



بررسی رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت منیزیمی تقویت شده به وسیله نانولوله بور نیتريد به روش دینامیک مولکولی

مجتبی ذوالفقاری^۱، یگانه جعفرکلهری^۱، حامد حیدری^۲، وحید طهماسبی^۳، مهدی صفری^۳

۱- دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اراک، اراک، ایران

۲- دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران

۳- دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه صنعتی اراک، اراک، ایران

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۴۰۰/۰۱/۰۲

بازنگری: ۱۴۰۰/۰۸/۰۷

پذیرش: ۱۴۰۰/۱۰/۱۱

ارائه آنلاین: ۱۴۰۰/۱۰/۲۲

کلمات کلیدی:

دینامیک مولکولی

نانوکامپوزیت

منیزیم

نانولوله بور نیتريد

خلاصه: نانوکامپوزیت‌های پایه منیزیم به طور گسترده در صنایع هوافضا، خودروسازی و پزشکی استفاده می‌شوند. با توجه به خواص ویژه نانولوله بور نیتريد، این نانولوله نقش مهمی در تقویت نانو کامپوزیت‌ها ایفا می‌نماید. در این پژوهش نانو کامپوزیت منیزیم به وسیله نانولوله بور نیتريد تقویت شده و خواص مکانیکی این نانو کامپوزیت‌ها تحت بارگذاری کششی تک محوره، در راستای محوری نانولوله، با روش دینامیک مولکولی توسط نرم‌افزار لمپس بررسی شده است. همچنین ضرایب تابع پتانسیل بین‌اتمی اتم‌های منیزیم، با استفاده از قانون ترکیب و داده‌های استخراج شده توسط نرم‌افزار گوسین، محاسبه شده است. نتایج شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی حاکی از بهبود خواص مکانیکی نانو کامپوزیت فلزی پایه منیزیم به دلیل اضافه نمودن نانولوله‌های بور نیتريد می‌باشد. وجود استحکام‌دهنده نانولوله بور نیتريد (۰،۱۲)، (۰،۱۴)، (۰،۱۶) و (۰،۱۸) به عنوان تقویت‌کننده‌ی زمینه‌ی منیزیم، سبب افزایش مدول الاستیک نانو کامپوزیت‌ها به ترتیب به میزان ۱۳، ۱۴/۹، ۱۶/۲ و ۱۷ درصد نسبت به منیزیم خالص شده است. نتایج دیگر این تحقیق حاکی از آن است که رفتار الاستیک نانو کامپوزیت مستقل از تغییرات نرخ کرنش است. همچنین با انجام این شبیه‌سازی در محدوده وسیعی از دما، تغییرات آشکاری در خواص مکانیکی نانو کامپوزیت در دماهای مختلف بدست آمده است.

۱- مقدمه

زمان از نانولوله‌های کربن به عنوان فاز تقویت‌کننده در نانوکامپوزیت‌ها استفاده شد که باعث افزایش خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها گردید [۳] و [۴]. با کشف نانولوله بور نیتريد^۴ و مقایسه‌ی آن با نانولوله کربن که به برتری نانولوله بور نیتريد انجامید، از آن به عنوان فاز تقویت‌کننده در نانوکامپوزیت‌ها استفاده شد [۵]. شارما^۵ و همکاران [۶] به مطالعه تجربی و دینامیک مولکولی کامپوزیت‌های پلی متیل متاکریلات^۶ تقویت شده با نانولوله بور نیتريد پرداختند، نتایج بدست آمده در این پژوهش نمایانگر بهبود خواص از جمله افزایش رسانایی حرارتی ماتریس پلی متیل متاکریلات با افزایش درصد وزنی نانولوله‌های بور نیتريد است. در پژوهشی رحمت^۷ و همکاران [۷] خصوصیات مکانیکی برشی و کششی فیلم نازک کامپوزیت اپوکسی- بور نیتريد را بررسی نموده و مشخص شد که با افزایش نرخ کرنش استحکام کششی و مدول یانگ به ترتیب ۳۹ و ۱۱۳ درصد افزایش

منیزیم^۱ به عنوان کم چگال‌ترین فلز صنعتی، استحکام ویژه بالایی دارد و به همین دلیل به طور گسترده به عنوان زمینه فلزی در ساخت کامپوزیت‌ها استفاده می‌شود. نانو کامپوزیت‌های ماتریس فلزی مبتنی بر منیزیم، موضوع مهمی در توسعه‌ی مواد ساختاری سبک وزن هستند، زیرا خواص بهینه شده‌ی آن‌ها برای صنایع خودروسازی، هوافضا بسیار مهم است [۱]. علاوه بر این، منیزیم و برخی از آلیاژهای آن به طور گسترده مورد توجه کاربردهای پزشکی قرار گرفته‌اند زیرا دارای تجزیه‌پذیری زیستی و ضریب الاستیک کمتری هستند که نسبت به مواد کاشت^۲ فلزی فعلی مانند تیتانیوم و آلیاژهای آن، فولادهای ضد زنگ، به استخوان‌های طبیعی نزدیک‌تر می‌باشند [۲]. پس از کشف نانولوله کربن^۳ در دهه‌ی ۱۹۹۰، این نانولوله به یک نانو ماده‌ی مهم با خواص ویژه و پتانسیل بسیار بالا بدل شد. با گذشت

- 1 Mg
- 2 Implant
- 3 CNT

* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: m-zolfaghari@araku.ac.ir



یافته است. کاکارلا^۱ و همکاران [۸] با هدف بررسی ریخت شناسی، خواص حرارتی و کششی نانوکامپوزیت‌های پلی کاپرولاکتون- نیتريد بور را سنتز نمودند و با افزودن نانولوله‌ها به ماتریس پلیمری، هم پایداری حرارتی و هم خواص مکانیکی را افزایش دادند، به‌ویژه استحکام کششی که، با افزودن ۵ درصد وزنی نیتريد بور، ۱۰۱ درصد افزایش یافت. گوان^۲ و همکاران [۹] نیز خواص مکانیکی و گرمایی نانوکامپوزیت‌های پلی کربنات^۳- نیتريد بور را با خواص پلی کربنات خالص مقایسه کردند، نتیجه آزمایش‌ها افزایش در چقرمگی کششی نانوکامپوزیت نسبت به پلی کربنات خالص را به میزان ۳۹ درصد نشان می‌دهد، همچنین مدول یانگ به میزان ۱۳ درصد افزایش یافته است. نانو کامپوزیت‌های آلومینیوم تقویت‌شده با نانولوله‌های بور نیتريد نمونه‌ای از این نانوکامپوزیت‌ها می‌باشد. کانگ^۴ و لی [۱۰] چندین شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای بررسی رفتار مکانیکی کامپوزیت‌های آلومینیوم- بور نیتريد تحت بارگذاری کششی انجام دادند. این شبیه‌سازی‌ها اطلاعاتی در مورد خصوصیات مکانیکی کامپوزیت نانولوله‌ی بور نیتريد ارائه داده و تأثیر قطرهای مختلف نانولوله‌ی بور نیتريد و کسرهای حجمی را نشان می‌دهد. سهم مؤلفه‌های نانولوله و ماتریس برای بهبود کل خواص مکانیکی از طریق آنالیز جزئی اندازه‌گیری شد. تجزیه و تحلیل‌ها نشان دادند که افزایش کسر حجمی نانو تقویت‌کننده‌ها نسبت به افزایش اندازه می‌تواند یک روش مؤثرتر برای تقویت استحکام مکانیکی باشد. علاوه بر این رابطه‌ی کمی بین کسر حجمی نانولوله‌های بور نیتريد و افزایش خاصیت الاستیک را می‌توان برای طراحی مهندسی کامپوزیت‌های زمینه فلزی آلومینیوم- نانولوله‌ی بور نیتريد استفاده کرد. در پژوهشی جدید، ویجایاراگوان^۵ و زانگ [۱۱] خواص کششی نانوکامپوزیت‌های آلومینیومی تقویت شده با نانو ورق نیتريد بور- کربن با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی را بررسی کردند. مدول یانگ محاسبه شده برای تقویت ماتریس آلومینیوم با تقویت‌کننده‌های گرافن، نیتريد بور و نیتريد بور- کربن با استفاده از شرایط بارگذاری واقع‌بینانه به ترتیب ۷۴/۶۱، ۷۴/۶۵ و ۷۶/۴۸ گیگاپاسکال به دست آمد. رفتار بارگذاری کششی نانوکامپوزیت نیز بستگی زیادی به زاویه قرارگیری نانو ورق نسبت به جهت بارگذاری دارد. نانوکامپوزیت با تقویت‌کننده نانوالیاف در راستای زاویه صفر با محور بارگذاری اصلی در مقایسه با تقویت‌کننده‌های نانوالیاف

