

Investigation of the Mechanical Behavior of Aluminum Nano-films with Surface Oxidation under Uniaxial Tests: Molecular Dynamics Analysis

Amir Rezaei Sameti ^{1*} , Hossein Abbasi ²

1. Assistant Professor, Department of Civil Engineering, Faculty of Engineering, Bu-Ali Sina University, Hamedan, Iran.
2. M.Sc., Department of Civil Engineering, Faculty of Engineering, Bu-Ali Sina University, Hamedan, Iran.

Abstract

Aluminum nano-films are one of the functional elements that have various applications in different fields such as strengthening cement base materials, improving the performance and efficiency of concrete, and enhancing the mechanical and volumetric properties of clay. In this study, the mechanical responses of aluminum nano-film are investigated under uniaxial tensile and compressive tests using the molecular dynamics (MD) method. The initial configuration of the nano-film is constructed based on a 3D aluminum core—alumina shell model that provides a suitable description of surface oxidation in the nano-film. This model is useful to determine the influence of surface oxidation on the mechanical behavior of nano-film. Because of the accuracy and competency, the inter-atomic interactions are evaluated using the EAM+CTI potential, which is a hybrid potential consisting of two components, i.e., EAM and CTI potential, such that it can also take into account the electrostatic interactions between the atoms. After establishing the initial configuration, the energy minimization process is performed on the nano-film, and then its temperature and pressure are adapted to the environmental conditions through the relaxation process. The MD analysis is accomplished by the open-source LAMMPS software, and the visualization of outputs is performed by the open-source OVITO software. The periodic boundary condition is imposed on the lateral sides of the nano-film to eliminate the free surface effect of the atomistic analysis. The tensile and compressive tests are applied to the nano-film in accordance with the experimental tests, and the stress—strain curves are determined. The concept of Virial stress is employed to calculate the stress of the atomic model, which is equivalent to the conventional Cauchy stress in classical mechanics. In order to diminish the dynamic effects, deformation is incrementally applied to the nano-film, such that at each increment, a small strain is gently imposed, then the nano-film is relaxed under the deformed conditions, and finally the stress and strains are evaluated. The numerical simulations are verified by comparing them with experimental data, which demonstrates the acceptable accuracy of the obtained numerical results. The influence of various parameters such as the thickness and the percentages of oxide layers are investigated on the mechanical response and stress-strain curve of aluminum nano-film under the uniaxial tests. It is demonstrated that the thickness of the oxide layer significantly impacts mechanical behavior, such that the hardness and energy absorption capacity of the nano-film is increased considerably by increasing the percentage of the oxide layer thickness. However, increasing the total thickness of the nano-film leads to a decrease in the Young's modulus and elastic limit of the specimen. It is because of the decrease in the percentage of oxide layer thickness by increasing the total thickness of the nano-film. Point defects are one of the important imperfections in the crystal structures of atomic configuration that have a significant effect on the mechanical behavior of materials. In order to investigate the influence of point defects, different percentages of voids are generated by randomly omitting some atoms in the nano-film domain. The generated specimens are analyzed under the uniaxial tests, and their mechanical characteristics are evaluated. The numerical simulations demonstrate that the hardness of the nano-film is significantly reduced by increasing the point defects.

Review History

Received: Jan 09, 2024

Revised: Sep 25, 2024

Accepted: Mar 12, 2025

Keywords

Aluminum nano-film

Uniaxial tests

Molecular dynamics analysis

Mechanical responses

Surface oxidation effects

Point defects

* Corresponding Author Email: a.rezaeisameti@basu.ac.ir - ORCID: 0000-0002-7985-9840

بررسی رفتار مکانیکی نانورق‌های آلومینیومی دارای لایه اکسید سطحی تحت آزمون تک‌محوری با روش دینامیک مولکولی

امیر رضائی صامتی^{۱*} , حسین عباسی^۲

۱. دکتری تخصصی گروه مهندسی عمران، دانشکده مهندسی، دانشگاه بوعلی سینا، همدان، ایران.

۲. کارشناسی ارشد گروه مهندسی عمران، دانشکده مهندسی، دانشگاه بوعلی سینا، ایران.

چکیده

تاریخچه داوری

نانورق‌های آلومینیومی از جمله اجرایی هستند که کاربردهای مختلفی در زمینه‌های متنوع همچون تقویت مواد پایه سیمانی و بهبود عملکرد و کارایی بتن و ارتقا خواص مکانیکی و حجمی خاک رس دارند. در این مطالعه به بررسی پاسخ‌های مکانیکی نانورق‌های آلومینیومی تحت آزمون کشش و فشار تک‌محوری با استفاده از روش دینامیک مولکولی پرداخته می‌شود. مدل اتمی در نظر گرفته شده برای نانورق براساس مدل سه‌بعدی هسته آلومینیومی و پوسته اکسید آلومینیوم است که می‌تواند توصیف مناسبی از اکسیداسیون سطحی در نمونه داشته باشد. اندرکنش بین اتمی نیز براساس پتانسیل EAM+CTI محاسبه می‌شود تا مدل‌سازی دارای دقت خوبی بوده و تأثیرات اندرکنش الکترواستاتیک بین ذرات نیز در نظر گرفته شود. پس از ایجاد پیکربندی اولیه نانورق، فرایند کمینه‌سازی انرژی صورت پذیرفته و نمونه تحت شرایط محیطی پایدار می‌گردد. سپس آزمون تک‌محوری کششی و فشاری منطبق با شرایط آزمایشگاهی بر نمونه اعمال شده و نمودارهای تنش-کرنش نمونه تعیین می‌گردد. به منظور حذف اثرات دینامیکی ناشی از سرعت بالای بارگذاری، اعمال تغییرشکل بر نانورق به صورت گام‌به‌گام صورت می‌پذیرد. در این روش برای هر گام از بارگذاری، ابتدا تغییرشکل کمی به آرامی به نمونه اعمال شده، سپس نمونه تحت شرایط تغییرشکل یافته پایدار گردیده و در انتها مقادیر تنش و کرنش در نمونه ارزیابی می‌شود. شبیه‌سازی صورت گرفته با مقایسه با داده‌های آزمایشگاهی صحت‌سنجی می‌شود. پس از تایید صحت مدل‌سازی، نانورق‌ها با ضخامت‌های مختلف و درصدهای مختلفی از لایه اکسید تحت آزمون تک‌محوری ارزیابی شده و نمودار تنش-کرنش آن‌ها بررسی می‌گردد. نتایج حاکی از تأثیر زیاد ضخامت لایه اکسید بر رفتار مکانیکی نانورق است، به طوری که با افزایش درصد لایه اکسید از ۱۵ تا ۶۰ درصد نمونه سخت‌تر شده و مدول یانگ آن از حدود ۷۵ به ۱۰۰ گیگاپاسکال افزایش می‌یابد. همچنین تأثیر نواقص نقطه‌ای نیز بر شیب نمودار تنش-کرنش بیانگر کاهش سختی با افزایش میزان حفرات بسیار زیر در نمونه‌ها است.

