



بررسی اثر جنس قطعه در فرآیند نانوفروروندگی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

نفیسه مهدیار¹، سید وحید حسینی^{2*}

1- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک و مکاترونیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران

2- استادیار، مهندسی مکانیک و مکاترونیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران

* دانشگاه صنعتی شاهرود، صندوق پستی 3619995161، v_hosseini@shahroodut.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل
دریافت: 15 شهریور 1400
داوری اولیه: 12 مهر 1400
پذیرش: 3 آذر 1400

کلیدواژگان:

نانو فروروندگی
دینامیک مولکولی
سختی
جنس قطعه

چکیده

نانوفروروندگی ابزاری ارزشمند برای تعیین خصوصیات مکانیکی لایه‌های نازک است. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یک روش موثر برای مطالعه‌ی آزمایش نانوفروروندگی است. در این پژوهش، به منظور بررسی سختی فلزات مختلف، فرآیند نانو فروروندگی روی سه قطعه کار با جنس‌های نیکل، مس و آلومینیوم به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مطالعه می‌شود. طبق منحنی‌های نیرو-جابجایی، نیکل و آلومینیوم به ترتیب بیشترین و کمترین نیرو را به ابزار اعمال می‌کنند. بر اساس منحنی سختی-جابجایی بدست آمده برای سه قطعه، آلومینیوم کمترین و نیکل بیشترین سختی را دارند. منحنی نیرو-جابجایی آلومینیوم و سختی-جابجایی نیکل با منحنی نیرو-جابجایی آلومینیوم و سختی-جابجایی نیکل تحقیقات گذشتگان تعیین اعتبار شد. نتایج شبیه‌سازی تغییر فاز اتم‌ها نشان داد که تغییر شکل در نیکل عمدتاً به صورت پلاستیک و در آلومینیوم الاستیک-پلاستیک است. انباشتگی اتمی بعد از اتمام فرآیند روی سطح مس با نتایج تجربی و شبیه‌سازی المان محدودی تحقیق گذشتگان تعیین اعتبار شد. با شبیه‌سازی عیوب کریستالی در قطعات مشخص شد در عمق و بارگذاری یکسان، توزیع عیوب کریستالی در آلومینیوم علاوه بر ناحیه‌ی فروروندگی، در سطح قطعه و لایه‌های زیرین فروروندگی هم وجود دارد در حالی پراکندگی عیوب در مس و نیکل کمتر است. حرکت نابجایی‌ها بعنوان عامل اصلی ایجاد لغزش و تغییر شکل در قطعات بررسی شد.

Investigation of the Effect of Substrate Material in Nano-indentation Process using Molecular Dynamics Simulation

Nafise Mahdiyar, Seyed Vahid Hosseini*

Faculty of Mechanical And Mechatronics Engineering, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran

* P.O.B 3619995161, Shahrood, Iran, v_hosseini@shahroodut.ac.ir

Article Information

Original Research Paper
Received: 6 September 2021
First Decision: 4 October 2021
Accepted: 24 November 2021

Keywords:

Nano-indentation
Molecular Dynamics
Hardness
Substrate materia

Abstract

Nano-indentation is a valuable method for determining the mechanical properties of thin films. In this paper, in order to investigate the hardness of different metals, the nano-indentation process on three workpieces with nickel, copper and aluminum is studied by simulating molecular dynamics. According to the force-displacement curves, nickel and aluminum apply the most and the least force to the indenter, respectively. Based on the hardness-displacement curve obtained for the three components, aluminum has the lowest and nickel the highest hardness. The force-displacement curve of aluminum and hardness-displacement curve of nickel was validated by the force-displacement curve of aluminum and hardness-displacement of nickel in the previous study. The results of atomic phase transfer simulation showed that the deformation in nickel is mainly plastic and in aluminum elastic-plastic. Atomic accumulation was validated after the completion of the process on the copper surface with experimental results and simulation of finite element research of the past. By simulating crystal defects in workpieces, it was found that at the same depth and load, the distribution of crystal defects in aluminum, in addition to the depression area, is also present in the surface of the part and the underlying layers, while the dispersion of defects in copper and nickel is less. Dislocation motion was investigated as the main cause of slipping and deformation in workpieces.

1- مقدمه

شناسایی مواد استفاده می‌شود. متداول‌ترین خواصی که برای یک ماده تعریف می‌شود عبارتند از: تنش، انعطاف‌پذیری، سختی، مقاومت در برابر ضربه و مقاومت به شکست. خواص مکانیکی قطعه از طریق انجام آزمایش‌های مربوطه بدست می‌آیند، سپس برای کاربرد مورد نظر استفاده می‌شوند. یکی از

خواص مکانیکی یک ماده واکنش آن نسبت به بار اعمال شده را نشان می‌دهد. با استفاده از خواص مکانیکی، دامنه سودمندی و عمر خدمتی که می‌توان از ماده انتظار داشت تعیین می‌شود. همچنین از خواص مکانیکی برای کمک به طبقه بندی و

Please cite this article using:

N. Mahdiyar, S. V. Hosseini, Investigation of the Effect of Substrate Material in Nano-indentation Process using Molecular Dynamics Simulation, Iranian Journal of Manufacturing Engineering, Vol. 8, No. 10, pp. 1- 15, 2022 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

بینش بیشتری نسبت به رفتار واقعی مواد بدست آورد [7]. میلان و همکاران با بررسی اثر اندازه‌ی دانه‌ی 21 کریستال مختلف در فرآیند نانو فروروندگی نشان دادند که کاهش اندازه‌ی دانه منجر به افزایش سختی و کاهش انعطاف پذیری می‌شود [8]. یکی از روش‌هایی که می‌تواند در فهم پدیده‌هایی در ابعاد نانو موثر باشد، روش شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی است. فنگ و همکاران، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی تأثیرات دما در فرآیند نانو فروروندگی، با استفاده از ابزار صلب الماس و قطعه کار مس² در سرعت بارگذاری-باربرداری ثابت پرداختند و به این نتایج رسیدند که در عمق مشخص فرورفتگی، با افزایش دما نیروی فروروندگی کاهش می‌یابد و مقدار تغییر شکل پلاستیک قطعه افزایش یافته و باعث می‌شود قطعه‌کار از ساختار کریستالی اصلی به ساختار بی‌نظم تغییر فاز دهد. هم‌چنین افزایش دما، باعث کاهش سختی و مدول یانگ می‌شود [9]. پینگ و همکاران، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تأثیر تغییرات نرخ بارگذاری فرآیند نانو فروروندگی را در فیلم نازک آلومینیوم روی قطعه سیلیکون بررسی کردند. نتایج نشان داد وقتی سرعت فروروندگی پایین است (50 m/s)، تغییر شکل زیادی روی فیلم آلومینیوم ایجاد نمی‌شود. در حالی که در سرعت بالا (250m/s) نیرو از طریق فیلم به قطعه منتقل شده و جابجایی و تغییر شکل بزرگ‌تری ایجاد شد [10]. یعقوبی و همکاران شبیه‌سازی فروروندگی فیلم تک کریستال نیکل³ روی بستر سیلیکونی را با شرایط مرزی و ضخامت‌های متفاوت انجام دادند. مشاهده شد که تأثیر شرایط مرزی روی بستر الاستیک، به ضخامت فیلم و شعاع ابزار کروی بستگی دارد به این طریق که با کاهش شعاع ابزار و افزایش ضخامت فیلم، اثر شرایط مرزی کمتر می‌شود [11]. چونگ و همکاران با روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تغییر فاز سیلیکون تک کریستال تحت نانو فروروندگی را بررسی کردند و به این نتیجه رسیدند که در اثر بار ابزار فرورونده و از طریق صاف شدن ساختار تتراهدرا، ساختار مکعب الماسی سیلیکون به ساختار تتراگونال تبدیل شد. بعد از باربرداری، بستر با از دست دادن بخشی از اتم‌ها، از ساختار تتراگونال به یک ساختار بی‌شکل تبدیل شده و با نوبت دوم بارگذاری، دوباره ساختار بی‌شکل به ساختار تتراگونال تبدیل شد [12]. نایر و همکاران برای بررسی اثر پتانسیل‌های بین اتمی و شرایط مرزی بستر، سرعت و شعاع ابزار، نانو فروروندگی را روی فیلمی به ضخامت

رایج‌ترین روش‌ها برای اندازه‌گیری خواص مکانیکی مواد در ابعاد نانو، آزمایش نانو فروروندگی است [1]. مدول الاستیک و سختی از جمله پارامترهایی است که با این روش محاسبه می‌شوند. سختی، مقاومت ماده در برابر تغییر شکل پلاستیک موضعی در اثر نفوذ یک ابزار فرورونده با اعمال نیروی مشخص تعریف می‌شود [2]. در طی آزمایش نانو فروروندگی، ابزاری که خصوصیات مکانیکی آن شناخته شده باشد (اغلب یک ماده بسیار سخت مانند الماس) به نمونه‌ای که خصوصیات آن ناشناخته است، فشار داده می‌شود. با افزایش فرورفتن ابزار در داخل نمونه، بار قرار داده شده روی نوک ابزار افزایش می‌یابد و به زودی به یک مقدار تعریف شده توسط کاربر می‌رسد. در این مرحله، بار ممکن است مدت کوتاهی ثابت نگه داشته شود و سپس برداشته شود. سختی با تقسیم حداکثر بار بر مساحت منطقه تورفته‌ی باقی‌مانده بدست می‌آید [3].

مطالعات گسترده‌ای در حوزه آزمایش نانو فروروندگی و خواص مکانیکی حاصل از آن صورت گرفته است. راتینام و همکاران آزمایش نانو فروروندگی آلومینیوم¹ تک کریستال با صفحه‌ی کریستالی (100) را در دو دمای 265 K و 388 K انجام دادند. نتایج نشان داد با افزایش درجه حرارت فرآیند، افزایش قابل توجهی در عمق نفوذ و کاهش در سختی، مدول الاستیک و برگشت پذیری الاستیک مشاهده شد. هم‌چنین مشاهده شد افزایش دما باعث افزایش قابل توجه در نرمی آلومینیوم می‌شود [4]. در برخی سیستم‌های اندازه‌گیری سختی، از ابزاری کروی بعنوان فرورونده استفاده می‌شود. زمانی که سختی-سنجی در ابعاد نانو صورت می‌گیرد، در واقع هیچ ابزاری با نوک کاملاً تیز وجود ندارد و همیشه کمی انحنا دارد. به همین جهت در بسیاری از تحقیقات، ابزار را کروی در نظر می‌گیرند. در برخی مقالات فرض شده است که سختی ابزار نسبت به نمونه خیلی زیاد است و از رفتار تغییر شکل ابزار صرف نظر می‌کنند [5, 6]. در تحقیقات گذشتگان تأثیر هندسه‌ی ابزار روی تغییر شکل قطعه بررسی شده است. طبق نتایج، شکل فرورونده بطور قابل توجهی در فرآیند نانو فروروندگی تأثیر گذار است. سوین و همکاران به بررسی تأثیر تفاوت ابزار نوک تیز و کروی در فرآیند نانو فروروندگی پرداختند. نتایج نشان داد استفاده از ابزار فرورونده‌ی کروی می‌تواند مزایایی نسبت به نوک تیز داشته باشد از جمله اینکه مشکل تماس در نوک ابزار را کاهش می‌دهد. بعلاوه می‌توان با این ابزار تغییر رفتار الاستیک به پلاستیک یا شکننده را در حین فرورفتگی با وضوح بالاتری دنبال کرد و