با زاویه ۱۵ یا ۳۰ درجه حداکثر استحکام کششی را از خود نشان داد. صدیق^۶ و همکاران [۱۲] خواص مکانیکی کامپوزیت‌های آلومینیوم تقویت شده با نانو ورق بور- نیتريد^۷ و نانولوله بور- نیتريد^۸ تحت شرایط بارگذاری تک محوری را بررسی کرده و نتایج نشان داد که ورق بور- نیتريد در مورد افزایش مدول یانگ و چقرمگی شکست نانوکامپوزیت‌های ماتریس فلزی از نانولوله پیشی می‌گیرد و این برتری به‌طور عمده به سطح ویژه بالاتر نانورق نسبت به نانولوله نسبت داده شده است. ژو^۹ و همکاران [۱۳] به شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تست کششی کامپوزیت پایه منیزیمی تقویت شده به‌وسیله نانولوله‌ی کربن با پوشش نیکل، در دما و نرخ کرنش‌های مختلف پرداختند. نتایج نشان داد که نانولوله‌ی کربن با پوشش نیکل، خواص مکانیکی کامپوزیت را به‌طور مؤثری بهبود می‌بخشد. در مقایسه با کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌ی کربن (۶ و ۶) بدون پوشش‌دهی، تنش ماکزیمم کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌ی کربن (۶ و ۶) با پوشش نیکل، ۱۱/۱۳ درصد و مدول الاستیک ۱۴/۴۳ درصد افزایش یافت. همچنین از نتایج دیگر این پژوهش، در مقایسه با منیزیم تک بلور، تنش ماکزیمم کامپوزیت نانولوله‌ی کربن (۶ و ۶) با پوشش نیکل، ۲۵/۶۶ درصد و مدول الاستیک ۲۳/۶۹ درصد افزایش پیدا کرده است. این نتایج برای دمای ۳۰۰ کلین و نرخ کرنش ۱۰^{-۹} بر ثانیه به دست آمده است. تمرکز بیشتر در مطالعات کامپوزیت‌های ماتریس فلزی تقویت‌شده با نانولوله‌های کربن بر روی خواص مکانیکی ماکروسکوپی می‌باشد و از آن‌جا که انجام روش‌های اندازه‌گیری ناحیه‌ی بین وجهی دشوار است و تئوری توصیف ناحیه‌ی بین وجهی هنوز کامل نیست، تکنیک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی^{۱۰} به‌طور گسترده در مطالعه رفتار ناحیه‌ی بین وجهی استفاده شده است. برای مثال باکشی^{۱۱} و همکاران [۱۴] موضوعات مهم در مطالعه‌ی کامپوزیت‌های ماتریس فلزی تقویت شده با نانولوله‌های کربن را مورد تحلیل و جمع‌بندی قرار دادند که شامل پراکنندگی نانولوله‌های کربن در ماتریس فلزی و بررسی پارامترهای مؤثر در ناحیه‌ی بین وجهی می‌باشد. هان و لیوت^{۱۲} خواص الاستیک سیستم‌های کامپوزیت پلیمر- نانولوله‌های کربن را با دو ماتریس پلیمر مختلف با استفاده از روش دینامیک مولکولی بررسی کردند و دریافتند که مدول الاستیک دو کامپوزیت در جهت طولی نانولوله‌های کربن افزایش می‌یابد [۱۵].

6 Sedigh
7 BNNS
8 BNNT
9 Zhou
10 Molecular dynamics
11 Bakshi
12 Han and Elliott

1 Kakarla
2 Guan
3 Polycarbonate
4 Cong
5 Vijayaraghavan

است. در پژوهش حاضر، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار لمپس^۴ انجام شده است. نرم‌افزار لمپس به اتم‌ها و مولکول‌ها در مدت زمان مشخصی فرصت داده تا با استفاده از توابع پتانسیل بین اتمی با یکدیگر برهم‌کنش انجام دهند که از طریق آن، مسیر حرکت اتم‌ها و مولکول‌ها را به کمک حل عددی معادله حرکت نیوتون تعیین می‌کند.

۲-۱- انتخاب توابع پتانسیل

دقت شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به انتخاب توابع پتانسیل بستگی دارد. برای شبیه‌سازی حاضر به توابع پتانسیل بین اتمی اتم‌های منیزیم-منیزیم، منیزیم-بور، منیزیم-نیتروژن و بور-نیتروژن نیاز است. برای توصیف پتانسیل بین اتمی، اتم‌های بور و نیتروژن از تابع پتانسیل ترسوف^۵، معادلات (۱) تا (۵) استفاده شده است.

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \varphi(r_{ij}) \quad (1)$$

$$\varphi(r_{ij}) = \sum_i \sum_{j>i} f_c(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})] \quad (2)$$

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1 & r_{ij} < R_1 \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left[\frac{\pi(r_{ij} - R_1)}{R_2 - r_{ij}} \right] & R_1 < r_{ij} < R_2 \\ 0 & r_{ij} > R_2 \end{cases} \quad (3)$$

$$f_R(r_{ij}) = A e^{(-\lambda_1 r_{ij})} \quad (4)$$

$$f_A(r_{ij}) = B e^{(-\lambda_2 r_{ij})} \quad (5)$$

در این روابط f_c تابع برش، f_R و f_A پتانسیل جفتی دافعه و جاذبه، r_{ij} فاصله از اتم i تا اتم j و b_{ij} تابع ترتیب پیوند هستند. ضرایب این پتانسیل برای اتم‌های بور و نیتروژن در جدول ۱ ارائه شده است [۱۹].

سانگ و ژا^۱ [۱۵] رفتار مکانیکی کامپوزیت‌های طلا- نانولوله‌های کربنی چند دیواره که با روکش و بدون وجود روکش نیکل، را با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار دادند. نتایج نشان می‌دهد که مدول یانگ و استحکام کششی نانولوله‌های کربنی چند دیواره پس از پوشش‌دهی با نیکل کاهش می‌یابد، علاوه بر این، این شبیه‌سازی نشان می‌دهد که برای افزایش بازدهی تحمل بار، نانولوله‌های کربنی چند دیواره باید با جهت بارگذاری موازی باشند. در داخل کشورمان نیز در مورد کامپوزیت‌های تقویت شده با نانولوله‌ی بور نیتريد مطالعاتی انجام شده است. رضایی^۲ و همکاران [۱۶] نانولوله‌ی بور نیتريد تک جداره و چند جداره را با ماتریس آلومینیوم به کار بردند. سپس به بررسی خواص مکانیکی و مکانیزم تغییرشکل کامپوزیت تقویت شده به‌وسیله‌ی نانولوله‌ی بور نیتريد کوتاه و بلند تحت بارگذاری‌های تک‌محوره‌ی کششی و فشاری با شرایط مرزی مختلف پرداختند. آن‌ها در این پژوهش از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده کردند. نتایج حاکی از آن است که نانولوله‌های بور نیتريد بلند به‌طرز چشم‌گیری خواص مکانیکی کششی ماتریس را بهبود بخشیده و مدول الاستیک و استحکام نانوکامپوزیت‌ها را افزایش داده است. همچنین آن‌ها پی‌بردند که نانولوله‌ها می‌توانند موانع مؤثری در مسیر انتشار نابجایی‌های ایجاد شده در ماتریس ایجاد کنند.

