

מחקר תאורטי בתחום הננוטריבולוגיה חיכוך וסופר-סיכוך בחומרים קשיחים*

אפראח עאסי** ודועא נסאר***

הקדמה

נוזלי סיכה מסורתיים יכולים להקטין את החיכוך בעולם המאקרוסקופי, אך אינם טובים בעולם המיקרו והננו NEMS (NanoElectroMechanical Systems), כי במקרה הזה, נוזלים אלה הופכים לצמיגים. במכשירים הזעירים היחס העצום של שטח פנים לעומת הנפח מוביל לחיכוך חמור ובעיות בלאי שמקטינות באופן דרמטי את זמן החיים של המכשירים, ומהווה מכשול עיקרי המגביל את השימוש הנרחב בהם.

הפתרון המוצע ע"י חוקרים רבים כמו פרופ' עודד הוד, חוקר תאורטי מאוניברסיטת תל אביב, הוא: סופר-סיכוך (Superlubricity). סופר-סיכוך הוא מצב שבו יש סיכוך מקסימלי, והחיכוך כמעט אפסי (נעלם). בפתרון זה משתמשים בחומרי סיכוך מוצקים ויבשים המראים חיכוך מינימלי. חומרים שכבתיים מהווים מועמדים מבטיחים היכולים לשמש הן כמרכיבים פעילים במערכות NEMS והן כחומרי סיכה משופרים עבור התקנים מיקרוסקופיים. ראשית נתייחס לשני מושגי יסוד בתחום:

טריבולוגיה: מדע של חיכוך, בלאי וסיכוך.

ננוטריבולוגיה: הוא ענף של הטריבולוגיה שחוקר את תופעת החיכוך בסקלה הננומטרית.

ההבחנה בין ננוטריבולוגיה וטריבולוגיה היא בעיקר בגלל מעורבות כוחות אטומיים שתפקידם בקביעת ההתנהגות הסופית של המערכת בסקלות הננומטריות הוא מכריע. בנוסף, כשמתייחסים לחיבורים של חומרים בסקלה זו, בדרך כלל יכולת ההתאמה של פני השטח היא בעלת תפקיד מכריע בהכתבת התכונות הטריבולוגיות של הממשק, כפי שנפרט בהמשך הכתבה. למרות שנדמה כי הנושא שבו מטפל המאמר הוא תאורטי, יש לו יישומים מעשיים ועכשוויים המשפיעים על חיינו.

סקירה היסטורית

1. טריבולוגיה מודרנית התחילה לפני כ-500 שנה (בשנות 1500) כאשר ליאונרדו דה וינצ'י הסיק את החוקים של תנועת גוש מלבני שמחליק על פני שטח פלנרי.
2. בשנת 1699 פרסם פיזיקאי צרפתי Guilanme Amontons תיאור רשמי ראשון של חוקי חיכוך קלסיים ומקרוסקופיים.
3. המושג "טריבולוגיה" דווח לראשונה ע"י H.B. Jost בשנת 1966. המילה נגזרת מהמילה היוונית "tribos" שמשמעותה = rubbing = חיכוך.
4. שני מדענים Philip Bowden & David Tabor מאוניברסיטת קמברידג' הגדירו את החיכוך ברמה מיקרוסקופית בשנת 1970: "אטומים משני חומרים נקשרים אחד לשני ומתנגדים להחלקה כאשר שני החומרים באים במגע".
5. Jacqueline krim פיזיקאי מאוניברסיטת צפון קרוליינה הטביע את המושג "ננוטריבולוגיה" בשנת 1991, שמשמעותו תת-תחום של הטריבולוגיה, שחוקר את תופעת החיכוך בסקלה הננומטרית.



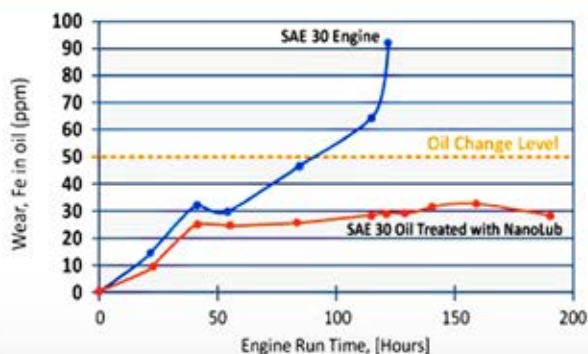
איור 1: תוסף לשמן המנוע, שמפחית את החיכוך, פיתוח של פרופ' רשף טנא ממכון ויצמן למדע

* הכתבה נכתבה במסגרת הקורס: "מבוא לחומרים וננוטכנולוגיה", בהנחיית ד"ר רון בלונדר, תכנית רוטשילד-ויצמן, מכון ויצמן למדע.

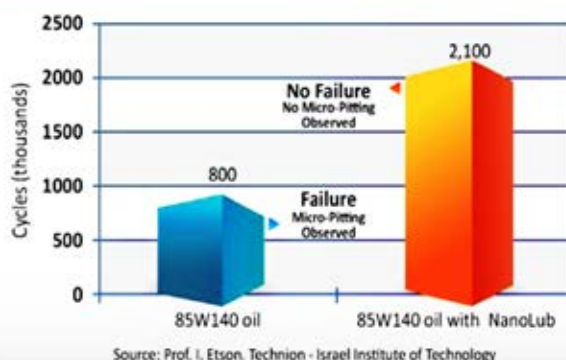
** אפראח עאסי, מורה לכימיה, בית הספר העל-יסודי אלקאסמי, באקה אלגרב'יה.

