

به نام خدا



# مرکز دانلود رایگان مهندسی متالورژی و مواد

[www.Iran-mavad.com](http://www.Iran-mavad.com)



## Molecular dynamic simulation of Cu nanoparticle behavior during surface indentations

### Abstract

In the present article, the mechanical behavior of a Cu nanoparticle during nanoindentation is studied using molecular dynamics simulation. The effect of substrate, Si here, is considered and the force constant was chosen to simulate diamond indenter which would lead to more realized result. A Cu nanoparticle was placed on Si substrate and a diamond indenter entered the structure. The embedded atom method (EAM) is used for interatomic Cu-Cu interaction which has proven to be a useful model for FCC nanostructures. The aim of this study is investigating the relationship between the applied force and the plastic deformation of Cu nanoparticle and the nucleation and growth of the dislocations. The simulation outputs were used to draw force-displacement curves and to calculate the mechanical properties of Cu nanoparticle. The loading curve revealed an elastic region followed by sharp decline of indentation force, as plastic deformation begins. Further penetration of indenter is associated with dislocation nucleation at the indenter/Cu nanoparticle interface followed by the formation of dislocation loops in (111) planes. The Young's modulus, hardness and stiffness of Cu are calculated from simulation outputs as 128 GPa, 13.2 GPa and 1.3181  $\mu\text{N}/\text{\AA}$ , respectively, which are the main outcomes of this study.

**Keywords:** Nanoindentation, Nanoparticle, young's modulus, EAM, Dislocation loop.

## شبیه سازی نانوفروروندگی در نانوذره مس

### چکیده‌ها

در این مقاله با استفاده از شبیه‌سازی رایانه‌ای، به بررسی پاسخ نانوذره مس در برابر نانوفرورونده‌ای با خواص مشابه ساختار الماس، پرداخته شده است. ساختار مس بر روی زیر لایه‌ای از سیلیسیوم قرار داده شد تا تاثیر زیر لایه موجب افزایش دقت محاسبات شود. سپس نانوفرورونده در راستای محور Z وارد ساختار گردید. پتانسیل به کار رفته برای اندرکنش بین اتم‌های مس، روش اتم جاسازی شده است. استفاده از این پتانسیل، روش پذیرفته شده‌ای برای شبیه سازی نانوساختارهای FCC است. هدف اصلی این پژوهش بررسی ارتباط بین تغییر شکل پلاستیک با تغییرات نیرو و همچنین جوانه‌زنی و رشد نابه‌جایی‌ها است. از خروجی‌های این شبیه‌سازی برای رسم نمودارهای نیرو بر حسب جابه‌جایی و محاسبه‌ی خواص مکانیکی نانوذره مس استفاده شد. نتایج به‌دست آمده نشان داد که در هنگام تغییر شکل پلاستیک، نیروی لازم برای نفوذ نانوفرورونده، کاهش چشم‌گیر و ناگهانی پیدا می‌کند. همچنین با تغییر شکل پلاستیک در اثر ورود نانوفرورونده، در سطح مشترک نانوفرورونده و نانو ذره مس، نابه‌جایی‌ها شروع به جوانه‌زنی می‌کنند. رشد نابه‌جایی‌ها در صفحه‌های (۱۱۱) است. مهم‌ترین دست‌آورد این مقاله محاسبه مدول یانگ، سختی و سفتی نانوذره مس به کمک شبیه‌سازی است که به ترتیب، ۱۲۸ گیگاپاسکال، ۱۳/۲ گیگاپاسکال و ۱/۳۱۸۱ میکرو نیوتون بر آنگستروم، به‌دست آمد. نتایج بدست آمده با داده‌های تجربی مطابقت مطلوبی دارد که نشان دهنده‌ی صحت شبیه سازی و محاسبات می باشد.

واژه‌های کلیدی: نانوفرورونده، نانوذره، روش اتم جاسازی شده، مدول یانگ، نابه‌جایی.

