



مطالعه رفتار تنش- کرنش ساختار پلی کریستال کاربید بور دارای ترک، در حضور متوقف کننده ترک و در شرایط دمایی مختلف، به روش دینامیک مولکولی

علی دادرسی*

استادیار، گروه مهندسی مکانیک، واحد شاهرود، دانشگاه آزاد اسلامی، شاهرود، ایران

مقاله مستقل، تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۲/۲۰؛ تاریخ بازنگری: ۱۴۰۰/۰۵/۲۹؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۸/۱۳

چکیده

در این مقاله، تأثیر ترک، متوقف کننده ترک و دما بر خواص مکانیکی ساختار پلی کریستال کاربید بور با استفاده از مدلسازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. درک عملکرد نانوصفحات کاربید بور در حضور ترک که از آن به عنوان منبع اصلی تمرکز تنش یاد می-شود، به عنوان یک فرآیند مهم تعریف می-شود. با این هدف و با استفاده از پتانسیل ترسوف و شرایط مرزی دوره‌ای، اثر وجود ترک با طول ۵ آنگستروم، متوقف کننده ترک با فاصله‌های ۲ و ۴ آنگستروم از لبه ترک و دماهای مختلف مورد تحلیل قرار گرفت. نتایج نشان داد که افزایش دما در حضور و عدم حضور ترک در ساختار کاربید بور، باعث کاهش مقدار خواص مکانیکی می-شود. مدول یانگ ساختار بدون نقص (C_0-D_0) و ساختار با حضور متوقف کننده‌های ترک با دو فاصله ۲ (C_5-D_2) و ۴ (C_5-D_4) آنگستروم از ترک به ترتیب ۱۲/۴۲٪، ۸۴/۴۷٪ و ۸۴/۴۷٪ کاهش یافت. این روند نزولی برای خواص مکانیکی تنش و کرنش در نقطه شکست نیز مشاهده شد. علاوه بر این، خواص مکانیکی C_5-D_2 بالاتر از C_5-D_4 گزارش شد که بیانگر آن است، ترک در این ساختار انرژی بیشتری را صرف شکست کرده است و باعث افزایش مقاومت ساختار مورد بررسی شده است.

کلمات کلیدی: پلی کریستال؛ کاربید بور؛ دینامیک مولکولی؛ خواص مکانیکی؛ شبیه سازی.

Study of Stress-Strain Behavior of Cracked Polycrystalline Boron Carbide Structure in the Presence of Crack Arrest and in Different Temperature Conditions by Molecular Dynamics Method

A. Dadrasi*

Assist. Prof., Department of Mechanical Engineering, Shahrood Branch, Islamic Azad University, Shahrood, Iran.

Abstract

In this paper, the effect of crack, crack arrester and temperature on the mechanical properties of polycrystalline boron carbide structures was investigated using molecular dynamics simulation. Understanding the performance on boron carbide structures in the presence of crack, which is considered as the main source of stress concentration, is defined as an important process. with this purpose, using the Tersoff potential and periodic boundary conditions, crack length of 5 Å, the arresters with a distance of 2 and 4 Å of crack tips and different temperatures were analyzed. The results obtained revealed that the mechanical properties for all structures were decreased by increasing the temperature. The Young's modulus of pristine structure, C_5-D_2 and C_5-D_4 was reduced by about 17.21%, 42.12, and 47.84, respectively. A similar behavior was observed for the failure stress and failure strain. Furthermore, the mechanical properties of C_5-D_2 samples in higher than C_5-D_4 samples, which indicates that the crack has to spend more energy on failure and it causes the strength of the structures.

Keywords: Polycrystalline; Boron Carbide; Molecular Dynamics; Mechanical Properties; Simulation.

* نویسنده مسئول؛ تلفن: ۰۹۱۵۵۷۱۷۵۱۰

آدرس پست الکترونیک: ali.dadrasi@gmail.com

۱- مقدمه

ساختارهای دو بعدی در سال‌های گذشته به عنوان یک ساختار نوظهور معرفی شده‌اند که در دو دهه گذشته، پیشرفت چشمگیری داشته‌اند [۱]. تحقیقات گسترده بر این ساختارها نشان داده است که خواص حرارتی [۲]، مکانیکی [۳] و شیمیایی [۴] قابل توجهی دارند که می‌توان آنها را در فرآیندهای مختلف مورد استفاده قرار داد. از انواع ساختارهای دو بعدی می‌توان به بور-نیتريد^۱ [۵]، ژرمانیوم^۲ [۶]، تنگستن دی سولفات^۳ [۷] و اکسید روی^۴ [۸] اشاره کرد. خواص منحصر به فرد ساختارهای دو بعدی که بر پایه‌ی کربن ارایه شده‌اند، باعث شد تا نظر بسیاری از محققان به این دست از مواد جلب شود. از مهم‌ترین و پرکاربردترین ساختارهای دو بعدی بر پایه کربن، می‌توان به گرافن^۵ [۹]، کاربید-بور^۶ [۱۰] و کربن-نیتريد^۷ [۱۱] اشاره کرد. گرافن به عنوان اصلی‌ترین ساختار خانواده کربن به شمار می‌آید که یک ساختار شش ضلعی و به شکل لانه زنبور است. این ماده پرکاربرد برای اولین بار در سال ۲۰۰۴ میلادی سنتز شد که بوسیله لایه برداری از سطح گرافیت بدست آمد [۱۲]. می‌توان گفت که ساختارهای دو بعدی دیگر با الگوبرداری از ساختار گرافن بدست آمده‌اند؛ به طوری که با جایگزینی اتم‌های مختلف مانند برون و نیتروژن، ساختارهای جدیدی ارایه شد که نشان داد، مواد ساخته شده بر پایه کربن را می‌توان در زمینه‌های مختلف از الکترونیک و اپتوالکترونیک [۱۳] تا هوافضا [۱۴] و انتقال دارو [۱۵] استفاده نمود.

