



## تأثیر تجمع صفحات گرافن روی مکانیزم قفل شدن نابجایی‌ها در کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن: مطالعه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

حمید دانشمند، میثم کریمی\*، مسعود عراقچی، مسعود عسگری

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

### تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۳۹۹/۰۳/۰۹  
بازنگری: ۱۳۹۹/۱۲/۲۸  
پذیرش: ۱۴۰۰/۰۲/۲۳  
ارائه آنلاین: ۱۴۰۰/۰۲/۲۵

### کلمات کلیدی:

نانو کامپوزیت‌های چندلایه آلومینیوم/گرافن  
قفل‌شدگی نابجایی  
دینامیک مولکولی  
تجمع صفحات گرافن

**خلاصه:** نانو ساختارهای چندلایه آلومینیوم/گرافن دارای اثر تقویتی و سفت کننده بسیار خوبی در کامپوزیت‌های آلومینیوم می‌باشند. لایه‌های گرافن به‌طور مؤثر مانع از رشد و حرکت نابجایی‌ها در زمینه آلومینیوم می‌شوند؛ بنابراین، خطوط نابجایی بیشتر و کوتاه‌تر در زمینه آلومینیوم بین لایه‌های گرافن رخ می‌دهد. در این مقاله، بارگذاری کششی بر روی نانو کامپوزیت‌های چندلایه آلومینیوم/گرافن با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای مطالعه مکانیزم قفل‌شدگی نابجایی‌ها و اثر تقویتی و سفت‌کنندگی 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 انتقال تنش برشی است. علاوه بر این، اثرات تقویتی و سفت‌کنندگی به‌عنوان تابعی از فاصله بین صفحات گرافن (فاصله صفحات ۱۴-۴ آنگستروم) نیز مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که فاصله صفحات گرافن نقش مؤثری در ایجاد مکانیزم قفل‌شدگی نابجایی‌ها در زمینه آلومینیوم دارند. کاهش صفحات گرافن سبب افزایش خواص مکانیکی زمینه آلومینیوم به سبب ایجاد مکانیزم قفل‌شدگی نابجایی می‌شود که این امر می‌تواند با شروع تجمع صفحات گرافن محدود شود. در نتیجه پله‌های سطحی پایدار در فاصله ۱۲-۱۰ آنگستروم بین صفحات گرافن توسط نابجایی‌ها با استحکام تسلیم حدودی ۱۴ GPa و کرنش تسلیم ۰/۰۶۵ به دست آمد.

### ۱-مقدمه

مناسی به‌عنوان تقویت‌کننده است [۴]. نانو کامپوزیت آلومینیوم/گرافن در مقایسه با آلومینیوم خالص خواص بسیار خوبی از جمله 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 مختلفی از جمله اصلاح ریزساختارها، افزایش دمای تبلور، انتقال تنش در حین بارگیری و موارد دیگر می‌شود. بررسی پراکندگی و تجمع نانو ذرات گرافن در زمینه آلومینیوم در ساخت نانو کامپوزیت آلومینیوم / گرافن با کارایی بالا بسیار مهم است [۶]. با این حال، گرافن به دلیل سختی زیاد درون صفحه‌ای که همراه با سختی خمشی مقدار کم

کامپوزیت‌های زمینه آلومینیوم به دلیل مقاومت به سایش و نسبت استحکام به وزن بالا به‌طور وسیعی در صنایع هوافضا، اتومبیل و غیره استفاده می‌شوند [۱]. نوووسلوف<sup>۱</sup> و همکاران [۲] برای اولین بار از گرافن تک لایه به‌عنوان تقویت‌کننده در کامپوزیت‌های زمینه آلومینیوم استفاده کرده‌اند. در تحقیقات صورت گرفته پیشنهاد شده است که استفاده از گرافن به‌جای نانولوله کربن اثر بیشتری به‌عنوان تقویت‌کننده روی فاز زمینه دارد [۳]. گرافن به‌عنوان یک ماده تک لایه به دلیل هندسه دوبعدی و خصوصیات مکانیکی فوق‌العاده همچون استحکام بالا (۱۳۰ GPa) و مدول یانگ (TPa) (۱ ماده

<sup>1</sup>Novoselov

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



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

بازده استحکام کامپوزیت‌ها به شدت تحت تأثیر نحوه قرار گرفتن عامل تقویت‌کننده 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 به عنوان تقویت‌کننده 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 می‌کنند، در حالی که لایه‌های گرافن نابجایی‌های زمینه آلومینیوم را محدود می‌کنند. این امر سبب تقویت قابل توجهی در خواص مکانیکی کامپوزیت می‌شود [۱۰].

برای دستیابی به خواص مکانیکی کامپوزیت‌های نانو چندلایه‌ای آلومینیوم/گرافن، تحقیقات آزمایشگاهی متعددی انجام شده است. به عنوان مثال، کامپوزیت‌های پایه آلومینیوم تقویت‌شده با صفحات گرافن، با موفقیت توسط شین<sup>۱</sup> 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 انعطاف‌پذیری دشوار است [۱۱]، اما کامپوزیت‌های تقویت‌شده توسط یان<sup>۲</sup> و همکاران [۱۲] با افزودن ۰/۵ درصد گرافن بدون کاهش انعطاف‌پذیری و افزایش استحکام تسلیم حدود ۵۰٪ تولید شده است. بسیاری از مطالعات انجام‌شده نشان می‌دهد که ساختار نانو چندلایه‌ای و فازهای تقویت‌کننده با ترتیب بالا به طور مؤثری خواص کامپوزیت‌ها را افزایش می‌دهند. به عنوان مثال لی<sup>۳</sup> و همکاران [۱۳] کامپوزیت‌های زمینه آلومینیوم تقویت‌شده با اکسید گرافن کاهش یافته با ساختار نانو چندلایه‌ای را پیشنهاد داده‌اند که بدون کاهش در شکل‌پذیری کامپوزیت، منجر به افزایش استحکام کششی (افزایش حدود ۵۰٪) و سختی می‌شود. شیونگ<sup>۴</sup> و همکاران [۱۴] کامپوزیت نانو چندلایه‌ای مس خالص تقویت‌شده با مقدار زیادی از اکسید گرافن کاهش یافته را تولید کردند. آن‌ها دریافتند که کامپوزیت‌های نانو ساختار چندلایه‌ای، خواص ویژه‌ای از خود نشان می‌دهند. علاوه

