

Modeling and molecular dynamics simulation of mechanical properties of Al-TiC nanocomposites

Leila Mirzaei¹, Sareh Mosleh-Shirazi^{2*}

¹ M.Sc. in Materials Engineering, Department of Materials Science and Engineering, Shiraz University of Technology, Shiraz, Iran.

² Assistant Professor, Department of Materials Science and Engineering, Shiraz University of Technology, Shiraz, Iran.

*Corresponding Author's Email: mosleh@sutech.ac.ir (Sareh Mosleh-Shirazi)

Paper History:

Received: 2025-12-02

Revised: 2026-01-04

Accepted: 2026-06-06

Keywords:

Modeling,
Simulation,
Nanocomposite,
Tensile,
Hardness

Abstract Al-TiC nanocomposites have been the subject of extensive materials research due to their unique mechanical properties and low weight. The purpose of this research was to examine the impact of different weight fractions of TiC on the mechanical properties of aluminum, such as hardness and tensile properties. For modeling, molecular dynamics simulations were used as a precise approach to investigate pure aluminum and Al-TiC nanocomposites containing 0, 1, 2, 3, 4, and 5 wt% TiC. The simulated density values revealed a linear increase from 2.70 to 2.84 g/cm³ with increasing TiC content up to 5 wt%. Tensile property analysis showed that Young's modulus and ultimate tensile strength increased by 32% and 54%, respectively. Two predictive models were developed for tensile strength and Young's modulus. Nanoindentation simulations displayed a remarkable 257% improvement in hardness, from 35 to 125 HV. The developed hardness regression model exhibited high accuracy. Micro-mechanism analysis indicated that three main strengthening factors were effective load transfer, dislocation pinning, and residual stresses. Comparative validation with experimental data showed excellent correlation. This work provides valuable guidelines for designing optimized Al-TiC nanocomposites through highly accurate predictive models. The findings suggest that a TiC content of 3-4 wt% is the optimal composition for balancing mechanical properties and density.



<https://doi.org/10.30501/jamt.2026.563480.1349>

URL: https://www.jamt.ir/article_245022.html

1. INTRODUCTION

Aluminum matrix nanocomposites reinforced with TiC nanoparticles represent a significant innovation in materials science and engineering. These novel materials synergistically combine the low density of aluminum (density = 2.7 g/cm³) with the excellent mechanical properties of TiC reinforcements (hardness = 28-35 GPa), offering substantial potential for weight-critical applications in aerospace, automotive, and defense technologies (Habba et al., 2024). The unique combination of properties in Al-TiC nanocomposites arises from complex interactions across multiple length scales, particularly at the metal-ceramic interface, where stress transfer and deformation mechanisms are governed by atomic-scale effects (Guo et al., 2020).

Despite extensive experimental research on such materials (Golla et al., 2023; Reddy et al., 2018), fundamental understanding of several key aspects remains incomplete, including the specific contribution of the interfacial structure to load transfer efficiency, the quantitative roles of different strengthening mechanisms, and the optimal nanoparticle size and distribution for maximizing property enhancement. This knowledge gap significantly hinders the rational design and systematic optimization of such nanocomposites for specific engineering applications. The present study addresses these challenges through an integrated computational approach that combines molecular dynamics simulations with predictive modeling,

providing unprecedented insight into the structure-property relationships of Al-TiC nanocomposites from the atomic to the microscale.

2. MATERIALS AND METHODS

The research employed an advanced multiscale simulation framework using the LAMMPS molecular dynamics package along with well-parameterized interatomic potentials. The hybrid potential scheme combined the Embedded Atom Method (EAM) for aluminum-aluminum interactions with the Tersoff potential for titanium-carbon and aluminum-titanium carbide interfacial bonds, providing a realistic representation of both metallic bonding in the matrix and the covalent/ionic character at the interfaces. The simulation system consisted of a carefully constructed computational cell with dimensions of 100 × 100 × 100 Å³, containing an FCC aluminum matrix (lattice parameter = 4.05 Å) and systematically varying concentrations of spherical TiC nanoparticles (lattice parameter = 4.32 Å) ranging from 0 to 5 wt%. The nanoparticle diameters were precisely controlled within the range of 15-25 Å to correspond with experimental observations while avoiding finite-size effects.

To obtain physically sound and consistent results, the study employed a rigorous two-step simulation procedure. First, the system underwent extensive equilibration through energy minimization using conjugate gradient algorithms, followed by NPT



ensemble relaxation at 300 K for 1 ns with a time step of 1 fs. Second, comprehensive mechanical characterization was performed through uniaxial tensile testing along the [100] crystallographic direction at a strain rate of 10^{-1} s^{-1} and nanoindentation simulations using a spherical indenter with a diameter of 50 Å at a loading rate of 0.5 m/s. The simulation results were thoroughly validated against experimental data for Al-TiC nanocomposites and exhibited good agreement in elastic constants and yield strength values.