همان‌طور که اشاره شد، می‌توان تحقیقات انجام شده بر ساختارهای دو بعدی را به زمینه‌های خواص حرارتی، مکانیکی، شیمیایی و ... دسته بندی کرد. مرتضوی و همکاران [۱۶] با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی به بررسی صفحات دو بعدی کاربید-بور و BC_۶N پرداختند. نتایج آنها نشان داد، استحکام کششی ساختارهای یاد شده در جهت زیگزاگ بالاتر از جهت آرمچیر است. سلمانخانی و همکاران

[۱۷] نانولوله کاربید بور را با استفاده از روش دینامیک مولکولی شبیه سازی نمودند. گزارش آنها بیانگر آن است که با افزایش تعداد لایه‌های نانولوله کاربید-بور، مقدار مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه شکست افزایش می‌یابد. بررسی خواص مکانیکی نانولوله‌های سیلیکون^۸ -ژرمانیوم بوسیله دادرسی و همکاران [۱۸] صورت پذیرفت. نتایج آنها برای خواص مکانیکی از قبیل مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه-ی شکست بیانگر آن است که حذف اتم به صورت‌های تک اتمی یا دو اتمی، موجب کاهش خواص یاد شده می‌شود. خلخالی و همکاران [۱۹] با استفاده از ساختار پلی کریستال سیلیکون به بررسی خواص حرارتی آن پرداختند. نتایج آنها نشان داد که استفاده از دو پتانسیل ترسوف^۹ و استلینگر وبر^{۱۰} وبر^{۱۱} بر نتایج تأثیرگذار است؛ به طوری که مقدار پارامتر کاپیتزا برای پتانسیل ترسوف $10 \times 10^{-10} \text{ W/m}^2\text{K}$ و برای پتانسیل استلینگر وبر $10 \times 10^{-10} \text{ W/m}^2\text{K}$ ارایه شده است. خواص مکانیکی و حرارتی ساختارهایی بر پایه برون بوسیله سنتورک و همکاران [۲۰]، مورد بررسی قرار گرفت. آنها با مطالعه ساختارهای BC_۲، BC_۳ و B_۴C_۳ نشان دادند که ساختار BC_۳ به عنوان یک ساختار ایده‌آل برای شرایط مختلف قابل استفاده است؛ همچنین، نتایج آنها بیانگر آن است که افزایش دما بر خواص مکانیکی هر سه ساختار تأثیر نامطلوب می‌گذارد.

معمولاً ساختارهای دو بعدی به صورت کاملاً یکپارچه در طبیعت وجود ندارند و همچنین هنگام ساخت آنها در آزمایشگاه‌ها، نمی‌توان از عوامل اثرگذار بر خرابی آنها چشم پوشی کرد؛ از همین رو، برای بررسی ساختارهای دو بعدی، باید عوامل مختلفی که بر آنها تأثیرگذار هستند را مورد مطالعه و بررسی قرار داد. عواملی همچون عدم حضور اتم‌ها در جایگاه مشخص شده‌شان، حذف برخی از اتم‌ها به دلایل گوناگون و جهت گیری تصادفی اتم‌ها که باعث تشکیل ساختارهایی به اسم پلی کریستال می‌شود. در پلی کریستال‌ها، جهت گیری اتم‌ها موجب تشکیل مرزدانه‌ها در ساختارها می‌شود که تنش را در این نواحی افزایش می‌دهد. مطالعات زیادی بر ساختارهای پلی کریستال انجام پذیرفته است.

^۱ Boron nitride^۲ Geranium^۳ Tungstan (IV) Sulfide^۴ Zinc Oxide^۵ Graphene^۶ Boron Carbide^۷ Carbon Nitride^۸ Silicon^۹ Tersoff^{۱۰} Stillinger-Weber

کریستال آلیاژ NiTi بعد از گذشت چند گام زمانی، از مرزدانه‌ها آغاز می‌شود. این تیم تحقیقاتی، نتایج بدست آمده از این تحقیق را به عنوان یک دستاورد مهم تلقی نمودند. همانطور که بیان شد، ترک در ساختارهای دو بعدی را می‌توان به عنوان یکی از مهم‌ترین علل تأثیرگذار بر خواص مختلف برشمرد. اما تحقیقات اندکی در مورد چگونگی جلوگیری از رشد ترک انجام پذیرفته است. با این توصیف، مطرح شدن چند سوال اساسی حائز اهمیت است: از چه نوع متوقف کننده ترک استفاده شود؟ آیا شکل متوقف کننده تأثیرگذار خواهد بود؟ آیا فاصله متوقف کننده از ترک را می‌توان به عنوان یک عامل اثر گذار تلقی کرد؟

دما می‌تواند چه نقشی در این میان داشته باشد؟ در این مطالعه، تأثیر ترک، متوقف کننده ترک و همچنین تغییرات دما بر خواص مکانیکی و رفتار شکست ساختار پلی کریستال کاربید بور مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور، مقادیر مدول یانگ، تنش در نقطه‌ی شکست و کرنش در نقطه شکست در جهت زیگزاگ مطالعه شده است. از آنجایی که از ساختارهای تک کریستالی به عنوان یک ساختار ایده‌آل یاد می‌شود و بیشتر ساختارهای موجود در طبیعت و ساختارهایی که در آزمایشگاه‌ها تولید می‌شوند به صورت پلی کریستال با اشکال مختلف می‌باشند، نتایج این تحقیق را می‌توان در ارزیابی کارایی ساختارهای دو بعدی مورد استفاده قرار داد که بر پایه پلی کریستال ایجاد شده‌اند.

۲- مدل‌سازی دینامیک مولکولی

در این مقاله، از شبیه سازی دینامیک مولکولی به عنوان یک روش جایگزین برای روش‌های آزمایشگاهی و تجربی استفاده شده است. این روش شبیه سازی را اولین مرتبه آنس رحمان، که او را پدر دینامیک مولکولی می‌شناسند، به دنیای شبیه سازی معرفی کرد [۲۷]. برای بررسی بصری ساختارهای پلی کریستال کاربید بور از نرم افزار OVITO^۳ استفاده شده است [۲۸]. همچنین، از میان پتانسیل‌های سازگار با ساختار مورد بررسی، پتانسیل ترسوف به کار گرفته شده است [۲۹].

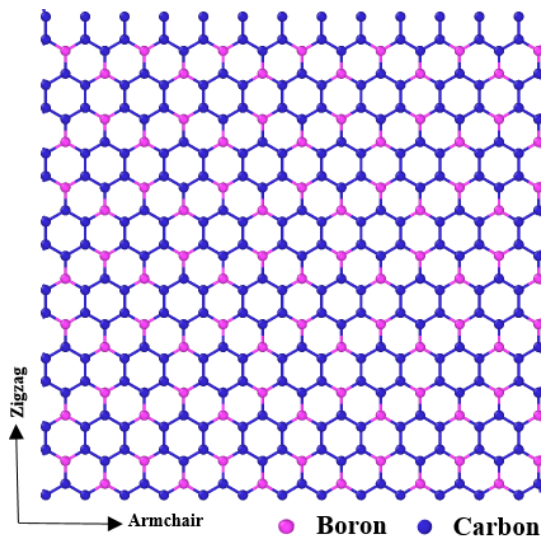
مرتضوی و کانیرتی [۲۱] با استفاده ساختار پلی کریستال برن-نیتريد و با کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی نشان دادند که می‌توان از مرزدانه‌ها به عنوان یک عامل تشدید کننده شدت تنش یاد کرد. در تحقیقی دیگر، خواص مکانیکی پلی کریستال گرافن مورد بررسی قرار گرفت و نتایج نشان داد که کوچک بودن اندازه دانه‌ها در ساختار، باعث افزایش مدول یانگ می‌شود [۲۲]. نمازیان و همکاران [۲۳] با استفاده از روش دینامیک مولکولی و با به کار بستن ساختار پلی کریستال دو بعدی برن-نیتريد، اثر افزودن اتم‌های کربن را مورد مطالعه قرار دادند. آنها افزایش استحکام کششی را با افزودن اتم‌های کربن گزارش کردند؛ همچنین، افزایش دما تأثیر منفی بر ساختار داشته است و باعث کاهش استحکام کششی ساختار پلی کریستال شده است. بررسی تأثیر اندازه دانه‌های ساختار پلی کریستال گرافن با بهره‌گیری از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی بوسیله‌ی شا و همکاران [۲۴] انجام پذیرفت. آنها گزارش کردند، نوع اتصال مرزدانه‌ها و همچنین زاویه‌ی اتصال آنها را می‌توان به عنوان یک عامل اثرگذار بر خواص مختلف، مورد بررسی قرار داد.