استفاده از روش‌های تجربی با محدودیت‌هایی نظیر مشکلات ساخت و هزینه‌های فراوان مواجه بوده و به‌همین دلیل استفاده از شبیه‌سازی‌های مقیاس مولکولی در مطالعه‌ی خواص و رفتار مواد روز به روز بیشتر می‌شود. تخریب سریع آلیاژهای منیزیم و از بین رفتن یکپارچگی مکانیکی آن‌ها قبل از بهبود کافی استخوان، کاربرد بالینی آن‌ها را با مشکل مواجه می‌کند [۲]، بنابراین باید استحکام ماتریس منیزیم را با نانوذرات مناسب که سازگاری زیستی خوبی دارند، افزایش داد. لذا در تحقیق حاضر با توجه به سازگاری زیستی نانولوله‌های بورنیتريد [۱۷] به بررسی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت منیزیم- بور نیتريد^۳، که به‌طور ویژه برای کاربردهای ارتوپدی از جمله ایمپلنت‌ها کاربردی می‌باشد [۲ و ۱۸]، تحت اثر تغییرات قطر نانولوله، نرخ کرنش و دما، به‌روش دینامیک مولکولی پرداخته شده است.

۲- محاسبه ضرایب پتانسیل و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

دینامیک مولکولی روشی برای آنالیز حرکت فیزیکی اتم‌ها و مولکول‌ها

4 LAMMPS
5 Tersoff

1 Song and Zha
2 Rezaei
3 Mg-BNNT

جدول ۱. پارامترهای تابع پتانسیل استفاده شده برای نانولوله‌ی بور نیتريد [۱۹]

Table 1. Potential function parameters used for BNNTs [19]

واحد‌ها	ثابت‌ها	پارامتر
	۳/۰	m
	۱/۰	γ
A^{-1}	۰/۰	λ_3
	۲۵۰۰۰	c
	۴/۳۴۸۴	d
	-۰/۸۹	h
	۰/۷۲۷۵۱	n
	۰/۰۰۰۰۰۰۱۲۵۷	β
	۲/۱۹۹	C
eV	۳۴۰	B
A^{-1}	۱/۹۵	R
A^{-1}	۰/۰۵	D
A^{-1}	۰/۵۶۸	λ_1
eV	۱۳۸۰	A

اتم سیستم است. $\varphi(r_{ij})$ انرژی بین اتمی و $F(\rho_i)$ تابع پتانسیل محاطی برای اتم i را نشان می‌دهد که به چگالی الکترونی کل ρ_i احساس شده توسط آن اتم بستگی دارد. بنابراین در این تحقیق برای توصیف برهم‌کنش بین ذرات منیزیم- منیزیم از پتانسیل اتم محاط شده که توسط ویلسون^۳ و مندلف [۲۲] ارائه گردیده، استفاده شده است.

تابع پتانسیل لنارد جونز^۴ برای توصیف برهم‌کنش بین اتم‌های منیزیم و بور و نیتروژن انتخاب شده است. رایج‌ترین بیان پتانسیل لنارد-جونز در معادله (۸) بیان شده است:

$$E_{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (8)$$

داو و باسکس^۱ روش اتم محاط شده^۲ را برای توصیف برهم‌کنش بین ذرات فلزی معرفی کردند [۲۰ و ۲۱]. انرژی پتانسیل اتم محاط شده از جمع جفت گونه‌ی برهم‌کنش بین اتم‌ها و جمع توابع محاطی اتم‌ها تشکیل می‌شود، معادله (۶) و (۷):

$$E_{total} = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \varphi(r_{ij}) + \sum_{i=1}^N F(\rho_i) \quad (6)$$

$$\rho_i = \sum_{j=1}^N \psi(r_{ij}) \quad (7)$$

در این روابط زیرنویس‌های i و j جفت اتم برهم‌کنش کننده از N

3 Wilson
4 Lennard-Jones

1 Daw and Baskes
2 EAM

جدول ۲. ضرایب انرژی پتانسیل بین اتمی لنارد جونز

Table 2. Coefficients of Leonard Jones interatomic Potential Energy

منیزیم-منیزیم	منیزیم-بور	نیتروژن-نیتروژن	بور-بور	منیزیم-منیزیم	
۰/۰۶۵۳۸	۰/۰۵۲۹۲۴	۰/۰۰۶۲۸۱	۰/۰۰۴۱۱۶	۰/۶۸۰۵	اپسیلون (الکترون ولت)
۳/۴۹۲۵	۳/۰۳۶۵	۳/۳۶۵	۳/۴۵۳	۲/۶۲۰	سیگما (آنگستروم)
-	-	[۲۴ و ۲۵]	[۲۴ و ۲۵]	-	مراجع

جدول ۳. ویژگی نانولوله‌های بور نیتريد زيگزاگ

Table 3. Characteristics of zigzag BNNTs

کسر حجمی نانولوله (درصد)	طول نانولوله (آنگسترم)	نانولوله	تعداد اتم بور	تعداد اتم نیتروژن	تعداد اتم کل	قطر نانولوله (آنگسترم)
۲/۷۹۸	۱۱۷/۵۰	(۱۲,۰)	۴۴۴	۴۴۴	۸۸۸	۹/۹۵
۳/۸۰	۱۱۷/۵۰	(۱۴,۰)	۵۱۸	۵۱۸	۱۰۳۶	۱۱/۶۰
۴/۹۶	۱۱۷/۵۰	(۱۶,۰)	۵۹۲	۵۹۲	۱۱۸۴	۱۳/۲۵
۶/۲۷	۱۱۷/۵۰	(۱۸,۰)	۶۶۶	۶۶۶	۱۳۳۲	۱۴/۹۰

را در فواصل مختلف، با استفاده از نرم‌افزار گوسین، استخراج کرده و سپس با استفاده از برازش منحنی ثوابت اپسیلون و سیگما برای اتم‌های منیزیم-منیزیم محاسبه خواهد شد. در ادامه از قانون ترکیب استفاده شده و ضرایب تابع پتانسیل برای اتم‌های منیزیم-بور و منیزیم-نیتروژن به دست می‌آیند، جدول ۲.

۲-۲- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

مدل ماتریس به صورت مکعب مستطیل از جنس اتم‌های منیزیم با ساختار بسته شش ضلعی^۲ و با ثوابت شبکه‌یی^۳ ۳/۲، ۳/۲ و ۵/۲ در سه راستای x ، y و z توسط اتمسک^۴ ساخته شده است. ابعاد این مکعب در سه راستای x ، y و z به ترتیب ۵۷/۶، ۵۵/۴۳ و ۸۳/۲ آنگسترم می‌باشد که شامل ۱۵۲۰ اتم منیزیم است. نانولوله‌های بور نیتريد زيگزاگ (۱۲,۰)، (۱۴,۰)، (۱۶,۰) و (۱۸,۰) به وسیله نرم‌افزار وی ام دی^۵ ایجاد می‌شوند، جدول ۳، ویژگی نانولوله‌های بور نیتريد زيگزاگ را بیان می‌کند.

