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

بررسی ارتعاشات آزاد طولی نانومیله‌های آلومینیومی یکسرگیردار با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

رضا ناظم‌نژاد[آ*]، محمد رضا رضایی[آ]، سید امیرحسین حسینی [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

هدف این مقاله، استخراج فرکانس‌های طبیعی محوری نانومیله‌های آلومینیومی، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌باشد. یادآوری این نکته ضروری است که مقایسه نتایج آزمایشگاهی با نتایج تئوری‌های کلاسیک (مورد استفاده در مقیاس ماکرو) نشان داد که تئوری‌های کلاسیک نمی‌توانند به درستی رفتار سازه‌های نانومقیاس را پیش‌بینی نمایند! نانومیله‌های شبیه‌سازی شده، دارای طول‌های ۶، ۷، ۸، ۹ و ۱۰ نانومتر می‌باشند. هم‌چنین برای بررسی بیشتر، سطح مقطع نانومیله بصورت مربع فرض شده است که برای آن‌ها دو مقدار ۰,۸ و ۱,۶ نانومتر در نظر گرفته شده است. شرط مرزی مورد بررسی، شرط مرزی کانتیلور می‌باشد. به منظور استخراج فرکانس‌های طبیعی، لازم است ابتدا یک تحریک اولیه به نانومیله اعمال شود. بدین منظور با اعمال نیرو به یک سر نانومیله در راستای طول آن، و به سبب آن ایجاد یک جابجایی اولیه و سپس رها کردن آن، نانومیله به ارتعاش درمی‌آید. با ثبت جابجایی محوری اتم‌های واقع شده در سر آزاد نانومیله در گام‌های زمانی مختلف، می‌توان با استفاده از تبدیل فوریه سریع، داده‌های ثبت شده را در حوزه فرکانس تعیین نمود. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد هر چند از نظر تئوری‌های کلاسیک، فرکانس‌های ارتعاشات محوری مستقل از سطح مقطع سازه می‌باشند اما فرکانس های نانومیله‌ها در مقیاس نانو، وابسته به اندازه سطح مقطع نانومیله می‌باشند. دستاورد این پژوهش می‌تواند راهنمای مناسبی برای پژوهشگران حوزه ارتعاشات و مرجع مناسبی برای طراحی تجهیزات نانوالکترومکانیکی باشد.

کلمات کلیدی: آلومینیوم؛ فرکانس طبیعی طولی؛ شبیه‌سازی دینامیک مولکولی؛ شرط مرزی کانتیلور.

۱- مقدمه

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به عنوان یک ابزار محاسباتی قدرتمند، امکان بررسی و پیش‌بینی رفتار سامانه‌های نانومقیاس را در سطح اتمی فراهم می‌سازد. این روش با مدلسازی دقیق برهمکنش‌های بین‌اتمی و دنبال کردن تحول زمانی سامانه، بینش بی‌بدیلی در مورد مکانیزم‌های بنیادی حاکم بر خواص مکانیکی، حرارتی و دینامیکی نانوساختارها ارائه می‌دهد. از آنجایی که روش‌های تجربی در مقیاس نانو اغلب پرهزینه و با محدودیت‌های فنی مواجه هستند، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با قابلیت بررسی اثر پارامترهای مختلف از جمله دما، تنش و شرایط مرزی، نقش مکمل و گاهی جایگزین حیاتی در طراحی و بهینه‌سازی نانومواد ایفا می‌کند. این توانایی منحصر به فرد، دینامیک مولکولی را به پارادایمی اساسی در مطالعات نانوفناوری تبدیل کرده است.

آلومینیوم به دلیل برخورداری از نسبت استحکام به وزن مطلوب، هدایت الکتریکی و حرارتی بالا و مقاومت به خوردگی عالی، به عنوان ماده‌ای کلیدی در ساخت ادوات نانوالکترومکانیکی (NEMS) مورد استفاده قرار می‌گیرد. این فلز با دارا بودن قابلیت ماشین‌کاری دقیق در ابعاد نانو، در ساخت حسگرهای فوق حساس، رزوناتورهای نانومتری و سیستم‌های میکروالکترومکانیکی (MEMS) کاربرد گسترده‌ای دارد.