## مقدمه

امروزه فرآیند فروروندگی، برای سختی سنجی سطحی کاربرد فراوان پیدا کرده است. این روش در ابعاد بالا قابل اطمینان می باشد اما در ابعاد نانو به دلیل شعاع زیاد فرورونده و تاثیر آن نمی توان نتایج مورد نظر را بدست آورد، به همین علت استفاده از نانوفرورونده ها پیشنهاد می شود. در این مقاله به بررسی نانوفروروندگی در نانو ذره مس پرداخته شده است. روش انجام پژوهش به وسیله ی شبیه سازی دینامیک مولکولی به کمک نرم افزار LAMMPS است. علت استفاده از شبیه سازی، عدم وجود ابزار مناسب برای بررسی دقیق رفتار نابه جایی ها و محدودیت شعاع نانوفرورونده در حالت عملی است. از دیگر مزایای استفاده از شبیه سازی، عدم وجود پارامترهای مخرب است که باعث کاهش دقت نتایج، در آزمایش های تجربی می شود. از جمله ی این موارد می توان به اکسید شدن سطح جسم، تغییر شکل پلاستیک نانو فرورونده در طی آزمایش و تاثیر زیر لایه اشاره کرد. در فرآیند شبیه سازی، نانوفرورونده کروی با رفتاری مشابه ساختار الماس وارد نانوذره مس می شود و تا مرحله ی تغییر شکل پلاستیک پیش می رود و پس از تغییر شکل از ساختار خارج می شود. هدف اصلی این مقاله محاسبه ی خواص مکانیکی نانو ذره مس و بررسی رشد و جوانه زنی نابه جایی ها در حین تغییر شکل پلاستیک در اثر فرو رفتن نانوفرورونده است. از خروجی های شبیه سازی برای رسم نمودار نیرو بر حسب جابه جایی نانوفرورونده استفاده شده است. بررسی این نمودار نشان داد که در هنگام تغییر شکل پلاستیک، نیرو به صورت ناگهانی افت می کند، از مطابقت این نمودار با معادلات موجود، می توان به خواص مکانیکی نانوذره مس از قبیل مدول یانگ و سختی، دست یافت. این نمودار با نمودارهای به دست آمده از روش های تجربی، مطابقت دارد که نشان دهنده ی صحت شبیه سازی می باشد.

## مبانی نظری پژوهش

از سال ۱۹۹۰ با پیدایش سیستم های محاسبه گر قدرتمندتر، شبیه سازی های رایانه ای که نیاز به حجم عظیمی از پردازش بودند، مورد استقبال قرار گرفتند. از جمله روش های شبیه سازی ذرات اتمی، می توان به دینامیک مولکولی اشاره کرد. نحوه کار این روش به گونه ای است که سرعت و مکان اولیه اتم ها، برای سیستم تعریف می شود. سپس سیستم با محاسبه ی تغییر پتانسیل، نیروی بین اتم ها را به دست می آورد. با محاسبه ی نیرو، با استفاده از معادله حرکت نیوتون، شتاب ذرات به دست می آید. در آخر، با داشتن شتاب ذرات، سرعت و مکان جدید ذرات در فاصله ی زمانی بعدی مشخص می گردد. با تکرار این مراحل می توان رفتار یک ذره را بررسی کرد. هدف اصلی در این پژوهش، بررسی رفتار مکانیکی ساختار مس خالص در اثر ورود جسم صلب خارجی درون ساختار آن است که به فرآیند نانوفروروندگی موسوم است. معمولاً از فرآیند فروروندگی برای محاسبه ی سختی در مقیاس بالا و از فرآیند نانوفروروندگی برای محاسبه سختی در مقیاس میکروسکوپی مانند مرز دانه استفاده می شود. پس از انجام آزمون فروروندگی، به کمک نمودار نیرو بر حسب جابه جایی فرورونده، می توان خواص مکانیکی ساختار مورد نظر را بررسی نمود (آقازاده، مرعشی، رضایی، ۱۳۹۱). حین نفوذ فرورونده در نمونه، بار اعمالی و جابه جایی به صورت مداوم در یک سیکل بارگذاری/ باربرداری، ثبت می شوند. بار بیشینه و جابه جایی مربوطه، از عمق فرورفتگی محاسبه می شود. سختی (H) از رابطه ی شماره ی ۱ به دست می آید.