² Copper (Cu)³ Nickel (Ni)¹ Aluminum (Al)

الماس، بزرگ‌تر از ورق گرافیتی است [18]. لو و همکاران با استفاده از ابزار نیم‌کره و هرمی‌شکل فرآیند نانو فروروندگی را شبیه‌سازی کردند. نتایج نشان داد ابزار نیمه کرومی نیروی بیشتری از ابزار هرمی اعمال می‌کند [19]. حسینی و همکاران با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند ماشینکاری مس، اثر قطر ابزار در نیروهای وارد بر ابزار را بررسی کردند. نتایج ایشان نشان داد نیروی عمودی وارد بر ابزار بشدت به هندسه‌ی ابزار وابسته است به این نحو که با افزایش قطر ابزار نیروی عمودی افزایش یافت. در حالی که نیروی برشی وابستگی اندکی به هندسه‌ی ابزار داشت [20]. جاو و همکاران با دو ابزار نوک تیز و نوک گرد، فرآیند نانوخراش را روی نیکل شبیه‌سازی کردند. نتایج ایشان نشان داده در مرحله‌ی فروروندگی اگر ابزار نوک تیز باشد تنها ناحیه‌ی کوچکی از منطقه‌ی تحت فرورونده تغییر شکل می‌دهد در حالی که در استفاده از فرورونده‌ای که نوک آن گرد باشد باعث ایجاد نابجایی بیشتری در قطعه می‌شود و منطقه‌ی تغییر شکل بزرگتری در بستر ایجاد می‌شود. حرکت نابجایی‌ها در نیروی نانوفروروندگی تأثیرگذار است. نابجایی‌ها انرژی آزاد می‌کنند و ماده را ضعیف می‌کنند و نیروی فروروندگی کمتر می‌شود. نتایج نشان داده است نیروی راستای عمود بر قطعه در استفاده از ابزار نوک تیز کمتر از ابزار با نوک گرد است. نیرو یک پارامتر خیلی مهم در محاسبه‌ی سختی است و در صورت استفاده از هر نوع هندسه‌ای برای فرورونده نتایج می‌تواند متفاوت باشد. انتظار می‌رود فرورونده‌ی نوک تیز سختی کمتری را برای قطعه نشان بدهد [21]. گول و همکاران شبیه‌سازی نانو فروروندگی پلی‌سیلیکون و سیلیکون تک‌کریستال را به منظور تحلیل مکانیزم تغییرشکل، با ابزارهای برکویچ هرمی و کرومی برای هر دو ساختار انجام دادند. نتایج نشان داد در تمام موارد، در فشار بالا انتقال فاز صورت می‌گیرد. با این حال بین سیلیکون تک‌کریستال و پلی‌سیلیکون در شیوه انتقال فاز و مقدار آن تفاوت وجود دارد. در پلی‌سیلیکون انتقال فاز در مرزدهانه‌ها بیشتر از ناحیه فرورفتگی است [22]. ردی و همکاران نانو فروروندگی فیلم آلومینیوم-نیکل-کبالت روی بستر آلومینیوم را شبیه‌سازی کرده و خواص مکانیکی فیلم را به ازای سرعت‌های متفاوت ابزار بدست آوردند. نتایج نشان داد سرعت ابزار بشدت در سختی فیلم تأثیرگذار است، به این نحو که افزایش سرعت ابزار باعث افزایش سختی بستر می‌شود، علاوه بر این افزایش سرعت باعث شد مقدار توده‌های تشکیل شده روی بستر کاهش پیدا کند [23]. ژائو و همکاران به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی تغییرشکل سیلیکون با ابزار الماس

20nm شبیه‌سازی کردند و دریافتند که سرعت بالا و شعاع‌های مختلف ابزار تأثیر کمی بر سختی دارند. در حالی که استفاده از پتانسیل بین اتمی و شرایط مرزی متفاوت، تفاوت بسزایی در سختی و عمق فروروندگی ایجاد می‌کند [13]. لیو و همکاران، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از فیلم‌های سخت و نرم (الماس و طلا)، تحت نانو فروروندگی را در دما، بار و نرخ بارگذاری متفاوت انجام دادند. نتایج نشان داد که در هر دو جنس فیلم‌ها، هنگامی که دما افزایش یافت، در اثر افزایش سرعت نواسانات اتمی، قطعه دچار رفتار نرمی شده و باعث کاهش مدول یانگ شد و با افزایش بار و نرخ بارگذاری، سختی و مدول یانگ افزایش یافت [14]. چوکیک و زین‌تارسکی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ارتباط بین ساختار فیلم‌های تشکیل شده روی قطعه و تغییر شکل پلاستیک ایجاد شده در آن‌ها را بررسی کردند. یک فیلم پوششی نیکل روی طلا با ساختار هگزاگونال فشرده و یک فیلم نیکل روی بستر مس، با ساختار مکعب مرکز پر ایجاد شد. مشاهده شد که افزایش سختی در فیلم‌های نیکل باعث کاهش ضخامت لایه حرارتی می‌شود. همچنین بین ساختار فیلم‌ها و توزیع تغییر شکل پلاستیک روی آن‌ها همبستگی دیده شد. به این صورت که در نیکل/مس، تغییر شکل از مرکز فرورفتگی گسترش پیدا کرد ولی در نیکل/آلومینیوم علاوه بر مرکز، در مرزدهانه‌ها هم گسترش تغییرشکل وجود داشت [15]. شوی‌اکسو و همکاران فرآیند نانو فروروندگی و نانو خراش را با استفاده از ابزار صلب الماسی و قطعه‌کار با آلیاژ کربن¹ تیتانیوم-آلومینیوم شبیه‌سازی کردند. طی این شبیه‌سازی مدول یانگ 157GPa گزارش شد که با نتایج سایر گروه‌ها مطابق بود. همچنین نشان دادند که سرعت ابزار در محدوده‌ی 1-15m/s، تأثیر کمی بر مدول یانگ دارد و در طول لغزش بین نیروی اصطکاک و بار نرمال رابطه‌ی خطی وجود دارد [16]. والش و همکاران فروروندگی فیلم سیلیکون نیتريد با ساختار کریستالی و بی‌شکل را شبیه‌سازی کردند. نتایج نشان داد در عمق فرورفتگی یکسان، بار اعمال شده به ساختار کریستالی بیشتر از ساختار بی‌شکل است [17]. فنگ و همکاران فرآیند نانو فروروندگی را با استفاده از ابزار مخروطی شکل کربنی روی قطعه الماس و همچنین ورق گرافیتی، در دما و سرعت‌های متفاوت شبیه‌سازی کردند. نتایج نشان داد که با افزایش سرعت فروروندگی و زاویه مخروطی ابزار، بیشینه نیروی تماس، افزایش یافت و با افزایش دما این نیرو کاهش یافت. همچنین نشان دادند بیشینه نیروی تماس در سرعت و دمای یکسان، برای قطعه

¹ Carbon (C)

سختی فلزات، فرایند نانو فروروندگی برای سه قطعه‌ی بدون عیب با جنس‌های نیکل، مس و آلومینیوم با استفاده از ابزار صلب الماس و به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی و نتایج حاصل از آن گزارش شده است. با توجه به اینکه در مقیاس نانو نسبت سطح به حجم قطعه بیشتر از ماکرو است انتظار می‌رود مقدار سختی فلزات در مقیاس نانو بیشتر از ماکرو باشد و این تفاوت در این مقاله نشان داده شده است. از زمانی که ابزار فرورونده وارد قطعه شده و به جای اول خود باز می‌گردد قطعه دچار تغییر شکل و عیوبی می‌شود که در مساحت اثر باقی مانده از فروروندگی تأثیرگذار است. در این تحقیق چگونگی ایجاد تغییرشکل در ریز ساختار سه فلز مختلف و اینکه چه نوع عیوبی باعث خرابی ماده می‌شوند نشان داده شده و با مقایسه نتیجه‌ی هر یک از آن‌ها توضیح داده می‌شود که جنس بعنوان یک ویژگی ذاتی هر فلز، چگونه در سختی آن تأثیر می‌گذارد.

2- روش تحقیق

در این تحقیق، شبیه‌سازی نانو فروروندگی با استفاده از بسته‌ی نرم‌افزاری دینامیک مولکولی لمپس¹ انجام شد. برای این منظور ابتدا شبکه اتمی تولید و سپس با گذشت زمان مناسب به پایداری رسیده است. فرایند نانوفروروندگی با استفاده از نمونه‌های نیکل، مس، آلومینیوم و یک ابزار فرورونده‌ی کرومی الماس تک کریستال، انجام شده است که در ادامه با جزئیات ارائه می‌شود.

2-1- آماده سازی نمونه

شکل 1 نمایی از مدل محاسباتی فرآیند نانو فروروندگی را نمایش می‌دهد. ساختار کریستالی، مشخصات مکانیکی، فیزیکی و اتمی قطعه‌کارها در جدول 1 نشان داده شده است. ابعاد هر سه نمونه $8/45\text{nm} \times 8/45\text{nm} \times 6/34\text{nm}$ است. ابزار کرومی از جنس الماس، با قطر ثابت 4nm و تعداد 5889 اتم کربن می‌باشد که در فاصله 3nm بالای قطعه قرار دارد. فرآیند فروروندگی در سرعت ثابت 100m/s برای ابزار انجام می‌شود.

2-2- میدان‌های نیرو

در این شبیه‌سازی از چهار نوع اتم نیکل، مس، آلومینیوم و کربن و سه نوع تابع پتانسیل بین اتمی، برای برهم‌کنش بین اتم‌ها استفاده شده است.

پرداختند. در ناحیه فرورفتگی، سیلیکون از ساختار مکعب الماسی به تتراگونال تغییر پیدا کرد و بعد از بارگذاری دوباره به ساختار قبل خود بازگشت و فقط نواحی که دچار تغییر شکل پلاستیک شدند تغییر ساختار ندادند و به صورت حفره‌ای با عمق کمتر باقی ماندند [24]. کیم و او، شبیه‌سازی نانو فروروندگی را روی سطوح (100) و (111) انجام دادند و دریافتند که با بارگذاری روی سطوح (111)، اتم‌ها در طول جابجایی ابزار دارای ساختار بی‌شکل می‌شوند [25]. لین و همکاران اثر جهت‌گیری کریستالی و تغییر فاز اتم‌ها را شبیه‌سازی کردند و دریافتند که فروروندگی روی سطح (110) باعث گسترش انتقال فاز و لغزش بیشتر نسبت به سطح (001) می‌شود [26].

