

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده مهندسی مکانیک و مکاترونیک

پایان نامه کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک و مکاترونیک گرایش ساخت و تولید

مطالعه و بررسی تاثیر نانو افزودنی بر بهبود خواص روانکاری روغن موتور با استفاده از روش دینامیک مولکولی

نگارنده: نفیسه مهدیار

استاد راهنما

دکتر سید وحید حسینی

مهر ۱۳۹۹

در این صفحه صورت جلسه دفاع را قرار دهید. لازم است پس از صحافی این صفحه مجدداً توسط دانشکده مهر گردد و استاد راهنما با امضای خود اصلاحات پایان نامه را تایید کند.

تقدیم اثر

ماحصل آموخته‌هایم را تقدیم می‌کنم به تمام زنان و مردانی که نیک می‌اندیشند و عقل و منطق را پیشه‌ی خود نموده و با هدف رضای الهی و برای خدمت به ایران، پس از من قدم در این رشته می‌نهند.

شکرو قدردانی

حمد و ستایش مخصوص خدایست که بشر را آفرید، به او قدرت اندیشیدن داد، توانایی های بالقوه ای در وجود انسان نهاد و

او را امر به تلاش و کوشش نمود و راهنمایی برای بشر فرستاد. بر خود واجب می دانم از استاد گرامی ام جناب آقای دکتر

حسینی که از نعمت اخلاق، تجربه و دانش ایشان بهره فراوان بردم، کمال شکرو قدردانی را بعمل آورم و آرزوی

موفقیت در تمام مراحل زندگی ایشان را از خداوند منان خواستارم.

تعمدنامه

اینجانب نفیسه مهدیار دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته مهندسی مکانیک دانشکده مهندسی مکانیک و مکاترونیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه مطالعه و بررسی تاثیر نانو افزودنی بر بهبود خواص روانکاری روغن موتور با استفاده از روش دینامیک مولکولی

تحت راهنمایی دکتر سید وحید حسینی 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

امروزه، صنعت روانکاری تبدیل به یک بخش مهم از توسعه صنایع ماشینی و صنایع مربوط به آن شده است. با مطرح شدن بحث‌های جدیدی چون بهینه‌سازی مصرف و حفظ منابع تجدیدناپذیر و همچنین رعایت الزامات زیست محیطی، مطالعه بر روی روانکارها بخصوص در حوزه نانوتکنولوژی جایگاه خاصی پیدا کرده است. روغن موتورهای نانو، روغن پایه حاوی نانوذرات افزونی هستند که می‌توانند خواص تریبولوژی روغن موتور را بهبود بخشند. نانوذرات الماس به عنوان یکی از مهم‌ترین نوع نانوذرات روانکار شناخته شده در این حوزه است. امکان فهم مکانیزم‌های روانکاری در ابعاد نانو با استفاده از روش‌های آزمایشگاهی بسیار سخت و هزینه‌بر است. امروزه روش جایگزین محاسباتی دینامیک مولکولی برای فهم بهتر پدیده روانکاری و سایش قطعات در ابعاد نانو به کمک توسعه این کاربرد آمده است و در این راستا رساله حاضر به شبیه سازی فرایند دینامیک مولکولی فرایند سایش با استفاده از نانو ذره الماس می‌پردازد. انتخاب تابع پتانسیل بعنوان مهم‌ترین هسته شبیه‌سازی تاثیر قابل توجهی بر روی مکانیزم سایش و نیروهای وارد بر قطعه کار و نانوذره می‌گذارد. از این رو، صحنه گذاری روش دینامیک مولکولی با استفاده از شبیه‌سازی فرایند نانوفروروندگی انجام پذیرفته است. بر اساس نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، تفاوت بدست آمده در فرایند شبیه سازی نانوفروروندگی با دیگر پژوهش‌ها در محدوده ۱۰٪ گزارش شده است.

فرایند نانوسایش قطعه کار آهنی در حضور نانوذره‌ی الماس شبیه‌سازی شده و عوامل موثر در آن بررسی می‌شود. بر اساس نتایج بدست آمده استفاده از نانو ذره الماس امکان کاهش ضریب اصطکاک را از ۰/۲۴ به ۰/۰۵ بوجود می‌آورد. نتایج نشان داد که در صورتی که درجه حرارت سطوح را بتوان با خنک کاری ثابت نگه داشت، افزایش سرعت لغزشی سطوح منجر به کاهش ضریب اصطکاک می‌شود. افزایش دما و بار اعمال شده به بلوک بالایی، ضریب اصطکاک بین نانوذره و قطعه کار را افزایش می‌دهد. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانوسایش برای قطعاتی با دو جنس متفاوت آهن و آلومینیوم انجام شد. نتایج نشان داد که ضریب اصطکاک در دو قطعه‌ی آهنی کمتر از ضریب اصطکاک در دو قطعه با جنس متفاوت است. دلیل این موضوع نرم بودن فلز آلومینیوم در مقایسه با آهن است که باعث نفوذ زیاد ذره الماس به داخل آلومینیوم می‌شود. همچنین در این پایان‌نامه مطالعه اولیه‌ای بر روی اثر وجود پستی و برجستگی سطح انجام گرفت. بر اساس نتایج، مشاهده شد که سطحی که دارای برجستگی است، بیشترین ضریب اصطکاک را داراست و سطحی که دارای حفره‌ی کوچک سطحی است می‌تواند دارای ضریب اصطکاک کوچک‌تری باشد. با این حال وجود نانوذره در مقایسه با حالتی که نانو ذره وجود نداشته باشد، تفاوت ضریب اصطکاک زیادی دارد.

کلمات کلیدی: نانوروانکاری، نانوذره، روغن موتور، نانوسایش، دینامیک مولکولی

لیست مقالات مستخرج از پایان نامه

1- An investigation of the effect of indenter deformation and presence of voids on silicon Nano indentation using molecular dynamics simulation, Chines physic B, Submitted.

۲- بررسی اثر جهات کریستالی و ابزار غیر صلب بر سختی نیکل در فرایند نانوفروروندگی باپ استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی؛ مجله سازه ها و شاره ها؛ دانشکده مهندسی مکانیک و مکاترونیک؛ دانشگاه صنعتی شاهرود؛ ارسال شد.

۳- بررسی خواص تریبولوژی نانو ذره الماس بین سطوح سایشی از جنس آهن با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی؛ در حال بررسی است.

فهرست مطالب

۵	فهرست جداول
ز	فهرست اشکال
۱	فصل ۱: روانکاری
۱-۱	مقدمه
۲	۱-۲ معرفی روانکاری
۳	۱-۳ کاربرد روانکار
۴	۱-۴ اثر نانوذرات افزودنی در روانکار
۶	۱-۵ پیشینه‌ی پژوهش
۱۳	فصل ۲: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی
۱۴	۲-۱ دینامیک کلاسیک
۱۵	۲-۱-۱ دینامیک نیوتنی
۱۶	۲-۱-۲ دینامیک همیلتونی
۱۷	۲-۲ میدان نیرو
۱۸	۲-۲-۱ اجزاء تابع پتانسیل
۲۱	۲-۲-۲ نیروهای بین‌اتمی در دینامیک مولکولی
۲۱	۲-۳ توابع پتانسیل کاربردی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی
۲۲	۲-۳-۱ تابع پتانسیل لِنارد-جونز
۲۳	۲-۳-۲ تابع پتانسیل مورس
۲۴	۲-۳-۳ تابع پتانسیل فلزها

۲۸.....	۲-۳-۴ تابع پتانسیل ترسوف
۲۹.....	۲-۴ شرایط مرزی در دینامیک مولکولی
۳۱.....	۲-۴-۱ شرایط مرزی متناوب
۳۲.....	۲-۴-۲ شرایط مرزی دیگر
۳۲.....	۲-۵ پیاده‌سازی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی
۳۳.....	۲-۵-۱ شعاع قطع اثر پتانسیل
۳۴.....	۲-۵-۲ لیست همسایه‌های ناپیوندی
۳۵.....	۲-۵-۳ الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی
۳۶.....	۲-۵-۴ انتگرالگیری از معادله‌های حرکت نیوتن
۳۸.....	۲-۵-۵ انتخاب شرایط اولیه
۳۹.....	۲-۵-۶ انتخاب گام زمانی
۴۱	فصل ۳: پیاده‌سازی و صحه گذاری فرآیند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی
۴۳.....	۳-۱ پیشینه تحقیقات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرایند نانو فروروندگی
۴۸.....	۳-۲ محیط شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و معرفی بسته نرم‌افزاری
۴۹.....	۳-۳ الگوریتم شبیه‌سازی فرآیند نانوفروروندگی
۵۰.....	۳-۴ شبیه‌سازی سه بعدی فرآیند نانوفروروندگی
۵۰.....	۳-۴-۱ معرفی مدل
۵۳.....	۳-۴-۲ شرایط مرزی و اولیه
۵۴.....	۳-۵ گام‌های زمانی و تعداد اتم
۵۵.....	۳-۶ توابع پتانسیل
۵۷.....	۳-۷ بررسی نتایج
۵۷.....	۳-۷-۱ زمان پایاری سیستم

۳-۷-۲ صحه‌گذاری شبیه‌سازی فرآیند نانوفروروندگی ۵۷

فصل ۴: بررسی اثر نانوذره بر روانکاری با استفاده از روش دینامیک مولکولی ۶۳

۴-۱ الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانوسایش ۶۸

۴-۲ شبیه‌سازی سه بعدی نانوسایش ۶۹

۴-۲-۱ توابع پتانسیل ۷۱

۴-۲-۲ مراحل انجام فرآیند ۷۲

۴-۳ تفاوت لغزش و غلتش ۷۳

۴-۳-۱ معرفی مدل ۷۳

۴-۳-۲ مکانیزم شناسی سایش ۷۴

۴-۴ عوامل موثر در سایش ۷۹

۴-۴-۱ بررسی اثر سرعت در فرآیند نانوسایش ۷۹

۴-۴-۲ بررسی اثر دما در فرآیند نانوسایش ۸۶

۴-۴-۳ بررسی اثر فشار وارد بر سطح در فرآیند نانوسایش ۹۳

۴-۴-۴ بررسی اثر جنس قطعه در فرآیند نانوسایش ۹۸

۴-۴-۵ بررسی اثر عیوب سطحی در فرآیند نانوسایش ۱۰۶

۴-۵ جمع‌بندی نتایج ۱۱۳

فصل ۵: نتیجه‌گیری و ارائه‌ی پیشنهادها ۱۱۵

۵-۱ نتیجه‌گیری ۱۱۶

۵-۱-۱ شبیه‌سازی فرآیند نانوفروروندگی با استفاده از روش دینامیک مولکولی ۱۱۶

۵-۲ بررسی عوامل تاثیرگذار در نانوسایش با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ۱۱۷

۵-۳ پیشنهادها ۱۲۰

فهرست جداول

جدول ۳-۱. مشخصات قطعه کار و ابزار در تحلیل سه بعدی فرآیند نانوفروروندگی.....	۵۲
جدول ۳-۲. مشخصه‌های فرآیند نانوفروروندگی.....	۵۳
جدول ۳-۳. ابعاد و تعداد اتم قطعه کار و ابزار.....	۵۵
جدول ۳-۴. توابع پتانسیل در فرآیند نانوفروروندگی [۵۲و۵۱،۴۹،۳].....	۵۶
جدول ۴-۱. مشخصات مدل نانوسایش.....	۷۱
جدول ۴-۲. ثوابت توابع پتانسیل در فرآیند نانوسایش [۶۳،۲۳ و ۶۴].....	۷۲
جدول ۴-۳. مشخصات مدل لغزش و غلتش.....	۷۴
جدول ۴-۴. متوسط ضریب اصطکاک لغزشی و غلتشی.....	۷۷
جدول ۴-۵. مشخصات مدل.....	۸۳
جدول ۴-۶. متوسط ضریب اصطکاک برای سایش با سرعت‌های لغزشی متفاوت.....	۸۵
جدول ۴-۷. مشخصات مدل.....	۸۹
جدول ۴-۸. متوسط ضریب اصطکاک در دماهای متفاوت.....	۹۲
جدول ۴-۹. مشخصات مدل.....	۹۳
جدول ۴-۱۰. نفوذ نانوذره در آهن تحت فشارهای متفاوت.....	۹۵
جدول ۴-۱۱. متوسط ضریب اصطکاک فرآیند سایش تحت فشار متفاوت.....	۹۶
جدول ۴-۱۲. مشخصات مدل سایش لغزشی جهت بررسی اثر جنس قطعه.....	۹۹
جدول ۴-۱۳. متوسط ضریب اصطکاک لغزشی آهن-آهن و آهن-آلومینیوم.....	۱۰۱
جدول ۴-۱۴. ثوابت توابع پتانسیل بکار رفته در سایش غلتشی با دو سطح اصطکاکی آهن و آلومینیوم.....	۱۰۳
جدول ۴-۱۵. مشخصات مدل سایش غلتشی با دو بلوک آهن و آلومینیوم.....	۱۰۳
جدول ۴-۱۶. متوسط ضریب اصطکاک در سایش با دو سطح آهن و آلومینیوم.....	۱۰۶
جدول ۴-۱۷. مشخصات مدل در حالات قطعه با سطح صاف، سطح دارای حفره و سطح دارای برجستگی.....	۱۰۸

جدول ۱۸-۴. متوسط ضریب اصطکاک در فرآیند سایش با سطوح صاف، دارای حفره و دارای
برجستگی..... ۱۱۳

فهرست اشکال

- شکل ۱-۲. موقعیت، سرعت، شتاب و نیروی وارد بر مولکول در دستگاه کارترین..... ۱۵
- شکل ۲-۲. بعضی از انرژی‌های درون مولکولی..... ۱۹
- شکل ۲-۳. نمودار تابع پتانسیل لنارد-جونز و نیروی برهم‌کنش بین دو اتم..... ۲۲
- شکل ۲-۴. نمودار تابع پتانسیل مورس بر حسب فاصله بین اتمی، بین اتم‌های مس و بین اتم‌های کربن و مس..... ۲۴
- شکل ۲-۵. نمودار پیوند فلزی..... ۲۴
- شکل ۲-۶. نمودار چگالی الکترونی بین دو اتم بر حسب فاصله‌ی آن‌ها..... ۲۷
- شکل ۲-۷. نمودار انرژی اتم بر حسب چگالی الکترونی پس زمینه..... ۲۷
- شکل ۲-۸. نمودار شار الکترونی بر حسب فاصله اتمی..... ۲۷
- شکل ۲-۹. نمایی از تفاوت حرکت مولکول‌ها در مرز و مولکول‌های داخل جسم..... ۳۰
- شکل ۲-۱۰. نمایی از چگونگی شرط مرزی متناوب..... ۳۱
- شکل ۲-۱۱. قرارگیری اتم‌ها در شعاع r_c و r_l ۳۵
- شکل ۲-۱۲. کلیت الگوریتم شبیه سازی دینامیک مولکولی..... ۳۶
- شکل ۲-۱۳. انرژی جنبشی و پتانسیل بر حسب گام زمانی..... ۳۷
- شکل ۲-۱۴. انرژی کل بر حسب گام زمانی..... ۳۷
- شکل ۲-۱۵. ارتباط خطای کل شبیه سازی با بزرگی گام زمانی..... ۳۹
- شکل ۳-۱. الگوریتم شبیه سازی دینامیک مولکولی فرآیند نانو فروروندگی..... ۴۹
- شکل ۳-۲. مدل شماتیکی فرآیند نانوفروروندگی..... ۵۰
- شکل ۳-۳. نسبت اتم‌های سطح به کل اتم‌های شبکه‌ی کریستالی FCC..... ۵۴
- شکل ۳-۴. منحنی انرژی کل اتم‌های شبکه بر حسب زمان..... ۵۷
- شکل ۳-۵. منحنی نیرو-جابجایی ابزار برای قطعه‌ی سیلیکون..... ۵۸
- شکل ۳-۶. منحنی نیرو-جابجایی ابزار برای قطعه‌ی نیکل..... ۵۸
- شکل ۳-۷. شماتیک منحنی نیرو بر حسب جابجایی..... ۵۹
- شکل ۳-۸. منحنی سختی-جابجایی سیلیکون..... ۶۰
- شکل ۳-۹. منحنی سختی-جابجایی نیکل..... ۶۰
- شکل ۳-۱۰. منحنی نیرو-جابجایی ابزار برای قطعه‌ی سیلیکون..... ۶۱
- شکل ۳-۱۱. منحنی نیرو-جابجایی ابزار برای قطعه‌ی نیکل..... ۶۱
- شکل ۳-۱۲. منحنی سختی-جابجایی سیلیکون..... ۶۲
- شکل ۴-۱. نقشه‌ی راه..... ۶۸
- شکل ۴-۲. الگوریتم شبیه سازی دینامیک مولکولی فرآیند نانوسایش..... ۶۹

- شکل ۴-۳. نمایی از مدل محاسباتی نانوسایس در حضور نانوذره الماس..... ۷۰
- شکل ۴-۴. نمودار انرژی کل بر حسب زمان..... ۷۳
- شکل ۴-۵. نمایی از مدل لغزش و غلتش..... ۷۴
- شکل ۴-۶. سایش a. لغزشی و b. غلتشی بعد از اتمام فرآیند..... ۷۵
- شکل ۴-۷. نمودار ضریب اصطکاک برای سایش a. لغزشی و b. غلتشی [۶۵]..... ۷۶
- شکل ۴-۸. نمودار ضریب اصطکاک لغزشی و غلتشی..... ۷۷
- شکل ۴-۹. شماتیک اصطکاک: a. لغزشی و b. غلتشی..... ۷۸
- شکل ۴-۱۰. مولفه‌های تریبوسیستم تاثیر گذار بر رفتار سایشی و اصطکاکی مواد..... ۷۹
- شکل ۴-۱۱. نمودار دما بر حسب طول لغزش [۶۲]..... ۸۰
- شکل ۴-۱۲. نمودار دما بر حسب طول لغزش در سرعت لغزشی ۱۰ m/s [۵۹]..... ۸۱
- شکل ۴-۱۳. نمودار دما بر حسب طول لغزش در سرعت لغزشی ۵۰۰ m/s [۵۹]..... ۸۲
- شکل ۴-۱۴. مدل محاسباتی فرآیند نانوسایس در سرعت‌های متفاوت..... ۸۲
- شکل ۴-۱۵. تغییر شکل قطعه در اثر تفاوت در سرعت لغزش..... ۸۴
- شکل ۴-۱۶. نمودار انرژی جنبشی حاصل از سرعت‌های متفاوت..... ۸۴
- شکل ۴-۱۷. نمودار ضریب اصطکاک غلتشی بر حسب طول لغزش حاصل از سرعت‌های متفاوت..... ۸۵
- شکل ۴-۱۸. شماتیک سایش خراشان دو جسمی و سه جسمی..... ۸۷
- شکل ۴-۱۹. شماتیک سایش چسبان: a. قبل از برخورد، b. لحظه‌ی برخورد، c. بعد از برخورد..... ۸۸
- شکل ۴-۲۰. مدل سیستم شبیه‌سازی در دماهای مختلف..... ۸۹
- شکل ۴-۲۱. تاثیر دما در حرکت نانوذره..... ۹۰
- شکل ۴-۲۲. نمودار دما بر حسب طول لغزش..... ۹۰
- شکل ۴-۲۳. نمودار انرژی جنبشی بر حسب طول لغزش..... ۹۱
- شکل ۴-۲۴. نمودار انرژی پتانسیل بر حسب طول لغزش..... ۹۱
- شکل ۴-۲۵. نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش برای سایش در دماهای متفاوت..... ۹۲
- شکل ۴-۲۶. سیستم نانوسایس تحت فشارهای متفاوت..... ۹۳
- شکل ۴-۲۷. نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش [۵۹]..... ۹۴
- شکل ۴-۲۸. تاثیر فشار در تغییر شکل قطعه..... ۹۵
- شکل ۴-۲۹. نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش برای سایش تحت فشارهای متفاوت..... ۹۶
- شکل ۴-۳۰. نمایش ضریب اصطکاک و فشار در هر مرحله از فرآیند سایش..... ۹۸

- شکل ۴-۳۱. مدل سایش لغزشی برای دو بلوک آهن و آلومینیوم..... ۹۹
- شکل ۴-۳۲. مقایسه‌ی نمودار ضریب اصطکاک لغزشی برای دو بلوک آهن و آلومینیوم..... ۱۰۱
- شکل ۴-۳۳. مدل سایش غلتشی برای دو بلوک آهن و آلومینیوم..... ۱۰۲
- شکل ۴-۳۴. تغییر شکل سطوح آهن و آلومینیوم در اثر سایش..... ۱۰۵
- شکل ۴-۳۵. نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش برای قطعه با دو جنس متفاوت ۱۰۶
- شکل ۴-۳۶. مدل سایش با وجود عیوب سطحی..... ۱۰۷
- شکل ۴-۳۷. شماتیک سایش با وجود عیب حفره در قطعه پایین..... ۱۰۹
- شکل ۴-۳۸. تغییر شکل ناشی از سایش در سطح دارای حفره ۱۱۰
- شکل ۴-۳۹. نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش..... ۱۱۰
- شکل ۴-۴۰. شماتیک سایش با وجود برجستگی در قطعه پایین..... ۱۱۱
- شکل ۴-۴۱. تغییر شکل ناشی از سایش در سطح دارای برجستگی..... ۱۱۲
- شکل ۴-۴۲. نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش..... ۱۱۲

فصل ۱ : روانکاری

۱-۱ مقدمه

در اکثر تجهیزات و ماشین آلاتی که مورد استفاده بشر قرار دارد، قطعاتی وجود دارد که در اثر حرکات نسبی آن‌ها، دستگاه می‌تواند وظیفه خود را بدرستی انجام دهد. با لغزش سطوح روی هم و برخورد آنها با یکدیگر سایش بوجود می‌آید. در اثر تماس دو سطح فلزی، کامپوزیتی و پلاستیکی و... با یکدیگر که در خلاف جهت هم حرکت می‌کنند و تحت نیروی عمودی قرار می‌گیرند، اصطکاک ایجاد می‌شود. اصطکاک باعث ایجاد تنش‌های حرارتی و گرما می‌شود و باعث می‌شود سرعت فعالیت و حرکت دستگاه به شدت کند شود. روانکار وظیفه دارد تا با کاهش درگیری دو قطعه و کاهش اصطکاک، کارایی دستگاه را افزایش داده و هزینه‌های تعمیرات را نیز کم کند. روغن موتور معروف‌ترین و پرمصرف‌ترین نوع روانکار است که علاوه بر اینکه اصطکاک بین قطعات را کاهش می‌دهد و باعث جلوگیری از سایش قطعات موتور می‌شود، وظایف دیگری چون گرفتن ضربه، خنک سازی موتور، انتقال ذرات ریز فلز و گرد و غبار از داخل موتور به فیلتر روغن و جلوگیری از رسوب دوده در سوپاپ‌ها، رینگ‌ها و تمیز نگاه داشتن قطعات موتور را نیز به عهده دارد. امروزه به منظور داشتن روانکار با خواص مطلوب و مناسب برای هر کاربرد مشخص، انواع افزودنی‌ها بصورت نانوذره با کاربردهای مختلف، به روغن پایه افزوده می‌شوند. این نانوذرات می‌توانند هر یک از وظایف بهبود روانکاری، خواص ضد اکسیداسیون و ضدخوردگی، پاک کنندگی، گرانروی و غیره را در ترکیب، به عهده داشته باشند.

باوجود افزایش کاربرد نانو ذرات در بهبود عملکرد روغن، ولی هنوز اطلاعات کافی از مکانیزم‌ها و جنبه‌های میکروسکوپی اثرات نانو ذرات وجود ندارد. بررسی تجربی این مکانیزم‌ها دارای محدودیت‌های متعددی است. انجام مطالعات آزمایشگاهی در این مقیاس علاوه بر زمان‌بر بودن، با هزینه‌های بالا و گاهی خطا همراه است. روش‌های شبیه سازی راه‌کارهای جایگزین مناسبی برای این منظور هستند. از آنجا که در مقیاس نانو و ابعاد اتمی نمی‌توان خواص ماده را بصورت پیوسته در نظر گرفت، روش المان محدود با محدودیت‌های متعددی همراه است. علاوه بر آن در این مقیاس، خواص ریزساختاری مواد

مانند خواص شیمیایی، خواص وابسته به جهت، ساختار کریستالی، ثوابت کریستالی، عیوب مواد، ابعاد دانه، ذرات فاز دوم و ... در نوع عملکرد قطعات و مکانیزم روانکاری بسیار تاثیرگذار هستند.

امروزه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی^۱ به عنوان ابزار قوی و ارزشمند برای بررسی و درک فرایندهای میکروسکوپی شناخته شده است و کاربرد گسترده‌ای در مطالعه مکانیزم‌های روانکاری در ابعاد نانو دارد. روش دینامیک مولکولی قابلیت تفکیک‌پذیری زمانی و مکانی بالاتری نسبت به روش المان محدود دارد و می‌تواند ریزساختار قطعات و نانوذرات را در مقیاس اتمی شبیه‌سازی کند. با توجه به اینکه فرآیند روانکاری در ابعاد نانومتری و با استفاده از نانوافزودنی‌ها انجام می‌شود، روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بهترین و دقیق‌ترین روش برای مطالعه سازوکار نانوروانکاری است.

۲-۱ معرفی روانکاری

یکی از رشته‌های بسیار مهم در علوم مهندسی، دانش روانکاری است طوری که موفقیت بسیاری از طراح-های صنعتی در گرو آگاهی از این دانش فنی خواهد بود. دانش روانکاری، دانش آسان‌سازی حرکت نسبی سطوح در تماس با یکدیگر است. به لایه‌های جامد، مایع یا گاز که بین دو سطح درگیر قرار می‌گیرند و یکنواختی حرکت یک سطح بروی دیگری را بهبود می‌بخشند و از ایجاد آسیب بروی سطوح جلوگیری می‌کنند روانکار گفته می‌شود. امروزه، صنعت روانکاری تبدیل به یک بخش مهم از توسعه صنایع ماشینی و صنایع مربوط به آن شده است. علاوه بر این، با مطرح شدن بحث‌های جدیدی چون بهینه‌سازی مصرف و حفظ منابع تجدیدناپذیر و همچنین رعایت الزامات زیست محیطی، مطالعه بروی روانکارها جایگاه خاصی در بین علوم پیدا کرده است. برای جلوگیری از فرسایش و از کارافتادگی زودرس ماشین آلات صنعتی و همچنین دسترسی به بیشترین بازده مکانیکی در حداقل زمان، وجود یک برنامه روانکاری مناسب جز مهم‌ترین شرایط مورد نیاز خواهد بود. در قرن حاضر برنامه روانکاری مناسب، یک برنامه روانکاری پایدار است که شاید کمی با تعاریف روانکاری قدیمی متفاوت باشد. نوع روانکار، مقدار،

^۱ Molecular Dynamics (MD)

زمان و مکان مناسب روانکاری، بعنوان چهارعامل موثر در موفقیت یک عمل روانکاری شناخته می‌شوند. هزینه‌های نگهداری و تعمیرات و رعایت قوانین و الزامات زیست محیطی را نیز برای انجام یک روانکاری موفق باید در نظر داشت. روانکارها از نظر عملکردی به دو دسته بزرگ روانکارهای خودرو و روانکارهای صنعتی تقسیم کرد و به لحاظ حالت فیزیکی به چهار دسته روان کننده های جامد، روان کننده های مایع، گریس ها و روان کننده های گازی تقسیم بندی می‌شوند.

روانکارهای خودرو، مواد شیمیایی با ساختارهای مولکولی متفاوتی هستند که برای کاربردهای مختلف در قسمت های مختلف خودروها تولید شده اند و دارای ویژگی های منحصر به فردی هستند. انتخاب یک روان کننده مناسب برای خودرو می تواند باعث افزایش طول عمر قطعات داخلی شده و در طولانی مدت هزینه های اضافی را کاهش دهد. رایج ترین روانکار خودرو، روغن موتور است که با نام روغن ماشین نیز در بازار معروف است. از آنجا که استفاده از یک روانکار مناسب، فاصله زمانی تعویض روغن یک خودرو را زیاد می کند، این مسئله می تواند به حفظ محیط زیست و البته به حفظ منابع تجدید ناپذیر کمک فراوانی کند که این خود موضوع بیانگر اهمیت دانش فنی روانکارها است. باتوجه به اینکه در روانکاری علاوه بر کیفیت، هزینه های مصرفی را نیز باید در نظر گرفت، با این حال شعار شرکت های بزرگ تولید کننده روانکار، انتخاب بهترین گزینه به جای ارزان ترین است. در اکثر موارد، هزینه ای که می توانیم برای یک روانکار بهتر ولی گران تر بپردازیم بسیار کمتر از هزینه ای است که باید برای تعمیرات قطعات مستهلک که ناشی از استفاده روانکار نامناسب است، پرداخته شود.

۳-۱ کاربرد روانکار

از مهم ترین وظایف روانکار می توان به موارد زیر اشاره کرد:

روانکاری: با تشکیل لایه ای از روغن با ضخامت مناسب بین قطعات متحرک باعث به حداقل رساندن اصطکاک و ساییدگی قطعات در حین کار می شود.

انتقال حرارت: حرارت ایجاد شده ناشی از عملیات مکانیکی را از سطوح مورد نظر انتقال داده و باعث خنک کردن قطعات متحرک می‌شود.

ضربه‌گیری: روغن می‌تواند با کاهش ضربات در حین انجام حرکات مکانیکی از تأثیر منفی ضربه‌های قطعات بر یکدیگر جلوگیری کند.

حفاظت از سطوح: روانکارها می‌توانند از سطوح قطعات فلزی در مقابل خوردگی شیمیایی و زنگ زدگی محافظت کنند.

آب‌بندی: در موتورهای احتراق داخلی، با تشکیل لایه‌ای از روغن بین سیلندر و پیستون از فرار گازهای متراکم شده جلوگیری می‌شود.

انتقال مواد: روانکارها باید مواد ناشی از تجزیه روغن و ذرات ناشی از ساییدگی قطعات را به صورت معلق نگه داشته و با خود حمل کنند.

انتقال نیرو: در بعضی موارد (سیالات هیدرولیک) روانکار نقش انتقال دهنده نیرو را به عهده دارد.

۴-۱ اثر نانوذرات افزودنی در روانکار

در گذشته از روغن‌های پایه به منظور روانکاری استفاده می‌شد، ولی امروزه با ساخت موتورهای تندرو و سبک، استفاده از روغن‌های پایه جوابگوی نیاز اینگونه موتورها نیست. به همین منظور و برای ساخت یک روانکار مناسب که مشخصات لازم را بر حسب عملکرد مورد نظر داشته باشد، روغن پایه و مواد افزودنی با یکدیگر مخلوط می‌شود تا بتواند شرایط لازم برای کار موتور و محافظت از موتور را به وجود آورد.

یکی از مهم‌ترین روانکارها که از ترکیب روغن پایه و افزودنی‌ها بوجود می‌آید، روغن موتور است و وظایف مهمی دارد که عبارتند از: روانکاری (کاهش اصطکاک بین قطعات)، کاهش ساییدگی قطعات موتور، و تمیز نگه داشتن قطعات داخل موتور از دوده و ترکیبات حاصل از تجزیه روغن و رسوبات بین قطعات و شست‌وشوی آن، آب‌بندی کامل بین پیستون و سیلندر، خنک کردن قطعات داخلی موتور،

محافظت قطعات موتور در مقابل خوردگی و ضربه‌گیری، کارکرد بهینه قطعات متحرک موتور در دماهای مختلف و غیره. با توجه به ترکیبات بیان شده درخصوص ساختار روغن موتور، کیفیت اصلی روغن وابسته به مواد افزودنی آن است. در سال‌های اخیر نانو ذرات به دلیل خواص منحصر بفردشان به عنوان نوع جدیدی از افزودنی‌ها در روانکارها پدیدار شده‌اند.

نانوذرات در آزمایشگاه و با روش‌های خاصی ساخته شده و در مقادیر مشخصی به روغن پایه افزوده می‌شوند و تغییر در رفتار روغن روانکار با روش‌های مختلفی مورد بررسی قرار می‌گیرد. نتایج نشان داده که در اغلب موارد مخلوط روغن پایه و مواد افزودنی نانو، عملکرد بهتری نسبت به روغن پایه فاقد مواد افزودنی از خود نشان می‌دهد، بنابراین هدف یافتن نانوافزودنی متناسب با روغن پایه و غلظتی از آن است که در این شرایط روغن روانکار بهترین کارکرد را داشته باشد.

صرف نظر از صنایع مختلف که از روغن‌های پایه نفتی استفاده می‌کنند، اگر تعداد خودروهایی که در کشور در در رفت و آمد هستند و حجم زیادی از روغن موتور را استفاده می‌کنند در نظر گرفته شود، اهمیت موضوع درک خواهد شد. روغن مستعمل حاوی انواع آلاینده‌های سمی است که ورود آن‌ها خاک و آب‌های سطحی، زیر سطحی باعث ایجاد بیماری‌های گاهی لاعلاج مثل انواع سرطان خواهد شد.

حتی در موتورهای کوچک هم از انواع روغن یا گریس، برای کاهش اصطکاک قطعات استفاده می‌شود و بنظر می‌رسد تصور یک موتور بدون سیستم روانکاری غیر ممکن است. قطعات مکانیکی نیازمند این مواد هستند تا هنگام حرکت و تعامل با یکدیگر، دچار فرسایش نشوند و حرارت ناشی از اصطکاک، کاهش پیدا کند. با این اوصاف و با توجه به وظایف مهمی که روغن موتور در یک خودرو ایفا می‌کند، ساختمان شیمیایی روغن موتور پیچیده خواهد بود ساخت آن به سادگی ممکن نیست.

سطوح فلزی هرچقدر هم که صاف به نظر برسند دارای پستی و برجستگی‌ها و دندان‌های بسیار ریزی هستند که به هنگام حرکت روی هم موجب اصطکاک شدید و سایش می‌شوند. ذرات بزرگ یک روانکار معمولی، فقط یک لایه روی سطح فلز تشکیل می‌دهد که نمی‌تواند حفرات خیلی ریز سطوح را پر کند و از سایش جلوگیری کند، درصورتیکه به دلیل ذرات نانویی که در روانکارهای حاوی افزودنی وجود

دارد، این ویژگی را به روانکارها می‌دهند که به درون ریزحفره‌ها نفوذ کنند و اثر سایش را تا حد بسیار خوبی پایین آورند. به موجب این اتفاق، در هزینه‌های ناشی از پدیده سایش و اصطکاک صرفه‌جویی اقتصادی قابل توجهی صورت می‌گیرد.

نانوذرات به عنوان افزودنی مکمل روغن، به طور اساسی بر صرفه جویی سوخت و بازدهی موتور تاثیر گذارند. به طور کلی، خواصی که برای این افزودنی‌های نانو ذکر شده است عبارتند از:

- پر کردن حفرات ریز سطح و در نتیجه کاهش اصطکاک بین دو سطح تماس
- جلوگیری از تشکیل رسوبات سخت در موتور
- محافظت در برابر زنگ زدگی
- محافظت در برابر خوردگی بین اجزای مکانیکی داخلی موتور
- افزایش قدرت موتور و عملکرد آن
- کاهش مصرف سوخت به میزان قابل توجه
- کاهش گازهای آلاینده خروجی از اگزوز
- ثابت نگه داشتن ویسکوزیته روغن موتور
- جلوگیری از کاهش حجم روغن موتور

۵-۱ پیشینه‌ی پژوهش

در سال‌های اخیر پژوهشگران تحقیقات قابل توجهی را در زمینه شناخت انواع نانو ذرات و کاربرد و تاثیر آن‌ها در روانکارها انجام داده‌اند که استفاده از اصول، روش‌ها، ابزار و نوآوری‌های به کار رفته در تحقیقات ایشان می‌تواند کمک به سزایی در روند مطالعه حاضر داشته باشد. امروزه بسیاری از نانوذرات فلزی، غیر معدنی، کربنی و غیره به عنوان روان کننده استفاده می‌شوند. که در این میان نانوذرات کربنی به دلیل درجه بالای پایداری ساختاری و غیر فعال بودن به لحاظ شیمیایی مورد توجه است.

زین و همکاران رفتار تریبولوژی محلول‌های پایداری از روغن و نانو ذرات کربن را در دماهای

مختلف ارزیابی کردند. با اضافه کردن محلول حاوی نانو ذره به روغن، ضریب اصطکاک کاهش یافت و به تبع آن دمای سطوح سایشی نسبت به حالت قبل از افزودن نانو ذرات، کاهش یافت [۱]. چوی و همکاران خصوصیات سایشی روغن‌های معدنی حاوی افزودنی‌های C60^۱ با غلظت‌های متفاوت را مورد بررسی قرار دادند. نتایج نشان داد که نانو ذرات با غلظت بیشتر، موجب کاهش بیشتر اصطکاک و کاهش ساییدگی در صفحات می‌شوند و افزودن نانو ذرات خاصیت روانکاری روغن را بهبود می‌بخشد و نانو روانکار حاوی مخلوط نانو ذرات گرافیت و طلا باعث افزایش قابلیت باربری و بهبود خواص سایشی شده و مصرف برق را بیش از ۳ درصد کاهش داد [۲]. یک گروه دیگر از نانو ذرات مورد مطالعه در این زمینه اکسید فلزات هستند. باتز و همکاران رفتار ضد سایشی نانو ذرات محلول در روغن، با غلظت‌های ۰/۵، ۱ و ۲ درصد وزنی از نانو ذرات ZnO^۲، ZrO₂^۳، CuO^۴ را بررسی کردند و پس از انجام آزمایش‌ها، سطح با استفاده تصاویر SEM^۵ مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که در تمام محلول‌ها، اصطکاک و سایش نسبت به روغن پایه کاهش پیدا کرد [۳]. لاد و همکاران در مقایسه‌ای که بین نانو ذرات Al^۶ و TiO₂^۷ انجام دادند، نتیجه گرفتند که در شرایطی که بار وارد به سطح زیاد شود، اگر نانو ذره Al اضافه شود، سایش افزایش می‌یابد ولی با همان مقدار بار، اگر TiO₂ اضافه شود، سایش سطوح به شدت کاهش می‌یابد. همچنین نتایج نشان داد TiO₂ دارای حلالیت و پایداری خوبی است. در غلظت ۰/۳ درصد وزنی، ضریب اصطکاک نسبت به روغن پایه ۸۶ درصد کاهش پیدا کرد که ناشی از حرکت غلتشی نانو ذرات است. با افزایش غلظت و تجمع نانو ذرات، ضریب اصطکاک افزایش می‌یابد اما با این حال ضریب اصطکاک نسبت به روغن پایه بدون ناوذرات کمتر است و همچنین سایش نسبت به زمانی که نانو ذره‌ای نباشد به شدت کاهش می‌یابد [۴]. احمدی و همکاران، گرانیوی، نقطه پاشش، نقطه اشتعال و همچنین

^۱ Carbon60

^۲ Zinc oxide

^۳ Zirconium dioxide

^۴ Copper(II) oxide

^۵ Scanning electron microscope

^۶ Aluminum

^۷ Titanium dioxide

ضریب هدایت حرارتی روغن حاوی نانو ذرات مس اکسید را در غلظت‌های مختلف ۰/۱، ۰/۲ و ۰/۵ درصد وزنی نانوذرات، به عنوان چهار پارامتر مهم در عملکرد روغن، ارزیابی کردند. براساس نتایج بدست آمده، ضریب هدایت حرارتی و نقطه اشتعال نانو ذرات با غلظت ۰/۱ درصد وزنی، به ترتیب ۳٪ و ۷/۹٪ بهبود پیدا کردند. همچنین ویسکوزیته به عنوان عامل مهم در روانکاری غلظتی پایین‌تر نسبت به روغن بدون نانو ذره مس اکسید داشت [۵]. نانوذره‌ی دیگر که مورد مطالعه محققین قرار گرفته است، نانو ورق MoS_2 می‌باشد. MoS_2 به عنوان یک افزودنی روان کننده برای افزایش بهره‌وری روغن موتور خودرو استفاده شده است. برای تولید نانو روانکار از این ذره، از روش آسیاب گلوله‌ای که یک روش ارزان قیمت و بسیار کارآمد است استفاده می‌شود. وان و همکاران در تحقیقات خود با استفاده از آزمون‌های سایشی نشان دادند که ضریب اصطکاک روغن با MoS_2 به ۰/۰۷۵ می‌رسد که در مقایسه با زمانی که روغن پایه بدون نانو ذرات است (۰/۱۶) خیلی کمتر است. نانو ذره MoS_2 با کاهش ضریب اصطکاک، کاهش سایش سطوح و افزایش پایداری عملکرد روغن پایه را افزایش می‌دهد. به نظر می‌رسد که اثر ضد سایشی به غلظت MoS_2 بستگی دارد و نیاز به تحقیقات بیشتر، ضروری تشخیص داده می‌شود. افزایش پایداری می‌تواند به دلیل افزایش انتقال حرارت و استحکام فیلم روغن روانکار در حضور نانوذرات باشد [۶]. گروه دیگر نانوذرات، نانوذرات هیبریدی هستند. داران و همکاران با انجام آزمایشاتی نشان دادند که ویسکوزیته نانو سیال هیبریدی با افزایش غلظت نانوذرات و کاهش دما، افزایش می‌یابد و حداکثر افزایش ویسکوزیته، ۴۶٪ بوده است. حساسیت ویسکوزیته نسبت به تغییر دما جزیی و نسبت به تغییرات غلظت حساس‌تر است [۷]. یو و همکاران خواص سایشی و مکانیزم‌های روانکاری نانو ذرات مس در روانکاری را مورد مطالعه قرار دادند. در این تحقیق اثر دما بر خواص نسبی نانو ذرات مس بررسی شد و برای بررسی‌های بیشتر مکانیزم‌های سایشی نانوذرات مس، از یک سختی سنج استفاده شده است. نتایج نشان می‌دهد که در دماهای بالا، یک پوشش محافظتی نازک مس با مدول الاستیسیته و سختی پایین روی سطح تشکیل می‌شود و باعث بهبود عملکرد تریبولوژیکی نانو ذرات می‌شود [۸].

