

بررسی رفتار مکانیکی فوم‌های آلومینیومی تحت آزمون تک‌محوری با به‌کارگیری روش شبکه‌بندی و رونویی

امیررضائی صامتی (استادیار)

گروه مهندسی عمران، دانشکده مهندسی، دانشگاه بوعلی‌سینا، همدان

مهندسی عمران شریف، (بهار ۱۴۰۳)
دوره ۳۰، شماره ۱، صص. ۹۸-۹۱، (پژوهشی)

فوم‌های آلومینیومی از مصالح نوینی هستند که در اجزاء مختلف، همانند پانل‌های ساندویچی کاربردهای متعددی دارند. این دسته از مواد با توجه به چگالی پایین، وجود حفره‌های ریز، عایق صوتی، و مقاومت در برابر خوردگی، ویژگی‌های منحصر به فردی دارند. در مطالعه‌ی حاضر، روش مبتنی بر شبکه‌بندی و رونویی برای شبیه‌سازی پیکربندی نانوفوم‌های آلومینیومی پیشنهاد شده است، که قابلیت‌های بالایی در مدل‌سازی ساختارهای متخلخل نامنظم با چگالی‌ها، اندازه‌ی حفره‌ها و ضخامت دیوارهای مختلف به‌صورت پایدار دارند. نتایج حاصل، بیانگر سرعت و توانایی بالای روش رونویی برای ایجاد ساختارهای نانوفوم منطبق با تصاویر آزمایشگاهی است. رفتار مکانیکی نمونه‌های نانوفوم آلومینیومی تحت آزمون بارگذاری تک‌محوری با استفاده از روش دینامیک مولکولی و پتانسیل بین‌اتمی EAM بررسی شده است. در تمامی نمونه‌ها، براساس تئوری همگن‌سازی، شرایط مرزی به‌صورت پرپودیک لحاظ و تغییر شکل شبه‌استاتیکی به نمونه اعمال شده است. نتایج بیانگر وابستگی بالای رفتار مکانیکی نانوفوم‌ها به میزان چگالی و تخلخل نمونه‌هاست. همچنین، مقایسه‌ی مدول کشسان نمونه‌ها با نتایج آزمایشگاهی، بیانگر قابلیت بالای روش رونویی در ایجاد ساختارهای متخلخل آلومینیومی است.

واژگان کلیدی: پانل ساندویچی، نانوفوم آلومینیوم، شبکه‌بندی و رونویی، مدل‌سازی ساختار اتمی مواد متخلخل، آزمون تک‌محوری کشش.

a.rezaeisameti@basu.ac.ir

۱. مقدمه

نسبت به آلومینیوم معمولی (چگالی نسبی ۳ تا ۸۰ درصد) تولید کنند. [۱] در کنار چگالی پایین، قابلیت بالای فوم‌ها برای جذب و اتلاف انرژی می‌تواند منجر به افزایش میزان میرایی سازه شود و در نتیجه، خرابی‌های ناشی از بارگذاری لرزه‌یی را کاهش دهد. بر این اساس، گنابادی و دامغانی (۲۰۱۷)، [۲] پانل‌های ساندویچی تولید شده با هسته‌ی فوم آلومینیومی را تحت آزمون ضربه با سرعت پایین قرار دادند و میزان اتلاف انرژی در المان‌های مذکور را بررسی کردند. مطالعات ایشان نشان داد که نرخ اتلاف انرژی در پانل‌ها مستقیماً به میزان انرژی ضربه بستگی دارد. لیو^۲ و همکاران (۲۰۱۵)، [۳] با افزودن پلیمرهایی به فوم آلومینیوم، ساختاری ایجاد کردند که به‌عنوان میرگرا براساس رفتار هیستریزس، توانایی اتلاف انرژی بسیار بالایی دارد و نیز نشان دادند که مواد اخیر، توانایی برگشت پذیری در چرخه‌های متعدد بارگذاری و نیز ظرفیت میرایی قابل توجهی دارد.

پانل‌های ساندویچی با هسته‌ی فوم آلومینیومی،^۱ از جمله قطعاتی هستند که می‌توانند در صنعت ساختمان به‌عنوان دیوارهای پیش‌ساخته، جداکننده‌ها در فضا‌های اداری و سالن‌ها و همچنین در سقف‌ها استفاده شوند. به‌کارگیری این دسته از پانل‌های ساندویچی در صنعت ساختمان با توجه به وزن حجمی پایین، مقاومت در برابر آتش‌سوزی و داشتن نسبت سختی به وزن بالای فوم‌های آلومینیومی در راستای سبک‌سازی و کاهش نیروهای وارد بر سازه خواهد بود. [۱] از این رو، استفاده از اجزاء نوین مذکور می‌تواند نقش مؤثری در صنعتی‌سازی ساختمان و بهبود عملکرد آن ایفا کند. براساس مطالعات صورت‌گرفته، قابلیت تولید فوم‌های آلومینیومی با روش‌های متعدد و اقتصادی فراهم شده است، که می‌توانند فوم‌هایی را با چگالی بسیار کمتر

تاریخ: دریافت ۱۸/۲/۱۴۰۳، اصلاحیه ۲۳/۴/۱۴۰۳، پذیرش ۲۶/۴/۱۴۰۳.

استناد به این مقاله:

رضائی صامتی، امیر، ۱۴۰۳. بررسی رفتار مکانیکی فوم‌های آلومینیومی تحت آزمون تک‌محوری با به‌کارگیری روش شبکه‌بندی و رونویی. مهندسی عمران شریف، ۴۰(۱)،

صص. ۹۸-۹۱. DOI:10.24200/J30.2023.62214.3215

در نهایت در بخش چهارم، نتایج حاصل از مدل‌سازی عددی ارائه و به بررسی نتایج پرداخته شده است.

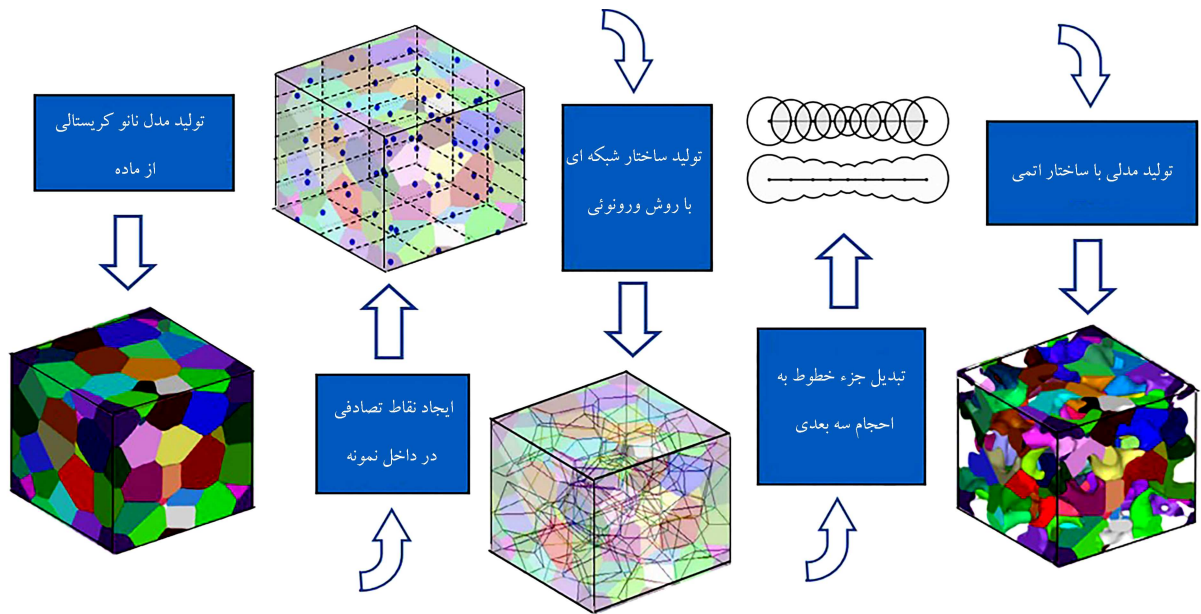
۲. ایجاد پیکربندی اولیه‌ی نانوفوم آلومینیومی براساس شبکه‌بندی ورونوئی

