مکانیک سازه‌ها و شاره‌ها/ سال ۱۴۰۰/ دوره ۱۱/ شماره ۱/ صفحه ۲۱۳-۲۲۶

نشریه علمی مکانیک سازه‌ها و شاره‌ها

دانشگاه صنعتی شاهرود

DOR:

# بررسی اثر صفحات کریستالی و ابزار غیرصلب بر سختی نیکل در فرایند نانودندانه‌گذاری با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

**نفیسه مهدیار[۱] و سید وحید حسینی[۲،*]**

[۱] دانشجوی دکتری، دانشکده مهندسی مکانیک و مکاترونیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران

[۲] استادیار، دانشکده مهندسی مکانیک و مکاترونیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران

**مقاله مستقل،** تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۰۲/۱۹؛ تاریخ بازنگری: ۱۴۰۰/۰۲/۱۴؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۳/۰۳

## چکیده

از آنجا که نیکل خواص ضد سایش به همراه استحکام و شکل‌پذیری قابل قبولی دارد، در سالیان اخیر کاربرد وسیعی در زمینه پوشش‌ها داشته است. در این مقاله فرایند نانو دندانه‌گذاری نیکل با استفاده از روش دینامیک مولکولی شبیه‌سازی شد. قطعه‌کار بصورت تک کریستال و ابزار بصورت نیمه کروی در نظر گرفته شد. صحت نتایج سختی بر حسب جابجایی ابزار با نتایج موجود در دیگر پژوهش‌ها تعیین اعتبار شد. در مقیاس اتمی ساختارکریستالی، دارای خواص جهتی است. زمانی که نانو دندانه-گذاری یک لایه اتمی به اتمام می‌رسد و نوبت به لایه‌ی بعدی می‌شود، مکانیزم تغییرشکل، نیروی ابزار و سختی قطعه می‌تواند تغییر کند که در این پژوهش مورد مطالعه قرار گرفت. بر اساس نتایج، بیشترین سختی مربوط به صفحه کریستالی (۱۱۱) در عمق ۱٫۵ نانومتر شد. فرآیند شبیه‌سازی در دو حالت ابزار صلب و ابزار غیرصلب انجام گرفت تا اثر تغییرشکل ابزار بر فرآیند سختی مورد مطالعه قرار گیرد. بر اساس نتایج، بدلیل عدم تغییرشکل ابزار صلب نیروهای وارد بر ابزار به میزان ۶٫۴٪ در تک کریستال نیکل افزایش داشت. از طرف دیگر بدلیل کاهش سطح تماس و افزایش نیرو، سختی تا ۳٫۶٪ در ابزار صلب نسبت به ابزار غیرصلب افزایش یافت.

**کلمات کلیدی:** نانو دندانه‌گذاری؛ شبیه‌سازی دینامیک مولکولی؛ تک‌کریستال؛ جهت کریستالی؛ ابزار غیرصلب.

# Investigation of the Effect of Crystallographic Orientation and Non-Rigid Tool on Nickel Hardness in Nanoindentation Process using Molecular Dynamics Simulation

**N. Mahdiyar[1], S.V. Hosseini[2,*]**

[1] PhD. Student, Mech. Eng., Shahrood Univ. of Tech., Shahrood, Iran.

[2] Assis. Prof., Mech. Eng., Shahrood Univ. of Tech., Shahrood, Iran.

## Abstract

Nickel has great potential for engineering applications in the field of coating due to have good anti-wear properties with acceptable strength and ductility. In this study, molecular dynamics simulations of nano-indentation were performed using a single crystal of Nickel with the hemispherical shape of diamond tip. Result of derived hardness in various indenter depths was validated with another research paper. At the atomic scale, the crystal structure has directional properties. When nanoindentation of one atomic layer is completed and it is the turn of the next layer, the mechanism of deformation, tip force and hardness can be changed. So in this paper, the effect of crystallography orientation was studied. According to the results, nickel at the crystalline surface (111) had the maximum hardness at depth of 1.5 nm. simulations were conducted with rigid and non-rigid indenters to study the effect of tool deformation on derived hardness. The results show that due to the lack of change in the rigid shape of the tool, the tip force increased by 6.4% in nickel single crystal. Furthermore, due to the decrease of contact level and increase tip force, the hardness increased up to 3.6% in rigid tool compared with non-rigid indenter.

**Keywords:** Nano-indentation; Molecular Dynamics Simulation; Single Crystal, Crystallographic Orientation, Non-Rigid Probe.

* نویسنده مسئول؛ تلفن: تلفن: ۰۲۳۳۲۳۰۰۲۴۰- داخلی ۳۳۶۴

آدرس پست الکترونیک: v_hosseini@shahroodut.ac.ir

## ۱- مقدمه

خواص مکانیکی مواد شامل، سختی، استحکام، مدول الاستیسیته، چقرمگی شکست، رفتار خستگی و خزشی خواصی هستند که تعیین کننده رفتار مواد در برابر نیروهای وارد شده هستند. این خواص پیش از آنکه ماده‌ای مورد استفاده قرار گیرد، بایستی به طور کامل بررسی شوند. پس از بررسی خواص مکانیکی قطعه از طریق انجام آزمایش‌های مربوطه و بدست آمدن نتایج، مناسب بودن آن برای کاربرد مورد نظر مشخص می‌شود [۱]. آزمایش نانودندانه‌گذاری که در اواسط دهه ۱۹۷۰ توسعه یافته است، یکی از کارآمدترین روش‌ها برای اندازه‌گیری پارامترهای مکانیکی مواد در ابعاد نانو است [۲]. سختی و مدول الاستیک از جمله داده‌هایی است که با این فرآیند محاسبه می‌شوند. سختی را می‌توان مقاومت ماده در برابر تغییر شکل پلاستیک موضعی در اثر نفوذ یک ابزار فرورونده با اعمال نیروی مشخص تعریف کرد [۳].

در طی این آزمایش، ابزار با اعمال نیروی مشخص وارد سطح بستر می‌شود و تغییر شکل الاستیک در بستر آغاز می شود. نیرو و عمق فرورفتگی ابزار به درون بستر به تدریج افزایش می‌یابند تا جایی که قطعه دچار تغییر شکل پلاستیک شود. در طول انجام آزمایش نیروها و جابجایی ابزار در هر مرحله از بارگذاری اندازه‌گیری شده و ثبت می‌شود و با استفاده از منحنی نیرو-جابجایی حاصل می‌توان برخی از خواص مورد نظر را بدست آورد و هم‌چنین بعد از باربرداری با اندازه‌گیری مساحت سطح اثر تماس و داشتن بیشینه نیروی نانودندانه‌گذار، سختی قطعه محاسبه می‌شود [۴، ۵ و ۶].

در حوزه آزمایش نانودندانه‌گذاری و خواص مکانیکی حاصل از آن و نیز پارامترهای تاثیرگذار در این فرآیند، مطالعات گسترده‌ای صورت گرفته است. روش دینامیک مولکولی که در آن برای محاسبه مسیرهای اتمی از قوانین مکانیک کلاسیک استفاده می‌شود، ابزاری ارزشمند برای فهم پدیده‌هایی در ابعاد نانو است. در این روش از فرض‌های ساده شونده کمتری استفاده می‌شود، بنابراین نتایج دقیق‌تری نسبت به روش‌های مشابه خود دارد [۷]. در این روش فرض می‌شود، در صورتی که تغییری از خارج مجموعه اتمی در آن وارد نشود، مجموع انرژی جنبشی و پتانسیل همواره مقداری ثابت است. انرژی جنبشی تابع اندازه حرکت اتم‌ها و انرژی پتانسیل تابع موقعیت اتم‌ها است [۸]. فنگ و همکارانش، تاثیرات دما در فرآیند نانودندانه‌گذاری را به شیوه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، برای قطعه کار مس[1] و ابزار صلب الماس، با سرعت بارگذاری-باربرداری ثابت، مورد بررسی قرار داده‌اند و به این نتایج رسیدند که با افزایش دما، مقدار جابجایی پلاستیک روی منحنی نیرو-جابجایی افزایش یافته و نیروی دندانه‌گذاری در عمق مشخص کاهش می‌یابد و باعث تغییر فاز قطعه‌کار از ساختار کریستالی اصلی به ساختار بی‌نظم می‌شود؛ هم‌چنین مشخص می‌شود که افزایش دما، سبب کاهش مدول یانگ و سختی قطعه می‌شود [۹]. پینگ و همکاران، تاثیر تغییرات نرخ بارگذاری فرآیند نانودندانه‌گذاری را در فیلم نازک آلومینیوم روی بستر سیلیکون شبیه‌سازی کردند. در طی این شبیه‌سازی، وقتی سرعت دندانه‌گذاری پایین بود ( ۵۰m/s)، تغییر شکل زیادی روی فیلم آلومینیوم دیده نمی‌شد. در حالی که در سرعت بالا (۲۵۰ m/s)، نیرو از طریق فیلم به بستر منتقل شده و باعث تغییر شکل و جابجایی بزرگ‌تری می‌شد [۱۰]. چونگ و همکارش تغییر فاز تک کریستال سیلیکون را تحت نانودندانه‌گذاری بررسی کردند و دریافتند که ساختار مکعب الماسی سیلیکون در اثر بار دندانه‌گذار و از طریق صاف‌شدن ساختار تتراهدران، به ساختار تتراگونال تبدیل می‌شد. بعد از باربرداری، بستر با از دست دادن بخشی از اتم‌ها، از ساختار تتراگونال به یک ساختار بی‌شکل تبدیل می‌شد. با نوبت دوم بارگذاری ساختار بی‌شکل مجددا به ساختار تتراگونال تبدیل می‌شد [۱۱]. چنگ و همکاران، شبیه‌سازی‌های اتمی از فیلم‌های نرم و سخت ( طلا[2] و الماس)، تحت نانودندانه‌گذاری را در بار، دما و نرخ بارگذاری متفاوت انجام دادند. نتایج آن‌ها نشان داد که در هر دو جنس فیلم‌ها، با افزایش بار و نرخ بارگذاری، مدول یانگ و سختی افزایش می‌یافت، اما هنگامی که دما افزایش می‌یافت، قطعه دچار رفتار نرمی ناشی از افزایش سرعت نوسانات اتمی و سبب کاهش مدول یانگ می‌شد [۱۲]. یعقوبی و همکارش در شبیه‌سازی دندانه‌گذاری فیلم تک کریستال نیکل روی بستر سیلیکونی با شرایط مرزی و