ژو و همکاران اثر وجود حفره در فرآیند نانوفروروندگی فیلم نازک نیکلی را به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی کردند. در این شبیه‌سازی تأثیر عمق و شعاع حفره‌های متفاوت بررسی شد. نتایج ایشان نشان داد وجود حفره باعث نرم‌تر شدن قطعه شده و باعث می‌شود در بارگذاری یکسان، عمق فرورفتگی بیشتری نسبت به قطعه بدون عیب ایجاد شود و مشخص شد که در طی فرآیند فروروندگی حفره فروریخته و اگر عمق فروروندگی به اندازه‌ی کافی بزرگ نباشد، حفره ناپدید می‌شود. همچنین نشان دادند که عمق فروروندگی ابزار برای از بین بردن حفره به اندازه و عمق حفره بستگی دارد. [27].

حسینی و همکاران در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند ماشینکاری مس تک کریستال به بررسی تأثیر وجود حفره در قطعه‌کار، در نیروهای وارد بر ابزار و مکانیسم تغییر شکل اتمی قطعه‌کار پرداختند. نتایج ایشان نشان داد با استفاده از قطعه‌ی معیوب، نیروی عمودی وارد بر ابزار نسبت به قطعه‌ی بدون عیب کاهش چشم‌گیری یافت و با اعمال فشار کمتری، اتم‌های دیواره‌ی حفره تغییر شکل داده و باعث کاهش نیروی عمودی شدند [28].

سختی فلزات در ابعاد ماکرو با روش‌های مختلف سختی-سنجی اندازه‌گیری شده و تفاوت در سختی سه فلز نیکل، مس و آلومینیوم به این ترتیب که نیکل بعنوان فلز با سختی بیشتر و آلومینیوم بعنوان فلز با سختی کمتر است، مشخص شده است. بررسی نانو سختی‌سنجی تجربی در مطالعات گذشتگان انجام شده و برخی از آن‌ها به روش دینامیک مولکولی، شبیه‌سازی و مطالعه کرده‌اند. اما در سایر مطالعات دینامیک مولکولی بررسی تفاوت سختی فلزات در ابعاد نانو برای جنس‌های متفاوت دیده نشده است. در این مقاله، به منظور بررسی اثر جنس قطعه در

¹ LAMMPS

زیاد فلزات هم با تغییر مکان نسبی اتم‌ها صورت می‌گیرد و جهت پیوند را عوض می‌کند ولی پیوند ضعیف نمی‌شود، نمی‌شکند و پا بر جا می‌ماند. این رفتار باعث می‌شود که فلزات نرم باشند. هدایت الکتریکی و حرارتی آنها هم بعلا ساختار پیوند آنها می‌باشد. حسینی و همکاران اثر پتانسیل بین اتمی قطعه کار را به کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی فرآیند ماشینکاری مس، بررسی کردند. نتایج ایشان نشان داد تابع پتانسیل EAM² برای مدل سازی فلزات تک عنصری و یا آلیاژی جواب‌های دقیق تری تامین می‌کند و قابلیت محاسبه خواص الاستیک و پلاستیک، تولید عیوب و پیش‌بینی مکانیزم شکست در فلزات را دارد. همچنین با استفاده از این تابع پتانسیل می‌توان خواص سطحی را از جمله انرژی سطحی، بازسازی سطحی و خواص چسبندگی سطحی مدل کرد. در فلزات می‌توان چگالی کل الکترون‌ها را با استفاده از اصل برهم نهی خطی از توزیع اتم‌ها تقریب زد و این موضوع پایه تابع پتانسیل EAM می‌باشد [30]. در سال 1984 داو و باسکس انرژی پتانسیل کل فلزات را با استفاده از رابطه (1) بدست آوردند [31, 32].

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

در واقع این تابع پتانسیل از جمع انرژی ناشی از چگالی الکترونی پس‌زمینه $f_i(\rho h_i)$ و انرژی پتانسیل جفتی $\phi_{ij}(R_{ij})$ بدست آمده است. در این رابطه R_{ij} فاصله بین یون‌ها و f_i انرژی موجود بین اتم i با الکترون‌های زمینه که با چگالی الکترونی محلی ρh_i توزیع شده‌اند را نشان می‌دهد. انرژی پتانسیل جفتی از نوع الکترواستاتیکی دفعی است، که برای یون‌های مثبت فلزی در نظر گرفته می‌شود. این انرژی بصورت صریح به چگالی الکترون‌ها وابسته نیست [33]. با استفاده از روابط (2) و (3) می‌توان انرژی پتانسیل جفتی را محاسبه کرد [31, 32].

$$\phi_{ij}(R_{ij}) = Z_i(R_{ij}) Z_j(R_{ij}) / R_{ij} \quad (2)$$

$$Z_{ij}(R_{ij}) = Z_0(1 + \beta R_{ij}^\theta) e^{-\alpha R_{ij}} \quad (3)$$

در این رابطه $Z_{ij}(R_{ij})$ شارژ الکترونی موثر میان دو یون را نشان می‌دهد و شارژ موثر را می‌توان با استفاده از بار الکترون‌های لایه‌های خارجی Z_0 و ضرایب ثابت θ و β ، α بدست آورد. مقدار این ضرایب برای فلزات مختلف بدست آمده است [32]. تابع $f_i(\rho h_i)$ انرژی موجود بین اتم i با الکترون‌های زمینه که با چگالی الکترونی محلی توزیع شده‌اند را نشان

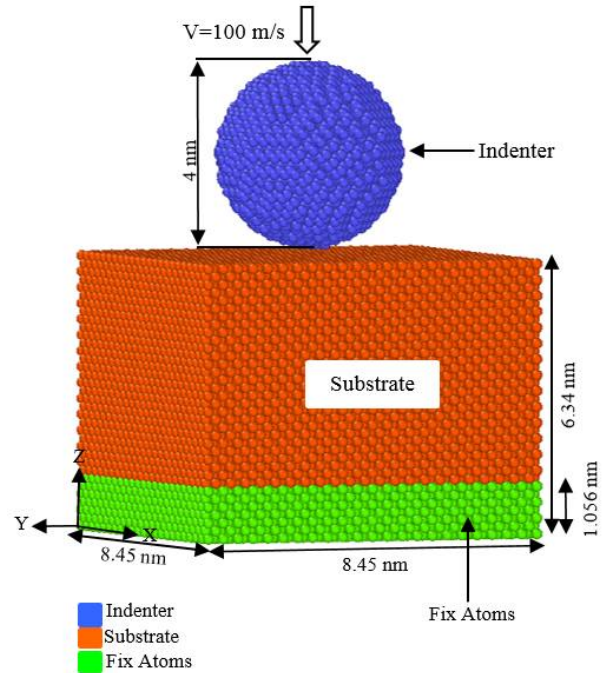


Fig. 1 View of the nano-indentation computational model

شکل 1 نمایی از مدل محاسباتی نانو فروروندگی

جدول 1 مشخصات کریستالی، مکانیکی، فیزیکی و اتمی قطعه کار [29]

Table 1 Crystalline, mechanical, physical and atomic properties of the workpiece [29]

مشخصه	نیکل	مس	آلومینیوم
مشخصات کریستالی	شبکه‌ی کریستالی	Fcc	Fcc
ثابت شبکه (nm)	0/352	0/3165	0/3986
صفحه کریستالی	(111)	(111)	(111)
مدول یانگ (GPa)	200	110-128	70
مدول برشی (GPa)	76	48	26
مشخصات مکانیکی	رسانایی گرمایی (W/(m·K))	90/9	401
انبساط حرارتی (μm/(m·K))	13/4	16/5	23/1
مشخصات فیزیکی	فاز	جامد	جامد
چگالی (g/cm ³) در دمای 300 K	8/90	8/96	2/70
مشخصات اتمی	تعداد شعاع اتمی (pm)	124	128
جرم اتمی (u)	58/69	63/546	26/98

2-2-1- تابع پتانسیل فلزی

پیوندهای فلزی جهت‌دار نیستند یعنی خواص آن‌ها در کلیه جهات یکسان است. زیرا الکترون‌هایی که اتم‌ها را به یکدیگر متصل می‌کنند دارای موقعیت بخصوصی نیستند. کرنش

² Embedded atom model

¹ Face-centered cubic

ترسوف⁴ با استفاده از روابط (6) و (7) تعریف می شود [38].

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} V_{ij} \quad (6)$$

$$V_{ij} = f_c(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})] \quad (7)$$

در رابطه (7)، $f_c(r_{ij})$ ، $f_R(r_{ij})$ و $f_A(r_{ij})$ به ترتیب تابع قطع، پتانسیل جفتی دافعه و جاذبه هستند که به ترتیب با روابط (8 تا 10) محاسبه می شوند. b_{ij} نشان دهنده نوعی وابستگی است که می تواند نیروی جاذبه را نسبت به دافعه تقویت یا تضعیف کند که با استفاده از روابط (11 تا 13) محاسبه می شود.

$$f_c(r) = \begin{cases} 1 & : r < R - D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin\left(\frac{\pi(r-R)}{2D}\right) & : R - D < r < R + D \\ 0 & : r > R + D \end{cases} \quad (8)$$

$$f_R(r_{ij}) = A \exp(-\gamma_1 r_{ij}) \quad (9)$$

$$f_A(r_{ij}) = -B \exp(-\gamma_2 r_{ij}) \quad (10)$$

در رابطه (8)، R شعاع قطع پتانسیل بین اتمی و D تلرانس محدوده شعاع قطع، تعریف می شود به نحوی که، $R-D$ حداقل شعاع قطع پتانسیل و $R+D$ حداکثر شعاع قطع می باشد [39] و پارامترهای A و B در روابط (9) و (10) ثابت هستند.

$$b_{ij} = (1 + \beta^n \delta_{ij}^n)^{\frac{1}{2n}} \quad (11)$$

$$\delta_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) \exp(\gamma_3^m (r_{ij} - r_{ik})^m) \quad (12)$$

$$g(\theta) = \mu_{ijk} \left(1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{[d^2 + (\cos\theta - \cos\theta_0)^2]} \right) \quad (13)$$

در رابطه (12)، θ_{ijk} زاویه پیوندی بین بردارهای r_{ij} و r_{jk} است. پارامترهای بکار رفته در تابع پتانسیل ترسوف برای C-C مطابق [40] است.