همان‌گونه که اشاره شد، برای ایجاد پیکربندی اولیه‌ی ساختارهای متخلخل فلزی، روش‌های مختلفی توسط پژوهشگران پیشنهاد شده است. به‌طورکلی، در روش‌های عددی تولید پیکربندی اولیه‌ی نانوفوم‌های فلزی، سرعت و دقت شبیه‌سازی برای ایجاد ساختارهای متخلخل فلزی، اهمیت بسیاری دارد. تصاویر آزمایشگاهی ارائه‌شده از ساختار متخلخل نانوفوم فلزات، بیانگر وجود ساختار هندسی پیچیده و نامنظم در این دسته از مواد است که بر اساس آن، تولید پیکربندی آنها با استفاده از اعمال تجزیه‌ی آلیاژ دو فلزی می‌تواند هزینه‌ی محاسباتی بسیار بالایی در برداشته باشد.^[۱۶] از جمله روش‌های پیشنهادی برای ایجاد پیکربندی نامنظم و متخلخل مواد نانوفوم فلزات، استفاده از روش شبکه‌بندی ورونوئی است، که توسط یلدیز و همکاران (۲۰۲۰ و ۲۰۲۰)^[۱۷، ۱۶] برای تولید نانوفوم طلا استفاده شده است، روشی صریح و منطبق بر دیدگاه هندسی بوده است. از این روش سرعت بالایی برای شبیه‌سازی نانوفوم‌های فلزات دارد. براین اساس، در مطالعه‌ی حاضر، به‌کارگیری روش شبکه‌بندی ورونوئی برای تولید ساختار اولیه‌ی نانوفوم‌های آلومینیوم بررسی و دقت نتایج حاصل با مقایسه‌ی پیکربندی و خواص مکانیکی نمونه‌ی ایجادشده با نتایج آزمایشگاهی اعتبارسنجی شده است.

جزئیات پیاده‌سازی روش شبکه‌بندی ورونوئی برای تولید نانوفوم فلزات در شکل ۱ مشاهده می‌شود، که مطابق آن فرایند ایجاد نانوفوم فلزی براساس روش شبکه‌بندی ورونوئی شامل پنج مرحله است: در گام اول، ساختار پلی‌کریستالی فلز در حالت بدون تخلخل ایجاد می‌شود. این ساختار و محدوده‌ی نواحی مختلف با رنگ‌بندی در شکل ۱ نشان داده شده است. در گام دوم، تعدادی نقاط تصادفی در داخل نمونه انتخاب می‌شود. این نقاط باید به نحو مناسبی انتخاب شوند تا خیلی نزدیک به یکدیگر و یا سطح نمونه نباشند. کمینه‌ی فاصله بین نقاط تصادفی و تعداد آنها، از جمله عوامل کنترل‌کننده در ساختار مورفولوژی فوم است. در گام سوم، براساس نقاط تصادفی تعیین شده در مرحله‌ی دوم، شبکه‌بندی ورونوئی بر روی نمونه ایجاد می‌شود. این شبکه‌بندی براساس شکل‌های چندوجهی محدب غیرهم‌پوشان صورت می‌پذیرد. در گام چهارم، خطوط مرزی در شبکه‌بندی ورونوئی به‌صورت احجام سه‌بعدی در نظر گرفته می‌شوند. این عمل با فرض کره‌هایی متقاطع با یکدیگر در طول خطوط صورت می‌پذیرد. اندازه‌ی کره‌های مذکور و فاصله‌ی آنها، نقش اساسی در کنترل اندازه‌ی حفره‌ها و میزان زوایا و گوشه‌های حفره‌ها در نمونه‌ی نهایی دارد. نهایتاً در گام آخر، بخش‌هایی از ساختار کامل اتمی، که در داخل احجام سه‌بعدی به‌دست آمده از گام قبلی قرار می‌گیرد، حذف و نمونه‌ی با ساختار متخلخل اسفنجی شکل ایجاد می‌شود. این روش با توجه به اینکه توانایی کنترل عوامل مختلف، از جمله: ابعاد نمونه، چگالی نمونه‌ی نهایی، اندازه و زاویه‌های حفره‌ها را دارد، قابلیت پیاده‌سازی بالایی دارد و می‌تواند برای بررسی نمونه‌های مختلف استفاده شود.^[۱۸] همچنین همان‌گونه که مشاهده می‌شود، روش شبکه‌بندی ورونوئی صریح است و با به‌کارگیری مفاهیم هندسی در زمان کمی می‌تواند ساختار متخلخل را برای نمونه ایجاد کند. در مطالعه‌ی حاضر، روش شبکه‌بندی ورونوئی برای ایجاد پیکربندی اولیه‌ی نانوفوم‌های آلومینیومی

با توجه به کاربردهای گسترده‌ی فوم‌های آلومینیومی، مطالعات آزمایشگاهی متعددی برای تعیین رفتار مکانیکی فوم‌های آلومینیومی تحت شرایط بارگذاری‌های مختلف انجام شده است. در این راستا، لازرو و داویلا^[۳] (۲۰۱۳)،^[۵] رفتار مکانیکی فوم‌های آلومینیومی را تحت آزمون فشار بررسی کردند. تاناکا^۴ و همکاران (۲۰۱۱)،^[۶] با استفاده از آزمایش ضربه با سرعت بالا، میزان جذب انرژی در فوم آلومینیومی را تعیین کردند. مشاهده‌های آنها شکست ناهموار در ساختار فوم آلومینیوم در طول ضربه با سرعت بالا را نشان داد. مونتانی^۵ (۲۰۰۵)،^[۲] در آزمون‌های فشاری استاتیکی و دینامیکی به بررسی تأثیر نرخ کرنش در رفتار مکانیکی فوم‌های آلومینیومی و ظرفیت جذب انرژی در آنها پرداخت و دریافت که نرخ کرنش در فوم‌هایی با ساختار سلولی باز، تأثیر کم و در فوم‌هایی با ساختار سلولی بسته، تأثیر قابل توجهی دارد. در حال حاضر، با پیشرفت‌های صورت‌گرفته در سال‌های اخیر، امکان تولید فوم‌های آلومینیومی با اندازه‌ی حفره‌های بسیار زیر نیز فراهم شده است. سوارز^۶ و همکاران (۲۰۱۴)،^[۷] پینا^۷ و همکاران (۲۰۲۱)،^[۸] و یانگ^۸ و همکاران (۲۰۲۱)،^[۹] فوم آلومینیومی با حفره‌هایی در ابعاد نانو تولید و خواص مکانیکی آن را ارزیابی کردند.