[1] Copper (Cu)
[2] Gold (Au)

ضخامت‌های متفاوت، به این نتایج رسیدند که تاثیر شرایط مرزی روی بستر الاستیک، تابعی از ضخامت فیلم و شعاع ابزار کروی است، به این طریق که با افزایش ضخامت و کاهش شعاع ابزار، اثر شرایط‌مرزی کمتر دیده می‌شد [۱۳]. والش و همکاران شبیه‌سازی دندانه‌گذاری فیلم سیلیکون نیترید را یک‌بار با ساختار کریستالی و یک‌بار با ساختار بی‌شکل انجام دادند. مشاهده شد که در عمق ثابت، نیروی اعمال شده برای ساختار کریستالی بیشتر از ساختار بی‌شکل بوده است [۱۴]. چوکیک و زین‌تارسکی ارتباط بین ساختار فیلم‌های تشکیل شده روی بستر و تغییر شکل پلاستیک ایجاد شده در آن‌ها را مورد بررسی قرار دادند. برای این کار یک فیلم پوششی نیکل روی بستر مس، با ساختار BCC[1] و یک فیلم نیکل روی طلا با ساختار HCP[2] ایجاد شد. مشاهده شد که افزایش سختی در فیلم‌های نیکل با کاهش ضخامت لایه حرارتی در ارتباط است؛ هم‌چنین همبستگی بین ساختار فیلم‌ها و توزیع تغییر شکل پلاستیک روی آن‌ها یافت شد. به این نحو که تغییر شکل در Ni/Cu از مرکز دندانه‌گذاری گسترش پیدا می‌کرد، ولی در Ni/Au علاوه بر مرکز، در مرزدانه‌ها هم گسترش تغییرشکل وجود داشت [۱۵]. لو و همکارانش فرآیند نانودندانه‌گذاری برای ابزارهای نیم‌کره و هرمی شکل را شبیه‌سازی کردند. آنها دریافتند که نیروی ابزار برای ابزار نیم‌کره در مقایسه با ابزار هرمی افزایش می‌یابد [۱۶]. فنگ و همکارانش فرآیند نانودندانه‌گذاری را روی ورق گرافیتی و هم‌چنین قطعه الماس و با استفاده از ابزار مخروطی‌شکل کربنی[3]، در دما و سرعت‌های متفاوت انجام دادند. نتایج آنها نشان داد که با افزایش زاویه مخروطی ابزار و سرعت دندانه‌گذاری، بیشینه نیروی تماس، افزایش می‌یابد و در عین حال با افزایش دما این نیرو کاهش می‌یابد؛ هم‌چنین آنها نشان دادند، بیشینه نیروی تماس در عمق دندانه‌گذاری، سرعت و دمای یکسان، برای قطعه الماس، بزرگ‌تر از ورق گرافیتی است [۱۷]. شوی‌اکسو و همکارانش در شبیه‌سازی فرایند نانودندانه‌گذاری و نانو خراش با استفاده از ابزار الماسی صلب و قطعه‌کار با آلیاژ CTi-Al[4] مدول یانگ را ۱۵۷ گیگاپاسکال گزارش کردند که با نتایج سایر گروه‌ها هم‌خوانی داشت؛ هم‌چنین آنها نشان دادند که سرعت ابزار در محدوده ۱۵-۱ m/s، تاثیر کمی بر مدول یانگ دارد و در طول لغزش رابطه خطی بین نیروی اصطکاک و بار نرمال وجود دارد [۱۸]. گول و همکارانش به منظور تحلیل مکانیزم تغییرشکل در پلی‌سیلیکون و سیلیکون تک‌کریستال شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانودندانه‌گذاری را با ابزارهای برکویچ[5] هرمی و کروی برای هر دو ساختار انجام دادند. نتایج ایشان نشان داد، در تمام موارد، در فشار بالا انتقال فاز صورت می‌گیرد. با این حال در میزان و شیوه انتقال فاز بین سیلیکون تک‌کریستال و پلی‌سیلیکون تفاوت وجود دارد. در پلی‌سیلیکون انتقال فاز در مرزدانه‌ها، بیشتر از ناحیه فرورفتگی ابزار است [۱۹]. نایر و همکارانش نانودندانه‌گذاری روی فلیمی به ضخامت ۲۰ nm را برای بررسی اثرات سرعت و شعاع ابزار، پتانسیل‌های بین اتمی و شراط مرزی بستر، شبیه‌سازی کردند و نتیجه گرفتند که سرعت بالا و شعاع‌های مختلف ابزار تاثیر قابل توجهی بر سختی ندارند. در حالی که استفاده از پتانسیل بین اتمی و شرایط مرزی متفاوت، به ترتیب تفاوت قابل توجهی در سختی و عمق دندانه‌گذاری ایجاد می‌کند [۲۰]. ردی و همکارانش با شبیه‌سازی فیلم AlNiCo[6] روی بستر آلومینیوم، خواص مکانیکی فیلم را به ازای سرعت‌های متفاوت ابزار بدست آوردند. سرعت ابزار به‌شدت روی سختی فیلم تاثیرگذار بود. افزایش سرعت ابزار باعث افزایش سختی بستر می‌شد، علاوه بر این مقدار توده-های تشکیل شده هنگام نانودندانه‌گذاری روی بستر، با افزایش سرعت، کاهش می‌یافت [۲۱]. چائو اکسو و همکارانش با شبیه‌سازی نانودندانه‌گذاری الماس به این نتیجه رسیدند که تغییر شکل پلاستیک ایجاد شده در ماده سخت الماس ناشی از انتشار نابجایی‌ها و تغییر فاز الماس از ساختار مکعب الماس به هگزاگونال است [۲۲].

در فرایند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانودندانه‌گذاری از شرط‌مرزی دوره‌ای[7] استفاده می‌شود. این شرط‌مرزی به عنوان یک مانع موثر در گسترش نابجایی است که در روند فرآیند منجر به سخت‌شدن فیلم می‌شود [۲۳]. ایمران و

[1] Body-Centered Cubic
[2] Hexagonal Close-Packed
[3] Carbon (C)
[4] Carbon Titanium_Aluminium
[5] Berkovich
[6] Aluminum Nickel Cobalt
[7] Periodic