1 Shin  
2 Yan  
3 Li  
4 Xiong

بر این، کامپوزیت‌های زمینه فلزی با گرافن چندلایه‌ای تقویت‌شده به صورت ستونی در مقیاس نانو و میکرو توسط محققان مورد مطالعه قرار گرفته است. کیم<sup>۵</sup> 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<sup>۶</sup> و همکاران [۱۶] آزمون‌های فشاری تک‌محوره را روی میکرو ستون‌های تهیه‌شده از نانو کامپوزیت‌های چندلایه‌ای آلومینیوم/گرافن با غلظت‌های مختلف از گرافن اکسید کاهش یافته و جهت‌گیری لایه‌های مختلف انجام دادند. آن‌ها 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 لایه‌های گرافن ناخالص مقاومت بالاتری (افزایش حدود ۴۰٪ نسبت به مس خالص) دارند. مس تقویت‌شده با گرافن ناخالص با کسر حجمی ۰/۱۶ اثر گلوبی شدن نشان می‌دهد که منجر به مرحله کرنش-نرم می‌شود، در حالی که مس تقویت‌شده با گرافن با کیفیت تقریباً خالص بدون ورود به مرحله گلوبی دچار خمش یا شکست برشی می‌شود [۱۷]. ژائو<sup>۷</sup> و همکاران [۱۸] یک آزمون فشاری روی میکرو ستون‌ها (آلومینیوم/گرافن اکسید کاهش یافته) انجام دادند. نتایج آن‌ها نشان داد وجود گرافن در ساختار منجر به بهبود استحکام و چقرمگی می‌شود. 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 می‌تواند به طور مؤثری از انتقال نابجایی‌ها 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 انجام شده است. شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی برای سنتز و توصیف خواص مختلف کامپوزیت

5 Kim  
6 Feng  
7 Zhao

[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. با این وجود، 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.

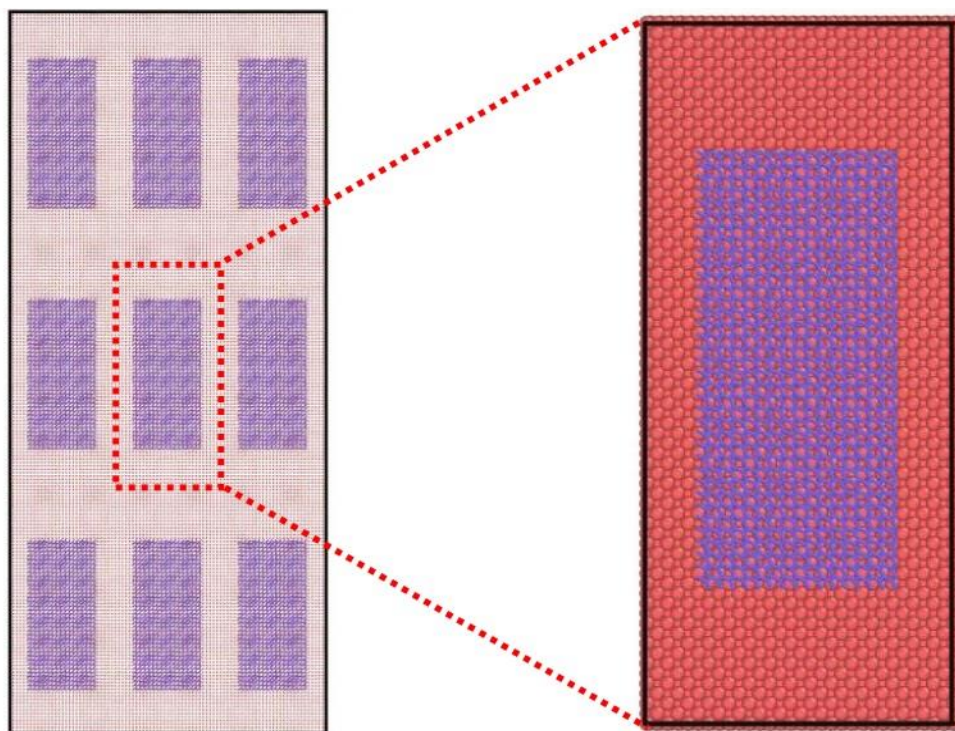
در حالی که اثر افزایش و سفت شدن گرافن با آزمون‌های کشش، فشار و شبیه‌سازی ستون‌های میکرو/نانو مطابقت داشته است، اثر فصل مشترک بین گرافن و آلومینیوم در نابجایی‌های داخلی فلز، به ویژه نقش تجمع صفحات گرافن روی مکانیزم قفل‌شدگی نابجایی‌ها به طور کامل مورد مطالعه قرار نگرفته است. علاوه بر این، مطالعه تجربی 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 استحکام و انعطاف‌پذیری کامپوزیت‌ها تشریح نشده است. به عبارت دیگر وابستگی خواص مکانیکی کامپوزیت‌ها به ساختار لایه‌ای هنوز به طور کامل مشخص نیست.

در این مطالعه، به منظور 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 تسلیم بررسی شده است. مشخص شد گرافن نه تنها می‌تواند حرکت نابجایی‌ها را محدود کند، بلکه نیروهای درون شبکه در ساختار نانو را نیز تحمل می‌کند. همه‌ی این موارد منجر به بهبود خواص کامپوزیت آلومینیوم/گرافن می‌شود. علاوه بر آن، با شروع تجمع صفحات گرافن، به سبب کاهش سطح مؤثر گرافن، استحکام مکانیکی کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن کاهش می‌یابد و در نتیجه فاصله بهینه‌ای برای صفحات گرافن وجود دارد.