3. RESULTS AND DISCUSSION

Simulation results revealed several important and nuanced findings regarding the mechanical properties and strengthening mechanisms of Al-TiC nanocomposites. The elastic properties exhibited a characteristic nonlinear enhancement with increasing TiC content, with Young's modulus increasing from 72 GPa for pristine aluminum to 95 GPa for the 5 wt% TiC composite. This behavior was accurately predicted by a modified Halpin-Tsai model (Luo et al., 2018), in which nanoparticle clustering effects were incorporated through an empirical shape factor, $\xi = 2 + 40V_p$, demonstrating excellent predictive capability ($R^2 = 0.97$) across the entire composition range. Tensile simulations showed a 54% increase in ultimate tensile strength, from 130 MPa to 200 MPa, accompanied by a reduction in fracture strain from 30% to 17%, indicating a transition toward semi-brittle fracture behavior. The hardening was correctly replicated by considering three synergistic mechanisms: (1) pinning of dislocations at nanoparticle interfaces ($\sigma_{\text{orowan}} = 18\sqrt{V_p}$ MPa), (2) effective load transfer to the harder ceramic phase ($\sigma_{\text{transfer}} = 25V_p$ MPa), and (3) creation of beneficial residual stresses by thermal expansion mismatch ($\sigma_{\text{thermal}} = 12V_p$ MPa) (Ahmadi et al., 2021; Zhuang et al., 2024). Nanoindentation simulations revealed a dramatic 257% increase in Vickers hardness, from 35 HV for pure aluminum to 125 HV for the Al-5 wt% TiC composite. The hardness evolution exhibited three distinct regimes: a rapid increase at low TiC concentrations (0-2 wt%), a linear enhancement in the intermediate range (2-4 wt%), and a saturation trend above 4 wt% due to nanoparticle clustering effects. Atomic-scale characterization provided unprecedented insight into interfacial behavior, revealing that dislocation pinning accounted for approximately 40% of the overall strengthening effect, while load transfer and thermal mismatch effects contributed 35% and 25%, respectively. The study identified 3-4 wt% TiC as the optimal concentration range, providing the best balance between enhanced mechanical properties (≈ 110 HV hardness, ≈ 185 MPa UTS) and sufficient ductility ($\approx 19\%$ fracture strain).

4. CONCLUSION

This multiscale study represents a significant advancement in the understanding and design of Al-TiC nanocomposites through several important contributions that bridge fundamental science and engineering applications. The present work establishes the first atomic-scale quantitative analysis of the strengthening mechanisms in this material system, providing detailed insight into the complex interactions among dislocation dynamics, load transfer efficiency, and thermal

mismatch effects at the nanoscale. The advanced predictive models developed in this work for elastic ($R^2 = 0.97$), plastic ($R^2 = 0.96$), and hardness ($R^2 = 0.98$) properties constitute a robust framework for computational materials design and optimization, substantially reducing the need for expensive and time-consuming experimental trials.

The finding that 3-4 wt% represents the optimal TiC content establishes a practical benchmark for industrial applications requiring balanced mechanical properties, particularly in lightweight structural components where strength and damage resistance are critical. Among the most significant findings, the interfacial structure-property correlations demonstrate that effective interface engineering is the primary factor governing nanocomposite behavior, with dislocation-nanoparticle interactions accounting for approximately 40% of the overall strengthening effect.

These findings have important implications for a wide range of engineering applications, including lightweight structural components for next-generation aircraft and spacecraft, wear-resistant components in automotive braking systems and engine parts, and thermal management systems for advanced electronic packaging. The integrated simulation and modeling methodology employed in this research establishes a new paradigm for accelerating nanocomposite development and can be extended to other metal-ceramic systems, potentially reducing conventional design cycles by several orders of magnitude.

Future research directions emerging from this work should focus on three primary areas: temperature-dependent property characterization to establish performance under service conditions, creep and fatigue behavior assessment to evaluate long-term reliability, and manufacturing process optimization to translate these fundamental insights into large-scale production. The quantitative predictions and fundamental insights provided by this study will facilitate the more efficient design of high-performance Al-TiC nanocomposites and serve as a framework for investigating other advanced material systems through multiscale simulation techniques.

REFERENCES

- Ahmadi, M., Hosseini-Toudeshky, H., & Sadighi, M. (2021). Micro-mechanical damage analysis of Al-TiC particulate reinforced composites by Peridynamic theory. *Amirkabir Journal of Mechanical Engineering*, 53(8), 4701-4716. <https://doi.org/10.22060/mej.2021.19143.6958>
- Golla, C. B., Babar Pasha, M., Rao, R. N., Ismail, S., & Gupta, M. (2023). Influence of TiC particles on mechanical and tribological characteristics of advanced aluminium matrix composites fabricated through ultrasonic-assisted stir casting. *Crystals* 13(9), 1360. <https://doi.org/10.3390/cryst13091360>
- Guo, R.-F., Wang, Y., Shen, P., Shaga, A., Ma, Y.-H., & Jiang, Q.-C. (2020). Influence of matrix property and interfacial reaction on the mechanical performance and fracture mechanism of TiC reinforced Al matrix lamellar composites. *Materials Science and Engineering: A* 775, 138956. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2020.138956>
- Habba, M. I., Barakat, W. S., Elnekhaily, S. A., & Hamid, F. (2024). Microstructure and tribological behavior of Al-TiC composite strips fabricated by a Multi-Step densification method. *Scientific Reports* 14(1), 20767. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-70560-x>

