



Impression of temperature and oxide layer thickness on the mechanical characteristics of aluminum ultra-thin film

Hossein Abbasi and Amir Rezaei Sameti*

Department of Civil Engineering, Faculty of Engineering, Bu-Ali Sina University, 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 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.

Received: Jan. 21, 2024; Revised: Apr. 03, 2024; Accepted: Apr. 06, 2024; Published Online: Jul. 22, 2024.

* Corresponding Author: a.rezaeisameti@basu.ac.ir

How to Cite: Abbasi Hossein and Rezaei Sameti Amir, Impression of temperature and oxide layer thickness on the mechanical characteristics of aluminum ultra-thin film, Journal of Computational Methods in Engineering; 2024, 43(1), 105-121; DOI: 10.47176/jcme.43.1.1025.





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

چکیده- ورق‌های آلومینیومی با توجه به خواص ویژه خود از جمله چگالی پایین و شکل‌پذیری 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 واکنش‌پذیری بالای آلومینیوم در مجاورت اکسیژن، مدل‌سازی اولیه بر اساس مدل هسته فلزی و پوسته اکسید فلزی صورت می‌پذیرد که در آن امکان بررسی تأثیر ضخامت‌های مختلف لایه اکسید سطحی بر رفتار مکانیکی ورق‌های نازک آلومینیومی امکان‌پذیر است. پس از ایجاد ساختار اولیه، نمونه‌ها تحت شرایط محیطی پایداری شده و انرژی آن‌ها کمینه‌سازی می‌شود. به منظور بررسی رفتار مکانیکی، نمونه‌ها تحت آزمون‌های مختلف مکانیکی ارزیابی شده و پارامترهای مختلف مکانیکی آن‌ها از جمله مدول یانگ، مدول بالک، مدول برشی و درایه‌های مختلف ماتریس خواص ماده در دماهای مختلف اندازه‌گیری می‌شود. دقت مدل‌سازی‌های صورت گرفته از شبیه‌سازی عددی با نتایج آزمایشگاهی موجود صحت‌سنجی می‌شود. بر اساس نتایج عددی، روابطی تحلیلی برای تعیین پارامترهای مختلف مکانیکی ورق‌های نازک آلومینیومی با ضخامت‌های مختلف از لایه اکسیداسیون سطحی در دماهای مختلف ارائه شد. مقایسه روابط تحلیلی به دست آمده با داده‌های آزمایشگاهی، بیانگر دقت مناسب آن‌ها و همچنین قابلیت تعمیم‌پذیری روابط حاصل به ورق‌های آلومینیومی با ابعاد میکرو و ماکرو است.

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

دریافت مقاله: ۱۴۰۲/۱۱/۰۱، بازنگری: ۱۴۰۳/۰۱/۱۵، پذیرش: ۱۴۰۳/۰۱/۱۸، اولین انتشار: ۱۴۰۳/۰۵/۰۱

*: نویسنده مسئول، رایانامه: a.rezaeisameti@basu.ac.ir



فهرست علائم

انرژی الکترواستاتیک	E_{CTI}	انرژی مربوط به پتانسیل EAM	E_{EAM}
بار الکتریکی برای اتم i	q_i	فاصله بین اتم‌های i و j	r_{ij}
انرژی‌های برهم‌کنش الکترواستاتیک بین جفت اتم‌ها	V_{ij}	چگالی الکترون برای اتم i	ρ_i
درایه ij از ماتریس خواص ماده	C_{ij}	برهم‌کنش جفتی بین اتم‌های i و j	ϕ_{ij}
دما	T	انرژی لازم برای جاسازی اتم i	F_i
مدول بالک	K	مدول برشی	G
ضخامت کلی لایه اکسید	OLT	مدول یانگ	E
سرعت ذره در زمان t	$v(t)$	انرژی پتانسیل کل سیستم اتمی	E_{tot}
شتاب ذره در زمان t	$a(t)$	جرم اتم i	m_i

۱- مقدمه

آلومینیومی در مرحله 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 می‌شود [۵]. لایه اکسید فلزی تشکیل شده در سطح بیرونی این قطعات، هسته‌های فلزی را از تماس با محیط بیرونی محافظت می‌کند 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 تأثیر عوامل مختلفی همچون نقص‌های سطحی، چگالی و ضخامت است. وجود پوشش اکسید فلزی در مقیاس نانو، یکی از چالش‌های توسعه مواد نانو با ویژگی‌های 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 قرار گرفته است [۷].

با توجه به کاربردهای متنوع نانورق‌های آلومینیومی، مطالعات متعددی به صورت آزمایشگاهی برای بررسی خواص مکانیکی آن‌ها صورت گرفته است. از جمله تحقیقات صورت گرفته در این راستا، می‌توان به مطالعه هاگیو^۱ و

آلومینیوم با توجه به خواص ویژه خود، در صنایع بسیار 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. آلومینیوم در ساختمان‌ها و سازه‌ها در طیف وسیعی از کاربردهای متفاوت مورد استفاده قرار می‌گیرد که از جمله آن می‌توان به در و پنجره، سقف‌های آلومینیومی داخل و خارج ساختمان‌ها و کارخانه‌ها، ورق‌های روکش‌دار پیش‌ساخته آلومینیومی برای نمای ساختمان‌های عظیم، ویتترین 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 نانورق‌های آلومینیومی دارای اهمیت بسزایی است. نانو ورق‌های