نتایج تحقیقات نشان داده است که حضور انواع نقص می‌تواند تأثیر بسزایی در خواص یاد شده داشته باشد. این نقوص را می‌توان به نقوص‌های SW^۱، ترک لبه‌ای، ترک مرکزی و انواع دیگر نقص دسته بندی کرد. ایزدی‌فر و همکاران [۲۵] با استفاده از ساختار پلی کریستال گرافن، تأثیر ترک مرکزی را بر خواص مختلف مکانیکی ارایه نمودند. نتایج آنها نشان داد که افزایش طول ترک در ساختار پلی کریستال گرافن موجب کاهش مقدار خواص مکانیکی می‌شود. در بخشی دیگر از این تحقیق، اثر جایگزین کردن اتم برن با اندازه‌های مختلف در ساختار مورد بررسی قرار گرفت. نتایج بیانگر آن است که افزایش اندازه اتم برن، تأثیر مطلوبی بر خواص دارد. در مطالعه‌ی دیگر، رشد ترک در ساختار پلی کریستال آلیاژ NiTi^۲ مورد آزمایش قرار گرفت [۲۶]. نتایج این تحقیق نشان داد که اگرچه افزایش طول ترک به عنوان یک عامل اثرگذار بر خاصیت شدت تنش است، اما رشد ترک در ساختار پلی-

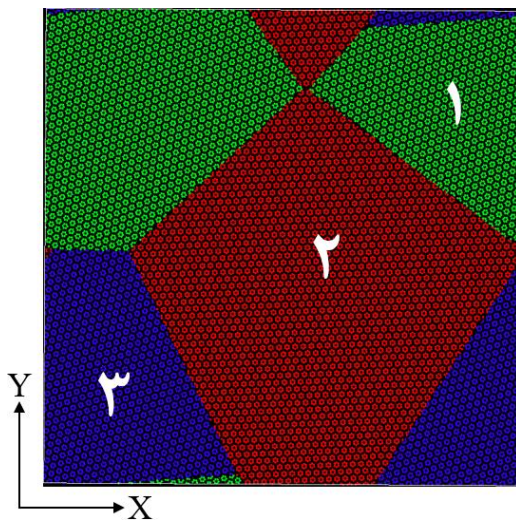
^۱ Stone Wales

^۲ Nickel titanium

^۳ Open Visualization Tool



شکل ۱- نمای بالا از ساختار دو بعدی کاربید بور که اتم کربن و بور به ترتیب با رنگ‌های بنفش و صورتی نشان داده شده است



شکل ۲- ساختار پلی کریستال کاربید بور با سه ناحیه

۱۰۰۰ کلوین محاسبه می‌شود. از آنجا که وجود ترک به عنوان یک امر اجتناب ناپذیر در ساختارهای اتمی بیان می‌شود، در قسمت دوم این تحقیق، اثر وجود ترک با طول ۵ آنگستروم و سپس اثر وجود متوقف کننده ترک با جنس اتمی کربن به شکل دایره و با شعاع ۵ آنگستروم از نوک ترک مورد بررسی قرار گرفته است؛ همچنین، اثر فاصله متوقف کننده ترک با فاصله‌های ۲ و ۴ آنگستروم از نوک ترک مورد بررسی قرار گرفته است. موقعیت متوقف کننده‌های ترک در شکل ۳ نشان داده شده است.

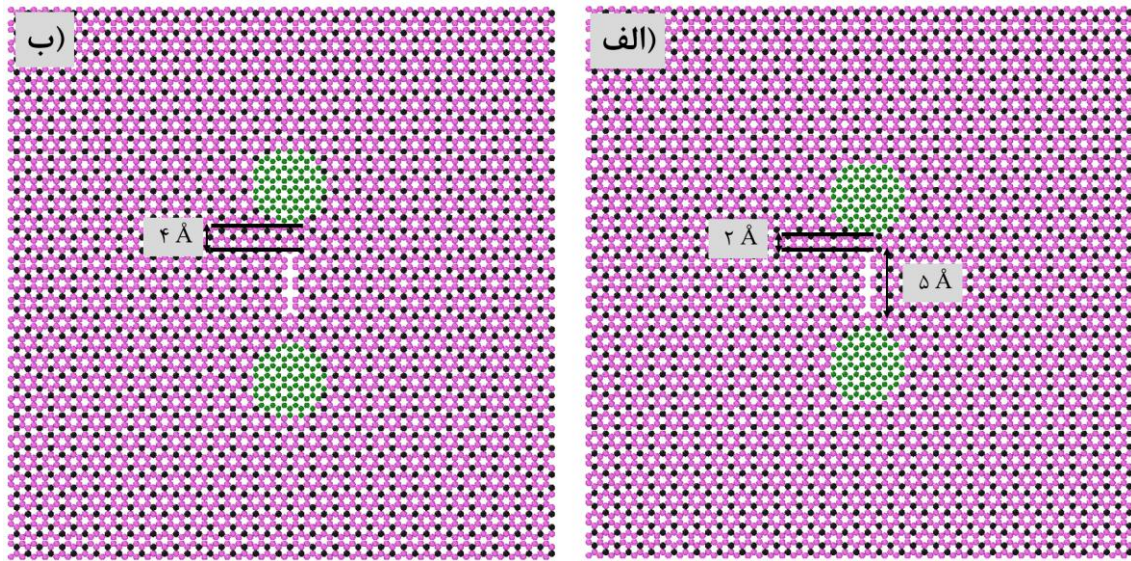
شایان ذکر است که از نرم افزار لمپس^۱ برای بررسی خواص مکانیکی ساختار کاربید مورد استفاده شده است. بار تک محوری در راستای Y، با نرخ کرنش 0.001 ps^{-1} و گام زمانی 0.00025 fs برای بدست آوردن نمودار تنش-کرنش و بررسی تغییرات ساختار پلی کریستال کاربید بور در شرایط مختلف اعمال شده است. اندازه صفحات مورد بررسی جهت مدلسازی، $60 \times 60 \text{ \AA}^2$ در نظر گرفته شده است. شکل ۱ نمایی از ساختار کاربید بور را به نمایش گذاشته است. برای نشان دادن جهات آرمچیر و زیگزاگ، به ترتیب از نمادهای X و Y استفاده شده است. تنش و کرنش در نقطه‌ی شکست از مقادیر بدست آمده از نرم افزار لمپس گزارش شده است و مقدار مدول یانگ از شیب قسمت خطی نمودار تنش- کرنش گزارش شده است.