نانولوله‌های کربنی و آلومینیوم/گرافن مانند انتقال فاز، تکامل ساختار کریستالی، خواص مکانیکی و پایداری مواد در دما و فشار بالا استفاده شده است. رونغ<sup>۱</sup> و همکاران [۲۱] مکانیزم تقویت نانو کامپوزیت‌های زمینه تقویت‌شده با گرافن را با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی در مقیاس بزرگ بررسی کردند. سیلستر<sup>۲</sup> و همکاران [۲۲] خواص مکانیکی کامپوزیت آلومینیوم/نانولوله کربن تک دیواره با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی را مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها دریافتند که کامپوزیت‌های نانولوله‌های کربنی آلومینیوم در مقایسه با آلومینیوم خالص از لحاظ مکانیکی بهبود یافته‌اند. چوی<sup>۳</sup> و همکاران [۲۳] تأثیر گنجاندن نانولوله‌های کربنی تک دیواره در زمینه آلومینیوم را بر روی خواص مکانیکی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در مقیاس بزرگ بررسی کردند. آن‌ها مشاهده کردند که فشار تنشی، مدول یانگ و چقرمگی به طور قابل توجهی افزایش می‌یابد. کومار<sup>۴</sup> [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 قرار دادند 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 تحت فشار و ضربه مورد بررسی قرار گرفته است [۲۶-۲۸]. محققین دریافتند که حضور گرافن در ساختار روی استحکام، مدول یانگ و کرنش شکست تأثیرگذار است. رضایی خواص مکانیکی افزایش یافته 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 نه تنها استحکام و کرنش شکست را بهبود می‌دهد، بلکه استحکام شکست و سختی کامپوزیت‌ها را نیز افزایش می‌دهند [۲۹]، همچنین استفاده از لایه‌های گرافن با مساحت سطح بزرگ‌تر سبب بهبود خواص مکانیکی می‌شود [۳۰]. اخیراً ژو<sup>۵</sup> و همکاران

1 Rong  
2 Silvestre  
3 Choi  
4 Kumar  
5 Zhu



شکل ۱. کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن.  
**Fig. 1. Nanolaminated aluminum/graphene composite**

## ۲- روش تحقیق

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

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

$$V(r_{ij}) = \left( \frac{a}{r_{ij}} \right)^n \quad (2)$$

$$p_i = \sum_{j \neq i} \left( \frac{a}{r_{ij}} \right)^m \quad (3)$$

که در آن  $\varepsilon$  و  $a$  به ترتیب انرژی برهمکنش و ثابت شبکه را نشان می‌دهند.  $m$ ،  $n$  و  $c$  ثابت‌های مثبت اتم‌های آلومینیوم هستند.  $r_{ij}$  فاصله بین اتم‌های  $i$  و  $j$  آلومینیوم است. پتانسیل جفت بین اتم‌های  $i$  و  $j$  آلومینیوم و  $p_i$  چگالی موضعی الکترون اتم  $i$  آلومینیوم است. از تابع پتانسیل ایریبو<sup>۳</sup> نیز برای مدل‌سازی صفحات گرافن استفاده شد [۳۳]. پتانسیل ایریبو شامل سه قسمت است که

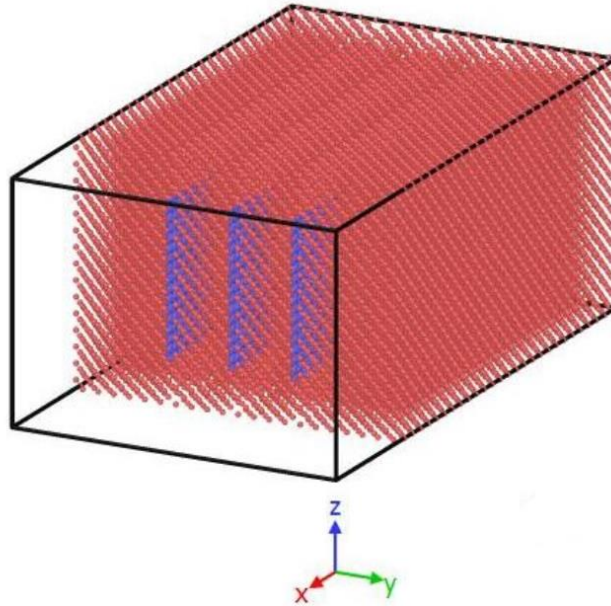
شبه سازی دینامیک مولکولی ابزار قدرتمندی برای محاسبه نیروهای پیوندی در فصل مشترک مواد است [۴۳]. بدین منظور از شبه‌سازی‌های دینامیک مولکولی برای بررسی کامپوزیت‌های آلومینیوم/گرافن با استفاده از نرم‌افزار لمپس<sup>۱</sup> استفاده شد. در مدل‌های اولیه، اتم‌های آلومینیوم در یک ساختار شبکه مکعبی و جوه‌پر با اندازه شبکه ۰.۵/۴ آنگستروم و صفحات گرافن بدون هیچ عیبی در نظر گرفته شد. بر این اساس، مدل شبه‌سازی حاوی حدود ۵۰۰۰۰ اتم آلومینیوم و ۵۰۰۰ اتم کربن است. یک کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن در شکل ۱ نشان داده شده است. مستطیل‌های خط‌چین، نماینده حجم مدل می‌باشد که برای مدل‌سازی و شبه‌سازی استفاده گردید. اندازه پیکربندی مدل شبه‌سازی،  $15 \times 9 \times 7 \text{ nm}^3$  در نظر گرفته شد. صفحات گرافن با اندازه  $9 \times 5 \text{ nm}^2$  در زمینه آلومینیوم قرار داده شد. درصد حجمی گرافن در زمینه کامپوزیت ۴ درصد در نظر گرفته شد. اندرکنش میان اتم‌های آلومینیوم با استفاده از تابع پتانسیل روش اتم جاسازی شده<sup>۲</sup> مدل‌سازی شد [۳۲]. سهم انرژی از تابع پتانسیل

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

2 Embedded atom model

3 Adaptive intermolecular reactive empirical bond order





شکل ۲. 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 ایریو دقیقاً تعامل پیوند-پیوند بین اتم‌های کربن را به همراه شکستن پیوند و شکل‌گیری 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  $\epsilon_{Al-G} = 0.35078 \text{ eV}$  و  $\text{\AA}$   $\sigma_{Al-G} = 3/0.135$  مدل‌سازی شد [۲۲].

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

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

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \left[ -\sum_i m_i v_i^\alpha v_i^\beta + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} F_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta \right] \quad (7)$$

که در آن،  $V$  حجم سیستم،  $m_i$  و  $v_i$  جرم و سرعت اتم،  $F_{ij}^\alpha$  نیروی بین‌اتمی است.

همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، آزمون کشش به صورت

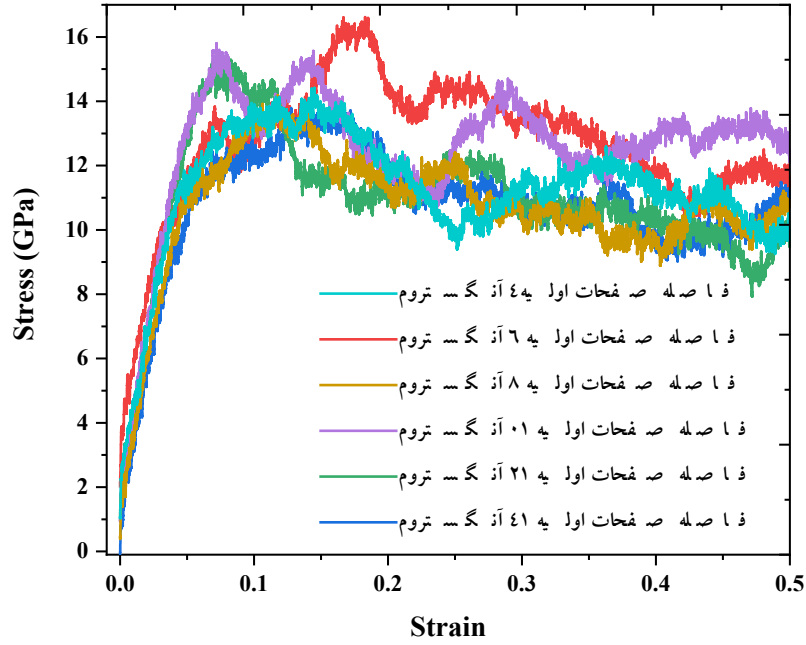
پتانسیل ریو،  $E_{ij}^{REBO}$  تابع مورس نشانگر برهمکنش‌های فاصله دور و  $E_{ijkl}^{TORSION}$  نشانگر برهمکنش‌های پیچشی است.

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} E_{ij}^{REBO} + E_{ij}^{MP} + \sum_{k \neq i, j} \sum_{l \neq i, j, k} E_{ijkl}^{TORSION} \quad (4)$$

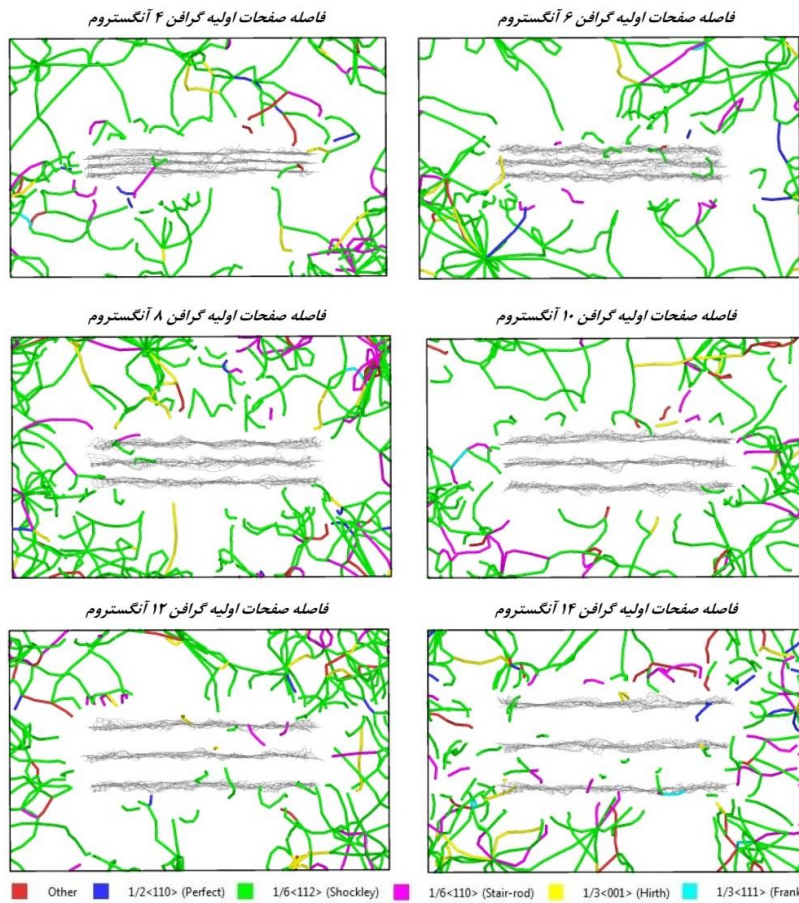
پتانسیل ریو شامل هر دو قسمت تشکیل و شکست بین اتم‌های کربن است، همان‌طور که در زیر آورده شده است:

$$E_{ij}^{REBO} = V_{ij}^R(r_{ij}) + b_{ij} V_{ij}^A(r_{ij}) \quad (5)$$

که در آن  $V_{ij}^A(r_{ij})$  و  $V_{ij}^R(r_{ij})$  به ترتیب عبارات دافعه و جاذبه می‌باشند. همچنین  $b_{ij}$  مربوط به تشکیل یا گسست پیوند است. از آنجاکه پتانسیل ریو فقط برای اندرکنش‌های اتم‌های کربن در ۲ آنگستروم از یکدیگر است از پتانسیل ایریو 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 ایریو، شعاع قطع برای پتانسیل ریو دو آنگستروم در نظر گرفته شده است. مطالعات نشان داده است که پتانسیل ایریو برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای فولرن، نانولوله‌های کربنی و گرافن مناسب