سیف^۲ [۸] اشاره کرد که در آن نمونه‌های آلومینیومی با ضخامت‌های 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 ورق‌های نازک مقاومت آنها افزایش می‌یابد. میرینی^۳ و هافمن^۴ [۹] نیز به بررسی خواص مکانیکی سه لایه آلومینیوم خالص، اکسید آلومینیوم و یک لایه کامپوزیتی از آلومینیوم و اکسید آلومینیوم تحت کشش تک محوری پرداختند. بر اساس نتایج حاصل، ورق‌های کامپوزیتی مقاومت کششی نهایی بالاتری را نسبت به آلومینیوم داشته و همچنین انعطاف‌پذیری و کرنش‌های شکست بالاتری را نسبت به آلومینای نشان می‌دهند. با وجود تلاش‌های صورت گرفته، مطالعات آزمایشگاهی گزارش شده برای شناخت رفتار مکانیکی نانورق‌های آلومینیومی و تعیین عوامل تأثیرگذار بر خواص مکانیکی آنها بسیار محدود و هزینه‌بر 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 آلومینیومی بر اساس مدل هسته فلزی-پوسته اکسید فلزی 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 شکل‌پذیری بیشتری دارند. همچنین با افزایش ضخامت پوشش اکسید آلومینیوم، 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 ترمودینامیکی نانوذرات آلومینیوم با لایه اکسید سطحی 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^۸ 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 آلومینیوم تحت آزمون هیدرواستاتیک 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 نانورق‌های آلومینیومی در دماهای مختلف پرداخته شده و پارامترهای مختلف مکانیکی ارزیابی می‌شود. در ادامه در بخش دوم به بیان نحوه ایجاد پیکربندی اولیه نانورق‌های آلومینیومی پرداخته شده و جزئیات مدل‌سازی رفتار مکانیکی آن-ها بر اساس روش دینامیک مولکولی ارائه می‌شود. در نهایت در بخش سوم، نتایج حاصل از مدل‌سازی عددی ارائه شده و به بررسی نتایج پرداخته می‌شود.

۲- مدل‌سازی نانورق‌های 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 نانورق‌های 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

در روابط فوق $\vec{F}_i(t)$ 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 برگشت‌پذیر است.

همان‌گونه که در روابط مشاهده می‌شود، پتانسیل بین اتمی از جمله مهم‌ترین عواملی است که نقش بسزایی در دقت مدل‌سازی دینامیک مولکولی دارد. یوسفی و همکاران [۱۶] در مطالعه‌ای به ارزیابی دقت پتانسیل‌های مختلف برای مدل‌سازی اتم‌های اکسیژن و آلومینیوم پرداختند. آن‌ها نشان دادند که پتانسیل EAM^9+CTI^{10} ارائه شده توسط ژو^{۱۲} و همکاران [۱۷]، دارای دقت مناسبی در مدل‌سازی اندرکنش اتم‌های آلومینیوم و اکسیژن است. این پتانسیل به صورت ترکیبی از دو پتانسیل شامل پتانسیل اتم تعبیه شده (EAM) و پتانسیل انرژی الکترواستاتیک (CTI) است که انرژی بین ذرات را به ترتیب بر اساس روابط زیر تعریف می‌کند:

$$E_{EAM} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i \left(\sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij}) \right) \quad (7)$$

$$E_{CTI} = \sum_i E_i(q_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} V_{ij}(r_{ij}, q_i, q_j) \quad (8)$$

در روابط فوق، E_{EAM} انرژی مربوط به پتانسیل EAM، r_{ij} فاصله بین اتم‌های i و j ، ρ_i چگالی الکترون برای اتم i ، ϕ_{ij} برهم‌کنش جفتی بین اتم‌های i و j ، F_i انرژی لازم برای جاسازی اتم i است. E_{CTI} انرژی الکترواستاتیک، q_i بار الکتریکی برای اتم i و V_{ij} انرژی‌های برهم‌کنش الکترواستاتیک بین همه جفت اتم‌ها است. به‌طور کلی پتانسیل EAM از جمله پتانسیل‌های پرکاربرد برای مدل‌سازی فلزات و آلیاژهای فلزی است که بر پایه مکانیک کوانتومی بوده و پارامترهای آن به صورت نیمه‌تجربی تعیین می‌شود. در این پتانسیل، جزء اول (ϕ_{ij}) شامل اندرکنش جفتی بین اتم‌ها است که انرژی ناشی از اندرکنش الکترواستاتیکی هسته-هسته را لحاظ می‌کند و جزء دوم (F_i)

پرکاربرد همانند مدول یانگ، ضریب پواسون، مدول برشی، مدول بالک و درایه‌های مختلف ماتریس خواص ماده ارزیابی می‌شود. روش دینامیک مولکولی این امکان را فراهم می‌سازد تا بتوان رفتار مکانیکی این قطعات را به صورت عددی و با دقت اتمی ارزیابی کرد. در این روش معادلات حرکتی نیوتن برای توصیف حرکات ذرات استفاده می‌شود؛ به طوری که معادله حاکم بر سیستم اتمی شامل N ذره بر اساس رابطه زیر بیان می‌شود.

$$m_i \vec{a}_i(t) = \vec{F}_i(t) = - \frac{\partial E_{tot}}{\partial \vec{r}_i(t)} \quad (1)$$

در رابطه فوق E_{tot} انرژی پتانسیل کل سیستم اتمی که بر اساس تابع پتانسیل بین اتمی تعیین می‌شود. $\vec{r}_i$ ، m_i و $\vec{F}_i$ به ترتیب جرم، بردار مکان و بردار نیرو اتم نام t بیانگر زمان است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود معادله حاکم بر سیستم اتمی، یک معادله دیفرانسیل مرتبه دوم است که می‌توان آن را با به‌کارگیری الگوریتم ورلت سرعتی^{۱۱} حل کرد [۱۵]. در الگوریتم ورلت سرعتی، با معلوم بودن وضعیت مختصات و سرعت ذرات سیستم در زمان t ، مختصات ذرات در زمان $t+\Delta t$ بر اساس بسط تیلور مطابق با رابطه زیر تعیین می‌شود:

$$\vec{r}_i(t+\Delta t) = \vec{r}_i(t) + \Delta t \times \vec{v}_i(t) + \frac{1}{2} \Delta t^2 \times \vec{a}_i(t) \quad (2)$$

