

تأثیر دما و اکسیداسیون سطحی بر پارامترهای مختلف مکانیکی ورقهای نازک آلومینیومی

حسین عباسی و امیر رضائی صامتی* گروه مهندسی عمران، دانشکده مهندسی، دانشگاه بوعلی سینا، همدان، ایران

> (دریافت مقاله: ۱۴۰۲/۱۱/۰۱ – دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۲/۱۰/۱۸) DOI: 10.47176/jcme.43.1.1025

چکیده – ورقهای آلومینیومی با توجه به خواص ویژه خود از جمله چگالی پایین و شکل پذیری بالا دارای کاربردهای متنوع در صنایع مختلف هستند. با توجه به پیشرفتهای صورت گرفته در زمینه ساخت ورقهای آلومینیومی، در حال حاضر امکان تولید این قطعات با ضخامتهای بسیار پایین حتی در مقیاس نانو فراهم شده است. از این رو در این پژوهش به بررسی رفتار مکانیکی این مواد با استفاده از شبیهسازی عددی بر مبنای روش دینامیک مولکولی پرداخته میشود. با توجه به واکنش پذیری بالای آلومینیوم در مجاورت اکسیژن، مدلسازی اولیه بر اساس مدل هسته فلزی و پوسته اکسید فلزی صورت می پذیرد که در آن امکان بررسی تأثیر ضخامتهای مختلف لایه اکسید سطحی بر رفتار مکانیکی ورقهای نازک آلومینیومی امکان پذیر است. پس مورت می پذیرد که در آن امکان بررسی تأثیر ضخامتهای مختلف لایه اکسید سطحی بر رفتار مکانیکی ورقهای نازک آلومینیومی امکان پذیر است. پس از ایجاد ساختار اولیه، نمونهها تحت شرایط محیطی پایدارسازی شده و انرژی آنها کمینهسازی می شود. به منظور بررسی رفتار مکانیکی، نمونهها تحت آزمونهای مختلف مکانیکی ارزیابی شده و پارامترهای مختلف مکانیکی آنها کمینهسازی می شود. به منظور بررسی رفتار مکایکی نمونهها تحت می خواص ماده در دماهای مختلف اندازه گیری می شود. دقت مدلسازیهای صورت گرفته از شبیه سازی عددی با تایج آزمایشگاهی موجود صحتسنجی می شود. بر اساس نتایج عددی، روابطی تحلیلی برای تعیین پارامترهای صختلف مکانیکی ورقهای نازک آلومینیومی با ضخاسی از لایه می شود. بر اساس نتایج عددی، روابطی تحلیلی برای تعیین پارامترهای مختلف مکانیکی ورقهای نازک آلومینیومی با ضخامتهای مختلف از لایه می شود. بر اساس نتایج عددی، روابطی تحلیلی برای تعیین پارامترهای مختلف مکانیکی ورقهای نازک آلومینیومی با ضخامتهای

واژههای کلیدی: ورقهای نازک آلومینیوم، پارامترهای مکانیکی، روش دینامیک مولکولی، اثرات دما، تأثیر ضخامت لایه اکسید.

Impression of Temperature and Oxide Layer Thickness on the Mechanical Characteristics of Aluminum ultra-thin film

H. Abbasi and A. Rezaei Sameti*

Department of Civil Engineering, Faculty of Engineering, Bu-Ali Sina University, Hamedan, Hamedan, Iran

Abstract: Thin aluminum films have various applications in different industries because of their special properties, including low density and high ductility. Due to the progress in the manufacturing process, it is now possible to produce ultra-thin aluminum films with very low thickness, even on the nanoscale. This paper aims to numerically investigate the mechanical behavior of ultra-thin aluminum films using the molecular dynamics (MD) method. Because of the high reactivity of aluminum in the vicinity of oxygen, the representative volume elements (RVEs) of the aluminum film are simulated based on the aluminum core-alumina shell model to study the effect of different thicknesses of the surface oxide layer. In order to stabilize the atomistic RVEs under environmental conditions, the relaxation process is applied, and the total energy of the system is minimized. Then, the relaxed configuration of RVEs is analyzed under different mechanical tests, and their different mechanical parameters such as Young's modulus, bulk modulus, shear modulus, and different material characteristics are calculated at different temperatures. The accuracy of the numerical simulations is validated by comparing the results with the experimental data. Based

* : مسئول مكاتبات، پست الكترونيكي:a.rezaeisameti@basu.ac.ir

on the MD results, analytical relations are presented to determine the different mechanical parameters of thin aluminum films as a function of the oxide layer thickness and ambient temperature. Comparison of the proposed analytical relations with the experimental data, demonstrates their capability and generalizability for the micro- and macro-size aluminum sheets.

Keywords: Thin aluminum films; Mechanical parameters; Molecular dynamics method; Effects of temperature; oxide layer thickness.

			-
انرژی الکترواستاتیک	E _{CTI}	انرژی مربوط به پتانسیل EAM	$\mathbf{E}_{\mathrm{EAM}}$
بار الکتریکی برای اتم i	\boldsymbol{q}_{i}	فاصله بین اتمهای i و j	r_{ij}
انرژیهای برهمکنش الکترواستاتیک بین جفت اتمها	\mathbf{V}_{ij}	چگالی الکترون برای اتم i	$ ho_{i}$
درایه ij از ماتریس خواص ماده	\mathbf{C}_{ij}	برهمکنش جفتی بین اتمهای j و j	$\boldsymbol{\varphi}_{ij}$
دما	Т	انرژی لازم برای جاسازی اتم i	F_i
مدول بالک	K	مدول برشي	G
ضخامت کلی لایه اکسید	OLT	<i>مدو</i> ل یانگ	Е
سرعت ذره در زمان t	v(t)	انرژی پتانسیل کل سیستم اتمی	$\mathbf{E}_{\mathrm{tot}}$
شتاب ذره در زمان t	a(t)	جرم اتم i	m _i

۱–مقدمه

فهرست علائم

آلومينيوم با توجه به خواص ويژه خود، در صنايع بسيار گوناگونی استفاده شده است. این فلز با توجه به داشتن ویژگیهای خاص و متفاوت خود، در صنایعی همچون هوافضا، حملونقل، خودروسازی، صنایع بستهبندی، صنایع الکتریکی، صنایع ساختمانی و بسیاری از صنایع دیگر کاربرد فراوانی دارد. آلومينيوم در ساختمانها و سازهها در طيف وسيعي از کاربردهای متفاوت مورد استفاده قرار می گیرد که از جمله آن می توان به در و پنجره، سقفهای آلومینیومی داخل و خارج ساختمانها و کارخانهها، ورقهای روکش دار پیش ساخته آلومينيومي براي نماي ساختمانهاي عظيم، ويترين مغازهها، سایهبانها، تجهیزات و وسایل معماری و تجهیزات هدایت آب باران اشاره کرد. در سالهای اخیر، توانایی تولید قطعات ریز مقیاس منجر به افزایش کاربردهای صفحات نازک آلومینیومی در زمینههای مختلف شده است. ورقهای آلومینیومی با ضخامت نانو در بهبود تولید مواد بر پایه سیمان [۱ و ۲]، بهبود طرح اختلاط، عملکرد و کارایی بتن [۳] و همچنین بهبود

خواص مکانیکی و حجمی خاک رس [۴] کاربردهای متنوعی را داراست. با توجه به واکنشپذیری بالای آلومینیوم در مجاورت اکسیژن، درک پدیدههای اکسیداسیون سطحی و تأثیرات آن بر مکانیزم تغییر شکل مکانیکی نانوورقهای آلومینیومی دارای اهمیت بسزایی است. نانو ورقهای آلومینیومی در مرحلهٔ تولید، پردازش و اندازهگیری صنعتی با توجه به نسبت سطح به حجم بالا به آسانی واکنش اکسیدی ایجاد کرده و لایهای از اکسید فلزی در سطح این قطعات ایجاد می شود [۵]. لایه اکسید فلزی تشکیل شده در سطح بیرونی این قطعات، هسته های فلزی را از تماس با محیط بیرونی محافظت می کند و از طرفی تغییرات قابل توجهی را در خواص شیمیایی، مکانیکی، الکتریکی، مغناطیسی و نوری این قطعات به وجود میآورد [۶]. از این رو سطح آزاد لایهی اکسیده شده، نقش مستقیمی در کنترل و تعیین خواص فیزیکی و مکانیکی داشته و تحت تأثير عوامل مختلفي همچون نقص هاي سطحي، چگالي و ضخامت است. وجود يوشش اکسيد فلزي در مقياس نانو، يکي از چالش های توسعه مواد نانو با ویژگی های خاص از طریق

کنترل ناخالصیهای لایه اکسید سطحی، فضاهای خالی، حفرهها و مورفولوژی است. با وجود تلاشهای گسترده صورت گرفته در این زمینه، کنترل اکسیداسیون سطحی به طور کامل بسیار دشوار بوده و بر این اساس ساختارهای مبتنی بر هسته فلزی-پوسته اکسید فلزی مواد نانو، هم از نظر تجربی و هم از نظر تئوری مورد مطالعه گسترده قرارگرفته است [۷].

