مکانیک هوافضا/ سال ۱۴۰۱/ دوره ۱۸/ شماره ۱/ صفحه ۱۶۱-۱۶۹

نشریه علمی مکانیک هوافضا

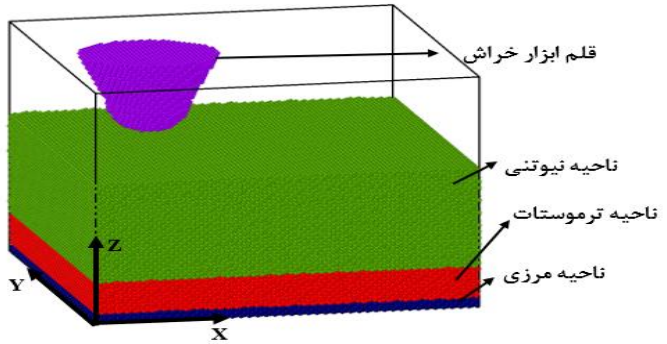
DOR: 20.1001.1.26455323.1401.18.1.10.8

بررسی اثر چسبندگی بین دو سطح بر کار نیروی اصطکاک و سایش در مقیاس نانو با استفاده از دینامیک مولکولی

میر ابوالفضل مختاری[1*]

[1] استادیار، گروه خلبانی دانشگاه امام علی(ع)، تهران، ایران

چکیده گرافیکی



برجسته‌ها

- در خراش با عمق‌های کمتر، کار چسبان اثر قابل‌توجهی بر کار اصطکاک و سایش خواهد داشت.
- کار اصطکاک و سایش با هم رابطه‌ای خطی دارند.

چکیده

در این پژوهش، با بهره‌گیری از دینامیک مولکولی اثر چسبندگی بر میزان حذف و جدا شدن مواد در طی فرایند خراش در مقیاس نانو و به روش عددی با کمک آزمون نانو خراش موردمطالعه قرارگرفته است. در این شبیه‌سازی، آزمون خراش با استفاده از یک سری تنظیمات مجازی بر یک زیرلایه صاف با ساختار مکعبی وجوه پر تک‌بلور و یک قلم خراش مخروطی با نوک کروی با عمق‌های خراش ۰، ۳، ۷ و ۱۰ آنگستروم انجام‌شده است. از پتانسیل کلاسیک بین‌اتمی لنارد-جونز برای مدل‌سازی و تنظیم چسبندگی بین اتم‌های قلم و زیرلایه استفاده‌شده است که این چسبندگی‌های در نظر گرفته‌شده از ۵ تا ۷۰ درصد قدرت چسبندگی بین‌اتمی اتم‌های آلومینیوم هست. با این کار اثر ماده روانکار بدون مدل‌سازی آن موردبررسی قرار می‌گیرد. باوجوداینکه بررسی تأثیر چسبندگی به‌طور مداوم در مطالعات گذشته صرف‌نظر می‌شده، اما مشاهده‌شده است که در خراش با عمق‌های کمتر، کار چسبان اثر قابل‌توجهی بر کار اصطکاک و سایش خواهد داشت. شایان‌ذکر است که در این مطالعه به دلیل اینکه اثر شکل‌پذیری اصلی‌ترین مکانیسم سایش بوده است، مطابق با مشاهدات تجربی کار اصطکاک و سایش باهم رابطه‌ای خطی دارند.

مشخصات مقاله

تاریخچه مقاله:
نوع مقاله: علمی پژوهشی
دریافت: ۱۴۰۰/۰۶/۰۱
بازنگری: ۱۴۰۰/۰۸/۰۳
پذیرش: ۱۴۰۰/۰۸/۱۱
ارائه آنلاین: ۱۴۰۰/۱۰/۲۰

*نویسنده مسئول:
s.abolfazl.mokhtari@aut.ac.ir

کلید واژه ها:
سایش چسبان
سایش خراشان
کار نیروی اصطکاک
کار شخم‌زنی
نانو خراش
دینامیک مولکولی

* حقوق مؤلفین به نویسندگان و حقوق ناشر به انتشارات دانشگاه جامع امام حسین (ع) داده شده است. این مقاله تحت لیسانس آفرینندگی مردمی (License Commons Creative) در دسترس شما قرار گرفته است. برای جزئیات این لیسانس، از آدرس https://maj.ihu.ac.ir دیدن فرمائید.

۱- مقدمه

از سوده‌شناسی یا تریبولوژی به‌عنوان علم و فناوری سطوح لغزنده با حرکات نسبی یاد می‌شود. به‌طورکلی، تریبولوژی شامل سه موضوع اصلی است: اصطکاک، سایش و روانکاری. اصطکاک عبارت است از مقاومت در برابر حرکت نسبی، منظور از ساییدگی از دست دادن مواد در اثر آن حرکت است و روانکاری استفاده از مایع (در بعضی موارد جامد) برای کاهش اصطکاک و سایش با کاهش چسبندگی بین سطوح است. اصطکاک و سایش از دلایل اصلی اتلاف مقدار زیادی ماده و انرژی است. در نتیجه، این پدیده‌ها چالش‌های جدی اقتصادی، زیست‌محیطی و صنعتی را ایجاد می‌کند که باید در زمینه خواص مکانیکی و فرایندهای ماشین‌کاری و پوشش‌های سطوح و... تحقیقات بسیاری صورت گیرد.