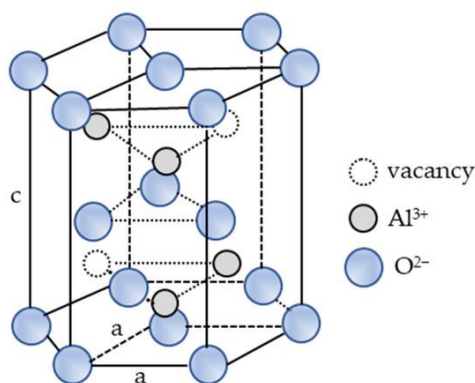
در رابطه فوق $\vec{v}_i(t)$ و $\vec{a}_i(t)$ به ترتیب بردار سرعت و بردار شتاب اتم نام در زمان t است. در الگوریتم ورلت سرعتی، شتاب نیم‌گام به صورت میانگین شتاب در ابتدا و انتهای گام زمانی در نظر گرفته می‌شود و سرعت در نیم‌گام با استفاده از رابطه (۳) مطابق زیر محاسبه می‌شود:

$$\vec{v}_i(t + \frac{1}{2} \Delta t) = \vec{v}_i(t) + \Delta t \times \frac{\vec{a}_i(t)}{2} \quad (3)$$

$$\vec{a}_i(t + \frac{1}{2} \Delta t) = \frac{\vec{a}_i(t) + \vec{a}_i(t + \Delta t)}{2} \quad (4)$$

$$\vec{v}_i(t + \Delta t) = \vec{v}_i(t + \frac{1}{2} \Delta t) + \Delta t \times \frac{\vec{a}_i(t + \Delta t)}{2} \quad (5)$$

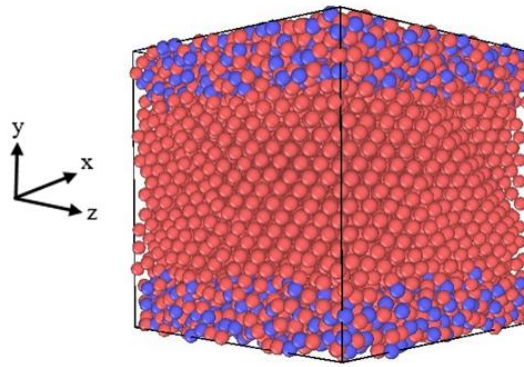
$$\vec{a}_i(t + \Delta t) = \frac{\vec{F}_i(t + \Delta t)}{m_i} \quad (6)$$



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

آلومینیومی واکنش پذیری بالایی در مجاورت اکسیژن داشته و از این رو همواره دارای لایه‌های نازک از اکسید آلومینیوم در سطح خود هستند که به میزان قابل توجهی بر رفتار مکانیکی این نمونه‌ها تأثیر می‌گذارد. با توجه به پیچیدگی‌های زیاد در فرایند اکسیداسیون و هزینه بالای انجام آزمایشات تجربی، در این مطالعه تأثیر اکسیداسیون سطحی بر خواص مکانیکی نانو ساختارهای ورق‌هایی 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 می‌شود [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 می‌شود [۱۲]. ساختار اولیه‌ی اتم‌ها در هسته آلومینیومی به صورت FCC^{14} با ثابت شبکه برابر $4/046$ انگستروم در نظر گرفته می‌شود. همچنین ساختار اولیه‌ی اتم‌ها در پوسته اکسید آلومینیوم بر اساس ساختار کوراندوم ($\alpha-Al_2O_3$) مدل‌سازی می‌شود 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 پایداری سازی نمونه‌ها فرایند کمینه‌سازی انرژی^{۱۵} صورت می‌پذیرد. در این راستا، ابتدا انرژی نمونه بر اساس روش گرادیان مزدوج^{۱۶} مینیمم شده، سپس با استفاده از هنگرد دما ثابت (NVT) در

اندرکنش‌های چند اتمی را در نظر می‌گیرد که تحت عنوان انرژی لازم برای جاسازی اتم شناخته می‌شود. 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 به دست 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 می‌شود [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 می‌شود تا بتواند انرژی ذرات در ساختار آلومینیوم اکسید را به خوبی مدل کند. در پتانسیل CTI، جزء اول (E_1) انرژی ناشی از پیوند یونی و جزء دوم (V_{ij}) انتقال بار بین همه جفت اتم‌ها را بیان می‌کند [۱۷]. بر این اساس، پتانسیل ترکیبی EAM+CTI دارای قابلیت مدل‌سازی پیوندهای فلزی و اکسید فلزی را دارا است. جئون^{۱۳} و همکاران [۱۹] با استفاده از این پتانسیل به بررسی تأثیر دما و همچنین تأثیر جنس ماده بر روند اکسیداسیون سطحی فلزات پرداختند. همانگونه که در بخش قبل اشاره شد، ورق‌های نازک



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

پایدار برسد. این روش بارگذاری این امکان را فراهم می‌سازد تا بتوان بارگذاری را به صورت شبه‌استاتیکی بر نمونه اعمال کرد [۲۳]. در تمامی تحلیل‌های دینامیک مولکولی صورت گرفته گام زمانی ۱ فمتوثانیه لحاظ شده است.

