



Investigation of Mechanical Behavior of Boron Nitride Nanotubes -Reinforced Magnesium Nanocomposite Using Molecular Dynamics Simulations

M. Zolfaghari¹, Y. Jafarkalhari¹, H. Heydari², V. Tahmasbi³, M. Safari³

¹ D1 Department of Mechanic Engineering, Arak University, Arak, Iran

² Department of Mechanic Engineering, Shahrekord University, Shahrekord, Iran

³ Department of Mechanic Engineering, Arak University of Technology, Arak, Iran

ABSTRACT: Magnesium-based nanocomposites are widely used in the aerospace, automotive, and medical industries. Due to the special properties of boron nitride nanotubes, these nanotubes play an important role in strengthening nanocomposites. In this research, magnesium nanocomposites are reinforced by boron nitride nanotubes and the mechanical properties of these nanocomposites under uniaxial tensile loading in the axial direction of the nanotubes have been investigated by the molecular dynamics method by Lammmps software. Also, the coefficients of the atomic potential function of magnesium atoms have been calculated using the law of composition and the data extracted by Gaussian software. The results of molecular dynamics simulations show the improvement of mechanical properties of magnesium-based metal nanocomposites due to the addition of boron nitride nanotubes. The presence of boron nitride (0,12), (0,14), (0,16) and (0,18) nanotube reinforcers as magnesium field reinforcers increased the elastic modulus by 13, 14.9, 16.2 and 17 percent. Other results of this study indicate that the elastic behavior of nanocomposites is independent of strain rate changes. Also, by performing this simulation over a wide range of temperatures, obvious changes in the mechanical properties of the nanocomposite at different temperatures have been obtained.

Review History:

Received: Mar. 22, 2021

Revised: Oct. 29, 2021

Accepted: Jan. 01, 2022

Available Online: Jan. 12, 2022

Keywords:

Molecular Dynamics

Nanocomposite

Magnesium

Boron Nitride Nanotube.

1- Introduction

Magnesium, as the least dense industrial metal, has a high specific strength. Magnesium-based metal matrix nanocomposites are an important issue in the development of lightweight structural materials, as their optimized properties are critical to the automotive and aerospace industries.[1] In addition, magnesium and some of its alloys have received widespread medical attention because of their lower biodegradability and elasticity, which are closer to the natural bone than current metal implants such as titanium and its alloys, stainless steels [2]. With the discovery of Boron Nitride Nanotubes (BNNT) and its comparison with carbon nanotubes, which led to the superiority of boron nitride nanotubes, it was used as a reinforcing phase in nanocomposites [3]. In a study by Rahmat et al. [4], The shear and tensile mechanical properties of epoxy-boron nitride composite thin film were investigated and it was found that with increasing strain rate, the tensile strength and Young's modulus increased by 39% and 113%, respectively. Zhou et al. [5] simulated the molecular dynamics of the tensile test of a magnesium-based composite reinforced by a nickel-coated carbon nanotube at different temperatures and strain rates. The results showed that nickel-coated carbon nanotubes effectively improve the mechanical properties of the composite.

In the present study, due to the biocompatibility of boron-nitride nanotubes [6], the mechanical properties of magnesium-boron nitride nanocomposite, which is especially useful for orthopedic applications including implants [7], due to changes in nanotube diameter, Strain rate, and temperature are studied by molecular dynamics.

2- Methodology

In the present study, simulation by molecular dynamics method was performed using Lammmps software. The present simulation requires inter-atomic potential functions of magnesium-magnesium, magnesium-boron, magnesium-nitrogen, and boron-nitrogen atoms. The Tersoff potential function is used to describe the interatomic potential of boron and nitrogen atoms. The embedded-atom method is used to describe the interaction between magnesium-magnesium particles, and the Lennard-Jones potential function is used to describe the interaction between magnesium-boron and nitrogen atoms.