فرآیندهای شبیه‌سازی بسیاری جهت شناخت خواص مکانیکی و مکانیسم ماشین‌کاری بر روی سطوح مواد مختلف انجام می‌گیرد. فن شبیه‌سازی نانو خراش با کمک میکروسکوپ نیروی اتمی برای مطالعه اصطکاک و سایش در نانو ساختارها کاربرد گسترده‌ای یافته است و پارامترهایی مثل نفوذ و عمق خراش روی انواع مختلف از توده مواد یا فیلم‌های نازک مواد موردبررسی قرار گرفته است. سایش و اصطکاک مهم‌ترین عوامل هدررفت ماده و انرژی در هر سال هستند که توسط بسیاری از تحقیقات موردمطالعه و بررسی قرار گرفته است [۴-۱]. همچنین خراش ایجادشده، فرایند تغییرشکل مکانیکی است که توسط نیروی کنترل‌شده‌ای بر قلم میکروسکوپ نیروی اتمی وارد می‌شود و قلم با سرعت و نیروی مشخص اثری را بر زیرلایه (ماده کاری) ایجاد می‌کند. باید توجه داشت که ضخامت خراش و سرعت حرکت قلم و شکل و هندسه قلم همگی می‌توانند بر رفتار خراش تأثیر بگذارند. به کاری که توسط قلم برای خراش انجام می‌گیرد شخم‌زنی می‌گویند. هر چه‌کار شخم‌زنی بیشتر شود فشار تماسی بین قلم و زیرلایه بیشتر می‌شود تا جایی که از محدوده الاستیک زیرلایه تجاوز کرده و وارد ناحیه پلاستیک می‌شود و باعث تغییرشکل پلاستیک سطح زیرلایه می‌شود و انباشت توده اتم‌ها در جلوی قلم در مسیر خراش را در پی دارد. سایش ایجادشده از این نوع کار را سایش خراشان گویند.

زمانی که قلم ابزار خراش بر سطح زیرلایه شروع به حرکت می‌کند بین اتم‌های زیرلایه و قلم نیروی بین‌اتمی ایجاد می‌شود که باعث می‌شود دو اتم در فاصله‌ای تعادلی در پایین‌ترین سطح انرژی از یکدیگر قرار بگیرند. به این نیرو که اتم‌های را در یک فاصله تعادلی قرار می‌دهد نیروی چسبندگی گویند؛ بنابراین وقتی جسمی مانند قلم ابزار خراش بر سطح نرم‌تر حرکت می‌کند بین اتم‌های قلم و زیرلایه یک نیروی چسبندگی ایجاد می‌شود و این نیرو تلاش می‌کند تا مانع از حرکت قلم شود و درصورتی‌که نیروی حرکت‌دهنده قلم بر این نیرو فائق آید. با توجه به نیروی چسبندگی بین‌اتمی اتم‌های زیرلایه، ممکن است اتم‌های سطحی زیرلایه از سطح زیرلایه جدا شوند، در این صورت سایش چسبان را در پی خواهد داشت. کاری که برای انجام این سایش صورت می‌گیرد کار چسبان گویند. در واقع کار چسبان کاری است که از چسبندگی یا همان نیروی بین‌اتمی اتم‌های قلم و زیرلایه نشئت می‌گیرد. بودن و تابور [۵] منشأ ماکروسکوپیک اصطکاک را دو فرایند چسبندگی جامدات و تغییرشکل (شخم‌زنی) معرفی کردند. اولی منشأ فیزیکی دارد و دومی منشأ مکانیکی. بر همین اساس قانون اصطکاک کلمب [۶] بیان می‌کند که مجموع ترم چسبندگی و شخم‌زنی، نیروی اصطکاک را تشکیل می‌دهد. در نتیجه، سایش مجموع سایش چسبان و خراشان است و کار نیروی اصطکاک مجموع کار شخم‌زنی و کار چسبان است.

در مقیاس اتمی، تئوری مکانیک محیط پیوسته را نمی‌توان برای تجزیه‌وتحلیل فرآیند نانو خراش بهره برد و همچنین روش تجربی نیز برای تحلیل در این مقیاس بسیار دشوار است. برای شرح و تکمیل روش تجربی، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به ابزاری قدرتمند برای تعمیق درک حالت‌های سایش و خرابی در مقیاس اتمی تبدیل شده است. در مقالات، مطالعات زیادی در مورد نانوخراش فلزات به‌صورت تئوری و آزمایشی در دسترس است و می‌توان یک بررسی جامع در منابع [۷ و ۸] یافت. برای بررسی ماشین‌کاری در مقیاس نانو و عوامل حاکم بر فرآیند نانو از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده شده است و بیشتر