لازم به ذکر است که به منظور محاسبه پارامترهای مختلف مکانیکی برای نانورق 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 اثبات شده است. در این حالت تنش برای اتم i بر اساس رابطه زیر تعیین می‌شود:

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

در رابطه فوق، σ تانسور تنش وایرال، V حجم، m_i و $\vec{v}_i$ به ترتیب جرم و بردار سرعت اتم i ، $\vec{r}_{ij}$ و $\vec{f}_{ij}$ 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 غیرتعدلی و سری توزیع دلتا دیراک، روابطی را برای محاسبه تنش ارائه کردند. نال^{۲۳} [۲۹] رابطه تحلیلی را برای محاسبه تنش بدون نیاز به بسط سری ارائه کرد. هاردی^{۲۴} و

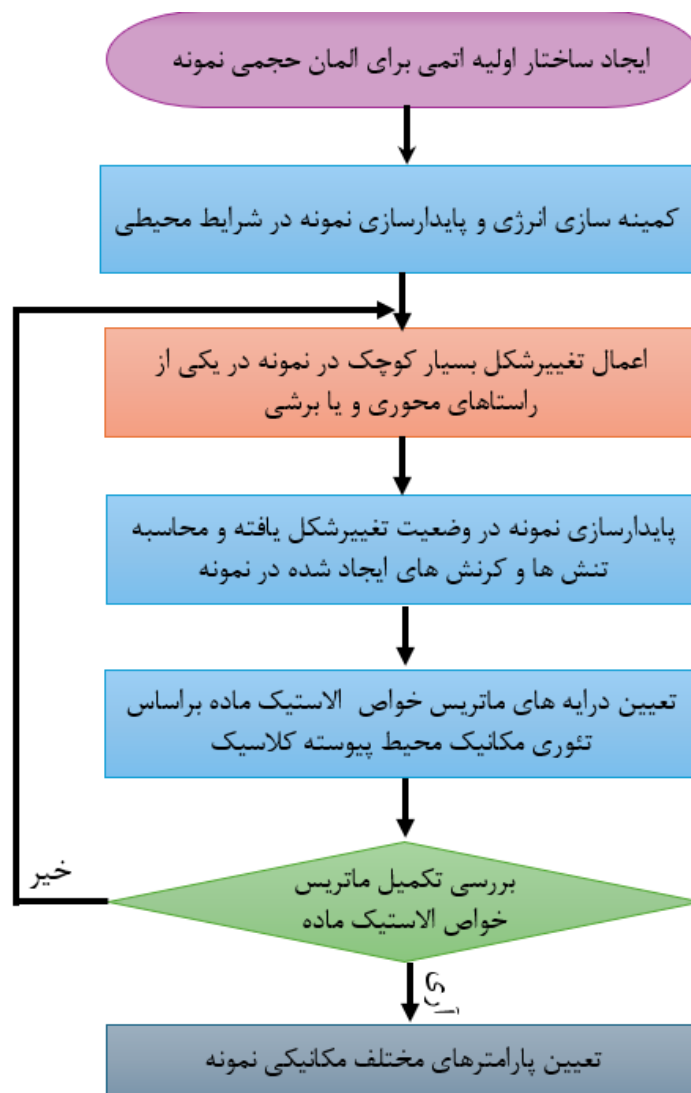
مدت زمان ۲۰ پیکوثانیه دمای نمونه منطبق با دمای محیط حدوداً برابر ۳۰۰ درجه کلوین تنظیم شده و در ادامه با استفاده از هنگرد دما- فشار ثابت (NPT) در مدت زمان ۲۰ پیکوثانیه فشار نمونه در هر سه جهت با شرایط محیطی حدوداً برابر ۱ اتمسفر سازگار می‌شود. در فرایند پایدارسازی دما و فشار، گام زمانی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برابر ۱ فمتوثانیه در نظر گرفته می‌شود. شکل (۲) نمونه‌ای از ساختار اتمی المان حجمی نمونه برای نانورق آلومینیوم بعد از فرایند پایدارسازی ارائه شده است. این نمونه‌ها دارای ابعاد 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 بزرگ‌تر را دارا باشد. پس از مدل‌سازی ساختارهای نانورق‌های آلومینیومی، نمونه‌ها تحت بارگذاری‌های مختلف کششی، فشاری و برشی قرار گرفته و بر اساس نتایج حاصل، پارامترهای مختلف مکانیکی برای نمونه‌ها اندازه‌گیری می‌شود. فرایند اعمال تغییر شکل در هنگرد دما- فشار ثابت انجام پذیرفته و به منظور حذف اثرات دینامیکی ناشی از نرخ کرنش بارگذاری 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 می‌شود و سپس اجازه داده می‌شود که فرایند تغییرشکل پایدار شود و انرژی آن به حالت

می‌توان کرنش بسیار کمی در راستای محوری و یا برشی در نمونه ایجاد کرد و با محاسبه نسبت تغییرات تنش‌ها به تغییرات کرنش 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 تعیین مشخصات مکانیکی و پارامترهای الاستیک و استخراج نمودار تنش-کرنش منطبق با مفاهیم مکانیک محیط پیوسته کلاسیک برای ساختار اتمی و با استفاده از تحلیل دینامیکی مولکولی به کار برده شده است. همچنین در اینجا از نرم‌افزار متن‌باز 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، ضریب پواسون و درایه‌های مختلف ماتریس خواص ماده، شامل $C_{11} = \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial \epsilon_{11}}$ ، $C_{12} = \frac{\partial \sigma_{11}}{\partial \epsilon_{12}}$ و $C_{44} = \frac{\partial \sigma_{12}}{\partial \epsilon_{12}}$ برای نانورق‌های آلومینیومی با درصد اکسید مختلف در دماهای مختلف ارزیابی می‌شود. بر این منظور پاسخ‌های مکانیکی نمونه‌های مختلف نانورق آلومینیوم تحت تغییرشکل‌های مختلف شبیه‌سازی شده و پارامترهای مکانیکی مختلف آن‌ها بر اساس تعاریف تئوری مکانیک محیط پیوسته کلاسیک تعیین می‌شود. 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 تنش‌ها به تغییرات کرنش در نمونه، پارامترهای مختلف الاستیک بر اساس تئوری مکانیک محیط پیوسته کلاسیک محاسبه می‌شود. لازم به ذکر است که در اینجا از مفهوم تنش میانگین و ایرال استفاده می‌شود 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