The matrix model is made as a rectangular cube of magnesium atoms with an hcp structure and with lattice constants of 3.2, 3.2, and 5.2 in three directions x, y, and z by the AtomsK. The dimensions of this cube in three directions x, y, and z are 57.6, 55.43, and 83.2 angstrom, respectively, which contains 1520 magnesium atoms. Zigzag (12,0), (14,0), (16,0), and (18,0) boron nitride boron nanotubes are generated by Visual Molecular Dynamics (VMD) software.

*Corresponding author's email: hami



Copyrights for this article are retained by the author(s) with publishing rights granted to Amirkabir University Press. The content of this article is subject to the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY-NC 4.0) License. For more information, please visit <https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode>.

After modeling pure magnesium and nanotubes, it will be completed by cutting a cylindrical volume from inside the matrix and placing the nanotubes in the nanocomposite model under study. Using Lammmps software, periodic boundary conditions in all three directions x, y, and z are considered for the model. Before applying the uniaxial tensile load, the energy minimization operation will be applied in one-hundred Pico-seconds with a time step of one femto-second. Using the Gaussian distribution function, the initial velocity will be given to the system and then the constructed model will be rested to balance the thermodynamic properties of the system, which requires the application of a constant pressure-constant temperature NPT at 300 K and at external pressure it is zero by the Nose-Hoover thermostat.

After releasing the sample, a load in the z-direction is applied to it at a specified strain rate of 109 s^{-1} [10] and the Verlet algorithm is used to integrate the Newtonian equations of classical motion equations. In this study, the simulation temperature is controlled by the NVT constant temperature canonical ensemble at 300 K and the simulation is performed in a time step of one femtosecond. During the simulation, the stress is calculated from the virial stress relation.

3- Results and Discussion

The results of stress-strain simulations show that there are four parts during the tension of the models: Primary elastic deformation in which the stress increases linearly with increasing strain. A nonlinear short elastic region and an ever-decreasing stress phase, when the stress is maximized due to the germination of defects, and a stress flow phase is caused by the interaction of defects. In other words, in these diagrams, the specimen is first stretched elastically and then its plastic deformation begins at the point of yield with the formation and dispersion of the propagation dislocation particles. The first peak point in the stress-strain diagram shows the yield point of matter as well as the first atomic dislocation within matter. The rest of the peaks in the plastic range from the stress-strain diagrams and the sudden collapse after them show the formation and propagation of the dislocations under the applied load. The increase of stress after each peak reveals the material's resistance to subsequent plastic deformation. The first peak point indicates the yield of the matrix to the applied load. The endpoint also shows the failure of the nanotube under the applied strain load. The oscillations between these two points also express the process of plastic deformation of the matrix. The general behavior of the stress-strain diagram and the peak points of this research are in good agreement with similar previous articles, so that the stress-strain diagram for aluminum-boron nitride nanocomposites, whose nanotube is an armchair type [8], has the highest initial peak point of about 7 GB. It also has several similar points that indicate an increase in the collision and interaction of these dislocations and then their release at each stage, which will lead to the creation of peak points. Also, the general behavior of the stress-strain diagram and the peak points of the present study show a good agreement with another study, which

investigated aluminum nanocomposites-boron -nitride-carbon nanofibers [9].

3- 1- Effects of nanotube diameter

As the diameter of boron nitride nanotubes increases, the elastic modulus, maximum stress, and fracture stress increase significantly. However, the fracture strain in reinforced nanocomposites increases with the increasing diameter of boron nitride nanotubes. This is because the tensile stress in nanotubes is diameter dependent [10] and the magnesium-boron nitride nanotube-dominated composite is dominated by the reinforcing boron nitride nanotubes. While the failure behavior of magnesium-boron-nitride nanotubes may be controlled by more factors such as boron nitride nanotube size characteristics and deformation mechanisms. It can also be concluded that in a magnesium composite reinforced with boron nitride nanotubes, their fracture toughness increases because these nanotubes cause the failure of the composite to occur gradually.