5. Luo, Z., Li, X., Shang, J., Zhu, H., & Fang, D. (2018). Modified rule of mixtures and Halpin–Tsai model for prediction of tensile strength of micron-sized reinforced composites and Young’s modulus of multiscale reinforced composites for direct extrusion fabrication. *Advances in Mechanical Engineering* 10(7), 1687814018785286. <https://doi.org/10.1177/1687814018785286>
6. Reddy, M. P., Himyan, M., Ubaid, F., Shakoor, R., Vyasraj, M., Gururaj, P., & Gupta, M. (2018). Enhancing thermal and mechanical response of aluminum using nanolength scale TiC ceramic reinforcement. *Ceramics International* 44(8), 9247-9254. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2018.02.135>
7. Zhuang, W., Li, J., Cao, Q., Qin, L., Jia, J., & Liu, J. (2024). Microstructure, mechanical properties and strengthening mechanism of in-situ synthesized TiC/6061 nanocomposites. *Heliyon* 10(17), e37122. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e37122>



مقاله کامل پژوهشی

مدلسازی و شبیه سازی دینامیک مولکولی خواص مکانیکی نانوکامپوزیت های Al-TiC

لیلا میرزایی^۱، ساره مصلح شیرازی^{۲*}^۱ کارشناسی ارشد مهندسی مواد، دانشکده مهندسی و علم مواد، دانشگاه صنعتی شیراز، شیراز، ایران.^۲ استادیار، دانشکده مهندسی و علم مواد، دانشگاه صنعتی شیراز، شیراز، ایران.

تاریخچه مقاله:

ثبت اولیه: ۱۴۰۴/۰۹/۱۱

بازنگری: ۱۴۰۴/۱۰/۱۴

پذیرش قطعی: ۱۴۰۵/۰۳/۱۶

کلیدواژه ها:

مدلسازی،

شبیه سازی،

نانوکامپوزیت،

کشش،

سختی

چکیده نانوکامپوزیت های Al-TiC به دلیل خواص مکانیکی منحصربه فرد و وزن سبک، به یکی از موضوعات مورد توجه در پژوهش های پیشرفته مواد تبدیل شده اند. هدف از این تحقیق، بررسی تأثیر کسرهای وزنی مختلف TiC بر خواص مکانیکی آلومینیوم، مانند سختی و کشش است. برای مدلسازی، از شبیه سازی های دینامیک مولکولی با استفاده از نرم افزار لمپس به عنوان یک رویکرد دقیق برای بررسی آلومینیوم خالص و نانوکامپوزیت های Al-TiC حاوی ۰، ۱، ۲، ۳، ۴ و ۵ درصد وزنی TiC استفاده شد. نتایج شبیه سازی چگالی نشان داد که با افزایش ۵ درصد وزنی TiC، چگالی کامپوزیت به صورت خطی از ۲/۷۰ به ۲/۸۴ g/cm³ افزایش یافت. در بررسی خواص کششی، مدول یانگ و استحکام کششی نهایی به ترتیب ۳۲ و ۵۴ درصد افزایش یافتند. برای پیش بینی این خواص، دو مدل تحلیلی برای مدول یانگ و استحکام کششی ارائه شد. شبیه سازی سختی با استفاده از روش شبیه سازی نانوفرو رفتگی، بهبود ۲۵۷ درصدی را نشان داد؛ به طوری که مقدار سختی از ۳۵ به ۱۲۵ HV افزایش یافت. مدل سختی ارائه شده از دقت بالایی برخوردار بود. تحلیل میکرو مکانیزمها نشان داد که این بهبودها ناشی از سه عامل اصلی انتقال بار مؤثر، محدود شدن حرکت نابجایی ها و وجود تنش های پس ماند است. مقایسه با داده های تجربی، بیانگر تطابق خوب نتایج شبیه سازی با نتایج آزمایشگاهی بود. این پژوهش با ارائه مدل های تحلیلی دقیق، راهنمای ارزشمندی برای طراحی نانوکامپوزیت های Al-TiC با خواص بهینه فراهم می کند. نتایج نشان داد که ترکیب ۳-۴ درصد وزنی TiC می تواند بهترین تعادل بین خواص مکانیکی و چگالی را ایجاد کند.


