

Amirkabir Journal of Mechanical Engineering

Amirkabir J. Mech. Eng., 53(8) (2021) 1095-1098 DOI: 10.22060/mej.2021.18509.6831

Effect of Graphene Sheets Aggregation on The Dislocation-Blocking Mechanism of Nanolaminated Aluminum/Graphene Composite: Molecular Dynamics Simulation Study

H. Daneshmand, M. Karimi*, M. Araghchi, M. Asgari

The Main Organ of Material, Nuclear Science and Technology Research Institute, Tehran, Iran

ABSTRACT: Aluminum/graphene nanolaminated structures have a very proper reinforcing and toughening effect on aluminum composites. Graphene layers effectively prevent the growth and movement of dislocations in the aluminum matrix. Therefore, more and shorter dislocations lines occur in the aluminum matrix between the graphene layers. In this paper, tensile tests have been performed on nanolaminated aluminum/graphene composite using molecular dynamic simulation to study the dislocation-blocking mechanism and its reinforcing and toughening effect. The nucleation, expansion, and displacement of the dislocation in the aluminum matrix were investigated under tension. The results showed that the reinforcement mechanism includes increasing displacement density and shear stress transfer. Besides, the reinforcing and toughening effects were investigated as a function of the distance between the graphene sheets (the spacing of sheets between 4-14 Å). The results showed that the distance between the graphene sheets has an effective role in creating the dislocation-blocking mechanism in the aluminum matrix. Decreased graphene sheets increase the mechanical properties of the aluminum matrix due to the dislocation-blocking mechanism, which can be limited by the onset of graphene sheet aggregation. As the result, stable steps in 10-12 Å distance between graphene sheets were obtained by dislocations with a yield strength of about 14 GPa and yield strain of 0/065.

Review History:

Received: May. 29, 2020 Revised: Mar. 18, 2021 Accepted: May. 13, 2021 Available Online: May. 15, 2021

Keywords:

Nanolaminated aluminum/ graphene composites Dislocation-blocking Molecular dynamics Graphene sheets aggregation

1. INTRODUCTION

The strength efficiency of composites is strongly influenced by the way the reinforcing agent is placed in them [1]. Biological materials in nature, such as pearls, have high toughness and fatigue resistance due to their laminated structure. These properties have led researchers to use laminated nanostructures as reinforcements for the development of aluminum/graphene nanocomposites [2]. These features include two-dimensional structure, high specific surface area, and high modulus. In addition, aluminum layers limit the outward displacement of graphene, while graphene layers limit the displacement of the aluminum base. This significantly enhances the mechanical properties of the composite [3].

Recently, Zhou et al. [4] investigated the effect of graphene plate spacing on the properties of aluminum laminated composite. The results showed that reducing the distance between the plates due to the dislocation-blocking mechanism increases the mechanical properties of the composite. However, the optimal spacing of graphene sheets and the role of their aggregation on the properties of aluminum laminated composite have not been investigated so far.

In this study, to investigate the effect of aggregation of graphene plates on the properties of aluminum, the tensile properties of aluminum/graphene composite at different *Corresponding author's email: m.karimi664@gmail.com

distances from graphene layers have been studied and evaluated using Molecular Dynamics (MD). For this purpose, parallel graphene plates were placed at specific intervals in the matrix of aluminum metal and the tensile test was applied perpendicular to the graphene plates.

2. SIMULATION METHOD

MD simulations were performed to fabricate aluminum/ graphene composites using Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) software. In the early models, aluminum atoms were considered in a Face-Centered Cubic (FCC) structure with a grid size of 4/55 Å and graphene plates without any defects. Accordingly, the simulation model contains about 50,000 aluminum atoms and 5,000 carbon atoms. The configuration size of the simulation model was 7×9×15 nm³. Graphene plates measuring 5×9 nm² were placed on an aluminum matrix. The volume percentage of graphene in the composite was considered to be 4%. The interaction between aluminum atoms was modeled using the potential of the Embedded Atom Model (EAM) [5]. The Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order (AIREBO) potential was also used to model graphene plates [6]. In addition, van der Waals forces were modeled using the Leonard-Jones potential function [7].

As shown in Fig. 1, the tensile test is applied horizontally (in a *y*-direction) to the specimens. To prepare the simulation

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.



Fig. 1. Nanolaminated aluminum/graphene composite under tensile load in the y-direction.

structure, first, the whole system was subjected to energy minimization by conjugate gradient method by periodic conditions. Then, the process of thermodynamic optimization under NVT and NPT ensembles was performed based on Nose/Hoover thermostat and Nose/Hoover isobaricisothermal ensemble at zero pressure at 300K for 100 ps. The time steps were set to 0/001 ps. In MD models, the microstructure is optimized when the potential energy of the system is balanced. Then, a uniaxial tension in the direction of the *y*-axis was applied by gradually expanding (pulling) the simulation box at a strain rate of 10^8 s⁻¹. Boundary conditions were assumed to be periodic in the direction of *x* and *z* and the direction of free tension. After the simulations, the Dislocation Extraction Algorithm (DXA) was used in OVITO software to detect and analyze the movements of the dislocation in the deformed structures [8].

3. RESULTS AND DISCUSSION

Fig. 2 shows the stress-strain diagrams of the specimens under tensile load for different spacing of graphene plates. By reducing the distance between the graphene plates from 14 to 10 Å, the elastic range increases by 13%, and the plastic deformation occurs at a higher strain (0065/). This trend is seen at intervals of 10-14 Å of graphene plates and the yield strength of the material increases by 30%.

Dislocations can be seen in Fig. 3 appearing inside the aluminum in addition to creating an interface. Dislocations are not able to penetrate the interface so the plastic deformation is limited in each of the aluminum layers. Dislocations are cut by graphene and accumulated in the interface. At distances less than 10 Å, graphene plates tend to accumulate graphene plates due to the gravitational force of van der Waals. As a result, the specific surface area available for graphene is reduced. At these distances, the graphene surface has less ability to cut dislocation. In the distances of 4-8 Å graphene plates, a reduction of the dislocations cut in the interface of graphene and aluminum can be observed, which has reduced the length of the dislocations. The composite has more in common between the 10 and 12 Å plates, which further locks the dislocations. Therefore, the propagation of dislocations



Fig. 2. Stress-strain diagram of aluminum/graphene composite.



Fig. 3. Dislocation of nanolaminated aluminum/graphene composite in strain 0/12. The red dashed circles indicate dislocation-blocking.

becomes very difficult for composites with a plate spacing of more than 10 Å, which improves the mechanical properties of the aluminum/graphene composite. On the other hand, for the composite sample, the number of dislocation cuts in the graphene-aluminum interface has been reduced due to the influence of dislocation in the interface. Only low dislocation lengths can be observed in the interface of this sample. Such behavior has reduced the yield stress in this sample. As a result, the distance between the graphene plates in an optimal state (in this study 10 and 12 Å) can have the highest yield stress. This indicates that plate spacing and graphene aggregation have a significant effect on the dislocationblocking mechanism. Due to the presence of graphene layers that can effectively block the dislocation, high engagement dislocations can be found in the samples. Therefore, the composites show high tensile strength, especially at intervals of 10 and 12 Å.

4. CONCLUSIONS

In this study, the mechanical properties of nanolaminated aluminum/graphene composites during uniaxial tensile application were investigated and evaluated using MD simulations. The results of the study are as follows:

1) Displacement slip is restricted and accumulated by graphene layers in nanolaminated aluminum/graphene

composites and leads to increased displacement density in the interface.

2) Nanolaminated aluminum/graphene composites have higher yield strength and yield strain due to an increase in displacement density, decrease in plastic strain rate, and surface stress transfer effect. This increases the load-bearing capacity and flexibility of the composite.