کلمات کلیدی

نانورق آلومینیوم
آزمون‌های تک‌محوری
شبیه‌سازی دینامیک مولکولی
پاسخ‌های مکانیکی
تأثیر اکسیداسیون سطحی
نواقص نقطه‌ای

۱- مقدمه

نوظهوری هستند که کاربردهای مختلفی در زمینه‌های متنوع

نانورق‌های آلومینیومی از جمله المان‌های بسیار نازک و همچون تقویت مواد پایه سیمانی و بهبود عملکرد و کارایی بتن

* رایانامه نویسنده مسئول: a.rezaeisameti@basu.ac.ir - ORCID: 0000-0002-7985-9840

کپی‌رایت © ۲۰۲۵، انتشارات دانشگاه تربیت مدرس (TMU Press). این مقاله به صورت دسترسی آزاد منتشر شده و تحت مجوز بین‌المللی Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 قرار دارد (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>). بر اساس این مجوز، شما می‌توانید این مطلب را در هر قالب و رسانه‌ای کپی، بازنشر و بازآفرینی کنید و یا آن را ویرایش و بازسازی نمایید، به شرط آنکه نام نویسنده را ذکر کرده و از آن برای مقاصد غیرتجاری استفاده کنید.



بررسی تاثیر لایه اکسید آلومینیوم بر خواص مکانیکی نانورق‌های آلومینیومی، میرینی^{۱۱} و هافمن^{۱۲} [14] نمونه‌های مختلف از نانورق‌های آلومینیومی را تولید نموده و تحت آزمون تک‌محوری به بررسی رفتار مکانیکی آن‌ها پرداختند. نتایج آن‌ها نشان داد که لایه اکسید تاثیر قابل توجهی بر رفتار مکانیکی نانورق‌ها داشته و منجر به کاهش انعطاف‌پذیری و افزایش مقاومت آن‌ها می‌شود.

همواره در کنار مطالعات آزمایشگاهی، شبیه‌سازی عددی به عنوان روشی مناسب برای درک پدیده‌های مختلف در مقیاس نانو مورد توجه بوده است. این تحقیقات به دلیل پیچیدگی ساختار نانورق‌ها و تأثیرات زیادی که فرایندهای ساخت و شرایط محیطی بر روی آن‌ها دارند، از اهمیت ویژه‌ای برخوردارند. این شبیه‌سازی‌ها و مدل‌سازی‌ها می‌توانند به طور مستمر در توسعه فناوری‌های جدید و بهبود کارایی مواد نانومتریکی مؤثر باشند. در این راستا، پینگ^{۱۳} و همکاران [15] به بررسی رفتار مکانیکی نانورق‌های آلومینیومی تحت آزمون نفوذ با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پرداختند. نتایج آن‌ها بیانگر افزایش سختی نفوذ در نانورق‌ها با افزایش سرعت بود. مینگ زی و همکاران [16] با استفاده از روش دینامیک مولکولی ذوب نانورق‌های آلومینیومی براساس تابش لیزر را مطالعه نمودند. ونگ و همکاران [17] گسترش ترک در نانورق‌های آلومینیومی را در اثر اعمال حرارت بررسی نمودند. آن‌ها با به‌کارگیری روش دینامیک مولکولی اثبات نمودند که تنش و سرعت‌ها اتم‌های موجود در نانورق به صورت قابل ملاحظه‌ای با افزایش شار حرارت خارجی افزایش می‌یابد. خویی و همکاران [18] اثر لایه اکسید سطحی را بر رفتار مکانیکی نانوذرات آلومینیوم تحت آزمون‌های فشار هیدرواستاتیک و فشاری سه‌محوری به صورت سه‌بعدی مطالعه نمودند. آن‌ها اثبات نمودند که با تغییر ضخامت لایه اکسید، پاسخ‌های مکانیکی نانوذرات آلومینیوم دستخوش تغییرات قابل ملاحظه‌ای می‌شود. عباسی و صامتی [19] با به کارگیری روش دینامیک مولکولی نشان دادند که پارامترهای مختلف مکانیکی نانورق‌های آلومینیومی وابستگی قابل توجهی به ضخامت لایه اکسید دارند. در این مطالعه با توجه به کاربردهای گسترده نانورق‌های آلومینیومی در صنایع مختلف مانند تقویت

[2, 1]، ذخیره‌سازی انرژی [3] و ارتقا خواص مکانیکی و حجمی خاک رس [4] دارند. براین اساس تعیین خواص مکانیکی ورق‌های نازک نقش مهمی در قابلیت تولید و اطمینان از عملکرد مطلوب آن‌ها دارد. به طور کلی تست‌های مختلفی برای ارزیابی رفتار مکانیکی نانورق‌ها ارائه شده است که از آن جمله می‌توان به آزمون تک‌محوری فشاری^۱ [5]، آزمون تک‌محوری کششی^۲ [6]، آزمون نفوذ نانو با میکروسکوپ اتمی^۳ [7]، آزمون نفوذ نانو با میکروسکوپ الکترونی^۴ [8]، آزمون برآمدگی^۵ [9, 10] و آزمون خمش [11] اشاره نمود. از متداول‌ترین تکنیک‌های توصیف رفتار مکانیکی ورق‌های نازک، آزمایش کشش تک‌محوری است که ساده‌ترین داده‌ها را برای استخراج خواص الاستیک و پلاستیک ارائه می‌دهد. از چالش‌های اصلی در استفاده از این آزمون در مقیاس نانو می‌توان به مواردی همچون آماده‌سازی، اندازه‌گیری پیش‌تیدگی در نمونه، هم ترازی دقیق نمونه و تولید و اندازه‌گیری نیروها و جابجایی‌های مقیاس کوچک در نمونه اشاره نمود [12].

تاکنون تحقیقات متعددی برای شناسایی و درک رفتار مکانیکی نانورق‌های آلومینیومی ارائه شده است. در این راستا، وانگ^۶ و فو^۷ [13] نمونه پایدار از نانورق‌های آلومینیومی با ضخامت کمتر از ۲ نانومتر را ارائه نمودند. هاگیو^۸ و سیف^۹ [12] نانورق‌های آلومینیومی با ضخامت ۳۰-۵۰ نانومتر را تهیه نموده و رفتار مکانیکی آن‌ها را در براساس تست کشش تک‌محوری ارزیابی نمودند. آن‌ها دریافتند که مدول یانگ و شکل‌پذیری نانورق‌ها با کاهش اندازه دانه‌های کریستالی^{۱۰}، کاهش می‌یابد. به طور کلی، در ساخت نانورق‌های آلومینیومی درک پدیده‌های اکسیداسیون و تأثیرات آن بر مکانیسم تغییر شکل مکانیکی این مواد از جنبه‌های مختلف علمی، مهندسی و فناوری دارای اهمیت به‌سزایی است. نانورق‌های آلومینیومی دارای نسبت سطح به حجم بالایی بوده و در شرایط محیطی به راحتی با اکسیژن موجود در هوا واکنش داده و لایه‌ای از اکسید آلومینیوم در سطح آن‌ها ایجاد می‌شود. به منظور

¹ Compression test

² Tensile test

³ Atomic force microscopy (AFM)-enabled nanoindentation

⁴ In situ nanoindentation in a scanning electron microscopy

⁵ Bulge testing

⁶ Wang

⁷ Fu

⁸ Haque

⁹ Saif

¹⁰ grain size

¹¹ Mearini

¹² Hoffman

¹³ Peng

شبیه‌سازی می‌کند با این روش می‌توان نحوه تغییر شکل و بازیابی شکل اتم‌ها و جنبش آن‌ها در پاسخ به آزمون تک‌محوری کششی و فشاری را شبیه‌سازی نمود و اثرات تغییرات در ساختار اتمی نانورق آلومینیوم تحت شرایط مختلف دما و تغییرات رفتار مکانیکی بر اساس ابعاد و ویژگی‌های سطحی نانورق‌ها را مطالعه نمود. این شبیه‌سازی‌ها نقش مهمی در ارائه دیدگاهی عمیق‌تر و دقیق‌تر از رفتار نانومتریک نانورق‌های آلومینیوم دارند و این امکان را فراهم می‌سازند تا اصلاحات مورد نیاز برای کاربردهای مختلف نانورق‌های آلومینیومی را تعیین نمود.