3- 2- Effects of strain rate

The stress-strain curves at the rates of different strains in the linear elastic stage are exactly the same during tensile loading, This indicates that no apparent change in young's modulus of the composites occurs with increasing strain rate. This can be attributed to the low sensitivity of the elastic modulus to the strain rate in nanomaterials [11]. Changes in strain rate, maximum stress, and related tensile strain affect the magnesium-boron nitride nanotube composite. The energy required to overcome the dislocations over the obstacles they encounter during slip determines the dependence of the stress on the strain rate [12]. Increasing the strain rate delays the beginning of Nucleation and propagation, thereby increasing the flow stress and strain associated with it. As the atomic mobility increases due to the increase in strain rate, the chance of dislocations for propagation and interaction will decrease, and as a result, the density of the dislocation lines will increase, which will lead to an increase in flow stress with increasing strain rate. For example, at a strain rate of 0.05 (ps)^{-1} , due to high atomic mobility, the dislocations have less chance of colliding and interacting, forming only one peak. However, at lower strain rates, this trend is less pronounced, for example, at a strain rate of 0.0001 (ps)^{-1} , in addition to reducing the maximum stress, at this rate the chance of collisions and interactions dislocations is greater and more peaks are created.

3- 3- Effects of temperature

To investigate the effect of temperature, tensile tests were again performed on a modeled sample of magnesium-boron nitride (0,12) composite nanotubes at different temperatures in a wide range from 100 to 500K. In each of these experiments, the system temperature is controlled using a Nose-Hoover thermostat by applying an NVT constant temperature canonical ensemble to the system. The sample is subjected to a tensile load at a specified strain rate of 109 s^{-1} . Then, the stress-strain diagram is drawn using the data

obtained from the simulations. For each tensile load, the maximum stress and tensile strength decrease significantly with increasing temperature from room temperature to higher temperature, while increasing with decreasing temperature. At higher temperatures, the material exhibits softer behavior and less resistance to applied strain loads due to increased kinetic energy and particle mobility. At lower temperatures, however, kinetic energy plays a lesser role in the mobility of the particles, and the available potential energy holds them tightly together, leaving more resistance to applied strain energies. The Poisson ratio, in reverse, decreases with increasing temperature and increases with decreasing temperature. As the temperature increases, the atoms have higher kinetic energy and the material will behave softer. As a result, it will be easier to pull by applying force in the direction of tension, and it will contract more easily in the direction perpendicular to the load. That is, in exchange for axial strain, more transverse deformation occurs in the material. But at low temperatures, the opposite happens.

4- Conclusion

After performing the desired simulations and examining them, it can be concluded that the presence of boron nitride nanotube reinforcement (0,12) increases the elastic modulus by 13%, boron nitride nanotube (0,14) increases the elastic modulus by 14.9%, boron Nitride (0,16) increased the elastic modulus by 16.2% and boron nitride (0,18) nanotubes increased the elastic modulus by 17%. Also, the presence of boron nitride nanotube reinforcer significantly increases the stiffness, strength, and toughness of magnesium-boron nitride nanocomposite. In other results, with increasing temperature, maximum stress and fracture strain of magnesium-boron nitride composite nanotubes decrease except fracture stress. At higher temperatures, the material exhibits softer behavior and less resistance to applied strain loads due to increased kinetic energy and particle mobility. Young's modulus and yield strength are almost unchanged with increasing external loading rate. The change in strain rate affects the maximum stress, the corresponding tensile strain, the fracture stress, and the fracture strain of the magnesium-boron nitride composite nanotube. Also, with increasing the diameter of boron nitride nanotubes, the maximum stress and fracture stress increase significantly.

References

[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] 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.

[4] 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.

[5] 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.

[6] G.G. Genchi, G. Ciofani, Bioapplications of boron nitride nanotubes, in, *Future Medicine*, 2015, pp. 3315-3319.

[7] 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.

[8] Z. Cong, S. Lee, Study of mechanical behavior of BNNT-reinforced aluminum composites using molecular dynamics simulations, *Composite Structures*, 194 (2018) 80-86.