^۱ Molybdenum disulfide

چو و همکاران اثر نانو ذره نیکل را با درصدهای وزنی متفاوت محلول در روغن پایه بررسی کردند. نتایج نشان داد این ذره غیر حساس به درجه حرارت است، واکنش شیمیایی کم دارد، در شرایط دما و فشار بالا خوردگی ندارد و تمام محلول‌ها نسبت به روغن پایه رفتار سایشی بهتری داشتند و شاخص باربری برای تمام محلول‌ها بیشتر از روغن پایه است. در محلول‌هایی با ۲/۰ و ۵/۰ درصد وزنی نانو ذره بترتیب ۳/۴ و ۵۴ درصد کاهش در سایش و هم‌چنین ۷ و ۳۰ درصد کاهش اصطکاک داشتند [۹]. کو و همکاران به بررسی ویسکوزیته روغن در حضور نانو ذره فلورن پرداختند. نتایج نشان داد وقتی ویسکوزیته روغن پایه بالا باشد حضور نانو ذرات تاثیر چندانی ندارد اما در ویسکوزیته پایین، نانو ذرات باعث بهبودی خواص تریبولوژی و سایشی روانکار می‌شوند [۱۰]. لیو و همکاران نشان دادند که نانو ذره مس باعث بهبود خواص حرارتی شده و هم‌چنین با رسوب روی سطوح باعث بهبود خواص روانکاری و اصطکاک می‌شود [۱۱]. راجنهان و همکاران نشان دادند در حضور ۵/۰ درصد وزنی از نانو ذرات Ni^{-1} و MoS_2 ، سایش و ضریب اصطکاک بترتیب ۴۰ تا ۵۰ و ۱۵ تا ۲۰ درصد بهبود پیدا کرد [۱۲]. لی و همکاران به به این نتیجه رسیدند که نانو ذرات SiO_2^2 و ZrO_2 اصلاح شده با $AlZr^3$ پراکندگی بهتری داشته و به خوبی حل می‌شوند. غلظت ۱/۰ درصد وزنی از نانو ذرات به عنوان غلظت بهین، ضریب اصطکاک را ۱۶/۲۴ درصد کاهش داد که این کار با تبدیل حرکت لغزشی صفحات به حرکت غلتشی نانو ذرات انجام شد [۱۳]. هانگ و همکاران به مقایسه‌ی اثر اندازه و شکل نانو ذرات کربنی مختلف در روغن کاری پرداختند. نتایج نشان می‌دهد که نانو ذرات کروی با حفظ فاصله بین سطوح مانع از اصطکاک شده و ضریب اصطکاک را کاهش می‌دهند در حالی که نانو ذرات فیبری به دلیل تراکم راحت‌تر، ضریب اصطکاک بالاتری نسبت کروی دارند و هم‌چنین ضخامت نانو ذرات جمع شده از فیلم روانکار بیشتر شده و باعث افزایش زبری سطح می‌شوند و از جریان روغن در سطوح جلوگیری می‌کنند [۱۴]. چو و همکاران به بررسی اثر نانو ذره کروی الماس در روانکار پرداختند. نتایج نشان داد غلظت ۳ درصد وزنی

^۱ Nickel-Molybdenum disulfide

^۲ Silicon dioxide

^۳ Aluminum zirconium

نانو ذره برای کاهش اصطکاک مناسب است. افزایش غلظت در کاهش سایش موثر است اما ضریب اصطکاک را کمتر کاهش می‌دهد زیرا افزایش غلظت باعث تجمع ذرات می‌شود [۱۵].

الماس مهم‌ترین ساختار سرامیکی تک عنصری است که از کربن خالص تشکیل شده و به طور طبیعی تحت فشارهای زیاد در اعماق ۱۵۰ یا ۲۰۰ کیلومتری از سطح زمین و در زمان طولانی شکل می‌گیرد. استفاده ۱۰ تا ۲۰۰ گرم از نانوذره الماس در هر تن روغن موتور به عنوان افزودنی می‌تواند منجر به تولید روغن‌هایی شود که در برابر رسوب‌دهی پایدارترند و علاوه بر افزایش طول عمر و راندمان موتور، اصطکاک سطوح در تماس را بین ۲۰ تا ۴۰٪ کاهش می‌دهد و حرکت قطعات موتور را تسهیل می‌کند.

در رساله کارشناسی ارشد که در ادامه ارائه می‌شود اثر نانوذره‌ی افزودنی الماس در بهبود خواص روانکاری روغن موتور مورد بررسی قرار می‌گیرد.

در فصل اول ابتدا به اهمیت روانکاری و نانوروانکاری و کاربرد آن در صنایع مختلف پرداخته شد و عواملی که در کیفیت فرایند نانوروانکاری تاثیرگذار است، معرفی شد. سپس با تکیه به مقالات پیشین، به تئوری‌های مکانیزم‌های نانوروانکاری نانوذرات از دیدگاه تجربی و تحلیلی پرداخته شد. در فصل دو روش دینامیک مولکولی معرفی می‌شود. در این فصل ابتدا تئوری و فرضیات استفاده شده بیان می‌شود. در ادامه، میدان‌های نیرویی و توابع پتانسیلی که در روش دینامیک مولکولی کاربرد دارد، ارائه خواهند شد و در نهایت چگونگی پیاده‌سازی این روش بیان می‌شود. فصل سوم به شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرایند مکانیکی نانوفروروندگی قطعات فلزی تک کریستال با جنس‌های مختلف می‌پردازد. در این فصل با پیاده‌سازی روش دینامیک مولکولی در مدلسازی فرایندهای نانوفروروندگی، عوامل تاثیرگذار از جمله تاثیر توابع پتانسیل مواد مختلف مورد بحث قرار می‌گیرد و با مقالات چاپ شده در زمینه‌ی نانوفروروندگی صحنه گذاری می‌شود. در فصل چهارم به بررسی اثر نانوذره بر روانکاری با استفاده از روش دینامیک مولکولی می‌پردازد. در این فصل تاثیر عواملی از جمله سرعت لغزش، دما، فشار مطالعه خواهد شد.

سطوح لغزشی لزوماً از یک جنس یکسان نیستند و هر یک از سطوح با جنس‌های متفاوت، می‌توانند عملکرد متفاوتی در فرآیند سایش داشته باشند. از این رو برای بررسی اثر نانوروانکاری نانوذره الماس در فرآیند سایش فلزات با دوجنس متفاوت، یکبار دیگر شبیه‌سازی با دو جنس آلومینیوم و آهن انجام شد به این نحوه که بلوک پایین از جنس آلومینیوم و بلوک بالایی از جنس آهن در نظر گرفته شده است. این مورد در مطالعات دینامیک مولکولی پیشین بررسی نشده است و می‌توان به عنوان موضوعی جدید به آن پرداخت.

زبری سطح یکی از دلایل افزایش اصطکاک در قطعات صنعتی است. یکی دیگر از کاربردهای نانو ذرات برطرف کردن این ناصافی‌ها و بهبود اصطکاک است. همچنین بلورهای جامدات کامل نیستند یعنی دارای عیوب شبکه کریستالی می‌باشند. از نظر کریستالوگرافی، کریستالی که دارای ساختمان شبکه‌ای کاملاً منظم از تکرار سلول واحد باشد، کریستال ایده‌آل نامیده می‌شود و منظور از عیوب بلوری، بی‌نظمی شبکه‌ای است که ابعاد آن در محدوده قطر اتمی می‌باشد. در طبیعت ماده‌ای که تمام بلورهای آن بی‌نقص باشند وجود ندارد و همچنین خواص فیزیکی و مکانیکی برخی مواد به شدت تحت تأثیر حضور عیوب می‌باشد به‌طوری که این عیوب در پلاستیسیته، استحکام فلزات، هدایت الکتریکی نیمه رسانا و ... تأثیر قابل توجهی دارند و همچنین یکی از مهم‌ترین دلایل استحکام، وجود نواقص در ساختمان کریستالی تلقی می‌شود که البته این اثر همیشه مضر نیست و برخی ویژگی‌های خاص ماده اغلب به صورت عمدی و با استفاده از وارد کردن مقادیر کنترل شده از عیوب خاص ایجاد می‌گردند. در مطالعات دینامیک مولکولی پیشین، به تأثیر این پدیده در سایش پرداخته نشده است بنابراین در فصل چهار، همچنین به بررسی اثر هر یک از این ناصافی‌ها یعنی وجود برجستگی روی سطح بلوک پایین و وجود حفره روی سطح آن پرداخته می‌شود. نهایتاً در فصل پنجم نتایج بدست آمده در فصول مختلف جمع‌بندی می‌شود و پیشنهادات ادامه این تحقیق در این فصل ارائه خواهد شد.

فصل ۲ : شبیه سازی دینامیک مولکولی

امروزه شبیه سازی‌های رایانه‌ای در کنار فعالیت‌های آزمایشگاهی، کمک بسیاری به فهم پدیده‌های فیزیکی می‌کند. به دلیل محدودیت‌های آزمایشگاهی در مقیاس میکرو و نانو، علم محاسباتی نانو به عنوان مکمل علوم آزمایشگاهی، محققان را در فهم پدیده‌ها در مقیاس میکرو و نانو یاری می‌کند. روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، به عنوان یک روش معین در میان روش‌های شبیه سازی مولکولی، در سال‌های اخیر مورد توجه محققان قرار گرفته است. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یک رشته تحقیقاتی است که در دهه‌ی ۱۹۵۰ میلادی آغاز شده است. در این روش از رایانه‌ها برای تولید مجموعه‌ای از تصاویر و فیلم‌های نمایشی از مولکول‌های در حال تعامل استفاده می‌شود و می‌توان محاسبات مربوط به خواص موردنیاز را با آن انجام داد. روش‌های دینامیک مولکولی بر پایه انرژی پتانسیل بین اتم‌ها بنا شده است. شبیه‌سازی دستگاه‌های گسسته^۱ (اتمی) سه مرحله را در برمی‌گیرد [۱۶]:

۱. ایجاد یک مدل از ماده مدنظر (جامد، مایع و یا گاز).
۲. محاسبه مسیرهای اتمی مدل (مسیر حرکت اتم‌ها در هنگام شبیه سازی).
۳. تجزیه و تحلیل مسیرهای محاسبه شده در سیستم، برای بدست آوردن مقادیر عددی خواص سیستم.

در ادامه، ابتدا به فرضیات و تئوری‌های موجود در روش دینامیک مولکولی پرداخته می‌شود. سپس چگونگی پیاده‌سازی روش دینامیک مولکولی ارائه می‌گردد.

۲-۱ دینامیک کلاسیک

محاسبه مسیر حرکت اتم‌ها در روش دینامیک مولکولی، از قوانین مکانیک کلاسیک استفاده می‌شود. در ادامه این روش معرفی می‌شوند [۱۷].

^۱ Discrete Systems

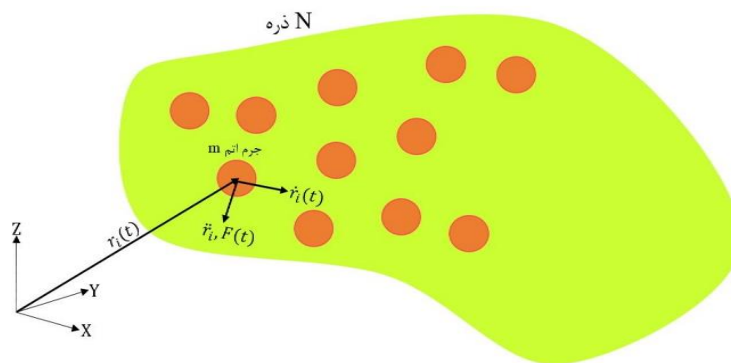
۲-۱-۱ دینامیک نیوتنی^۱

در دینامیک نیوتنی اعمال نیروی F_i به ذره‌ی i باعث حرکت انتقالی آن می‌شود. رابطه‌ی ۲-۱ قانون دوم نیوتن را نشان می‌دهد که در آن با فرض ثابت بودن جرم اتمی (m)، شتاب مستقیماً با نیرو در ارتباط است.

$$F_i = m\ddot{r}_i \quad (2-1)$$

$$\ddot{r}_i = d^2 r_i / dt^2 \quad (2-2)$$

اگر N تعداد مولکول باشد آنگاه معادله نیوتن منجر به ایجاد $3N$ معادله دیفرانسیل مرتبه دوم مانند ۱ می‌شود. شکل ۲-۱ نمایی از موقعیت، سرعت، شتاب و نیروی وارد بر اتم را در دستگاه کارتزین نشان می‌دهد. اگر هیچ نیروی خارجی به اتم i اعمال نشود، سرعت ثابت بوده و می‌توان به قانون اول نیوتن رسید.



شکل ۲-۱. موقعیت، سرعت، شتاب و نیروی وارد بر ذره در دستگاه کارتزین [۱۹]

^۱Newtonian Dynamics

۲-۱-۲ دینامیک همیلتونی^۱

اگر چه گذشت زمان منجر به تغییر در نیروی وارد بر مولکول و موقعیت آن می‌شود، ولی قانون دوم نیوتن مستقل از زمان است. اگر تغییری از خارج در سیستم ایجاد نشود، انرژی کل موجود در هر سیستم، ثابت می‌ماند. این انرژی به دو بخش کلی پتانسیل و جنبشی تقسیم می‌شود. با فرض اینکه جرم مولکول‌ها ثابت باشد، انرژی جنبشی تابع اندازه حرکت اتم‌ها و انرژی پتانسیل تابع موقعیت آن‌ها است. بنابراین انرژی کل، تابعی از اندازه حرکت اتم‌ها و موقعیت آن‌ها خواهد بود که بصورت رابطه ۳-۲ بیان می‌شود. این رابطه تابع همیلتون H نام دارد.

$$H(r^N, p^N) = \frac{1}{2m} \sum_i p_i^2 + \sum_i U(r_i) = E = \text{Const} \quad (2-3)$$

در این رابطه r موقعیت هر اتم را نشان می‌دهد و U و p به ترتیب انرژی پتانسیل و اندازه حرکت هستند. با توجه به اینکه تابع همیلتون طبق رابطه ۳-۲ وابستگی مستقیم به زمان ندارد، با استفاده از مشتق گیری می‌توان می‌توان به معادلات حرکت همیلتونی (روابط ۴-۲ و ۵-۲) رسید [۱۷].

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m} = \dot{r}_i \quad (2-4)$$

$$\frac{\partial H}{\partial r_i} = -\dot{p}_i \quad (2-5)$$

معادلات همیلتونی تعداد $6N$ معادله دیفرانسیل مرتبه اول اسکالر در سه راستای عمود بر هم بوجود می‌آورند که معادل با $3N$ معادلات نیوتنی مرتبه دوم است. در حقیقت در دیدگاه همیلتونی نیرو به صورت صریح وجود ندارد و به دلیل ثابت فرض کردن انرژی، حرکت اتفاق می‌افتد ولی در دیدگاه

^۱Hamiltonian Dynamics

نیوتنی، حرکت را در اثر نیروی بوجود آمده می‌داند. برای سهولت در شبیه‌سازی و ساده‌سازی معادلات در روش دینامیک مولکولی، از دینامیک همیلتونی به جای نیوتنی استفاده می‌شود. برای بدست آوردن معادلات همیلتونی فرضیاتی صورت گرفته است که بصورت زیر است:

- این معادلات برای یک سیستم ایزوله می‌باشد. در صورتی که سیستم با محیط تبادل انرژی داشته باشد، یک جمله از جنس انرژی به روابط فوق اضافه خواهد شد.
- بر اساس رابطه‌ی $p_i = m\dot{r}_i$ ، اندازه حرکت و سرعت با هم مرتبط هستند.
- در تابع همیلتونی جمله‌ای که بصورت صریح با زمان مرتبط باشد، وجود ندارد.

۲-۲ میدان نیرو

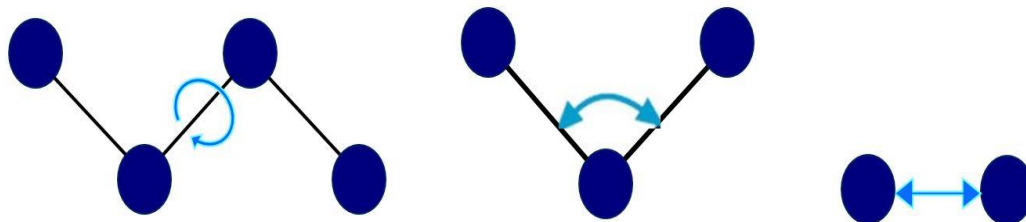
اکثر سیستم‌هایی که در مقیاس نانو هستند حداقل از چند صد اتم تشکیل شده اند. این سیستم‌ها به قدری بزرگ هستند که نمی‌توان آنها را بر اساس روش‌های مکانیک کوانتومی مدل‌سازی کرد. روش‌های مکانیک کوانتومی با الکترون‌های موجود در یک سیستم سر و کار دارند لذا حتی اگر ما تعدادی از الکترون‌ها را هم در نظر نگیریم (روش‌های نیمه-تجربی)، هنوز هم تعداد زیادی ذره بایستی مورد بررسی قرار گیرد که شبیه سازی چنین سیستم‌هایی را بسیار زمان‌گیر می‌نماید. در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نیروهای درون ذره‌ای و بین ذره‌ای به صورت معادلات جداگانه ریاضی بیان می‌شوند و هر دوی آن اهمیت زیادی در صحت و دقت نتایج شبیه‌سازی دارند. حالت میکروسکوپی یک سیستم بر حسب اندازه حرکت و موقعیت مجموعه ذرات تشکیل دهنده آن (اتم‌ها و مولکول‌ها) مشخص می‌شود. در تقریبی که بورن-اپنهایمر از سیستم اتمی یا مولکولی مواد ارائه داده‌اند، بیان می‌شود موقعیت الکترون‌ها نسبت به هسته اتم تاثیر چندانی در انرژی (همیلتونی) یک سیستم ندارد و فقط تابعی از مختصات هسته اتم‌ها می‌باشد [۱۸]. در روش‌های مبتنی بر میدان‌های نیرو (که به دینامیک مولکولی نیز مشهورند)، انرژی پتانسیل یک سیستم را فقط تابعی از موقعیت هسته‌ها و انرژی جنبشی را فقط

تابعی از سرعت هسته‌ها در نظر می‌گیرند از حرکت‌های الکترونی صرف نظر می‌کنند. بنابراین همیشه از دینامیک مولکولی برای انجام محاسبات در سیستم‌هایی که تعداد زیادی اتم دارند، استفاده می‌شود. انرژی پتانسیل به عنوان ورودی اصلی برنامه شبیه‌سازی است و نقش بسیار مهمی را در تشکیل انرژی کلی همیلتونی بازی می‌کند. انرژی پتانسیل بر اثر نیروهای برهم‌کنش بین ذرات ایجاد می‌شود لذا روشی که تقریباً در تمام شبیه‌سازی‌ها به کار می‌رود، تفکیک انرژی پتانسیل کل به جمله‌هایی جداگانه برای برهم‌کنش‌های مختلف است که در ادامه بررسی می‌شود [۱۶].

۱-۲-۲ اجزاء تابع پتانسیل

همانطور که در بخش گذشته بیان شد، پتانسیل تابعی از موقعیت مولکول‌ها یا هسته‌ی آن‌هاست و به موقعیت الکترون‌ها و ذرات زیراتمی (پروتون و نوترون) در مولکول‌ها بستگی ندارد. در روش دینامیک مولکولی، پتانسیل کل به دو بخش پتانسیل درون مولکولی (پتانسیل بین اتم‌های درون یک مولکول که با اصطلاح پیوندی تعریف می‌شود) و پتانسیل بین مولکولی (پتانسیل بین اتم‌های یک مولکول با مولکول‌های دیگر که با اصطلاح غیرپیوندی بیان می‌شود) تقسیم می‌شود.

برای محاسبه انرژی پتانسیل پیوندی، فرض می‌شود که مولکول از اتم‌های مختلفی تشکیل شده است و فاصله و زوایای فضایی قرارگیری اتم‌ها نسبت به هم از مشخصات هندسی آن مولکول می‌باشد. سه نوع پر کاربرد این انرژی‌ها، انرژی حاصل از کشش بین اتم‌ها، انرژی حاصل از باز و بسته شدن زاویه‌های بین اتم‌ها، و انرژی حاصل از چرخش حول پیوندهای ساده است. شکل ۲-۲ این سه نوع انرژی پیوندی پرکاربرد را نشان می‌دهد [۱۹].



ج- چرخش حول پیوندهای ساده

ب- باز و بسته شدن زاویه های پیوندها

الف- کشش بین اتمی

شکل ۲-۲. بعضی از انرژی های درون مولکولی [۱۹]

بخش دیگری از انرژی پتانسیل مربوط به انرژی های ناپیوندی است. در این حالت می توان فرض کرد که هر مولکول بصورت یک جسم صلب است و تنها موقعیت آن نسبت به دیگر مولکول ها تعیین کننده ی انرژی است. عموماً در روش های دینامیک مولکولی از یک تابع ریاضی برای انرژی پتانسیل سیستم مورد نظر (اتم یا مولکول) استفاده می شود. میدان های نیرویی که امروزه در شبیه سازی های مولکولی به کار می روند، رابطه ساده چهار جزیی که از نیروهای درون مولکولی و بین مولکولی سیستم تشکیل شده است، ارائه می شود (رابطه ۲-۶).

$$U = \sum_N intera - molecular + \sum_N inter - molecular$$

$$= \sum_{bond} U + \sum_{angle} U + \sum_{dihed} U + \sum_N inter - molecular \quad (2-6)$$

در این رابطه سه جمله اول مربوط به انرژی درون مولکولی (کششی، زاویه پیوندها و زاویه چرخشی پیوندها) و جمله چهارم هم تابع پتانسیل برهم کنش های بین مولکول های سیستم را توصیف می کند [۱۹]. جملات معادله فوق را می توان به روش های مختلف بسط داد. در هر روش فرض متفاوت بوده و روابط ریاضی حاصل هم متفاوت است.

برهم کنش های ناپیوندی خود شامل دو بخش الکترواستاتیکی^۱ و واندروالسی^۲ است. با توجه به اینکه

^۱ Electrostatic

^۲ Van der waals

برهم کنش الکترواستاتیکی مربوط به ذرات باردار است و در شبیه سازی های این پایان نامه از ذرات باردار استفاده نشده است از توضیح آن صرف نظر می شود.

در یک سیستم N ذره ای، ذرات می توانند دو به دو با هم تبادل انرژی داشته باشند. از طرفی ذرات این سیستم می توانند سه به سه یا چهار به چهار یا N به N باهم تبادل انرژی کنند. در نبود نیروهای خارجی، انرژی کل برای یک سیستم N ذره ای به صورت رابطه ۲-۷ بدست می آید. در این رابطه ϕ_N نشان دهنده مجموع انرژی تعاملات N ذره ای است.

$$\phi = \phi_2 + \phi_3 + \dots + \phi_N \quad (2-7)$$

$$\phi = \phi(r_1, r_2, \dots, r_N)$$

$$\phi_2 = \sum_{i < j} U_2(r_i, r_j)$$

$$\phi_3 = \sum_{i < j < k} U_3(r_i, r_j, r_k)$$

$$\phi_n = \sum_{i < j < k < \dots < n} U_n(r_i, r_j, \dots, r_n)$$

در رابطه ۲-۷، U_2 انرژی حاصل از برهم کنش هر ذره تنها با یک ذره دیگر است. به همین ترتیب، U_3 انرژی حاصل از برهم کنش هر ذره با دو ذره مجاورش است و U_n انرژی حاصل از برهم کنش هر ذره با $n-1$ ذره پیرامونش است. بنابراین انرژی پتانسیل موجود در هر ذره از جمع انرژی هایی بدست می آید که آن ذره با ذرات اطراف تبادل می کند. اندیس های جمع زنی طوری نوشته می شوند که از تکرار در شمارش برهم کنش ها (به عنوان مثال i و j) جلوگیری شود.

جمله دوم در (۲-۷)، ϕ_2 یا پتانسیل جفتی^۱ بزرگترین بخش انرژی پتانسیل است و بیشترین مقدار را دارد. لذا برای ساده کردن محاسبات معمولاً از جملات بعدی صرف نظر می شود. از آنجا که پتانسیل جفتی تنها به فاصله جفت اتم ها بستگی دارد می توان آن را به صورت $U_2(r_{ij})$ نوشت. با وارد کردن پارامترهای مختلف خطی یا غیرخطی در جمله های باقی مانده می توان سهم جملات حذف شده را

^۱ Pair potential

جبران کرد. با در نظر گرفتن جمله‌های پتانسیل بین چند ذره در تابع پتانسیل، دقت شبیه‌سازی افزایش می‌یابد اما موجب افزایش چشم‌گیری در حجم محاسبات خواهد شد و در بسیاری از شبیه‌سازی‌های مهندسی از تقریب دو ذره‌ای استفاده می‌شود که هم تقریب قابل قبولی برای شبیه‌سازی حالت‌های واقعی می‌باشد و هم حجم محاسبات در آن کمتر است. از این رو در روش‌های دینامیک مولکولی، همیشه مصالحه‌ای بین دقت نتایج و زمان در انتخاب نوع تابع پتانسیل تحلیل وجود دارد.

۲-۲-۲ نیروهای بین‌اتمی در دینامیک مولکولی

در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با مشتق‌گیری از تابع انرژی نسبت به مختصات اتم‌ها، می‌توان نیروهای بین‌اتمی را محاسبه کرد. با استفاده از رابطه‌ای که با مشتق‌گیری تحلیلی بدست می‌آید می‌توان محاسبات را با دقت و سرعت بیشتر نسبت به مشتق‌گیری عددی انجام داد. در دینامیک مولکولی، موقعیت اتم‌ها همیشه بر حسب مختصات دکارتی مرجع بیان می‌شود. لذا در محاسبه مشتق‌ها نسبت به مختصات اتمی، از قانون مشتق‌های زنجیری استفاده می‌شود. با استفاده از مشتق‌گیری از انرژی پتانسیل U ، نیروی بین‌اتمی F در جهت k ، بصورت رابطه ۸ محاسبه می‌شود [۱۶].

$$F_k = -\frac{\partial U}{\partial r_k} = \frac{\partial U(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \left(\frac{\partial r_{ij}}{\partial r_k} \right) \quad k = x, y \text{ or } z \quad (2-8)$$

۲-۳ توابع پتانسیل کاربردی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

قبل از اینکه تابع انرژی پتانسیل بین مولکول‌ها محاسبه شود، ابتدا باید مشخص کرد مولکولی که از مجموعه‌ای از اتم‌ها تشکیل شده است باید چه ویژگی‌هایی داشته باشد. یعنی آنکه چه نوع مدلی برای یک مولکول در نظر گرفته می‌شود و چه فرضیاتی و چه نوع ساده‌سازی مورد استفاده قرار می‌گیرد

[۱۶]. اکنون نمونه‌هایی از توابع پتانسیل که به طور معمول در شبیه‌سازی‌های رایانه‌ای مورد استفاده قرار می‌گیرند بیان می‌شود.

۱-۳-۲ تابع پتانسیل لنارد-جونز^۱

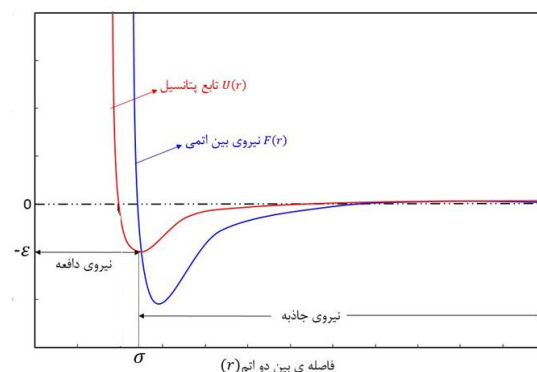
شکل عمومی تابع پتانسیل لنارد-جونز به صورت رابطه ۲-۹ است [۱۷]:

$$U_r = k\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^n - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^m \right] \quad (2-9)$$

که در آن r_{ij} فاصله بین اتمی و σ فاصله‌ای است که در آن انرژی پتانسیل برابر صفر است (شکل ۲-۳).
 (۳) n و m بترتیب توان جملات دافعه و جاذبه است و اعداد ثابت هستند. ε در رابطه ۲-۹ به نام کمینه انرژی پتانسیل است و k از رابطه ۲-۱۰ بدست می‌آید.

$$k = \left(\frac{n}{n-m} \right) \left(\frac{n}{m} \right)^{\frac{m}{n-m}} \quad (2-10)$$

شکل ۲-۳ نمودار این تابع پتانسیل و نیروی برهم‌کنش بین دو اتم را بر حسب فاصله بین اتمی نمایش می‌دهد.



شکل ۲-۳. نمودار تابع پتانسیل لنارد جونز و نیروی برهم‌کنش بین دو اتم

^۱ Lennard-Jones Potential

نخستین بار لنارد و جونز، این تابع پتانسیل را برای مطالعه خواص ترمودینامیکی گازهای نجیب پیشنهاد دادند. اما بعد از آن برای مطالعه سیستم‌های متنوعی به کار گرفته شد. تابع پتانسیل (۲-۱۱) لنارد - جونز متداول‌ترین شکل این تابع است که با قرار دادن $n=12$ و $m=6$ به صورت زیر نوشته می‌شود.

$$U_r = k\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2-11)$$

مقدار ε در رابطه ۲-۱۱ در $r_m = 2^{1/6}$ اتفاق می‌افتد (شکل ۳-۲). در رابطه ۲-۱۱ جمله ی با علامت مثبت نماینده پتانسیل دافعه و جمله ی با علامت منفی نشان دهنده ی پتانسیل جذبی است. انرژی دافعه با جمله توانی مرتبه دوازدهم تقریب زده شده است. از آنجا که توان ۱۲ از توان ۶ ساخته می‌شود، حجم محاسبات کاهش می‌یابد و سرعت محاسبات بسیار زیاد می‌شود.

۲-۳-۲ تابع پتانسیل مورس^۱

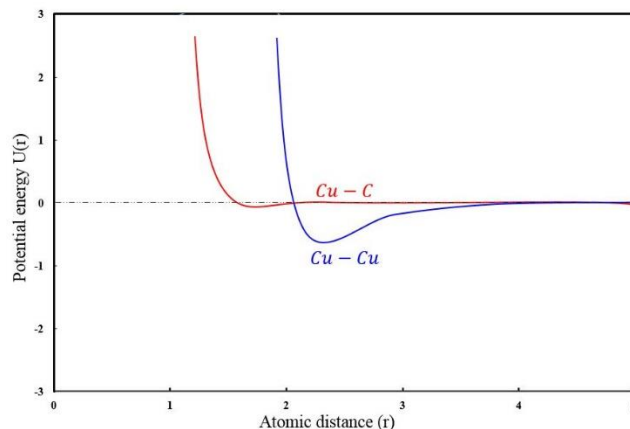
یکی از توابع پتانسیل بین اتمی ساده که برای شبیه‌سازی فلزات استفاده می‌شود، تابع پتانسیل جفتی مورس است. سادگی این تابع امکان کاهش زمان محاسبات را فراهم می‌کند. این تابع بصورت رابطه ۱۲ نوشته می‌شود [۱۹].

$$U(r_{ij}) = E_0 \{ e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)} \} \quad (2-12)$$

در این تابع E_0 انرژی پیوستگی^۲، α مدول الاستیک و r_0 فاصله تعادلی بین اتمی می‌باشد. شکل ۴-۲ نمونه‌ای از تابع پتانسیل بین دو اتم کربن و مس و بین دو اتم مس را نشان می‌دهد.

^۱Morse Potential

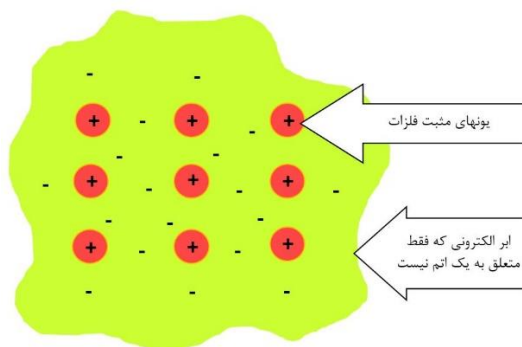
^۲ Cohesion Energy



شکل ۲-۴. نمودار تابع پتانسیل مورس بر حسب فاصله بین اتمی، بین اتم‌های مس و بین اتم‌های کربن و مس [۱۹]

۳-۳-۲ تابع پتانسیل فلزها^۱

عناصر فلزی دارای الکترون‌های لایه‌های آخر هستند. این عناصر با از دست دادن الکترون‌های لایه آخر خود، یک ابر الکترونی یا دریای الکترونی به وجود می‌آورند. قسمت درونی هر اتم که شامل هسته مرکزی و الکترون‌های مدارهای داخلی است از آن باقی می‌ماند. با توجه به اینکه الکترون‌های لایه خارجی از دست رفته‌اند، این قسمت دارای بار مثبت خواهد شد و همانند یک یون عمل می‌کند. الکترون‌های لایه آخر که دیگر به هسته مرکزی وابسته نیستند، به سادگی در قسمت ابر الکترونی حرکت می‌کنند و در هر زمان به چندین اتم وابسته هستند [۲۰]. شکل ۲-۵ چگونگی پیوند فلزی را نشان می‌دهد.



شکل ۲-۵. نمودار پیوند فلزی [۲۰]

در اثر جاذبه‌ی دوگانه‌ای که بین یون‌های مثبت و ابرالکترونی وجود دارد، یون‌های مثبت به یکدیگر متصل شده و پیوند فلزی را بوجود می‌آورند. خواص پیوندهای فلزی در تمام جهات یکسان است و این یعنی پیوندهای فلزی جهت‌دار^۱ نیستند زیرا الکترون‌هایی که اتم‌ها را به یکدیگر متصل می‌کنند دارای موقعیت مشخصی نیستند. با تغییر مکان نسبی اتم‌ها، کرنش زیادی در فلزات صورت می‌گیرد و جهت پیوند را عوض می‌کند ولی پیوند ضعیف نمی‌شود، نمی‌شکند و پا برجا می‌ماند. این ویژگی باعث رفتار نرم فلزات می‌شود. هدایت حرارتی و الکتریکی آن‌ها نیز به دلیل ساختار پیوند آن‌ها می‌باشد [۱۶].

تابع پتانسیل EAM^۲ برای مدلسازی فلزات (تک عنصری و یا آلیاژی) جواب‌های دقیق‌تری می‌دهد و قابلیت محاسبه خواص الاستیک و پلاستیک، تولید عیوب و پیش‌بینی مکانیزم شکست را در فلزات دارد. همچنین با استفاده از این تابع پتانسیل می‌توان خواص سطحی فلزات از جمله خواص چسبندگی سطح، انرژی سطحی، بازسازی سطحی را مدل کرد [۲۱ و ۲۲].

همانطور که در شکل ۵-۲ دیده می‌شود، ابر الکترونی، هسته‌های یونی مثبت را محاصره کرده‌اند. انرژی وارد بر هر هسته از مجموع انرژی حاصل از مجاورت با هسته‌ها و مجاورت با الکترون‌ها بدست می‌آید. در فلزات، چگالی کل الکترون‌ها با استفاده از اصل برهم نهی خطی از توزیع اتم‌ها تقریب زده می‌شود و این موضوع پایه تابع پتانسیل EAM می‌باشد. داو و باسکس در سال ۱۹۸۴ انرژی پتانسیل کل، فلزات را با استفاده از رابطه ۱۳-۲ بدست آوردند [۲۱ و ۲۲].

$$U_{metal} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j \neq i}^N V_{ij}(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F(\rho_i) \quad (2-13)$$

در این رابطه $V_{ij}(r_{ij})$ (جمله‌ی اول) جمع انرژی پتانسیل جفتی و $F(\rho_i)$ انرژی ناشی از چگالی الکترونی پس‌زمینه است و N تعداد یون‌های مثبت است.

^۱ Directional

^۲ Embedded Atom Model (EAM)

انرژی پتانسیل جفتی که برای یون‌های مثبت در نظر گرفته می‌شود از نوع الکترواستاتیکی دفعی^۱ است. این انرژی مستقیماً به چگالی الکترون‌ها وابسته نیست [۲۰]. انرژی پتانسیل جفتی را می‌توان با استفاده از روابط ۲-۱۴ و ۲-۱۵ محاسبه نمود [۲۱ و ۲۲].

$$V_{ij}(r) = Z_i(r)Z_j(r)/r \quad (2-14)$$

$$Z_r = Z_0(1 + \beta r^v)e^{-\alpha r} \quad (2-15)$$

در این رابطه $Z(r_{ij})$ شارالکترونی موثر میان دو یون و r_{ij} فاصله بین یون‌ها می‌باشد. شارژ موثر با استفاده از بار الکترون‌های لایه‌های خارجی Z_0 و ضرایب ثابت α, β, v بدست می‌آید. مقادیر این ضرایب برای فلزات مختلف بدست آمده است [۲۲].

تابع $F(\rho_i)$ انرژی موجود بین اتم i با الکترون‌های زمینه که با چگالی الکترونی محلی ρ_i توزیع شده‌اند را نشان می‌دهد. در واقع این تابع، انرژی تعاملات گروه‌های چند ذره‌ای^۲ را در فلزات شبیه‌سازی می‌کند. برای بدست آوردن انرژی برهم‌کنش بین یک اتم با الکترون‌های موجود در ابر الکترونی اطراف آن، باید چگالی این الکترون‌هایی که در اطراف هر اتم مستقر هستند را محاسبه کرد. چگالی الکترونی محلی ρ_i در اطراف یک اتم در فلزات با استفاده از اصل برهم‌نهی چگالی اتم‌های مجاور مطابق رابطه ۱۶ بدست می‌آید.

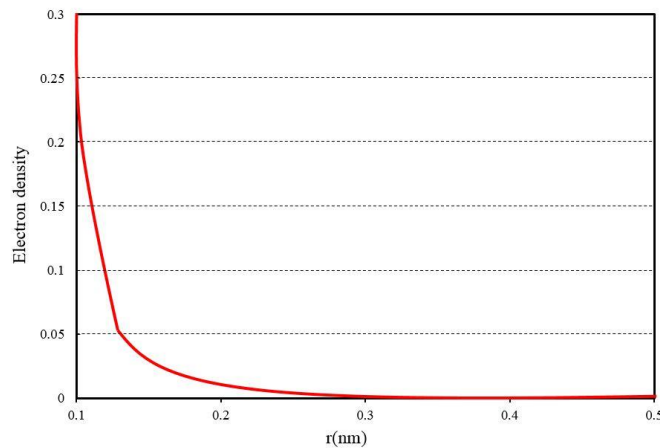
$$\rho_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N \rho_{ij}(r_{ij}) \quad (2-16)$$

در این رابطه ρ_{ij} چگالی الکترون‌هایی است که توسط اتم j با اتم i به اشتراک گذاشته می‌شود. این چگالی، تابع موقعیت بین اتم‌های i, j (r_{ij}) است. این تابع با استفاده عدد الکترون و چگالی الکترونی در لایه‌های اوربیتال s و d برای هر فلز و توابع موجی هارتری-فوک بدست می‌آید [۲۱ و ۲۲].

^۱ Repulsive Electrostatic Potential

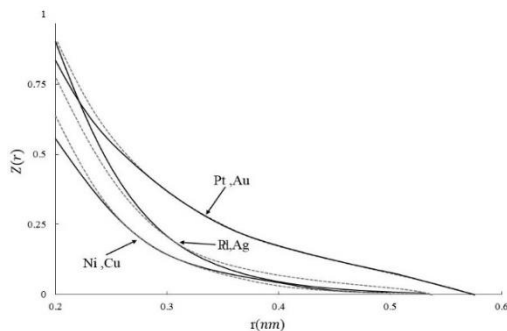
^۲ Multi-Body Interaction

شکل ۶-۲ نمونه‌ای از چگالی الکترونی اتم مس را نسبت به فاصله بین اتمی نشان می‌دهد.



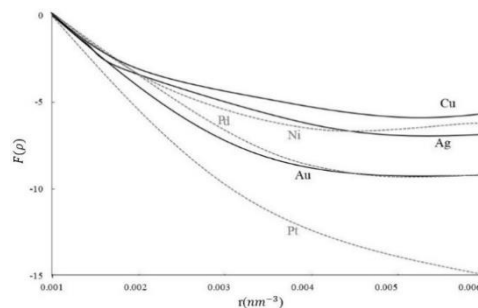
شکل ۶-۲. نمودار چگالی الکترونی بین دو اتم بر حسب فاصله آن‌ها [۲۳]

تابع $F(\rho_i)$ یک تابع عمومی^۱ است و به اینکه این چگالی الکترونی چگونه بوجود آمده است ارتباطی ندارد و فقط وابسته به چگالی الکترونی محلی است. برای استفاده از تابع پتانسیل EAM، طبق رابطه ۱۵، باید مقادیر $F(\rho_i)$ ، V_{ij} و ρ_i بدست آیند. از آنجا که V_{ij} تابعی از $Z(r)$ است، با استفاده از تئوری‌های موجود می‌توان مقادیر اولیه $Z(r)$ را تخمین زد اما برای رسیدن به دقت کافی داشته باشد، نیاز است که مقادیر آن‌ها با استفاده از آزمایش‌های تجربی بدست آید. شکل ۷-۲ و شکل ۸-۲ نمونه‌ای از مقادیر توابع $F(\rho_i)$ و $Z(r)$ را برای فلزات مختلف نشان می‌دهد.



شکل ۸-۲. نمودار شار الکترونی موثر بر حسب

فاصله‌ی بین اتمی [۲۲]



شکل ۷-۲. نمودار انرژی اتم بر حسب

الکترونی پس زمینه [۲۲]

^۱ Universal Function

همانگونه که قبلاً هم بیان شد، تابع $Z(r)$ دارای معادله صریح ریاضی است (رابطه ۱۷-۲). ولی تابع $F(\rho)$ دارای رابطه صریح ریاضی نمی‌باشد و مقادیر کل آن بصورت داده‌های جدولی مورد استفاده قرار می‌گیرد [۱۶].