با توجه به کاربردهای متنوع نانوورقهای آلومینیومی، مطالعات متعددی به صورت آزمایشگاهی برای بررسی خواص مکانیکی آنها صورت گرفته است. از جمله تحقیقات صورت گرفته در این راستا، می توان به مطالعه هاگیو و سیف ۲ [۸] اشاره کرد که در آن نمونههای آلومینیومی با ضخامت های مختلف ساخته شده و تحت تست آزمون کشش تک محوری قرار گرفتند. نتایج حاصل از این مطالعه نشان داد که در حالت کلی با کاهش ضخامت ورق های نازک مقاومت آنها افزایش مییابد. میرینی" و هافمن ٔ [۹] نیز به بررسی خواص مكانيكي سه لايه آلومينيوم خالص، اكسيد آلومينيوم و یک لایه کامپوزیتی از آلومینیوم و اکسیدآلومینیوم تحت کشش تک محوری پرداختند. بر اساس نتایج حاصل، ورقهای کامپوزیتی مقاومت کششی نهایی بالاتری را نسبت به آلومینیوم داشته و همچنین انعطاف پذیری و کرنش های شکست بالاتری را نسبت به آلومینای نشان میدهند. با وجود تلاشهای صورت گرفته، مطالعات آزمایشگاهی گزارش شده برای شناخت رفتار مکانیکی نانوورق،های آلومینیومی و تعیین عوامل تأثيرگذار بر خواص مكانيكي آنها بسيار محدود و هزينهبر است.

با توجه به محدودیتهای موجود در مطالعات آزمایشگاهی قطعات در مقیاس ریز، عموماً روش مطالعات عددی به عنوان ابرازی مناسب در این زمینه به کار گرفته میشود. از جمله تحقیقات صورت گرفته در این زمینه، میتوان به مطالعات روزاندی^۵ و همکاران [۱۰] اشاره کرد که در آن به بررسی رفتار مکانیکی نانوسیمهای آلومینیومی پرداخته شده است. در این مطالعه شبیهسازی نانوسیمهای

آلومينيومي بر اساس مدل هسته فلزي-پوسته اکسيد فلزي صورت گرفته و رفتار مکانیکی این قطعات تحت اثر تغییر شکل کششی و فشاری با استفاده از روش دینامیک مولکولی ارزیابی شده است. آنها نشان داد که نمونههای پوشش داده شده با اکسید، مقاومت کششی کمتر اما شکل پذیری بیشتری دارند. همچنين با افزيش ضخامت پوشش اكسيد آلومينيوم، مقاومت کششی و شکلپذیری نانوسیمها افزایش مییابد. به منظور ارزیابی تأثیر تجمع و شکستگی نانوذرات فلزی با پوشش اکسید در فرایند سنتز، احتراق یا انفجار، ما^۶ و همکاران [۱۱] به بررسی برخورد دو نانوذره آلومینیوم با پوشش اکسید آلومینیوم در سرعتهای مختلف با استفاده از روش دینامیک مولکولی پرداختند. زنگ^۷ و همکاران [۱۲] رفتار ترموديناميكي نانوذرات آلومينيوم با لايه اكسيد سطحي را تحت فرایند حرارتدهی بررسی کردند. آنها دریافتند که با افزایش دما و کاهش ضخامت پوسته اکسید آلومینیوم میزان نفوذ اکسیژن از لایه پوسته به هسته آلومینیومی افزایش پیدا میکند. سن^ و همکاران [۱۳] بر اساس روش دینامیک مولکولی نشان دادند که اکسیداسیون، شکلپذیری نانوسیم آلومینیوم را افزایش میدهد و پوسته اکسید رفتار فوقالعادهای از خود نشان میدهد. خویی و همکاران [۱۴] در مطالعهای اثر اکسیداسیون سطحی را بر رفتار نانوذرات آلومينيوم تحت آزمون هيدرواستاتيک و سهمحوری نشان دادند. مطالعات آنها نشان دهنده افزایش مقاومت و کاهش شکلپذیری نانوذرات تحت آزمون سهمحوری با افزایش درصد ضخامت لایه اکسید است. با توجه به اهمیت درک تأثیر اکسیداسیون سطحی، در این مطالعه به بررسی رفتار مکانیکی نانوورق،های آلومینیومی در دماهای مختلف پرداخته شده و پارامترهای مختلف مکانیکی ارزیابی می شود. در ادامه در بخش دوم به بیان نحوه ایجاد پیکربندی اولیه نانوورقهای آلومینیومی پرداخته شده و جزئیات مدلسازی رفتار مکانیکی آن-ها بر اساس روش دینامیک مولکولی ارائه می شود. در نهایت در بخش سوم، نتایج حاصل از مدلسازی عددی ارائه شده و به بررسی نتایج پرداخته میشود.

۲ مدلسازی نانوورقهای آلومینیومی بر اساس روش دینامیک مولکولی

همانگونه که اشاره شد، در این پژوهش با توجه به کاربرد گسترده ورقهای نازک آلومینیومی در صنایع مختلف به بررسی رفتار مکانیکی این مواد بر اساس روش دینامیک مولکولی پرداخته میشود. در این راستا بر مبنی مدلسازی عددی نانوورقهای آلومینیوم با اکسیداسیون سطحی تحت تأثیر تغییر شکل و بارگذاریهای مختلف اعم از کششی و فشاری قرار گرفته و رفتار مکانیکی نمونهها با ارزیابی کمیتهای مکانیکی پرکاربرد همانند مدول یانگ، ضریب پواسون، مدول برشی، میشود. روش دینامیک مولکولی این امکان را فراهم میسازد تا اتمی ارزیابی کرد. در این روش معادلات حرکتی نیوتن برای توصیف حرکات ذرات استفاده میشود؛ به طوری که معادله میشود.

$$\mathbf{m}_{i}\vec{\mathbf{a}_{i}}(t) = \vec{\mathbf{F}_{i}}(t) = -\frac{\partial \mathbf{E}_{tot}}{\partial \vec{\mathbf{r}_{i}}(t)}$$
(1)

در رابطه فوق E_{tot} انرژی پتانسیل کل سیستم اتمی که بر اساس تابع پتانسیل بین اتمی تعیین می شود. $\vec{r}_i \ n_i$ و \vec{r}_i به ترتیب جرم، بردار مکان و بردار نیرو اتم *i*ام و *t* بیانگر زمان است. همانگونه که مشاهده می شود معادله حاکم بر سیستم اتمی، یک معادله دیفرانسیل مرتبه دوم است که می توان آن را با به کارگیری الگوریتم ورلت سرعتی^{۱۱} حل کرد [10]. در الگوریتم ورلت سرعتی، با معلوم بودن وضعیت مختصات و سرعت ذرات سیستم در زمان *t* مختصات ذرات در زمان *t*

$$\vec{\mathbf{r}}_{i}(t + \Delta t) = \vec{\mathbf{r}}_{i}(t) + \Delta t \times \vec{\mathbf{v}}_{i}(t) + \frac{1}{2}\Delta t^{2} \times \vec{\mathbf{a}}_{i}(t) \qquad (\Upsilon)$$