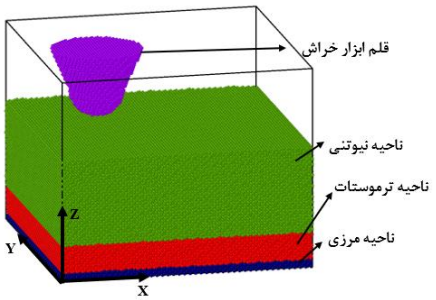
این شبیه‌سازی‌ها معمولاً ساختارهای تک‌بلوری بدون نقص و عیب را به‌عنوان زیرلایه در نظر می‌گیرند. کوماندوری و همکارانش [۹ و ۱۰] فرایند برش نانومتریک را برای بررسی تغییرشکل میکروسکوپی و فرایند حذف مواد در مقیاس نانو را بر آلومینیوم تک‌بلور شبیه‌سازی نمودند. همچنین آن‌ها [۱۱] در مطالعه‌ای دیگر بر آلومینیوم تک‌بلور شبیه‌سازی‌های نانو دندانه‌گذاری تحت آزمون نانوخراش را برای بررسی اصطکاک انجام دادند. در این مطالعه آن‌ها نشان دادند که ضریب اصطکاک مستقل از عمق خراش‌های کم‌عمق است. فنگ و ونگ [۱۲] به بررسی هندسه قلم ابزار خراش و زاویه قرارگیری آن بر زیرلایه‌ای از جنس مس تک‌بلور در فرایند برش پرداختند. مطابق تمام مقالاتی که ذکر شد اثر کار چسبندگی به‌صورت جداگانه موردبررسی قرار نگرفته است و مشخص نشده است که چه میزان از کار اصطکاک را به خود اختصاص می‌دهند.

اثر چسبندگی بر سایش و کار نیروی اصطکاک در بسیاری از مطالعات از جمله مطالعات در مقیاس ماکرو صرف‌نظر شده است. در این مطالعه تحت یک سری شبیه‌سازی‌های سه‌بعدی دینامیک مولکولی آزمون نانوخراش، اهمیت بررسی اثر چسبندگی بر کار و سایش موردمطالعه قرار گرفته است. همچنین با در نظر گرفتن چسبندگی‌های مختلف بین اتم‌های قلم و زیرلایه می‌توان اثر روانکار را بدون مدل کردن آن بررسی کرد زیرا روانکار نیز به‌عنوان عامل اثرگذار بر چسبندگی بین دو سطح عمل می‌کند [۱۳].

۲- روش مدل‌سازی و توضیح مسئله

در این مطالعه از نرم‌افزار متن‌باز لمپس [۱۵،۱۴] برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده شده است. همچنین برای به تصویر درآوردن و مشاهده ساختارهای اتمی از نرم‌افزار اویتو [۱۶] استفاده شده است.

شکل ۱ نمایی از یک مدل شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در آزمون نانوخراش را نشان می‌دهد. این مدل از یک قلم ابزار خراش صلب و زیرلایه آلومینیومی تک‌بلور با ساختار مکعبی وجوه مرکز پر تشکیل شده است. قلم ابزار خراش به سمت پایین تا عمق موردنظر حرکت کرده و وارد سطح زیرلایه آلومینیومی شده و بر روی سطح آن در جهت محور X شروع به حرکت نموده و خراش ایجاد می‌کند. اندازه زیرلایه ۹۰a×۴۵a×۴۵a است که a ثابت شبکه آلومینیوم و برابر با ۴/۰۵ آنگستروم است که به این صورت ابعاد زیرلایه به‌ترتیب ۱۸۲/۲۵Å، ۱۸۲/۲۵Å و ۹۰Å است.



شکل ۱: نمای کلی جعبه شبیه‌سازی در آزمون نانو خراش.

شرایط مرزی در راستای X و Y دوره‌ای است. اتم‌های زیرلایه به سه ناحیه تقسیم شده است که در شکل ۱ نمایش داده شده است. ناحیه نیوتنی و ترموستات از قانون دوم نیوتن تبعیت می‌کند. دمای سیستم ۱۰ درجه کلوین هست که با استفاده از ترموستات لانژوین با پارامتر دمپ ۰/۵ در ناحیه ترموستات از زیرلایه قرار گرفته شده است. شرایط مرزی در راستای Z برای جلوگیری از حرکت اتم‌ها از ناحیه زیرین و خارج نشدن از جعبه شبیه‌سازی ناحیه مرزی به‌صورت ثابت و صلب در نظر گرفته شده است. نرم‌افزار لمپس از الگوریتم ورله سرعتی برای به دست آوردن موقعیت سرعت و شتاب اتم‌ها استفاده می‌کند. گام زمانی برای این الگوریتم یک فمتو ثانیه در نظر گرفته شده است. شبیه‌سازی‌های انجام‌شده با استفاده از هنگرد میکرو کانونی سیستم شبیه‌سازی به تعادل رسیده است. پتانسیل بین اتم‌های زیرلایه آلومینیومی از نوع پتانسیل اتم جاسازی‌شده [۱۸،۱۷] است که به‌صورت گسترده در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی نانوبرش استفاده می‌شود [۲۳-۱۹]. پتانسیل اتم جاسازی‌شده برای سیستم به‌صورت زیر به‌دست می‌آید:

$$E_{tot} = \frac{1}{2}\sum_{ij}\Phi_{ij}\left(r_{ij}\right) + \sum_{i}F_i\left(\rho_i\right) \qquad (۱)$$

در این رابطه r_{ij} فاصله دو اتم مجاور i و j در شعاع قطع (r_{cut}) است. ϕ_{ij} انرژی اندرکنش دافعه دو ذره‌ای بین دو اتم مذکور، ρ_i چگالی الکترون در جایگاه اتم i ام و F انرژی لازم برای داخل کردن اتم i ام در شبکه‌ای با چگالی ρ است.

