



شبیه‌سازی روغن موتور حاوی نانوذره الماس بین دو سطح سایشی آهن با استفاده از روش‌های دینامیک مولکولی

نویسنده: مهدیار^۱، سید وحید حسینی^{۲*}

^۱ دانشجوی دکتری دانشکده مهندسی مکانیک و مکاترونیک دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران، n.mahdiyar2013@email.com

^۲ عضو هیات علمی دانشکده مهندسی مکانیک و مکاترونیک دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران، v.hosseini@shahroodut.ac.ir

* نویسنده مسئول

اطلاعات مقاله

چکیده

تاریخچه مقاله:

دریافت: ۳۰ آذر ۱۳۹۹
پذیرش: ۱۱ بهمن ۱۳۹۹

کلیدواژه‌ها:

شبیه‌سازی
دینامیک مولکولی
نانو سایش
لغزش
غلتش

در مقاله حاضر، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانو سایش با استفاده از نانوذره الماس به قطر ۳ نانومتر محصور شده با دو قطعه آهنی انجام شد. کل فرآیند در دمای ۳۰۰K ثابت ماند و سرعت لغزشی برای لایه‌های مرزی بالا و پایین ۱۰۰m/s انتخاب شد. بررسی سازوکار روانکاری الماس نشان می‌دهد که نانو ذره حرکت لغزشی سطوح اصطکاک را به حرکت غلتشی تبدیل می‌کند. بر اساس نتایج بدست آمده، استفاده از نانوذره الماس امکان کاهش ضریب اصطکاک را از ۰,۲۴ به ۰,۰۵ به وجود می‌آورد. به منظور بررسی اثر فشار در فرآیند سایش، شبیه‌سازی فرآیند سایش در دما و سرعت ثابت، تحت سه فشار متفاوت ۳۵۰، ۵۰۰ و ۶۵۰ مگاپاسکال انجام شد. نتایج نشان داد نانوذره تحت فشارهای قویتر تغییر شکل نمی‌دهد و شکل کروی خود را حفظ می‌کند و با ایجاد فاصله بین سطوح اصطکاک نسبت به زمانی که نانوذره‌ای نباشد، اصطکاک را بهبود می‌بخشد. با این حال در حضور نانوذره، با افزایش فشار، ضریب اصطکاک افزایش یافت.



تمامی حقوق برای انجمن علمی موتور ایران محفوظ است.

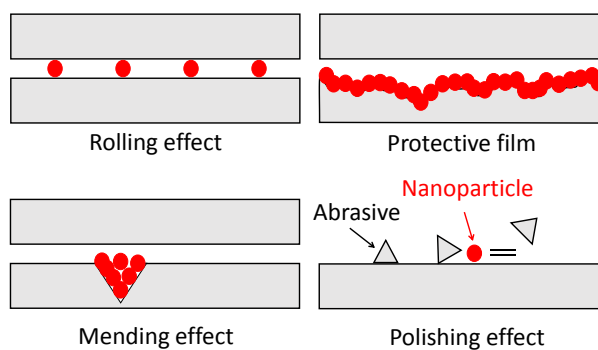
۱- مقدمه

تلفات اصطکاکی در یک اتومبیل معمولی، به طور قابل توجهی باعث کاهش قدرت مفید موتور برای حرکت می‌شوند. تقریباً ۱۵٪ از کل اتلاف انرژی، از اصطکاک ایجاد شده بین قطعات لغزشی حاصل می‌شود. روان‌کننده‌ها برای کاهش چنین تلفات اصطکاکی عرضه می‌شوند.

بیشتر تلفات اصطکاکی در حلقه‌های سمبه و یاتاقان‌ها ایجاد می‌شود که به دلیل کم بودن فاصله بین سطوح و فشار روغن بین قطعات، تحت روانکاری مرزی قرار دارند. در چنین شرایطی، مواد افزودنی در روان‌کننده‌ها وارد عمل می‌شوند. افزودنی‌های معلق ذرات نانو در روغن پایه، برای حل مسائل روغن کاری مرزی مورد توجه اند [۱].

در طی چند دهه گذشته، استفاده از نانوذرات به عنوان مواد افزودنی روان‌کننده، به عنوان یک موضوع مهم در فعالیت‌های پژوهشی تعریف شده است. سازوکارهای متنوعی برای نحوه عملکرد نانو ذرات در روانکار وجود دارد. مطابق شکل ۱ این سازوکارها به طور عمده به دو گروه تقسیم می‌شوند.

تأثیر مستقیم نانوذرات بر تقویت روغن کاری، به این صورت که نانوذرات معلق در روغن روانکننده نقش بلبرینگ بین سطوح اصطکاک را بازی می‌کنند و علاوه بر این، آن‌ها با پوشاندن سطوح اصطکاک خشن، تا حدودی یک لایه محافظ می‌سازند (شکل ۱-ا) مورد دیگر، تأثیر ثانویه وجود نانوذرات بر تقویت سطح است. نانوذرات بر روی سطح اصطکاک رسوب می‌کنند و از بین رفتن جرم را که به عنوان اثر مهار کننده شناخته می‌شود، جبران می‌کنند و همچنین زبری سطح روغن کاری توسط سایش به کمک نانوذرات کاهش می‌یابد (شکل ۱-ب) [۲].



شکل ۱: سازوکارهای روانکاری ممکن با افزودن نانو روغن بین سطوح اصطکاک [۲]

باعث بهبودی خواص تریبولوژی و سایشی روانکار می‌شوند [۳].

لی و همکاران نشان دادند که نانو ذره مس باعث بهبود خواص گرمایی شده و همچنین با رسوب روی سطوح باعث بهبود خواص روانکاری و اصطکاک می‌شود [۴].

لاد و همکاران نتایج روانکاری در حضور نانو ذره TiO_2 را بررسی کردند. نتایج نشان داد TiO_2 دارای حلالیت و پایداری خوبی است. در غلظت ۳،۳ درصد وزنی، ضریب اصطکاک نسبت به روغن پایه ۶۶ درصد کاهش پیدا کرد که ناشی از حرکت غلظتی نانو ذرات است. با افزایش غلظت و تجمع نانو ذرات، ضریب اصطکاک افزایش می‌یابد اما با این حال نسبت به روغن پایه کمتر است و همچنین سایش به شدت کاهش می‌یابد [۵].

هانگ و همکاران به مقایسه اثر اندازه و شکل نانو ذرات کربنی مختلف در روغن کاری پرداختند. نتایج نشان می‌دهد که نانو ذرات کروی با حفظ فاصله بین سطوح مانع از اصطکاک شده و ضریب اصطکاک را کاهش می‌دهند در حالی که نانو ذرات فیبری به دلیل تراکم راحت‌تر، ضریب اصطکاک بالاتری نسبت کروی دارند و همچنین ضخامت نانو ذرات جمع شده از لایه روانکار بیشتر شده و باعث افزایش زبری سطح می‌شوند و از جریان روغن در سطوح جلوگیری می‌کنند [۶].