به طور کلی در تحلیل به روش دینامیک مولکولی، اندرکنش بین ذرات با استفاده از پتانسیل بین‌اتمی توصیف می‌گردد؛ از این رو انتخاب مناسب پتانسیل بین‌اتمی نقش به‌سزایی در دقت شبیه‌سازی خواهد داشت. بر این اساس در این مطالعه اندرکنش بین اتم‌های آلومینیوم و اکسیژن با استفاده از پتانسیل $EAM^2 + CTI^3$ ارائه شده توسط ژو⁴ و همکاران [20] تعیین می‌شود. انرژی بین‌اتمی در این پتانسیل ترکیبی از دو بخش شامل انرژی پتانسیل اتم تعیبه شده (E_{EAM}) و انرژی پتانسیل الکترواستاتیک (E_{CTI}) است که براساس روابط زیر محاسبه می‌شود.

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

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

در روابط فوق، r_{ij} فاصله بین اتم‌های i و j ، ρ_i و q_i به ترتیب چگالی الکترون و بار الکتریکی برای اتم i ، ϕ_{ij} و V_{ij} به ترتیب برهم‌کنش جفتی و برهم‌کنش الکترواستاتیک بین اتم‌های i و j ، و F_i انرژی لازم برای جاسازی اتم i است. یوسفی و همکاران [21] با ارزیابی دقت پتانسیل‌های مختلف اثبات نمودند که پتانسیل $EAM + CTI$ دارای دقت مناسب برای محاسبه اندرکنش بین‌اتمی آلومینیوم و اکسیژن است. هی⁵ و ما⁶ [22] از این پتانسیل برای مدل‌سازی خمش در نانوسیم آلومینا استفاده نمودند و با مقایسه نتایج حاصل از تحلیل عددی با داده‌های آزمایشگاهی دقت این پتانسیل را تایید نمودند.

مواد پایه سیمانی، بهبود عملکرد بتن و خواص حجمی خاک رس و همچنین اهمیت درک تاثیر اکسیداسیون سطحی بر رفتار مکانیکی نانورق‌های آلومینیوم، پاسخ‌های مکانیکی این المان‌ها تحت آزمون تک‌محوری با استفاده از روش دینامیک مولکولی ارزیابی می‌گردد. در این مطالعه برای مدل‌سازی نانورق آلومینیوم با لایه اکسید سطحی از مدل هسته فلزی-پوسته اکسید استفاده می‌شود که علاوه بر دقت مناسب، امکان بررسی تاثیر ضخامت لایه اکسید و ضخامت نانورق بر رفتار مکانیکی نانورق‌های آلومینیوم را نیز فراهم می‌سازد. برای افزایش دقت مدل‌سازی از پتانسیل ترکیبی $EAM + CTI$ در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده می‌شود که دارای دقت و توانایی بالایی در محاسبه اندرکنش بین مولکولی در نانورق آلومینیوم است. نتایج مطالعه نشان می‌دهد که افزایش ضخامت لایه اکسید باعث افزایش سختی و ظرفیت جذب انرژی در نانورق‌ها می‌شود. همچنین این مطالعه تاثیر نقص‌های نقطه‌ای¹ در ساختار نانورق‌ها را تحت آزمون‌های محوری کششی و فشاری مورد ارزیابی قرار می‌دهد تا تاثیر میکروساختار بر رفتار مکانیکی نانورق آلومینیوم بررسی گردد. بررسی نواقص نقطه‌ای نیز نشان می‌دهد که افزایش این نواقص به طور قابل توجهی سختی نانورق را کاهش می‌دهد و این امر تاثیر زیادی بر رفتار مکانیکی نانورق‌ها دارد. در ادامه این مقاله در بخش دوم، جزئیات مدل‌سازی نانورق‌های آلومینیومی و نحوه اعمال تغییر شکل بر آن‌ها ارائه می‌شود. بخش سوم نیز به بیان نتایج حاصل از مدل‌سازی عددی و بررسی تاثیر پارامترهای مختلف بر رفتار مکانیکی نانورق‌ها پرداخته می‌شود.

۲- جزئیات مدل‌سازی نانورق آلومینیوم

استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای مدل‌سازی رفتار نانورق‌های آلومینیوم در سطح ذرات و اتم‌ها یکی از روش‌های مفید برای درک عمیق‌تر از رفتار این ساختارهای نانومتریک است. این شبیه‌سازی‌ها از قانون‌های فیزیکی و شیمیایی برای شبیه‌سازی رفتار ذرات و اتم‌ها استفاده می‌کنند. در دینامیک مولکولی، ابزارهایی مانند معادلات حرکت نیوتنی، قوانین نیرو و پتانسیل‌های بین‌ذره‌ای مورد استفاده قرار می‌گیرند تا رفتار جنبشی ذرات مدل‌سازی شود. این مدل‌سازی اجزای میکروسکوپی نانورق آلومینیوم را به دقت

² Embedded atomic method

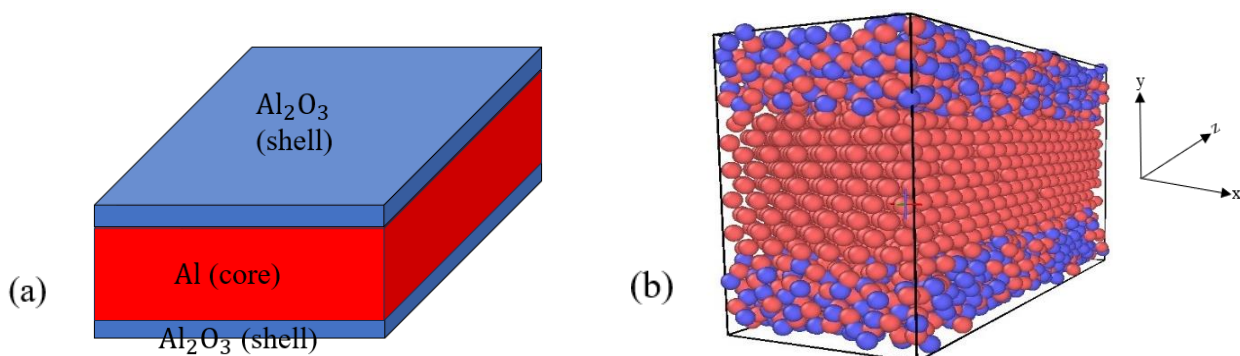
³ Charge transfers ionic potential

⁴ Zhou

⁵ HE

⁶ MA

¹ Point defects



شکل ۱. پیکربندی اولیه نانورق آلومینیوم با لایه اکسید سطحی؛ (a) نمای شماتیکی از مدل هسته آلومینیومی و پوسته اکسید آلومینیوم، (b) ساختار اتمی نانورق