[9] V. Vijayaraghavan, L. Zhang, Tensile Properties of Boron Nitride-Carbon Nanosheet-Reinforced Aluminum Nanocomposites Using Molecular Dynamics Simulation, *JOM*, 72(6) (2020) 2305-2311.

[10] 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.

[11] Y. Zhou, M. Hu, Mechanical behaviors of nanocrystalline Cu/SiC composites: An atomistic investigation, *Computational Materials Science*, 129 (2017) 129-136.

[12] D. Hull, D.J. Bacon, *Introduction to dislocations*, Elsevier, 2011.

HOW TO CITE THIS ARTICLE

M. Zolfaghari, Y. Jafarkalhari, H. Heydari, V. Tahmasbi3, M. Safari3, *Investigation of Mechanical Behavior of Boron Nitride Nanotubes -Reinforced Magnesium Nanocomposite Using Molecular Dynamics Simulations, Amirkabir J. Mech Eng., 54(2) (2022) 89-92.*

DOI: 10.22060/mej.2022.19779.7108





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

- 4 BNNT
- 5 Sharma
- 6 Polymethyl Methacrylate
- 7 Rahmat

- 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 پلی‌کاپرولاکتون- 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 پلی‌کربنات^۳- نیتريد بور را با خواص پلی‌کربنات خالص مقایسه کردند، نتیجه آزمایش‌ها افزایش در چقرمگی کششی نانوکامپوزیت نسبت به پلی‌کربنات 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 پراکندگی 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):

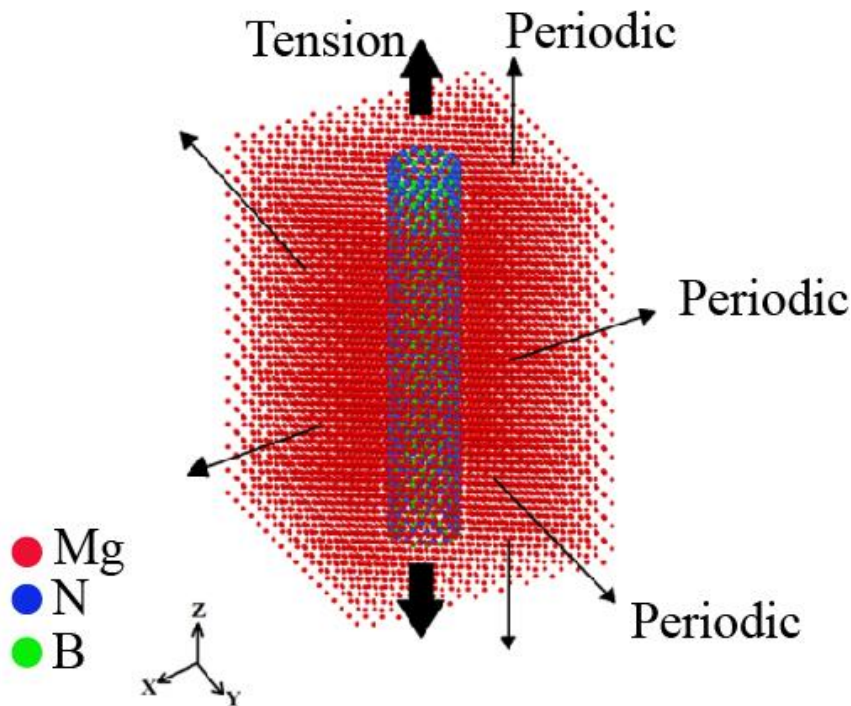
$$\epsilon_{ij} = \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j} \quad (9)$$

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

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 منیزیمی تقویت شده به وسیله نانولوله‌ی بور نیترید