2-3-3- شرایط مرزی و اولیه

در این شبیه سازی سه لایه ی زیرین از قطعه ثابت در نظر گرفته شده است تا در حین انجام فرآیند، دچار تغییر شکل نشوند. به منظور کاهش اثر مقیاس شبیه سازی، در راستای محورهای X و Y شرایط مرزی دوره ای⁵ تعریف شده است. از آنجا که باید سطح قطعه که فروروندگی در آن صورت می گیرد مشخص باشد، در جهت Z شرط مرزی دوره ای در نظر گرفته نمی شود. دمای کل فرآیند در دمای ثابت 300K تنظیم می شود و گام زمانی برابر 1 fs می باشد. ابتدا سیستم به مدت 5ps به پایداری

می دهد. در واقع این تابع، انرژی برهم کنش گروه های شامل چند ذره را در فلزات مدل سازی می کند. برای اینکه بتوان انرژی برهم کنش بین یک اتم با الکترون های موجود در ابر الکترونی اطراف آن را بدست آورد، باید چگالی این الکترون های مستقر در اطراف هر اتم را محاسبه کرد. برای فلزات می توان چگالی الکترونی محلی در اطراف یک اتم را با استفاده از اصل برهم نهی چگالی اتم های مجاور مطابق رابطه (4) بدست آورد.

$$\rho_i = \sum_{j=1, j \neq i} \rho_{ij}(R_{ij}) \quad (4)$$

در این رابطه ρ_{ij} چگالی الکترون هایی است که توسط اتم i با اتم j به اشتراک گذاشته شده است. این چگالی، تابع موقعیت بین اتم های i و j می باشد. این تابع با استفاده از توابع موجی هارتری-فوک¹ و با استفاده از عدد الکترون و چگالی الکترونی در لایه های اوربیتال s و d برای هر فلز بدست می آید. تابع $f_i(\rho h_i)$ یک تابع عمومی² است و فقط وابسته به چگالی الکترونی محلی است و به اینکه این چگالی الکترونی چگونه بوجود آمده است ارتباطی ندارد. برای استفاده از تابع پتانسیل EAM، طبق رابطه (1) نیاز است که مقادیر $f_i(\rho h_i)$ ، $\rho_{ij}(R_{ij})$ و $\phi_{ij}(R_{ij})$ با توجه به اینکه تابعی از Z_{ij} است، با استفاده از تئوری های موجود می توان مقادیر اولیه $Z_{ij}(R_{ij})$ را تخمین زد ولی برای اینکه تابع پتانسیل دقت کافی داشته باشد، نیاز است که مقادیر آنها با استفاده از آزمایش های تجربی بدست آید. برای ارتباط بین اتم های Ni، Cu و Al در بستر، تابع پتانسیل EAM با استفاده از رابطه (1) تعریف می شود [32,31].

2-2-2- برای برهم کنش بین اتم های C-Ni، C-Cu و C-Al تابع پتانسیل مورس³ از رابطه (5) استفاده شده است.

$$U = D \left[e^{-2\alpha(r_{ij}-r_0)} - 2e^{-\alpha(r_{ij}-r_0)} \right] \quad (5)$$

در این تابع D انرژی پیوستگی، α یک پارامتر منحصر بفرد برای مواد است که به انرژی کششی و مدول بالک ماده بستگی دارد و r_0 فاصله تعادلی بین اتمی می باشد [34]. پارامترهای تابع پتانسیل مورس برای برهم کنش کربن با فلزات نیکل، مس و آلومینیوم مطابق مراجع [35-37] است.

2-2-3- برای ارتباط بین اتم های C در ابزار، تابع پتانسیل

⁴Tersoff

⁵Periodic Boundary Conditions

¹Hartree-Fock Wave Function

²Universal Function

³Morse

از قطعه تحت نانو فروروندگی نمایش می‌دهد. بر این اساس، نیروی وارد بر قطعه در هر سه جنس قطعه کار، با افزایش جابجایی ابزار افزایش پیدا می‌کند اما میزان افزایش آن در سه جنس متفاوت است بطوریکه Al نسبت به Cu و Cu نسبت به Ni نیروی کمتری متحمل می‌شود. طبق نمودار نیرو-جابجایی در شکل‌های 2 و 3، بیشترین عمق فروروندگی درون آلومینیوم در هر دو مورد حدود 1/5 nm و بیشترین نیروی فروروندگی در هر دو مورد حدود 100nN است و میزان تغییرات نیرو در طول جابجایی ابزار تقریباً یکسان است. پس می‌توان اطمینان حاصل کرد که توابع پتانسیل بکار رفته در شبیه‌سازی حاضر درست عمل می‌کنند.

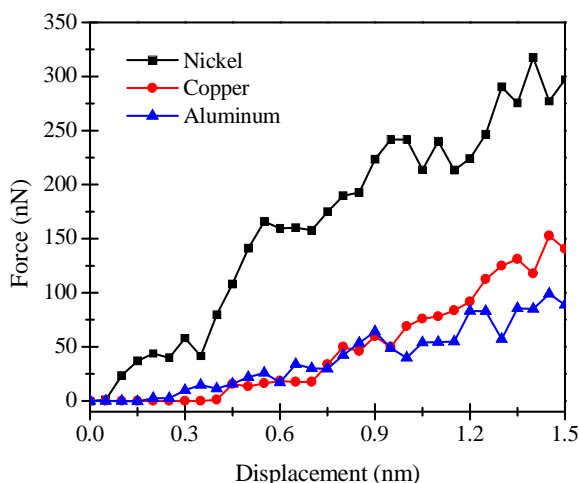


Fig. 3 Force-displacement curve in the process of nano-indentation with different metals

شکل 3 منحنی نیرو-جابجایی در فرآیند نانوفروروندگی با فلزات مختلف

3-2- محاسبه‌ی سختی

سختی یکی از مهم‌ترین پارامترهای مکانیکی مواد است که اندازه‌گیری آن با آزمایش نانو فروروندگی ممکن می‌باشد. شکل 4 شماتیک منحنی نیرو بر حسب جابجایی در فرآیند نانو فروروندگی نشان داده شده است. سختی H را می‌توان با استفاده از رابطه (14) محاسبه کرد [42].

$$H = F_{max}/A_c \quad (14)$$

$$A_c = \pi(2Rh_c - h_c^2) \quad (15)$$

$$h_c = h_{max} - 0/75 \left(\frac{F_{max}}{S} \right) \quad (16)$$

در رابطه‌ی (14)، 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 می‌باشد. A_c و h_c به ترتیب با استفاده از روابط (15) و (16) محاسبه می‌شوند. S و h_{max} به ترتیب شیب منحنی

می‌رسد. ابزار فرورونده تا عمق حدود 1/5nm درون قطعه کار نفوذ کرده و باز می‌گردد.

3- نتایج

در این مقاله از بررسی تأثیر هندسه‌ی فرورونده صرف نظر شده و تمام شبیه‌سازی‌ها با استفاده از ابزاری کروی به قطر 4nm انجام شد. نتایج حاصل از منحنی نیرو و سختی برحسب جابجایی، عیوب کریستالی و جابجایی اتمی گزارش شده و در مواردی با دو مقاله از تحقیقات گذشتگان مقایسه می‌شود.

3-1- منحنی نیرو برحسب جابجایی

کماندوری و همکاران رفتار آلومینیوم تک کریستال با جهت‌گیری‌های کریستالی متفاوت را در فرآیند نانوفروروندگی و نانوخرایش با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی کردند. نتایج نشان داد در عمق‌های فروروندگی پایین، میزان تغییر شکل پلاستیک کنترل می‌شود. هم‌چنین نشان داد در فرآیند نانو فروروندگی آلومینیوم دارای صفحات کریستالی (110)، جابجایی صفحات لغزش هم در جهت موازی با فروروندگی و هم عمود بر آن گسترش می‌یابد ولی در آلومینیوم با صفحات کریستالی (001)، فقط در جهت فروروندگی گسترش می‌یابد [41]. با توجه به اینکه عمق فروروندگی آلومینیوم با صفحات (110) و (111) یکسان بوده و مقادیر نیروی فروروندگی در هر دو مورد بسیار نزدیک است، می‌توان از نمودار نیرو-جابجایی فروروندگی در سطح (110) برای مقایسه با نمودار نیرو-جابجایی در مقاله‌ی حاضر استفاده کرد. نمودار نیرو-جابجایی مرجع [41] در شکل 2 نشان داده شده است.

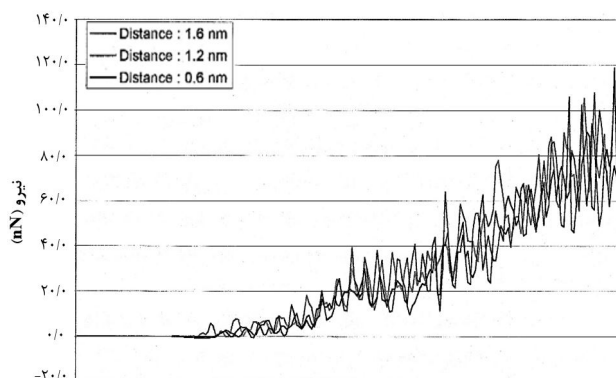


Fig. 2 Force-displacement curve in the process of nano-indentation for [41]

شکل 2 منحنی نیرو-جابجایی در فرآیند نانوفروروندگی آلومینیوم مرجع [41]

شکل 3 منحنی‌های نیرو-جابجایی را برای سه جنس متفاوت

بین دو منحنی سختی نیکل در شکل 5، در عمق نهایی که حداکثر بارگذاری اعمال شده است، طبق رابطه (17) محاسبه می‌شود.

$$PD = \frac{p-q}{p} \times 100 \quad (17)$$

در رابطه‌ی (17)، p مقدار سختی در مقاله حاضر است که مقدار آن حدود 28GPa و q مقدار سختی در مقاله مرجع [43] است که مقدار آن حدود 26GPa است. بر این اساس درصد تفاوت سختی برای دو منحنی سختی نیکل شکل 5، حدود 7% است.

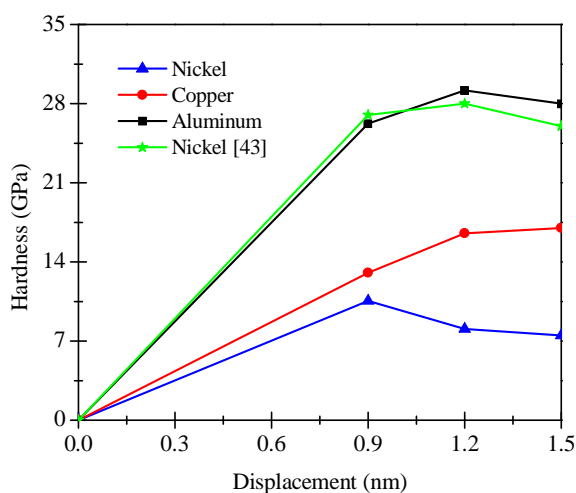


Fig. 5 Hardness-displacement curve in nano-indentation process with different metals

شکل 5 منحنی سختی-جابجایی در فرآیند نانوفروروندگی با فلزات مختلف

جدول 2 مقدار سختی تجربی نیکل، مس و آلومینیوم را با روش‌های برینل و ویکرز را در ابعاد ماکرو نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود در ابعاد بزرگ هم سختی نیکل بیشترین و سختی آلومینیوم کمترین است. همان‌طور که انتظار می‌رفت مقدار سختی بدست آمده در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به مراتب بیشتر از مقدار سختی مهندسی در ابعاد ماکرو باشد چرا که در مقیاس نانو نسبت سطح به حجم قطعه بیشتر از ماکرو است و به همین ترتیب تعداد اتم‌های درگیر در سطح بسیار بیشتر از مدل‌های تجربی در اندازه‌های بزرگ است. از آنجا که سختی بدست آمده با استفاده از فروروندگی به‌شدت وابسته به مساحت سطح نمونه است، می‌توان تفاوت در مقادیر سختی بدست آمده با استفاده از نانوفروروندگی و روش‌های سختی سنجی ابعاد بزرگ را درک کرد. لازم بذکر است که در شبیه‌سازی شرایط ایده‌آل برای فرآیند در نظر گرفته می‌شود ولی آزمایش تجربی با شرایط واقعی انجام می‌شود.