با مروری بر مراجع موجود متوجه می‌شویم که تاکنون پژوهش‌های فراوانی در زمینه شناخت رفتار و خواص آلومینیوم انجام شده است. به عنوان مثال، سینگ و همکاران [۱]، رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت سه‌لایه آلومینیم/مس/آلومینیم با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در دماهای مختلف مورد مطالعه قرار گرفته است. محققان با آنالیز منحنی‌های تنش-کرنش، استحکام تسلیم، مدول الاستیک و مکانیزم‌های تغییر شکل، به ارزیابی عملکرد مکانیکی این نانوکامپوزیت در محدوده دمایی مشخص پرداخته‌اند. نتایج این شبیه‌سازی نشان می‌دهد که دما تأثیر قابل ملاحظه‌ای بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت داشته و مکانیزم‌های تغییر شکل در مرزهای مشترک بین‌لایه‌ای با تغییر دما دستخوش تحولات معناداری می‌شوند.

در پژوهش دیگری، واکنش نانوذرات آلومینیوم با آب با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار گرفته است [۲]. پژوهش فوق به بررسی تأثیر دو عامل کلیدی اندازه نانوذرات و اثر پسیواسیون (محافظت‌سازی) بر سینتیک و مکانیزم واکنش می‌پردازد. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که نانوذرات کوچک‌تر به دلیل نسبت سطح به حجم بالاتر، فعالیت شیمیایی بیشتری از خود نشان می‌دهند. همچنین لایه اکسید محافظ (پسیواسیون) نقش تعیین‌کننده‌ای در کنترل نرخ و تکامل واکنش ایفا می‌کند.

ژو و همکاران [۳] نیز در پژوهش دیگری پدیده نفوذ و انتشار اتم‌های هیدروژن در شبکه کریستالی آلومینیوم با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار دادند. محققان با به کارگیری پتانسیل‌های بین‌اتمی مناسب، به بررسی مکانیزم‌های نفوذ، مسیرهای حرکت اتم‌های هیدروژن و محاسبه ضریب نفوذ در دماهای مختلف پرداخته‌اند. نتایج این پژوهش، وابستگی دمایی ضریب نفوذ هیدروژن را کمی‌سازی کرده و سهم نسبی مکانیزم‌های نفوذ بین‌نشینی مختلف را در شبکه FCC آلومینیوم مشخص می‌نماید.

می و همکاران [۴] نیز ساختار اتمی و ریزساختار لایه مرزی بین آلومینیوم و اکسید آلومینیوم (آلومینا) را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار دادند. پژوهش فوق به بررسی آرایش اتمی، پیکربندی پیوندها و خواص مکانیکی در ناحیه مشترک این دو ماده می‌پردازد. نتایج شبیه‌سازی، اطلاعات ارزشمندی در مورد ساختار ناحیه بین‌فازی، نحوه تشکیل پیوندهای شیمیایی و مکانیزمهای انتقال تنش در مرز مشترک فلز-سرامیک ارائه می‌دهد.