این مطالعه، ساختار پلی کریستال کاربید بور را با سه ناحیه در نظر گرفته است که شامل ۴۰۰۰ اتم است. این نواحی با خطوط فرضی به یکدیگر متصل شده‌اند که بیانگر مرزخانه‌ها هستند. شکل ۲، ساختار پلی کریستال کاربید بور را با سه ناحیه نشان می‌دهد. شایان ذکر است که نواحی ساختار به صورت تصادفی کنار هم قرار گرفته‌اند که این امر موجب می‌شود، جهت گیری هر ناحیه با ناحیه دیگر متفاوت باشد. برای تثبیت هرچه بیشتر و بهتر اتم‌های کربن و بور، این ساختار با استفاده از شرایط NVT تا دمای ۱۰۰۰ کلوین گرم شده است؛ همچنین، این عمل موجب می‌شود که محل قرارگیری مرزخانه‌ها به ثبات قابل قبول نزدیک شود [۳۰]. سپس، ساختار به دمای محیط (۳۰۰ کلوین) برگردانده می‌شود تا آماده اعمال شرایط مختلف آزمایش گردد. برای ایجاد ترک در ساختارهای دو بعدی، بر اساس شرایط آزمایش، ابتدا لازم است که موقعیت و ابعاد ترک مورد مطالعه قرار گیرد و سپس، با استفاده از دستور `delete_atom`، ترک در ساختار ایجاد گردد.

۳- نتایج و بحث

در این بخش، ابتدا، خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه شکست ساختار پلی کریستال کاربید بور به صورت بدون نقص و در دماهای ۱۰۰، ۳۰۰، ۵۰۰، ۸۰۰ و

¹ Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator



شکل ۳- ساختار شبیه‌سازی شده پلی کریستال کاربید بور، (الف) نمونه C₅-D₂ و (ب) نمونه C₅-D₄

۳-۱- نقش دما بر خواص مکانیکی

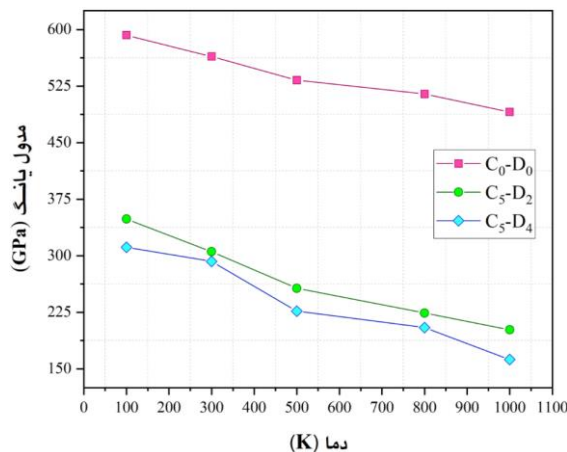
این قسمت به بررسی تأثیر دما بر خواص مکانیکی پلی کریستال کاربید بور اختصاص داده شده است. شکل ۴ تغییرات تنش-کرنش ساختار بدون نقص کاربید بور را در دماهای ۱۰۰، ۳۰۰، ۵۰۰، ۸۰۰ و ۱۰۰۰ کلوین نشان می‌دهد. بر اساس این شکل، افزایش دما موجب کاهش تنش در نقطه شکست ساختار از ۱۴۶/۷۵ گیگاپاسکال به ۱۰۴/۷۸ گیگاپاسکال شده است. دلیل این امر می‌تواند انرژی متقابل بین اتم‌ها باشد که با افزایش دما، فاصله بین اتم‌ها افزایش یافته و موجب کاهش انرژی بین آنها می‌شود [۳۱]. این مشاهدات با نتایج حاصل از محققان دیگر که اثر دما بر ساختارهای دو بعدی مورد مطالعه قرار داده‌اند نیز منطبق است [۳۲ و ۳۳]. رفتار مشابه در روند تغییرات مدول یانگ ساختار پلی کریستال کاربید بور نیز مشاهده می‌شود. افزایش دما از ۱۰۰ کلوین به ۱۰۰۰ کلوین، مقدار مدول یانگ را از ۵۹۲/۴۹ گیگاپاسکال به ۴۹۰/۵۴ گیگاپاسکال کاهش داده است که ۱۷/۲۱٪ کاهش را نشان می‌دهد. متغیرهایی مانند دما که باعث تغییر فاصله و نیروی بین اتم‌ها می‌شود، می‌تواند به طور قابل توجهی بر خواص مکانیکی اثر گذار باشد؛ بنابراین، افزایش دما منجر به کاهش اتصال بین اتمی و به دنبال آن، تضعیف پیوند شیمیایی می‌شود که کاهش مدول یانگ ساختار کاربید بور را به همراه دارد [۳۲]؛

همچنین، نتایج مشابهی توسط BaO و همکاران [۳۴] بر نانورق‌های MoS₂ و ضرغامی و همکاران [۳۵] بر ساختار دو بعدی ژرمانیوم گزارش شده است. علاوه بر این، افزایش دما باعث کاهش کرنش در نقطه شکست نیز شده است. این روند کاهشی نشان می‌دهد که این خاصیت مکانیکی ۱۱/۶۵٪ کاهش یافته است. تحقیقات بسیاری نشان داده است که تغییر شکل ساختار دو بعدی هنگام بارگذاری به صورت تک محوری، موجب تبدیل انرژی جنبشی به انرژی کرنش می‌شود. در نتیجه، افزایش دما باعث افزایش انرژی جنبشی شده و متعاقباً انرژی کرنش را کاهش می‌دهد. از همین رو، ساختار پلی کریستال کاربید بور در کرنش پایین‌تری به نقطه شکست می‌رسد [۳۶].

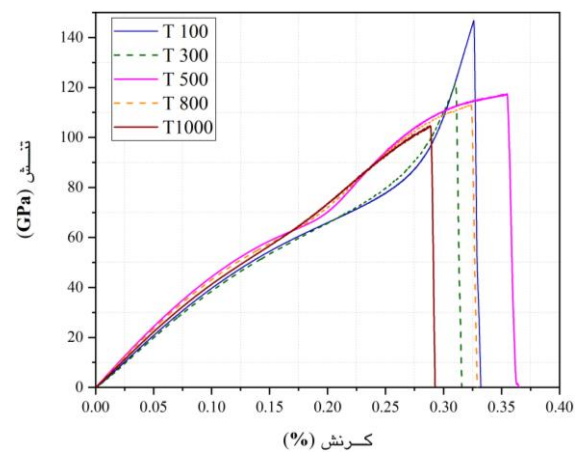
برای درک بهتر نتایج گزارش شده از تأثیر دما بر رفتار مکانیکی ساختار پلی کریستال کاربید بور در عدم حضور ترک و متوقف کننده ترک، جدول ۱ ارائه شده است. لازم به ذکر است که کد تعریف شده برای این قسمت، C₀-D₀ است؛ بدان معنا که برای ساختار هیچ گونه ترک^۱ یا فاصله متوقف کننده از ترک^۲ تعریف نشده است.

¹ Crack

² Distance



شکل ۵- تغییرات مدول یانگ ساختار پلی کریستال کاربید بور در دماهای ۱۰۰، ۳۰۰، ۵۰۰، ۸۰۰ و ۱۰۰۰ کلوین



شکل ۴- تغییرات تنش- کرنش ساختار پلی کریستال کاربید بور برای دماهای مختلف ۱۰۰، ۳۰۰، ۵۰۰، ۸۰۰ و ۱۰۰۰ کلوین

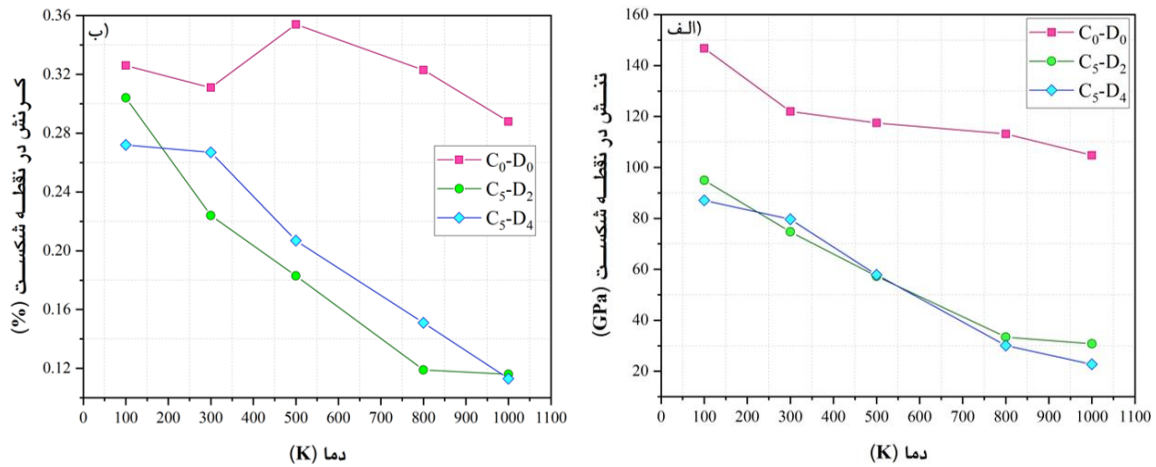
جدول ۱- خواص مکانیکی ساختار پلی کریستال کاربید بور در دماهای مختلف

کد نمونه	دما (K)	مدول یانگ (GPa)	تنش در نقطه‌ی شکست (GPa)	کرنش در نقطه‌ی شکست (%)
	۱۰۰	۵۹۲/۴۹	۱۴۶/۷۵	۰/۳۲۶
	۳۰۰	۵۶۴/۱۱	۱۲۲/۰۳	۰/۳۱۱
C ₀ -D ₀	۵۰۰	۵۳۲/۹۱	۱۱۷/۴۷	۰/۳۵۴
	۸۰۰	۵۱۴/۵۴	۱۱۳/۱۷	۰/۳۲۳
	۱۰۰۰	۴۹۰/۵۴	۱۰۴/۷۸	۰/۲۸۸

۳-۲- نقش دما بر خواص مکانیکی در حضور ترک و متوقف کننده ترک
 برای بررسی اثر ترک و متوقف کننده ترک بر خواص مکانیکی ساختار پلی کریستال کاربید بور در دماهای مختلف، یک ترک با طول ۵ آنگستروم در مرکز ساختار ایجاد شده است. همچنین، فاصله متوقف کننده ترک از ترک نیز به عنوان یک عامل اثرگذار بر خواص مکانیکی مورد بررسی قرار گرفته است. همانطور که در شکل ۳ نشان داده شده است، متوقف کننده ترک به شکل دایره و با شعاع ۵ در نظر گرفته شده است که با فاصله‌های ۲ و ۴ آنگستروم از ترک قرار گرفته است. کدهای تعریف شده برای این قسمت، C₅-D₂ و

C₅-D₄ است؛ بدان معنا که طول ترک^۱ ۵ آنگستروم و ثابت در نظر گرفته شده است و فاصله متوقف کننده ترک از ترک، ۲ و ۴ آنگستروم در نظر گرفته شده است. شکل‌های ۵ و ۶ تغییرات مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه شکست برای ساختار بدون نقص و در حضور ترک با متوقف کننده به عنوان تابعی از دما را نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود، وجود ترک در ساختار خواص مکانیکی یاد شده را به طور چشم گیری کاهش داده است. به عنوان مثال، مدول یانگ برای نمونه C₅-D₂ از ۳۴۸/۶۳ گیگاپاسکال به ۳۰۵/۴۶، ۲۵۶/۸۷، ۲۲۳/۹۹ و ۲۰۱/۷۶ گیگاپاسکال کاهش یافته است که به ترتیب ۱۲/۳۸٪، ۲۶/۳۲٪، ۳۵/۷۵٪ و ۴۲/۱۲٪ کاهش

¹ Crack length



شکل ۶- تغییرات، الف) تنش در نقطه شکست و ب) کرنش در نقطه شکست پلی کریستال کاربید بور در دماهای مختلف ۱۰۰، ۳۰۰، ۵۰۰، ۸۰۰ و ۱۰۰۰ کلوین

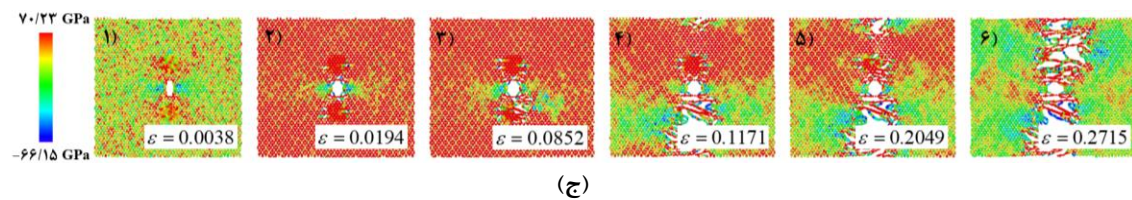
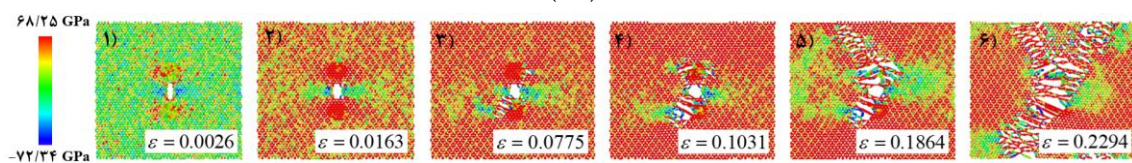
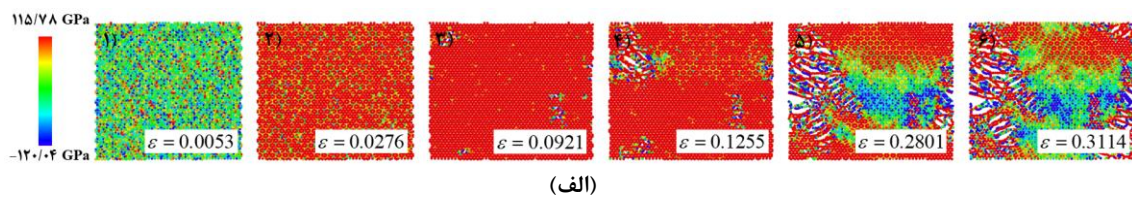
مدول یانگ را برای ساختار پلی کریستال کاربید بور در دماهای مختلف نشان می‌دهد. همچنین، مقدار تنش در نقطه شکست نیز از ۹۴/۹۶ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به ۳۰/۷۷ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰۰ کلوین کاهش یافته است. این روند کاهشی برای خاصیت کرنش در نقطه شکست نیز مشاهده شده است. وجود برخی نوسانات برای خاصیت کرنش در نقطه شکست را می‌توان به کاهش انرژی اتصال، تضعیف پیوندهای شیمیایی و در نتیجه تغییرات ناگهانی در خواص مکانیکی مرتبط دانست. همانطور که در قسمت قبل بیان شد، افزایش دما موجب کاهش مقدار خواص مکانیکی گشته است و از طرفی دیگر، وجود ترک نیز عامل اثر گذاری بر خواص مکانیکی است؛ این امر را می‌توان به افزایش فواصل بین اتمی که نقش مهمی در مقاومت مکانیکی و همچنین افزایش انرژی جنبشی دارد، نسبت داد [۳۷]. اثر ترک بر خواص مکانیکی ساختار پلی-کریستال NiTi و Ni₆₀Cr₃₀Fe₁₀ نیز مورد مطالعه قرار گرفته است که نتایج گزارش شده حاکی از آن است که حضور ترک سبب کاهش مقدار خواص مکانیکی می‌گردد [۳۸ و ۳۹]. نتایج گزارش شده در جدول ۲ بیانگر آن است که خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه شکست برای نمونه C₅-D₄ یک روند نزولی را پیش گرفته است، بدان معنا که با افزایش فاصله متوقف کننده ترک از ترک، خواص مکانیکی کاهش پیدا کرده است. به عنوان مثال، مقدار مدول یانگ در دمای ۱۰۰ کلوین برای دو نمونه C₅-D₂ و C₅-D₄ به

ترتیب ۳۵۸/۶۳ و ۳۱۱/۲۱ گیگاپاسکال است. این روند کاهشی برای تمام دماها برقرار است. نتایج گزارش شده برای مدول یانگ نشان می‌دهد که هرچه فاصله متوقف کننده ترک از ترک کمتر باشد، مقدار این خاصیت مکانیکی بیشتر خواهد بود؛ همچنین، از نتایج گزارش شده در این قسمت، می‌توان ادعان داشت که صفحات پلی کریستال کاربید بور در دماهای پایین، مقاومت بیشتری در برابر رشد ترک از خود نشان می‌دهند [۴۰]. در موارد مشابه، تأثیر افزایش دما بر خواص مکانیکی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان داده است که افزایش دما سبب کاهش مقدار خواص مکانیکی از قبیل مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه شکست می‌شود.

شکل ۷ روند رشد ترک در ساختار پلی کریستال کاربید بور را در عدم حضور ترک و ترک به همراه متوقف کننده در دمای ۳۰۰ کلوین به نمایش گذاشته است. با توجه به شکل ۷-الف، با افزایش کرنش و گام زمانی، میزان تنش در اطراف مرزخانه‌ها افزایش پیدا کرده است و این امر موجب گسیخته شدن پیوند بین اتم‌های برن و کربن شده است. این روند تا زمانی ادامه پیدا می‌کند که مقاومت صفحه به کمترین مقدار خود برسد و ساختار به صورت کامل از هم گسیخته شود. با توجه به تصویر ششم شکل الف، مقدار بیشترین کرنش برای این ساختار حدود ۰/۳۱۱٪ گزارش شده است. شکل ۷-ب و ۷-ج نیز رشد ترک ساختار مورد بررسی را در حضور ترک و متوقف کننده‌های ترک نشان

جدول ۲- خواص مکانیکی ساختار پلی کریستال کربید بور در دماهای مختلف

کرنش در نقطه‌ی شکست (%)	تنش در نقطه‌ی شکست (GPa)	مدول یانگ (GPa)	دما (K)	کد نمونه
۰/۳۰۴	۹۴/۹۶	۳۴۸/۶۳	۱۰۰	C ₅ -D ₂
۰/۲۲۴	۷۴/۷۳	۳۰۵/۴۶	۳۰۰	
۰/۱۸۳	۵۷/۲۸	۲۵۶/۸۷	۵۰۰	
۰/۱۱۹	۳۳/۴۱	۲۲۳/۹۹	۸۰۰	
۰/۱۱۶	۳۰/۷۷	۲۰۱/۷۶	۱۰۰۰	
۰/۲۷۲	۸۷/۰۸	۳۱۱/۲۱	۱۰۰	
۰/۲۶۷	۷۹/۷۱	۲۹۲/۵۴	۳۰۰	C ₅ -D ₄
۰/۲۰۷	۵۷/۸۲	۲۲۶/۵۹	۵۰۰	
۰/۱۵۱	۳۰/۰۷	۲۰۴/۸۱	۸۰۰	
۰/۱۱۳	۲۲/۷۵	۱۶۲/۳۲	۱۰۰۰	



شکل ۷- مراحل رشد ترک (۱-۶) و توزیع تنش ساختار پلی کریستال کربید بور، (الف) نمونه C₀-D₀، (ب) نمونه C₅-D₂ و (ج) نمونه C₅-D₄

ترک در راستای عمود بر جهت بارگذاری انتشار پیدا می‌کند. اگرچه نتایج گزارش شده در بخش قبل بیانگر آن است که نزدیک‌تر بودن متوقف کننده ترک به لبه‌های ترک نتایج

می‌دهد که به ترتیب مربوط به ساختارهای C₅-D₂ و C₅-D₄ می‌باشند. همانطور که انتظار می‌رود، حضور ترک موجب می‌شود تا تمرکز تنش اطراف آن پدید آید، به طوری که رشد