همکارانش در طول شبیه‌سازی فرایند نانودندانه‌گذاری نیکل با سرعت و شعاع ابزار متفاوت، به این نتایج رسیدند که افزایش سرعت ابزار سبب افزایش سختی قطعه و بزرگ‌شدن اندازه ابزار باعث کاهش سختی آن می‌شود و علاوه بر این بزرگ شدن ابزار، سبب بیشتر شدن بیشینه نیروی دندانه‌گذاری می‌شود. ایشان هم‌چنین نشان دادند که با افزایش تعداد سیکل بارگذاری-باربرداری، بیشینه نیرو و سختی قطعه کاهش پیدا می‌کند [۲۴]. ژائو و همکارانش تغییرشکل سیلیکون با ابزار الماس را مورد مطالعه قرار دادند. سیلیکون در ناحیه نانودندانه‌گذاری شده از ساختار مکعبی الماس به تتراگونال تغییر می‌یابد و بعد از بارگذاری دوباره به ساختار قبل خود باز می‌گردد و فقط نواحی که دچار تغییر شکل پلاستیک شدند، تغییر ساختار نمی‌دهند که به صورت حفره‌ای با عمق کمتر باقی می‌مانند [۲۵]. علاوه بر موارد ذکر شده، تحقیقاتی هم در زمینه بررسی اثر جهت کریستالی بر سختی ماده انجام گرفته است. کیم و اوه، نانودندانه‌گذاری روی سطوح (۱۰۰) و (۱۱۱) شبیه‌سازی کرده‌اند و متوجه شده‌اند که وقتی روی سطوح (۱۱۱) بارگذاری می‌شود، اتم‌ها در طول جابجایی ابزار دارای ساختار بی‌شکل می‌شوند [۲۶]. لین و همکاران اثر جهت‌گیری کریستال و تغییر فاز اتم‌ها را بررسی کردند و دریافتند که دندانه‌گذاری روی سطح (۱۱۰) سبب گسترش تبدیل فاز و لغزش بیشتر نسبت به سطح (۰۰۱) می‌شود [۲۷]. حفره‌های زیر سطحی ممکن است، به شدت در فرآیند نانودندانه‌گذاری موثر باشند. جان و همکاران با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند نانودندانه-گذاری را روی سطح آهن با شبکه‌کریستالی BCC در حضور حفره زیر سطحی بررسی کردند. نتایج نشان داد، زمانی که ابزار به داخل حفره نفوذ می‌کند، باعث فروپاشی اتم‌ها درون حفره شده و حجم آن کاهش پیدا می‌کند. نتایج نشان می‌دهد، حفره در جذب نابجایی‌ها خیلی کارآمد عمل می‌کند و به طور موثری گسترش ناحیه‌ی پلاستیک را محدود می‌کند و نیز خواص مکانیکی قطعه را تحت تاثیر قرار می‌دهد [۲۸].

اونبو و همکاران به شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند نانودندانه‌گذاری فیلم‌های نازک پالادیوم، وانادیوم، مس و نیوبیم روی بستر وانادیوم پرداختند. در این شبیه‌سازی‌ها از سرعت بارگذاری (۵۰m/s) و دماهای متفاوت ۳۰۰ K-۷۰۰ استفاده شده است. نتایج نشان داد با کاهش دما، نیروی دندانه‌گذاری و مقاومت ماده افزایش یافت و با کاهش دما، مدول الاستیک و سختی فیلم‌ها کاهش یافت [۲۹].

یکی از عوامل مهم و تاثیرگذار در فرایند نانو دندانه‌گذاری قطعه‌کار این است که دانه‌ها نسبت به هم دارای جهت‌های کریستالی متفاوتی هستند. از آنجا که در مقیاس اتمی ساختارکریستالی دارای خواص جهتی است، زمانی که نانودندانه‌گذاری یک دانه به اتمام رسید و نوبت به دانه بعدی رسید، مکانیزم تغییرشکل، نیروی دندانه‌گذاری و سختی قطعه می‌تواند تغییر کند [۳۰]؛ لذا نیاز است، تاثیر جهات کریستالی قطعه‌کار مورد ارزیابی قرار گیرد.

در اکثر مطالعات انجام شده در زمینه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرایند نانودندانه‌گذاری، با توجه به اینکه سختی ابزار در مقایسه با قطعه کار بیشتر است، از اثر تغییرشکل ابزار چشم‌پوشی شده و ابزار صلب و تغییر شکل‌ناپذیر در نظر گرفته شده است. جسم صلب شامل تعداد زیادی ذره است که فاصله اتم‌ها از یکدیگر همواره ثابت است. این فاصله حتی در صورتی که به جسم نیرو وارد شود یا حرکت کند نیز ثابت می‌ماند. این درحالی است که با افزایش نیروهای ناشی از نفوذ ابزار به داخل قطعه‌کار، در هر مرحله نفوذ، نیروهای عکس‌العمل سطح افزایش می‌یابد و در نتیجه با تغییرشکل هرچقدر کم ابزار سطح مقطع موثر برای اندازه گیری سختی می‌تواند تغییر کند. علاوه بر این در بعضی از کاربردهای خاص از جمله استفاده از نانوالماس‌ها در روغن بعنوان افزودنی، مطالعه عملکرد خود الماس تحت تنش‌های هیدرواستاتیک زیاد اجتناب ناپذیر است. در این مقاله، فرایند نانودندانه گذاری با در نظر گرفتن جهات کریستالی متفاوت قطعه کار مطالعه می‌شود و تفاوت در نتایج آن گزارش می‌شود؛ هم‌چنین تفاوت در نتایج فرایند، با در نظر گرفتن ابزار صلب و غیرصلب مطالعه می‌شود تا ضمن گزارش تغییرات سختی در قطعه‌کار، رفتار تغییرشکل ابزار الماس برای کاربردهای خاص هم مورد تجزیه و تحلیل قرار گیرد.

## ۲- شبیه‌سازی فرایند نانودندانه‌گذاری

در این مقاله فرآیند شبیه‌سازی نانو دندانه‌گذاری با استفاده از بسته نرم‌افزاری دینامیک مولکولی Lammps[1] انجام شده

[1] Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator

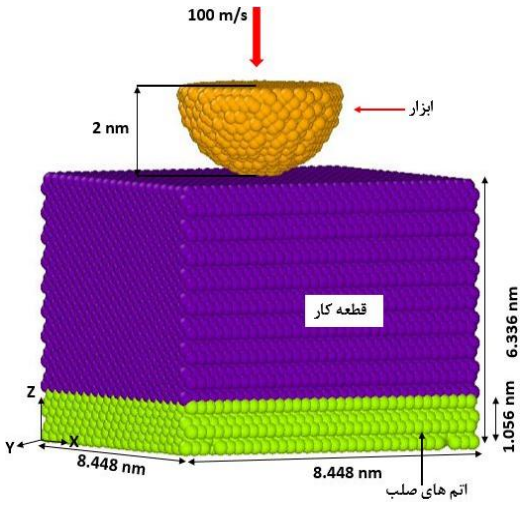
است. در این راستا ابتدا شبکه اتمی تولید و سپس با گذشت زمان مناسب به پایداری رسیده است. سپس فرایند نانودندانه‌گذاری با استفاده از ابزار الماس تک کریستال انجام پذیرفته است که در ادامه با جزئیات ارائه می‌شود.

### ۲-۱- آماده سازی نمونه

پیکره‌بندی ابزار و بستر در شکل ۱ نمایش داده شده است. مواد بستر از Ni با شبکه‌بندی FCC[1] و ثابت شبکه[2] ۰٫۳۵۲ (nm) است. بستر تحت نانودندانه‌گذاری در ابعاد ۸٫۴۵×۸٫۴۵×۶٫۳۴(nm) است. از ابزار نیمه کروی از جنس الماس با اتم‌های کربن، با قطر ثابت (nm) ۴ استفاده می‌شود. فرآیند دندانه‌گذاری در سرعت ثابت (m/s)۱۰۰ برای ابزار انجام می‌شود.

### ۲-۲- میدان‌های نیرو

پارامترهای زیادی در درستی خروجی‌های حاصل از یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تاثیرگذار هستند. تعریف درست برهم‌کنش بین اتم‌ها در شبیه‌سازی، یکی از مواردی است که می‌تواند در هم‌خوانی و نزدیکی خروجی‌های شبیه‌سازی و مقادیر واقعی موثر باشد. حسینی و همکاران به کمک




**شکل ۱- نمایی از مدل محاسباتی نانودندانه گذاری تک کریستال نیکل**

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند براده‌برداری مس تک‌کریستال، تاثیر تابع پتانسیل بین اتم‌های قطعه کار با استفاده از دو تابع پتانسیل مورس[3] و EAM[4] را در جابجایی اتمی اتم‌های قطعه‌کار و نیروی برشی ابزار بررسی کردند. نتایج نشان داد، به‌دلیل قابلیت‌های مناسب تابع پتانسیل فلزی EAM، محاسبه بهتر و دقیق‌تر خواص الاستیک-پلاستیک و تولید عیوب کریستالی در قطعه‌کار امکان‌پذیر است. نیروی برشی بدست آمده با استفاده از تابع پتانسیل EAM، کمتر بوده و جابجایی اتمی در عمق قطعه نفوذ کرده و آسیب کمتری به سطح قطعه و ابزار وارد شد [۳۱]. در این شبیه‌سازی از دو نوع اتم Ni و C و سه نوع تابع پتانسیل بین اتمی، برای تعاملات بین اتم‌ها استفاده شده است.

#### ۲-۲-۱- پتانسیل بین اتمی قطعه‌کار

برای ارتباط بین اتم‌های Ni در بستر، تابع پتانسیل EAM با استفاده از رابطه ۱ تعریف می‌شود [۳۲ و ۳۳]

$$E = \sum f_i(\rho h_i) + \frac{1}{2}\sum_i \sum_{j(\neq i)} \emptyset_{ij}(R_{ij}) \qquad (۱)$$

در واقع این تابع پتانسیل از جمع انرژی ناشی از چگالی الکترونی پس‌زمینه $f_i(\rho h_i)$ و انرژی پتانسیل جفتی $\emptyset_{ij}(R_{ij})$ بدست آمده است. در این رابطه $R_{ij}$ فاصله بین یون‌ها و $f_i$ انرژی موجود بین اتم i با الکترون‌های زمینه را نشان می‌دهد که با چگالی الکترونی محلی $\rho h_i$ توزیع شده‌اند.

#### ۲-۲-۲- پتاسیل اتم‌ها بین قطعه‌کار و ابزار

برای تعامل بین اتم‌های C و Ni، تابع پتانسیل مورس طبق رابطه ۲ استفاده شده است [۳۴].

$$U = D\left[e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)}\right]$$
$$r_{ij} < r_c \qquad (۲)$$

در این تابع D انرژی پیوستگی، α مدول الاستیک و $r_0$ فاصله تعادلی بین اتمی است [۳۵]. جدول ۱ مقادیر پارامترهای بکار رفته در تابع پتانسیل مورس بین اتم‌های نیکل و کربن را نمایش می‌دهد.

[1] Face Centered Cubic
[2] Lattice Constant (a)
[3] Morse
[4] Embedded-Atom Method

**جدول ۱- پارامترهای تابع پتانسیل مورس Ni-C [۲۴]**

| D (ev) | $\alpha(nm^{-1})$ | $r_0(nm)$ |
|---|---|---|
| ۱/۰۰۹۴ | ۰/۱۹۸۷۵ | ۰/۲۵۶ |

### ۲-۲-۳- پتانسیل بین اتمی ابزار

جهت بررسی و مقایسه تاثیر ابزار، شبیه‌سازی یک مرتبه با ابزار تغییرشکل ناپذیر و یک مرتبه با ابزار تغییرشکل پذیر انجام می‌شود. در ابزار تغییرشکل پذیر اتم‌ها با تابع پتانسیل ترسوف[1] که با استفاده از روابط ۳ و ۴ تعریف می‌شود با یکدیگر تعامل دارند [۳۶].

$$\boldsymbol{E} = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}\sum_{\boldsymbol{i}}\sum_{\boldsymbol{j}\neq\boldsymbol{i}}\boldsymbol{V_{ij}}} \quad (۳)$$

$$V_{ij} = f_c(r_{ij})\left[f_R(r_{ij}) + b_{ij}\, f_A(r_{ij})\right] \quad (۴)$$

در رابطه ۴، $f_c(r_{ij})$، $f_R(r_{ij})$ و $f_A(r_{ij})$ به ترتیب تابع قطع، پتانسیل جفتی دافعه و جاذبه هستند که به ترتیب با روابط ۵، ۶ و ۷ محاسبه می‌شوند. $b_{ij}$ نشان دهند نوعی وابستگی است که می‌تواند نیروی جاذبه را نسبت به دافعه تقویت یا تضعیف کند که با استفاده از روابط ۸ تا ۱۰ محاسبه می‌شود.

$$\boldsymbol{f_c(r)} = \begin{Bmatrix} 1 : \mathrm{r<R\text{-}D} \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\sin\left(\frac{\pi(\mathrm{r\text{-}R})}{2\mathrm{D}}\right) : \mathrm{R\text{-}D< r <R+D} \\ 0 : \mathrm{r>R+D} \end{Bmatrix} \quad (۵)$$

$$f_R(r_{ij}) = A\, exp(-\gamma_1 r_{ij}) \quad (۶)$$

$$f_A(r_{ij}) = -B\, exp(-\gamma_2 r_{ij}) \quad (۷)$$

پارامترهای D و R در رابطه ۵، به گونه‌ای انتخاب می‌شوند تا لایه همسایه‌های اول در نظر گرفته شود و پارمترهای A و B در روابط ۶ و ۷ ثابت هستند.

$$\boldsymbol{b_{ij}} = \left(\mathbf{1} + \boldsymbol{\beta^n \delta_{ij}^n}\right)^{-\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2n}}} \quad (۸)$$

$$\boldsymbol{\delta_{ij}} = \sum_{\boldsymbol{k\neq i,j}} \boldsymbol{f_c(r_{ik} g(\theta_{ijk}) exp(\gamma_3^m (r_{ij} - r_{ik})^m} \quad (۹)$$

$$\boldsymbol{g(\theta)} = \boldsymbol{\mu_{ijk}}\left(\mathbf{1} + \frac{\boldsymbol{c^2}}{\boldsymbol{d^2}} - \frac{c^2}{[d^2 + (cos\theta - cos\theta_0)^2]}\right) \quad (۱۰)$$

در رابطه ۹، $\theta_{ijk}$ زاویه پیوندی بین بردارهای $r_{ij}$ و $r_{jk}$ است [۳۶]. مقادیر پارامترهای بکار رفته در تابع پتانسیل در جدول ۲ نمایش داده شده است.

**جدول ۲- پارامترهای تابع پتانسیل ترسوف C-C [۳۶]**

| | |
|---|---|
| A= ۱۳۹۳/۶ (ev) | μ= ۱/۰ |
| B= ۳۴۶/۷ (ev) | β= ۰/۰۰۰۰۰۱۵۷۲۴ |
| C= ۳۸۰۴۹ | $\gamma_1$= ۰/۳۴۸۷۹ ($nm^{-1}$) |
| D= ۰/۰۱۵ (nm) | $\gamma_2$= ۰/۲۲۱۱۹ ($nm^{-1}$) |
| d= ۴/۳۴۸۴ | $\gamma_3$= ۰/۰ ($nm^{-1}$) |
| R= ۰/۱۹۵ (nm) | n= ۰/۷۲۷۵۱ |
| M= ۳/۰ | $\cos(\theta_0)$= -۰/۵۷۰۵۸ |

### ۲-۳- شرایط مرزی و اولیه

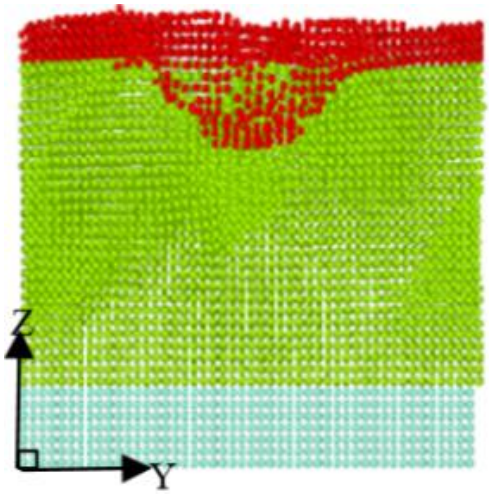
در این شبیه‌سازی لایه مرزی زیرین بستر ثابت در نظر گرفته می‌شود تا هنگام فرآیند، دچار تغییرشکل نشوند (رنگ سبز در شکل ۱). به منظور کاهش اثر مقیاس شبیه‌سازی، در راستای محورهای x و y شرایط مرزی دوره‌ای تعریف شده است [۳۷]. در جهت z نیازی به در نظر گرفتن شرط مرزی دوره‌ای نیست؛ زیرا باید سطح قطعه مشخص باشد که دندانه-گذاری در آن صورت می‌گیرد. دمای کل فرآیند در دمای ثابت (k) ۳۰۰ تنظیم می‌شود و پله زمانی برابر (fs) ۱ است.

## ۳- بررسی نتایج

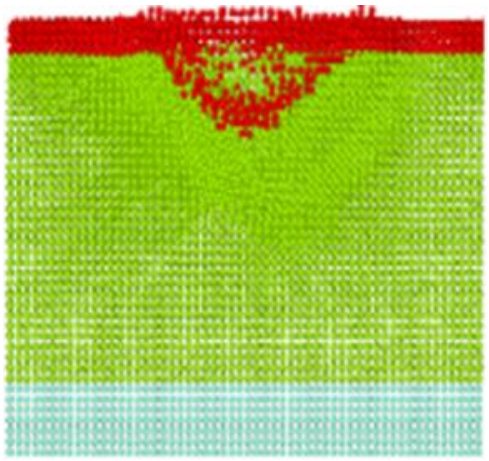
### ۳-۱- بررسی پارامترهای مدل

تعداد اتم‌های مدل می تواند بر نتایج تغییرشکل اتمی و اندازه‌گیری نیرو تاثیرگذار باشد. اگر شبکه اتمی از حدی کوچکتر باشد، نسبت اتم‌های سطح به حجم افزایش می‌یابد و می‌تواند باعث بوجود آمدن خطا در محاسبات شود [۳۸] و از طرفی افزایش تعداد اتم‌ها حجم محاسبات را افزایش می‌دهد. بر این اساس مطابق شکل ۲ فرایند نانودندانه‌گذاری در سه ابعاد مختلف انجام پذیرفت. بر اساس نتایج بدست آمده پس از نفوذ ابزار در قطعه‌کار و بازگشت ابزار، عمق و محدوده اتم‌ها که دچار تغییرشکل پلاستیک شده‌اند، در سه حالت اتمی تفاوت قابل توجهی نکرده‌اند.

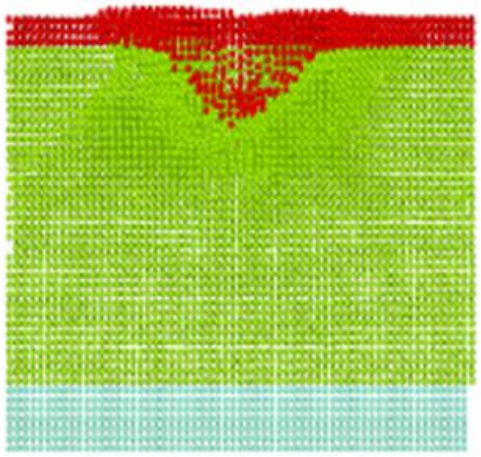
[1] Tersoff




(الف) (nm) ۶٫۳۴×۸٫۴۵×۸٫۴۵ شامل ۴۲۵۲۴ اتم



(ب) (nm) ۷٫۰۴×۹٫۸۶×۹٫۸۶ شامل ۶۴۲۸۸ اتم



(ج) (nm) ۷٫۷۴×۱۰٫۵۶×۱۰٫۵۶ شامل ۸۱۰۰۰ اتم

**شکل ۲- تاثیر ابعاد قطعه کار بر تغییر شکل اتمی در نواحی دندانه گذاری**

شکل ۳ منحنی نیرو بر حسب عمق نفوذ ابزار دندانه‌گذار را در قطعه‌کار را برای ابعاد مختلف اتمی قطعه‌کار مقایسه می‌کند. بر اساس شکل ۳ با تغییر مکان ابزار تا عمق ۱٫۵ نانومتر، نیرو وارد بر ابزار تا محدوده ۳۰۰ نانونیوتن افزایش می‌یابد و در هر سه ابعاد مختلف، نتایج یکسانی مشاهده می‌شود که نشان از کافی بودن انتخاب شبکه اتمی با تعداد ۴۲۵۲۴ اتم را دارد.

علاوه بر این، با بررسی تاریخچه انرژی پتانسیل، انرژی جنبشی و انرژی کل بر حسب زمان مدل دینامیک مولکولی، مشخص شد که بعد از گذر (ps) ۰٫۵ رفتار اتم‌ها پس از اعمال شرایط اولیه به پایداری می‌رسند. با توجه به اینکه زمان پایداری برای مدل (ps) ۵ انتخاب شده است، بارگذاری و بررسی نتایج کاملا پس از گذر پایداری در مدل اتفاق افتاده است.

## ۳-۲- صحه‌گذاری شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرایند نانودندانه‌گذاری

برای تعیین اعتبار مدل دینامیک مولکولی شبیه‌سازی شده از یک تحقیق دینامیک مولکولی نانودندانه‌گذاری نیکل با استفاده از ابزار الماسی کروی شکل استفاده شده است که در آن سختی یعنی مقاومت ماده در برابر تغییرشکل موضعی ناشی از نفوذ یک جسم به داخل آن محاسبه شده است. سختی یکی از مهم‌ترین پارامترهای مکانیکی مواد است که اندازه‌گیری آن با آزمایش نانودندانه‌گذاری ممکن است. شکل ۴ شماتیک منحنی نیرو بر حسب جابجایی در فرآیند نانودندانه‌گذاری نشان داده شده است.

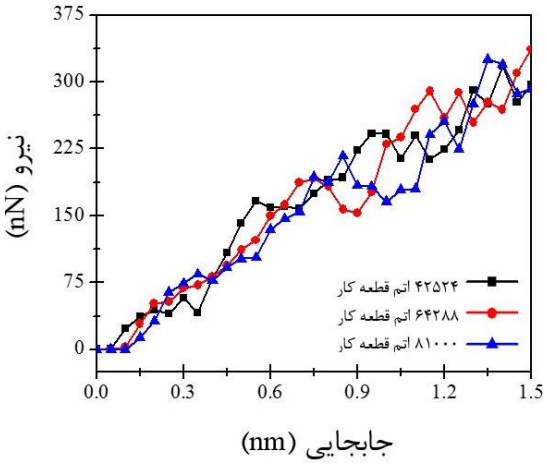
سختی H را می‌توان با استفاده از رابطه ۱۱ محاسبه کرد.

$$\boldsymbol{H = \frac{F_{max}}{A_c}} \qquad (۱۱)$$

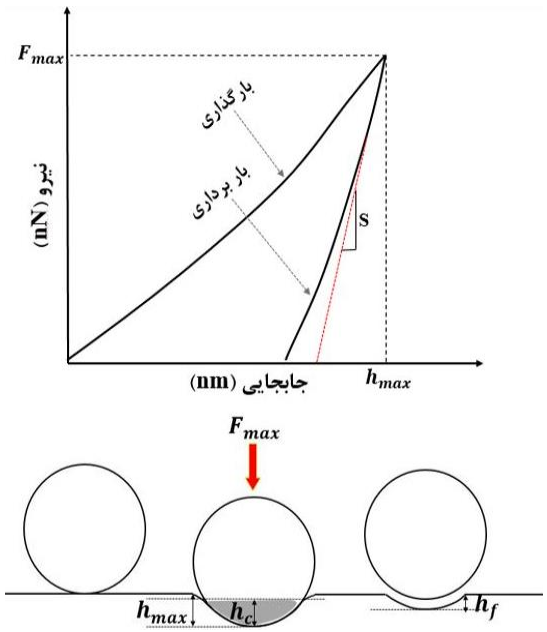
$$A_c = \pi a^2 = \pi(2Rh_c - h_c^2) \qquad (۱۲)$$

$$h_c = h_{max} - 3/4(\frac{F_{max}}{\frac{dF}{dh}}) \qquad (۱۳)$$

در رابطه ۱۱، $F_{max}$ بیشترین نیروی وارد شده به جسم و $A_c$ مساحت اثر سطح تماس است که تابعی از عمق تماس $h_c$ و شعاع ابزار R است. $A_c$ و $h_c$ بترتیب با استفاده از روابط ۱۲ و ۱۳ محاسبه می‌شوند. قبل از تماس دو ناحیه ابزار و بستر

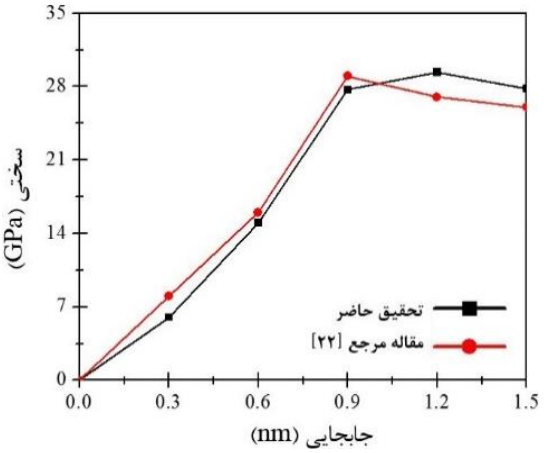



**شکل ۳- منحنی نیرو برحسب جابجایی ابزار دندانه‌گذار برای ابعاد مختلف قطعه‌کار**




**شکل۴- شماتیک منحنی نیرو بر حسب جابجایی [۵]**

قطعه‌کار، سختی معنایی ندارد و با افزایش عمق نفوذ ابزار مطابق با شکل ۴، انتظار می‌رود، سختی قطعه افزایش یابد. $h_f$ در شکل، عمق نهایی بعد از برداشتن ابزار و $h_{max}$ بیشترین عمق فرورفتگی را نشان می‌دهد [۵]. شکل ۵ مقایسه منحنی سختی بر حسب جابجایی تحقیق حاضر را با تحقیق مرجع [۲۴] نشان می‌دهد. در هر دو منحنی شکل ۵ با افزایش جابجایی، مقدار سختی نیز تا جابجایی ۰/۹ نانومتری




**شکل ۵- منحنی سختی بر حسب جابجایی**

ابزار افزایش می‌یابد و سپس در محدوده‌ای نسبتا ثابت می‌ماند. طبق نتایج در حداکثر عمق دندانه‌گذاری ۱/۵ نانومتر، مقدار سختی در مدل مورد نظر ۲۸ گیگا پاسکال است و انطباق قابل قبولی بین منحنی تحقیق حاضر و مرجع [۲۴] وجود دارد. درصد تفاوت بین دو منحنی شکل ۵، در نقطه انتهایی که حداکثر بار گذاری اعمال شده است، طبق رابطه ۱۴ محاسبه می‌شود.

$$PD = \frac{A - B}{A} \times 100 \qquad (۱۴)$$

در رابطه ۱۴، A مقدار سختی در مقاله حاضر است که مقدار آن ۲۷/۸۰ GPa و B مقدار سختی در مقاله مرجع [۲۲] است که مقدار آن ۲۶/۰ GPa است. بر این اساس درصد تفاوت سختی برای دو منحنی شکل ۵، ۶/۵٪ است.

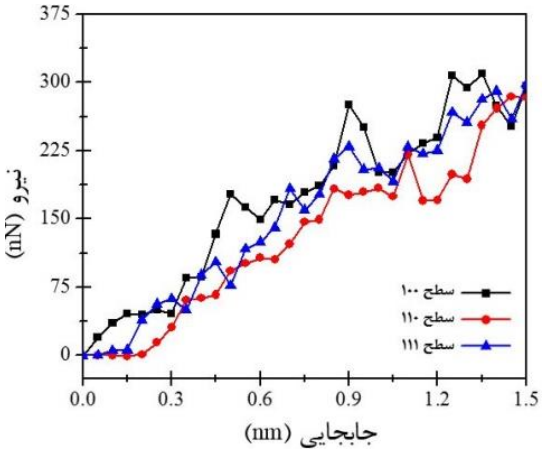
### ۳-۳- تاثیر جهات کریستالی بستر

در تحقیق حاضر شبیه‌سازی فرایند نانودندانه‌گذاری در سه جهت کریستالی (۱۰۰)، (۱۱۰) و (۱۱۱) قطعه‌کار انجام شده است. شکل ۶ نمودار نیرو بر حسب جابجایی را برای نانودندانه‌گذاری قطعه‌کار با سه جهت کریستالی متفاوت نشان می‌دهد.

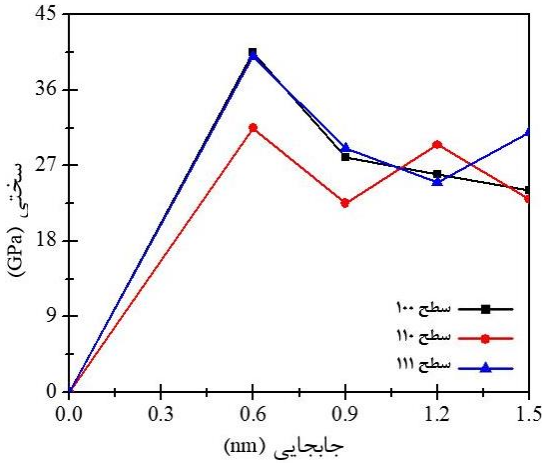
بر اساس شکل ۶ نیروی وارد بر ابزار در سه جهت کریستالی مورد مطالعه بهم نزدیک هستند، ولی در جهت کریستالی (۱۱۰) نیروهای وارد بر ابزار کمتر بدست آمده است. شکل ۷ نمودار سختی قطعه‌کار بر حسب جاجایی ابزار در جهت‌های کریستالی مختلف نشان می‌دهد. بر اساس نتایج، در بیشترین عمق نفوذ ابزار فرورونده، بیشترین

سختیمربوط به صفحه کریستالی (۱۱۱) و کمترین سختی در صفحه کریستالی (۱۱۰) بدست آمد.

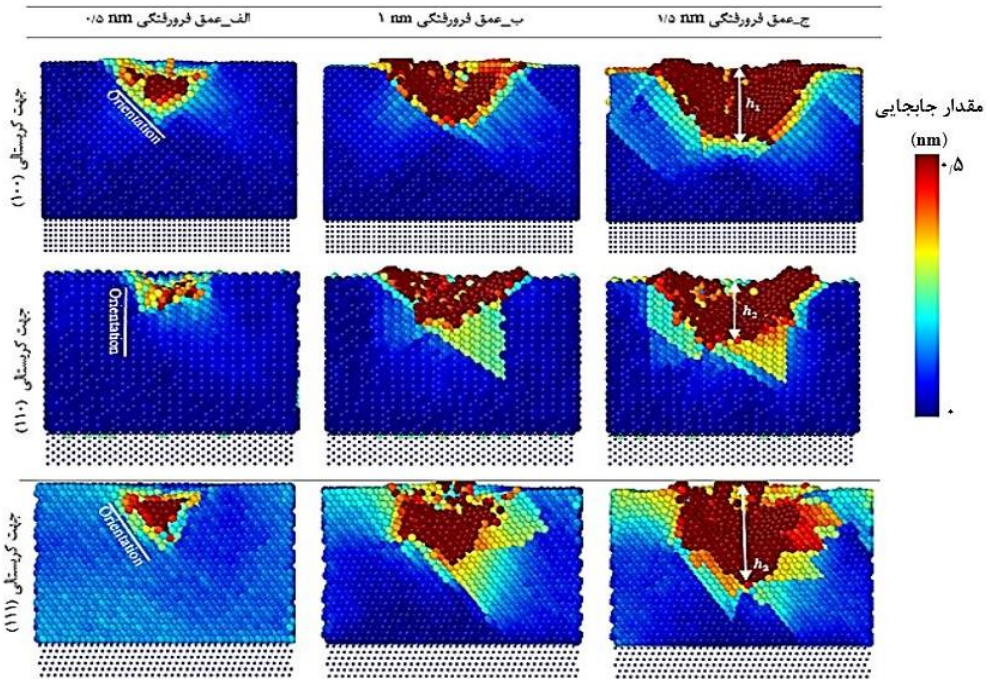
جهت بررسی دقیق‌تر این موضوع، شکل ۸ جابجایی اتمی را در طول فرآیند نانودندانه‌گذاری برای جهات کریستالی متفاوت قطعه‌کار نشان می‌دهد. این تصاویر جابجایی اتمی را در جابجایی (nm) ۰/۵ تا ۱/۵ ابزار دندانه‌گذار را نمایش می‌دهند. با نفوذ ابزار به داخل قطعه‌کار پدیده لغزش در سطوح مختلف با بوجود آمدن نابجایی‌ها و عیوب کریستالی در قطعات بوجود می‌آید تا نهایتا پس از برگشت ابزار، این اثرات در قالب تغییرشکل پلاستیک در قطعه‌کار نمود کنند. با افزایش عمق نفوذ این پدیده‌ها بیشتر شده و به نوبه خود منجر به افزایش نیرو می‌شوند. مطابق شکل ۸ عمق تغییرشکل پلاستیک ($h_p$) در قطعه با چیدمان اتمی (۱۱۰) کمتر و در جهت کریستالی (۱۱۱) از دو حالت دیگر بیشتر




**شکل ۶- منحنی نیرو برحسب جابجایی برای جهات کریستالی متفاوت**




**شکل ۷- منحنی سختی برحسب جابجایی برای جهات کریستالی متفاوت**




**شکل ۸- جابجایی اتمی قطعات با جهات کریستالی متفاوت در عمق دندانه‌گذاری مختلف پس از فرایند نانودندانه‌گذاری**

بوده است. مطابق رابطه ۱۲، با کاهش ($h_p$) سطح تماس قطعه‌کار با ابزار کاهش می‌یابد، اما طبق رابطه ۱۱ با افزایش نیرو سختی افزایش می‌یابد و با توجه به شکل ۷ که نشان می‌دهد سختی در قطعه‌کار با جهت کریستالی (۱۱۰) کمترین و در جهت کریستالی (۱۱۱) بیشترین است می‌توان پی برد، اثر نیرو بیشتر از اثر مساحت سطح تماس است.

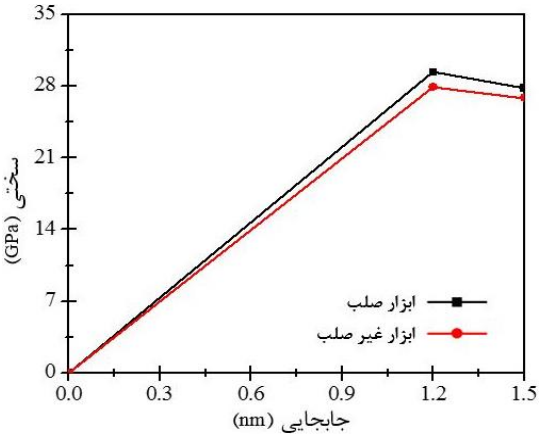
## ۳-۴- بررسی رفتار ابزار غیرصلب

### ۳-۴-۱- محاسبه سختی در قطعه‌کار

در این مرحله از شبیه‌سازی دینامیکی مولکولی فرایند نانودندانه‌گذاری، ابزار الماس غیرصلب در نظر گرفته می‌شود. تا اثر میدان نیرویی اتم‌های الماس بر تغییرشکل ابزار و محاسبه سختی مشخص شود. در این فرآیند از ابزار نیمه‌کروی به شعاع ۲ نانومتر به عنوان دندانه‌گذار استفاده می‌شود. ابعاد بستر و شعاع ابزار مطابق با شکل ۱ است. فرآیند در دمای ثابت ۳۰۰ کلوین و با سرعت حرکت ابزار برابر با ۱۰۰ متر بر ثانیه انجام شده است. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یکبار با فرض ابزار صلب و بار دیگر با فرض غیرصلب انجام می پذیرد. در ابزار غیر صلب، اتم‌ها با استفاده از تابع پتانسیل Tersoff که در بخش ۲-۲ شرح داده شده است، با یکدیگر در تعامل هستند. شکل ۹ منحنی سختی بر حسب جابجایی را برای فرایند نانودندانه‌گذاری با ابزار صلب و غیرصلب نشان می‌دهد. مطابق شکل ۹ سختی بدست آمده با استفاده از ابزار صلب بیشتر از ابزار غیرصلب است. دلیل آن می‌تواند افزایش نیروهای ابزار با استفاده از ابزار صلب و امکان کرنش و تغییرشکل در ابزار غیرصلب باشد که در نتیجه آن علاوه بر کاهش نیروهای ابزار، تغییر در مساحت اثر بدست آمده باعث کاهش محاسبه مقدار سختی می‌شود.

جدول ۳ تغییرات نیرو و سختی برای فرایند نانو دندانه‌گذاری با ابزار صلب و غیرصلب را در حداکثر عمق جابجایی نشان می‌دهد.

مطابق جدول ۳ نیروی وارد بر ابزار غیرصلب در مقایسه با ابزار صلب به میزان اندکی کاهش می‌یابد. استفاده از ابزار صلب در مقایسه با ابزار غیرصلب می‌تواند باعث افزایش ۶/۴٪ خطا در محاسبه نیرو و افزایش ۳/۶٪ خطا در محاسبه سختی نیکل شود.




**شکل ۹- منحنی سختی بر حسب جابجایی برای نانو دندانه‌گذاری با ابزار صلب و غیر صلب**

**جدول ۳- تفاوت نیرو و سختی برای ابزار صلب و غیرصلب در عمق ۱/۵ nm**

| | نیرو (nN) | سختی (GPa) |
|---|---|---|
| ابزار صلب | ۲۹۷/۲ | ۲۷/۸ |
| ابزار غیر صلب | ۲۷۹/۴ | ۲۶/۸ |
| درصد تفاوت | ۶/۴ | ۳/۶ |

### ۳-۴-۲- عیوب کریستالی در قطعه‌کار

برای اینکه بتوان علت تغییرشکل پلاستیک را در قطعه‌کار بررسی کرد، نیاز است که رفتار عیوب کریستالی و نابجایی‌ها در ماده مورد بررسی قرار گیرد. در مواد با ساختار کریستالی FCC، هر اتم دارای پیوندهای متقارن در همسایگی خود است. بزرگی این پیوندها ممکن است، به علت تغییر شکل الاستیک تغییر کند، ولی چیدمان اتمی کماکان یکسان و متقارن باقی می‌ماند. در صورتی که عیب کریستالی در نزدیکی اتم به وجود بیاید، ساختار کریستالی دیگر شکل متقارن نخواهد داشت و با استفاده از این خاصیت می‌توان عیب را تشخیص داد. هر اتم در ساختار FCC بدون عیب، دارای ۱۲ اتم (جفت مزدوج) است. پارامتر خاصیت تقارن مرکزی[1] با استفاده از رابطه ۱۴ محاسبه می‌شود [۳۹].

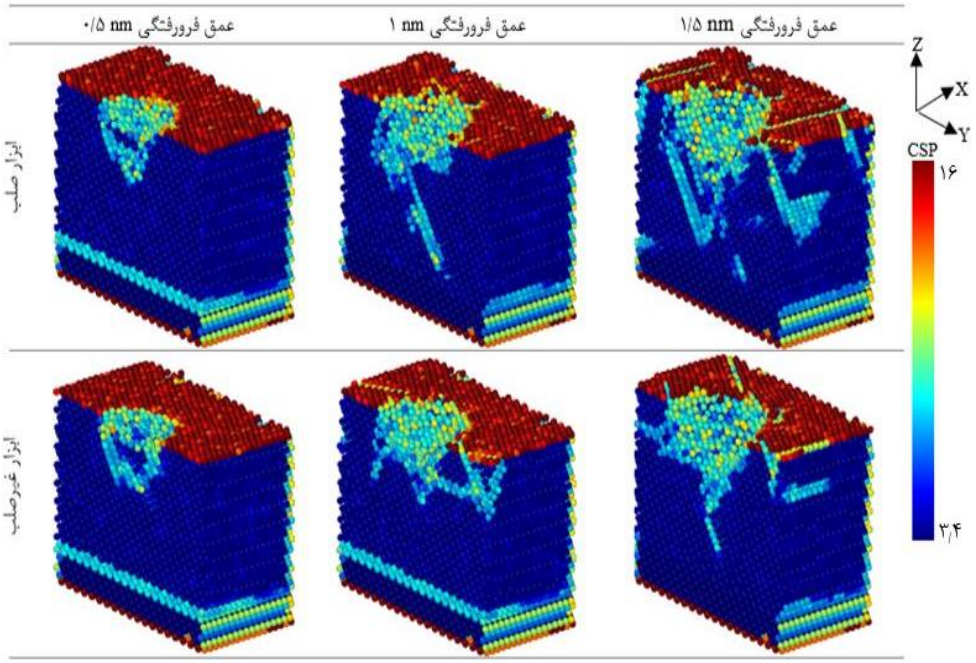
[1] Centrosymmtery Parameter(CSP)

$$CSP = \sum_{i=1,6} \left| \vec{R}_i + \vec{R}_{i+6} \right| \quad (۱۴)$$

در این رابطه $R_i$ و $R_{i+6}$ بردارهای مزدوج برای ۶ جفت اتم هستند. شکل ۱۰ تغییرشکل پلاستیک در قطعه‌کار را تحت فرایند نانودندانه‌گذاری برای دو حالت ابزار صلب و غیرصلب در جابجایی‌های مختلف ابزار با استفاده از خاصیت تقارن مرکزی نشان می‌دهد. خاصیت تقارن مرکزی در ساختار کریستالی بدون عیب و بدون تغییر شکل الاستیک صفر است. در صورتی که این عدد بدون بعد کمتر از ۳/۴ باشد، ساختار کریستالی کم اعوجاج و بدون عیب است. اگر بین ۳/۴ تا ۱۶ باشد، عیوب مختلف کریستالی را نشان خواهد داد و در صورتی که بیش از ۱۶ باشد، اتم‌های سطحی را نشان خواهد داد. بر اساس شکل۱۰، در حالت فرض ابزار صلب، با جابجایی ابزار ۰/۵ نانومتر هم عیوب کریستالی ماندگار درقطعه‌کار بوجود می‌آید، در حالی که اگر ابزار بدرستی غیرصلب در نظر گرفته شود، تغییر شکل قطعه‌کار در ناحیه الاستیک خواهد بود و با برگشت ابزار عیوبی در قطعه کار بوجود نمی‌آید. با افزایش نفوذ ابزار در قطعه‌کار هم در حالت فرض ابزار صلب، ناحیه تغییرشکل پلاستیک بزرگتر می‌شود و نابجایی‌ها تا عمق‌های بیشتری در قطعه کار نفوذ می‌کنند این در حالی است که اگر ابزار غیرصلب باشد، ناحیه تغییرشکل ماندگار کوچکتر و در نتیجه ضمن اعمال نیروی‌های کمتر به ابزار، سطح مقطع درگیر هم بزرگتر می شود و در نهایت سختی قطعه‌کار کمتر گزارش خواهد شد.

## ۴- جمع بندی نتایج

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرایند نانودندانه‌گذاری نیکل با استفاده از ابزار الماسی نیمه کروی شکل در دمای ثابت انجام شد. در مرحله اول به منظور بررسی رفتار ماده نیکل در فرایند، نانودندانه گذاری با ابزار صلب مورد مطالعه قرار گرفت و صحت نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از مرجع [۲۴] اعتبارسنجی شد و درصد تفاوت سختی بدست آمده در مقاله حاضر و مقاله مرجع ۶/۵٪ محاسبه شد. در ادامه اثر تغییر در جهات کریستالی در فرایند نانودندانه‌گذاری مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که نیروی وارد بر ابزار در سه جهت کریستالی (۱۰۰)، (۱۱۰) و (۱۱۱) بهم نزدیک هستند، با این حال در جهت کریستالی (۱۱۰) نیرو کمتر است. نتایج حاصل از منحنی سختی بر حسی جابجایی نشان می‌دهد، قطعه با جهت کریستالی (۱۱۱) سخت ترین و در جهت (۱۱۰) نرم ترین حالت خود را دارد.




**شکل ۱۰- مقایسه تشکیل عیوب کریستالی با استفاده از خاصیت تقارن مرکزی برای نانودندانه‌گذاری با ابزار صلب و غیرصلب**

نتایج حاصل از مطالعه اثر ابزار صلب و غیرصلب نشان می‌دهد که جابجایی اتم‌ها و ارتفاع ناحیه پلاستیک قطعه تحت دندانه‌گذاری با ابزار صلب بزرگتر از وقتی که از ابزار غیرصلب در نظر گرفته می‌شود، بدست می‌آید؛ همچنین بدلیل عدم تغییرشکل ابزار صلب نیروهای وارد بر ابزار در قطعه‌کار از جنس نیکل به میزان ۶٫۴٪ افزایش داشته است. از طرف دیگر بدلیل کاهش سطح تماس و افزایش نیرو، سختی تا ۳٫۶٪ در ابزار صلب نسبت به ابزار غیرصلب افزایش می‌یابد.

## ۵- علایم، نشانه‌ها و ارقام

| | |
|---|---|
| a | ثابت در برهم کنش‌های دو جسمی |
| $A_c$ | مساحت اثر سطح تماس، $m^2$ |
| b | ثابت در برهم کنش‌های دو جسمی |
| $b_{ij}$ | ضریب استحکام پیوند ij |
| c | اثر نیروی زاویه‌ای |
| D | انرژی پیوستگی، ev |
| d | وضوح وابستگی زاویه‌ای |
| E | تابع پتانسیل |
| $F_{max}$ | بیشترین نیروی وارد شده به قطعه، nN |
| $f_A$ | پتانسیل جفتی جاذبه، ev |
| $f_c$ | تابع قطع |
| $f_R$ | پتانسیل جفتی دافعه، ev |
| $H$ | سختی، GPa |
| $h_c$ | عمق تماس |
| $h_f$ | عمق نهایی بعد از برداشتن ابزار |
| $h_{max}$ | بیشترین عمق دندانه‌گذاری |
| m | ثابت در برهم‌کنش‌های سه جسمی |
| n | ثابت در برهم‌کنش‌های دو جسمی |
| R | پارامتر برهم‌کنش‌های دو جسمی |
| $r_c$ | شعاع قطع پتانسیل، nm |
| $r_0$ | فاصله تعادلی بین اتمی، nm |
| $r_{ij}$ | طول پیوند ij |
| U | تابع پتانسیل مورس |
| $V_{ij}$ | انرژی پیوند بین اتم i و j |
| $\alpha$ | مدول الاستیک، $nm^{-1}$ |
| $\beta$ | ثابت در برهم‌کنش‌های دو جسمی |
| $\delta_{ij}$ | عدد همسایگی موثر اتم i |
| $\theta$ | زاویه‌ی پیوند |
| $\theta_{ij}$ | زاویه بین دو بردار ij و jk |
| $\theta_0$ | زاویه تعادلی پیوند |

## ۶- مراجع


[1] Zaoui A, Pineau A, François D (1991) Comportement mécanique des matériaux. Tome: Elasticité et Plasticité.

[2] Poon B, Rittel D, Ravichandran G (2008) An analysis of nanoindentation in linearly elastic solids. Int J Solids Struct 45(24): 6018-6033.

[3] Cardarelli F ( 2008) Materials handbook: a concise desktop reference. Springer Science & Business Media.

[4] Ziegenhain G, Hartmaier A, Urbassek HM (2009) Pair vs many-body potentials: Influence on elastic and plastic behavior in nanoindentation of fcc metals. J Mech Phys Solids 57(9): 1514-1526.

[5] Fischer-Cripps AC (2004) Contact mechanics In Nanoindentation. springer New York NY.

[6] Fischer-Cripps AC, Gloyna EF, and Hart WH (2000) Introduction to contact mechanics. Springer New York.

[7] Rezaei M, Azimian A (2013) Investigation of structural properties of electrosmotic flow in a nanochannel by molecular dynamics simulation. *Journal of Solid and Fluid Mechanics* 2(4): 77-91. (In Persian)

[8] Hosseini SV, Vahdati M (2012) Effect of tool geometry and cutting speed on heat generation in nanometric cutting of copper single crystal. Journal of New Materials 2(8):45-57. (In Persian)

[9] Fang TH, Weng CI, Chang JG (2003) Molecular dynamics analysis of temperature effects on

[24] Imran M, Hussain F, Rashid M, Ahmad SA (2012) Dynamic characteristics of nanoindentation in Ni: A molecular dynamics simulation study. Chin Phys B 21(11): 116201.

[25] Zhao H, Zhang P, Shi C, Liu C, Han L, Cheng H, Ren L (2014) Molecular dynamics simulation of the crystal orientation and temperature influences in the hardness on monocrystalline silicon. J Nanomater.

[26] Kim DE, Oh SI (2006) Atomistic simulation of structural phase transformations in monocrystalline silicon induced by nanoindentation. Nanotechnology 17(9): 2259.

[27] Lin YH, Chen TC, Yang PF, Jian SR, Lai YS (2007) Atomic-level simulations of nanoindentation-induced phase transformation in mono-crystalline silicon. Appl Surf Sci 254(5): 1415-1422.

[28] Hofer JA, Ruestes CJ, Bringa EM, Urbassek HM (2020) Effect of subsurface voids on the nanoindentation of Fe crystals Model Simul Mater Sci Eng 28(2): 025010.

[29] Oyinbo ST, Jen TC (2020) A Molecular Dynamics Investigation of the Temperature Effect on the Mechanical Properties of Selected Thin Films for Hydrogen Separation. Membranes 10(9): 241.

[30] Reddy KV, Pal S (2018) Analysis of deformation behaviour of Al–Ni–Co thin film coated aluminium during nano-indentation: a molecular dynamics study. Mol Simulat 44(17): 1393-1401.

[31] Hosseini SV, Vahdati M, Shokuhfar A (2011) Investigation of interatomic potential on chip formation mechanism in nanometric cutting using MD simulation. Defect Diffus Forum 983: 312-315.

[32] Foiles SM, Baskes MI, Daw MS (1986) Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. Phys Rev B 33(12): 7983.

[33] Daw MS, Baskes MI (1984) Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. Phys Rev B 29(12): 6443.

[34] Maekawa K, Itoh A (1995) Friction and tool wear in nano-scale machining—a molecular dynamics approach. Wear 188(1-2): 115-122

[35] Chang WY, Fang TH, Lin SJ, Huang JJ (2010) Nanoindentation response of nickel surface using molecular dynamics simulation. Mol Simulat 36(11): 815-822.

[36] Atomic LS and Simulator, MMP (2003) LAMMPS Users Manual.

[37] Pei QX, Lu C, Lee HP, Zhang YW (2009) Study of materials deformation in nanometric cutting by nanoindentation measurement. Mat Sci Eng A-Struct 357(1-2): 7-12.

[10] Peng P, Liao G, Shi T, Tang Z, Gao Y ( 2010) Molecular dynamic simulations of nanoindentation in aluminum thin film on silicon substrate. Appl Surf Sci 256(21): 6284-6290.

[11] Cheong WCD, Zhang LC (2000) Molecular dynamics simulation of phase transformations in silicon monocrystals due to nano-indentation. Nanotechnology 11(3): 173.

[12] Liu CL, Fang TH, Lin JF (2007) Atomistic simulations of hard and soft films under nanoindentation. Mat Sci Eng A-Struct 452: 135-141.

[13] Yaghoobi M, Voyiadjis GZ (2014) Effect of boundary conditions on the MD simulation of nanoindentation. Comput Mater Sci 95:626-636.

[14] Walsh P, Omeltchenko A, Kalia RK, Nakano A, Vashishta P, Saini S (2003) Nanoindentation of silicon nitride: A multimillion-atom molecular dynamics study. Appl Phys Lett 82(1): 118-120.

[15] Chocyk D, Zientarski T (2018) Molecular dynamics simulation of Ni thin films on Cu and Au under nanoindentation. Vacuum 147: 24-30.

[16] Lu C, Gao Y, Michal G, Huynh NN, Zhu HT, Tieu AK (2009) Atomistic simulation of nanoindentation of iron with different indenter shapes. P I Mech Eng J-J Eng 223(7): 977-984.

[17] Fang TH, Chang WJ, Fan YC (2010) Molecular dynamics of nanoindentation with conical carbon indenters on graphite and diamond. Nano 5(04): 231-236.

[18] Xu S, Wan Q, Sha Z, Liu Z (2015) Molecular dynamics simulations of nano-indentation and wear of the $\gamma$ Ti-Al alloy. Comput Mater Sci 110: 247-253.

[19] Goel S, Faisal NH, Luo X, Yan J, Agrawal A (2014) Nanoindentation of polysilicon and single crystal silicon: Molecular dynamics simulation and experimental validation. J Phys D Appl Phys 47(27): 275304.

[20] Nair AK, Cordill MJ, Farkas D, Gerberich WW (2009) Nanoindentation of thin films: Simulations and experiments. J Mater Res 24(3): 1135-1141.

[21] Reddy KV, Pal S (2018) Analysis of deformation behaviour of Al–Ni–Co thin film coated aluminium during nano-indentation: a molecular dynamics study. Mol Simulat 44(17): 1393-1401.

[22] Xu C, Liu C, Wang H (2017) Incipient plasticity of diamond during nanoindentation. RSC Adv 7(57): 36093-36100.

[23] Yuan L, Xu Z, Shan D, Guo B (2012) Atomistic simulation of twin boundaries effect on nanoindentation of Ag (1 1 1) films. Appl Surf Sci 258(16): 6111-6115.

large-scale molecular dynamics simulations. Nanoscale Res Lett 4(5): 444.

[38] Blackman JA (2009) Handbook of Metal Physics: Metallic Nanoparticles. 1st editio.

[39] Kelchner CL, Plimpton SJ, Hamilton JC (1998) Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation. Phys Rev B 58(17): 11085.