۴-۳-۲ تابع پتانسیل ترسوف^۱

تابع پتانسیل ترسوف برای استفاده در سیستم‌های کووالانسی شامل پیوندهای کربن-کربن، سیلیکون-سیلیکون و ژرمانیم-ژرمانیم توسعه داده شده است. این پتانسیل اثرات دو جسمی و چند جسمی را به خوبی در یک مدل ترکیب می‌کند. این پتانسیل از اولین پتانسیل‌های است که اثر مرتبه پیوند و انرژی پیوند را نیز لحاظ می‌کند. ایده اصلی این پتانسیل آن است که در سیستم‌های واقعی، قدرت هر پیوند به محیط موضعی آن بستگی دارد، یعنی اتمی که تعداد زیادی همسایه دارد، پیوندهای ضعیف‌تری نسبت به اتمی که همسایه‌های کمتری دارد تشکیل می‌دهد. این پتانسیل از نگاهی دیگر یک پتانسیل جفتی است که قدرت آن به محیط بستگی دارد. پتانسیل ترسوف دارای ۱۳ پارامتر است. انرژی به صورت مجموع برهم‌کنش‌های جفتی-مانند مدل‌سازی می‌شود، اما ضریب جمله جاذبه‌ای در این پتانسیل جفتی-مانند (که نقش مرتبه پیوند را ایفا می‌کند) به محیط موضعی بستگی دارد. تابع پتانسیل ترسوف با استفاده از روابط ۱۷-۲ و ۱۸-۲ تعریف می‌شود [۲۳].

$$E = \frac{1}{2 \sum_i \sum_{j \neq i} V_{ij}} \quad (2-17)$$

$$V_{ij} = f_c(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})] \quad (2-18)$$

در رابطه‌ی ۱۸-۲، $f_c(r_{ij})$ ، $f_R(r_{ij})$ و $f_A(r_{ij})$ به ترتیب یک تابع هموار برای محدود کردن فاصله اعمال پتانسیل، پتانسیل جفتی دافعه که به علت همپوشانی اربیتال‌های اتمی اتم‌های مقابل پیش

^۱Tersoff Potential

می‌آید و پتانسیل جفتی جاذبه ناشی از پیوند، هستند که به ترتیب با روابط ۲-۱۹، ۲-۲۰ و ۲-۲۱ محاسبه می‌شوند. b_{ij} نشان دهنده نوعی وابستگی است که می‌تواند نیروی جاذبه را نسبت به دافعه تقویت یا تضعیف کند که با استفاده از روابط ۲-۲۲ تا ۲-۲۴ محاسبه می‌شود.

$$f_c(r) \quad (2-19)$$

$$= \begin{cases} 1 & : r < R - D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin\left(\frac{\pi(r-R)}{2D}\right) & : R - D < r < R + D \\ 0 & : r > R + D \end{cases}$$

$$f_R(r_{ij}) = A \exp(-\gamma_1 r_{ij}) \quad (2-20)$$

$$f_A(r_{ij}) = -B \exp(-\gamma_2 r_{ij}) \quad (2-21)$$

پارامترهای D و R در رابطه ۲-۱۹، به گونه‌ای انتخاب می‌شوند تا لایه همسایه‌های اول در نظر گرفته شود و پارامترهای A و B در روابط ۲-۲۰ و ۲-۲۱ ثابت هستند.

$$b_{ij} = (1 + \beta^n \delta_{ij}^n)^{-\frac{1}{2n}} \quad (2-22)$$

$$f_R(r_{ij}) = A \exp(-\gamma_1 r_{ij}) \quad (2-23)$$

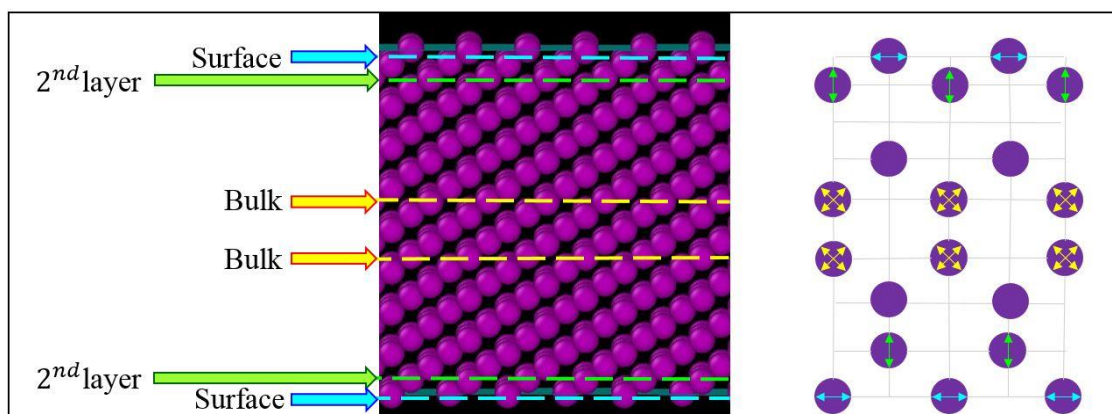
$$f_A(r_{ij}) = -B \exp(-\gamma_2 r_{ij}) \quad (2-24)$$

در رابطه‌ی ۲-۲۳، θ_{ijk} زاویه پیوندی بین بردارهای r_{ij} و r_{jk} است.

۲-۴ شرایط مرزی در دینامیک مولکولی

هدف اصلی شبیه سازی دینامیک مولکولی، محاسبه مسیرهای اتمی و مولکولی است. شبیه سازی با یک دستگاه کوچک انجام می‌شود. یعنی دستگاهی با N اتم در یک حجم ثابت V که سلول شبیه سازی را تشکیل می‌دهد. در شبیه سازی دینامیک مولکولی، برای آنکه بتوان با تعداد نسبتاً کمی از ذرات، خواص ماکروسکوپی را بدرستی شبیه سازی کرد، باید شرایط مرزی بدرستی تعیین شوند. محیط‌های

ماکروسکوپی و میکروسکوپی تفاوت‌هایی با یکدیگر دارند. در محیط سیستم‌های ماکروسکوپی، تغییرات محیطی به بخش کوچکی از اتم‌ها که به دیواره نزدیک هستند تاثیرگذار است. این در حالی است که در یک سیستم میکروسکوپی بخش عمده‌ای از اتم‌ها به دیواره نزدیک هستند. در یک سیستم با تعداد اتم، $N_m = 10^3$ حدود ۵۰۰ اتم (یعنی نیمی از آن‌ها) دارای خواص مرزی هستند که قطعا در خواص سیستم و نتایج سیستم تاثیرگذار است. برای بدست آوردن خواص ماکروسکوپی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نیاز است که اثرات مرزی حذف شوند. شکل ۲-۹ نمایی از تفاوت حرکتی مولکول‌های داخل سلول و مولکول‌های مرزی را نشان می‌دهد.

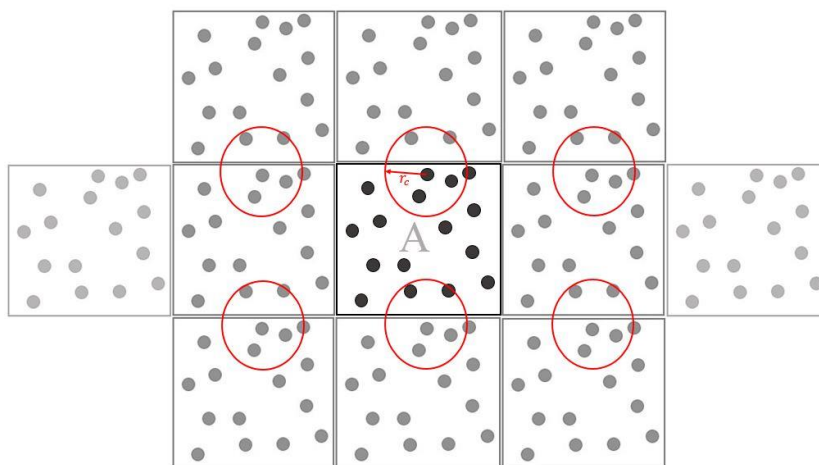


شکل ۲-۹. نمایی از تفاوت حرکت مولکول‌ها در داخل جسم و مولکول‌های مرزی

همانگونه که در شکل ۲-۹ مشخص است، مولکول‌های چندلایه که نزدیک به سطح آزاد هستند دارای درجه آزادی بیشتر و تغییر مکان بیشتر هستند ولی مولکول‌هایی که در فاصله بیشتر از سطح قرار دارند، تغییر مکان محدودی دارند. مولکول‌های نزدیک به مرز دارای انرژی و تغییر مکان‌های متفاوت هستند و نمی‌توانند خواص کپه‌ای داشته باشند [۱۶].

۱-۴-۲ شرایط مرزی متناوب^۱

برای آنکه بتوان در یک شبیه سازی با استفاده از تعداد نسبتاً کمی از ذرات، خواص ماکروسکوپی را تعیین نمود باید مرزها و اثرات مرزی را به درستی در نظر گرفت. از آنجا که تعداد ذرات موجود در اجسام ماکروسکوپی بسیار زیاد است و بدلیل وجود محدودتیهای محاسباتی، شبیه سازی تمامی ذرات امکان پذیر نیست به در شبیه سازیها از تعداد محدودی ذرات استفاده می شود. (به عنوان مثال حجم A در شکل ۱۰-۲). اما ذرات موجود در حجم A همانند ذرات اجسام ماکروسکوپی نیستند. برای رفع این مشکل شرایط مرزی متناوب تعریف می شود و شبیه سازی به گونه ای انجام می شود که نیروهای وارد بر ذرات در مرزها مشابه شرایط جسم کپه ای باشد. شکل ۱۰-۲ نمایی از شرط مرزی متناوب را نشان می دهد.



شکل ۱۰-۲. نمایی از چگونگی شرط مرزی متناوب

در واقع با در نظر گرفتن شرط مرزی حجم اولیه (A) به طور متناوب در کنار یکدیگر تکرار شده و باعث می شود اتمهای مرزی حجم A دیگر حالت مرزی نداشته باشند و انرژی و حرکات آنها همانند ذرات داخلی جسم در نظر گرفته شود (شکل ۲-۱۰). با استفاده از شرط مرزی متناوب می توان ضمن حفظ خواص ماکروسکوپی فقط حجم اولیه را در محاسبات شرکت داد که روابط ۲۵-۲ و ۲۶-۲ برای آن

^۱Periodic boundary condition

حاکم است.

$$\text{if } R_{\alpha}[i] > \frac{l_{\alpha}}{2} \rightarrow R_{\alpha}[i] = R_{\alpha}[i] - l_{\alpha} \quad \alpha = x, y \text{ or } z \quad (2-25)$$

$$\text{if } R_{\alpha}[i] < \frac{-l_{\alpha}}{2} \rightarrow R_{\alpha}[i] = R_{\alpha}[i] + l_{\alpha} \quad \alpha = x, y \text{ or } z \quad (2-26)$$

در این معادلات R_{α} مختصات اتم i در راستای α و l_{α} ابعاد حجم اولیه است. اگر یکی از اتم‌ها از مرز حجم اولیه خارج شود، آنگاه از طریق تصحیح مختصات با استفاده از روابط ۲-۲۵ و ۲-۲۶ از مرز مقابل وارد حجم می‌شود. وسط حجم اولیه به عنوان مرکز مختصات تعریف می‌شود (شکل ۲-۱۰). مطالعات بر روی اصول پایستاری^۱ نشان می‌دهد که استفاده از شرط مرزی متناوب، در پایستاری جرم، انرژی کل و مومنتوم خطی، خطایی بوجود نمی‌آورد ولی باعث عدم پایستاری مومنتوم زاویه‌ای می‌شود [۱۷].

۲-۴-۲ شرایط مرزی دیگر

در شبیه سازی دینامیک مولکولی علاوه بر شرط مرزی متناوب، شرایط مرزی دیگری نیز تعریف می‌شود. یکی از شرایط مرزی، شرط مرزی ثابت^۲ است که موقعیت اتم‌ها در آن ثابت در نظر گرفته می‌شود. شرط مرزی دما ثابت^۳ که در آن با تنظیم سرعت اتم‌ها، دما را ثابت نگه می‌دارد و بدین معنی است خارج شده از این جسم به میزانی است که دما (سرعت اتم‌ها) در آن ثابت بماند [۱۶].

۲-۵ پیاده سازی شبیه سازی دینامیک مولکولی

عموما در شبیه سازی‌های دینامیک مولکولی برخی کمیت‌ها ثابت فرض می‌شوند که در هر یک از موارد شبیه سازی متفاوت هستند. به عنوان مثال در برخی سیستم‌ها دما، حجم و تعداد ذرات را ثابت در نظر

^۱ Conservation

^۲ Fixed Boundary Condition

^۳ Constant Temperature

می‌گیرند. چنین سیستمی هنگرد کانونی^۱ (NVT) پنام دارد. و نیز از این قبیل هنگردها می‌توان به هنگرد کانونی کوچک^۲ (NVE) اشاره نمود که در آن انرژی، حجم و تعداد ذرات ثابت می‌باشند. تعداد مولکول‌ها (اتم‌ها) در شبیه سازی دینامیک مولکولی از 10^3 تا 10^{23} متغیر است. مقادیر انرژی، جرم و حجم و غیره هم حسب واحدهای ماکروسکوپی (مانند متر، ژول، گرم، ...)، اعداد بسیار کوچکی خواهند داشت. انجام محاسبات با چنین اعداد کوچکی باعث افزایش خطاهای عددی حاصل از گرد کردن اعداد می‌شود. برای رفع این مشکل از متغیرهای بدون بعد استفاده که در آن واحدها با استفاده از ترکیب‌های مناسبی از انرژی، جرم، حجم و غیره بدون بعد می‌شوند و یکی دیگر از روش‌ها استفاده از واحدهای در مقیاس مولکول است [۱۶].

۱-۵-۲ شعاع قطع اثر پتانسیل

طولانی‌ترین و مهم‌ترین مرحله در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی، محاسبه نیروهای وارد بر اتم‌های سیستم و انرژی پتانسیل است. برهم‌کنش بین اتم‌ها باید برای تمام جفت اتم‌های موجود در سیستم محاسبه شود. اما در بسیاری از مدل‌ها عملاً انجام چنین کاری میسر نیست چرا که حجم محاسبات بشدت افزایش می‌یابد. از آنجا که بخش اعظم انرژی پتانسیل و نیروها، ناشی از همسایه‌های نزدیک هر ذره است، لذا از یک فاصله مشخص به بعد، از تاثیر ذرات همسایه چشم پوشی می‌شود. این فاصله را تحت عنوان "شعاع قطع اثر پتانسیل"^۳ نام‌گذاری می‌کنند. یعنی به ازای $r > r_c$ ، انرژی پتانسیل برابر صفر قرار داده می‌شود که در آن r_c شعاع قطع پتانسیل^۴ است. رابطه‌ی ۲۷-۲ شعاع قطع اثر پتانسیل را برای رابطه‌ی لنارد-جونز محاسبه می‌کند:

^۱ Canonical Ensemble

^۲ Micro Canonical Ensemble

^۳ Truncation Potential

^۴ Cut off radius

$$U(r) = \begin{cases} 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] & r \leq r_c = 2.5\sigma \\ 0 & r > r_c = 2.5\sigma \end{cases} \quad (2-27)$$

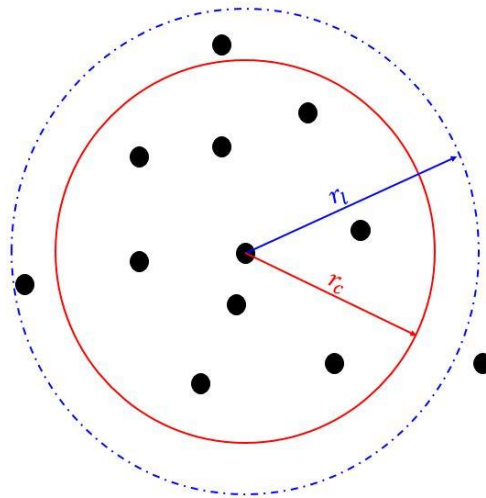
در شکل ۱۱-۲ ذره مرکزی، درون دایره قرمز رنگ با شعاع r_c قرار دارد و این ذره تنها با مولکول‌هایی که در این ناحیه قرار دارند برهم‌کنش خواهد داشت. اگر یک جعبه مکعبی به طول L فرض کنیم، در یک مساله با شرایط مرزی متناوب، فاصله‌ی قطع را بایستی کمتر از نصف طول کوتاه‌ترین لبه‌ی جعبه انتخاب نمود. قید دیگری که فاصله‌ی قطع بایستی رعایت کند با توجه به برهم‌کنش‌های ناپیوندی موجود در سیستم مشخص می‌شود. اگر در یک سیستم، تنها برهم‌کنش‌های ناپیوندی پتانسیل ندارد- جونز باشد، با استفاده از فاصله‌ی 2.5σ خطای بسیار اندکی در نتایج ایجاد می‌شود اما اگر در سیستمی برهم‌کنش‌های الکترواستاتیکی موجود باشند فاصله‌ی قطع باید بسیار بزرگتر انتخاب شود [۱۶].

۲-۵-۲ لیست همسایه‌های ناپیوندی

تنها استفاده از شعاع قطع اثر پتانسیل کاهش قابل توجهی در زمان محاسبه ایجاد نمی‌کند. زیرا هنوز هم باید فاصله هر دو اتم را در سیستم محاسبه شده و آنگاه تصمیم گرفته شود که آیا فاصله‌ی آن‌ها در حدی است که بتوانند تعامل داشته باشند یا خیر. محاسبه‌ی فاصله بین N اتم نیاز به محاسبه $N(N-1)/2$ (فاصله دارد که در سیستم‌های بزرگ نیازمند زمان زیادی است).

در اکثر شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی، اتم‌هایی که در فاصله‌ی قطع آن اتم قرار گرفته‌اند، در حین هر ۱۰ تا ۲۰ مرحله شبیه‌سازی تغییر چندانی ندارند. بنابراین اگر بدانیم در محاسبه‌ی پتانسیل ناپیوندی، چه اتم‌هایی را باید در نظر بگیریم، می‌توانیم همسایه‌های هر اتم را مستقیماً و بدون نیاز به محاسبه‌ی فاصله تشخیص دهیم. این روش اولین بار توسط ورله پیشنهاد شد. در این روش، اتم‌های اطراف هر هسته که در شعاعی بزرگتر از شعاع قطع اثر پتانسیل هستند، ذخیره می‌شوند (r_l). معمولاً $r_l = r_c + 0.3\sigma$ که در آن σ فاصله تعادلی بین دو اتم است و تعداد همسایه‌های بیشتری را دربر

می‌گیرد (شکل ۲-۱۱).

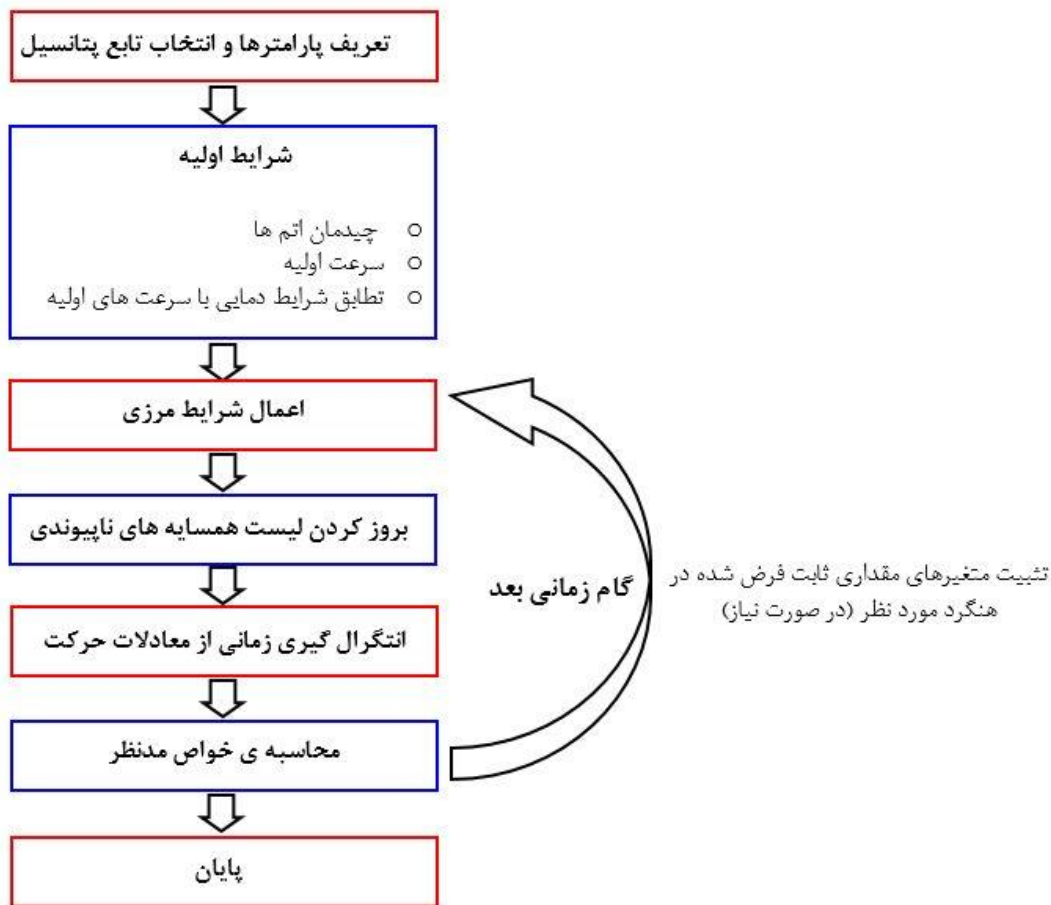


شکل ۲-۱۱. قرارگیری اتم‌ها در شعاع r_l و r_c

با توجه به اینکه نواحی بتدریج تغییر می‌کند و همسایه‌ها تعویض می‌شوند، دیگر نیاز نیست همسایگی تمام اتم‌ها در هر مرحله بررسی شود و با به‌روز کردن همسایه‌های جدید هر اتم در هر چند گام زمانی، زمان محاسبات کاهش می‌یابد [۱۶].

۳-۵-۲ الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

شکل ۲-۱۲ شمای کلی از الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی را نمایش می‌دهد. طبق این الگوریتم، بعد از انتخاب تابع پتانسیل و اعمال شرایط اولیه، شرایط مرزی اعمال می‌شود. سپس برای کاهش حجم محاسبات با تعیین شعاع قطع، لیست همسایه‌های غیریونددی تشکیل می‌شود. پس از آن از معادلات حرکت که بر اساس قانون دوم نیوتن (اصل همیلتون) است، انتگرال‌گیری زمانی می‌شود (در بخش ۴-۲-۵ توضیح داده می‌شود). پس از انتگرال‌گیری زمانی، خواص مورد نظر سیستم را محاسبه و در گام زمانی بعدی، این الگوریتم می‌شود [۱۶].



شکل ۱۲-۲. الگوریتم شبیه سازی دینامیک مولکولی

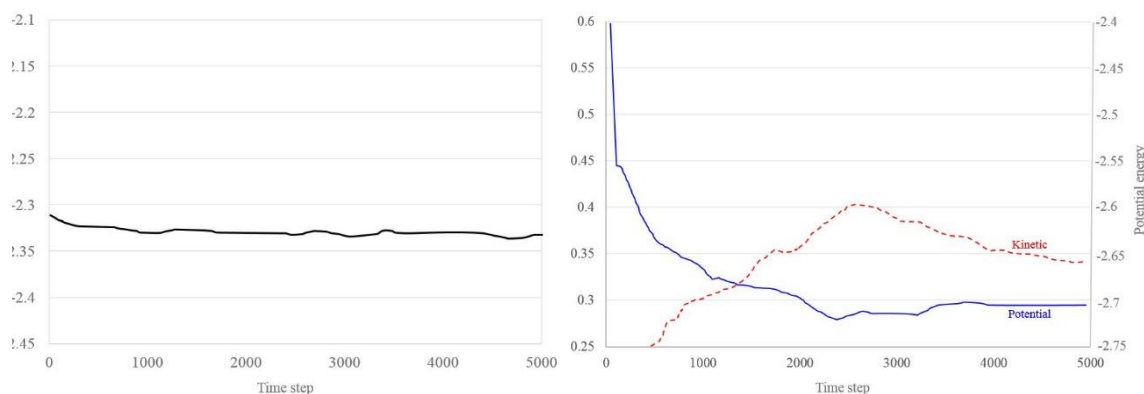
۴-۵-۲ انتگرال گیری از معادله های حرکت نیوتن

مسیر حرکت اتم ها در سیستم با حل معادله های حرکت نیوتن، به دست می آید و خواص مختلفی را می توان با استفاده از آن محاسبه کرد. یک روش استاندارد برای انتگرال گیری عددی از معادله های حرکت روش تفاضل محدود^۱ است. در این روش معادلات حرکت بصورت گام به گام حل می شوند به این صورت که زمان مورد نظر برای انتگرال گیری به تعداد زیادی از فاصله های زمانی کوچک و ثابت dt که گام زمانی^۲ نام دارند، تفکیک می شود و با ترکیب کردن موقعیت، سرعت، شتاب ذره ها در زمان t ، مقدار آن ها در زمان بعدی $t+dt$ بدست آید. در تمام الگوریتم هایی که براساس روش تفاضل محدود ابداع

^۱ Finite Difference Method

^۲ Time step

شده است فرض می‌شود که موقعیت‌ها و خواص دینامیکی اتم‌ها را می‌توان با استفاده از بسط سری تیلور برآورد کرد. یک الگوریتم انتگرال‌گیری بهینه باید حافظه اندکی نیاز داشته باشد و دارای سرعت در حل محاسبات باشد. علاوه بر این باید از قوانین بقای انرژی و اندازه حرکت تبعیت کند و دقت کافی داشته باشد. معمولاً در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای اطمینان از بقای انرژی کل، انرژی جنبشی و پتانسیل (شکل ۱۳-۲) و انرژی کل (شکل ۱۴-۲) بر حسب زمان (یا گام‌های زمانی) رسم می‌شود.



شکل ۱۴-۲. انرژی کل بر حسب گام زمانی

شکل ۱۳-۲. انرژی جنبشی و پتانسیل بر حسب گام

زمانی

همانگونه که در شکل ۱۳-۲ مشخص است، بر اساس قانون بقای انرژی انتظار می‌رود که کاهش و افزایش انرژی پتانسیل و جنبشی برابر و در خلاف جهت هم باشند. یک الگوریتم خوب ضمن حفظ ثبات انرژی، امکان استفاده از گام‌های زمانی بزرگ‌تر را میسر می‌سازد. در بعضی از الگوریتم‌ها مانند الگوریتم ورله^۱ یا الگوریتم ورله‌ی سرعتی^۲، ابتدا با استفاده از بسط تیلور، موقعیت و سرعت اتم‌ها در در لحظه‌ی بعدی محاسبه می‌شود و سپس با مشتق‌گیری از تابع پتانسیل نسبت به موقعیت مکانی، شتاب وارد به همه‌ی اتم‌ها محاسبه می‌شود [۲۰]. این الگوریتم‌ها که سرعت بالایی هم دارند از روش‌های متداول و پرکاربرد در دینامیک مولکولی هستند.

^۱ Verlet Algorithm

^۲ Velocity Verlet Algorithm

۵-۵-۲ انتخاب شرایط اولیه

منظور از شرایط اولیه، انتخاب پیکره‌بندی و سرعت اولیه اتم‌ها است که نیاز است تا برای هر مسئله دینامیک مولکولی بصورت صحیح انتخاب شود.

۵-۵-۱-۲ انتخاب پیکره‌بندی اولیه

در شروع هر شبیه‌سازی باید یک پیکره‌بندی اولیه برای سیستم انتخاب شود. در انتخاب این پیکره‌بندی باید دقت شود، زیرا در موفقیت یا عدم موفقیت شبیه‌سازی کاملاً تاثیر گذار است. برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در حالت تعادل سیستم، بهتر است که پیکره‌بندی اولیه به حالت مورد نظر نزدیک باشد.

۵-۵-۲-۲ انتخاب سرعت‌های اولیه

تمام اتم‌های موجود در یک مجموعه دارای سرعت هستند. این سرعت در جامدات بازه‌های محدودتر و بصورت ارتعاشی هستند. این سرعت برای تمام اتم‌های یک مجموعه یکسان نیست و هر کدام مقدار خاص خود را دارند ولی عموماً توزیع سرعت‌ها در اتم‌های یک مجموعه، از توزیع آماری مانند توزیع ماکسول-بولتزمن^۱ پیروی می‌کند [۱۷]. طبق رابطه ۲-۲۸ درجه حرارت T شاخصی انرژی جنبشی اتم‌ها یا سرعت v است [۱۷].

$$3(N-1) \times \frac{1}{2} k_B T = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N v_i^2 \quad (2-28)$$

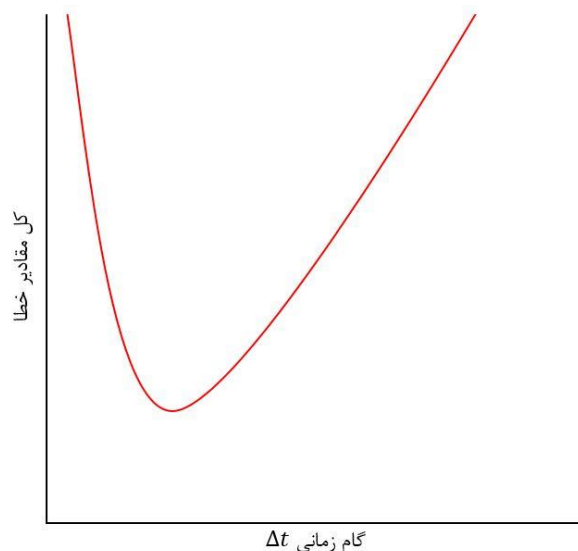
در این رابطه k_B ضریب بولتزمن، N تعداد اتم‌ها و m جرم اتم‌ها می‌باشد. در انتخاب سرعت‌های اولیه باید سه مرحله در نظر گرفته شود. اول اینکه سرعت انتخاب شده برای هر اتم بصورت تصادفی باشد ولی توزیع این سرعت‌های تصادفی از توزیع ماکسول-بولتزمن پیروی کند. توزیع ماکسول-

^۱ Maxwell-Boltzmann distribution

بولتزمن یک توزیع گوسی است و می‌توان آن را با استفاده از یک تولید کننده اعداد تصادفی به دست آورد. اکثر الگوریتم‌های تولید اعداد تصادفی به گونه‌ای طراحی شده‌اند که اعداد تصادفی را در بازه ۱ و ۰ بطور یکنواختی تولید کنند و می‌توان با استفاده از روش‌های نسبتاً ساده‌ای به سرعت‌های تصادفی با توزیع گوسی رسید. دوم اینکه کل سیستم نباید حرکت صلب داشته باشد لذا سرعت‌های اولیه طوری تنظیم شوند که اندازه حرکت کل سیستم صفر باشد. بزرگی این سرعت‌ها باید به گونه‌ای مقیاس شود که طبق رابطه ۲۸-۲ سیستم دارای دمای مدنظر T باشد [۱۶].

۶-۵-۲ انتخاب گام زمانی

در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی قاعده سریع و قطعی برای انتخاب گام زمانی وجود ندارد. اگر گام زمانی بیش از حد کوچک باشد، در هر مرحله فقط بخش محدودی از مسیر طی شده و برای تحلیل مسئله نیاز به گام‌های زمانی زیادی است که این مسئله می‌تواند باعث گرد کردن اعداد، باعث افزایش خطا شود. همچنین اگر گام زمانی بیش از اندازه بزرگ باشد باعث ناپایداری در الگوریتم انتگرال‌گیری می‌شود [۱۶]. ارتباط خطای کلی شبیه‌سازی با بزرگی گام زمانی بصورت شکل ۲-۱۵ است.



شکل ۲-۱۵. ارتباط خطای کل شبیه‌سازی با بزرگی گام زمانی [۱۷]

فصل ۳ : پیاده سازی و صحه گذاری فرآیند شییه سازی دینامیک مولکولی

روش دینامیک مولکولی دارای قابلیت تفکیک‌پذیری مکان و زمان بالاتری نسبت به روش‌های المان محدود و روش‌های عددی است می‌تواند ریزساختار مواد ابزار و قطعه‌کار را در مقیاس اتمی شبیه‌سازی کند. همچنین روش دینامیک مولکولی تصاویر واقعی‌تری از سطوح سایش ارائه می‌دهد که قابل مقایسه با نتایج تجربی می‌باشد. با توجه به اینکه برای بررسی اثر نانوذر در روانکاری و اصطکاک لازم است شبیه‌سازی از فرآیند نانوسایش انجام گیرد و فرایند نانوسایش از تغییر شکل پلاستیک در مقیاس اتمی شروع شده و نهایتاً به شکست پیوندهای بین اتمی منجر می‌شود، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بهترین و دقیق‌ترین روش برای مطالعه فرآیند نانو سایش است. این روش نسبت به هزینه فرایند آزمایشگاهی نانوسایش، بسیار کم هزینه‌تر و مقرون به صرفه است و با استفاده از آن می‌توان تاثیر عوامل مختلف را مشاهده کرد. در سالیان اخیر با رشد چشم‌گیر قابلیت محاسبات عددی توسط رایانه‌های محاسباتی، تحقیقات متعددی در زمینه مدل‌سازی فرایند نانو سایش استفاده از روش دینامیک مولکولی انجام گرفته است. با استفاده از این روش می‌توان بسیاری از عوامل موثر در نانوسایش از جمله سرعت، دما، فشار، جنس قطعه ... را مورد بررسی قرارداد (در فصل ۴ ارائه داده می‌شود).

همانطور که در فصل قبل گفته شد، مهم‌ترین عامل در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، انتخاب میدان‌های نیرو و توابع پتانسیل بین اتمی است. از آنجا که محیط شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بصورت آزمایشگاه مجازی است و نمی‌توان نحوه‌ی واکنش و پیوند اتم‌ها با یکدیگر را به طور تجربی بدست آورد، لذا باید قبل از شروع شبیه‌سازی در مورد درست و یا غلط بودن توابع پتانسیل اطمینان حاصل کرد. در این فصل با پیاده‌سازی دو شبیه‌سازی در زمینه‌ی فرآیند نانوفروروندگی^۱ و معرفی دو مقاله‌ی انجام شده در این زمینه، توابع پتانسیل، شرایط دمایی و مرزی و ... صحنه‌گذاری می‌شود.

^۱ Nano-indentation

۳-۱ پیشینه تحقیقات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرایند نانو

فروروندگی

خواص مکانیکی مواد شامل سختی^۱، استحکام، مدول الاستیسیته^۲، چقرمگی شکست، رفتار خستگی و خزشی خواصی هستند که تعیین کننده‌ی رفتار مواد در برابر نیروهای وارد شده هستند. این خواص پیش از آنکه یک قطعه مورد استفاده قرار گیرد، بایستی به طور کامل بررسی شوند. پس از بررسی خواص مکانیکی قطعه از طریق انجام آزمایش‌های مربوطه و بدست آمدن نتایج، مناسب بودن آن برای کاربرد مورد نظر مشخص می‌گردد [۲۴]. آزمایش نانوفروروندگی در اواسط دهه‌ی ۱۹۷۰، توسعه یافته است و یکی از کارآمدترین روش‌ها برای اندازه‌گیری پارامترهای مکانیکی مواد در ابعاد نانو است [۲۵]. سختی و مدول الاستیک از جمله داده‌هایی است که با این فرآیند محاسبه می‌شوند. سختی را می‌توان مقاومت ماده در برابر تغییر شکل پلاستیک موضعی در اثر نفوذ یک ابزار فرورونده یا خراشنده با اعمال نیروی مشخص تعریف کرد [۲۶]. در طی این آزمایش، ابزار با اعمال نیروی مشخص وارد سطح بستر می‌شود و تغییر شکل الاستیک در بستر آغاز می‌شود. نیرو و عمق فرورفتگی ابزار به درون بستر به تدریج افزایش می‌یابند تا جایی که قطعه دچار تغییر شکل پلاستیک شود. در طول انجام آزمایش نیروها و جابجایی ابزار در هر مرحله از بارگذاری اندازه‌گیری شده و ثبت می‌شود و با استفاده از منحنی نیرو-جابجایی حاصل می‌توان برخی از خواص مورد نظر را بدست آورد و همچنین بعد از باربرداری با اندازه‌گیری مساحت سطح اثر تماس^۳ و داشتن پیشینه نیروی نانو دندانگذار^۴، سختی قطعه محاسبه می‌شود [۲۸، ۲۹]. در حوزه آزمایش نانوفروروندگی و خواص مکانیکی حاصل از آن و نیز پارامترهای تاثیرگذار در این فرآیند، مطالعات گسترده‌ای صورت گرفته است که در اینجا به برخی از آنجا اشاره

^۱ Hardness

^۲ Elastic modul

^۳ Projected Area

^۴ Indenter

می‌شود. فنگ و همکارانش، تاثیرات دما در فرآیند نانوفروروندگی را به شیوه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، برای قطعه کار مس^۱ و ابزار صلب الماس^۲، با سرعت بارگذاری باربرداری ثابت، مورد بررسی قرار داده‌اند و به این نتایج رسیدند که با افزایش دما، مقدار جابجایی پلاستیک روی منحنی نیرو-جابجایی افزایش یافته و نیروی فروروندگی در عمق مشخص کاهش می‌یابد و باعث تغییر فاز قطعه‌کار از ساختار کریستالی اصلی به ساختار بی‌نظم می‌شود. همچنین مشخص می‌شود که افزایش دما، باعث کاهش مدول یانگ و سختی قطعه می‌شود [۲۹]. پینگ و همکاران، تاثیر تغییرات نرخ بارگذاری فرآیند نانوفروروندگی را در فیلم نازک آلومینیوم روی بستر سیلیکون را شبیه‌سازی کرده‌اند. در طی این شبیه‌سازی، وقتی سرعت فروروندگی پایین باشد (50 m/s)، تغییر شکل زیادی روی فیلم آلومینیوم دیده نمی‌شود در حالی که در سرعت بالا (250 m/s)، نیرو از طریق فیلم به بستر منتقل شده و باعث تغییر شکل و جابجایی بزرگتری می‌شود [۳۰]. چونگ و همکارش تغییر فاز تک کریستال سیلیکون را تحت نانوفروروندگی بررسی کردند و دریافتند که ساختار مکعب الماسی سیلیکون در اثر بار دندانه‌گذار و از طریق صاف‌شدن ساختار تتراهدرال، به ساختار تتراگونال تبدیل می‌شود. بعد از باربرداری، بستر با از دست دادن بخشی از اتم‌ها، از ساختار تتراگونال به یک ساختار بی‌شکل تبدیل می‌شود. با نوبت دوم بارگذاری ساختار بی‌شکل مجدداً به ساختار تتراگونال تبدیل می‌شود [۳۱]. چنگ و همکاران، شبیه‌سازی‌های اتمی از فیلم‌های نرم و سخت (طلا و الماس)، تحت نانوفروروندگی را در بار، دما و نرخ بارگذاری متفاوت انجام داده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که در هر دو جنس فیلم‌ها، با افزایش بار و نرخ بارگذاری، مدول یانگ و سختی افزایش می‌یابند اما هنگامی که دما افزایش می‌یابد، قطعه دچار رفتار نرمی ناشی از افزایش سرعت نوسانات اتمی می‌شود و باعث کاهش مدول یانگ می‌شود [۳۲]. یعقوبی و همکاران در شبیه‌سازی فروروندگی فیلم تک کریستال نیکل روی بستر سیلیکونی با شرایط مرزی و ضخامت‌های متفاوت، به این نتایج رسیده‌اند که تاثیر شرایط مرزی روی بستر الاستیک، تابعی از ضخامت

^۱ Copper (Cu)

^۲ Diamond (C)

فیلم و شعاع ابزار کرووی است به این طریق که با افزایش ضخامت و کاهش شعاع ابزار، اثر شرایط مرزی کمتر دیده می‌شود [۳۳]. والش و همکاران شبیه‌سازی فروروندگی فیلم سیلیکون نیتريد را یک‌بار با ساختار کریستالی و یک‌بار با ساختار بی‌شکل انجام داده‌اند. مشاهده شده است که در عمق ثابت، نیروی اعمال شده برای ساختار کریستالی بیشتر از ساختار بی‌شکل بوده است [۳۴]. چوکیک و زین‌تارسکی ارتباط بین ساختار فیلم‌های تشکیل شده روی بستر و تغییر شکل پلاستیک ایجاد شده در آن‌ها را مورد بررسی قرار داده‌اند. برای این کار یک فیلم پوششی نیکل روی بستر مس، با ساختار BCC^1 و یک فیلم نیکل روی طلا با ساختار HCP^2 ایجاد شده است. مشاهده می‌شود که افزایش سختی در فیلم‌های نیکل با کاهش ضخامت لایه حرارتی در ارتباط است. همچنین همبستگی بین ساختار فیلم‌ها و توزیع تغییر شکل پلاستیک روی آن‌ها یافت شده است؛ به این نحو که تغییر شکل در Ni/Cu^3 از مرکز فروروندگی گسترش پیدا می‌کند ولی در Ni/Au^4 علاوه بر مرکز، در مرزخانه‌ها هم گسترش تغییر شکل وجود دارد [۳۵]. لو و همکاران فرآیند نانوفروروندگی برای ابزارهای نیم‌کره و هرمی شکل را شبیه‌سازی کرده‌اند. آن‌ها دریافتند که نیروی ابزار برای ابزار نیم‌کره در مقایسه با ابزار هرمی افزایش می‌یابد [۳۶]. فنگ و همکاران فرآیند نانوفروروندگی را روی ورق گرافیتی و همچنین قطعه الماس و با استفاده از ابزار مخروطی شکل کربنی، در دما و سرعت‌های متفاوت انجام داده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش زاویه مخروطی ابزار و سرعت فروروندگی، بیشینه نیروی تماس، افزایش می‌یابد و در عین حال با افزایش دما این نیرو کاهش می‌یابد. همچنین آن‌ها نشان دادند بیشینه نیروی تماس در عمق فروروندگی، سرعت و دمای یکسان، برای قطعه الماس، بزرگتر از ورق گرافیتی است [۳۷]. شوی‌اکسو و همکاران در شبیه‌سازی فرایند نانوفروروندگی و نانو خراش با استفاده از ابزار الماسی صلب و قطعه کار با آلیاژ $CTi-Al^5$ مدول یانگ را ۱۵۷ گیگاپاسکال گزارش کردند که با نتایج سایر گروه‌ها همخوانی داشته است. همچنین آن‌ها

¹ Body centred cubic

² Hexagonal Close Packed

³ Nickel(Ni)/Copper(Cu)

⁴ Nickel(Ni)/Gold(Au)

⁵ Carbon TitaniumAluminium

نشان دادند که سرعت ابزار در محدوده ۱۵-۱ m/s تاثیر کمی بر مدول ینگ دارد. هم‌چنین نشان دادند در طول لغزش رابطه خطی بین نیروی اصطکاک و بار نرمال وجود دارد [۳۸]. گول و همکارانش به منظور تحلیل مکانیزم تغییر شکل در پلی‌سیلیکون و سیلیکون تک‌کریستال شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانوفروروندگی را با ابزارهای برکویچ هرمی و کروی برای هر دو ساختار انجام داده‌اند. نتایج ایشان نشان می‌دهد که در تمام موارد، در فشار بالا انتقال فاز صورت می‌گیرد. با این حال در میزان و شیوه انتقال فاز بین سیلیکون تک‌کریستال و پلی‌سیلیکون تفاوت وجود دارد. در پلی‌سیلیکون انتقال فاز در مرزدهانه‌ها بیشتر از ناحیه فرورفتگی ابزار می‌باشد [۳۹]. نایر و همکارانش نانوفروروندگی روی فلیمی به ضخامت ۲۰ nm را برای بررسی اثرات سرعت و شعاع ابزار، پتانسیل‌های بین اتمی و شرایط مرزی بستر، شبیه‌سازی کردند و نتیجه گرفتند که سرعت بالا و شعاع‌های مختلف ابزار تاثیر قابل توجهی بر سختی ندارند. در حالی که استفاده از پتانسیل بین اتمی و شرایط مرزی متفاوت، به ترتیب تفاوت قابل توجهی در سختی و عمق فروروندگی ایجاد کردند [۴۰].