در این رابطه ϵ_{ij} انرژی پیوند- نابعایی، σ_{ij} فاصله‌ی محدودی که در آن پتانسیل بین دو ذره صفر است [۲۳]. برای به دست آوردن ضرایب از روش قانون ترکیب در تابع پتانسیل لنارد جونز استفاده خواهد شد، معادلات (۹) و (۱۰):

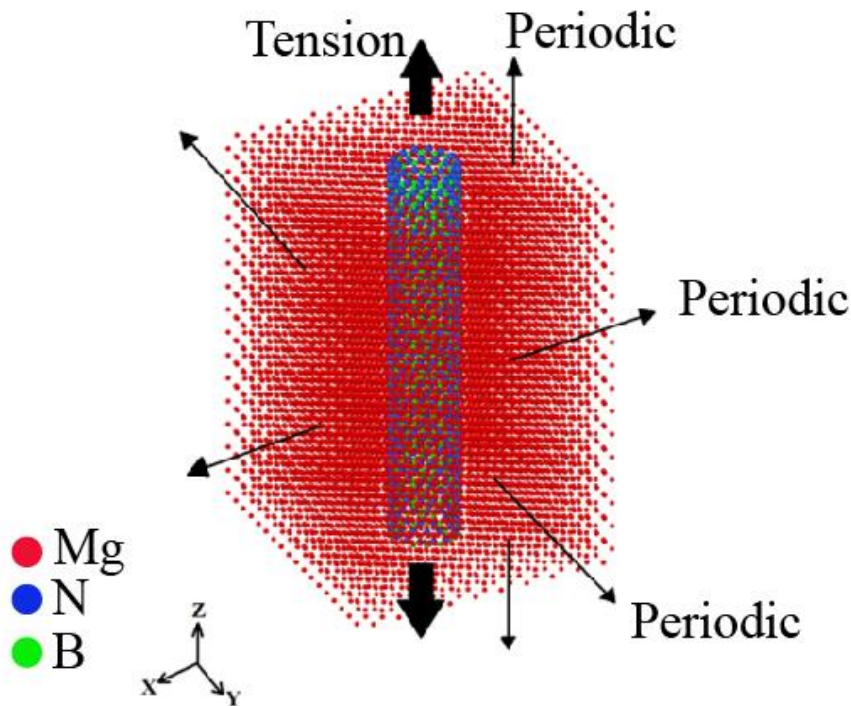
$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j} \quad (9)$$

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \quad (10)$$

بنابراین با داشتن ضرایب منیزیم-منیزیم، بور-بور و نیتروژن-نیتروژن ضرایب تابع پتانسیل لنارد جونز بین اتم‌های منیزیم-بور و منیزیم-نیتروژن محاسبه خواهد شد. برای به دست آوردن ضرایب پتانسیل بین اتم‌های منیزیم-منیزیم از نرم‌افزار گوسین^۱ استفاده شده است. برای محاسبه اپسیلون و سیگما در معادله لنارد جونز ابتدا سطح انرژی پیوند میان دو اتم

1 Gaussian

2 Hexagonal close pack
3 Lattice constant
4 Atomsk
5 VMD



شکل ۱. مدل نانوکامپوزیت منبیزی تقویت شده به وسیله نانولوله‌ی بور نیتريد

Fig. 1. Model of magnesium nanocomposite reinforced by BNNT

می‌گردد [۱۰] و از الگوریتم ولت^۵ برای محاسبات انتگرال‌گیری معادلات حرکت کلاسیک نیوتنی استفاده شده است. در این مطالعه، دمای شبیه‌سازی به‌وسیله‌ی آنسامبل کانونیکال دما ثابت^۶ در دمای ۳۰۰ کلین کنترل می‌شود و شبیه‌سازی با گام زمانی یک فمتو ثانیه انجام می‌گیرد. در حین شبیه‌سازی، تنش از رابطه‌ی تنش وایرال محاسبه می‌شود، معادله (۱۱):

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left[-\sum_i m_i v_i^\alpha v_i^\beta + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} F_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta \right] \quad (11)$$

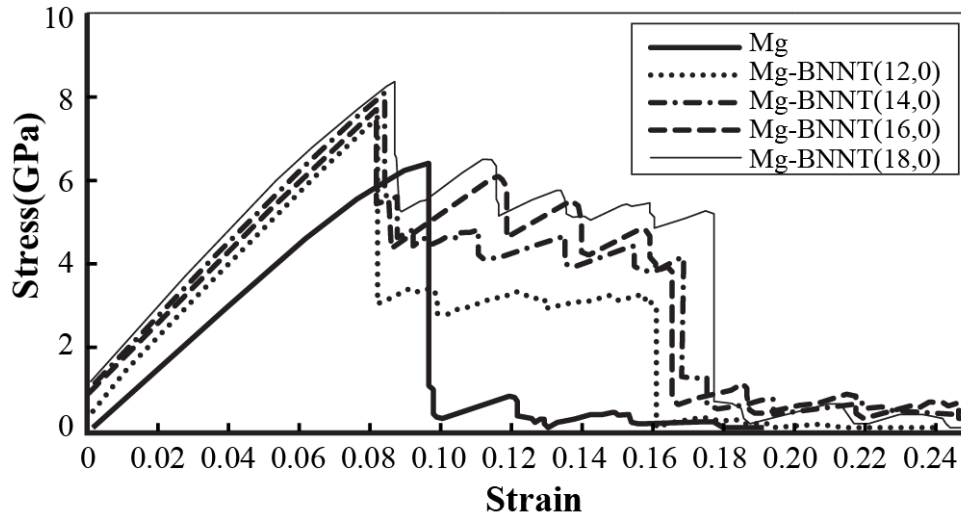
که در آن V حجم سیستم، m_i جرم و v_i سرعت ذره‌ای i ، F_{ij} نیروی بین اتم‌های i و j ، r_{ij} فاصله‌ی بین آن‌ها و α و β مؤلفه‌های مختصات کارترزین می‌باشند.

پس از مدل‌سازی منبیزیم خالص و نانولوله‌ها، با برش یک حجم استوانه‌ای از داخل ماتریس و قرار دادن نانولوله در آن مدل نانوکامپوزیت مورد بررسی، تکمیل خواهد شد، شکل ۱.

با استفاده از نرم‌افزار لمپس، شرایط مرزی دوره‌ای^۱ در هر سه جهت x ، y و z برای مدل در نظر گرفته شده است. قبل از اعمال بار کششی تک‌محوره، عمل کمینه‌سازی انرژی^۲ صد پیکوثانیه با گام زمانی یک فمتوثانیه اعمال خواهد شد. با استفاده از تابع توزیع گوسین، سرعت اولیه به سیستم داده خواهد شد و سپس برای به تعادل رسیدن خواص ترمودینامیکی سیستم، به مدل ساخته‌شده استراحت^۳ داده شده، که لازمه این کار، اعمال هنگرد فشار ثابت- دما ثابت^۴ در دمای ۳۰۰ کلین و در فشار خارجی صفر توسط ترموستات نوز- هوور است. پس از رهاسازی نمونه، بارگذاری در جهت z در نرخ کرنش مشخص^۹ ۱۰ برثانیه به آن اعمال

-
- 1 Periodic
 - 2 Energy minimization
 - 3 Relaxation
 - 4 NPT

5 Verlet
6 NVT



شکل ۲. نمودار تنش- کرنش برای مدل منیزیم خالص و مدل‌های منیزیم تقویت شده

Fig. 2. Strain- stress curve for pure magnesium model and reinforced magnesium models

وارد شده را نشان می‌دهد. نوسانات بین این دو نقطه نیز فرآیند تغییر شکل پلاستیک ماتریس را بیان می‌کند. رفتار کلی نمودار تنش-کرنش و نقاط اوج این پژوهش مطابقت خوبی با مقالات مشابه پیشین دارد، بطوری که نمودار تنش-کرنش برای نانوکامپوزیت‌های آلومینیوم-بور نیتريد، که نانولوله آن از نوع دسته‌صندلی^۲ است [۱۰]، دارای بالاترین نقطه اوج اولیه حدود ۷ گیگا پاسگال است، همچنین دارای چندین نقطه مشابه است که نشان دهنده افزایش برخورد و برهم‌کنش این نایجایی‌ها و سپس آزاد شدن آن‌ها در هر مرحله می‌باشد که منجر به ایجاد نقاط اوج خواهد شد. همچنین، رفتار کلی نمودار تنش-کرنش و نقاط اوج پژوهش حاضر با تحقیقی دیگر، که نانوکامپوزیت‌های آلومینیوم-نانوورق‌های بورنیتريد-کربن بررسی شده [۱۱]، مطابقت خوبی را نشان می‌دهد.