در رابطه فوق $\overrightarrow{v_i}(t)$ و $\overrightarrow{a_i}(t)$ به ترتیب بردار سرعت و بردار $\overrightarrow{v_i}(t)$ در ابطه فوق ابت اتم in در زمان t است. در الگوریتم ورلت سرعتی،

شتاب نیمگام به صورت میانگین شتاب در ابتدا و انتهای گام زمانی در نظر گرفته می شود و سرعت در نیمگام با استفاده از رابطه (۳) مطابق زیر محاسبه می شود:

$$\overrightarrow{v_{i}}(t + \frac{1}{2}\Delta t) = \overrightarrow{v_{i}}(t) + \Delta t \times \frac{\overrightarrow{a_{i}}(t)}{2}$$
(r)

$$\vec{a}_{i}(t+\frac{1}{2}\Delta t) = \frac{\vec{a}_{i}(t) + \vec{a}_{i}(t+\Delta t)}{2}$$
(*)

$$\vec{v}_{i}(t + \Delta t) = \vec{v}_{i}(t + \frac{1}{2}\Delta t) + \Delta t \times \frac{\vec{a}_{i}(t + \Delta t)}{2}$$
 (δ)

$$\vec{a_i}(t + \Delta t) = \frac{F_i(t + \Delta t)}{m_i}$$
(9)

در روابط فوق (F_i(t نیروی بین اتمی است که بر اساس پتانسیل تعریف شده بین ذرات مطابق رابطه (۱) محاسبه میشود. بر اساس معادلات (۲)، (۵) و (۶) میتوان به ترتیب موقعیت، سرعت و شتاب ذرات را در انتهای هر گام تعیین کرد. باید توجه داشت که رابط ورلت سرعتی دارای خطای از مرتبه چهار بوده و این روش نسبت به زمان برگشت پذیر است.

همان گونه که در روابط مشاهده می شود، پتانسیل بین اتمی از جمله مهم ترین عواملی است که نقش بسزایی در دقت مدل سازی دینامیک مولکولی دارد. یوسفی و همکاران [۱۶] در مطالعهای به ارزیابی دقت پتانسیل های مختلف برای مدل سازی اتم های اکسیژن و آلومینیوم پرداختند. آن ها نشان دادند که پتانسیل ¹⁰ CTT+PAB، ارائه شده توسط ژو^{۲۲} و همکاران پتانسیل ¹⁰ CTT+PAB، ارائه شده توسط ژو^۲ و همکاران [۱۷]، دارای دقت مناسبی در مدل سازی اندر کنش اتم های آلومینیوم و اکسیژن است. این پتانسیل به صورت ترکیبی از دو پتانسیل شامل پتانسیل اتم تعبیه شده (EAM) و پتانسیل انرژی الکترواستاتیک (CTT) است که انرژی بین ذرات را به ترتیب بر اساس روابط زیر تعریف می کند:

$$E_{EAM} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \phi_{ij}(\mathbf{r}_{ij}) + \sum_{i} F_i(\sum_{j \neq i} \rho_j(\mathbf{r}_{ij}))$$
(V)

$$E_{CTI} = \sum_{i} E_{i}(q_{i}) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} V_{ij}(r_{ij}, q_{i}, q_{j})$$
(A)

 r_{ij} ،EAM در روابط فوق، E_{EAM} انرژی مربوط به پتانسیل E_{EAM}

همانگونه که در بخش قبل اشاره شد، ورقهای نازک آلومینیومی واکنش پذیری بالایی در مجاورت اکسیژن داشته و از این رو همواره دارای لایههای نازک از اکسیدآلومینیوم در سطح خود هستند که به میزان قابل توجهی بر رفتار مکانیکی این نمونهها تأثیر می گذارد. با توجه به پیچیدگیهای زیاد در فرایند اکسیداسیون و هزینه بالای انجام آزمایشات تجربی، در این مطالعه تأثير اکسيداسيون سطحي بر خواص مکانيکي نانوساختارهای ورق،هایی که معمولاً نسبت سطح به حجم زیادی دارند، بر اساس مدلسازی اتمی بررسی میشود. از این رو از مدل هسته فلزی- پوسته اکسید فلزی برای مدلسازی این نمونهها استفاده می شود [۱۴]. در این مدل به منظور جلوگیری از پیدایش نیروهای دافعه بسیار بزرگ، در ابتدا فاصلهای به اندازه ۳ انگستروم مابین لایههای پوسته و هسته در نظر گرفته می شود [۱۲]. ساختار اولیهی اتمها در هسته آلومینیومی به صورت FCC¹⁴ با ثابت شبکه برابر ۴/۰۴۶ انگستروم در نظر گرفته می شود. همچنین ساختار اولیهی اتمها در پوسته اکسید آلومينيوم بر اساس ساختار كوراندوم ($lpha - Al_2O_3$) مدلسازى می شود که در دمای محیط پایدار است [۲۰]. نحوه چینش اتمها در ساختار کریستالی کوراندوم در شکل (۱) ارائه شده است [۲۱]. پس از ایجاد ساختار اولیه اتمی، به منظور پایدارسازی نمونهها فرایندکمینهسازی انرژی^{۱۵} صورت می پذیرد. در این راستا، ابتدا انرژی نمونه بر اساس روش گرادیان مزدوج^{۱۶} مینیمم شده، سپس با استفاده از هنگرد دما ثابت (NVT) در مدت زمان ۲۰ پیکوثانیه دمای نمونه منطبق با دمای محیط حدوداً برابر ۳۰۰ درجه کلوین تنظیم شده و در ادامه با استفاده از هنگرد دما- فشار ثابت (NPT) در مدت زمان ۲۰ پیکوثانیه فشار نمونه در هر سه جهت با شرایط محیطی حدوداً برابر ۱ اتمسفر سازگار می شود. در فرایند پایدارسازی دما و فشار، گام زمانی شبیهسازی دینامیک مولکولی برابر ۱ فمتوثانیه در نظر گرفته می شود. شکل (۲) نمونه ای از ساختار اتمی المان حجمی نمونه برای نانوورق آلومینیوم بعد از فرایند

 ϕ_{ii} ،i ،j و i ،j چگالی الکترون برای اتم $\dot{\rho}_i$ فاصله بین اتمهای $\dot{\rho}_i$ ،j و برهمکنش جفتی بین اتمهای i و Fi ، j انرژی لازم برای جاسازی اتم i است. E_{CTI} انرژی الکترواستاتیک، q_i بار الکتریکی برای i اتم i، و V_{ii} انرژیهای برهمکنش الکترواستاتیک بین همه جفت اتمها است. بهطور كلى پتانسيل EAM از جمله پتانسيلهاى پرکاربرد برای مدلسازی فلزات و آلیاژهای فلزی است که بر پایه مکانیک کوانتومی بوده و پارامترهای آن به صورت نیمهتجربی تعيين مي شود. در اين پتانسيل، جزء اول ((أ) شامل اندركنش جفتی بین اتمها است که انرژی ناشی از اندرکنش الکترواستاتیکی هسته- هسته را لحاظ میکند و جزء دوم (F_i) اندرکنش های چنداتمی را در نظر میگیرد که تحت عنوان انرژی لازم برای جاسازی اتم i شناخته می شود. در این پتانسیل، انرژی لازم برای قرارگیری اتم در یک جایگاه در شبکه اتمی، تابعی از چگالی الکترون در آن جایگاه است؛ به طوری که چگالی الکترون در هر مکان از برهمنهی چگالی الکترون ایجاد شده توسط تکتک اتمها منهای چگالی اتم مورد نظر بهدست میآید. با فرض اینکه چگالی اتمی با تغییرات فاصله به آرامی تغییر میکند، تابع چگالی در سادهترین حالت به صورت ثابت لحاظ شده و انرژی لازم برای جاسازی هر اتم برابر با مجموع انرژی حاصل از چگالی الکترونهای دیگر به علاوه انرژی چگالی همان اتم در نظر گرفته می شود [۱۸]. پتانسیل EAM پیوندهای فلزی را با دقت مناسبی مدلسازی میکند، اما توانایی مدلسازی پیوندهای یونی را ندارد. از این رو، پتانسیل CTI برای لحاظ کردن اثرات ناشی اندرکنش یونی به پتانسیل EAM افزوده می شود تا بتواند انرژی ذرات در ساختار آلومینیوماکسید را به خوبی مدل کند. در پتانسیل CTI، جزء اول (E_i) انرژی ناشی از پیوند یونی و جزء دوم (V_{ii}) انتقال بار بين همه جفت اتمها را بيان مي کند [۱۷]. بر این اساس، پتانسیل ترکیبی EAM+CTI دارای قابلیت مدلسازی پیوندهای فلزی و اکسیدفلزی را دارا است. جئون^{۱۳} و همکاران [۱۹] با استفاده از این پتانسیل به بررسی تأثیر دما و همچنین تأثیر جنس ماده بر روند اكسيداسيون سطحي فلزات يرداختند.