3) The mechanism of dislocation-blocking shows a remarkable effect: nanolaminated aluminum/graphene composites perform better by reducing the distance between the plates. This is limited to intervals of less than 10 Å of graphene plates due to the aggregation of graphene plates. As a result, there is an optimal limit for graphene plates, which in this study was 10-12 Å.

REFERENCES

- [1] P. Liu, Z. Jin, G. Katsukis, L.W. Drahushuk, S. Shimizu, C.-J. Shih, E.D. Wetzel, J.K. Taggart-Scarff, B. Qing, K.J. Van Vliet, Layered and scrolled nanocomposites with aligned semi-infinite graphene inclusions at the platelet limit, Science, 353(6297) (2016) 364-367.
- [2] S. Zhang, P. Huang, F. Wang, Graphene-boundary strengthening mechanism in Cu/graphene nanocomposites: A molecular dynamics simulation, Materials & Design, 190 (2020) 108555.

- [3] X. Liu, F. Wang, W. Wang, H. Wu, Interfacial strengthening and self-healing effect in graphene-copper nanolayered composites under shear deformation, Carbon, 107 (2016) 680-688.
- [4] J.-Q. Zhu, X. Liu, Q.-S. Yang, Dislocation-blocking mechanism for the strengthening and toughening of laminated graphene/Al composites, Computational Materials Science, 160 (2019) 72-81.
- [5] M. Mendelev, M. Kramer, C.A. Becker, M. Asta, Analysis of semi-empirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid Al and Cu,

Philosophical Magazine, 88(12) (2008) 1723-1750.

- [6] T.C. O'Connor, J. Andzelm, M.O. Robbins, AIREBO-M: A reactive model for hydrocarbons at extreme pressures, The Journal of chemical physics, 142(2) (2015) 024903.
- [7] N. Silvestre, B. Faria, J.N.C. Lopes, Compressive behavior of CNT-reinforced aluminum composites using molecular dynamics, Composites Science and Technology, 90 (2014) 16-24.
- [8] A.S. Visualization, analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool Modelling Simul, Mater. Sci. Eng, 18 (2010) 015012.

HOW TO CITE THIS ARTICLE

H. Daneshmand, M. Karimi, M. Araghchi, M. Asgari, Effect of Graphene Sheets Aggregation on The Dislocation-Blocking Mechanism of Nanolaminated Aluminum/Graphene Composite: Molecular Dynamics Simulation Study, Amirkabir J. Mech Eng., 53(8) (2021) 1095-1098.





نشريه مهندسي مكانيك اميركبير



نشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر، دوره ۵۳ شماره ۸، سال ۱۴۰۰، صفحات ۴۶۴۹ تا ۴۶۶۴ DOI: 10.22060/mej.2021.18509.6831

تأثير تجمع صفحات گرافن روی مکانيزم قفل شدن نابجايیها در کامپوزيت نانو چندلايه آلومينيوم /گرافن: مطالعه شبيهسازي ديناميک مولکولي

حميد دانشمند، ميثم كريمي*، مسعود عراقچي، مسعود عسگري

ارگان اصلی مواد، پژوهشگاه علوم و فنون هستهای، تهران، ایران

خلاصه: نانو ساختارهای چندلایه آلومینیوم/گرافن دارای اثر تقویتی و سفت کننده بسیار خوبی در کامپوزیتهای آلومینیوم میباشند. لایههای گرافن به طور مؤثر مانع از رشد و حرکت نابجاییها در زمینه آلومینیوم می شوند؛ بنابراین، خطوط نابجایی بیشتر و کوتاهتر در زمینه آلومینیوم بین لایههای گرافن رخ می دهد. در این مقاله، بارگذاری کششی بر روی نانو کامپوزیتهای چندلایه آلومینیوم/گرافن با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی برای مطالعه مکانیزم قفل شدگی نابجاییها و اثر تقویتی و سفت کنندگی آن انجام شده است. هستهزایی، گسترش و حرکت نابجاییها در زمینه آلومینیوم تحت کشش مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان داد که مکانیزم تقویت زمینه آلومینیوم شامل افزایش تراکم نابجاییها و اثر تقویتی و سفت کنندگی آن انجام شده است. هستهزایی، گسترش و حرکت نابجاییها در زمینه گرافن (فاصله صفحات ۱۴–۴ آنگستروم) نیز مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که مکانیزم تقویت زمینه آلومینیوم مائل افزایش در ایجاد مکانیزم قفل شدگی نابجاییها در زمینه آلومینیوم دارند. کاهش صفحات گرافن نقش مؤثری در ایجاد مکانیزم قفل شدگی نابجاییها در زمینه آلومینیوم دارند. کاهش صفحات گرافن نون مکانی خواص مکانیکی محدود شود. درنتیجه پلههای سطحی پایدار در فاصله ۱۲–۱۰ آنگستروم بین صفحات گرافن توسط نابجاییها با استحکام تسلیم حدودی ۱۴ GPa از گرفت تسلیم ۱۰۶۰۰، به دست آمد.

تاریخچه داوری: دریافت:۹ ۱۳۹۹/۰۳/۰ بازنگری: ۱۳۹۹/۱۲/۲۸ پذیرش:۱۴۰۰/۰۲/۲۳ ارائه آنلاین:۱۴۰۰/۰۲/۲۵

کلمات کلیدی: نانوکامپوزیتهای چندلایه آلومینیوم گرافن قفلشدگینابجایی دینامیک مولکولی تجمع صفحات گرافن

مناسبي بهعنوان تقويت كننده است [۴]. نانو كامپوزيت آلومينيوم/

گرافن در مقایسه با آلومینیوم خالص خواص بسیار خوبی ازجمله

مقاومت مکانیکی بالا، چگالی کم، مقاومت در برابر خوردگی، پایداری

حرارتی بهتر، خاصیت الکتروشیمیایی خوب، خاصیت اپتیکی بسیار

خوب و غیره را دارد [۵]. این خصوصیات نانو کامپوزیت بیشتر به

پراکندگی گرافن در زمینه آلومینیوم بستگی دارد. پراکندگی مناسب

نانو ذرات گرافن باعث افزایش خواص زمینه آلومینیوم به دلیل عوامل

مختلفى ازجمله اصلاح ريزساختارها، افزايش دماى تبلور، انتقال تنش

در حین بارگیری و موارد دیگر می شود. بررسی پراکندگی و تجمع نانو

ذرات گرافن در زمینه آلومینیوم در ساخت نانو کامپوزیت آلومینیوم

/ گرافن با کارایی بالا بسیار مهم است [۶]. بااینحال، گرافن به دلیل

سختی زیاد درون صفحهای که همراه با سختی خمشی مقدار کم

۱–مقدمه

کامپوزیتهای زمینه آلومینیوم به دلیل مقاومت به سایش و نسبت استحکام به وزن بالا بهطور وسیعی در صنایع هوافضا، اتومبیل و غیره استفاده می شوند [۱]. نوووسلوف^۱ و همکاران [۲] برای اولین بار از گرافن تک لایه بهعنوان تقویت کننده در کامپوزیتهای زمینه آلومینیوم استفاده کردهاند. در تحقیقات صورت گرفته پیشنهاد شده است که استفاده از گرافن بهجای نانولوله کربن اثر بیشتری بهعنوان تقویت کننده روی فاز زمینه دارد [۳]. گرافن بهعنوان یک ماده تک لایه به دلیل هندسه دوبعدی و خصوصیات مکانیکی فوق العاده همچون استحکام بالا (TPa و مدول یانگ TPa) ۱ماده

1Novoselov

* نویسنده عهدهدار مکاتبات: m.karimi664@gmail.com

کتوق مؤلفین به نویسندگان و حقوق ناشر به انتشارات دانشگاه امیرکبیر داده شده است. این مقاله تحت لیسانس آفرینندگی مردمی (Creative Commons License) کتار کتار در دسترس شما قرار گرفته است. برای جزئیات این لیسانس، از آدرس https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode دیدن فرمائید.