$$H = P_{max} / A \quad (1)$$

که در آن  $P_{max}$  بار اعمالی و  $A$  سطح اثر در نیروی بیشینه است. سطح اثر در نیروی بیشینه از شکل هندسی فرورونده و عمق تماس ( $h_c$ ) تعیین می‌شود. با فرض این که فرورونده تغییر شکل قابل توجهی ندهد، می‌توان نوشت  $A=f(h_c)$ . شکل تابع  $f$  در این جا با توجه به شکل هندسی فرورونده، طبق رابطه ۲ به دست می‌آید.

$$A = \pi.D.h_c \quad (2)$$

سفتی ( $S$ ) را می‌توان از منحنی نیرو بر حسب عمق فرورفتگی ( $h$ )، به کمک رابطه ۳ به دست آورد. این رابطه، مدول نسبی ( $E_r$ )، سطح تماس ( $A$ ) و سفتی ( $S$ ) را به هم مرتبط می‌کند.

$$S = dP/dh = (2/\pi^{0.5}).E_r.A^{0.5} \quad (3)$$

مدول نسبی ( $E_r$ ) تلفیقی از مدول فرورونده و نمونه است و این واقعیت را در نظر می‌گیرد که هم در نمونه و هم در فرورونده، تغییر شکل الاستیک صورت می‌گیرد. همچنین مدول نانوفرورونده ( $K$ ) از رابطه ی ۴ قابل محاسبه است که در آن،  $P$  نیرو و  $d$  جابه‌جایی نانوفرورونده است (کلچنر<sup>۱</sup> و همکاران، ۱۹۹۸). طبق رابطه ی ۵ می‌توان مدول نانوفرورونده را به مدول یانگ ربط داد. در رابطه ی ۵،  $E$  مدول یانگ ماده،  $\nu$  ضریب پواسون ماده و  $R$  شعاع ایندنتور است (ب.اومن<sup>۲</sup> و همکاران، ۲۰۰۶).

$$P = Kd^{3/2} \quad (4)$$

$$K=4/3 \times (E/I-\nu^2) \times R^{0.5} \quad (5)$$

### پیشینه پژوهش

در سال ۱۹۹۸ اولین گام در شبیه سازی نانوفروروندگی بوسیله ی دینامیک مولکولی، بوسیله کلچنر و همکاران، برداشته شد. در پژوهشی که توسط کلچنر و همکاران انجام شد، برای اولین بار تاثیر ورود نانوفرورونده بر رشد و جوانه زنی نابجایی ها به طریق شبیه سازی، بررسی شد. دان مورداهای<sup>۳</sup> و گروهش (۲۰۱۱) به بررسی نانوفروروندگی در یک ذره ی طلا پرداختند و به کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی تاثیر ابعاد نانوفرورونده را بر نیرو لازم برای فرآیند فروروندگی بررسی کردند. اسکال<sup>۴</sup> و همکاران (۲۰۰۶) علاوه بر شبیه سازی نانو فروروندگی، به صورت تجربی به بررسی رشد نابجایی ها در نانو ذره های کلویدی پرداختند، که مطابقت و صحت شبیه سازی را در این زمینه، مشخص کردند. پژوهش حاضر، الهام گرفته از مطالعات دان مورداهای و گروهش در رابطه با نانوفروروندگی در ساختارهای خاص، به کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی است.

<sup>1</sup> Cynthia L. Kelchner

<sup>2</sup> B.oommen

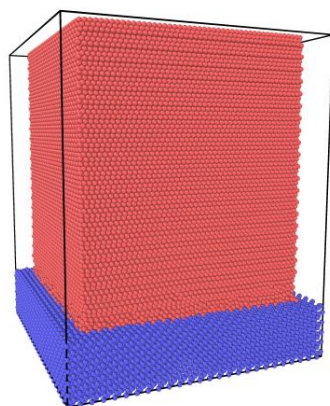
<sup>3</sup> Dan Mordehai

<sup>4</sup> Peter Schall



## روش پژوهش

شبیه‌سازی انجام شده به وسیله نرم‌افزار LAMMPS صورت گرفت. دیواره‌های سلول شبیه‌سازی، غیرتناوبی تعریف شدند. ساختار اولیه از جنس مس با ساختار بلوری مکعبی با سطوح مرکزدار، به ابعاد  $120 \times 120 \times 140$  آنگستروم مکعب است که روی زیرلایه‌ای از جنس سیلیسیوم قرار داده شد. ابعاد زیر لایه  $140 \times 140 \times 30$  آنگستروم مکعب است که ساختار شبکه الماسی دارد (شکل ۱). برای کاهش محاسبات، ۱۰ آنگستروم از زیر لایه که در تماس با ساختار بود، وارد محاسبات شد و بقیه اتم‌های زیر لایه، ثابت شدند. نیروی وارد شده به لایه تثبیت شده برای رسم نمودار نیرو-جاب‌جایی نانوفرورنده، طی فرایند شبیه‌سازی، ذخیره شد. پتانسیل استفاده شده برای اتم‌ها به کمک پتانسیل هیبریدی تعریف شد. برای اتم‌های ساختار مس از پتانسیل eam و برای اتم‌های سیلیسیوم از پتانسیل tersoff استفاده شد. برهم‌کنش این دو نوع اتم در فصل مشترک به وسیله پتانسیل لنارد-جونز<sup>۵</sup> تعریف شد. در ابتدا سطح انرژی و نیروی ساختار اولیه، به حالت پایدار رسید و پس از آن مرحله نانوفرورنده‌گی شروع شد. نانوفرورنده کروی از جنس الماس به شعاع ۳۵ آنگستروم به مرکز ساختار، مماس شد و پس از ورود هر ۰/۱ آنگستروم، ساختار دوباره از لحاظ نیرو و انرژی، پایدار شد. ورود نانوفرورنده و رساندن نیرو و انرژی به حالت پایدار تا جایی ادامه پیدا کرد که ساختار دچار تغییر شکل پلاستیک شود. در این مرحله با ادامه‌ی ورود نانوفرورنده به ساختار، نابه‌جایی‌ها شروع به جوانه‌زنی و رشد کردند. پس از مشخص شدن بیشینه نیروی قابل تحمل ساختار، بار دیگر شبیه‌سازی انجام گرفت با این تفاوت که در این مرحله، نانوفرورنده تا تغییر شکل پلاستیک وارد ساختار شد و سپس خارج شد. از رسم نمودار نیرو-جاب‌جایی در این شبیه‌سازی کمیت‌های لازم برای محاسبه‌ی خواص مکانیکی مس، استخراج شد.

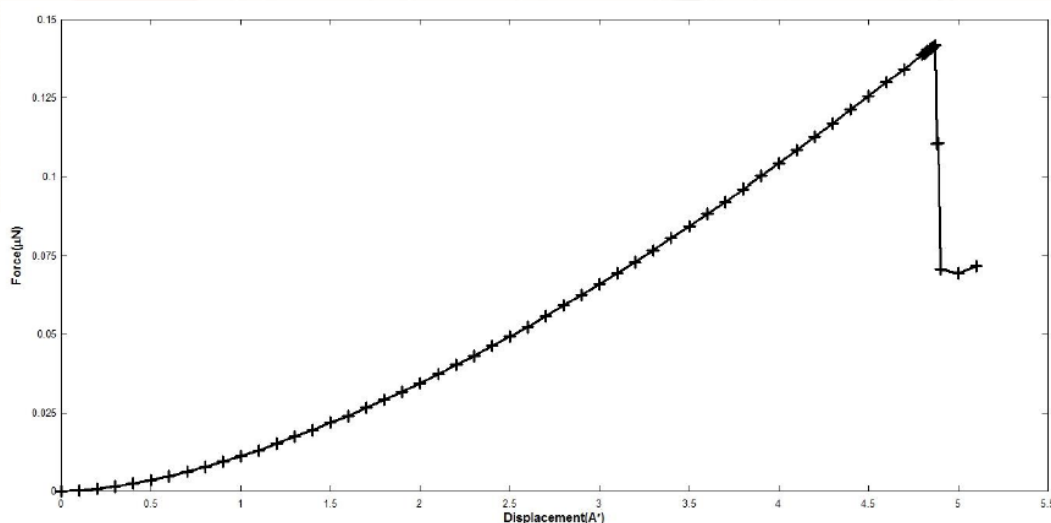


شکل ۱- ساختار اولیه مس (اتم‌های قرمز رنگ) بر روی زیر لایه‌ای از جنس سیلیسیوم (اتم‌های آبی رنگ).

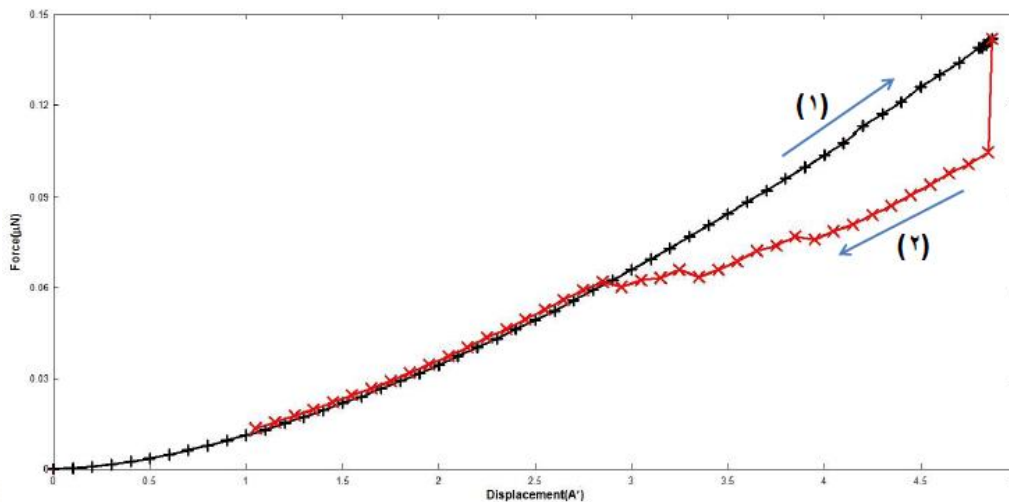
<sup>5</sup> Lennard - Jones

## تجزیه و تحلیل داده‌ها

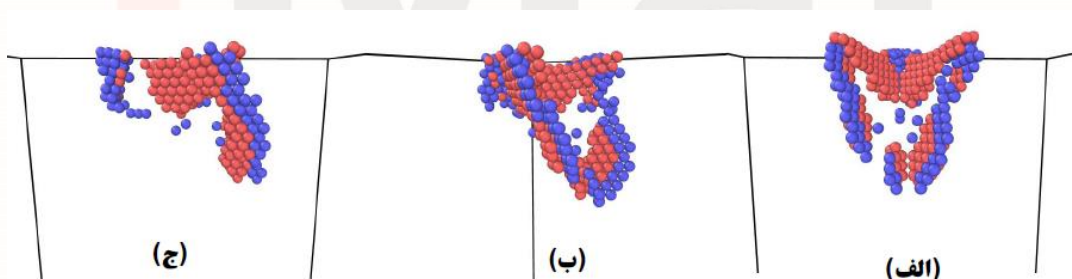
با ترسیم نمودار نیرو-جاب‌جایی، مشاهده می‌شود که در فرورودگی ۴/۸۷ آنگستروم، کاهش ناگهانی نیرو اتفاق می‌افتد (شکل ۲). در ابتدا جسم در ناحیه الاستیک مقاومت میکند و در نتیجه نیرو افزایش می‌یابد اما در ناحیه تغییر شکل پلاستیک با جوانه زنی نابجایی ها، نیرو به صورت چشم گیری کاهش می‌یابد. در شکل ۳ نمودار نیرو بر حسب جاب‌جایی نانوفرورونده رسم شده است که در این مرحله، پس از تغییر شکل پلاستیک، نانوفرورونده از ساختار خارج شد. شیب نمودار در مرحله‌ی خارج شدن نانوفرورونده نمایان‌گر سفتی است. در نیروی بیشینه، ساختار شروع به جوانه‌زنی و رشد ناب‌جایی می‌کند (شکل ۴). در این شکل تنها اتم‌هایی که عدد همسایگی آن‌ها مربوط به ناب‌جایی جزئی یا نقص چینش است نمایش داده شده‌اند. با توجه به شکل، نابجایی ها در صفحات فشرده شبکه کریستالی FCC رشد میکنند. در شکل ۵، اثر نانوفرورونده را بر سطح نانو ذره در ناحیه الاستیک و پلاستیک می‌توان مشاهده کرد، اتم های سبز رنگ نمایانگر ساختار مس می باشند. لازم بذکر است که تنها تاثیر نانو فرورونده در این شکل مشخص است. مقدار H طبق رابطه ی ۱، ۱۳/۲ GPa محاسبه شد. با تطبیق نمودار به‌دست آمده (شکل ۱)، با رابطه ی ۴، مقدار K برای مس ۰/۱۱۶ به‌دست آمد. به کمک رابطه ی ۵ مدول یانگ مس ۱۲۸ GPa بدست آمد. نتایج بدست آمده از آزمایش های تجربی صحت این کمیت را نشان داد، بگونه ای که در آزمایش های تجربی این کمیت ۱۱۷ GPa گزارش شده است. مقدار S برابر ۱/۳۱۸۱  $\mu\text{N/A}$  و  $E_r$  و ۳۶۵۰ GPa به‌دست آمد. مقدار غیر منطقی بدست آمده برای مدول نسبی نانو ذره و نانوفرورونده ( $E_r$ )، می تواند به علت تعریف ساختار نانوفرورونده در فرآیند شبیه سازی باشد. در این شبیه سازی نانوفرورونده جسم صلبی فرض شد که در حین فرورودگی تغییر شکل پلاستیک نداشته باشد.



شکل ۲- نمودار نیرو بر حسب جاب‌جایی در شبیه‌سازی اول، بدون خروج نانوفرورونده از ساختار.

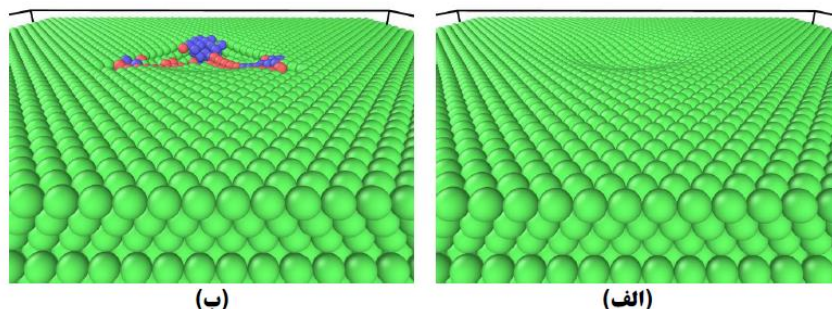


شکل ۳- نمودار نیرو بر حسب جابه‌جایی. پس از تغییر شکل پلاستیک، نانوفروارونده از ساختار خارج شد. جهت (۱) مربوط به ورود نانو فروارونده است و جهت (۲) مربوط به خروج نانوفروارونده بعد از تغییر شکل پلاستیک است.