شکل ۱- نمای شماتیک از ساختار کریستالی کوراندوم [۲۰]



شکل ۲- نمای شماتیکی از المان حجمی نمونه برای نانوورق آلومینیوم با لایه اکسید سطحی

می شود و سپس اجازه داده می شود که فرایند تغییر شکل پایدار شود و انرژی آن به حالت پایدار برسد. این روش بارگذاری این امکان را فراهم می سازد تا بتوان بارگذاری را به صورت شبه استاتیکی بر نمونه اعمال کرد [۲۳]. در تمامی تحلیل های دینامیک مولکولی صورت گرفته گام زمانی ۱ فمتوثانیه لحاظ شده است.

لازم به ذکر است که به منظور محاسبه پارامترهای مختلف مکانیکی برای نانوورق آلومینیوم، محاسبه تنش در مقیاس نانو و معادلسازی آن با مفاهیم مکانیک محیط پیوسته ضروری است. در این راستا مطالعات گستردهای صورت گرفته و روابط و دیدگاههای مختلفی ارائه شده است. کلاسیوس^{۱۸} [۲۴] و مکسول^{۱۹} [۲۵ و ۲۶] تئوری وایرال^{۲۰} را برای محاسبه تنش بیان کردند. در حال حاضر در مطالعات متعددی دقت و کارکرد مناسب محاسبه تنش برای ساختار اتمی، بر اساس تنش وایرال ۵۰×۵۰×۵۰ انگستروم است و درصدهای مختلفی از ضخامت لایه اکسید در سطح فوقانی و تحتانی نمونه در نظر گرفته میشود. در راستای x و z شرایط مرزی نمونهها به صورت پریودیک در نظر گرفته میشود تا نتایج حاصل قابلیت تعمیم به نمونههای بزرگ تر را دارا باشد. پس از مدلسازی ساختارهای نانوورقهای آلومینیومی، نمونهها تحت بارگذاریهای مختلف نانوورقهای آلومینیومی، نمونهها تحت بارگذاریهای مختلف پارامترهای مختلف مکانیکی برای نمونهها اندازه گیری میشود. فرایند اعمال تغییر شکل در هنگرد دما- فشار ثابت انجام پارگذاری به صورت گامبهگام صورت میپذیرد. در این روش بارگذاری که توسط لی^{۱۷} و همکاران [۲۲] ارائه شده است، ابتدا به صورت بسیار آرام جابهجایی کوچکی به نمونه اعمال

پایدارسازی ارائه شده است. این نمونهها دارای ابعاد

اثبات شده است. در این حالت تنش برای اتم i بر اساس رابطه زیر تعیین می شود:

 $\sigma = \frac{1}{V} \left(-m_i \vec{v}_i \otimes \vec{v}_i + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \vec{r}_{ij} \otimes \vec{f}_{ij} \right) \tag{9}$

در رابطه فوق، σ تانسور تنش وایرال، V حجم، $\mathbf{m_i}$ و \vec{v}_i به ترتیب جرم و بردار سرعت اتم i، $ec{f}_{ij}$ و $ec{f}_{ij}$ نیز به ترتیب بردار جابهجایی و نیرو بین اتمهای i و j هستند. تسای^{۲۱} [۲۷] بر اساس تئوری کوشی، رابطهی تنش را برای ساختارهای اتمی گسترش داد. ایرون و کیرکود^{۲۲} [۲۸] بر اساس اصول مکانیک آماری غیرتعادلی و سری توزیع دلتا دیراک، روابطی را برای محاسبه تنش ارائه کردند. نال^{۳۲} [۲۹] رابطه تحلیلی را برای محاسبه تنش بدون نیاز به بسط سری ارائه کرد. هاردی^{۲۴} و همکاران [۳۰ و ۳۱] با استفاده از توابع وزنی و بر اساس مفهوم میانگین گیری روابطی را برای محاسبه تنش در مقیاس نانو مبتنی بر مفاهیم مکانیک محیط پیوسته کلاسیک ارائه کردند. بر اساس اصول بقای جرم و انرژی، ژو^{۱۲} و مکداول^{۲۵} [۳۳] و ژو (۳۳] تنش معادل مکانیک محیط پیوسته کلاسیک را برای محیط اتمی بر اساس مفهوم میانگین گیری حجمی از تنش وایرال تعیین کردند که بر این اساس اثرات غیرمحلی بودن در ساختار اتمی را ناچیز کرده است. سابرامانین و سان^{۲۶} [۳۴] نیز تنش میانگین وايرال را به صورت معادل تنش كوشي در محيط پيوسته اثبات کردند. چنگ و سان^{۲۷} [۳۵] اثبات کردند که حجم لازم برای میانگین گیری جهت از بین بردن اثرات غیرمحلی در محاسبه تنش در ساختار اتمی، برای حالت پریودیک کرمای به شعاع ثابت شبکه اتمی و در حالت غیرپریودیک کرهای به شعاع پنج برابر ثابت شبکه اتمی است. دیدگاه محاسبه تنش برای ساختار نانو بر اساس مفهوم میانگین گیری تنش وایرال در مطالعات متعددی مورد پذیرش واقع شده است. از جمله مطالعات صورت گرفته می توان به مراجع [۳۶–۳۸] اشاره کرد که در آنها از این روش برای مدلسازی چندمقیاسی محیط پیوسته مقیاس اتمی استفاده شده و تنش در هر نقطه مادی از مقیاس بزرگ بر اساس تئوری مکانیک محیط پیوسته کلاسیک مطابق با مفهوم میانگین گیری تنش وایرال از المان حجمی نمونه اتمی

محاسبه شده است. در این مطالعه نیز به منظور حذف اثرات غیرمحلی از مفهوم میانگین گیری تنش وایرال بر روی المان حجمي نمونه اتمي براي نانوورق ألومينيومي استفاده شده است. ابعاد نمونه و همچنین شرایط مرزی نمونه به نحوی است که بهخوبی شرایط ارائه تنش منطبق با مفاهیم مکانیک محیط پیوسته کلاسیک را فراهم میکند. در این حالت تنش و کرنش برای کل نمونه با مفهوم میانگین گیری بهدست می آید که بیانگر تنش معادل در یک نقطه مادی از نانوورق آلومینیومی در مقیاس درشت است. از این رو رابطه تنش-کرنش و پارامترهای مختلف منطبق با تئوري مكانيك محيط پيوسته كلاسيك تعيين می شود. در این حالت، بر اساس تئوری مکانیک محیط پیوسته، می توان کرنش بسیار کمی در راستای محوری و یا برشی در نمونه ایجاد کرد و با محاسبه نسبت تغییرات تنشها به تغییرات كرنش پارامترهای مختلف الاستیک نمونه را تعیین کرد. روش بیان شده در مطالعات مختلفی نیز به کار گرفته شده است. این روش در مراجع معتبر و متعددی همچون مراجع [۳۹–۴۳] برای تعيين مشخصات مكانيكي و پارامترهاي الاستيك و استخراج نمودار تنش-كرنش منطبق با مفاهيم مكانيك محيط پيوسته کلاسیک برای ساختار اتمی و با استفاده از تحلیل دینامیکی مولکولی به کار برده شده است. همچنین در اینجا از نرمافزار متن باز لمپس ۲۸ [۴۴] و اویتو ۲۹ [۴۵] به ترتیب برای انجام تحلیلهای دینامیک مولکولی و بررسی نتایج استفاده میشود.

