



تحلیل اتمی رفتار اصطکاکی 4H-SiC تیتانیوم تحت اثر فشار و دما با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

علیرضا خنجری^۱، احمد همایونی^{۲*}

^۱ دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اراک، اراک، ایران.

^۲ استادیار مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اراک، اراک، ایران.

مقاله مستقل، تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۱۱/۱۷؛ تاریخ بازنگری: ۱۴۰۵/۰۲/۱۸؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۵/۰۴/۰۴

چکیده

در این پژوهش، رفتار اصطکاکی تماس بین سیلیسیم کارباید و تیتانیوم با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفته است. به منظور مدل‌سازی سیستم، بلوک‌هایی از جنس 4H-SiC و تیتانیوم با هندسه مکعب مستطیل ایجاد شده و برهم‌کنش‌های بین‌اتمی با استفاده از پتانسیل‌های EAM، Tersoff و Lennard-Jones تعریف گردید. فرآیند شبیه‌سازی شامل اعمال نیروی نرمال و حرکت لغزشی بلوک تیتانیوم بر روی سطح SiC بوده و ضریب اصطکاک از نسبت نیروی اصطکاکی میانگین به نیروی نرمال محاسبه شده است. اثر پارامترهای فشار و دما بر ضریب اصطکاک مورد تحلیل قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهد که افزایش نیروی نرمال اعمالی منجر به کاهش ضریب اصطکاک می‌شود، در حالی که تغییر شرایط دمایی باعث بروز رفتار اصطکاکی خطی اما پایدار در طول شبیه‌سازی می‌گردد. این مطالعه با ارائه تحلیل اتمی تماس SiC-Ti درک عمیق‌تری از مکانیزم‌های کنترل‌کننده اصطکاک فراهم ساخته و می‌تواند در طراحی و بهینه‌سازی سیستم‌های پیشرفته تریبولوژیکی مورد استفاده قرار گیرد.

کلمات کلیدی: سیلیسیم کارباید؛ تیتانیوم؛ دینامیک مولکولی؛ ضریب اصطکاک؛ نانو اصطکاک.

Atomistic Analysis of 4H-SiC/Titanium Nanoscale Friction Behavior under the Effects of Normal Load and Temperature Using Molecular Dynamics

Alireza Khanjari, Ahmad Homayoni*

MSc Student, Mech. Eng., Arak UT, Arak, Iran.

Assist. Prof., Mech. Eng., Arak UT, Arak, Iran.

Abstract

In this study, the frictional behavior of the contact between silicon carbide and titanium is investigated using molecular dynamics simulation. To model the system, rectangular blocks of 4H-SiC and titanium are constructed, and the interatomic interactions are described using the Tersoff, embedded atom method (EAM), and Lennard-Jones potentials. The simulation procedure involves the application of a normal load followed by the sliding motion of the titanium block over the SiC surface, and the coefficient of friction is calculated as the ratio of the averaged friction force to the applied normal force. The effects of normal load and temperature on the coefficient of friction are systematically analyzed. The results indicate that increasing the applied normal load leads to a reduction in the coefficient of friction, while variations in temperature result in a linear yet stable frictional behavior throughout the simulation. This study provides atomistic insight into the SiC-Ti contact and contributes to a deeper understanding of the mechanisms governing friction at the nanoscale, with potential implications for the design and optimization of advanced tribological systems.

Keywords: Silicon carbide; Titanium; Molecular dynamics; Coefficient of friction; Nanotribology.

* احمد همایونی؛ تلفن: ۰۸۶۳۳۴۰۰۶۲۹

آدرس پست الکترونیک: Homayoni@araku.ac.ir

۱- مقدمه

پدیده اصطکاک و سایش از عوامل اصلی محدودکننده عملکرد و عمر مفید قطعات مهندسی به شمار می‌رود و نقش تعیین‌کننده‌ای در مصرف انرژی، قابلیت اطمینان و هزینه‌های نگهداری سیستم‌های صنعتی دارد. با پیشرفت فناوری و حرکت به سوی سیستم‌های کوچک‌مقیاس و شرایط کاری شدید، نیاز به شناخت دقیق‌تر رفتار اصطکاکی مواد در مقیاس‌های ریز و نانو بیش از پیش احساس می‌شود. در این راستا، توسعه مواد پیشرفته و استفاده از روش‌های عددی نوین، امکان بررسی مکانیزم‌های بنیادی اصطکاک را فراهم کرده است. اصطکاک و سایش از مهم‌ترین پدیده‌های تریبولوژیکی مؤثر بر عملکرد، بازده انرژی و عمر مفید قطعات مهندسی محسوب می‌شوند. کاهش تلفات ناشی از اصطکاک، به‌ویژه در کاربردهای پیشرفته صنعتی، نیازمند شناخت عمیق رفتار تماس مواد در مقیاس‌های مختلف است. در این راستا، توسعه مواد پیشرفته و استفاده از روش‌های شبیه‌سازی اتمی، افق‌های جدیدی را برای تحلیل مکانیزم‌های بنیادی اصطکاک فراهم کرده است. [۴ و ۱۱]

در میان مواد مهندسی، سرامیک‌ها به دلیل سختی بالا، پایداری حرارتی مناسب و مقاومت عالی در برابر سایش، جایگاه ویژه‌ای در کاربردهای تریبولوژیکی دارند. سیلیسیم کارباید به عنوان یکی از مهم‌ترین سرامیک‌های پیشرفته، در محیط‌های با بار و دمای بالا مورد استفاده قرار می‌گیرد. مطالعات نشان می‌دهد که رفتار اصطکاکی SiC به ساختار بلوری، نوع پلی‌تایپ و شرایط تماس وابسته است و تماس‌های اصطکاکی آن با تغییر شکل زیرسطحی و تمرکز تنش همراه می‌باشد. سیلیسیم کارباید به دلیل سختی بالا، مدول الاستیسیته زیاد، پایداری حرارتی و مقاومت عالی در برابر سایش، یکی از مهم‌ترین سرامیک‌های مهندسی در کاربردهای تریبولوژیکی به شمار می‌رود. مطالعات نشان داده‌اند که ضریب اصطکاک و رفتار سایش SiC به عواملی نظیر نوع پلی‌تایپ، شرایط تماس و محیط عملیاتی وابسته است. بررسی اصطکاک بین سطوح SiC و همچنین تماس آن با مواد فلزی، بیانگر نقش مهم ساختار بلوری و مکانیزم‌های تغییر شکل سطحی و زیرسطحی در تعیین رفتار اصطکاکی است. [۸، ۱۱ و ۱۴]

در مقیاس نانو، رفتار اصطکاکی SiC به‌طور قابل توجهی تحت تأثیر مکانیزم‌های اتمی قرار دارد که با روش‌های تجربی