همکاران [۳۰ و ۳۱] با استفاده از توابع وزنی و بر اساس مفهوم میانگین‌گیری 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} [۳۲] و ژو [۳۳] تنش معادل مکانیک محیط پیوسته کلاسیک را برای محیط اتمی بر اساس مفهوم میانگین‌گیری حجمی از تنش و ایرال تعیین کردند که بر این اساس اثرات غیرمحمولی بودن در ساختار اتمی را ناچیز کرده است. سابرامانین و سان^{۲۶} [۳۴] نیز تنش میانگین و ایرال را به صورت معادل تنش کوشی در محیط پیوسته اثبات کردند. چنگ و سان^{۲۷} [۳۵] اثبات کردند که حجم لازم برای میانگین‌گیری جهت از بین بردن اثرات غیرمحمولی در محاسبه تنش در ساختار اتمی، برای حالت پریودیک کره‌ای 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 میانگین‌گیری تنش و ایرال در مطالعات متعددی مورد پذیرش واقع شده است. از جمله مطالعات صورت گرفته می‌توان 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 میانگین‌گیری تنش و ایرال از المان حجمی نمونه اتمی محاسبه شده است. در این مطالعه نیز به منظور حذف اثرات غیرمحمولی از مفهوم میانگین‌گیری تنش و ایرال بر روی المان حجمی نمونه اتمی برای نانورق آلومینیومی 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 میانگین‌گیری به‌دست می‌آید که بیانگر تنش معادل در یک نقطه مادی از نانورق آلومینیومی در مقیاس درشت است. از این رو رابطه تنش-کرنش و پارامترهای مختلف منطبق با تئوری مکانیک محیط پیوسته کلاسیک تعیین می‌شود. در این حالت، بر اساس تئوری مکانیک محیط پیوسته،



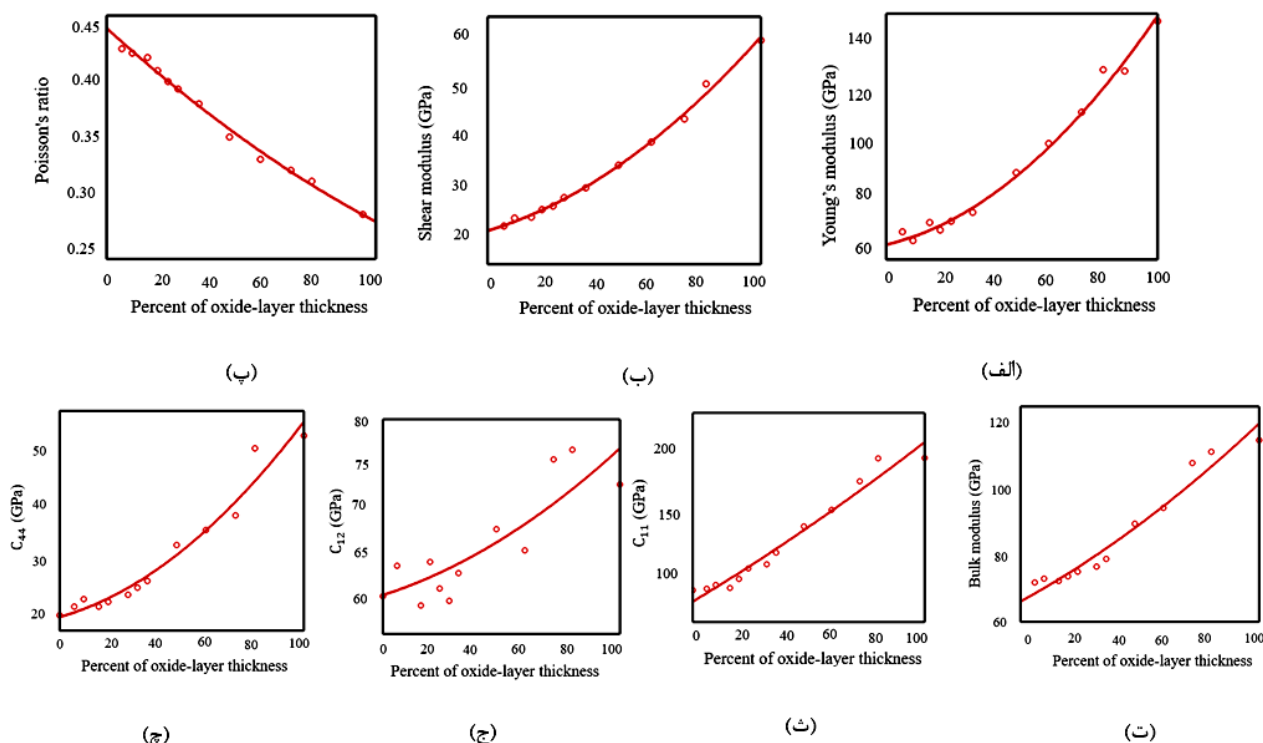
شکل ۳- جزییات نحوه محاسبه پارامترهای مختلف مکانیکی

جدول ۱- مقایسه نتایج پارامترهای مکانیکی آلومینیوم و آلومینا

مشخصات مواد	آلومینیوم		آلومینا	
	آزمایشگاهی	شبیه سازی	آزمایشگاهی	شبیه سازی
مدول یانگ (گیگاپاسکال)	۷۰ [۴۷]	۶۹	۱۰۶ - ۱۶۶ [۴۶]	۱۴۴/۲۲
ضریب پواسون	۰/۳۳ [۴۷]	۰/۳۵	۰/۲۶ - ۰/۲۸ [۴۶]	۰/۲۸

موجود ارزیابی می شود. نتایج حاصل از این مقایسه در جدول (۱) ارائه شده است. همانگونه که مشاهده می شود، نتایج در محدوده داده های آزمایشگاهی هستند که این امر نیز دقت نتایج

مختلف مکانیکی، ضریب پواسون و مدول یانگ، نمونه های شامل آلومینیوم و آلومینا خالص مدل شده و نتایج حاصل از مدل سازی عددی با نتایج حاصل از داده های آزمایشگاهی



شکل ۴- نمودار تغییرات (الف) مدول یانگ (ب) مدول برشی، (پ) ضریب پواسون، (ت) مدول بالک (ث) C_{11} ، (ج) C_{12} و (چ) C_{44} بر حسب درصد لایه اکسید برای نانورق‌های آلومینیومی

افزایش پیدا می‌کند، مدول بالک از ۶۵ گیگاپاسکال به ۱۲۰ گیگاپاسکال افزایش پیدا کرده و مقدار ضریب پواسون از ۰/۴۵ تا ۰/۲۸ رو به کاهش است. همچنین مقادیر C_{11} ، C_{12} و C_{44} هم با افزایش درصد لایه اکسید افزایش می‌یابند. این تغییرات در پارامترهای C_{11} و C_{44} با افزایش دو برابری است اما در C_{12} این افزایش کمتر مشاهده می‌شود. همانگونه که در این اشکال مشاهده می‌شود، درصد لایه اکسید تأثیر بسیار بالایی بر مقادیر پارامترهای مختلف مکانیکی نمونه داشته و با تغییر درصد لایه اکسید، مقادیر پارامترهای مختلف می‌تواند دچار تغییرات قابل ملاحظه‌ای شود. از این رو بایستی در کاربرد ورق‌های نازک آلومینیوم، توجه بالایی به میزان درصد لایه اکسید کرد و پارامترهای مکانیکی متناسب با آن را در مدل‌سازی‌های عددی در نظر گرفت. به طور کلی تغییر پارامترهای مختلف نانورق‌های آلومینیومی با درصد لایه اکسید ناشی از سخت‌تر و مقاوم‌تر بودن ساختار اتمی آلومینا نسبت به آلومینیوم است. به طور کلی اتم‌های

عددی و تعیین مناسب پارامترهای مختلف مکانیکی را می‌تواند تایید کند. پس از صحت‌سنجی نتایج به‌دست آمده، درصد‌های مختلفی از لایه اکسید روی نمونه نانورق شبیه‌سازی شده و پارامترهای مختلف مکانیکی آن‌ها ارزیابی می‌شود. برای این منظور ۱۲ نمونه نانورق 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 نتایج حاصل و تعاریف مکانیک محیط پیوسته، پارامترهای مکانیکی نمونه‌ها محاسبه شده و نتایج حاصل در قالب نمودارهایی در شکل (۴) ارائه می‌شود.

همانطور که در شکل (۴) مشاهده می‌شود، 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

آلومینا دارای پیوندهای یونی بوده و ساختار بسیار محکم‌تری را نسبت به اتم‌های آلومینیوم که دارای پیوندهای فلزی هستند، به وجود می‌آورند. از این رو با افزایش ضخامت لایه اکسید مدول یانگ و مدول برشی نمونه افزایش یافته و ضریب پواسون آن کاهش می‌یابد. همچنین مشاهده می‌شود که تغییرات پارامترهای مختلف مکانیکی با درصد لایه اکسید عموماً به صورت غیرخطی است و از این رو استفاده از درون‌یابی خطی برای تعیین مشخصات مکانیکی این نمونه‌ها می‌تواند خطای قابل ملاحظه‌ای را دربر داشته باشد.

به‌طور کلی دما از پارامترهای تأثیرگذار بر رفتار مکانیکی نمونه‌های مختلف بوده و در مطالعات مختلف، تأثیر دما بر پاسخ‌های مکانیکی مواد مختلف ارزیابی شده است. از جمله مطالعات صورت گرفته در این زمینه می‌توان به تحقیقات هاکیو^۱ و سیف^۲ [۴۸] اشاره کرد که در آن به صورت تجربی به بررسی خواص مکانیکی - حرارتی فیلم‌های آلومینیومی در مقیاس نانو پرداخته‌اند. آن‌ها نشان دادند که افزایش دما منجر به کاهش مدول یانگ در نانورق‌های آلومینیوم می‌شود. در این 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 کلون تکرار شده و مقادیر پارامترهای مختلف مکانیکی محاسبه می‌شود. بررسی اثر دما بر رفتار مکانیکی ورق‌های آلومینیوم 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 می‌شود، پارامترهای مختلف به 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 درصد‌های با افزایش دما کاهش می‌یابد که نشان دهنده کاهش شیب نمودار تنش - کرنش و رفتار نرم‌تر نمونه‌ها است که با روند مشاهده شده در آزمایش هاکیو و سیف [۴۸] همخوانی دارد. همچنین مشاهده می‌شود که وابستگی پارامترهای مختلف 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 کاربردی‌تر نتایج حاصل، توابعی تحلیلی برای محاسبه پارامترهای مکانیکی ورق‌های نازک آلومینیومی به صورت تابعی از دما و درصد لایه اکسید تعیین می‌شود. 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 به‌دست آمده از قرار زیر هستند:

$$E = 230T^{-0.2}[(OLT)^2 + 1] \quad (10)$$

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

$$K = 174T^{-0.15}[(OLT)^2 + 1] \quad (12)$$

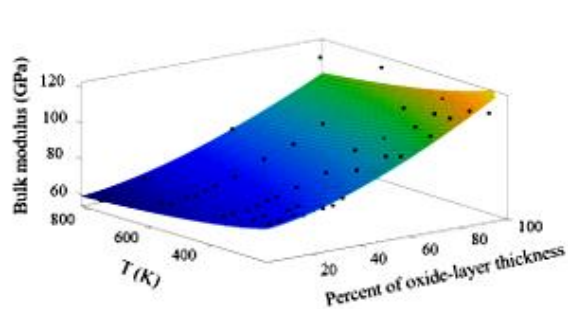
$$C_{11} = 222T^{-0.2}[4.2(OLT)^2 + 1] \quad (13)$$

$$C_{12} = 183T^{-0.2}[(OLT)^2 + 1] \quad (14)$$

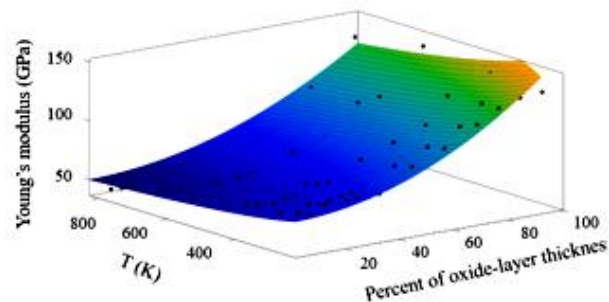
$$C_{44} = 71T^{-0.2}[2(OLT)^2 + 1] \quad (15)$$

در معادلات بالا متغیرهای OLT نشان دهنده‌ی نسبت مجموع ضخامت لایه اکسید در سطح فوقانی و تحتانی به ضخامت کل ورق آلومینیوم بوده و T بیانگر دما برحسب کلون است. همچنین واحد تمام معادلات بر حسب گیگاپاسکال است.

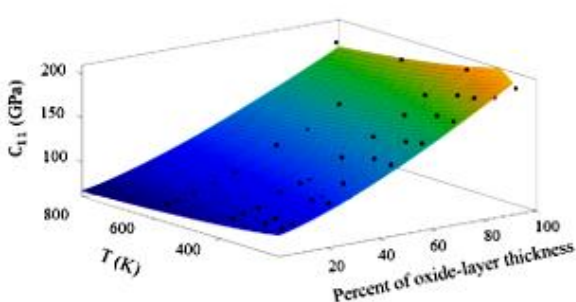
بنابر معادلات به‌دست آمده، به وضوح رابطه غیرخطی بین پارامترهای مختلف مکانیکی نانورق آلومینیومی با دما و ضخامت لایه اکسید قابل مشاهده است. از این رو، استفاده از درون‌یابی خطی برای تخمین تأثیر این پارامترها می‌تواند خطای قابل توجهی



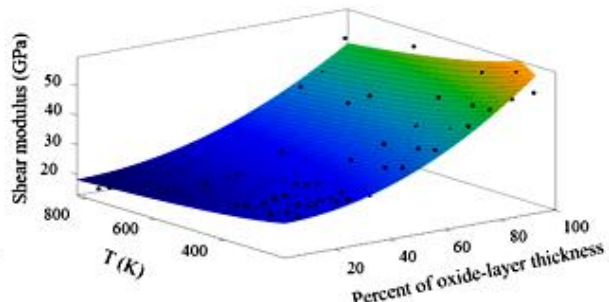
ب



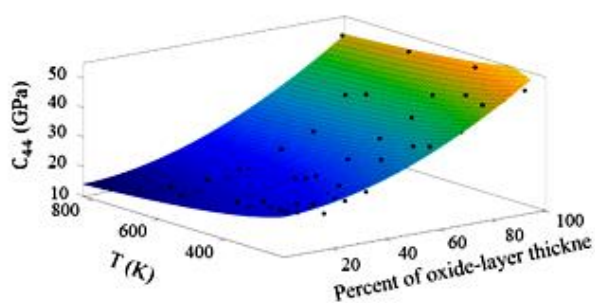
الف



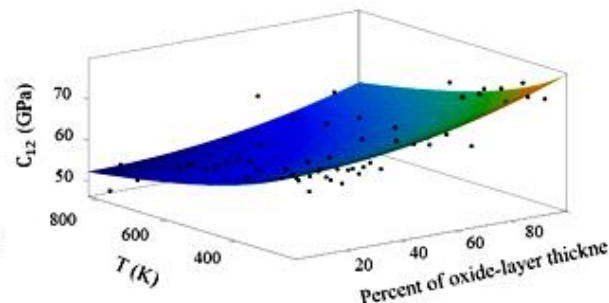
ت



پ



ج



ث

شکل ۵- نمودار تغییرات (الف) مدول یانگ، (ب) مدول بالک و (پ) مدول برشی (ت) C_{11} ، (ث) C_{12} و (ج) C_{44} بر حسب دما و درصد لایه اکسید

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

را در محاسبات ایجاد کند. به منظور بررسی دقت معادلات تعیین شده، مقایسه ای بین مقادیر آزمایشگاهی گزارش شده توسط هاگ و سیف [۴۸] با معادلات فوق صورت می پذیرد. این مقایسه در سه

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

منابع	درصد خطا	دما (سانتی گراد)	مدول یانگ (گیگاپاسکال)
نتایج آزمایشگاهی [۴۸]	۴/۳۲	۴۳	۶۳/۹۹۵
معادلات پیشنهادی			۶۱/۲۲
نتایج آزمایشگاهی [۴۸]	۲/۴۳	۷۶	۵۸/۴۲
معادلات پیشنهادی			۵۹/۸۴
نتایج آزمایشگاهی [۴۸]	۲/۳	۹۷	۵۶/۷۰
معادلات پیشنهادی			۵۸/۰۴

جدول ۳- جزئیات نمونه‌های بزرگ‌تر

نمونه	A	B	C	D
لایه اکسید (درصد)	۴۸	۲۰	۳۲	۲۴

تعمیم‌پذیری 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 نانورق آلومینیوم بر اساس شبکه‌بندی کریستالی ایجاد شد که در آن هسته فلزی بر اساس ساختار FCC 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 می‌شود. بارگذاری‌های مختلف محوری و برشی به صورت شبه‌استاتیکی به نمونه اعمال شد و پارامترهای مختلف مکانیکی آن مطابق با تعاریف متعارف ارزیابی شد. مقایسه نتایج حاصل با داده‌های آزمایشگاهی بیانگر دقت مناسب و توانایی بالای مدل‌سازی صورت گرفته برای تعیین پارامترهای مختلف مکانیکی است.

بر اساس نتایج حاصل، افزایش درصد ضخامت لایه اکسید منجر به کاهش ضریب پواسون، افزایش مدول یانگ، مدول بالک

داشته و با دقت مناسبی می‌تواند 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، می‌توان دریافت که نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی تنها منحصر به نمونه‌های با ابعاد بسیار کم نبوده و قابلیت تعمیم‌پذیری به نمونه‌هایی با ضخامت‌های بزرگ‌تر حتی در ابعاد میکرو و ماکرو را دارا است. قابلیت تعمیم‌پذیری نتایج به نمونه‌های بزرگ، ویژگی بسیار مهمی برای معادلات تعیین شده است که دامنه کاربرد این روابط را گسترده کرده و می‌تواند بیانگر عدم انحصار نتایج برای نانو ورق‌ها باشد. در این قسمت به منظور بررسی دقیق‌تر قابلیت تعمیم‌پذیری معادلات ارائه 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 می‌شوند. جزئیات نمونه‌های بزرگ‌تر و نتایج حاصل از تحلیل آن‌ها به ترتیب در جدول‌های (۳) و (۴) ارائه شده است. بر اساس نتایج به‌دست آمده می‌توان نتیجه گرفت که نتایج با درصد خطای بسیار کمی به هم نزدیک هستند و نشان می‌دهد که این روابط قابلیت

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

نمونه	مدول یانگ (گیگاپاسکال)	درصد خطا	مدول برشی (گیگاپاسکال)	درصد خطا	مدول بالک (گیگاپاسکال)	درصد خطا
مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	۸۵/۸۶	۵/۳۶	۳۴/۲۶	۰/۷۵	۸۵/۸۰	۵/۹۲
(A) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	۹۰/۷۳		۳۴/۵۲		۹۱/۲	
مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	۶۶/۳۷	۴/۰۳	۲۵/۳۳	۴/۵۹	۷۲/۵۲	۴/۱۳
(B) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	۶۹/۱۶		۲۶/۵۵		۷۵/۶۵	
مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	۷۲/۹۴	۴/۸۴	۲۸/۲۶	۲/۶۵	۷۶/۸۷	۲/۸۹
(C) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	۷۶/۶۵		۲۹/۰۳		۷۹/۱۶	
مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	۶۹/۶۴	۴/۶۵	۲۶/۱۵	۴/۴۵	۷۳/۷۵	۵/۴۰
(D) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	۷۳/۰۴		۲۷/۳۷		۷۷/۹۶	
نمونه	C_{11} (گیگاپاسکال)	درصد خطا	C_{12} (گیگاپاسکال)	درصد خطا	C_{44} (گیگاپاسکال)	درصد خطا
مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	۱۵۶/۵۲	۳/۲۲	۸۰/۷۱	۴/۹۴	۲۹/۴۶	۵/۸۳
(A) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	۱۵۱/۴۸		۷۶/۷۲		۳۱/۱۸	
مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	۹۲/۹۱	۶/۲۸	۶۸/۲۲	۴/۲۷	۲۱/۷۸	۵/۰۹
(B) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	۹۹/۱۴		۷۱/۲۷		۲۲/۸۹	
مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	۱۱۳/۷۶	۰/۱۶	۷۲/۳۲	۴/۶۷	۲۴/۳۰	۱/۱۵
(C) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	۱۱۳/۹۵		۷۵/۸۷		۲۴/۰۲	
مقادیر حاصل از معادلات پیشنهادی	۹۸/۸۰	۱/۹۵	۶۹/۳۸	۳/۵۹	۲۲/۵۰	۳/۶۴
(D) نتایج حاصل از تحلیل دینامیک مولکولی	۱۰۰/۷۷		۷۱/۹۷		۲۳/۳۵	

می‌یابد. بر اساس نتایج عددی، روابط تحلیلی برای تخمین پارامترهای مختلف مکانیکی نانورق‌های آلومینیومی ارائه شد. مقایسه روابط تحلیلی با داده‌های آزمایشگاهی، دقت مناسب و قابلیت تعمیم‌پذیری روابط تحلیلی به نمونه‌های بزرگ در ابعاد میکرو و حتی ماکرو رو اثبات کرد.

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 نانورق‌های آلومینیومی است، به طوری که با افزایش دما مدول یانگ، مدول برشی و مدول بالک کاهش

واژه‌نامه

- | | | |
|--------------------------------------|-------------------------------|--------------------------|
| 1. Haque | 11. Velocity Verlet algorithm | 21. Tsai. |
| 2. Saif | 12. Zhou | 22. Irving and Kirkwood. |
| 3. Mearini | 13. Jeon | 23. Noll |
| 4. Hoffman | 14. Face center cubic | 24. Hardy |
| 5. Rosandi | 15. Relaxation | 25. McDowell |
| 6. Ma | 16. Conjugate gradient | 26. Subramaniyan and Sun |
| 7. Zeng | 17. Li | 27. Cheng and Sun |
| 8. Sen | 18. Clausius | 28. LAMMPS |
| 9. Embedded atomic method | 19. Maxwell | 29. OVITO |
| 10. Charge transfers ionic potential | 20. Virial | |

References

منابع

- 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.
- 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.
- 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.
- Ghaffarpour Jahromi, S., and Zahedi, H., "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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- Khoei, A. R., Khajepour, 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.
- Nikraves, 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.

18. 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 (Al_2O_3) 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 Al_2O_3 and Cu_2O ", *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 Multi-axial 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.
26. 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 Statistischen 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 Nikraves, 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.