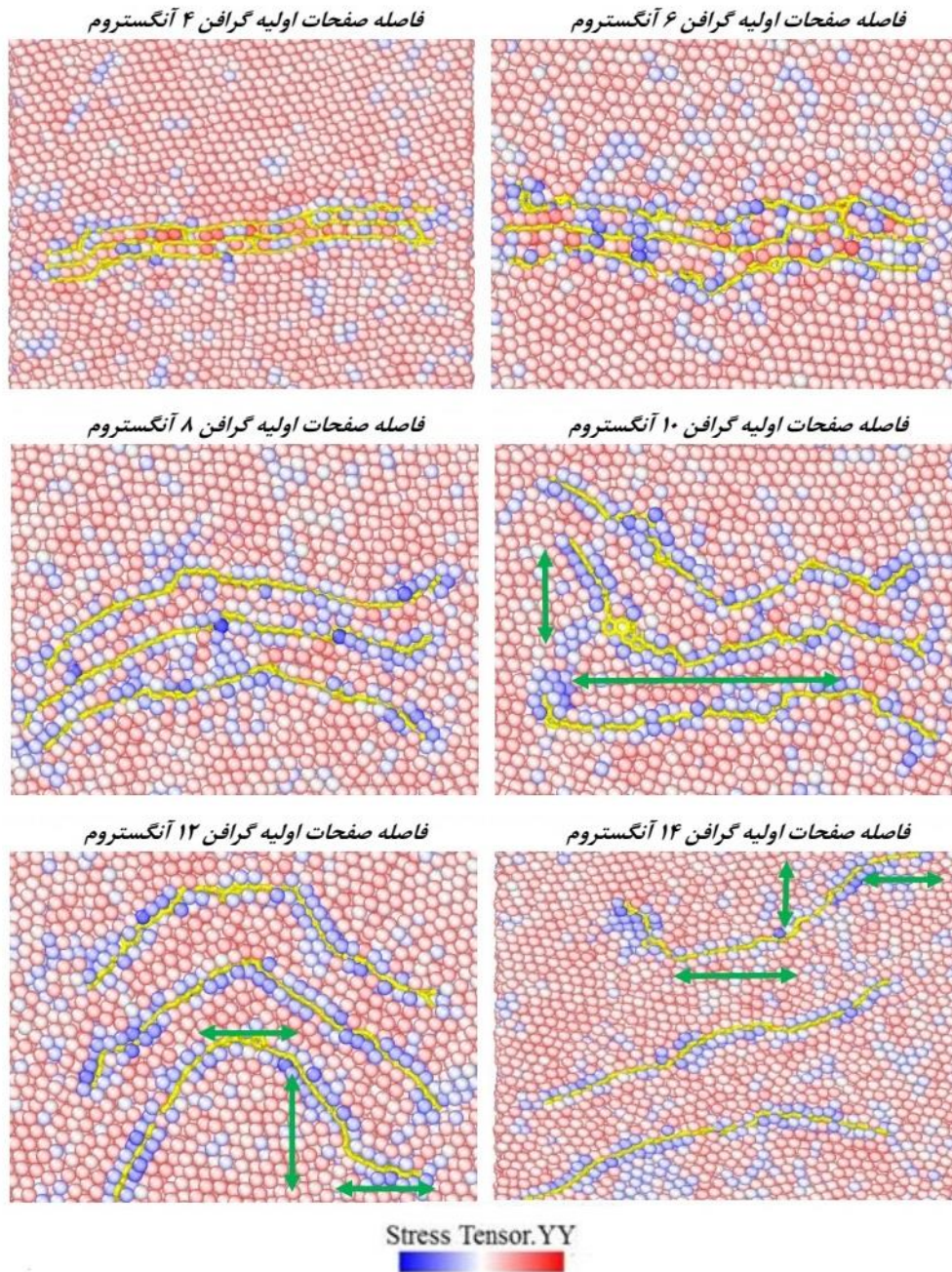


شکل ۳. نمودار تنش-کرنش کامپوزیت آلومینیوم/گرافن.  
 Fig. 3. Stress-strain diagram of aluminum/graphene composite.



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.**

دمائثابت و فشارثابت-دمائثابت 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 ps تنظیم شد. در مدل‌های دینامیک مولکولی زمانی که انرژی پتانسیل سیستم به تعادل رسیده شده باشد میکرو ساختار بهینه می‌شود. پس‌از آن،

افقی (در راستای  $y$ ) روی نمونه‌ها اعمال شده است. برای آماده‌سازی ساختار شبیه‌سازی، ابتدا کل سیستم به وسیله شرایط تناوب دوره‌ای تحت کمینه‌سازی انرژی با روش گرادینان مزدوج<sup>۱</sup> قرار گرفت. سپس، فرایند بهینه‌سازی ترمودینامیکی تحت هنگردهای حجم‌ثابت-