برون صفحهای است، بهراحتی میتواند منجر به اعوجاج ساختار شود [۷].

بازده استحکام کامپوزیتها بهشدت تحت تأثیر نحوه قرار گرفتن عامل تقویت کننده در آنها قرار دارد [۸]. مواد بیولوژیکی موجود در طبیعت مانند مروارید به دلیل ساختار چندلایهای دارای چقرمگی و مقاومت به خستگی بالایی هستند. این خصوصیات محققان را به استفاده از ساختارهای نانو چندلایه بهعنوان تقویت کننده برای توسعه نانو کامپوزیتها سوق داده است [۹]. این خصوصیات شامل ساختار دوبعدی، مساحت سطح ویژه بالا و مدول بالا است. علاوه بر این، لایههای آلومینیوم، جابجایی برون صفحهای گرافن را محدود می کنند، در حالی که لایههای گرافن نابجاییهای زمینه آلومینیوم را محدود می کنند. این امر سبب تقویت قابل توجهی در خواص مکانیکی کامپوزیت میشود [۱۰].

برای دستیابی به خواص مکانیکی کامپوزیتهای نانو چندلایهای آلومينيوم/گرافن، تحقيقات آزمايشگاهي متعددي انجامشده است. بهعنوان مثال، كامپوزيت هاى پايه آلومينيوم تقويت شده با صفحات گرافن، با موفقیت توسط شین و همکاران [۳] با استفاده از روش خاصی (ترکیبی از نورد گرم و آسیاب کاری مکانیکی) تولید شد. اگرچه افزایش خواص مکانیکی بدون آسیب رساندن به انعطاف پذیری دشوار است [11]، اما کامپوزیتهای تقویتشده توسط یان^۲ و همکاران [۱۲] با افزودن ۵/۵ درصد گرافن بدون کاهش انعطاف پذیری و افزایش استحکام تسلیم حدود ۵۰٪ تولید شده است. بسیاری از مطالعات انجامشده نشان میدهد که ساختار نانو چندلایهای و فازهای تقویت کننده با ترتیب بالا به طور مؤثری خواص کامپوزیت ها را افزایش میدهند. بهعنوان مثال لی^۳ و همکاران [۱۳] کامپوزیتهای زمينه آلومينيوم تقويتشده با اكسيد گرافن كاهشيافته با ساختار نانو چندلایهای را پیشنهاد دادهاند که بدون کاهش در شکل پذیری كامپوزيت، منجر به افزايش استحكام كششى (افزايش حدود ۵۰٪) و سختی می شود. شیونگ و همکاران [۱۴] کامیوزیت نانو چندلایهای مس خالص تقویتشده با مقدار زیادی از اکسید گرافن کاهشیافته را تولید کردند. آنها دریافتند که کامپوزیتهای با نانو ساختار چندلایهای، خواص ویژهای از خود نشان میدهند. علاوه

1 Shin

بر این، کامپوزیتهای زمینه فلزی با گرافن چندلایهای تقویتشده به صورت ستونى در مقياس نانو و ميكرو توسط محققان مورد مطالعه قرار گرفته است. کیم⁶ و همکاران [۱۵] مشاهده کردند که یک نانو کامپوزیت تشکیل شده به صورت ستونی متشکل از مس و گرافن، استحکام فشاری بسیاری بالایی (حداکثر ۱/۵ GPa) را دارا است. همچنین فنگ و همکاران [۱۶] آزمونهای فشاری تکمحوره را روی میکرو ستونهای تهیهشده از نانو کامپوزیتهای چندلایهای آلومینیوم/گرافن با غلظتهای مختلف از گرافن اکسید کاهشیافته و جهت گیری لایه های مختلف انجام دادند. آن ها بر اهمیت طراحی و کنترل ساختاری بر سفت شدن ساختار کامپوزیت تأکید کردند. در سالهای اخیر، مطالعات بیشتری در مورد کامپوزیتهای زمینه فلزی تقویتشده با گرافن و آزمون فشاری میکرو ستونی با جهت لایه صورت گرفته است. نتایج نشان داده است که کامپوزیت تقویتشده توسط لایه های گرافن ناخالص مقاومت بالاتری (افزایش حدود ۴۰٪ نسبت به مس خالص) دارند. مس تقویت شده با گرافن ناخالص با کسر حجمی ٪۶/۰ اثر گلویی شدن نشان میدهد که منجر به مرحله کرنش-نرم می شود، در حالی که مس تقویت شده با گرافن باکیفیت تقريباً خالص بدون ورود به مرحله گلویی دچار خمش یا شکست برشی می شود [۱۷]. ژائو^۷و همکاران [۱۸] یک آزمون فشاری روی ميكرو ستونها (ألومينيوم/ گرافن اكسيد كاهشيافته) انجام دادند. نتایج آنها نشان داد وجود گرافن در ساختار منجر به بهبود استحکام و چقرمگی می شود. همچنین در طول فرایند تغییر ستون، اثر بار انتقالی بین فصل مشترک لایههای گرافن تراز شده و زمینه فلز در کامپوزیتهای فلز-گرافن نانو چندلایهای، استحکام را افزایش میدهد [۱۹]. علاوه بر این، با استفاده از مزایای ساختارهای نانو چندلایهای، فصل مشترک می تواند به طور مؤثری از انتقال نابجایی ها جلوگیری کند و کامپوزیت استحکام و چقرمگی خوبی را از خود نشان میدهد که مطابق با تحقیقات قبلی است [۲۰].

علاوه بر مطالعات تجربی، برای بررسی خواص مکانیکی، تحقیقات عددی و شبیهسازی متعددی برای آنالیز و ارزیابی میکرو ساختاری کامپوزیتهای آلومینیوم/گرافن انجامشده است. شبیهسازیهای دینامیک مولکولی برای سنتز و توصیف خواص مختلف کامپوزیت

² Yan

³ Li

⁴ Xiong

⁵ Kim

⁶ Feng 7 Zhao

[/] Znao

نانولولههای کربنی و آلومینیوم/گرافن مانند انتقال فاز، تکامل ساختار کریستالی، خواص مکانیکی و پایداری مواد در دما و فشار بالا استفاده شده است. رونگ و همکاران [۲۱[مکانیزم تقویت نانو کامپوزیتهای زمینه تقویتشده با گرافن را با استفاده از شبیهسازیهای دینامیک مولکولی در مقیاس بزرگ بررسی کردند. سیلوستر^۲ و همکاران [٢٢] خواص مكانيكي كاميوزيت آلومينيوم/نانولوله كربن تك ديواره با شبیه سازی دینامیک مولکولی را مورد مطالعه قراردادند. آنها دریافتند که کامپوزیتهای نانولولههای کربنی آلومینیوم در مقایسه با آلومینیوم خالص ازلحاظ مکانیکی بهبودیافتهاند. چوی^۳ و همکاران [۲۳] تأثیر گنجاندن نانولولههای کربنی تک دیواره در زمینه آلومینیوم را بر روی خواص مکانیکی با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی در مقیاس بزرگ بررسی کردند. آنها مشاهده کردند که فشار تنشی، مدول یانگ و چقرمگی بهطور قابل توجهی افزایش می یابد. کومار ۲ [۲۴] اثر نانولولههای کربن تک دیواره و گرافن را بر خواص مکانیکی زمینه فلزی مطالعه کرد. علاوه بر این، تأثیر تجمع صفحات گرافن روی خواص کریستالی و فصل مشترک گرافن و آلومینیوم را مورد مطالعه قراردادند که مشخص شد تجمع و پراکندگی گرافن در زمینه آلومینیوم از اهمیت ویژهای برای بررسی کامل خواص مختلف نانو کامپوزیت برخوردار است [۲۵].