ردی و همکارانش با شبیه‌سازی فیلم AlNiCo^1 روی بستر آلومینیوم، خواص مکانیکی فیلم را به ازای سرعت‌های متفاوت ابزار بدست آوردند. سرعت ابزار به شدت روی سختی فیلم تاثیرگذار است. افزایش سرعت ابزار باعث افزایش سختی بستر می‌شود، علاوه بر این مقدار توده‌های تشکیل شده در حین نانوفروروندگی روی بستر، با افزایش سرعت، کاهش می‌یابد [۴۱]. چائو اکسو و همکارانش با شبیه‌سازی نانوفروروندگی الماس به این نتیجه رسیدند که تغییر شکل پلاستیک ایجاد شده در ماده سخت الماس ناشی از انتشار نابجایی‌ها و تغییر فاز الماس از ساختار مکعب الماس به هگزاگونال می‌باشد [۴۲]. ایمران و همکارانش در طول شبیه‌سازی فرایند نانوفروروندگی نیکل با سرعت و شعاع ابزار متفاوت، به این نتایج رسیدند که افزایش سرعت ابزار باعث افزایش سختی قطعه و بزرگ شدن اندازه ابزار باعث کاهش سختی آن خواهد شد و علاوه بر این بزرگ شدن ابزار باعث بیشتر شدن بیشینه نیروی فروروندگی می‌شود. ایشان هم‌چنین نشان دادند که با افزایش تعداد سیکل بارگذاری-باربرداری، بیشینه نیرو و سختی قطعه

¹ Aluminum Nickel Cobalt

کاهش پیدا می‌کند [۴۳]. ژائو و همکارانش تغییر شکل سیلیکون با ابزار الماس را مورد مطالعه قرار داده‌اند. سیلیکون در ناحیه نانوفروروندگی شده از ساختار مکعبی الماس به تتراگونال تغییر می‌یابد و بعد از بارگذاری دوباره به ساختار قبل خود بازمی‌گردد و فقط نواحی که دچار تغییر شکل پلاستیک شده‌اند تغییر ساختار نمی‌دهند که به صورت حفره‌ای با عمق کمتر باقی می‌مانند [۴۴]. کیم و او، نانوفروروندگی روی سطوح (۱۰۰) و (۱۱۱) شبیه‌سازی کرده و متوجه شدند که وقتی روی سطوح (۱۱۱) بارگذاری می‌شود، اتم‌ها در طول جابجایی ابزار دارای ساختار بی‌شکل می‌شوند [۴۵]. لین و همکاران اثر جهت‌گیری کریستال و تغییر فاز اتم‌ها را بررسی کردند و دریافتند که فروروندگی روی سطح (۱۱۰) باعث گسترش تبدیل فاز و لغزش بیشتر نسبت به سطح (۰۰۱) می‌شود [۴۶]. تان و همکاران با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تاثیر حفره در مس با صفحه کریستالی (۱۱۱) را بررسی کردند. دریافتند وقتی عمق فروروندگی زیاد باشد، حفره ناپدید می‌شود. انباشتگی تنش در سطح داخلی حفره نشان می‌دهد که وجود حفره تاثیر معناداری در سختی دارد. همچنین نشان دادند در شعاع یکسان با افزایش عمق حفره، نیرو و سختی بیشتر می‌شود [۴۷]. یو و همکاران با ترکیب شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و المان محدود اثرات شکل هندسی حفره روی فلیم مس با یک دندانگذار سخت را بررسی کردند. در این شبیه‌سازی پنج شکل مختلف حفره ایجاد شده و منحنی‌های نیرو برحسب جابجایشان مقایسه شد و تاثیرات شدید هندسه حفره به عنوان نقص نشان داده شد [۴۸]. ژو و همکاران با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سه بعدی اثر یک حفره روی فیلم نازک نیکل را بررسی کردند. برای نمایش تاثیر شعاع و عمق حفره، آنها را در اندازه‌های متفاوت در نظر گرفتند. نتایج نشان داد نسبت به زمانی که هیچ حفره‌ای نباشد و در بارگذاری برابر، ماده نرم‌تر شده و عمق فروروندگی بزرگتر شد. همچنین نشان داد در طی فروروندگی حفره فرو می‌ریزد و هنگامی که عمق فروروندگی به اندازه کافی بزرگ باشد، حفره ناپدید می‌شود [۴۹].

۲-۳ محیط شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و معرفی بسته نرم-

افزاری

از آنجا که در روش دینامیک مولکولی محاسبات انجام شده روی اتم‌های مجموعه با گام‌های زمانی بسیار کوچک فمتوثانیه (10^{-15} s) انجام می‌شود، برای شبیه‌سازی یک ناحیه کوچک هم باید محاسبات زیادی انجام شود که نیازمند امکانات محاسباتی قوی و زمان زیادی است. بنابراین نیاز است که در محاسبات عددی دینامیک مولکولی، ضمن حفظ دقت در نتایج، الگوریتم تحلیل بهینه‌سازی و نیز بازده محاسباتی افزایش یابد. در سال‌های اخیر با پیشرفت روز افزون علوم رایانه، سیستم عامل‌های لینوکس^۱ و ویندوز^۲ قابلیت‌های مناسبی را برای محیط محاسباتی فراهم کرده است. در این سیستم‌ها امکان دسترسی به فایل‌های مرجع^۳ بصورت رایگان وجود دارد. این بدین معنی است که، امکان اعمال تغییرات در فایل مرجع وجود دارد و می‌توان به عنوان مثال برنامه‌ای را برای کاربردهای خاصی توسعه داد. امروزه در بحث دینامیک مولکولی نرم افزارهای بسیار قدرتمندی تهیه شده‌اند که امکان شبیه‌سازی با بازده بالا را فراهم می‌کند. با توجه به تحقیقات انجام شده پیرامون نرم افزارهای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، بسته نرم‌افزاری LAMMPS^۴ قابلیت‌های بسیار خوبی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرایند نانو دندانه‌گذاری و نانوسایش دارد. این بسته نرم‌افزاری، محصول آزمایشگاه‌های ملی سندیا^۵ در آمریکا است که قابلیت شبیه‌سازی ذرات در حالات جامد، مایع و گاز را بصورت اتمی، پلیمری، بیولوژیکی، فلزی، دانه‌دار و با استفاده از توابع پتانسیل مختلف و شرایط مرزی را دارد [۲۳]. زبان برنامه نویسی در این نرم‌افزار ++C است و دارای الگوریتم‌های عددی با راندمان بالایی است که امکان تحلیل مسئله را با استفاده از یک هسته (سری) و یا مجموعه‌ای از هسته‌ها (موازی‌سازی رایانه‌ها) به کاربر می‌دهد. با

^۱ Linux Operating System

^۲ Windows Operating System

^۳ Open Source

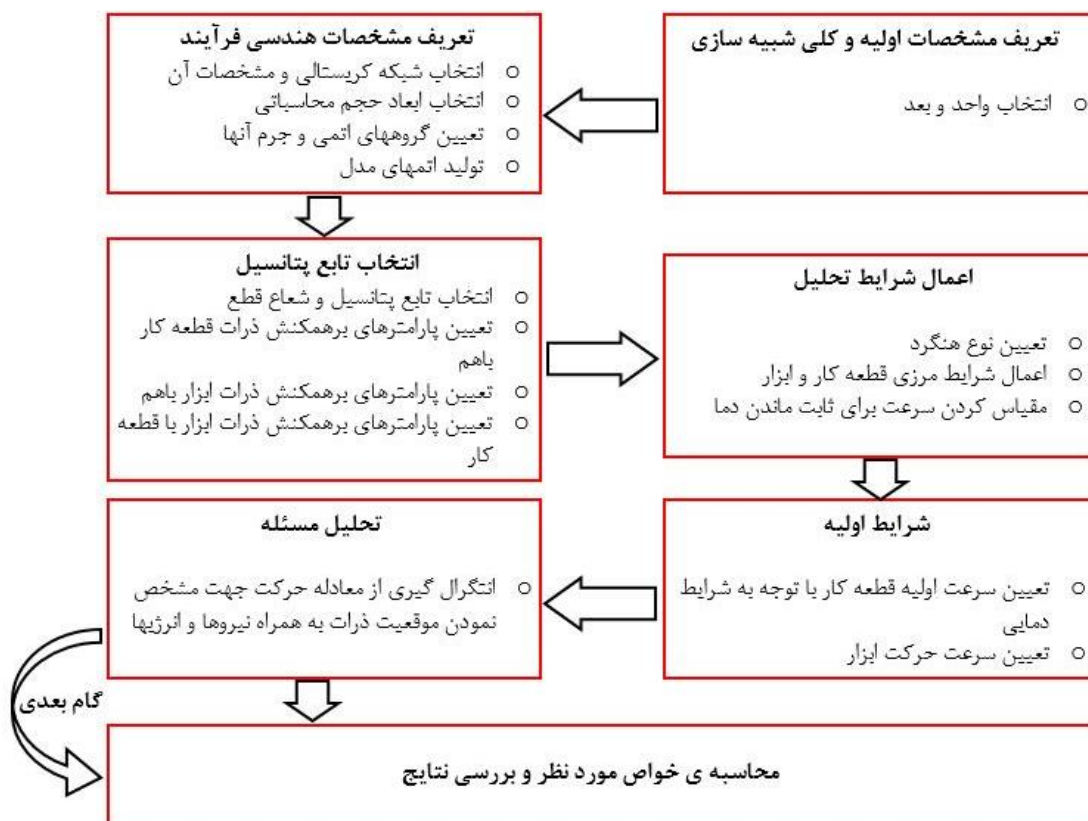
^۴ Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator

^۵ US Sandia National Labs

استفاده از این بسته نرم‌افزاری می‌توان از چند اتم تا چندین میلیارد اتم را مدل کرد که بسته به مجموعه‌های مورد نیاز و تجهیزات سخت‌افزاری قابل تغییر است. تاکنون تحقیقات ارزنده‌ای با استفاده از بسته نرم‌افزاری LAMMPS در زمینه شبیه‌سازی فرایند نانودندانه‌گذاری و نانوسایس انجام پذیرفته است. در این تحقیق نیز، مراحل مختلف شبیه‌سازی فرایند نانودندانه‌گذاری و در فصل ۴، نانوسایس با استفاده از این بسته نرم‌افزاری انجام خواهد شد.

۳-۳ الگوریتم شبیه‌سازی فرآیند نانوفروروندگی

الگوریتمی که در این تحقیق برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرایند نانوفروروندگی استفاده شده است، بصورت شکل ۳-۱ است:



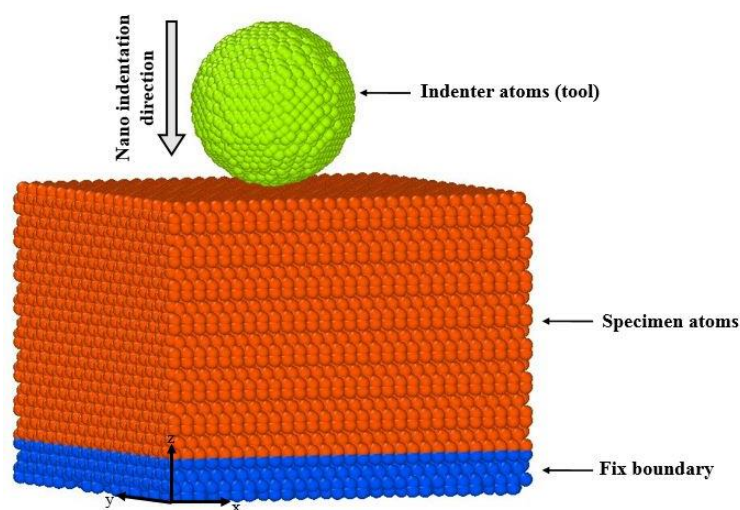
شکل ۳-۱. الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند نانو فروروندگی

۳-۴ شبیه‌سازی سه بعدی فرآیند نانوفروروندگی

شبیه‌سازی فرآیند نانوفروروندگی روی دو قطعه با جنس‌های نرم و سخت نیکل و سیلیکون انجام شد. در مدل نانوفروروندگی نیکل، توابع پتانسیل EAM، ترسوف و مورس و در مدل نانوفروروندگی سیلیکون علاوه بر توابع معرفی شده، تابع پتانسیل لnard-جونز صحنه‌گذاری شدند. از آنجا که بسیاری از پارامترهای هر دو شبیه‌سازی یکسان است، ادامه‌ی مطالب به صورت کلی و برای یک فرآیند نانوفروروندگی ارائه شده است و هر جا تفاوت‌ها تاثیرگذار باشد جداگانه ارائه شده است.

۳-۴-۱ معرفی مدل

شکل ۳-۲ مدل دینامیک مولکولی فرایند نانوفروروندگی را نمایش می‌دهد.



شکل ۳-۲. مدل دینامیک مولکولی فرایند نانو فروروندگی

در اکثر مطالعات انجام‌شده در زمینه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرایند نانوفروروندگی، با توجه به اینکه سختی ابزار در مقایسه با قطعه کار بیشتر است، از اثر تغییر شکل ابزار چشم‌پوشی شده و ابزار

صلب^۱ و تغییر شکل ناپذیر در نظر گرفته شده است. جسم صلب شامل تعداد زیادی ذره است که فاصله‌ی اتم‌ها از یکدیگر همواره ثابت می‌باشد. این فاصله حتی در صورتی که به جسم نیرو وارد شود یا حرکت کند نیز ثابت می‌ماند. این درحالی است که با افزایش نیروهای ناشی از نفوذ ابزار به داخل قطعه کار، در هر مرحله نفوذ نیروهای عکس‌العمل سطح افزایش می‌یابد و در نتیجه با تغییر شکل هرچه قدر کم ابزار سطح مقطع موثر برای اندازه گیری سختی می‌تواند تغییر کند. علاوه بر این در بعضی از کاربردهای خاص از جمله استفاده از نانوالماس‌ها در روغن بعنوان افزودنی، مطالعه عملکرد خود الماس تحت تنش‌های هیدرواستاتیک زیاد، اجتناب ناپذیر است. در مقالات ذکر شده، تفاوت در نظر گرفتن ابزار صلب و ابزار غیرصلب در فرایند نانودندانه‌گذاری مطالعه شده است تا ضمن گزارش تغییرات سختی در قطعه کار، رفتار تغییر شکل ابزار الماس برای کاربردهای خاص هم مورد تجزیه و تحلیل قرار گیرد اما از آنجا که هدف از ارائه‌ی این بخش در پایان‌نامه، صحنه گذاری توابع پتانسیل است، فقط نتایج با ابزار غیر صلب گزارش می‌شود. جدول ۱-۳ تفاوت‌های قطعه و ابزار را در هر دو مدل نمایش می‌دهد. قطعه کار بصورت تک کریستال و بدون عیب در نظر گرفته شده است. برای فروروندگی قطعه کار، از ابزاری از جنس الماس با اتم‌های کربن استفاده شده است.

^۱ Rigid

جدول ۱-۳. مشخصات قطعه کار و ابزار در تحلیل سه بعدی فرایند نانوفروروندگی

حرکت اتمی	مشخصات ابعادی	جنس	
غیر صلب	تک کریستال با ساختار FCC ثابت شبکه $a=0.352\text{ nm}$	نیکل	قطعه کار
غیر صلب	تک کریستال با ساختار مکعب الماسی ^۲ ثابت شبکه $a=0.5430\text{ nm}$	سیلیکون ^۱	قطعه کار
غیر صلب	تک کریستال با ساختار مکعب الماسی ثابت شبکه $a=0.357\text{ nm}$	الماس	ابزار

در هر دو مدل فاصله‌ی ابزار از مرکز سطح قطعه کار 3 nm است.

از آنجا که روش‌های شبیه‌سازی اتمی عموماً با تعداد اتم زیاد و با پله‌های زمانی کوچک انجام می‌پذیرد، زمان تحلیل زیاد می‌شود. در فرایند شبیه‌سازی نانودندانه‌گذاری یکی از راه‌حل‌های افزایش سرعت محاسبات، افزایش سرعت حرکت ابزار می‌باشد. با افزایش سرعت حرکت ابزار، ابزار در زمان کوتاه‌تری (تعداد پله زمانی کمتر)، عمق دندانه‌گذاری مشخصی را طی می‌کند. در شبیه‌سازی دندانه‌گذاری نیکل سرعت حرکت ابزار 100 m/s و در شبیه‌سازی دندانه‌گذاری سیلیکون سرعت حرکت ابزار 40 m/s می‌باشد. همانطور که در بخش ۱-۳ بیان شد تاثیر جهات مختلف کریستالی در مطالعات پیشین انجام پذیرفته است. در این مدل صفحه کریستالی قطعه کار در هر دو جنس (۱۱۱) است. جدول ۲-۳ مشخصه‌های دندانه‌گذاری را در این تحلیل نشان می‌دهد:

^۱ Silicon(Si)

^۲ Diamond cubic

جدول ۲-۳. مشخصه‌های فرایند نانوفروروندگی

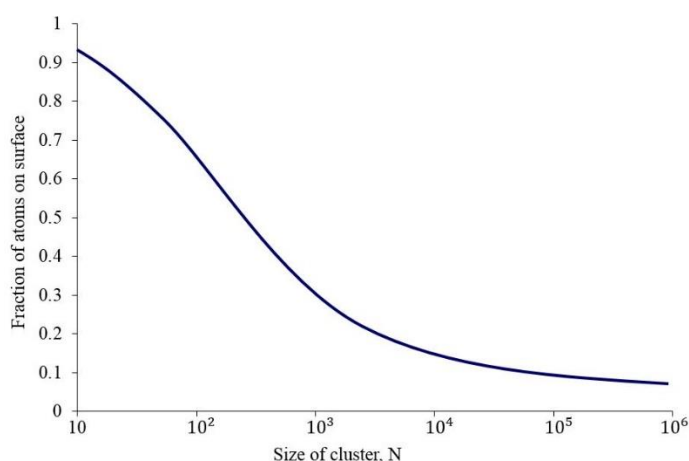
عمق فرورفتگی (nm)	سرعت حرکت ابزار (m/s)	شعاع ابزار (nm)	
۱/۲	۱۰۰	۲	نیکل
۲/۴۶	۴۰	۲/۱۴	سیلیکون

۲-۴-۳ شرایط مرزی و اولیه

در این مدل‌ها از شرط مرزی متناوب در دو راستای x و y (شکل ۲-۳) استفاده شده است و امکان را فراهم می‌کند که اتم‌های مرزی در صفحات مذکور حالت مرزی نداشته باشند و حرکت‌ها و انرژی‌های آن‌ها همانند ذرات میانی در نظر گرفته شود تا عوامل تاثیرگذار بر خطای محاسباتی به حداقل برسد. صفحه xy بالایی (صفحه‌ای که ابزار عمود بر آن نفوذ می‌کند) و صفحه xz در دو طرف بصورت سطح آزاد هستند و برای آن شرط مرزی در نظر گرفته نشده است تا رفتار آن با اعمال بار از طریق ابزار شبیه‌سازی شود. همچنین در صفحه xy پایینی، سه لایه اتمی ثابت در نظر گرفته شده‌اند تا از حرکت قطعه‌کار جلوگیری کند. در واقع برای ثابت نگه‌داشتن اتم‌ها باید نیروی وارد بر این اتم‌ها، مستقل از همسایه‌ها برابر صفر در نظر گرفته شود و چون در ابتدا دارای سرعت صفر هستند، دیگر موقعیت آن‌ها تغییر نمی‌کند. در مدل‌های مقالاتی که در بخش ۱-۳ نام برده شد از همین مکانیزم برای صلب در نظر گرفتن ابزار استفاده می‌شود. در این مطالعه از انتگرال‌گیر زمانی ورله سرعتی استفاده شده است. چگونگی حل معادلات دینامیک مولکولی قبلا در فصل ۲ بیان شده است. سرعت اولیه اتم‌های قطعه‌کار بر اساس رابطه ماکسول-بولتزمن در دمای 300K ثابت شده است و هنگرد مورد توجه در این تحلیل، هنگرد NVT است. لذا از بیان شرایط حرارتی صرف نظر می‌شود.

۵-۳ گام‌های زمانی و تعداد اتم

یکی دیگر از پارامترهای تاثیرگذار در نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، مشخصه بزرگی گام‌های زمانی است. گام‌های زمانی بزرگ در مسائلی که گرادیان تغییر شکل اتمی در آن زیاد است، موجب بوجود آمدن خطا در محاسبه نیرو و موقعیت اتم‌ها می‌شود. و اگر گام‌های زمانی خیلی کوچک باشند، علاوه بر افزایش زمان مورد نیاز محاسبات، ممکن است بعلت جمع خطای حاصل از گرد کردن اتم‌ها باعث بوجود آمدن خطا شود. عموماً در تحلیل‌های پیشین در زمینه مدل‌سازی اتمی، گام زمانی در بازه ۱ fs انتخاب شده است [۲۳]. لذا در این تحقیق هم از گام زمانی ۱ fs استفاده شد. یکی دیگر از چالش‌های مهم در روش‌های دینامیک مولکولی، ابعاد سیستم شبیه‌سازی و تعداد اتم‌های بکار رفته در آن است. هر چه تعداد اتم‌ها کمتر باشد، سرعت محاسبات افزایش می‌یابد، اما خطاهای ناشی از اثر سایز بر روی نتایج می‌تواند تاثیرگذار باشد. در روش‌های دینامیک مولکولی اگر نسبت اتم‌های نزدیک به سطح به کل اتم‌ها عدد بالایی باشد، موجب افزایش خطای محاسبات افزایش می‌شود که این میزان خطا با افزایش تعداد اتم‌ها کاهش می‌یابد. شکل ۳-۳ نسبت اتم‌های نزدیک به سطح به کل اتم‌ها را در ساختار کریستالی FCC نشان می‌دهد [۵۰].



شکل ۳-۳. نسبت اتم‌های سطحی به کل اتم‌ها در شبکه کریستالی FCC [۵۰]

بر این اساس در صورتی که تعداد اتم‌ها بیش از 10^5 اتم باشد، این نسبت کمتر از ۱۰٪ اثر دارد. در صورتی که ابعاد قطعه کار بیش از اندازه بزرگ باشد باعث بوجود آمدن محدودیت‌های محاسباتی و زمانی خواهد شد و اگر اتم‌های قطعه کار از حد قابل قبولی کمتر باشد، باعث بوجود آمدن خطا در نتایج می‌شود. جدول ۳-۳ ابعاد و تعداد اتم بکار رفته در هر مدل را نشان می‌دهد.

جدول ۳-۳. ابعاد و تعداد اتم قطعه کار و ابزار

ابعاد قطعه کار	قطر ابزار	تعداد اتم قطعه کار	تعداد اتم ابزار
مدل نیکل	$28(a) \times 20(a)^1$	۴nm	۴۲۶۲۴
مدل سیلیکون	$20(a) \times 20(a)$	۳nm	۴۷۶۷۸
			۵۸۸۹
			۷۱۹۶

با توجه به اینکه در مدل قطعه کار دو ضلع در راستای x و y دارای شرط مرزی تناوبی است و سطح پایین دارای شرط مرزی مقید شده است، درصد اتم‌های سطحی بمراتب کمتر است که در افزایش دقت محاسبات کمک می‌کند.

۳-۶ توابع پتانسیل

جدول ۳-۴ توابع پتانسیل بکار رفته در هر یک از مدل‌ها را نمایش می‌دهد. معادلات حاکم در این توابع در فصل ۲ ارائه شده است. مقادیر پارامترهای بکار رفته در توابع مورس و ترسوف با استفاده از مقالات، در جدول ۳-۴ گزارش شده است.

^۱ Lattice Constant (a)

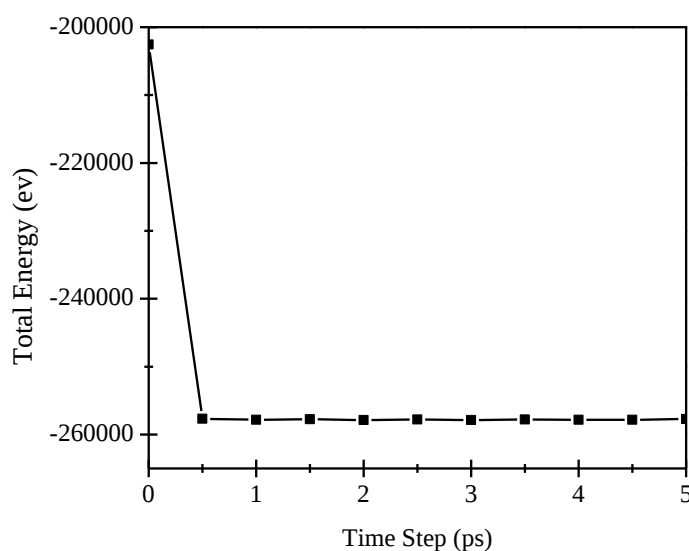
جدول ۴-۳. ثوابت توابع پتانسیل در فرآیند نانودندانه‌گذاری [۵۲ و ۵۱، ۴۹، ۲۳]

برهم‌کنش	تابع پتانسیل	ثوابت
Ni-Ni	EAM	تعیین شده در [۲۳] برای فلز نیکل
Ni-C	Morse	$r_0(nm) = 0.256$ $\alpha(nm^{-1}) = 0.19875$ $D(ev) = 1.0094$
C-C	Tersoff	$A=1393.6(ev)$ $B=346.7(ev)$ $C=38049$ $D=0.015(nm)$ $d=4.3484$ $R=0.195(nm)$ $\mu = 1$ $\beta = 0.00000015724$ $\gamma_1 = 0.34879(nm^{-1})$ $\gamma_2 = 0.22119(nm^{-1})$ $\gamma_3 = 0.0(nm^{-1})$ $n = 0.72751$ $m=3$ $\cos(\theta_0) = -0.57058$
Si-Si	Tersoff	$A=1830.8(ev)$ $B=471.17(ev)$ $C=100390$ $D=0.015(nm)$ $d=16.217$ $R=0.285(nm)$ $\mu = 1$ $\beta = 0.0000011$ $\gamma_1 = 0.24799(nm^{-1})$ $\gamma_2 = 0.173222(nm^{-1})$ $\gamma_3 = 0.0(nm^{-1})$ $n=0.78734$ $m=3$ $\cos(\theta_0) = -0.59825$
Si-C	Morse	$r_0(nm) = 0.19475$ $\alpha(nm^{-1}) = 0.468$ $D(ev) = 0.435$

۳-۷ بررسی نتایج

۳-۷-۱ زمان پایاری سیستم

شکل ۳-۴ منحنی انرژی کل بر حسب زمان را نشان می‌دهد. بر اساس این منحنی انرژی کل اتم‌های شبکه در هر دو مدل نیکل و سیلیکون، پس از گذر (10^{-12} s) ۱ ps پایدار می‌شوند. و در این تحلیل زمان پایداری ۵ps در نظر گرفته شده است.



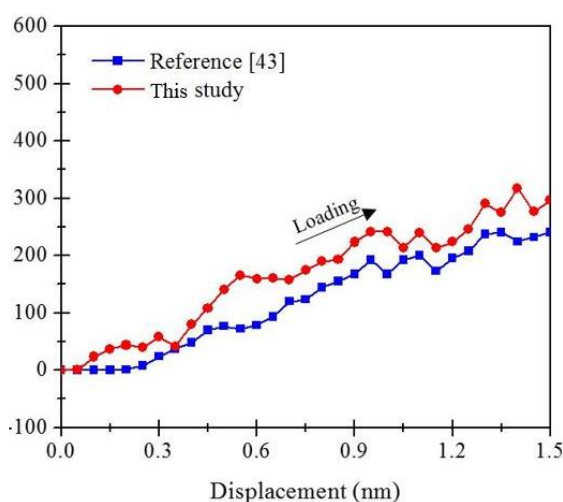
شکل ۳-۴. منحنی انرژی کل اتم‌های شبکه بر حسب زمان

۳-۷-۲ صحنه‌گذاری شبیه‌سازی فرآیند نانوفروروندگی

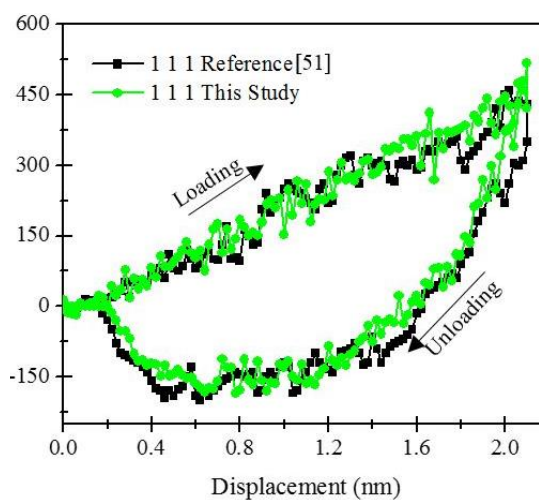
برای تعیین اعتبار مدل دینامیک مولکولی شبیه‌سازی شده از یک تحقیق دینامیک مولکولی نانودندانه‌گذاری سیلیسیم در (۱۱۱) [۵۱]، و یک مقاله در حوزه شبیه‌سازی نانو فروروندگی نیکل [۴۳] با استفاده از ابزار الماسی کروی شکل استفاده شده است. همانطور که در بخش ۳-۴-۱ گفته شد، سایر مقالات، فرآیند نانودندانه‌گذاری را با فرض ابزار صلب شبیه‌سازی کرده‌اند، لذا در ادامه که به مقایسه و

اعتبار سنجی مدل‌های بیان شده در پایان نامه با مقالات مرجع پرداخته شد، ابزار صلب در نظر گرفته شد.

شکل ۳-۵ و ۳-۶ نمودار نیرو بر حسب جابجایی ابزار را بترتیب برای مدل‌های سیلیکون و نیکل نمایش می‌دهد که با نمودار نیرو-جابجایی مقالات مرجع مقایسه شده است. همانطور که مشخص است مقادیر نیرو برای هر دو مدل پایان‌نامه و مقاله‌های مرجع نزدیکی و مطابقت خوبی با مقالات مرجع دارد، لذا می‌توان اطمینان حاصل کرد که توابع پتانسیل تعریف شده برای برهم‌کنش اتم‌ها درست انتخاب شده است.

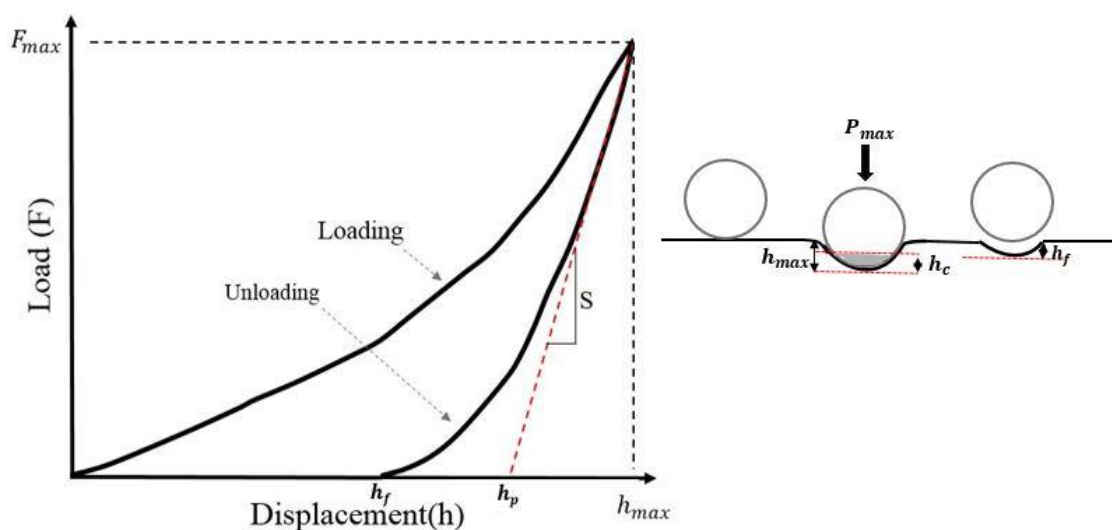


شکل ۳-۶. منحنی نیرو-جابجایی ابزار برای قطعه نیکل



شکل ۳-۵. منحنی نیرو-جابجایی ابزار برای قطعه سیلیکون

مقاومت ماده در برابر تغییر شکل موضعی ناشی از نفوذ یک جسم به داخل آن سختی ماده نامیده می‌شود. سختی یکی از مهم‌ترین پارامترهای مکانیکی مواد است که اندازه‌گیری آن با آزمایش نانوفروروندگی ممکن می‌باشد. شکل ۳-۷ شماتیک منحنی نیرو بر حسب جابجایی در فرآیند نانو فروروندگی را نشان داده شده است، با توجه به تفاوتی که در ابعاد مدل پایان‌نامه و مقالات مرجع دارد درصد تفاوتی بین نمودارهای نیرو و سختی بر حسب جابجایی آن‌ها ایجاد می‌شود.



شکل ۳-۷. شماتیک منحنی نیرو بر حسب جابجایی

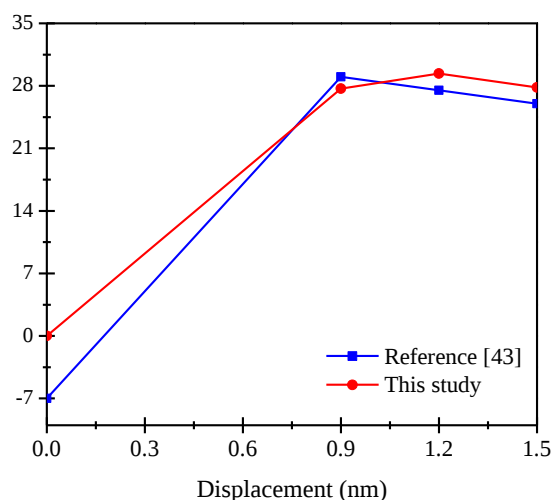
سختی H را می توان با استفاده از رابطه ۳-۱ محاسبه کرد [۵۲].

$$H = \frac{F_{max}}{A_c} \quad (3-1)$$

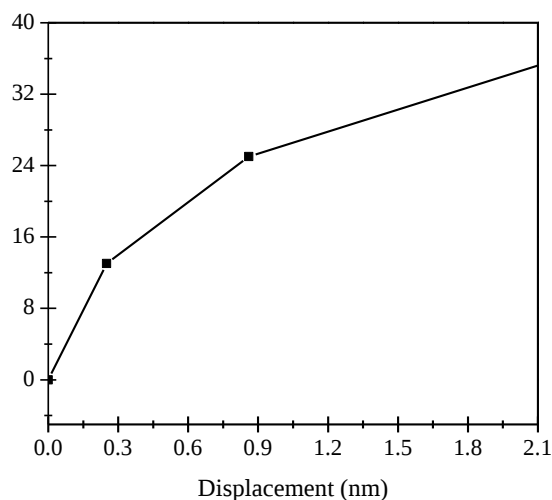
$$A_c = \pi a^2 = \pi(2Rh_c - h_c^2) \quad (3-2)$$

$$h_c = h_{max} - \frac{3}{4} \left(\frac{F_{max}}{\frac{df}{dh}} \right) \quad (3-3)$$

در رابطه ۳-۱، F_{max} بیشترین نیروی وارد شده به جسم و A_c مساحت اثر سطح تماس می باشد که تابعی از عمق تماس h_c و شعاع ابزار R می باشد. قبل از تماس دو ناحیه ی ابزار و بستر قطعه کار، سختی معنایی ندارد. با مشاهده شماتیک منحنی در شکل ۳-۷، انتظار می رود با افزایش عمق دندانه گذاری، سختی قطعه افزایش یابد. h_f در شکل عمق نهایی بعد از برداشتن ابزار و h_{max} بیشترین عمق فرورفتگی را نشان می دهد. شکل ۳-۸ نمودار سختی بر حسب جابجایی را برای فروروندگی سیلیکون و شکل ۳-۹ مقایسه نمودار سختی بر حسب جابجایی را برای فروروندگی نیکل با مقاله مرجع [۴۳] مقایسه می کند.



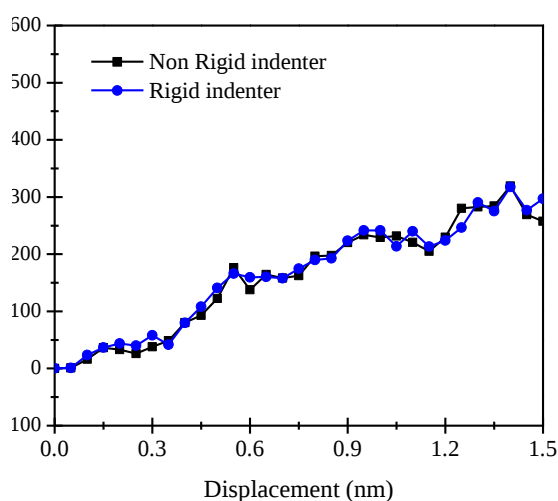
شکل ۹-۳. منحنی سختی-جابجایی نیکل



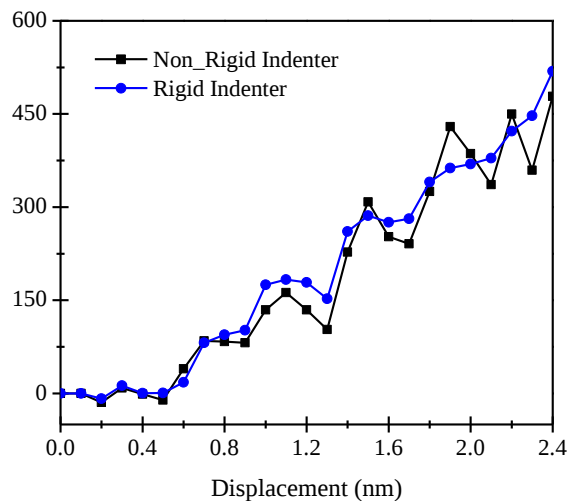
شکل ۸-۳. منحنی سختی-جابجایی سیلیکون

در بررسی اثر نانوافزودنی بر روانکاری که در فصل چهار بیان خواهد شد، نانوذره کروم و غیر صلب است و از آنجا که جنس ابزار در نانودندانه‌گذاری و جنس نانوذره الماس هر دو از کربن است و توابع پتانسیل و ساختار کریستالی آن یکسان است نیاز است تا در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانوفروروندگی، ابزار غیر صلب فرض شود و اثرگذاری آن در مقادیر نیرو و تغییر شکل‌های ایجاد شده ناشی از آن بررسی شود، سپس می‌توان از آن در شبیه‌سازی نانوذره روانکار استفاده کرد. در این مرحله از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرایند نانوفروروندگی، ابزار الماس غیرصلب در نظر گرفته می‌شود تا اثر میدان نیرویی اتم‌های الماس بر تغییرشکل ابزار و محاسبه سختی مشخص شود. در این فرآیند از ابزار نیمه‌کروی به عنوان فرورونده استفاده می‌شود. باقی شرایط مرزی، دمایی و سرعت حرکت ابزار و غیره بدون تغییر باقی می‌ماند. شکل ۱۰-۳ و ۱۱-۳ نمودار نیرو برحسب جابجایی را برای فروروندگی سیلیکون و نیکل با ابزار صلب و غیر صلب مقایسه می‌کند. بر اساس شکل ۱۰-۳ نیروی وارد بر ابزار غیرصلب در مقایسه با ابزار صلب کاهش می‌یابد. دلیل این رفتار این است که با تغییرشکل ابزار، تغییرشکل مورد نیاز قطعه‌کار کاهش می‌یابد و این امر مانع از وارد شدن فشار بیشتر از طرف قطعه‌کار به ابزار می‌شود. همانطور که دیده می‌شود در شروع فرآیند، نیروها در بخش منفی محور مختصات در نوسان است و می‌تواند ناشی از این باشد که در شروع فرآیند و قبل از رسیدن به قطعه نیروها از جنس کششی و فشاری بوده است و پس از آن تمام نیرو بصورت فشار وارد می‌شود.

در شکل ۳-۱۱ نمودار نیرو بر حسب جابجایی برای شبیه سازی با ابزار غیر صلب، کمی پایین تر نسبت به منحنی نیرو بر حسب جابجایی با ابزار صلب دارد چراکه اتم‌های تشکیل دهنده ابزار که با هم در تعامل هستند بخشی از نیروی نانو دندانگذاری را تحمل می‌کنند و مانع از وارد شدن فشار بالاتر به قطعه می‌شوند. اما با این حال در طول مسیر فروروندگی اختلاف نیروهای بدست آمده ناچیز بوده و قابل چشم پوشی می‌باشد و شاید بتوان گفت، صلب یا غیر صلب بودن ابزار تاثیر زیادی در منحنی نیرو بر حسب جابجایی ندارد.

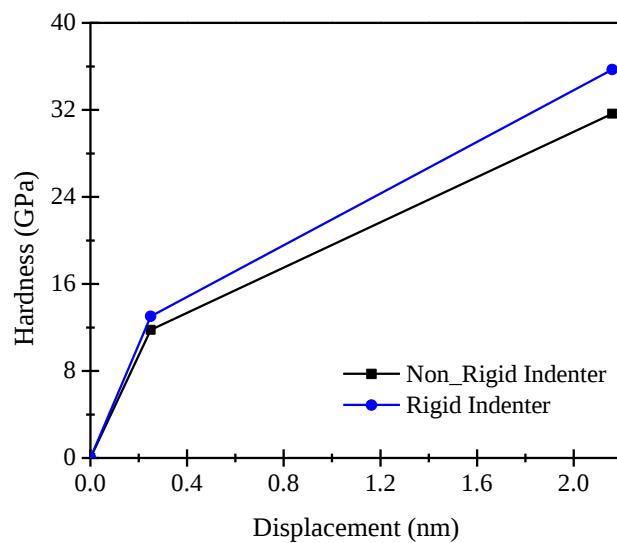


شکل ۳-۱۱. نمودار نیرو-جابجایی ابزار با قطعه کار نیکل



شکل ۳-۱۰. نمودار نیرو-جابجایی ابزار با قطعه کار سیلیکون

در ادامه شکل ۳-۱۲ نمودار سختی بر حسب جابجایی را در فرآیند نانودندانگذاری سیلیکون و نیکل نشان می‌دهد که در آن سختی قطعه کار در حالتی که ابزار فرورونده غیر صلب در نظر گرفته شده با حالتی که صلب در نظر گرفته شده مقایسه می‌شود. می‌توان دید که وقتی از ابزار را غیر صلب استفاده شده است، سختی قطعات کمتر است و دلیل آن می‌تواند افزایش نیروهای ابزار با استفاده از ابزار صلب و همچنین امکان کرنش و تغییر شکل در ابزار غیر صلب باشد که در نتیجه آن علاوه بر کاهش نیروهای ابزار، تغییر در مساحت اثر بدست آمده باعث کاهش محاسبه مقدار سختی می‌شود.