Figure 1. Initial configuration of aluminum nano-film with surface oxidation; (a) schematic view of the core-shell model, and (b) atomic configuration

ابتدا نمونه در هنگرد دما ثابت (NVT) به مدت زمان ۲۰ پیکوثانیه و دمای ۳۰۰ درجه کلوین قرار گرفته و سپس در هنگرد دما-فشار ثابت (NPT) به مدت زمان ۲۰ پیکوثانیه و در دمای محیط و فشار حدودا ۱ اتمسفر تحلیل می‌شود. پیکربندی اتمی نمونه پس از اعمال فرایند پایداری سازی در شکل (۱-ب) ارائه شده است. گام زمانی در تحلیل دینامیک مولکولی برابر ۱ فمتوثانیه در نظر گرفته می‌شود. با توجه به مقدار بسیار کم گام زمانی در تحلیل دینامیک مولکولی و هزینه بالای محاسبات در این روش، عموماً بارگذاری با نرخ کرنش بالا انجام می‌پذیرد که این امر منجر به تاثیر بالای اثرات دینامیکی در نتایج حاصل می‌گردد. از رو در این مطالعه اعمال تغییر شکل به صورت گام به گام صورت می‌پذیرد؛ به نحوی که جزء کوچکی از جابجایی به آرامی به نمونه اعمال شده و سپس نمونه تحت شرایط تغییر شکل یافته ریلکس می‌گردد. اعمال تغییر شکل در این روش منجر به حذف اثرات دینامیکی موجود در تحلیل به روش دینامیک مولکولی شده و نتایج حاصل نزدیک به تحلیل شبه‌استاتیکی خواهد بود [28, 29]. به منظور اطمینان از دقت مدل‌سازی صورت پذیرفته، نتایج حاصل از تحلیل عددی با داده‌های آزمایشگاهی ارائه شده توسط هاگیو^۷ و سیف^۸ [12] برای اعمال تست کشش تک محوری بر روی نانورق‌های آلومینیومی مقایسه می‌شود. نتایج حاصل از مقایسه در قالب نمودار تنش-کرنش در شکل (۲) ارائه شده است. همانگونه که مشاهده می‌شود، همگرایی مناسب نتایج آزمایشگاهی و عددی می‌تواند به وضوح موید دقت مدل‌سازی‌های صورت گرفته در این مطالعه باشد.

در شکل (۱-الف) پیکربندی اولیه مورد استفاده برای مدل‌سازی نانورق آلومینیوم ارائه شده است. همانگونه که در این شکل مشاهده می‌شود، مدل سه‌بعدی هسته آلومینیومی و پوسته اکسید آلومینیوم برای در نظر گرفتن لایه اکسید سطحی به کار برده شده است. زینگ^۱ و همکاران [23] و همچنین خویی و همکاران [18] از مدل هسته-پوسته برای مدل‌سازی لایه اکسید سطحی بر روی نانوذرات آلومینیوم استفاده نموده‌اند. روزاندی^۲ و همکاران [24] نیز رفتار مکانیکی نانوسیم آلومینیوم را براساس مدل هسته-پوسته بررسی نمودند. چینش اولیه اتم‌ها در هسته آلومینیومی براساس ساختار FCC^۳ با ثابت شبکه ۴/۰۴۶ انگسترم صورت می‌پذیرد. همچنین در پوسته اکسید آلومینیوم جایگاه اولیه اتم‌ها مطابق با ساختار کریستالی $\alpha - \text{Al}_2\text{O}_3$ تنظیم می‌گردد [25]. در مدل هسته-پوسته، ابتدا فاصله‌ای به اندازه ۳ انگسترم در حفاصل لایه‌های پوسته و هسته در نظر گرفته می‌شود تا از ایجاد نیروهای دافعه بسیار بزرگ جلوگیری نماید [23]. نمونه اولیه دارای ابعاد ۷۵ × ۴۰ × ۲۵ انگسترم بوده و نمونه در راستای x و z دارای شرایط مرزی پیرویدیک است. تحلیل عددی با نرم‌افزار متن‌باز لمپس^۴ [26] صورت پذیرفته و ارائه گرافیکی نتایج با نرم‌افزار متن‌باز اویتو^۵ [27] انجام می‌پذیرد. پس از ایجاد ساختار اولیه اتمی، انرژی نمونه با استفاده از روش گرادیان مزدوج^۶ کمینه شده و نمونه حالت پایداری را پیدا می‌کند. در ادامه به منظور اعمال شرایط محیطی،

¹ Zeng

² Rosandi

³ Face center cubic

⁴ LAMMPS

⁵ OVITO

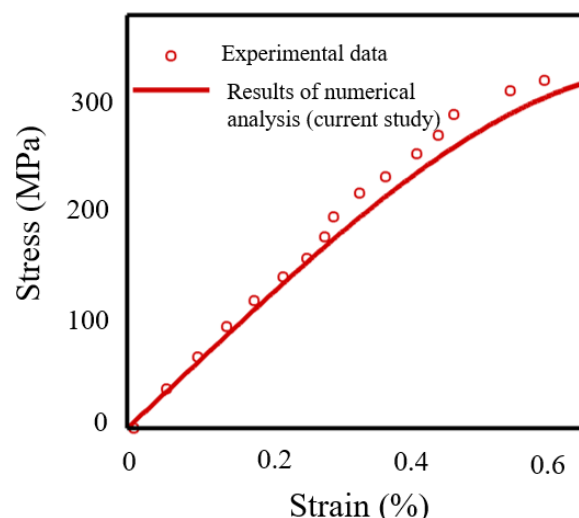
⁶ Conjugate Gradient (CG)

⁷ Haque

⁸ Saif

نحوه تغییر شکل نمونه در درصد‌های مختلف کرنش ارائه شده است. براساس این اشکال می‌توان مشاهده نمود که شرایط بارگذاری منطبق با آزمون کشش و فشار ساده بوده و با افزایش بارگذاری، نمونه در جهت Z به ترتیب دچار افزایش و کاهش طول تدریجی می‌شود. مطابق با نمودار تنش-کرنش، رفتار الاستیک خطی و سپس غیرخطی در نمونه مشاهده می‌گردد؛ به نحوی که نمونه ابتدا رفتار خطی داشته و سپس به تدریج رفتار غیرخطی در آن مشاهده می‌شود. با توجه به ضخامت بسیار پایین نانورق‌ها و همچنین اهمیت رفتار مکانیکی آن‌ها به عنوان تقویت‌کننده بتن و خاک رس در کرنش‌های پایین [2-4]، در این مطالعه بررسی رفتار مکانیکی آن‌ها تا قبل از شکست و بریدگی در نمونه شبیه‌سازی می‌شود. با مقایسه رفتار کششی و فشاری نمونه می‌توان دریافت که تحت تغییر شکل فشاری، نمونه دارای تنش و کرنش تسلیم بیشتری نسبت به حالت کششی می‌باشد و به عبارتی رفتار کششی و فشاری آن دقیقاً منطبق با یکدیگر نمی‌باشد. این امر می‌تواند ناشی از حضور درصد قابل توجهی از لایه اکسید آلومینیوم در سطح فوقانی و تحتانی نمونه باشد.