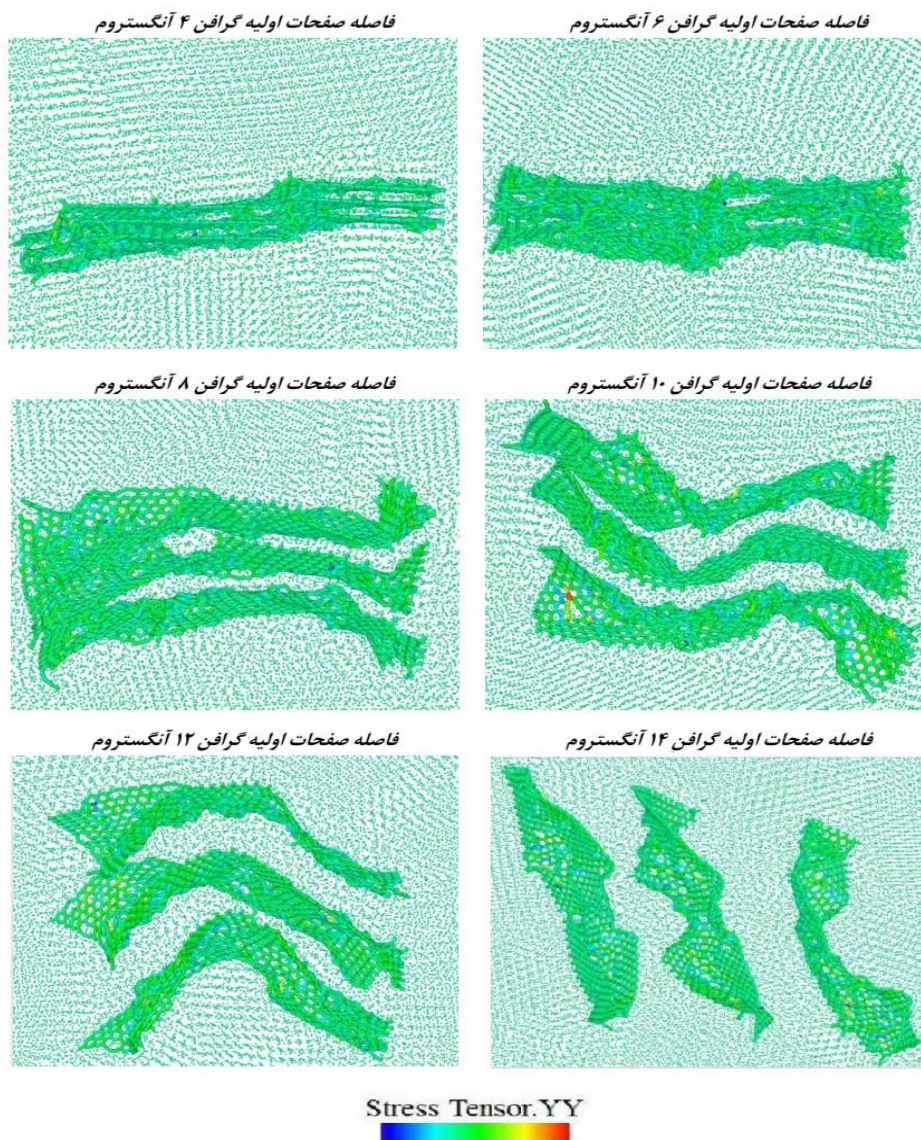
<sup>1</sup> Conjugate gradient



جدول ۱. خواص کامپوزیت‌ها نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن در نقطه تسلیم.

Table 1. Properties of nanolaminated aluminum / graphene composites at yield point.

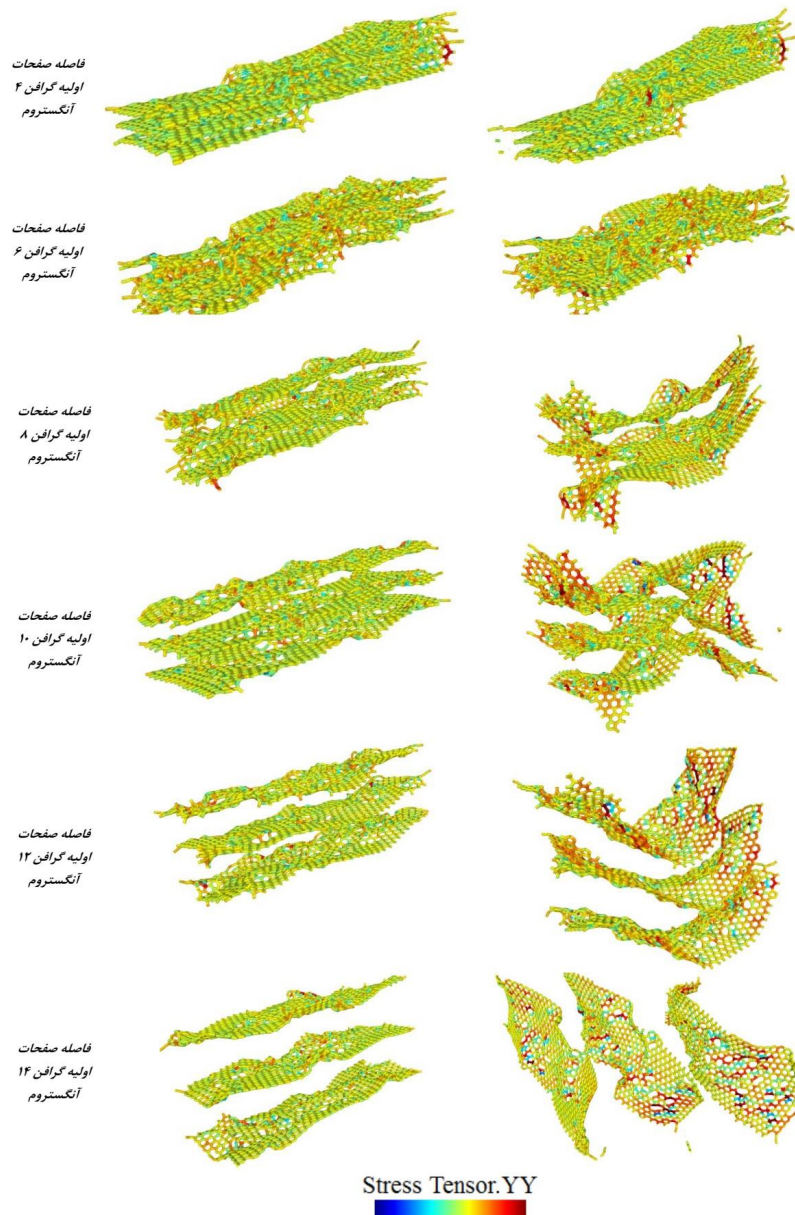
کرنش تسلیم	استحکام تسلیم (GPa)	کامپوزیت
۰/۰۵	۱۱/۶۶	فاصله صفحات اولیه گرافن ۴ آنگستروم
۰/۰۵	۱۱/۳۳	فاصله صفحات اولیه گرافن ۶ آنگستروم
۰/۰۵	۱۰/۸۱	فاصله صفحات اولیه گرافن ۸ آنگستروم
۰/۰۶۵	۱۴/۴۹	فاصله صفحات اولیه گرافن ۱۰ آنگستروم
۰/۰۶۵	۱۴/۲۹	فاصله صفحات اولیه گرافن ۱۲ آنگستروم
۰/۰۵	۱۰/۲۶	فاصله صفحات اولیه گرافن ۱۴ آنگستروم



شکل ۶. انتقال بار کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن در ناحیه پلاستیک در کرنش ۰/۱۲.

