

## Cutting-Edge Computational Insights into Polycrystalline BN Behavior: A Molecular Dynamics and Response Surface Approach

Mostafa Ahmadi Nokhandan<sup>1</sup>, Ali Dadrasi<sup>2\*</sup> , Fariborz Forouhandeh<sup>1</sup>, Vali Parvaneh<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Mechanical Engineering, Sha.C., Islamic Azad university, Shahrood, Iran

<sup>2</sup> Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Iran

### ARTICLE INFO

#### Article Type

Original Research

#### Article History

Received: February 09, 2025

Revised: June 02, 2025

Accepted: June 03, 2025

ePublished: July 19, 2025

### ABSTRACT

This paper analyzes the fracture behavior of two-dimensional boron nitride (BN) structures, examining both monocrystalline and polycrystalline states. Molecular dynamics simulation was employed as a cost-effective method for modeling and testing two-dimensional plates. The mechanical performance of monocrystalline BN was investigated as a function of temperature, in both armchair and zigzag directions. Additionally, the mechanical properties such as Young's modulus, fracture stress, and fracture strain were tested for polycrystalline BN in the presence and absence of cracks, across a temperature range of 100 to 900 K, for various region counts. The results indicate that increasing temperature reduces the mechanical properties of monocrystalline BN, with higher values observed in the armchair direction compared to the zigzag direction. Changes in strain rate led to a decrease in Young's modulus, while an increase in the number of regions in polycrystalline BN results in lower fracture stress. Additionally, greater crack length leads to an increase in stress intensity within this two-dimensional structure. Finally, the quadratic response surface method exhibited the lowest average error in both the test and train phases and was chosen as the selected model. The findings demonstrate significant variations in mechanical performance based on thermal conditions, and structural composition. Notably, polycrystalline BN exhibits distinct fracture behaviors depending on its microstructural arrangement, while monocrystalline BN shows directional mechanical advantages. Furthermore, the quadratic response surface method emerges as a highly effective predictive tool, offering accurate modeling capabilities for BN nanostructures.

**Keywords:** Boron Nitride, Mechanical Properties, Nanostructure, Molecular Dynamic, Polycrystalline, Modelling.

### How to cite this article

Nokhandan M A, Dadrasi A, Forouhandeh F, Parvaneh V, Cutting-Edge Computational Insights into Polycrystalline BN Behavior: A Molecular Dynamics and Response Surface Approach. Modares Mechanical Engineering; 2025;25(04):191-202.

\*Corresponding author's email: [ali.dadrasi@hsu.ac.ir](mailto:ali.dadrasi@hsu.ac.ir)

\*Corresponding ORCID ID: 0000-0001-9787-8909



Copyright© 2025, TMU Press. This open-access article is published under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License which permits Share (copy and redistribute the material in any medium or format) and Adapt (remix, transform, and build upon the material) under the Attribution-NonCommercial terms.



## تحلیل محاسباتی پیشرفته در مورد رفتار پلی کریستال نیتريد بور: رویکرد دینامیک مولکولی و سطح پاسخ

مصطفی احمدی نوخندان<sup>۱</sup>، علی دادرسی<sup>۲\*</sup>، فریبرز فروهنده<sup>۱</sup> و ولی پروانه<sup>۱</sup>

<sup>۱</sup>گروه مهندسی مکانیک، واحد شاهرود، دانشگاه آزاد اسلامی، شاهرود، ایران

<sup>۲</sup>گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی مهندسی، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار، ایران

### چکیده

در این مقاله، تحلیل رفتار شکست ساختار دو بعدی نیتريد بور در دو حالت مونوکریستال و پلی کریستال مورد بررسی قرار گرفت. از شبیه سازی دینامیک مولکولی به عنوان یک روش مقرون به صرفه برای مدلسازی و آزمایش صفحات دو بعدی استفاده شد. عملکرد مکانیکی مونوکریستال نیتريد بور به عنوان تابعی از دما در دو راستای آرمچیر و زیگزآگ بررسی شد. همچنین، خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست برای پلی کریستال نیتريد بور در حضور و عدم حضور ترک و در بازه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین برای تعداد ناحیه‌ی مختلف مورد آزمایش قرار گرفت. نتایج نشان داد که افزایش دما سبب کاهش خواص مکانیکی مونوکریستال نیتريد بور می‌شود و نتایج در راستای آرمچیر بالاتر از زیگزآگ گزارش شد. تغییرات نرخ کرنش موجب کاهش مدول یانگ شد و افزایش تعداد ناحیه در پلی کریستال نیتريد بور کاهش خاصیت مکانیکی تنش شکست را به همراه داشت. همچنین، افزایش طول ترک سبب شد تا مقدار شدت تنش در این ساختار دو بعدی افزایش یابد. در بخش پایانی، مدلسازی به روش سطح پاسخ مرتبه دو دارای کمترین میانگین خطا در دو بخش آزمایش و آموزش بود و به عنوان مدل منتخب برگزیده شد. یافته‌ها تغییرات قابل توجهی را در عملکرد مکانیکی بر اساس شرایط دمایی و ترکیب ساختاری نشان داد. پلی کریستال نیتريد بور بسته به آرایش ریزساختاری خود، رفتارهای شکست متمایزی را ارائه کرد. علاوه بر این، روش سطح پاسخ به عنوان یک ابزار پیش‌بینی بسیار مؤثر ظاهر شد و قابلیت‌های مدلسازی دقیقی را برای نانوساختارهای نیتريد بور ارائه کرد.

### اطلاعات مقاله

#### نوع مقاله

مقاله پژوهشی

#### تاریخچه مقاله

دریافت: ۱۴۰۳/۱۱/۲۱

بازنگری: ۱۴۰۴/۰۳/۱۲

پذیرش: ۱۴۰۴/۰۳/۱۳

ارائه آنلاین: ۱۴۰۴/۰۴/۲۸

**کلیدواژه‌ها:** نیتريد بور، خواص مکانیکی، نانوساختار، دینامیک مولکولی، پلی کریستال، مدلسازی

### نحوه ارجاع به این مقاله

احمدی نوخندان مصطفی، دادرسی علی، فروهنده فریبرز و ولی پروانه، تحلیل محاسباتی پیشرفته در مورد رفتار پلی کریستال نیتريد بور: رویکرد دینامیک مولکولی و سطح پاسخ، مهندسی مکانیک مدرس، ۲۰۲۰-۱۹۱(۰۴):۱۴۰۴.

\*پست الکترونیکی نویسنده عهده دار مکاتبات: [ali.dadrasi@hsu.ac.ir](mailto:ali.dadrasi@hsu.ac.ir)

\*شناسه اراکید نویسنده عهده دار مکاتبات: ۸۹۰۹-۹۷۸۷-۰۰۰۱-۰۰۰۰-۰۰۰۰



## ۱- مقدمه

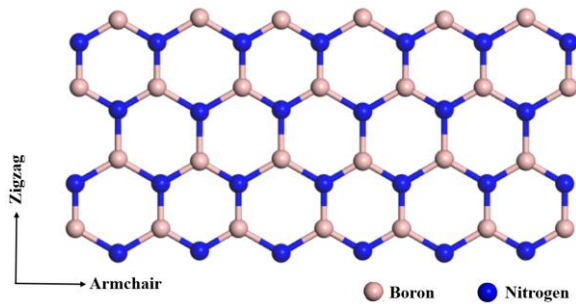
مواد دو بعدی مانند گرافن [۱] به دلیل خواص حرارتی [۲]، مکانیکی [۳] و الکتریکی [۴] که دارا می باشند، نظر بسیار از محققین را به خود جلب کرده اند. سخت ترین موادی که تا کنون شناسایی شده است، اتم-های کربن می باشد [۵]، از این رو، گرافن به عنوان یک نماینده مناسب در طیف گسترده ای از کاربردها همچون سیستم های نانوالکترومکانیکی [۶]، نانوالکتریک [۷] و نانوکامپوزیت [۸] مورد استفاده قرار می گیرد. از ویژگی های گرافن می توان به استحکام مکانیکی بالا [۹]، هدایت حرارتی مناسب [۱۰] و ویژگی های جذب قابل قبول [۱۱] اشاره کرد. اما، فاصله باند گرافن صفر می باشد و نمی توان به عنوان ابرخازن یا ترانزیستور در مدارهای الکتریکی استفاده شود [۱۲]. بنابراین، اصلاح ساختار با جایگزینی اتم های دیگر که دارای فاصله باند بزرگتری هستند، می تواند خواص مختلف آن را افزایش دهد. با توجه به مطالعات مختلفی که بر ساختارهای دو بعدی مانند سیلیکون ژرمانیوم، کاربید بور و نیتريد بور صورت گرفته است، نتایج نشان می دهد که این ساختارها می توانند جایگزین مناسبی برای گرافن باشند. ساختار نیتريد بور بهترین نمونه از یک نانومواد تک لایه است که شباهت بسیاری به گرافن دارد، با این تفاوت که اتم های برن و نیتروژن جایگزین اتم های کربن شده اند. فاصله ی باند نیتريد بور معادل ۱/۴۵ آنگستروم می باشد. تحقیقات صورت گرفته بر این ساختار نظر بسیار از دانشمندان را به خود جلب کرده است. مقاومت حرارتی بالا و شرایط اکسیداسیون بهتر این ساختار سبب شده است که جایگزین مناسبی برای گرافن باشد. بیان این نکته که ساختارهای دو بعدی در طبیعت به صورت یک دست وجود ندارند، حائز اهمیت است. این ساختارها معمولاً با نقص های رایج قابل استفاده هستند. وجود حفره ها و عیوب درون این مواد باعث اثرگذاری آنها بر خواص مختلف می گردد. این عیوب هندسی که تحت بارگذاری خارجی ایجاد می شوند، تغییر شکل هندسی درون و بیرون صفحه را به همراه دارد که بر خواص مختلف اثرگذار هستند [۱۳]. ساختارهای پلی کریستال از کنار هم قرار گرفتن بخش های کوچک یک ساختار که بوسیله ی مرزدهانه ها به یکدیگر متصل شده اند، بوجود می آیند [۱۴].

ترن و همکاران [۱۵] خواص مکانیکی ساختارهای گرافن و BC<sub>۳</sub>N را بررسی کردند. نتایج آنها نشان داد که حضور نقص هندسی در ساختارها موجب تضعیف استحکام ساختارها می شود. مدول یانگ و تنش تسلیم ساختار BC<sub>۳</sub>N با نقص های دایروی (قطر ۲ تا ۷ نانومتر) کاهش یافت. دادرسی و همکاران [۱۶] به بررسی خواص مکانیکی ساختار مونو و پلی کریستال BC<sub>۳</sub> پرداختند. نتایج آنها نشان داد که افزایش نواحی در ساختار پلی کریستال باعث کاهش خواص مکانیکی می گردد. همچنین، افزایش دما نیز کاهش مدول یانگ، تنش و کرنش شکست را به همراه دارد. فن و همکاران [۱۷] نشان دادند که مرزدهانه ها منجر به نوسانات درون صفحه ای گرافن می شود که برای کاهش تغییر انرژی مرزدهانه ها و همچنین، طول پیوند اتم های کربن و تنش اولیه مفید است. در تحقیقی دیگر، ما و همکاران [۱۸] ساختار تک لایه ی گرافن را مورد آزمایش قرار دادند. نتایج آنها نشان داد که حضور نقص در ساختار مورد بررسی سبب ایجاد تمرکز تنش در اطراف نقص شده و در نتیجه،

کاهش مدول یانگ را به همراه دارد. همچنین، افزایش طول ترک از ۱۰ آنگستروم به ۶۰ آنگستروم به عنوان یک عامل اثرگذار بر خواص مکانیکی معرفی شد. پنگ و همکاران [۱۹] با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی به بررسی خواص مکانیکی شکل دیگری از گرافن با در نظر گرفتن عواملی مانند نرخ کرنش، دما و نقص های هندسی پرداختند. نتایج آنها نشان داد که مدول یانگ در جهت آرمچیر ۱۰ درصد بالاتر از جهت زیگزاگ بود. همچنین، تغییرات دما از ۱ به ۹۰۰ کلوین منجر به کاهش ۶/۴ درصدی مدول یانگ شد. از سویی دیگر، تراکم حذف اتم از ۰ تا ۳ درصد، کاهش ۲۲ درصدی خواص مکانیکی را در جهت زیگزاگ به همراه داشت. در مطالعه ای دیگر، رفتار مکانیکی ساختار مونو و پلی کریستال سیلیکون کاربید مورد مطالعه قرار گرفت [۲۰]. نتایج آنها نشان داد که افزایش اندازه ناحیه از ۲ نانومتر به ۳۵ نانومتر به تدریج مدول الاستیک و استحکام شکست را افزایش می دهد. مقایسه ی ۲ ساختار مونو و پلی کریستال نشان داد که مدول الاستیک و استحکام شکست تقریباً ۸۷ و ۴۱ درصد تغییر می کنند. همچنین، نقص دایروی اثر بیشتری بر خواص مکانیکی ساختار سیلیکون کاربید نسبت به ترک مستطیلی داشت.

بر اساس مطالب ارایه شده در مورد مواد دو بعدی، در این مقاله، مقایسه ی رفتار شکست نانوساختار نیتريد بور به دو صورت مونو و پلی کریستال مورد بررسی قرار خواهد گرفت. ابتدا، چگونگی تغییرات خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست در دو راستای آرمچیر و زیگزاگ و در دماهای مختلف مطالعه خواهد شد. همچنین، اثر تغییرات نرخ کرنش مورد آزمایش قرار خواهد گرفت. در مرحله ی بعد، با در نظر گرفتن چهار نوع از ساختار پلی کریستال نیتريد بور در دماهای مختلف، خواص مکانیکی یاد شده مطالعه خواهد شد. شایان ذکر است که برای هر نوع از این نواحی، دو حالت مختلف در نظر گرفته شده است. سپس، اثر تغییرات طول ترک مورد آزمایش قرار خواهد گرفت. در بخش پایانی نیز نتایج بدست آمده از شبیه سازی دینامیک مولکولی با دو روش مدلسازی سطح پاسخ مرتبه ی اول و دوم مورد مقایسه قرار خواهد گرفت. نتایج بدست آمده از این تحقیق می تواند برای درک بهتر خواص مکانیکی، اثر مرزدهانه ها بر ساختارهای پلی کریستال، توزیع تنش و پیکربندی مواد دو بعدی حائز اهمیت باشد و انتظار می رود که علاقه ی گسترده ی محققین را به کاوش بیشتر در این زمینه جلب نماید.

ساختار نیتريد بور به دلیل رسانایی الکتریکی بالا و پایداری مکانیکی به عنوان مواد مناسب در کاربردهای ذخیره سازی انرژی و صنعت خودروسازی مورد استفاده قرار می گیرد. از همین رو، درک چگونگی تاثیر نقص های هندسی بر خواص مکانیکی، می تواند به طراحی مواد بهینه کمک کند تا ضعف ساختاری را به حداقل برساند و در عین حال، انعطاف پذیری آن را حفظ نماید. بررسی این ساختار به صورت مونوکریستال و پلی کریستال می تواند به بسیاری از پرسش های موجود در این زمینه پاسخ دهد. هدف از انتخاب این ساختار شش ضلعی، کشف روابط بنیادی بین نقص های هندسی و رفتار مکانیکی بود که می تواند راه را برای نوآوری های آینده در مواد دو بعدی مهندسی شده هموار کند. نتایج بدست آمده نشان می دهد که افزایش دما کاهش



شکل ۱ نمای بالا از ساختار نیتريد بور که در آن، راستای کشش در جهت X و Y به ترتیب آرمچير و زيگزاگ معرفی شده است.

Fig. 1 Top view of the boron nitride atomic configuration. X and Y represent the loading direction as armchair and zigzag, respectively

نيتروژن و برن را شامل می‌شود. همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده است، ساختار مورد بررسی به صورت شش ضلعی می‌باشد. دو جهت بارگذاری آرمچير و زيگزاگ به ترتیب بيانگر جهت‌های X و Y می‌باشند و خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش شکست و کرنش شکست در بازه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین مورد بررسی قرار گرفته است. برای کنترل دما در جعبه‌ی شبیه سازی با اعمال الگوریتم Nose-Hoover در دما و فشار ثابت (دما ۳۰۰ کلوین و فشار صفر در نظر گرفته شده است) و با استفاده از گام زمانی ۰/۰۰۱ پیکوثانیه، سیستم برای مدت زمان ۵۰ پیکوثانیه به حالت تعادل رسیده است. پس از تعادل، سیستم تحت بار کششی با نرخ کرنش  $0.001 \text{ ps}^{-1}$  قرار گرفته است تا تنش در هر کرنش و گام زمانی بدست آید. در نهایت، نمودار تنش-کرنش برای بررسی خواص مکانیکی ساختارهای مورد بررسی با استفاده از اطلاعات بدست آمده ترسیم شده است. شکل ۲، ساختار ترکیبی گرافن- نیتريد کربن و راستای X و Y را به نمایش گذاشته است.

بررسی خواص مکانیکی برای ساختار پلی کریستال با تعداد ناحیه‌ی ۳، ۱۰، ۱۶ و ۲۵ ناحیه بررسی شده است. این مدل‌ها با توزیع تصادفی نواحی با ۲ حالت مختلف در جعبه‌ی شبیه سازی مطالعه شده است. همان گونه که در شکل ۲ نشان داده شده است، نواحی بوسیله‌ی مرزدهانه‌ها به یکدیگر متصل شده‌اند. از سویی دیگر، ۳ طول ترک با اندازه‌های ۵، ۱۵ و ۳۰ آنگستروم به عنوان ترک لبه‌ای برای ساختارهای یاد شده مورد آزمایش قرار گرفته است. شرایط مرزی دوره‌ای در هر دو جهت X و Y برای حذف اثر طول محدود برای تولید آزمایش‌های بارگذاری کششی بر نانو ورق‌های مورد بررسی، استفاده شده است. برای ایجاد فرآیند بازپخت ساختار نیتريد بور، ساختارها به مدت ۴۰ ps تا دمای ۱۰۰۰ کلوین گرم شدند و سپس، قبل از اعمال بار کششی، به مدت ۴۰ ps به دمای محیط سرد شدند و با استفاده از فرآیند NVT، شرایط بازآرایی اتم‌ها در مرزدهانه‌های ساختار پلی کریستال تسهیل گشت. در تمام موارد شبیه سازی، ابتدا با اعمال الگوریتم Nose-Hoover در دما و فشار ثابت و با استفاده از گام زمانی ۰/۰۰۱ ps، سیستم برای مدت زمان ۵۰ ps به حالت تعادل رسیده است. همچنین، سیستم‌های مورد بررسی تحت بار کششی با نرخ کرنش  $0.001 \text{ ps}^{-1}$  قرار گرفته‌اند.

خواص مکانیکی را به همراه دارد. همچنین، تغییرات نرخ کرنش سبب تغییرات خواص مکانیکی مونوکریستال نیتريد بور می‌شود. همچنین، افزایش تعداد ناحیه به عنوان یک عامل اثرگذار بر مدول یانگ و تنش شکست ایفای نقش می‌نماید. ایجاد ترک در ساختار نیز به عنوان یک نقص هندسی، تغییرات رفتار مکانیکی نانوساختار مورد مطالعه را به همراه دارد. از سویی دیگر، روش سطح پاسخ مرتبه‌ی دو نتایج دقیق-تری را ارائه می‌دهد.

## ۲- روش‌های محاسبات

شبیه سازی دینامیک مولکولی ساختار دو بعدی نیتريد بور با استفاده از شبیه ساز موازی جرم اتمی/مولکولی در مقیاس بزرگ (لمپس) صورت پذیرفته است [۲۱]. برهمکنش‌های بین اتم‌های نیتروژن و برن با استفاده از پتانسیل ترسوف توصیف شده است [۲۲]. برخلاف پتانسیل‌های دیگر، پتانسیل ترسوف اثرات مرتبه پیوند را در نظر می‌گیرد و امکان نمایش واقع بینانه‌تری از تشکیل و شکستن پیوند را فراهم می‌کند که هنگام مطالعه‌ی نقص‌های هندسی ضروری است. علاوه بر این، این پتانسیل، رفتار مکانیکی مواد دو بعدی را با دقت بالا ثبت می‌کند و آن را برای بررسی چگونگی تاثیر نقص‌های ساختاری بر خواص مکانیکی مناسب می‌سازد. همچنین، برای نظارت بر خروجی-های مورد بررسی و موقعیت یابی اتم‌ها از نرم افزار OVITO استفاده شده است. رابطه‌ی بین انرژی و جابجایی در معادله‌ی زیر برقرار است:

$$U_{ij} = f_c(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})] \quad (1)$$

در این رابطه،  $f_R$  پتانسیل دافعه،  $f_A$  نماد پتانسیل جاذبه است. همچنین،  $b_{ij}$  مرتبه‌ی پیوند بین  $i$  و  $j$  است. افزایش هماهنگی پیوند باعث کاهش  $B$  می‌گردد.  $f_c$  نیز به عنوان یک تابع تناوبی برای محاسبات cutoff استفاده می‌شود. هر سه تابع از معادلات زیر بدست می‌آیند:

$$f_R(ij) = -A_{ij}e^{\lambda_{ij}r_{ij}}, f_A(ij) = -B_{ij}e^{\mu_{ij}r_{ij}}$$

$$f_c(ij) = \begin{cases} 1 & r_{ij} < R_{ij} \\ 1/2 + 1/2 \cos(\frac{\pi(r_{ij} - R_{ij})}{S_{ij} - R_{ij}}) & R_{ij} < r_{ij} < S_{ij} \\ 0 & r_{ij} > S_{ij} \end{cases}$$

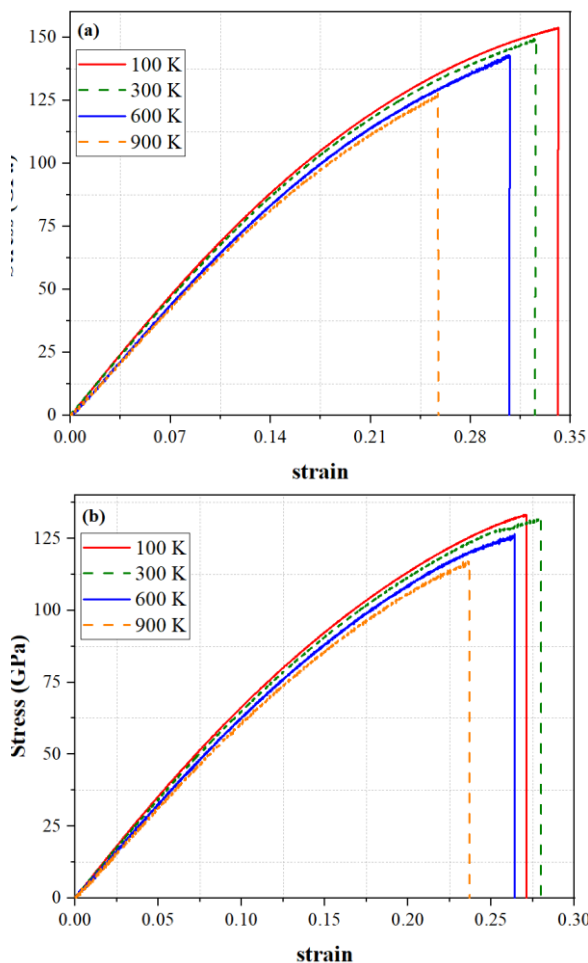
$$f_R(ij) = -A_{ij}e^{\lambda_{ij}r_{ij}}, f_A(ij) = -B_{ij}e^{\mu_{ij}r_{ij}} \quad (2)$$

$$b_{ij} = X_{ij}(1 + B_i^{\mu_i} \xi_{ij}^{\mu_i})^{-0.5n_i}, \xi_{ij} = \sum_{k \neq i,j} f_c(r_{ik})\omega_{ik}g(\theta_{ijk})$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{G_i^2}{d_i^2} - \frac{G_i^2}{(h_i + \cos \theta_{ijk})^2}$$

$$\omega_{ik} = e[\mu_{ik}^3(r_{ij} - r_{ik})^3], \lambda_{ij} = \frac{(\lambda_i + \lambda_j)}{2}, \mu_{ij} = \frac{(\mu_i + \mu_j)}{2}$$

از فرآیند NPT با گام زمانی ۱ فمتوثانیه و به مدت ۵۰ پیکوثانیه برای دستیابی به تعادل سیستم استفاده شده است. اندازه‌ی نانوصفحه  $100 \times 100$  آنگستروم مربع در نظر گرفته شده است که تعداد ۱۰۸۷ اتم از

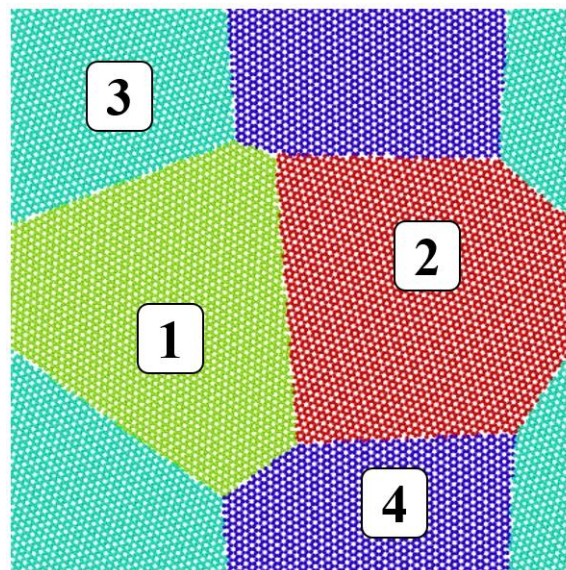


شکل ۳ تغییرات تنش-کرنش مونوکریستال نیتريد بور، (الف) در راستای آرمچر، (ب) در راستای زیگزگ

Fig. 3 Stress-strain curves of monocrystalline boron nitride in the a) armchair direction, and b) zigzag direction

### ۳-۱-۱- خواص مکانیکی به عنوان تابعی از دما

منحنی تنش-کرنش نانوصفات نیتريد بور برای اندازه ساختار  $100 \times 100 \text{ \AA}^2$  در شکل ۳ نشان داده شده است. با توجه به نتایج گزارش شده، نتایج بدست آمده برای ساختارها در راستای آرمچر بالاتر از زیگزگ گزارش شده است. از سویی دیگر، افزایش دما از ۱۰۰ کلوین به ۹۰۰ کلوین سبب کاهش خواص مکانیکی شده است. این امر به دلیل افزایش طول پیوند بین اتمها با افزایش دما می باشد که کاهش انرژی اتصال اتمها را به همراه دارد و از این مورد، به عنوان یک عامل اثرگذار بر خواص مکانیکی یاد می شود [۲۳]. آرایش اتمی نانوصفات نیتريد بور به گونه ای شکل گرفته است که پیوند میان اتمهای نیتروژن و برن در راستای آرمچر پایدارتر از زیگزگ می باشد که این امر، منجر به استحکام مکانیکی بالاتر در این جهت می گردد [۲۴]. یک روند نزولی خواص مکانیکی با افزایش دما برای ساختار گرافن بوسیله ی ژائو و همکاران گزارش شده است [۲۵]. مطالعه ی ساختار کاربید سیلیسیم بوسیله ی مولایی و همکاران نشان از کاهش ۱۶/۱۹، ۴۱/۱۳ و ۴۲/۱۱ درصدی مدول ینگ، تنش و کرنش شکست به همراه داشت [۲۰].



شکل ۲ ساختار پلی کریستال نیتريد بور با ۴ ناحیه در حضور مرزدانه ها

Fig. 2 A schematic of a polycrystalline with 4 oriented grain regions

سطح پاسخ یک مجموعه ای از تکنیک های آماری برای ساخت مدل های تجربی است. هدف در طرح های رویه پاسخ، بهینه سازی پاسخ است که متأثر از چندین متغیر مستقل می باشد. یک آزمایش، مجموعه ای از آزمون هاست که اجرا نامیده می شوند. در هر آزمایش، تغییرات در متغیرهای ورودی به منظور تعیین علل تغییرات در متغیر پاسخ ایجاد می شوند. در طرح های رویه پاسخ، ساخت مدل های رویه پاسخ یک فرآیند تکراری می باشد. به محض اینکه یک مدل تقریبی بدست آمد، توسط روش نیکویی برازش مورد آزمون قرار می گیرد که آیا جواب رضایت بخش است یا خیر؛ اگر جواب تأیید نشود، فرآیند دومرتبه آغاز می شود. در طراحی آزمایش ها، هدف، شناسایی و تحلیل متغیرهای مؤثر بر خروجی ها با کمترین تعداد آزمایش است. اولین قدم در روش سطح پاسخ، پیدا کردن تقریب مناسب برای رابطه ی صحیح بین پاسخ و مجموعه متغیرهای مستقل می باشد. برای پیدا کردن بهترین درجه ی مدل، معمولاً از چند جمله ای های مرتبه پایین استفاده می شود. اگر پاسخ بوسیله ی یک تابع خطی از متغیرهای مستقل مدل شود، آنگاه تابع تقریب روش سطح پاسخ، مدل درجه اول نامیده می شود. در این حالت، روش سطح پاسخ معادل با رگرسیون خطی چندگانه محسوب می شود.

### ۳- نتایج و بحث

#### ۳-۱- ساختار مونوکریستال نیتريد بور

رفتار شکست مونوکریستال نیتريد بور در دو راستای آرمچر و زیگزگ و در بازه ی دمایی ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین مورد بررسی قرار گرفت. تمامی نمونه ها برای هر دو ساختار تحت بارگذاری کششی تک محوری قرار گرفتند و نتایج تنش و کرنش آنها گزارش شد.

**جدول ۱** خواص مکانیکی ساختار نیترید بور در جهت آرمچیر برای نرخ‌های کرنش مختلف.

**Table 1** Mechanical properties of boron nitride nanosheets subjected to tensile loading in armchair direction for various strain rates

| Mechanical properties | Strain rate (%) |        |        |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
|-----------------------|-----------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
|                       | 0.001           |        |        |        | 0.01   |        |        |        | 0.1    |        |        |        |
|                       | Temperature (K) |        |        |        |        |        |        |        |        |        |        |        |
|                       | 100             | 300    | 600    | 900    | 100    | 300    | 600    | 900    | 100    | 300    | 600    | 900    |
| Young's modulus (GPa) | 697.24          | 678.57 | 651.66 | 627.16 | 703.99 | 684.12 | 645.98 | 630.34 | 725.18 | 711.07 | 688.99 | 674.04 |
| Failure stress (GPa)  | 153.47          | 149.45 | 142.58 | 127.68 | 162.68 | 155.44 | 136.52 | 128.91 | 175.65 | 162.01 | 151.75 | 135.21 |
| Failure strain (%)    | 0.341           | 0.325  | 0.307  | 0.257  | 0.405  | 0.379  | 0.316  | 0.283  | 0.456  | 0.404  | 0.372  | 0.311  |

اختصاص دارد که مقادیر آن به ترتیب برای مدول یانگ، تنش و کرنش شکست ۷۲۵/۱۸، ۱۷۵/۶۵ گیگاپاسکال و ۰/۴۵۶ می‌باشد.

### ۲-۳- ساختار پلی کریستال نیترید بور

در این بخش، به بررسی خواص مکانیکی نانوساختار نیترید بور با تعداد ناحیه‌های ۳، ۱۰، ۱۶ و ۲۵ ناحیه با دو چینش تصادفی و در دمای ۳۰۰ کلوین پرداخته شده است. شکل ۴ نشان دهنده ساختارهای پلی کریستال نیترید بور برای تعداد نواحی مختلف می‌باشد.

### ۳-۲-۱- خواص مکانیکی به عنوان تابعی از تعداد ناحیه

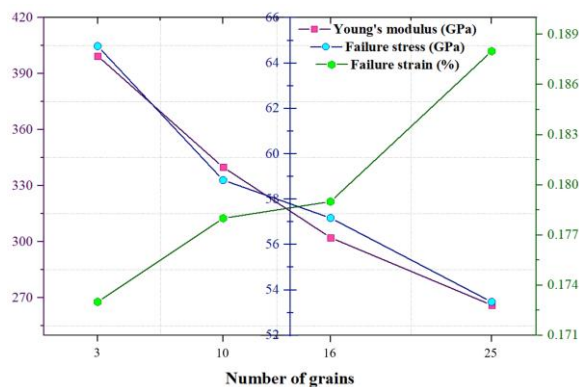
نمودار شکل ۵ میانگین تغییرات خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست پلی کریستال نیترید بور را نشان می‌دهد. با توجه به شکل ۵، با افزایش تعداد ناحیه از ۳ ناحیه به ۲۵ ناحیه، کاهش مدول یانگ و تنش شکست را شاهد هستیم. این در حالی است که افزایش تعداد ناحیه سبب افزایش کرنش شکست شده است. با توجه به نتایج بدست آمده، میانگین مقدار مدول یانگ از ۳۹۹/۴۸ گیگاپاسکال برای نانوساختار با ۳ ناحیه به ۲۶۶/۱۶ گیگاپاسکال برای ۲۵ ناحیه کاهش یافته است که ۳۳/۳۷ درصد کاهش را نشان می‌دهد. همچنین، میانگین مقدار تنش شکست برای ساختار با ۳ ناحیه از ۶۴/۷۵ گیگاپاسکال به ۵۳/۴۸ گیگاپاسکال کاهش یافت که معادل ۱۷/۴۲ درصد کاهش می‌باشد. میانگین مقدار کرنش شکست نیز برای تعداد ناحیه‌های ۳، ۱۰، ۱۶ و ۲۵ به ترتیب ۰/۱۷۳، ۰/۱۷۸، ۰/۱۷۹ و ۰/۱۸۸ گزارش شد. از آنجایی که برهمکنش بین اتم‌هایی که در مرزدها قرار دارند، ضعیف‌تر از اتم‌هایی است که داخل نواحی قرار دارند، این امر به عنوان دلیل اصلی گرا دیان تنش در ساختارهای پلی کریستال در مقایسه با ساختارهای مونو کریستال بیان می‌شود. در نتیجه، تمرکز تنش در مجاورت مرزدها پلی کریستال افزایش می‌یابد و کاهش خواص مکانیکی را به همراه دارد [۲۸]. در مطالعه‌ای مشابه، خواص مکانیکی ساختار مونوکریستال و پلی کریستال کاربید بور به روش دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار گرفت [۲۹]. نتایج این تحقیق نشان داد که خواص مکانیکی پلی کریستال با ۳ ناحیه پایین‌تر از حالت مونوکریستال ساختار کاربید بور می‌باشد.

### ۳-۲-۲- خواص مکانیکی به عنوان تابعی از نرخ کرنش

در این بخش، به بررسی خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست نانوساختارهای نیترید بور با در نظر گرفتن نرخ کرنش‌های ۰/۱، ۰/۰۱ و ۰/۰۰۱ در بازه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین و راستای آرمچیر پرداخته شده است. نتایج بدست آمده در جدول ۱ به نمایش گذاشته شده است. همان طور که مشاهده می‌شود، افزایش دما سبب ایجاد یک روند نزولی در خواص مکانیکی مورد بررسی شده است. از سویی دیگر، افزایش نرخ کرنش از ۰/۰۰۱ به ۰/۱ موجب افزایش مدول یانگ، تنش و کرنش شکست نانوصفحات نیترید بور شده است.

با توجه به نتایج گزارش شده در جدول ۱، مقدار مدول یانگ از ۶۹۷/۲۴ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین و نرخ کرنش ۰/۰۰۱ به ۷۲۵/۱۸ گیگاپاسکال و نرخ کرنش ۰/۱ افزایش یافته است. این روند افزایشی برای دماهای ۶۰۰، ۹۰۰ و ۱۰۰ کلوین نیز قابل مشاهده است. مقدار مدول یانگ برای نرخ کرنش ۰/۰۰۱ به ترتیب ۶۷۸/۵۷، ۶۵۱/۶۶ و ۶۲۷/۱۶ گیگاپاسکال گزارش شده است و با افزایش نرخ کرنش به ۰/۱، مقادیر مدول یانگ به ترتیب ۷۱۱/۰۷، ۶۸۸/۹۹ و ۶۷۴/۰۴ گیگاپاسکال بدست آمده است. این روند صعودی برای دو خاصیت مکانیکی تنش و کرنش شکست نیز قابل مشاهده است. با توجه به نتایج گزارش شده، تنش شکست برای نرخ کرنش ۰/۰۰۱ و در دماهای ۱۰۰، ۳۰۰، ۶۰۰ و ۹۰۰ کلوین به ترتیب ۱۵۳/۴۷، ۱۴۹/۴۵، ۱۴۲/۵۸ و ۱۲۷/۶۸ گیگاپاسکال محاسبه شده است. این در حالی است که مقدار این خاصیت مکانیکی در همین بازه‌ی دمایی و نرخ کرنش ۰/۱، به ترتیب ۱۷۵/۶۵، ۱۶۲/۰۱، ۱۵۱/۷۵ و ۱۳۵/۲۱ گیگاپاسکال گزارش شده است. نتایج بدست آمده از کرنش شکست برای نرخ کرنش ۰/۱ نشان دهنده‌ی افزایش ۳۳/۷۲، ۲۴/۳۱ و ۲۱/۱۷ درصد در بازه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین نسبت به نرخ کرنش ۰/۰۰۱ می‌باشد. شایان ذکر است که در این بخش نیز افزایش دما به عنوان یک عامل اثر گذار بر خواص مکانیکی مورد بررسی یاد شده است. ژانگ و همکاران [۲۶] به بررسی تغییرات نرخ کرنش بر نانوکریستال سلسیوس و گرافن پرداختند. در مطالعه‌ای دیگر، بررسی تغییرات نرخ کرنش بر نانوساختار چند لایه‌ای گرافن مورد مطالعه قرار گرفت [۲۷]. شایان ذکر است که اتم‌های نانوصفحات در نرخ کرنش‌های بالاتر زمان کمتری برای تنظیم مجدد خود دارند و این امر منجر به مقاومت بالاتر در برابر تغییر شکل می‌شود. در نتیجه، افزایش خواص مکانیکی را نیز به همراه دارد. همچنین، در بعضی از موارد، در نرخ کرنش بالاتر ممکن است ماده زمان کافی برای رسیدن به تعادل حرارتی را نداشته باشد که منجر به خواص مکانیکی بالاتر می‌شود.

با بررسی نتایج بدست آمده از خواص مکانیکی مونوکریستال نیترید بور می‌توان دریافت که بیشترین مقدار خواص مکانیکی مورد مطالعه در این بخش به نانوساختار با نرخ کرنش ۰/۱ و دمای ۱۰۰ کلوین

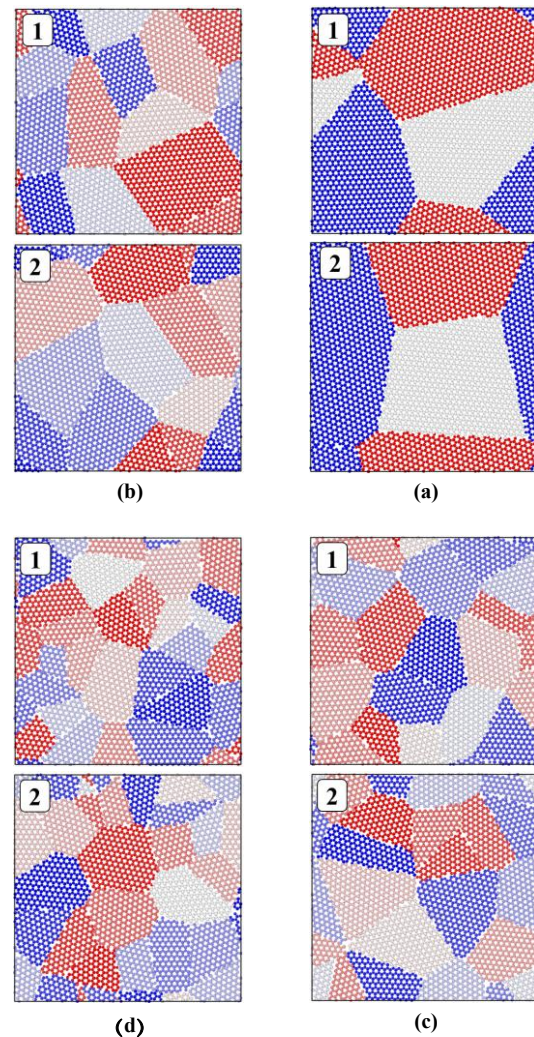


شکل ۵) مدول یانگ، تنش و کرنش شکست پلی کریستال نیتريد بور برای تعداد ناحیه‌ی مختلف

Fig. 5 Young's modulus, failure stress, and failure strain of polycrystalline boron nitride as a function of grain numbers

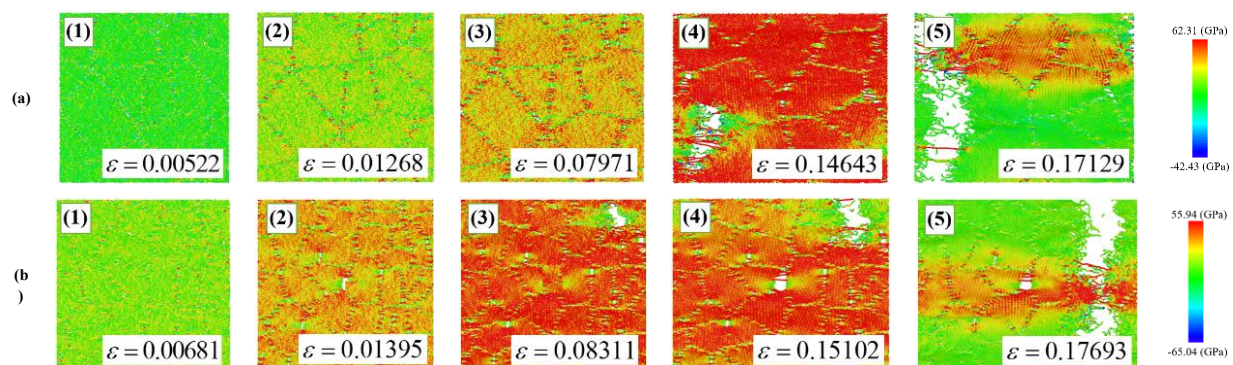
روند تغییرات شکست ساختار پلی کریستال نیتريد بور با تعداد ناحیه‌ی ۱۰ و ۲۵ در شکل ۶ به نمایش گذاشته شده است. همان گونه که مشاهده می‌شود، تمرکز تنش در اطراف مرزخانه‌ها با افزایش کرنش تشدید می‌شود که همین امر، موجب ایجاد شکست در ساختارها می‌گردد.

این روند تا زمانی ادامه پیدا می‌کند که مقاومت ساختار به کمترین مقدار خود برسد و صفحه از هم گسیخته شود؛ به طوری که این گسیختگی در ساختار در راستای عمود بر جهت بارگذاری انتشار پیدا می‌کند و شکست کامل ساختار مورد مطالعه در کرنش ۰/۱۷۱ برای ۱۰ ناحیه و ۰/۱۷۵ برای ۲۵ ناحیه انجام می‌پذیرد. افزایش کرنش باعث گسترش و رشد نقص‌ها می‌شود که در پی آن، گسستن پیوندهای بین اتمی بور-نیتروژن را به همراه دارد.



شکل ۴ نمای بالا از پلی کریستال نیتريد بور با چینش تصادفی ۱ و ۲ و با تعداد ناحیه‌ی الف) ۳، ب) ۱۰، ج) ۱۶، د) ۲۵

Fig. 4 Top view of four types of polycrystalline boron nitride; including types 1 and 2 with different grain numbers a) 3, b) 10, c) 16, and d) 25 grain regions

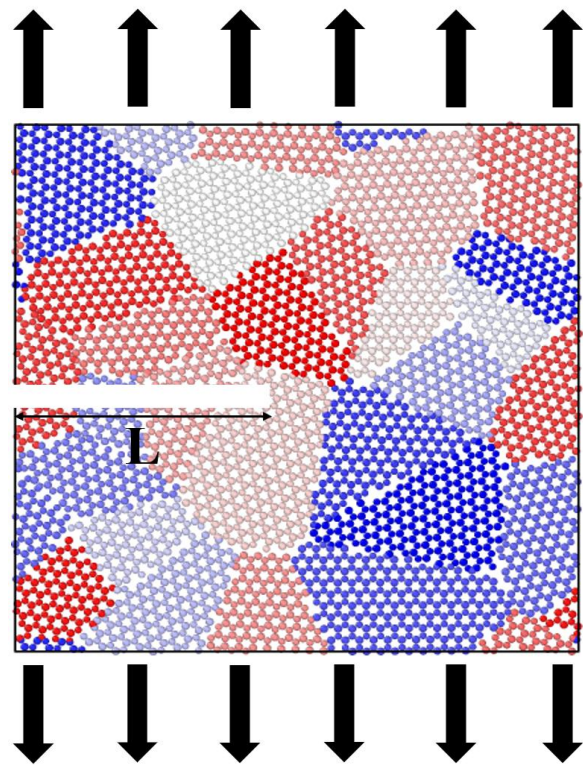


شکل ۶ روند شکست ساختار پلی کریستال نیتريد بور الف) ۱۰ ناحیه، ب) ۲۵ ناحیه

Fig. 6 Crack propagation steps for polycrystalline boron nitride for a) 10 regions, and b) 25 regions

رشد ترک کمتر می‌شود. نتایج مشابهی از این رفتار در مطالعه‌ای که بر ساختار برلیوم اکساید صورت گرفته است، قابل مشاهده می‌باشد [۳۰]. نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که افزایش طول ترک سبب کاهش شدت تنش شده است. مقدار مدول یانگ برای طول‌های ترک مختلف ساختار با ۱۰ ناحیه به ترتیب ۳۰۰/۳۳، ۲۹۲/۵۱ و ۲۷۰/۳۱ گیگاپاسکال گزارش شد. از سویی دیگر، این خاصیت مکانیکی برای ساختار با ۲۵ ناحیه به ترتیب با ۱۲/۵۱، ۱۶/۳۳ و ۱۸/۱۴ درصد کاهش، ۲۶۲/۷۵، ۲۴۴/۷۴ و ۲۲۱/۲۷ گیگاپاسکال بدست آمده است. با توجه به روند تغییرات تنش شکست پلی کریستال نیتريد بور، این خاصیت مکانیکی برای ساختار با ۱۰ ناحیه و طول ترک ۳۰ آنگستروم معادل ۴۴/۱۲ گیگاپاسکال گزارش شده است که نسبت به طول ترک ۵ آنگستروم، ۲۴/۹۷ درصد کاهش را نشان می‌دهد. این روند برای ساختار با ۲۵ ناحیه نیز قابل مشاهده می‌باشد؛ به طوری که تنش شکست از ۵۴/۳۶ گیگاپاسکال برای طول ترک ۵ آنگستروم به ۵۰/۸۵ گیگاپاسکال برای طول ترک ۳۰ آنگستروم کاهش یافته است. این رفتار کاهشی را می‌توان به غلبه‌ی فاصله‌ی بین اتمی و به دنبال آن، کاهش انرژی اتصال، تضعیف پیوندهای شیمیایی و در نتیجه، کاهش خواص مکانیکی نسبت داد. بائو و همکاران یک سیر نزولی از خواص مکانیکی را برای ساختار  $\text{MoS}_2$  گزارش کردند [۳۱]. نتایج آنها نشان داد که افزایش دما و تغییرات طول ترک موجب کاهش خواص مکانیکی می‌گردد. برای درک بهتر نتایج بدست آمده از این مطالعه و نتایج بدست آمده در مطالعات قبلی، جدول ۲ ارائه شده است.

برای جمع بندی این نیز می‌توان نتیجه گرفت که بیشترین مقادیر مدول یانگ و تنش شکست برای ساختار پلی کریستال با ۳ ناحیه بدست آمد که مقادیر آن به ترتیب عبارتند از: ۳۹۹/۴۸ و ۶۴/۷۵ گیگاپاسکال برای مدول یانگ و تنش شکست. همچنین، تغییرات طول ترک به عنوان یک عامل اثرگذار بر خواص مکانیکی معرفی شد. از سویی دیگر، افزایش تعداد ناحیه نیز سبب تغییرات خواص مکانیکی گشت. بیشترین مقادیر مدول یانگ و تنش شکست برای ساختار پلی کریستال با طول ترک ۵ آنگستروم و ساختار با ۱۰ ناحیه به ترتیب ۲۹۲/۵۱ و ۵۵/۸۲ گیگاپاسکال گزارش شد. این در حالی است که مقدار شدت تنش برای ساختار با ۲۵ ناحیه و طول ترک ۳۰ آنگستروم معادل  $6/07 \text{ MPa.m}^{0.5}$  بدست آمد.



شکل ۷ محل قرارگیری ترک با طول  $L$  و جهت بارگذاری در راستای  $Y$   
 Fig. 7 The location of edge crack and loading along  $Y$  direction

### ۳-۲-۲- خواص مکانیکی به عنوان تابعی از طول ترک

بررسی نقص‌های هندسی در نانو ساختارها می‌تواند یک بینش متفاوت به محققین ارائه دهد، زیرا عیوب هندسی می‌تواند بر عملکرد مکانیکی ساختارهای دو بعدی تاثیرگذار باشد. از همین رو، در این بخش، بررسی ساختار پلی کریستال با ۱۰ و ۲۵ ناحیه مورد بررسی قرار گرفته است. شایان ذکر است که نتایج گزارش از نتایج بدست آمده برای چینش تصادفی شماره‌ی ۱ ساختارها بدست آمده است. سه طول ترک ۵، ۱۵ و ۳۰ آنگستروم برای بررسی مدول یانگ، شدت تنش، تنش و کرنش شکست مورد استفاده قرار گرفته است. شکل ۷ نشان دهنده‌ی محل قرار ترک و جهت بارگذاری می‌باشد که در آن،  $L$  نشان دهنده‌ی طول ترک است.

نتایج مدول یانگ، تنش و کرنش شکست و شدت تنش در نمودار شکل ۸ گزارش شده است. با توجه به مطالعات قبلی، انتظار می‌رود که افزایش طول ترک سبب کاهش خواص مکانیکی شود. این، در حالی است که شدت تنش با افزایش طول ترک افزایش می‌یابد. با توجه به نتایج، کمترین مقدار مدول یانگ و تنش شکست برای ساختار با ۲۵ ناحیه و طول ترک ۳۰ به ترتیب ۲۲۱/۲۷ و ۵۰/۸۵ گیگاپاسکال می‌باشد. همچنین، کمترین مقدار کرنش شکست برای ساختار با ۱۰ ناحیه و طول ترک ۳۰ معادل ۰/۱۴۹ گزارش شده است. این نتایج در مقایسه با ساختار مونوکریستال نیتريد بور به ترتیب ۶۷/۳۹، ۶۶/۱۵ و ۵۴/۱۵ درصد کاهش را نشان می‌دهد. در مقابل، با افزایش طول ترک از ۵ به ۳۰ آنگستروم، شدت تنش به بیشترین مقدار خود در طول ترک ۳۰ آنگستروم با تعداد ناحیه ۲۵ رسید. می‌توان این طور نتیجه گرفت هر چه طول ترک بیشتر باشد، مقاومت پلی کریستال نیتريد بور در برابر

**جدول ۲** مقایسه‌ی نتایج مطالعات گذشته و مطالعه‌ی پیش رو بر خواص مکانیکی ساختارهای پلی کریستال.

**Table 2** Comparison of results from previous studies and the present study on the mechanical properties of polycrystalline structures.

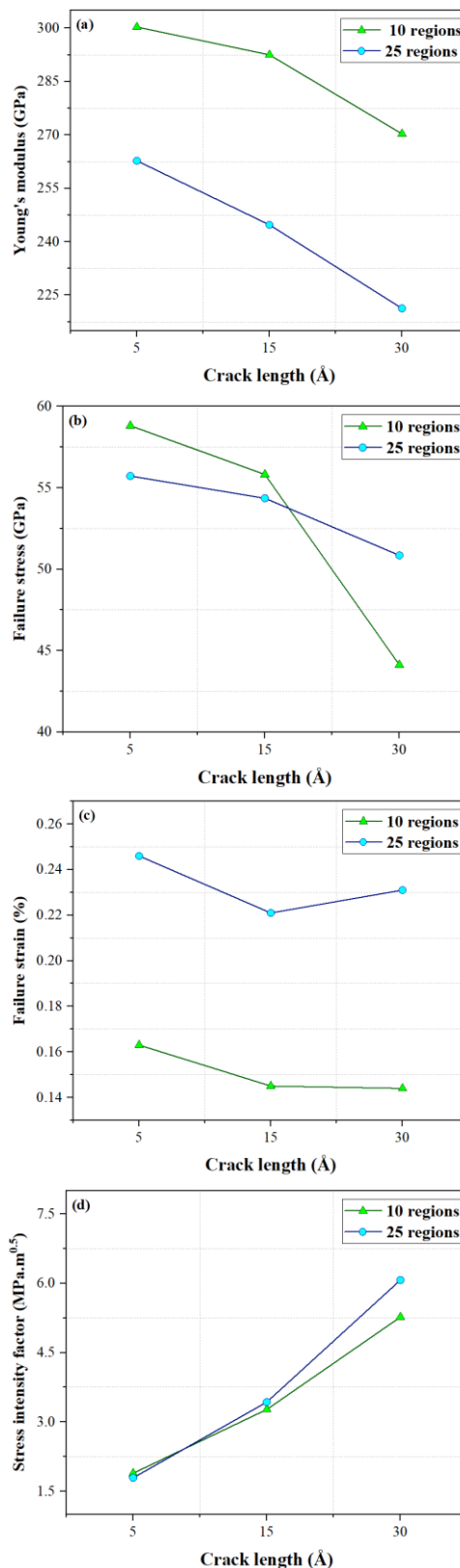
| Polycrystalline structures | Size (nm <sup>2</sup> ) | Region number | Young's modulus (GPa) | Failure stress (GPa) | Ref.          |
|----------------------------|-------------------------|---------------|-----------------------|----------------------|---------------|
| Boron nitride              | 10×10                   | 16            | 302.11                | 57.05                | Present study |
| Graphene                   | 24×24                   | 23            | 184.26                | 54.19                | [14]          |
| Boron carbide              | 30×30                   | 10            | 626.43                | 77.51                | [16]          |
| Boron carbide              | 30×30                   | 3             | 631.07                | 73.22                | [29]          |
| Carbon nitride             | 20×20                   | 25            | 688.61                | 96.29                | [33]          |
| Boron nitride              | 25×25                   | 6             | -                     | 68.22                | [34]          |
| Silicon carbide            | 30×30                   | 36            | 63.49                 | 52.05                | [35]          |

### ۳-۳- مدلسازی

نتایج شبیه سازی به روش دینامیک مولکولی برای موارد مختلف مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. در این بخش، فرآیند مدلسازی به روش سطح پاسخ مرتبه‌ی اول و دوم برای مدول یانگ و تنش شکست مونوکریستال نیتريد بور در جهت آرمچیر مورد مطالعه قرار گرفته است. از آنجایی که مقادیر خواص مکانیکی با تغییرات دما تغییر می‌کند، این مهم نیازمند مدلسازی می‌باشد. برای مدلسازی معمولاً بین ۶۰ تا ۷۰ درصد نمونه‌ها را به آموزش مدل و بین ۳۰ تا ۴۰ درصد نمونه‌ها را به آزمایش مدل اختصاص می‌دهند. در نتیجه، برای نشان دادن اعتبار مدل و بالا بردن میزان اعتبارسنجی آن، ۷ نمونه برای آموزش و ۴ نمونه برای آزمایش در نظر گرفته شده است. شایان ذکر است که از عناوین MD، Linear و Quadratic به ترتیب برای بیان دینامیک مولکولی، مرتبه‌ی اول و مرتبه‌ی دوم (روش سطح پاسخ) استفاده شده است.

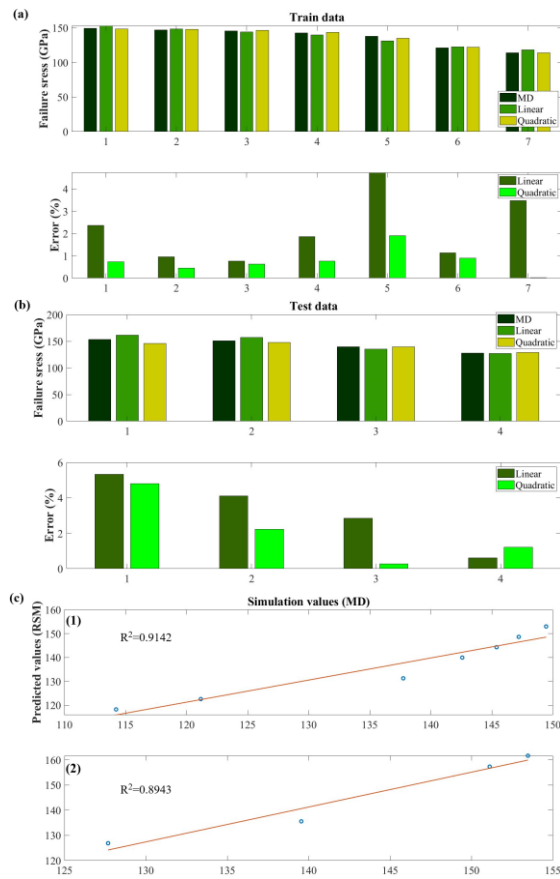
با توجه به شکل ۹ (الف)، نتایج مدول یانگ حاصل از دو روش مدلسازی در مقایسه با نتایج شبیه سازی برای بخش آموزش قابل مشاهده می‌باشد. همچنین، در این شکل، درصد خطای نسبی هر مدل به نمایش گذشته شده است که در آن، میانگین درصد خطای سطح پاسخ مرتبه‌ی اول برای بخش آموزش بالاتر از مرتبه‌ی دوم می‌باشد. برای دستیابی به یک مقایسه‌ی بهتر، نیازمند بررسی نتایج بدست آمده از بخش آزمایش نیز می‌باشیم. از همین رو، شکل ۹ (ب) نشان دهنده‌ی نتایج بدست آمده از مدلسازی سطح پاسخ مرتبه‌ی اول و دوم می‌باشد. با توجه به این شکل، میانگین خطای سطح پاسخ مرتبه‌ی دوم کمتر از مرتبه‌ی اول می‌باشد. در نتیجه، با مقایسه‌ی هر دو بخش آموزش و آزمایش، می‌توان دریافت که بهترین مدل که تطابق قابل قبول‌تری با نتایج شبیه سازی را برای مدول یانگ دارد، سطح پاسخ مرتبه‌ی دوم می‌باشد.

اعتبارسنجی مدل نیز با ضریب تعیین  $R^2$  در شکل ۹ (ج) قابل مشاهده می‌باشد. این المان نشان دهنده‌ی نسبت واریانس در خروجی است که به درستی از داده‌های ورودی مدل شده است. همانطور که در شکل ۹ (ج) مشاهده می‌شود، مقدار  $R^2$  برای بخش آموزش و آزمایش به ترتیب ۰/۹۴۳ و ۰/۸۸۹ می‌باشد که انطباق ۸۲/۳ و ۹۴/۳ درصدی را نشان می‌دهد.



**شکل ۸ الف)** مدول یانگ، **ب)** تنش شکست، **ج)** کرنش شکست، **د)** شدت تنش پلی کریستال نیتريد بور با ۱۰ و ۲۵ ناحیه، تحت تاثیر طول‌های ترک مختلف

**Fig. 8 a)** Young's modulus, **b)** failure stress, **c)** failure strain, and **d)** stress intensity factor polycrystalline boron nitride with 10 and 25 grains as a function of different crack lengths



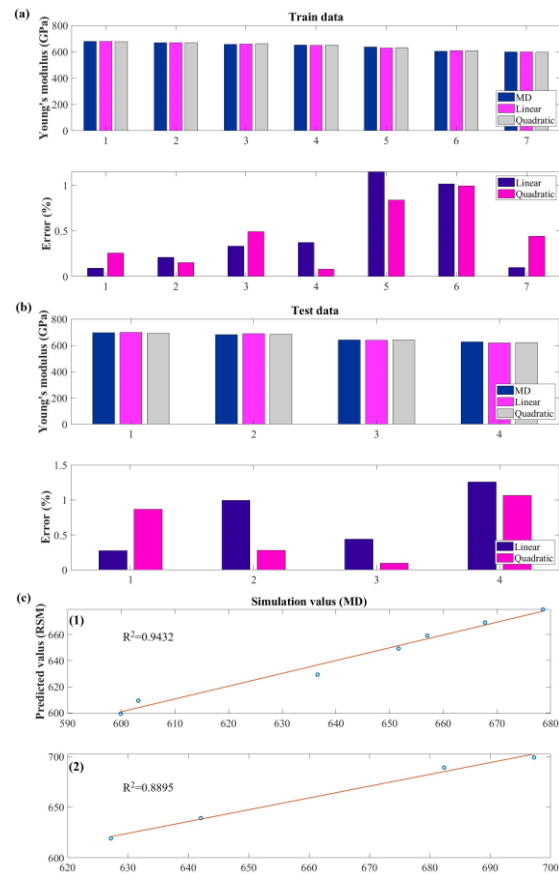
**شکل ۱۰** مقایسه‌ی نتایج بخش مدلسازی و شبیه سازی برای تنش شکست، (الف) آموزش، (ب) آزمایش، (ج) اعتبار سنجی مدل

**Fig. 10** Comparison of modeling and simulation results for failure stress in **a)** Test, **b)** Train, and **c)** Model validation

[۳۶] انطباق مناسب نتایج بدست آمده از مدلسازی را با نتایج آزمایشگاهی گزارش کردند. همچنین، در تحقیقی دیگر، نتایج بدست آمده از بخش مدلسازی به روش سطح پاسخ انطباق مناسبی با نتایج آزمایشگاهی داشت [۳۷]. نتایج این تحقیق نشان می‌دهد که میانگین خطای بدست آمده از سطح پاسخ مرتبه دو برای بخش آموزش کمتر از ۱ درصد و برای بخش آزمایش کمتر از ۳ درصد می‌باشد.

#### ۴- جمع‌بندی

در این مطالعه، بررسی رفتار شکست نانوصفحات مونوکریستال و پلی کریستال نیتريد بور مورد بررسی قرار گرفت. نانوساختارهای مورد بررسی با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی مدل شدند. با اعمال پتانسیل مناسب و شرایط مرزی دوره‌ای، اثر تغییرات دما و نرخ کرنش بر ساختار مونوکریستال نیتريد بور در دو راستای آرمچر و زیگزاگ مورد مطالعه قرار گرفت. همچنین، تاثیر تعداد ناحیه و تغییرات طول ترک بر پلی کریستال نیتريد بور مطالعه شد. در قسمت پایانی نیز، مدلسازی ساختار نیتريد بور با استفاده از روش سطح پاسخ مرتبه‌ی اول و دوم مورد بررسی قرار گرفت. نتایج به دست آمده به شرح زیر می‌باشد:



**شکل ۹** مقایسه‌ی نتایج بخش مدلسازی و شبیه سازی برای مدول یانگ، (الف) آموزش، (ب) آزمایش، (ج) اعتبار سنجی مدل

**Fig. 9** Comparison of modeling and simulation results for Young's modulus in **a)** Test, **b)** Train, and **c)** Model validation

نتایج شبیه سازی دینامیک مولکولی و مدلسازی سطح پاسخ مرتبه‌ی اول و دوم برای خاصیت مکانیکی تنش شکست برای دو بخش آموزش و آزمایش در شکل ۱۰ ارائه شده است. با توجه به نمودار خطاها در هر دو بخش، می‌توان دریافت که کمترین خطا برای این خاصیت مکانیکی در روش سطح پاسخ مرتبه‌ی دوم بدست آمده است. در نتیجه، با توجه به نتایج مشاهده شده در این قسمت از دو بخش آموزش و آزمایش، می‌توان سطح پاسخ مرتبه‌ی دوم را به عنوان مدل منتخب برای تنش شکست معرفی کرد. همچنین، برای اثبات اعتبار مدل سطح پاسخ مرتبه‌ی دوم، آلمان  $R^2$  برای اطلاعات پیش بینی شده بوسیله‌ی سطح پاسخ و نتایج بدست آمده از شبیه سازی در شکل ۱۰ (ج) به نمایش گذاشته شده است. باید اذعان داشت که قرار گرفتن نقاط در دو طرف خط رسم شده با ضریب زاویه‌ی یک، حاکی از اعتبار مدل و درصد  $R^2$  بالا، نشانگر دقت مناسب نتایج مدل با نتایج شبیه سازی است. این نکته را نیز باید اشاره کرد که عدد یک برای آلمان  $R^2$  یک حالت ایده‌آل می‌باشد و در کاربردهای متعارف مهندسی، عدد بالای ۰/۹ برای این آلمان به عنوان یک عدد قابل قبول معرفی می‌شود. مقدار  $R^2$  برای آموزش و آزمایش این بخش به ترتیب ۰/۹۱۴ و ۰/۸۹۴ می‌باشد که معادل ۹۱/۴ و ۸۹/۴ درصد انطباق را نشان می‌دهد. دادرسی و همکاران

## منابع

- [1] K. Novoselov, A. Geim, S. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. Dubonos, J. Grigorieva, A. Firsov, "Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films," *Rep.*, vol. 306, no. 2, pp. 666-669, Sep. 2004, [doi: 10.1126/science.1102896](https://doi.org/10.1126/science.1102896).
  - [2] A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, C. Lau, "Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene," *Nano Lett.*, vol. 8, no. 26, pp. 902-907, Jan. 2008, [doi: 10.1021/nl0731872](https://doi.org/10.1021/nl0731872).
  - [3] C. Lee, X. Wei, J. Kysar, J. Hone, "Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene," *Sci.*, vol. 321, no. 11, pp. 385-388, Jul. 2008, [doi: 10.1126/science.1157996](https://doi.org/10.1126/science.1157996).
  - [4] J. Willimas, L. DiCarlo, C. Marcus, "Quantum Hall Effect in a Gate-Controlled p-n Junction of Graphene," *Sci.*, vol. 317, no. 8, pp. 638-641, Agu. 2007, [doi: 10.1126/science.1144657](https://doi.org/10.1126/science.1144657).
  - [5] B. Mortazavi, Z. Fan, L. Pereira, A. Harju, T. Rabczuk, "Amorphized graphene: A stiff material with low thermal conductivity," *Carbon.*, vol. 103, no. 21, pp. 318-326, Jul. 2016, [doi: 10.1016/j.carbon.2016.03.007](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2016.03.007).
  - [6] M. Izadifar, P. Thissen, R. Abadi, A. Jam, S. Gohari, C. Burvill, T. Rabczuk, "Fracture toughness of various percentage of doping of boron atoms on the mechanical properties of polycrystalline graphene: A molecular dynamics study," *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures.*, vol. 114, no. 21, pp. 113614, Oct. 2019, [doi: 10.1016/j.physe.2019.113614](https://doi.org/10.1016/j.physe.2019.113614).
  - [7] R. Westervelt, "Graphene Nanoelectronics," *Sci.*, vol. 320, no. 2, pp. 324-435, Apr. 2008, [doi: 10.1126/science.1156936](https://doi.org/10.1126/science.1156936).
  - [8] H. Silani, H. Talebi, A. Hamouda, T. Rabczuk, "Nonlocal damage modelling in clay/epoxy nanocomposites using a multiscale approach," *J. Comput. Sci.*, vol. 15, no. 8, pp. 41-47, Sep. 2015, [doi: 10.1016/j.jocs.2015.11.00](https://doi.org/10.1016/j.jocs.2015.11.00).
  - [9] C. Lee, X. Wei, J. Kysar, J. Hone, "Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene," *Sci.*, vol. 321, no. 14, pp. 385-388, Jul. 2008, [doi: 10.1126/science.1157996](https://doi.org/10.1126/science.1157996).
  - [10] S. Ghosh, I. Calizo, D. Teweldebrhan, E. Pokatilov, D. Nika, A. Balandin, W. Bao, F. Miao, C. Lau, "Extremely high thermal conductivity of graphene: Prospects for thermal management applications in nanoelectronic circuits," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 92, no. 11, pp. 151911, Sep. 2008, [doi: 10.1063/1.2907977](https://doi.org/10.1063/1.2907977).
  - [11] C. Ghan, X. Lv, Z. Han, C. Chen, Z. Xu, Q. Liu, "The adsorption enhancement of graphene for fluorine and chlorine from water," *Appl. Surf. Sci.*, vol. 516, no. 8, pp. 146157, Jun. 2020, [doi: 10.1016/j.apsusc.2020.146157](https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2020.146157).
  - [12] K. Qingqing, J. Wang, "Graphene-based materials for supercapacitor electrodes-A review," *Materiomics.*, vol. 2, no. 14, pp. 37-54, Sep. 2016, [doi: 10.1016/j.jmat.2016.01.001](https://doi.org/10.1016/j.jmat.2016.01.001).
  - [13] K. Mahbuba, B. Beeler, A. Jokisaari, "Grain boundary self-diffusion and point defect interactions in  $\alpha$ -U via molecular dynamics," *J. Nucl. Mater.*, vol. 604, no. 11, pp. 155521, Jan. 2025, [doi: 10.1016/j.jnucmat.2024.155521](https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2024.155521).
  - [14] M. Becton, X. Wang, "Grain-size Dependence of Mechanical Properties in Polycrystalline Boron-Nitride: A Computational Study," *Phys. Chem. Phys.*, vol. 17, no. 31, pp. 849-901, Jul. 2015, [doi: 10.1039/C5CP03460D](https://doi.org/10.1039/C5CP03460D).
  - [15] T. Tran, H. Nguyen, V. Nguyen, "Mechanical and Thermal Transport in Nanoporous Graphene-Like BC<sub>6</sub>N,"
- (۱) افزایش دما از ۱۰۰ به ۹۰۰ کلین خواص مکانیکی نانوساختار مونوکریستال را به همراه داشت. این روند نشان از کاهش ۲۵/۵ درصد برای تنش شکست و ۵۱/۲۱ درصد برای کرنش شکست در راستای آرمچر به همراه داشت.
- (۲) تغییرات نرخ کرنش به عنوان یک عامل اثرگذار بر خواص مکانیکی ساختار مونوکریستال نیتريد بور معرفی شد. به عنوان مثال، مقدار مدول یانگ از ۶۸۸/۹۹ گیگاپاسکال با نرخ کرنش ۰/۱ و در دمای ۶۰۰ کلین به ۶۵۱/۶۶ گیگاپاسکال با نرخ کرنش ۰/۰۰۱ در همین دما کاهش یافت.
- (۳) خواص مکانیکی مدول یانگ و تنش شکست پلی کریستال نیتريد بور با افزایش تعداد ناحیه کاهش یافت. با این حال، افزایش اندکی در کرنش شکست مشاهده شد. کمترین مقادیر مدول یانگ و تنش شکست برای ساختار پلی کریستال با ۲۵ ناحیه مشاهده شد. این مقادیر مکانیکی در مقایسه با مونوکریستال نیتريد بور به ترتیب ۵۴/۳۱ و ۵۶/۸۱ کاهش را برای مدول یانگ و تنش شکست به همراه داشت.
- (۴) از سویی دیگر، افزایش طول ترک در پلی کریستال به عنوان یک عامل اثرگذار بر خواص مکانیکی بررسی شد. انتشار ترک از مرزدهانه‌های ساختار که به عنوان منابع اصلی تمرکز تنش هستند، آغاز شد. فضاهای خالی بین این مرزدهانه‌ها شبیه به ترک‌های کوچک عمل کرده و با پیوستن تدریجی به یکدیگر، سبب گسیختگی ساختار می‌شوند. مدول یانگ و تنش شکست با افزایش طول ترک از ۵ به ۳۰ آنگستروم در پلی کریستال با ۱۰ و ۲۵ ناحیه کاهش یافت. به عنوان مثال، مقدار مدول یانگ برای ساختار با ۲۵ ناحیه از ۲۶۲/۷۵ گیگاپاسکال با طول ترک ۵ آنگستروم به ۲۲۱/۲۷ گیگاپاسکال با طول ترک ۳۰ آنگستروم کاهش یافت. همچنین، خاصیت شدت تنش پلی کریستال نیتريد بور به عنوان تابعی از طول ترک افزایش یافت که نشان دهنده‌ی شکست آسان‌تر این ساختارها با افزایش طول ترک است.
- (۵) در نهایت، برای مقایسه‌ی نتایج بخش شبیه سازی از روش‌های مدل‌سازی سطح پاسخ مرتبه‌ی اول و دوم استفاده شد. نتایج روش سطح پاسخ مرتبه دو انطباق مناسبی با بخش شبیه سازی داشت؛ به طوری که انطباق ۸۲ و ۹۴ درصد برای مدول یانگ و ۹۱ و ۸۹ درصد برای تنش شکست در دو بخش آموزش و آزمایش گزارش شد.
- تاییده اخلاقی:** محتویات علمی این مقاله حاصل پژوهش نویسندگان است و در هیچ نشریه ایرانی و غیر ایرانی منتشر نشده است.
- تعارض منافع:** در این مقاله، هیچ گونه تعارض منافعی برای اظهار وجود ندارد.

short-range order on mechanical properties of NiCoCr multi-principal element alloys: A molecular dynamics simulations," *Materialstoday*, vol. 36, no. 11, pp. 106630, Agu. 2023, [doi: 10.3390/nano12234170](https://doi.org/10.3390/nano12234170).

[29] A. Dadrasi, S. Fooladpanjeh, A. Albooyeh, A. Salmankhani, A. Mashhadzadeh, M. Saeb, "A theoretical insight into the fracture behavior of the edge-cracked polycrystalline BC<sub>3</sub> nanosheets," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 192, no. 2, pp. 110346, Dec. 2021, [doi: 10.1039/c7ra10273a](https://doi.org/10.1039/c7ra10273a).

[30] M. Dehghani, A. Mashhadzadeh, A. Salmankhani, Z. Karami, S. Habibzadeh, M. Ganjali, M. Saeb, "Fracture toughness and crack propagation behavior of nanoscale beryllium oxide graphene-like structures: A molecular dynamics simulation analysis," *Eng. Fract. Mech.*, vol. 235, no. 14, pp. 107194, Apr. 2020, [doi: 10.1016/j.mtcomm.2023.106630](https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2023.106630).

[31] H. Bao, Y. Huang, Z. Yang, Y. Sun, Y. Bai, Y. Miao, P. Chu, K. Xu, F. Ma, "Molecular Dynamics Simulation of Nanocrack Propagation in Single-Layer MoS<sub>2</sub> Nanosheets," *J. Phys. Chem.*, vol. 122, no. 19, pp. 351-360, Nov. 2018, [doi: 10.1016/j.commatsci.2021.110345](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110345).

[32] A. Dadrasi, S. Fooladpanjeh, A. Gharahbagh, "Interactions between HA/GO/epoxy resin nanocomposites: optimization, modeling and mechanical performance using central composite design and genetic algorithm," *J. Brazil. Soc. Mech. Sci. Eng.*, vol. 41, no. 20, pp. 151-156, Jan. 2019, [doi: 10.1016/j.engfracmech.2020.107194](https://doi.org/10.1016/j.engfracmech.2020.107194).

[33] B. Bagheri, M. Dehghani, M. Safa, P. Zarintaj, A. Hamed, M. Ganjali, M. Saeb, "Fracture fingerprint of polycrystalline C<sub>3</sub>N nanosheets: Theoretical basis," *J. Mol. Graphics. Model.*, vol. 106, no. 3, pp. 107899, Sep. 2021, [doi: 10.1016/j.jmngm.2021.107899](https://doi.org/10.1016/j.jmngm.2021.107899).

[34] A. Jam, N. Jam, M. Izadifar, T. Rabczuk, "Molecular dynamics study on the crack propagation in carbon doped polycrystalline boron-nitride nanosheets," *Compu. Mater. Sci.*, vol. 203, no. 12, pp. 111066, Mar. 2022, [doi: 10.1016/j.commatsci.2021.111066](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.111066).

[35] F. Molaei, M. Dehghani, A. Salmankhani, S. Fooladpanjeh, S. Sajadi, M. Safa, O. Abida, S. Habibzadeh, M. Hamen, M. Saeb, "Applying molecular dynamics simulation to take the fracture fingerprint of polycrystalline SiC nanosheets," *Compu. Mater. Sci.*, vol. 200, no. 31, pp. 110770, Nov. 2021, [doi: 10.1016/j.commatsci.2021.110770](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110770).

[36] A. Dadrasi, A. Albooyeh, S. Fooladpanjeh, M. Shad, M. Beynaghi, "RSM and ANN modeling of the energy absorption behavior of steel thin-walled columns: a multi-objective optimization using the genetic algorithm," *J. Brazil. Soc. Mech. Sci. Eng.*, vol. 42, no. 20, pp. 114572, Dec. 2020, [doi: 10.1021/acs.jpcc.7b10094](https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b10094).

[37] A. Dadrasi, S. Fooladpanjeh, A. Alavi, "Interactions between HA/GO/epoxy resin nanocomposites: optimization, modeling and mechanical performance using central composite design and genetic algorithm," *J. Brazil. Soc. Mech. Sci. Eng.*, vol. 11, no. 26, pp. 41-63, Apr. 2019, [doi: 10.1007/s40430-019-1564-7](https://doi.org/10.1007/s40430-019-1564-7).

*J. Fish. Sci. Tech.*, vol. 1, no. 14, pp. 114231, Mar. 2024, [doi: 10.53818/jfst.01.2024.266](https://doi.org/10.53818/jfst.01.2024.266).

[16] A. Dadrasi, A. Albooyeh, S. Fooladpanjeh, A. Salmankhani, A. Mashhadzadeh, M. Saeb, "Theoretical examination of the fracture behavior of BC<sub>3</sub> polycrystalline nanosheets: Effect of crack size and temperature," *Mech. Mater.*, vol. 165, no. 4, pp. 104158, Jan. 2022, [doi: 10.1016/j.mechmat.2021.104158](https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2021.104158).

[17] L. Fan, Z. Bian, Z. Huang, F. Song, Y. Xia, J. Xu, "New insight into bonding energy and stress distribution of graphene oxide/hexagonal boron nitride: Functional group and grain boundary effect," *Diam. Relat. Mater.*, vol. 127, no. 22, pp. 109185, Sep. 2022, [doi: 10.1016/j.diamond.2022.109185](https://doi.org/10.1016/j.diamond.2022.109185).

[18] J. Ma, K. Wang, M. Tang, Y. He, X. Gao, J. Sun, "Effect of monovacancy defects on anisotropic mechanical behavior of monolayer graphene: A molecular dynamics study," *Diam. Relat. Mater.*, vol. 148, no. 3, pp. 111437, Sep. 2024, [doi: 10.1016/j.diamond.2024.111437](https://doi.org/10.1016/j.diamond.2024.111437).

[19] Q. Peng, A. Li, G. Chen, Huang Z, Chen X, Cai X, Hu Z, Chen X, "Effects of strain rate, temperature, and defects on mechanical properties of xgraphene: Molecular dynamics study," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 254, no. 31, pp. 113911, Apr. 2025, [doi: 10.1016/j.commatsci.2025.113911](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2025.113911).

[20] A. Islam, M. Akbar, M. Islam, C. Stampfl, A. Bhuiyan, J. Park, "Atomistic details of grain, crack, and notch effect on the mechanical behavior and fracture mechanisms of monolayer silicon carbide," *Mater. Chem. Phys.*, vol. 316, no. 4, pp. 129068, Dec. 2024, [doi: 10.1016/j.matchemphys.2024.129068](https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2024.129068).

[21] S. Plimpton, "Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics," *Parallel. Comput. Sci. Dep.*, vol. 17, no. 33, pp. 141-145, Jun. 1993, [doi: 10.1016/j.commatsci.2021.110770](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110770).

[22] A. Kinaci, C. Haskins, T. Cagin, "Thermal conductivity of BN-C nanostructures," *Phys. Rev. B.*, vol. 86, no. 11, pp. 115410, Sep. 2012, [doi: 10.1006/jcph.1995.1039](https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039).

[23] Z. Zhuang, J. Chang, J. Fan, M. Li, T. Dumitrica, H. Xu, "Mechanical properties of knitted carbon nanotube sheet: A molecular dynamics study," *Diam. Relat. Mater.*, vol. 17, no. 21, pp. 112005, Jan. 2025, [doi: 10.1103/PhysRevB.86.115410](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.115410).

[24] Z. Liu, H. Liu, Y. Wang, Z. Xu, L. Tian, C. Zhang, K. Zhang, R. Li, "Significantly improved interfacial mechanical properties in boron nitride nanosheet/Ti composite via nano-configuration: A molecular dynamics study," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 228, no. 3, pp. 112347, Sep. 2023, [doi: 10.1107/S002188989500197X](https://doi.org/10.1107/S002188989500197X).

[25] H. Zhao, H. Wang, "Molecular dynamics simulation of the mechanical properties of multi-walled nanotube comprising X-graphene and Y-graphene with different stacking orders," *J. Math. Chem.*, vol. 14, no. 20, pp. 114785, Dec. 2024, [doi: 10.1016/j.diamond.2025.112005](https://doi.org/10.1016/j.diamond.2025.112005).

[26] X. Zhang, Z. Chen, L. Lu, J. Wang, "Molecular Dynamics Simulations of the Mechanical Properties of Cellulose Nanocrystals-Graphene Layered Nanocomposites," *Nanomaterials*, vol. 12, no. 3, pp. 4170, Nov. 2022, [doi: 10.1016/j.commatsci.2023.112347](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2023.112347).

[27] X. Zhang, S. Liu, H. Liu, J. Zhang, X. Yang, "Molecular dynamics simulation of the mechanical properties of multilayer graphene oxide nanosheets," *RSC Adv.*, vol. 7, no. 22, pp. 5-11, Dec. 2017, [doi: 10.1007/s10910-024-01698-2](https://doi.org/10.1007/s10910-024-01698-2).

[28] R. Akter, M. Khan, M. Nobin, M. Ali, M. Hossain, M. Rahaman, M. Ali, "Effects of grain boundary and chemical