*** דועא נסאר, מורה לכימיה, בית ספר מקיף אלכטוף, כפר עראבה.

Reduction of Engine Wear by NanoLub Formulated Oil



Ball on Cylinder Test, 5.85 GPa @ 4,300 RPM



איור 2

מודל ייצוג קופסת ביצים Egg-box

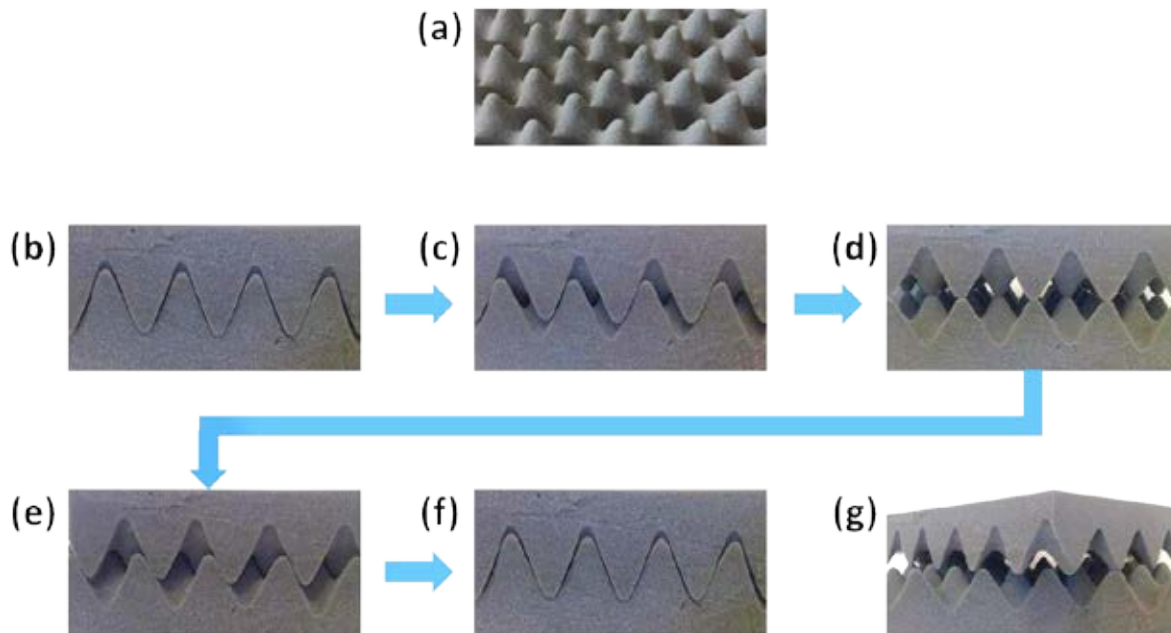
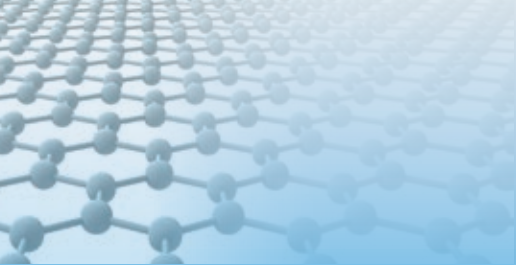
במודל קופסת הביצים Egg-box, המתואר באיור 4, מוצגות מספר תמונות המתארות את ההחלקה של משטח אחד על פני משטח שני. קבועי הסריג בקופסת הביצים מייצגים את המחסום האנרגטי של ההחלקה שנגרם מדחיית Pauli הנוצרת בשל חפיפת ענבי האלקטרונים של האטומים השונים בשתי השכבות הסמוכות, בזמן ששתיהן חוצות זו את זו בעת תהליך ההחלקה. תמונה a: מודל קופסת ביצים שיכול להציג הצגה פשוטה של הקשר בין החיכוך ובין מידת ההתאמה של המשטחים. תמונה b: מתארת מצב שבו שני המשטחים, קבועי הסריג, מתאימים זה לזה. תמונות c-f: אם מנסים להחליק שכבה אחת ביחס לשנייה, אז כל תאי היחידה צריכים לעבור מחסום פיזיקלי. דבר שגורם לחיכוך מקסימלי בין שני המשטחים בעת ההחלקה. חיכוך זה יגרום לבלאי!! תמונה g: מתארת מצב שבו סובבו משטח אחד ביחס לאחר, כדי ליצור מצב של אי התאמה בין קבועי הסריג. וכך, אם נרצה להחליק שכבה אחת מעל לאחרת, אז כל תאי היחידה צריכים לעבור מחסומים אנרגטיים קטנים יותר, בכל נקודה, בכל זמן ההחלקה. הדבר מקטין את ההתנגדות להחלקה ובכך מקטין את החיכוך שנוצר בין שני המשטחים בעת ההחלקה.



איור 3: הראש שקורא וכותב מידע מהדיסק הקשיח

שימושים עכשוויים

- 1. תעשיית הרכב** - חומרי סיכוך לשליטה ברעשי הבלמים ובבלאי שלהם ולהקטנת חיכוך פנימי במנוע. לדוגמה: פרופ' רשף טנא פיתח תוסף לשמן המנוע, להילוכים, ולמחדש (כמוצג באיור 1). התוסף מפחית את החיכוך, מפחית את זיהום האוויר, מקטין את צריכת האנרגיה ומאריך את זמן חיי המנוע. באיור 2 ניתן לראות שני גרפים המשווים בין שמן רגיל לבין שמן המכיל תוסף ננו. בגרף מצד שמאל ניתן לראות:
 - קו כחול שמתאר את החיכוך כפונקציה של זמן עבודת המנוע, כאשר משתמשים בשמן רגיל ללא תוסף ננו.
 - קו אדום שמתאר את החיכוך כפונקציה של זמן עבודת המנוע כאשר משתמשים בשמן שכולל תוסף ננו.
 ניתן לראות ששמן שהכיל תוסף ננו הקטין את החיכוך בהרבה בהשוואה לשמן רגיל שלא הכיל תוסף ננו.
- 2. תעשיית אחסון נתונים** - בכונן דיסק קשיח. איור 3 מציג את הראש שקורא וכותב מידע מהדיסק הקשיח עף -100 50 ננומטר מעל פני שטח הדיסק. הדיסק מסתובב מתחת לראש במהירות של 20-100 מטר לשנייה.
- 3. רפואה** - במערכות ביו-אלקטרו-מכניות, בסקלת המיקרו והננו BioMEMS & BioNEMS המשמשות לאינזימה כימית וביוכימית למטרות דיאגנוזה ל-DNA, RNA, חלבונים, תאים ולהנדסת רקמות. לביו-חיישנים Bio sensors, לניתוחים.



איור 4: מודל קופסת ביצים שיכול להציע הצגה פשוטה של הקשר בין החיכוך ובין מידת ההתאמה של המשטחים.