شکل ۱۲-۳. نمودار سختی بر حسب جابجایی سیلیکون

سختی بدست آمده برای دندان‌گذاری سیلیکون با ابزار صلب ۳۵/۷ و سختی بدست آمده با ابزار غیر صلب ۳۱/۶ است و درصد تفاوت بین این دو، ۱۲/۹ درصد است.

در این پایان‌نامه فقط به بررسی موارد ضروری جهت صحت‌گذاری پرداخته شده است و از ذکر تمام بخش‌های مقالات ارائه شده خودداری شده است.

فصل ۴: بررسی اثر نانو ذره بر روانکاری با استفاده از روش دینامیک مولکولی

مهم‌ترین بخش در قطعات صنعتی سطح آن است، چراکه بسیاری از شکست‌ها، از سطح شروع می‌شود. لذا، حفاظت سطح از مسائل بسیار حساس و تعیین‌کننده کیفیت و عمر قطعات و در نهایت، کارایی یک واحد تولیدی و بهای تمام شده محصول می‌باشد. در هر عملیاتی که با استفاده از قطعات صنعتی انجام می‌شود و با قطعات با یکدیگر برخورد دارند، اولین تاثیر ازین برخورد را سطح قطعه متحمل می‌شود. تریبولوژی^۱، علم و تکنولوژی سطوحی است که در حال تماس با یکدیگر بوده و نسبت به یکدیگر حرکت دارند و شامل تحقیقاتی در زمینه اصطکاک، سایش و روانکاری است. سایش را می‌توان کاهش تصاعدی ماده از سطح یک جسم تعریف کرد که در نتیجه حرکت نسبی سطوح نسبت به یکدیگر پدید می‌آید. سایش به ندرت فاجعه‌آمیز بوده و می‌تواند راندمان را به مقدار زیادی کاهش داده و موجب افزایش افت انرژی، مصرف روغن و همچنین افزایش نرخ تعویض قطعات شود. در نتیجه اهمیت اقتصادی تریبولوژی، این موضوع سبب شده است که در طی دو دهه گذشته تحقیقات گسترده‌تری در این زمینه صورت پذیرد.

عواملی همچون متغیرهای متالورژیکی نظیر سختی، چقرمگی، ساختار میکروسکوپی، ترکیب شیمیایی و همچنین مواد در حال تماس (نظیر ساینده‌ها و مشخصات آن‌ها) نوع و روش بارگذاری، سرعت، دما، زمان، خشونت سطحی، روانکاری و خوردگی بروی پدیده سایش تاثیرگذار هستند.

به‌طور کلی می‌توان سه مرحله برای سایش در نظر داشت

- مرحله نخست که در آن سرعت سایش بالاست.
- مرحله دوم که در آن سایش با سرعتی ثابت ادامه دارد و بیشتر عمر کاری ماده در این مرحله است.
- مرحله سوم که در اثر سایش زیاد در مرحله‌های قبل، مقاومت ماده کم شده و سایش می‌تواند با سرعت بالا و به آسانی ماده را نابود سازد.

^۱Tribology

اطلاعات لازم در ارتباط کاربرد هر یک از ذرات در روانکار با آزمایش‌های تجربی بدست می‌آیند اما اینکه هر یک از نانوذرات از جمله مس، نیکل، مولیبدن دی‌سولفات، الماس و ... چگونه و با چه مکانیزمی این تاثیر را می‌گذارند به کمک شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی قابل مشاهده است. هم‌چنین بررسی عوامل تاثیرگذار در این مکانیزم‌ها به کمک شبیه‌سازی‌ها امکان‌پذیر است که می‌تواند بسیاری از هزینه‌هایی که صرف امتحان کردن هر یک از نانوذرات می‌شود را کاهش دهد. آلوز و همکاران به منظور بررسی خواص روانکاری و ضد سایشی نانوذرات CuO، ابتدا نانوذره را تا اندازه‌ی ۵ nm سنتز کرده و سپس بعنوان ماده پراکنده در روغن در سه غلظت ۰/۲۵، ۰/۱ و ۰/۵ درصد وزنی اضافه کردند. نتایج حاصل از تست‌های تریبولوژی سطح نشان داد نانوذره در غلظت‌های پایین عملکرد بهتری دارد و ضریب اصطکاک و سایش نسبت به زمانی که نانوذره‌ای نباشد کاهش می‌یابد [۵۳]. پاجزر و همکاران اثر روغن‌های حاوی نانوذرات مس، آهن^۱ و کبالت و نیز ترکیبات این سه نانوذره را در خواص سایشی سطوح بررسی کردند. آزمایش‌های تجربی آن‌ها نشان می‌دهد که هر یک از این ذرات به طور قابل توجهی (تا ۱/۵ برابر) سایش و اصطکاک را کاهش دادند. استفاده از نانوذره مس، چه به صورت جداگانه و چه بصورت ترکیب با ذرات دیگر موثرترین نقش را در کاهش اصطکاک و فرسودگی سطوح داشت. تجزیه و تحلیل سطح با استفاده از میکروگراف‌های SEM، نشان می‌دهد که ذرات به صورت رسوبی روی سطح قرار می‌گیرند و از این طریق در کاهش اصطکاک اثر می‌گذارند. هم‌چنین نتایج نشان داد استفاده از ترکیب نانوذرات فوق، موثرتر از نانوذرات به صورت جداگانه است [۵۴]. ژانگ و همکاران با استفاده از یک تستر چهارتوپ^۲، اثر نانوذره مس بر خواص روانکاری آب را بررسی کردند. با استفاده از تصاویر میکروسکوپی بدست آمده، مشاهده کردند که یک لایه رسوب مسی روی سطح باقی می‌ماند که باعث بهبود قابل توجهی در خواص تریبولوژی و ظرفیت تحمل بار آب شده و از سطوح اصطکاکی محافظت می‌کند [۵۵]. ژانگ و همکاران تاثیرات نانوذره کامپوزیتی Al_2O_3/SiO_2 ^۳ در روانکاری را بررسی کردند.

^۱ Iron (Fe)

^۲ Four Ball Tester

^۳ Aluminium oxide/Silicon dioxide

نتایج نشان داد عملکرد ضد اصطکاکی و ضد سایشی آن نسبت به SiO_2 و Al_2O_3 خالص بهتر است. ۵/۰ درصد وزنی از ترکیب آن دو کمترین ضریب اصطکاک را حاصل می‌کند [۵۶]. ایون و همکاران رفتار تریبولوژی نانوذرات کربنی CND^1 و CNO^2 ها را با روش شبیه سازی دینامیک مولکولی بررسی کردند. در این شبیه‌سازی، نانوذرات بین دو بلوک آهنی قرار می‌گیرند و اثر غلظت یا تعداد نانوذرات، فشار و سرعت لغزشی سطوح روی این پدیده بررسی شد. نتایج نشان داد وقتی غلظت نانوذرات زیاد و فشار کم (۱Gpa) است، نانوذره داخل سطوح آهن فرو نمی‌رود و سایش سطوح صفر و ضریب اصطکاک لغزشی هم کم است. در غلظت کم و فشار بالا (۵Gpa) نانوذرات به داخل آهن فرو رفته و در آن شیار ایجاد می‌کنند که منجر به سایش در مقیاس اتمی می‌شود و ضریب اصطکاک بالا می‌رود. با این حال حتی در بالاترین فشار و کمترین غلظت نیز، نانوذره به جدا سازی سطوح اصطکاک کمک کرده و در مقایسه با وقتی که هیچ نانوذره‌ای نبود، اصطکاک را تقریباً ۷۵ درصد کاهش داد که با نتایج تجربی هم مطابقت داشته است [۵۷]. هو و همکاران، اثر نانو ذره مس را در آرگون مایع با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی بررسی کردند. نتایج نشان داد در سیال پایه و سیال نانو با افزایش نیروی اعمالی و کاهش سرعت حرکت لغزش قطعات، تنش برشی کمتر می‌شود و در سرعت لغزش ثابت، در بارگذاری بالا و شعاع نانو ذره‌ی بزرگ‌تر، تنش برشی بیشتر است اما در بار گذاری‌های پایین تقریباً یکسان است [۵۸]. هو و همکاران به بررسی اثر دو نانو ذره‌ی الماس و SiO_2 در اصطکاک دو قطعه‌ی آهنی پرداختند. نتایج نشان داد در غلظت کم نانو ذرات و بارگذاری پایین، نانو ذرات مثل بلب‌رینگ عمل کرده و دو قطعه را از یکدیگر جدا نگه داشتند و اصطکاک و هم‌چنین توزیع حرارت کاهش پیدا کرد. در غلظت بالای نانو ذرات و بارگذاری بالا، نانو ذرات فقط برای زمان معینی می‌توانند اثر محافظتی داشته باشند و SiO_2 شکل خورد را از دست داده و خورد می‌شود [۵۹]. چن و همکاران با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی نشان دادند نانوذره‌ی MoS_2 با تغییر مکانیزم لغزش به غلتش ضریب اصطکاک را کاهش

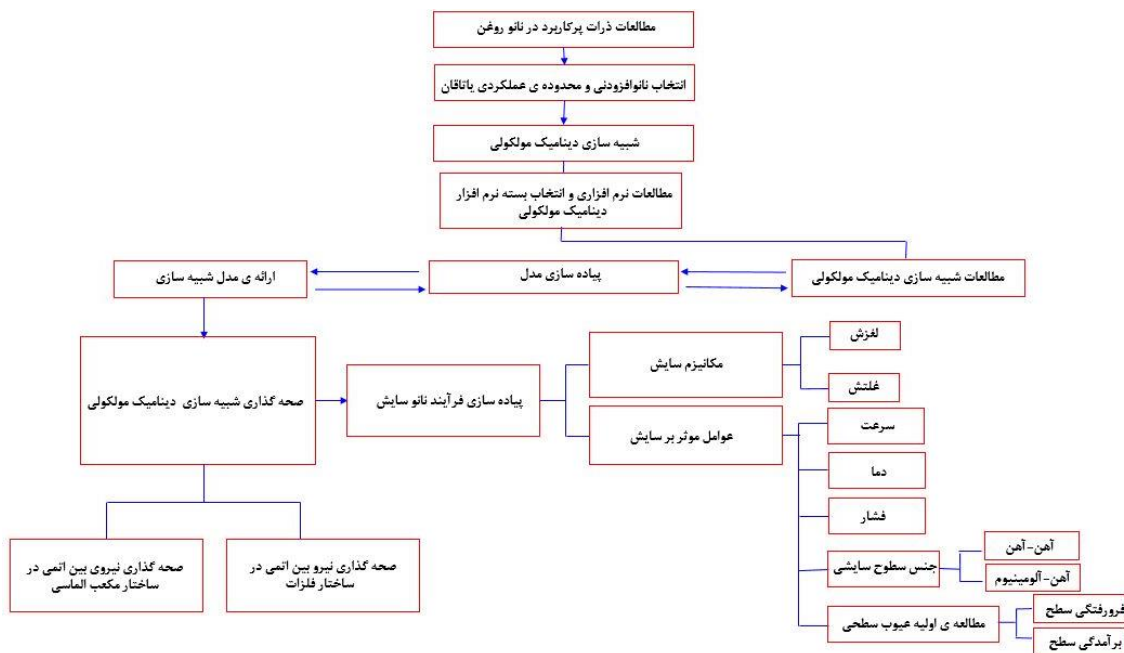
¹ Carbon Nano Diamond

² Carbon Nano Onion

می‌دهد [۶۰]. هو و همکاران با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی نانو ذره مس در روغن پایه‌ی نیتروژن اکتان پرداختند. نتایج نشان داد تشکیل لایه‌ی جذب اطراف نانو ذرات باعث تولید روانکاری سازگارتر از روغن پایه می‌شود. همچنین نانوذرات مس تغییر شکل داده و در روانکار ناپدید می‌شوند [۶۱]. هو و همکاران، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی اثر نانوذره‌ی مس در رفتار سایشی سطح پرداختند. در این تحقیق از یک جفت بلوک آهنی به‌عنوان سطوح اصطکاکی استفاده شده است. به منظور بررسی اثر نانوذره در حرارت ناشی از اصطکاک سطوح و خواص تریبولوژی سطح، شبیه‌سازی را تحت فشار و سرعت‌های متفاوت با حضور نانوذره و بدون حضور نانوذره انجام دادند. نتایج نشان داد که توزیع دما و سایش سطح در حضور نانوذره بطور قابل توجهی کاهش می‌یابد که می‌تواند دلیلی بر بهبود خواص تریبولوژی سطح باشد. در حالی که بدون حضور نانوذره، دما و دامنه‌ی گسترش تاثیر گرمایش اصطکاکی بطور قابل توجهی افزایش یافت. همچنین نتایج ایشان نشان داد در انتهای طول لغزش، بدون حضور نانوذره، در فشار ۱۰۰۰ MPa و سرعت ۳۰ m/s، دما به اندازه ۱۰۰ K افزایش یافت در حالی که در حضور نانوذره اختلاف دمای ابتدا و انتهای طول لغزش ۳۸ K بود. این نتیجه در فشار ۵۰۰ MPa و سرعت ۱۰ m/s بدون حضور نانوذره، ۵۰ K و در حضور نانوذره ۱۷ K بود [۶۲].

در فصل اول به مطالعه‌ی پیرامون روانکاری و روغن موتور پرداخته شد و با مروری بر تحقیقات پیشین بر برخی از وظایف و کاربردهای نانوذرات افزودنی به روغن موتور بیان شد. بر اساس نتایج حاصل از تحقیق پژوهشی و میدانی که در حوزه‌ی نانوذرات صورت گرفت، نانوذره‌ی الماس بعنوان بهترین نانوذره برای بهبود خواص روانکاری و سایشی انتخاب شد. با توجه به جنس قطعات داخلی موتور خودرو که از فولاد و آلیاژی از آهن است، سطوح سایشی مورد مطالعه از جنس آهن انتخاب شده است. با توجه به مطالعات در زمینه‌ی دینامیک مولکولی، نرم‌افزار LAMMPS به عنوان نرم‌افزاری قوی برای انجام شبیه‌سازی ها انتخاب شد. در فصل دوم عوامل موثر در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بیان شد و در فصل سوم با معرفی دو مقاله در زمینه‌ی نانودندانه‌گذاری فلز نیکل و سیلیکون، به صحنه‌گذاری توابع پتانسیل بین

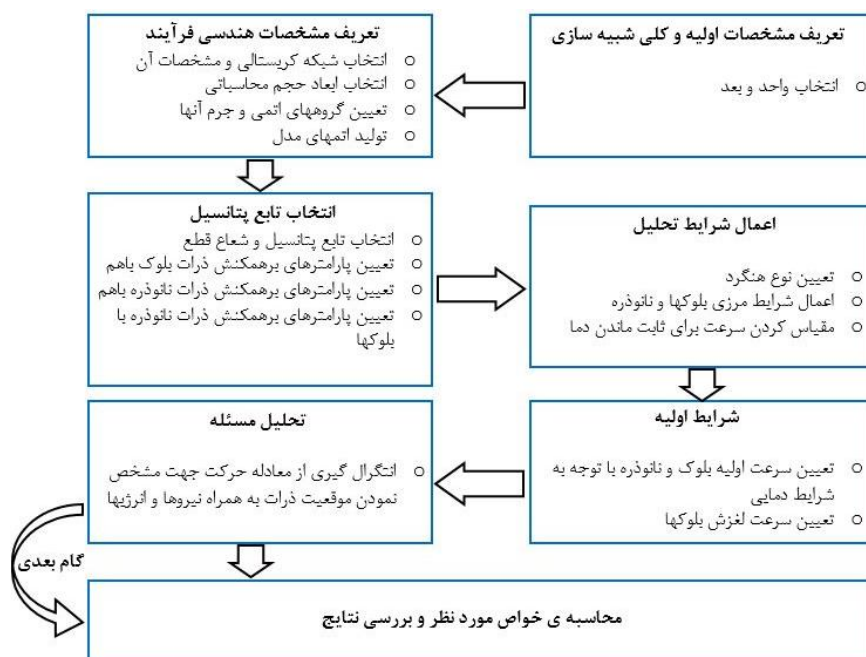
اتم‌های فلزی و توابع پتانسیل بین اتم‌های سیلیکون و کربن، مورد نیاز برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند نانوسایس پرداخته شد. در فصل ۴ ابتدا مکانیزهای لغزشی و غلتشی سایس شبیه‌سازی و تعریف شده سپس تاثیر عوامل موثر در فرآیند سایس شرح داده خواهد شد. شکل ۴-۱ نقشه‌ی راه روند انجام مطالعات پایان‌نامه را نمایش می‌دهد.



شکل ۴-۱. نقشه‌ی راه

۴-۱ الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانوسایس

در این بخش مشابه بخش ۳-۳ الگوریتم شبیه‌سازی طراحی می‌شود تا مسیر شبیه‌سازی روشن باشد. شکل ۴-۲ الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند نانوسایس را نشان می‌دهد.



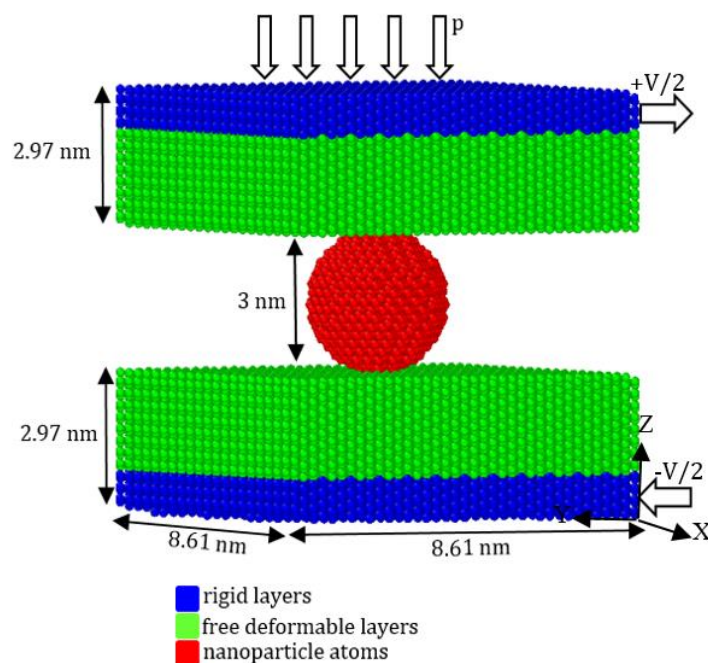
شکل ۴-۲. الگوریتم شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند نانوسازی

۴-۲ شبیه‌سازی سه بعدی نانوسازی

از آنجا که در فصل ۳ مفصل به توضیح پارامترهای مورد استفاده در شبیه سازی‌ها پرداخته شده است در این فصل از ارائه مطالب تکراری خودداری می‌شود و بطور مختصر نحوه‌ی انتخاب هر یک از پارامترها بیان شده است. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرایند نانوسازی با استفاده از دو بلوک آهنی و یک نانو ذره الماس تک کریستال که بین دو بلوک قرار دارد، انجام پذیرفته است. پیکره‌بندی سیستم شبیه سازی در شکل ۴-۳ نمایش داده شده است. بلوک‌های آهنی مشابه به عنوان جفت اصطکاکی و با شبکه بندی BCC و ثابت شبکه‌ی 0.287 nm عمل می‌کنند. یک نانو ذره به قطر ثابت 3 nm بین دو بلوک قرار داده شد. نانو ذره می‌تواند آزادانه حرکت کند و محدودیتی در حرکت ندارد. لایه‌های مرزی بالا و پایین (لایه‌های آبی رنگ در شکل ۴-۳) با سرعت یکسان و در خلاف جهت هم حرکت می‌کنند. فشار نرمال P^1 به لایه مرزی فوقانی اعمال می‌شود. در این مدل از شرط مرزی متناوب در دو راستای x و

¹ Normal Load

y (شکل ۳-۴) استفاده شده است و این امکان را فراهم می‌کند که اتم‌های مرزی در صفحات مذکور حالت مرزی نداشته باشند و حرکات و انرژی‌های آن‌ها همانند ذرات میانی در نظر گرفته شود تا عوامل تاثیرگذار بر خطای محاسباتی به حداقل برسد. صفحه xz در دو طرف بصورت سطح آزاد هستند و برای آن شرط مرزی در نظر گرفته نشده است تا رفتار آن با اعمال بار و حرکت لغزشی بلوک‌ها شبیه‌سازی شود. لایه‌های مرزی بالا و پایین (لایه‌های آبی رنگ در شکل ۳-۴) ثابت هستند. در واقع برای ثابت نگه‌داشتن اتم‌ها نیاز است که نیروی وارد بر این اتم‌ها، مستقل از همسایه‌ها برابر صفر در نظر گرفته شود و چون در ابتدا دارای سرعت صفر هستند، دیگر موقعیت آن‌ها تغییر نمی‌کند.



شکل ۳-۴. نمایی از مدل محاسباتی نانو سایش در حضور نانو ذره الماس

به منظور شناخت مشخصات ابعادی و ساختاری مدل معرفی شده، جدول ۱-۴ مشخصات مربوط به مدل نانوسایش را نمایش می‌دهد.

جدول ۴-۱. مشخصات مدل نانوسایش

ردیف	اجزای فرآیند سایش	جنس	مشخصات	تابع پتانسیل
۱	سطح بالایی سطح پایینی	آهن	تک کریستال با ساختار BCC ثابت شبکه $a=0.287 \text{ nm}$ ابعاد $8.61*8.61*2.97 \text{ nm}$ تعداد اتم لایه‌های آزاد 13068 تعداد اتم‌های لایه‌های ثابت 5223 جهت گیری کریستالی (111) شرایط دمایی ثابت 300K در جهت x و y شرایط مرزی متناوب سرعت لغزشی ثابت 50m/s بار اعمالی به لایه‌های ثابت 500 Mpa حرکت اتمی غیر صلب	EAM
۲	نانوذره	الماس	تک کریستال با ساختار مکعب الماسی ثابت شبکه $a=0.357 \text{ nm}$ شعاع 1.5 nm تعداد اتم 2498 شرایط دمایی ثابت 300 K حرکت آزادانه حرکت اتمی غیر صلب	Tersoff

۴-۲-۱ توابع پتانسیل

در این شبیه‌سازی از دو نوع اتم آهن و کربن و سه نوع تابع پتانسیل بین اتمی، برای برهم‌کنش بین اتم‌ها استفاده شده است. برای ارتباط بین اتم‌های Fe در بلوک‌های آهنی، تابع پتانسیل EAM، برای تعامل بین اتم‌های آهن و کربن، تابع پتانسیل لnard جونز و برای ارتباط بین اتم‌های کربن در نانوذره،

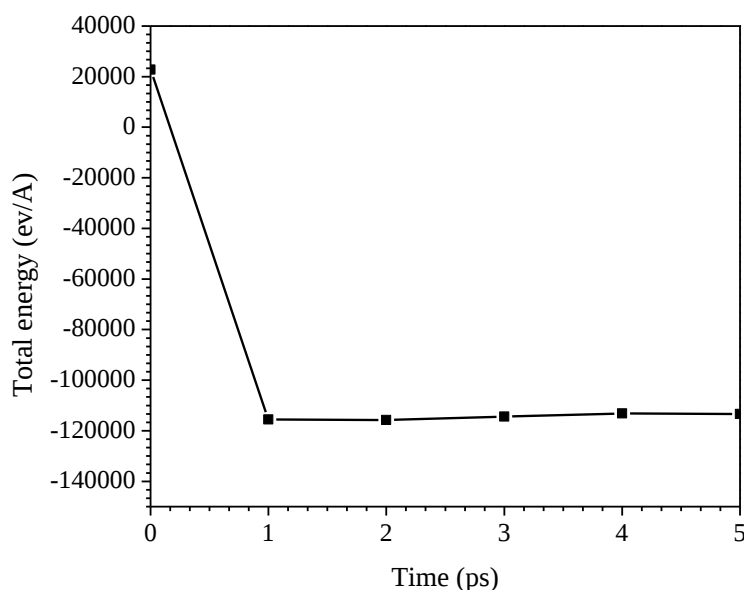
تابع پتانسیل ترسوف تعریف می‌شود. جدول ۲-۴ توابع پتانسیل بکار رفته در شبیه سازی دینامیک مولکولی نانوسایش را نمایش می‌دهد. معادلات حاکم در این توابع در فصل ۲ ارائه شده است.

جدول ۲-۴. ثوابت توابع پتانسیل در فرآیند نانوسایش [۶۳، ۶۴ و ۶۵]

برهم کنش	تابع پتانسیل	ثوابت
Fe-Fe	EAM	تعیین شده در [۲۳] برای اتم آهن
Fe-C	Lennard-Jones	$\varepsilon(eV) = 0.02495$ $\sigma(nm) = 0.37$
C-C	Tersoff	A=1393.6eV B=346.7eV C=38049 D=0.015nm d=4.3484 R=0.195nm $\mu = 1$ $\beta = 0.00000015724$ $\gamma_1 = 0.34879nm^{-1}$ $\gamma_2 = 0.22119nm^{-1}$ $\gamma_3 = 0.0nm^{-1}$ n=0.72751 m=3 $\cos(\theta_0) = -0.57058$

۲-۲-۴ مراحل انجام فرآیند

در ابتدا باید منتظر ماند تا اتم‌های سیستم به پایداری برسند و سطح انرژی جنبشی و پتانسیل آن‌ها یکنواخت شود. برای این منظور نمودار انرژی کل بر حسب زمان پایداری رسم می‌شود (شکل ۴-۴). طبق این نمودار سیستم بعد از زمان ۵ ps پایدار است. سپس بار ثابت ۵۰۰ MPa، به تدریج به لایه صلب فوقانی اعمال می‌شود و مجدداً سیستم پایدار می‌شود و در زمان پایداری دوباره، هیچ باری به سیستم اعمال نمی‌شود. سپس لایه های مرزی بالا و پایین در جهت مخالف و با سرعت یکسان هر کدام ۵۰ m/s حرکت می‌کنند. دمای کل فرآیند در دمای ثابت ۳۰۰ K تنظیم می‌شود و گام زمانی برابر ۱ fs می‌باشد.

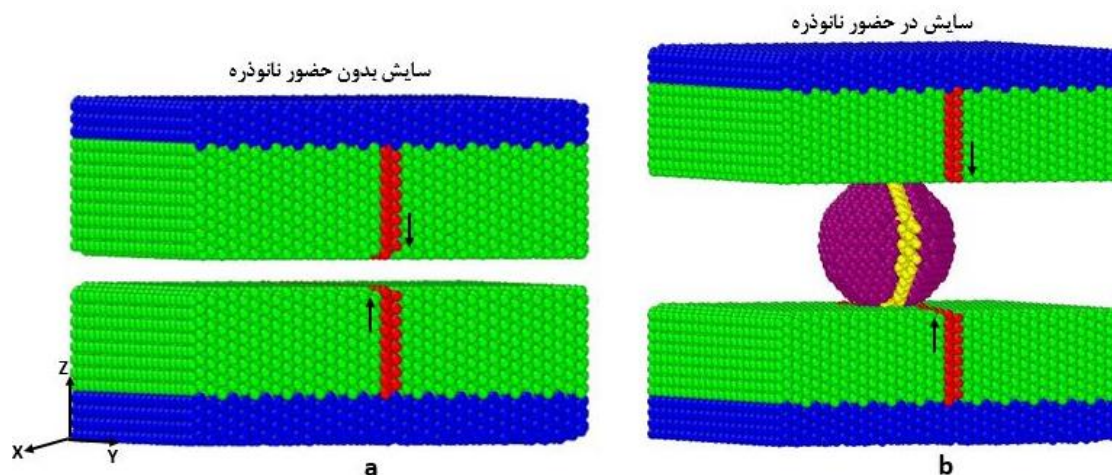


شکل ۴-۴. نمودار انرژی کل بر حسب زمان

۴-۳ تفاوت لغزش و غلتش

۴-۳-۱ معرفی مدل

شکل ۴-۵ نمایی از دو مدل لغزش (سایش بدون حضور نانوذره) و غلتش (سایش در حضور نانوذره) را قبل از شروع فرآیند سایش نمایش می‌دهد. در این تصویر دو نوار قرمز رنگ در بلوک‌های آهن بالا و پایین در راستای عمود بر سطح XY ، قرار و یک نوار زرد رنگ روی محیط نانوذره در تصویر سمت راست قرار دارد. با توجه به اینکه در مدل لغزش، اتم‌ها در لایه‌های مرزی آزاد میانی توان جنب و جوش و حرکت بالایی دارند و از یک سطح، شرط مرزی برایشان تعریف نشده است، ممکن است به محض شروع فرآیند، اتم‌های بالا و پایین در هم فرو رفته و نیروی بسیار زیادی بهم اعمال کنند که این خود باعث بروز خطا در ادامه‌ی فرآیند می‌شود، لذا فاصله‌ی کمی (به اندازه‌ی فیلم روانکار خالص) بین دو قطعه تعریف شده است.



شکل ۴-۵. نمایی از مدل لغزش و غلتش

جدول ۳-۴ مشخصات مربوط به مدل سایش لغزشی و غلتشی را نمایش می‌دهد.

جدول ۳-۴. مشخصات مدل لغزش و غلتش

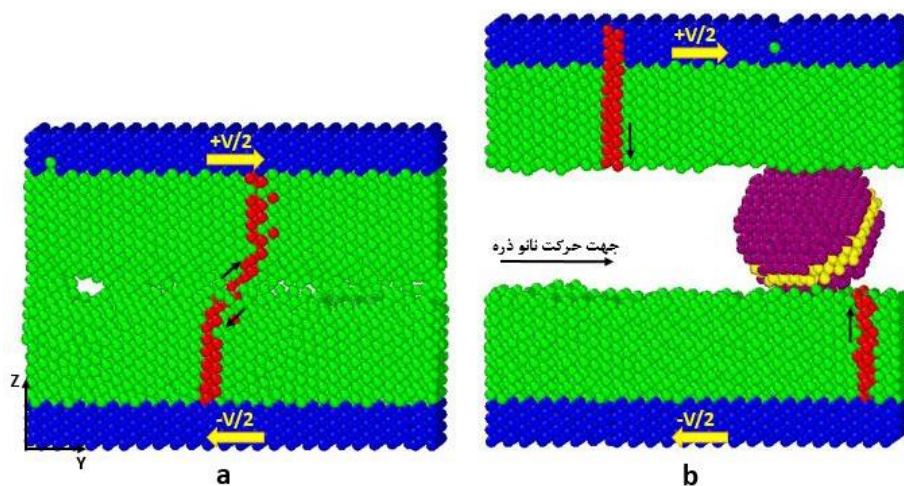
ردیف	نوع مدل	اجزای فرآیند سایش	مشخصات	تابع پتانسیل
۱	سایش بدون حضور نانوذره	بلوک بالایی - آهنی بلوک پایینی - آهنی	مطابق جدول ۱-۴	EAM
۲	سایش با حضور نانوذره	بلوک بالایی - آهنی بلوک پایینی - آهنی	مطابق جدول ۱-۴	EAM
		نانوذره الماس	مطابق جدول ۱-۴	Tersoff

- ثوابت توابع پتانسیل استفاده شده در این مدل همانند توابع پتانسیل جدول ۲-۴ است.

۲-۳-۴ مکانیزم شناسی سایش

با توجه به مطالبی که در فصل اول در مورد خواص نانوذره الماس بیان شد، این نتیجه بدست می‌آید که، نانو ذره الماس به عنوان ماده افزودنی روانکار، دارای شکل هندسی کروی بوده و از این بابت می‌تواند

در طول لغزش دو سطح اصطکاکی همانند بلبرینگ عمل کند و بین دو سطح غلتش کند و از این طریق مانع تماس مستقیم دو سطح اصطکاک شود. شکل ۴-۶ مدل دو فرآیند سایش بدون نانوذره و سایش در حضور نانوذره را بعد از اتمام فرآیند نمایش می‌دهد که در دمای ثابت 300 K تحت فشار ثابت MPa 500 و سرعت لغزش 100 m/s قرار داشته است.

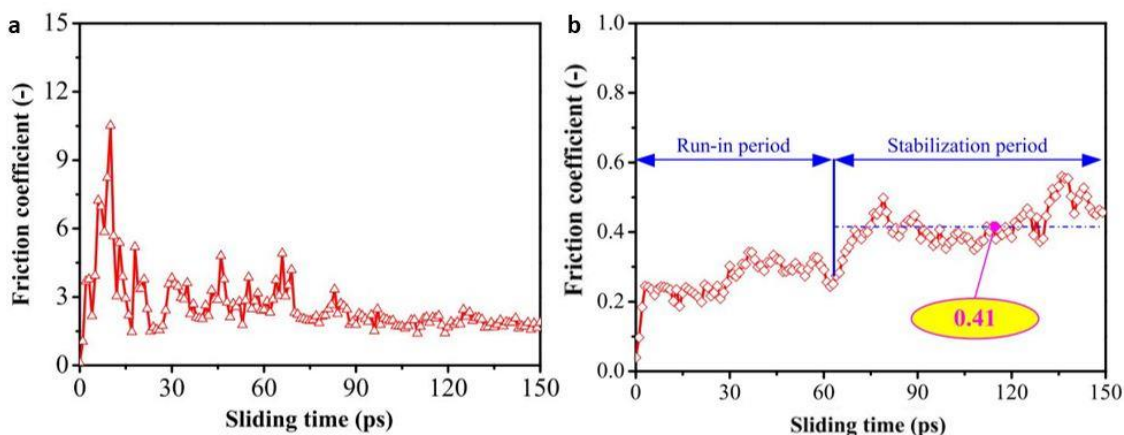


شکل ۴-۶. سایش a. لغزشی و b. غلتشی بعد از اتمام فرآیند

همانطور که در شکل ۴-۶ مشخص می‌شود، در صورت عدم وجود نانوذره، اتم‌های نوار قرمز رنگ دو بلوک بالا و پایین به یکدیگر پیوستند و در هم فرو رفتند و از راستای خود خارج شده و دچار کشیدگی به سمت چپ و راست خود شده اند که ناشی از تغییر شکل زیاد ایجاد شده در اتم‌های دو سطح اصطکاک است. در تصویر b، هنگامی که نانوذره به سیستم اضافه شد، دو بلوک به اندازه‌ی قطر نانوذره (3 nm) از هم فاصله گرفته اند و از تماس آن‌ها جلوگیری شده است. در این حالت، اتم‌های قرمز رنگ روی جفت بلوک اصطکاکی تغییر جهت بسیار ناچیزی دارند که بدلیل تغییر شکل اندک در آن است. نوار زرد رنگ روی نانوذره مکانیزم غلتیدن نانوذره بین سطوح اصطکاک را به خوبی نمایش می‌دهد. همچنین نانوذره الماس در طول فرآیند دچار تغییر شکل نشده و همچنان حالت کروی خود را حفظ

کرده است. بنابراین، می‌توان گفت نانوذره میزان سایش را کاهش داده و مورفولوژی سطح فرسوده را بهبود می‌بخشد.

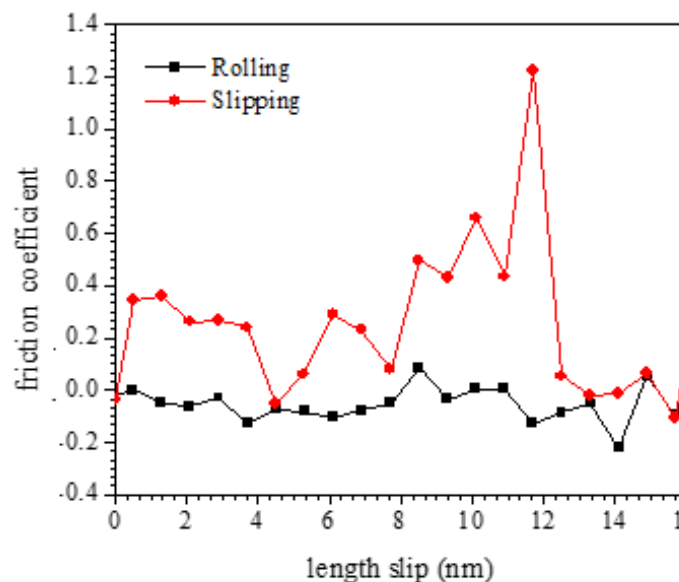
شی و همکاران تاثیر نانوذره‌ی الماس بر خواص سایشی سطوح مسی را بررسی کردند. نتایج ضریب اصطکاک آن‌ها در دو مدل سایش لغزش و غلتشی نشان می‌دهد، در غیاب نانوذره اتم‌های لایه‌های آزاد مس درون هم فرو رفته و تماس شدید بین دو سطح اصطکاک وجود دارد و باعث ایجاد چسبندگی و اصطکاک می‌شود. در حالی که نانوذره وجود داشته باشد، بعد از اعمال بار، نانوذره کمی درون مس فرو می‌رود اما هم‌چنان خاصیت غلتکی خود را حفظ کرده و مانع از بالا رفتن ضریب اصطکاک می‌شود [۶۵]. شکل ۴-۷ نمودار ضریب اصطکاک برای فرآیند لغزش بدون نانوذره و شکل ۵-۷ نمودار ضریب اصطکاک غلتشی نانوذره را نشان می‌دهد. درصد تفاوت در دو نمودار حدود ۸۶ درصد است.



شکل ۴-۷. نمودار ضریب اصطکاک برای سایش a. لغزشی و b. غلتشی [۶۵]

هو و همکاران تاثیر دو نانوذره‌ی الماس و SiO_2 محصور شده با دو بلوک آهنی، بر خواص تریبولوژی سطح را با هم مقایسه کردند. در هر دو مورد در صورت غیاب نانوذره اتم‌های آهن درون هم فرو رفته و دچار تغییر شکل‌های زیاد می‌شوند اما در صورتی که نانوذره وجود داشته باشد، سطوح اصطکاک کاملاً از هم جدا بوده و سایش صفر است [۵۹].

شکل ۸-۴ نمودار ضریب اصطکاک در فرآیند سایش لغزشی و غلتشی بدست آمده از نتایج تحقیق حاضر را نشان می‌دهد. طبق این نمودار همانگونه که انتظار می‌رفت بعد از افزودن نانوذره به سیستم و تبدیل لغزش صفحات به غلتش نانوذره، ضریب اصطکاک کاهش زیادی پیدا کرده است.



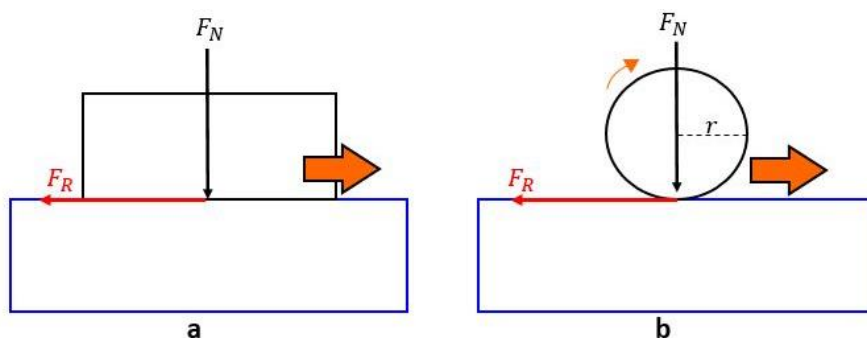
شکل ۸-۴. نمودار ضریب اصطکاک لغزشی و غلتشی

مقادیر متوسط ضریب اصطکاک حاصل از شکل ۸-۴ در جدول ۴-۴ نمایش داده شده است.

جدول ۴-۴. متوسط ضریب اصطکاک لغزشی و غلتشی

فرآیند	متوسط ضریب اصطکاک	درصد تفاوت نسبت به حالت بدون ذره
لغزش	۰/۲۴	۰
غلتش	۰/۰۵	۷۹

شکل ۹-۴ شماتیک سطوح لغزش و غلتش و پارامترهای لازم برای محاسبه‌ی ضریب اصطکاک را نشان می‌دهد.



شکل ۴-۹. شماییک اصطکاک: a. لغزشی و b. غلتشی

جهت بررسی چگونگی حل ضریب اصطکاک لغزشی و غلتشی روابط مربوط تعریف می‌شود. مطابق شکل ۴-۹-a. زمانی که غلتنده‌ای روی سطح وجود نداشته باشد و قطعه بالایی با سرعتی معلوم شروع به حرکت کند، در اثر برخورد دو سطح با یکدیگر نیروی اصطکاک در خلاف جهت حرکت ظاهر می‌شود. نسبت نیروی اصطکاک به نیروی عمود بر این قطعه که ناشی از وزن قطعه است مقدار ضریب اصطکاک لغزشی را بدست می‌آورد. ضریب اصطکاک در این حالت به عنوان اصطکاک لغزشی از رابطه‌ی ۳۵ قابل محاسبه است. زمانی که قطعه بالایی دارای حرکت چرخشی ساعتگرد و رو به جلو باشد (شکل ۴-۹-b) ضریب اصطکاک بین دو سطح به نام اصطکاک غلتشی از طریق رابطه‌ی ۴-۱ محاسبه می‌شود.

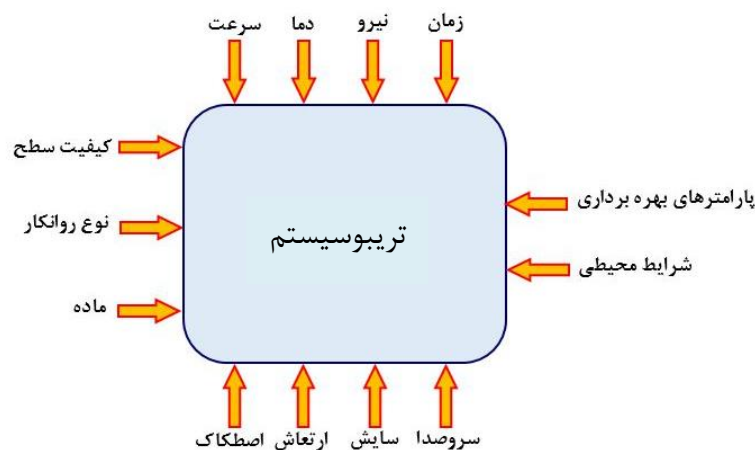
$$\mu = \frac{F_R}{F_N} \quad (4-1)$$

$$f = F_R r / F_N \quad (4-2)$$

در رابطه‌ی ۴-۱، μ ضریب اصطکاک لغزشی و F_N و F_R به ترتیب نیروهای اصطکاک و عمود بر سطح هستند. در رابطه‌ی ۴-۲، f ضریب اصطکاک غلتشی و F_N و F_R به ترتیب نیروهای اصطکاک و عمود بر سطح و r شعاع غلتنده (در اینجا نانوذره) می‌باشد.