شکل ۳ نمایش گرافیکی فرایند تغییر شکل الاستیک، پلاستیک و شکست نانوکامپوزیت تقویت شده توسط نانولوله‌ی بور نیتريد (۰،۱۲) به وسیله نرم‌افزار اویتو^۳ را نشان می‌دهد. شکل ۳- A مدل در ابتدای شبیه‌سازی، شکل ۳- B مدل در مرحله‌ی الاستیک خطی، شکل ۳- C مدل در وضعیت تسلیم ماتریس، شکل ۳- D و شکل ۳- E مدل در حال تغییر شکل پلاستیک و شکل ۳- F نانوکامپوزیت در وضعیت شکست نانولوله است.

۳- نتایج و بحث

۳-۱- تأثیر قطر نانولوله

شکل ۲ نتایج شبیه‌سازی تنش-کرنش برای مدل منیزیم خالص و مدل منیزیم-نانولوله‌های بور نیتريد زیگزاگ است. در این نمودارها ملاحظه می‌شود که چهار قسمت در حین کشش مدل‌ها وجود دارد: تغییر شکل الاستیک اولیه که در آن تنش با افزایش کرنش به صورت خطی افزایش می‌یابد (منطقه‌ی الاستیک خطی)، یک ناحیه‌ی کوتاه الاستیک غیرخطی و یک مرحله‌ی همواره نزولی تنش، زمانی که تنش به دلیل جوانه‌زنی عیوب^۱ به حداکثر می‌رسد و یک مرحله جریان تنش که علت آن تعامل عیوب است. به بیانی دیگر در این نمودارها نمونه در ابتدا به طور الاستیک کشیده شده و سپس تغییر شکل پلاستیک آن در نقطه‌ی تسلیم با تشکیل و انتشار نایجایی ذرات شروع می‌شود. نقطه‌ی اوج اول در نمودار تنش-کرنش، نقطه‌ی تسلیم ماده و همچنین ایجاد اولین نایجایی اتمی درون ماده را نشان می‌دهد. بقیه‌ی نقاط اوج در محدوده‌ی پلاستیک از نمودارهای تنش-کرنش و سقوط ناگهانی بعد از آن‌ها، تشکیل و انتشار مجدد نایجایی اتم‌ها تحت بار اعمال شده را نشان می‌دهند. افزایش مجدد تنش بعد از هر نقطه اوج، مقاومت ماده در مقابل تغییر شکل پلاستیک بعدی را آشکار می‌سازد.

در شکل ۲ نقطه‌ی اوج اول، تسلیم ماتریس در مقابل بار اعمال شده را نشان می‌دهد. نقطه‌ی اوج پایانی نیز شکست نانولوله تحت بار کرنشی

2 Armchair

3 Ovito

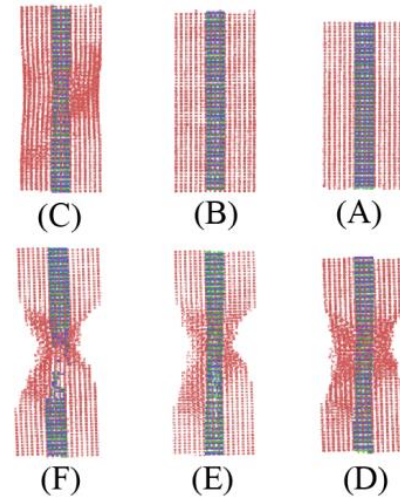
1 Defect

افزایش می‌یابد. با این حال، کرنش شکست در نانوکامپوزیت تقویت شده با افزایش قطر نانولوله‌های بور نیتريد افزایش می‌یابد. این امر به این دلیل است که تنش کششی در نانولوله وابسته به قطر است [۲۶] و کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌های بور نیتريد تحت سلطه تقویت‌کننده نانولوله‌های بور نیتريد است، در حالی که رفتار شکست کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌های بور نیتريد ممکن است توسط عوامل بیشتری مانند ویژگی‌های اندازه نانولوله‌های بور نیتريد و مکانیزم‌های تغییر شکل کنترل شود.

همچنین از این نمودارها می‌توان نتیجه گرفت که در کامپوزیت با تقویت ماتریس منیزیمی به وسیله نانولوله‌های بور نیتريد، چقرمگی شکست آن‌ها افزایش می‌یابد زیرا این نانولوله‌ها باعث می‌شوند که شکست در کامپوزیت به صورت تدریجی اتفاق بیفتد.

مقادیر به دست آمده برای خواص مکانیکی این آزمایش‌ها در جدول ۴ آمده است:

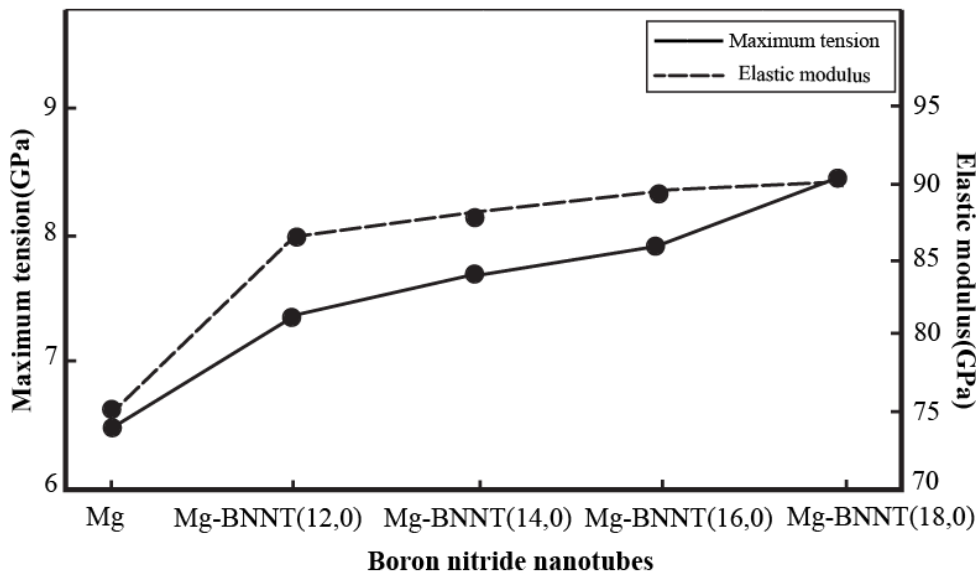
بنابراین وجود تقویت‌کننده‌ی نانولوله‌ی بور نیتريد (۱۲,۰) سبب افزایش مدول الاستیک به میزان ۱۳ درصد، نانولوله‌ی بور نیتريد (۱۴,۰) سبب افزایش مدول الاستیک به میزان ۱۴/۹ درصد، نانولوله‌ی بور نیتريد (۱۶,۰) سبب افزایش مدول الاستیک به میزان ۱۶/۲ درصد و نانولوله‌ی بور نیتريد (۱۸,۰) سبب افزایش مدول الاستیک به میزان ۱۷ درصد شده است.