فرض می‌شود که چگالی الکترون‌ها مجموع چگالی الکترونی اتم‌های دیگر بوده و در نتیجه:

$$\rho_i = \sum_{j=1(\neq i)} \rho_j\left(r_{ij}\right) \quad (۲)$$

که در این رابطه $\rho_j(r_{ij})$ توزیع چگالی الکترونی‌اتم j در جایگاه اتم i است، قبل از آنکه در ابر الکترونی تعبیه شود. پتانسیل بین اتم‌های زیرلایه و قلم ابزار خراش از نوع لنارد-جونز بوده که فرمول آن به‌صورت زیر تعریف شده است:

$$U(r) = 4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right] \quad (۳)$$

در این رابطه ε عمق چاه پتانسیل که حداقل آن در $r_m = 2^{1/6}\sigma$ واقع‌شده است و σ مقدار r در $U(r) = 0$ است. همچنین ثوابت σ و ε از طریق تجربی یا محاسبات مکانیک کوانتوم به‌دست‌آمده و تقریباً برای تمام مواد این ثوابت استخراج شده است. شعاع قطع در این شبیه‌سازی طبق راهنمای نرم‌افزار لمپس کمی بیشتر از ۲/۵ برابر σ، (σ_{AL} = ۰/۲۵۷۳۶۶) یعنی ۷ Å انتخاب شده است. ε که با نام چاه پتانسیل معرفی می‌شود که برای آلومینیوم برابر با ۰/۵۰۷۲۲ الکترون‌ولت است [۲۴]. میزان چسبندگی بین دو سطح قلم ابزار خراش و زیرلایه با پارامتر چسبندگی تعیین می‌شود که برابر با $\varepsilon_{adh}/\varepsilon_0$ هست. مقادیر این پارامتر در جدول ۱ ذکر شده است که برای ۱۳ پارامتر مختلف برای هرکدام از ۴ عمق خراش موردنظر شبیه‌سازی صورت گرفته است. همچنین برای نام‌گذاری آن‌ها از برچسب استفاده شده است. منظور از Al_LJ_1 جنس آلومینیوم و پتانسیل لنارد-جونز برای حالت یک یعنی کمترین پتانسیل بین دو اتم قلم و زیرلایه است که پتانسیل کمتر دارای چسبندگی کمتر و پتانسیل بیشتر دارای چسبندگی بیشتر است. در واقع پارامتر چسبندگی ضریبی از پتانسیل بین دو اتم آلومینیوم برای حالت بالک ماده است. بررسی چسبندگی‌های مختلف بین دو سطح این کمک را می‌کند که بدون مدل‌سازی ماده روانکار، اثرات آن‌ها موردبررسی قرار داد؛ زیرا هرچه ماده روانکار، روان‌کننده‌تر باشد چسبندگی بین این دو سطح کمتر است و بالعکس.

مراحل آزمون نانو خراش در این مطالعه مطابق شکل ۱ به این صورت است که ابتدا قلم ابزار خراش به میزان عمق‌های موردنظر یعنی ۱۰، ۷، ۳ و صفر آنگستروم در زیرلایه فرو می‌رود و سپس با سرعت ۱۰۰ متر بر ثانیه شروع به حرکت کرده و بر سطح زیرلایه خراش ایجاد کرده تا به‌طور کامل از زیرلایه خارج شود. مشخصات شبیه‌سازی در جدول ۲ نشان داده شده است.

جدول ۱: مقادیر مختلف پتانسیل بین اتم‌های زیرلایه و قلم به همراه پارامتر چسبندگی آن‌ها

$\varepsilon_{adh}/\varepsilon_0$	ε, (eV)	برچسب	
۰/۰۵	۰/۰۲۵۳۶۱	Al_LJ_1	**پتانسیل سطحی بین قلم و زیرلایه**
۰/۱	۰/۰۵۰۷۲۲	Al_LJ_2	
۰/۱۵	۰/۰۷۶۰۸۳	Al_LJ_3	
۰/۱۷	۰/۰۸۶۲۲۷۴	Al_LJ_4	
۰/۲	۰/۱۰۱۴۴۴	Al_LJ_5	
۰/۲۳	۰/۱۱۶۶۶۰۶	Al_LJ_6	
۰/۲۵	۰/۱۲۶۸۰۵	Al_LJ_7	
۰/۳	۰/۱۵۲۱۶۶	Al_LJ_8	
۰/۳۵	۰/۱۷۷۵۲۷	Al_LJ_9	
۰/۴	۰/۲۰۲۸۸۸	Al_LJ_10	
۰/۵	۰/۲۵۳۶۱	Al_LJ_11	
۰/۶	۰/۳۰۴۳۳۲	Al_LJ_12	
۰/۷	۰/۳۵۵۰۵۴	Al_LJ_13	

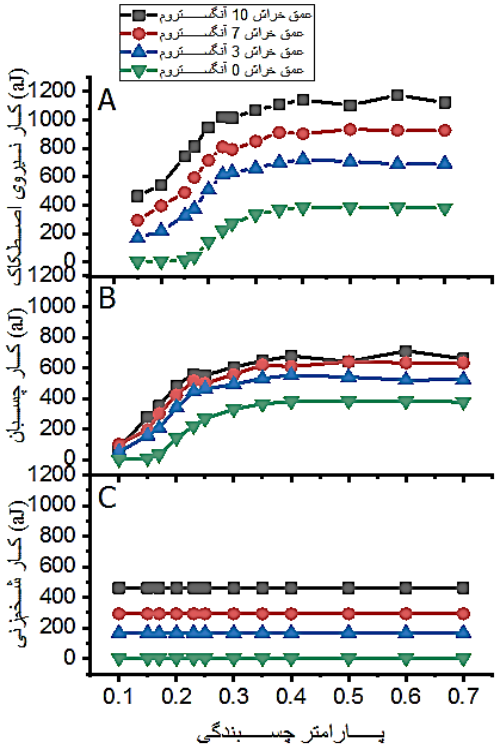
جدول ۲: مشخصات عوامل به‌کاربرده شده در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