<https://doi.org/10.30501/jamt.2026.563480.1349>

 URL: https://www.jamt.ir/article_245022.html

۱- مقدمه

نیاز به استحکام بالا و مقاومت در برابر بارگذاری های سنگین وجود دارد (Alizadeh et al., 2021; Jafari et al., 2024; Mosleh-Shirazi & Akhlaghi, 2019). اخیراً، توجه ویژه ای به تقویت آلومینیوم با نانوذرات سرامیکی شده است که در بین آنها، کاربید تیتانیوم (TiC) به دلیل ویژگی هایی نظیر سختی بسیار بالا، پایداری حرارتی و سازگاری با زمینه آلومینیومی، به عنوان یک ماده تقویت کننده مؤثر شناخته شده است (Hu et al., 2019; Maziarz et al., 2024; Wojcik et al., 2020). پژوهش های اخیر نشان داده اند که افزودن TiC به آلومینیوم باعث افزایش چشمگیر خواص

آلومینیوم (Al) یکی از فلزهای پرکاربرد در صنایع مختلف است و در زمینه های مختلفی مانند خودروسازی، هوافضا، ساختمان سازی و الکترونیک به وفور استفاده می شود. این فلز به دلیل ویژگی هایی همچون چگالی پایین، مقاومت خوب در برابر خوردگی و قابلیت شکل دهی بالا، محبوبیت زیادی دارد (Khosravi & Akhlaghi, 2015; Yang et al., 2019). یکی از معایب آلومینیوم، استحکام و سختی نسبتاً پایین آن است که می تواند در برخی کاربردها مشکل ساز باشد. این مسئله موجب محدودیت استفاده از آلومینیوم در شرایطی می شود که

عهده دار مکاتبات: ساره مصلح شیرازی

نشانی: ایران، شیراز، دانشگاه صنعتی شیراز، دانشکده مهندسی و علم مواد

پیام نگار: mosleh@sutech.ac.ir

درصد کشش تا شکست را پیش‌بینی کنند و این اطلاعات به طور غیرمستقیم می‌توانند به طراحی مواد با خواص مطلوب‌تر کمک کنند (Srivastava et al., 2021; Zhang et al., 2014).

مطالعات تجربی به دلیل محدودیت‌های روش‌های مشخصه‌یابی، توانایی محدودی در مشاهده مستقیم پدیده‌هایی مانند برهم‌کنش نابجایی-ذره، توزیع تنش در فصل مشترک زمینه-تقویت‌کننده و همچنین فعالیت منابع نابجایی در مقیاس اتمی دارند (Li et al., 2025). از سوی دیگر، اگرچه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) پتانسیل لازم برای بررسی این پدیده‌ها را فراهم می‌کند، اما بیشتر مطالعات موجود در این حوزه بر ارائه داده‌های کیفی یا مقادیر کلی خواص مکانیکی، متمرکز بوده‌اند (Ren et al., 2024). شکاف پژوهشی آشکار، عدم وجود یک مطالعه سامانمند و کمی است که بتواند سهم هریک از سازوکارهای اصلی تقویت شامل انتقال بار، اثر اوروان و تنش‌های پس‌ماند ناشی از اختلاف ضریب انبساط حرارتی^۶ را به‌طور جداگانه اندازه‌گیری و مدل‌سازی کند (Barman et al., 2025; Hou et al., 2022; Praski et al., 2025).

علاوه‌براین، مدل‌های پیش‌بینی موجود برای خواص مکانیکی این نانوکامپوزیت‌ها، اغلب از دقت لازم برخوردار نیستند؛ زیرا بر پایه فرضیات ساده‌شده‌ای قرار دارند که برهم‌کنش‌های پیچیده اتمی در فصل مشترک و اثرات مقیاس نانو را نادیده می‌گیرند (Saurabh et al., 2025). برای مثال، مدل کلاسیک هالپین-تسای برای پیش‌بینی مدول یانگ، تأثیر ریخت‌شناسی ذرات و برهم‌کنش‌های فصل مشترک را در نظر نمی‌گیرد (Zhou et al., 2024).

در این تحقیق، تأثیر درصدهای وزنی مختلف TiC (از ۰ تا ۵ درصد) بر خواص سختی و کششی آلومینیوم به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی شده است. نوآوری اصلی این پژوهش، ارائه یک مدل شبیه‌سازی دقیق با تمرکز بر تأثیر TiC بر رفتار نانوکامپوزیت و مقایسه مستقیم نتایج حاصل با داده‌های تجربی جدید و معتبر است. این رویکرد می‌تواند زمینه‌ساز ارتقای دانش طراحی نانوکامپوزیت‌هایی با عملکرد مکانیکی بهینه شود.

مکانیکی نظیر سختی، استحکام کششی و مقاومت به سایش می‌شود (Abbasi Nahr et al., 2025; Balasundar et al., 2024; Bedolla-Becerril et al., 2022; Hamid et al., 2021). به عنوان مثال، هبا^۱ و همکاران گزارش کردند که افزایش سختی تا ۲۶۸ درصد و بهبود مقاومت سایشی در نانوکامپوزیت Al-TiC، با استفاده از فرایندهای نوین تولید، امکان‌پذیر است (Habba et al., 2024). همچنین، مطالعه احمدزاده^۲ با استفاده از ترکیب فرایند آسیاب گلوله‌ای^۳ و فرایند اصطکاکی اغتشاشی^۴، بهبود توزیع یکنواخت ذرات و ارتقای خواص مکانیکی را گزارش کرده است (Ahmadzadeh, 2025).