شکل ۴- ساختار نابه‌جایی در مراحل اولیه تغییر شکل پلاستیک. رنگ قرمز بیان‌گر نابه‌جایی جزئی و رنگ آبی بیان‌گر نقص چینش است. شکل (الف) در جهت [۱۱۲] است و شکل‌های (ب) و (ج) به ترتیب ۴۵ درجه و ۹۰ درجه نسبت به شکل (الف) چرخیده‌اند.





شکل ۵- تاثیر نانوفورورونده کروی در سطح نانوذره مس. شکل (الف) قبل از تغییر شکل پلاستیک و شکل (ب) بعد از تغییر شکل پلاستیک است. اتم‌های سبز رنگ متعلق به شبکه FCC هستند. رنگ قرمز بیانگر ناهم‌جایی جزیی و رنگ آبی بیانگر نقص چینش است.

#### نتیجه‌گیری

- با ورود نانوفورورونده، نیروی لازم برای ورود نانوفورورونده افزایش می‌یابد. این افزایش تا زمانی ادامه می‌یابد که جسم دچار تغییر شکل پلاستیک شود، در این مرحله، کاهش شدید و ناگهانی نیرو مشاهده می‌شود.
- پس از کاهش ناگهانی نیرو، جوانه زنی و رشد ناهم‌جایی‌ها آغاز می‌گردد. ناهم‌جایی‌ها در صفحات (۱۱۱) جوانه زنی می‌کنند.
- سختی نانو ذره مس،  $13.2 \text{ GPa}$  محاسبه شد. مدول یانگ مس  $128 \text{ GPa}$  بدست آمد که مقدار تجربی آن  $117 \text{ GPa}$  است. سفتی نانو ذره برابر  $1.3181 \mu\text{N/A}$  و مدول نسبی نانوفورورونده و نانوذره،  $3650 \text{ GPa}$  به‌دست آمد.

#### منابع

مارک آندره میرز، کریشان کومار چاولا (۱۳۹۱)، رفتار مکانیکی مواد، (ترجمه جمشید آقازاده، پیروز مرعشی، مسیح رضایی)، انتشارات دانشگاه صنعتی امیر کبیر. (تاریخ انتشار به زبان اصلی ۲۰۰۹).

Oommen, B., Van Vliet, K.J., (2006), "Effects Of Nanoscale Thickness And Elastic Nonlinearity On Measured Mechanical Properties Of Polymeric Films", *Thin Solid Films*, Volume 513, Issues 1–2, Pages 235–242.

Cynthia L. Kelchner, S. J. Plimpton, J. C. Hamilton, (1998), "Dislocation Nucleation And Defect Structure During Surface Indentation". *The American Physics Society*, PHYSICAL REVIEW B, Volume 58, Number 17.

Dan Mordehai, Michael Kazakevich, David J. Srolovitz, Eugen Rabkin, (2011), "NANOINDENTATION SIZE EFFECT IN SINGLE-CRYSTAL NANOPARTICLES AND THIN FILMS: A COMPARATIVE EXPERIMENTAL AND SIMULATION STUDY". *Acta Materialia*, 59, 2309–2321.

Peter Schall, Itai Cohen, David A. Weitz, Frans Spaepen, (2006), "Visualizing Dislocation Nucleation By Indenting Colloidal Crystals", *nature*, Vol 440, 04557.