Fig. 1. Model of magnesium nanocomposite reinforced by BNNT

می‌گردد [۱۰] و از الگوریتم ورلت^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 کلوین کنترل می‌شود و شبیه‌سازی با گام زمانی یک فمتو ثانیه انجام می‌گیرد. در حین شبیه‌سازی، تنش از رابطه‌ی تنش وایرال محاسبه می‌شود، معادله (۱۱):

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

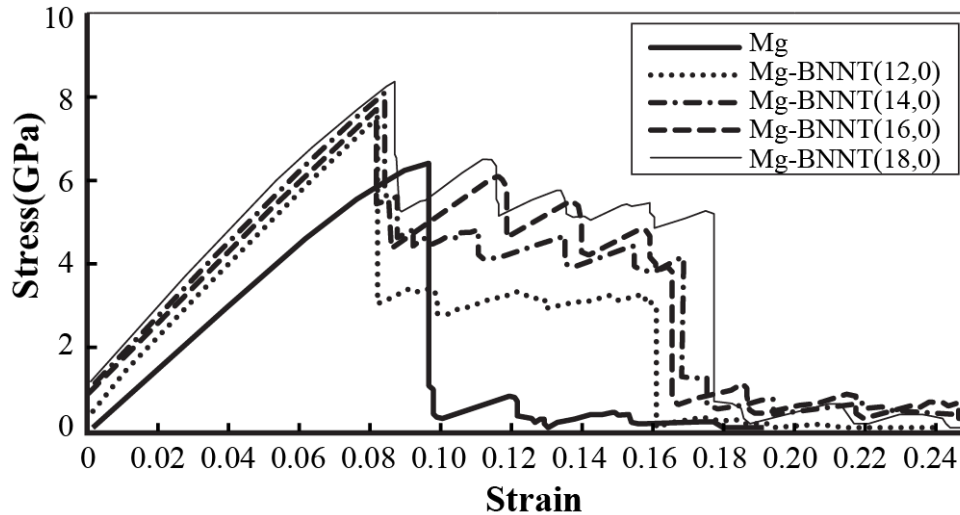
که در آن V حجم سیستم، m_i جرم و v_i سرعت ذره‌ای i ، F_{ij} نیروی بین اتم‌های i و j ، r_{ij} فاصله‌ی بین آن‌ها و α و β مؤلفه‌های مختصات کارترزین می‌باشند.

پس از مدل‌سازی منیزیم 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 کلوین 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 نابعجایی‌ها 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 نابعجایی ذرات شروع می‌شود. نقطه‌ی اوج اول در نمودار تنش-کرنش، نقطه‌ی تسلیم ماده و همچنین ایجاد اولین نابعجایی 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 نابعجایی 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

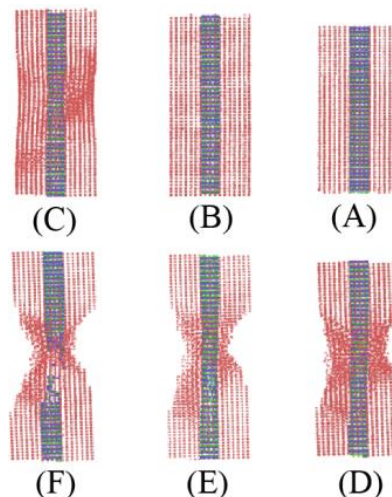
1 Defect

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:

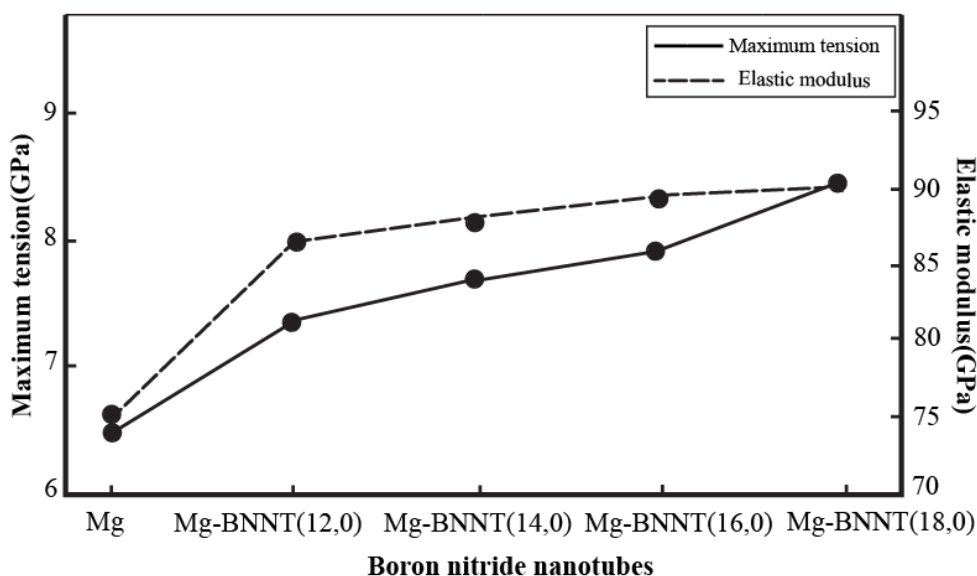
بنابراین وجود تقویت‌کننده‌ی نانولوله‌ی بور نیتريد (۱۲,۰) سبب افزایش مدول الاستیک به میزان ۱۳ درصد، نانولوله‌ی بور نیتريد (۱۴,۰) سبب افزایش مدول الاستیک به میزان ۱۴/۹ درصد، نانولوله‌ی بور نیتريد (۱۶,۰) سبب افزایش مدول الاستیک به میزان ۱۶/۲ درصد و نانولوله‌ی بور نیتريد (۱۸,۰) سبب افزایش مدول الاستیک به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