با توجه به رفتار مکانیکی کاملاً متفاوت آلومینیوم و اکسید آلومینیوم، وجود درصد‌های مختلف از لایه اکسید می‌تواند تاثیر قابل توجهی در رفتار مکانیکی ورق آلومینیوم با لایه اکسید سطحی داشته باشد. به منظور بررسی این موضوع، نمونه‌هایی با درصد‌های مختلفی از لایه اکسید در سطح ورق آلومینیوم خالص ایجاد گردیده و رفتار مکانیکی آن‌ها تحت آزمون کشش و فشار ارزیابی می‌شود. در این حالت با ثابت نگه‌داشتن ضخامت لایه هسته آلومینیومی، درصد مختلفی از لایه پوخته اکسید آلومینیوم روی سطح نانورق طبق جزئیات شبیه‌سازی ایجاد می‌شود. ضخامت لایه اکسید در سطح فوقانی و تحتانی تمامی نانورق‌ها یکسان است. نمونه‌های ایجاد شده تحت آزمون کشش و فشار ساده ارزیابی گردیده و نتایج به صورت نمودارهای تنش-کرنش محوری در شکل (۵) نشان داده می‌شود. در این نمودارها منظور از درصد لایه اکسیدی نشان داده شده، نسبت مجموع ضخامت لایه اکسید در سطح فوقانی و تحتانی نمونه به کل ضخامت نانورق است. طبق نمودارها می‌توان دریافت که با افزایش درصد لایه اکسید شیب نمودار بیشتر شده که باعث افزایش مقدار مدول یانگ



شکل ۲. مقایسه نمودار تنش-کرنش نانورق آلومینیوم شبیه‌سازی شده با روش دینامیک مولکولی در این مطالعه با نتایج آزمایشگاهی ارائه شده توسط هاگیو^۱ و سیف^۲ [12]

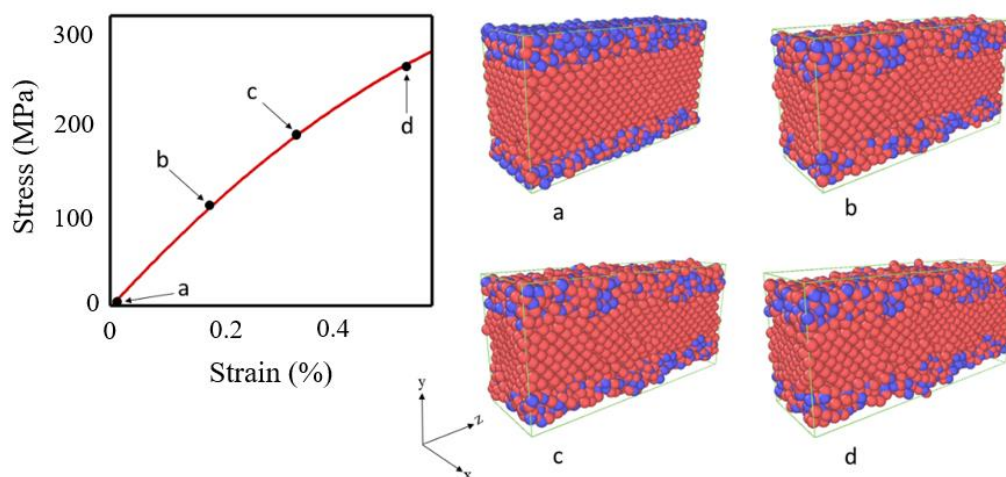
Figure 2. Validation of the stress-strain curve of Al nano-film determined by MD numerical simulation in this study with experimental data reported by Haque and Saif [12]

۳- نتایج و بحث

مطابق با روش بیان شده در قسمت قبل، نمونه‌ای از نانورق آلومینیومی با اکسیداسیون سطحی مدل‌سازی شده و در شرایط محیطی پایدارسازی می‌شود. در نمونه شبیه‌سازی شده مجموع درصد لایه اکسید در سطح فوقانی و تحتانی نمونه نسبت به ضخامت کل ورق ۳۰ درصد فرض می‌شود. پس از اعمال فرایند پایدارسازی نمونه تحت آزمون کشش و فشار ساده قرار می‌گیرد. در مدل‌سازی صورت گرفته، مشابه با آزمون‌های آزمایشگاهی نمونه از دو طرف در راستای Z کشیده شده و در راستای X و Y تحت اثر فشار محیط می‌باشد. براساس تحلیل دینامیک مولکولی، تغییر شکل اعمالی به اتم‌ها منتقل شده و بر مبنای جایگاه اتم‌ها و اندرکنش بین اتمی، در هر لحظه تنش نمونه در راستای محوری ارزیابی می‌شود. همانگونه که قبلاً نیز اشاره گردید، به منظور حذف اثرات دینامیکی، بارگذاری به صورت گام‌به‌گام صورت گرفته است؛ به طوری که در هر مرحله تغییر شکل بسیار کوچکی در نمونه ایجاد شده و سپس پیکربندی نمونه در شرایط تغییر شکل یافته پایدار می‌گردد. در شکل‌های (۳) و (۴) نمودار تنش-کرنش نمونه به ترتیب تحت اثر آزمون کشش ساده و فشار ساده به همراه

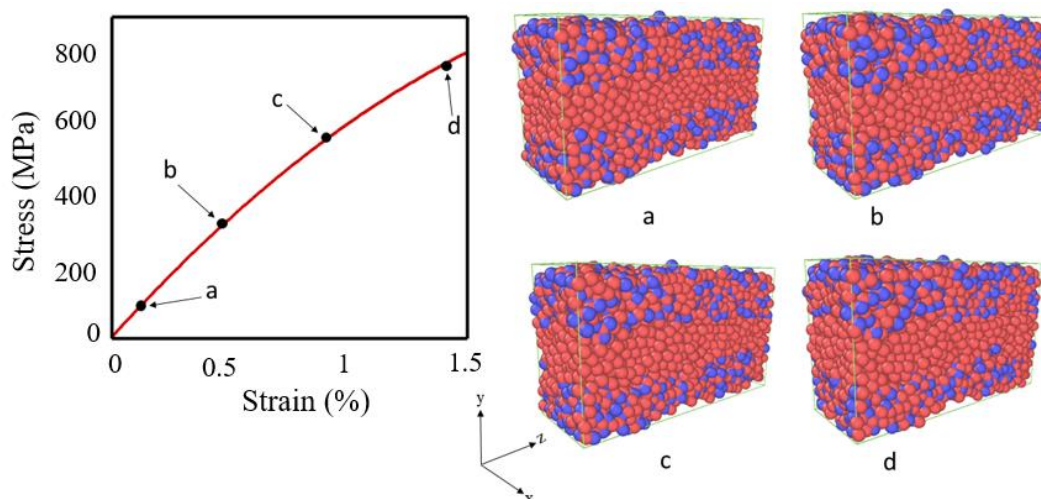
¹ Haque

² Saif



شکل ۳. نمودار تنش - کرنش نمونه تحت اثر آزمون کشش ساده به همراه تغییر شکل نمونه در کرنش (a) صفر درصد (b) ۰/۲ درصد (c) ۰/۳۵ درصد و (d) ۰/۵ درصد (کره‌های آبی و قرمز به ترتیب بیانگر اتم اکسیژن و اتم آلومینیوم است).