۴-۴ عوامل موثر در سایش

بر خالف مدول الاستیسیته و سختی، سایش، یک خاصیت ذاتی ماده نیست و بستگی به مولفه‌های تریبوسیستم دارد. یک سیستم مهندسی که سایش در آن رخ می‌دهد، تریبوسیستم نام دارد. از طرف دیگر، عواملی از جمله زمان، نیرو، دما، سرعت، دانسیته، نابجایی‌ها، ساختمان کریستالی، اندازه دانه و حضور و توزیع فازهای ثانویه و... می‌توانند بر رفتار سایشی و میزان اصطکاک مواد اثرگذار باشند. طبق شکل ۴-۱۰ کیفیت سطوح نیز از دیگر مولفه‌های مهم یک تریبوسیستم است که عمدتاً به آماده سازی، نوع و کیفیت تولید بستگی دارد.



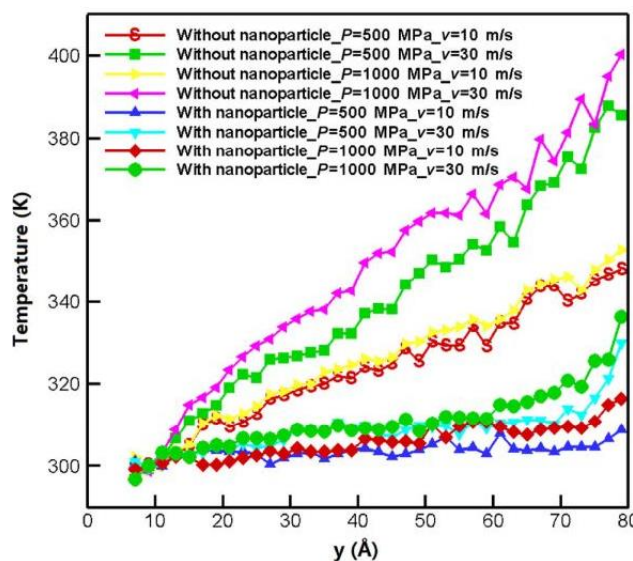
شکل ۴-۱۰. شماتیک اصطکاک: a. لغزشی و b. غلتشی

به کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی می‌توان اثر هر یک از عوامل ذکر شده را بررسی کرد. پایان‌نامه حاضر به بررسی اثر سرعت لغزش، دمای سیستم، فشار (بار اعمالی)، جنس قطعه کار و عیوب موجود در سطوح می‌پردازد.

۴-۴-۱ بررسی اثر سرعت در فرآیند نانوسایش

سرعت لغزش سطوح اصطکاک به عنوان یک عامل تاثیر گذار در فرآیند سایش معرفی می‌شود. در قطعاتی از جمله یاتاقان‌های موجود در خودرو سرعت لغزندگی بین ۱۰ تا ۱۸ m/s است اما از آنجا که

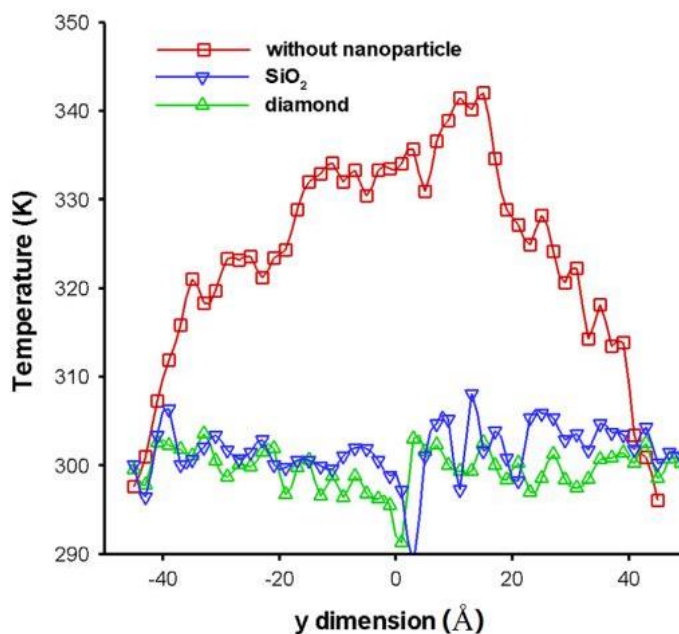
این سرعت پایین منجر به افزایش زمان و هزینه‌ی محاسبات دینامیک مولکولی می‌شود، در این بخش به بررسی اثر سرعت در تغییر شکل اتمی در شرایط دما ثابت پرداخته می‌شود تا میزان اهمیت کم یا زیاد بودن سرعت در فرآیندهای دما ثابت نشان داده شود. هو و همکاران فرآیند سایش سطوح اصطکاکی مسی را با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی و با استفاده از نانوذره الماس تحلیل کرده‌اند. بمنظور بررسی اثر سرعت در تغییرات دمایی، شرایط دمایی حاکم در مرحله‌ی لغزش را دما متغیر (NVE)، فرض کردند. شکل ۴-۱۱ مربوط به نتایج نموداری دما بر حسب طول لغزش ایشان در سرعت‌های متفاوت می‌باشد. مشاهده می‌شود که در صورت عدم حضور نانوذره، در فشار ۵۰۰ MPa و سرعت‌های لغزشی ۱۰ m/s و ۳۰، دما از مقدار اولیه ۳۰۰ K به ۳۵۰ K افزایش یافته است. همچنین در فشار ۱۰۰۰ MPa و سرعت‌های لغزشی ۱۰ m/s و ۳۰، دما از مقدار اولیه ۳۰۰ K به ۴۰۰ K افزایش داشته است. اما وقتی نانوذره به سیستم اضافه می‌شود و شرایط دمایی همانند قبل در حالت (NVE) قرار دارد، در فشار ۵۰۰ MPa و سرعت‌های لغزشی ۱۰ m/s و ۳۰، در ۹۰ درصد از طول مسیر دما در مقدار اولیه یعنی ۳۰۰ K ثابت بوده و فقط در انتهای مسیر آن هم به اندازه ۳۰ K افزایش داشته است. همچنین در فشار ۱۰۰۰ MPa و سرعت‌های لغزشی ۱۰ m/s و ۳۰، دما در ۹۰ درصد از مسیر ثابت بوده و در انتهای مسیر به اندازه ۱۰ K افزایش داشته است [۶۲].



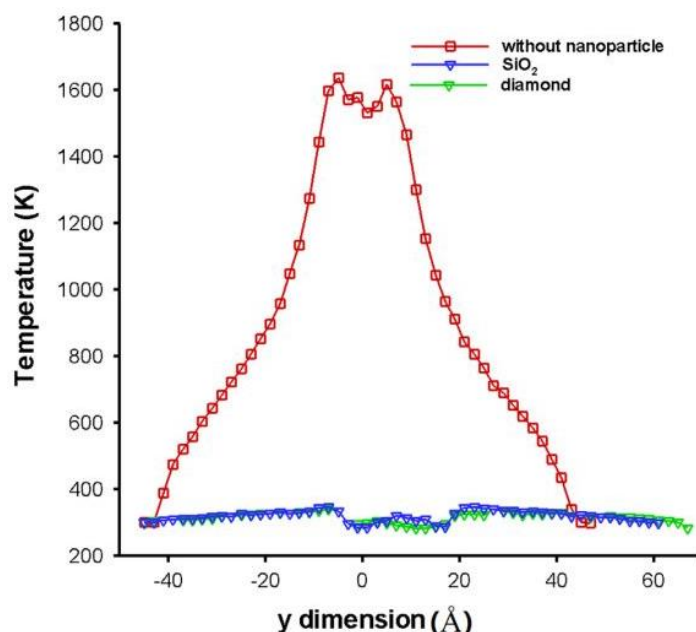
شکل ۴-۱۱. نمودار دما بر حسب طول لغزش [۶۲]

هو و همکاران در شبیه سازی دینامیک مولکولی اثر سرعت را در فرآیند نانوسایش یکبار با استفاده از نانوذره‌ی الماس و یکبار نانوذره‌ی SiO_2 محصور شده بین دو بلوک آهنی بررسی کردند. دمای سیستم در مرحله‌ی لغزش در حالت متغیر (NVE) قرار دارد. شبیه‌سازی در فشار ثابت و یکبار با سرعت لغزش سطوح کم (10 m/s) و یکبار در سرعت بالای (500 m/s) انجام شد. نتایج نشان داد در حالتی که نانوذره وجود ندارد دمای سیستم در مرحله‌ی لغزش بسیار بیشتر از دمای اولیه می‌شود اما در حالتی که نانوذره، چه الماس و چه SiO_2 به سیستم اضافه می‌شود دما در مقدار اولیه خود ثابت می‌ماند [۵۹].

شکل ۴-۱۲ و ۴-۱۳ نمودار دما بر حسب طول لغزش را برای این فرآیند در دو سرعت متفاوت نمایش می‌دهد. باتوجه به مطالعات انجام شده در زمینه تاثیر سرعت در فرآیند نانوسایش و دما می‌توان نتیجه گرفت اهمیت کم یا زیاد بودن سرعت در ایجاد خطا در محاسبات، وقتی که نانوذره‌ای نباشد بسیار زیاد است اما در حالی که نانوذره وجود داشته باشد تغییر بسیار کمی در دما ایجاد می‌شود لذا در این تحقیق فرآیند دما ثابت در نظر گرفته شد.

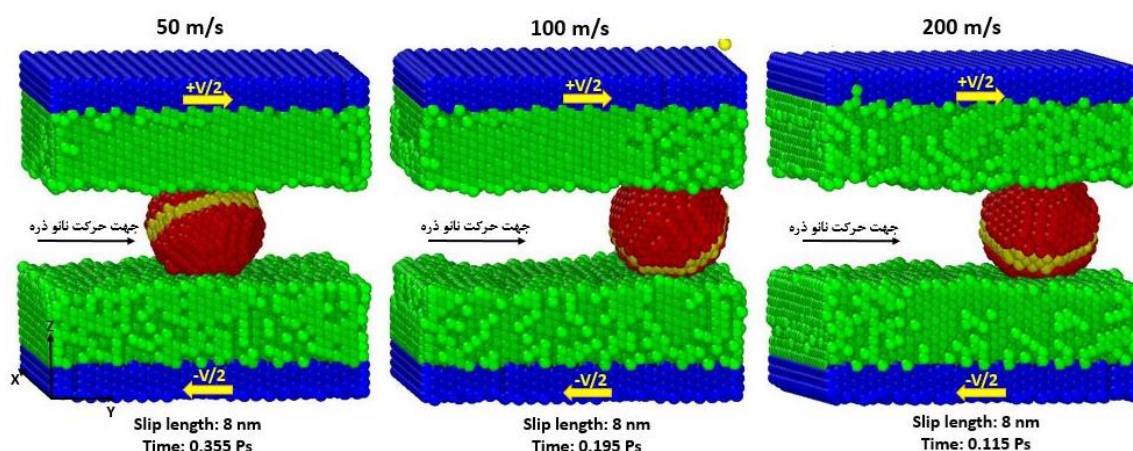


شکل ۴-۱۲. نمودار دما بر حسب طول لغزش در سرعت لغزشی 10 m/s [۵۹]



شکل ۴-۱۳. نمودار دما بر حسب طول لغزش در سرعت لغزشی ۵۰۰ m/s [۵۹]

شکل ۴-۱۴ مدل فرآیند سایش در حضور نانوذره را برای سه مقدار سرعت لغزشی ۵۰ m/s، ۱۰۰ و ۲۰۰، دمای ثابت ۳۰۰ K و فشار ثابت ۵۰۰ MPa و در انتهای زمان حل نمایش می‌دهد. در این تحلیل طول لغزش برای هر سه حالت ثابت در نظر گرفته شده و زمان حل مسئله در آن‌ها متفاوت است. مشاهده می‌شود همانگونه که انتظار میرفت در سرعت پایین برای سطوح لغزشی، حرکت نانوذره آهسته‌تر شده و زمان حل مسئله برای طی کامل مسیر لغزش بیشتر شده است و وقتی سرعت لغزش تا ۲۰۰ m/s افزایش یافت، زمان حل مسئله تقریباً به نصف کاهش پیدا کرده است.



شکل ۴-۱۴. مدل محاسباتی فرآیند سایش در سرعت‌های متفاوت

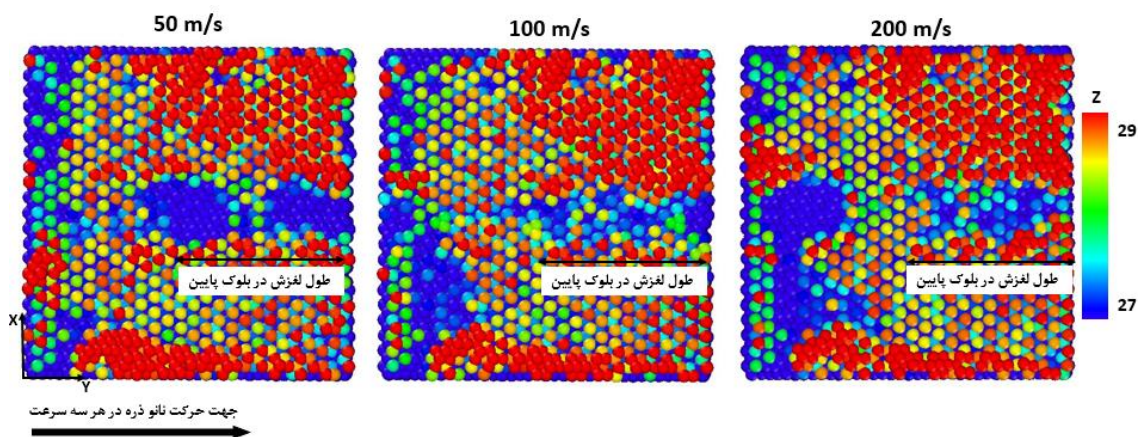
جدول ۴-۵ مشخصات مربوط به مدل شبیه سازی در سرعت متفاوت را نشان می دهد.

جدول ۴-۵. متوسط ضریب اصطکاک لغزشی و غلتشی

ردیف	سرعت لغزش کل	مشخصات و تابع پتانسیل	تعداد گام حل	زمان حل (ساعت)
۱	۵۰ m/s	مطابق جدول ۱-۴ (بجز سرعت لغزش)	۳۵۵	۱۶
۲	۱۰۰ m/s	مطابق جدول ۱-۴ (بجز سرعت لغزش)	۱۹۵	۹
۳	۲۰۰ m/s	مطابق جدول ۱-۴ (بجز سرعت لغزش)	۱۱۵	۷

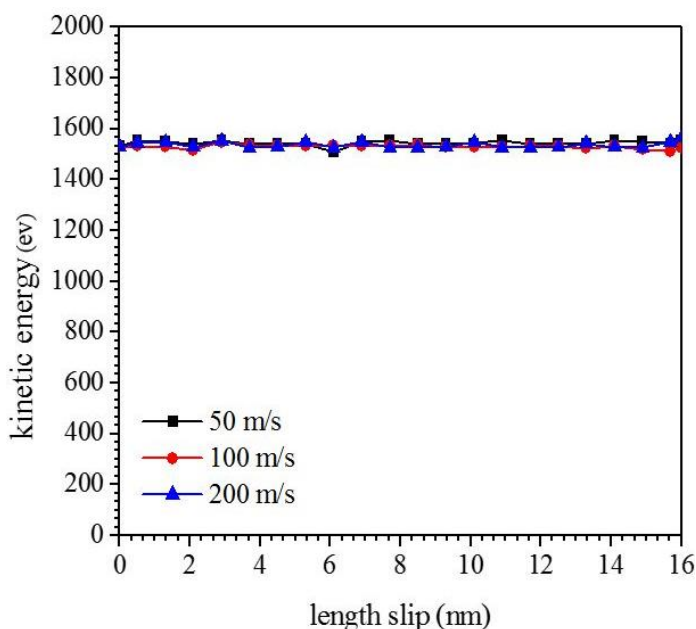
-توابع پتانسیل استفاده شده در این مدل همانند توابع پتانسیل جدول ۲-۴ است.

شکل ۱۵-۴ تغییر شکل ناشی از اثر سرعت های متفاوت را در نمایی دو بعدی برای قطعه کار پایین نمایش می دهد. طبق این شکل مشاهده می شود تغییر شکلی در سرعت های متفاوت در قطعه کار ایجاد شده تفاوت اندکی باهم دارند و تعداد اتم های کنده شده از هر سه مورد نزدیک به هم هستند و عمق نفوذ نانوذره در هر سه مورد یکسان است که دلیل آن می تواند فرض ثابت گرفتن دما باشد. همانطور که قبلا بیان شد از آنجا که دما و سرعت اتم ها کاملاً بهم وابسته هستند، تغییرات سرعت در تغییرات دما موثر است اما چون دما ثابت نگه داشته شده، تاثیر سرعت در تغییر شکل قطعه و شکستن پیوندهای اتمی بین اتم های سطح دیده نمی شود. پس می توانیم به این نتیجه برسیم که در شرایط دما ثابت، برای راحت تر و سریع تر حل شدن مسئله، می توان سرعت را بیشتر گرفت و این موضوع مشکلی تغییر شکل قطعه ایجاد نمی کند.



شکل ۴-۱۵. تغییر شکل قطعه در اثر تفاوت در سرعت لغزش

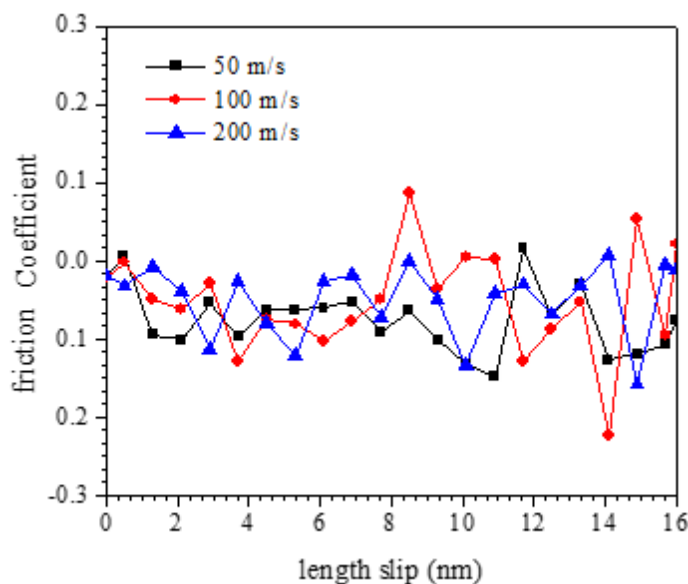
شکل ۴-۱۶ نمودار انرژی جنبشی بر حسب طول لغزش را برای سایش در سرعت‌های متفاوت نمایش می‌دهد. مشاهده می‌شود که به دلیل ثابت گرفتن دما، انرژی جنبشی اتم‌های سیستم در طول فرآیند ثابت بوده و انرژی اضافی اتم‌ها که در اثر افزایش سرعت در آن ایجاد می‌شود با ثابت گرفتن دما دفع شده و به میزان ثابت دما رسیده‌اند.



شکل ۴-۱۶. نمودار انرژی جنبشی حاصل از سرعت‌های متفاوت

شکل ۴-۱۷ نمودار ضریب اصطکاک غلتشی بر حسب طول لغزش و جدول ۴-۶ متوسط ضریب اصطکاک غلتشی حاصل از شکل ۴-۱۷ در سه سرعت متفاوت را نمایش می‌دهد. مشاهده می‌شود که

در طول لغزش یکسان ۱۶ nm هر چه سرعت لغزش صفحات بیشتر باشد مقدار ضریب اصطکاک کمتر است و دلیل آن این است که سرعت سریع حرکت نانوذره مانع از اختلال و جمع شدن اتم‌ها در مسیر غلتش می‌شود و اتم‌ها فرصتی برای کنار هم قرار گرفتن و چسبندگی پیدا نمی‌کنند و مانع از ایجاد اصطکاک می‌شود. در سرعت‌های پایین خاصیت شناوری روانکار برای جداسازی کامل سطوح از یکدیگر کفایت نمی‌کند و بعضی از قسمت‌های سخت قطعات با یکدیگر برخورد می‌کند که این موضوع خطر آسیب‌دیدگی قطعه را به دنبال دارد. با بالا رفتن سرعت نیروی سایش کاهش می‌یابد و شناوری دائمی در روانکار ایجاد می‌شود. به این ترتیب به جای اصطکاک خشک بین قطعات، اصطکاک غلتشی نانوذرات موجود در روانکار و نیز اصطکاک سیال صورت می‌گیرد و سطوح اصطکاک کاملاً از هم جدا می‌شوند.



شکل ۴-۱۷. نمودار ضریب اصطکاک غلتشی بر حسب طول لغزش حاصل از سرعت‌های متفاوت

جدول ۴-۶. متوسط ضریب اصطکاک برای سایش با سرعت‌های لغزشی متفاوت

۵۰m/s	۱۰۰m/s	۲۰۰m/s	
۰/۰۷۴	۰/۰۵	۰/۰۵	ضریب اصطکاک

۲-۴-۴ بررسی اثر دما در فرآیند نانوسایش

در اکثر تحقیقات انجام شده در زمینه نانوسایش برای زمانی که لغزش اتفاق می‌افتد، شرایط دمایی NVE تعریف شده است. تا اثر تغییرات دما در حین لغزش صفحات بررسی شود اما همانطور که در بخش گذشته گفته شد در حالتی که نانوذره وارد سیستم می‌شود تغییرات دما بسیار جزئی است و تاثیر آن در تغییر شکل ناچیز است به همین جهت در تحقیق حاضر شرایط دمایی ثابت 300 K در تمام طول فرآیند برای کل اتم‌های سیستم تعریف شده است.

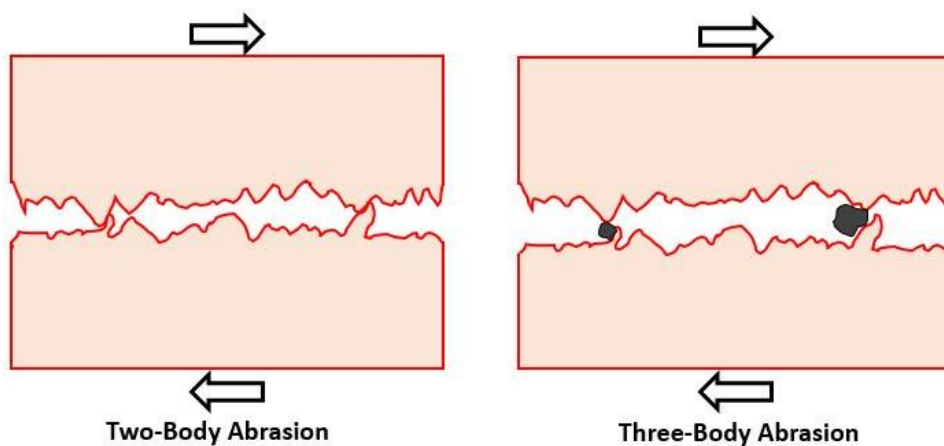
زمانی که دمای قطعه بالا می‌رود انرژی درونی آن نیز افزایش می‌یابد و این امر باعث می‌شود که جنبش و تحرک مولکول‌های ماده بیشتر و بیشتر شود و در نتیجه مولکول‌ها به یکدیگر بیشتر برخورد می‌کنند و از یکدیگر نیز بیشتر فاصله می‌گیرند. افزایش فاصله به این علت است که مولکول‌ها با انرژی بیشتری با یکدیگر برخورد می‌کنند و این امر موجب افزایش حجم قطعه می‌شود. اما از آنجا که در شرایط NVT تغییرات حجمی را ثابت در نظر می‌گیرد، حجم قطعات تا انتهای فرآیند ثابت است و تغییر نمی‌کند لذا در هر نوبت که دمای سیستم شبیه‌سازی افزایش پیدا می‌کند و قبل از رسیدن به پایداری، اتم‌های قطعه در سطوح آزاد که دچار حرکات و جنب و جوش بالا می‌شدند و نمی‌توانستند از حجم خود پیشروی کنند باعث ایجاد حرکات اعوجاجی روی سطح قطعات می‌شدند. با توجه به مدل‌های مختلف سایش در قطعات، در کل دو نوع سایش زیر در فرآیند نانوسایش می‌تواند اتفاق بیافتد.

الف. سایش خراشان^۱: سایش خراشان زمانی پیش می‌آید که سطوح سخت و زبر در مقابل یک سطح نرم‌تر، حرکتی لغزشی داشته باشند و سطح سخت در سطح نرم فرو رفته و یکسری شیارهایی را به وجود آورد. ذرات سایشی که بر اثر مکانیزم ذکر شده حاصل شده‌اند، می‌توانند به صورت تراشه‌ای کشیده درآیند. در این حالت سایش خراشان از نوع دو جسمی^۲ است. سایش خراشان می‌تواند در موقعیت‌های دیگری نیز بوجود آید، برای مثال وقتی ذرات ساینده در فصل مشترک دو سطح در حالت لغزش قرار

^۱ Abrasive wear

^۲ Two-body

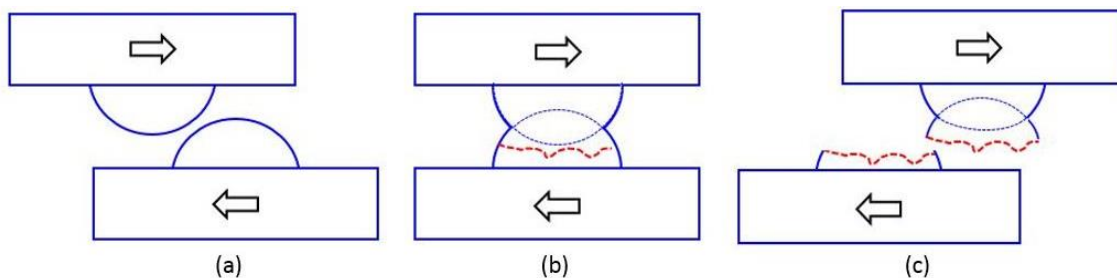
گیرند و از هر سطح ذراتی را جدا کنند، این نوع سایش را سایش خراشان سه جسمی^۱ می‌نامند. در صورتی که سطح لغزنده ماده سخت‌تر، صاف و صیقلی باشد، سایش دو جسمی پدید نمی‌آید. به همین ترتیب اگر ذرات ساینده کوچک و نرم تر از مواد لغزنده باشد، سایش خراشان سه جسمی مشاهده نشده است. همچنین سایش خراشان می‌تواند به خاطر حضور ذرات سایشی باشد که توسط دیگر مکانیزم‌های سایش بوجود آمده است و در سیستم باقی مانده و پس از اکسید شدن سخت شده‌اند. در حالت‌های دیگر ذرات آلاینده در محیط نیز می‌توانند در یک سیستم لغزش قرار بگیرند. براساس نتایج به دست آمده از تحقیقات انجام گرفته در زمینه سایش خراشان، ضعف و شدت سایش خراشان به نسبت سختی ماده ساینده به سختی سطح در حال سایش بستگی دارد. تحقیقات نشان می‌دهند سطوحی که سختی بیش از نصف سختی ماده ساینده داشته باشد در مقابل ساییدگی مقاوم‌تر هستند. امروزه به کمک فرآیندهای مهندسی سطح می‌توان سطوح سرامیکی و بین فلزی نسبتاً سختی را تولید کرد و به همین دلیل کاربرد آن‌ها یک راه حل عملی و منطقی به حساب می‌آید [۶۷]. شکل ۴-۱۸ شماتیک دو نوع سایش خراشان را نمایش می‌دهد.



شکل ۴-۱۸. سایش خراشان دو جسمی و سه جسمی

^۱ Three-body

ب. سایش چسبان^۱: سطوح قطعات مهندسی که در طی فرآیندهای مختلف تولید شده‌اند، کاملاً صاف نبوده و ناهمگونی متعددی دارند. در نتیجه در چند نقطه‌ای پراکنده از قطعات صنعتی درگیری صورت گرفته و تنش‌های زیادی را در این نقاط پدید می‌آورد. این امر موجب اتصالات موضعی و تغییر شکل پلاستیکی در سطح می‌شود. سایش چسبان در صورتی ایجاد می‌شود که لغزش موضعی بین دو سطح درگیر موجب انتقال ماده از یک سطح به گسیختگی اتصالات مزبور و در نهایت به سطح دیگر شود که عموماً در درجه حرارت‌های بالا اتفاق می‌افتد. گسیختگی اتصالات در فصل مشترک ۲ یا در حالت حادتر در عمقی از محل اتصال ۳ به طور مداوم صورت می‌گیرد [۶۷]. شکل ۱۹-۴ شماتیکی از سایش چسبان را نمایش می‌دهد.



شکل ۱۹-۴. شماتیک سایش چسبان: a. قبل از برخورد، b. لحظه‌ی برخورد، c. بعد از برخورد

هم‌چنین در انواع دیگر سایش می‌توان از سایش ورقه‌ای^۴، سایش نوسانی^۵، سایش خستگی سطح^۶، نام برد.

شکل ۲۰-۴ مدل سیستم شبیه‌سازی فرآیند سایش را برای سه دمای متفاوت ۳۰۰k، ۴۰۰ و ۵۰۰ نمایش می‌دهد. در تمام موارد سرعت لغزش سطوح اصطکاک ۱۰۰m/s و فشار ثابت ۵۰۰MPa اعمال شده است و موقعیت نانو ذره بین قطعات بالا و پایین است و در مرکز است. زمان حل مسئله در تمام

^۱ Adhesive wear

^۲ Adhesive failur

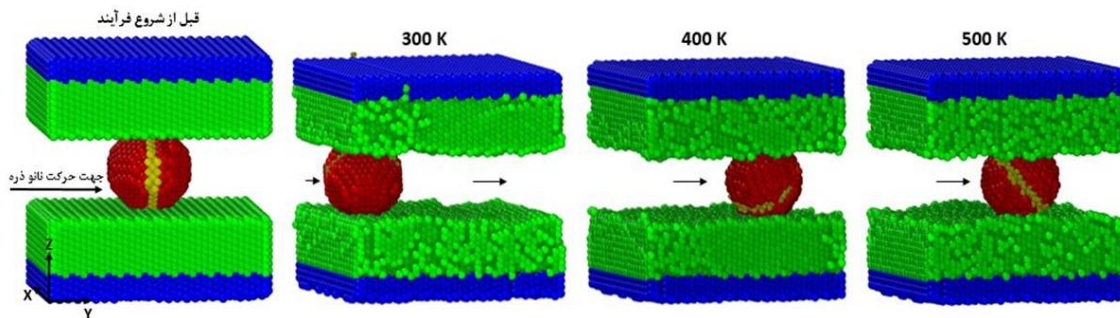
^۳ Cohesive failur

^۴ Delamination wear

^۵ Fretting wear

^۶ Fatigue Surface wear

موارد یکسان است.



شکل ۴-۲۰. مدل سیستم شبیه سازی در دماهای مختلف

جدول ۴-۷ مشخصات مربوط به مدل شبیه سازی در دمای متفاوت را نشان می دهد.

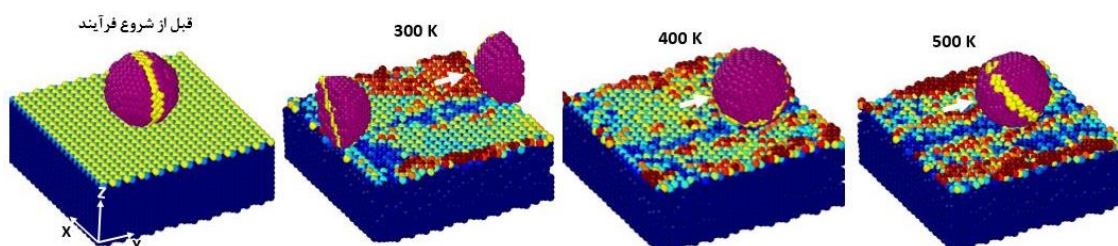
جدول ۴-۷. مشخصات مدل

مشخصات و تابع پتانسیل	سرعت لغزش کل	ردیف
مطابق جدول ۴-۱ (بجز دمای سیستم)	۳۰۰ K	۱
مطابق جدول ۴-۱ (بجز دمای سیستم)	۴۰۰ K	۲
مطابق جدول ۴-۱ (بجز دمای سیستم)	۵۰۰ K	۳

-توابع پتانسیل استفاده شده در این مدل همانند توابع پتانسیل جدول ۴-۲ است.

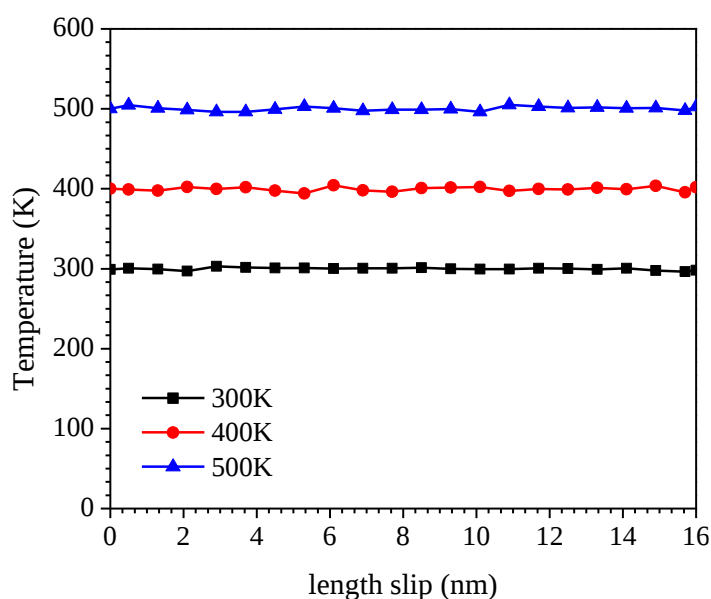
با توجه به شکل ۴-۲۰ می توان مشاهده کرد که در دمای 300 K ، نانوذره کل طول قطعه را با حرکت غلتشی خود پیموده و بدلیل تعریف شرایط مرزی متناوب در جهت y ، دوباره از ابتدای سیستم وارد می شود. در دمای 400 K ، نانوذره در جهت مثبت y ، حرکت رو به جلوی ساعتگرد داشته و بخشی از مسیر را پیموده است و در دمای 500 K ، مشاهده می شود نانوذره فاصله کمی نسبت به موقعیت اولیه خود دارد و چرخش نوار زرد رنگ روی آن ثابت می کند که حرکت غلتشی نانوذره متوقف نشده و فقط روند حرکت آن کند شده است. شکل ۴-۲۱ نمایی از قطعه ی پایین را نمایش می دهد. از آنجا که در دمای بالا میزان انرژی و جنب و جوش اتم ها بالا می رود، برخوردهای زیادی با یکدیگر دارند و در این

حین برخی از اتم‌های قطعه به نانوذره می‌چسبند و مانع از حرکت سریع نانوذره می‌شوند و بصورت توده‌ای در زیر نانوذره انباشته می‌شوند که می‌تواند باعث افزایش اصطکاک نسبت به دمای پایین باشد. می‌توان گفت در دمای پایین ۳۰۰k سایش از نوع خراشان و در دمای ۵۰۰k از نوع خراشان به همراه چسبان است.



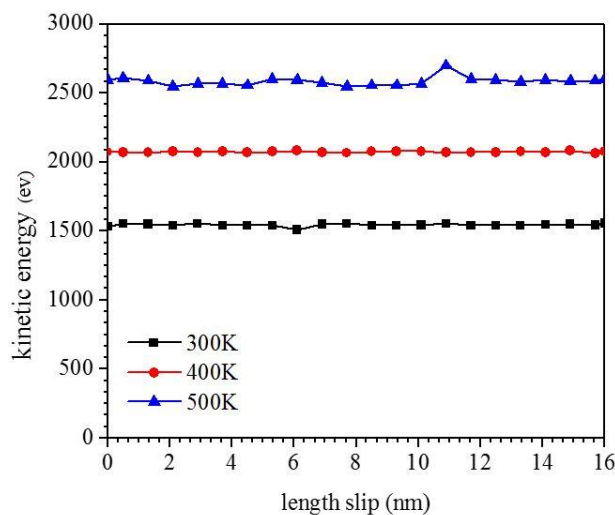
شکل ۴-۲۱. تاثیر دما در حرکت نانوذره

شکل ۴-۲۲ نمودار دما بر حسب طول لغزش در هر مورد را نمایش می‌دهد. مشاهده می‌شود که در هر مورد دمای کل سیستم ثابت نگه داشته شده است. اگر دما متغیر فرض می‌شد، در بررسی اثر سرعت، امکان استفاده از سرعت‌های بالا نبود چرا که باعث افزایش نرخ کرنش شده و تفاوت زیادی با واقعیت داشت و باعث ایجاد خطا در نیروها و ضرایب اصطکاک بدست آمده می‌شد.

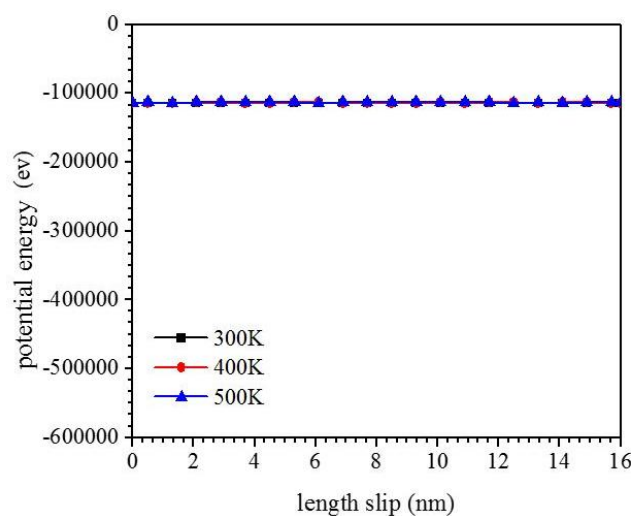


شکل ۴-۲۲. نمودار دما بر حسب طول لغزش

شکل ۴-۲۳ و ۴-۲۴ بترتیب نمودار انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل سیستم شبیه سازی بر حسب طول لغزش را نمایش می دهند. مشاهده می شود که انرژی جنبشی برای وقتی که دمای سیستم 300K است، کمترین و وقتی دمای سیستم 500K است بیشترین است که دلیل آن هم افزایش انرژی درونی اتمها در اثر افزایش دما است. مطابق شکل ۴-۲۴ نمودار انرژی پتانسیل در هر سه حالت یکسان است چرا که انرژی پتانسیل تابعی از موقعیت اتمها تعریف شده است و حرکت آن ها تاثیری در انرژی پتانسیل ندارد. از آنجا که انرژی کل سیستم مجموع انرژی پتانسیل و جنبشی آن است، لذا انتظار می رود اختلاف مقدار انرژی کل در هر سه مورد به اندازه اختلاف در انرژی جنبشی آن ها باشد.

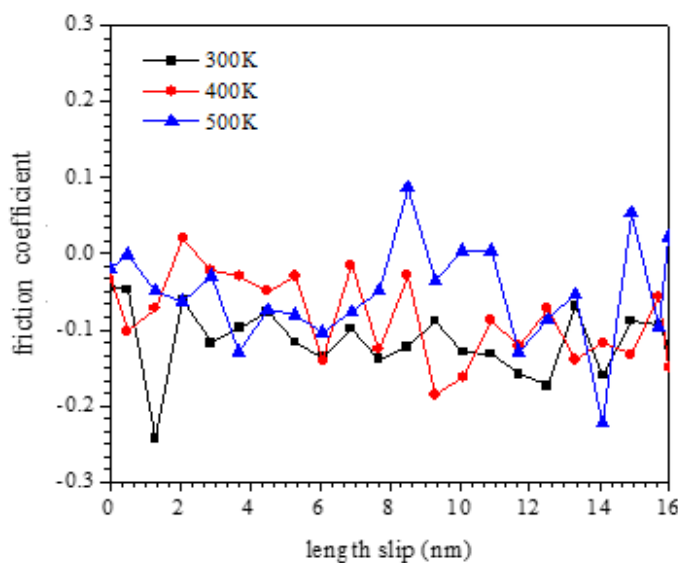


شکل ۴-۲۳. نمودار انرژی جنبشی بر حسب طول لغزش



شکل ۲۴-۴. نمودار انرژی پتانسیل بر حسب طول لغزش

شکل ۲۵-۴ نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش فرآیند سایش با سه دمای متفاوت را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که سطح نمودار در دمای 300K از دو نمودار دیگر پایین‌تر و سطح نمودار در دمای 500K بالاتر از بقیه است. همانطور که گفته شد با افزایش دما چسبندگی اتم‌های سطح بیشتر شده و باعث چسبیدن به اتم‌های نانوذره نیز می‌شوند و این خود مانع از حرکت درست نانوذره شده و علاوه بر اصطکاک خراش اصطکاک چسبندگی نیز بوجود می‌آید.



شکل ۲۵-۴. نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش برای سایش در دماهای متفاوت

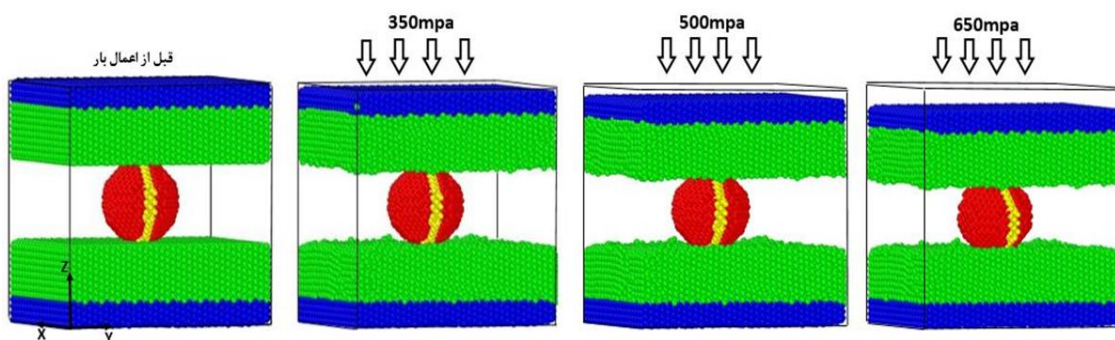
جدول ۸-۴ متوسط ضریب اصطکاک فرآیند سایش در دماهای متفاوت را نمایش می‌دهد که براساس نتایج ضریب اصطکاک، در صورت گرم شدن سطح به میزان 200K ، می‌تواند تا ۱۰۰ درصد افزایش یابد.

جدول ۸-۴. متوسط ضریب اصطکاک در دماهای متفاوت

۳۰۰k	۴۰۰k	۵۰۰k	
۰/۰۵	۰/۰۸	۰/۱۰	متوسط ضریب اصطکاک

۳-۴-۴ بررسی اثر فشار وارد بر سطح در فرآیند نانوسایش

شکل ۴-۲۶ مدل سیستم شبیه‌سازی تحت بار اعمالی در سه مقدار متفاوت ۳۵۰، ۵۰۰ و ۶۵۰ MPa را، بعد از اعمال بار نمایش می‌دهد. در این تحلیل شرایط دمایی ثابت ۳۰۰k و سرعت لغزش ۱۰۰m/s در نظر گرفته شده است. از آنجا که الماس نانوذره‌ای سخت با توان تحمل بار بالاست، قابلیت تحمل فشار تا ۶۵۰MPa (و بالاتر) را دارد و مشاهده می‌شود که بعد از اعمال بار تغییر شکل نداده و پیوندهای اتمی آن گسیخته نمی‌شود و حالت کروی خود را حفظ می‌کند و به وظیفه‌ی خود به عنوان ذره میانی غلتنده عمل می‌کند. تاثیرات فشار در تغییر شکل قطعات و نانوذره در بخش‌های بعد توضیح داده خواهد شد.