خواص مکانیکی کامپوزیتهای نانو چندلایهای و تغییرات شکل تحتفشار و ضربه مورد بررسی قرار گرفته است [۲۶–۲۸]. محققین دریافتند که حضور گرافن در ساختار روی استحکام، مدول یانگ و کرنش شکست تأثیر گذار است. رضایی خواص مکانیکی افزایشیافته نانو کامپوزیتهای نانو چندلایهای مس-گرافن ناشی از حضور گرافن ناشی از ساختار تغییر شکل یافته در کرنش متفاوت با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی بررسی کرده است. نتایج نشان داد که لایههای گرافن نهتنها استحکام و کرنش شکست را بهبود می دهد، بلکه استحکام شکست و سختی کامپوزیتها را نیز افزایش می دهند [۲۹]، همچنین استفاده از لایههای گرافن با مساحت سطح بزر گتر سبب بهبود خواص مکانیکی می شود [۳۰]. اخیراً ژو^ه و همکاران

- 1 Rong
- 2 Silvestre 3 Choi
- 4 Kumar
- 5 Zhu

[۳۱] تأثیر فاصله صفحات گرافن را روی خواص کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم بررسی نمودند. نتایج نشان داده شد که کاهش فاصله صفحات به علت وجود قفلشدگی نابجاییها، سبب افزایش خواص مکانیکی کامپوزیت میشود. بااینوجود، از آنجا که تجمع به دلیل نسبت سطح به حجم زیاد و نیروهای متقابل ون در والس بین نانوذرات رخ میدهد[۴۱ و ۴۲] تاکنون فاصله بهینه صفحات گرافن و نقش تجمع آنها روی خواص کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم مورد بررسی قرار نگرفته است.

درحالی که اثر افزایش و سفت شدن گرافن با آزمونهای کشش، فشار و شبیه سازی ستونهای میکرو/نانو مطابقت داشته است، اثر فصل مشترک بین گرافن و آلومینیوم در نابجاییهای داخلی فلز، بهویژه نقش تجمع صفحات گرافن روی مکانیزم قفل شدگی نابجاییها بهطور کامل مورد مطالعه قرار نگرفته است. علاوه بر این، مطالعه تجربی مکانیزم تنش انتقالی بین گرافن و فلز مشکل است. اگرچه مطالعات تجربی و دینامیک مولکولی در مورد کامپوزیتهای گرافن-فلز انجام شده است، اما هنوز به طور کامل میکرو تغییرات و مکانیزم اساسی بهبود است کام و انعطاف پذیری کامپوزیتها تشریح نشده است. بهعبارتدیگر وابستگی خواص مکانیکی کامپوزیتها به ساختار لایه یه هنوز به طور کامل میکرو تغییرات و مکانیزم

در این مطالعه، بهمنظور بررسی تأثیر تجمع صفحات گرافن روی خواص زمینه آلومینیوم، خواص کششی کامپوزیت آلومینیوم/ گرافن در فاصلههای مختلفی از لایههای گرافن با استفاده از دینامیک مولکولی مورد مطالعه و ارزیابی قرار گرفته است. بدین منظور صفحات موازی گرافن در فواصل مشخص در زمینه فلز آلومینیوم قرار داده شد و آزمون کشش در راستای عمود بر صفحات گرافن اعمال شد. سپس، اثرات نابجایی در زمینه آلومینیوم در طول تغییر شکل و مراحل اثرات نابجایی ها را محدود کند، بلکه نیروهای درون شبکه در ساختار نانو را نیز تحمل می کند. همهی این موارد منجر به بهبود خواص کامپوزیت آلومینیوم/گرافن می شود. علاوه بر آن، با شروع تجمع صفحات گرافن، به سبب کاهش سطح مؤثر گرافن، استحکام مکانیکی کامپوزیت نانو برای صفحات گرافن کاهش مییابد و درنتیجه فاصله بهینهای



شكل۱. كامپوزيت نانو چندلايه آلومينيوم/گرافن. Fig. 1. Nanolaminated aluminum/graphene composite

۲-روش تحقيق

اتم جاسازی شده برای اتمهای آلومینیوم، E_{Al-Al} ، توسط عبارت زیر داده شده است:

$$E_{Al-Al} = \sum_{i} \varepsilon \left[\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} V(r_{ij}) - c \sqrt{\rho_i} \right] \tag{1}$$

$$V(r_{ij}) = \left(\frac{a}{r_{ij}}\right)^n \tag{(7)}$$

$$p_i = \sum_{j \neq i} \left(\frac{a}{r_{ij}}\right)^m \tag{(7)}$$

که در آن $g \in a$ به ترتیب انرژی برهمکنش و ثابت شبکه را نشان می دهند. $m \cdot n = c$ ثابتهای مثبت اتمهای آلومینیوم هستند. نشان می دهند. $m \cdot n = c$ ثابتهای مثبت اتمهای آلومینیوم هستند. r_{ij} فاصله بین اتمهای i = i آلومینیوم است. (r_{ij}) پتانسیل جفت بین اتمهای و i آلومینیوم و $p_i = g$ چگالی موضعی الکترون اتم iآلومینیوم است. از تابع پتانسیل ایریبو⁷ نیز برای مدل سازی صفحات گرافن استفاده شد [۳۳]. پتانسیل ایریبو شامل سه قسمت است که شبیه سازی دینامیک مولکولی ابزار قدرتمندی برای محاسبه نیروهای پیوندی در فصل مشترک مواد است [۴۳]. بدین منظور از شبیهسازیهای دینامیک مولکولی برای بررسی کامپوزیتهای آلومینیوم/گرافن با استفاده از نرمافزار لمپس^۱ استفاده شد. در مدلهای والیه، اتمهای آلومینیوم در یک ساختار شبکه مکعبی وجوهپر با اندازه شبکهه / ۴ آنگستروم و صفحات گرافن بدون هیچ عیبی در نظر گرفته شد. بر این اساس، مدل شبیهسازی حاوی حدود ۲۰۰۰ اتم آلومینیوم شد. بر این اساس، مدل شبیهسازی حاوی حدود ۲۰۰۰ اتم آلومینیوم در شکل ۱ نشان داده شده است. مستطیلهای خطچین، نماینده منجم مدل میباشد که برای مدلسازی و شبیهسازی استفاده گردید. اندازه پیکربندی مدل شبیهسازی، ۳m^۳ ۷×۹×۵۱ در نظر گرفته شد. صفحات گرافن با اندازه ۳n^۳ ۵×۹ در زمینه آلومینیوم قرار داده شد. اندازه پیکربندی مدل شبیهسازی، ۳m^۳ ۷×۹×۵۱ در نظر گرفته شد. مفحات گرافن با اندازه سا^۳ ۵×۹ در زمینه آلومینیوم قرار داده شد. اندرکنش میان اتمهای آلومینیوم با استفاده از تابع پتانسیل روش

³ Adaptive intermolecular reactive empirical bond order

¹ Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)

² Embedded atom model



شکل۲. کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن تحت بار گزاری کششی در راستای *y*. Fig. 2. Nanolaminated aluminum/graphene composite under tensile load in the y-direction.

است. نشان داده شده است که پتانسیل ایریبو دقیقاً تعامل پیوند-پیوند بین اتمهای کربن را به همراه شکستن پیوند و شکل گیری مجدد پیوند به دست میآورد [۳۴]. علاوه بر این، نیروهای واندروالسی با استفاده از تابع پتانسیل لونارد-جونز (E_{LJ}) و پارامترهای مربوط به فصل مشترک آلومینیوم-گرافن برابر با $\mathcal{E}_{AI-G} = \cdot/\cdot \$ و $\mathcal{F}_{AI-G} = \pi/\cdot \$

$$E_{LJ} = 4\varepsilon_{Al-G} \left[\left(\frac{\sigma_{Al-G}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{Al-G}}{r} \right)^{6} \right]$$
(8)

از تنش ویریال برای محاسبهی تنش استفاده شد [۳۵]. مؤلفههای تانسور تنش ویریال برای سیستمی از اتمها بهصورت زیر تعریف میشود جملهی اول از ارتعاش حرارتی اتمها و جملهی دوم ناشی از نیروهای بیناتمی است:

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left[-\sum_{i} m_{i} v_{i}^{\alpha} v_{i}^{\beta} + \frac{1}{2} \sum_{i} \sum_{j \neq i} F_{ij}^{\alpha} r_{ij}^{\beta} \right]$$
(Y)

 F_{ij}^{lpha} ، که در آن، V حجم سیستم، m_i و m_i جرم و سرعت اتم، F_{ij}^{lpha} نیروی بیناتمی است. همانطور که در شکل ۲ مشاهده می شود، آزمون کشش به صورت

پتانسیل ربیو،
$$E^{MP}_{ij}$$
 تابع مورس نشانگر برهمکنشهای E^{REBO}_{ij} فاصله دور و $E^{TORSION}_{kijl}$ نشانگر برهمکنشهای پیچشی است.

$$E = \frac{1}{2} \sum_{i} \sum_{j \neq i} E_{ij}^{REBO} + E_{ij}^{MP} + \sum_{k \neq i, j} \sum_{l \neq i, j, k} E_{kijl}^{TORSION}$$
([¢])

پتانسیل ربیو شامل هر دو قسمت تشکیل و شکست بین اتمهای کربن است، همانطور که در زیر آورده شده است:

$$E_{ij}^{REBO} = V_{ij}^{R}(r_{ij}) + b_{ij}V_{ij}^{A}(r_{ij})$$
(\Delta)

که در آن $V_{ij}^{R}(r_{ij})$ و $V_{ij}^{A}(r_{ij})$ به ترتیب عبارات دافعه و جاذبه میباشند. همچنین b_{ij} مربوط به تشکیل یا گسست پیوند است. ازآنجاکه پتانسیل ربیو فقط برای اندرکنشهای اتمهای کربن در ۲ آنگستروم از یکدیگر است از پتانسیل ایریبو همچنین شامل پتانسیل مورس برای فواصل بیشتر از ۲ آنگستروم و کمتر از شعاع قطع استفاده شده است. برای حذف اثرات غیر فیزیکی در پتانسیل ایریبو، شعاع قطع برای پتانسیل ربیو دو آنگستروم در نظر گرفتهشده است. مطالعات نشان داده است که پتانسیل ایریبو برای شبیه سازی دینامیک مولکولی برای فولرن، نانولولههای کربنی و گرافن مناسب







شکل ۴. نابجاییهای کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن در کرنش ۰/۱. Fig. 4. Dislocation of nanolaminated aluminum/graphene composite in strain 0/1.



شکل ۵. تغییر شکل کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن در ناحیه پلاستیک در کرنش ۰/۱۲. پیکانهای سبز رنگ جهت تشکیل پلههای سطحی را نشان میدهند.

Fig. 5. Deformation of nanolaminated aluminum / graphene composite in the plastic region at a strain of 0/12. Indicate green arrows to form surface steps.

دماثابت و فشارثابت-دماثابت به ترتیب بر اساس ترموستات نوز-هوور و باروستات نوز-هوور در فشار صفر در دمای ۳۰۰ کلوین به مدت ۱۰۰ ps صورت گرفت. گامهای زمانی روی ۰/۰۰۱ تنظیم شد. در مدلهای دینامیک مولکولی زمانی که انرژی پتانسیل سیستم به تعادل رسیده شده باشد میکرو ساختار بهینه میشود. پسازآن، افقی (در راستای ۷) روی نمونهها اعمال شده است. برای آمادهسازی ساختار شبیهسازی، ابتدا کل سیستم بهوسیله شرایط تناوب دورهای تحت کمینهسازی انرژی با روش گرادیان مزدوج^۱ قرار گرفت. سپس، فرایند بهینهسازی ترمودینامیکی تحت هنگردهای حجم^ثابت-

¹ Conjugate gradient

كرنش تسليم	استحکام تسلیم (GPa)	كامپوزيت
•/• ۵	11/88	فاصله صفحات اوليه گرافن ۴ آنگستروم
•/• ۵	11/77	فاصله صفحات اولیه گرافن ۶ آنگستروم
•/• ۵	۱•/٨١	فاصله صفحات اولیه گرافن ۸ آنگستروم
•/•۶۵	14/49	فاصله صفحات اوليه گرافن ۱۰ آنگستروم
•/•۶۵	14/29	فاصله صفحات اوليه گرافن ۱۲ آنگستروم
•/• ۵	۱۰/۲۶	فاصله صفحات اوليه گرافن ۱۴ آنگستروم

جدول۱. خواص كامپوزیتها نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن در نقطه تسلیم. Table 1. Properties of nanolaminated aluminum / graphene composites at yield point.



شکل ۶. انتقال بار کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن در ناحیه پلاستیک در کرنش ۰۰/۱۲. Fig. 6. Load transfer of nanolaminated aluminum / graphene composite in plastic area at a strain of 0/12.



شکل ۷. توزیع تنش در راستای کشش کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن. Fig. 7. Stress distribution in the direction of tensile strength of nanolaminated aluminum / graphene composite.

ساختارهای تغییر شکل یافته استفاده شد [۳۶].

شکل ۳ نمودارهای تنش-کرنش نمونههای تحت بارگذاری کششی برای فاصله صفحات مختلف گرافن را نشان میدهد. با توجه به شکلهای ۳ و ۴، تمامی نمونهها در ابتدا بهطور الاستیک کشیده شده و سپس تغییر شکل پلاستیک آن

یک کشش تک محوری در جهت محور y با منبسط کردن (کشیدن) تدریجی جعبه شبیهسازی در نرخ کرنش ^۱-۱۰^۸ اعمال شد. شرایط مرزی در راستای x و z تناوبی و در راستای کشش آزاد فرض شد. ۳ - **نتایج و بررسی** پس از شبیهسازیها، از الگوریتمهای لغزش نابجایی در نرمافزار اویتو ۲ برای آشکار کردن و تجزیهوتحلیل حرکتهای نابجاییها در

1 Dislocation extraction algorithm

² Open Visualization Tool



شکل ۸. نابجاییهای کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن در کرنش ۱۲/۰۰ دایرههای خطچین قرمزرنگ نشاندهنده قفلشدگیهای نابجایی میباشد. Fig. 8. Dislocation of nanolaminated aluminum/graphene composite in strain 0/12. The red dashed circles indicate dislocation-blocking.

صفحات گرافن از ۱۴ به ۱۰ آنگستروم، محدوده ی الاستیک به مقدار ۱۳ درصد افزایش می یابد و تغییر شکل پلاستیک در کرنش بیشتری (۰/۰۶۵) اتفاق می افتد. این روند در فواصل ۱۴–۱۰ آنگستروم صفحات گرافن دیده می شود و استحکام تسلیم ماده به مقدار ۳۰ درصد افزایش می یابد. از طرفی دیگر در فواصل کمتر از ۱۰ آنگستروم به سبب تجمع صفحات گرافن، استحکام تسلیم و کرنش تسلیم ماده شروع به کاهش کرده است. با بررسی نمودارهای تنش-کرنش مشخص شد که فواصل مختلف صفحات گرافن در زمینه آلومینیوم تأثیر زیادی بر تغییرات مدول الاستیک کامپوزیت در نقطهی تسلیم با تشکیل و انتشار نابجاییها صورت گرفته است. برای تمامی فواصل گرافن، فرآیند تسلیم با تشکیل نابجایی موضعی شاکلی (خط سبزرنگ) در لایههای فلزی شروع و با رسیدن به لایههای گرافن متوقف می گردد. نابجایی اتمها در راستای سطح لغزش در ناحیه پلاستیک موجب تسلیم ماده و درنتیجه تغییر شکل پلاستیک می شود و افزایش مجدد تنش بعد از هر نقطه اوج، مقاومت ماده در مقابل تغییر شکل پلاستیک بعدی را آشکار می سازد. نتایج به دست آمده وابستگی شدید تغییر رفتار الاستیک -پلاستیک ماده ی کامپوزیت را نسبت به فاصله صفحات گرافن نشان می دهد. با توجه به جدول ۱، با کاهش فاصله

آلومينيوم /گرافن نداشته است.

شکل ۵ تغییر شکل و میدان کرنش برشی متناظر با آن را برای آزمایش کشش نشان میدهد. برای فاصله صفحات کمتر از ۱۰ آنگستروم، به علت تجمع صفحات، تشکیل پله سطحی کاملاً ایجاد نشده است. این موضوع، تأثیر میدان نیروی اطراف فاز تقویت کننده ناشی از برهمکنش اتمهای زمینه در تغییر شکل آن را نشان میدهد. پلههای سطحی برای صفحات گرافن ۲۴–۱۰ آنگستروم بهوضوح قابل مشاهده است. در این فواصل، نمونهها از طریق لغزش سطحی بهطور پلاستیک تغییر شکل میدهند که باعث ایجاد پلههای سطحی پایدار لایههای گرافن میشوند. لغزش از طریق حرکت نابجایی کامل شبکه مکعبی وجوه پر بهوفور دیده میشود. از آنجایی که نابجاییها بهطور آزاد حرکت کرده و از سطح میگذرند باعث ایجاد پلههای سطحی پایداری میشوند. لذا این فرایند تغییر شکل، برگشت پذیر نیست [۳۸].

شکل ۶ تغییر شکل پلاستیک در بارگذاری کششی روی نمونههای كامپوزيت نانو چندلايه آلومينيوم/گرافن در فاصله صفحات مختلف را نشان میدهد. رنگ سبز پررنگ اتمهای گرافن بهخوبی آشکار است. این تغییر رنگ، درنتیجه مشارکت آنها در تحمل بار وارده و تغییر شکل زیاد است. اتمهای آلومینیوم در مجاور فاز تقویت کننده که دارای رنگ سبز کمرنگتر میباشند که تأثیر جاذبهی فصل مشترک بین زمینه و تقویتکننده را نشان میدهد. مشخص است هیچگونه شکستی در پیوندهای کووالانسی بین اتمهای گرافن به وجود نیامده است. با توجه به مکانیزم تأخیر برشی'، هنگامی که فاصله صفحات کاهش می یابد؛ در حجم مشخصی لایههای گرافن افزایشیافته که این امر سبب میشود كامپوزيت نانو چندلايه آلومينيوم/گرافن نيروهاي بالاتري را تحمل كند [٣٩]. بنابراين، كامپوزيت بافاصله صفحات كمتر بدون رسيدن به نقطه تسلیم میتواند نیروهای بالاتری را تحمل کند. علاوه بر مکانیزم نابجاییها، مکانیزم تأخیر برشی نیز نقش مهمی در تقویت كامپوزيتهاي آلومينيوم/گرافن دارد [۳۱]. مكانيزم تأخير برشي بهوسیله انتقال بار از زمینه به تقویت کننده از طریق تنش برشی

در شکل ۷ توزیع تنش در جهت راستای کشش برای کامپوزیت آلومینیوم/گرافن تحت کرنشهای کششی مختلف (۰/۰۱ و ۰/۱۲) نشان داده شده است. انتقال بار مؤثر زمینه آلومینیوم به لایههای گرافن علاوه بر اینکه به دلیل مساحت سطح ویژه بالای ذاتی لایه گرافن است به فاصله صفحات گرافن نیز وابسته است. با افزایش تنش، درصورتی که سطح مؤثر گرافن بالا باشد و انتقال بار بەدرستى صورت بگيرد، كانتور تنش سطح گرافن بايد افزایش تنش را بر روی سطح گرافن با افزایش کرنش در کامپوزیت نشان دهد. برای فاصله صفحات ۸-۴ آنگستروم بر اساس کانتور تنش، به علت تجمع صفحات گرافن و کاهش سطح مؤثر گرافن، انتقال بار بهطور مؤثر روی سطح گرافن پخش نشده است. برخلاف آن، در فواصل ۱۴–۱۰ آنگستروم توزیع بار بهطور مؤثری روی سطح گرافن پخششده است. برای فاصله ۱۴ آنگستروم به سبب افزایش فاصله، صفحات نتوانستهاند بار را بهطور کامل تحمل کنند و این امر سبب شده تنها در فاصله صفحات ۱۰ و ۱۲ آنگستروم پلههای سطحى پايدار صفحات گرافن توسط نابجايىها ايجاد شود.

بهعنوان نتیجه گیری، تغییر شکل پلاستیک با تشکیل نابجایی در لایههای فلزی اتفاق میافتد، لیکن تغییر شکلهای موضعی توسط لایههای گرافن متوقف و از انتشار آنها در بقیهی ماده جلوگیری میکند. با افزایش بار اعمالی، نابجاییهای موضعی شاکلی به دلیل مانع مؤثر لایههای گرافن نمیتوانند در ماده منتشر شوند. لایههای گرافن بهشدت تغییر شکل میدهند، اما به دلیل پیوندهای کووالانسی محکم بین آنها در ماده نفوذ نمیکنند. این امر را میتوان به دو ویژگی، سفتی خمشی ضعیف و پیوندهای کووالانسی درون صفحهای مستحکم ذاتی گرافن نسبت داد.

به دلیل این که حجم کلی زمینه آلومینیوم در مدلهای آلومینیوم / گرافن ثابت است، نقش لایههای گرافن در کامپوزیتهای نانو چندلایه آلومینیوم /گرافن می تواند به وسیله طول خط لغزش و طول نابجاییها نیز بررسی شود [۳۱]. به هم خوردگی و تکثیر نابجاییها در طول تغییر شکل، منجر به افزایش تدریجی دانسیته شبکه نابجاییها

سطحی ایجاد میشود؛ بنابراین، سهم تقویت کننده در کامپوزیت آلومینیوم/گرافن ساخته شده توسط تنش برشی سطحی مورد بررسی قرار گرفت.

¹ Shear lag

می شود. خطوط نابجایی در نقطه شکست در کامپوزیت آلومینیوم/ گرافن در شکل ۸ مشخص است. خطوط سبز، خطوط آبی و خطوط قرمز به ترتیب نمایانگر نابجاییهای شکلی، کامل و دیگر نابجاییها می اشند. در کامپوزیتهای آلومینیوم/گرافن، گسترش و لغزش نابجاییها در فصل مشترک بین زمینه آلومینیوم و گرافن مسدود می شود که موانعی برای حرکت نابجاییها است.

مشاهده می شود نابجایی ها علاوه بر ایجاد در فصل مشترک در داخل آلومينيوم نيز ظاهرشدهاند. نابجايىها توانايى نفوذ به داخل فصل مشترک را ندارند، بنابراین تغییر شکل پلاستیک در هر یک از لایههای آلومینیوم محدود می شود. نابجاییها توسط گرافن بریده و در فصل مشترک انباشته می شوند. در فواصل کمتر از ۱۰ آنگستروم صفحات گرافن به علت وجود نیروی جاذبه واندروالسی تمایل به تجمع صفحات گرافن افزایش مییابد. درنتیجه، مساحت سطح ویژه در دسترس گرافن کاهش مییابد. در این فواصل سطح گرافن توانایی کمتری برای بریدن نابجاییها دارد. در فواصل صفحات گرافن ۸-۴ آنگستروم میتوان کاهش نابجاییهای بریدهشده در فصل مشترک گرافن و آلومینیوم را مشاهده نمود که سبب کاهش طول نابجاییها شده است. کامپوزیت بافاصله صفحات ۱۰ و ۱۲ آنگستروم فصل مشترک بیشتری دارد که باعث بیشتر قفل شدن نابجاییها مىشود. ازاينرو، انتشار نابجايىها براى كامپوزيتهاى بافاصله صفحه بیشتر از ۱۰ آنگستروم بسیار سخت می شود که منجر به بهبود خواص مكانيكي كامپوزيت آلومينيوم/گرافن مي شود. از طرفي براي نمونه کامیوزیت در فاصله صفحات ۱۴ آنگستروم به علت نفوذ نابجایی در فصل مشترک، تعداد بریده شدن نابجاییها در فصل مشترک گرافن اًلومینیوم کاهشیافته است. تنها میتوان طولهای کم نابجایی را در فصل مشترک این نمونه مشاهده نمود. چنین رفتاری منجر به کاهش تنش تسلیم در این نمونه شده است. درنتیجه فاصله صفحات گرافن در یک حالت بهینه (در این مطالعه ۱۰ و ۱۲ آنگستروم) می توانند بیشترین تنش تسلیم را داشته باشند. به دلیل وجود نابجاییها، تغییر شکل پلاستیک نیازی به لغزش در کل سطح لغزش ندارد، در عوض، لغزش از طريق نابجایی بر روی يکطرف از سطح كريستال بهطرف دیگر انجام می پذیرد و درنهایت به طور کامل سطح فصل مشترک را در برمی گیرد. به این ترتیب، لغزش نابجایی، توانایی لغزش نسبی در تمام فصل مشترک را دارد. نیروی مورد نیاز برای لغزش نابجاییها بسیار

كمتر از لغزش تمام سطح است. مجموع طول خطوط نابجایی برای کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن در کرنش مشخص ۰/۱۲ در فواصل صفحه ۱۰ و ۱۲ آنگستروم به ترتیب برابر با ۷۳۶۵۷۲ و ۶۹۴۵۶۳ آنگستروم و برای فاصله صفحات گرافن ۴، ۶، ۸ و ۱۴ آنگستروم به ترتیب برابر ۲۴۶۵۳۲،۲۵۵۸۶۳،۲۵۶۳۳ و ۵۳۲۳۶۹ آنگستروم است. درنتیجه، در فواصل کمتر از ۱۰ آنگستروم مجموع طول خطوط نابجاییها کاهشیافته است و سبب کاهش ناحیه الاستيك نمونهها شده است. اين امر نشان ميدهد كه فواصل صفحات و تجمع گرافن بهطور قابل توجهی روی مکانیزم قفل کردن نابجایی اثر گذار است. همچنین، همان طور که در شکل نشان داده شده، تعداد کمی خطوط نابجایی طولانی در آلومینیوم بافاصله صفحات گرافن ۴، ۶ و ۱۴ آنگستروم رخداده و مجموع طول های بلند نابجایی ها اندک است. از طرف دیگر، خطوط نابجایی بیشتر در کامپوزیتهای آلومینیوم/گرافن ۱۰ و ۱۲ آنگستروم ایجادشده و بهراحتی با یکدیگر ادغامشدهاند. با توجه به حضور لایههای گرافن که توانایی مؤثر در قفل کردن نابجایی دارند، نابجاییهای با درگیری بالا در نمونهها می توان یافت؛ بنابراین، کامیوزیتها به خصوص در فواصل صفحات ۱۰ و ۱۲ آنگستروم یک استحکام کششی بالایی از خود نشان میدهند.

۴-نتیجهگیری

در این پژوهش خواص مکانیکی نانو کامپوزیتهای چندلایه آلومینیوم/گرافن در حین اعمال کشش تکمحوری با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی مورد بررسی و ارزیابی قرار گرفت. اثر فاصله صفحات مختلف گرافن و تجمع آنها روی خواص کامپوزیتها با استفاده از محاسبه نمودارهای تنش-کرنش، ارزیابی میکرو ساختاری، مشخصه یابی لغزش نابجایی و مکانیزم قفل شدن نابجایی در کامپوزیت تشریح شد. نتایج مطالعه به شرح زیر است:

۱- لغزش نابجاییها بهوسیله لایههای گرافن در کامپوزیتهای
 نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن محدود و انباشته میشوند و منجر به
 افزایش دانسیته نابجایی در فصل مشترک میشوند.

۲- کامپوزیتهای نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن، استحکام و
 کرنش تسلیم بالاتری را ناشی از افزایش دانسیته نابجایی، کاهش نرخ
 کرنش پلاستیک و اثر انتقالی تنش سطحی دارند. این موضوع منجر
 به افزایش ظرفیت تحمل بار و انعطاف پذیری کامپوزیت می شود.

- [9] S. Zhang, P. Huang, F. Wang, Graphene-boundary strengthening mechanism in Cu/graphene nanocomposites: A molecular dynamics simulation, Materials & Design, 108555 (2020) 190.
- [10] X. Liu, F. Wang, W. Wang, H. Wu, Interfacial strengthening and self-healing effect in graphene-copper nanolayered composites under shear deformation, Carbon, (2016) 107 688-680.
- [11] X. Xia, Y. Su, Z. Zhong, G.J. Weng, A unified theory of plasticity, progressive damage and failure in graphenemetal nanocomposites, International journal of plasticity, 80-58 (2017) 99.
- [12] S. Yan, S. Dai, X. Zhang, C. Yang, Q. Hong, J. Chen, Z. Lin, Investigating aluminum alloy reinforced by graphene nanoflakes, Materials Science and Engineering: A, 612 444-440 (2014).
- [13] Z. Li, Q. Guo, Z. Li, G. Fan, D.-B. Xiong, Y. Su, J. Zhang, D. Zhang, Enhanced mechanical properties of graphene (reduced graphene oxide)/aluminum composites with a bioinspired nanolaminated structure, Nano letters, (12)15 8083-8077 (2015).
- [14] D.-B. Xiong, M. Cao, Q. Guo, Z. Tan, G. Fan, Z. Li, D. Zhang, High content reduced graphene oxide reinforced copper with a bioinspired nano-laminated structure and large recoverable deformation ability, Scientific reports, 8-1 (2016) (1)6.
- [15] Y. Kim, J. Lee, M.S. Yeom, J.W. Shin, H. Kim, Y. Cui, J.W. Kysar, J. Hone, Y. Jung, S. Jeon, Strengthening effect of single-atomic-layer graphene in metal–graphene nanolayered composites, Nature communications, 4 2114 (2013).
- [16] S. Feng, Q. Guo, Z. Li, G. Fan, Z. Li, D.-B. Xiong, Y. Su, Z. Tan, J. Zhang, D. Zhang, Strengthening and toughening mechanisms in graphene-Al nanolaminated composite micro-pillars, Acta Materialia, 108-98 (2017) 125.
- [17] Z. Li, X. Fu, Q. Guo, L. Zhao, G. Fan, Z. Li, D.-B. Xiong,
 Y. Su, D. Zhang, Graphene quality dominated interface deformation behavior of graphene-metal composite: the defective is better, International Journal of Plasticity, 111 265-253 (2018).

۳-مکانیزم قفل شدن نابجاییها یک اثر قابل توجه نشان میدهد: کامپوزیتهای نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن باکم شدن فاصله صفحات عملکرد بهتری دارد. این امر در فواصل کمتر از ۱۰ آنگستروم صفحات گرافن به سبب تجمع صفحات گرافن محدود میشود. درنتیجه محدود بهینهای برای صفحات گرافن وجود دارد که در این پژوهش فاصله ۱۲-۱۰ آنگستروم به دست آمد.