RI - Registry Index הוא פרמטר מספרי המעוצב כדי לכמת את חוסר ההתאמה של ממשק בין שני סריגים. הוא מוגדר כפונקציית חומר ספייציפית שדורשת קלט לגבי מבנה פני שטח הסריג ומצבי היערמות השכבות *stacking mode* בשני מצבים:

- מצב היערמות אופטימלי מבחינה אנרגטית.
- מצב היערמות גרוע ביותר מבחינה אנרגטית.

שיטות המחקר: המחקר משתמש בסימולציות אטומיות ובהגדרה של RI ומבצע חישובים תאורטיים של ה-RI כפונקציה של זווית אי ההתאמה, על מנת לנבא את התכונות הטריבולוגיות של הממשק.

RI של הגרפן

אנו נתייחס לגרפן ונתאר את מצבי היערמות והחפיפה בממשק של גרפן-גרפן. איור 5 ממחיש את ההבדל בין מצב היערמות אופטימלי ובין מצב היערמות גרוע ביותר. תמונה (a): קונפיגורציה AA, מצב היערמות הגרוע ביותר, הכי גבוה מבחינה אנרגטית, הסריגים של שתי השכבות הם במצב *eclipsed*. תמונה (b): קונפיגורציה Ab, מצב היערמות האופטימלי, הכי נמוך מבחינה אנרגטית; מחצית מאטומי הפחמן בשכבה אחת נמצאים מעל מרכזי המשושים של

במאמר זה אנו נסקור עבודה תאורטית חדשנית שמטרתה:

- לספק מדד כמותי למידת ההתאמה בין הסריגים בממשק שבין חומרים קשיחים.
- לקשר את המדד הכמותי לתכונות הטריבולוגיות של החיבור.

המחקר התאורטי של פרופ' עודד הוד מאוניברסיטת תל אביב חוקר את התכונות הטריבולוגיות של מגוון חומרים במבנה הקסגוני כגון: גרפן, גרפיט, בורון ניטריד הקסגוני h-BN, די סולפיד מולבידניום $2H-MoS_2$, ממשק היטרוגני בין גרפן ו-h-BN, והכללות למבנים לא מישוריים כגון ננוצינוריות DWBNNT. בעזרת חומרים הקסגוניים אלה ניתן להראות איך פרמטר גאומטרי תאורטי פשוט:

- יכול לתאר את התמונה הכוללת של אנרגיית ההחלקה בין השכבות.
- יכול לנבא התנהגות חיכוך שנמדדה באופן ניסוי של ננופתית גרפן מחליק על גבי משטח גרפיט.
- יכול לעבור הכללה כדי לטפל במערכות שאינן מישוריות כגון ננוצינוריות בורון ניטריד עם דופן כפולה: DWBNNT Double-Walled Boron-Nitrid Nano Tubes

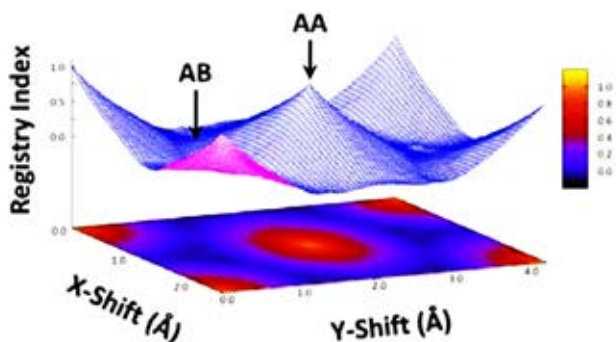
- גודל קבוע.

S_{CC}^{AB} החפיפה במצב היערמות אופטימלי - גודל קבוע.

S_{CC} החפיפה במצב היערמות מסוים - גודל מחושב (לפי משוואות חפיפת עיגולים).

RI גודל מחושב לפי המשוואה הנתונה.

פרמטר RI שמתקבל מוגבל בטווח [0,1]. RI=1 במצב היערמות הגרוע ביותר (AA). RI=0 במצב היערמות אופטימלי (AB). איור 6 מתאר את התמונה הכוללת של RI של החלקה בין שכבות גרפן דו-שכבתי כפונקציה של התזוזה על צירי ה-x, y. הואים שמצב היערמות אופטימלי AB נתן RI=0, ומצב היערמות גרוע ביותר AA נתן RI=1.



איור 6: מיקום מצבי היערמות AA, AB מסומן בחצים שחורים. X-Shift תזוזה של שכבה אחת על ציר ה-X ביחס לשכבה השנייה. Y-Shift תזוזה של שכבה אחת על ציר ה-Y ביחס לשכבה השנייה.

כאשר משווים את תמונת ה-RI המושגת (איור 6). לדינאמיקות מולקולריות ולחישובים של אנרגיית ההחלקה של גרפן, הואים שמודל ה-RI לוכד את כל המאפיינים הפיזיקליים החשובים של פוטנציאל ההחלקה של מערכת זו.

$$L_{CC} = 1.42 \text{ \AA}$$

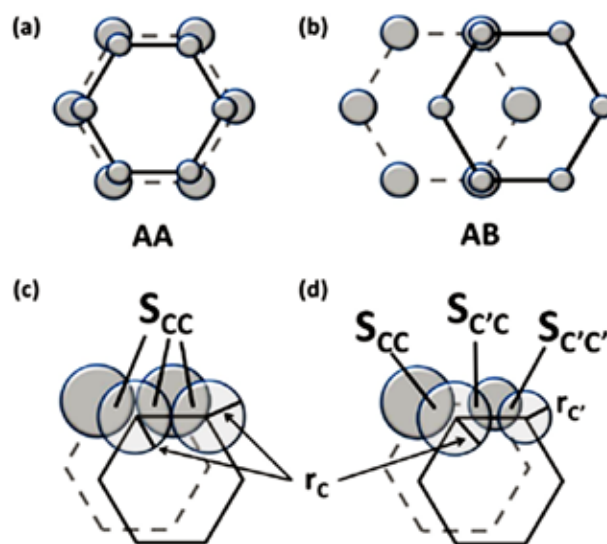
$$r_c = 0.5 \cdot L_{CC}$$

עקרונות כימיים

אפשר לתהות: איך פרמטר גאומטרי פשוט יכול לתפוס באופן מדויק את התמונה הכוללת והמורכבת של אנרגיית ההחלקה של ממשק שכבתי?

כדי להסביר זאת, יש לזכור שהתרומה העיקרית לקמטי

השכבה הסמוכה. תמונה (c): מציגה את החפיפה בגרפן דו-שכבתי. תמונה (d): מציגה את החפיפה בחומר רב-שכבתי.



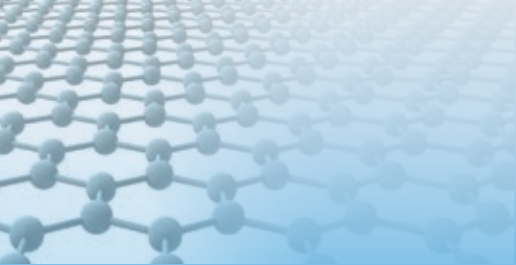
איור 5: שני מצבי היערמות השכבות stacking mode בגרפן: מצב אופטימלי (b). והגרוע ביותר (a).

העקרונות בהגדרת RI:

- כל מרכז אטומי מוקצה כמעגל
- החפיפה המוצגת בין המעגלים השייכים לשכבה האחת ועמיתיהם בשכבה הצמודה מתויגים ע"י S_{CC} .
- גודל זה מחושב באמצעות משוואות מתמטיות שמחשבות שטח חפיפה של מעגלים.
- החפיפה מקבלת ערך מקסימלי במצב היערמות הגרוע ביותר AA.
- החפיפה מקבלת ערך מינימלי במצב היערמות האופטימלי AB.
- בוחרים ש-RI יהיה פרופורציוני לאזור החפיפה המוחלט: $RI \propto S_{CC}$
- נרמול ביטוי זה לערכי החפיפה במצב היערמות הגרוע ביותר S_{CC}^{AA} , ומצב היערמות האופטימלי ביותר S_{CC}^{AB} , ייתן את המשוואה:

$$RI = \frac{(S_{CC} - S_{CC}^{AB})}{(S_{CC}^{AA} - S_{CC}^{AB})}$$

החפיפה המקסימלית במצב היערמות הגרוע ביותר



- מידת החפיפה המקומית של האטומים - מיוצגת בביטוי של ה-RI ע"י חפיפת האטומים המחושבת בעזרת נוסחאות מתמטיות.

גרפיט מנקודת מבט של RI

ברגע שה-RI מוגדר עבור חומר מסוים, ניתן להשתמש בו (ב-RI) כדי לשלוט בחיכוך במכשירי NEMS הבנויים מחומר זה. כדי להוכיח זאת, אנחנו נתייחס לתוצאות ניסוי חדש וניתן עדות ברורה להתרחשות סופר-סיכוך בגרפיט. החיכוך בין פתית הגרפן ומשטח הגרפיט נמדד כפונקציה של זווית אי ההתאמה misfit angle.

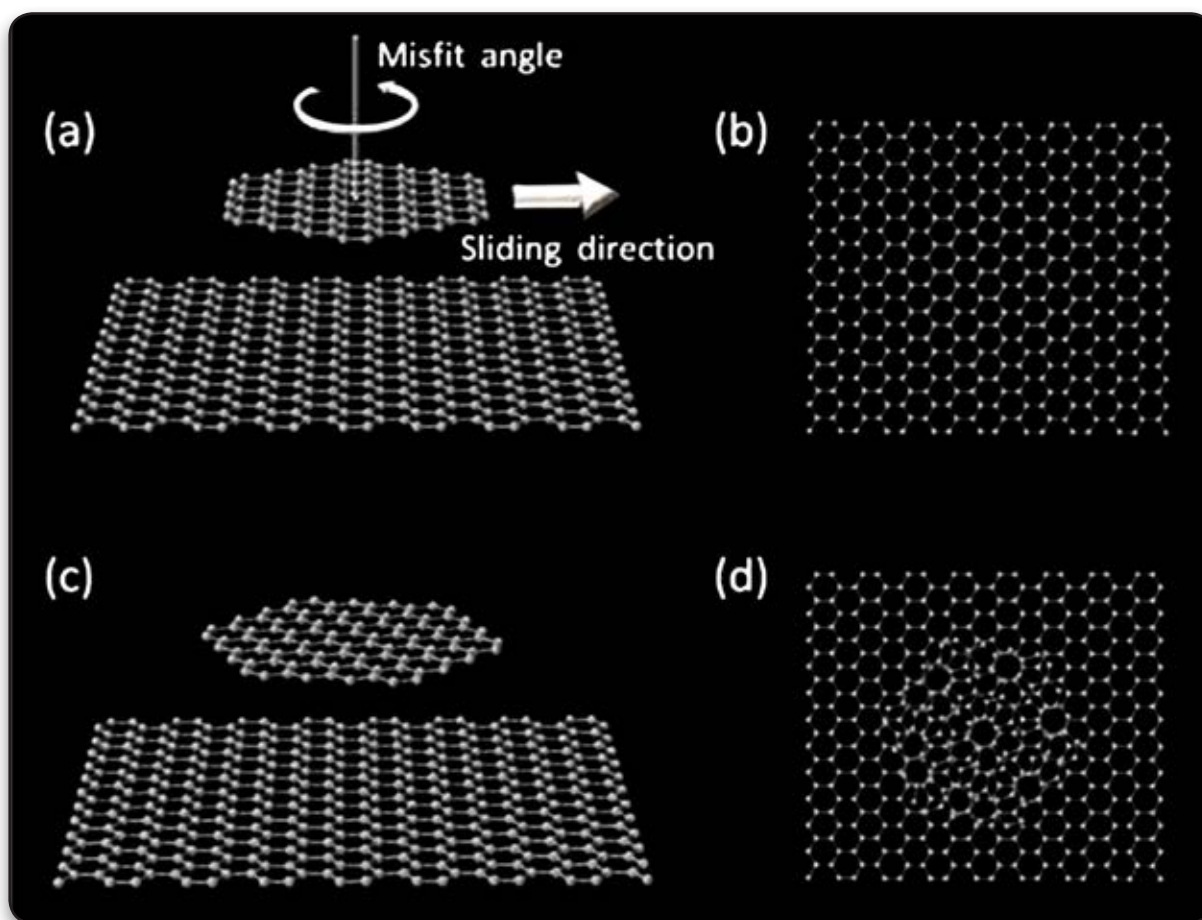
מכל האמור ניתן ללמוד את הדברים האלה:

ההחלקה מגיעה מוואריאציות דחיייה בין חפיפת ענבי האלקטרונים של אטומים השייכים לשתי השכבות הסמוכות כשהם חוצים זה את זה במהלך תהליך ההחלקה.

אינטראקציות אלו המקושרות בד"כ לדחיית Pauli הן בעלות טווח קצר, ולכן מספיק להתחשב בענבי האלקטרונים המחוברים לאתרים אטומיים שכנים של שתי השכבות (קירוב זה מכונה קירוב השכן הקרוב).

לפיכך נדרשים שני גורמים כדי לתאר את התמונה הכוללת של אנרגיית ההחלקה:

- גודל הענן האלקטרוני של האטום - מיוצג בביטוי של ה-RI ע"י רדיוס האטום $r_c = 0.5 \cdot L_{cc}$.



איור 7: תמונות (a, b): מייצגות משטחים מתאימים, זווית 0° או 60° . תמונות (c, d): מייצגות משטחים לא מתאימים, זווית 20° . שני פרמטרים חשובים משמשים כדי לאפיין את תרחיש ההחלקה: זווית אי ההתאמה misfit angle וכיוון ההחלקה.

מסרטים גרף של RI כפונקציה של ההחלקה, אורך ההחלקה ביחידות A^0 , בזוויות שונות. ניתן לראות השוואה באיור 8 בין:

- תוצאות מחושבות באופן תאוריטי לפי משוואות של ה-RI (Calculated).
- תוצאות נמדדות באופן ניסויי של החיכוך friction (measured).

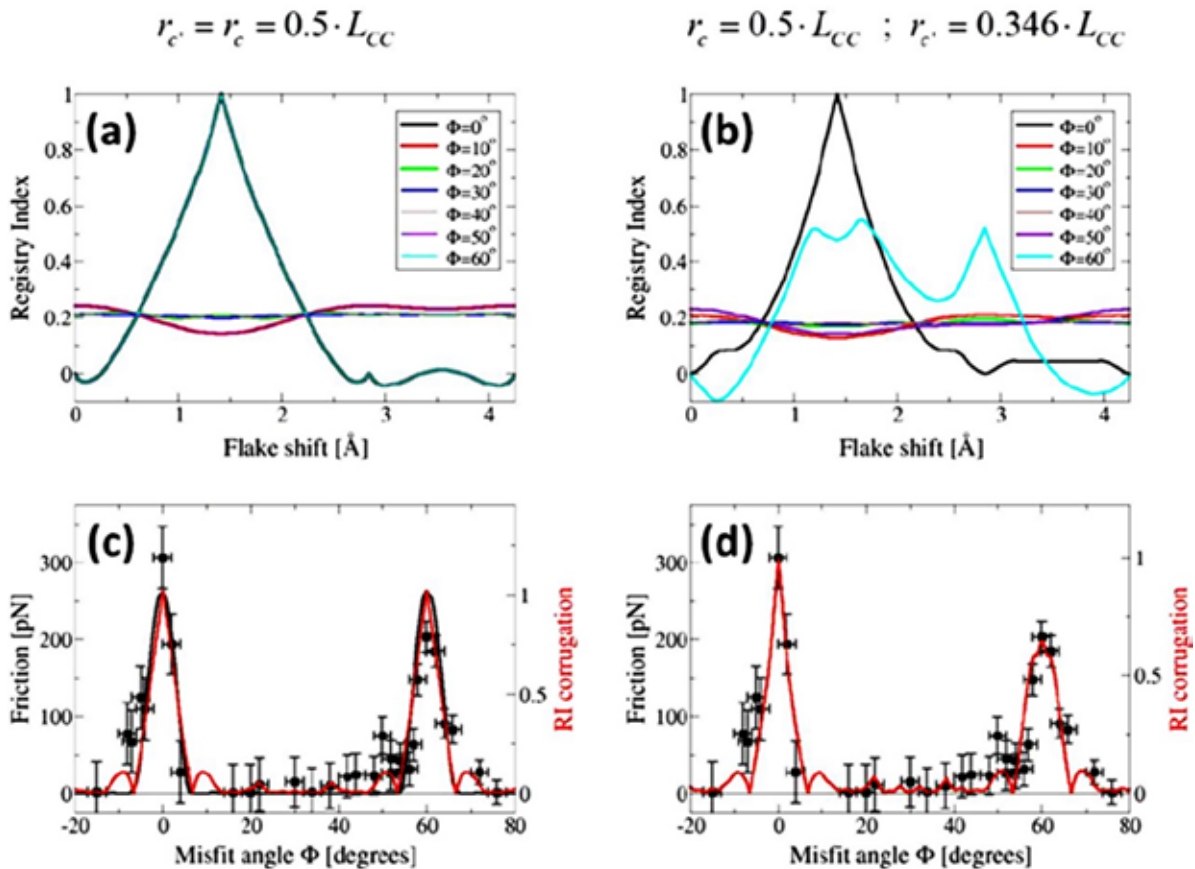
תוצאות המחקר - הוכחה מעשית לתאוריה: ניתן לראות שהתוצאות התאורטיות המחושבות של ה-RI דומות מאוד לתוצאות הניסיוניות הנמדדות של החיכוך friction. שני הגרפים נופלים האחד בדיוק מעל האחר. בזוויות 0^0 ו- 60^0

- כאשר יש התאמה בין שני הסריגים, מתרחש חיכוך מדיד.
 - עבור קונפיגורציות לא מתאימות, ניתן לקבל תנועה מעשית ללא חיכוך.
- ניתן לראות תיאור של פתית גרפן נע על פני משטח גרפיט באיור 7.

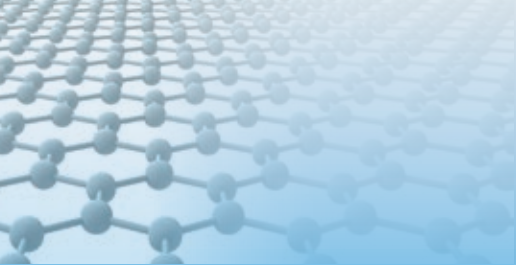
תיאור ההחלקה התאורטית

משתמשים בסימולציות אטומיות ומזיזים משטח אחד ביחס למשטח האחר, מגדירים את הזווית ואת כיוון ההחלקה ומחשבים את ה-RI לזוויות שונות. לפי המשוואה

$$RI = \frac{(S_{CC} - S_{CC}^{AB})}{(S_{CC}^{AA} - S_{CC}^{AB})}$$



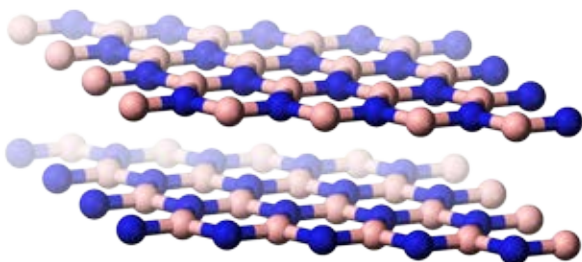
איור 8: תמונה a: מתארת את ה-RI כפונקציה של החלקת שכבה אחת של גרפן על גרפן בזוויות שונות. תמונה b: מתארת את ה-RI כפונקציה של החלקת גרפן רב-שכבתי על גרפיט בזוויות שונות. תמונה c: ציר Y שמאלי בצבע שחור מתאר את החיכוך friction, את ציר Y ימני בצבע אדום, מתאר את פרמטר Registry Index כפונקציה של זווית ההחלקה של גרפן על פני גרפן (מערכת דו-שכבתית). תמונה d: ציר Y שמאלי בצבע שחור מתאר את החיכוך friction, ציר Y ימני בצבע אדום מתאר את פרמטר Registry Index כפונקציה של זווית ההחלקה של גרפן על פני גרפיט (מערכת רב-שכבתית).



באופן תיאורטי כפונקציה של זווית ההחלקה של גרפן על פני משטח גרפיט, נופל בדיוק על הקו השחור שמתאר את החיכוך הנמדד באופן ניסויי כפונקציה של זווית ההחלקה של גרפן על פני משטח גרפיט. התוצאות המחושבות באופן תאורטי של פרמטר ה-RI, מראות שמודל ה-RI יכול לשמש ככלי פשוט, אינטואיטיבי, כמותי ויעיל לניבוי התכונות הטריבולוגיות של ממשק בסקלת הננו של חומרים שכבתיים קשיחים.

בורון ניטריד היקסגונלי h-BN

בורון ניטריד היקסגונלי, גם הוא בדומה לגרפן הוא חומר שכבתי הקסגונלי, כפי שניתן לראות באיור 9. ניתן לראות השוואה בין בורון ניטריד הקסגונלי לבין הגרפן בטבלה 1.



איור 9: בורון ניטריד היקסגונלי

סופר סיכוך superlubricity בממשק היטרוגני גרפן ו-h-BN

בין גרפן ו-h-BN, (לשני החומרים יש אותו מבנה הקסגונלי), קיים ממשק שבו יש אי התאמה קטנה 1.8%. כאשר פתית גרפן גדול מחליק על פני שטח h-BN, אי התאמה זו יכולה ליצור מצב של סופר-סיכוך שאינו תלוי בזווית אי התאמה

יש חיכוך מקסימלי RI=1. בזוויות 20° יש חיכוך מינימלי RI=0.

השוואה בין הניסוי המעשי ובין התאוריה

בהשוואה בין תוצאות החישוב התאורטי לבין מדידות חיכוך בין פתיתי הגרפן, ניתן להצביע על נקודות דמיון ועל הבדלים. ראשית נתייחס להבדלים: בניסוי גם פתית הגרפן וגם שטח פני הגרפיט הם רב-שכבתיים, ואילו בחישוב התאורטי מתייחסים לשכבה אחת של גרפיט (כאשר מכניסים את קירוב השכן הקרוב). בהבדל זה נובעים הבדלים נוספים - בעוד שבשכבה הרב-אטומית הסימטריה משתנה ויורדת מ-C₆ ל-C₃. קיים שוני בצורה ובנפח של ענבי אלקטרוני ה-π ליד האטומים 'CC', קיים שוני בדחיית Pauli. ולכן שני הפיקים ב-0° ו-60° אינם סימטריים. בגישת ה-RI ניתן לייצג זאת ע"י רדיוס אטומי שונה, שמייצג נפח ענן אלקטרוני שונה. אם חוזרים לאיור 8 רואים שבתמונה a: $r_c = 0.5 \cdot L_{cc}$, בתמונה b: $r_c' = 0.346 \cdot L_{cc}$

לעומת זאת בחישוב התאורטי רדיוס ונפח קטן של אטום מייצג חומר רב-שכבתי.

ניתן לראות בתמונות d, c דמיון רב בין התוצאות הנמדדות באופן ניסויי של החיכוך ובין ה-RI המחושב באופן תיאורטי. בתמונה c ניתן לראות שהקו האדום שמתאר את ה-RI המחושב באופן תיאורטי כפונקציה של זווית ההחלקה של גרפן על פני משטח גרפן, נופל בדיוק על הקו השחור שמתאר את החיכוך הנמדד באופן ניסויי כפונקציה של זווית ההחלקה של גרפן על פני משטח גרפן. בתמונה d ניתן לראות שהקו האדום שמתאר את ה-RI המחושב

טבלה 1: השוואה בין בורון ניטריד הקסגונלי לבין הגרפן

גרפן	h-BN	
שניהם הקסגונליים - מבנה תא יחידה הקסגונלי		דמיון
איזו אלקטרונים - מספר האלקטרונים זהה		
אלקטרו שליליות האטומים זהה (רק פחמן)	אלקטרושליליות האטומים N ו-B שונה	שוני
הקשר הקוולנטי לא קוטבי	הקשר הקוולנטי קוטבי	
הקונפיגורציה במצב eclipsed היא הגרועה ביותר AA	קיימת קונפיגורציית eclipsed שהיא אופטימלית 'AA'	
רדיוס האטומים זהה (רק פחמן)	רדיוס האטומים שונה $r_B > r_N$ בגלל צפיפות אלקטרונים גבוהה יותר על החנקן היותר אלקטרושלילי מהבורון	

מצורפות שתי תמונות (איור 11) שמשוות בין ה-RI המחושב ובין האנרגיה הכוללת.

ברגע שה-RI מוגדר, ניתן לאפיין את התלות של אנרגיית ההחלקה בזווית אי ההתאמה בין שני המשטחים. עושים חישובים עבור נפחים שונים של פתית גרפן.

תמונה b: באיור 12 מתארת את RI כפונקציה של זווית אי ההתאמה בין שני המשטחים:

- עבור הפתית הקטן ביותר, 5x5 גרפן, מתקבל גרף דומה לגרפיט. (גרף שחור) RI=1 בזוויות 0° ו-60°
- ככל שנפח הפתית גדל (מספר אטומים בפתית גדל), ה-RI המקסימלי קטן. (הפיק יורד)
- ככל שנפח הפתית גדל, קטנה השפעת זווית אי ההתאמה על ה-RI.

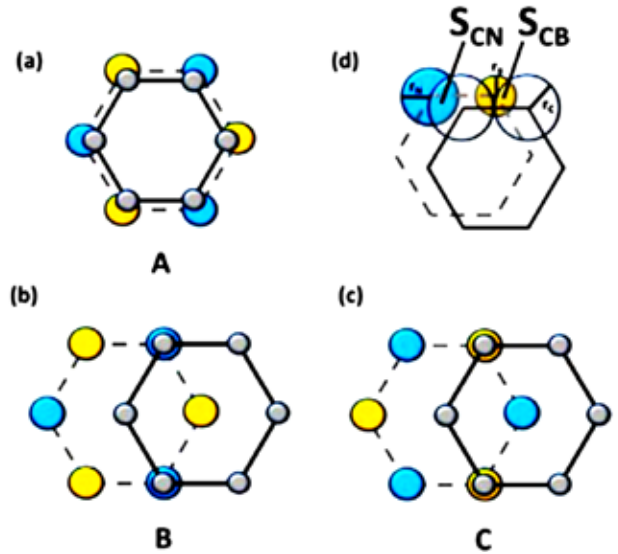
תמונה a באיור 12 מתארת את זווית אי ההתאמה misfit angle = 45° בין גרפן ל-h-BN ואת כיוון ההחלקה.

סיכום

בסקירה זו הראינו כי RI הוא כלי יעיל מבחינה חישובית ופשוט מבחינה מושגית לשימושים האלה:

- לכימות ההתאמה בין הסריגים בממשק שבין חומרים קשיחים ננומטריים.
 - לאפיון התמונה הכוללת של אנרגיית ההחלקה שלהם.
- ה-RI יכול לתאר ולנבא עד פרטי פרטים את התנהגות

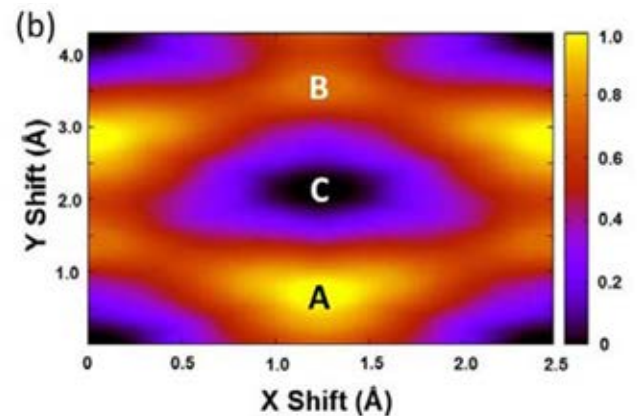
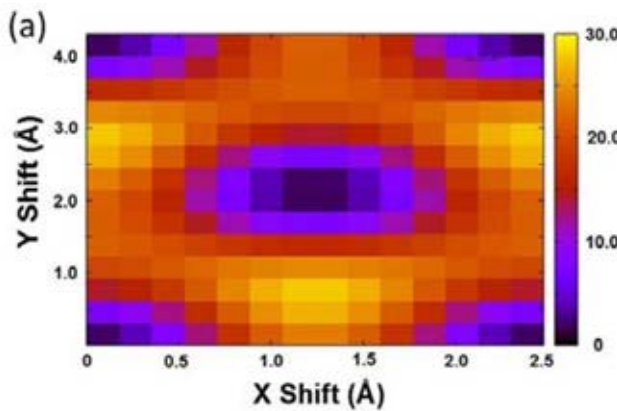
בין השכבות. ניתן לראות קונפיגורציות של מצב אופטימלי וגרוע ביותר באיור 10.



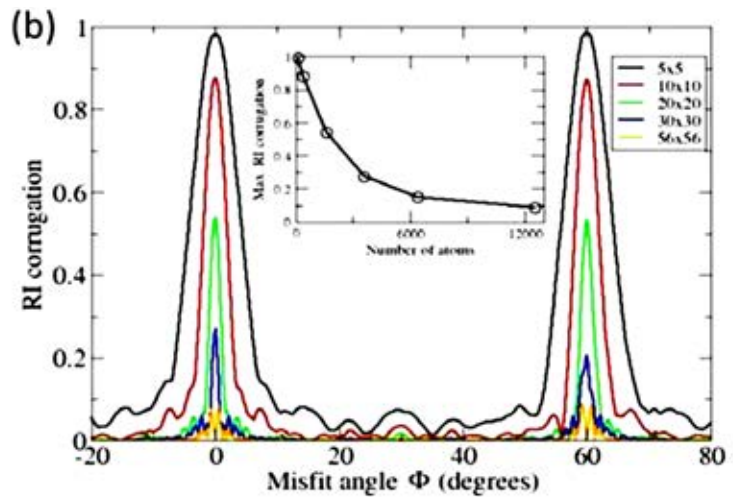
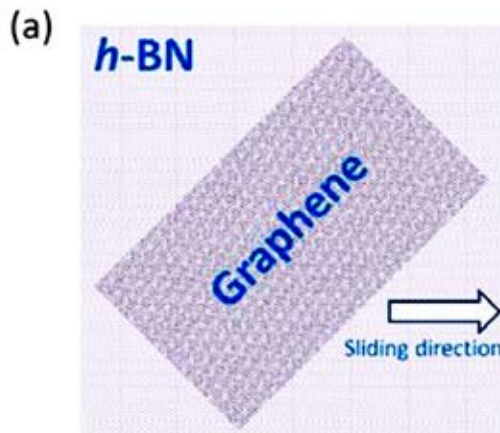
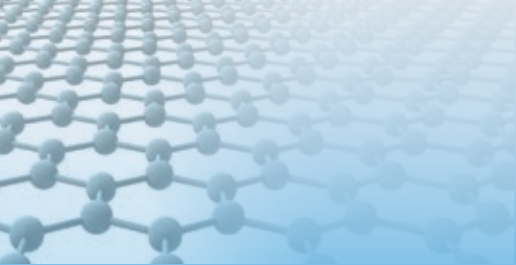
איור 10: (c): מצב אופטימלי, אטום פחמן בגרפן מעל אטום בורון ב-h-BN, אטום פחמן שני בגרפן מעל מרכז ה-h-BN - ההיקסגונו. (a): מצב גרוע ביותר, מצב eclipsed: מצב ביניים: אטום פחמן בגרפן מעל אטום חנקן ב-h-BN, אטום פחמן שני בגרפן מעל מרכז ה-h-BN - ההיקסגונו.

איור 10: מצב אופטימלי, אטום פחמן בגרפן מעל אטום בורון ב-h-BN, אטום פחמן שני בגרפן מעל מרכז ה-h-BN - ההיקסגונו. (a): מצב גרוע ביותר, מצב eclipsed: מצב ביניים: אטום פחמן בגרפן מעל אטום חנקן ב-h-BN, אטום פחמן שני בגרפן מעל מרכז ה-h-BN - ההיקסגונו.

$$RI = \frac{(S_{CB} - S_{CB}^C) + (S_{CN} - S_{CN}^C)}{(S_{CB}^A - S_{CB}^C) + (S_{CN}^A - S_{CN}^C)}$$



איור 11: תמונה a: מתארת את ה-RI כפונקציה של ההחלקה על ציר x. תמונה b: מתארת את התמונה הכוללת של אנרגיית ההחלקה של פתית גרפן מעל מחליק מעל h-BN (האנרגיה מחושבת בעזרת DFT) כפונקציה של ההחלקה על ציר x.



איור 12: תמונה a: מתארת את זווית אי ההתאמה $\text{misfit angle} = 45^\circ$ בין גרפן ל-h-BN ואת כיוון ההחלקה. תמונה b: מתארת את RI כפונקציה של זווית אי ההתאמה בין שני המשטחים.

הוד, ע. ננו יהלומים ואוצרות אחרים, <http://www.hayadan.org.il/nano-diamonds-240712>

Hod, O, (2012). Interlayer Commensurability and Sliding in Layered Materials, American Physical Societ.

Hod, O, (2010). Quantifying the Stacking Registry Matching in Layerd Materials, Israel Journal of Chemistry, 50,506-514

Hod, O, (2013). The Registry Index: A Quantitative Measure of Materials Interfacial Commensurability

www.apnano.com

איורים 4-8 ואיורים 10-12 נלקחו ממאמרים בנושא ננטריבולוגיה באדיבות פרופ' עודד הוד מאוניברסיטת תל אביב.

איורים 1 ו-2 נלקחו מאתר: <http://www.apnano.com>

Active Protection NANO materials באדיבות פרופ' רשף טנא ממכון ויצמן למדע.

תודות לפרופ' עודד הוד ופרופ' רשף טנא.

החיכוך אשר נמדדה באופן ניסויי של פתית גרפן המחליק על גבי משטח גרפיט.

ניתן לעשות הכללה ל-RI כדי שיוכל להתאים למערכות לא פלנריות השימושיות במערכות NEMS.

בעתיד רכיבים מכניים, אלקטרומכניים, מיקרוסקופיים וננוסקופיים עם דיוק חסר תקדים צפויים לחולל מהפכה בתחומים טכנולוגיים רבים, גם במכשירי קיבולת גבוהה יותר, וגם יגרמו להופעת פונקציות חדשות המסתמכות על תופעות פיזיקליות המופיעות בממדים קטנים. ולכן הבנת נושא החיכוך והתכונות הטריבולוגיות במערכות אלה חשובה ביותר. עם ההצלחה המוכחת של מושג ה-RI בתיאור התכונות הטריבולוגיות בסקלת הננו, והטווח הרחב של הרחבות אפשריות שעשויות להשפיע על מגוון תחומים כמו: קטליזה, חישה כימית, הרכבה עצמית. בתקווה שה-RI יהפוך לחלק סטנדרטי של מגוון הסימולציות בארגז הכלים הזמין למדענים בתחום הננטריבולוגיה.

מקורות

בלונדר, ר. הוד, ע. (2011). נפלאות הגרפן, על כימיה, 18, 19-23.

הנגשת הנושא לתלמידי בית הספר

בתיאום עם עמותת "בשער", קהילה אקדמית למען החברה בישראל, שמארגנת מפגשים בין אנשים מהאקדמיה ובין תלמידי תיכון, אורגן מפגש (12.11.13) בין פרופ' עודד הוד לבין תלמידי כיתות י"א ו-י"ב בבית ספר על יסודי אלקאסמי-באקה. מטרת המפגשים הייתה לעורר ולסקרן את התלמידים, לחזק בהם את ההרגשה כי לאנשי האקדמיה אכפת מבני הנוער. מפגשים אלה מעצימים את חשיבות ההשכלה הגבוהה ואת חשיבותה כחלק טבעי ממסלול החיים של בני הנוער. ההרצאות שהועברו ע"י פרופ' הוד היו בנושא הגרפן, המבנה שלו, תכונותיו, הגילוי, שימושים ושיטות שונות לייצור-או כמו שכונתה ההרצאה "נפלאות הגרפן". פרופ' הוד התאים את הרצאותיו לקהל היעד, עניין את התלמידים ונתן להם מעבר להרחבת ידע מדעי בכימיה. הוא סיפר על המחקרים שלו בארץ ובחו"ל, על שיתוף הפעולה בינו לבין מדענים אחרים ברחבי העולם, על החשיבות שבהפצת מאמרים באנגלית, על העובדה שמדען שזוכה בפרס איג-נובל אינו מאבד את הרצון להמשיך ולקבל את הנובל במלוא הדרו, ועוד ועוד.

בסוף היום, ועם סיום ההרצאות, מנהל בית הספר, ד"ר פארס קיבלאו, והמורה לכימיה, אפרח עאסי, הודו לפרופ' עודד הוד על הזמן היקר שהוא מקדיש בהתנדבות למען קהילה ועל מתן הרצאות לתלמידי בית הספר.



עודד הוד בבית הספר מקבל תעודת הוקרה מהמנהל ד"ר פארס קיבלאו