به‌سختی قابل مشاهده هستند. با گسترش روش‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، امکان بررسی رفتار اصطکاکی SiC در مقیاس اتمی فراهم شده است. مطالعات انجام‌شده روی پلی‌تایپ‌های مختلف SiC نظیر 3C، 4H و 6H نشان می‌دهد که ضریب اصطکاک به‌طور مستقیم تحت تأثیر جهت‌گیری سطح، شرایط بارگذاری و نحوه لغزش قرار دارد. این شبیه‌سازی‌ها نشان می‌دهند که ایجاد نابجایی‌ها، ترک‌های زیرسطحی و تغییرات ساختاری موضعی نقش تعیین‌کننده‌ای در رفتار اصطکاکی SiC ایفا می‌کنند. شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی نشان داده‌اند که نانو اصطکاک در پلی‌تایپ‌های مختلف SiC منجر به ایجاد نابجایی، ترک‌های زیرسطحی و آسیب‌های موضعی می‌شود. همچنین جهت خراش، وجود دوقلوبی‌های نانومقیاس و زبری سطح، تأثیر مستقیمی بر میزان نیروی اصطکاک و الگوی تخریب زیرسطحی دارند. [۱۶، ۱۷، ۱۳ و ۱۰]

رفتار اصطکاکی SiC در تماس با فلزات مختلف، به‌ویژه تیتانیوم و آلومینیوم، موضوع تحقیقات گسترده‌ای بوده است. نتایج نشان می‌دهد که نوع فلز مقابل، شرایط محیطی مانند رطوبت و تشکیل لایه‌های اکسیدی، می‌توانند به‌طور قابل توجهی ضریب اصطکاک و نرخ سایش را تغییر دهند. در کاربردهای صنعتی، تماس سرامیک‌ها با فلزات امری اجتناب‌ناپذیر است. تیتانیوم و آلیاژهای آن به دلیل نسبت استحکام به وزن بالا، مقاومت به خوردگی و زیست‌سازگاری مناسب، کاربرد گسترده‌ای دارند، اما رفتار ضعیف آن‌ها در برابر سایش یکی از چالش‌های اصلی محسوب می‌شود. مطالعات نشان داده‌اند که تماس SiC با فلزاتی نظیر تیتانیوم می‌تواند منجر به رفتار اصطکاکی پیچیده‌ای شود که به ویژگی‌های فصل مشترک وابسته است. علاوه بر این، استفاده از SiC در قالب پوشش‌ها و کامپوزیت‌های تقویت‌شده، منجر به بهبود خواص تریبولوژیکی و کاهش سایش شده است. [۵، ۶ و ۲]

تیتانیوم و آلیاژهای آن به دلیل نسبت استحکام به وزن بالا و مقاومت خوردگی مناسب، در صنایع هوافضا و پزشکی کاربرد گسترده‌ای دارند، با این حال رفتار ضعیف آن‌ها در برابر سایش یکی از محدودیت‌های اصلی محسوب می‌شود. تقویت آلیاژهای پایه تیتانیوم با ذرات سرامیکی نظیر SiC، منجر به افزایش سختی و بهبود مقاومت اصطکاکی شده است. مطالعات شبیه‌سازی روی کامپوزیت‌های TiC/Ni نیز نشان می‌دهد که

مکانیزم‌های سایش به شدت به بار اعمالی و تکرار تماس وابسته هستند. [۲۱، ۹، ۶، ۲۲ و ۱۸]

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به‌عنوان یکی از مؤثرترین ابزارها برای بررسی رفتار اصطکاکی مواد سرامیکی در مقیاس نانو شناخته می‌شود، زیرا امکان تحلیل مستقیم برهم‌کنش‌های اتمی در ناحیه تماس را فراهم می‌سازد. مطالعات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انجام‌شده روی پلی‌تایپ‌های مختلف سیلیسیم کارباید نظیر $3C-SiC$ ، $4H-SiC$ و $6H-SiC$ نشان داده‌اند که ضریب اصطکاک این ماده به‌شدت تحت تأثیر ساختار بلوری، جهت‌گیری سطح و شرایط بارگذاری قرار دارد. نتایج این شبیه‌سازی‌ها حاکی از آن است که فرآیند اصطکاک در SiC با مکانیزم‌هایی نظیر ایجاد نابجایی، تغییر شکل پلاستیک موضعی و آسیب زیرسطحی همراه است که مستقیماً بر مقدار نیروی اصطکاک اثر می‌گذارند. [۱۹، ۱۰، ۲۰ و ۱۴] اگرچه مطالعات متعددی به بررسی رفتار تریبولوژیکی SiC و فلزات پرداخته‌اند، بخش قابل توجهی از این پژوهش‌ها در مقیاس ماکرو یا در شرایط تجربی انجام شده‌اند. از سوی دیگر، شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی بیشتر بر روی SiC خالص یا سیستم‌های فلزی دیگر متمرکز بوده و تماس مستقیم $SiC-Ti$ کمتر مورد توجه قرار گرفته است. این مسئله نشان‌دهنده وجود خلأ پژوهشی در تحلیل اتمی این جفت‌مواد است [۱، ۱۲، ۱۵ و ۱۴]

در تماس اصطکاکی بین سیلیسیم کارباید و فلزات، به‌ویژه تیتانیوم، شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی نقش مهمی در شناسایی مکانیزم‌های حاکم بر ضریب اصطکاک ایفا می‌کنند. مطالعات انجام‌شده روی تماس $SiC-Ti$ نشان داده‌اند که تفاوت در ماهیت پیوندهای اتمی و خواص مکانیکی دو ماده، منجر به تمرکز تنش در فصل مشترک و ایجاد آسیب‌های موضعی در SiC یا سطح تیتانیوم می‌شود. نتایج این شبیه‌سازی‌ها بیانگر آن است که ضریب اصطکاک در تماس $SiC-Ti$ به شدت تحت تأثیر شرایط تماس، ساختار سطحی و تغییر شکل اتمی در ناحیه فصل مشترک قرار دارد و تحلیل دینامیک مولکولی امکان درک دقیق این رفتار و پیش‌بینی عملکرد تریبولوژیکی این جفت‌مواد را فراهم می‌سازد انتخاب سیلیسیم کارباید و تیتانیوم در این پژوهش به دلیل کاربرد گسترده آن‌ها در سیستم‌های مهندسی پیشرفته و تفاوت

بنیادین در ماهیت پیوندهای اتمی صورت گرفته است. به‌عنوان یک سرامیک سخت با پیوندهای کووالانسی قوی و تیتانیوم به‌عنوان فلزی با پیوندهای فلزی، شرایط مناسبی را برای مطالعه اصطکاک در فصل مشترک‌های ناهمجنس فراهم می‌کنند. بررسی ضریب اصطکاک در این سیستم می‌تواند به درک بهتر مکانیزم‌های انتقال تنش، آسیب زیرسطحی و کنترل اصطکاک منجر شود. [۳، ۱۵، ۱۹ و ۱۱]

با وجود پژوهش‌های انجام‌شده، بررسی نظام‌مند تماس اصطکاکی $SiC-Ti$ در مقیاس اتمی و تحت شرایط مختلف فشار، دما و سرعت لغزش همچنان محدود است. به‌ویژه تأثیر هم‌زمان این پارامترها بر ضریب اصطکاک و مکانیزم‌های حاکم بر رفتار اصطکاکی به‌طور جامع مورد مطالعه قرار نگرفته است. از این‌رو، در این پژوهش با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، تماس بین سیلیسیم کارباید و تیتانیوم تحت شرایط مختلف بررسی شده و تلاش می‌شود خلأ موجود در مطالعات پیشین برطرف گردد.

