

# تحلیل خواص مکانیکی نانوکامپوزیت آلومینیوم- گرافین با نقص جای خالی و حفره به روش دینامیک مولکولی

علی ابراهیمی<sup>۱</sup>، مسعود اجری<sup>۲\*</sup>

<sup>۱</sup> دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک- طراحی کاربردی، دانشکده فنی، دانشگاه محقق اردبیلی، ایران

<sup>۲</sup> استادیار گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی، دانشگاه محقق اردبیلی، ایران

\*نویسنده پاسخگو: [m.ajri@uma.ac.ir](mailto:m.ajri@uma.ac.ir)

## خلاصه

مطالعه حاضر، خواص مکانیکی از جمله مدول یانگ و تنش استحکام کششی نانوکامپوزیت آلومینیوم تقویت شده با گرافین ناقص با نقص حفره و نقص جای خالی تحت کشش تک محوره با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار داده است. همچنین در این مطالعه اثر تعداد لایه‌های گرافین در درصد حجمی ثابت، بر روی رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت نیز بررسی شده است. این شبیه‌سازی با کمک پکیج منبع باز لمپس با مدل سازی یک سیستم دوره‌ای با هنگرد NVE و NPT انجام گرفته و برای توصیف اندرکنش اتم‌های کربن و آلومینیوم به ترتیب از پتانسیل‌های AIREBO و MEAM و همچنین برای اندرکنش بین این اتم‌ها از پتانسیل لnardجونز استفاده شده است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهند که افزودن تک لایه گرافین به ساختار آلومینیوم خالص باعث بهبود مدول یانگ و استحکام کششی آلومینیوم خالص به ترتیب به میزان ۲۲۰ و ۳۲۰ درصد شده است. علاوه بر این مشاهده می‌شود که اثر نقص جای خالی و نقص حفره بر روی مدول یانگ و استحکام کششی به صورت غیرخطی بوده و روند کاهشی دارد.

واژگان کلیدی: نانوکامپوزیت، خواص مکانیکی، دینامیک مولکولی، گرافین، نقص جای خالی

## Analyzing Mechanical Properties of Aluminum-graphene Nanocomposite with Vacancy and Pin-holed Defects by Molecular Dynamics Method

Ali Ebrahimi<sup>1</sup>, Masoud Ajri<sup>2\*</sup>

1.MSc. Student, Department of Mechanical Engineering, University of Mohaghegh Ardabili, Iran.

2. Assistant Professor, Department of Mechanical Engineering, University of Mohaghegh Ardabili, Iran.

\*Corresponding Author: [m.ajri@uma.ac.ir](mailto:m.ajri@uma.ac.ir)

## Abstract

The present study investigated mechanical properties such as Young's modulus and tensile strength of aluminum nanocomposite reinforced with defective graphene with vacancy and hole defects under uniaxial tension using molecular dynamics simulation. Also, the effect of the number of graphene layers in a constant volume ratio on the mechanical behavior of the nanocomposite has also been obtained. This simulation was done with the help of the LAMMPS open-source package by modeling a periodic system with NVE and NPT ensembles.

The AIREBO and MEAM potentials were used to describe the interaction of carbon and aluminum atoms, respectively, and Lennard Jones potential was used for the interaction between these atoms. The obtained results show that adding a single layer of graphene to the structure of pure aluminum has improved Young's modulus and tensile strength of pure aluminum by 220 and 320%, respectively. In addition, it is observed that the effect of pinhole and vacancy defects on Young's modulus and tensile strength is non-linear and has a decreasing trend.

Keywords: nanocomposite, mechanical properties, molecular dynamics, graphene, vacancy defects

## ۱- مقدمه

یک ساختار دوبعدی لانه‌زنبوری از اتم‌های کربن (C) که ورقه گرافین (GS) را ایجاد می‌کنند دارای خواص مکانیکی فوق العاده‌ای می‌باشد [۱, ۲]. این آلوتروپ کربن تقریباً به صورت تئوری هشت دهه مورد مطالعه قرار گرفته است [۳, ۴]. اگرچه نانو صفحات گرافین به طور ذاتی در کامپوزیت‌ها یافت شدند اما فرض بر این بود که GS ها نسبت به تشکیل نانو ساختارهای کربنی منحرف شده مانند نانولوله‌ها و فولرن‌ها ناپایدار هستند [۵]. در سال ۲۰۰۴، نووسلوف و همکارانش GS ها را با تست‌های آزمایشگاهی مورد مطالعه قرار دادند و مسیر جدیدی از علم نانو را برای محققان در سراسر جهان گشودند [۶]. خواص مکانیکی GS ها تقریباً مشابه همتای خود، یعنی نانولوله‌های کربنی (CNTs) است. با این حال، به دلیل نسبت ابعاد بالاتر، مساحت سطح و تولید کم هزینه GS ها به عنوان نانو پر کننده تقویت کننده به CNT ها ترجیح داده می‌شوند. با تقویت GS ها بر حسب وزن یا حجم کسری در پلیمرها، رفتار مکانیکی کامپوزیت مواد به طور قابل توجهی افزایش می‌یابد [۷]. GS ها در مقایسه با CNT ها سطح بیشتری دارند و با مواد ماتریس در هر دو سطح متصل شود. ساختار دوبعدی GS پیوند بهتری با مواد ماتریس دارد و یک فصل مشترک بزرگ تر را در ارتباط بین GS و مواد ماتریس نسبت به CNT تشکیل می‌دهد که در نهایت ایجاد فصل مشترک بزرگ تر به خواص مکانیکی بهتر منجر خواهد شد [۸, ۹]. به عنوان مثال تقویت ۳ درصد وزنی GS در پلی اتیلن (PE) منجر به افزایش استحکام کششی و مدول الاستیک کامپوزیت به ترتیب نزدیک به ۷۷ و ۸۷ درصد می‌شود. اما، برای همان کسر وزنی تقویت کننده CNT در پلی اتیلن استحکام کششی و مدول الاستیک ماتریس پلی اتیلن را تنها به میزان ۵۸٪ و ۵۷٪ افزایش می‌دهد [۱۰]. خواص مکانیکی فشاری و کششی نانوپرکننده‌های مبتنی بر کربن توسط تعدادی از محققین به صورت تجربی و با استفاده از آزمایش‌های عددی از جمله شبیه‌سازی مولکولی مورد مطالعه قرار گرفت [۱۱, ۱۲].

با میدان‌های نیروی تجربی کمتر توسعه یافته، تکنیک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) نقش اساسی در تجزیه و تحلیل پاسخ‌های مکانیکی نانو پرکننده‌ها و نانوکامپوزیت‌ها ایفا می‌کند [۱۸-۱۳]. لین و همکاران پاسخ کمانش نانوکامپوزیت پلیمری تقویت شده با GS را مورد بحث قرار داده‌اند و ثابت کرده‌اند که شبیه‌سازی‌های MD می‌توانند بینش بیشتری از دامنه کمانش و برهم‌کنش‌های میان نانو پرکننده‌ها و مواد ماتریس ارائه دهند که یافتن آن‌ها در آزمایش‌های مقیاس نانو دشوار است [۱۹]. در نمونه‌های کاربردی، تقریباً تمام کامپوزیت‌های تقویت شده با GS با GS لایه‌ای تقویت شده‌اند [۲۰]. چندین تحلیل توسط محققان در مورد نتایج تقویت GS های چندلایه در مواد ماتریس بر رفتار مکانیکی مواد نانوکامپوزیت منتشر شده است [۲۱, ۲۲]. در مقایسه با کامپوزیت‌های سرامیکی و پلیمری تقویت شده با GS ها، کامپوزیت‌های فلزی تقویت شده با GS به دلیل مشکلاتی مانند توزیع یکنواخت، تولید انبوه نانو پرکننده‌های هم‌تراز و پیوند بین سطحی ضعیف کمتر مورد بررسی قرار می‌گیرند [۲۳]. اما از بین فلزات موجود، آلومینیوم (Al) در بسیاری از کاربردها به دلیل چگالی کم، کارایی مناسب و خواص سختی آن به سایر مواد ترجیح داده شده است و پژوهش‌های فراوانی روی آن صورت گرفته است [۲۴, ۲۵]. کاربردهای بسیاری از نانوکامپوزیت‌های آلومینیوم در صنایع، خودروسازی و صنایع نظامی وجود دارد [۲۶]. شین و همکاران یک کامپوزیت آلی تعبیه شده چندلایه GS

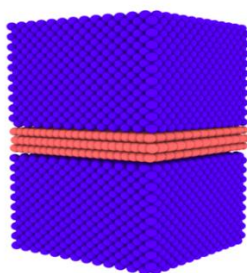
با رویکرد متالورژی پودر توسعه دادند و ویژگی‌های مقاومت آن را بررسی کردند [۲۷]. بر اساس روش MD، تحقیقات زیادی برای GS‌های لایه‌ای و کامپوزیت‌های تقویت شده با GS لایه‌ای توسط محققین مختلف در سراسر جهان اجرا شده است و مشخص شده است که افزایش دما پیامد منفی بر خواص مکانیکی GS‌ها دارد [۲۸]. در سال ۲۰۲۰ صدیق و همکاران پژوهشی تحت عنوان بررسی نانوکامپوزیت‌های بونیتريد آلومینیوم انجام دادند. در خلال این پژوهش اثر عیب جای خالی مورد بررسی قرار گرفت. آن‌ها دریافتند که حضور نقص جای خالی در نانوکامپوزیت بونیتريد آلومینیوم منجر به افت خواص مکانیکی خواهد شد [۲۹]. همچنین گزارشات نشان می‌دهد که تشکیل عیوب نامطلوب در ساختارهای کریستالی یک مسأله اجتناب‌ناپذیر است، به‌خصوص زمانی که فرآیندهای مکانیکی در روش سنتز آنها دخالت داشته باشد. اگرچه وجود جای خالی خواص مغناطیسی را ارتقا می‌دهد اما عیوب ذکر شده ویژگی‌های مکانیکی این نانو ساختارها را کاهش می‌دهد [۳۰، ۳۱].

در سال ۲۰۱۷ در یک پژوهش انجام شده، مخالینگام و کومار به بررسی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین پرداختند. در این پژوهش که به نتایج محدودی ختم شده است، هیچ‌گونه نقص ساختاری و همچنین اثر تعداد لایه بر خواص مکانیکی مورد توجه قرار نگرفته است و نتایج گزارش شده محدود به مدول یانگ نانوکامپوزیت است [۳۲]. به همین دلیل برای دستیابی به نتایج نزدیک به واقعیت، بررسی عیب‌ها در خلال شبیه‌سازی نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین امری ضروری است. با توجه به ضروریات ذکر شده، در این پژوهش به بررسی خواص مکانیکی نانو کامپوزیت آلومینیوم تقویت شده با گرافین تحت تست کشش تک محوره در جهت  $x$  و همچنین تأثیر نقص جای خالی اعمال شده در لایه گرافین با درصدهای اتمی ۳، ۶ و ۹، تأثیر نقص حفره اعمال شده بر لایه گرافین با شعاع‌های ۵، ۷ و ۹ آنگستروم و همچنین اثر افزایش تعداد لایه فاز فیبر یعنی گرافین بر مدول یانگ و استحکام کششی نانوکامپوزیت پرداخته شده است.

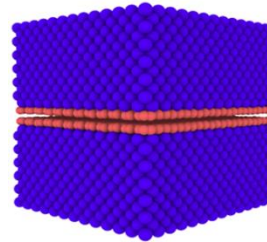
## ۲- مدل‌سازی سلول واحد نانو

### ۲-۱ مدل شبیه سازی

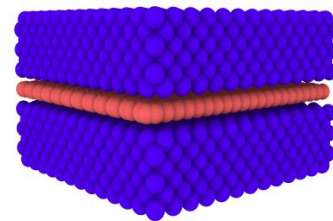
نانو سلول واحد مولکولی (NUC) برای شبیه سازی MD در شکل ۱ با یک، دو و سه لایه گرافین نشان داده شده است. برای ایجاد NUC در شبیه سازی دینامیک مولکولی، شرایط تناوبی در محورهای  $x$ ،  $y$  و  $z$  استفاده می‌شود. کسر حجمی برای نانو سلول واحد ۵٪ با ابعاد ۵۱ آنگستروم در جهات  $x$  و  $y$  و ۲۸/۳۵ آنگستروم در جهت  $z$  در نظر گرفته شده است. به منظور بررسی آثار مکانیکی نقص جای خالی و نقص حفره، تست‌های کشش انجام شده روی نانوکامپوزیت به دو دسته مجزای بدون نقص و با نقص تقسیم‌بندی می‌شوند. تست‌های کشش در جهت  $x$  و با حضور نقص جای خالی با درصدهای اتمی ۳، ۶ و ۹ به صورت تصادفی و در ساختار گرافین در نظر گرفته شده است (شکل ۲-الف). همچنین به منظور انجام آزمون کشش نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین با نقص حفره، حفره‌هایی با شعاع ۵، ۷ و ۹ آنگستروم در وسط لایه گرافین ایجاد شده است (شکل ۲-ب) لازم به ذکر است که متناسب با افزایش تعداد لایه‌های گرافین، ابعاد نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین به منظور ثابت ماندن کسر حجمی در جهت  $z$  افزایش داده شده است.



(ج)

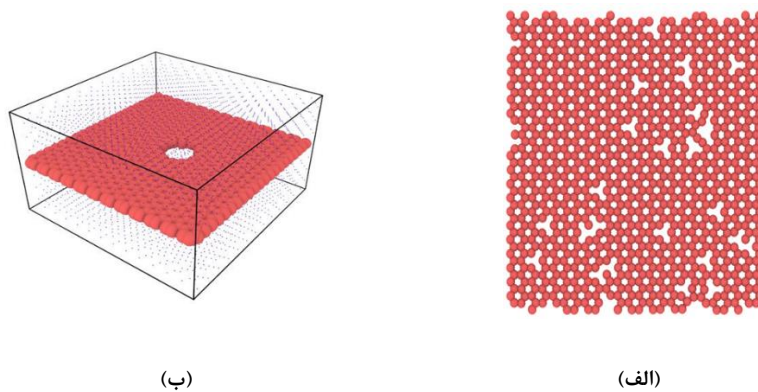


(ب)



(الف)

شکل ۱- مدل اتمی نشان دهنده ساختار نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین (الف) گرافن تک لایه (ب) گرافین دولایه (ج) گرافین سه لایه



شکل ۲- الف) نقص جای خالی ۳ درصد اتمی در ساختار گرافین نانوکامپوزیت (ب) حفره در ساختار گرافین نانوکامپوزیت.

## ۲-۲ پتانسیل های بین اتمی

استفاده از پتانسیل بین اتمی صحیح در انجام شبیه سازی ها نقشی کلیدی دارد [۳۳]. در مطالعه حاضر پتانسیل های بین اتمی زیر مورد استفاده قرار گرفته اند:

الف: برای اتم های آلومینیوم روش اتم تعبیه شده اصلاح شده (MEAM)، [۳۴]

ب: برای اتم های کربن ترتیب پیوند تجربی واکنشی بین مولکولی تطبیقی (AIREBO) [۳۵]

پ: برای تعاملات بین اتم های کربن و آلومینیوم لنارد-جونز (L-J) [۳۶]

همچنین مقدار شعاع قطع معادل  $3\sigma_{AL-C}$  در نظر گرفته می شود. انرژی کل مدل به صورت زیر نمایش داده می شود:

$$E_{total} = E_{AL}^{MEAM} + E_C^{AIREBO} + E_{LJ}^{AL-C} \quad (1)$$

پتانسیل های مورد نیاز و پارامترهای مربوطه (به عنوان مثال، شعاع و اندروالس ( $\sigma$ ))، عمق چاه بالقوه ( $\epsilon$ ) و برش شعاع) توسط چوی و همکاران مورد بحث قرار گرفته است و همچنین در جدول پایین ذکر شده اند.

جدول ۱- پارامترهای مربوط به پتانسیل های بین اتمی [۳۷]

پارامترهای پتانسیل لنارد جونز	پیوند آلومینیوم- آلومینیوم	پیوند کربن-کربن	پیوند آلومینیوم کربن با قانون اختلاط
$\epsilon$ (ev)	۰/۴۱۵۷	۲/۸۴۴۰	۰/۰۳۴۳۸
$B$ ( $A^0$ )	۲/۶۲۰۰	۳/۴۰۰۰	۳/۰۱۰۰

$$3 \times B_{AL-C} = \text{شعاع کات آف} = 9.03A^0$$

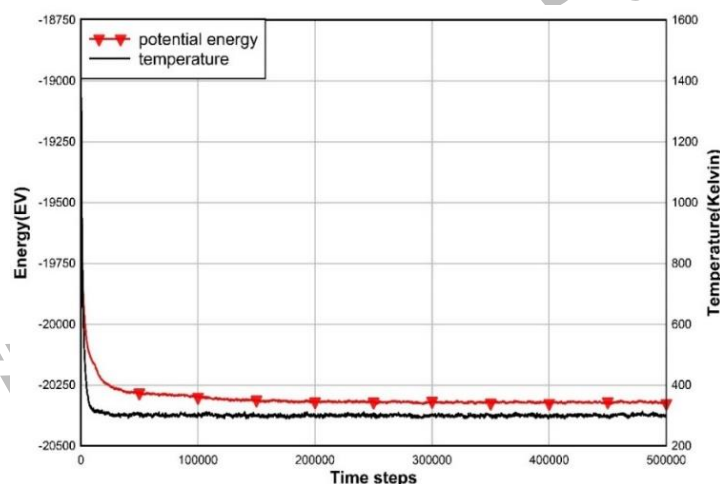
برای انجام شبیه سازی MD، کدهای منبع باز کاربر پسند و قابل اعتماد مختلفی مثل LAMMPS، CHARMM، NAMD، GROMOS، GROMACS، AMBER به صورت رایگان در دسترس هستند [۳۸]. با وجود نرم افزارهای شبیه سازی MD موجود،

از کد LAMMPS به طور گسترده‌ای به دلیل تطبیق پذیری آن استفاده می‌شود. بنابراین در مطالعه حاضر، LAMMPS به عنوان ابزار شبیه سازی استفاده می‌شود [۳۹].

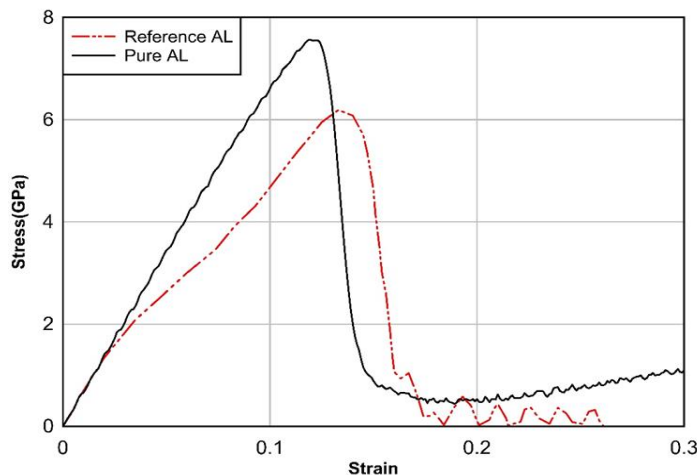
### ۳- شرایط شبیه سازی

گام زمانی پس از هم‌گرایی نتایج در مقدار ۰/۵ فمتوثانیه برای همه‌ی مدل‌های شبیه سازی شده در نظر گرفته شد و اتم‌ها تحت مجموعه میکروکانونیکال (NVE) در دمای ۳۰۰ کلوین با ترموستات لانگوین متعادل می‌شوند. پس از آن برای آزاد کردن تنش‌های داخلی اولیه، فشار صفر بار با استفاده از آنسامبل NPT اعمال شد. همان‌طور که در شکل ۳ مشخص است، اتم‌ها پس از طی کردن پانصد هزار گام زمانی، به سطح کمینه انرژی خود رسیده و از آنجا که پایداری سیستم وابسته به انرژی پتانسیل است، این نمودار نشان از به تعادل رسیدن سیستم اتمی دارد. همچنین دمای سیستم شبیه سازی شده، به خوبی در ناحیه ۳۰۰ کلوین قرار گرفته است.

در مرحله اول اعتبار سنجی رویکرد شبیه سازی MD آلومینیوم خالص در مقاله حاضر با مقایسه نتایج نمودار تنش- کرنش و مدول یانگ با نتایج منتشر شده در مقاله رونگ و همکاران (شکل ۴) انجام شده است [۴۰]. رونگ و همکاران مدول ۷۴,۷۸ گیگاپاسکال را گزارش کردند و در شرایط شبیه‌سازی مشابه، مطالعه حاضر مدول ۷۰ گیگاپاسکال را گزارش می‌کند از این رو دقت روش فعلی تایید شده است.

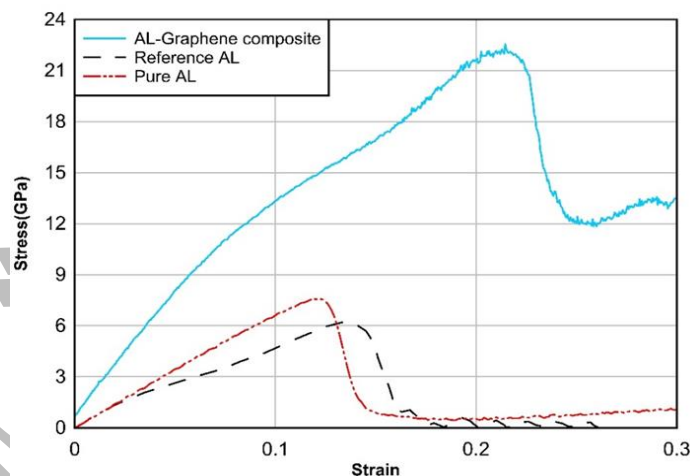


شکل ۳ - آرامش انرژی پتانسیل و دما ساختار نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین تک لایه



#### ۴- نتایج و بحث

ویژگی‌های مکانیکی نانوکامپوزیت آلومینیوم تقویت شده با گرافین توسط آزمایش‌های عددی MD و با استفاده از مرزهای تناوبی با شرایط کسر حجمی ۵ درصد برای فاز فیبر محاسبه شد. نتایج منحنی‌های تنش کرنش که توسط شبیه‌سازی رایانه‌ای MD یافت شده، در شکل‌های زیر نشان داده شده است. همان‌طور که پیش‌تر گفته شد، همه ساختارهای کریستالی در شبکه خود دارای حفره‌ها و نقص‌هایی هستند که برای دستیابی به نتایج واقعی و قابل اعتمادتر لازم است اثرات آن‌ها بررسی شوند. در این پژوهش سه تست کشش برای نانوساختار با نقص جای خالی و درصد‌های اتمی ۳، ۶ و ۹ در ساختار گرافین، سه تست کشش با حضور نقص حفره اعمال شده در لایه گرافین با شعاع ۵، ۷ و ۹ و همچنین تست کشش با تقویت یک، دو و سه لایه گرافین انجام گرفته شد. در شکل ۵، نتایج حاصل از آزمون کشش تک محوره نانوکامپوزیت بدون نقص آلومینیوم گرافین تک لایه با آزمون کشش آلومینیوم خالص و نمونه مرجع مقایسه شده است. برای نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین بی‌نقص، مدول یانگ ۱۵۳ گیگا پاسکال و استحکام کششی ۲۲/۵ گیگا پاسکال به دست آمد که در مقایسه با نمونه آلومینیوم خالص به ترتیب حدود ۲۲۰ و ۳۲۰ درصد افزایش مشاهده می‌شود. مقادیر تنش نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین در حین بارگذاری روند صعودی دارند تا در کرنش ۰/۲۲ گرافین دچار گسیختگی می‌شود درحالی که برای آلومینیوم خالص کرنشی که بیشترین تنش در آن اتفاق افتاده است، ۰/۱۳ می‌باشد. همچنین چقرمگی که معادل سطح زیر نمودار تنش کرنش است برای نانو کامپوزیت بسیار بیشتر از نمونه آلومینیوم خالص است.

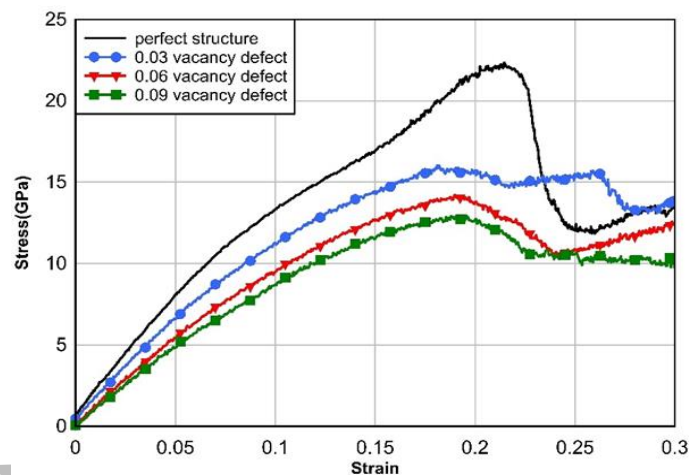


شکل ۵- مقایسه نمودار تنش کرنش آلومینیوم خالص و نانوکامپوزیت آلومینیوم تقویت شده با گرافین

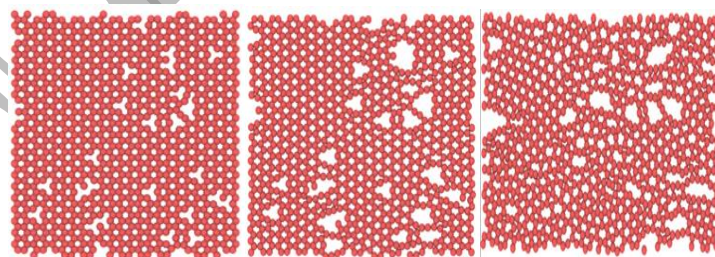
شکل ۶ منحنی‌های تنش کرنش نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای عیب جای خالی با درصد‌های اتمی ۳، ۶ و ۹ را نشان می‌دهند که با نمونه نانوکامپوزیت بی‌عیب آلومینیوم گرافین تک لایه مقایسه شده‌اند. همان‌طور که دیده می‌شود اعمال نقص جای خالی با ۳ درصد اتمی در ساختار گرافین باعث کاهش شیب ناحیه خطی منحنی تنش کرنش و استحکام کششی نانوکامپوزیت شده است. همان‌طور که در نمودار ۶ مشخص است، نانوکامپوزیت دارای نقص جای خالی ۳ درصد اتمی بیشترین تنش خود را به مقدار ۱۶/۰۳ گیگاپاسکال در کرنش ۰/۱۸ تحمل کرده است که استحکام کششی در مقایسه با نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین بی‌نقص، ۲۸/۱۱ درصد کاهش یافته است. این کاهش به دلیل ضعف در ساختار لایه گرافین با توجه به اعمال نقص جای خالی ۳ درصد می‌باشد.

استحکام کششی برای نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای ۶ درصد نقص جای خالی، مقدار ۱۵/۱ گیگاپاسکال به دست آمد که در مقایسه با ساختار بی نقص آلومینیوم گرافین، ۳۲/۲ درصد کاهش پیدا کرده است. برای نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص جای خالی ۹ درصد اتمی، استحکام کششی ۱۴/۷ گیگاپاسکال بدست آمد که در مقایسه با نمونه بی نقص به ترتیب ۳۴ درصد کاهش پیدا کرده است. بنابراین می توان بیان داشت که تنش حدنهایی نانوکامپوزیت سالم و بی نقص در حدود ۲۰۰ تا ۳۲۰ درصد افزایش پیدا کرده است و این روند با مشاهدات تجربی افزایش تنش حدنهایی در تست کشش کامپوزیت آلومینیوم-گرافین مطالعه آقای لی و همکارانش که افزایش ۲۰٪ در تنش حدنهایی را با افزودن ۱٪ گرافین به ساختار آلومینیوم مشاهده کردن همخوانی دارد [۴۱]. علاوه بر این در همه نمونه های دارای نقص جای خالی با افزایش درصد اتمی نقص، شیب ناحیه خطی منحنی تنش کرنش کاهش پیدا کرده است. نکته قابل توجه در خصوص اعمال نقص جای خالی بر ساختار گرافین در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین مربوط به افت شدید خواص مکانیکی با اعمال نقص جای خالی بر لایه گرافین است.

اشکال ۷ تا ۹ رفتار کششی لایه گرافین دارای نقص جای خالی حین بارگذاری کششی را در گام های زمانی مختلف نشان می دهند که با اعمال هرچه بیشتر درصد اتمی نقص جای خالی، مشاهده می شود که تغییر شکل و گسیختگی ساختار گرافین زودتر رخ می دهد.

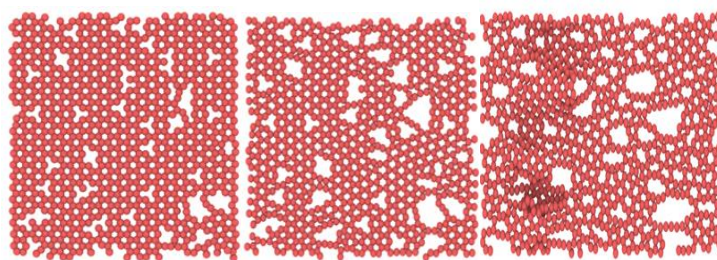


شکل ۶- مقایسه اثر نقص جای خالی بر مدول یانگ و استحکام کششی نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین با نمونه بی نقص



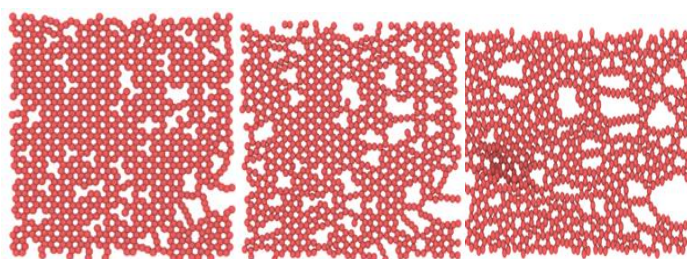
۰ پیکوتانیه      ۱۰ پیکوتانیه      ۲۵ پیکوتانیه

شکل ۷- رفتار کششی لایه گرافین دارای نقص جای خالی ۳ درصد در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین



۰ پیکوتانیه      ۱۰ پیکوتانیه      ۲۵ پیکوتانیه

شکل ۸- رفتار کششی لایه گرافین دارای نقص جای خالی ۶ درصد در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین



۰ پیکوتانیه      ۱۰ پیکوتانیه      ۲۵ پیکوتانیه

شکل ۹- رفتار کششی لایه گرافین دارای نقص جای خالی ۹ درصد در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین

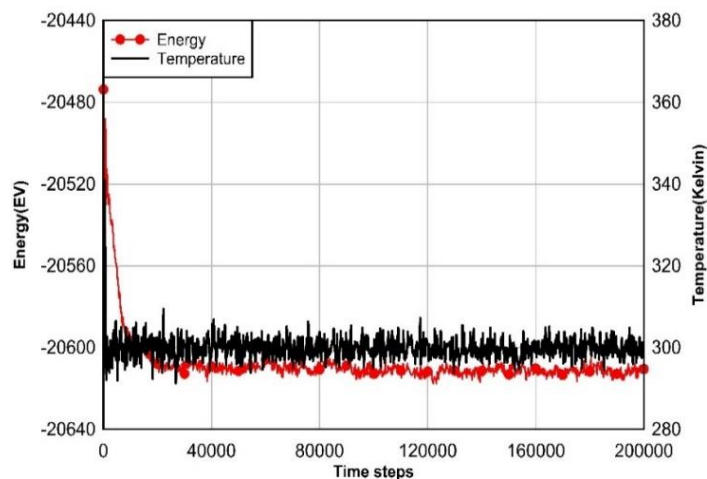
به منظور انجام آزمون کشش نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره در ساختار گرافین تک لایه که در شکل ۲-ب مشخص است، سه نمونه با شعاع ۵، ۷ و ۹ آنگستروم ایجاد شده است. پس از ایجاد ساختارهای مورد نظر، آزمون کشش در جهت X روی ساختار کامپوزیت آلومینیوم تقویت شده با تک لایه گرافین دارای حفره اعمال شد. شکل ۱۰ نمودار تعادل دمایی و انرژی پتانسیل نانوساختار آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره را نشان می دهد که در تمام مدت زمان شبیه سازی دما در محدوده ۳۰۰ کلوین نگهداشته شده است. علاوه بر این، انرژی پتانسیل ساختار در مقدار ۲۰۶۱۰- به سطح پایدار خود رسیده است. شکل ۱۱ منحنی های تنش کرنش مربوط به ساختار کامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۵، ۷ و ۹ و نقایسه آن با ساختار بی عیب نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین را نشان می دهد.

همان طور که در شکل ۱۱ مشخص است وجود نقص حفره در لایه گرافین باعث کاهش شیب ناحیه خطی منحنی تنش کرنش، استحکام کششی و مقدار کرنشی که بیشترین تنش در آن اتفاق می افتد، شده است. استحکام کششی برای ساختار کامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۵ آنگستروم ۱۸/۶ گیگاپاسکال به دست آمد که نسبت به ساختار کامل نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین باعث افت ۱۶/۵ درصدی شده است. برای ساختار نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۷ آنگستروم، مقدار استحکام کششی ۱۶/۶۷ گیگاپاسکال به دست آمد که در مقایسه با ساختار بی نقص نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین ۲۵/۲ درصد کاهش در استحکام کششی مشاهده می شود. در آخر و برای ساختار نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۹ آنگستروم استحکام کششی مقدار ۱۴/۴۹ به دست آمد که در مقایسه با ساختار بی نقص نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین کاهش ۳۵ درصدی حاصل شد.

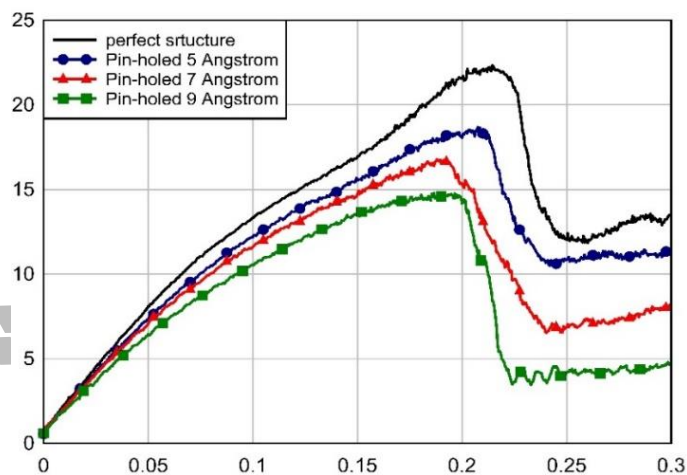
از مقایسه نمودارها می توان دریافت که با اعمال نقص حفره در لایه گرافین خواص مکانیکی شیب ناحیه خطی افت کرده است و با افزایش شعاع حفره، مقدار کرنشی که بیشترین تنش در آن اتفاق می افتد، کاهش پیدا کرده است. به عنوان مثال، در منحنی تنش کرنش نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین بی نقص این مقدار کرنش، ۰/۲۲ است، در حالی که برای نمونه دارای نقص حفره با شعاع ۹ این عدد مقدار ۰/۱۸ می باشد که این مهم، بیانگر آن است که نمونه های دارای نقص در اثر تنش کششی محوری زودتر



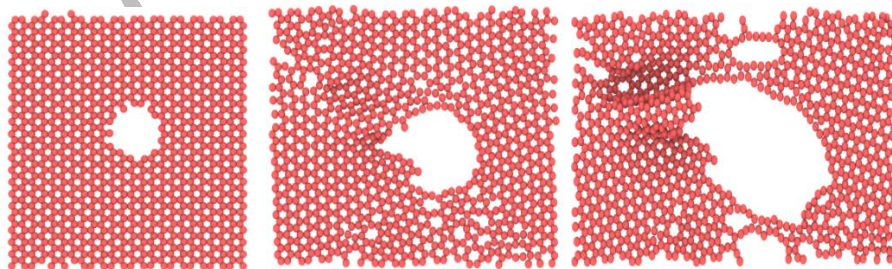
دچار تغییر شکل می‌شوند. همچنین تغییر شکل لایه گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۵، ۷ و ۹ آنگستروم حین آزمون کشش در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین در نمودارهای ۱۲-۱۴ نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش شعاع حفره در ساختار گرافین در گام زمانی یکسان، گسیختگی بیشتری دیده می‌شود.



شکل ۱۰- نمودار تعادل دمایی و انرژی پتانسیل نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین تک لایه با نقص حفره



شکل ۱۱- نمودار مقایسه تنش کرنش کامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره با نمونه بی نقص

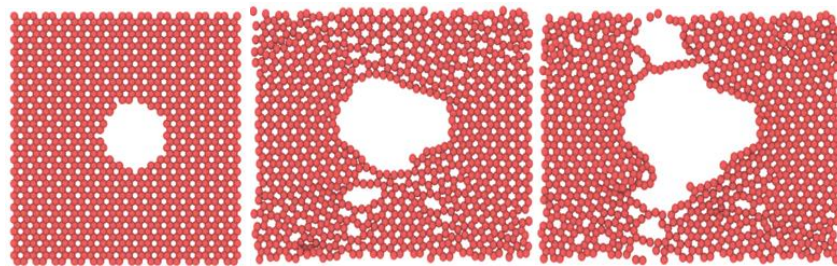


۰ پیکوتانیه

۸ پیکوتانیه

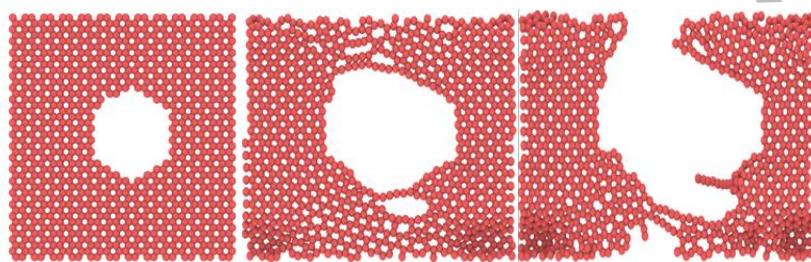
۱۷ پیکوتانیه

شکل ۱۲- رفتار کششی لایه گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۵ آنگستروم در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین



۰ پیکوثنائیه ۸ پیکوثنائیه ۱۷ پیکوثنائیه

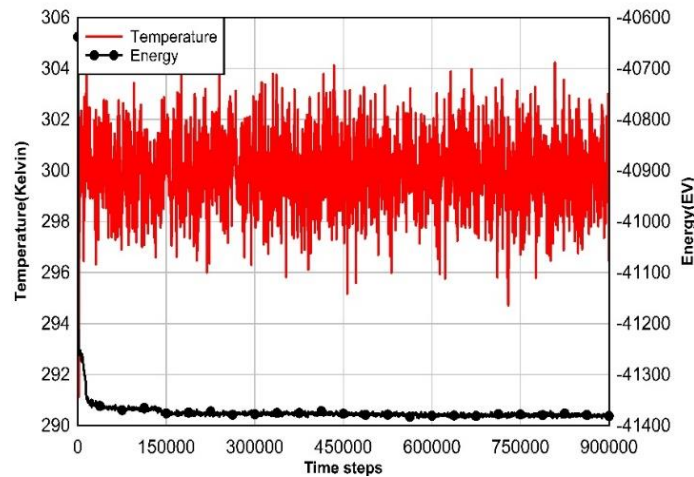
شکل ۱۳- رفتار کششی لایه گرافین دارای نقص حفره باشعاع ۷ آنگستروم در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین



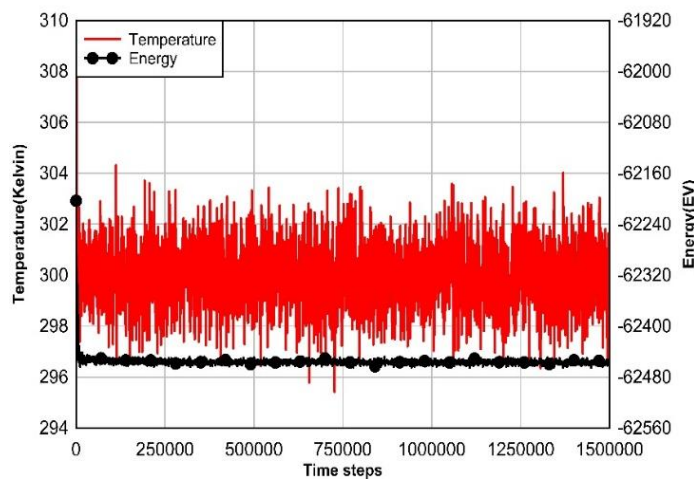
۰ پیکوثنائیه ۸ پیکوثنائیه ۱۷ پیکوثنائیه

شکل ۱۴- رفتار کششی لایه گرافین دارای نقص حفره باشعاع ۹ آنگستروم در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین

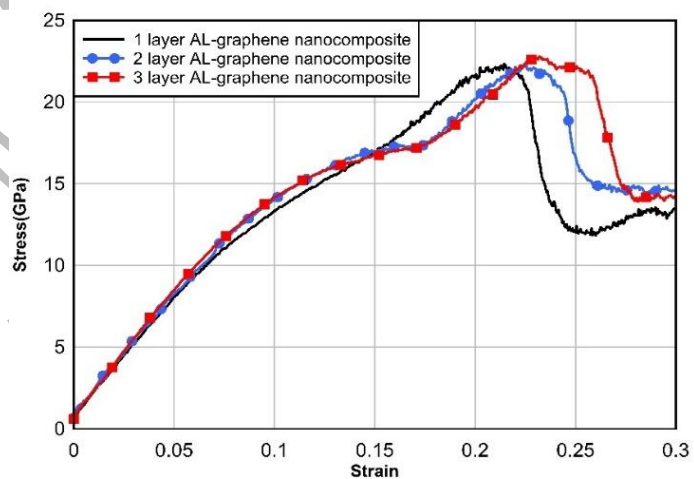
همگرایی انرژی پتانسیل و دمای ساختار آلومینیوم گرافین تک لایه در شکل ۳ آورده شده است. در شکل‌های ۱۵ و ۱۶ نمودارهای تعادل دما و انرژی پتانسیل ساختارهای آلومینیوم گرافین دو و سه لایه آورده شده است. در شکل ۱۵ و ۱۶ به خوبی نشان داده شده است که در حین شبیه‌سازی، دمای سیستم اتمی به خوبی در حدود ۳۰۰ کلوین نگه‌داشته شده است. همچنین مقادیر انرژی پتانسیل به تعادل رسیده به ترتیب برای ساختار دو و سه لایه ۴۱۳۸۰- و ۶۲۴۶۰- الکترون ولت است. منحنی تنش کرنش نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین یک، دو و سه لایه در شکل ۱۷ آورده شده است. مشاهده می‌گردد که با افزایش تعداد لایه از یک به سه، مقدار کرنشی که بیشترین تنش در آن اتفاق می‌افتد، به سمت ارقام بزرگ‌تری میل می‌کند. همچنین نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دولایه در کرنش ۰/۲۴ بیشترین تنش خود را تحمل می‌کند درحالی‌که طبق شکل برای نانساختار سه لایه این مقدار کرنش به ۰/۲۶ رسیده است و در حالت تک لایه این مقدار ۰/۲۲ است. این بدان معناست که با افزایش تعداد لایه گرافین، مقاومت نانوکامپوزیت در مقابل تغییر شکل افزایش پیدا خواهد کرد. همچنین با افزایش تعداد لایه‌های گرافین، شیب ناحیه خطی منحنی تنش کرنش نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین افزایش می‌یابد. در خصوص استحکام کششی نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین باید گفت که این مقادیر هم همچون شیب ناحیه خطی منحنی تنش کرنش، روند صعودی داشتند و با افزایش تعداد لایه، استحکام کششی هم افزایش یافت. به طوری‌که در نانوکامپوزیت تک لایه مقدار استحکام کششی ۲۲/۳ گیگاپاسکال به دست آمد. این عدد برای حالت دولایه نسبت به تک لایه ۱۰۰ مگاپاسکال رشد نشان داده است و مقدار ۲۲/۴ گیگاپاسکال گزارش می‌شود. در نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین سه لایه مقدار استحکام کششی ۲۲/۸ گیگاپاسکال ثبت شد که نسبت به نمونه تک لایه به میزان ۵۰۰ مگاپاسکال رشد داشته است.



شکل ۱۵- نمودار تعادل دمایی و انرژی پتانسیل نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دو لایه



شکل ۱۶- نمودار تعادل دمایی و انرژی پتانسیل نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین سه لایه



شکل ۱۷- نمودار مقایسه تنش کرنش نانوکامپوزیت‌های آلومینیوم گرافین چندلایه

در جدول‌های ۲-۴ مقادیر مدول یانگ و تنش حدنهایی نانوکامپوزیت برای تمام حالت‌های بررسی شده در این پژوهش آورده شده است. مدول یانگ برای نانوکامپوزیت با نقص جای خالی ۳، ۶ و ۹ درصد اتمی به ترتیب ۱۲۹/۶، ۱۱۶/۸ و ۱۰۲/۴ گیگاپاسکال می‌باشد که نسبت به نمونه بی نقص بی نقص به ترتیب ۱۵/۲، ۲۳/۶ و ۳۳ درصد کاهش یافته است. برای نانوکامپوزیت با

نقص حفره با شعاع ۷، ۵ و ۹ آنگستروم مدول یانگ به ترتیب ۱۴۰، ۱۳۵/۴ و ۱۲۰/۵۹ گیگاپاسکال است در مقایسه با نمونه بی نقص به ترتیب ۸/۴، ۱۱/۵ و ۲۱/۱ درصد کاهش پیدا کرده است. همچنین مدول یانگ برای نانوکامپوزیت‌های آلومینیوم گرافین یک، دو و سه لایه روند صعودی داشت که به ترتیب مقادیر ۱۵۷/۷، ۱۵۹/۷ و ۱۵۷/۷ گیگاپاسکال گزارش می‌شود که در مقایسه با نمونه آلومینیوم خالص به ترتیب، ۲۱۸، ۲۲۵ و ۲۲۸ درصد افزایش پیدا کرده است.

جدول ۲- مدول یانگ و استحکام حدنهایی نانو کامپوزیت آلومینیوم تقویت‌شده با گرافین دارای نقص جای خالی

نمونه	مدول یانگ (گیگاپاسکال)	استحکام کششی (گیگاپاسکال)
نقص جای خالی ۳ درصد اتمی	۱۲۹/۶	۱۶
نقص جای خالی ۶ درصد اتمی	۱۱۶/۸	۱۵/۱
نقص جای خالی ۹ درصد اتمی	۱۰۲/۴	۱۴/۷

جدول ۳- مدول یانگ و استحکام کششی نانو کامپوزیت آلومینیوم تقویت‌شده با گرافین دارای نقص حفره

نمونه	مدول یانگ (گیگاپاسکال)	استحکام کششی (گیگاپاسکال)
نقص حفره به شعاع ۵ آنگستروم	۱۴۰	۱۸/۶
نقص حفره به شعاع ۷ آنگستروم	۱۳۵/۴	۱۶/۷
نقص حفره به شعاع ۹ آنگستروم	۱۲۰/۶	۱۴/۵

جدول ۴- مدول یانگ و استحکام کششی آلومینیوم خالص و نانوکامپوزیت‌های آلومینیوم گرافین

نمونه	مدول یانگ (گیگاپاسکال)	استحکام کششی (گیگاپاسکال)
آلومینیوم خالص	۷۰	۷
نانوکامپوزیت با گرافین تک لایه	۱۵۳	۲۲/۳
نانوکامپوزیت با گرافین دو لایه	۱۵۷/۷	۲۲/۴
نانوکامپوزیت با گرافین سه لایه	۱۵۹/۷	۲۲/۸

## ۵- نتیجه گیری

در پژوهش حاضر، آزمون‌های کشش به کمک دینامیک مولکولی برای ارزیابی مدول یانگ و استحکام کششی نانو کامپوزیت آلومینیوم تقویت‌شده با گرافین انجام شد. سلول واحد در مقیاس نانو برای پیش‌بینی خواص مکانیکی نانو کامپوزیت آلومینیوم توسط لایه گرافین و همچنین اثر نقص جای خالی و نقص حفره، به دو صورت ساختار کامل و ساختارهای دارای نقص جای خالی ۳، ۶ و ۹ درصد اتمی و ساختار دارای نقص حفره با شعاع ۵، ۷ و ۹ آنگستروم شبیه‌سازی شد. همچنین برای بررسی اثر تعداد لایه گرافین بر خواص مکانیکی نانوکامپوزیت، هرکدام از این ساختارها به صورت جداگانه ایجاد شدند. یافته‌های مهم بر اساس مطالعه حاضر عبارت‌اند از:

- افزودن تک لایه گرافین به ساختار آلومینیوم خالص موجب افزایش قابل توجه مدول یانگ و استحکام کششی آلومینیوم خالص شد که برای نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین تک لایه این مقادیر ۱۵۳ و ۲۲/۳ گیگاپاسکال بدست آمد که در مقایسه با نمونه آلومینیوم خالص، به ترتیب ۲۱۸ و ۳۲۰ درصد افزایش یافته‌اند.

- تقویت ساختار آلومینیوم خالص به وسیله دو و سه لایه گرافین موجب افزایش مدول یانگ و استحکام کششی آلومینیوم خالص شد که برای نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دو و سه لایه، مقادیر مدول یانگ به ترتیب ۱۵۷/۷ و ۱۵۹/۷ بدست آمد که در مقایسه با آلومینیوم خالص ۲۲۵ و ۲۲۸ درصد افزایش مشاهده می شود. همچنین استحکام کششی برای نانوکامپوزیت آلومینیوم تقویت شده با دو و سه لایه گرافین مقادیر ۲۲/۴ و ۲۲/۸ بدست آمد که در مقایسه با آلومینیوم خالص به ترتیب ۲۹۸/۶ و ۳۰۴ درصد افزایش داشته است.
- نقص جای خالی باعث کاهش مدول یانگ و استحکام کششی نانوکامپوزیت شد. به طوری که برای نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص جای خالی ۳، ۶ و ۹ درصد اتمی مقادیر مدول یانگ به ترتیب ۱۲۹/۶، ۱۱۶/۸ و ۱۰۲/۴ گیگاپاسکال بدست آمد که در مقایسه با نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین بی نقص به ترتیب ۱۵/۲، ۲۳/۶ و ۳۳ درصد کاهش پیدا کرده است. مقادیر استحکام کششی برای نانوکامپوزیت های دارای نقص جالی خالی ۳، ۶ و ۹ درصد به ترتیب ۱۶/۰۳، ۱۵/۱ و ۱۴/۷ بدست آمد که در مقایسه با نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین بی نقص به ترتیب ۲۸/۱، ۳۲/۲ و ۳۴ درصد کاهش مشاهده می شود.
- نقص حفره باعث کاهش مدول یانگ و استحکام کششی نانوکامپوزیت شد. به طوری که برای نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین دارای نقص حفره با شعاع ۵، ۷ و ۹ آنگستروم به ترتیب مقادیر مدول یانگ ۱۴۰، ۱۳۵/۴ و ۱۲۰/۵۹ گیگاپاسکال بدست آمد که مدول یانگ در مقایسه با نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین بی نقص به ترتیب ۸/۴، ۱۱/۵ و ۲۱/۱ درصد کاهش پیدا کرده است. مقادیر استحکام کششی برای نانوکامپوزیت های دارای نقص حفره با شعاع ۵، ۷ و ۹ درصد به ترتیب ۱۸/۶، ۱۶/۶۷ و ۱۴/۴۹ بدست آمد که در مقایسه با نانوکامپوزیت آلومینیوم گرافین بی نقص به ترتیب ۱۶/۵، ۲۵/۲ و ۳۵ درصد کاهش مشاهده می شود.
- رفتار اثر نقص جای خالی و نقص حفره بر روی مدول یانگ و استحکام کششی در سه آزمون گرفته شده برای هر دو ساختار به صورت غیرخطی ظاهر شد.

## واژه نامه

Graphene sheet(GS)	ورقه های گرافن
Nanofullerenes	نانوفولرن ها
Carbon nanotubes	نانولوله های کربنی
Polyethylene	پلی اتیلن
Tensile strength	استحکام کششی
Vacancy Defect	نقص جای خالی
Molecular Nano Unit Cell	سلول واحد نانومولکولی
Molecular dynamics	دینامیک مولکولی
Time steps	گام زمانی
Cutoff radius	شعاع قطع

- [1] A. A. Balandin, "Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials," *Nature materials*, vol. 10, no. 8, pp. 569-581, 2011.
- [2] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, "Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene," *science*, vol. 321, no. 5887, pp. 385-388, 2008.
- [3] M. Sharma, L. Johnson, and J. McClure, "Diamagnetism of graphite," *Physics Letters A*, vol. 44, no. 7, pp. 445-446, 1973.
- [4] K. Mohammadi, "Application of SSPH Method in Free Vibration Analysis of Graphene," *The Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, vol. 31, no. 2, pp. 53-66, 2020.
- [5] E. Fradkin, "Critical behavior of disordered degenerate semiconductors. I. Models, symmetries, and formalism," *Physical Review B*, vol. 33, no. 5, p. 3257, 1986.
- [6] K. S. Novoselov *et al.*, "Electric field effect in atomically thin carbon films," *science*, vol. 306, no. 5696, pp. 666-669, 2004.
- [7] T. Kuilla, S. Bhadra, D. Yao, N. H. Kim, S. Bose, and J. H. Lee, "Recent advances in graphene based polymer composites," *Progress in polymer science*, vol. 35, no. 11, pp. 1350-1375, 2010.
- [8] H. Kim and C. W. Macosko, "Processing-property relationships of polycarbonate/graphene composites," *Polymer*, vol. 50, no. 15, pp. 3797-3809, 2009.
- [9] S. Stankovich *et al.*, "Graphene-based composite materials," *nature*, vol. 442, no. 7100, pp. 282-286, 2006.
- [10] M. El Achaby and A. Qaiss, "Processing and properties of polyethylene reinforced by graphene nanosheets and carbon nanotubes," *Materials & Design*, vol. 44, pp. 81-89, 2013.
- [11] I. Chang and B.-C. Chiang, "Mechanical buckling of single-walled carbon nanotubes: Atomistic simulations," *Journal of Applied Physics*, vol. 106, no. 11, 2009.
- [12] M. Ayatollahi, S. Shadlou, and M. Shokrieh, "Multiscale modeling for mechanical properties of carbon nanotube reinforced nanocomposites subjected to different types of loading," *Composite Structures*, vol. 93, no. 9, pp. 2250-2259, 2011.
- [13] M.-A. Mostaan, J. Davoodi, H. Alizadeh, and M. Yarifard, "Nontrivial tensile behavior of rutile TiO<sub>2</sub> nanowires: a molecular dynamics study," *The European Physical Journal B*, vol. 91, pp. 1-6, 2018.
- [14] H. Alizadeh, M. A. Mostaan, N. Malih, and J. Davoodi, "Size and shape dependent thermal properties of rutile TiO<sub>2</sub> nanoparticles: a molecular dynamics simulation study," *Molecular Simulation*, vol. 46, no. 5, pp. 341-349, 2020.
- [15] M. Binghi, S. Rahnema, A. Dadrasi, "Analysis of fracture behavior of carbon nitride poly crystalline by genetic algorithm and molecular dynamics methods," *The Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, 2023, doi: 10.22067/JACSM.2023.83323.1192.
- [16] A. Albooyeh, A. Dadrasi, M. Razavikia, "Investigation of the Effect of Geometric Defects and Temperature Changes on the Fracture Behavior of Boron Carbide Monocrystalline Structure by Molecular Dynamics," *The Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, 2022, doi: 10.22067/JACSM.2023.83323.1192.

- [17] M.A.H.Khotbesara.M.Ajri.M.Samadiyan, "Mechanical properties analysis of a monolayer biphenylene at different temperatures " *journal of modeling in engineering*, 2023, doi: 10.22075/JME.2023.31122.2485.
- [18] M.Samadian.M.Ajri.A.zizi.M.Amin.H.Khotbesara, "Investigating the pinhole effect on the mechanical properties of biphenylene," *applied physics A*, 2023, doi: <https://doi.org/10.1007/s00339-023-07112-z>.
- [19] F. Lin, Y. Xiang, and H.-S. Shen, "Buckling of graphene embedded in polymer matrix under compression," *International Journal of Structural Stability and Dynamics*, vol. 15, no. 07, p. 1540016, 2015.
- [20] Y. Y. Zhang and Y. Gu, "Mechanical properties of graphene: Effects of layer number, temperature and isotope," *Computational Materials Science*, vol. 71, pp. 197-200, 2013.
- [21] Y. Song *et al.*, "Microscopic mechanical properties of titanium composites containing multi-layer graphene nanofillers," *Materials & Design*, vol. 109, pp. 256-263, 2016.
- [22] H. Wang, G. Xie, Z. Ying, Y. Tong, and Y. Zeng, "Enhanced mechanical properties of multi-layer graphene filled poly (vinyl chloride) composite films," *Journal of Materials Science & Technology*, vol. 31, no. 4, pp. 340-344, 2015.
- [23] H. Kwon, D. H. Park, J. F. Silvain, and A. Kawasaki, "Investigation of carbon nanotube reinforced aluminum matrix composite materials," *Composites Science and Technology*, vol. 70, no. 3, pp. 546-550, 2010.
- [24] A. K. Srivastava, M. K. Dikshit, V. K. Pathak, and L. Khurana, "A molecular dynamics study of the buckling behaviour of graphene-reinforced aluminum nanocomposite plate," *Materials Physics and Mechanics*, vol. 42, pp. 234-241, 2019.
- [25] M.Ali.Farsi.A.R.Sehat, "Experimental and Numerical Study on Aluminum Damage Using a Nonlinear Model of Continuum Damage Mechanics," *The Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics* vol. 27, no. 2, pp. 41-54, 2016.
- [26] A.Bashiri.M.Hosseini.H.Hatami, "Experimental and Numerical Analysis of Single and Double layered Aluminum Sheet 3105 With Mechanical Joints under Drop Weight Impact," *The Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics* vol. 30, no. 2, pp. 109-123, 2019.
- [27] S. Shin, H. Choi, J. Shin, and D. Bae, "Strengthening behavior of few-layered graphene/aluminum composites," *Carbon*, vol. 82, pp. 143-151, 2015.
- [28] C. Li, A. R. Browning, S. Christensen, and A. Strachan, "Atomistic simulations on multilayer graphene reinforced epoxy composites," *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, vol. 43, no. 8, pp. 1293-1300, 2012.
- [29] P. Sedigh, A. Zare, and A. Montazeri, "Evolution in aluminum applications by numerically-designed high strength boron-nitride/Al nanocomposites," *Computational Materials Science*, vol. 171, p. 109227, 2020.
- [30] A. Du, Y. Chen, Z. Zhu, R. Amal, G. Q. Lu, and S. C. Smith, "Dots versus antidots: computational exploration of structure, magnetism, and half-metallicity in boron-nitride nanostructures," *Journal of the American Chemical Society*, vol. 131, no. 47, pp. 17354-17359, 2009.
- [31] X. Qi-lin, L. Zhen-huan, and T. Xiao-geng, "The defect-induced fracture behaviors of hexagonal boron-nitride monolayer nanosheets under uniaxial tension," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 48, no. 37, p. 375502, 2015.
- [32] A. Mokhalingam, D. Kumar, and A. Srivastava, "Mechanical behaviour of graphene reinforced aluminum nano composites," *Materials Today: Proceedings*, vol. 4, no. 2, pp. 3952-3958, 2017.

- [33] S.N.A.Kalkhoran.M.Vahvadi, "The Effect of Interatomic Potential Function on Nanometric Machining of Single Crystal Silicon," *The Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics* vol. 30, no. 2, pp. 17-32, 2019.
- [34] E. Lee and B.-J. Lee, "Modified embedded-atom method interatomic potential for the Fe–Al system," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 22, no. 17, p. 175702, 2010.
- [35] S. J. Stuart, A. B. Tutein, and J. A. Harrison, "A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions," *The Journal of chemical physics*, vol. 112, no. 14, pp. 6472-6486, 2000.
- [36] A. Kumar Srivastava and V. Kumar Pathak, "Elastic properties of graphene-reinforced aluminum nanocomposite: Effects of temperature, stacked, and perforated graphene," *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part L: Journal of Materials: Design and Applications*, vol. 234, no. 9, pp. 1218-1227, 2020.
- [37] B. K. Choi, G. H. Yoon, and S. Lee, "Molecular dynamics studies of CNT-reinforced aluminum composites under uniaxial tensile loading," *Composites Part B: Engineering*, vol. 91, pp. 119-125, 2016.
- [38] M. González, "Force fields and molecular dynamics simulations," *École thématique de la Société Française de la Neutronique*, vol. 12, pp. 169-200, 2011.
- [39] S. Plimpton, "Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics," *Journal of computational physics*, vol. 117, no. 1, pp. 1-19, 1995.
- [40] Y. Rong, H. He, L. Zhang, N. Li, and Y. Zhu, "Molecular dynamics studies on the strengthening mechanism of Al matrix composites reinforced by graphene nanoplatelets," *Computational Materials Science*, vol. 153, pp. 48-56, 2018.
- [41] J. Li *et al.*, "Microstructure and tensile properties of bulk nanostructured aluminum/graphene composites prepared via cryomilling," *Materials Science and Engineering: A*, vol. 626, pp. 400-405, 2015.