ISAV2025
پانزدهمین کنفرانس بین المللی آکوستیک و ارتعاشات
۳ و ۴ دی ماه ۱۴۰۴ تهران - ایران
انجمن آکوستیک و ارتعاشات ایران

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ارتعاشات آزاد نانومیله‌های آلومینیومی با در نظر گرفتن تاثیر دما

رضا ناظم‌نژاد[آ*]، محمد رضا رضایی[آ]، سید محمدجواد شجیعی گهراز[ب]

[آ] ایران، دامغان، میدان دانشجو، دانشگاه دامغان، دانشکده فنی و مهندسی، ۴۵۶۶۷-۳۶۷۱۶، دانشیار

[ب] ایران، دامغان، میدان دانشجو، دانشگاه دامغان، دانشکده فنی و مهندسی، ۴۵۶۶۷-۳۶۷۱۶، دانشجو

*پست الکترونیکی نویسنده مسئول: *rnazemnezhad@du.ac.ir*

چکیده

در این مقاله، ارتعاشات آزاد نانومیله‌های آلومینیومی توسط شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی شده است. بدین منظور، نانومیله‌ای با سطح مقطع ثابت (۱,۲۱۵×۱,۲۱۵ نانومتر مربع)، و به طول‌های مختلف (۸,۱، ۱۰,۱، ۱۲,۱۵ و ۱۴,۱۲۵ نانومتر) در نظر گرفته شده است. سپس به ازای یک طول مشخص، دمای شبیه‌سازی به ترتیب ۰، ۲۷۳ و ۳۰۰ درجه کلوین در نظر گرفته شده است. سپس به ازای یک طول و دمای مشخص، به انتهای نانومیله جابجایی اجباری در راستای عرضی داده شده است. بعد از رها کردن انتهای نانومیله، موقعیت آن در زمان‌های مختلف ثبت شده است. در نهایت با انجام عملیات ریاضی تبدیل فوریه سریع فرکانس‌های نانومیله استخراج و گزارش شده است. فرآیند فوق، برای شرط مرزی گیردار-آزاد که به عنوان شرط مرزی بسیار پرکاربرد در نانوفناوری می‌باشد مورد استفاده قرار گرفته است. از آنجا که آلومینیوم به عنوان یک ماده فلزی، خواص مکانیکی متمایزی دارد که در طراحی و ساخت ادوات الکترونیکی، سامانه‌های میکروالکترومکانیکی و سامانه‌های نانوالکترومکانیکی بسیار پرکاربرد است نتایج این مقاله می‌تواند مرجع مناسبی در این زمینه باشد.

کلمات کلیدی: نانومیله؛ دما؛ ارتعاشات عرضی؛ دینامیک مولکولی.

۱- مقدمه

نانوتکنولوژی به عنوان یکی از پیشرفته‌ترین و میان‌رشته‌ای‌ترین عرصه‌های علمی و فناوری در قرن حاضر، نقش تعیین‌کننده‌ای در توسعه مواد و سیستم‌های نوین ایفا می‌کند. در این میان، نانوساختارهای فلزی به ویژه نانومیله‌های آلومینیومی، به دلیل دارا بودن خواص مکانیکی، الکتریکی و حرارتی منحصر به فرد، کاربردهای گسترده و فزاینده‌ای در ادوات نانوالکترومکانیکی (NEMS) و میکروالکترومکانیکی (MEMS) پیدا کرده‌اند. آلومینیوم با دارا بودن نسبت استحکام به وزن مناسب، هدایت الکتریکی و حرارتی بالا،

قابلیت ماشین‌کاری عالی و مقاومت به خوردگی مطلوب، به عنوان ماده‌ای کلیدی و استراتژیک در طراحی و ساخت این ادوات پیشرفته شناخته می‌شود.

آلومینیوم به عنوان یکی از پرکاربردترین فلزات در صنایع مختلف، در مقیاس نانو نیز از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. خواص مکانیکی متمایز این ماده در ابعاد نانو، از جمله استحکام تسلیم بالا، انعطاف‌پذیری و مقاومت به خستگی، آن را به گزینه‌ای ایده‌آل برای کاربردهای حساس در ادوات نانوالکترومکانیکی تبدیل کرده است. همچنین، سازگاری زیستی و هزینه تولید نسبتاً پایین‌تر در مقایسه با سایر فلزات، موقعیت رقابتی منحصر به فردی برای آلومینیوم در عرصه نانوفناوری ایجاد کرده است.