با توجه به هزینه‌ی بالای بررسی آزمایشگاهی رفتار مکانیکی نانوفوم‌های آلومینیومی، شبیه‌سازی‌های عددی می‌تواند به‌عنوان ابزاری مناسب برای درک بهتر پاسخ‌های این دسته از مواد در نظر گرفته شود. روش دینامیک مولکولی با مدل‌سازی پدیده‌ها با دقت اتمی از جمله روش‌های عددی است که در این زمینه می‌تواند عملکرد مناسبی داشته باشد. در به‌کارگیری روش دینامیک مولکولی برای بررسی رفتار مکانیکی نانوفوم آلومینیوم، تولید پیکربندی اولیه‌ی مناسب از ساختار متخلخل این ماده بسیار حائز اهمیت است. به‌طورکلی، در مطالعات عددی صورت‌گرفته بر روی نانوفوم‌های فلزی، روش‌های مختلفی به‌منظور پیکربندی اولیه‌ی ساختار هندسی پیچیده این دسته از مواد ارائه شده است. کروسان^۹ و همکاران (۲۰۰۷)،^[۱۰] فارکس^{۱۰} و همکاران (۲۰۱۳)^[۱۱] و رویستس^{۱۱} و همکاران (۲۰۱۶)،^[۱۲] از روش مبتنی بر تحلیل میدان فازی و تجزیه‌ی آلیاژ دو فلزی برای این منظور استفاده کردند. مطالعات منگپودی^{۱۲} و همکاران (۲۰۱۶)،^[۱۳] نیز نشان داد که روش مذکور می‌تواند پیکربندی اولیه‌ی مناسب برای ساختار متخلخل نانوفوم را مدل کند، اما خواص مکانیکی نمونه‌های ایجاد شده با روش اخیر، تفاوت محسوسی با نتایج آزمایشگاهی دارد. گیری^{۱۳} و همکاران (۲۰۱۴)،^[۱۴] از حفره‌های کروی با اندازه‌های تصادفی برای تولید ساختار متخلخل استفاده کردند. مقایسه‌ی پیکربندی نمونه‌های تولید شده با روش ذکرشده با تصاویر آزمایشگاهی نانوفوم‌ها، بیانگر ناتوانی آن در تولید پیکربندی نانوفوم‌های فلزی است. سوپارسالان^{۱۴} و همکاران (۲۰۱۸)،^[۱۵] با به‌کارگیری میدان تصادفی گوسین و برهم نهی امواج سینوسی ایستاده با طول موج‌های ثابت و با جهت‌های متمایز، ساختار اولیه‌ی نانوفوم‌های فلزی را ایجاد کردند. یلدیز^{۱۵} و همکاران (۲۰۱۷ و ۲۰۲۰)،^[۱۶، ۱۷] براساس روش شبکه‌بندی ورونوئی، ساختار اولیه‌ی نانوفوم طلا را ایجاد کردند و دریافتند که روش شبکه‌بندی ورونوئی برای تولید پیکربندی اولیه‌ی ساختار متخلخل نانوفوم طلا، توانایی بالایی دارد. براین اساس در مطالعه‌ی حاضر، به‌کارگیری روش شبکه‌بندی ورونوئی برای تولید نمونه‌های نانوفوم آلومینیوم، نمونه‌های حاصل از لحاظ پیکربندی و خواص مکانیکی آنها با نتایج آزمایشگاهی بررسی و ارزیابی شده‌اند. در ادامه، در بخش دوم، به بیان نحوه‌ی ایجاد پیکربندی اولیه‌ی نانوفوم براساس شبکه‌بندی ورونوئی پرداخته شده است. همچنین توانایی روش شبکه‌بندی ورونوئی در ساخت نمونه‌های با چگالی، اندازه‌ی حفره‌ها و ضخامت دیوارهای مختلف بررسی و در بخش سوم، جزئیات مدل‌سازی رفتار مکانیکی نانوفوم آلومینیوم براساس روش دینامیک مولکولی ارائه شده است.



شکل ۱. جزئیات مدل سازی فوم فلزی با روش شبکه بندی ورونوی. [۱۲]

که در آن، انرژی کل سیستم، $\rho_{h,i}$ چگالی الکترونی کل بر روی اتم i ، ϕ_{ij} چگالی الکترونی ناشی از اتم j ، $\rho_{h,i}$ بردار فاصله بین اتم های i و j و F_i اندرکنش دو ذره یی بین اتمی و F_i انرژی مدفون شده برای اتم i است. مطابق رابطه ی پتانسیل EAM شامل دو بخش مجزاست: بخش اول، بیانگر اندرکنش جفتی بین اتم هاست و بخش دوم، امکان لحاظ کردن اندرکنش های چند اتمی را برای پتانسیل EAM فراهم می سازد. [۲۳] در پژوهش حاضر، از پارامترهای ارائه شده توسط پان و میشین (۲۰۰۹) [۲۴] برای مدل سازی آلومینیوم براساس پتانسیل EAM استفاده شده است.

نمونه های اولیه به صورت مکعبی شکل با ابعاد ۱۶ نانومتر در نظر گرفته شده اند، که در حالت بدون تخلخل در برگیرنده ی حدود ۲۵۰ هزار اتم آلومینیوم با ساختار پلی کریستالی هستند. شرایط مرزی نمونه در هر سه جهت به صورت پر یودیک در نظر گرفته شده است، تا نتایج حاصل از تحلیل نمونه، قابلیت تعمیم به نمونه های بزرگ تر را داشته باشد؛ به عبارت دقیق تر، نمونه ی ایجاد شده را بتوان به صورت یک المان حجمی نمونه (RVE) [۱۸] از ساختار یک نانوفوم آلومینیومی در نظر گرفت. پس از ایجاد پیکربندی اولیه براساس روش شبکه بندی ورونوی، ابتدا نمونه باید تحت شرایط محیطی به حالت پایدار قرار گیرد. برای این منظور، پس از تولید ساختار متخلخل، انرژی نمونه در دمای محیط و فشار یک اتمسفر کمینه می شود. فرایند کمینه سازی انرژی با تحلیل دینامیک مولکولی در هنگرد (آنسامبل) 1^9 همدمایی (NVT) به مدت ۷۵ پیکوثانیه و سپس در هنگرد همدمایی - هم فشاری (NPT) به مدت ۷۵ پیکوثانیه صورت می پذیرد. شرایط کمینه سازی انرژی به نحوی صورت می پذیرد که پارامترهای ترمودینامیک نمونه، از جمله: دما، فشار، و آنتروپی سیستم در پایان فرایند تقریباً به حالت پایدار برسد. پس از اتمام فرایند پایداری، تغییر شکل در هنگرد همدمایی - هم فشاری بر روی نمونه اعمال می شود. نحوه ی اعمال تغییر شکل بر روی نمونه منطبق با روش ارائه شده ی لی 2^0 و همکاران (۲۰۱۸) [۲۵] برای مدل سازی نانوفوم طلا صورت پذیرفته است. در این روش به منظور تأمین شرایط بارگذاری شبه استاتیکی، تغییر شکل به صورت مرحله به مرحله بر نمونه اعمال می شود. در هر مرحله از بارگذاری، کرنشی به میزان 0.1% در مدت زمان ۱ پیکوثانیه به نمونه اعمال می شود و سپس نمونه به مدت ۱ پیکوثانیه (ps) 2^1 در دمای محیط تحت