۵- مراجع

- [1] Li J, Wu M, Yang G, Zhang D, Wang Z, Zheng D, Yu J (2020) Bottom-up passivation effects by using 3D/2D mix structure for high performance p-i-n perovskite solar cells. *Sol Energy* 205(2): 44-50.
- [2] Liang G, Zhang J, An S, Tang J, Ju S, Bai S, Jiang D (2021) Phase change material filled hybrid 2D / 3D graphene structure with ultra-high thermal effusivity for effective thermal management. *Carbon* 176(3): 11-20.
- [3] Wu Y, Yang L (2021) Modeling of the effect of local material imperfection to the structural mechanical property variability of 2D finite-size cellular structures. *Compos Struct* 262(6): 113610.
- [4] Meng S, Wu H, Cui Y, Zheng X, Wang H, Chen S, Wang Y, Fu X (2020) One-step synthesis of 2D/2D-3D NiS/Zn3In2S6 hierarchical structure toward solar-to-chemical energy transformation of biomass-relevant alcohols. *Appl Catal B* 256(2): 118617.
- [5] Wang M, Meng F, Hou D, Han Y, Ren J, Bai C, Wang B, Zhou T (2019) Electronic structure and spin properties study on 2D h-BN nanosheet with Ti or Fe doping. *Solid State Commun* 307(7): 113803.
- [6] Trivedi R, Mishra V (2021) Exploring the structural stability order and electronic properties of transition metal M@Ge12 (M = Co, Pd, Tc, and Zr) doped germanium cage clusters—A density functional simulation. *J Mol Struct* 1226(4): 129371.
- [7] Juvaidd MM, Rao R (2021) Wafer scale growth of MoS2 and WS2 by pulsed laser deposition. *Mater Today Proc* 35(8): 494-496.
- [8] Zhao ZC, Yang CL, Meng QT, Wang MS, Ma XG (2020) ZnCdO2 monolayer — A complex 2D structure of ZnO and CdO monolayers for photocatalytic water splitting driven by visible-light. *Spectrochim. Acta Part A* 230(1): 118068.
- [9] Song T, Long B, Yin S, Ali A, Deng G (2021) Designed synthesis of a porous ultrathin 2D CN@graphene@CN sandwich structure for superior photocatalytic hydrogen evolution under visible light. *Chem Eng J* 404(2): 126455.
- [10] Belasfar K, Houmad M, Boujnah M, Benyoussef A, Kenz AE (2020) First-principles study of BC3 monolayer as anodes for lithium-ion and sodium-ion batteries. *J Phys Chem Solids* 139(5): 109319.
- [11] Ghasemi H, Rutledge JE, Yazdani H (2020) Mechanical properties of defective cyanoethynyl (2D polyaniline – C3N): A comparative molecular dynamics study versus graphene and hexagonal boron nitride. *Physica E* 121(4): 114085.
- [12] Huang G, Guo X, Cao X, Tian Q, Sun H (2017) Formation of graphene-like 2D spinel MnCo2O4

بهتری را ارایه کرده است، اما ساختار C₅-D₄ در دمای ۳۰۰ کلوین کرنش بیشتری را از خود نشان داده است. با توجه به تصویر ششم شکل ۷-ب و ۷-ج، بیشترین مقدار کرنش برای ساختار C₅-D₂ معادل ۰/۲۲۹٪ است؛ این در حالی است که این مقدار برای ساختار C₅-D₄ معادل ۰/۲۷۱٪ گزارش شده است. حضور متوقف کننده ترک موجب می‌شود، انرژی بیشتری صرف رشد ترک گردد و این امر موجب می‌شود تا مقاومت در برابر شکست ساختار افزایش یابد [۳۵ و ۳۶].

۴- جمع‌بندی

در این مقاله، خواص مکانیکی از قبیل مدول یانگ، تنش در نقطه‌ی شکست و کرنش در نقطه شکست ساختار پلی-کریستال کاربید بور با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. بررسی این ساختار در عدم حضور ترک و حضور ترک به همراه متوقف کننده‌های آن با شعاع ثابت، بررسی شد. فاصله متوقف کننده ترک از لبه ترک و همچنین دماهای ۱۰۰، ۳۰۰، ۵۰۰، ۸۰۰ و ۱۰۰۰ کلوین به عنوان موارد قابل بررسی در این تحقیق مورد تحلیل قرار گرفت؛ همچنین، نتایج نشان داد که هر چه فاصله متوقف کننده ترک از ترک کمتر باشد، شاهد خواص مکانیکی بهتری خواهیم بود. نتایج بدست آمده نشان داد که افزایش دما از ۱۰۰ کلوین به ۱۰۰۰ کلوین موجب کاهش مقدار خواص مکانیکی یاد شده می‌شود. مدول یانگ برای ساختار بدون ترک و در دمای ۱۰۰ کلوین از ۵۲۹/۴۹ گیگاپاسکال به ۴۹۰/۵۴ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰۰ کلوین کاهش یافت؛ همچنین، مقدار تنش در نقطه شکست نیز از ۱۴۶/۷۵ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به ۱۰۴/۷۸ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰۰ کلوین کاهش پیدا کرد. نتایج بدست آمده از ساختار پلی-کریستال کاربید بور در حضور ترک حاکی از آن است که مقدار مدول یانگ و تنش در نقطه‌ی شکست برای نمونه C₅-D₂ به ترتیب ۴۲/۱۲ و ۶۷/۵۹ درصد کاهش یافت. این سیر نزولی برای نمونه C₅-D₄ نیز مشاهده شد؛ به گونه‌ای که مقدار مدول یانگ از ۳۱۱/۲۱ گیگاپاسکال و در دمای ۱۰۰ کلوین به ۱۶۲/۳۲ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰۰ کلوین کاهش یافت که معادل ۴۴/۵۱ درصد کاهش را نشان می‌دهد.