۳– نتایج و بحث

همانگونه که اشاره شد، در این مطالعه تغییرات پارامترهای مختلف مکانیکی شامل مدول یانگ، مدول برشی، مدول بالک، مختلف مکانیکی شامل مدول یانگ، مدول برشی، مدول بالک، ضریب پواسون و درایههای مختلف ماتریس خواص ماده، شامل $\frac{1}{\partial \epsilon_{11}} = \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial \epsilon_{22}} = c_{12}$ و $\frac{1}{2} \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial \epsilon_{23}} = c_{13}$ برای شامل $\frac{1}{\partial \epsilon_{12}} = c_{13}$ $c_{12} = \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial \epsilon_{23}}$ و مامای انوورقهای آلومینیومی با درصد اکسید مختلف در دماهای مختلف ارزیابی می شود. بر این منظور پاسخهای مکانیکی نمونههای مختلف آنورق آلومینیوم تحت تغییر شکلهای مختلف شبیه سازی شده و پارامترهای مکانیکی مختلف آنها بر

افزایش پیدا می کند، مدول بالک از ۶۵ گیگاپاسکال به ۱۲۰ گیگاپاسکال افزایش پیدا کرده و مقدار ضریب پواسون از ۴۵/۰ تا ۲۸/۰ رو به کاهش است. همچنین مقادیر C₁₁، C₁₂ و C₄₄ هم با افزایش درصد لایه اکسید افزایش مییابند. این تغییرات در پارامترهای C11 و C44 با افزایش دو برابری است اما در C12 این افزایش کمتر مشاهده می شود. همانگونه که در این اشکال مشاهده می شود، درصد لایه اکسید تأثیر بسیار بالایی بر مقادیر پارامترهای مختلف مکانیکی نمونه داشته و با تغییر درصد لایه اکسید، مقادیر پارامترهای مختلف می تواند دچار تغییرات قابل ملاحظهای شود. از این رو بایستی در کاربرد ورقهای نازک آلومينيوم، توجه بالايي به ميزان درصد لايه اكسيد كرد و پارامترهای مکانیکی متناسب با آن را در مدلسازیهای عددی در نظر گرفت. به طور کلی تغییر پارامترهای مختلف نانوورقهای آلومینیومی با درصد لایه اکسید ناشی از سخت تر و مقاوم تر بودن ساختار اتمی آلومینا نسبت به آلومینیوم است. به طور کلی اتمهای آلومینا دارای پیوندهای یونی بوده و ساختار بسیار محکمتری را نسبت به اتمهای آلومینیوم که دارای پیوندهای فلزی هستند، به وجود می آورند. از این رو با افزایش ضخامت لایه اکسید مدول یانگ و مدول برشی نمونه افزایش یافته و ضریب پواسون آن کاهش مییابد. همچنین مشاهده می شود که تغییرات پارامترهای مختلف مكانيكي با درصد لايه اكسيد عموماً به صورت غيرخطي است و از این رو استفاده از درونیابی خطی برای تعیین مشخصات مكانيكي اين نمونهها ميتواند خطاي قابل ملاحظهاي را دربر داشته باشد.

به طور کلی دما از پارامترهای تأثیر گذار بر رفتار مکانیکی نمونه های مختلف بوده و در مطالعات مختلف، تأثیر دما بر پاسخ های مکانیکی مواد مختلف ارزیابی شده است. از جمله مطالعات صورت گرفته در این زمینه می توان به تحقیقات هاکیو¹ و سیف^۲ [۴۸] اشاره کرد که در آن به صورت تجربی به بررسی خواص مکانیکی – حرارتی فیلم های آلومینیومی در مقیاس نانو پرداخته اند. آن ها نشان دادند که افزایش دما منجربه کاهش مدول یانگ در نانوورق های آلومینیوم می شود. در این

اساس تعاريف تئوري مكانيك محيط پيوسته كلاسيك تعيين می شود. جزئیات تعیین پارامترهای مختلف مکانیکی در شکل (۳) ارائه شده است. همانگونه که نشان داده شده است، ابتدا تغییرشکل بسیار کمی در یکی از راستاهای محوری و یا برشی در نمونه ایجاد شده و سپس و با محاسبه نسبت تغییرات تنشرها به تغییرات کرنش در نمونه، پارامترهای مختلف الاستیک بر اساس تئوری مکانیک محیط پیوسته کلاسیک محاسبه می شود. لازم به ذکر است که در اینجا از مفهوم تنش میانگین وایرال استفاده می شود تا تنش برای مجموعه نمونه اتمی با دقت مناسبی تعیین شود [۴۲ و ۴۳]. در اینجا، ابتدا به منظور بررسی دقت مدلهای ایجاد شده در تعیین پارامترهای مختلف مکانیکی، ضریب پواسون و مدول یانگ، نمونههای شامل آلومينيوم و آلومينا خالص مدل شده و نتايج حاصل از مدلسازی عددی با نتایج حاصل از دادههای آزمایشگاهی موجود ارزیابی میشود. نتایج حاصل از این مقایسه در جدول (۱) ارائه شده است. همانگونه که مشاهده می شود، نتایج در محدوده دادههای آزمایشگاهی هستند که این امر نیز دقت نتایج عددی و تعیین مناسب پارامترهای مختلف مکانیکی را می تواند تاييد كند. پس از صحتسنجی نتايج بهدست آمده، درصدهای مختلفی از لایه اکسید روی نمونه نانوورق شبیهسازی شده و پارامترهای مختلف مکانیکی آنها ارزیابی میشود. برای این منظور ۱۲ نمونه نانوورق آلومینیوم با ضخامت کل یکسان، اما با مجموع درصد لایه اکسید متفاوت در سطح فوقانی و تحتانی در نظر گرفته شده و پس از اعمال فرایند پایدارسازی، تحت اثر تغییر شکلهای کششی، فشاری و برشی قرار داده میشوند. بر اساس نتايج حاصل و تعاريف مكانيك محيط پيوسته، پارامترهای مکانیکی نمونهها محاسبه شده و نتایج حاصل در قالب نمودارهایی در شکل (۴) ارائه میشود.

همانطور که در شکل (۴) مشاهده می شود، با افزایش درصد لایه اکسید مقدار مدول یانگ از ۶۰ به حدود ۱۵۰ گیگاپاسکال، بیشتر از دو برابر مقدار اولیه افزایش پیدا میکند. با افزایش ۱۰۰ درصدی لایه اکسید مقدار مدول برشی نزدیک به سه برابر



شکل ۳- جزییات نحوه محاسبه پارامترهای مختلف مکانیکی

.1	آلومينيوم		آلومينا		
مشخصات مواد	آزمایشگاهی	شبيەسازى	آزمایشگاهی	شبيەسازى	
مدول يانگ (گيگاپاسكال)	٧٠ [۴٧]	۶٩	108-188 [48]	144/22	
ضريب پواسون	۰/٣٣ [۴۷]	۰/۳۵	 °/۲۶ – °/۲۸ [۴۶] 	۰/۲۸	

جدول ۱– مقایسه نتایج پارامترهای مکانیکی آلومینیوم و آلومینا

برای درصد اکسیدهای مختلف، مطابق قسمت قبل اعمال شده و پارامترهای مکانیکی مختلف نمونهها با درصد اکسیدهای مختلف در دماهای متفاوت محاسبه شده است. نتایج حاصل در قالب کانتورهای سهبعدی در شکل (۵) ارائه شده است. همانگونه که مشاهده می شود، پارامترهای مختلف به مطالعه به منظور بررسی تأثیر دما بر رفتار مکانیکی ورقهای نازک آلومینیومی، مدلسازیهای صورت گرفته در قسمت قبل برای چهار دمای مختلف دیگر شامل ۲۵۰، ۴۰۰، ۶۰۰ و ۸۰۰ کلوین تکرار شده و مقادیر پارامترهای مختلف مکانیکی محاسبه میشود. بررسی اثر دما بر رفتار مکانیکی ورقهای آلومینیوم