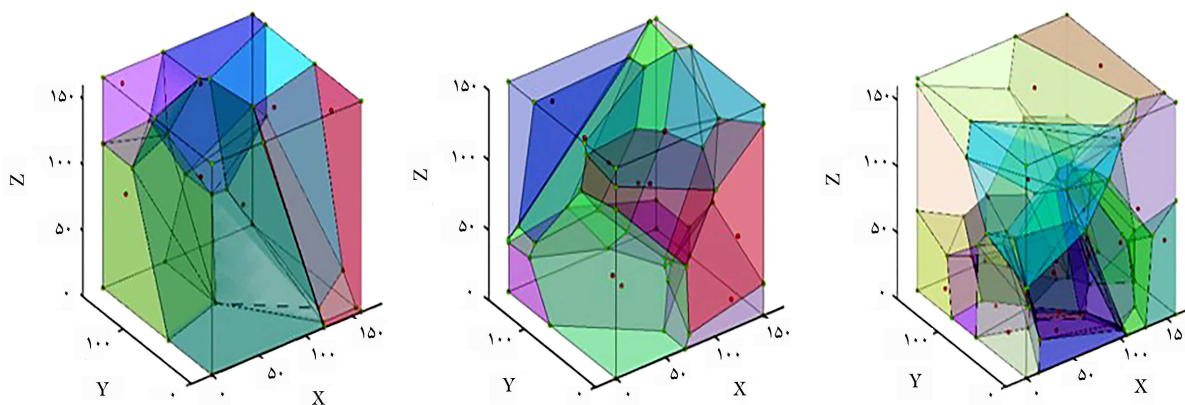
استفاده و توانایی روش اخیر در مدل سازی این دسته از مواد متخلخل ارزیابی شده است.

۳. جزئیات مدل سازی عددی به روش دینامیک مولکولی

به طور کلی فوم های آلومینیومی، از جمله مصالح نوینی هستند که در زمینه های مختلف، مانند پانل های ساندویچی، کاربردهای متعددی دارند. با توجه به ویژگی های منحصر به فرد فوم های آلومینیومی، شناخت و بررسی رفتار مکانیکی آنها بسیار حائز اهمیت است. با توجه به هزینه ی بالای مطالعات آزمایشگاهی و وجود عوامل تأثیرگذار متعدد، استفاده از روش های مبتنی بر مدل سازی عددی، می تواند نقش به سزایی در شناخت رفتار مکانیکی این دسته از مواد داشته باشد. روش دینامیک مولکولی، از جمله روش های عددی است که توانایی و دقت بالا برای شبیه سازی آنها با دقت اتمی دارد. در روش دینامیک مولکولی، ابتدا پیکربندی اولیه ی نمونه متناسب با ساختار طبیعی آن ایجاد می شود، سپس براساس معادله های تعادل حاکم بر ذرات و با روش های انتگرال گیری عددی، تغییر شکل نمونه تحت بارگذاری بررسی می شود. در روش اخیر، ایجاد پیکربندی اولیه و انتخاب مناسب پتانسیل بین اتمی برای توصیف دقیق اندرکنش بین ذرات اهمیت بسیاری دارد. همان گونه که اشاره شد، در مطالعه ی حاضر، پیکربندی ساختار متخلخل نانوفوم با روش شبکه بندی ورونوی صورت پذیرفته و همچنین از پتانسیل بین اتمی EAM 1^6 برای ارزیابی اندرکنش بین اتم های آلومینیوم استفاده شده است. دقت و توانایی بالای پتانسیل EAM در مدل سازی ساختارهای آلومینیوم در مطالعات متعددی اثبات شده است. [۱۹-۲۲] در پتانسیل EAM، اندرکنش بین ذرات براساس رابطه ی ۱ تعیین می شود:

$$E_{tot} = \frac{1}{4} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \phi_{ij}(r_{ij}) + \sum_i F_i(\rho_{h,i})$$

$$\rho_{h,i} = \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{ij}) \quad (1)$$

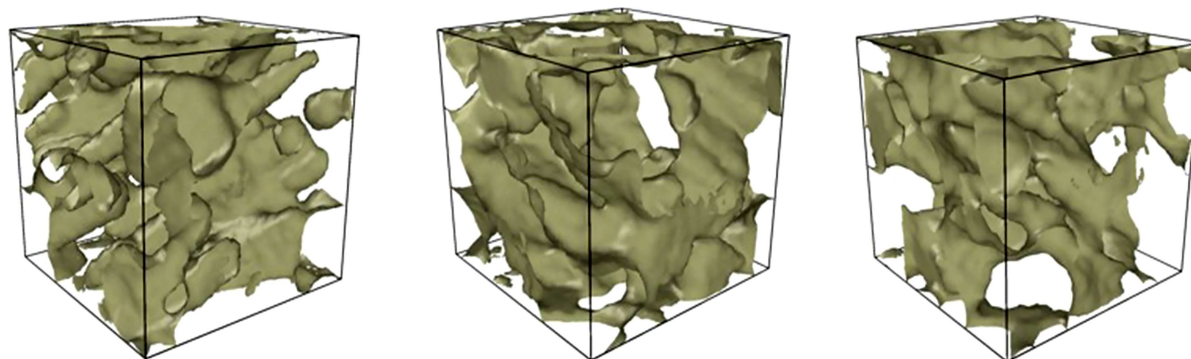


الف) نمونه شماره (۱)؛

ب) نمونه شماره (۲)؛

پ) نمونه شماره (۳)

شکل ۲. اعمال شبکه‌بندی ورونوئی بر روی مکعبی با ضلع ۱۶۰ انگسترم با تعداد نقاط تصادفی: الف) ۱۵، ب) ۱۰ و پ) ۷.



الف) نمونه شماره (۱)؛

ب) نمونه شماره (۲)؛

پ) نمونه شماره (۳)

شکل ۳. پیکربندی اولیه‌ی ساختار متخلخل فوم‌های آلومینیومی پس از پایدارسازی در دمای محیط و فشار یک اتمسفر.