Figure 3. Stress-strain curve of uniaxial tensile test along with the snapshots of nano-film at the strain of (a) 0%, (b) 0.1%, (c) 0.19%, and (d) 0.28%



شکل ۴. نمودار تنش - کرنش فشار تک محوری به همراه تغییر شکل نمونه در کرنش (a) ۰/۱ درصد (b) ۰/۵ درصد (c) ۱ درصد و (d) ۱/۴ درصد (کره‌های آبی و قرمز به ترتیب بیانگر اتم اکسیژن و اتم آلومینیوم است).

Figure 4. Stress-strain curve of uniaxial compression test along with the snapshots of nano-film at the strain of (a) 0.1%, (b) 0.5%, (c) 1%, and (d) 1.4%

با افزایش ضخامت لایه اکسید به میزان قابل توجهی تنش تسلیم کششی در نمونه‌ها افزایش می‌یابد. این تغییرات ناشی از سخت‌تر و مقاوم‌تر بودن ساختار اتمی آلومینا نسبت به آلومینیوم می‌باشد. 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 می‌آورند [20].

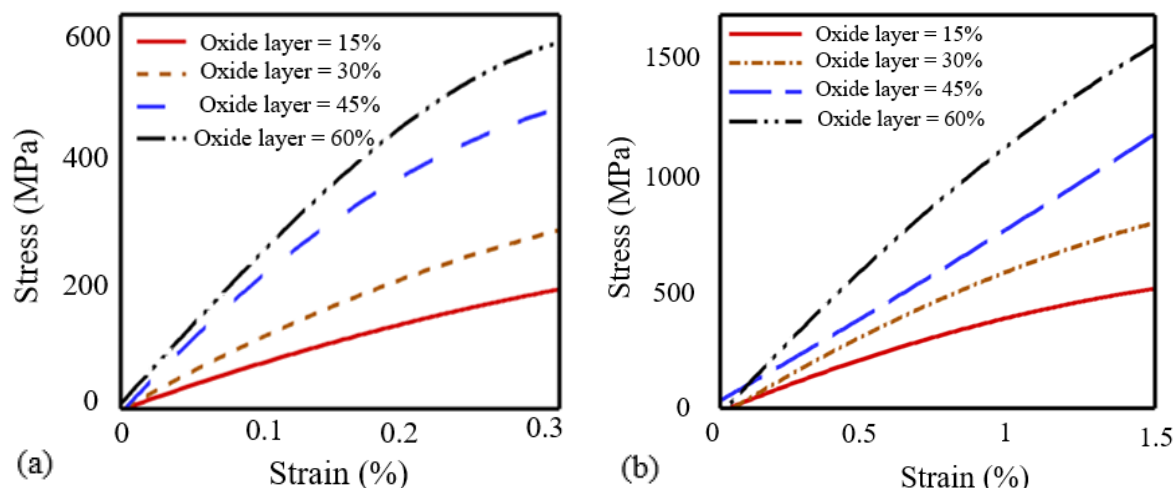
همانگونه که اشاره شد، با توسعه تکنولوژی در حال حاضر امکان تولید ورق‌های آلومینیومی با ضخامت‌های مختلف امکان‌پذیر است. در این قسمت به منظور بررسی تأثیر ضخامت کل ورق بر

در نمونه‌ها می‌شود. میرینی^۱ و هافمن^۲ [14] نیز با مطالعه آزمایشگاهی نشان دادند که وجود لایه آلومینا منجر به افزایش سختی و کاهش انعطاف‌پذیری در نانورق‌ها می‌شود. روزاندی^۳ و همکاران [24] با مطالعه رفتار نانوسیم آلومینیوم تحت آزمون محوری اثبات نمودند که لایه اکسید باعث افزایش مدول یانگ و مقاومت در برابر تغییر شکل پلاستیک در نمونه‌ها می‌شود. همچنین

¹ Mearini

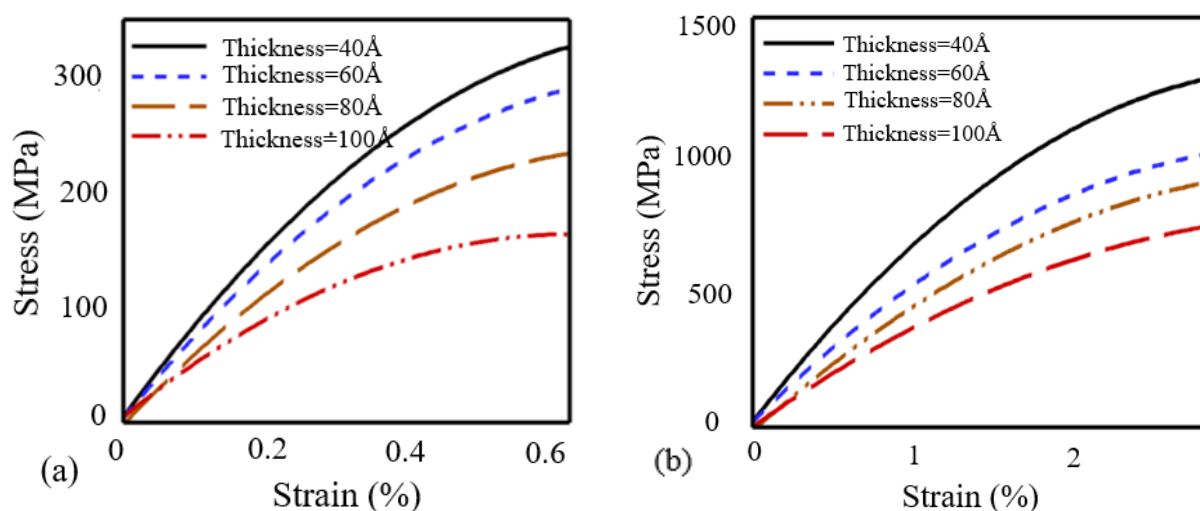
² Hoffman

³ Rosandi



شکل ۵. نمودار تنش-کرنش نانورق‌های آلومینیومی با ضخامت ۸۰ انگسترم و درصدهای مختلف لایه اکسید تحت آزمون (ا) کشش و (ب) فشار تک محوری

Figure 5. The impression of oxide layer thickness on the stress-strain curve of Al nano-film with a thickness of 80 Å under the (a) uniaxial tensile, and (b) uniaxial compression tests.

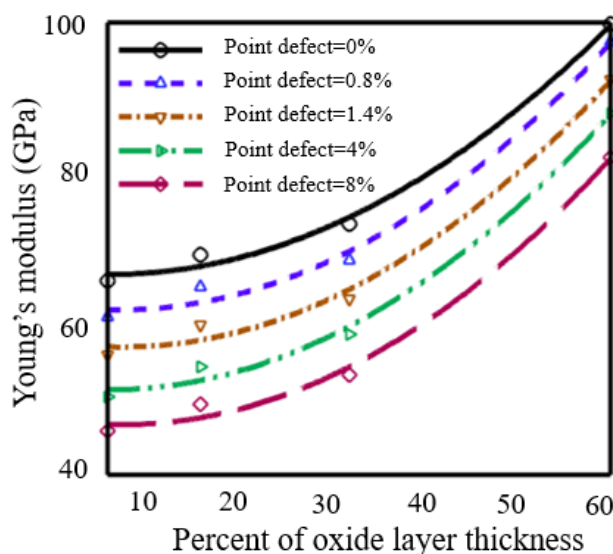


شکل ۶. نمودار تنش-کرنش نمونه‌هایی با ۳۰ درصد لایه اکسیدی و مقادیر مختلف ضخامت کل نانورق تحت آزمون (الف) کشش و (ب) فشار تک محوری

Figure 6. The impression of nano-film's thickness on the stress-strain curve of Al nano-film with a 30% oxide layer under the (a) uniaxial tensile, and (b) uniaxial compression tests.