شکل ۴- نمودار تغییرات (الف) مدول یانگ (ب) مدول برشی، (پ) ضریب پواسون، (ت) مدول بالک (ث) C11 ، (ج) C12 و (چ) C44 بر حسب درصد لایه اکسید برای نانوورق.های آلومینیومی

صورت تابع دما و درصد لایه اکسید برای ورقهای آلومینیومی قابل تعیین است. بر اساس این شکل به وضوح تأثیرات قابل توجه دما در رفتار مکانیکی ورقهای آلومینیومی مشاهده میشود، به نحوی که در آنها به صورت تقریباً یکنواخت پارامترهای مکانیکی با دما کاهش مییابد. به طور کلی، بر اساس نمودارهای ارائه شده در شکل (۵)، مقادیر درایههای مختلف ماتریس خواص مکانیکی نمونه با افزایش دما کاهش مییابند. مقادیر مدول یانگ، مدول برشی و مدول بالک در شیب نمودار تنش – کرنش و رفتار نرمتر نمونهها است که با روند مشاهده شده در آزمایش هاکیو و سیف [۸۸] همخوانی به دما تابعی از میزان درصد لایه اکسید است. این امر میتواند ناشی از آن باشد که اکسید آلومینیوم عایق حرارتی بوده و تغییرات حجمی آن با دما ناچیز است در صورتی که آلومینیوم

رسانای قوی حرارتی بوده و تغییرات حجمی آن با دما قابل ملاحظه است.

به منظور ارائه کاربردی تر نتایج حاصل، توابعی تحلیلی برای محاسبه پارامترهای مکانیکی ورقهای نازک آلومینیومی به صورت تابعی از دما و درصد لایه اکسید تعیین می شود. روابط تحلیلی ارائه شده همگی دارای ضریب تعیین بالای ۹۰ درصد هستند. بالا بودن این ضریب بیانگر درصد خطای کم در معادلات تحلیلی ارائه شده و دقت بالای این معادلات هستند. معادلات تحلیلی به دست آمده از قرار زیر هستند:

 $E = 230T^{-0.2}[(OLT)^2 + 1]$ (1...)

$$G = 87T^{-0.2}[2(OLT)^2 + 1]$$
(11)

- $K = 174T^{-0.15}[(OLT)^2 + 1]$ (17)
- $C_{11} = 222T^{-0.2}[4.2(OLT)^2 + 1]$ (17)
- $C_{12} = 183T^{-0.2}[(OLT)^2 + 1]$ (14)
- $C_{44} = 71T^{-0.2}[2(OLT)^2 + 1]$ (10)



شکل ۵– نمودار تغییرات (الف) مدول یانگ، (ب) مدول بالک و (پ) مدول برشی (ت) C11 ، (ث) C12 و (ج) C44 برحسب دما و درصد لایه اکسید



در معادلات بالا متغیرهای OLT نشان دهندهی نسبت مجموع ضخامت لایه اکسید در سطح فوقانی و تحتانی به ضخامت کل

مدول يانگ (گيگاپاسکال)	دما (سانتیگراد)	درصد خطا	منابع
83/990	ĸm	K 144	نتایج آزمایشگاهی [۴۸]
81/22	11	1/1 1	معادلات پیشنهادی
۵۸/۴۲	٧۶	۲/۴۳	نتایج آزمایشگاهی [۴۸]
۵٩/٨۴		17.11	معادلات پیشنهادی
۵۶/V。	٩٧	۲/۳	نتایج آزمایشگاهی [۴۸]
$\Delta \Lambda / \circ Y$		17.1	معادلات پیشنهادی

جدول ۲- مقایسه مدول یانگ گزارش شده در مطالعات آزمایشگاهی با مقادیر حاصل از معادلات ارائه شده

بنابر معادلات بهدست آمده، به وضوح رابطه غیرخطی بین پارامترهای مختلف مکانیکی نانوورق آلومینیومی با دما و ضخامت لایه اکسید قابل مشاهده است. از این رو، استفاده از درونیابی خطی برای تخمین تأثیر این پارامترها میتواند خطای قابل توجهی را در محاسبات ایجاد کند. به منظور بررسی دقت معادلات تعیین شده، مقایسهای بین مقادیر آزمایشگاهی گزارش شده توسط هاک و سیف [۸۸] با معادلات فوق صورت میپذیرد. این مقایسه در سه دمای ۴۳، ۷۶ و ۹۷ درجه سانتی گراد صورت گرفته است. نتایج حاصل از این مقایسه در جدول (۲) ارائه شده است.

به وضوح مشاهده می شود که روابط تحلیلی توانایی بالایی داشته و با دقت مناسبی می تواند نتایج آزمایشگاهی را تخمین زده و همگرایی مناسبی را داراست. با توجه به ضخامت ورقهای بررسی شده در مطالعه آزمایشگاهی که بسیار بزرگتر از نمونه استفاده شده برای تحلیل دینامیک مولکولی است، می توان دریافت که نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی تنها منحصر به نمونههای با ابعاد بسیار کم نبوده و قابلیت تعمیم پذیری به نمونههای با ابعاد بسیار کم نبوده و قابلیت ابعاد میکرو و ماکرو را دارا است. قابلیت تعمیم پذیری نتایج به نمونههای بزرگ، ویژگی بسیار مهمی برای معادلات تعیین شده است که دامنه کاربرد این روابط را گسترده کرده و می تواند بیانگر عدم انحصار نتایج برای نانو ورقها باشد. در این قسمت شده، برای نمونههای بزرگتر، پارامترهای مختلف مکانیکی برای ورقهایی با ضخامتهای ۲، ۳ و ۴ برابر بزرگتر از

نمونهی اولیه به ترتیب نمونههای (A، B و C) تعیین شده و مقادیر حاصل از روابط (۱۰) تا (۱۵) مقایسه می شوند. جزئیات نمونههای بزرگتر و نتایج حاصل از تحلیل آنها به ترتیب در جدولهای (۳) و (۴) ارائه شده است. بر اساس نتایج به دست آمده می توان نتیجه گرفت که نتایج با درصد خطای بسیار کمی به م نزدیک هستند و نشان می دهد که این روابط قابلیت تعمیم پذیری مناسبی برای تعیین پارامترهای مکانیکی برای نمونههای بزرگتر را دارا هستند.

۴- نتیجهگیری

در این پژوهش با توجه به کاربرد گسترده ورقهای نازک آلومینیومی در صنایع مختلف به بررسی رفتار مکانیکی این مواد پرداخته شد. برای این منظور از روش دینامیک مولکولی برای تعیین پارامترهای مختلف مکانیکی استفاده شد. ساختار اولیه اتمی از نانوورق آلومینیوم بر اساس شبکهبندی کریستالی ایجاد شد که در آن هسته فلزی بر اساس ساختار PCC و پوسته اکسید فلزی بر اساس ساختار کوراندوم مدلسازی شد. در ابتدا انرژی نمونهها کمینهسازی شده و سپس دما و فشار نمونه منطبق با دما و فشار محیط پایدار می شود. بارگذاریهای اعمال شد و پارامترهای مختلف مکانیکی آن مطابق با تعاریف متعارف ارزیابی شد. مقایسه نتایح حاصل با دادههای آزمایشگاهی بیانگر دقت مناسب و توانایی بالای مدلسازی

جدول ۳- جزئیات نمونههای بزرگ تر				
D	С	В	А	نمونه
74	٣٢	۲۰	۴۸	لايه اكسيد (درصد)

جدول ۴– مقایسه خواص مکانیکی نمونههای بزرگتر با مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی

درصد	مدول بالک	درصد	مدول برشى	درصد	م <i>دو</i> ل یانگ		
خطا	(گیگاپاسکال)	خطا	(گیگاپاسکال)	خطا	(گیگاپاسکال)	نمونه	
۵/۹۲	$\Lambda\Delta/\Lambda\circ$		34/18	N 1940	$\Lambda 0 / \Lambda 9$	مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	
	٩١/٢	°/Vω	30/47	- ω/1 <i>7</i> -	٩٠/٧٣	(A) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	
۴/۱۳	VT/0T	۴/۵۹	4/29	۴/۰۳	99/W	مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	
	V۵/۶۵		۲۶/۵۵		89/18	(B) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	
۲/۸۹	$\nabla \mathcal{F} / \Lambda \nabla$	۲/۶۵	۲۸/۲۶	۴/۸۴	V7/94	مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	
	V٩/1 ۶		۲۹/०۳		V9/90	(C) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	
۵/۴۰	VT/V0	۴/۴۵	28/10	4/80	9 ٩ /94	مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	
	VV/٩۶		TV/TV		۷۳/۰۴	(D) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	
درصد خطا	C ₄₄ (گیگاپاسکال)	درصد خطا	(گیگاپاسکال) $C_{ m 12}$	درصد خطا	(گیگاپاسکال) <i>C</i>	نمونه	
۵/۸۳	79/49	¥ / 0 ¥	۸°/۷۱	*/77	108/01	مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	
	۳۱/۱۸	1/11	٧۶/٧٢	- 1/11 -	101/41	(A) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	
٥/•٩	Y 1/VA	¥/YV	۶۸/۲۲	۶/۲۸	97/91	مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	
ω/ • ٩ -	22/24	1/11	V1/TV	- ////	99/14	(B) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	
1/10	۲۴/۳۰	¥/\$V	۷۲/۳۲	°/\&	117/V9	مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	
	74/07	177 1	$V\Delta/\Lambda V$	- / / / /	117/90	(C) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	
٣/۶۴	۰ ۵/۲۲		<u> </u>	1/90 -	٩٨/٨ •	مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	
	22/20	٣/۵٩	V1/9V		\ • •/VV	D) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	

بر اساس نتایج حاصل، افزایش درصد ضخامت لایه اکسید منجربه کاهش ضریب پواسون، افزایش مدول یانگ، مدول بالک و مدول برشی در ورقهای آلومینیومی میشود. همچنین وابستگی کمیتهای مختلف عمدتاً به صورت غیرخطی بوده و استفاده از درونیابی خطی میتواند خطای قابل توجهی داشته

باشد. همچنین بر اساس نتایج عددی، دما از عوامل تأثیرگذار بر خواص مکانیکی نانوورق های آلومینیومی است، به طوری که با افزایش دما مدول یانگ، مدول برشی و مدول بالک کاهش می یابد. بر اساس نتایج عددی، روابط تحلیلی برای تخمین پارامترهای مختلف مکانیکی نانوورق های آلومینیومی ارائه شد.

مقایسه روابط تحلیلی با دادههای آزمایشگاهی، دقت مناسب و میکرو و حتی ماکرو رو اثبات کرد. قابلیت تعمیم پذیری روابط تحلیلی به نمونه های بزرگ در ابعاد

- 1. Haque
- 2. Saif
- 3. Mearini
- 4. Hoffman
- 5. Rosandi
- 6. Ma
- 7. Zeng
- 8. Sen
- 9. Embedded atomic method
- 10. Charge transfers ionic potential

- 11. Velocity Verlet algorithm
- 12. Zhou
- 13. Jeon
- 14. Face center cubic 15. Relaxation
- 16. Conjugate gradient
- 17.Li
- 18. Clausius
- 19. Maxwell
- 20. Virial

21. Tsai. 22. Irving and Kirkwood. 23. Noll 24. Hardy 25. McDowell 26. Subramaniyan and Sun 27. Cheng and Sun 28. LAMMPS **29. OVITO**

مراجع

واژەنامە

- 1. Kozlova, I. V., Zemskova, O. V., Semenov, V. S., and Stepina, I. V., "Effect of Nano-Aluminum Component on the Cement Properties", IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, Vol. 1079, No. 3, p. 032071, 2021.
- 2. Zhang, A., Yang, W., Ge, Y., Du, Y., and Liu, P., "Effects of Nano-SiO₂ and Nano-Al₂O₃ on Mechanical and Durability Properties of Cement-Based Materials: A Comparative Study", Journal of Building Engineering, Vol. 34, p. 101936, 2021.
- 3. Muzenski, S., Flores-Vivian, I., Farahi, B., and Sobolev, K., "Towards Ultrahigh Performance Concrete Produced with Aluminum Oxide Nanofibers and Reduced Quantities of Silica Fume", Nanomaterials, Vol. 10, No. 11, 2020.
- 4. Ghaffarpour Jahromi, S., and Zahedi, Н., "Investigating the Effecting of Nano Aluminum on Mechanical and Volumetric Properties of Clay", (In EN), Amirkabir Journal of Civil Engineering, Vol. 50, No. 3, pp. 597-606, 2018.
- 5. Yang, Z., He, L., Chen, J., Cong, H., and Ye, H., "Microstructure and Thermal Stability of an Ultrafine Al/Al2O3 Composite", Journal of Materials Research, Vol. 18, No. 2, pp. 272-278, 2003.
- 6. Balog, M., Poletti, C., Simancik, F., Walcher, M., and Rajner, W., "The Effect of Native Al₂O₃ Skin Disruption on Properties of Fine Al Powder Compacts", Journal of Alloys and Compounds, Vol. 509, pp. S235-S238, 2011.
- 7. Aral, G., Islam, M. M., and van Duin, A. C. T., "Role of Surface Oxidation on The Size Dependent Mechanical Properties of Nickel Nanowires: A ReaxFF Molecular Dynamics Study", Physical Chemistry Chemical Physics, 10.1039/C7CP06906E Vol. 20, No. 1, pp. 284-298, 2018.

- 8. Haque, M. A., and Saif, M. T. A., "Mechanical Behavior of 30-50 nm Thick Aluminum Films Under Uniaxial Tension", Scripta Materialia, Vol. 47, No. 12, pp. 863-867, 2002.
- 9. Mearini, G. T., and Hoffman, R. W., "Tensile Properties of Aluminum/Alumina Multi-Layered Thin Films", Journal of Electronic Materials, Vol. 22, No. 6, pp. 623-629, 1993.
- 10. Rosandi, Y., Luu, H. T., Urbassek, H. M., and Gunkelmann, N., "Molecular Dynamics Simulations of The Mechanical Behavior of Alumina Coated Aluminum Nanowires Under Tension and Compression", RSC Advances. 10.1039/D0RA01206H Vol. 10, No. 24, pp. 14353-14359, 2020.
- 11. Ma, B., Zhao, F., Cheng, X., Miao, F., and Zhang, J., "The Mechanical and Thermal Responses of Colliding Oxide-Coated Aluminum Nanoparticles", Journal of Applied Physics, Vol. 121, No. 14, p. 145108, 2017.
- 12. Zeng, H., Cheng, X., Zhang, C., and Lu, Z., "Responses of Core-Shell Al/Al₂O₃ Nanoparticles to Heating: ReaxFF Molecular Dynamics Simulations", The Journal of Physical Chemistry C, Vol. 122, No. 16, pp. 9191-9197, 2018.
- 13. Sen, F. G., Alpas, A. T., van Duin, A. C. T., and Qi, Y., "Oxidation-Assisted Ductility of Aluminium Nanowires", Nature Communications, Vol. 5, No. 1, p. 3959, 2014.
- 14. Khoei, A. R., Khajehpour, B., and Rezaei Sameti, A., "Surface Oxidization Effect on The Mechanical Behavior of Aluminum Nanopowders Under Triaxial Compression Test", Applied Surface Science, Vol. 606, p. 154907, 2022.
- 15. Nikravesh, Y., Rezaei Sameti, A., and Khoei, A. R., "An Atomistic-Continuum Multiscale Analysis for

Heterogeneous Nanomaterials and It's Application in Nanoporous Gold Foams", *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 107, pp. 353-378, 2022.