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.**

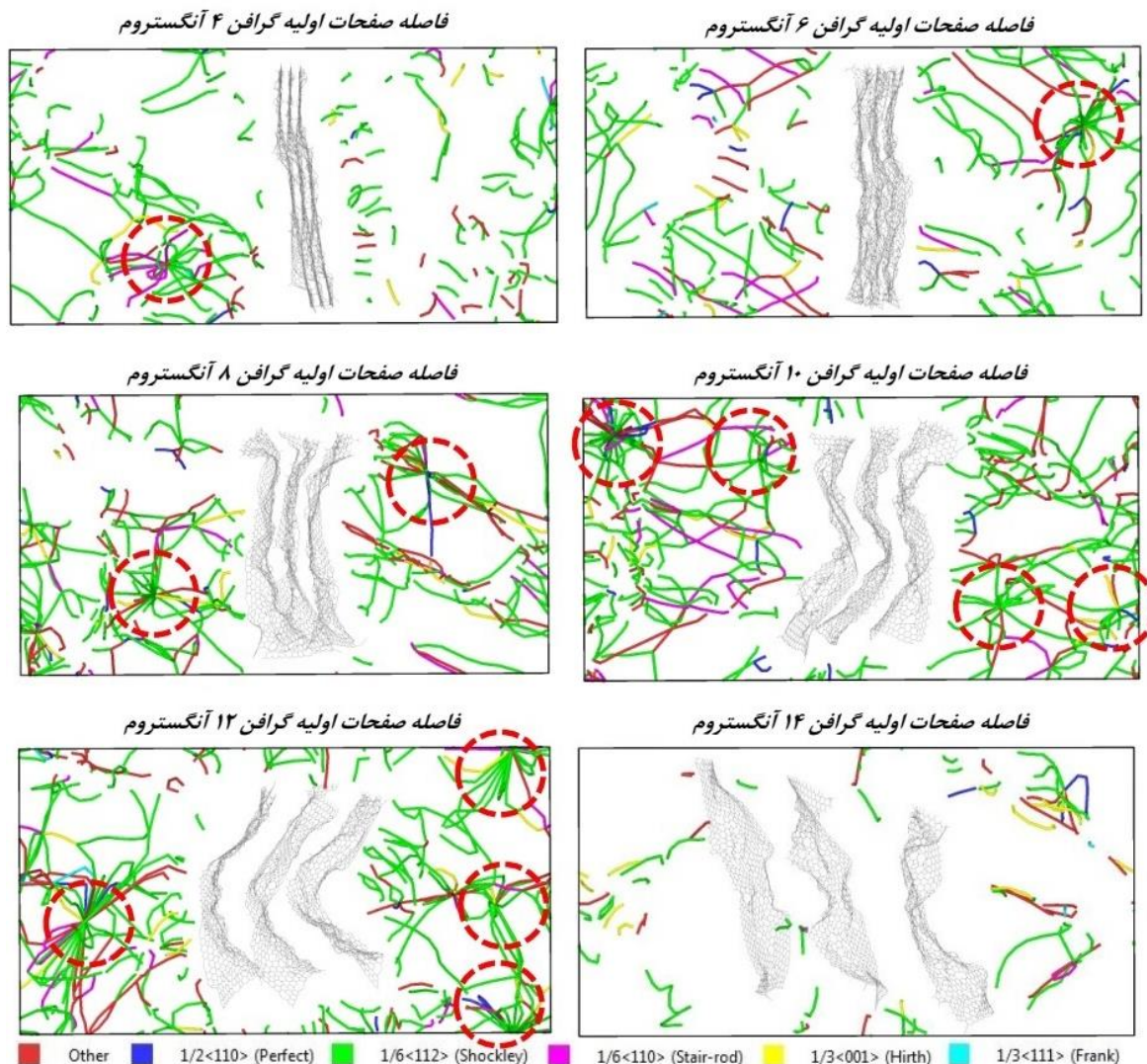
ساختارهای تغییر شکل یافته استفاده شد [۳۶].

### ۳- نتایج و بررسی

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 تک‌محوری در جهت محور  $z$  با منبسط کردن (کشیدن) تدریجی جعبه شبیه‌سازی در نرخ کرنش  $10^{-8} S^{-1}$  اعمال شد. شرایط مرزی در راستای  $x$  و  $z$  تناوبی و در راستای کشش آزاد فرض شد. پس از شبیه‌سازی‌ها، از الگوریتم‌های لغزش نابجایی<sup>۱</sup> در نرم‌افزار اویتو<sup>۲</sup> برای آشکار کردن و تجزیه و تحلیل حرکت‌های نابجایی‌ها در

1 Dislocation extraction algorithm  
 2 Open Visualization Tool



شکل ۸. نابجایی‌های کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن در کرنش ۰/۱۲. دایره‌های خط‌چین قرمز رنگ 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، محدوده‌ی الاستیک به مقدار ۱۳ درصد افزایش می‌یابد و تغییر شکل پلاستیک در کرنش بیشتری (۰/۰۶۵) اتفاق می‌افتد. این روند در فواصل ۱۴-۱۰ آنگستروم صفحات گرافن دیده می‌شود و استحکام تسلیم ماده به مقدار ۳۰ درصد افزایش می‌یابد. 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 سبز رنگ) در لایه‌های فلزی شروع و با رسیدن به لایه‌های گرافن متوقف می‌گردد. نابجایی اتم‌ها در راستای سطح لغزش در ناحیه پلاستیک موجب تسلیم ماده و در نتیجه تغییر شکل پلاستیک می‌شود و افزایش مجدد تنش بعد از هر نقطه اوج، مقاومت ماده در مقابل تغییر شکل پلاستیک بعدی را آشکار می‌سازد. نتایج به دست آمده وابستگی شدید تغییر رفتار الاستیک-پلاستیک ماده‌ی کامپوزیت را نسبت به فاصله صفحات گرافن نشان می‌دهد. با توجه به جدول ۱، با کاهش فاصله

آلومینیوم/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 تقویت‌کننده ناشی از برهمکنش اتم‌های زمینه در تغییر شکل آن را نشان می‌دهد. پله‌های سطحی برای صفحات گرافن ۱۴-۱۰ آنگستروم به وضوح 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  $\langle 110 \rangle$  اتفاق می‌افتد که در آزمایش فشار فلزات تک-بلور شبکه مکعبی و جوهر پر به‌وفور دیده می‌شود. از آنجایی که نابجایی‌ها به‌طور آزاد حرکت کرده و از سطح می‌گذرند باعث ایجاد پله‌های سطحی پایدار می‌شوند. لذا این فرایند تغییر شکل، برگشت‌پذیر نیست [۳۸].

شکل ۶ تغییر شکل پلاستیک در بارگذاری کششی روی نمونه‌های کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن در فاصله صفحات مختلف را نشان می‌دهد. رنگ سبز پررنگ اتم‌های گرافن به‌خوبی آشکار است. این تغییر رنگ، در نتیجه مشارکت آن‌ها در تحمل بار وارده و تغییر شکل زیاد است. اتم‌های آلومینیوم در مجاور فاز تقویت‌کننده 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<sup>۱</sup>، هنگامی که فاصله صفحات کاهش می‌یابد؛ در حجم مشخصی لایه‌های گرافن افزایش یافته که این امر سبب می‌شود کامپوزیت نانو چندلایه آلومینیوم/گرافن نیروهای بالاتری را تحمل کند [۳۹]. بنابراین، کامپوزیت با فاصله صفحات کمتر بدون رسیدن به نقطه تسلیم می‌تواند نیروهای بالاتری را تحمل کند. علاوه بر مکانیزم نابجایی‌ها، مکانیزم تأخیر برشی نیز نقش مهمی در تقویت کامپوزیت‌های آلومینیوم/گرافن دارد [۳۱]. مکانیزم تأخیر برشی به‌وسیله انتقال بار از زمینه به تقویت‌کننده از طریق تنش برشی

1 Shear lag

سطحی ایجاد می‌شود؛ بنابراین، سهم تقویت‌کننده در کامپوزیت آلومینیوم/گرافن ساخته‌شده توسط تنش برشی سطحی مورد بررسی قرار گرفت.

در شکل ۷ توزیع تنش در جهت راستای کشش برای کامپوزیت آلومینیوم/گرافن تحت کرنش‌های کششی مختلف (۰/۱۲ و ۰/۰۱) 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، در صورتی که سطح مؤثر گرافن بالا باشد و انتقال بار به‌درستی صورت بگیرد، کانتور تنش سطح گرافن باید 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 پخش شده 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 سطحی پایدار صفحات گرافن توسط نابجایی‌ها ایجاد شود.

به‌عنوان نتیجه‌گیری، 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 می‌تواند به‌وسیله 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



می‌شود. 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 می‌باشند. در کامپوزیت‌های آلومینیوم/گرافن، گسترش و لغزش نابجایی‌ها در فصل مشترک بین زمینه آلومینیوم و گرافن مسدود می‌شود که موانعی برای حرکت نابجایی‌ها است.

مشاهده می‌شود نابجایی‌ها علاوه بر ایجاد در فصل مشترک در داخل آلومینیوم نیز ظاهر شده‌اند. نابجایی‌ها توانایی نفوذ به داخل فصل مشترک را ندارند، بنابراین تغییر شکل پلاستیک در هر یک از لایه‌های آلومینیوم محدود می‌شود. نابجایی‌ها توسط گرافن بریده و در فصل مشترک انباشته می‌شوند. در فواصل کمتر از ۱۰ آنگستروم صفحات گرافن به علت وجود نیروی جاذبه واندروالسی تمایل به تجمع صفحات گرافن افزایش می‌یابد. در نتیجه، مساحت سطح ویژه در دسترس گرافن کاهش می‌یابد. در این فواصل سطح گرافن توانایی کمتری برای بریدن نابجایی‌ها دارد. در فواصل صفحات گرافن ۴-۸ آنگستروم می‌توان کاهش نابجایی‌های بریده شده 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 می‌شود. از این رو، انتشار نابجایی‌ها برای کامپوزیت‌های بافاصله صفحه بیشتر از ۱۰ آنگستروم بسیار سخت می‌شود که منجر به بهبود خواص مکانیکی کامپوزیت آلومینیوم/گرافن می‌شود. از طرفی برای نمونه کامپوزیت در فاصله صفحات ۱۴ آنگستروم به علت نفوذ نابجایی در فصل مشترک، تعداد بریده شدن نابجایی‌ها در فصل مشترک گرافن آلومینیوم کاهش یافته 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. در نتیجه فاصله صفحات گرافن در یک حالت بهینه (در این مطالعه ۱۰ و ۱۲ آنگستروم) می‌توانند 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 طریق نابجایی بر روی یک طرف از سطح کریستال به طرف دیگر انجام می‌پذیرد و در نهایت به طور کامل سطح فصل مشترک را در بر می‌گیرد. به این ترتیب، لغزش نابجایی، توانایی لغزش نسبی در تمام فصل مشترک را دارد. نیروی مورد نیاز برای لغزش نابجایی‌ها بسیار

کمتر 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 ۲۵۶۳۳۳، ۲۵۵۸۶۳، ۲۴۶۵۳۲ و ۵۳۲۳۶۹ آنگستروم است. در نتیجه، در فواصل کمتر از ۱۰ آنگستروم مجموع طول خطوط نابجایی‌ها کاهش یافته است و سبب کاهش ناحیه الاستیک نمونه‌ها شده است. این امر نشان می‌دهد که فواصل صفحات و تجمع گرافن به طور قابل توجهی روی مکانیزم قفل کردن نابجایی اثرگذار است. همچنین، همان‌طور که در شکل نشان داده شده، تعداد کمی خطوط نابجایی طولانی در آلومینیوم بافاصله صفحات گرافن ۴، ۶ و ۱۴ آنگستروم رخ داده و مجموع طول‌های بلند نابجایی‌ها اندک است. از طرف دیگر، خطوط نابجایی بیشتر در کامپوزیت‌های آلومینیوم/گرافن ۱۰ و ۱۲ آنگستروم ایجاد شده و به راحتی با یکدیگر ادغام شده‌اند. با توجه به حضور لایه‌های گرافن که توانایی مؤثر در قفل کردن نابجایی دارند، نابجایی‌های با درگیری بالا در نمونه‌ها می‌توان یافت؛ بنابراین، کامپوزیت‌ها 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 به وسیله 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 انعطاف‌پذیری کامپوزیت می‌شود.

- [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 graphene-metal 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. در نتیجه 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 graphene 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. Mendeleev, 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 graphene 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. Asgari, Wettability alteration and retention of mixed polymer-grafted silica nanoparticles onto oil-wet porous medium, Petroleum Science, (2021).
- [42] H. Daneshmand, M. Araghchi, M. Asgari, 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. Asgari, 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

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم

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](https://doi.org/10.22060/mej.2021.18509.6831)