شکل ۳. شماتیک گرافیکی تغییر شکل نانوکامپوزیت منیزیم- بور نیتريد

Fig. 3. Graphic schematic of magnesium-boron nitride nanocomposite deformation

شکل‌های ۲ و ۴ نیز نشان می‌دهند که مدول الاستیک پیش‌بینی شده توسط شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به قطر نانولوله‌های بور نیتريد بستگی دارد. از این نمودارها می‌توان دریافت که با افزایش قطر نانولوله‌های بور نیتريد، مدول الاستیک، تنش بیشینه و تنش شکست به‌طور قابل توجهی



شکل ۴. نمودار تأثیر قطر نانولوله در بیشینه تنش و مدول الاستیک

Fig. 4. Diagram of the effect of nanotube diameter on maximum stress and elastic modulus

جدول ۴. خواص مکانیکی نانوکامپوزیت‌های ماتریس منیزیمی

Table 4. Mechanical properties of magnesium matrix nanocomposites

ماده	مدول الاستیک (گیگا پاسکال)	تنش تسلیم (گیگا پاسکال)	کرنش تسلیم	تنش شکست (گیگا پاسکال)	کرنش شکست
کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌های بور نیتريد(۰،۱۲)	۸۶/۵۳۹	۷/۳۷	۰/۰۸۲	۲/۳۵	۰/۱۶۱
کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌های بور نیتريد(۰،۱۴)	۸۸/۱۲۴	۷/۶۸	۰/۰۸۳	۳/۵۱	۰/۱۶۵
کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌های بور نیتريد(۰،۱۶)	۸۹/۴۹۱	۷/۹۱	۰/۰۸۵	۴/۱۲	۰/۱۶۹
کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌های بور نیتريد(۰،۱۸)	۹۰/۳۲۰	۸/۳۱۹۷	۰/۰۹	۵/۲۲	۰/۱۷۹

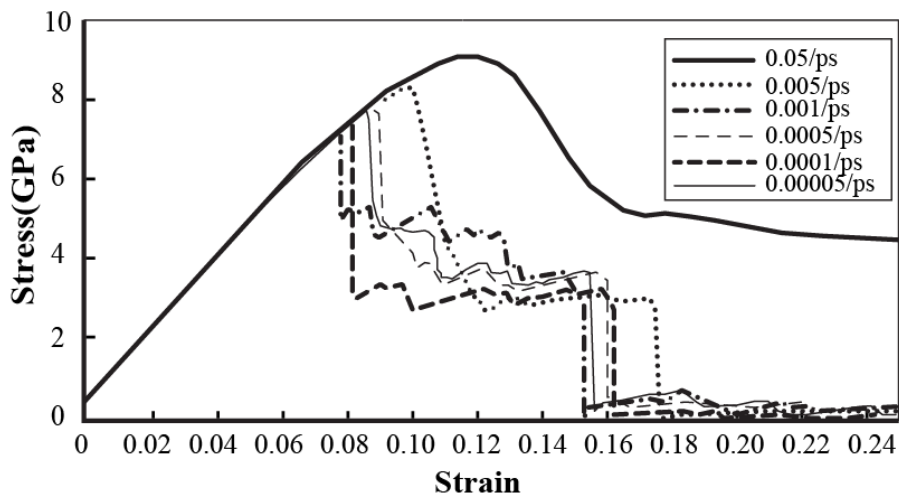
۳-۲- تأثیر نرخ کرنش

فرصت نابیجایی‌ها برای انتشار و برهم‌کنش کم خواهد شد و در نتیجه چگالی خطوط نابیجایی‌ها افزایش می‌یابد که منجر به افزایش تنش جریان با افزایش نرخ کرنش می‌شود. این روند در نمودارهای شکل ۵ برای نرخ‌های مختلف مشهود است، برای نمونه در نرخ کرنش ۰/۰۵ بر پیکو ثانیه به علت تحرک بالای اتمی، نابیجایی‌ها فرصت برخورد و برهم‌کنش کم‌تری پیدا کرده و تنها یک نقطه اوج تشکیل خواهد شد، اما در نرخ‌های کرنش پایین‌تر این روند کم‌رنگ‌تر شده، به‌عنوان مثال در نرخ کرنش ۰/۰۰۰۱ بر پیکو ثانیه علاوه بر کاهش تنش بیشینه، در این نرخ فرصت برخورد و برهم‌کنش نابیجایی‌ها بیشتر بوده و نقاط اوج بیشتری ایجاد شده است.

۳-۳- تأثیر دما

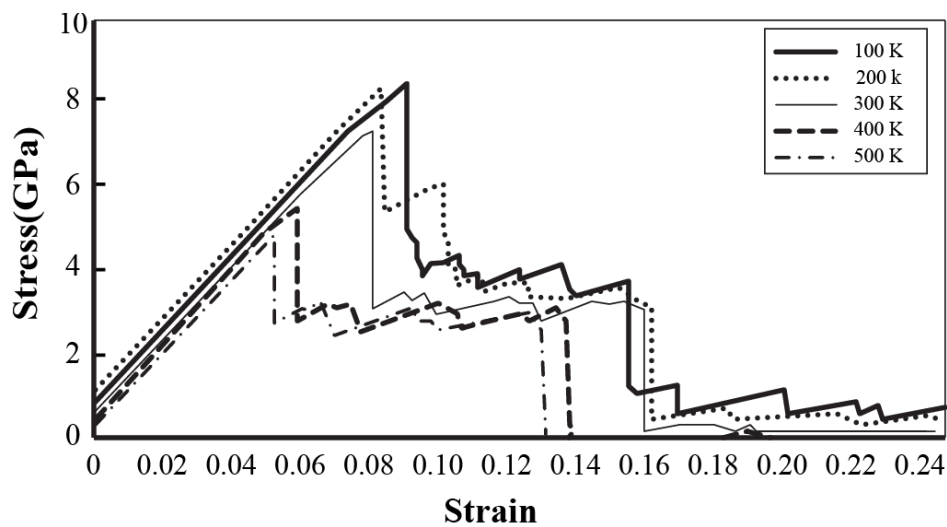
برای بررسی تأثیر دما، مجدداً تست‌های کششی بر روی نمونه‌ی مدل‌سازی شده کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌ی بور نیتريد (۰،۱۲) در دماهای مختلف در یک محدوده‌ی وسیع از ۱۰۰ تا ۵۰۰ کلون انجام شده است. در هرکدام از این آزمایش‌ها، دمای سیستم با استفاده از ترموستات نوز- هوور با اعمال آنسامبل کانونیکال دما ثابت بر روی سیستم کنترل می‌گردد. نمونه

به‌منظور بررسی اثرات نرخ کرنش در ناحیه‌ی الاستیک مشخصات مکانیکی منیزیم تقویت شده به‌وسیله‌ی نانولوله‌ی بور نیتريد (۰،۱۲)، در معرض بارگذاری کششی با نرخ کرنش‌های مختلف قرار می‌گیرد، شکل ۵. همانطور که در شکل ۵ دیده می‌شود، منحنی‌های تنش- کرنش در نرخ کرنش‌های مختلف در مرحله الاستیک خطی در حین بارگذاری کششی کاملاً برهم منطبق هستند، که نشان دهنده‌ی این است که تغییر آشکاری در مدول یانگ کامپوزیت‌ها با افزایش نرخ کرنش رخ نمی‌دهد. این امر می‌تواند به حساسیت کم مدول الاستیک در برابر نرخ کرنش در مواد نانو نسبت داده شود [۲۷]. با توجه به نمودار شکل ۵، تغییر در نرخ کرنش، تنش بیشینه و کرنش کششی مربوطه را در کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌های بور نیتريد تحت تأثیر قرار می‌دهد. انرژی لازم برای غلبه نابیجایی‌ها بر موانع که در حین لغزش با آن‌ها مواجه می‌شوند تعیین کننده وابستگی تنش به نرخ کرنش است [۲۸]. افزایش نرخ کرنش، شروع جوانه‌زنی نابیجایی‌ها و انتشار را به تأخیر انداخته و در نتیجه باعث افزایش تنش جریان و کرنش مربوط به آن می‌شود. با افزایش تحرک اتمی ناشی از افزایش نرخ کرنش،