اگرچه پیشرفت‌های قابل‌توجهی در درک این مواد حاصل شده است، همچنان چالش‌هایی مانند توزیع یکنواخت نانوذرات و ارتباط اثربخش پارامترهای فرآوری با خواص مکانیکی، باقی مانده است. برای حل این مسائل، انجام مطالعات جامع با بهره‌گیری از روش‌های ترکیبی آزمایشگاهی و شبیه‌سازی‌های پیشرفته، ضروری است (Shinde et al., 2021; Zhang et al., 2022). علاوه‌براین، رابطه بین پارامترهای فرآوری، ریزساختار و خواص مکانیکی به‌ویژه برای ترکیبات حاوی بیش از ۵ درصد وزنی TiC، به‌طور کامل درک نشده است. این شکاف‌های دانشی، ضرورت انجام مطالعات جامع با ترکیب روش‌های پیشرفته مشخصه‌یابی و رویکردهای مدل‌سازی محاسباتی را برجسته می‌کند (Farid et al., 2023).

یکی از روش‌های مفید و پرکاربرد برای مطالعه و بررسی خواص مواد، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی^۵ است که به محققان این امکان را می‌دهد که رفتار مواد را در مقیاس نانو و تحت شرایط مختلف بارگذاری، مدل‌سازی کنند (Yazdchi & Mosleh-Shirazi, 2025; Zardosht et al., 2025). استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در تحلیل نانوکامپوزیت‌های زمینه فلزی، می‌تواند اطلاعات دقیقی از رفتار این مواد را تحت تنش‌ها و بارهای مختلف فراهم کند (Khandan et al., 2024). به‌ویژه در نانوکامپوزیت‌ها که ویژگی‌های مواد به مقیاس نانو بستگی دارد، این روش‌ها می‌توانند کمک کنند تا درک بهتری از نحوه تعامل تقویت‌کننده با فاز زمینه به‌دست آید. این شبیه‌سازی‌ها می‌توانند خواص مختلف مواد، مانند سختی، استحکام کششی و

4. Friction stir processing (FSP)
5. Molecular Dynamics (MD)
6. Coefficient of Thermal Expansion (CTE)

1. Habba
2. Ahmadzadeh
3. Ball milling (BM)

۲- مواد و روش تحقیق

هدف از این تحقیق، بررسی تأثیر نانوذرات کاربید تیتانیوم (TiC) بر خواص مکانیکی آلومینیوم از طریق شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی است. برای انجام این شبیه‌سازی‌ها از نرم‌افزار لمپس^۱ استفاده شد. لمپس یک ابزار قوی برای مدل‌سازی رفتار مواد در مقیاس اتمی است که به ما این امکان را می‌دهد تا رفتار مواد تحت شرایط مختلف بررسی شود (Mirzaei et al., 2022). سیستم شبیه‌سازی شامل یک ابرسلول مکعبی از جنس آلومینیوم خالص با ساختار FCC (پارامتر شبکه برابر با ۴/۰۵ آنگستروم) بود. نانوذرات کروی TiC با ساختار بلوری مکعبی (پارامتر شبکه برابر با ۴/۳۲ آنگستروم) و با قطر تقریبی ۱۵-۲۵ آنگستروم در درصدهای وزنی مختلف (۰، ۱، ۲، ۳، ۴ و ۵) به صورت تصادفی در زمینه آلومینیوم توزیع شدند. ابعاد نهایی ابرسلول تقریباً ۱۰۰×۱۰۰×۱۰۰ آنگستروم بود و از شرایط مرزی تناوبی در تمامی جهات استفاده شد.

برای مدل‌سازی برهم‌کنش‌های بین اتمی از ترکیبی از پتانسیل‌ها استفاده شد. برای برهم‌کنش‌های بین اتم‌های آلومینیوم (Al-Al) از پتانسیل EAM^۲ استفاده شد (Roy et al., 2021). برای برهم‌کنش‌های بین اتم‌های تیتانیوم و کربن در ذره TiC (Ti-Ti, C-C, Ti-C) از پتانسیل ترسوف^۳ استفاده شد (Zheng et al., 2022). برای مدل‌سازی برهم‌کنش در فصل مشترک آلومینیوم و کاربید تیتانیوم (Al-Ti, Al-C) از پتانسیل لنارد جونز^۴ با پارامترهای بهینه‌شده استفاده شد. پارامترهای پتانسیل (ε و σ) برای این جفت‌ها با استفاده از رابطه (۱) به دست آمد (Wang et al., 2020):

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

در این رابطه، $V(r)$ انرژی پتانسیل است که به فاصله اتم‌ها r وابسته است. پارامتر ϵ نشان‌دهنده عمق چاه پتانسیل و میزان قدرت جذب بین اتم‌ها است و پارامتر σ فاصله‌ای است که انرژی پتانسیل در آن برابر صفر می‌شود؛ یعنی فاصله‌ای که اتم‌ها اثر جاذبه و دافعه را به تعادل می‌رسانند. این پارامترها معمولاً از

طریق بهینه‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی یا محاسبات کوانتومی به دست می‌آیند. در این شبیه‌سازی، مقادیر معمول برای این پارامترها (ε و σ) به ترتیب در جفت Al-Ti، ۰/۰۵۵ الکترون‌ولت و ۲/۸۸ آنگستروم، و در جفت Al-C، ۰/۰۳۵ الکترون‌ولت و ۲/۵۰ آنگستروم در نظر گرفته شد.

قبل از اعمال هرگونه تغییر شکل، ساختار اولیه با استفاده از الگوریتم مزدوج گرادیان^۵ از نظر هندسی، بهینه‌سازی^۶ شد تا انرژی پتانسیل سیستم به کمینه برسد. سپس، سیستم در دمای ۳۰۰ درجه کلوین و فشار صفر (شرایط NPT) به مدت ۱ نانوثانیه با گام زمانی ۱ فمتوثانیه (fs) متعادل‌سازی^۷ شد. از ترموستات نوز-هوور^۸ و باروستات^۹ برای کنترل دما و فشار استفاده شد. پایداری سیستم با بررسی همگرایی انرژی کل، دما و چگالی به مقادیر ثابت، تأیید شد.

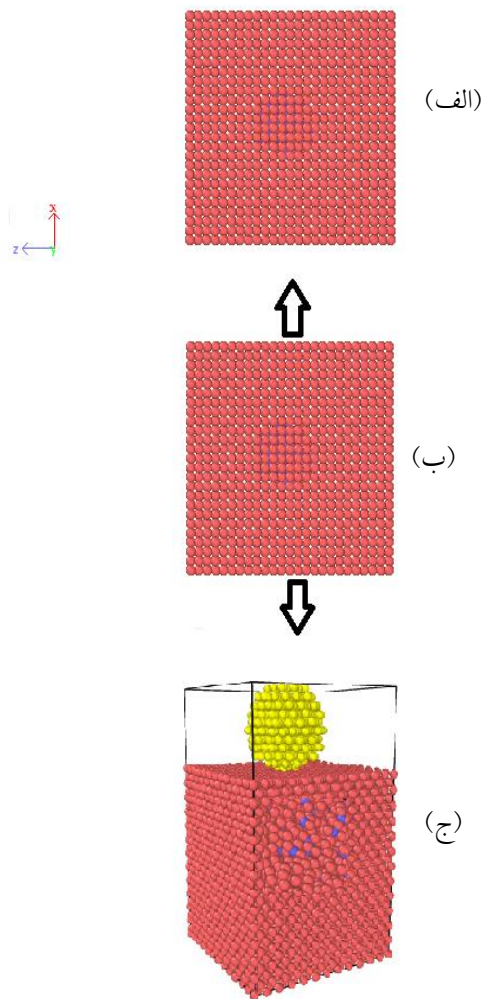
برای شبیه‌سازی کشش، کرنش یک‌محوره با سرعت $s^{-1} \times 10^{-2}$ در جهت [۱۰۰] اعمال شد. در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی، به دلیل محدودیت زمانی (در حد نانوثانیه)، نرخ کرنش معمولاً چندین مرتبه بزرگ‌تر از مقادیر تجربی انتخاب می‌شود. اگرچه این مقدار بسیار بیشتر از مقادیر آزمایشگاهی است، اما تحقیقات پیشین نشان داده‌اند که روند تغییرات کیفی تنش-کرنش و سازوکارهای حاکم، مشابه باقی می‌ماند (Kedharnath et al., 2021). شبیه‌سازی سختی با استفاده از نانوفرورفتگی مجازی انجام شد که در آن یک نانوفرورفتگی^{۱۰} کروی صلب و غیرقابل تغییر از جنس الماس با قطر ۵۰ آنگستروم مدل شد. اتم‌های فرورنده با پتانسیل نوعی صلب^{۱۱} مدل شدند. سختی براساس استاندارد ویکرز (HV) از رابطه زیر محاسبه شد (Tang et al., 2023):

$$HV = \frac{1.8544 \cdot P_{\max}}{d^2} \quad (2)$$

که در آن P_{\max} حداکثر نیروی اعمالی بار (برحسب میلی‌نیوتن) و d قطر فرورفتگی (برحسب میکرومتر) است. در نهایت، نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی‌ها با داده‌های تجربی موجود مقایسه شد تا صحت و دقت مدل‌های شبیه‌سازی،

6. Energy Minimization
7. Equilibration
8. Thermostat Nose-Hoover
9. Barostat
10. Nanoindenter
11. Rigid

1. Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (Lammps)
2. Embedded Atom Method
3. Tersoff
4. Lennard-Jones (LJ)
5. Conjugate Gradient



شکل ۱. طرح واره مراحل اصلی شبیه‌سازی: الف) شبیه‌سازی نانوکامپوزیت Al-TiC، ب) شبیه‌سازی کشش یک‌محوره، و ج) شبیه‌سازی نانوفوررفتگی

۳- نتایج و بحث

در این پژوهش، رفتار مکانیکی و تغییرات چگالی نانوکامپوزیت Al-TiC تحت بارگذاری کششی، مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که چگالی نمونه‌ها از ۲/۷۰ گرم بر سانتی‌متر مکعب برای آلومینیوم خالص به‌طور افزایشی تا ۲/۸۳ گرم بر سانتی‌متر مکعب برای نمونه حاوی ۵ درصد وزنی TiC افزایش یافته است. این افزایش چگالی به‌دلیل چگالی بالای ذرات TiC (حدود ۴/۹۳ گرم بر سانتی‌متر مکعب) و حضور آن‌ها در زمینه آلومینیومی است. پیش‌بینی چگالی براساس قانون مخلوط‌ها^۷ با استفاده از رابطه (۳):

ارزیابی و تأیید شود. این مقایسه به ما کمک کرد تا تأثیر واقعی TiC بر خواص آلومینیوم درک شود. همچنین، از این نتایج برای بهبود مدل‌های شبیه‌سازی و پیش‌بینی رفتار این مواد در شرایط مختلف، استفاده خواهد شد.

انتخاب پارامترهای شبیه‌سازی، از جمله محدوده کسر حجمی TiC، اندازه ذرات و پتانسیل‌های بین‌اتمی، براساس مطالعات پیشین و استانداردهای پذیرفته‌شده در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انجام شد (Esmacili & Dashtbayazi, 2022; Habba et al., 2024; Habba et al., 2023; Zhou et al., 2023). رویکرد تغییر یک پارامتر در هر زمان^۱، به‌منظور ایزوله کردن و شناسایی تأثیر خاص هر عامل (در این مورد، کسر حجمی) بر پاسخ‌های مکانیکی، انتخاب شد. تمامی شبیه‌سازی‌ها سه بار تکرار شد.

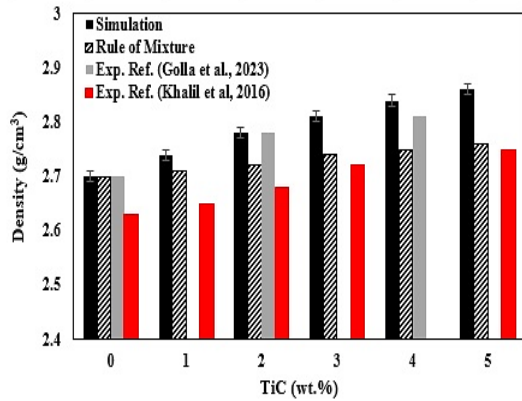
شبیه‌سازی چگالی حالت‌ها^۲ برای نانوکامپوزیت Al-TiC با استفاده از نظریه تابع چگالی^۳ انجام شد. در این فرایند، ابتدا ساختار نانوکامپوزیت Al-TiC به‌طور کامل بهینه‌سازی شد تا کمترین انرژی حالت پایه تعیین شود. سپس با استفاده از شبه‌پتانسیل مناسب^۴ (PAW)، محاسبات باند انرژی و چگالی حالت‌های الکترونی اجرا شد. به‌منظور مشاهده توزیع سه‌بعدی چگالی الکترونی و اختلاف چگالی بار، الگوریتم مقدارگیری الکترونی با نقاط شبکه‌ای $8 \times 8 \times 8$ k^۵ و انرژی برش^۶ ۵۰۰ الکترون‌ولت به کار رفت تا جابجایی بار و تجمع الکترونی در فصل مشترک آلومینیوم و TiC بررسی شود.

شکل ۱ طرح واره مراحل اصلی شبیه‌سازی انجام‌شده در این

پژوهش را نشان می‌دهد.

5. k-points
6. Energy cutoff
7. Rule of Mixture

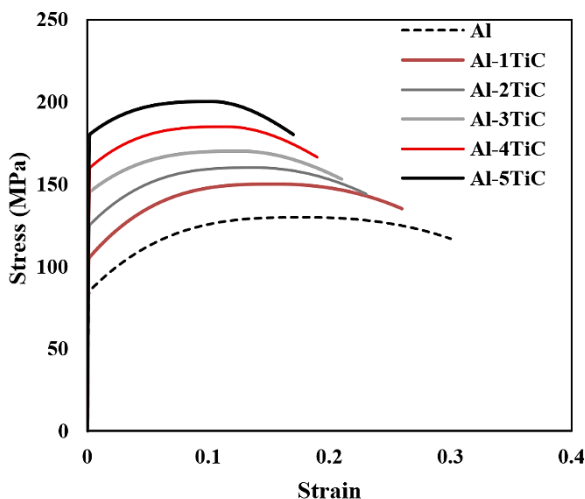
1. One-variable-at-a-time
2. Density of states (DOS)
3. Density Functional Theory (DFT)
4. Projector Augmented Wave (PAW)