افزایش ضخامت ورق، نسبت ضخامت پوسته آلومینا به ضخامت کل ورق کاهش یافته و منجر به رفتار نرم‌تر نمونه‌ها شده است. براساس نتایج حاصل مشاهده می‌شود که رفتار تنش-کرنش نمونه‌ها به میزان قابل توجهی تحت اثر نسبت ضخامت پوسته آلومینا به ضخامت کل ورق بوده و با تغییر این پارامتر مدول یانگ و تنش تسلیم نمونه دچار تغییرات محسوس می‌شود. براین اساس می‌توان نتیجه گرفت که مشخصات مکانیکی نانورق‌های آلومینیومی به صورت تابعی از نسبت ضخامت پوسته آلومینا به ضخامت کل ورق است. همچنین براساس نمودارهای تنش-کرنش

رفتار مکانیکی نمونه، این بار ضخامت لایه پوسته آلومینا ثابت فرض شده و با افزایش ضخامت لایه هسته آلومینیوم، چهار ضخامت متفاوت شامل ۴۰، ۶۰، ۸۰ و ۱۰۰ انگسترم برای کل ورق آلومینیوم در نظر گرفته می‌شود. در این حالت نمونه‌ها تحت بارگذاری آزمون کشش و فشار ساده قرار گرفته که نمودارهای تنش-کرنش حاصل در شکل (۶) نشان داده شده است. همانطور که در شکل بالا ملاحظه می‌شود، در هر دو آزمون تنش کششی و تنش فشاری با افزایش ضخامت کل ورق، سختی نمونه و تنش تسلیم آن کاهش می‌یابد. این امر ناشی از آن می‌تواند باشد که با



شکل (۷). تاثیر نواقص نقطه‌ای بر نمودار تغییرات مدول یانگ بر حسب درصد لایه اکسید

Figure 7. The impression of points defects on the Young's modulus of Al nano-film

مشخص به صورت تصادفی در نمونه ایجاد شده و سپس منطبق با قسمت‌های قبلی، تحت آزمون‌های تک‌محوری رفتار مکانیکی نانورق‌ها ارزیابی می‌شود. به طور کلی شیب نمودار تنش-کرنش در آزمون محوری در مکانیک کلاسیک به عنوان مدول یانگ شناخته می‌شود. با توجه به تعداد بالای نمونه و همچنین اهمیت مدول یانگ در کاربرد نانورق‌ها در بتن و خاک‌رس، در شکل (۷) تغییرات مدول یانگ بر حسب تغییرات درصد لایه اکسید برای درصدهای مختلف از نقص نقطه‌ای ارائه می‌شود. همانگونه که مشاهده می‌شود، عموماً با افزایش درصد نواقص نقطه‌ای، رفتار نمونه‌ها نرم‌تر شده و پارامتر مدول یانگ در آن‌ها کاهش می‌یابد. این موضوع در مطالعات صورت گرفته توسط نیکروش و همکاران [30] و صامتی [31] نیز مشاهده شده است. همچنین مطابق شکل (۷) مشاهده می‌شود که تاثیر نواقص نقطه‌ای برای نمونه‌هایی با مقادیر مختلف درصد لایه اکسید یکسان نبوده و به طور کلی با افزایش درصد لایه اکسید تاثیر این عامل کاهش می‌یابد.

۴- نتیجه‌گیری

در این مطالعه نانورق‌های آلومینیوم براساس مدل هسته فلزی-پوسته اکسید فلزی مدل‌سازی گردیده و تحت آزمون‌های تک‌محوری مختلف مکانیکی ارزیابی می‌گردد. در این راستا ابتدا نمونه‌هایی با ضخامت‌ها و درصد لایه اکسید مختلف مدل‌سازی شده و تحت شرایطی مشابه با شرایط محیطی پایدار شدند. به

با افزایش نسبت ضخامت پوسته آلومینا به ضخامت کل ورق، سطح زیر نمودار تنش-کرنش نیز به صورت قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد که بیانگر افزایش ظرفیت نانورق‌ها برای جذب انرژی در طول تغییر شکل است.

به طور کلی ریزساختارها^۱ و ایرادات موجود در آن‌ها از عوامل تاثیرگذار و مهم در پاسخ‌های مکانیکی قطعات بوده و می‌تواند تغییرات قابل ملاحظه‌ای را در رفتار آن‌ها ایجاد نماید. ایرادات ساختار موجود می‌تواند شامل انواع مختلف از جمله ترک‌ها، حفرات، نابجایی‌ها و مرزبندی باشد که با توجه به گستردگی و تصادفی بودن آن‌ها، بررسی تاثیرات آن‌ها نیازمند مطالعه بسیار وسیعی است. نواقص نقطه‌ای از انواع متداول ایرادات موجود در ریزساختار نمونه‌ها است که می‌تواند بر رفتار مکانیکی نمونه‌ها اثرگذار باشد. در این بخش از مطالعه به بررسی اثر نواقص نقطه‌ای بر پاسخ‌های مکانیکی نانورق‌های نازک آلومینیومی پرداخته می‌شود. برای این منظور ۴ درصد متفاوت برای نواقص نقطه‌ای شامل ۰/۸، ۱/۲، ۴ و ۸ درصد ارزیابی می‌گردد. در این راستا در نمونه‌هایی با درصدهای مختلف از لایه اکسید، ابتدا در ساختار کریستالی نمونه، تعدادی از اتم‌ها به صورت تصادفی حذف می‌شوند تا نقص‌های نقطه‌ای ایجاد شود. درصد این نقص‌ها به نسبت تعداد اتم‌های حذف‌شده به کل تعداد اتم‌های موجود در نمونه محاسبه می‌شود. در این حالت نواقص نقطه‌ای با درصد

¹ Microstructure

کاهش می‌یابد. بررسی رفتار مکانیکی بیانگر آن است که افزایش ۸ درصدی نواقص نقطه‌ای می‌تواند تا حدود ۲۵ درصد مدول یانگ نانورق را کاهش دهد.

قدردانی نویسندگان

نویسندگان از حمایت معنوی دانشگاه قدردانی می‌کنند.

تعارض منافع

برای نویسندگان هیچ‌گونه تعارض منافی وجود ندارد.

سهم نویسندگان

سهم نویسندگان با هم برابر است.

منابع مالی

نویسندگان از منابع مالی شخص یا نهادی استفاده نکرده‌اند.