مطالعه رفتار دینامیکی نانوساختارهای آلومینیومی در دو دهه اخیر مورد توجه گسترده پژوهشگران قرار گرفته است. در این زمینه، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به عنوان ابزاری قدرتمند و دقیق برای بررسی خواص این مواد در مقیاس نانو مطرح شده است. به عنوان مثال، چابا و همکاران [۱]، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، خواص مکانیکی و ساختاری آلومینیوم خالص را مطالعه کرده‌اند. در پژوهش فوق، با استفاده از دو پتانسیل EAM و Lennard-Jones، مدول حجمی، تابع توزیع شعاعی و فشار شکست آلومینیوم، محاسبه شده است. نتایج نشان می‌دهد که هر دو پتانسیل قادر به پیش‌بینی مقادیر مدول حجمی نزدیک به مقادیر تجربی هستند. همچنین بررسی توابع توزیع شعاعی و تغییرات ساختار کریستالی تحت کشش، نشان‌دهنده دقت بالاتر پتانسیل EAM در توصیف رفتار اتمی آلومینیوم می‌باشد. در پژوهش دیگری، اکسیداسیون نانوذرات آلومینیوم با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و پتانسیل الکترواستاتیک پیشرفته Streitz-Mintmire مورد مطالعه قرار گرفته است [۲]. محققان ساختار و توزیع بار در فازهای مختلف Al_2O_3 شامل ساختار بلوری حجیم، سطح (۰۰۰۱) و نانوذره مجزا را بررسی نموده‌اند. شبیه‌سازی‌های اکسیداسیون با نسبت‌های مولی مختلف آلومینیوم به اکسیژن (۱:۱ و ۲:۱) در دماهای مختلف انجام شده است. نتایج نشان می‌دهد که در نسبت ۱:۱، پوسته اکسیدی پایدار تشکیل شده و ساختار نانوذره حفظ می‌شود، در حالی که در نسبت ۲:۱، اکسیژن ناکافی منجر به تشکیل ذرات با سطوح ناهموار و ساختار دچار تغییرشکل می‌گردد. علوی و تامپسون [۳] نقطه ذوب نانوذرات آلومینیوم در محدوده ۵۵ تا ۱۰۰۰ اتم را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و پتانسیل Streitz-Mintmire بررسی نمودند. در این پژوهش، ذوب نانوذرات با بررسی وابستگی دمایی انرژی پتانسیل و شاخص لیندمن شناسایی شده است. رفتار دینامیکی آلومینیوم تک‌کریستال تحت بارگذاری شوک موجی نیز توسط کوکسین و همکاران [۴] مورد مطالعه قرار گرفته است. محققان با مقایسه نتایج شبیه‌سازی با مقادیر تجربی تنش تسلیم دینامیکی، به بررسی رفتار ماده تحت تغییرشکل با نرخ بالا پرداخته‌اند. این مطالعه تنوع رفتار مواد در شرایط شوک را هم در وابستگی دمایی تنش تسلیم و هم در ویژگی‌های تغییرشکل نمونه‌ها نشان می‌دهد. لین و همکاران [۵] به‌صورت جامع، تأثیر دمای اولیه بر خواص مکانیکی پلی‌کریستال‌های آلومینیوم را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار دادند. منحنی‌های تنش-کرنش، استحکام نهایی و مدول یانگ در دماهای ۳۰۰، ۳۵۰، ۴۰۰ و ۴۵۰ کلوین اندازه‌گیری شده‌اند. نتایج این پژوهش نشان داد که دمای اولیه تأثیر قابل‌توجهی بر پایداری فیزیکی و عملکرد مکانیکی نمونه‌ها دارد.