شکل ۵. نمودار تأثیر نرخ کرنش در نانوکامپوزیت منیزیم تقویت شده با نانولوله‌ی بور نیتريد (۱۲،۰)

Fig. 5. Diagram of the effect of strain rate on magnesium nanocomposites reinforced with boron nitride nanotubes (12,0)



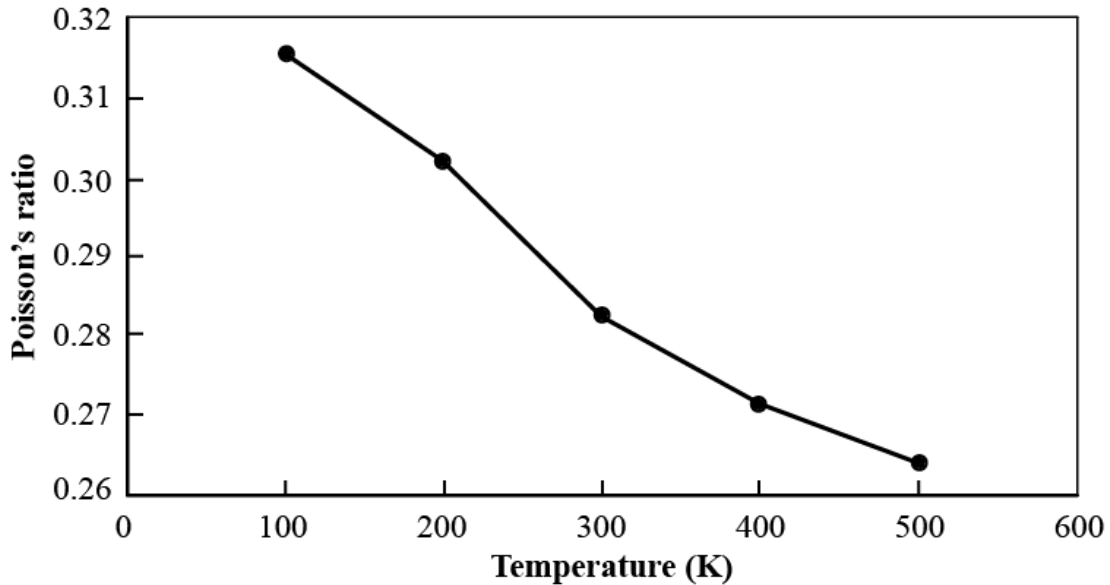
شکل ۶. نمودار تأثیر دما بر نانو کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌ی بور نیتريد (۰،۱۲)

Fig. 6. Diagram of the effect of temperature on boron nitride nanotube (0,12) - magnesium nanocomposite

دمای اتاق به دمای بالاتر، کاهش می‌یابد، در حالی که با کاهش دما افزایش می‌یابد. در دماهای بالاتر، ماده به دلیل افزایش انرژی جنبشی و جنب و جوش ذرات، رفتار نرم‌تر و مقاومت کمتری در مقابل بارهای کرنشی اعمال شده از خود نشان می‌دهند. درحالی‌که در دماهای پایین‌تر، انرژی جنبشی نقش کمتری در تحرک ذرات داشته و انرژی پتانسیل موجود، آن‌ها را محکم

تحت بارگذاری کششی تحت نرخ کرنش مشخص 10^9 بر ثانیه قرار می‌گیرد. سپس با استفاده از داده‌های به دست آمده از شبیه‌سازی‌ها، نمودار تنش-کرنش آن رسم می‌گردد، شکل ۶.

همانطور که در شکل ۶ مشاهده می‌گردد، برای هر بارگذاری کششی، بیشینه تنش و استحکام کششی به طور قابل ملاحظه‌ای با افزایش دما از



شکل ۷. نمودار تأثیر دما بر نسبت پواسن نانو کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌ی بور نیتريد (۱۲,۰)

Fig. 7. Diagram of the effect of temperature on the Poisson's ratio of magnesium nanocomposite to boron nitride nanotubes (12,0)

افزایش مدول الاستیک به میزان ۱۳ درصد، نانولوله‌ی بور نیتريد (۰,۱۴) سبب افزایش مدول الاستیک به میزان ۱۴/۹ درصد، نانولوله‌ی بور نیتريد (۰,۱۶) سبب افزایش مدول الاستیک به میزان ۱۶/۲ درصد و نانولوله‌ی بور نیتريد (۰,۱۸) سبب افزایش مدول الاستیک به میزان ۱۷ درصد شده است. همچنین، وجود تقویت‌کننده‌ی نانولوله‌ی بور نیتريد سبب افزایش سفتی، استحکام و چقرمگی نانو کامپوزیت منیزیم- بور نیتريد به صورت چشم‌گیری می‌شود. از نتایج دیگر، با افزایش دما تنش بیشینه و کرنش شکست کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌ی بور نیتريد به جز تنش شکست، کاهش می‌یابد. در دماهای بالاتر، ماده به دلیل افزایش انرژی جنبشی و جنب و جوش ذرات، رفتار نرم‌تر و مقاومت کم‌تری در مقابل بارهای کرنشی اعمال شده از خود نشان می‌دهند. مدول یانگ و استحکام تسلیم با افزایش نرخ بارگذاری خارجی تقریباً بدون تغییر می‌باشند. تغییر در نرخ کرنش تنش بیشینه، کرنش کششی مربوطه، تنش شکست و کرنش شکست کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌ی بور نیتريد را تحت تأثیر قرار می‌دهد. همچنین، با افزایش قطر نانولوله‌ی بور نیتريد، تنش بیشینه و تنش شکست به طور قابل توجهی افزایش می‌یابد.

در کنار هم نگاه‌داشته و مقاومت بیش‌تری را در مقابل انرژی‌های کرنشی اعمال شده به‌جا می‌گذارند. نسبت پواسون، با روندی معکوس، با افزایش دما کاهش می‌یابد و با کاهش دما افزایش می‌یابد، شکل ۷. با افزایش دما، اتم‌ها از انرژی جنبشی بالاتری برخوردار بوده و ماده رفتار نرم‌تری خواهد داشت، در نتیجه، با اعمال نیرو در جهت بارگذاری، راحت‌تر کشیده شده و در راستای عمود بر بارگذاری به شکل راحت‌تری جمع می‌شود. یعنی در ازای اعمال کرنش محوری، تغییر شکل عرضی بیش‌تری در ماده ایجاد می‌گردد. ولی در دماهای پایین، عکس این حالت اتفاق می‌افتد. نتایج شبیه‌سازی به‌طور کلی تأثیر زیاد دما در خواص مکانیکی کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌ی بور نیتريد را آشکار می‌سازد. به‌طور کلی با افزایش دما، بیشینه تنش، کرنش و تنش شکست کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌ی بور نیتريد کاهش می‌یابد. علاوه بر این، مقاومت تغییرشکل پلاستیک برای ماتریس کامپوزیت‌های منیزیم- نانولوله‌ی بور نیتريد به دلیل تغییرات ساختاری آن‌ها در طول فرایند تغییرشکل در دماهای بالا تضعیف شده است.