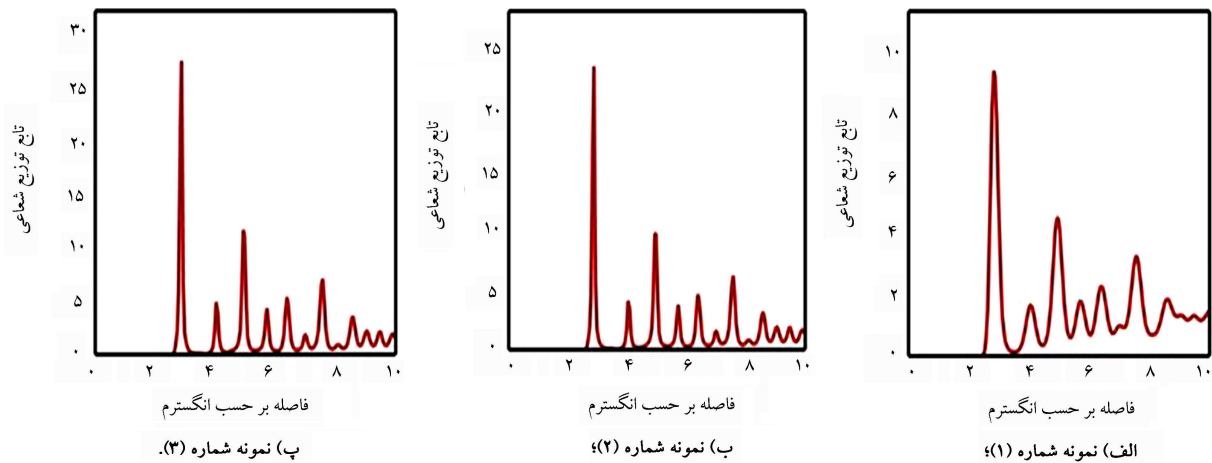
به یکدیگر نباشند. به منظور ایجاد ساختار نانوفوم متخلخل، خطوط شبکه‌بندی ورونوئی مطابق روش بیان‌شده در بخش پیشین، به احجام تبدیل می‌شود. سپس با حذف بخش‌هایی از مکعب که در داخل احجام قرار می‌گیرد، ساختار متخلخل ایجاد می‌شود. پیکربندی ساختار متخلخل پس از پایدارسازی در دمای محیط و فشار یک اتمسفر در شکل ۳ مشاهده می‌شود. نمونه‌های مختلف تولیدشده به ترتیب دارای چگالی‌های ۱،۷۰۸، ۱،۴ و ۱،۶۲ گرم بر سانتی‌متر مکعب بوده‌اند، که تقریباً معادل ۴۰، ۵۰ و ۶۰ درصد چگالی آلومینیوم بدون تخلخل است.

همان‌گونه که مشاهده می‌شود، روش اخیر، توانایی ایجاد فوم‌ها با درصد‌های چگالی‌های مختلف را به راحتی دارد. در نمونه‌های ساخته شده، پارامتر اندازه‌ی متوسط قطر حفره‌ها در تمامی نمونه‌ها برابر با ۱۰ انگسترم بوده است، که با انتخاب شعاع کره‌ها و نحوه‌ی تغییرات آنها در طول شبکه‌بندی ورونوئی محقق شده است. با توجه به اینکه چگالی نمونه و اندازه‌ی حفره‌ها از عوامل تأثیرگذار در رفتار مکانیکی نانوفوم‌های فازی هستند، روش ورونوئی این قابلیت را دارد که می‌تواند به راحتی با تغییر شبکه‌بندی اعمال‌شده و شعاع کره‌ها، ساختار متخلخلی با ویژگی‌های موردنظر را تولید کند. همچنین در شکل ۳، دیواره‌های حفره‌ها، زوایای تند و شکستگی‌های زیادی نداشته‌اند، که این موضوع منطبق با شرایط واقعی نانوفوم‌های آلومینیومی است. به طور کلی در روش شبکه‌بندی ورونوئی با کاهش فاصله‌ی کره‌ها در راستای خطوط و کاهش نرخ تغییرات قطر کره‌ها می‌توان شکستگی و زوایا را در نمونه‌ی

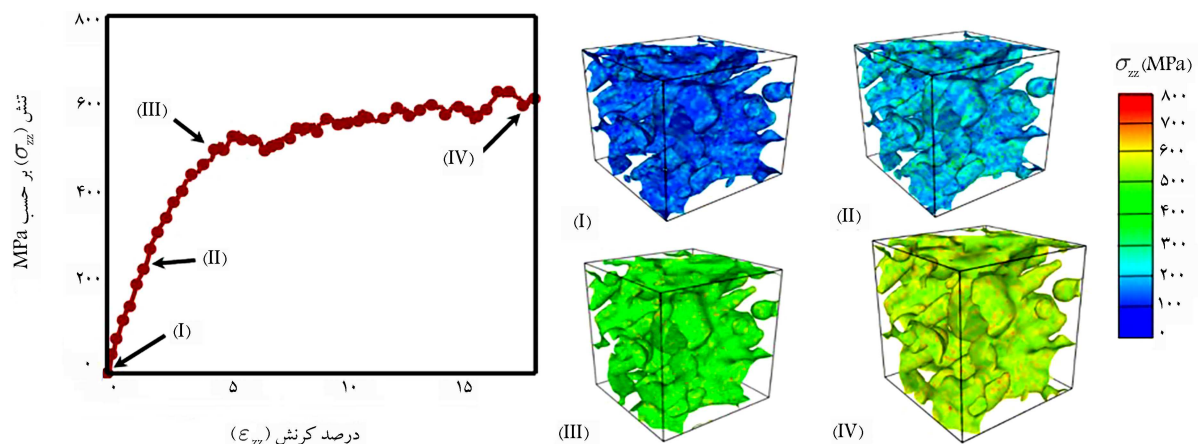
فرایند استراحت^{۲۲} قرار می‌گیرد. این پروسه منجر به کاهش آثار دینامیکی در نمونه می‌شود و فرایند بارگذاری را نزدیک به حالت شبه‌استاتیکی پیش می‌برد.^[۲۶] این تذکر لازم است که در مطالعه‌ی حاضر، تمامی تحلیل‌های دینامیک مولکولی با گام زمانی ۱ فمتوثانیه (fs) ۲۳ با استفاده از نرم‌افزار متن‌باز لمپس^{۲۴}،^[۲۷] صورت گرفته و بررسی نتایج نیز با استفاده از نرم‌افزار متن‌باز اویتو^{۲۵} [۲۸] انجام پذیرفته است.

۴. نتایج و بحث

همان‌گونه که اشاره شد، در مطالعه‌ی حاضر، روش شبکه‌بندی ورونوئی برای ایجاد ساختار اولیه‌ی متخلخل نانوفوم آلومینیوم استفاده شده است. در این راستا، بر روی سه نمونه‌ی مکعبی شکل با ابعاد ۱۶ نانومتر، سه شبکه‌بندی ورونوئی متفاوت پیاده‌سازی شده است. در شکل ۲، شبکه‌بندی‌های ورونوئی با استفاده از رنگ‌بندی نواحی مختلف مشاهده می‌شود. در نمونه‌های اخیر، به ترتیب از ۱۵، ۱۰ و ۷ نقطه‌ی تصادفی برای تولید شبکه‌بندی ورونوئی استفاده شده است. مطابق با شکل مذکور، با افزایش تعداد نقاط، تعداد چندوجهی‌های به دست آمده افزایش و اندازه‌ی متوسط آنها کاهش یافته است، که این موضوع در ساختار متخلخل نانوفوم نهایی می‌تواند تأثیرگذار باشد. در انتخاب نقاط تصادفی باید دقت شود که فاصله‌ی کمینه‌ی با یکدیگر داشته باشند تا خطوط شکل‌های چندوجهی، چسبیده



شکل ۴. تغییرات تابع توزیع شعاعی برای نمونه‌های مختلف فوم آلومینیومی.



شکل ۵. نمودار تغییرات تنش-کرنش برای نمونه‌ی ۳ تحت آزمون کشش ساده به همراه کانتورهای توزیع تنش در نانوفوم آلومینیوم.

می‌شود که مقدار پیک نمودارها با کاهش چگالی و افزایش حفره‌ها کاهش یافته است، که این امر می‌تواند بیانگر افزایش چگالی اتم‌های سطحی با افزایش حفره‌ها باشد.