References

- Muzenski, S., Flores-Vivian, I., Farahi, B. and Sobolev, K. 2020. Towards Ultrahigh Performance Concrete Produced with Aluminum Oxide Nanofibers and Reduced Quantities of Silica Fume. *Nanomaterials*, 10(11), p.2155.
- Sun, X., Yang, C., Zhao, Y., Li, Y., Shang, Z., Zhou, H., He, X., et al. 2022. Ultrathin Aluminum Nanosheets Grown on Carbon Nanotubes for High Performance Lithium Ion Batteries. *Advanced Functional Materials*, 32(8), p.2109112.
- Kozlova, I.V., Zemskova, O.V., Semenov, V.S. and Stepina, I.V. 2021. Effect of Nano-Aluminum Component on the Cement Properties. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 1079(3), p.032071.
- Ghaffarpour Jahromi, S. and Zahedi, H. 2018. Investigating the Effecting of Nano Aluminum on Mechanical and Volumetric Properties of Clay. *Amirkabir Journal of Civil Engineering*, 50(3), pp.597-606.
- Sinnott, A.D., Kelly, A., Gabbett, C., Munuera, J., Doolan, L., Möbius, M. and Boland, J.J. 2023. Mechanical Properties of Conducting Printed Nanosheet Network Thin Films Under Uniaxial Compression. *Advanced Materials*, 35(50), p.2306954.
- Kim, J.-H., Nizami, A., Hwangbo, Y., Jang, B., Lee, H.-J., Woo, C.-S. and Lee, S.-M. 2013. Tensile testing of ultra-thin films on water surface. *Nature Communications*, 4(1), p.2520.
- Li, X., Gao, H. and Murphy, C.J. 2004. Nanoindentation of Cu₂O Nanocubes. *Nano Letters*, 4(10), pp.1903-7.
- Suk, J.W., Mancevski, V., Hao, Y., Liechti, K.M. and Ruoff, R.S. 2015. Fracture of polycrystalline graphene membranes by in situ nanoindentation in a scanning electron microscope. *physica status solidi (RRL) – Rapid Research Letters*, 9(10), pp.564-9.
- Xu, D. and Liechti, K.M. 2010. Bulge Testing Transparent Thin Films with Moiré Deflectometry. *Experimental Mechanics*, 50(2), pp.217-25.
- Castellanos-Gomez, A., Poot, M., Steele, G.A., van der Zant, H.S.J., Agraït, N. and Rubio-Bollinger, G. 2012. Mechanical properties of freely suspended semiconducting graphene-like layers based on MoS₂. *Nanoscale Research Letters*, 7(1), p.233.
- Al-Quraishi, K.K., He, Q., Kauppila, W., Wang, M. and Yang, Y. 2020. Mechanical testing of two-dimensional materials: a brief review. *International Journal of Smart and Nano Materials*, 11(3), pp.207-46.
- Haq, M.A. and Saif, M.T.A. 2002. Mechanical behavior of 30–50 nm thick aluminum films under uniaxial tension. *Scripta Materialia*, 47(12), pp.863-7.
- Wang, W. and Fu, L. 2020. Oxygen Passivation Stabilizes Sub-2-nm Aluminum Nanosheets. *Chem*, 6(2), pp.322-4.
- Mearini, G.T. and Hoffman, R.W. 1993. Tensile properties of aluminum/alumina multi-layered thin films. *Journal of Electronic Materials*, 22(6), pp.623-

- 9.
15. Peng, P., Liao, G., Shi, T., Tang, Z. and Gao, Y. 2010. Molecular dynamic simulations of nanoindentation in aluminum thin film on silicon substrate. *Applied Surface Science*, 256(21), pp.6284-90.
16. Lin, Z., Leveugle, E., Bringa, E.M. and Zhigilei, L.V. 2010. Molecular Dynamics Simulation of Laser Melting of Nanocrystalline Au. *The Journal of Physical Chemistry C*, 114(12), pp.5686-99.
17. Wang, X., Shi, X., Ragab, A.E. and Sabetvand, R. 2024. Investigating the effect of external heat flux on the crack growth process in an aluminum nanoplate using molecular dynamics simulation. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 150, p.107199.
18. Khoei, A.R., Khajepour, B. and Rezaei Sameti, A. 2022. Surface oxidization effect on the mechanical behavior of aluminum nanopowders under triaxial compression test. *Applied Surface Science*, 606, p.154907.
19. Abbasi, H. and Rezaei Sameti, A. 2024. Impression of Temperature and Oxide Layer Thickness on the Mechanical Characteristics of Aluminum ultra-thin film. *Journal of Computational Methods in Engineering*, 43(1), pp.103-118. [In Persian]
20. Zhou, X.W., Wadley, H.N.G., Filhol, J.S. and Neurock, M.N. 2004. Modified charge transfer-embedded atom method potential for metal/metal oxide systems. *Physical Review B*, 69(3), p.035402.
21. Yousefi, E., Sun, Y., Kunwar, A., Guo, M., Moelans, N. and Seveno, D. 2021. Surface tension of aluminum-oxygen system: A molecular dynamics study. *Acta Materialia*, 221, p.117430.
22. He, Y.J. and Ma, B. 2022. Molecular dynamics analysis on bending mechanical behavior of alumina nanowires at different loading rates. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 32(11), pp.3687-98.
23. Zeng, H., Cheng, X., Zhang, C. and Lu, Z. 2018. Responses of Core-Shell Al/Al₂O₃ Nanoparticles to Heating: ReaxFF Molecular Dynamics Simulations. *The Journal of Physical Chemistry C*, 122(16), pp.9191-7.
24. Rosandi, Y., Luu, H.-T., Urbassek, H.M. and Gunkelmann, N. 2020. Molecular dynamics simulations of the mechanical behavior of alumina coated aluminum nanowires under tension and compression. *RSC Advances*, 10(24), pp.14353-9.
25. Kirfel, A. and Eichhorn, K. 1990. Accurate structure analysis with synchrotron radiation. The electron density in Al₂O₃ and Cu₂O. *Acta Crystallographica Section A*, 46(4), pp.271-84.
26. Plimpton, S. 1995. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, 117(1), pp.1-19.
27. Stukowski, A. 2014. A triangulation-based method to identify dislocations in atomistic models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 70, pp.314-9.
28. Khoei, A.R., Orvati Movaffagh, A.M. and Sameti, A.R. 2024. Thermo-mechanical characteristics of oxide-coated aluminum nano-powder. *International Journal of Thermal Sciences*, 197, p.108767.
29. Rezaei Sameti, A. and Mousivand, A., 2025. The Influence of Diameter on the Strength and Ductility of BCC Iron Nanowire under Axial Loading: A Reactive Molecular Dynamics Simulation. *Physica B: Condensed Matter*, p.417402.
30. Nikraves, Y., Sameti, A.R. and Khoei, A.R. 2022. An atomistic-continuum multiscale analysis for heterogeneous nanomaterials and its application in nanoporous gold foams. *Applied Mathematical Modelling*, 107, pp.353-78.
31. Sameti, A.R. 2024. Investigation of mechanical behavior of Aluminum foam under uniaxial tests using Voronoi tessellation method. *Sharif Journal of Civil Engineering*, 40(1), pp.91-98. [In Persian]

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم؟

Sameti, A. and Abbasi, H., 2025. Investigation of the Mechanical Behavior of Aluminum Nano-films with Surface Oxidation under Uniaxial Tests: Molecular Dynamics Analysis. *Modares Civil Engineering journal*, 25(5), pp.7-17.

DOI: 10.22034/25.5.7