مراجع

- [1] Z. Hu, G. Tong, D. Lin, C. Chen, H. Guo, J. Xu, L. Zhou, Graphene-reinforced metal matrix nanocomposites-a review, Materials Science and Technology, (2016) (9)32 953-930.
- [2] J. Liu, U. Khan, J. Coleman, B. Fernandez, P. Rodriguez, S. Naher, D. Brabazon, Graphene oxide and graphene nanosheet reinforced aluminium matrix composites: powder synthesis and prepared composite characteristics, Materials & design, 94-87 (2016) 94.
- [3] S. Shin, H. Choi, J. Shin, D. Bae, Strengthening behavior of few-layered graphene/aluminum composites, Carbon, 82 151-143 (2015).
- [4] K. Duan, L. Li, Y. Hu, X. Wang, Interface mechanical properties of graphene reinforced copper nanocomposites, Materials Research Express, 115020 (2017) (11)4.
- [5] Ö. Güler, N. Bağcı, A short review on mechanical properties of graphene reinforced metal matrix composites, Journal of Materials Research and Technology, (2020).
- [6] S. Gong, H. Ni, L. Jiang, Q. Cheng, Learning from nature: constructing high performance graphene-based nanocomposites, Materials Today, 219-210 (2017) (4)20.
- [7] J.C. Meyer, A.K. Geim, M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov, T.J. Booth, S. Roth, The structure of suspended graphene sheets, Nature, 63-60 (2007) (7131)446.
- [8] P. Liu, Z. Jin, G. Katsukis, L.W. Drahushuk, S. Shimizu, C.-J. Shih, E.D. Wetzel, J.K. Taggart-Scarff, B. Qing, K.J. Van Vliet, Layered and scrolled nanocomposites with aligned semi-infinite graphene inclusions at the platelet limit, Science, 367-364 (2016) (6297)353.

of chirality and number of graphene layers on the mechanical properties of graphene-embedded copper nanocomposites, Computational Materials Science, 117 299-294 (2016).

- [28] X. Liu, F. Wang, H. Wu, W. Wang, Strengthening metal nanolaminates under shock compression through dual effect of strong and weak graphene interface, Applied Physics Letters, 231901 (2014) (23)104.
- [29] R. Rezaei, Tensile mechanical characteristics and deformation mechanism of metal-graphene nanolayered composites, Computational Materials Science, (2018) 151 188-181.
- [30] Y. Rong, H. He, L. Zhang, N. Li, Y. Zhu, Molecular dynamics studies on the strengthening mechanism of Al matrix composites reinforced by grapnene nanoplatelets, Computational Materials Science, 56-48 (2018) 153.
- [31] J.-Q. Zhu, X. Liu, Q.-S. Yang, Dislocation-blocking mechanism for the strengthening and toughening of laminated graphene/Al composites, Computational Materials Science, 81-72 (2019) 160.
- [32] M. Mendelev, M. Kramer, C.A. Becker, M. Asta, Analysis of semi-empirical interatomic potentials appropriate for simulation of crystalline and liquid Al and Cu, Philosophical Magazine, 1750-1723 (2008) (12)88.
- [33] T.C. O'Connor, J. Andzelm, M.O. Robbins, AIREBO-M: A reactive model for hydrocarbons at extreme pressures, The Journal of chemical physics, 024903 (2015) (2)142.
- [34] D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott, A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons, Journal of Physics: Condensed Matter, 783 (2002) (4)14.
- [35] A.P. Thompson, S.J. Plimpton, W. Mattson, General formulation of pressure and stress tensor for arbitrary many-body interaction potentials under periodic boundary conditions, The Journal of chemical physics, 154107 (2009) (15)131.
- [36] A.S. Visualization, analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool Modelling Simul, Mater. Sci. Eng, 015012 (2010) 18.

- [18] L. Zhao, Q. Guo, Z. Li, Z. Li, G. Fan, D.-B. Xiong, Y. Su, J. Zhang, Z. Tan, D. Zhang, Strain-rate dependent deformation mechanism of graphene-Al nanolaminated composites studied using micro-pillar compression, International Journal of Plasticity, 140-128 (2018) 105.
- [19] W. Zhou, Y. Fan, X. Feng, K. Kikuchi, N. Nomura, A. Kawasaki, Creation of individual few-layer graphene incorporated in an aluminum matrix, Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, 177-168 (2018) 112.
- [20] X. Mu, H. Cai, H. Zhang, Q. Fan, Z. Zhang, Y. Wu, Y. Ge, D. Wang, Interface evolution and superior tensile properties of multi-layer graphene reinforced pure Ti matrix composite, Materials & Design, -431 (2018) 140 441.
- [21] Y. Rong, H. P. He, L. Zhang, N. Li, Y. C. Zhu, Molecular dynamics studies on the strengthening mechanism of Al matrix composites reinforced by grapnene nanoplatelets, Computational Materials Science, 56-48 (2018) 153.
- [22] N. Silvestre, B. Faria, J.N.C. Lopes, Compressive behavior of CNT-reinforced aluminum composites using molecular dynamics, Composites Science and Technology, (2014) 90 24-16.
- [23] B.K. Choi, G.H. Yoon, S. Lee, Molecular dynamics studies of CNT-reinforced aluminum composites under uniaxial tensile loading, Composites Part B: Engineering, 125-119 (2016) 91.
- [24] S. Kumar, Graphene Engendered aluminium crystal growth and mechanical properties of its composite: An atomistic investigation, Materials Chemistry and Physics, 48-41 (2018) 208.
- [25] S. Kumar, S.K. Pattanayek, S.K. Das, Reactivity-Controlled Aggregation of Graphene Nanoflakes in Aluminum Matrix: Atomistic Molecular Dynamics Simulation, The Journal of Physical Chemistry C, -18017 (2019) (29)123 18027.
- [26] R. Rezaei, C. Deng, H. Tavakoli-Anbaran, M. Shariati, Deformation twinning-mediated pseudoelasticity in metal-graphene nanolayered membrane, Philosophical Magazine Letters, 329-322 (2016) (8)96.
- [27] K. Duan, F. Zhu, K. Tang, L. He, Y. Chen, S. Liu, Effects

micropillars: grain boundary effects, International Journal of Plasticity, 17-1 (2013) 50.

- [41] H. Daneshmand, M. Rezaeinasab, M. Asgary, Wettability alteration and retention of mixed polymer-grafted silica nanoparticles onto oil-wet porous medium, Petroleum Science, (2021).
- [42] H. Daneshmand, M. Araghchi, M. Asgary, A spray pyrolysis method for fabrication of superhydrophobic copper substrate based on modified-alumina powder by fatty acid, Journal of Particle Science & Technology, (1)6 36-25 (2020).
- [43] H. Daneshmand, M. Araghchi, M. Asgary, M. Karimi, M. Torab-Mostaedi, New insight into adsorption mechanism of nickel-ammonium complex on the growth of nickel surfaces with hierarchical nano/microstructure, Results in Surfaces and Interfaces, (100014 (2021.

- [37] R. Rezaei, H. Tavakoli-Anbaran, M. Shariati, Mechanical Characteristics and Failure Mechanism of Nano-Single Crystal Aluminum Based on Molecular Dynamics Simulations: Strain Rate and Temperature Effects, Journal of Solid Mechanics, 801-794 (2017) (4)9.
- [38] 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, 1741-1733 (2018) (12)33.
- [39] V. Palermo, I.A. Kinloch, S. Ligi, N.M. Pugno, Nanoscale mechanics of graphene and graphene oxide in composites: a scientific and technological perspective, Advanced Materials, 6238-6232 (2016) (29)28.
- [40] J. Zhang, G. Liu, J. Sun, Strain rate effects on the mechanical response in multi-and single-crystalline Cu

جگونه به اين مقاله ارجاع دهيم H. Daneshmand, M. Karimi, M. Araghchi, M. Asgari, Effect of Graphene Sheets Aggregation on The Dislocation-Blocking Mechanism of Nanolaminated Aluminum/Graphene Composite: Molecular Dynamics Simulation Study, Amirkabir J. Mech Eng., 53(8) (2021) 4649-4664. DOI: 10.22060/mej.2021.18509.6831



بی موجعه محمد ا