- Yousefi, E., Sun, Y., Kunwar, A., Guo, M., Moelans, N., and Seveno, D., "Surface Tension of Aluminum-Oxygen System: A Molecular Dynamics Study", *Acta Materialia*, Vol. 221, p. 117430, 2021.
- Zhou, X. W., Wadley, H. N. G., Filhol, J. S., and Neurock, M. N., "Modified Charge Transfer-Embedded Atom Method Potential for Metal/Metal Oxide Systems", *Physical Review B*, Vol. 69, No. 3, p. 035402, 2004.
- Abdolhosseini Qomi, M. J., "Hierarchical Multi-Scale Modeling of Surface Effect in Crystalline Nano-Structures Via Cauchy-Born Hypothesis", *M.Sc. thesis, Sharif University of Technology*, 2008.
- 19. Jeon, B., Sankaranarayanan, S. K. R. S., and Ramanathan, S., "Atomistic Modeling of Ultrathin Surface Oxide Growth on a Ternary Alloy: Oxidation of Al–Ni–Fe", *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 115, No. 14, pp. 6571-6580, 2011.
- 20. Zhang, Z., Zhou, S., and Chen, Z., "Preparation and Morphology of Single Crystal (Al₂O₃ Nano- Particles by Combustion Chemical Deposition", *Procedia Engineering*, Vol. 27, pp. 1284-1291, 2012.
- 21. Kirfel, A. and Eichhorn, K., "Accurate Structure Analysis with Synchrotron Radiation, The Electron Density in Al₂O₃ and Cu₂O", *Acta Crystallographica Section A*, Vol. 46, No. 4, pp. 271-284, 1990.
- 22. Li, J., Xian, Y., Zhou, H., Wu, R., Hu, G., and Xia, R., "Microstructure-Sensitive Mechanical Properties of Nanoporous Gold: A Molecular Dynamics Study", *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 26, No. 7, p. 075003, 2018.
- 23. Li, J., Li, J., Chen, Y., and Chen, J., "Strengthening Modulus and Softening Strength of Nanoporous Gold in Multiaxial Tension: Insights from Molecular Dynamics", *Nanomaterials*, Vol. 12, No. 24, 2022.
- 24. Clausius, R., "On a Mechanical Theorem Applicable to Heat", *Philosophical Magazine*, Vol. 40, pp.122-127, 1870.
- 25. Maxwell, J. C., "On Reciprocal Figures, Frames and Diagrams of Forces", *Transactions of the Royal Society of Edinburgh*, Vol. XXVI, pp.1-43, 1870.
- Maxwell, J. C., "Van Der Waals on the Continuity of the Gaseous and Liquid States", *Nature*, Vol 10, pp. 477-480, 1874.
- 27. Tsai, D. H., "The Virial Theorem and Stress Calculation in Molecular Dynamics", *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 70, No. 03, pp.1375-1382, 1979.
- 28. Irving, J. H., and Kirkwood, G., "The Statistical Mechanics Theory of Transport Processes. iv. The Equations of Hydrodynamics", *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 18, No. 6, pp. 817-829, 1950.
- 29. Noll, W., "Die Herleitung Der Grundgleichungen Der Thermomechanik Der Kontinua Aus Der

Statistichen Mechanik", *Journal of Rational Mechanics and Analysis*, Vol. 4, pp. 627-646, 1955.

- 30. Hardy, R. J., "Formulas for Determining Local Properties in Molecular Dynamics Simulation: Shock Waves", *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 76, No. 1, pp. 622-628, 1982.
- 31. Hardy, R. J., Root, S., and Swanson, D. R., "Continuum Properties from Molecular Simulations", *AIP Conference Proceedings*, Vol. 620, pp. 363-366, 2002.
- 32. Zhou, M., "A New Look at the Atomic Level Virial Stress: On Continuum-Molecular System Equivalence", *Proceedings of the Royal Society of London Series A*, Vol. 459, pp. 2347-2392, 2003.
- 33. Zhou, M., and McDowell, D. L., "Equivalent Continuum for Dynamically Deforming Atomistic Particle Systems", *Philosophical Magazine A*, Vol. 82, pp. 2547-2574, 2002.
- 34. Subramaniyan, A., and Sun, C., "Continuum Interpretation of Virial Stress in Molecular Simulations", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 45, pp. 4340-4346, 2008.
- 35. Cheng, S., and Sun, C., "Convergence of Local Atomistic Stress Based on Periodic Lattice", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 51, pp. 2027-2035, 2014.
- 36. Khoei, A. R., Rezaei Sameti, A., and Nikravesh, Y., "A Continuum-Atomistic Multi-Scale Technique for Nonlinear Behavior of Nano-Materials", *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 148, pp. 191-208, 2018.
- 37. Khoei, A. R., Mofatteh, H., and Rezaei Sameti, A., "A Multiscale Framework for Atomistic–Continuum Transition in Nano-Powder Compaction Process Using a Cap Plasticity Model", *International Journal* of Mechanical Sciences, Vol. 255, p. 108482, 2023.
- 38. Khoei, A. R., Rezaei Sameti, A., and Mofatteh, H., "Multiscale Analysis of Nano-Powder Compaction Process Using the FEM–MD Technique", *Powder Technology*, Vol. 423, p. 118507, 2023.
- 39. Li, Z., Gao, Y., Zhan, S., Fang, H., and Zhang, Z., "Molecular Dynamics Study on Temperature and Strain Rate Dependences of Mechanical Properties of Single Crystal Al Under Uniaxial Loading", *AIP Advances*, Vol. 10, p. 075321, 2020.
- 40. HE, Y., and MA, B., "Molecular Dynamics Analysis on Bending Mechanical Behavior of Alumina Nanowires at Different Loading Rates", *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, Vol. 32, pp. 3687-3698, 2022.
- 41. Erturk, A., Yildiz, Y., and Kirca, M., "Mechanical Performance and Morphological Evolution of Heat-Treated Nanoporous Gold: A Molecular Dynamics Study", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Vol. 108, pp. 15-21, 2019.
- 42. Matheson, S., and Mordehai, D., "Size-Dependent Elastic Modulus of Nanoporous Au Nanopillar",

Acta Materialia, Vol. 185, No. 1, pp. 441-452, 2020.

- 43. Li, J., Xian, Y., Zhou, H., Wu, R., Hu, G., and Xia, R., "Mechanical Properties of Nano Crystalline Nano Porous Gold Complicated by Variation of Grain and Ligament: A Molecular Dynamics Simulation", *Science China Technological Sciences*, Vol. 61, No. 1, pp. 1353-1363, 2018.
- 44. Plimpton, S., "Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics", *Journal of Computational Physics*, Vol. 117, No. 1, pp. 1-19, 1995.
- 45. Stukowski, A., "A Triangulation-Based Method to Identify Dislocations in Atomistic Models", *Journal* of the Mechanics and Physics of Solids, Vol. 70, pp. 314-319, 2014.
- 46. Gong, M. F., Qiao, S. R., and Mei, F., "Determining Young's modulus and Poisson's ratio of thin hard films", *Surface Engineering*, Vol. 30, No. 8, pp. 589-593, 2014/08/01 2014.
- 47.. Grünwald, E., Nuster, R., Paltauf, G., Maier, T., Wimmer-Teubenbacher, R., Konetschnik, R., Kiener, D., Leitgeb, V., Kock, A., and Brunner, R., "Laser Ultrasonic Thin Film Characterization of Si-Cu-Al-Cu Multi-Layered Stacks", *Materials Today: Proceedings*, Vol. 4, No. 7, Part 2, pp. 7122-7127, 2017.
- 48. Haque, M. A. and Saif, M. T. A., "Thermo-Mechanical Properties of Nano-Scale Freestanding Aluminum Films", *Thin Solid Films*, Vol. 484, No. 1, pp. 364-368, 2005.