۲- جزئیات شبیه‌سازی

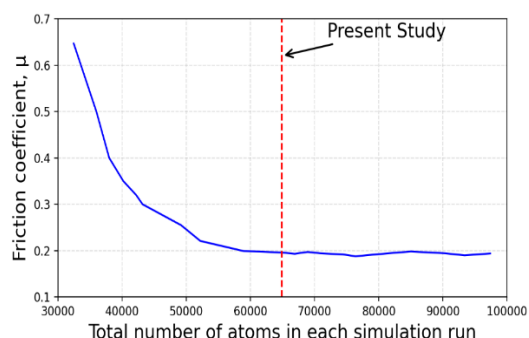
۲-۱- مواد اولیه و هندسه مدل

در این پژوهش، به‌منظور بررسی رفتار اصطکاکی بین سیلیسیم کارباید و تیتانیوم، یک مدل اتمی متشکل از دو بلوک جامد با هندسه مکعب مستطیل در نظر گرفته شد. در گام نخست، بلوک سیلیسیم کارباید از نوع $3C-SiC$ با استفاده از کد متن‌باز اتم‌اسک^۱ و بر اساس ساختار بلوری مربوطه، در واحد آنگستروم و با ابعاد ۱۲۰ در ۱۲۰ در ۳۸ آنگستروم ایجاد گردید. پس از ساخت مدل اتمی، فایل داده خروجی تهیه شده و جهت انجام شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی به نرم‌افزار لمپس^۲ منتقل شد.

در ادامه، در محیط نرم‌افزار لمپس یک بلوک از جنس تیتانیوم به‌صورت مکعب مستطیل و با ابعادی کوچکتر از بلوک سیلیسیم کارباید تعریف گردید. ابعاد بلوک تیتانیومی به‌صورت ۷۰ در ۷۰ در ۳۰ می‌باشد. این انتخاب هندسی به‌منظور شبیه‌سازی تماس یک جسم لغزان فلزی بر روی سطح سرامیکی SiC انجام شده است. بلوک تیتانیوم به‌عنوان ماده فلزی و بلوک سیلیسیم کارباید به‌عنوان زیرلایه سخت در نظر

^۲ LAMMPS

^۱ AtomsK



شکل ۲- نمودار همگرایی ضریب اصطکاک براساس تعداد اتم در شبیه سازی با شرایط ثابت

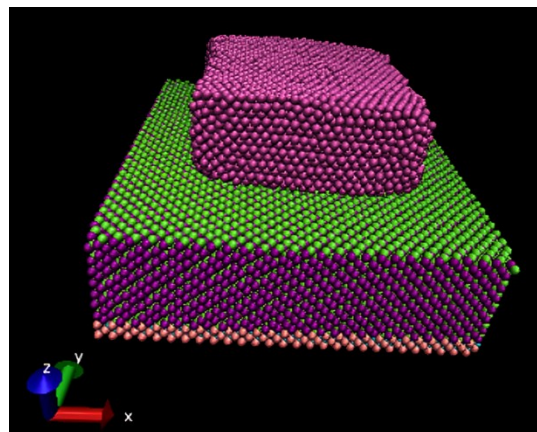
شکل ۲ نتایج ضریب اصطکاک را با تغییر شرایط ابعادی انسمبل نشان میدهد. همانطور که مشاهده میشود مقدار ضریب اصطکاک پس از افزایش تعداد اتمها همگرا شده و نسبت به اندازه مستقل میشود.

۲-۲- روش مدلسازی

در این پژوهش، به منظور توصیف دقیق رفتار مکانیکی و تریبولوژیکی مواد مورد بررسی، از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی استفاده شد که امکان تحلیل مستقیم برهم کنش های اتمی و استخراج پاسخ سیستم در مقیاس نانو را فراهم می سازد. انتخاب پتانسیل های بین اتمی مناسب، یکی از مهم ترین مراحل در شبیه سازی دینامیک مولکولی محسوب می شود، زیرا دقت نتایج به طور مستقیم به صحت مدل سازی پیوندهای اتمی وابسته است.

در بخش روش مدلسازی، انتخاب پتانسیل ها بر اساس ماهیت فیزیکی و نوع پیوندهای حاکم بر هر ماده انجام شده است. برای تیتانیوم از پتانسیل Embedded Atom Method (EAM) استفاده شد، زیرا این پتانسیل قادر است برهم کنش های فلزی، اثرات چگالی الکترونی و رفتار مکانیکی فلزات را با دقت مناسبی مدل سازی نماید. برای سیلیسیم کاربرد از پتانسیل Tersoff استفاده گردید، زیرا این پتانسیل به طور خاص برای مدل سازی مواد کووالانسی با وابستگی زاویه ای پیوندها توسعه یافته و در باز تولید خواص مکانیکی، ساختاری و شکست SiC عملکرد مناسبی دارد. همچنین برای برهم کنش بین اتم های Ti و SiC، تابع پتانسیل ترکیبی مطابق با مطالعات معتبر پیشین تعریف گردید. انتخاب این مجموعه پتانسیل ها موجب

گرفته شدند تا شرایط تماس اصطکاکی به صورت واقع بینانه مدل سازی شود. شکل ۱ نمایانگر حالت ابتدایی شبیه سازی پیش از اعمال نیروی لغزشی است.



شکل ۱- تصویری از قرار گیری بلوک SiC بر روی بلوک Ti در حین شبیه سازی

هندسه کلی مدل به گونه ای طراحی شد که هر دو بلوک در شرایط آزاد و بدون قید اضافی قرار داشته باشند و امکان بررسی دقیق رفتار اصطکاکی و برهم کنش اتمی در فصل مشترک میان آن ها فراهم گردد. این آرایش هندسی، شرایط مناسبی را برای تحلیل نیروهای تماس، تغییر شکل های موضعی و پاسخ اصطکاکی سیستم ایجاد می کند.

در شبیه سازی حاضر که با انسمبل NVT برای سازگاری با شرایط دمایی انجام شده است، تأثیر اندازه انسمبل بر پاسخ دینامیکی سیستم به طور دقیق بررسی گردیده است. اندازه انسمبل به گونه ای انتخاب شد که تعداد کافی از اتم ها در ناحیه تماس وجود داشته باشند تا رفتار آماری و میانگین نیروها به صورت پایدار و مستقل از نوسانات موضعی ظاهر شود، اما در عین حال از افزایش بیش از حد اندازه مدل که سبب افزایش زمان محاسباتی و کاهش دقت در کنترل انرژی می شود، اجتناب شده است. انتخاب این اندازه بر مبنای آزمون همگرایی انجام شد؛ بدین معنا که پس از افزایش تدریجی اتم ها و حجم شبیه سازی، پاسخ نیرو و ضریب اصطکاک به مقدار ثابت و تکرارپذیر رسید که نشان دهنده کفایت انسمبل انتخابی در تطابق با شرایط دمایی و پایداری حرارتی مدل است.

بلوک تیتانیوم و سیلیسیم کاربرد از پتانسیل لنارد-جونز استفاده شد. این پتانسیل به دلیل سادگی و پایداری عددی، به طور گسترده برای شبیه سازی برهم کنش های بین سطحی در سیستم های چندماده ای مورد استفاده قرار می گیرد. در این راستا، ابتدا مقادیر پارامترهای لنارد-جونز یعنی (σ) و (ϵ) مربوط به اتم های تیتانیوم، سیلیسیم و کربن از منابع معتبر استخراج گردید که این مقادیر در جدول (۱) ارائه شده اند. معادلات (۱) و (۲) که در ادامه نشان داده شده، نشانگر نحوه محاسبه ضرایب پتانسیل لنارد-جونز در این پژوهش بوده است. پارامتر سیگما متعرف فاصله ای است که در آن پتانسیل بین دو ذره برابر با صفر میشود و بر حسب آنگستروم بوده. از سوی دیگر پارامتر ϵ نشان دهنده عمق چاه پتانسیل است که بر حسب الکتروولت بوده.

$$\sigma_{xy} = \frac{\sigma_x + \sigma_y}{2} \quad (1)$$

$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i * \epsilon_j} \quad (2)$$

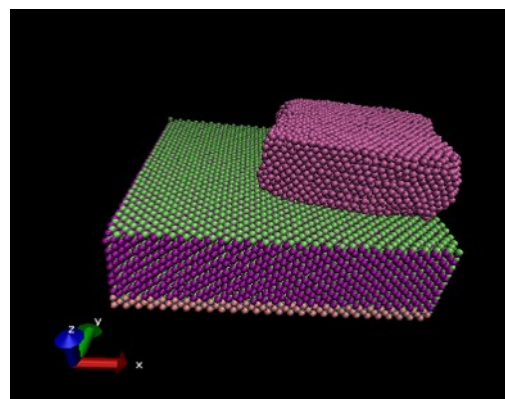
جدول ۱- مقادیر ضرایب پارامتر لنارد-جونز

پیوند مولکولی	$\epsilon(\text{ev})$	$\sigma(\text{\AA})$
Si-Si	۰/۰۱۷۳	۳/۸۳
C-C	۰/۰۰۲۸	۳/۳۶
Ti-Ti	۰/۰۲۴۲	۲/۲
Si-C	۰/۰۰۶۹	۳/۵۹۵
Si-Ti	۰/۰۲۰۵	۳/۰۱۵
C-Ti	۰/۰۰۱۳	۲/۷۸

پس از تعیین پارامترهای اولیه، مقادیر مؤثر سیگما و اپسیلون برای برهم کنش بین SiC و Ti با استفاده از روابط استاندارد ترکیب پارامترها محاسبه شد. در این روش، سیگما مؤثر به عنوان میانگین هندسی پارامترهای دو ماده و اپسیلون مؤثر به عنوان میانگین هندسی انرژی برهم کنش تعریف گردید. استفاده از این رویکرد امکان ایجاد یک مدل پایدار و قابل اعتماد برای شبیه سازی تماس بین سیلیسیم کاربرد و تیتانیوم

بازنمایی واقع بینانه تر برهم کنش فلز-سرامیک شده و دقت نتایج اصطکاکی و مکانیکی را بهبود می بخشد. برای مدل سازی بلوک تیتانیوم، از پتانسیل EAM^۱ استفاده شد. این پتانسیل با در نظر گرفتن اثرات چندجسمی و محیطی، توانایی مناسبی در توصیف رفتار فلزات انتقالی از جمله تیتانیوم دارد و در مطالعات متعددی برای بررسی خواص مکانیکی و تریبولوژیکی فلزات به کار رفته است. پتانسیل EAM مورد استفاده از منابع معتبر استخراج شده و پیش تر اعتبار آن در بازتولید خواص فیزیکی تیتانیوم نظیر انرژی پیوندی، مدول الاستیسیته و رفتار تغییر شکل تأیید شده است.

به منظور توصیف برهم کنش های درون بلوک سیلیسیم کاربرد، از پتانسیل Tersoff استفاده شد. این پتانسیل به طور ویژه برای مواد با پیوندهای کووالانسی طراحی شده و قابلیت توصیف هم زمان تغییرات زاویه ای و طول پیوند را داراست. استفاده از پتانسیل Tersoff امکان مدل سازی دقیق ساختار بلوری SiC، تشکیل نقص های بلوری، تغییر شکل زیرسطحی و رفتار شکست موضعی را در شرایط تماس فراهم می کند. پارامترهای مورد استفاده برای این پتانسیل نیز از پژوهش های پیشین انتخاب شده اند که تطابق مناسبی با نتایج تجربی و عددی گزارش شده دارند. شکل ۲ برای زمان اعمال نیروی لغزش بین دو بلوک در فرآیند شبیه سازی و نزدیک به پایان شبیه سازی است.



شکل ۳- تصویری از قرار گیری بلوک SiC بر روی بلوک Ti در حین لغزش در شبیه سازی

از آنجا که سیستم مورد بررسی شامل دو ماده ناهمجنس با ماهیت پیوندی متفاوت است، برای مدل سازی برهم کنش بین

^۴ Lennard-Jones

^۳ Embedded Atom Method

را فراهم می‌سازد و نتایج آن با روندهای گزارش شده در مطالعات مشابه همخوانی دارد.

۲-۳- شرایط شبیه‌سازی و اعمال بارگذاری

فرآیند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در چند مرحله متوالی انجام شد. در مرحله نخست، نیروی فشاری مشخصی به بلوک تیتانیوم اعمال گردید تا این بلوک به سمت بلوک سیلیسیم کارباید حرکت کرده و تماس بین دو سطح برقرار شود. اعمال این نیروی فشاری تا زمانی ادامه یافت که بلوک تیتانیوم به‌طور کامل با سطح SiC در تماس قرار گرفت و شرایط تماس پایدار ایجاد شد.

پس از برقراری تماس، بلوک تیتانیوم با سرعت مشخصی در راستای سطح سیلیسیم کارباید به حرکت درآمد. این حرکت تا رسیدن بلوک تیتانیوم به انتهای سطح SiC ادامه یافت. در این حالت، هم‌زمان اثر فشار نرمال و حرکت لغزشی باعث ایجاد پدیده خراش و اصطکاک بین دو سطح شد که امکان محاسبه نیروی اصطکاک و در نتیجه ضریب اصطکاک را فراهم می‌کند. شبیه‌سازی‌ها در سه مجموعه شرایط مختلف شامل تغییر فشار و تغییر دما انجام شدند. در بررسی اثر فشار، دمای سیستم بر روی ۳۰۰ کلوین و سرعت حرکت بلوک تیتانیوم برابر با ۵ متر بر ثانیه ثابت نگه داشته شد. سپس چهار شبیه‌سازی جداگانه تحت نیروهای فشاری ۵، ۱۰، ۲۰ و ۴۰ نانونیوتن انجام گرفت. این نیروها به‌منظور ایجاد تماس و اعمال بار نرمال بین بلوک تیتانیوم و سیلیسیم کارباید اعمال شدند.

در بررسی اثر دما، نیروی فشاری برابر با ۵ نانونیوتن و سرعت لغزش برابر با ۵ متر بر ثانیه ثابت در نظر گرفته شد. شبیه‌سازی‌ها در ۱۲ دمای مختلف شامل ۲۰۰، ۳۰۰، ۴۰۰، ۵۰۰، ۶۰۰، ۷۰۰، ۸۰۰ و ۹۰۰ درجه کلوین انجام شدند تا تأثیر دما بر رفتار اصطکاکی سیستم به‌طور جامع بررسی شود. تعداد گام‌های زمانی در این شبیه‌سازی‌های با توجه به هر شبیه‌سازی و میزان روند پیشروی لازم در هرکدام متغیر بوده ولی به‌طور میانگین میتوان آنرا ۲۵۰۰۰۰ در نظر گرفت. علاوه بر آن خود گام زمانی مد نظر به منظور جلوگیری از هم‌گسیختگی شبیه‌سازی بر روی ۰/۰۰۱ تنظیم گردیده است. هر تحلیل شامل مرحله تعادل اولیه، اعمال بار و مرحله لغزش بوده و بسته به شرایط دما و بارگذاری بین ۱۰ تا ۱۲ ساعت زمان محاسباتی نیاز داشته است. این زمان بر روی سامانه

محاسباتی مورد استفاده و با توجه به تعداد گام‌های زمانی و اندازه مدل متغیر بوده است.

در این شبیه‌سازی، ترموستات لانژون برای کنترل و حفظ دمای سیستم در مقادیر مورد نظر (۲۰۰ تا ۹۰۰ کلوین) به کار گرفته شده است. این ترموستات با افزودن نویز تصادفی و یک عامل میرایی به معادلات حرکت اتم‌ها، نوسانات حرارتی را در سیستم مدل‌سازی کرده و از انحراف دما به دور از مقدار تنظیم‌شده جلوگیری می‌کند. فرایند ایجاد تعادل در این شبیه‌سازی به صورت مرحله‌ای انجام شده است:

۱. ابتدا سیستم برای مدت زمان مشخصی (معمولاً چند پیکوثانیه) در دمای مورد نظر و بدون اعمال بار عمودی به حال خود رها می‌شود تا اتم‌ها به پیکربندی اولیه و پایدار خود برسند.

۲. پس از رسیدن به تعادل اولیه، نیروی نرمال مورد نظر به آرامی اعمال شده و سیستم مجدداً تحت نظارت ترموستات لانژون قرار می‌گیرد تا در دمای ثابت، به تعادل دینامیکی جدیدی دست یابد.

۳. در این مرحله تعادل، نیروهای محاسبه شده (مانند نیروی جداسازی و اصطکاک) مبنای تحلیل قرار می‌گیرند.

استفاده از ترموستات لانژون و این فرایند دو مرحله‌ای تعادل، تضمین می‌کند که دینامیک مولکولی در شرایط پایدار حرارتی و مکانیکی شبیه‌سازی شده و نتایج حاصل، منعکس‌کننده رفتار فیزیکی واقعی سیستم در مقیاس اتمی باشد.

۲-۴- محاسبه ضریب اصطکاک و معیارهای ارزیابی

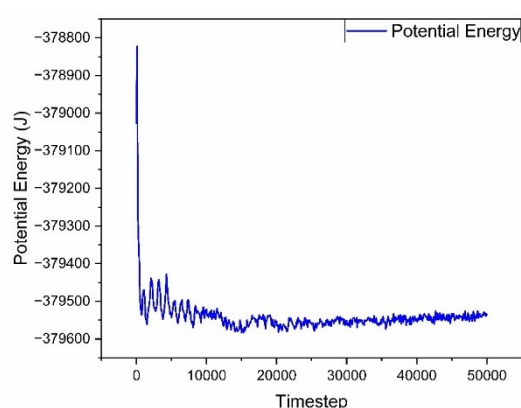
به‌منظور تحلیل رفتار اصطکاکی سیستم و استخراج ضریب اصطکاک، نیروهای وارد بر بلوک تیتانیوم در طول فرآیند لغزش مورد بررسی قرار گرفت. در شبیه‌سازی‌های انجام‌شده، نیروی نرمال اعمال‌شده به بلوک تیتانیوم کنترل شده و نیروی اصطکاکی به‌عنوان مؤلفه نیروی موازی با سطح تماس در راستای حرکت بلوک تعریف گردید. این نیرو در طول زمان شبیه‌سازی ثبت و میانگین‌گیری شد تا نوسانات لحظه‌ای ناشی از ارتعاشات اتمی کاهش یابد.

ضریب اصطکاک سیستم به‌صورت نسبت نیروی اصطکاک متوسط به نیروی نرمال اعمال‌شده محاسبه گردید. برای افزایش دقت نتایج، بازه‌ای از زمان شبیه‌سازی که سیستم به

مقایسه قرار گرفت تا اثر هر پارامتر به طور مستقل ارزیابی شود. معیار پایداری ضریب اصطکاک در این پژوهش، رسیدن مقدار آن به ناحیه‌ای با نوسان محدود در طول زمان لغزش بوده است که نشان‌دهنده برقراری تماس اصطکاکی پایدار بین دو ماده می‌باشد.

۳- نتایج و بحث

۳-۱- نتایج



شکل ۴- نمودار بررسی انرژی پتانسیل سیستم در فرآیند شبیه‌سازی

بر اساس نمودار ارائه‌شده در شکل ۳ می‌توان گفت که انرژی پتانسیل سیستم در مراحل ابتدایی شبیه‌سازی با یک افت تند و نوسانات نسبتاً شدید همراه است که بیانگر فرآیند ریلکس شدن اولیه سیستم و خروج آن از شرایط اولیه غیربهبه است. وجود نوسانات کوچک باقی‌مانده نیز ماهیت آماری حرکت حرارتی اتم‌ها در چارچوب دینامیک مولکولی را تأیید می‌کند.

حالت پایدار اصطکاکی رسیده بود، به‌عنوان مبنای محاسبات در نظر گرفته شد. در این بازه، تغییرات نیروی اصطکاک حول یک مقدار میانگین نوسان داشته و اثرات گذرای اولیه حذف شده‌اند.

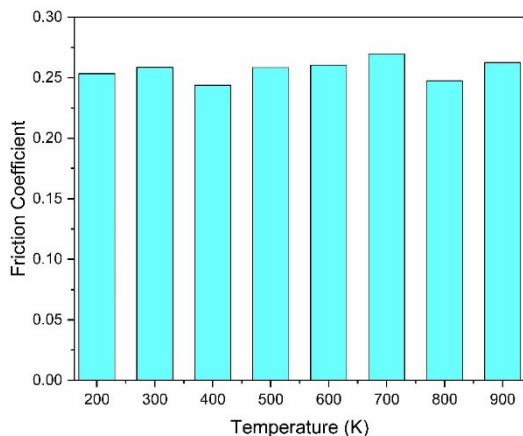
علاوه بر محاسبه ضریب اصطکاک، رفتار تغییرشکل زیرسطحی، الگوی خراش ایجادشده بر سطح سیلیسیم کارباید و توزیع تنش‌های اتمی در ناحیه تماس نیز مورد بررسی قرار گرفت. تحلیل این پارامترها امکان برقراری ارتباط بین تغییرات ضریب اصطکاک و مکانیزم‌های اتمی حاکم بر فرآیند لغزش را فراهم می‌کند. در نهایت، مقایسه نتایج حاصل از شرایط مختلف فشار، دما و سرعت، مبنایی برای ارزیابی جامع رفتار تریبولوژیکی سیستم SiC-Ti فراهم می‌سازد.

در این پژوهش، ضریب اصطکاک بین بلوک تیتانیوم و سطح سیلیسیم کارباید با استفاده از نیروهای برهم‌کنشی استخراج‌شده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی محاسبه شده است. پس از اعمال نیروی نرمال مشخص به بلوک تیتانیوم و رسیدن سیستم به حالت پایدار تماس، حرکت لغزشی بلوک تیتانیوم با سرعت کنترل‌شده در راستای افقی آغاز گردید. در طول فرآیند لغزش، مؤلفه نیروی برهم‌کنشی وارد بر بلوک تیتانیوم در راستای حرکت به‌عنوان نیروی اصطکاکی و مؤلفه عمود بر سطح تماس به‌عنوان نیروی نرمال ثبت شد. برای حذف اثر نوسانات اولیه و رسیدن به رفتار پایدار، تنها داده‌های مربوط به بازه زمانی پایدار شبیه‌سازی مورد تحلیل قرار گرفتند. معادله شماره (۳) نمایانگر نحوه محاسبه ضریب اصطکاک در این پژوهش بوده است.

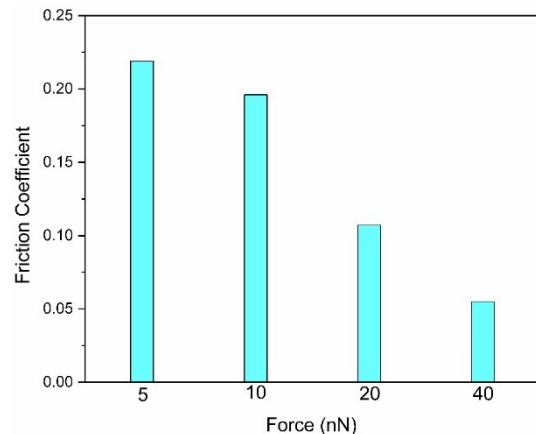
$$\mu = \frac{f_x}{f_z} \quad (3)$$

که در آن μ ضریب اصطکاک، f_x نیروی لغزنده در جهت محور x بر روی سیلیسیم کارباید و تیتانیوم و f_z نیروی فشاری وارد از طرف بلوک تیتانیومی بر روی بلوک سیلیسیم کارباید می‌باشد.

به‌منظور افزایش دقت محاسبات، نیروی اصطکاکی لحظه‌ای در طول مسیر لغزش میانگین‌گیری زمانی شده و مقدار میانگین آن به‌عنوان نیروی اصطکاک مؤثر در نظر گرفته شد. ضریب اصطکاک به‌صورت نسبت نیروی اصطکاک میانگین به نیروی نرمال اعمال‌شده تعریف گردید. علاوه بر این، تغییرات ضریب اصطکاک در شرایط مختلف فشار، دما و سرعت لغزش مورد



شکل ۶- نمودار میله‌ای ضریب اصطکاک در دماهای مختلف در فرآیند شبیه سازی



شکل ۵- نمودار میله‌ای ضریب اصطکاک در نیروهای مختلف در فرآیند شبیه سازی

در شکل ۵ نمودار ضریب اصطکاک برای دماهای مختلف شبیه سازی ترسیم شده است. این نمودار تغییرات ضریب اصطکاک بر حسب دما را در بازه دمایی ۲۰۰ تا ۹۰۰ کلوین نشان می‌دهد و بیانگر آن است که ضریب اصطکاک در این محدوده دمایی رفتار نسبتاً پایدار و غیرخطی از خود بروز می‌دهد. در دماهای پایین‌تر، مقدار ضریب اصطکاک اندکی بالاتر است که می‌تواند به محدود بودن تحرک اتم‌ها و درگیری قوی‌تر برهم‌کنش‌های بین‌اتمی در فصل مشترک تماس نسبت داده شود. با افزایش دما تا محدوده‌های میانی، نوسانات جزئی در ضریب اصطکاک مشاهده می‌شود که ناشی از افزایش انرژی جنبشی اتم‌ها، بازآرایی ساختاری سطح و تسهیل فرآیند لغزش در مقیاس اتمی است. در دماهای بالاتر نیز اگرچه انتظار کاهش پیوسته ضریب اصطکاک می‌رود، اما مقادیر تقریباً ثابت یا حتی افزایش‌های جزئی نشان می‌دهد که حاکی از رقابت میان نرم‌شدگی حرارتی سطح و افزایش ناپایداری‌های دینامیکی و برهم‌کنش‌های ارتعاشی است. این نتایج نشان می‌دهد که اثر دما بر اصطکاک در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یک پدیده پیچیده و وابسته به مکانیزم‌های اتمی، شرایط تماس و خواص ماده بوده و نمی‌توان آن را با یک روند خطی ساده توصیف کرد.

شکل ۴ بررسی ضریب اصطکاک در نیروهای مختلف مورد بررسی در طول شبیه سازی را نشان می‌دهد. این نمودار وابستگی ضریب اصطکاک به نیروی نرمال اعمال‌شده در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی را نشان می‌دهد؛ به‌گونه‌ای که با افزایش نیرو از مقادیر کم تا نیروهای بالاتر، کاهش معناداری در ضریب اصطکاک مشاهده می‌شود. در نیروهای پایین‌تر، ضریب اصطکاک مقدار نسبتاً بالایی دارد که می‌تواند ناشی از درگیری مؤثرتر ناهمواری‌های سطحی و سهم غالب برهم‌کنش‌های چسبنده اتمی در ناحیه تماس باشد. با افزایش نیروی اعمالی، ضریب اصطکاک به تدریج کاهش می‌یابد که این رفتار معمولاً به هموارتر شدن مؤثر تماس، بازآرایی اتم‌ها در فصل مشترک و افزایش سهم لغزش پایدار نسبت داده می‌شود. این روند کاهش بیانگر رفتار غیرخطی اصطکاک در مقیاس نانو است و نشان می‌دهد که رابطه اصطکاک-نیرو الزاماً از قانون کلاسیک آمونتون پیروی نمی‌کند، بلکه به مکانیزم‌های اتمی، ساختار سطح و شرایط بارگذاری در شبیه‌سازی وابسته است.