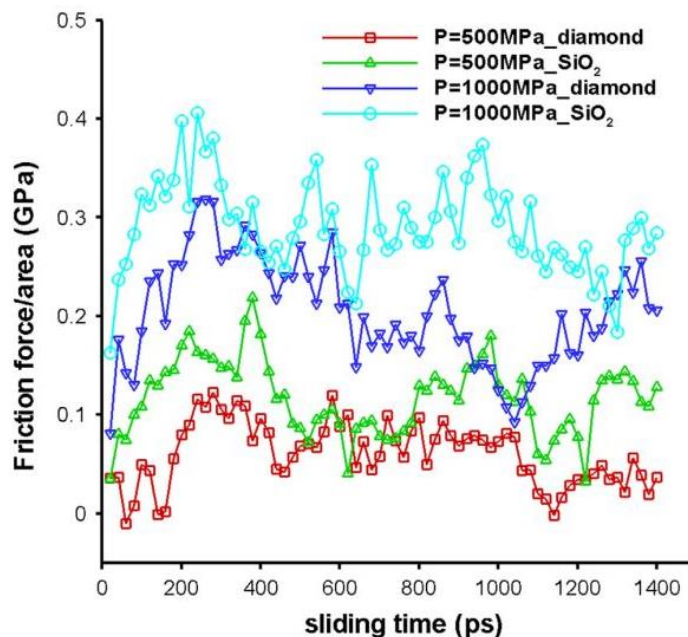
شکل ۴-۲۶. سیستم نانو سایش تحت فشارهای متفاوت

جدول ۴-۹ مشخصات مربوط به مدل شبیه‌سازی در فشار متفاوت را نشان می‌دهد.

جدول ۴-۹. مشخصات مدل

رديف	سرعت لغزش کل	مشخصات و تابع پتانسیل
۱	۳۵۰Mpa	مطابق جدول ۴-۱ (بجز فشار وارد بر سطح)
۲	۵۰۰MPa	مطابق جدول ۴-۱ (بجز فشار وارد بر سطح)
۳	۶۵۰MPa	مطابق جدول ۴-۱ (بجز فشار وارد بر سطح)

هو و همکاران در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی اثر نانوذره‌ی الماس و سیلیکون دی اکسید در فرآیند سایش که با دو بلوک آهنی، در سرعت لغزش ثابت 10 m/s و تحت فشارهای متفاوت 500 MPa و 1000 MPa انجام شد به این نتیجه رسیدند که افزایش بار وارد بر لایه‌ی صلب بالا باعث افزایش ضریب اصطکاک هنگام غلتش نانوذره می‌شود. شکل ۲۷-۴ نمودار مربوط به ضریب اصطکاک را نشان می‌دهد [۵۹].

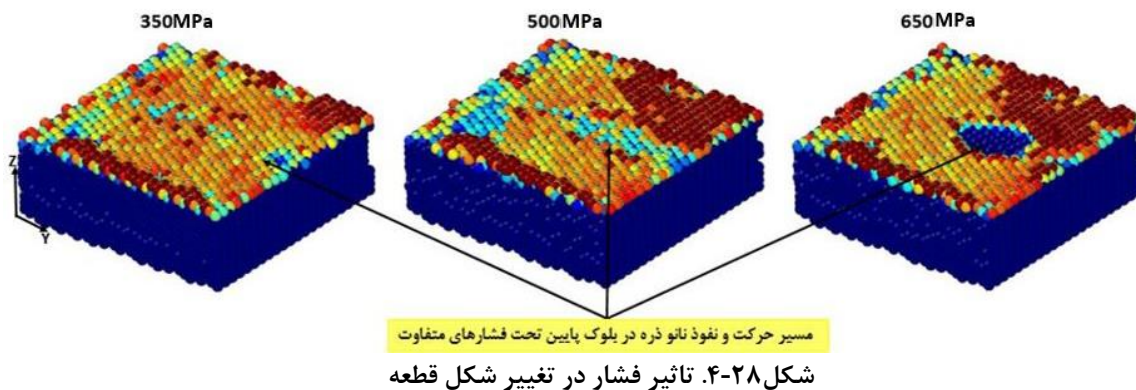


شکل ۲۷-۴. نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش [۵۹]

ایون و همکاران اثر نانوذرات کربنی را در بهبود کیفیت تریبولوژی سطوح آهن بررسی کردند. نتیجه‌ی تحلیل ایشان از اثر فشار در تغییرات ضریب اصطکاک که در سرعت لغزشی ثابت 10 m/s انجام شده است. نشان می‌دهد که هم در مورد CND ها و هم در مورد CNO ها ضریب اصطکاک با افزایش فشار بالا می‌رود. با این حال مقدار تغییرات در CND ها بیشتر است [۶۵].

شکل ۴-۲۸ تغییر شکل ایجاد شده روی سطح قطعه پایین، تحت سه فشار متفاوت و بعد از اتمام فرآیند را نمایش می‌دهد. آن طور که مسیر حرکت نانو ذره روی شکل مشخص است، در فشار 350 MPa ، نانو ذره نفوذ ناچیزی در قطعه داشته اما از اثر باقی مانده روی سطح می‌توان فهمید که طول مسیر را با حرکت غلتشی گذرانده است. در فشار 500 MPa ، در مرکز قطعه و در راستای y ، شیاری نسبتاً

عمیق‌تر نسبت به فشار 350 MPa ایجاد شده است که نشان‌دهنده‌ی نفوذ بیشتر نانوذره درون قطعه است. در شکل سمت راست و در فشار 650 MPa مشاهده می‌شود که اثر حفرة‌ی به اندازه قطر نانوذره ایجاد شده است و برخلاف دو حالت قبل شیار ایجاد دیده نمی‌شود. با اعمال فشار بالای 650 MPa نانوذره درون قطعه نفوذ کرده است و اتم‌های آهن اطراف آن، اجازه‌ی حرکت به جلو و عقب به نانوذره نمی‌دهند و فقط قادر است در محل نفوذ حرکت چرخش داشته باشد و با حفظ فاصله‌ی بین دو سطح اصطکاکی از تماس آن‌ها جلوگیری کرده و مانع ایجاد سایش و اصطکاک شود.

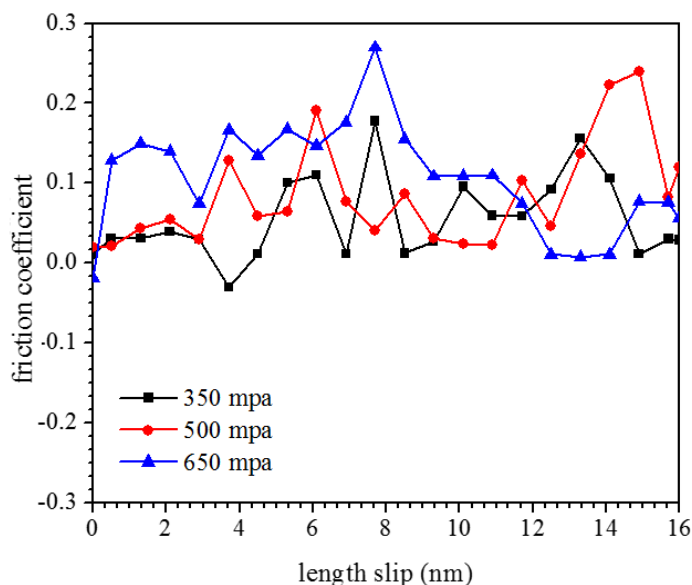


جدول ۴-۱۰ میزان نفوذ نانوذره درون آهن را بعد از اعمال فشار، برای سه فشار متفاوت نشان می‌دهد.

جدول ۴-۱۰. نفوذ نانوذره در آهن تحت فشارهای متفاوت

350 MPa	500 MPa	650 MPa	
۰/۱۶	۱/۸۶	۳/۸۱	نفوذ نانوذره در دوسطح (nm)

شکل ۴-۲۹ نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش را برای غلتش نانو ذره در سه فشار متفاوت نمایش می‌دهد. همانطور که در نتایج سایر شبیه‌سازی‌ها گزارش شده بود، در تحقیق حاضر نیز با افزایش فشار ضریب اصطکاک افزایش می‌یابد.



شکل ۲۹-۴. نمودار ضریب اصطکاک بر حسب لغزش برای سایش تحت فشارهای متفاوت

جدول ۴-۱۱ متوسط ضریب اصطکاک را تحت فشارهای متفاوت نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که کمترین ضریب اصطکاک متعلق کمترین فشار و بیشترین ضریب اصطکاک متعلق به بیشترین فشار است.

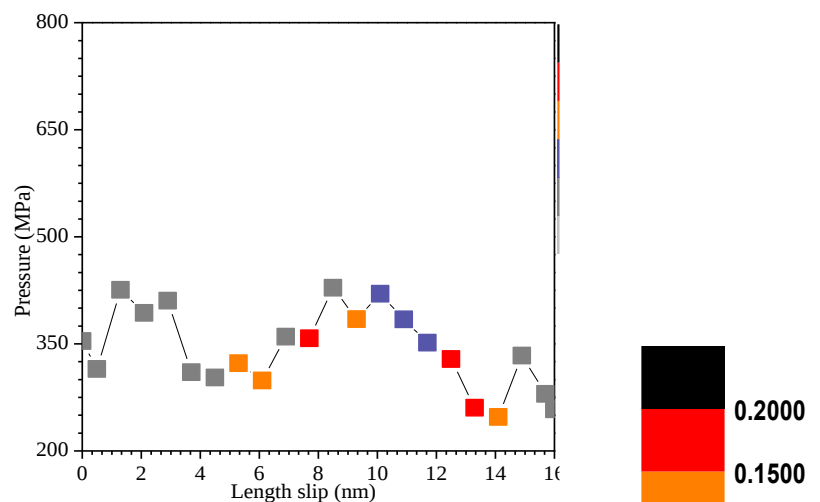
جدول ۴-۱۱. متوسط ضریب اصطکاک فرآیند سایش تحت فشار متفاوت

۳۵۰MPa	۵۰۰MPa	۶۵۰MPa	
۰/۰۶	۰/۰۷۴	۰/۱۳	متوسط ضریب اصطکاک

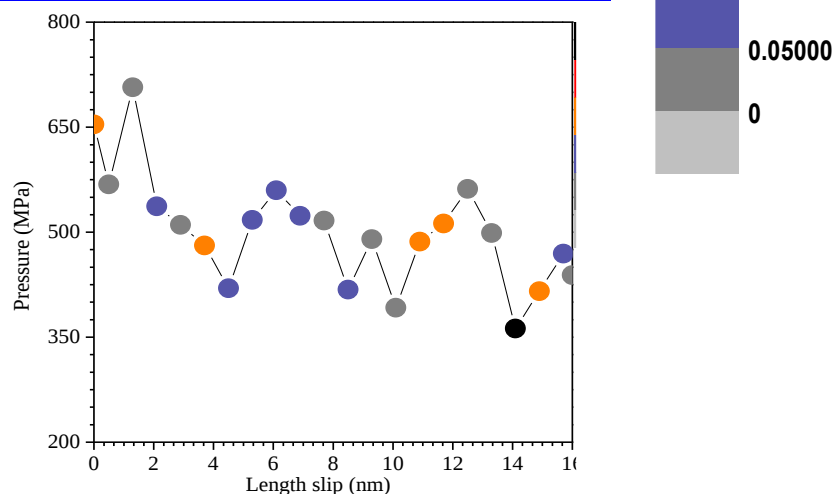
در شکل ۳۰-۴ با استفاده از نمودار فشار بر حسب طول لغزش، محدوده‌ی مربوط به تغییرات ضرایب اصطکاک و فشار را نمایش می‌دهند. در سمت راست، بازه‌ی تغییرات ضریب اصطکاک بر اساس طیف رنگی و مقدار نمایش داده شده است. همانطور که مشخص است پراکندگی رنگ‌های سرد در فشارهای ۳۵۰MPa و ۵۰۰MPa بیشتر از فشار ۶۵۰ MPa بوده است. تغییرات رنگ مختصات مشخص شده در نمودار فشار ۳۵۰MPa نشان می‌دهد که در محدوده‌ای که متوسط فشار آن به اندازه ۳۵۰MPa است دارای ضریب اصطکاکی در محدوده‌ی ۰/۲-۰/۲ است. که متوسط نوسانات آن مقدار ۰/۰۶ را برای ضریب اصطکاک نشان می‌دهد.

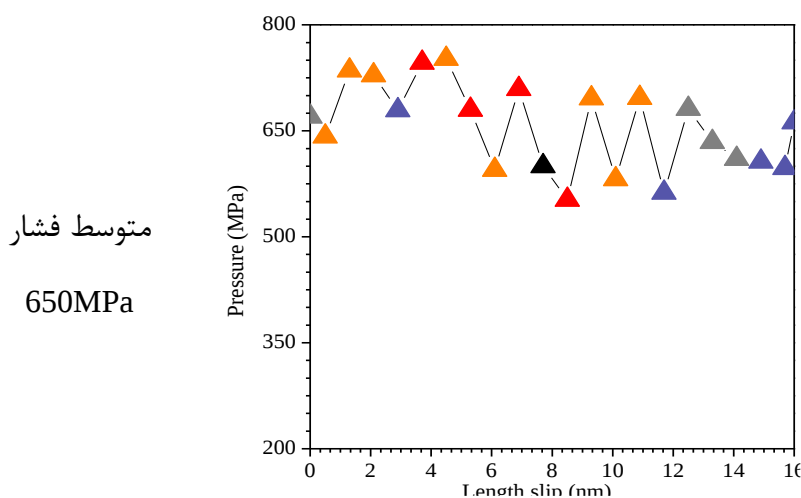
تغییرات رنگ مختصات مشخص شده در نمودار فشار ۵۰۰ MPa نشان می‌دهد که در محدوده‌ای که متوسط فشار آن به اندازه ۵۰۰ MPa است دارای ضریب اصطکاکی در محدوده‌ی ۰/۳-۰/۰۲ است. که متوسط نوسانات آن مقدار ۰/۰۷۴ را برای ضریب اصطکاک نشان می‌دهد و تغییرات رنگ مختصات مشخص شده در نمودار فشار ۶۵۰ MPa نشان می‌دهد که در محدوده‌ای که متوسط فشار آن به اندازه ۶۵۰ MPa است دارای ضریب اصطکاکی در محدوده‌ی ۰/۳-۰/۰۵ است. که متوسط نوسانات آن مقدار ۰/۱۳ را برای ضریب اصطکاک نشان می‌دهد. این شکل نشان می‌دهد در هر مرحله از محاسبه، چه فشاری به سیستم وارد آمده و همزمان نشان می‌دهد ضریب اصطکاک غلتشی در آن مرحله چه مقدار بوده است.

متوسط فشار
350MPa



متوسط فشار
500MPa





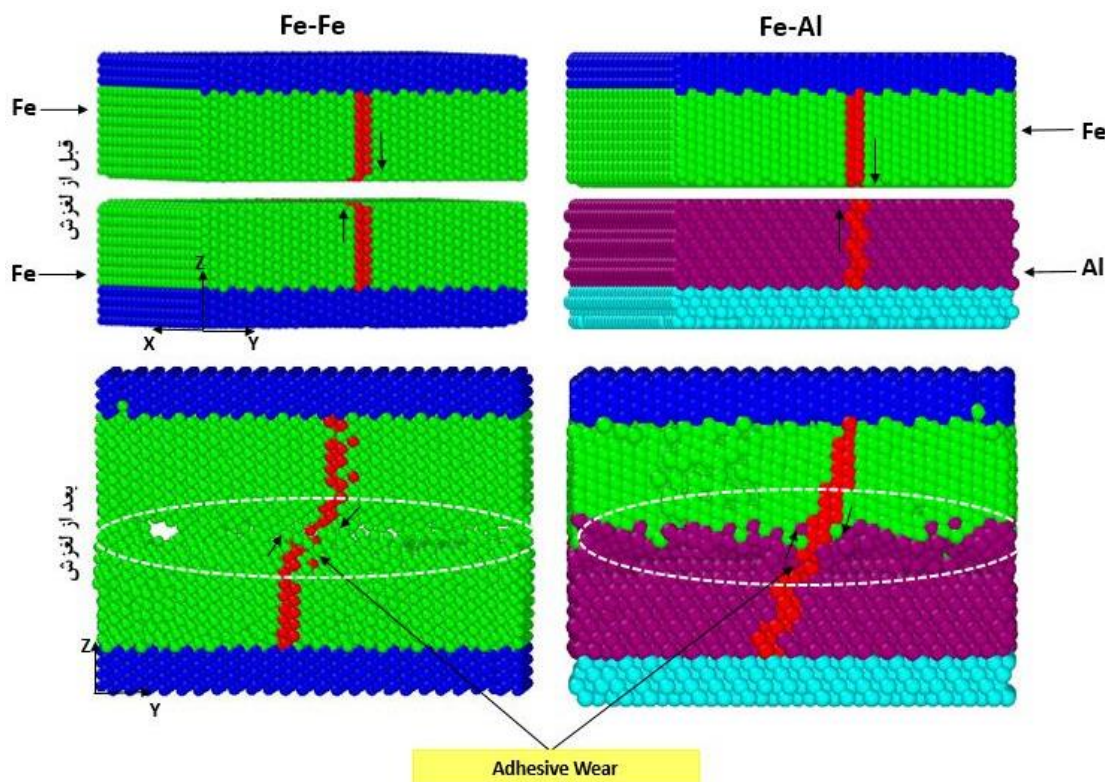
شکل ۴-۳۰. نمایش ضریب اصطکاک و فشار در هر مرحله از فرآیند سایش

با توجه به نمودار ضریب اصطکاک در شکل ۴-۲۹ و شکل ۴-۳۰، می‌توان نشان داد افزایش فشار باعث افزایش ضریب اصطکاک می‌شود.

۴-۴-۴ بررسی اثر جنس قطعه در فرآیند نانوسایش

سطوح لغزشی لزوماً از یک جنس یکسان نیستند و هر یک از سطوح با جنس‌های متفاوت، می‌توانند عملکرد متفاوتی در فرآیند سایش داشته باشند. برای بررسی اثر نانوروانکاری نانوذره الماس در فرآیند سایش فلزات با دو جنس متفاوت، یکبار دیگر شبیه‌سازی با دو جنس آلومینیوم و آهن انجام شد به این نحوه که بلوک پایین از جنس آلومینیوم و بلوک بالایی از جنس آهن در نظر گرفته شده است. مدل شکل ۴-۳۱ صفحات لغزشی بدون حضور نانوذره را قبل از شروع فرآیند و بعد از آن نمایش می‌دهند. در این شکل، تصویر سمت راست مربوط به دو بلوک از جنس‌های متفاوت آهن و آلومینیوم و تصویر سمت چپ مدل مربوط به دو بلوک از جنس آهن است. نوارهای قرمز رنگ در هر دو تصویر به عنوان نشانگر عمل می‌کنند و نشان می‌دهند که بعد از اتمام فرآیند سایش لغزشی در هر دو تصویر سمت چپ

و راست سایش از نوع چسبان اتفاق افتاده است و سطوح اصطکاک بالا و پایین کاملاً به هم چسبیده و اتم‌های یکدیگر را جدا کرده و با خود در مسیر حرکت حمل کردند.



شکل ۳-۴. مدل سایش لغزشی برای دو بلوک با جنس‌های آهن و آلومینیوم

جدول ۴-۱۲ مشخصات مربوط به مدل شبیه سازی لغزش در دو جنس قطعه کار متفاوت را نشان می‌دهد.

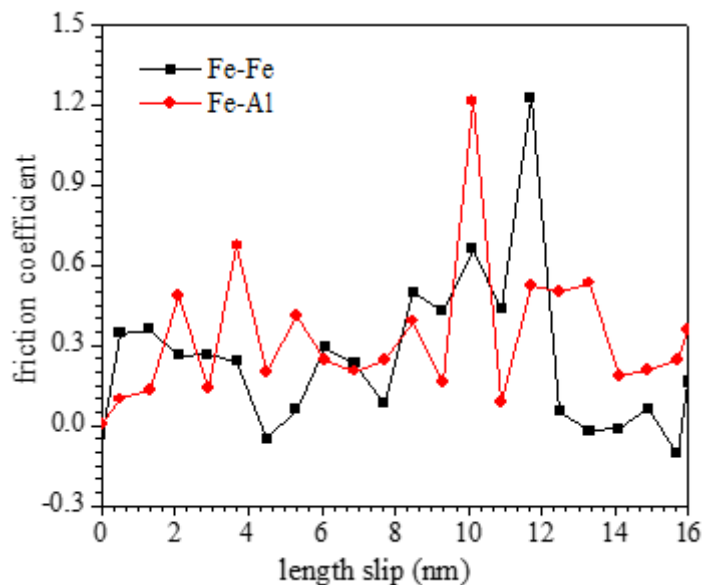
جدول ۴-۱۲. مشخصات مدل سایش لغزشی برای بررسی اثر جنس قطعه

ردیف	مدل سایشی	مشخصات	توابع پتانسیل
۱	دو سطح آهنی	مطابق جدول ۱-۴	EAM
		مطابق ۱-۴	EAM
۲	دو سطح با جنس آهن و آلومینیوم	مطابق جدول ۱-۴	EAM
		تک کریستال با ساختار FCC ثابت شبکه $a=0.3986 \text{ nm}$ ابعاد $8.61*8.61*2.97 \text{ nm}$	EAM

	تعداد اتم لایه‌های آزاد 9609 تعداد اتم‌های لایه‌های ثابت 3988 جهت گیری کریستالی (111) شرایط دمایی ثابت 300 K در جهت x و y شرایط مرزی متناوب طول لغزش 8 nm سرعت لغزشی ثابت 50m/s بار اعمالی به لایه‌های ثابت 500 MPa حرکت اتمی غیر صلب		
--	---	--	--

پارامترهای مربوط به توابع پتانسیل بکار رفته در مدل سایش لغزشی با دو جنس متفاوت آهن و آلومینیوم در مرجع [۲۳] تعیین شده‌اند.

شکل ۳۲-۴ نمودار ضریب اصطکاک لغزشی برای لغزش دو بلوک آهن روی هم و لغزش بلوک آهن روی آلومینیوم را نشان می‌دهد. بر اساس نتایج حاصل از نمودار ضریب اصطکاک در لغزش دو سطح آهنی کمتر از ضریب اصطکاک لغزشی دو سطح با جنس‌های آهن و آلومینیوم است.



شکل ۳۲-۴. مقایسه نمودار ضریب اصطکاک لغزشی برای دو بلوک آهنی و دو بلوک با جنس‌های آهن و آلومینیوم

جدول ۱۳-۴ متوسط ضریب اصطکاک لغزشی برای سطوح لغزشی آهن-آهن و آهن-آلومینیوم را

نشان می‌دهد.

جدول ۱۳-۴. متوسط ضریب اصطکاک لغزشی آهن-آهن و آهن-آلومینیوم

متوسط ضریب اصطکاک	
۰/۲۴	Fe-Fe
۰/۳۳	Fe-Al

شکل ۳۳-۴ مدل مربوط به غلتش نانوذره الماس بین دو بلوک آهن-آهن و آهن-آلومینیوم را نمایش

می‌دهد. در این شکل دو تصویر بالا مربوط به سیستم قبل از شروع فرآیند است و دو تصویر پایین،

سیستم شبیه را بعد از اتمام فرآیند نشان می‌دهد. نشانگرهای قرمز روی هر یک از سطوح وضعیت

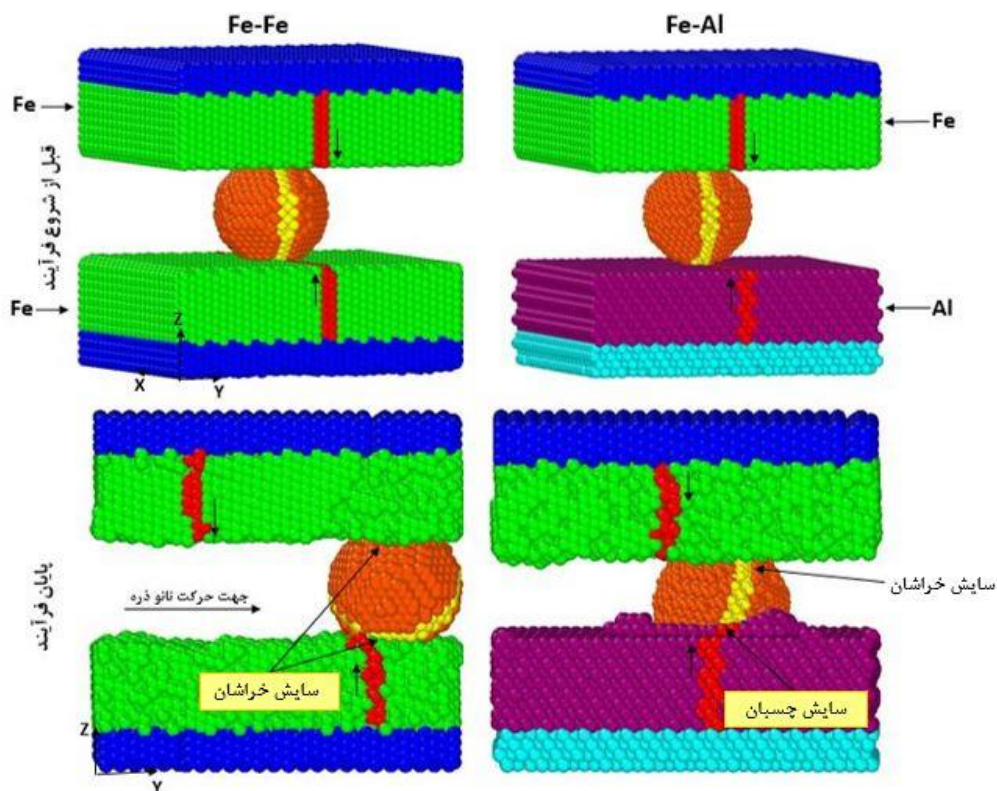
تغییر شکل ایجاد شده به هر یک از بلوک‌های بالا و پایین را مشخص می‌کند. قبل از شروع فرآیند

نشانگرها در راستای عمود بر سطح xy هستند و بعد از حرکت لغزش هر یک از سطوح، تقریباً راستای

عمود بر سطح خود را حفظ کرده‌اند. این نشان‌دهنده آن است که در حضور نانوذره و در طی لغزش هر

یک از بلوک‌ها دو سطح با هم برخورد نداشته و نیروی اصطکاک خیلی کمتری نسبت به حالت لغزش

متحمل می‌شوند و این اصطکاک از طریق غلتش نانو ذره به اصطکاک غلتشی تبدیل شده است. در مدل سایش مربوط به دو بلوک آهنی همراه با نانوذره، نانوذره با غلتش رو به جلو در راستای مثبت محور y ، منجر به سایش خراشان می‌شود و در مدل سایش مربوط به بلوک آهن و آلومینیوم همراه با نانوذره، بین نانوذره و آهن سایش خراشان و بین نانوذره و آلومینیوم سایش چسبان رخ داده است.



شکل ۴-۳۳. مدل سایش غلتشی برای دو بلوک آهنی و دو بلوک آهن و آلومینیوم

جدول ۴-۱۴ مشخصات مربوط به مدل شبیه سازی غلتش نانوذره بین دو سطح آهن-آهن و دو سطح آهن-آهن-آلومینیوم را نشان می‌دهد.

جدول ۱۴-۴. مشخصات مدل سایش غلتشی با دو بلوک آهن و آلومینیوم

ردیف	اجزای فرآیند سایش	جنس	مشخصات	تابع پتانسیل
۱	بلوک اصطکاکی بالا	آهن	مطابق جدول ۱-۴	EAM
۲	بلوک اصطکاکی پایین	آلومینیوم	مطابق جدول ۱۳-۴	EAM
۳	نانوذره	الماس	مطابق جدول ۱-۴	Tersoff

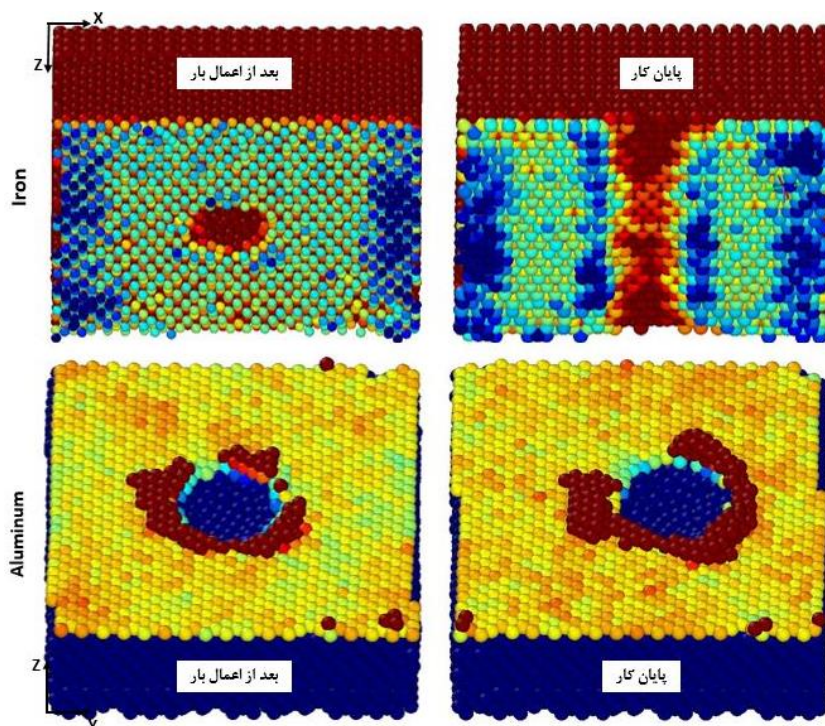
جدول ۱۵-۴. ثوابت توابع پتانسیل بکار رفته در سایش غلتشی با دو سطح اصطکاکی غیر هم جنس را نشان می‌دهد.

جدول ۱۵-۴. ثوابت توابع پتانسیل بکار رفته در سایش غلتشی با دو سطح اصطکاکی آهن و آلومینیوم

برهمکنش	تابع پتانسیل	پارامترها
Al-Al, Fe-Al, Fe-Fe	EAM	تعیین شده در [۲۳] برای اتم آهن-آهن، آهن-آهن-آلومینیوم و آلومینیوم-آلومینیوم
Al-C	Morse	$r_0(nm) = 0.22$ $\alpha(nm^{-1}) = 0.278$ $D(ev) = 0.28$
Fe-C	Lennard-Jones	$\varepsilon(ev) = 0.02495$ $\sigma(nm) = 0.37$
C-C	Tersoff	$A=1393.6ev$ $B=346.7ev$ $C=38049$ $D=0.015nm$ $d=4.3484$ $R=0.195nm$ $\mu = 1$ $\beta = 0.00000015724$ $\gamma_1 = 0.34879 nm^{-1}$ $\gamma_2 = 0.22119 nm^{-1}$ $\gamma_3 = 0.0 nm^{-1}$ $n=0.72751$ $m=3$ $\cos(\theta_0) = -0.57058$

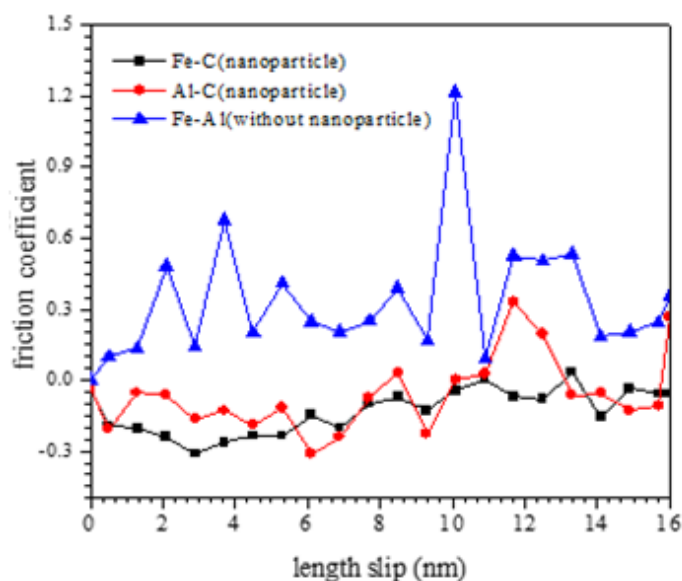
باتوجه به سختی بدست آمده حاصل از آزمایش تجربی سختی سنجی ویکرز^۱، مقدار سختی برای فلز آهن ۰/۶۰۸ Gpa و مقدار سختی برای فلز آلومینیوم ۰/۱۶۷ Gpa گزارش شده است [۶۶]. از آنجا که آلومینیوم فلز نرم‌تری نسب به آهن است، انتظار می‌رود در طی فرآیند سایش، نانو ذره، نفوذ بیشتری در آلومینیوم نسبت به آهن داشته باشد. شکل ۳۴-۴ نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سایش آهن و آلومینیوم، بعد از اعمال بار ۵۰۰MPa و در پایان فرآیند لغزش سطوح اصطکاکی را نمایش می‌دهد. مشاهده می‌شود که بعد از اعمال فشار به لایه‌های صلب بالا، نانوذره مقداری درون آهن فرو رفته و یک گودال نه چندان عمیق در آن ایجاد می‌کند. از طرفی بعد از اعمال بار روی فلز آلومینیوم، نانوذره درون آلومینیوم نفوذ کرده و اثر عمیق‌تر و بزرگ‌تری نسبت به آهن ایجاد شده است. تصویر مربوط به پایان کار لغزش بلوک آهن نشان می‌دهد، نانوذره از طرق تبدیل فرآیند لغزش به غلتش، شیاری در کل طول قطعه بالا ایجاد کرده است. درحالی که در تصویر مربوط به پایان لغزش آلومینیوم اثری از شیاری روی سطح دیده نمی‌شود و گودال ایجاد شده بعد از اعمال بار در اندازه خود باقی است و فقط در اثر لغزش بلوک آلومینیوم در راستای شرایط مرزی متناوب، مکان آن تغییر کرده است. در اثر نفوذ نانوذره درون قطعه و محدود شدن حرکت نانوذره توسط اتم‌های آلومینیوم، نانوذره نمی‌تواند حرکت غلتشی داشته باشد و عملاً غلتش نانوذره صفر می‌شود و فقط با حفظ فاصله بین سطوح آهن و آلومینیوم مانع از برخورد آن دو شده و مانع از ایجاد اصطکاک لغزشی می‌شود.

^۱ Vickers



شکل ۳۴-۴. تغییر شکل سطوح آهن و آلومینیوم در اثر سایش

شکل ۳۵-۴ نمودار ضریب اصطکاک بین آهن-نانوذره، آلومینیوم-نانوذره و آهن و آلومینیوم بدون حضور نانوذر را نمایش می‌دهد. همانطور که مشخص است ضریب اصطکاک در حضور نانوذر بین سطوح آهن و آلومینیوم بسیار کمتر از ضریب اصطکاک بین دو سطح آهن و آلومینیوم بدون حضور نانوذر است و این یعنی نانوذر باعث کاهش ضریب اصطکاک می‌شود.



شکل ۴-۳۵. نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش برای قطعه با دو جنس آهن و آلومینیوم

جدول ۴-۱۶ متوسط ضریب اصطکاک حاصل از نمودار شکل ۴-۳۵ و درصد تفاوت نسبت به زمانی که هیچ نانوذره‌ای وجود ندارد را نمایش می‌دهد.

جدول ۴-۱۶. متوسط ضریب اصطکاک در سایش با دو سطح آهنی و آلومینیومی

ضریب اصطکاک	درصد تفاوت نسبت به حالت بدون ذره	
۰/۰۵	۷۹	Fe-C
۰/۰۶	۸۱	Al-C

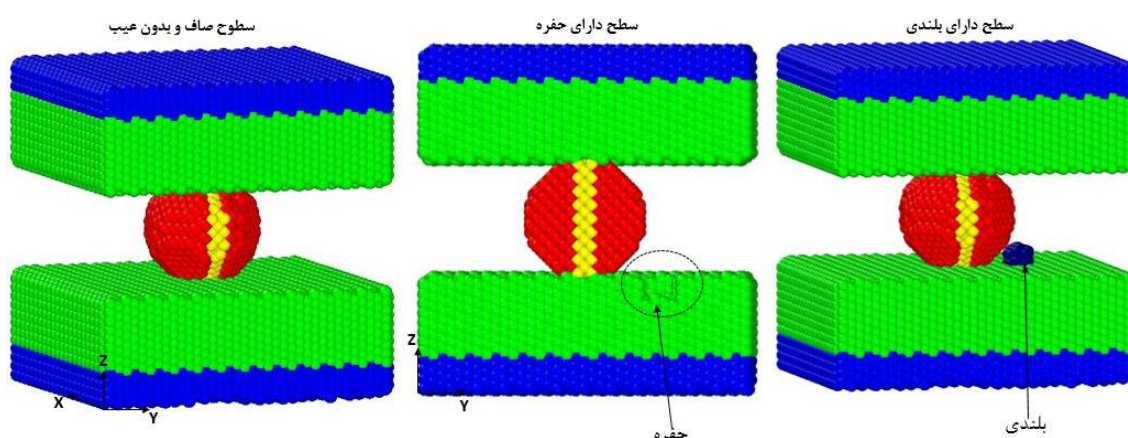
۴-۴-۵ بررسی اثر عیوب سطحی در فرآیند نانوسایش

زبری سطح به صورت انحرافات یک سطح حقیقی در جهت بردار نرمال، از مقدار ایده‌آل آن تعریف می‌شود. اگر مقدار این انحرافات زیاد باشد، سطح زبر است و اگر مقدار این انحرافات کوچک باشد، سطح صاف است [۶۱]. زبری سطح یکی از دلایل افزایش اصطکاک در قطعات صنعتی است. یکی دیگر از کاربردهای نانو ذرات برطرف کردن این ناصافی‌ها و بهبود اصطکاک است. هم‌چنین بلورهای جامدات کامل نیستند یعنی دارای عیوب شبکه کریستالی می‌باشند. از نظر کریستالوگرافی، کریستالی که دارای

ساختمان شبکه‌ای کاملاً منظم از تکرار سلول واحد باشد، کریستال ایده‌آل نامیده می‌شود و منظور از عیوب بلوری، بی‌نظمی شبکه‌ای است که ابعاد آن در محدوده قطر اتمی می‌باشد. در طبیعت ماده‌ای که تمام بلورهای آن بی‌نقص باشند وجود ندارد و همچنین خواص فیزیکی و مکانیکی برخی مواد به شدت تحت تأثیر حضور عیوب می‌باشد به‌طوری که این عیوب در پلاستیسیته، استحکام فلزات، هدایت الکتریکی نیمه‌رسانا، پس‌ماند مغناطیسی، مغناطیس‌های دائمی، هدایت الکتریکی فوق‌رسانا، استحکام در مقابل درجه حرارت‌های بالا، قابلیت هدایت حرارتی مواد سرامیکی کریستالی در درجه حرارت‌های پایین تأثیر قابل توجهی دارند و همچنین یکی از مهم‌ترین دلایل استحکام، وجود نواقص در ساختمان کریستالی تلقی می‌شود که البته این اثر همیشه مضر نیست و برخی ویژگی‌های خاص ماده اغلب به صورت عمدی و با استفاده از وارد کردن مقادیر کنترل شده از عیوب خاص ایجاد می‌گردند.

در این بخش به بررسی اثر هر یک از این ناصافی‌ها یعنی وجود برجستگی روی سطح بلوک پایین و وجود حفره روی سطح آن پرداخته می‌شود.

شکل ۳۶-۴ مدل سیستم شبیه‌سازی را در حالت‌های سطح صاف بدون عیب، سطح دارای حفره و سطح دارای پلندی نمایش می‌دهد. از آنجا که در مدل عیب حفره، حفره درون قطعه قرار دارد، برای نمایش بهتر، برشی از وسط سیستم در راستای x اعمال شده و نمای دو بعدی آن نمایش داده شده است.



شکل ۳۶-۴. مدل سایش با وجود عیوب سطحی

جدول ۱۷-۴ مشخصات مربوط به مدل شبیه سازی سایش با وجود عیوب سطحی روی قطعه کار

پایین را نمایش می دهد. توابع پتانسیل بکار رفته در این شبیه سازی همانند جدول ۲-۴ است.