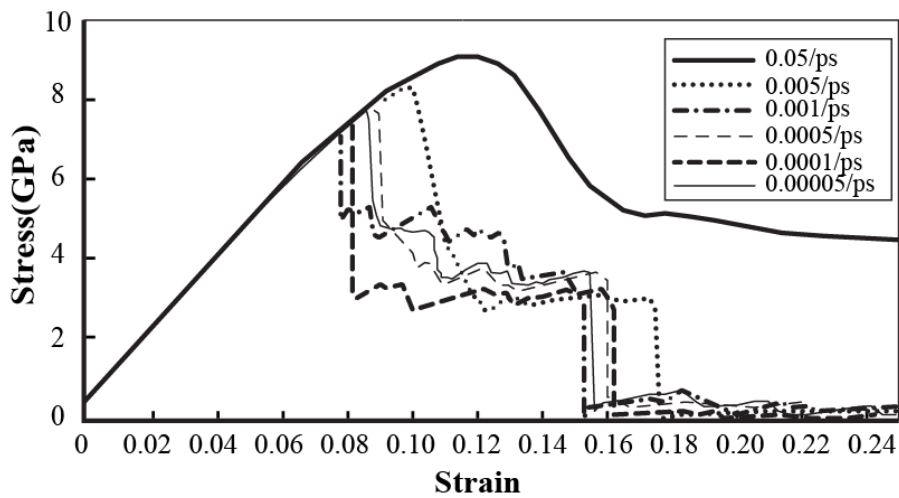
۳-۲- تأثیر نرخ کرنش

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

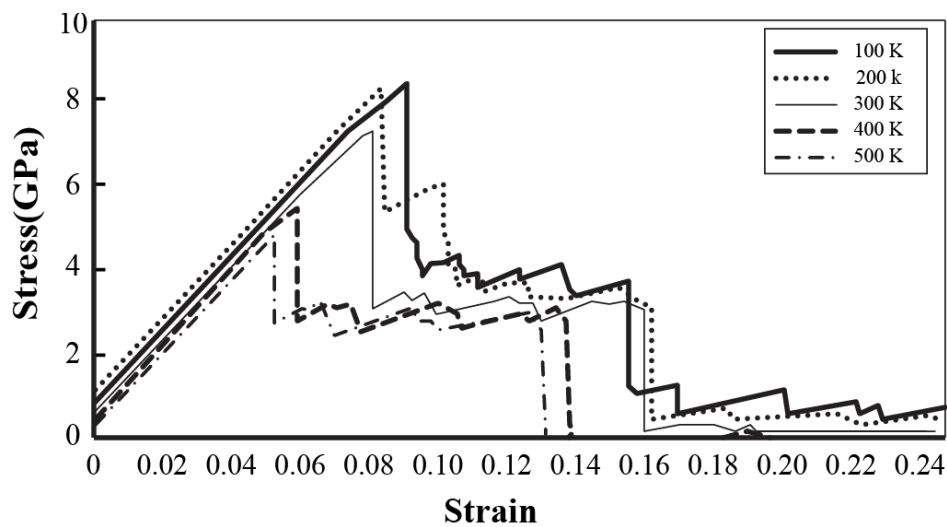
برای بررسی تأثیر دما، مجدداً تست‌های کششی بر روی نمونه‌ی مدل‌سازی شده کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌ی بور نیتريد (۰،۱۲) در دماهای مختلف در یک محدوده‌ی وسیع از ۱۰۰ تا ۵۰۰ کلون انجام شده است. در هرکدام از این آزمایش‌ها، دمای سیستم با استفاده از ترموستات نوز- هوور با اعمال آنسامبل کانونیکال دما ثابت بر روی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



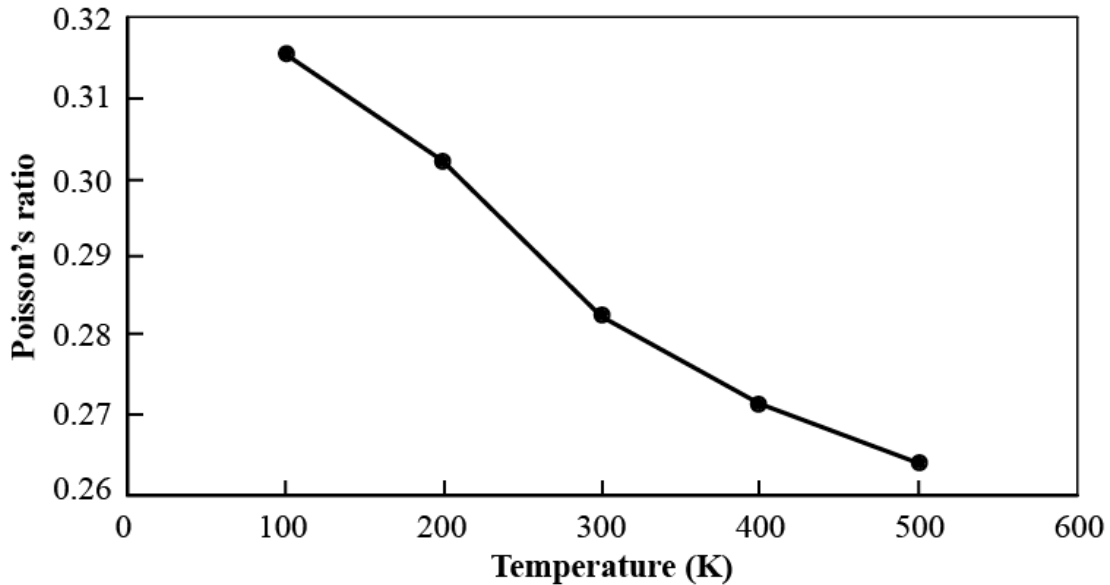
شکل ۶. نمودار تأثیر دما بر نانو کامپوزیت منیزیم- نانولوله‌ی بور نیتريد (۰،۱۲)

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. در حالی که 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 تغییر شکل پلاستیک برای ماتریس کامپوزیت‌های منیزیم- نانولوله‌ی بور نیتريد به دلیل تغییرات ساختاری آن‌ها در طول فرایند تغییر شکل 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. Dourdori, 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