آلومینیوم	**ماده قطعه کار**
FCC	**ساختار شبکه قطعه کار**
جسم صلب	**ماده ابزار تراش**
مخروط ناقص با شعاع کوچک و بزرگ به ترتیب ۲۰ و ۳۵ Å	**ابعاد قلم ابزار تراش (مخروطی با نوک کروی)**
۱۸۲/۲۵×۱۸۲/۲۵×۹۰Å^3	**ابعاد قطعه کار**
شعاع کره ۲۰ Å	**ابعاد قلم ابزار تراش (مخروطی با نوک کروی)**
۰ و ۳ و ۷ و ۱۰ Å	**عمق نفوذ ابزار تراش**
۱۳۷/۲۵ آنگستروم	**طول خراش**
خط صاف در راستای X (طولی)	**مسیر خراش**
واحد کار در این مقاله	**aJ**

۱۸۹۵۰۲	**تعداد اتم‌های استفاده‌شده در شبیه‌سازی**

۳- نتایج و بحث

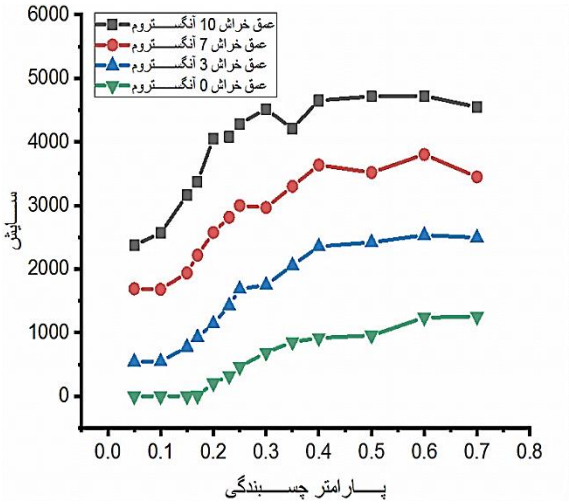
برای به دست آوردن کار نیروی اصطکاک در شکل ۲A، نیروی اصطکاک در مقابل حرکت قلم در طی مسافت خراش با کمک نرم‌افزار لمپس محاسبه شده است و سپس با داشتن نیرو و جابجایی و انتگرال‌گیری از سطح زیر نمودار آن با بهره‌گیری از نرم‌افزار origin، کار نیروی اصطکاک در هر پارامتر چسبندگی و عمق خراش به دست آمده است. مشاهده می‌گردد که با افزایش چسبندگی ابتدا کار نیروی اصطکاک افزایش یافته تا این‌که به حالت ثابت و پایدار می‌رسد. به‌علاوه اینکه با افزایش عمق خراش، کار نیروی اصطکاک نیز افزایش می‌یابد. از طرف دیگر برای به دست آوردن کار شخم‌زنی برای هر عمق خراش، چسبندگی بسیار اندکی بین سطح قلم و ابزار خراش در نظر گرفته شده و شبیه‌سازی صورت گرفته است. با انجام این کار، کار انجام‌شده برای جابجایی اتم‌های در مسیر حرکت قلم تحت عنوان کار شخم‌زنی در شکل ۲C نشان داده شده است. همان‌طور که از این شکل ملاحظه می‌کنیم هیچ ارتباطی بین کار شخم‌زنی و چسبندگی در نظر گرفته نشده است و در حالتی که چسبندگی در کمترین مقدار خود قرار داشته محاسبه شده‌اند. با این کار از تأثیر کار چسبان جلوگیری کرده و فقط کار شخم‌زنی محاسبه می‌شود. حال با داشتن کار نیروی اصطکاک و کار شخم‌زنی و به دست آوردن تفاضل این دو کار در هر عمق خراش و پارامتر چسبندگی، می‌توان کار چسبان را محاسبه نمود که در شکل ۲B نشان داده شده است. شکل ۲ نمودارهای کار نیروی اصطکاک، کار چسبان و کار شخم‌زنی برحسب پارامتر چسبندگی را نشان می‌دهد که به ترتیب با شماره (A)، (B) و (C) شماره‌گذاری شده‌اند. هرکدام از خطوط، مربوط به یک عمق خراش می‌باشند که از بالا به پایین به ترتیب برای عمق خراش‌های ۳،۷،۱۰ و ۰ آنگستروم می‌باشند. همچنین هرکدام از نقاط قرار گرفته شده بر خطوط مربوط به یک پارامتر چسبندگی می‌باشند که از چپ به راست میزان چسبندگی در حال افزایش یافتن می‌باشند. همان‌طور که از شکل ۲ مشخص است میزان کار نیروی اصطکاک با افزایش چسبندگی، افزایش می‌یابد تا اینکه از یک مقدار مشخص به حالت اشباع از تأثیر چسبندگی بر میزان کار نیروی اصطکاک می‌رسد و دیگر افزایش چسبندگی تأثیر ملموسی بر کار نیروی اصطکاک ندارد و به یک مقدار نسبتاً ثابت می‌رسد. مطابق نکاتی که قبلاً ذکر گردید، مجموع کار شخم‌زنی و کار چسبان کار نیروی اصطکاک را تشکیل می‌دهد. حال اگر به میزان نسبت مقدار کار چسبان بعد از ثابت شدن بر مقدار کار شخم‌زنی توجه کنیم متوجه خواهیم شد که سهم کار چسبان بسیار بیشتر از کار شخم‌زنی است؛ بنابراین بیشتر سهم کار نیروی اصطکاک را کار چسبان در برمی‌گیرد. همچنین با افزایش عمق خراش این نسبت در حال کاهش است تا اینکه در نهایت سهم کار شخم‌زنی از کار چسبان بیشتر خواهد شد. به همین دلیل است که در مطالعات ماکرو با تقریب خوبی از اثرات چسبندگی چشم‌پوشی می‌شود. این نتیجه این مهم را می‌رساند که در پروژه‌ها و مطالعاتی که دقت بالا را می‌طلبد و عمق خراش بسیار کوچک است و بایستی اثرات چسبندگی لحاظ گردد.