- Hall-Petch Relation in Polycrystalline Graphene. *Sci Rep* 4(3): 5991.
- [25] Izadifar M, Thissen P, Abadi R, Jam AN, Gohari S, Burvill C, Rabczuk T (2019) Fracture toughness of various percentage of doping of boron atoms on the mechanical properties of polycrystalline graphene: A molecular dynamics study. *Physica E* 114(1): 113614.
- [26] Lu M, Wang F, Zeng X, Chen W, Zhang J (2020) Cohesive zone modeling for crack propagation in polycrystalline NiTi alloys using molecular dynamics. *Theor Appl Fract Mech* 105(12): 102402.
- [27] Adcock SA, McCammon JA (2006) *Molecular Dynamics: Survey of Methods for Simulating the Activity of Proteins*. ACS Publication 106(5): 1589-1615.
- [28] Stukowski A (2009) Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool. *Modeling Simul Mater Sci Eng* 18(1): 015012.
- [29] Lee BS, Park S (2019) Applying Tersoff-potential and bond-softening models in a molecular dynamics study of femtosecond laser processing. *J Appl Phys* 126(3): 045109.
- [30] Guo FL, Tan D, Wu T, Huang P, Li YQ, Hu N, Fu SY (2021) Experimental characterization and molecular dynamics simulation of thermal stability, mechanical properties and liquid oxygen compatibility of multiple epoxy systems for cryotank applications. *Extreme Mech Lett* 101227.
- [31] Saleh M, Hofer TS (2021) Theoretical insight on the solvation properties of Zn²⁺ in pure liquid ammonia: A quantum mechanical molecular charges field molecular dynamics (QMCF-MD) study. *J Mol Liq* 324(11): 114737.
- [32] Dehghani MZ, Mashhadzadeh AH, Salmankhani A, Karimi Z, Habibzadeh S, Ganjali MR, Saeb MR (2020) Fracture toughness and crack propagation behavior of nanoscale beryllium oxide graphene-like structures: A molecular dynamics simulation analysis. *Eng Fract Mech* 235(12): 107194.
- [۳۳] آل بویه عر، اکبری ح، شیخ محمدی ن، فولادپنجه س (۱۴۰۰) تأثیر دما و رشد ترک بر ضریب شدت تنش ساختار پلی کریستال گرافن: مطالعه شبیه سازی دینامیک مولکولی. نهمین کنفرانس بین المللی مهندسی مواد و متالورژی ایران.
- [34] Bao H, Huang Y, Yang Z, Sun Y, Bai Y, Miao Y, Chu PK, Xu K, Ma F (2018) Molecular Dynamics Simulation of Nanocrack Propagation in Single-Layer MoS₂ Nanosheets. *J Phys Chem C* 122(5): 1351-1360.
- [35] Zarghami MZ, Safa ME, Yousefi F, Salmankhani A, Karami Z, Dadrasi A, Mashhadzadeh AH, and its lithium storage properties. *J Alloys Compd* 695(3): 2937-2944.
- [13] Lisesivdin BS, Lisesivdin SB, Ozbay E, Jelezko F (2020) Structural parameters and electronic properties of 2D carbon allotrope: Graphene with a kagome lattice structure. *Chem Phys Lett* 760(2): 138006.
- [14] Ivanov DS, Lomov SV (2015) 2 - Modelling the structure and behaviour of 2D and 3D woven composites used in aerospace applications. *Pol. Comp. Aero Indst* 21-52.
- [15] Molaei MJ (2020) Two-dimensional (2D) materials beyond graphene in cancer drug delivery, photothermal and photodynamic therapy, recent advances and challenges ahead: A review. *J Drug Delivery Sci Technol* 101830.
- [16] Mortazavi B, Shahrokhi M, Raeisi M, Zhuang X, Pereira LFC, Rabczuk T (2019) Outstanding strength, optical characteristics and thermal conductivity of graphene-like BC₃ and BC_{6N} semiconductors. *Carbon* 149(4): 733-742.
- [17] Salmankhani A, Karimi Z, Mashhadzadeh AM, Dehghani MZ, Saeb MR, Fierro V, Clezard A (2021) A theoretical scenario for the mechanical failure of boron carbide nanotubes. *Comput Mater Sci* 186(3): 110022.
- [18] Dadrasi A, Albooyeh AR, Mashhadzadeh AH (2019) Mechanical properties of silicon-germanium nanotubes: A molecular dynamics study. *Appl Surf Sci* 498(7): 143867.
- [19] Khalkhali M, Rajabpour A, Khoeini F (2019) Thermal transport across grain boundaries in polycrystalline silicene: A multiscale modeling. *Sci Rep* 9(2): 5684.
- [20] Senturak AE, Oktem AS, Konukman AES (2020) Thermal conductivity and mechanical properties of graphene-like BC₂, BC₃ and B₄C₃. *Mol Simul* 46(12): 879-888.
- [21] Mortazavi B, Cuniberti G (2014) Mechanical properties of polycrystalline boron-nitride nanosheets. *R Soc Chem* 4(7): 19137-19143.
- [22] Chen MQ, Quek SS, Sha ZD, Chiu CH, Pei QX, Zhang YW (2015) Effects of grain size, temperature and strain rate on the mechanical properties of polycrystalline graphene – A molecular dynamics study. *Carbon* 85(11): 135-146.
- [23] Jam AN, Abadi R, Izadifar M, Rabczuk T (2018) Molecular dynamics study on the mechanical properties of carbon doped single-layer polycrystalline boron-nitride nanosheets. *Comput Mater Sci* 153(3): 16-27.
- [24] Sha ZD, Quek SS, Pei QX, Liu ZS, Wang TJ, Shwnoy VB, Zhang YW (2013) Inverse Pseudo

- polycrystalline NiTi alloys using molecular dynamics. *Theor Appl Fract Mech* 105(3): 102402.
- [40] Yang Q, Hwang C, Marvel CJ, Chauhan A, Domnich V, Khan AU, LaSalvia JC, Harmer MP, Hemker KJ, Haber RA (2019) Fabrication and characterization of arc melted Si/B co-doped boron carbide. *J Eur Ceram Soc* 39(16): 5156-5166.
- [36] Wang R, Wang J, Dong T, Ouyang G (2020) Structural and mechanical properties of geopolymers made of aluminosilicate powder with different SiO₂/Al₂O₃ ratio: Molecular dynamics simulation and microstructural experimental study. *Constr Build Mater* 240(2): 117935.
- [۳۶] آل بویه عر، رضوی کیا م، شیخ محمدی ن، فولادپنجه س (۱۴۰۰) خواص مکانیکی ساختار پلی کریستال گرافن از شبیه سازی دینامیک مولکولی: نقش دما و عیوب هندسی. نهمین کنفرانس بین المللی مهندسی مواد و متالورژی.
- Stadler FJ, Saeb MR (2021) Fracture behavior of SiGe nanosheets: Mechanics of monocrystalline vs. polycrystalline structure. *Eng Fract Mech* 251(2): 107782.
- [36] Khadka R, Baishnab N, Opletal G, Sakidja R (2020) Study of amorphous boron carbide (a-BxC) materials using Molecular Dynamics (MD) and Hybrid Reverse Monte Carlo (HRMC). *J Non-Cryst Solids* 530(2): 119783.
- [37] Salmankhani A, Karimi Z, Mashhadzadeh AH, Dehghani MZ, Saeb MR, Fierro V, Celzard A (2021) A theoretical scenario for the mechanical failure of boron carbide nanotubes. *Comput Mater Sci* 186(4): 110022.
- [38] Liu X, Kim SY, Lee SH, Lee B (2021) Atomistic investigation on initiation of stress corrosion cracking of polycrystalline Ni₆₀Cr₃₀Fe₁₀ alloys under high-temperature water by reactive molecular dynamics simulation. *Comput Mater Sci* 187(1): 110087.
- [39] Lu M, Wang F, Zeng X, Chen W, Zhang J (2020) Cohesive zone modeling for crack propagation in