جدول ۱۷-۴. مشخصات مدل در حالات قطعه با سطح صاف، دارای حفره و دارای برجستگی

ردیف	مدل سایش	اجزای فرآیند سایش	مشخصات	تابع پتانسیل
۱	سطح صاف بدون عیب	بلوک آهنی بالا	مطابق جدول ۱-۴	EAM
		بلوک آهنی پایین		
		نانوذره الماس	مطابق جدول ۱-۴	Tersoff
۲	سطح دارای حفره	بلوک آهنی بالا	مطابق جدول ۱-۴	EAM
		بلوک آهنی پایین	مطابق جدول ۱-۴ با این تفاوت که تعداد اتم ها ۱۳۰۲۰ است.	EAM
		نانوذره الماس	مطابق جدول ۱-۴	Tersoff
۳	سطح دارای برجستگی	بلوک آهنی بالا	مطابق جدول ۱-۴	EAM
		بلوک آهنی پایین	مطابق جدول ۱-۴ با این تفاوت که تعداد اتم ها ۱۳۰۹۴ است.	EAM
		نانوذره الماس	مطابق جدول ۱-۴	Tersoff

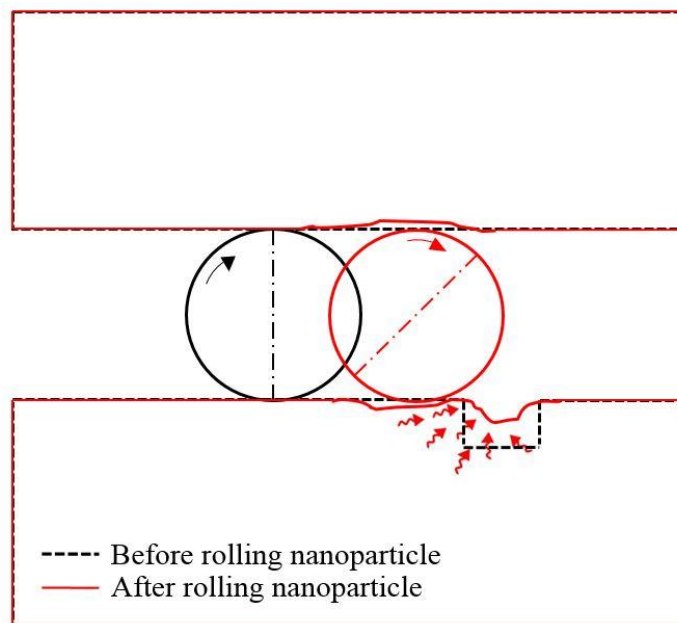
شکل ۳۷-۴ شماتیکی از فرآیند سایش با نانوذره و در حضور یک حفره روی بلوک پایین را نشان

می دهد. خطوط سیاه، قبل از شروع لغزش و خطوط قرمز بعد از لغزش را نمایش می دهند. خط چین

روی نانوذره حرکت غلتشی و به سمت حفره نانوذره را مشخص می کند. با حرکت نانو ذره به طرف

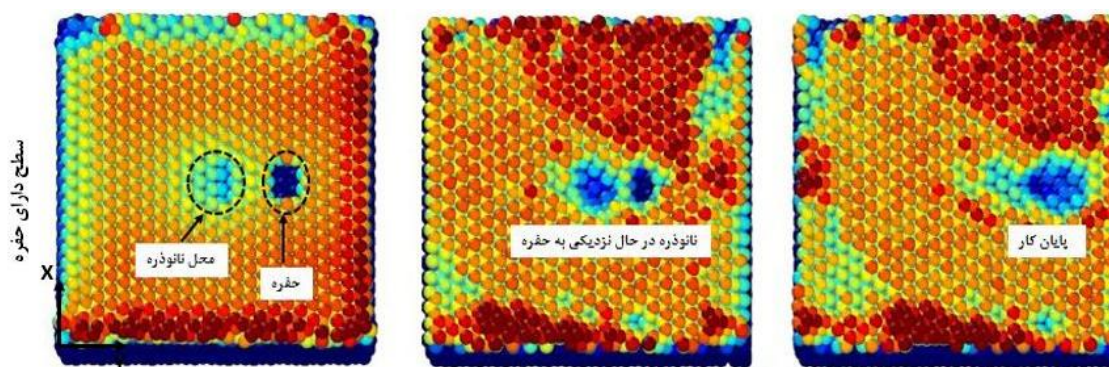
تورفتگی ، اتم های اطراف تو رفتگی به سمت یکدیگر نزدیک شده و سعی در پر کردن تو رفتگی دارند

که این باعث بهبود صافی سطح می شود.



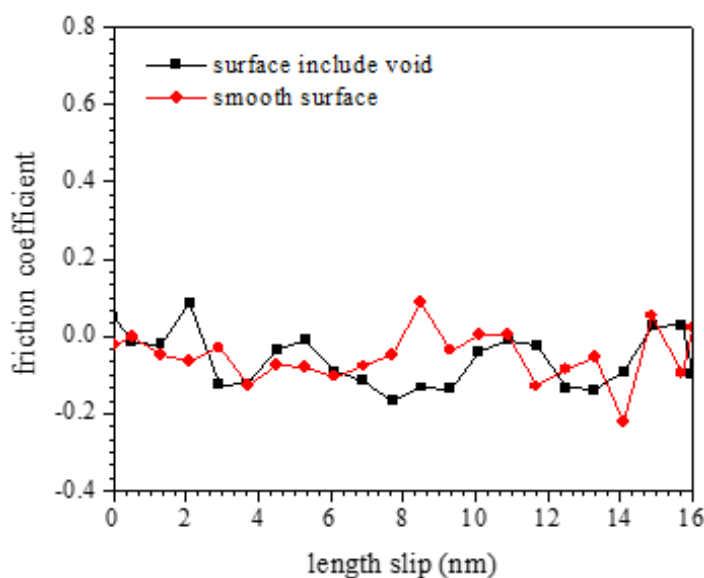
شکل ۳۷-۴. شماتیک سایش با وجود حفره در قطعه پایین

شکل ۳۸-۴ تصویر دینامیک مولکولی سایش در حضور حفره روی سطح را نشان می‌دهد. طبق شکل، در شروع فرآیند نانوذره با فاصله‌ای نسبت به حفره روی سطح قرار دارد (تصویر سمت چپ). با شروع حرکت صفحات لغزشی نانوذره به سمت حفره غلتیده و به آن نزدیک می‌شود (شکل وسط). در پایان فرآیند مشاهده می‌شود که حفره‌ای که در اثر حضور نانوذره روی قطعه بوده است در کنار حفره‌ی موجود در سطح قرار گرفته و موقعیتش در آنجا تثبیت می‌شود و حفره‌ای با طول بلندتر اما عمق کمتر تشکیل داده است و دلیل آن حرکت اتم‌های اطراف حفره‌ی سطحی به سمت حفره بوده و لایه‌های زیرین حفره را پر کردند و سعی در از بین بردن حفره داشته‌اند. پس می‌توان گفت نانوذره با حرکت غلتشی خود توانسته حفره‌ی موجود در سطح را تا حد زیادی برطرف سازد و باعث بهبود کیفیت سطح شود.



شکل ۳۸-۴. تغییر شکل ناشی از ساییش در سطح دارای حفره

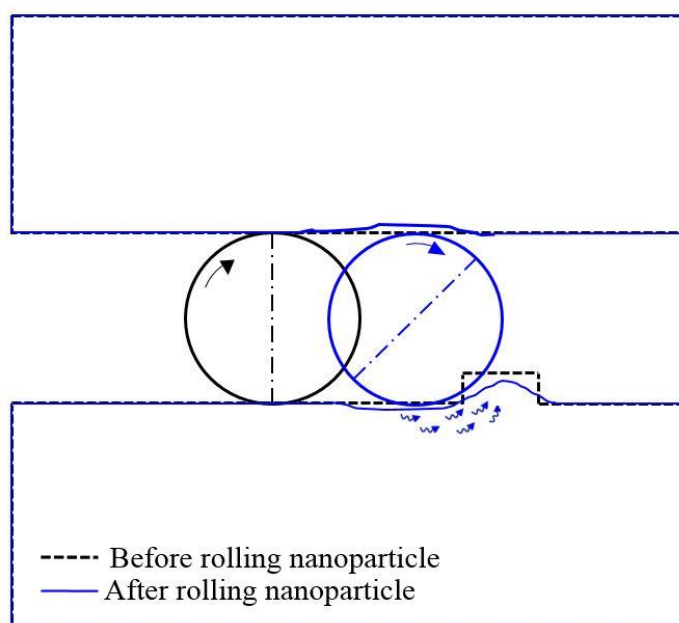
شکل ۳۹-۴ نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش را برای ساییش در حضور حفره‌ی موجود در سطح نمایش داده آن را با نمودار ضریب اصطکاک ساییش روی سطح بدون عیب مقایسه می‌کند.



شکل ۳۹-۴. نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش

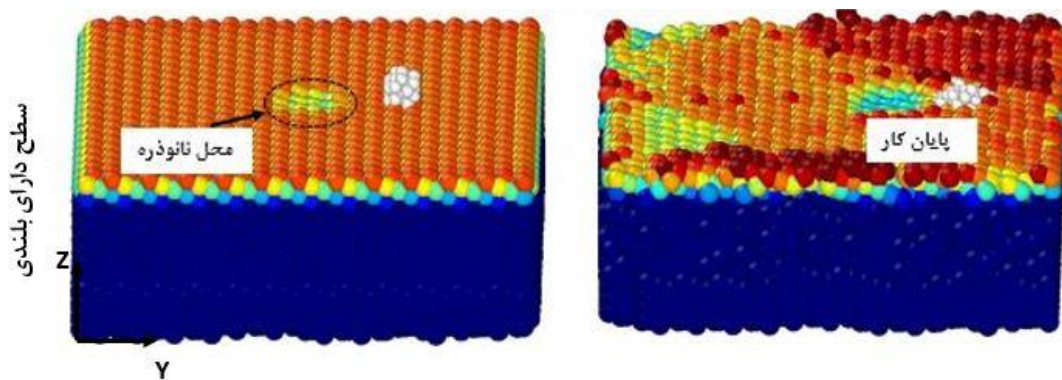
شکل ۴۰-۴ شماتیکی از فرآیند ساییش با نانوذره و در حضور یک برجستگی روی بلوک پایین را نشان می‌دهد. خطوط سیاه، قبل از شروع لغزش و خطوط آبی بعد از لغزش را نمایش می‌دهند. خط چین روی نانوذره حرکت غلتشی و به سمت حفره نانوذره را مشخص می‌کند. حرکت نانو ذره به طرف برجستگی، باعث شکسته شدن پیوند بین اتم‌های برجستگی شده و در اثر نیرویی که از طرف نانوذره به برجستگی اعمال می‌شود، برجستگی متلاشی شده و از شدت آن کم می‌شود و اتم‌های حاصل از

خورد شدن برجستگی، روی سطح قطعه پخش می‌شوند و این باعث بهبود کیفیت سطح می‌شود.



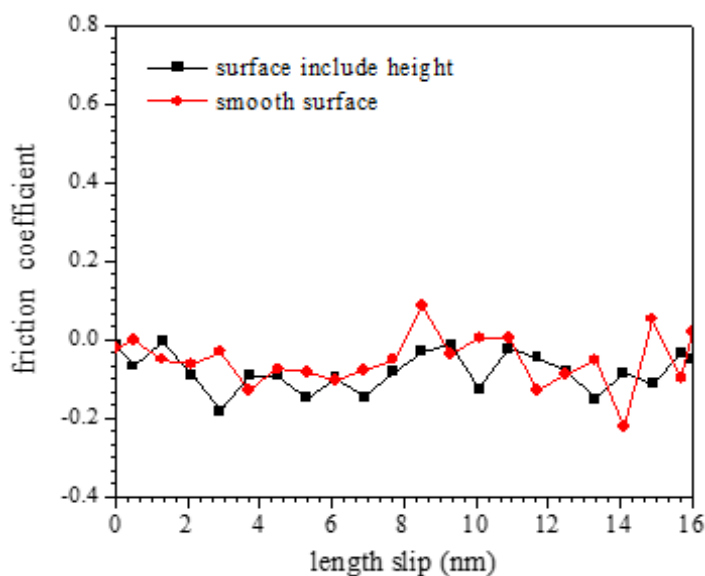
شکل ۴۰-۴. شماتیک سایش با وجود برجستگی در قطعه پایین

شکل ۴۰-۴ تصویر دینامیک مولکولی سایش در حضور برجستگی روی سطح را نشان می‌دهد. طبق شکل، در شروع فرآیند نانوذره با فاصله‌ای نسبت به برجستگی روی سطح قرار دارد (تصویر سمت چپ). با شروع حرکت صفحات لغزشی نانوذره به سمت حفره غلتیده و به آن نزدیک می‌شود و در پایان فرآیند مشاهده می‌شود که حفره‌ای که در اثر حضور نانوذره روی قطعه بوده است در کنار برجستگی موجود در سطح قرار گرفته و از شدت برجستگی موجود در سطح کاسته شده و پیوند منظم بین اتم‌های آن شکسته شده است. نانو ذره بعد از رسیدن به برجستگی، دیگر حرکت رو به جلو نداشته و در سر جای خود با حفظ فاصله‌ی سطوح به بهبود اصطکاک بین سطوح کمک می‌کند. می‌توان گفت نانوذره با حرکت غلتشی خود توانسته برجستگی موجود در سطح را تا حد زیادی برطرف ساخته و باعث بهبود کیفیت سطح شده است.



شکل ۴-۴۱. تغییر شکل ناشی از سایش در سطح دارای برجستگی

شکل ۴-۴۲ نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش را برای سایش در حضور برجستگی موجود در سطح نمایش داده آن را با نمودار ضریب اصطکاک سایش روی سطح بدون عیب مقایسه می کند.



شکل ۴-۴۲. نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش

جدول ۴-۱۸ متوسط ضریب اصطکاک حاصل از سایش نانو ذره روی سطوح صاف، دارای حفره و دارای برجستگی را نشان می دهد. همچنین نتایج نسبت به زمانی که هیچ نانوذره ای وجود ندارد را نمایش می دهد.

جدول ۴-۱۸. مشخصات مدل در حالات قطعه با سطح صاف، دارای حفره و دارای برجستگی

ضریب اصطکاک	درصد تفاوت نسبت به حالت بدون نانوذره	درصد تفاوت نسبت به سطح صاف	
سطح صاف	۰/۰۵	۷۹	۰
سطح دارای تورفتگی	۰/۰۶	۶۰	۱۶/۶
سطح دارای برجستگی	۰/۰۸	۷۳	۳۷/۵

۴-۵ جمع بندی نتایج

در فصل ۴ ابتدا تعریفی از فرآیند سایش ارائه شد. سپس به شناخت انواع سایش پرداخته شد و بعد از معرفی عوامل تاثیر گذار در سایش به شبیه سازی دینامیک مولکولی فرآیند نانوسایش با استفاده از دو بلوک آهنی و نانوذره الماس پرداخته شد. از آنجا که الماس ذره ای سخت با قدرت تحمل بار بالاست، با اعمال فشار (حداکثر تا ۶۵۰ MPa) نانو ذره کرومی ماند و تغییر شکل نداد. مشاهده شد که در طول لغزش سطوح، نانو ذره با تبدیل حرکت لغزشی به غلتشی باعث بهبود اصطکاک شد و ضریب اصطکاک از ۰/۲۴ به ۰/۰۵ کاهش یافت. اثر عوامل تاثیر گذاری از جمله: سرعت لغزش، دما، فشار، جنس قطعه کار و عیوب سطحی، به کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی بررسی شد و نتایج آن ارائه شد.

فصل ۵ : نتیجه گیری و ارائه پیشنهاد

۵-۱ نتیجه‌گیری

در سالیان اخیر با افزایش سرعت محاسبات رایانه ای و تمایل به توسعه و تحقیقات در ابعاد نانو، شبیه سازی دینامیک مولکولی کاربرد وسیعی در پژوهش‌ها پیدا کرده است. این شبیه سازی‌ها از یک طرف می‌تواند باعث صرفه جویی در هزینه‌ی آزمایشات و زمان شود و از طرف دیگر اطلاعات زیادی از ریز ساختار و مکانیزم‌های عملکردی را در اختیار محققان قرار می‌دهد.

این تحقیق به مطالعه اثر تریبولوژیکی نانو ذره در روغن موتور بنزینی پرداخت. در این تحقیق ابتدا با جستجوی منابع علمی معتبر و بررسی امکانات تولیدی صنایع روغن ساز داخل کشور، نانو ذره‌ی الماس، بعنوان افزودنی برای روغن موتور بنزینی انتخاب شد. سپس فرایند سایش سطوح درگیر در موتور با استفاده از روش‌های دینامیک مولکولی شبیه سازی شد تا مکانیزم اثرگذاری نانو ذره در روغن بدست آید. اما قبل از آن به جهت تعیین اعتبار توابع پتانسیل و نیروهای مورد استفاده در شبیه سازی، دو مقاله‌ی علمی و پژوهشی در حوزه‌ی نانودندانه‌گذاری انجام شد تا از درست بودن توابع بکار رفته در شبیه سازی نهایی اطمینان حاصل شود.

در ادامه، اثر کارکرد نانوذره الماس در سرعت‌های لغزش متفاوت سطوح، دماهای متفاوت، فشار متفاوت، جنس قطعه کار متفاوت و در سطوحی دارای نقص، با استفاده از روش دینامیک مولکولی مطالعه شد.

۵-۱-۱ شبیه‌سازی فرآیند نانوفروروندگی با استفاده از روش دینامیک مولکولی

هسته اصلی روش دینامیک مولکولی تعریف توابع پتانسیل بین اتمی است که بتواند رفتار ماده را با دقت بالا مدل کند. لذا قبل از شبیه سازی فرآیند نانو سایش، فرآیند نانو فروروندگی نیکل و سیلیکون انجام شد تا توابع پتانسیل لازم در فرآیند نانو سایش در آن استفاده شود و به کمک مقالات

تحقیقاتی در این زمینه صحنه‌گذاری شود. در تمام تحقیقات صورت گرفته در حوزه‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، از ابزار صلب برای دندان‌گذاری استفاده می‌شود اما با توجه به شباهت مکانیزم نانوذره روانکار و ابزار فرورونده و از آنجا که باید اثر تغییر شکل نانوذرات در سایش بررسی شود، نیاز بود تا اثر تغییر شکل ابزار در نانودندان‌گذاری تحلیل شود تا صحنه‌گذاری بدرستی انجام گیرد. در شبیه‌سازی نانوفروروندگی فلز نیکل و سیلیکون، توابع پتانسیل EAM، لناردجونز، مورس و ترسوف که در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند نانوسایش استفاده شد و با مقالات به چاپ رسیده در این زمینه تعیین اعتبار شد. براساس نتایج، نمودار نیرو برحسب جابجایی و سختی بر حسب جابجایی فلز نیکل مطابقت خوبی با نمودار نیرو برحسب جابجایی و سختی برحسب جابجایی مقاله مرجع داشت. نتایج نشان داد در هر دو مورد با استفاده از ابزار غیر صلب، سختی بدست آمده، کمتر از وقتی است که ابزار صلب در نظر گرفته شود. درصد تفاوت سختی سیلیکون با استفاده از ابزار صلب و غیر صلب ۱۲/۹ درصد، و برای نیکل ۳/۶ درصد گزارش شد.

۲-۵ بررسی عوامل تاثیر گذار در نانوسایش با استفاده از شبیه-

سازی دینامیک مولکولی

مکانیزم نانوذره در فرآیند سایش: در فصل ۱ وظایف و نقش نانوذرات در روانکارها و بهبود خواص روانکاری و سایشی بیان شد. نانوذره‌ی الماس بعنوان مهم‌ترین نانوذره در بهبود خواص روانکاری شناخته می‌شود. نانوذره الماس با ساختار کریستالی مکعب الماسی از کربن تشکیل شده است که بعنوان نانوذره-ای سخت در صنعت شناخته می‌شود. از آنجا که الماس دارای شکل هندسی کروی است، افزودن آن به روغن پایه باعث می‌شود بین سطوح درگیر اصطکاکی فاصله ایجاد کند و از تماس مستقیم آنها جلوگیری کند که این موضوع می‌تواند تا حد قابل توجهی منجر به کاهش ضریب اصطکاک بین سطوح شود. نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند سایش که با استفاده از دو بلوک آهنی و یک

نانوذره (الماس) صورت گرفت، نشان داد بعد از اعمال فشار به بلوک اصطکاکی بالا و شروع حرکت صفحات لغزشی، نانوذره شروع به غلتیدن می‌کند و نقش بلبرینگ بین سطوح را ایفا می‌کند و با این کار حرکت لغزشی صفحات اصطکاکی به حرکت غلتشی نانوذره تبدیل شده و ضریب اصطکاک لغزشی به ضریب اصطکاک غلتشی تبدیل شده و کاهش چشم‌گیری پیدا می‌کند.

عوامل مختلفی در یک تریبوسیستم تاثیرگذارند که در این پایان نامه اثر برخی از آنها از جمله: سرعت لغزش سطوح اصطکاکی، دمای فرآیند، فشار وارد بر سطح، جنس قطعه و عیوب سطحی قطعه، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی شد.

تاثیر سرعت لغزش در فرآیند نانوسایش: نتایج حاصل از شبیه‌سازی سایش در سرعت‌های لغزشی متفاوت 200 m/s ، 100 و 50 نشان داد، وقتی سرعت حرکت صفحات کم باشد مانع از شناوری روانکار شده و نانوذره در سرعت کم بخش کوچکی از طول قطعه را می‌پیماید یا اینکه زمان بیشتری صرف غلتیدن در کل طول قطعه دارد ازین رو برای بالا رفتن سرعت محاسبات باید سرعت‌های بالا نیز بررسی میشد. اتم‌های سطح اصطکاک فرصت کافی برای کنار هم قرارگیری و چسبندگی پیدا می‌کنند. مطالعه و بررسی مقالات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در زمینه نانوسایش نشان داد در حضور نانوذره و در شرایط دمایی متغیر، دمای فرآیند در مرحله‌ی لغزش ثابت می‌ماند ازین رو در این پایان نامه شرایط دمایی ثابت اعمال شده است تا بتوان تاثیر سرعت‌های بالاتر (200 m/s) را بررسی کرد. مشاهده شد که با افزایش سرعت لغزشی، ضریب اصطکاک کاهش می‌یابد.

تاثیر دما در فرآیند نانوسایش: بمنظور بررسی اثر دما در فرآیند نانوسایش، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانوسایش سه مرتبه و در دماهای ثابت 300 K ، 400 و 500 انجام شد. افزایش دما باعث افزایش انرژی درونی اتم‌های تشکیل دهنده سیستم شده و اتم‌های قطعه سعی بر خارج شدن از حجم خود را دارند ازین رو حجم سیستم ثابت و بدون تغییر در نظر گرفته شده است. نتایج نشان می‌دهد، در دمای بالاتر ضریب اصطکاک سطح بیشتر است و نانوذره مسیر کمتری از طول قطعه کار را می‌پیماید که دلیل آن می‌تواند سایش چسبان ناشی از افزایش دما باشد. اتم‌های بهم چسبیده در مسیر حرکت

نانوذره قرار گرفته و مانع از پیشروی آن می‌شوند.

تاثیر فشار در فرآیند نانوسایش: جهت بررسی اثر فشار وارد بر سطح در فرآیند نانوسایش، شبیه-سازی‌ها در سه فشار متفاوت ۶۵۰ MPa، ۵۰۰ و ۳۵۰ انجام شد. بر اساس نتایج بدست آمده در فشار ۳۵۰ MPa نانوذره نفوذ کمتری در قطعه می‌کند و اثر بجای مانده حاصل از غلتش نانوذره روی سطح کم عمق است و با افزایش فشار تا ۶۵۰ MPa، نانوذره بیشترین نفوذ در قطعه را دارد به نحوی که اتم‌های آهن اطراف نانوذره مانع از حرکت غلتشی رو به جلوی نانو ذره می‌شوند و در این مرحله نانوذره با حفظ فاصله بین دو سطح در بهبود اصطکاک نسبت به حالتی که نانوذره‌ای نباشد تاثیر می‌گذارد. طبق نتایج با افزایش فشار ضریب اصطکاک افزایش یافت.

تاثیر جنس قطعه کار در فرآیند نانوسایش: سطوح اصطکاکی همیشه از جنس یکسان نیستند. به منظور بررسی اثر جنس سطوح سایشی در فرآیند سایش، فرآیند یک بار دیگر با دو جنس متفاوت انجام شد. در این شبیه سازی بلوک بالایی از آهن و بلوک پایین از آلومینیوم انتخاب شد. نتایج نشان می‌دهد بعد از اعمال بار نانوذره درون آلومینیوم نفوذ کرده و گیر می‌افتد و بین اتم‌های آلومینیوم و نانوذره سایش از نوع چسبان همراه خراشان رخ می‌دهد اما در مورد آهن، چسبندگی ایجاد نشده و سایش از نوع خراشنده است. نتایج نشان می‌دهد وقتی دو بلوک اصطکاکی از جنس یکسان آهن بودند، ضریب اصطکاک کمتر از سایش با دو بلوک آهن و آلومینیوم شد.

تاثیر عیوب سطحی در فرآیند نانوسایش: سطوح فلزی صاف نیستند و دارای عیوب سطحی مانند حفره و برجستگی هستند. بمنظور بررسی اثر عیب سطح، شبیه سازی یک مرتبه با حضور یک حفره روی سطح پایین و یک مرتبه با حضور یک برجستگی روی سطح پایین انجام شد. نتایج نشان می‌دهد با شروع حرکت غلتشی نانوذره به سمت حفره و اعمال نیرو به اتم‌های نزدیک اطراف حفره به سمت حفره، آنها را به سمت حفره کشانده و حفره پر می‌شود و به این ترتیب میتواند در بهبود کیفیت سطح و نیز بهبود ضریب اصطکاک نسبت به زمانی که نانوذره‌ای نباشد اثرگذار باشد. با حرکت غلتشی نانوذره به طرف برجستگی موجود در سطح، پیوند اتم‌های برجستگی شکسته شده و اتم‌های آن از هم جدا

شدند و روی سطح قطعه توزیع شدند و نانوذره با رسیدن به برجستگی دیگر نتوانست از موقعیت خود جلوتر حرکت کند و در جای خود غلتش داشت و از این طریف در کاهش اصطکاک بین سطوح و بهبود کیفیت سطح تاثیر گذاشت. با این حال متوسط ضریب اصطکاک سطح صاف در حضور نانوذره کمتر از دو سطح دیگر در حضور نانوذره است.

۳-۵ پیشنهادها

نتایج این پایان نامه نشان می دهد که روش دینامیک مولکولی دارای قابلیت های ارزنده ای در زمینه مدل سازی فرایند نانوروانکاری و نانوسایش است و درک مناسبی از فرایندهای میکروسکوپی را در اختیار می گذارد که دسترسی به آن بصورت تجربی یا غیر ممکن است و یا اینکه هزینه بسیار زیاد را در بر دارد. در ادامه پیشنهاداتی جهت ادامه این پژوهش ارائه می شود.

- مدل سازی فرایند نانوسایش در مواد با خواص پیچیده تر از جمله فلزات آلیاژی، مواد ترد و یا مواد بی شکل که دارای توابع پتانسیل خاصی هستند و بدست آوردن مکانیزم سایش در آن ها.
- بررسی وضعیت سایش نانوذره در فرایند نانوسایش و بررسی مکانیزم های تخریب نانوذره و روش های استحکام بخشی آن.
- بررسی تاثیر عیوب نقطه ای مانند جاخالی ها و یا وجود رسوب ها در ماده قطعه کار در فرایند نانوسایش.

- مدل سازی قطعه کارهای چند کریستالی و بررسی تاثیر انواع مرزدانه ها در قطعه کار.
- پیاده سازی روش های طراحی آزمون و مطالعه آماری نتایج برای بدست آوردن تاثیر عوامل متقابل بر هم و همچنین فرموله کردن تاثیر هریک از پارامترهای نانوسایش.

- [1] Zin, V., Agresti, F., Barison, S., Colla, L., Mercadelli, E., Fabrizio, M. and Pagura, C., 2014. Tribological properties of engine oil with carbon nano-horns as nano-additives. *Tribology Letters*, 55(1), pp.45-53.
- [2] Choi, C., Jung, M., Choi, Y., Lee, J. and Oh, J., 2011. Tribological properties of lubricating oil-based nanofluids with metal/carbon nanoparticles. *Journal of nanoscience and nanotechnology*, 11(1), pp.368-371.
- [3] Battez, A.H., González, R., Viesca, J.L., Fernández, J.E., Fernández, J.D., Machado, A., Chou, R. and Riba, J., 2008. CuO, ZrO₂ and ZnO nanoparticles as antiwear additive in oil lubricants. *Wear*, 265(3-4), pp.422-428.
- [4] Laad, M. and Jatti, V.K.S., 2018. Titanium oxide nanoparticles as additives in engine oil. *Journal of King Saud University-Engineering Sciences*, 30(2), pp.116-122.
- [5] Ahmadi, H., Rashidi, A., Mohtasebi, S.S. and Alaei, M., 2013. Experimental evaluation of engine oil properties containing copper oxide nanoparticles as a nanoadditive. *International Journal of Industrial Chemistry*, 4(1), p.28.
- [6] Wan, Q., Jin, Y., Sun, P. and Ding, Y., 2014. Rheological and tribological behaviour of lubricating oils containing platelet MoS₂ nanoparticles. *Journal of Nanoparticle Research*, 16(5), p.2386.
- [7] Dardan, E., Afrand, M. and Isfahani, A.M., 2016. Effect of suspending hybrid nano-additives on rheological behavior of engine oil and pumping power. *Applied Thermal Engineering*, 109, pp.524-534.
- [8] Yu, H.L., Yi, X.U., Shi, P.J., Xu, B.S., Wang, X.L. and Qian, L.I.U., 2008. Tribological properties and lubricating mechanisms of Cu nanoparticles in lubricant. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 18(3), pp.636-641.
- [9] Chou, R., Battez, A.H., Cabello, J.J., Viesca, J.L., Osorio, A. and Sagastume, A., 2010. Tribological behavior of polyalphaolefin with the addition of nickel nanoparticles. *Tribology International*, 43(12), pp.2327-2332.
- [10] Ku, B.C., Han, Y.C., Lee, J.E., Lee, J.K., Park, S.H. and Hwang, Y.J., 2010. Tribological effects of fullerene (C₆₀) nanoparticles added in mineral lubricants according to its viscosity. *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing*, 11(4), pp.607-611.
- [11] Liu, G., Li, X., Qin, B., Xing, D., Guo, Y. and Fan, R., 2004. Investigation of the mending effect and mechanism of copper nano-particles on a tribologically stressed surface. *Tribology Letters*, 17(4), pp.961-966.
- [12] Rajendhran, N., Palanisamy, S., Periyasamy, P. and Venkatachalam, R., 2018. Enhancing of the tribological characteristics of the lubricant oils using Ni-promoted MoS₂ nanosheets as nano-additives. *Tribology International*, 118, pp.314-328.
- [13] Li, W., Zheng, S., Cao, B. and Ma, S., 2011. Friction and wear properties of ZrO₂/SiO₂ composite nanoparticles. *Journal of Nanoparticle Research*, 13(5), pp.2129-2137.
- [14] Hwang, Y., Lee, C., Choi, Y., Cheong, S., Kim, D., Lee, K., Lee, J. and Kim, S.H., 2011. Effect of the size and morphology of particles dispersed in nano-oil on

- friction performance between rotating discs. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 25(11), pp.2853-2857.
- [15] Chu, H.Y., Hsu, W.C. and Lin, J.F., 2010. The anti-suffing performance of diamond nano-particles as an oil additive. *Wear*, 268(7-8), pp.960-967.
- [۱۶] حسینی، س.و؛ وحدتی، م.؛ شبیه‌سازی فرایند ماشینکاری نانومتری و مطالعه اثر عیوب کریستالی با روش‌دینامیک مولکولی، رساله دکتری؛ دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی؛ شهریور ۱۳۹۱.
- [17] Haile, J.M., 1992. *Molecular dynamics simulation: elementary methods*. John Wiley & Sons, Inc.
- [18] Phillips, R. and Rob, P., 2001. *Crystals, defects and microstructures: modeling across scales*. Cambridge University Press.
- [19] Buehler, M.J., 2008. *Atomistic modeling of materials failure*. Springer Science & Business Media.
- [20] Rapaport, D.C. and Rapaport, D.C.R., 2004. *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge university press.
- [21] Daw, M.S. and Baskes, M.I., 1984. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Physical Review B*, 29(12), p.6443.
- [22] Foiles, S.M., Baskes, M.I. and Daw, M.S., 1986. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Physical review B*, 33(12), p.7983.
- [23] Atomic, L.S. and Simulator, M.M.P., 2003. *LAMMPS Users Manual*.
- [24] Zaoui, A., Pineau, A. and François, D., 1991. *Comportement mécanique des matériaux*, Tome: Elasticité et Plasticité
- [25] Poon, B., Rittel, D. and Ravichandran, G., 2008. An analysis of nanoindentation in linearly elastic solids. *International Journal of Solids and Structures*, 45(24), pp.6018-6033.
- [26] Cardarelli, F., 2008. *Materials handbook: a concise desktop reference*. Springer Science & Business Media.
- [27] Ziegenhain, G., Hartmaier, A. and Urbassek, H.M., 2009. Pair vs many-body potentials: Influence on elastic and plastic behavior in nanoindentation of fcc metals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 57(9), pp.1514-1526.
- [28] Fischer-Cripps, A.C., 2004. *Contact mechanics*. In *Nanoindentation* (pp.1-20). pringer, New York, NY.
- [29] Fang, T.H., Weng, C.I. and Chang, J.G., 2003. Molecular dynamics analysis of temperature effects on nanoindentation measurement. *Materials Science and Engineering: A*, 357(1-2), pp.7-12.
- [30] Peng, P., Liao, G., Shi, T., Tang, Z. and Gao, Y., 2010. Molecular dynamic simulations of nanoindentation in aluminum thin film on silicon substrate. *Applied Surface Science*, 256(21), pp.6284-6290.
- [31] Cheong, W.C.D. and Zhang, L.C., 2000. Molecular dynamics simulation of phase transformations in silicon monocrystals due to nano-indentation. *Nanotechnology*, 11(3), p.173.
- [32] Liu, C.L., Fang, T.H. and Lin, J.F., 2007. Atomistic simulations of hard and soft films under nanoindentation. *Materials Science and Engineering: A*, 452, pp.135-141.

- [33] Yaghoobi, M. and Voyiadjis, G.Z., 2014. Effect of boundary conditions on the MD simulation of nanoindentation. *Computational Materials Science*, 95, pp.626-636.
- [34] Walsh, P., Omeltchenko, A., Kalia, R.K., Nakano, A., Vashishta, P. and Saini, S., 2003. Nanoindentation of silicon nitride: A multimillion-atom molecular dynamics study. *Applied Physics Letters*, 82(1), pp.118-120.
- [35] Chocyk, D. and Zientarski, T., 2018. Molecular dynamics simulation of Ni thin films on Cu and Au under nanoindentation. *Vacuum*, 147, pp.24-30.
- [36] Lu, C., Gao, Y., Michal, G., Huynh, N.N., Zhu, H.T. and Tieu, A.K., 2009. Atomistic simulation of nanoindentation of iron with different indenter shapes. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part J: Journal of Engineering Tribology*, 223(7), pp.977-984.
- [37] Fang, T.H., Chang, W.J. and Fan, Y.C., 2010. Molecular dynamics of nanoindentation with conical carbon indenters on graphite and diamond. *Nano*, 5(04), pp.231-236.
- [38] Xu, S., Wan, Q., Sha, Z. and Liu, Z., 2015. Molecular dynamics simulations of nano-indentation and wear of the γ Ti-Al alloy. *Computational Materials Science*, 110, pp.247-253.
- [39] Goel, S., Faisal, N.H., Luo, X., Yan, J. and Agrawal, A., 2014. Nanoindentation of polysilicon and single crystal silicon: Molecular dynamics simulation and experimental validation. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47(27), p.275304.
- [40] Nair, A.K., Cordill, M.J., Farkas, D. and Gerberich, W.W., 2009. Nanoindentation of thin films: Simulations and experiments. *Journal of Materials Research*, 24(3), pp.1135-1141.
- [41] Reddy, K.V. and Pal, S., 2018. Analysis of deformation behaviour of Al–Ni–Co thin film coated aluminium during nano-indentation: a molecular dynamics study. *Molecular Simulation*, 44(17), pp.1393-1401.
- [42] Xu, C., Liu, C. and Wang, H., 2017. Incipient plasticity of diamond during nanoindentation. *RSC Advances*, 7(57), pp.36093-36100.
- [43] Imran, M., Hussain, F., Rashid, M. and Ahmad, S.A., 2012. Dynamic characteristics of nanoindentation in Ni: A molecular dynamics simulation study. *Chinese Physics B*, 21(11), p.116201.
- [44] Zhao, H., Zhang, P., Shi, C., Liu, C., Han, L., Cheng, H. and Ren, L., 2014. Molecular dynamics simulation of the crystal orientation and temperature influences in the hardness on monocrystalline silicon. *Journal of Nanomaterials*, 2014.
- [45] Kim, D.E. and Oh, S.I., 2006. Atomistic simulation of structural phase transformations in monocrystalline silicon induced by nanoindentation. *Nanotechnology*, 17(9), p.2259.
- [46] Lin, Y.H., Chen, T.C., Yang, P.F., Jian, S.R. and Lai, Y.S., 2007. Atomic-level simulations of nanoindentation-induced phase transformation in mono-crystalline silicon. *Applied Surface Science*, 254(5), pp.1415-1422.
- [47] Tan, C.M., Jeng, Y.R. and Chiou, Y.C., 2008. Atomistic Simulations of Nanoindentation on Cu (111) with a Void. In *Advanced Materials Research* (Vol. 33, pp. 919-924). Trans Tech Publications Ltd.
- [48] Yu, W. and Shen, S., 2009. Multiscale analysis of the effects of nanocavity on nanoindentation. *Computational Materials Science*, 46(2), pp.425-430.

- [49] Zhu, P., Hu, Y. and Wang, H., 2010. Atomistic simulations of the effect of a void on nanoindentation response of nickel. *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*, 53(9), pp.1716-1719.
- [50] J.A. Blackman, "Handbook of Metal Physics: Metallic Nanoparticles", 1st edition, Elsevier B.V., 2009.
- [51] Chang, W.Y., Fang, T.H., Lin, S.J. and Huang, J.J., 2010. Nanoindentation response of nickel surface using molecular dynamics simulation. *Molecular Simulation*, 36(11), pp.815-822.
- [52] Fischer-Cripps, A.C., 2004. Contact mechanics. In *Nanoindentation* (pp.1-20). Springer, New York, NY.
- [53] Alves, S.M., Mello, V.S., Faria, E.A. and Camargo, A.P.P., 2016. Nanolubricants developed from tiny CuO nanoparticles. *Tribology International*, 100, pp.263-271.
- [54] Padgurskas, J., Rukuiza, R., Prosyčevs, I. and Kreivaitis, R., 2013. Tribological properties of lubricant additives of Fe, Cu and Co nanoparticles. *Tribology International*, 60, pp.224-232.
- [55] Zhang, C., Zhang, S., Song, S., Yang, G., Yu, L., Wu, Z., Li, X. and Zhang, P., 2014. Preparation and tribological properties of surface-capped copper nanoparticle as a water-based lubricant additive. *Tribology Letters*, 54(1), pp.25-33.
- [56] Jiao, D., Zheng, S., Wang, Y., Guan, R. and Cao, B., 2011. The tribology properties of alumina/silica composite nanoparticles as lubricant additives. *Applied Surface Science*, 257(13), pp.5720-5725.
- [57] Ewen, J.P., Heyes, D.M. and Dini, D., 2018. Advances in nonequilibrium molecular dynamics simulations of lubricants and additives. *Friction*, 6(4), pp.349-386.
- [58] Hu, C., Bai, M., Lv, J., Wang, P. and Li, X., 2014. Molecular dynamics simulation on the friction properties of nanofluids confined by idealized surfaces. *Tribology International*, 78, pp.152-159.
- [59] Hu, C., Bai, M., Lv, J., Kou, Z. and Li, X., 2015. Molecular dynamics simulation on the tribology properties of two hard nanoparticles (diamond and silicon dioxide) confined by two iron blocks. *Tribology International*, 90, pp.297-305.
- [60] Chen, C.S., Cian, H.J., Yu, C.H. and Huang, C.W., 2014. Friction coefficient calculation and mechanism analysis for MoS₂ nanoparticle from molecular dynamics simulation. *Procedia Engineering*, 79, pp.617-621.
- [61] Chen, C.S., Cian, H.J., Yu, C.H. and Huang, C.W., 2014. Friction coefficient calculation and mechanism analysis for MoS₂ nanoparticle from molecular dynamics simulation. *Procedia Engineering*, 79, pp.617-621.
- [62] Zhai, C., Gan, Y., Hanaor, D., Proust, G. and Retraint, D., 2016. The role of surface structure in normal contact stiffness. *Experimental Mechanics*, 56(3), pp.359-368.
- [63] Hu, C., Lv, J., Bai, M., Zhang, X. and Tang, D., 2019. Molecular dynamics simulation of effects of nanoparticles on frictional heating and tribological properties at various temperatures. *Friction*, pp.1-11.
- [64] Foiles, S.M., Baskes, M.I. and Daw, M.S., 1986. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Physical review B*, 33(12), p.7983.

- [65] Daw, M.S. and Baskes, M.I., 1984. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Physical Review B*, 29(12), p.6443.
- [66] Shi, W., Zhao, H. and Luo, X., 2019. Effect of diamond nanoparticle on the friction property of sliding friction pair with molecular dynamics simulation. *IEEE Access*, 7, pp.51790-51798.
- [65] Ewen, J.P., Gattinoni, C., Thakkar, F.M., Morgan, N., Spikes, H.A. and Dini, D., 2016. Nonequilibrium molecular dynamics investigation of the reduction in friction and wear by carbon nanoparticles between iron surfaces. *Tribology Letters*, 63(3), p.38.
- [66] Samsonov, G.V., 2012. *Handbook of the Physicochemical Properties of the Elements*. Springer Science & Business Media.
- [67] Rabinowicz, E. and Tanner, R.I., 1966. *Friction and wear of materials*.

Abstract

Today, the lubrication industry has become an important part of the development of the machine industry and related industries. With the emergence of new issues such as optimization of consumption and conservation of non-renewable resources, as well as compliance with environmental requirements, the study of lubricants, especially in the field of nanotechnology has found a special place. Nano-engine oils are base oils containing added nanoparticles that can improve the tribological properties of engine oils. Diamond nanoparticles are one of the most important types of lubricant nanoparticles known in this field. The ability to understand nano-dimensional lubrication mechanisms using laboratory methods is very difficult and costly. Today, an alternative method of calculating molecular dynamics to better understand the phenomenon of lubrication and wear of nano-dimensional parts has been developed with the help of this application. The selection of the potential function as the most important simulation core has a significant effect on the wear mechanism and the forces acting on the workpiece and nanoparticles. Therefore, the validation of the molecular dynamics method has been done using the simulation of the nano indentation process. Based on the results of molecular dynamics simulation, the difference obtained in the nanoindentation simulation process with other studies is reported in the range of 10%.

The nano wearing process of the iron workpiece is simulated in the presence of diamond nanoparticles and the effective factors are investigated. Based on the obtained results, the use of diamond nanoparticles makes it possible to reduce the coefficient of friction from 0.24 to 0.05. The results showed that if the surface temperature can be kept constant by cooling, increasing the sliding speed of the surfaces will reduce the coefficient of friction. Increasing the temperature and load applied to the upper block increases the coefficient of friction between the nanoparticle and the workpiece. Molecular dynamics simulation of nanowear was performed for parts with two different materials, iron and aluminum. The results showed that the coefficient of friction in two pieces of iron is less than the coefficient of friction in two pieces of different materials. The reason for this is the softness of aluminum metal compared to iron, which causes high penetration of diamond particles into aluminum. Also in this dissertation, a preliminary study was done on the effect of the presence of post and surface prominence. Based on the results, it was observed that the surface that has a protrusion has the highest coefficient of friction and the surface that has a small surface cavity can have a smaller coefficient of friction. However, the presence of nanoparticles has a large difference in the coefficient of friction compared to the absence of nanoparticles.

Keywords: Nanolubrication, Nanoparticle, Engine oil, Nanowear, Molecular dynamics.



Shahrood University of Technology

Faculty of Mechanical and Mechatronic Engineering

M.Sc Thesis in Mechanical Engineering

Investigation the Effect of Nano Additive in Engine Oil on Friction Improvement Using Molecular Dynamics Simulation

By:Nafise Mahdiyar

Supervisor:
Dr. Seyed Vahid Hosseini

October,2020