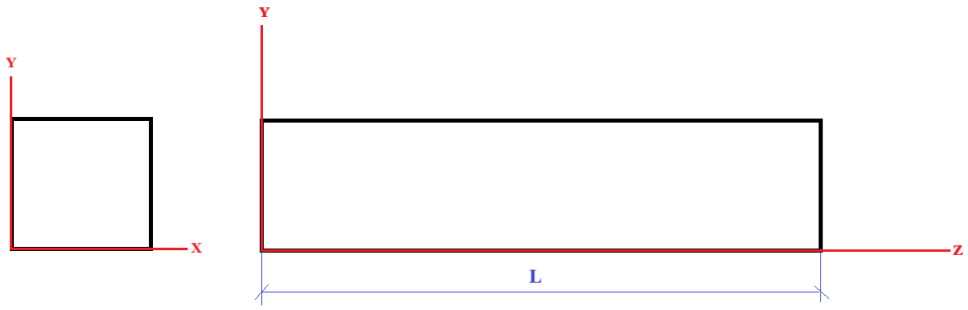
در پژوهش دیگری، صلح‌جو و همکاران [۵] فرآیندهای ذوب، انجماد و ذوب مجدد آلومینیوم را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار دادند. پژوهش فوق به بررسی رفتار اتمی و تغییرات ساختاری در خلال این انتقالات فازی، از جمله تشکیل و رشد جوانه‌های جامد، دینامیک سطح مشترک مایع-جامد و تکامل ریزساختار می‌پردازد. نتایج شبیه‌سازی، بینش ارزشمندی در مورد مکانیزم‌های اتمی حاکم بر پدیده‌های هیسترزیس حرارتی، تشکیل نقص‌های کریستالی و پویایی مرز دانه‌ها در چرخه‌های حرارتی مکرر ارائه می‌دهد.

علی‌رغم پژوهش‌های فراوانی که بر روی سازه‌های ساخته شده از آلومینیوم در مقیاس نانو انجام گرفته است اما هم‌چنان موضوعاتی است که به آنها پاسخ داده نشده است. یکی از این موضوعات، تحلیل رفتار ارتعاشاتی سازه‌های نانومقیاسی است که از آلومینیوم تشکیل شده‌اند. از طرفی بدلیل عدم توانایی تئوری‌های کلاسیک در پیش‌بین رفتار سازه‌های نانومقیاس، لزوم استفاده از

روش‌های شبیه‌سازی و تجربی دوچندان می‌شود. لذا در این پژوهش، با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، رفتار ارتعاشات آزاد محوری نانومیله‌های ساخته شده از آلومینیوم بررسی می‌شود. بدین منظور، نانومیله‌های آلومینیومی با سطح مقطع مربعی و با طول‌های مختلف که دارای شرط مرزی کانتیلور می‌باشند مدنظر می‌باشد. سپس دو فرکانس محوری اول نانومیله گزارش می‌شود و تاثیر اندازه سطح مقطع و طول نانومیله بر فرکانس‌های محوری آن بررسی می‌گردد.

۲- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

هندسه نانومیله‌های آلومینیومی‌ای که برای شبیه‌سازی از آنها استفاده شده است بصورت شماتیک مطابق شکل (۱) می‌باشند. هندسه نانومیله‌های شبیه‌سازی شده برای استخراج فرکانس‌های طبیعی آنها بر اساس جدول (۱) انتخاب شده‌اند.



شکل ۱. شماتیک نانومیله‌های آلومینیومی شبیه‌سازی شده.

جدول ۱. مقادیر ابعاد هندسی نانومیله.

پارامتر	مقدار	واحد
طول	۶-۱۰	نانومتر
سطح مقطع	۰,۸×۰,۸ و ۱,۶×۱,۶	نانومترمربع
طول پیوند آلومینیوم-آلومینیوم	۴,۰۵	انگستروم
ساختار کریستالی	FCC	-

برای ایجاد هندسه نانومیله، ابتدا یک کد اولیه در نرم‌افزار لمپس ایجاد شده است تا بوسیله آن بتوان، هندسه نانومیله را در گام های بعدی مورد استفاده قرار داد. شبیه‌سازی اصلی که بوسیله آن می‌توان جابجایی‌های محوری نانومیله را در حین ارتعاش ثبت نمود در کد دیگری در نرم‌افزار لمپس تهیه شده است. مشخصات کد نوشته شده در جدول (۲) آورده شده است. الگوریتم کد نوشته شده نیز در شکل (۲) آورده شده است.