باربرداری و بیشترین عمق فروروندگی هستند. قبل از تماس دو ناحیه‌ی ابزار و بستر قطعه‌کار، سختی معنایی ندارد و با افزایش عمق نفوذ ابزار مطابق با شکل، انتظار می‌رود سختی قطعه افزایش یابد [42].

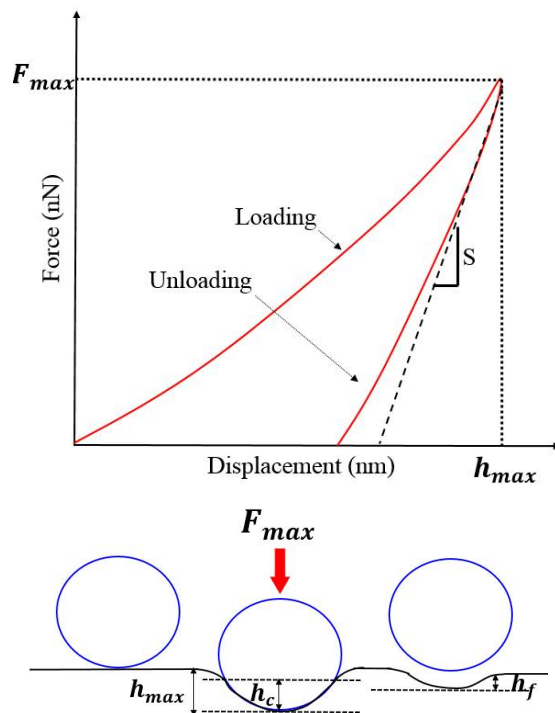


Fig. 4 Schematic of the force-displacement curve in the nano-indentation process [42]

شکل 4 شماتیک منحنی نیرو-جابجایی در فرآیند نانو فروروندگی [42]

شکل 5 منحنی سختی بر حسب جابجایی را برای جنس‌های مختلف قطعه نشان می‌دهد. در هر سه منحنی با افزایش جابجایی تا 0/9nm، مقدار سختی افزایش می‌یابد و سپس در محدوده‌ای نسبتاً ثابت می‌ماند. دلیل آن این است که تا زمانی که ابزار به حداکثر عمق فروروندگی برسد به تدریج بار هم افزایش می‌یابد ولی از آنجا که سرعت افزایش بار بیشتر از سرعت گسترش مساحت اثر حاصل از فروروندگی است، نمودار سختی-جابجایی صعودی است. هنگامی که بار به مقدار بحرانی می‌رسد در صورت برابر بودن سرعت اعمال بار و گسترش ناحیه تحت فروروندگی، مقدار سختی ثابت می‌ماند. طبق نتایج، درحداکثر عمق فروروندگی 1/5nm، مقدار سختی برای نیکل، مس و آلومینیوم به‌ترتیب از راست حدود 28، 17 و 7 GPa است. شکل 5 هم‌چنین نمودار سختی نیکل با صفحه کریستالی (111) با سرعت حرکت ابزار 100m/s را برای مرجع [43] را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که انطباق قابل قبولی بین منحنی تحقیق حاضر و مرجع [43] وجود دارد. درصد تفاوت

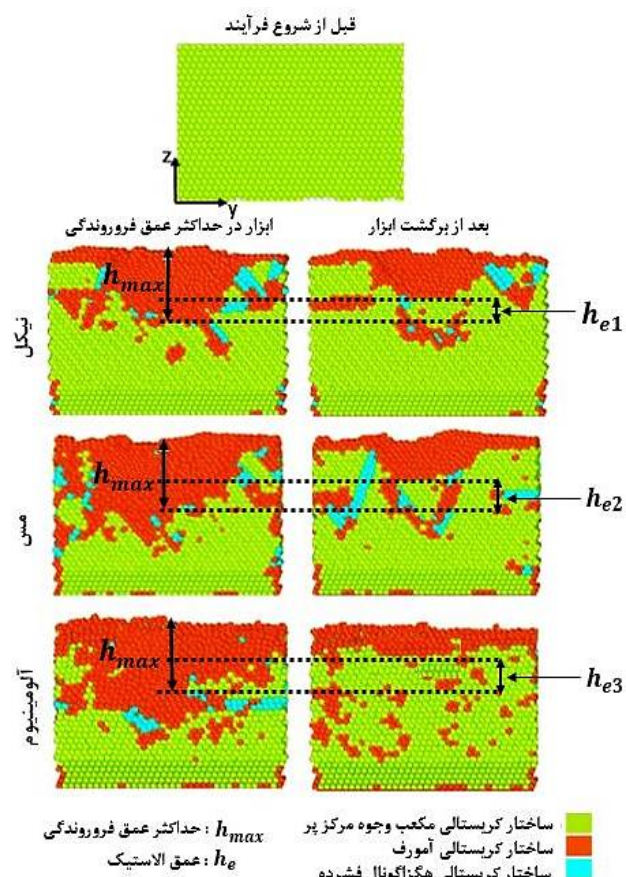


Fig. 6 Phase transfer in a workpiece with different materials
 شکل 6 تغییر فاز در قطعه کار با جنس های مختلف

3-4- انباشتگی اتمها

با اعمال بار توسط ابزار درون قطعه، پیوند اتمهای فلزی درگیر در اطراف ابزار شکسته شده، برخی از اتمها درون گودال حاصل از فروروندگی، ریخته می شوند و برخی از آنها به روی سطح آمده و در لبه ی گودال روی یکدیگر انباشته می شوند و تپه هایی از اتم را تشکیل می دهند. لیو و همکاران اثر جهت گیری کریستالی مس در فرآیند نانو فروروندگی را هم با استفاده از آزمایش تجربی و هم با استفاده از شبیه سازی المان محدودی برای ابزار فرورونده با شعاع های $3/4\mu\text{m}$ و $10\mu\text{m}$ و متناظر با آن تا عمق فرورفتگی 310nm و $10\mu\text{m}$ بررسی کردند. در این شبیه سازی ها لغزش کریستالوگرافی و جهت گیری کریستالی بطور کامل نمایش داده شد. مشاهده شد که نمودار نیرو-جابجایی در تمام جهات و صفحات کریستالی حاصل از آزمایش تجربی و شبیه سازی تطابق خوبی با یکدیگر داشتند. بنابراین می توان خواص مس تک کریستال را بر اساس مدل عددی مناسب از نانو فروروندگی تعیین کرد [44]. شکل 7 تصاویر حاصل از میکروسکوپ نیروی اتمی¹ از سطح نمونه در سطوح

¹ AtomicForce Microscopy (AFM)

جدول 2 مقادیر تجربی سختی فلزات در اندازه ماکرو [29]

Table 2 Experimental values of metals hardness in macro size [29]

جنس	سختی برینل (MPa)	سختی ویکرز (MPa)
نیکل	667 - 1600	638
مس	235 - 878	343 - 369
آلومینیوم	160 - 550	160 - 350

3-3- تغییرات ریزساختاری در قطعه کار

بررسی تغییر فاز یک روش معمول برای توصیف تغییر ساختار بلوری در طی فرآیندهای مکانیکی است. شکل 6 مدل تغییر فاز در دو مرحله ی حداکثر بارگذاری فرورونده و بعد از برداشتن ابزار را نشان می دهد. مشاهده می شود زمانی که ابزار فشرده می شوند، رفتن درون قطعه می کند، اتمهای زیر ابزار فشرده می شوند. وقتی انرژی کرنشی ذخیره شده در شبکه تغییر شکل یافته از مقدار مشخصی بیشتر شود، پیوند اتمی بین فلزی شکسته شده و ساختار منظم شبکه بهم می ریزد و آرایش اتمی به تدریج بی شکل شده و یک لایه آمورف روی سطح قطعه ایجاد می شود. زمانی که ابزار به حداکثر عمق می رسد تغییر فاز به اطراف منطقه ی فرورفته گسترش می یابد. طبق نتایجی که از محاسبه ی سختی بدست آمد، در عمق فروروندگی یکسان، انتظار می رود مقاومت اتمهای نیکل در مقابل ورود ابزار بیشتر و نیروی فروروندگی نیز بیشتر باشد و اتمهای نیکل تا محدوده ی کمتری از زیر سطح دچار تغییر شکل شوند. آلومینیوم در همان عمق فروروندگی یکسان، مقاومت کمتری نسبت به تغییر شکل نشان داده و تا ناحیه ی بزرگتری از زیر سطح دچار تغییر شکل می شود و لذا نیروی لازم برای فرو روندگی کمتر خواهد بود. زمانی که فروروندگی به اتمام رسیده و ابزار برداشته می شود، اتمهایی که پیوندشان شکسته شده بود ترکیب می شوند و شبکه تا حدی بازسازی می شود. در آلومینیوم بیشتر از مس و در مس بیشتر از نیکل کاهش عمق اتمهای تغییر فاز یافته دیده می شود. این به این معناست که در آلومینیوم بخش زیادی از اتمهای آمورف به ساختار قبلی خود بازگشتند و دارای بیشترین خاصیت ارتجاعی یا تغییر شکل الاستیک است و بخش زیادی از فرورفتگی که در طی فرآیند ایجاد شده بود توسط برگشت اتمها پر شد. تغییر شکل در مس ترکیبی از الاستیک و پلاستیک و فرورفتگی نهایی که در اثر اعمال بار ابزار در نیکل ایجاد شده است دارای عمق پلاستیک بزرگتری است.

بدست آمد که با نتایج حاصل از آزمایش تجربی ایشان در شکل 7 هم‌خوانی دارد [44]. در شکل 7- ج حجم بیشتری از اتم‌های انباشته که با رنگ سفید مشخص شده است در ناحیه‌ی شمال غربی (ربع دوم) محل فرورفتگی، ناحیه‌ی دوم که انباشتگی بیشتری دارد ناحیه‌ی جنوب شرقی (ربع سوم) و مقدار کمتری انباشتگی در ناحیه‌ی شمال شرقی (ربع اول) سطح مس است و به این ترتیب در سه طرف انباشتگی اتمی دیده می‌شود. مدل المان محدود در شکل 8- الف بطور کلی میزان انباشتگی اتم در سه طرف سطح مس را تقریباً یکسان نشان می‌دهد و در بیرونی‌ترین سطح که انباشتگی اتم با رنگ قرمز نشان داده شده است، مشاهده می‌شود که در دو جهت شمال شرقی و جنوب شرقی بیشتر از شمال غربی انباشتگی اتم دارد که این نتیجه بطور دقیق با نتیجه‌ی شکل 7- ج سازگاری زیادی ندارد. طبق نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی که در شکل 8- ب نشان داده شده است می‌توان دید که بیشترین انباشتگی اتم در سطح مس مربوط به ناحیه‌ی شمال غربی، سپس ناحیه‌ی جنوب شرقی و بعد ناحیه‌ی شمال شرقی است و تصویر حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تطابق بیشتری نسبت به روش المان محدود با شکل 7- ج دارد.

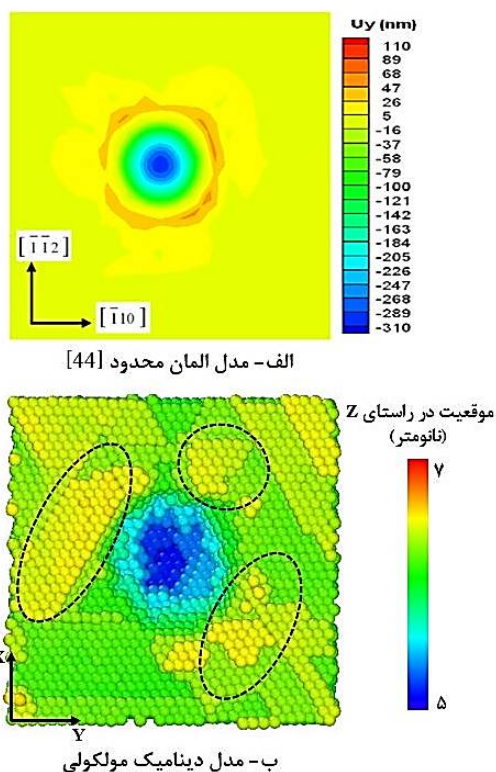


Fig. 8 Comparison of finite element simulation [44] and molecular dynamics simulation for copper at the crystal surface (111)

شکل 8 مقایسه‌ی تصاویر حاصل از شبیه‌سازی المان محدود [44] و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای مس در سطح کریستالی (111)

کریستالوگرافی مختلف را نشان می‌دهد. رنگ روشن نشان‌دهنده‌ی انباشتگی مواد روی سطح بعد از فروروندگی است. دیده می‌شود که در سطح (100) در چهار طرف، در سطح (011) در دو طرف و در سطح (111) در سه طرف به طور متقارن انباشتگی مواد شکل گرفته است [44].

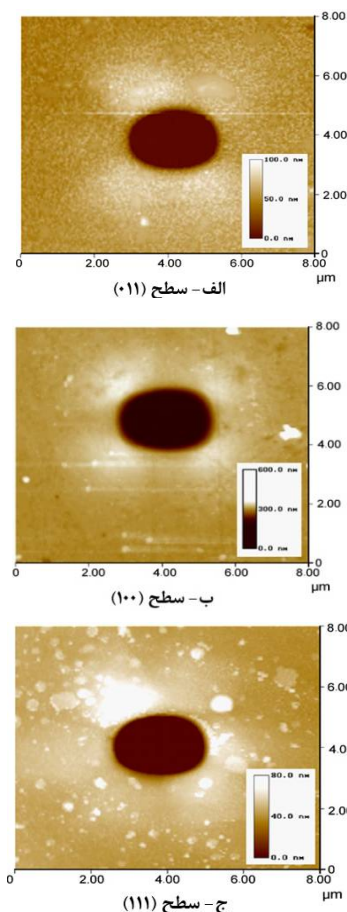


Fig. 7 AFM images of depressions made on a copper workpiece with a spherical indenter (tip radius $3.4 \mu\text{m}$) in different crystallographic directions [44]

شکل 7 تصاویر AFM از فرورفتگی ساخته شده بر روی قطعه کار مس با یک فرورونده‌ی کرومی (شعاع نوک $3/4 \mu\text{m}$) در جهت‌های مختلف کریستالوگرافی [44]

شکل 8- الف نتیجه حاصل از شبیه‌سازی فروروندگی مس به روش المان محدود در تحقیق لیو و همکاران [44] و شکل 8- ب نتیجه حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانوفرو روندگی مس، با سطح کریستالی (111) در مقاله حاضر را نمایش می‌دهد. راهنمای رنگ‌ها در شکل 8- الف نشان می‌دهد که هرچه مواد به قسمت بیرونی سطح منتقل می‌شوند رنگ آن به سمت قرمز رفته و علامت آن مثبت است و در مناطق عمیق‌تر حاصل از فروروندگی بسمت رنگ آبی و مقادیر منفی می‌رود. به این ترتیب در سطح (111) سه ناحیه با مقادیر مثبت

ناجایی و تغییر شکل پلاستیک در نیکل بیشتر متوجه اتم‌های زیر سطح قطعه شده است و در مورد آلومینیوم اتم‌های انباشته در سطح دچار تغییر شکل پلاستیک هستند و اتم‌های زیر سطح با تغییر شکل الاستیک بخشی از گودال ایجاد شده را پر می‌کنند. با مشاهده تصاویر انباشتگی سه فلز مشخص می‌شود که انباشتگی اتم‌ها در سطح بطور قابل توجهی تحت تأثیر جنس قطعه است.

3-5- عیوب کریستالی

در این مقاله قطعه‌کار بدون حفره و بصورت یکپارچه در نظر گرفته شده است و از وجود حفره در آن صرف‌نظر شده است. طی تغییر شکل پلاستیک ماده، بخش زیادی از کار مکانیکی به حرارت تبدیل شده و بخش کمی انرژی در داخل ماده ذخیره می‌شود. بخشی از این انرژی ذخیره شده ناشی از ناجایی‌های ذخیره شده در ماده است و بخشی هم مربوط به عیوب نقطه‌ای است که قابل توجه نبوده و از آن صرف‌نظر می‌شود. تفاوت در انرژی ذخیره شده تغییر شکل موجب تفاوت در میزان سختی تک کریستال‌ها دارد و نیز تغییرات انرژی ذخیره شده به جهات کریستالی نیز وابسته است. شروع پدیده لغزش در یک جامد کریستالی با لغزش اتم‌ها در صفحات لغزش و در جهات کریستالی معین رخ می‌دهد. معمولاً صفحه‌ی لغزش، صفحه‌ای که بالاترین تراکم اتمی را دارد و جهت لغزش جهتی در صفحه‌ی لغزش است که در آن اتم‌ها بهم نزدیک‌تر هستند.

دلیل اصلی لغزش اتم‌ها در ساختار کریستالی فلزات را می‌توان تنش برشی دانست. تغییر شکل پلاستیک برگشت‌ناپذیر در نتیجه‌ی لغزش‌هایی رخ می‌دهد که در آن شبکه‌ی کریستالی شکل و جهت خود را حفظ می‌کند. هم‌چنین تغییر اندازه و اعوجاج شبکه‌ی بلوری باعث ایجاد تغییر شکل الاستیک می‌شود [45]. به منظور تعیین علت تغییر شکل پلاستیک در قطعه‌کار، باید رفتار ناجایی‌ها و عیوب کریستالی در ماده مورد بررسی قرار گیرد. در مواد با ساختار کریستالی مکعب وجوه مرکز پر، هر اتم دارای پیوندهای متقارن در همسایگی خود است که بزرگی این پیوندها ممکن است به علت تغییر شکل الاستیک تغییر کند ولی چیدمان اتمی همچنان یکسان و متقارن باقی می‌ماند. در صورتی که در نزدیکی یک اتم عیب کریستالی به وجود بیاید، ساختار کریستالی دیگر متقارن نخواهد بود و با استفاده از این خاصیت می‌توان عیب را تشخیص داد. هر اتم در ساختار مکعب وجوه مرکز پر بدون عیب، دارای 12 اتم (جفت مزدوج) است.

از آنجا که روش المان محدود از توابع پیوسته برای تحلیل استفاده می‌کند، دقت کمتری نسبت به روش دینامیک مولکولی برای مدل‌سازی دارد و روش دینامیک مولکولی جزئیاتی را نشان می‌دهد که با شبیه‌سازی المان محدود یا تصاویر آزمایشگاهی امکان‌پذیر نیست.

نقشه‌های حاصل از شبیه‌سازی انباشتگی اتم‌ها در مدل‌های نیکل، مس و آلومینیوم در سطوح کریستالی (111)، در شکل 9 نشان داده شده است. از آنجا که تپه‌ها و گسترده‌گی انباشتگی اتم‌ها در سطح نمونه نشان‌دهنده‌ی گسترش ناجایی در مواد است، هم ارتفاع تپه‌ها و هم طول گسترش انباشتگی اتم‌ها می‌تواند اطلاعات بیشتری در مورد تغییر شکل پلاستیک قطعه بعد از فرآیند ارائه دهد. حضور اتم‌های قرمز در سطح آلومینیوم نشان می‌دهد انباشتگی‌ها روی سطح آلومینیوم ارتفاع بیشتری نسبت به دو فلز دیگر دارد و در مقابل ارتفاع انباشتگی در سطح نیکل کمتر از دو فلز دیگر است. هم‌چنین طول گستره‌ی انباشتگی اتم‌ها در سطح آلومینیوم بیشتر از دو فلز دیگر و در نیکل کمترین است. گودال بجای مانده از فرآیند در آلومینیوم عمق کمتر و در نیکل عمق بیشتری دارد که این نتیجه با شکل 6 مطابق است.

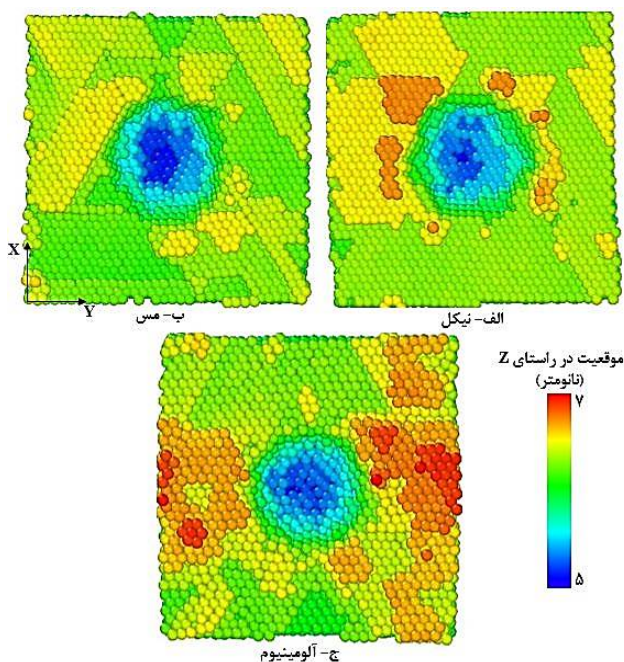


Fig. 9 Molecular dynamics images of depressions made in Nickel, Copper and Aluminum at the crystal surface (111)

شکل 9 تصاویر دینامیک مولکولی از فرورفتگی ساخته شده در نیکل، مس و آلومینیوم در سطح کریستالی (111)

با توجه به موارد گفته شده نتیجه می‌شود که گسترش

دیده می شود و نشان می دهد که آلومینیوم نسبت به دو ماده دیگر بیشترین تغییر ساختار را در فرآیند نانو فروروندگی داشته است و توزیع عیوب در سطح آلومینیوم نسبت به دو جنس دیگر بیشتر است. علاوه بر آن تا منطقه بزرگی زیر فرورفتگی نیز دچار عیب کریستالی شده است که این اتفاق در مس کمتر دیده می شود و در نیکل وجود ندارد.

3-6- نابجایی

شکل 11 حرکت نابجایی های قطعه را در عمق های متفاوت نمایش می دهند. تولید و انباشتگی نابجایی های شاکی² (نابجایی های جزئی شاکی به طور کلی به یک جفت نابجایی اشاره دارد که می تواند منجر به وجود گسل انباشتگی³ که یک نقص مسطح است، شود.)، کامل⁴ (در شبکه ی کریستالی Fcc زمانی که لغزش صفحات در راستای بردار $[110] \frac{1}{2}$ صورت گیرد، نابجایی کامل رخ می دهد.)، استیر-رود⁵ (زمانی که دو نابجایی کامل در صفحات مختلف $\{111\}$ به نابجایی های جزئی شاکی تقسیم می شوند، حرکت می کنند تا به هم برسند و تعامل برقرار میکنند. محصول نهایی این تعامل، یک نابجایی استیر-رود خواهد بود.)، فرانک⁶ (نابجایی های جزئی فرانک بدون حرکت هستند، اما می توانند با نفوذ اتم ها حرکت کنند) و دیگر نابجایی ها نشانه هایی از پدیده ی لغزش هستند. وقتی که عمق فروروندگی کم است هیچ نابجایی شکل نمی گیرد و با افزایش عمق بارگذاری و افزایش تدریجی نیرو، مقدار نابجایی ها افزایش می یابد. وقتی که نیرو به مقدار بحرانی برسد، باعث تجمع نابجایی ها می شود. با توجه به این که تغییر شکل پلاستیک بعنوان یک تغییر شکل دائمی در اثر حرکت نابجایی ها اتفاق می افتد، ایجاد نابجایی جدید و اثر متقابل نابجایی ها برهم باعث گره خوردن و قفل شدن نابجایی ها می شود که این عامل از لغزش بیشتر صفحات جلوگیری کرده و باعث سخت شدن قطعه در آن مرحله می شود. همان طور که در شکل 11 دیده می شود در آلومینیوم نابجایی ها زودتر و بیشتر از دو ماده دیگر تشکیل شدند و لغزش صفحات بیشتر اتفاق افتاده است و این عامل باعث افزایش تغییر شکل الاستیک-پلاستیک در ناحیه ی فروروندگی شده و عمق ناحیه اثر ابزار را بزرگ تر می کند. اگرچه که سطح منحنی نیرو-جابجایی در آلومینیوم پایین تر از دو منحنی دیگر است ولی به دلیل بزرگی عمق پلاستیک و مساحت

پارامتر خاصیت تقارن مرکزی¹ با استفاده از رابطه ی 17 محاسبه می شود [46].

$$CSP = \sum_{i=1,6} |\bar{R}_i + \bar{R}_{i+6}| \quad (17)$$

در این رابطه R_i و R_{i+6} بردارهای مزدوج برای 6 جفت اتم هستند. شکل 10 تغییر شکل پلاستیک در قطعه کار را تحت فرایند نانو فروروندگی برای سه جنس متفاوت قطعه کار، در عمق 1/5nm ابزار با استفاده از خاصیت تقارن مرکزی نشان می دهد. خاصیت تقارن مرکزی در ساختار کریستالی بدون عیب و بدون تغییر شکل الاستیک صفر است. در صورتی که این عدد بدون بعد کمتر از 3/4 باشد، ساختار کریستالی کم اعوجاج و بدون عیب می باشد و اگر بین 3/4 تا 16 باشد، عیوب مختلف کریستالی را نشان خواهد داد. مشاهده می شود در نیکل منطقه بزرگ تری از قطعه بدون عیب است و توزیع عیوب در ناحیه ی فروروندگی و سطح قطعه اتفاق افتاده است. در مس عیوب بیشتری نسبت به نیکل در منطقه فروروندگی ظاهر شده است و پراکندگی آن به قسمت های درونی تر قطعه کشیده شده است.

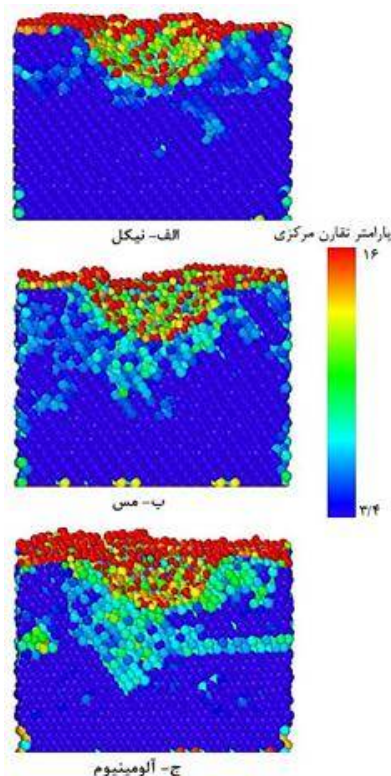


Fig. 10 Central symmetry parameter in a workpiece with different materials

شکل 10 پارامتر تقارن مرکزی در قطعه کار با جنس های مختلف

در آلومینیوم بیشترین میزان عدم تقارن ساختار کریستالی

¹ Centro symmetry Parameter (CSP)

² Shockley

³ Stacking fault

⁴ Perfect

⁵ Stair-rod

⁶ Frank

روندگی، سختی نیکل، مس و آلومینیوم را به ترتیب 28 GPa، 17 و 7، نشان دادند. منحنی سختی-جابجایی نیکل با تحقیق گذشتگان [43] تعیین اعتبار شد. با توجه به شکل 5، به دلیل تفاوت در سرعت افزایش نیرو و گسترش مساحت فرورفتگی، منحنی سختی-جابجایی تا جابجایی حدود 0/9 روند صعودی داشته و بعد آن ثابت می ماند.

- با بررسی تغییر فاز ایجاد شده در هر یک از قطعات در حداکثر عمق فروروندگی و بعد از برداشتن ابزار مشاهده شد که آلومینیوم بیشترین تغییر شکل الاستیک را دارد در حالی که تغییر شکل در نیکل عمدتاً بصورت پلاستیک است.

- شبیه سازی دینامیک مولکولی انباشتگی اتمها در سطح قطعه مسی با تصاویر حاصل از آزمایش تجربی و شبیه سازی المان محدود آن در تحقیق گذشتگان [44] تعیین اعتبار شد. نتایج نشان داد روش دینامیک مولکولی تصویر دقیق تری از انباشتگی اتمها دارد و مطابقت بهتری با تصویر انباشتگی اتمی در آزمایش تجربی نسبت به شبیه سازی المان محدود دارد. انباشتگی اتمها در سطح آلومینیوم بیشتر از مس و در مس بیشتر از نیکل است.

- بررسی عیوب کریستالی در سه فلز نشان داد، بیشترین گستردگی عیوب کریستالی در حداکثر عمق بارگذاری را آلومینیوم دارد و کمترین آن مربوط به نیکل است.

- در ابتدا وقتی نیروی بارگذاری کم بود نابیجایی در قطعات دیده نشد. با افزایش تدریجی بار، نابیجاییها افزایش پیدا کردند و باعث تغییر شکل پلاستیک در قطعات شدند. با رسیدن نیرو به مقدار بیشینه، تجمع نابیجایی مانع از حرکت یکدیگر می شود و مقدار سختی تا این مرحله افزایش می یابد و بعد از آن ثابت می ماند.

5- فهرست علائم

A	ضریب ثابت
A_c	مساحت اثر سطح تماس (nm^2)
B	ضریب ثابت
b_{ij}	ضریب استحکام پیوند ij
c	استحکام اثر زاویه ای
D	انرژی پیوستگی در پتانسیل مورس (eV)، نصف عرض پیوند در پتانسیل ترسوف (nm)
d	تیزی زاویه غیر پیوندی
E	پتانسیل EAM، پتانسیل ترسوف

بجای مانده ی بزرگ تر طی فروروندگی، انتظار می رود که قطعه آلومینیومی از دو مورد دیگر نرم تر باشد که این نتیجه با نتایج حاصل از شکل 5 نیز مطابقت دارد.

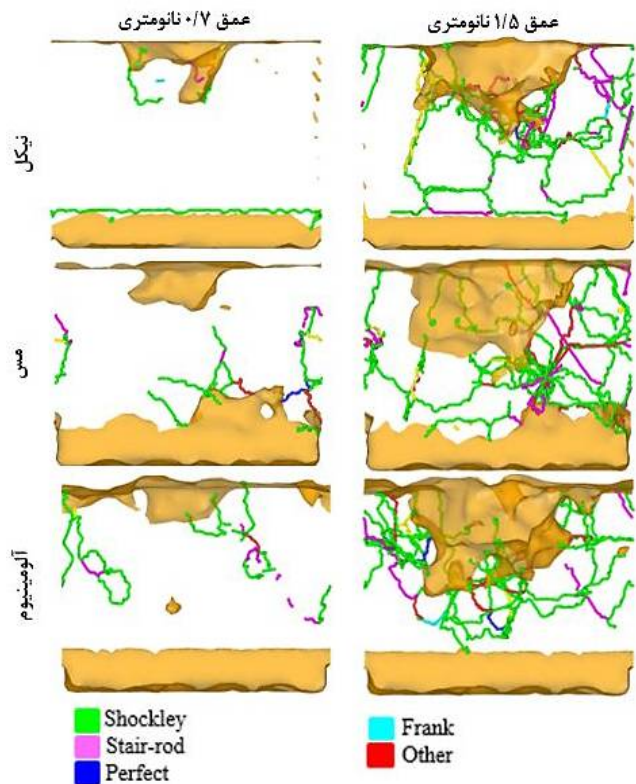


Fig. 11 Dislocations motion in a workpiece of different materials

شکل 11 حرکت نابیجاییها در قطعه کار با جنسهای مختلف

4- نتیجه گیری

شبیه سازی دینامیک مولکولی یک روش اثرگذار برای مطالعه ی فرآیندهای مکانیکی است. از طریق شبیه سازی می توان به سوالات حوزه ی مکانیزم فرآیند فروروندگی پاسخ داد هم چنین برخی پدیده هایی که در آزمایش واقعی قابل مشاهده نیست، قابل بررسی است. در این مقاله، نانو فروروندگی سه فلز نیکل، مس و آلومینیوم با استفاده از ابزار الماسی کروی شکل به کمک روش دینامیک مولکولی بررسی شد و نتایج زیر بدست آمد:

- با مقایسه ی منحنی های نیرو-جابجایی قطعات با جنس های متفاوت دیده می شود که آلومینیوم کمترین و نیکل بیشترین نیرو را به ابزار اعمال می کند. تعیین اعتبار نیروی بدست آمده با استفاده از منحنی نیرو-جابجایی فروروندگی آلومینیوم در تحقیق گذشتگان [41] انجام شد و مشاهده شد که در عمق فرورفتگی 1/5nm بیشترین نیروی وارد بر ابزار از طرف آلومینیوم در هر دو تحقیق برابر و مقدار آن 100nN است. - منحنی های سختی-جابجایی حاصل از شبیه سازی فرو

- pp. 3-20, 2004.
- [4] M. Rathinam, R. Thillaigovindan, P. Paramasivam, Nanoindentation of aluminum (100) at various temperatures, *Journal of mechanical science and technology*, 23(10), p. 2652, 2009.
- [5] S. Pathak, S. R. Kalidindi, Spherical nanoindentation stress-strain curves, *Materials science and engineering: R: Reports*, 91, pp. 1-36, 2015.
- [6] S. Pathak, J. L. Riesterer, S. R. Kalidindi, J. Michler, Understanding pop-ins in spherical nanoindentation, *Applied Physics Letters*, 105(16), p. 161913, 2014.
- [7] M. V. Swain, J. Menčík, Mechanical property characterization of thin films using spherical tipped indenters, *Thin Solid Films*, 253(1-2), pp. 204-211, 1994.
- [8] Y. V. Milman, A. A. Golubenko, S. N. Dub, Indentation size effect in nanohardness, *Acta materialia*, 59(20), pp.7480-7487, 2011.
- [9] T. H. Fang, C. I. Weng, J. G. Chang, Molecular dynamics analysis of temperature effects on nanoindentation measurement, *Materials Science and Engineering: A*, 357(1-2), pp. 7-12, 2003.
- [10] P. Peng, G. Liao, T. Shi, Z. Tang, Y. Gao, Molecular dynamic simulations of nanoindentation in aluminum thin film on silicon substrate, *Applied Surface Science*, 256(21), pp. 6284-6290, 2010.
- [11] M. Yaghoobi, G. Z. Voyiadjis, Effect of boundary conditions on the MD simulation of nanoindentation, *Computational Materials Science*, 95, pp. 626-636, 2014.
- [12] W. C. D. Cheong, L. C. Zhang, Molecular dynamics simulation of phase transformations in silicon monocrystals due to nano-indentation, *Nanotechnology*, 11(3), p.173, 2000.
- [13] A. K. Nair, M. J. Cordill, D. Farkas, W. W. Gerberich, Nanoindentation of thin films: Simulations and experiments, *Journal of Materials Research*, 24(3), pp. 1135-1141, 2009.
- [14] C. L. Liu, T. H. Fang, J. F. Lin, Atomistic simulations of hard and soft films under aluminium during nano-indentation: a molecular dynamics study, *Molecular Simulation*, 44(17), pp. 1393-1401, 2007.
- [15] D. Chocyk, T. Zientarski, Molecular dynamics simulation of Ni thin films on Cu and Au under nanoindentation, *Vacuum*, 147, pp. 24-30, 2018.
- [16] S. X. Q. Wan, Z. Sha, Z. Liu, Molecular dynamics simulations of nano-indentation and wear of the γ Ti-Al alloy, *Computational Materials Science*, 110, pp. 247-253, 2015.
- [17] P. Walsh, A. Omeltchenko, R. K. Kalia, A. Nakano, P. Vashishta, S. Saini, Nanoindentation of silicon nitride: A multimillion-atom molecular dynamics study, *Applied Physics Letters*, 82(1), pp. 118-120, 2003.
- [18] T. H. Fang, W. J. Chang, Y. C. Fan, Molecular dynamics of nanoindentation with conical carbon indenters on graphite and diamond, *Nano*, 5(04), pp. 231-236, 2010.
- [19] C. Lu, Y. Gao, G. Michal, N. N. Huynh, H. T. Zhu,

- F_{max} بیشینه نیروی وارد شده به بستر (nN)
- $f_A(r_{ij})$ پتانسیل جفتی جاذبه (eV)
- $f_C(r_{ij})$ تابع قطع (eV)
- $f_R(r_{ij})$ پتانسیل جفتی دافعه (eV)
- $f_i(\rho h_i)$ انرژی ناشی از چگالی الکترونی پس‌زمینه (eV)
- $g(\theta)$ تابع در پتانسیل ترسوف
- H سختی (GPa)
- h_c عمق پلاستیک (nm)
- h_{max} بیشترین عمق فروروندگی (nm)
- R مرکز شعاع قطع پتانسیل (nm), شعاع ابزار (nm)
- R_i, R_{i+6} بردارهای مزدوج برای 6 جفت اتم
- r_c شعاع قطع پتانسیل (nm)
- r_{ij} فاصله بین اتم i و j (nm)
- r_0 فاصله تعادلی بین اتمی (nm)
- S شیب منحنی باربرداری
- U پتانسیل مورس
- V_{ij} انرژی پیوندی بین اتم‌های i و j (eV)
- $Z_{ij}(R_{ij})$ شارژ الکترونی موثر میان دو یون

علائم یونانی

- α ضریب ثابت، مدول الاستیک (1/nm)
- β ضریب ثابت
- ϑ ضریب ثابت
- δ_{ij} تعداد همسایگی موثر اتم i
- θ زاویه پیوند
- θ_{ijk} زاویه پیوندی بین بردارهای r_{ij}, r_{jk} (درجه)
- $\phi_{ij}(R_{ij})$ انرژی پتانسیل جفتی (eV)
- $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ ضرایب برداری (1/nm)
- μ_{ijk} ضریب ثابت
- ρ_i چگالی الکترونی

6- مراجع

- [1] B. Poon, D. Rittel, G. Ravichandran, An analysis of nanoindentation in linearly elastic solids, *International Journal of Solids and Structures*, 45(24), pp. 6018-603, 2008.
- [2] F. Cardarelli, Materials handbook: a concise desktop reference, *Springer Science & Business Media*, 2008.
- [3] W. C. Oliver, G. M. Pharr, Measurement of hardness and elastic modulus by instrumented indentation: Advances in understanding and refinements to methodology, *Journal of materials research*, 19(1),

- 29(12), p. 6443, 1984.
- [32] S. M. Foiles, M. I. Baskes, M. S. Daw, Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys, *Physical review B*, 33(12), p. 7983, 1986.
- [33] D. C. Rapaport, D. C. R. Rapaport, The art of molecular dynamics simulation, *Cambridge university press*, 2004.
- [34] S. Amaya-Roncancio, D. F. Arias-Mateus, M. M. Gómez-Hermida, J. C. Riano-Rojas, E. Restrepo-Parra, Molecular dynamics simulations of the temperature effect in the hardness on Cr and CrN films, *Applied Surface Science*, 258(10), pp. 4473-4477, 2012.
- [35] K. Maekawa, A. Itoh, Friction and tool wear in nano-scale machining—a molecular dynamics approach, *Wear*, 188(1-2), pp. 115-122, 1995.
- [36] R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L. M. Raff, MD simulation of indentation and scratching of single crystal aluminum, *Wear*, 240(1-2), pp. 113-143, 2000.
- [37] W. Y. Chang, T. H. Fang, S. J. Lin, J. J. Huang, Nanoindentation response of nickel surface using molecular dynamics simulation, *Molecular Simulation*, 36(11), pp. 815-822, 2010.
- [38] J. Tersoff, Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties, *Physical Review B*, 38(14), p.9902, 1988.
- [39] M. Papanikolaou, F. R. Hernandez, K. Salonitis, Investigation of the Subsurface Temperature Effects on Nanocutting Processes via Molecular Dynamics Simulations, *Metals*, 10(9), p.1220, 2020.
- [40] S. Goel, X. Luo, R. L. Reuben, W. Rashid, Atomistic aspects of ductile responses of cubic silicon carbide during nanometric cutting, *Nanoscale Res Lett* 6:589, 2011.
- [41] R. Komanduri, N. Chandrasekaran, L. M. Raff, MD simulation of indentation and scratching of single crystal aluminum, *Wear*, 240(1-2), pp. 113-143, 2000.
- [42] A. C. Fischer-Cripps, E. F. Gloyna, W. H. Hart, *Introduction to contact mechanics* (Vol. 221), New York: Springer, 2000.
- [43] M. Imran, F. Hussain, M. Rashid, S. A. Ahmad, Dynamic characteristics of nanoindentation in Ni: A molecular dynamics simulation study, *Chinese Physics B*, 21(11), p. 116201, 2012.
- [44] Y. Liu, S. Varghese, J. Ma, M. Yoshino, H. Lu, R. Komanduri, Orientation effects in nanoindentation of single crystal copper, *International Journal of Plasticity*, 24(11), pp. 1990-2015, 2008.
- [45] Y. R. Jeng, C. M. Tan, Static atomistic simulations of nanoindentation and determination of nanohardness, 2005.
- [46] C. L. Kelchner, S. J. Plimpton, J. C. Hamilton, Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation, *Physical review B*, 58(17), p.11085, 1998.
- A. K. Tieu, Atomistic simulation of nanoindentation of iron with different indenter shapes, *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part J: Journal of Engineering Tribology*, 223(7), pp. 977-984, 2009.
- [20] S. V. Hosseini, M. Vahdati, A. Shokuhfar, Effect of tool nose radius on nano-machining process by molecular dynamics simulation, *In Defect and Diffusion Forum* (Vol. 312, pp. 977-982). Trans Tech Publications Ltd, 2011.
- [21] Y. Gao, C. Lu, N. N. Huynh, G. Michal, H. T. Zhu, A. K. Tieu, Molecular dynamics simulation of effect of indenter shape on nanoscratch of Ni, *Wear*, 267(11), pp. 1998-2002, 2009.
- [22] S. Goel, N. H. Faisal, X. Luo, J. Yan, A. Agrawal, Nanoindentation of polysilicon and single crystal silicon: Molecular dynamics simulation and experimental validation, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 47(27), p. 275304, 2014.
- [23] K.V. Reddy, S. Pal, Analysis of deformation behaviour of Al-Ni-Co thin film coated aluminium during nano-indentation: a molecular dynamics study, *Molecular Simulation*, 44(17), pp. 1393-1401, 2018.
- [24] H. Zhao, P. Zhang, C. Shi, C. Liu, L. Han, H. Cheng, L. Ren, Molecular dynamics simulation of the crystal orientation and temperature influences in the hardness on monocrystalline silicon, *Journal of Nanomaterials*, 2014.
- [25] D. E. Kim, S. I. Oh, Atomistic simulation of structural phase transformations in monocrystalline silicon induced by nanoindentation, *Nanotechnology*, 17(9), p. 2259, 2006.
- [26] Y. H. Lin, T. C. Chen, P. F. Yang, S. R. Jian, Y. S. Lai, Atomic-level simulations of nanoindentation-induced phase transformation in mono-crystalline silicon, *Applied Surface Science*, 254(5), pp.1415-1422, 2007.
- [27] P. Zhu, Y. Hu, H. Wang, Atomistic simulations of the effect of a void on nanoindentation response of nickel, *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*, 53(9), pp. 1716-1719, 2010.
- [28] S. V. Hosseini, M. Vahdati, A. Shokuhfar, Molecular Dynamics Simulation on Nano-Machining of Single Crystal Copper with a Void, *In Materials with Complex Behaviour II* (pp. 661-669), Springer, Berlin, Heidelberg, 2012.
- [29] G.V. Samsonov, Mechanical properties of the elements, *In Handbook of the Physicochemical Properties of the Elements* (pp. 387-446), Springer, Boston, MA, 1968.
- [30] S. V. Hosseini, M. Vahdati, A. Shokuhfar, Investigation of interatomic potential on chip formation mechanism in nanometric cutting using MD simulation, *In Defect and Diffusion Forum* (Vol. 312, pp. 983-988). Trans Tech Publications Ltd, 2011.
- [31] M. S. Daw, M. I. Baskes, Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals, *Physical Review B*,