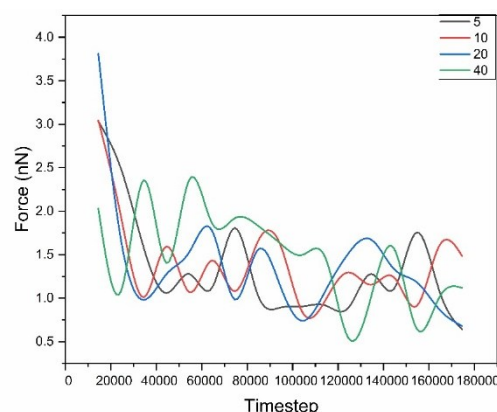
در نتیجه، تحلیل نمودار نشان می‌دهد که پاسخ مکانیکی اتصال بین تیتانیوم و سیلیسیم کربناید در برابر جداسازی به میزان بار عمودی وابسته است. تحت بارهای کم، سیستم رفتاری ساده و پایدار با نیروی جداسازی ثابت از خود نشان می‌دهد، در حالی که با افزایش بار، رفتار سیستم پویاتر شده و نیروی جداسازی متغیر و نوسانی می‌شود. این موضوع اهمیت در نظر گرفتن سطح تنش عمودی را در طراحی و پیش‌بینی رفتار سطوح در تماس تحت نیروهای جدایشی آشکار می‌سازد.

۳-۲- مقایسه سنجی و صحنه سنجی

به‌منظور ارزیابی صحت و قابلیت اعتماد مدل شبیه‌سازی حاضر، نتایج حاصل با داده‌های تجربی گزارش‌شده در مطالعه ژائو و همکاران [۲۳] مورد مقایسه قرار گرفت. با توجه به نبود داده‌های تجربی یا شبیه‌سازی مستقیم برای سامانه تماس $Ti-4H-SiC$ در مقیاس اتمی، از سامانه مرجع $SiC-SiC$ در شرایط تماس خشک به‌عنوان مبنای اعتبارسنجی غیرمستقیم استفاده شد.

در مطالعه مرجع، رفتار اصطکاکی جفت تماس $SiC-SiC$ تحت شرایط تماس خشک بررسی شده و ضریب اصطکاک برای نمونه‌های SiC در محدوده تقریبی ۰٫۴۸ تا ۰٫۵۵ گزارش گردیده است که مقدار میانگین آن حدود ۰٫۵۲ می‌باشد. در پژوهش حاضر، به‌منظور اعتبارسنجی روش مدل‌سازی و ارزیابی دقت پتانسیل‌های بین‌اتمی به‌کاررفته، سامانه $SiC-SiC$ تحت شرایط مشابه شبیه‌سازی گردید و ضریب اصطکاک برابر با ۰٫۴۸۷ به‌دست آمد.

مقایسه نتایج نشان می‌دهد که اختلاف نسبی بین مقدار حاصل از شبیه‌سازی حاضر و مقدار میانگین گزارش‌شده در مرجع حدود ۶ درصد است که با توجه به تفاوت در هندسه مدل، شرایط مرزی، ابعاد سامانه و ماهیت اتمی مدل‌سازی، قابل قبول ارزیابی می‌شود. این انطباق مناسب، نشان‌دهنده اعتبار روش شبیه‌سازی، صحت انتخاب پتانسیل‌های بین‌اتمی و قابلیت اعتماد نتایج ارائه‌شده برای تحلیل رفتار اصطکاکی فصل مشترک $Ti-4H-SiC$ می‌باشد.



شکل ۷- نمودار نیروی افقی لغزنده تیتانیوم و سیلیسیم کربناید در نیروی ۵، ۱۰، ۲۰ و ۴۰ نانونیوتن

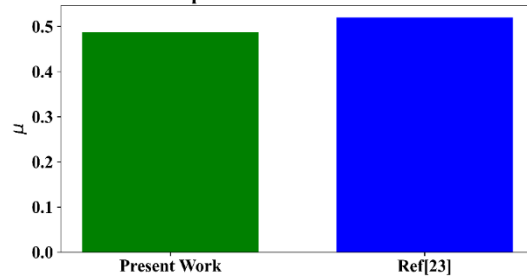
این نمودار تغییرات نیروی مورد نیاز برای کشیده‌شدن صفحات تیتانیوم و سیلیسیم کربناید را در طول زمان شبیه‌سازی و تحت بارگذاری‌های عمودی متفاوت ۵، ۱۰، ۲۰ و ۴۰ واحد نمایش می‌دهد. در ابتدای فرآیند (تایم‌استپ صفر)، نیروی جداسازی برای بارگذاری‌های بالاتر به‌طور محسوسی بیشتر است (۳٫۸ برای بار ۵، ۳٫۰ برای بار ۱۰، ۲٫۰ برای بار ۲۰ و ۱٫۰ برای بار ۴۰). این تفاوت اولیه می‌تواند نشان‌دهنده تأثیر مستقیم بار عمودی بر استحکام پیوند اولیه یا درگیری سطحی لحظه‌ای بین دو ماده باشد.

با پیشرفت شبیه‌سازی، یک رفتار متمایز مشاهده می‌شود: برای بارگذاری‌های ۵ و ۱۰ واحد، نیروی جداسازی به سرعت به یک مقدار ثابت و پایدار تقریباً برابر با ۱٫۰ واحد می‌رسد و تا انتهای شبیه‌سازی بدون تغییر باقی می‌ماند. این نشان می‌دهد که تحت بارهای نسبتاً کم، سیستم به سرعت به یک حالت تعادل پویا با نیروی جداسازی ثابت می‌رسد. در مقابل، برای بارگذاری‌های سنگین‌تر ۲۰ و ۴۰ واحد، نیروی جداسازی پس از کاهش اولیه، رفتار پایدار ثابتی نشان نداده و در محدوده‌ای مشخص (بین حدود ۱٫۰ تا ۲٫۲۵ واحد) نوساناتی را تا پایان زمان شبیه‌سازی حفظ می‌کند. این نوسانات پایدار ممکن است نشان‌دهنده مکانیزم‌های پیچیده‌تر جدایش، مانند تغییر شکل پلاستیک موضعی، ایجاد و انتشار ترک‌های ریزسطحی یا گیرکردن و رهاشدن متناوب ناهمواری‌های سطح در هنگام جداسازی تحت بارهای بالا باشد.

مراجع

- [1] Borysiuk, V., I.A. Lyashenko, and V.L. Popov, (2024) Molecular dynamics study of friction between Ag nanoparticle and two-dimensional titanium carbide Ti2C (MXene). Crystals. 14(3): p. 272.
- [2] Demizu, K., H. Ishigaki, and R. Wadabayashi, (1989) Dry friction of silicon carbide and silicon nitride against metals: the effect of humidity and oxide films.
- [3] Deng, Y., et al., (2022) The effects of the temperature and termination (-O) on the friction and adhesion properties of MXenes using molecular dynamics simulation. Nanomaterials. 12(5): p. 798.
- [4] Ewen, J.P., et al., (2016) Nonequilibrium molecular dynamics investigation of the reduction in friction and wear by carbon nanoparticles between iron surfaces. Tribology letters. 63(3): p. 38.
- [5] Hegde, A., et (2024) „Comprehensive investigation of hardness, wear and frictional force in powder metallurgy engineered Ti-6Al-4V-SiCp metal matrix composites. J. Composites Science. 8(2): p. 39.
- [6] Kato, M., (2005) Friction and Wear Properties of SiC-Ti and SiC-Al Films Deposited by Simultaneous RF Magnetron Sputtering. J. Japan Society of Mech. Engineering, A., 71: p. 312-319.
- [7] Liang, L., et al., (2023) Molecular dynamics simulation of single-crystal 4H-SiC nano scratching with different scratching directions of the tool. Crystals. 13(7): p. 1044.
- [8] Miyoshi, K. and D.H. Buckley, (1979) Friction and fracture of single-crystal silicon carbide in contact with itself and titanium. ASLE TRANSACTIONS, 22(2): p. 146-153.
- [9] Murzin, S.P., et al., (2021) Ultraviolet nanosecond laser treatment to reduce the friction coefficient of silicon carbide ceramics. Applied Sciences, 11(24): p. 11906.
- [10] Ning, X., et al., (2024) Molecular dynamics analysis of subsurface brittleness mechanism of nanocrystalline 3C-SiC rough friction surface. Scientific Reports, 14(1): p. 18183.
- [11] Piroozan, N., S. Naserifar, and M. Sahimi, (2019) Sliding friction between two silicon-carbide surfaces. J. Appl. Phys., 125(12).
- [12] Serles, P., et al., (2022) Friction of Ti3C2T x MXenes. Nano letters, 22(8): p. 3356-3363.

Comparison of Friction Coefficient



شکل ۸- مقایسه ضریب اصطکاک سامانه SiC-SiC در شرایط تماس خشک بین مطالعه حاضر و نتایج گزارش شده توسط ژائو و همکاران [۲۳] به منظور اعتبارسنجی مدل شبیه سازی.

۳-۳- جمع بندی

تایید شبیه سازی دینامیک مولکولی در این پژوهش نشان داد که رفتار اصطکاکی فصل مشترک بین تیتانیوم و 4H-SiC در مقیاس اتمی به شدت تحت تأثیر بار نرمال و دما قرار دارد. بررسی اثر بار نرمال نشان داد که با افزایش نیروی نرمال، ضریب اصطکاک کاهش می یابد؛ این رفتار ناشی از کاهش سهم نسبی نیروهای چسبندگی بین سطحی و گذار تدریجی از رژیم اصطکاک کنترل شده توسط چسبندگی به رژیم کنترل شده توسط بار می باشد. این نتایج نشان می دهد که رفتار اصطکاکی در مقیاس نانو از قوانین کلاسیک اصطکاک، از جمله قانون آمونتون، تبعیت کامل نمی کند. همچنین بررسی اثر دما نشان داد که در بازه دمایی مورد مطالعه، تغییرات دما تأثیر قابل توجهی بر مقدار ضریب اصطکاک نداشته و رفتار اصطکاکی سیستم تقریباً پایدار باقی مانده است. این موضوع نشان می دهد که در شرایط حاضر، مکانیزم غالب اصطکاک بیشتر تحت کنترل برهم کنش های مکانیکی و برشی در فصل مشترک بوده و انرژی حرارتی اعمال شده برای ایجاد تغییر اساسی در سازوکار تماس و لغزش کافی نبوده است. در نتیجه، پایداری نسبی ساختار فصل مشترک در بازه دمایی مورد بررسی موجب حفظ رفتار اصطکاکی تقریباً ثابت شده است. در مجموع، نتایج این پژوهش درک عمیق تری از مکانیزم های اتمی حاکم بر رفتار اصطکاکی در فصل مشترک فلز-سرامیک ارائه می دهد و می تواند به عنوان مبنایی برای طراحی و بهینه سازی سامانه های تریبولوژیکی در مقیاس نانو و کاربردهای مهندسی مرتبط مورد استفاده قرار گیرد.

- [18] Zhang, D., et al., (2017) Computational study of low interlayer friction in Ti_n+1C_n ($n=1, 2$, and 3) MXene. *ACS applied materials & interfaces*, 9(39): p. 34467-34479.
- [19] Zhang, Y., K. Koranteng, and Y.-B. Yi, (2023) Characterization of graphene reinforced 3C-SiC composite as a metal-free friction material using molecular dynamics simulation. *Computational Materials Science*, 218: p. 11.1973.
- [20] Zhang, Y. and Y.B. Yi, (2024) A molecular dynamics study of 3C-SiC/epoxy nanocomposite as a metal-free friction material. *J. Appl. Polymer Science*, 141(8): p. e54999.
- [21] Zheng, M., et al., (2022) Molecular dynamics study on the nanoscale repeated friction and wear mechanisms of TiC/Ni composites. *Applied Physics A*, 2022. 128(4): p. 294.
- [22] Zheng, M., et al., (2022) Study on nanoscale friction behavior of TiC/Ni composites by molecular dynamics simulations. *Coatings*, 12(8): p. 1168.
- [23] Zhao, X., Liu, Y., Wen, Q., & Wang, Y. (2014). Frictional performance of silicon carbide under different lubrication conditions. *Friction*, 2(1), 58-63.
- [13] Tian, Z., X. Chen, and X. Xu, (2020) Molecular dynamics simulation of the material removal in the scratching of 4H-SiC and 6H-SiC substrates. *Int. J. Extreme Manufacturing.*, 2(4): p. 045104.
- [14] Wang, H., et al., (2022) Mechanical load-induced atomic-scale deformation evolution and mechanism of SiC polytypes using molecular dynamics simulation. *Nanomaterials*, 12(14): p. 2489.
- [15] Yin, Z., P. Zhu, and B. Li, (2021) Study of nanoscale wear of SiC/Al nanocomposites using molecular dynamics simulations. *Tribology Letters*, 69(2): p. 38.
- [16] Yu, D., et al., (2022) Molecular dynamics analysis of 6H-SiC subsurface damage by nanofriction. *ACS omega*, 7(21): p. 18168-18178.
- [17] Yu, D., et al., (2023) Molecular dynamics analysis of friction damage on nano-twin 6 H-SiC surface. *Tribology International*, 180: p. 108223.