هو و همکاران به بررسی اثر دو نانو ذره الماس و SiO_2 در اصطکاک دو قطعه آهنی پرداختند. نتایج نشان داد در غلظت کم نانو ذرات و بارگذاری پایین، نانو ذرات مثل یاتاقان غلظتی عمل کرده و دو قطعه را از یکدیگر جدا نگه داشتند و اصطکاک و همچنین توزیع گرما کاهش پیدا کرد. در غلظت بالای نانو ذرات و بارگذاری بالا، نانو ذرات فقط برای زمان معینی می‌توانند اثر محافظتی داشته باشند و SiO_2 شکل خورد را از دست داده و خورد می‌شود [۷].

وادیراج و همکاران اثر نانوذرات اسید بوریک^۳ و مس را در غلظت‌های حجمی متفاوت (۰،۱، ۰،۲ و ۰،۳) روی چرخ‌دنده چدنی و فولاد کربن دهی شده بررسی کردند. برای این بررسی، روغن‌های موتور و دنده SAE15W40 و SAE90، که برای وسایل نقلیه سنگین (۱۱ تا ۴۹ تن) در هند استفاده می‌شود، نانوذراتی با حداکثر اندازه اسید بوریک ۵۰ نانومتر است که توسط Advanced Lubricant Technology Inc. آمریکا^۴ تولید شده است و حداکثر اندازه برای ذرات مس ۲۰ نانومتر است که از DONG YANG INT'L LTD گروه LTD چین تولید شده است، تهیه شد.

نتایج نشان داد در حالی که از روغن موتور و قطعه چدنی استفاده شود، در غلظت ۰،۱ از هر دو نانوافزودنی، ضریب اصطکاک کمتری نسبت به وقتی نانوذره‌ای نباشد بدست می‌آید و در نسبت‌های حجمی ۰،۲ و ۰،۳ ضریب اصطکاک بالاتری نسبت به وقتی نانوذره نباشد، بدست می‌آید.

³ Boric acid

⁴ United States of America (USA)

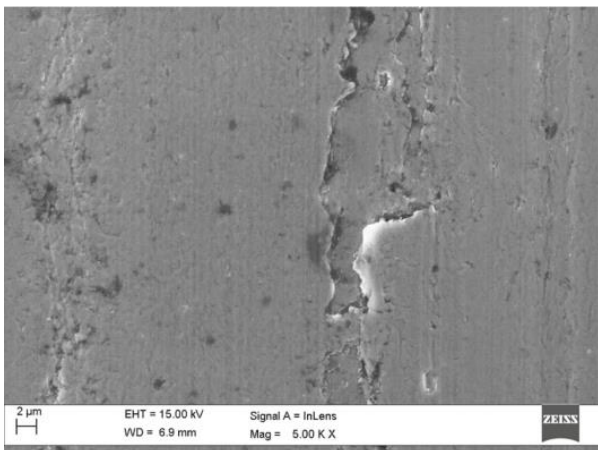
¹ Titanium dioxide

² Silicon dioxide

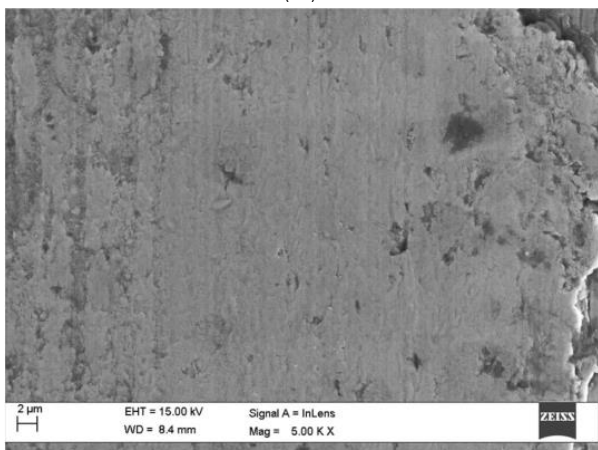
راینا و همکاران اثر افزودنی‌های CuO^1 ، BN^2 و ND^3 با قطر 60 nm -
 ۹۰ در خواص روانکاری و سایش روغن پایه PAO^۴ را بررسی کردند.
 در این آزمایش‌ها از گلوله فولادی به عنوان قطعه سایشی استفاده شده
 است.

نتایج نشان داد در بارگذاری ۲۰ تا 100 N ، در حالی که افزودنی‌های
 ND و CuO با هم در روغن پایه حل شوند، ضریب اصطکاک کمتری
 نسبت به وجود نانوذرات بصورت جداگانه در روغن بدست می‌دهند و به
 هر حال وجود این دو ذره در هر حالتی نسبت به روغن پایه خالص،
 ضریب اصطکاک را کاهش می‌دهد [۹]. با مشاهده تصاویر SEM^۵
 سطوح سایش تحت بار 100 N (شکل ۳) بدست آمد که وقتی نانوذرات
 $\text{CuO}+\text{ND}$ استفاده می‌شود در مقایسه با روغن پایه خالص، کاهش ۶۷
 درصدی در حجم سایش اتفاق می‌افتد.

(الف)



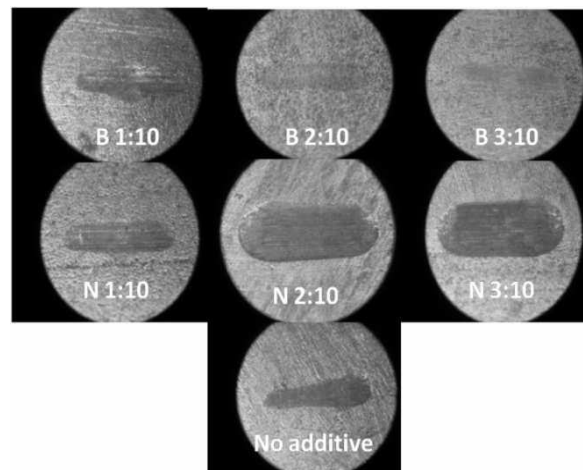
(ب)



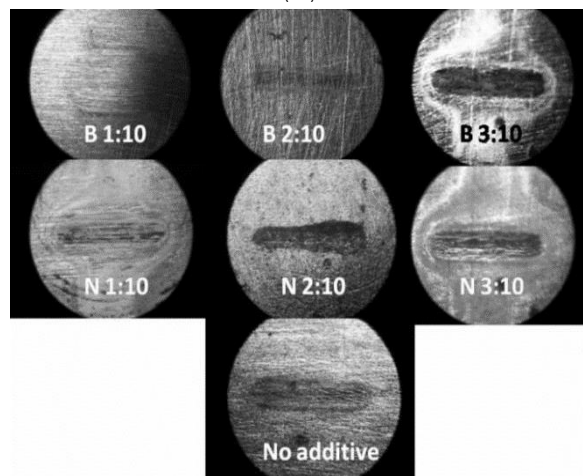
شکل ۳: الف) تصویر SEM از مسیر سایشی قطعه روغنکاری شده با
 روغن خالص، ب) تصویر SEM از مسیر سایشی قطعه روغنکاری
 شده با روغن حاوی نانوذرات $\text{CuO}+\text{ND}$ [۹]

همچنین نتایج نشان داد در حالی که از روغن دنده و فولاد کربن دهی
 شده استفاده می‌شود، نتایج معکوس حالت قبل است و در غلظت پایین -
 تر افزودنی، ضریب اصطکاک بیشتری بدست می‌آید. شکل ۲ الف نتایج
 اثر افزودنی موجود در روغن موتور با غلظت‌های متفاوت را در سایش
 نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که با استفاده از نانوذرة مس، نسبت به
 وقتی که نانوذرة‌ای استفاده نشود، سایش بیشتر شده و این نتیجه برای
 روغن موتور حاوی اسیدبوریک معکوس است. شکل ۲ ب نتایج اثر
 افزودنی موجود در روغن دنده با غلظت‌های متفاوت را در سایش نشان
 می‌دهد. مشاهده می‌شود که در استفاده از هر دو روغن موتور حاوی
 مس و اسید بوریک با غلظت ۰،۱، نسبت به روغنی که نانوذرة‌ای ندارد،
 سایش بهبود می‌یابد اما در غلظت شدیدتر ۰،۳، سایش بیشتر می‌شود
 [۸].

(الف)



(ب)



شکل ۲: الف) اثر اسیدبوریک (B) و مس (N) موجود در روغن موتور بر
 پدیده سایش، ب) اثر اسیدبوریک (B) و مس (N) موجود در روغن
 دنده بر پدیده سایش [۸]

⁴ Polyalphaolefin

⁵ Scanning electron microscope

¹ Copper oxide

² Boron nitride

³ Nanodiamond

فراگیر شده است تا جایی که جایگزین خیلی از روش‌های آزمایشگاهی می‌شود. روش دینامیک مولکولی از دقیق‌ترین روش‌های شبیه‌سازی است که برای شبیه‌سازی سامانه‌های پیچیده چند ذره‌ای به کار می‌رود. چن و همکاران با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان دادند نانوذره MoS_2 با تغییر سازوکار لغزش به غلتش ضریب اصطکاک را کاهش می‌دهد [۱۰].

هو و همکاران با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی نانو ذره مس در روغن پایه ازت اکتان پرداختند. نتایج نشان داد تشکیل لایه جذب اطراف نانوذرات باعث تولید روانکاری سازگارتر از روغن پایه می‌شود. همچنین نانو ذرات مس تغییر شکل داده و در روانکار ناپدید می‌شوند [۱۱].

در مقاله حاضر، جهت بررسی سازوکار سایشی نانو ذره و اثر فشار در پدیده سایش، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از یک نانو ذره و دو قطعه آهنی، انجام شد. از جمله تولید کنندگان روغن موتورهای حاوی نانوذرات می‌توان موارد زیر را نام برد:

پردیس شیمی باختر تولید کننده روغن موتور نانو اولکا^۱، از فناوری نانوالماس برای تولید این محصول بهره گرفته است و روغن موتورهای نانو بنزینی و دیزلی را در چند سطح کیفیتی عرضه می‌کند [۱۲].

شرکت روانکاران صنعت روغن موتور نانوکمل^۲ را در سطح کیفیت SL به بازار عرضه است [۱۳]. شرکت بهروان زاگرس عرضه کننده روغن موتورهای حاوی نانوالماس و مگنتیت همراه با مس و نیکل است که در سه کیفیت SF، SM و SL ارائه می‌دهد [۱۴].

۲- شبیه‌سازی فرایند نانو سایش

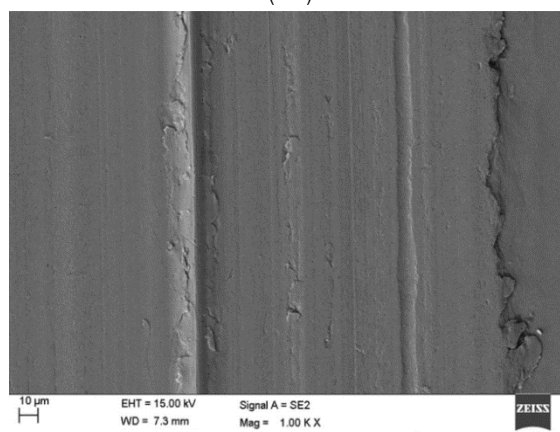
هنگام روشن شدن موتور در حالت سرد، در سرعت های کم و یا اعمال بار زیاد روی ماشین و روانکاری رینگ و سمبه، ضخامت لایه روغن به قدری کم است که تماس فلز به فلز رخ خواهد داد. این امر باعث ایجاد سایش و چسبندگی سطوح به یکدیگر خواهد شد.

معمول‌ترین روش برای جلوگیری از سایش و چسبندگی در روانکاری مرزی، استفاده از روغن هایی است که دارای مواد افزودنی ضدسایش یا فشار پذیر باشند. در این حالت فشار روغن بسیار کم است و بخش اعظم تحمل بار بر دوش نانوذرات است و سیال اثر گذاری کمی دارد. از این رو در این مقاله، شبیه‌سازی فرایند نانو سایش با استفاده از دو قطعه آهنی و یک نانوذره الماس تک کریستال، بین دو قطعه انجام پذیرفته است و از شبیه‌سازی روغن صرف نظر شده است.

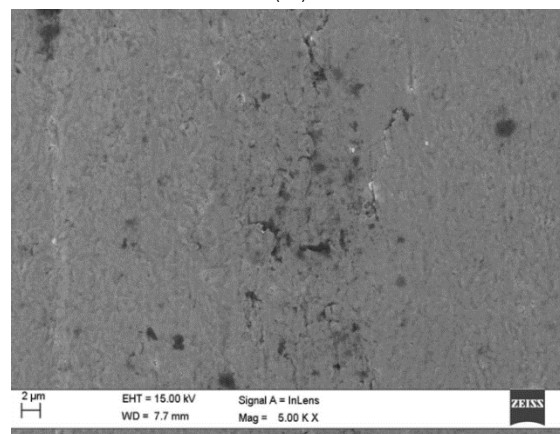
شبیه‌سازی با استفاده از بسته نرم‌افزاری دینامیک مولکولی^۳ Lammps انجام شده است. در این راستا ابتدا شبکه اتمی تولید و سپس با گذشت زمان مناسب به پایداری رسیده است که در ادامه با جزئیات ارائه می‌شود.

همچنین بر اساس آزمایش مشاهده شد در بارگذاری ۲۰ تا ۱۰۰N، در حالی که افزودنی‌های ND و BN با هم در روغن پایه حل شوند، ضریب اصطکاک کمتری نسبت به وجود نانوذرات بصورت جداگانه در روغن بدست می‌دهند و به هر حال وجود این دو ذره در هر حالتی نسبت به روغن پایه خالص، ضریب اصطکاک را کاهش می‌دهد. شکل ۴ مسیر سایش برای حالتی که نانوذرات BN+ND و فقط نانوذره BN به روغن پایه اضافه شده است را تحت بار ۱۰۰N نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که اثر پرداخت سطح نانوذره الماس باید کاهش شدید حجم سایش می‌شود و کیفیت سطح را بهبود می‌بخشد [۹].

(الف)



(ب)



شکل ۴: (الف) تصویر SEM از مسیر سایشی قطعه روغنکاری شده با روغن خالص BN+ND، (ب) تصویر SEM از مسیر سایشی قطعه روغنکاری شده با روغن خالص ND+BN [۹]

به دلیل محدودیت‌های آزمایشگاهی همچون زمان و هزینه بر بودن انجام آزمایش‌ها در مقیاس میکرو و نانو، علم محاسباتی نانو به عنوان مکمل علوم آزمایشگاهی، محققان را در فهم پدیده‌ها در مقیاس میکرو و نانو یاری می‌کند. در سال‌های اخیر استفاده از رایانه در همه علوم

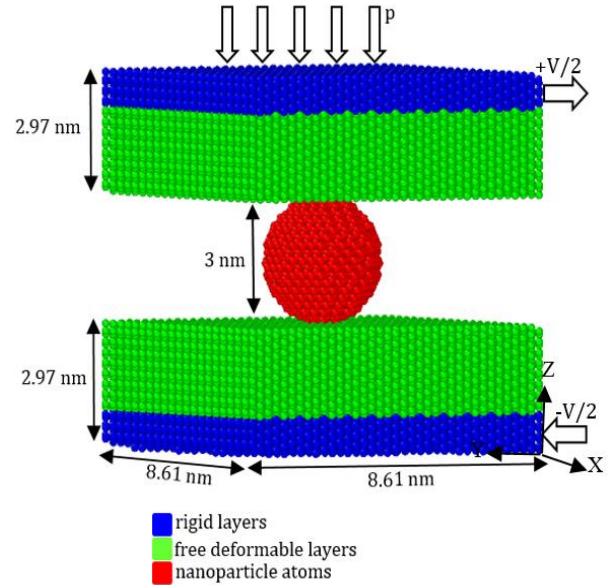
³ Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator

¹ OLKA

² Nano camel

۲-۱- آماده‌سازی نمونه

پیکره‌بندی سامانه شبیه‌سازی در شکل ۵ نمایش داده شده است. قطعه‌های آهنی مشابه، به عنوان جفت اصطکاکی و با شبکه‌بندی BCC^۱ و ثابت شبکه ۰٫۲۸۷ نانومتر عمل می‌کنند. یک نانو ذره به قطر ثابت ۳ نانومتر بین دو قطعه قرار داده شد.



شکل ۵: نمای از الگوی محاسباتی نانو سایش در حضور نانوذره الماس با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

$$E = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], r < r_c \quad (2)$$

که ε انرژی لnard جونز، r فاصله تعادلی بین اتمی، σ فاصله‌ای است که در آن ظرفیت ۰ می‌شود و r_c شعاع قطع ظرفیت اند. جدول ۱ متغیرهای تابع ظرفیت لnard جونز برای برهم‌کنش Fe-C را نمایش می‌دهد.

جدول ۱: متغیرهای تابع ظرفیت لnard جونز Fe-C [۱۸].

$\varepsilon(eV)$	$\sigma(nm)$
۰٫۰۲۵۹۵	۰٫۳۷

– برای ارتباط بین اتم‌های C در نانو ذره، تابع ظرفیت ترسوف^۶ با استفاده از معادلات ۳ و ۴ تعریف می‌شود [۱۷].

$$E = 1 / \left(2 \sum_i \sum_{j \neq i} V_{ij} \right) \quad (3)$$

$$V_{ij} = f_c(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})] \quad (4)$$

که $f_c(r_{ij})$ ، $f_R(r_{ij})$ و $f_A(r_{ij})$ ترتیب تابع قطع، ظرفیت جفتی دافعه و جاذبه هستند که به ترتیب با معادلات ۵-۷ محاسبه می‌شوند. b_{ij} نشان دهنده نوعی وابستگی است که می‌تواند نیروی جاذبه را نسبت به دافعه، تقویت یا تضعیف کند که با استفاده از معادلات ۸-۱۰ محاسبه می‌شود.

$$f_c(r) = \begin{cases} 1 & r < R - D \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin \left[\frac{\pi(r - R)}{2D} \right] & R - D < r < R + D \\ 0 & R + D < r \end{cases} \quad (5)$$

$$V_{ij} = f_c(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})] \quad (6)$$

$$E = 1/2 \sum_i \sum_{j \neq i} V_{ij} \quad (7)$$

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

$$b_{ij} = (1 + \beta^n \delta_{ij}^n)^{-\frac{1}{2n}} \quad (8)$$

$$\delta_{ij} = \sum_{k \neq i,j} f_c(r_{ik}) g(\theta_{ijk}) e^{\gamma_3^m} (r_{ij} - r_{ik})^m \quad (9)$$

۲-۲- میدان‌های نیرو

در این شبیه‌سازی از دو نوع اتم آهن^۲ و کربن^۳ و سه نوع تابع ظرفیت بین اتمی، برای برهم‌کنش بین اتم‌ها استفاده شده است. – برای ارتباط بین اتم‌های Fe در قطعه‌های آهنی، تابع ظرفیت EAM^۴ با استفاده از رابطه (۱) تعریف می‌شود [۱۵ و ۱۶].

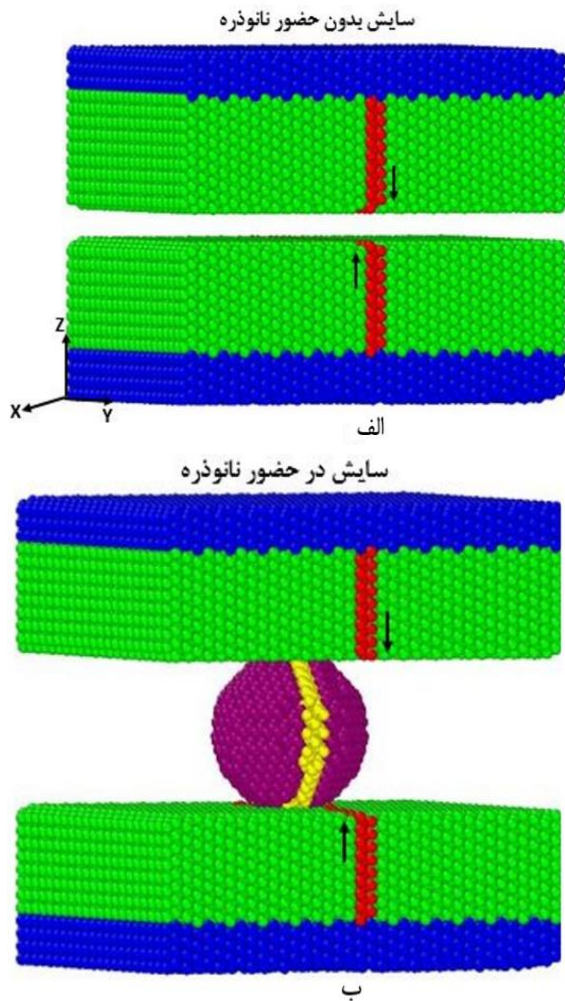
$$E = \sum f_i(\rho h_i) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j(\neq i)} \phi_{ij}(R_{ij}) \quad (1)$$

در واقع این تابع ظرفیت از جمع انرژی ناشی از چگالی الکترونی پس زمینه $f_i(\rho h_i)$ و انرژی ظرفیت 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.

– برای تعامل بین اتم‌های Fe و C، تابع ظرفیت لnard جونز^۵ طبق معادله (۲) استفاده شده است [۱۷].

^۴ Embedded-Atom Method
^۵ Leonard Jones Potential
^۶ Tersoff

^۱ Body-Centered Cubic
^۲ Iron (Fe)
^۳ Carbon (C)



شکل ۶: نمایی از الگوی لغزش و غلتش

نانوذره الماس به عنوان ماده افزودنی روانکار، دارای شکل هندسی کروی بوده و از این بابت می‌تواند در طول لغزش دو سطح اصطکاکی همانند بلبرینگ عمل کند و بین دو سطح غلتش کند و از این طریق مانع تماس مستقیم دو سطح اصطکاک شود. شکل ۷ الگوی دو فرآیند سایش بدون نانوذره و سایش در حضور نانوذره را بعد از اتمام فرآیند نمایش می‌دهد. مطابق شکل ۷-الف، در صورت عدم وجود نانوذره، اتم‌های نوار قرمز رنگ دو قطعه بالا و پایین به یکدیگر پیوستند و در هم فرو رفتند و از راستای خود خارج شده و دچار کشیدگی به سمت چپ و راست خود شدند که ناشی از تغییر شکل زیاد در اتم‌های دو سطح اصطکاک است. در تصویر ب، هنگامی که نانوذره به سامانه اضافه شد، دو قطعه به اندازه قطر نانوذره (۳ نانومتر) از هم فاصله گرفته اند و از تماس آن‌ها جلوگیری شده است. در این حالت، اتم‌های قرمز رنگ روی جفت قطعه اصطکاکی تغییر جهت بسیار ناچیزی دارند که دلیل تغییر شکل اندک در آن است. نوار زرد رنگ روی نانوذره سازوکار غلتیدن نانوذره بین سطوح

$$g(\theta) = \mu_{ijk} \left\{ 1 + \frac{c^2}{d^2} - \frac{c^2}{d^2 + (\cos \theta - \cos \theta_0)^2} \right\} \quad (10)$$

که θ_{ijk} زاویه پیوندی بین بردارهای r_{jk} و r_{ij} است. مقادیر متغیرهای بکار رفته در تابع ظرفیت در جدول ۲ نمایش داده شده است.

جدول ۲: متغیرهای تابع ظرفیت ترسوف C-C [۱۷]

$A = 1393.6 (ev)$	$\mu = 1$
$B = 346.7 (ev)$	$\beta = 0.00000015724$
$C = 38049$	$\lambda_1 = 0.34879 (nm^{-1})$
$D = 0.015 (nm)$	$\lambda_2 = 0.22119 (nm^{-1})$
$d = 4.3484$	$\lambda_3 = 0.0 (nm^{-1})$
$R = 0.195 (nm)$	$n = 0.72751$
$m = 3$	$\cos \theta_0 = -0.57058$

۲-۳- شرایط مرزی و اولیه

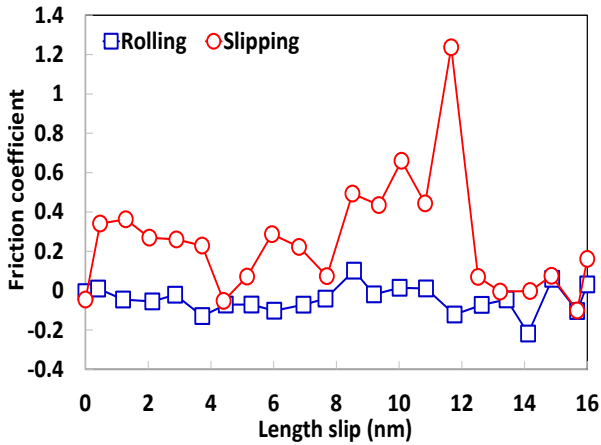
در این شبیه‌سازی سه لایه زیرین و سه لایه بالای قطعه‌های آهنی ثابت در نظر گرفته می‌شود تا در حین فرآیند، دچار تغییر شکل نشوند. به منظور کاهش اثر مقیاس شبیه‌سازی، در راستای محورهای x و y شرایط مرزی دوره‌ای تعریف شده است. ابتدا سامانه به مدت ۵ ps به پایداری می‌رسد. سپس بار نرمال P^1 به تدریج به لایه صلب فوقانی اعمال می‌شود و مجدداً سامانه پایدار می‌شود. سپس لایه‌های مرزی بالا و پایین در جهت مخالف و با سرعت یکسان $50 m/s$ حرکت می‌کنند. دمای کل فرآیند در دمای ثابت $300 K$ تنظیم می‌شود و گام زمانی برابر $1 fs$ است.

۳- نتایج و بحث

شکل ۶ نمایی از دو الگو، الف: لغزش (سایش بدون حضور نانوذره) و ب: غلتش (سایش در حضور نانوذره) را قبل از شروع فرآیند سایش نمایش می‌دهد. در این تصویر دو نوار قرمز رنگ در قطعه‌های آهن بالا و پایین در راستای عمود بر سطح xy ، و یک نوار زرد رنگ روی محیط نانوذره در تصویر سمت راست قرار دارد.

با توجه به اینکه در الگوی لغزش، اتم‌ها در لایه‌های مرزی آزاد میانی توان جنب و جوش و حرکت بالایی دارند و از یک سطح، شرط مرزی برایشان تعریف نشده است، ممکن است به محض شروع فرآیند، اتم‌های بالا و پایین در هم فرو رفته و نیروی بسیار زیادی بهم اعمال کنند که این خود باعث بروز خطا در ادامه فرآیند می‌شود، لذا فاصله کمی (به اندازه لایه روانکار خالص) بین دو قطعه تعریف شده است.

¹ Normal Load



شکل ۸: نمودار ضریب اصطکاک لغزشی و غلتشی

مقادیر متوسط ضریب اصطکاک حاصل از شکل ۸ در جدول ۳ نمایش داده شده است.

جدول ۳: متوسط ضریب اصطکاک لغزشی و غلتشی

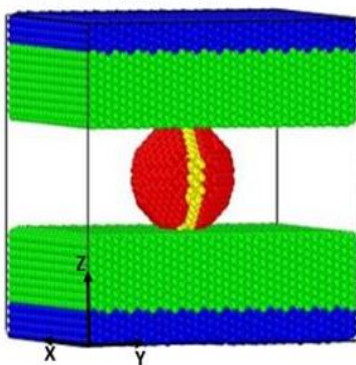
متوسط ضریب اصطکاک	تفاوت نسبت به حالت بدون ذره (%)
۰,۲۴	۰
۰,۰۵	۷۹

۱-۳- بررسی اثر فشار وارد بر سطح در فرآیند نانسایز

شکل ۹ الگوی سامانه شبیه‌سازی تحت بار اعمالی در سه مقدار متفاوت ۳۵۰، ۵۰۰ و ۶۵۰ MPa را بعد از اعمال بار نمایش می‌دهد. از آنجا که الماس نانوذره‌ای سخت با توان تحمل بار بالاست، قابلیت تحمل فشار تا ۶۵۰ MPa (و بالاتر) را دارد و مشاهده می‌شود که بعد از اعمال بار تغییر شکل نداده و پیوندهای اتمی آن گسیخته نمی‌شود و حالت کروی خود را حفظ می‌کند و به وظیفه خود به عنوان ذره میانی غلنده عمل می‌کند.

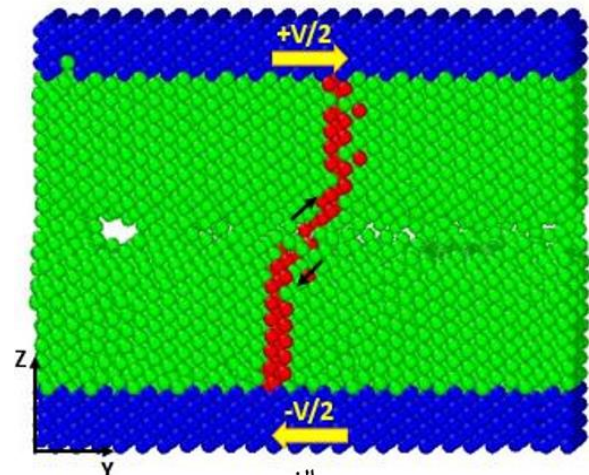
(الف)

قبل از اعمال بار

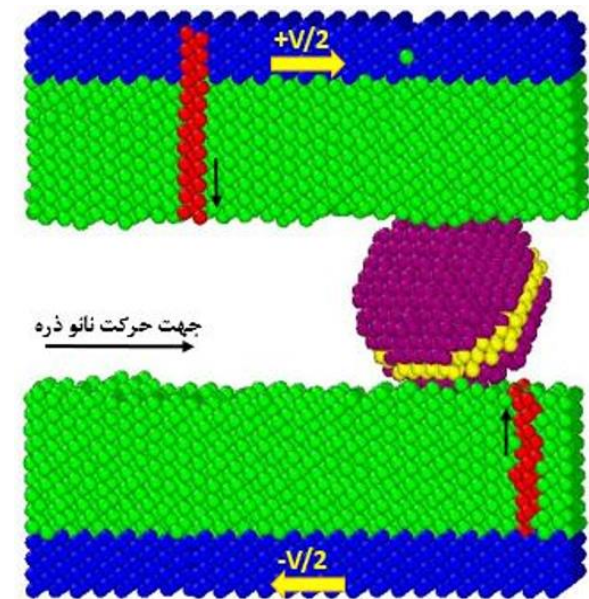


اصطکاک را به خوبی نمایش می‌دهد. هم‌چنین نانوذره الماس در طول فرآیند دچار تغییر شکل نشده و هم‌چنان حالت کروی خود را حفظ کرده است. بنابراین، می‌توان گفت نانوذره میزان سایش را کاهش داده و ناهمواری^۱ سطح فرسوده را بهبود می‌بخشد. این فرآیند تحت بار ۵۰۰ MPa انجام شده است.

(الف)



(ب)

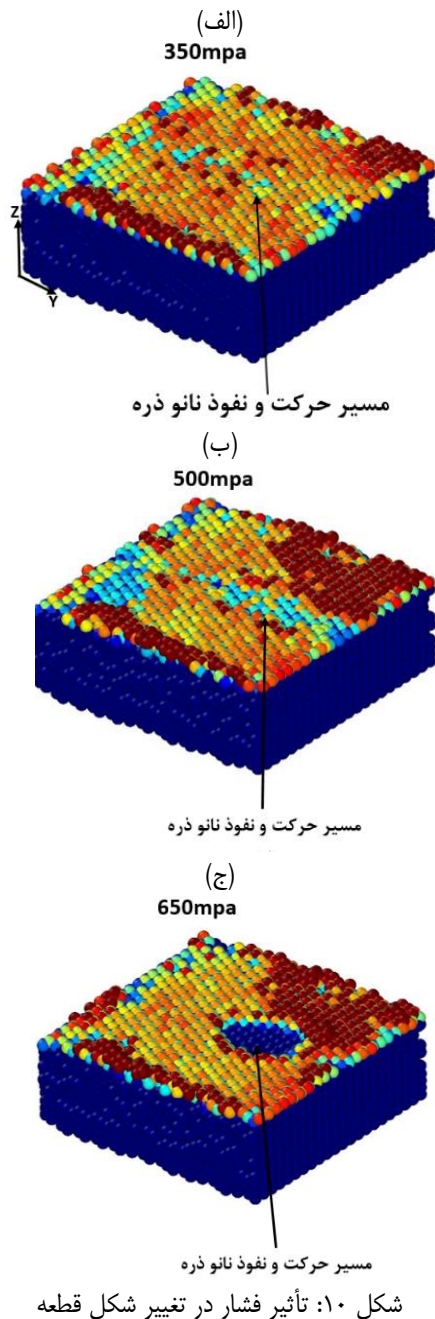


شکل ۹: سایش (الف) لغزشی، (ب) غلتشی بعد از اتمام فرآیند

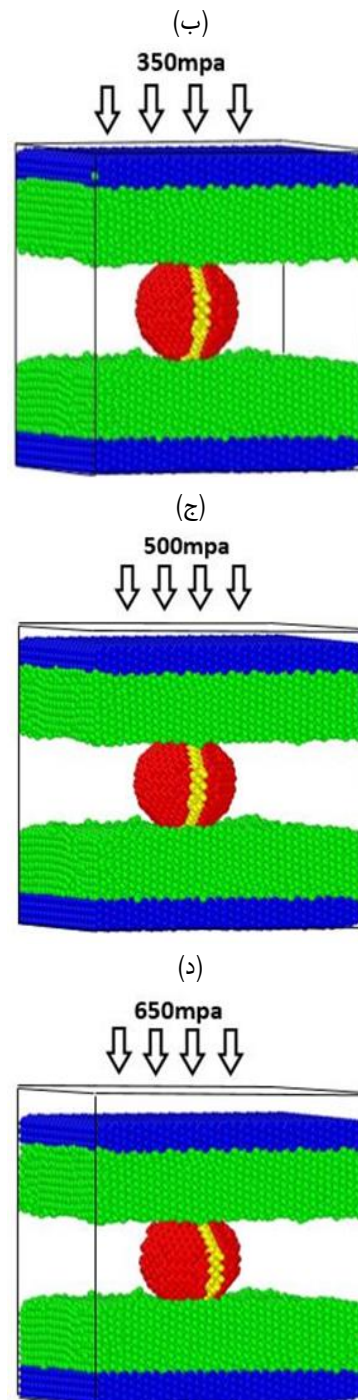
شکل ۸ نمودار ضریب اصطکاک در فرآیند سایش لغزشی و غلتشی بدست آمده از نتایج تحقیق حاضر را نشان می‌دهد. طبق این نمودار همانگونه که انتظار می‌رفت بعد از افزودن نانوذره به سامانه و تبدیل لغزش صفحات به غلتش نانوذره، ضریب اصطکاک کاهش زیادی پیدا کرده است.

^۱ Morphology

۶۵۰ MPa مشاهده می‌شود که اثر حفره‌ای به اندازه قطر نانوذره ایجاد شده است و برخلاف دو حالت قبل شیار ایجاد دیده نمی‌شود. با اعمال فشار بالای ۶۵۰ MPa نانوذره درون قطعه نفوذ کرده است و اتم‌های آهن اطراف آن، اجازه حرکت به جلو و عقب به نانوذره نمی‌دهند و فقط قادر است در محل نفوذ حرکت چرخش داشته باشد و با حفظ فاصله بین دو سطح اصطکاکی از تماس آن‌ها جلوگیری کرده و مانع ایجاد سایش و اصطکاک شود.



جدول ۴ میزان نفوذ نانوذره درون آهن را بعد از اعمال فشار، برای سه فشار متفاوت نشان می‌دهد.



شکل ۹: سامانه نانو سایش تحت فشارهای متفاوت

شکل ۱۰ تغییر شکل ایجاد شده روی سطح قطعه پایین، تحت سه فشار متفاوت و بعد از اتمام فرآیند را نمایش می‌دهد. آن طور که مسیر حرکت نانو ذره روی شکل مشخص است، در فشار ۳۵۰ MPa، نانو ذره نفوذ ناچیزی در قطعه داشته اما از اثر باقی مانده روی سطح می‌توان فهمید که طول مسیر را با حرکت غلتشی گذرانده است. در فشار ۵۰۰ MPa، در مرکز قطعه و در راستای y ، شیاری نسبتاً عمیق‌تر نسبت به فشار ۳۵۰ MPa ایجاد شده است که نشان‌دهنده نفوذ بیشتر نانوذره درون قطعه است. در شکل سمت راست و در فشار

بعد از اعمال فشار به قطعه اصطکاکی بالا و شروع حرکت صفحات لغزشی، نانوذره شروع به غلتیدن می‌کند و نقش بلبرینگ بین سطوح را ایفا می‌کند و با این کار حرکت لغزشی صفحات اصطکاکی به حرکت غلتشی نانوذره تبدیل شده و ضریب اصطکاک لغزشی به ضریب اصطکاک غلتشی تبدیل شده و کاهش چشم‌گیری پیدا می‌کند.

به منظور بررسی اثر فشار، شبیه‌سازی فرآیند سایش تحت بارهای متفاوت ۳۵۰، ۵۰۰ و ۶۵۰ Mpa انجام شد. بر اساس نتایج بدست آمده در فشار ۳۵۰ Mpa نانوذره نفوذ کمتری در قطعه می‌کند و اثر بجای مانده حاصل از غلتش نانوذره روی سطح کم عمق است و با افزایش فشار تا ۶۵۰ Mpa نانوذره بیشترین نفوذ در قطعه را دارد به نحوی که اتم‌های آهن اطراف نانوذره مانع از حرکت غلتشی رو به جلوی نانو ذره می‌شوند و در این مرحله نانوذره با حفظ فاصله بین دو سطح در بهبود اصطکاک نسبت به حالتی که نانوذره‌ای نباشد تأثیر می‌گذارد. طبق نتایج با افزایش فشار ضریب اصطکاک افزایش یافت.

فهرست علائم

a	ثابت در برهم‌کنش‌های دو جسمی
b	ثابت در برهم‌کنش‌های دو جسمی
b_{ij}	ضریب استحکام پیوند ij
c	اثر نیروی زاویه‌ای
D	انرژی پیوستگی، eV
d	وضوح وابستگی زاویه‌ای
E	تابع ظرفیت
f_A	ظرفیت جفتی جاذبه، eV
f_c	تابع قطع
f_R	ظرفیت جفتی دافعه، eV
m	ثابت در برهم‌کنش‌های سه جسمی
n	ثابت در برهم‌کنش‌های دو جسمی
R	متغیر برهم‌کنش‌های دو جسمی
r_{ij}	طول پیوند ij

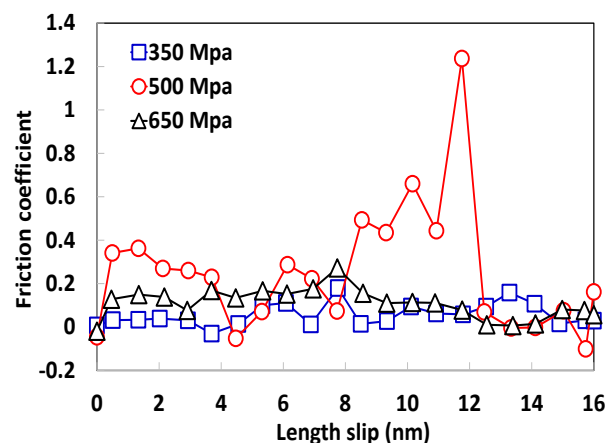
علائم یونانی

β	ثابت در برهم‌کنش‌های دو جسمی
δ_{ij}	عدد همسایگی موثر اتم i
θ	زاویه پیوند
θ_{ijk}	زاویه i بین دو بردار ij و jk
$\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$	ضرایب برداری، nm^{-1}
μ	ثابت در برهم‌کنش‌های دو جسمی

جدول ۴: نفوذ نانوذره در آهن تحت فشارهای متفاوت

فشار (مگاپاسکال)	نفوذ نانوذره در دوسطح (نانومتر)
۳۵۰	۰٫۱۶
۵۰۰	۱٫۸۶
۶۵۰	۳٫۸۱

شکل ۱۱ نمودار ضریب اصطکاک بر حسب طول لغزش را برای غلتش نانو ذره در سه فشار متفاوت نمایش می‌دهد. طبق این منحنی-ها، با افزایش فشار ضریب اصطکاک افزایش می‌یابد.



شکل ۱۱: نمودار ضریب اصطکاک بر حسب لغزش برای سایش تحت فشارهای متفاوت

جدول ۵ متوسط ضریب اصطکاک را تحت فشارهای متفاوت نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که کمترین ضریب اصطکاک متعلق کمترین فشار و بیشترین ضریب اصطکاک متعلق به بیشترین فشار است.

جدول ۵: متوسط ضریب اصطکاک فرآیند سایش تحت فشار متفاوت

فشار (مگاپاسکال)	متوسط ضریب اصطکاک
۳۵۰	۰٫۰۶
۵۰۰	۰٫۰۷۴
۶۵۰	۰٫۱۳

۴- نتیجه‌گیری

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند نانو سایش با دو قطعه آهنی و یک نانو ذره سخت الماسی که بین دو قطعه قرار گرفته است در دمای ثابت ۳۰۰K، سرعت ثابت ۱۰۰m/s انجام شد. از آنجا که الماس دارای شکل هندسی کروی است، افزودن آن به روغن پایه باعث می‌شود بین سطوح درگیر اصطکاکی فاصله ایجاد کند و از تماس مستقیم آن‌ها جلوگیری کند که این موضوع می‌تواند تا حد قابل توجهی منجر به کاهش ضریب اصطکاک بین سطوح شود.

مراجع و منابع

- [9] Raina, A. and Anand, A., 2017. Tribological investigation of diamond nanoparticles for steel/steel contacts in boundary lubrication regime. *Applied nanoscience*, 7(7), pp.371-388.
- [10] Chen, C.S., Cian, H.J., Yu, C.H. and Huang, C.W., 2014. Friction coefficient calculation and mechanism analysis for MoS2 nanoparticle from molecular dynamics simulation. *Procedia Engineering*, 79, pp.617-621.
- [11] Foiles, S.M., Baskes, M.I. and Daw, M.S., 1986. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Physical review B*, 33(12), p.7983.
- [12] <https://olckanano.com>.
- [13] <http://ravankaran.com>.
- [14] <http://behrazanzagros.com>.
- [15] Daw, M.S. and Baskes, M.I., 1984. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Physical Review B*, 29(12), p.6443.
- [16] Daw, M.S. and Baskes, M.I., 1984. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals. *Physical Review B*, 29(12), p.6443.
- [17] Atomic, L.S. and Simulator, M.M.P., 2003. LAMMPS Users Manual.
- [18] Hu, C., Bai, M., Lv, J., Kou, Z. and Li, X., 2015. Molecular dynamics simulation on the tribology properties of two hard nanoparticles (diamond and silicon dioxide) confined by two iron blocks. *Tribology International*, 90, pp.297-305.
- [19] Chen, C.S., Cian, H.J., Yu, C.H. and Huang, C.W., 2014. Friction coefficient calculation and mechanism analysis for MoS2 nanoparticle from molecular dynamics simulation. *Procedia Engineering*, 79, pp.617-621.
- [1] Vadiraj, A., Manivasagam, G., Kamani, K. and Sreenivasan, V.S., 2012. Effect of nano oil additive proportions on friction and wear performance of automotive materials. *Tribology in Industry*, 34(1), pp.3-10.
- [2] Shafi, W.K. and Charoo, M.S., 2018. NanoLubrication Systems: An Overview. *Materials Today: Proceedings*, 5(9), pp.20621-20630.
- [3] Lee, K., Hwang, Y., Cheong, S., Choi, Y., Kwon, L., Lee, J. and Kim, S.H., 2009. Understanding the role of nanoparticles in nano-oil lubrication. *Tribology Letters*, 35(2), pp.127-131.
- [4] Ku, B.C., Han, Y.C., Lee, J.E., Lee, J.K., Park, S.H. and Hwang, Y.J., 2010. Tribological effects of fullerene (C 60) nanoparticles added in mineral lubricants according to its viscosity. *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing*, 11(4), pp.607-611.
- [5] Liu, G., Li, X., Qin, B., Xing, D., Guo, Y. and Fan, R., 2004. Investigation of the mending effect and mechanism of copper nano-particles on a tribologically stressed surface. *Tribology Letters*, 17(4), pp.961-966.
- [6] Hwang, Y., Lee, C., Choi, Y., Cheong, S., Kim, D., Lee, K., Lee, J. and Kim, S.H., 2011. Effect of the size and morphology of particles dispersed in nano-oil on friction performance between rotating discs. *Journal of Mechanical Science and Technology*, 25(11), pp.2853-2857.
- [7] Hu, C., Bai, M., Lv, J., Kou, Z. and Li, X., 2015. Molecular dynamics simulation on the tribology properties of two hard nanoparticles (diamond and silicon dioxide) confined by two iron blocks. *Tribology International*, 90, pp.297-305.
- [8] Vadiraj, A., Manivasagam, G., Kamani, K. and Sreenivasan, V.S., 2012. Effect of nano oil additive proportions on friction and wear performance of automotive materials. *Tribology in Industry*, 34(1), pp.3-10.



Modeling of Motor Oil Containing Diamond Nanoparticle Between two Iron Abrasion Surfaces Using Molecular Dynamics Methods

N. Mahdiyar¹, S. V. Hosseini^{*2}

¹ PhD Candidate, Faculty of Mechanical and Mechatronics Engineering, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran, n.mahdiyar2013@email.com

² Assistant Professor, Faculty of Mechanical and Mechatronics Engineering, Shahrood University of Technology, Shahrood, Iran, v_hosseini@shahroodut.ac.ir

^{*}Corresponding Author

ARTICLE INFO

Article history:

Received: 20 December 2020

Accepted: 30 January 2021

Keywords:

Simulation

Molecular Dynamics

Nano-Wear

Slipping

Rolling

ABSTRACT

In the present paper, molecular dynamics simulations of nano-wear were performed using a diamond nanoparticle with a diameter of 3 nm enclosed by two iron blocks. The whole process remained constant at 300 K and the slip velocity was selected for the upper and lower 100 m/s boundary layers. The study of the diamond lubrication mechanism shows that nanoparticles convert the sliding motion of friction surfaces into rolling motion. Based on the obtained results, the use of a diamond nanoparticle makes it possible to reduce the coefficient of friction from 0.24 to 0.05. To investigate the effect of pressure on the wear process, simulation of the wear process at constant temperature and velocity was performed under three different pressures of 350, 500, and 650 MPa. The results showed that nanoparticle does not deform under higher pressures and retain their spherical shape and improve the friction by creating a distance between the surfaces of friction compared to when there are no nanoparticles. However, in the presence of nanoparticles, the coefficient of friction increased with increasing pressure.