شکل ۲: نمودارهای کار نیروی اصطکاک، کار چسبان و کار شخم‌زنی برحسب پارامتر چسبندگی

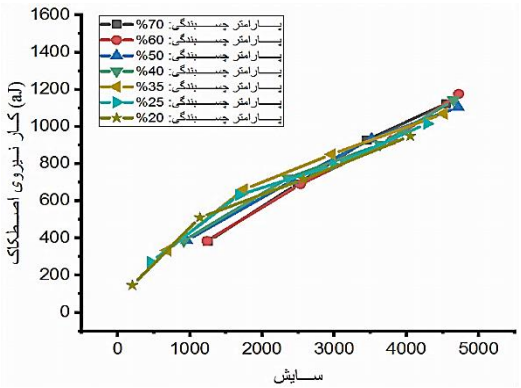
نکته دیگری که از شکل ۲B می‌توان پی برد این است که با افزایش عمق خراش خطوط به یکدیگر نزدیک‌تر می‌شوند که این مهم را می‌رساند که افزایش عمق خراش از یک عمق به بعد تأثیر ملموسی بر افزایش کار چسبان نمی‌گذارد و این کار شخم‌زنی است که مدام در حال افزایش است که در نتیجه آن، کار نیروی اصطکاک نیز افزایش می‌یابد.

شکل ۳ نمودار سایش برحسب پارامتر چسبندگی را نشان می‌دهد که با نگاهی به این نمودار به شباهت و ارتباط آن، با نمودار کار نیروی اصطکاک برحسب پارامتر چسبندگی (شکل ۲A) می‌توان پی برد. محور عمودی این شکل، تعداد اتم ساییده شده (اتم‌هایی که به قلم ابزار خراش چسبیده و از زیرلایه جداشده یا جابجا شده) را نشان می‌دهد. همچنین مشاهده می‌گردد که با افزایش چسبندگی بین دو سطح، اثر آن از یک مقدار به بعد بر سایش تأثیر ملموسی ندارد و سایش تقریباً ثابت هست. همچنین با افزایش عمق خراش همان‌طور که انتظار می‌رود حجم سایش نیز بیشتر می‌شود. در این شکل هر خط برای یک عمق خراش است که از بالا به پایین عمق خراش کاهش‌یافته و هر نقطه روی آن مربوط به یک پارامتر چسبندگی است که از چپ به راست این میزان که نشان‌دهنده میزان چسبندگی بین دو سطح قلم و ابزار خراش است، در حال افزایش است.



شکل ۳: نمودار سایش برحسب پارامتر چسبندگی در عمق‌های مختلف.

با توجه به نکاتی که در شکل ۲ و ۳ در مورد ارتباط نزدیک کار نیروی اصطکاک و سایش ذکر گردید. نمودار کار نیروی اصطکاک برحسب سایش در شکل ۴ رسم شده است و مشاهده می‌گردد که مطابق مشاهدات تجربی گذشته [۳۱-۲۵] در حالتی که اصلی‌ترین مکانیسم سایش پلاستیک شدن باشد کار و نیروی اصطکاک با یکدیگر رابطه خطی دارند. در این شکل هر خط نماینده یک پارامتر چسبندگی است و هر نقطه روی آن نیز مربوط به یک عمق خراش است؛ که بر روی هرکدام از این خطوط ۴ نقطه وجود دارد که از پایین به بالا بیانگر عمق خراش‌های کمتر به بیشتر هستند.



شکل ۴: این شکل رابطه خطی بین کار و نیروی اصطکاک را نشان می‌دهد.

۴- نتیجه‌گیری

در این مطالعه اثر چسبندگی بین دو سطح در تماس و عمق خراش بر کار نیروی اصطکاک به‌صورت تفکیک‌شده به دو نوع کار چسبان و کار شخم‌زنی موردبررسی قرار گرفت. همچنین سایش و ارتباط کار نیروی اصطکاک و سایش با استفاده از دینامیک مولکولی نیز موردبررسی و تحقیق قرار گرفت.