۳- نتایج

بعد از انجام هر مرحله شبیه‌سازی و ثبت جابجایی طولی اتم‌های واقع در سر آزاد نانومیله (شکل (۳))، با استفاده از تبدیل فوریه سریع، امکان تعیین فرکانس‌های طبیعی فراهم می‌شود. به عنوان نمونه، در شکل (۴) نمودار دامنه بر حسب فرکانس نمایش داده شده است.

پس از استخراج تمامی فرکانس‌های طبیعی که نیاز به عملیات آماده‌سازی زمانبری می‌باشد فرکانس اول و دوم برای تمامی حالت‌های مدنظر در جدول (۲) آورده شده است. همان‌طور که پیشتر ذکر شد اثر دو عامل طول و سطح مقطع بر فرکانس‌های طبیعی نانومیله‌ها در نظر گرفته شده است.

جدول ۲. جزییات کد نوشته شده در نرم‌افزار لمپس برای ثبت جابجایی‌های محوری نانومیله.

بخش‌های مختلف کد	ویژگی	توضیحات
واحد انتخاب شده برای کل شبیه‌سازی	metals	
شرایط مرزی فضای شبیه‌سازی	Fixed-Fixed-Shrink-wrapped	در راستای ارتعاش، فضای شبیه‌سازی متناسب با ابعاد هندسه سازه، تغییر می کند.
نوع اتم	atomic	
جرم اتم‌ها	۲۶,۹۸	مول/گرم
تابع پتانسیل	Al_jnp.eam	
مجموعه آماری اولیه	NVT	
گام زمانی	۱	فمتوثانیه
اعمال شرایط مرزی به سازه	صفر کردن جابجایی و دوران سه ردیف از اتم‌های آلومینیوم برای ایجاد شرط مرزی گیردار	
اعمال تحریک اولیه	اعمال نیرو به سه ردیف از اتم‌های آلومینیوم در سر ازاد	
ثبت جابجایی محوری	یک اتم در سر آزاد برای این منظور انتخاب شده است.	
مجموعه آماری نهایی	NVE	

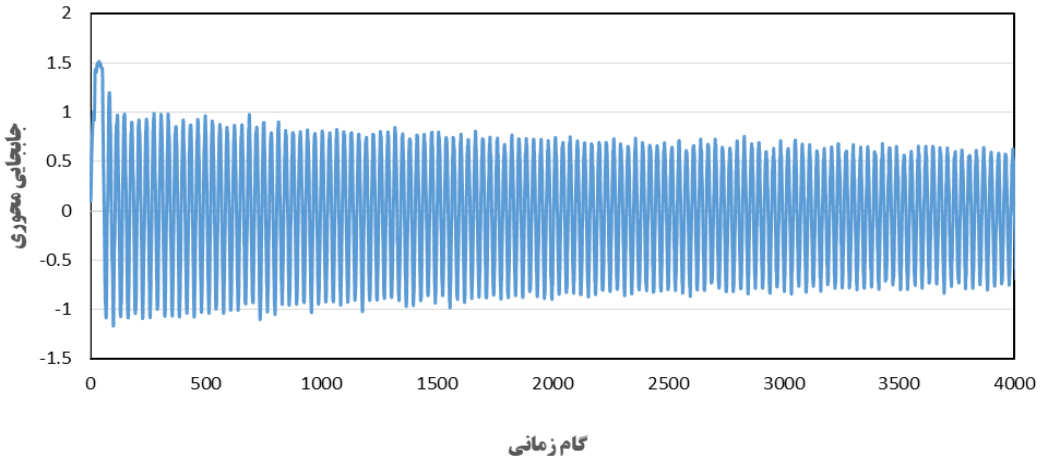
جدول (۲) نشان می‌دهد که به ازای یک سطح مقطع ثابت، با افزایش طول نانومیله، هر دو فرکانس اول و دوم کاهش می‌یابند. این پدیده، پیش‌تر در مقیاس ماکرو نیز مشاهده شده بود و قابل پیش‌بینی بود. اما نکته‌ای که باید به آن اشاره کرد این است که از تئوری‌های کلاسیک می‌دانیم که نسبت فرکانس دوم به اول، برای میله‌ای که دارای شرط مرزی گیردار-آزاد می‌باشد ۳ است (رابطه (۱)) این در حالیست که برای نانومیله با شرط مرزی فوق، این عدد ۳ نیست و تقریبا می‌توان آن را ۲ درنظر گرفت. دلیل این اختلاف را می‌توان اینگونه توضیح داد که، اولا تئوری‌های کلاسیک در حوزه ماکرو، توانایی پیش‌بینی رفتار سازه‌ها در مقیاس نانو را ندارند. هم چنین، نتایج تجربی نشان داده است که رفتار سازه‌های نانومقیاس، وابسته به ابعاد آنها می‌باشد که این امر به وضوح از نتایج جدول (۲) نیز قابل مشاهده می‌باشد.