۴- نتیجه‌گیری

پس از انجام شبیه‌سازی‌های موردنظر و بررسی آن‌ها می‌توان نتیجه‌گیری کرد که، وجود تقویت‌کننده‌ی نانولوله‌ی بور نیتريد (۰,۱۲) سبب

- [5] M. Santosh, P.K. Maiti, A. Sood, Elastic properties of boron nitride nanotubes and their comparison with carbon nanotubes, *Journal of nanoscience and nanotechnology*, 9(9) (2009) 5425-5430.
- [6] S. Sharma, P. Setia, R. Chandra, N. Thakur, Experimental and molecular dynamics study of boron nitride nanotube-reinforced polymethyl methacrylate composites, *Journal of Composite Materials*, 54(1) (2020) 3-11.
- [7] M. Rahmat, A. Naftel, B. Ashrafi, M.B. Jakubinek, Y. Martinez-Rubi, B. Simard, Dynamic mechanical characterization of boron nitride nanotube—epoxy nanocomposites, *Polymer Composites*, 40(6) (2019) 2119-2131.
- [8] A.B. Kakarla, C. Kong, W. Kong, I. Kong, Synthesis and characterization of boron nitride nanotubes-polycaprolactone nanocomposite, in: *Materials Science Forum*, Trans Tech Publ, 2019, pp. 39-44.
- [9] J. Guan, A. Dourdour, B. Ashrafi, A. Benhalima, K.S. Kim, M. Daroszewska, B. Simard, Boron nitride nanotubes reinforced polycarbonate nanocomposites, *Materials Today Communications*, 20 (2019) 100586.
- [10] Z. Cong, S. Lee, Study of mechanical behavior of BNNT-reinforced aluminum composites using molecular dynamics simulations, *Composite Structures*, 194 (2018) 80-86.
- [11] V. Vijayaraghavan, L. Zhang, Tensile Properties of Boron Nitride-Carbon Nanosheet-Reinforced Aluminum Nanocomposites Using Molecular Dynamics Simulation, *JOM*, 72(6) (2020) 2305-2311.
- [12] P. Sedigh, A. Zare, A. Montazeri, Evolution in aluminum applications by numerically-designed high strength boron-nitride/Al nanocomposites, *Computational Materials Science*, 171 (2020) 109227.
- [13] X. Zhou, X. Liu, F. Sansoz, M. Shen, Molecular dynamics simulation on temperature and strain rate-dependent tensile response and failure behavior of Ni-coated CNT/Mg composites, *Applied Physics A*, 124(7) (2018) 1-11.
- [14] S.R. Bakshi, D. Lahiri, A. Agarwal, Carbon nanotube reinforced metal matrix composites-a review,

۵- فهرست علائم

تابع برش	f_c
پتانسیل جفتی دافعه، J	f_R
پتانسیل جفتی جاذبه، J	f_A
فاصله از اتم i تا اتم j ، m	r_{ij}
تابع ترتیب پیوند	b_{ij}
حجم سیستم، m ^۳	V
جرم، kg	m_i
سرعت ذره‌ای i ، $\frac{m}{s}$	v_i
نیروی بین اتم‌های i و j ، $\frac{J}{m}$	F_{ij}
انرژی بین اتمی، J	$\varphi(r_{ij})$
تابع پتانسیل محاطی برای اتم i	$F(\rho_i)$
چگالی الکترونی کل، $\frac{V}{m^3}$	ρ_i
انرژی پیوند-ناپجایی، J	ε_{ij}
فاصله‌ی محدودی که در آن پتانسیل بین دو ذره صفر است، m	σ_{ij}
مؤلفه مختصات کارترزین	α

منابع

- [1] D.K. Rajak, D.D. Pagar, R. Kumar, C.I. Pruncu, Recent progress of reinforcement materials: A comprehensive overview of composite materials, *Journal of Materials Research and Technology*, 8(6) (2019) 6354-6374.
- [2] M. Shahin, K. Munir, C. Wen, Y. Li, Magnesium matrix nanocomposites for orthopedic applications: a review from mechanical, corrosion, and biological perspectives, *Acta biomaterialia*, 96 (2019) 1-19.
- [3] J.-P. Salvetat, J.-M. Bonard, N. Thomson, A. Kulik, L. Forro, W. Benoit, L. Zuppiroli, Mechanical properties of carbon nanotubes, *Applied Physics A*, 69(3) (1999) 255-260.
- [4] B.I. Yakobson, P. Avouris, Mechanical properties of carbon nanotubes, *Carbon nanotubes*, (2001) 287-327.

- method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys, *Physical review B*, 33(12) (1986) 7983.
- [22] S. Wilson, M. Mendeleev, A unified relation for the solid-liquid interface free energy of pure FCC, BCC, and HCP metals, *The Journal of Chemical Physics*, 144(14) (2016) 144707.
- [23] G.S. Camprubí, *Mechanical properties at nano-level*, Universitat Politècnica de Catalunya. Escola Tècnica Superior d'Enginyeria ..., 2010.
- [24] J.H. Lee, A study on a boron-nitride nanotube as a gigahertz oscillator, *Journal of the Korean Physical Society*, 49(1) (2006) 172-176.
- [25] S.L. Mayo, B.D. Olafson, W.A. Goddard, DREIDING: a generic force field for molecular simulations, *Journal of Physical chemistry*, 94(26) (1990) 8897-8909.
- [26] J. Xiang, L. Xie, S.A. Meguid, S. Pang, J. Yi, Y. Zhang, R. Liang, An atomic-level understanding of the strengthening mechanism of aluminum matrix composites reinforced by aligned carbon nanotubes, *Computational Materials Science*, 128 (2017) 359-372.
- [27] Y. Zhou, M. Hu, Mechanical behaviors of nanocrystalline Cu/SiC composites: An atomistic investigation, *Computational Materials Science*, 129 (2017) 129-136.
- [28] D. Hull, D.J. Bacon, *Introduction to dislocations*, Elsevier, 2011.
- International materials reviews*, 55(1) (2010) 41-64.
- [15] H.-Y. Song, X.-W. Zha, Mechanical properties of nickel-coated single-walled carbon nanotubes and their embedded gold matrix composites, *Physics Letters A*, 374(8) (2010) 1068-1072.
- [16] R. Rezaei, M. Shariati, H. Tavakoli-Anbaran, Mechanical characteristics and deformation mechanism of boron nitride nanotube reinforced metal matrix nanocomposite based on molecular dynamics simulations, *Journal of Materials Research*, 33(12) (2018) 1733-1741.
- [17] G.G. Genchi, G. Ciofani, Bioapplications of boron nitride nanotubes, in, *Future Medicine*, 2015.
- [18] W. Qin, A. Kolooshani, A. Kolahdooz, S. Saber-Samandari, S. Khazaei, A. Khandan, F. Ren, D. Toghraie, Coating the magnesium implants with reinforced nanocomposite nanoparticles for use in orthopedic applications, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 621 (2021) 126581.
- [19] C. Sevik, A. Kinaci, J.B. Haskins, T. Çağın, Characterization of thermal transport in low-dimensional boron nitride nanostructures, *Physical Review B*, 84(8) (2011) 085409.
- [20] M.S. Daw, M.I. Baskes, Semiempirical, quantum mechanical calculation of hydrogen embrittlement in metals, *Physical review letters*, 50(17) (1983) 1285.
- [21] S. Foiles, M. Baskes, M.S. Daw, Embedded-atom-

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم

M. Zolfaghari, Y. Jafarkalhari, H. Heydari, V. Tahmasbi, M. Safari, *Investigation of Mechanical Behavior of Boron Nitride Nanotubes -Reinforced Magnesium Nanocomposite Using Molecular Dynamics Simulations*, *Amirkabir J. Mech Eng.*, 54(2) (2022) 451-464.

DOI: 10.22060/mej.2022.19779.7108