اثرات چسبندگی بر کار نیروی اصطکاک و سایش برای اولین بار در این مطالعه بررسی شده است که با در نظر گرفتن چسبندگی می‌توان به تأثیر کار چسبان بر کار نیروی اصطکاک در فرایند خراش دست یافت. مشاهده شده است که در خراش با عمق‌های کمتر، کار چسبان نقش به‌سزایی در کار نیروی اصطکاک دارد و حتی از کار شخم‌زنی نیز

بیشتر است. این مهم زمانی اهمیت خود را بیشتر نشان می‌دهد که بخواهیم دقت را بالاتر ببریم و به بررسی خراش در مقیاس‌های نانو بپردازیم که در نتیجه آن باید حتماً اثر چسبندگی به‌عنوان یکی از مهم‌ترین اثرات در سایش موردبررسی قرار گیرد. از طرف دیگر با افزایش عمق خراش مشاهده شده است که کار چسبان به مقدار نسبتاً ثابتی می‌رسد و این کار شخم‌زنی است که باعث افزایش کار نیروی اصطکاک می‌شود.

علاوه بر این مشاهده شده است که با افزایش چسبندگی از یک مقدار به بعد، دیگر افزایش چسبندگی تأثیر ملموسی بر کار نیروی اصطکاک و سایش ندارد و این دو عامل مهم تریبولوژیکی سرانجام به یک مقدار نسبتاً ثابت یا وضعیت پایدار می‌رسند.

۵- مراجع

[1] Mohammadi S, Montazeri A, Urbassek HM. Geometrical aspects of nanofillers influence the tribological performance of Al-based nanocomposites. Wear. 2020;444:203117.

[2] Liu B, Xu Z, Chen C, Li R, Gao X, Liang L. Numerical and experimental investigation on ductile deformation and subsurface defects of monocrystalline silicon during nano-scratching. Applied Surface Science. 2020;528:147034.

[3] Pham VT, Fang TH. Pile-up and heat effect on the mechanical response of SiGe on Si (0 0 1) substrate during nanoscratching and nanoindentation using molecular dynamics. Computational Materials Science. 2020;174:109465.

[4] Zhu J, Xiong C, Ma L, Zhou Q, Huang Y, Zhou B, Wang J. Coupled effect of scratching direction and speed on nano-scratching behavior of single crystalline copper. Tribology International. 2020;150:106385.

[5] Bowden FP, Tabor D. The Friction and Lubrication of Solids-Part II. Oxford, England, University Press; 1964.

[6] Arvanitaki A, Briscoe B, Adams M, Johnson S. The friction and lubrication of elastomers. Tribology Series. 30: Elsevier; 1995. p. 503-11

[7] Beake B, Harris A, Liskiewicz T. Review of recent progress in nanoscratch testing. Tribology-Materials, Surfaces & Interfaces. 2013;7(2):87-96.

[8] Tiwari A, Natarajan S. Applied nanoindentation in advanced materials: John Wiley & Sons; 2017.

[9] Komanduri R, Chandrasekaran N, Raff L. Some aspects of machining with negative-rake tools simulating grinding: a molecular dynamics simulation approach. Philosophical Magazine B. 1999;79(7):955-68.

[10] R. Komanduri, N. Chandrasekaran, and L. M. Raff. “Effect of tool geometry in nanometric cutting: A molecular dynamics simulation approach”. Wear, vol. 219, no. 1, pp. 84–97, Aug. 1998.

[11] Komanduri R, Chandrasekaran N, Raff L. Effect of tool geometry in nanometric cutting: a molecular dynamics simulation approach. Wear. 1998;219(1):84-9.

[12] Fang T-H, Weng C-I. Three-dimensional molecular dynamics analysis of processing using a pin tool on the atomic scale. Nanotechnology. 2000;11(3):148.

[13] Shimizu J, Eda H, Zhou L, Okabe H. Molecular dynamics simulation of adhesion effect on material removal and tool wear in diamond grinding of silicon wafer. Tribology Online. 2008;3(5):248-53.

[14] Yan Y, Sun T, Dong S, Liang Y. Study on effects of the feed on AFM-based nano-scratching process using MD simulation. Computational materials science. 2007;40(1):1-5.

[15] Freitas R, Asta M, De Koning M. Nonequilibrium free-energy calculation of solids using LAMMPS. Computational Materials Science. 2016;112:333-41.

[16] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. Journal of computational physics. 1995;117(1):1-19.

[17] Daw MS, Foiles SM, Baskes MI. The embedded-atom method: a review of theory and applications. Materials Science Reports. 1993;9(7-8):251-310.

[18] Foiles S, Baskes M, Daw MS. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. Physical review B. 1986;33(12):7983.

[19] Jian-Hao C, Qiu-Yang Z, Zhen-Yu Z, Cong D, Zhong-Yu P. Molecular dynamics simulation of monocrystalline copper nano-scratch process under the excitation of ultrasonic vibration. Materials Research Express. 2021;8(4):046507.

[20] Lin W, Yano N, Shimizu J, Zhou L, Onuki T, Ojima H. Analysis of Nanoscratch Mechanism of C-Plane Sapphire with the Aid of Molecular Dynamics Simulation of Hcp Crystal. Nanomaterials. 2021;11(7):1739.

[21] Zhang P, Zhang Q, Fang Y, Yue X, Yu X, Wang Y. Research on the mechanism of surface damage of Ni-based high-temperature alloy GH4169 based on nano-cutting. Vacuum. 2021;192:110439.