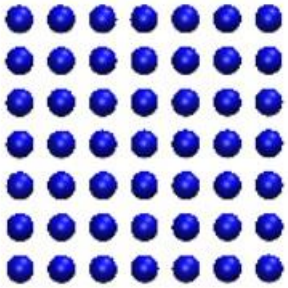
با وجود پیشرفت‌های چشمگیر در زمینه شبیه‌سازی نانوساختارهای آلومینیومی، هنوز جنبه‌های متعددی از رفتار ارتعاشی این مواد نیاز به بررسی دقیق‌تر دارد. به ویژه، مطالعه همزمان اثر پارامترهای مختلف از جمله طول، دما، شرایط مرزی و اثرات اندازه بر رفتار دینامیکی نانومیله‌های آلومینیومی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. پژوهش حاضر با درنظرگیری سیستماتیک این پارامترها و بررسی تعامل آن‌ها، گامی در جهت تکمیل دانش موجود در این حوزه برمی‌دارد.

این مقاله با بهره‌گیری از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، به مطالعه جامع ارتعاشات آزاد نانومیله‌های آلومینیومی می‌پردازد. اهداف اصلی این پژوهش عبارتند از:

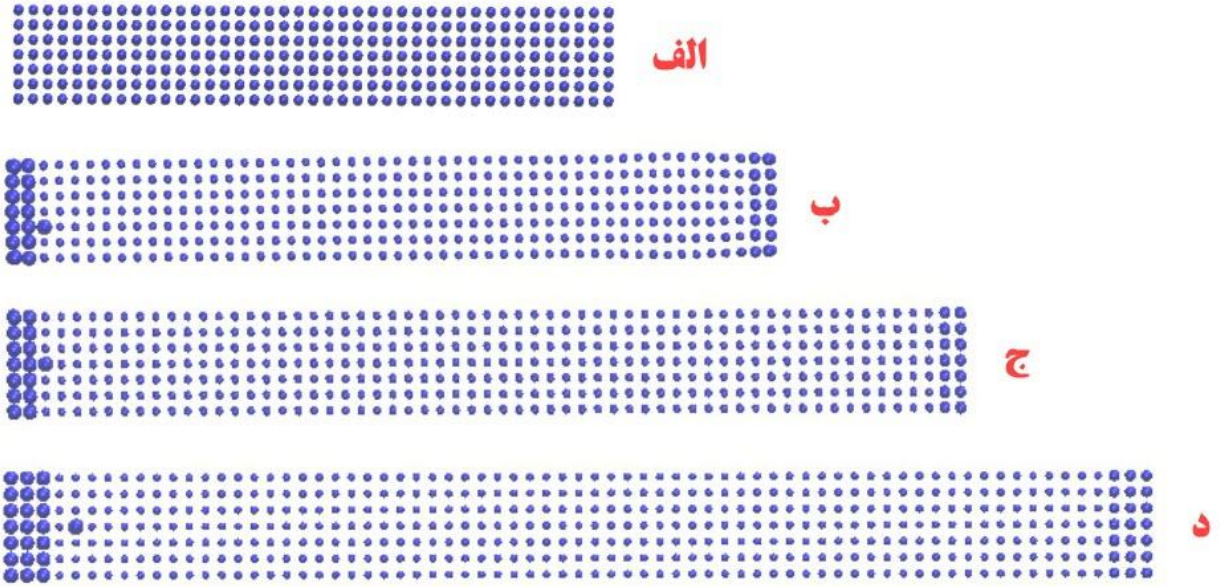
- بررسی سیستماتیک اثر تغییرات طول نانومیله بر فرکانس‌های طبیعی ارتعاشات عرضی
- تحلیل کمی تاثیر دما بر رفتار دینامیکی نانومیله‌های آلومینیومی
- استخراج و تحلیل مودهای ارتعاشی با استفاده از تبدیل فوریه سریع
- مطالعه دقیق سیستم تحت شرط مرزی گیردار-آزاد به عنوان پرکاربردترین شرط مرزی در نانوفناوری

۲- هندسه نانومیله آلومینیومی

در این پژوهش، نانومیله‌های مورد بررسی دارای سطح مقطع ثابت ۱,۲۵×۱,۲۵ نانومتر مربع (مطابق شکل (۱)) بوده و به طول های ۸,۱، ۱۰,۱، ۱۲,۱۵۶و ۱۴ نانومتر (مطابق شکل (۲)) در نظر گرفته شده‌اند. شبیه‌سازی رفتار ارتعاشات عرضی میله نیز در سه دمای $^{\circ}k$ ۰,۰ $^{\circ}k$ ۲۷۳و $^{\circ}k$ ۳۰۰ انجام گرفته است تا تاثیر دما علاوه بر تاثیر طول بر فرکانس طبیعی نانومیله بررسی گردد.



شکل ۱. هندسه سطح مقطع نانومیله آلومینیومی.



شکل ۲. نانومیله آلومینیومی با طول‌های مختلف، الف) ۸,۱ نانومتر، ب) ۱۰,۱ نانومتر، ج) ۱۲,۱۵ نانومتر، د) ۱۴,۱۲۵ نانومتر.

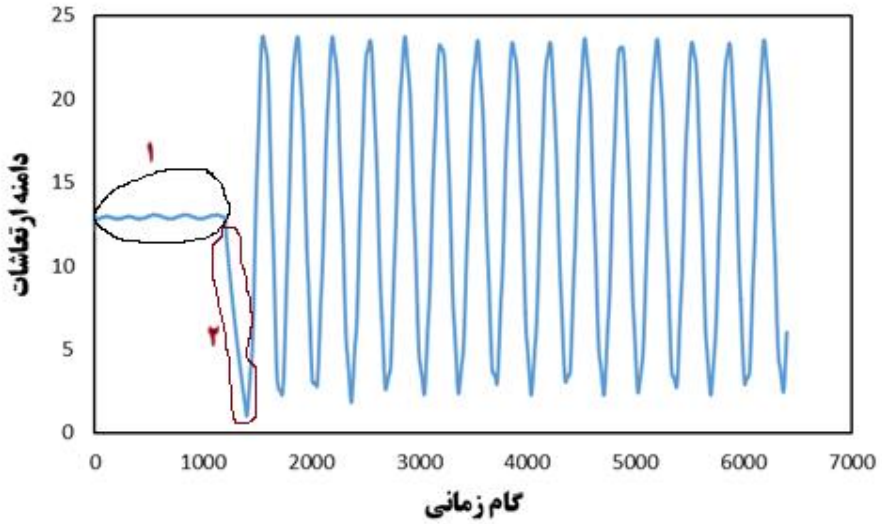
۳- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

برای تحلیل ارتعاشات نانوریبون‌ها و گرافن‌های چند لایه به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، از نرم‌افزار لمپس استفاده شده است. در این پژوهش از تابع پتانسیل EAM با شناسه Al_jnp.eam برای مدلسازی برهمکنش‌های بین‌اتمی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانومیله‌های آلومینیومی استفاده شده است. پتانسیل‌های EAM به دلیل در نظر گرفتن اثرات چگالی الکترونی در فلزات، دقت

مناسبی در پیش‌بینی خواص مکانیکی و ترمودینامیکی فلزات و آلیاژها دارند. پتانسیل Al_jnp.eam به طور خاص برای آلومینیوم توسعه یافته و قادر به بازتولید دقیق خواص بنیادی این فلز از جمله ثابت شبکه، انرژی کوهیـری، مدول‌های الاستیک و انرژی سطحی است. این پتانسیل رفتار نابجایی‌ها، نقص‌های نقطه‌ای و سطوح نانوذرات آلومینیوم را به خوبی توصیف می‌کند. اعتبارسنجی این پتانسیل در مطالعات پیشین نشان داده که نتایج حاصل از آن همخوانی مناسبی با داده‌های تجربی و محاسبات اولیه دارد. بنابراین با اطمینان می‌توان از آن برای مطالعه رفتار ارتعاشی نانوساختارهای آلومینیومی در شرایط مختلف دما و تنش استفاده نمود.

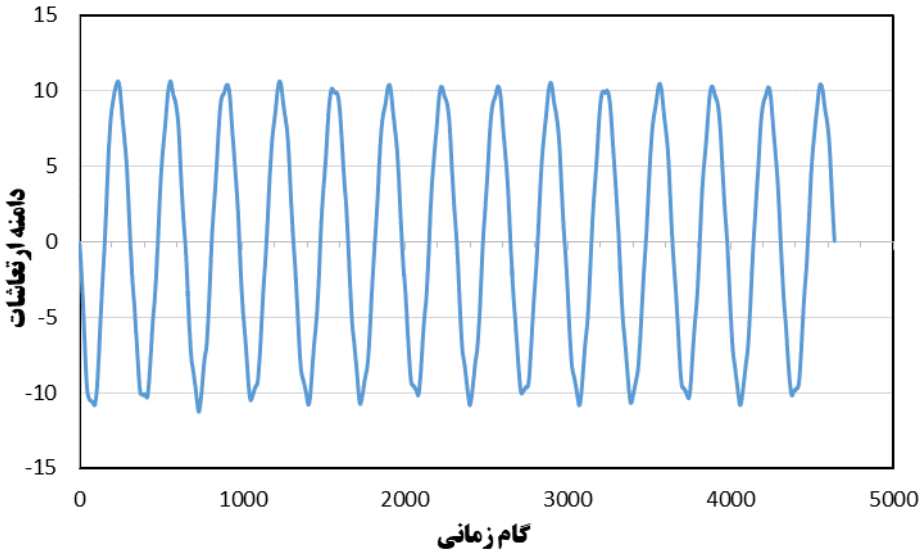
از آنجا که هندسه سازه مورد تحلیل در نرم‌افزار لمپس حتما باید شامل تغییراتی شود ابتدا یک کد لمپس تهیه شده است تا توسط آن، ساختار نانومیله آماده گردد. سپس در ساختار ایجاد شده، چهار گروه اتمی برای آلومینیوم تعریف می‌شود. گروه اول، تمامی اتم‌هایی است که برای ایجاد شرایط مرزی گیردار، جابجایی و دوران آنها، صفر در نظر گرفته می‌شود. گروه دوم، اتم‌هایی است که در سر آزاد نانومیله واقع شده‌اند و برای ایجاد تحریک اولیه به نانومیله به آنها نیرو وارد می‌شود. گروه سوم، اتمی است که جابجایی آن در راستای عرضی باید ثبت شود تا در گام بعدی برای انجام عملیات ریاضی تبدیل فوریه سریع مورد استفاده قرار بگیرد. و گروه چهارم اتم هایی هستند که جزو این سه گروه نمی‌باشند و ساختار کلی نانومیله را تشکیل می‌دهند.

کد نوشته شده، ابتدا شامل شرایط اولیه مانند یکای مورد نظر، شرایط مرزی مجموعه آماری[1]، فراخوانی هندسه سازه، تعریف تابع پتانسیل، تعریف نوع مولکول‌های بکار رفته در سازه، و تعریف گروه‌های مختلف مولکولی به منظور اعمال جابجایی و نیرو می‌باشد. سپس سازه تعریف شده به حداقل سطح انرژی پتانسیل رسانده می‌شود. در مرحله بعد، گام زمانی تعیین شده (۰/۰۰۱ فمتوثانیه)، نوع مجموعه آماری از لحاظ ترمودینامیکی مشخص، و شرایط مرزی به هندسه سازه اعمال می‌شود. نهایتا به سر آزاد نانومیله جابجایی اولیه عرضی (شکل (۳)) اعمال می‌شود. با ثبت جابجایی عرضی بر حسب زمان مولکول‌های واقع در سر آزاد نانومیله (شکل (۴)) و انجام تبدیل فوریه سریع، فرکانس‌های طبیعی سیستم بدست می‌آید (شکل (۵)**Error! Reference source not found.**).

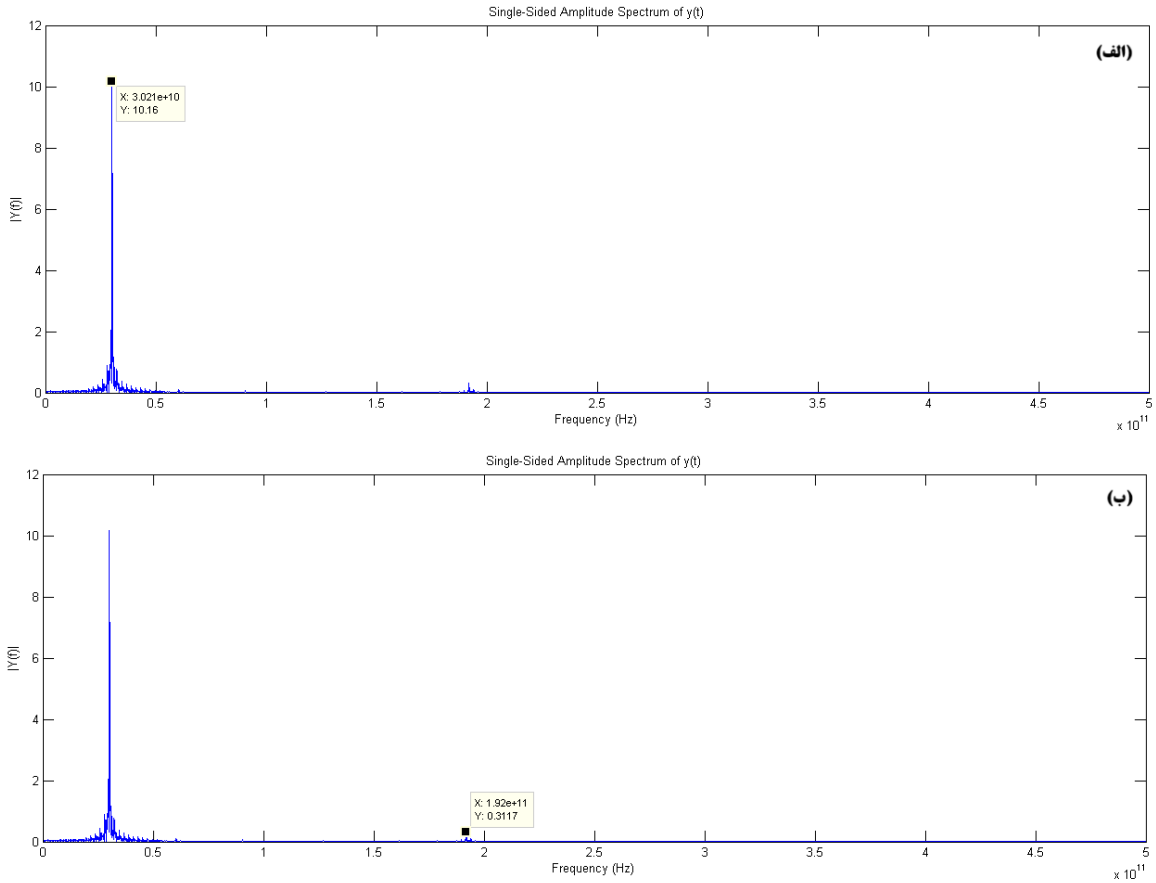


شکل ۳. نمایش جابجایی عرضی گروه چهارم اتمی نانومیله بر حسب گام زمانی؛ محدوده ۱ نشان دهنده مدت زمان به حداقل رساندن انرژی سازه می‌باشد و محدوده ۲ نشان دهنده مدت زمانی است که به گروه دوم اتمی، نیرو اعمال می‌شود.

1 . Ensemble



شکل ۴. استخراج جابجایی عرضی گروه چهارم نانومیله و مرتب‌سازی آن برای انجام عملیات تبدیل فوریه سریع.



شکل ۵. یک نمونه از نمودارهای دامنه بر حسب فرکانس اول و دوم نانومیله آلومینیومی بعد از عملیات تبدیل فوریه سریع.

۴- نتایج

در این بخش، نتایج حاصل از این پژوهش ارایه می‌گردد. بدین منظور فرکانس‌های اول و دوم نانومیله‌ها با طول‌های مختلف که تحت سه نوع دمای متفاوت شبیه‌سازی شده‌اند در جداول (۱)-(۴) ارایه شده است. نکاتی که از جداول فوق قابل بیان می‌باشد عبارتند از:

- هر چه دمای شبیه‌سازی ارتعاشات آزاد نانومیله افزایش یابد انتظار می‌رود فرکانس طبیعی اول و دوم کاهش یابد. مشاهده می شود به جزء موارد خاص، هر چه طول نانومیله بیشتر باشد میزان کاهش فرکانس‌های اول و دوم بر اثر افزایش دما، بیشتر باشد.
- هر چه طول نانومیله شبیه‌سازی شده بیشتر باشد مقدار فرکانس‌های اول و دوم، کمتر می‌باشد. این امر قابل پیش‌بینی است چرا که با افزایش طول نانومیله، انرژی لازم برای ایجاد یک تغییر شکل مشخص در نانومیله بلندتر، کمتر است.
- در بعضی نتایج شبیه‌سازی، تغییرات فرکانس با طول یا دما، روند متفاوتی با سایر نتایج دارد که می‌توان علت آن را در نحوه اعمال تحریک بر سازه دانست و نیازمند چندین مرتبه تکرار شبیه‌سازی است یا صحت و سقم آن بررسی گردد.

جدول ۲. دو فرکانس اول نانومیله آلومینیومی یکسر گیردار بطول ۸,۱ نانومتر.

دما ($^\circ$K)	فرکانس اول (GHz)	فرکانس دوم (GHz)
۰	۳۰,۲۱	۱۹۲
۲۷۳	۲۹,۳۵	۱۷۵,۹
۳۰۰	۲۶,۸۶	۱۶۱,۲

جدول ۳. دو فرکانس اول نانومیله آلومینیومی یکسر گیردار بطول ۱۰,۱ نانومتر.

دما ($^\circ$K)	فرکانس اول (GHz)	فرکانس دوم (GHz)
۰	۲۳,۲	۱۲۷
۲۷۳	۱۷,۷	۸۷,۲۹
۳۰۰	۱۱,۶	۵۲,۵

جدول ۳. دو فرکانس اول نانومیله آلومینیومی یکسر گیردار بطول ۱۲,۱۵ نانومتر.

دما ($^\circ$K)	فرکانس اول (GHz)	فرکانس دوم (GHz)
۰	۱۴,۶۶	۹۵,۲۶
۲۷۳	۱۷,۰۹	۸۳,۴۷
۳۰۰	۲,۱۳۶	۱۷,۵۵

جدول ۴. دو فرکانس اول نانومیله آلومینیومی یکسر گیردار بطول ۱۴,۱۷۵ نانومتر.

دما ($^\circ$K)	فرکانس اول (GHz)	فرکانس دوم (GHz)
۰	۱۲,۸۲	۷۴,۴۷
۲۷۳	۲,۴۴۲	۵۹,۸۳
۳۰۰	۲,۵۹۴	۲۳,۱۹

۵- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، تاثیر دما بر فرکانس‌های طبیعی اول و دوم نانومیله آلومینیومی با یک سطح مقطع ثابت، و به ازای چهار طول متفاوت بررسی شده است. شرط مرزی در نظر گرفته شده برای نانومیله‌ها، شرط مرزی گیردار-آزاد بوده است که یک شرط مرزی بسیار پرکاربرد در صنعت می‌باشد. بدلیل عدم همخوانی نتایج تئوری‌های کلاسیک با نتایج آزمایشگاهی در ابعاد نانو، در این پژوهش، از

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده شده است. به منظور بررسی تاثیر دما، شبیه‌سازی‌ها در سه دمای مختلف انجام گرفته است. نتایج این پژوهش نشان داد که دما سبب تغییر قابل توجه فرکانس‌های طبیعی نانومیله می‌شود و این تاثیرپذیری در طول‌های مخنلف، یکسان نمی‌باشد. به بیان دیگر، تاثیر دما بر فرکانس‌های نانومیله، بستگی به طول نانومیله نیز دارد. با توجه به اینکه تئوری‌های کلاسیک نمی‌توانند رفتار نانوسازه‌ها را به درستی پیش‌بینی نمایند نتایج این پژوهش می‌تواند مرجع مناسبی برای نحوه بررسی رفتار دینامیکی نانوسازه‌ها با شرایط مرزی مختلف باشد.

مراجع

1. H. Chabba, M. Lemaalem, A. Derouiche, D. Dafir, "Modeling aluminum using molecular dynamics simulation", *Journal of Materials and Environmental Sciences* 9, 93-99, (2018).
2. S. Alavi, J. W. Mintmire, D. L. Thompson, "Molecular dynamics simulations of the oxidation of aluminum nanoparticles", *The Journal of Physical Chemistry B* 109, 209-214, (2005).
3. S. Alavi, D. L. Thompson, "Molecular dynamics simulations of the melting of aluminum nanoparticles", *The Journal of Physical Chemistry A* 110, 1518-1523, (2006).
4. A. Y. Kuksin, V. Stegaĭlov, A. Yanilkin, "Molecular-dynamics simulation of edge-dislocation dynamics in aluminum", *Doklady Physics* 53, 467-471, (2008).
5. P. Lin, A. Basem, A. a. Alizadeh, E. N. Nasser, M. Al-Bahrani, C. K. Chan, N. Emami, "Effect of temperature on the mechanical properties of aluminum polycrystal using molecular dynamics simulation", *Case Studies in Thermal Engineering* 59, 104480, (2024).