همان‌گونه که اشاره شد، نمونه‌های ایجاد شده تحت آزمون تک‌محوری قرار گرفته و رفتار مکانیکی آنها ارزیابی شده است. در شکل ۵، نمودار تنش - کرنش به همراه کانتورهای توزیع تنش در نمونه در راستای کشش σ_{zz} مشاهده می‌شود. روند کلی نمودار تنش - کرنش مطابق با نتایج آزمایشگاهی برای مواد متخلخل است؛ که شامل ۴ ناحیه است: (۱) کشسان خطی، (۲) غیرخطی همراه با افزایش تنش، (۳) تسلیم و (۴) غیرخطی. [۱۹] براساس تصاویر ارائه شده، توزیع تنش در نمونه‌ها تقریباً یکنواخت بوده است، که به دلیل اعمال تغییرشکل با سرعت بسیار پایین و تقریباً به صورت شبه‌استاتیکی است.

در شکل ۶، نمودار تنش-کرنش در آزمون کشش برای نمونه‌های مختلف ترسیم و با یکدیگر مقایسه شده است. مطابق نمودارهای ارائه شده، چگالی و میزان تخلخل، تأثیر بسزایی در رفتار مکانیکی فوم آلومینیومی داشته است، که باید در بررسی رفتار مکانیکی مصالح مذکور لحاظ شود. در نتایج حاصل، مدول یانگ حدوداً برای نمونه‌های ۱ الی ۳ به ترتیب برابر با ۱۰/۵، ۱۳/۳، ۱۷/۷ گیگاپاسکال بوده است. در مطالعه‌ی آزمایشگاهی توسط پینا و همکاران (۲۰۲۱)، [۸] مدول یانگ برای نمونه‌ی با چگالی نزدیک به نمونه‌ی ۳ برابر ۲ ± ۱۸ گیگاپاسکال گزارش شده است. براساس

نهایی کاهش داد. همچنین براساس شکل ۳ مشاهده می‌شود که ساختار متخلخل می‌تواند پس از پایدارسازی در شرایط محیطی، فرم اسفنجی شکل خود را حفظ کند. براساس تصاویر ارائه شده، به وضوح روش ورونوئی توانایی تولید ساختارهای متخلخل نامنظم برای نانوفوم آلومینیوم را دارد. نحوه‌ی پیکربندی‌های حاصل با شکل‌های آزمایشگاهی ارائه شده از نانوفوم آلومینیوم، [۸-۱۰] انطباق کلی مناسبی دارد و براین اساس می‌توان اعتبار روش ورونوئی را از لحاظ فرم کلی پیکربندی نمونه‌ها تأیید کرد.

به منظور بررسی بهتر ساختار اتمی نمونه‌های ساخته شده، نمودار تغییرات تابع توزیع شعاعی برای نمونه‌های مختلف در شکل ۴ مشاهده می‌شود؛ که مطابق آن، نمودارها پیک‌های تیزی دارند، که بیانگر فاز جامد در مواد نمونه‌هاست. این تذکر لازم است که ثابت شبکه‌ی آلومینیوم، ۴۰۴ انگسترم و کمترین فاصله‌ی اتم‌ها در شبکه‌ی FCC برابر $\frac{\sqrt{3}}{4}$ ثابت شبکه برابر با ۲/۸۵ انگسترم بوده است. براین اساس، در نمودارهای توزیع شعاعی نیز مشاهده می‌شود که مقدار اکسترمم مطابق نمودارها همگی تقریباً در فاصله‌ی ۲/۸۵ انگسترم است، که منطبق با ساختار شبکه‌ی آلومینیوم است. این موضوع بیانگر آن است که ساختار متخلخل پس از فرایند ریلکسیشن دچار فروپاشی نمی‌شود و حالت اسفنجی شکل خود را حفظ می‌کند و می‌تواند به حالت پایدار برسد. این وضعیت نمونه‌ها منطبق با نتایج و تصاویر آزمایشگاهی ارائه شده از نانوفوم آلومینیوم، [۸-۱۰] است. همچنین در شکل ۴ مشاهده

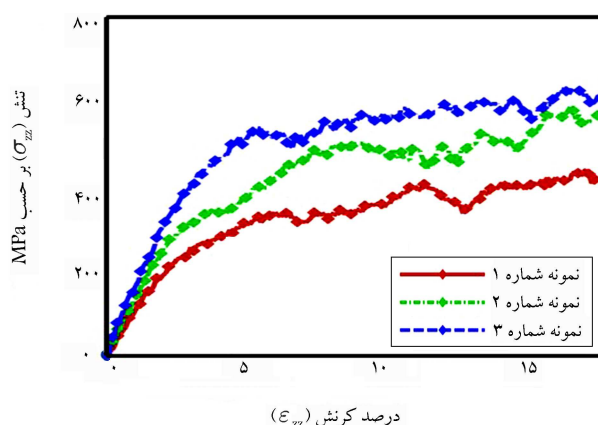
محاسباتی به شدت افزایش می‌یابد، براین اساس باید ابعاد المان حجمی نمونه به نحوی باشد که با کوچک‌ترین اندازه، قادر به انعکاس مناسب از مشخصات مکانیکی ماده‌ی موردنظر باشد.^[۳۱] درخصوص نانوفوم‌ها، اندازه‌ی المان حجمی نمونه باید براساس اندازه‌ی حفره‌ها، به نحوی باشد که توانایی بررسی تغییرشکل در نانوفوم‌ها با ساختار متخلخل را داشته باشد.^[۱۸]

در مطالعه‌ی حاضر، برای تعیین ابعاد مناسب برای المان حجمی نمونه، رفتار مکانیکی نمونه‌هایی با اندازه‌های مختلف ولی با میزان تخلخل تقریباً یکسان (چگالی نسبی حدود ۰.۴۴٪) و اندازه‌ی حفره‌های یکسان (با قطر حدود ۱۰ انگسترم) تحت آزمون کشش بررسی شده است. نتایج حاصل در قالب نمودار تنش - کرنش در شکل ۷ مشاهده می‌شود؛ که مطابق آن، نمودارها برای نمونه‌ی بزرگ‌تر از ۱۶ نانومتر، اختلاف تقریباً ناچیزی با یکدیگر دارند و تقریباً همگرایی رخ داده است. از این رو می‌توان دریافت که نتایج حاصل از تحلیل نمونه‌ی ۱۶ نانومتری، قابلیت تعمیم بر نمونه‌های بزرگ‌تر را دارد.

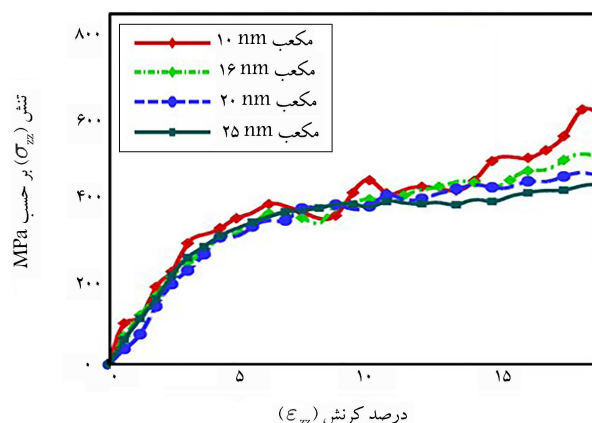
از سوی دیگر، در نمونه‌های بررسی شده در شکل ۷، تعداد نقاط تصادفی و شبکه‌بندی نمونه‌ها متفاوت است، اما بر طبق شکل اخیر، برای نمونه‌هایی با ابعاد بیشتر از ۱۶ نانومتر، نمونه‌ها رفتار تقریباً یکسانی دارند، که بیانگر عدم وابستگی نتایج به شبکه‌بندی و ررونوئی است. به عبارت دیگر، دو عامل اصلی و تأثیرگذار در رفتار مکانیکی نانوفوم‌های فلزی، عبارت از میزان تخلخل (و یا چگالی نسبی نانوفوم) و اندازه‌ی حفره‌هاست و تأثیر شبکه‌بندی و ررونوئی کمتر از دو عامل اخیر است. این تذکر لازم است که نانوفوم آلومینیوم در تصاویر آزمایشگاهی نیز ساختارهای نامنظم و اسفنجی‌شکلی دارند، که تصادفی بودن شبکه‌بندی اعمالی می‌تواند انطباق بیشتری با این واقعیت داشته باشد.

۵. نتیجه‌گیری

در مطالعه‌ی حاضر، با توجه به کاربردهای متعدد و نوین فوم‌های آلومینیومی در صنعت ساختمان به بررسی مدل‌سازی ساختار متخلخل آنها پرداخته شده است. برای این منظور، روش شبکه‌بندی و ررونوئی ارائه و پیاده‌سازی آن بر روی فلز آلومینیوم بررسی شده است. به‌طورکلی پیاده‌سازی روش شبکه‌بندی و ررونوئی به صورت فرایندی شامل پنج مرحله است، که عبارت‌اند از: ۱. ایجاد ساختار پلی‌کریستالی فلز آلومینیوم در حالت بدون تخلخل؛ ۲. تعیین تعدادی نقاط تصادفی در داخل نمونه؛ ۳. ایجاد شبکه‌بندی و ررونوئی بر روی نمونه براساس نقاط تصادفی تعیین شده؛ ۴. تبدیل خطوط مرزی در شبکه‌بندی و ررونوئی به صورت احجام سه‌بعدی و ۵. حذف بخش‌هایی از ساختار کامل اتمی که در داخل احجام به دست آمده از گام قبلی قرار می‌گیرد. مدل‌سازی‌ها، توانایی روش شبکه‌بندی و ررونوئی را در کنترل عوامل تأثیرگذار در نمونه‌ی ایجادشده، از جمله: چگالی‌ها، اندازه‌ی حفره‌ها و شکستگی‌های دیواره‌های حفره‌ها را به روشنی نشان داده‌اند. با پایدارسازی نمونه‌های ایجاد شده براساس روش شبکه‌بندی و ررونوئی در شرایط محیطی، نانوفوم‌های آلومینیومی با ساختار متخلخل و منطبق با تصاویر آزمایشگاهی شبیه‌سازی و رفتار مکانیکی نمونه‌های تولید شده، تحت آزمون کشش ساده ارزیابی شده‌اند؛ که نتایج حاصل از آن، انطباق مناسبی را با نتایج آزمایشگاهی نشان داده است، که بیانگر دقت و توانایی روش شبکه‌بندی و ررونوئی است. نمودارهای تنش - کرنش به وضوح بیانگر تأثیر بسزای چگالی در مشخصات مکانیکی نانوفوم‌های آلومینیومی هستند.



شکل ۶. نمودار تغییرات تنش-کرنش برای نمونه‌های مختلف مکعبی نانوفوم آلومینیومی با ابعاد ۱۶ نانومتر تحت آزمون کشش ساده.



شکل ۷. نمودار تغییرات تنش-کرنش برای نمونه‌های مکعبی نانوفوم با چگالی نسبی ۰.۴۴٪ و ابعاد مختلف آنها تحت آزمون کشش ساده.

تحلیل عددی صورت‌گرفته، مدول یانگ برای نمونه‌ی ۳ در حدود ۱۷٫۷ گیگاپاسکال و در محدوده‌ی به‌دست آمده براساس مطالعات آزمایشگاهی صورت‌گرفته بر روی نانوفوم آلومینیوم بوده است، که می‌تواند به صورت کمی درستی نمونه‌های تولیدشده را اثبات کند.

براساس نتایج ارائه شده در شکل ۶، به‌طورکلی با افزایش تخلخل و کاهش چگالی، مدول یانگ و تنش تسلیم کاهش یافته است. این روند تغییرات مدول یانگ بر حسب تخلخل در بسیاری از مطالعات صورت‌گرفته درخصوص مواد متخلخل مشاهده می‌شود.^[۳۰] براساس نمودارهای تنش - کرنش علاوه بر افزایش تخلخل، تنش حد کشسان نمونه نیز کاهش یافته است، که می‌تواند مرتبط با کاهش ضخامت دیواره‌های نمونه و افزایش آثار موضعی باشد. این تذکر لازم است که در حالت کلی برای نمودار تنش-کرنش فوم‌ها، نوسان‌های زیادی مشاهده می‌شود، که ناشی از وجود دیواره‌های نازک و پیچیدگی‌های هندسی در پیکربندی این دسته از مواد است.

به‌طورکلی در مدل‌سازی‌های عددی صورت‌گرفته، مطابق با تئوری همگن‌سازی شرایط مرزی نمونه‌ها در هر سه جهت به صورت پرودیک در نظر گرفته شده است. در این حالت، با افزایش ابعاد المان حجمی نمونه، بخشی از ماده که برای تخمین رفتار مکانیکی آن استفاده می‌شود، افزایش یافته است، لذا می‌تواند مشخصات مکانیکی نمونه را بهتر منعکس سازد. از سوی دیگر، با افزایش ابعاد نمونه، هزینه‌ی

1. Aluminum foam
2. Liu
3. Larner & Dávila
4. Tanaka
5. Montanini
6. Suárez
7. Pinna
8. Yang
9. Crowson
10. Farkas
11. Ruestes
12. Mangipudi
13. Giri
14. Soyarslan
15. Yildiz
16. Embedded Atom Model
17. Pun & Mishin
18. Representative Volumetric Element
19. Ensemble
20. Li
21. Pico second ($10^{-12}s$)
22. Relaxation
23. Femto Second (0.001 ps)
24. LAMMPS
25. OVITO

منابع (References)

1. Hipke, T., Hohlfeld, J. and Rybandt, S., 2014. Functionally aluminum foam composites for building industry. *Procedia Materials Science*, 4, pp.133-138. doi.org/10.1016/j.mspro.2014.07.550.
2. Montanini, R., 2005. Measurement of strain rate sensitivity of aluminium foams for energy dissipation. *International Journal of Mechanical Sciences*, 47, pp.26-42. doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2004.12.007.
3. Nouri Damghani, M. and Mohammadzadeh Gonabadi, A., 2019. Numerical study of energy absorption in aluminum foam sandwich panel structures using drop hammer test. *Journal of Sandwich Structures & Materials*, 21(1), pp.3-18. doi.org/10.1177/1099636216685315.
4. Liu, S., Li, A., He, S. and Xuan, P., 2015. Cyclic compression behavior and energy dissipation of aluminum foam-polyurethane interpenetrating phase composites. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 78, pp.35-41. doi.org/10.1016/j.compositesa.2015.07.016.
5. Larner, M. and Dávila, L.P., 2013. The mechanical properties of porous aluminum using finite element method simulations and compression experiments. *MRS Online Proceedings Library*, 1580, p.905. doi.org/10.1557/opl.2013.663.
6. Tanaka, S., Hokamoto, K., Irie, S., Okano, T., Ren, Z., Vesnjak, M. and Itoh, S., 2011. High-velocity impact experiment of aluminum foam sample using powder gun. *Measurement*, 44, pp.2185-2189. doi.org/10.1016/j.measurement.2011.07.018.
7. Suárez, O.M., Estremera, E.G., Soler, R., Declat, A. and Hernández -Maldonado, A.J., 2014. Fabrication of porous and nanoporous aluminum via selective dissolution of Al-Zn alloys. *Advances in Materials Science and Engineering*, 2014, pp.963042. doi.org/10.1155/2014/963042.
8. Pinna, A., Pia, G., Casula, M. F., Delogu, F., Sogne, E., Falqui, A. and Pilia, L., 2021. Fabrication of nanoporous Al by vapor-phase dealloying: Morphology features, mechanical properties and model predictions. *Applied Sciences*, 11(14), p.6639. doi.org/10.3390/app11146639.
9. Yang, W., Luo, Z.P., Bao, W.K., Xie, H., You, Z.S. and Jin, H.J. 2021 Light, strong, and stable nanoporous aluminum with native oxide shell. *Science Advances*, 7, p.28. DOI:10.1126/sciadv.abb9471.
10. Crowson, D.A., Farkas, D. and Corcoran, S.G., 2007. Geometric relaxation of nanoporous metals: The role of surface relaxation. *Scripta Materialia*, 56, pp.919-922. doi.org/10.1016/j.scriptamat.2007.02.017.
11. Farkas, D., Caro, A., Bringa, E. and Crowson, D. 2013. Mechanical response of nanoporous gold. *Acta Materialia*, 61(9), pp.3249-3256. doi.org/10.1016/j.actamat.2013.02.013.
12. Ruestes, C.J., Farkas, D., Caro, A. and Bringa, E.M., 2016. Hardening under compression in Au foams. *Acta Materialia*, 108, pp.1-7. doi.org/10.1016/j.actamat.2016.02.030.
13. Mangipudi, K.R., Epler, E. and Volkert, C.A., 2016. Topology-dependent scaling laws for the stiffness and strength of nanoporous gold. *Acta Materialia*, 119, pp.115-122. doi.org/10.1016/j.actamat.2016.08.012 .
14. Giri, A., Tao, J., Wang, L., Kirca, M. and To Albert, C., 2014. Compressive behavior and deformation mechanism of nanoporous open-cell foam with ultrathin ligaments. *Journal of Nanomechanics and Micromechanics*, 4(2), p.A4013012. doi.org/10.1061/(ASCE)NM.2153-5477.0000079.
15. Soyarslan, C., Bargmann, S., Pradas, M. and Weissmüller, J., 2018. 3D stochastic bicontinuous microstructures: Generation, topology and elasticity. *Acta Materialia*, 149, pp.326-340. doi.org/10.1016/j.actamat.2018.01.005.
16. Yildiz, Y.O., Ahadi, A. and Kirca, M. 2020. Strain rate effects on tensile and compression behavior of nano-crystalline nanoporous gold: A molecular dynamic study. *Mechanics of Materials*, 143, pp.103338. doi.org/10.1016/j.mechmat.2020.103338.
17. Yildiz, O. and Kirca, M., 2017. A novel atomistic modeling technique for poly-crystalline nanoporous metals. In: *Proceedings of the 32nd Technical Conference of the American Society for Composites*. DOI: 10.12783/asc2017/15307.
18. Nikraves, Y., Sameti, A.R. and Khoei, A.R., 2022. An atomistic-continuum multiscale analysis for heterogeneous nanomaterials and its application in nanoporous gold foams. *Applied Mathematical Modelling*, 107, pp.353-378. doi.org/10.1016/j.apm.2022.02.029.
19. Henz, B.J., Hawa, T. and Zachariah, M., 2009. Molecular dynamics simulation of the kinetic sintering of Ni and Al nanoparticles. *Molecular Simulation*, 35, pp.804-811. doi.org/10.1080/08927020902818021.

20. Olmsted, D.L., Hector, L.G., Curtin, W.A. and Clifton, R.J., 2005. Atomistic simulations of dislocation mobility in Al, Ni and Al/Mg alloys. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 13(3), pp.371-388. DOI: 10.1088/0965-0393/13/3/007.
21. Khoei, A.R., Khajepour, B. and Rezaei Sameti, A., 2022. Surface oxidization effect on the mechanical behavior of aluminum nanopowders under triaxial compression test. *Applied Surface Science*, 606, p.154907. doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.154907.
22. Khoei, A.R., Sameti, A.R. and Mofatteh, H., 2020. Compaction simulation of crystalline nano-powders under cold compaction process with molecular dynamics analysis. *Powder Technology*, 373, pp.741-753. doi.org/10.1016/j.powtec.2020.06.069.
23. Narayan, K., Behdinan, K. and Fawaz, Z., 2007. An engineering-oriented embedded-atom-method potential fitting procedure for pure fcc and bcc metals. *Journal of Materials Processing Technology*, 182, pp.387-397. doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2006.08.018.
24. Purja Pun, G.P. and Mishin, Y., 2009. Development of an interatomic potential for the Ni-Al system. *Philosophical Magazine*, 89, pp.3245-3267. doi.org/10.1080/14786430903258184.
25. Li, J., Xian, Y., Zhou, H., Wu, R., Hu, G. and Xia, R., 2018. Microstructure-sensitive mechanical properties of nanoporous gold: A molecular dynamics study. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 26, p.075003. DOI: 10.1088/1361-651X/aadb5d.
26. Li, J., Li, J., Chen, Y. and Chen, J., 2022. Strengthening modulus and softening strength of nanoporous gold in multiaxial tension: Insights from molecular dynamics. *Nanomaterials*, 12, p.4381. doi.org/10.3390/nano12244381.
27. Plimpton, S., 1995. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 117, pp.1-19. doi.org/10.1006/jcph.1995.1039.
28. Stukowski, A., 2014. A triangulation-based method to identify dislocations in atomistic models. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 70, pp.314-319. doi.org/10.1016/j.jmps.2014.06.009.
29. Kalpakoglou, T. and Yiatros, S., 2022. Metal foams: A review for mechanical properties under tensile and shear stress. *Frontiers in Materials*, 9, p.998673. doi.org/10.3389/fmats.2022.998673.
30. Lurie, S.A., Solyaev, Y.O., Rabinskiy, L.N., Polyakov, P.O. and Sevostianov, I., 2018. Mechanical behavior of porous Si3N4 ceramics manufactured with 3D printing technology. *Journal of Materials Science*, 53, pp.4796-4805. doi.org/10.1007/s10853-017-1881-0.
31. Khoei, A.R., Sameti, A.R. and Kazerooni, Y.N., 2018. A continuum-atomistic multi-scale technique for nonlinear behavior of nano-materials. *International Journal of Mechanical Sciences*, 148, pp.191-208. doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2018.08.012.