[22] Dai L, Chen G, Shan Z. Study on ultra-high speed nano-grinding of monocrystalline copper with V-shaped diamond abrasive grains based on molecular dynamics method. Diamond and Related Materials. 2021;111:108224.

[23] Wang G, Zhao G, Song J, Ding Q. Effect of velocity and interference depth on the tribological properties of alumina sliding with Cu: A molecular dynamics simulation. Chemical Physics Letters. 2021;775:138669.

[24] Filippova V, Kunavin S, Pugachev M. Calculation of the parameters of the Lennard-Jones potential for pairs of identical atoms based on the properties of solid substances. Inorganic Materials: Applied Research. 2015;6(1):1-4.

[25] Agrawal R, Moldovan N, Espinosa H. An energy-based model to predict wear in nanocrystalline diamond atomic force microscopy tips. Journal of Applied Physics. 2009;106(6):064311.

[26] Ramalho A, Miranda J. The relationship between wear and dissipated energy in sliding systems. Wear. 2006;260(4-5):361-7.

[27] Gotsmann B, Lantz MA. Atomistic wear in a single asperity sliding contact. Physical review letters. 2008;101(12):125501.

[28] Jacobs TD, Carpick RW. Nanoscale wear as a stress-assisted chemical reaction. Nature nanotechnology. 2013;8(2):108-12.

[29] Liu J, Jiang Y, Grierson DS, Sridharan K, Shao Y, Jacobs TD, et al. Tribochemical wear of diamond-like carbon-coated atomic force microscope tips. ACS applied materials & interfaces. 2017;9(40):35341-8.

[30] Maw W, Stevens F, Langford S, Dickinson J. Single asperity tribochemical wear of silicon nitride studied by atomic force microscopy. Journal of Applied Physics. 2002;92(9):5103-9.

[31] Shao Y, Jacobs TD, Jiang Y, Turner KT, Carpick RW, Falk ML. Multibond model of single-asperity tribochemical wear at the nanoscale. ACS applied materials & interfaces. 2017;9(40):35333-40.

Journal of Aerospace Mechanics/ 2022/ Vol.18/ No.1/ 161-169

Journal of Aerospace Mechanics

DOR: 20.1001.1.26455323.1401.18.1.10.8

Investigation of the Effect of Adhesion Between Two Surfaces on the Frictional Work and Wear at the Nanoscale Using Molecular Dynamics

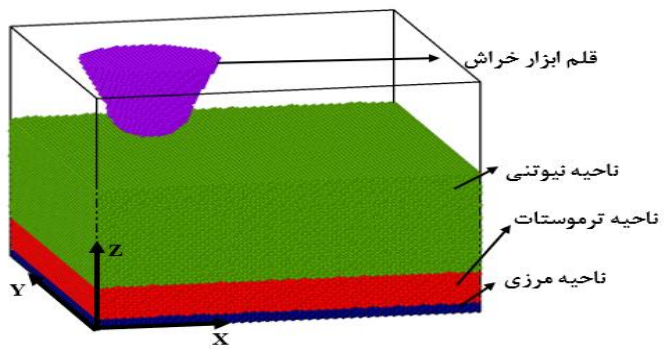
Mir Abolfazl Mokhtari[1*]

[1] Assistant Professor, Flight and Engineering Department, Imam Ali University, Tehran, Iran

HIGHLIGHTS

- In scratches with shallower depths, the adhesive has a significant effect on friction and wear.
- Friction and wear have a linear relationship with each other.

GRAPHICAL ABSTRACT



ARTICLE INFO

Article history:
Article Type: Research paper
Received: 23 August 2021
Received in revised form: 25 October 2021
Accepted: 2 November 2021
Available online: 10 January 2021
*Correspondence:
s.abolfazl.mokhtari@aut.ac.ir

How to cite this article:
M. A. Mokhtari. Investigation of the effect of adhesion between two surfaces on the frictional work and wear at the nanoscale using molecular dynamics. Journal of Aerospace Mechanics. 2022; 18 (1):161-169.

Keywords:
Adhesive wear
Abrasive wear
Frictional work
Ploughing work
Nano-scratching
Molecular dynamics

ABSTRACT

In this study, by using Molecular Dynamics (MD) simulations, the effect of adhesion on the removal and separation of materials in the nano-scale has been studied numerically during the nano-scratching test. The virtual setup simulates the scratching of a flat substrate made of a single crystalline aluminum using a rigid conical indenter with a blunted spherical tip (radius of 20 nm) at four different scratching depths (i.e., 0, 3, 7, and 10 A) was studied. The classical Lenard-Jones interatomic potential is used to model and regulate the adhesion between the atoms of the indenter and the substrate, which change from 5% to 70% of the interatomic adhesion strength of aluminum atoms. This mimics the effect of the lubricant without modeling. Although the effect of adhesion has been consistently neglected in previous studies, it has been observed that in scratches with shallower depths, the adhesive will have a significant effect on friction and wear. It is worth noting that in this study, due to the effect of plasticity being the main mechanism of the wear, according to experimental observations, friction and wear have a linear relationship with each other.

* Copyrights for this article are retained by the author(s) with publishing rights granted to Imam Hossein University Press. The content of this article is subject to the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY-NC 4.0) License. For more information, please visit https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode.