

# Investigating the Effects of Geometric Defects and Temperature Changes on the Fracture Behavior of Boron Carbide Monocrystalline Structure by Molecular\* Dynamics

Alireza Albooyeh<sup>\*1</sup>, Ali Dadrasi<sup>2</sup>  
Mohammadamin Razavikia<sup>3</sup>

## 1. Introduction

The discovery of graphene with a hexagonal structure in 2004 attracted the attention of researchers to two-dimensional structures such as boron nitride, phosphorus, silica, graphene, etc. Boron carbide ( $BC_3$ ), with low density and special mechanical properties, has applications in industry such as the production of abrasives, armor, thermoelectrics, and neutron detectors. This two-dimensional structure was identified by Tanaka et al. through epithelial growth at  $NbB_2$  levels. This structure has been introduced as the hardest material after diamond and cubic boron nitride. Moreover, the composites of this ceramic have high strength, low hardness, and low specific gravity. The mentioned properties make  $BC_3$  a suitable option for experimental studies and simulations.

This is a numerical study on the two-dimensional structure of  $BC_3$  based on molecular dynamics simulations. Mechanical properties including Young modulus, stress, and strain at break point were calculated. The effects of circular defect position with a fixed radius at different locations of the structure were studied. Moreover, the influence of increasing the temperature from 100 to 1000 K on the mechanical properties of the structure was investigated.

## 2. Calculation methods

In this study, molecular dynamics simulations in Lamps software were used to measure the mechanical properties of  $BC_3$ . The zigzag and armature directions were considered along the X

and Y axes, and the Tressof potential was used to depict the interactions between boron and carbon atoms, as well as the interaction of bonds. Moreover, the circular defects and temperatures changes as two effective elements on the mechanical properties were investigated. During the simulation, structures were balanced under NPT conditions and an integrated plate with dimensions of  $200A \times 200A$  with 13376 atoms was formed and put under axial tensile loading.

## 3. Results and discussion

### *The effect of circular defect position*

A circular defect with a radius of 15 angstroms was created in five positions on the structure containing 33, 66, 100, 133 and 166 angstroms. Figure 1 shows a schematic of the circular defect and its position at the center of the boron carbide structure.

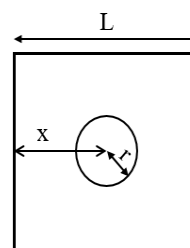


Figure 1. A schematic of the circular defect and its location at the center of the  $BC_3$  structure

The structure was put under tensile loading at 300K. Figure 2 shows the stress-strain diagram in the presence of a defect in five positions. The results showed that the lowest amount of mechanical properties occurred in the case of a circular defect at the center of the  $BC_3$  plate ( $X_{100}$ ) and the highest amount happened in the  $X_{166}$  position. The value of the Young modulus has risen from 741.01 GPa in the  $X_{66}$  position to 749.04 GPa in the  $X_{166}$  position, indicating an increase of 1.08%. This increasing behavior is also observed for stress and strain properties at the breaking point. It should be noted that at high stresses, defects with energy gain cause the atoms to become out of their steady state and the growth of the defect occurs.

\* Manuscript received: Junery,10 , 2022; Revised, April , 4 , 2022, Accepted, April, 27 , 2022.

<sup>1</sup> Corresponding author. Assistant Professor, School of Engineering, Damghan University, Damghan, Iran.

Email: a.albooyeh@du.ac.ir

<sup>2</sup> Assistant Professor, Mechanical Engineering, Azad Shahrood University, Shahrood, Iran.

<sup>3</sup> BSc. Student, School of Engineering, Damghan University, Damghan, Iran.

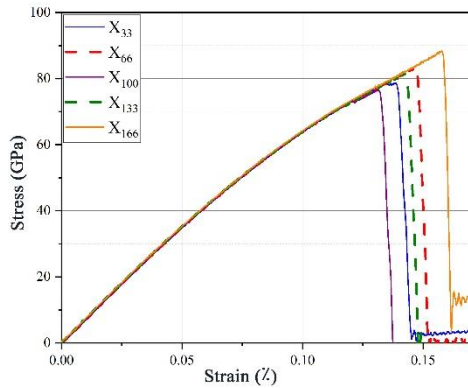


Figure 2. Stress-strain diagram of BC<sub>3</sub> on zigzag direction and five circular defect position

### The influence of temperature with fixed position of circular defect

Given that in the previous section, the best results were observed in the X<sub>166</sub> position, the structure with this defect position was examined at five temperatures of 100, 200, 300, 700, and 1000 K. Figure 3 shows the changes in stress and Young modulus with respect to temperature.

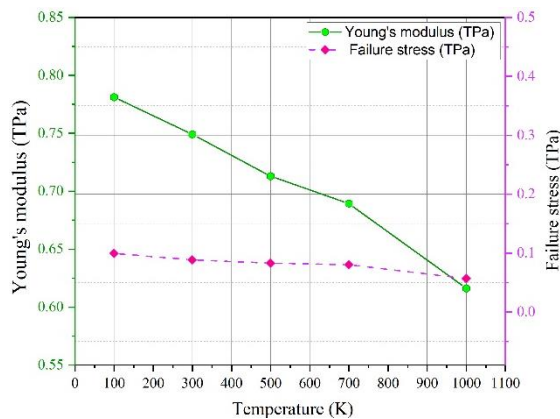


Figure 3. The changes in Young modulus and stress at the breaking point of BC<sub>3</sub> structure for different temperatures

The results showed that the mechanical properties decreased with increasing temperature. The values of Young modulus has risen from 781.21 GPa for temperature of 100K to 749.49, 712.98, 689.33 and 616.19 GPa for temperatures of 300, 500, 700 and 1000 K, which shows a decrease of 4.11%, 8.73%, 11.76%, and 21.12%, respectively. The value of stress at break point decreased from 99.59 GPa at temperature of 100 K to 56.71 GPa at 1000 K, which indicated a decreasing percentage of 57.61%.

Figure 4 shows the failure process of a carbide structure with a defect in the X<sub>166</sub> position at three different temperatures. It can be seen that with increasing strain, the concentration of stress around the defect increases, which causes failure in the structure.

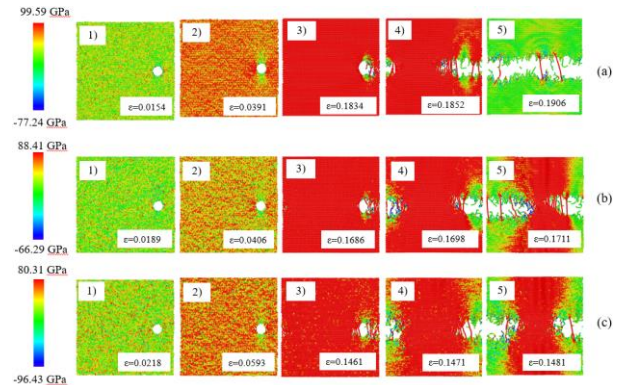


Figure 4. Crack propagation scenarios theoretically captured for BC<sub>3</sub> structure at (a) 100K, (b) 300K, (c) 700K for constant circular defects on X<sub>166</sub>

## 4. Conclusion

In this study, the mechanical properties of two-dimensional structure of BC<sub>3</sub> in the zigzag direction were investigated. Circular defect position and temperature changes as two affecting elements on the Young modulus, failure stress, and strain were studied. The results showed that the presence of a circular defect changes the mechanical properties. As its location approached the center of the structure from the edges, the mechanical properties decreased. The effect of five different temperatures of 100 K to 1000 K was investigated. The results showed a decrease of 21.12% in the Young modulus. Moreover, the amount of failure stress and strain of 1000 K was reduced by 43.05% and 46.19% compared to 100 K, respectively.

## بررسی تأثیر عیوب هندسی و تغییرات دما بر رفتار شکست ساختار مونوکریستال کاربید بور به روش دینامیک مولکولی\*

مقاله پژوهشی

علیرضا آلبویه<sup>(۱)</sup> علی دادرسی<sup>(۲)</sup> محمد امین رضوی کیا<sup>(۳)</sup>

**چکیده** کاربید بور ( $BC_3$ ) یکی از مواد دوبعدی نوظهور می باشد که خواص شیمیایی، مکانیکی و حرارتی منحصر به فردی را به نمایش گذاشته است. در این مقاله، خواص مکانیکی ساختار کاربید بور با بهره گیری از شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. با استفاده از پتانسیل ترسوف و شرایط مرزی دوره ای، دو آلان جایگاه نقص دایروی و تغییرات دما بر ساختار کاربید بور مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفتند. نتایج به دست آمده از شبیه سازی تست کشش بر ساختار کاربید بور نشان داد که کم ترین مقدار مدول یانگ و نیز تنش و کرنش در نقطه شکست در نمونه دارای نقص در مرکز ساختار اتفاق افتاد. همچنین با تغییر جایگاه نقص به سمت لبه ها، خواص مکانیکی افزایش یافت. با تغییر جایگاه نقص از مرکز ساختار به لبه ها، مقادیر مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه شکست و راستای زیگزاگ به ترتیب  $1/29\%$ ،  $1/15\%$  و  $20\%$  افزایش یافت. بررسی تغییرات دما از  $100$  کلوین تا  $1000$  کلوین نشان داد که افزایش دما باعث کاهش خواص مکانیکی شد، به طوری که مقدار مدول یانگ از  $781/21$  گیگاپاسکال در دمای  $100$  کلوین به  $616/19$  گیگاپاسکال در دمای  $1000$  کلوین کاهش یافت. همچنین، مقدار تنش و کرنش در نقطه شکست برای تغییرات دما، نسبت به دمای  $100$  کلوین ذکر شده به ترتیب  $43/04\%$  و  $45/88\%$  کاهش یافت.

**واژه های کلیدی** دینامیک مولکولی، خواص مکانیکی، شبیه سازی، کاربید بور، نقص مکانیکی.

### مقدمه

با کشف مواد دوبعدی، مانند مواد تک لایه ای که ضخامت آن ها اندازه یک اتم یا سلول است، تحقیقات در مقیاس نانو بر روی این ساختارها آغاز شد. نانو مواد دوبعدی، نیازهای گسترده ای از صنعت را مرتفع کردند و طیف گسترده ای از طراحی مواد را به خود اختصاص دادند. از جمله ساختارهای دوبعدی شناخته شده می توان به بور نیتريد [1]، فسفرین [2]، سیلیس [3]، گرافن [4] و... اشاره کرد. در سال  $2004$ ، کشف گرافن با ساختار شش وجهی توجه محققان را به ساختارهای دوبعدی معطوف کرد [5]. گرافن از روش های مختلفی سنتز می شود که لایه برداری مکانیکی، لایه برداری شیمیایی و رسوب بخار شیمیایی از جمله آن ها می باشد [6]. این ساختار سبک و انعطاف پذیر، با خواص مکانیکی [7]، هدایت گرمایی [8] و الکتریکی [9] کم نظیر، کاندیدای مقبولی برای کاربردهای متعدد صنعتی و تحقیقاتی است.

دینامیک مولکولی یک آزمایشگاه مجازی مناسب و قدرتمند برای شبیه سازی است. در شبیه سازی دینامیک مولکولی پارامترهایی نظیر فشار، دما، پتانسیل و... بر روی ساختار مورد

آزمایش کنترل و پس از رسیدن به تعادل و پایداری نسبت به زمان، ساختار تولید می شود. در دینامیک مولکولی حرکت اتم ها و مولکول ها و تغییرات آن ها نسبت به زمان بررسی می شود. با این روش، می توان ساختارهایی چون نانولوله ها، ساختارهای دوبعدی و سه بعدی، پلی کریستال ها و... را در مقیاس نانو و میکرو شبیه سازی کرد و خواص مختلف آن ها شامل خواص مکانیکی، ارتعاشی، الکتریکی، رسانش حرارتی، اپتیکی و... را اندازه گیری کرد [10-13].

کاربید بور، با چگالی کم و خواص مکانیکی ویژه، در صنعت کاربردهایی چون تولید مواد ساینده [14]، زره پوش [15]، ترموالکتریک [16] و آشکارسازی های نوترونی را دارد [17]. این ساختار دوبعدی در سال  $2005$  توسط تاناکا و همکاران، از طریق رشد هم بافته در سطوح  $NbB_2$  شناسایی شد [18]. این ساختار، سخت ترین ماده بعد از الماس و نیتريد بور مکعبی معرفی شده است [19]. همچنین کامپوزیت های این سرامیک، علاوه بر مقاومت و سختی بالا، وزن مخصوص پایینی دارند. خواص ذکر شده، کاربید بور را به گزینه مناسبی برای مطالعات تجربی و

\* تاریخ دریافت مقاله  $1400/10/20$  و تاریخ پذیرش آن  $1401/2/7$  می باشد.

(۱) نویسنده مسئول: استادیار، مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه دامغان.

(۲) استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه آزاد شاهرود.

(۳) دانشجوی کارشناسی، مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه دامغان.

نتایج، بیشتر بودن مدول یانگ در راستای آرمچیر نسبت به زیگزگ در همه موارد را نشان داد. این اتفاق برای تنش و کرنش شکست، به جز یک مورد نیز صادق بود. لی و همکاران [27] با به کارگیری تحلیل دینامیک مولکولی، تابش لیزر بر میکروساختار سیلیکا را مطالعه کردند و دریافتند که در حضور نقص نیم کره، پیوندهای Si-Si آسان تر دچار دگرگونی می شوند. اسلام [28] تأثیر مرزخانه ها بر استحکام کششی و مقاومت شکست را در یک نمونه پلی کریستال  $\text{MoS}_2$  مطالعه کرد. در نمونه ای با مرزخانه ۱۵ نانومتری، مقاومت کششی به اندازه ۱۵/۷ گیگاپاسکال گزارش شد. هم چنین نتایج حاکی از تضعیف قابل توجه خواص مکانیکی این ساختار در اثر مرزخانه ها بود.

در این مقاله، یک مطالعه عددی بر ساختار دوبعدی کاربرد بور و بر پایه شبیه سازی دینامیک مولکولی انجام شد. خواص مکانیکی از قبیل مدول یانگ، تنش در نقطه شکست و کرنش در نقطه شکست در راستای زیگزگ محاسبه شدند. در ابتدا، تأثیر جایگاه نقص های دایروی با شعاع ثابت و در مکان های مختلف از ساختار مورد مطالعه قرار گرفت. سپس، تأثیر افزایش دما از ۱۰۰ به ۱۰۰۰ کلوین بر روی ساختاری که بیشترین خواص مکانیکی را از خود نشان داد، مورد بررسی قرار گرفت.

### روش های محاسبه

در این مقاله، شبیه سازی دینامیک مولکولی که یک فرایند مناسب برای جایگزین کردن روش های آزمایشگاهی می باشد، برای اندازه گیری خواص مکانیکی کاربرد بور استفاده شد. این روش بر اساس حرکات اتمی سیستم و تکامل دینامیکی از طریق حل عددی قانون دوم نیوتن و معادلات حاکم بر فیزیک کلاسیک بنا شده است [29]. موقعیت نقص دایروی و دماهای مختلف به عنوان دو المان تأثیرگذار بر خواص مکانیکی مورد بررسی قرار گرفت. در این تحقیق، تمامی مدل سازی ها در نرم افزار لمپس انجام شدند [30]. شکل (۱) متغیر هندسی مورد استفاده را نشان می دهد.  $L$  به عنوان طول ساختار کاربرد بور و  $x$  به عنوان فاصله مرکز نقص دایروی از ضلع جانبی ساختار بود. لازم به ذکر است که شعاع نقص دایروی ( $r$ ) ثابت در نظر گرفته شد.

شبیه سازی ها تبدیل کرده است. دوراندوردو [20] خواص مکانیکی و الکتریکی کاربرد بور آمورف را با استفاده از دینامیک مولکولی شبیه سازی کرد. در این تحقیق کاربرد بور غیربلوری به عنوان یک نیمه رسانا معرفی شد. مردول و همکاران [21] در یک شبیه سازی دینامیک مولکولی، وابستگی های دمایی و ترمودینامیکی و خواص ساختاری تک لایه کاربرد بور را بررسی کردند. نتایج نشان داد، ضریب انبساط حرارتی خطی به دلیل برانگیختگی حالت های خمش خارج از صفحه با فرکانس پایین، در یک محدوده دمایی، مقداری منفی است. کروتایف و همکاران [22] تغییرات ساختار کاربرد بور را تحت تنش های غیرهیدرواستاتیک مطالعه کردند. در طی این شبیه سازی، سه تغییر ساختاری خم شدن ناگهانی زنجیره سه اتمی، بی نظمی ساختار و تغییر در تقارن بلوری مورد بحث قرار گرفت. خمش ناگهانی ۴۰ گیگاپاسکالی در اثر وجود تغییر شکل ویژه رخ داد، در حالی که در بارگذاری شبه استاتیک، ساختار مورد آزمایش تا ۷۰ گیگاپاسکال پایدار ماند. هم چنین نقص کریستالی مقدار آستانه تنش را کاهش داد. در مقاله ای دیگر خادمی زاهدی و همکاران [23] خواص مکانیکی کاربرد بور دوبعدی را مورد بررسی قرار دادند. آن ها دو نوع صفحه در حضور نقص و عدم حضور نقص را در دینامیک مولکولی شبیه سازی کردند. هم چنین دو نقص ترک و دایره در دماهای متفاوت تحت بار محوری قرار گرفت. مقدار مدول یانگ در دمای ۲ کلوین در راستای آرمچیر ۷۷۹/۴۳ گیگاپاسکال و در راستای زیگزگ ۸۱۵/۰۲ گیگاپاسکال گزارش شد. مولایی و همکاران [24] در سال ۲۰۲۱ کاربرد بور دوپ شده را مدل و خواص مکانیکی آن را استخراج کردند. با افزودن ۵ درصد اتم بور به ساختار کاربرد بور در راستای آرمچیر، مدول یانگ و تنش در نقطه شکست به ترتیب ۶٪ و ۱۹٪ کاهش یافت.

حضور نقص هایی با اشکال هندسی مختلف، تأثیر چشم گیری بر رفتارهای مکانیکی، حرارتی و... دارد. با ایجاد نقص و حذف شدن تعداد زیادی از اتم ها و مولکول ها و هم چنین وجود تمرکز تنش در لبه های نقص ایجاد شده، کاهش خواص مختلف مواد و ساختارهای گوناگون حاصل می شود. نصر اصفهانی و همکاران [25] با ایجاد عیوبی در مقیاس نانو، هدایت حرارتی گرافن را بررسی کردند. در حضور نقص بیضوی ۶ نانومتری، کاهش ۱۵٪ هدایت گرمایی مشاهده شد. آلبویه و همکاران [26] تأثیر نقص نقطه ای بر نانولوله بور نیتريد با استفاده از نرم افزار لمپس (LAMMPS) در دو راستای زیگزگ و آرمچیر مطالعه کردند.

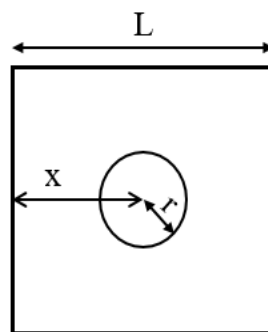
نرم افزار OVITO انجام شد [33]. شکل (۲) نشان دهنده ساختار کاربید بور می باشد که هر اتم بور (آبی رنگ) توسط سه اتم کربن (خاکستری رنگ) احاطه شده اند.

مدول یانگ که شیب قسمت خطی نمودار تنش - کرنش است، از رابطه هوک محاسبه شد.

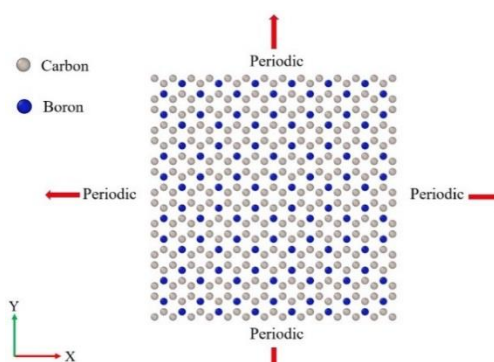
$$E = \sigma \varepsilon \quad (1)$$

### بحث و نتایج

**تأثیر موقعیت مکانی نقص دایروی.** خواص مکانیکی کاربید بور اعم از مدول یانگ، تنش در نقطه شکست و کرنش در نقطه شکست اندازه گیری شدند. ابتدا برای یافتن بهترین موقعیت نقص دایروی، پنج موقعیت ۳۳، ۶۶، ۱۰۰، ۱۳۳ و ۱۶۶ آنگستروم انتخاب شدند. شعاع نقص دایروی با مقدار ثابت ۱۵ آنگستروم در نظر گرفته شد. هم چنین، در بخش اول، دمای سیستم ۳۰۰ کلوین انتخاب شد. خواص مکانیکی یاد شده در جدول (۱) گزارش شده است. شایان ذکر است که مقدار مدول یانگ از قسمت خطی شیب نمودار تنش - کرنش به دست آمده است. با توجه به جدول (۱) تغییرات موقعیت مکانی نقص دایروی باعث تغییرات در خواص مکانیکی شده است. نتایج نشان می دهد، کم ترین مقدار خواص مکانیکی زمانی رخ داده است که نقص دایروی در مرکز صفحه کاربید بور قرار دارد (حالت X100). هم چنین، بیشترین مقدار خواص مکانیکی در موقعیت X166 گزارش شده است؛ مقدار مدول یانگ در دو موقعیت X66 به X166 از ۷۴۱/۰۱ گیگاپاسکال به ۷۴۹/۰۴ گیگاپاسکال رسیده است که نشان دهنده افزایش ۱/۰۸٪ می باشد. این روند افزایشی برای خواص تنش و کرنش در نقطه شکست نیز قابل ملاحظه است. باید اشاره کرد که در تنش های زیاد، نقص ها با کسب انرژی موجب می شوند تا اتم ها از حالت پایدار خود خارج شوند و رشد نقص اتفاق می افتد [34]. دادرسی و همکاران [32] تأثیر مسیر ترک را در صفحات گرافن مانند BC<sub>3</sub> تجزیه و تحلیل کردند. آن ها کاهش مدول یانگ و تنش شکست را در اثر افزایش طول نقص ها مشاهده کردند. روند تغییرات مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه شکست در شکل (۳ و ۴) قابل مشاهده می باشد. هم چنین برای تحلیل بهتر تأثیر موقعیت مکانی نقص دایروی در ساختار کاربید بور در راستای زیگزاگ، نمودار تنش - کرنش هر پنج نمونه در شکل (۵) ارائه شده است.



شکل ۱ شکل شماتیک نقص دایروی و مکان آن در مرکز ساختار کاربید بور

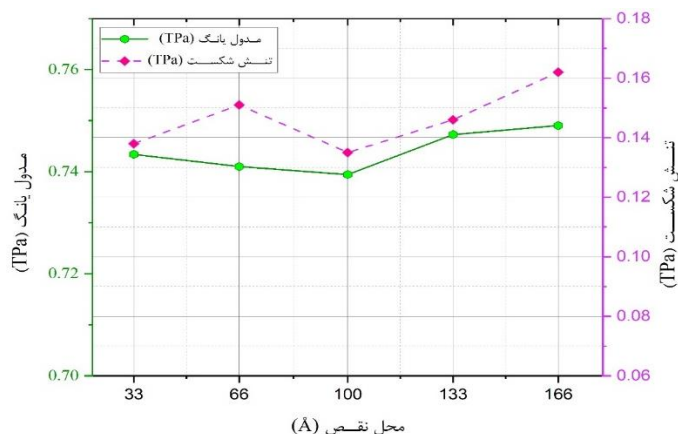


شکل ۲ نمای بالا از تک لایه ساختار کاربید بور لانه زنبوری

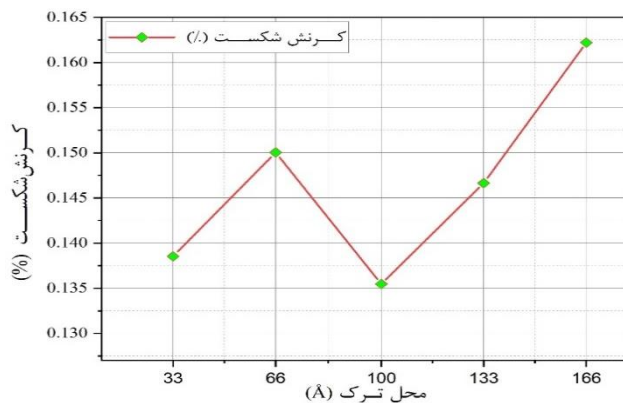
شرایط مرزی دوره ای و پتانسیل بین اتمی از نقش اساسی برای محاسبه نیروی های بین اتمی در شبیه سازی لمپس برخوردارند [31]. جهات زیگزاگ و آرمیچر در راستای محورهای X و Y در نظر گرفته شدند. از پتانسیل ترسوف برای به تصویر کشیدن فعل و انفعالات بین اتم های بور و کربن و هم چنین تعامل پیوندها استفاده شد [32]. پتانسیل ترسوف یکی از مناسب ترین و پرکاربردترین پتانسیل ها برای مدل سازی های خواص مکانیکی و حرارتی مواد مختلفی از جمله گرافن، کاربید بور، تنگستن دی سولفات و دیگر شبکه های کربن دو بعدی استفاده شده است [23]. بعد از آن، در طی شبیه سازی انرژی جنبشی و پتانسیل سیستم و هم چنین انرژی کل آن به پایداری قابل قبولی رسید. در طول فرایند شبیه سازی، ساختارها تحت شرایط NPT به تعادل رسید و صفحه یکپارچه ای با ابعاد ۲۰۰Å × ۲۰۰Å تشکیل شد که تحت بارگذاری کششی محوری قرار گرفت. هم چنین، الگوریتم سرعت برای حل معادلات حرکت ذرات با گام زمانی ۰/۰۰۱ ps استفاده شد. در این ساختارهای مورد بررسی دارای ۱۳۳۷۶ اتم بودند. برای ایجاد نقص در ساختار، ابتدا نقص با هندسه مورد نظر را ایجاد و بعد با بهره گیری از دستور "delete atom" نقص در محل مورد نظر ایجاد شد. در نهایت روند شکست و پیکربندی اتمی و تجسم ساختار با

جدول ۱ خواص مکانیکی صفحه کاربید بور در دمای ۳۰۰ کلوین و پنج موقعیت مختلف نقص دایروی

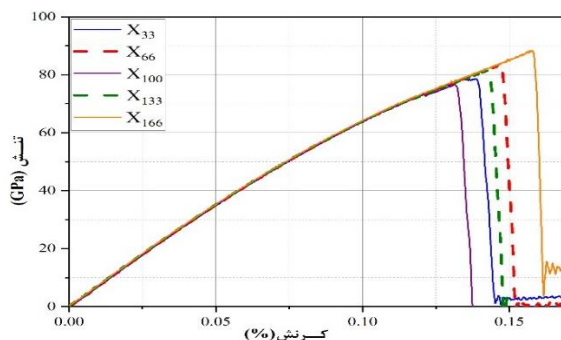
موقعیت (Å)	مدول یانگ (GPa)	تنش شکست (GPa)	کرنش شکست (%)	درصد افزایش مدول یانگ	درصد افزایش تنش شکست	درصد افزایش کرنش شکست
X <sub>33</sub>	۷۴۳/۴۱	۷۸/۷۳	۰/۱۳۸	مینا	مینا	مینا
X <sub>66</sub>	۷۴۱/۰۱	۸۳/۳۳	۰/۱۵۱	-۳/۲۲	۰/۰۵	۰/۰۹
X <sub>100</sub>	۷۳۹/۴۵	۷۶/۸۱	۰/۱۳۵	-۵/۳۲	-۰/۰۲	-۰/۰۲
X <sub>133</sub>	۷۴۷/۲۸	۸۱/۵۳	۰/۱۴۶	۵/۳۴	۰/۰۳	۰/۰۵
X <sub>166</sub>	۷۴۹/۰۴	۸۸/۴۱	۰/۱۶۲	۷/۵۷	۰/۱۲	۰/۱۷



شکل ۳ تغییرات مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه شکست ساختار کاربید بور برای موقعیت‌های مکانی مختلف نقص دایروی



شکل ۴ تغییرات کرنش در نقطه شکست ساختار کاربید بور برای موقعیت‌های مکانی مختلف نقص دایروی



شکل ۵ نمودار تنش-کرنش ساختار کاربید بور در راستای زیگزاگ و در حضور پنج موقعیت مختلف نقص دایروی

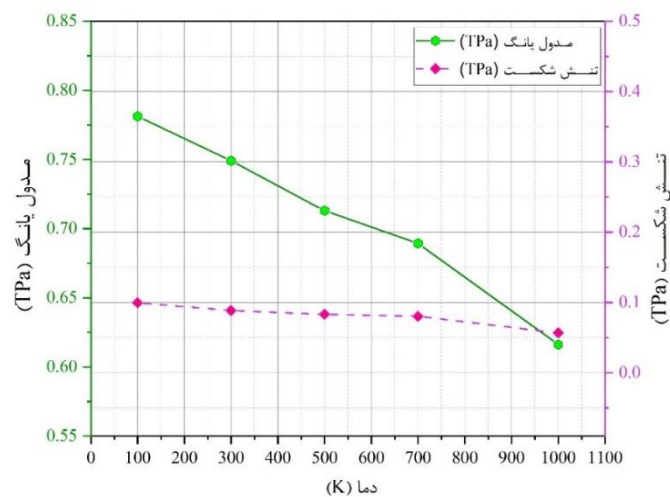
است به دلیل نتایج بهتر نمونه  $X_{166}$  در بخش قبل، تغییرات دما برای این نمونه بررسی شد. تغییرات مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه شکست در جدول (۲) گزارش شده است. همچنین شکل (۶ و ۷) تغییرات هر سه خاصیت مکانیکی را برای ساختار کاربرد بور به نمایش گذاشته است.

**تأثیر دما بر خواص مکانیکی با موقعیت مکانی ثابت نقص دایروی.** در این بخش، به منظور بررسی افزایش دما بر خواص مکانیکی ساختار یاد شده، تأثیر پنج دمای مختلف ۱۰۰، ۳۰۰، ۷۰۰ و ۱۰۰۰ کلوین بر مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه شکست ساختار کاربرد بور مورد بررسی قرار گرفت. شایان ذکر

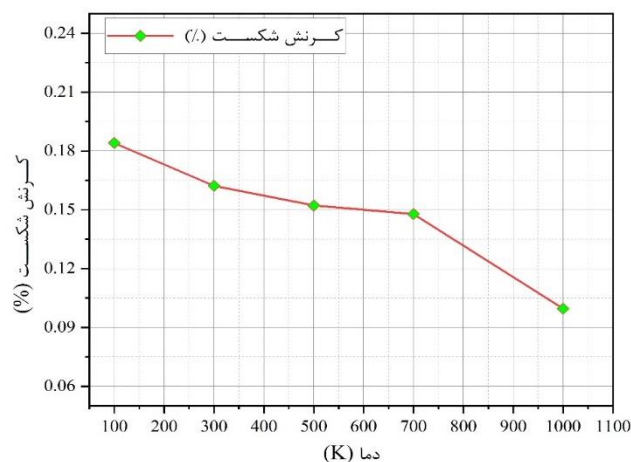
جدول ۲ خواص مکانیکی صفحه کاربرد بور در دماهای مختلف و

موقعیت مکانی ثابت نقص دایروی

دما (K)	کرنش شکست (%)	تنش شکست (GPa)	مدول یانگ (GPa)
۱۰۰	۰/۱۸۴	۹۹/۵۹	۷۸۱/۲۱
۳۰۰	۰/۱۶۲	۸۸/۴۱	۷۴۹/۰۴
۵۰۰	۰/۱۵۲	۸۳/۱۶	۷۱۲/۹۸
۷۰۰	۰/۱۴۷	۸۰/۳۰	۶۸۹/۳۳
۱۰۰۰	۰/۰۹	۵۶/۷۱	۶۱۶/۱۹



شکل ۶ تغییرات مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه شکست ساختار کاربرد بور برای دماهای مختلف

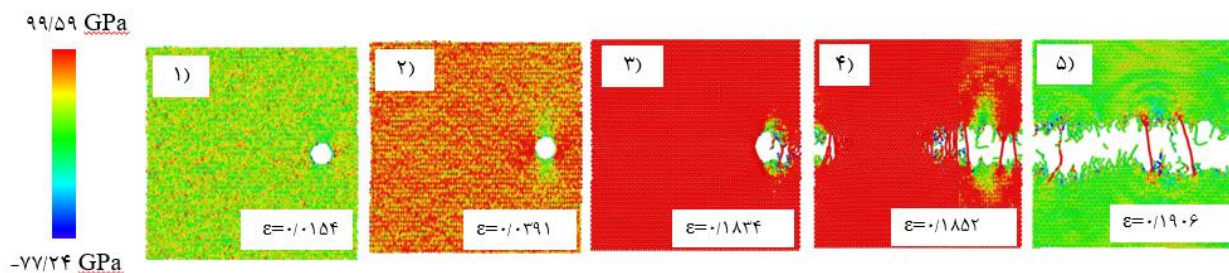


شکل ۷ تغییرات کرنش در نقطه شکست ساختار کاربرد بور برای دماهای مختلف

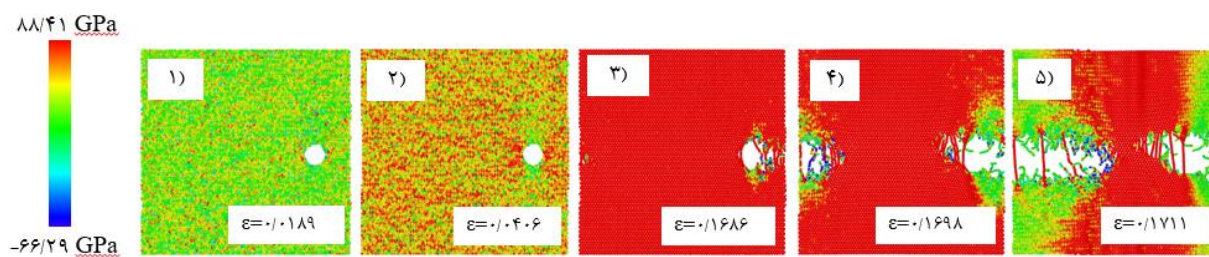
دما از ۱۰۰ به ۱۰۰۰ کلوین، موجب کاهش خواص مکانیکی می-گردد [35].

تنش در نقطه شکست نیز روند نزولی را از خود نشان می‌دهد. مقدار این خاصیت مکانیکی از ۹۹/۵۹ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به ۵۶/۷۱ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰۰ کلوین کاهش یافته‌است که نشان‌دهنده روند کاهشی به میزان ۵۷/۶۱٪ می‌باشد. با اعمال نیروی کششی به ساختار، انرژی جنبشی به انرژی کرنشی تبدیل می‌شود و در دماهای بالا با افزایش انرژی جنبشی، انرژی کرنشی کاهش می‌یابد و منجر به کاهش تنش بیشینه می‌شود [34, 33]. این روند نزولی می‌تواند به دلیل کم شدن انرژی برخورد بین اتمی و همچنین افزایش فاصله اتم‌ها در اثر افزایش دما باشد [35]. این سیر نزولی در خاصیت کرنش در نقطه شکست نیز قابل مشاهده است.

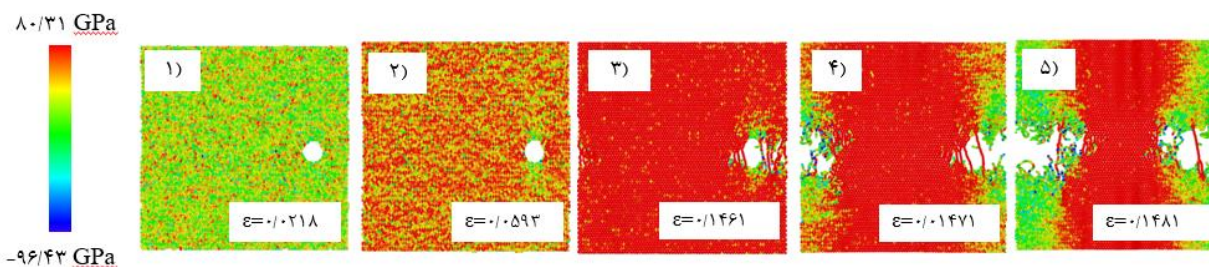
همان‌طور که قابل مشاهده است، با افزایش دما، خواص مکانیکی کاهش می‌یابد. به‌عنوان نمونه، مقدار مدول یانگ از ۷۸۱/۲۱ گیگاپاسکال برای دمای ۱۰۰ کلوین به ۷۴۹/۰۴، ۷۱۲/۹۸، ۶۸۹/۳۳ و ۶۱۶/۱۹ گیگاپاسکال به ترتیب برای دماهای ۳۰۰، ۵۰۰، ۷۰۰ و ۱۰۰۰ رسیده‌است که به ترتیب ۸/۷۳٪، ۴/۱۱٪، ۲۱/۱۲٪ و ۱۱/۷۶٪ کاهش را نشان می‌دهد. این نکته قابل ذکر است که در مقیاس اتمی، افزایش دما باعث تضعیف پیوند شیمیایی می‌شود. از آن‌جایی که پیوند شیمیایی عاملی اثرگذار بر خواص مکانیکی است، افزایش دما موجب کاهش خواص مکانیکی می‌گردد [23]. تحقیقات مختلفی مبنی بر تأثیر دما بر خواص مکانیکی شده‌است؛ دهقانی و همکاران اثر افزایش دما را بر خواص مکانیکی ساختار برلیوم اکساید مورد آزمایش قرار دادند. آن‌ها با استفاده از دماهای گوناگون نشان دادند که افزایش



شکل ۸ روند تغییرات شکست ساختار کاربید بور برای دمای ۱۰۰ کلوین موقعیت مکانی ثابت نقص دایروی (X<sub>۱۶۶</sub>)



شکل ۹ روند تغییرات شکست ساختار کاربید بور برای دمای ۳۰۰ کلوین موقعیت مکانی ثابت نقص دایروی (X<sub>۱۶۶</sub>)



شکل ۱۰ روند تغییرات شکست ساختار کاربید بور برای دمای ۷۰۰ کلوین موقعیت مکانی ثابت نقص دایروی (X<sub>۱۶۶</sub>)



کمک روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. دو المان موقعیت مکانی نقص دایروی و تغییرات دما به‌عنوان پارامترهای اثرگذار بر مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه شکست ساختار در راستای زیگزاگ مورد تحلیل قرار گرفت. نتایج به‌دست آمده نشان داد که حضور نقص دایروی باعث تغییرات خواص مکانیکی گردید و هرچه مکان آن از لبه‌های ساختار به مرکز ساختار نزدیک شد، کاهش خواص مکانیکی را به دنبال داشت. در گام بعدی، تأثیر پنج دمای مختلف ۱۰۰ تا ۱۰۰۰ کلوین مورد بررسی قرار گرفت. نتایج به‌دست‌آمده حاکی از آن بود که افزایش دما باعث کاهش خواص مکانیکی شد. نتایج به‌دست‌آمده نشان از کاهش ۲۱/۱۲٪ مدول یانگ داشت. همچنین مقدار تنش و کرنش در نقطه شکست دمای ۱۰۰۰ کلوین به ترتیب به میزان ۴۳/۰۵٪ و ۴۶/۱۹٪ نسبت به دمای ۱۰۰ کلوین کاهش یافت.

#### واژه نامه

Polycrystalline	پلی کریستال
Doped	دوپ شده
Periodic boundry condtion	شرایط مرزی دوره‌ای
Tensile strength	مقاومت کششی
Defect	نقص
Failure stress	تنش شکست
Failure strain	کرنش شکست
Temperature	دما
Mechanical properties	خواص مکانیکی

شکل‌های (۸-۱۰) روند تغییرات شکست ساختار کاربرد بور را برای سه دمای مختلف نشان می‌دهد. هر سه نمونه برای موقعیت مکانی ثابت نقص دایروی (X<sub>۱۶۶</sub>) می‌باشد. همان‌گونه که مشاهده می‌شود با افزایش کرنش، تمرکز تنش در اطراف نقص بیشتر می‌شود که همین امر موجب ایجاد شکست در ساختار می‌گردد. این روند تا زمانی ادامه پیدا می‌کند که مقاومت ساختار کاربرد بور به کم‌ترین مقدار خود برسد و صفحه از هم گسیخته شود. نکته مهم دیگری که باید به آن توجه داشت این است که با افزایش دما، ساختار مورد بررسی در کرنش کم‌تری به نقطه شکست می‌رسد. نتایج نشان می‌دهد که افزایش دما از ۱۰۰ کلوین به ۷۰۰ کلوین، تأثیر به‌سزایی بر خواص مکانیکی مورد بررسی داشته‌است. با توجه به شکل‌های (۸-۱۰) و جدول (۲) شکست در ساختار کاربرد بور به ترتیب در ۰/۱۷۱ و ۰/۱۴۸ درصد رخ داده‌است. گسترش و رشد عیوب به معنی گسستن پیوندهای بین بور- کربن و کربن- کربن می‌باشد. دادرسی و همکاران [36] تأثیر دما بر پاسخ مکانیکی ساختار کاربرد بور را بررسی کردند. نتایج آن‌ها نشان داد که افزایش دما و افزایش طول ترک خواص مکانیکی کاربرد بور را کاهش می‌دهد. با انتشار فضاهای خالی می‌توان انتظار نوسان در تنش را داشت که این امر موجب تمرکز تنش در اطراف نقوص می‌گردد [37-39]. شایان ذکر است که تمرکز تنش در اطراف نقص‌های ایجاد شده در ساختار را می‌توان به‌عنوان یکی از عوامل اصلی کاهش خواص مکانیکی برشمرد [40, 41].

#### جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در این مقاله، خواص مکانیکی ساختار دوبعدی کاربرد بور با

#### مراجع

- Bondarev, A. V., Fraile, A., Polcar, T., and Shtansky, D. V., "Mechanisms of Friction and Wear Reduction by H-BN Nanosheet and Spherical W Nanoparticle Additives to Base Oil: Experimental Study and Molecular Dynamics Simulation", *Tribology International*, Vol. 151, Pp. 106493, (2020).
- Aghdasi, P., Ansari, R., Rouhi, S., Yousefi, S., Goli, M., and Soleimani, H., "Investigating Elastic and Plastic Characteristics of Monolayer Phosphorene under Atomic Adsorption by the Density Functional Theory", *Physica B: Condensed Matter*, Vol. 600, Pp. 412603, (2021).
- Takari, A., Ghasemi, A. R., Hamadani, M., Sarafrazi, M., and Najafidoust, A. "Molecular Dynamics Simulation and Thermo-Mechanical Characterization for Optimization of Three-Phase Epoxy/TiO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> Nano-Composites", *Polymer Testing*, Vol. 93, Pp. 106890, (2021).

4. Sunnardianto, G. K., Bokas, G., Hussein, A., Walters, C., Moulto, O. A., and Dey, P., "Efficient Hydrogen Storage in Defective Graphene and its Mechanical Stability: A Combined Density Functional Theory and Molecular Dynamics Simulation Study", *International journal of Hydrogen energy*, Vol. 46, Pp. 5485-5494, (2021).
5. Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D. E., Zhang, Y., Dubonos, S. V., and Firsov, A. A., "Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films", *Science*, Vol. 306, Pp. 666-669, (2004).
6. Rajabi, M., Zarei, D., Rashed, Gh. R., "An overview of the structure and properties of polymer / graphene nanocomposites," *Journal of Studies in the World of Color*, Vol. 2, 23001, (2012) (In Persian).
7. Lee, C., Wei, X., Kysar, J. W., and Hone, J., "Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene", *Science*, Vol. 321, Pp. 385-388, (2008).
8. Yu Q., Jauregui, L. A., Wu W., Colby R., Tian J., Su Z., Cao H., Liu Z., Pandey D., and Wei D., "Control and Characterization of Individual Grains and Grain Boundaries in Graphene Grown by Chemical Vapour Deposition", *Nature Materials*, Vol. 10, Pp. 443-449, (2011).
9. Kim, K. S., Zhao, Y., Jang, H., Lee, S. Y., Kim, J. M., Kim, K. S., ... & Hong, B. H. Kim, K. S., Zhao, Y., Jang, H., Lee, S. Y., Kim, J. M., Kim, K. S., & Hong, B. H., "Large-Scale Pattern Growth of Graphene Films for Stretchable Transparent Electrodes", *Nature*, Vol. 457, Pp. 706-710, (2009).
10. Grieshammer, S., Momenzadeh, L., Belova, I. V., and Murch, G. E., "Ionic and Thermal Conductivity of Pure and Doped Ceria by Molecular Dynamics", *Solid State Ionics*, Vol. 355, Pp. 115424, (2020).
11. Zamani, S. M. M., and Behdinin, K., "A Molecular Dynamics Study of the Mechanical and Electrical Properties of Polydimethylsiloxane-Ni Conductive Nanocomposites", *Composites Science and Technology*, Vol. 200, Pp. 108463, (2020).
12. Djaili, S., Gueddim, A., Guibadj, A., and Bouarissa, N., "Temperature Dependence of the Optical Properties of MgO: Ab Initio Molecular Dynamics Calculations", *Optik*, Vol. 200, Pp. 163421, (2020).
13. Islam, M., Thakur, M. S. H., Mojumder, S., Al Amin, A., and Islam, M. M., "Mechanical and vibrational characteristics of functionally graded Cu-Ni nanowire: a molecular dynamics study," *Composites Part B: Engineering*, Vol. 198, Pp. 108212, (2020).
14. Thevenot, F. (1991). "A review on boron carbide." Pp. 59-88.
15. Domnich, V., Reynaud, S., Haber, R. A., and Chhowalla, M., "Boron carbide: structure, properties, and stability under stress," *Journal of the American Ceramic Society*, Vol. 94, Pp. 3605-3628, (2011).
16. Werheit, H., "Boron-rich solids: a chance for high-efficiency high-temperature thermoelectric energy conversion," *Materials Science and Engineering: B*, Vol. 29, Pp. 228-232, (1995).
17. Emin, D., "Unusual properties of icosahedral boron-rich solids," *Journal of Solid State Chemistry*, Vol. 179, Pp. 2791-2798, (2006).
18. Tanaka, H., Kawamata, Y., Simizu, H., Fujita, T., Yanagisawa, H., Otani, S., and Oshima, C., "Novel macroscopic BC<sub>3</sub> honeycomb sheet," *Solid state communications*, Vol. 136, Pp. 22-25, (2005).
19. Rao B. S., "*Ceramic Powders for High-tech Applications*", Universities Press, (1995).
20. Durandurdu M., "Ab initio simulation of amorphous BC<sub>3</sub>," *Computational Materials Science*, Vol. 178, Pp. 109622, (2020).
21. Mrudul, M. S., Thomas, S., and Ajith, K. M., "Anharmonicity in the temperature-dependent bending rigidity of BC<sub>3</sub> monolayer," *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Vol. 146, Pp. 109574, (2020).
22. Korotaev, P., Pokatashkin, P., and Yanilkin, A., "The role of non-hydrostatic stresses in phase transitions in boron carbide," *Computational Materials Science*, Vol. 121, Pp. 106-112, (2016).

23. Zahedi, R. K., Shirazi, A. H. N., Alimouri, P., Alajlan, N., and Rabczuk, T., "Mechanical properties of graphene-like BC<sub>3</sub>; a molecular dynamics study," *Computational Materials Science*, Vol. 168, Pp. 1-10, (2019).
24. Molaei, F., Eshkalak, K. E., Sadeghzadeh, S., and Siavoshi, H., "Assessing mechanical properties of single-layer B-doped C<sub>3</sub>N and N-doped BC<sub>3</sub> nanosheets and their hybrid," *Computational Materials Science*, Vol. 192, Pp. 110368, (2021).
25. Esfahani, M. N., Jabbari, M., Xu, Y., and Soutis, C., "Effect of nanoscale defects on the thermal conductivity of graphene," *Materials Today Communications*, Vol. 26, Pp. 101856, (2021).
26. Albooyeh, A. R., Dadrasi, A., and Mashhadzadeh, A. H., "Effect of point defects and low-density carbon-doped on mechanical properties of BNNTs: A molecular dynamics study," *Materials Chemistry and Physics*, Vol. 239, Pp. 122107, (2020).
27. Li, L., Zhang, M. W., and Zhao, Z. Z., "Molecular dynamics analysis of the effect of laser and defects on the microstructure of fused silica," *Journal of Electronic Science and Technology*, Vol. 18, Pp. 100045, (2020).
28. Islam, Z., and Haque, A., "Defects and grain boundary effects in MoS<sub>2</sub>: A molecular dynamics study," *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Vol. 148, Pp. 109669, (2021).
29. Zhang, Y., and Huang, H., "Stability of single-wall silicon carbide nanotubes—molecular dynamics simulations," *Computational Materials Science*, Vol. 43, Pp. 664-669, (2008).
30. Prieve, D. C., and Russel, W. B., "Simplified predictions of Hamaker constants from Lifshitz theory," *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 125, no. 1, Pp. 1-13, (1988).
31. Byggmästar, J., Hodille, E. A., Ferro, Y., and Nordlund, K., "Analytical bond order potential for simulations of BeO 1D and 2D nanostructures and plasma-surface interactions," *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 30, Pp. 135001, (2018).
32. Dadrasi, A., Fooladpanjeh, S., Eshkalak, K. E., Sadeghzadeh, S., and Saeb, M. R., "Crack Pathway Analysis in Graphene-Like BC<sub>3</sub> Nanosheets: Towards a Deeper Understanding", *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, Vol. 107, Pp. 107980, (2021).
33. Stukowski, A., "Visualization and Analysis of Atomistic Simulation Data with OVITO—the Open Visualization Tool", *Modelling and simulation in materials science and engineering*, Vol. 18, Pp. 015012, (2009).
34. Mortazavi, B., Ahzi, S., Toniazzi, V. and Rémond, Y., "Nitrogen Doping and Vacancy Effects on the Mechanical Properties of Graphene: A Molecular Dynamics Study", *Physics Letters A*, Vol. 376, Pp. 1146-1153, (2012).
35. Fang, T., Chang, W. and Yang, J. C., "Temperature Effect on Mechanical Properties of Graphene Sheets under Tensile Loading", *Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures*, Vol. 7, Pp. 1811-1816, (2012).
36. Dadrasi, A., Fooladpanjeh, S., Albooyeh, A., Salmankhani, A., Mashhadzadeh, A. H. and Saeb, M. R., "A Theoretical Insight into the Fracture Behavior of the Edge-Cracked Polycrystalline BC<sub>3</sub> Nanosheets", *Computational Materials Science*, Vol. 192, Pp. 110345, (2021).
37. Dehaghani, M. Z., Mashhadzadeh, A. H., Salmankhani, A., Karami, Z., Habibzadeh, S., Ganjali, M. R., & Saeb, M. R., "Fracture Toughness and Crack Propagation Behavior of Nanoscale Beryllium Oxide Graphene-Like Structures: A Molecular Dynamics Simulation Analysis", *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 235, Pp. 107194, (2020).
38. Li, J., Dong, L., Xie, H., Meng, W., Zhang, X., Zhang, J. and Zhao, W., "Molecular Dynamics Simulation of Nanocrack Propagation Mechanism of Polycrystalline Titanium under Tension Deformation in Nanoscale", *Materials Today Communications*, Vol. 26, Pp. 101837, (2021).
39. Chang, X., Ji, Y., and Li, H., "Mechanical Properties of PtS<sub>2</sub> Monolayer with Rectangular Defects: A Molecular Dynamics Study", *Computational Materials Science*, Vol. 196, Pp. 110552, (2021).

40. Guo, F. L., Tan, D., Wu, T., Huang, P., Li, Y. Q., Hu, N., and Fu, S. Y., "Experimental Characterization and Molecular Dynamics Simulation of Thermal Stability, Mechanical Properties and Liquid Oxygen Compatibility of Multiple Epoxy Systems for Cryotank Applications", *Extreme Mechanics Letters*, Vol. 44, Pp. 101227, (2021).
41. Chowdhury, E. H., Rahman, M. H., Fatema, S., and Islam, M. M., "Investigation of the Mechanical Properties and Fracture Mechanisms of Graphene/WSe<sub>2</sub> Vertical Heterostructure: A Molecular Dynamics Study", *Computational Materials Science*, Vol. 188, Pp. 110231, (2021).