$$\omega_n = \frac{(2n-1)\pi}{2L}\sqrt{\frac{E}{\rho}} \Rightarrow \begin{cases} \omega_1 = \dfrac{(1)\pi}{2L}\sqrt{\dfrac{E}{\rho}} \\ \omega_2 = \dfrac{(3)\pi}{2L}\sqrt{\dfrac{E}{\rho}} \end{cases} \Rightarrow \frac{\omega_2}{\omega_1} = 3 \qquad (۱)$$

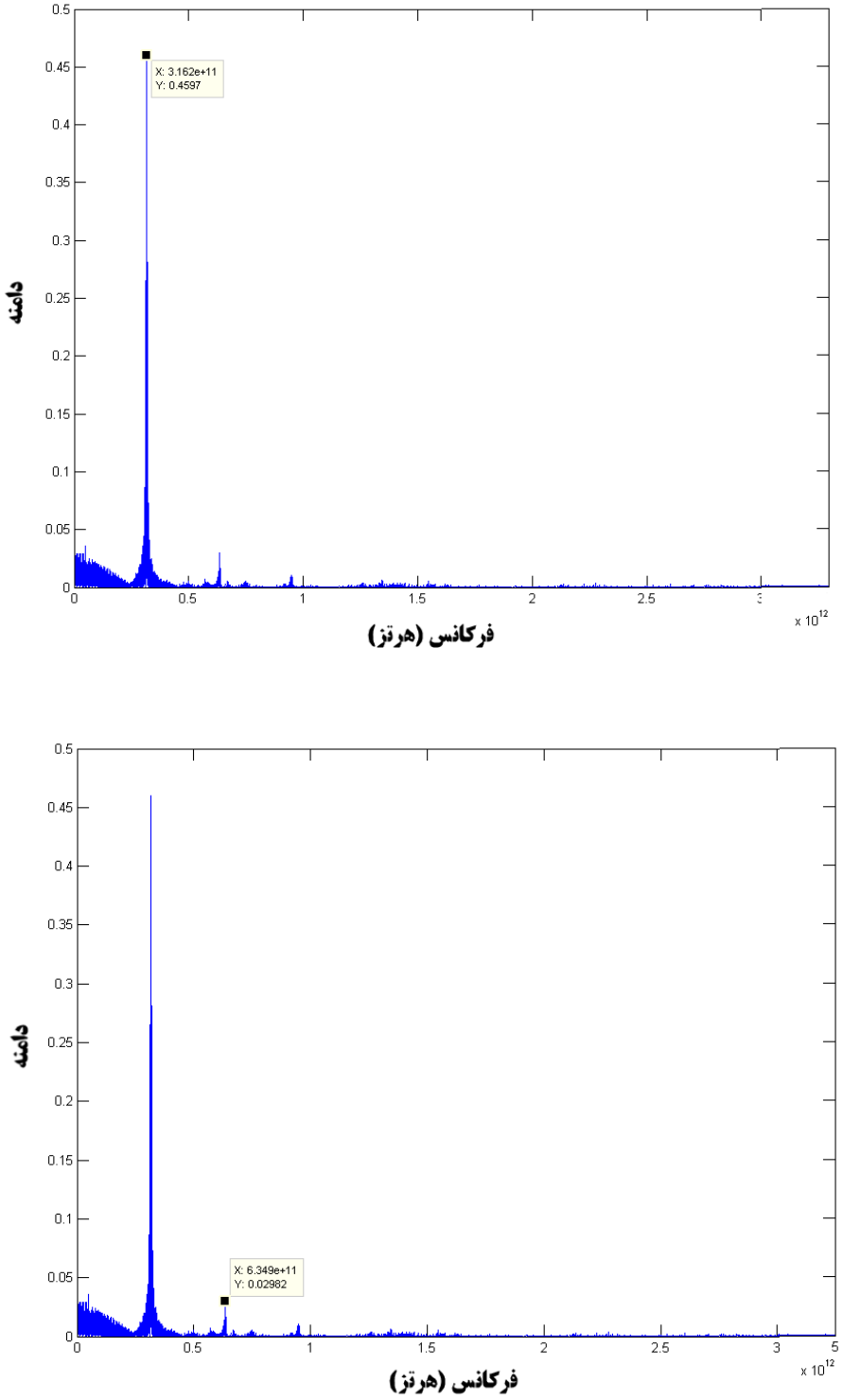
نکته دیگری که جدول (۲) نشان می‌دهد این است که با تغییر سطح مقطع نانومیله، فرکانس‌های طبیعی آن نیز تغییر می‌کند. به بیان دیگر، فرکانس‌های طبیعی محوری نانومیله وابسته به سطح مقطع نانومیله می‌باشند. مجددا به رابطه (۱) اشاره می‌شود. همان‌طور که این رابطه نشان می‌دهد فرکانس‌های طبیعی محوری میله در مقیاس ماکرو، مستقل از سطح مقطع میله می‌باشد این درحالیست که برای نانومیله، این نتیجه بدست نیامده است. لذا مجددا همان دلایلی که پیشتر ذکر شد مجددا به عنوان دلایل این پدیده، ذکر می گردد و برای جلوگیری از تکرار، از بیان آنها صرفنظر می‌شود.

نکته پایانی که از جدول (۲) قابل بیان است این است که در بین نتایج، مواردی مشاهده می‌شود که روند تغییرات فرکانس بر حسب طول یا سطح مقطع را رعایت نمی‌کند. دلیل این پدیده را می‌توان به نوع شبیه‌سازی و نحوه اعمال جابجایی اولیه به نانومیله دانست و هم اینکه، مواد نانومقیاس، بدلیل داشتن خواص وابسته به اندازه، نمی‌توان بصورت دقیق انتظار رفتار مشخصی از آن‌ها داشت. لذا نیاز است بررسی‌های دقیق‌تر و بیشتری برای دست یافتن به یک نتیجه کلی انجام شود.

شکل ۲. الگوریتم کد نوشته شده در نرم‌افزار لمپس.



شکل ۳. یک نمونه از جابجایی محوری اتم واقع در سر آزاد نانومیله



شکل ۴. نمودارهای دامنه بر حسب فرکانس بدست آمده با استفاده از تبدیل فوریه سریع.

جدول ۲. فرکانس های طبیعی محوری اول و دوم نانومیله به ازای ابعاد مختلف

طول (نانومتر)	سطح مقطع (نانومتر مربع)	فرکانس اول (GHz)	فرکانس دوم (GHz)	نسبت فرکانس دوم به اول
۶	۰٫۸×۰٫۸	۳۱۶٫۲	۶۳۴٫۹	۲٫۰۰۸
۶	۱٫۶×۱٫۶	۱۶۱٫۲	۳۱۵٫۱	۱٫۹۵۵
۷	۰٫۸×۰٫۸	۲۹۸٫۲	۵۶۶٫۱	۱٫۸۹۸
۷	۱٫۶×۱٫۶	۱۷۸٫۲	۲۶۷٫۳	۱٫۵
۸	۰٫۸×۰٫۸	۲۴۱٫۸	۴۸۶٫۱	۲٫۰۱
۸	۱٫۶×۱٫۶	۱۶۱٫۱	۲۰۶٫۸	۱٫۲۸۴
۹	۰٫۸×۰٫۸	۲۲۰٫۵	۴۴۱	۲
۹	۱٫۶×۱٫۶	۱۴۵	۲۷۹٫۲	۱٫۹۲۶
۱۰	۰٫۸×۰٫۸	۲۰۰٫۳	۴۰۰٫۶	۲
۱۰	۱٫۶×۱٫۶	۱۳۳٫۷	۲۶۴٫۷	۱٫۹۸۰

۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، فرکانس‌های طبیعی محوری اول و دوم نانومیله‌های آلومینیومی یکسرگیردار-یکسر آزاد، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استخراج شده‌اند. بدین منظور، نانومیله‌هایی با دو سطح مقطع متفاوت و چهار طول مختلف در نرم‌افزار لمپس شبیه سازی شده‌اند. نتیجه مهمی که از این پژوهش حاصل شده است این است که برخلاف تئوری‌های کلاسیک که فرکانس‌های محوری میله ماکرو مقیاس را مستقل از سطح مقطع آن گزارش می‌کند اما نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان داد که فرکانس‌های طبیعی محوری میله نانومقیاس به سطح مقطع آن وابسته می‌باشد. نکته مهم دیگر این است که بر اساس تئوری‌های کلاسیک، نسبت فرکانس دوم به فرکانس اول محوری میله ماکرو مقیاس، ۳ می‌باشد اما نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان داد که این نسبت برای میله نانومقیاس، عدد ثابتی نبوده و تقریبا می‌توان آن را ۲ درنظر گرفت. این تفاوت‌های برجسته بین نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و نتایج تئوری‌های کلاسیک، اهمیت نتایج حاصل از این پژوهش را نشان می‌دهد و متذکر می‌شود برای طراحی سیستم‌های نانوالکترومکانیکی، بررسی‌ها باید دقیق‌تر و توسط روش‌های غیرتئوری انجام شود.

مراجع

1. N. S. S. Singh, A. B. Ali, S. Babadoust, R. A. Hussein, S. Salahshour, S. Baghaei, S. M. Sajadi, "Mechanical performance of aluminum/copper/aluminum nanocomposite at different temperatures using molecular dynamics simulation", *Composites Part C* 16, 100572, (2025).
2. R.-K. Dong, Z. Mei, F.-Q. Zhao, S.-Y. Xu, X.-H. Ju, "Molecular dynamics simulation on the reaction of nano-aluminum with water: size and passivation effects", *RSC advances* 9, 41918-41926, (2019).
3. X. Zhou, F. El Gabaly, V. Stavila, M. Allendorf, "Molecular dynamics simulations of hydrogen diffusion in aluminum", *The Journal of Physical Chemistry C* 120, 7500-7509, (2016).
4. H. Mei, Q. Liu, L. Liu, X. Lai, W. She, P. Zhai, "Molecular dynamics simulations of the microstructure of the aluminum/alumina interfacial layer", *Applied Surface Science* 324, 538-546, (2015).
5. S. Solhjoo, A. Simchi, H. Aashuri, "Molecular dynamics simulation of melting, solidification and remelting processes of aluminum", *Iranian Journal of Science and Technology: Transactions of Mechanical Engineering* 36, 13-23, (2012).