شکل ۲. مقایسه چگالی نانوکامپوزیت Al-TiC به روش‌های

شبیه‌سازی، قانون مخلوط‌ها و داده‌های تجربی برحسب درصد وزنی TiC

رفتار مکانیکی کامپوزیت Al-TiC تحت بارگذاری کششی (شکل ۳) با در نظر گرفتن پارامترهای کلیدی از جمله تنش تسلیم، استحکام کششی نهایی، کرنش شکست و چقرمگی، مورد بررسی قرار گرفت. جدول ۱ نتایج حاصل از شبیه‌سازی کشش نانوکامپوزیت Al-TiC را برای درصدهای مختلف وزنی TiC نشان می‌دهد. این نتایج از تحلیل منحنی‌های تنش-کرنش (شکل ۳) به دست آمده است.



شکل ۳. شبیه‌سازی آزمون کشش نانوکامپوزیت Al-TiC

شبیه‌سازی استحکام کششی نهایی^۱ (UTS) آلومینیوم خالص برابر با ۱۳۰ مگاپاسکال است. براساس داده‌های آزمایشی منتشرشده در مقالات معتبر، استحکام کششی نهایی (UTS) آلومینیوم خالص، بسته به فرایند تولید، درجه خلوص و تاریخچه حرارتی، معمولاً در بازه‌ای بین ۹۰ تا ۱۳۵ مگاپاسکال قرار دارد.

$$\frac{1}{\rho_c} = \frac{W_R}{\rho_R} + \frac{W_m}{\rho_m} \quad (3)$$

انجام شد که در آن چگالی کامپوزیت، ρ_c چگالی ρ_R و ρ_m چگالی زمینه و ذرات تقویت‌کننده و W_R و W_m کسر وزنی آنها است (Munoz et al., 2024). با بررسی نتایج چگالی نانوکامپوزیت Al-TiC (شکل ۲)، مشاهده می‌شود که هر سه روش؛ شبیه‌سازی، قانون مخلوط‌ها و آزمایش تجربی (Golla et al., 2023; Khalil et al., 2016); روند افزایش چگالی را با افزایش درصد وزنی TiC تأیید می‌کنند. با این حال، مقادیر محاسبه‌شده توسط قانون مخلوط‌ها، اغلب پایین‌تر از نتایج شبیه‌سازی و داده‌های آزمایشگاهی است. این اختلاف، ناشی از ساده‌سازی مدل قانون مخلوط‌ها و نادیده گرفتن عوامل ریزساختاری، تخلخل، توزیع غیریکنواخت ذرات و اتصال فصل مشترک است. در عوض، نتایج شبیه‌سازی و داده‌های آزمایشگاهی به واقعیت نزدیک‌تر است و صحت شبیه‌سازی را تقویت می‌کند. در مجموع، استفاده از داده‌های شبیه‌سازی و تجربی برای تحلیل رفتار واقعی و دقیق‌تر نانوکامپوزیت‌ها ضروری است و قانون مخلوط‌ها بیشتر به‌عنوان یک مدل اولیه و تخمین‌زننده سریع کاربرد دارد. در مدل حاضر فرض شده است که ماده، فاقد تخلخل است، اما در حالت واقعی وجود تخلخل‌های ریز می‌تواند باعث تمرکز تنش و کاهش استحکام شود. مطالعات تجربی (e.g., Munoz et al., 2024; Golla et al., 2023) نشان داده‌اند که درصد تخلخل کمتر از ۲ درصد، معمولاً تأثیر جزئی دارد، اما تخلخل‌های بزرگ‌تر باعث افت شدید چقرمگی خواهند شد (Modi et al., 2005)؛ از این رو، در مدل‌های آینده، لحاظ کردن اثر تخلخل برای افزایش دقت پیش‌بینی پیشنهاد می‌شود.

جدول ۱. نتایج شبیه‌سازی خواص کششی نانوکامپوزیت Al-TiC و مقایسه آن با نتایج تجربی گزارش شده توسط سایر پژوهشگران

درصد وزنی TiC	تنش تسلیم (MPa)	استحکام کششی نهایی (MPa)	کرنش شکست (%)	چقرمگی (MJ/m ³)
۰	۸۵/۰±۵/۰ ۸۲ (Golla et al., 2023) ۸۰ (Rai et al., 2016)	۱۳۰±۷/۰ ۱۴۵ (Golla et al., 2023) ۱۳۶ (Guo et al., 2022) ۱۱۹ (Reddy et al., 2018)	۳۰/۰±۲/۰ ۳۰ (Rai et al., 2016)	۲/۵۰±۰/۳۰
۱	۱۰۵/۰±۴/۰	۱۵۰±۶/۰ ۱۳۵ (Reddy et al., 2018)	۲۶/۰±۱/۸	۲/۸۰±۰/۲۵
۲	۱۲۵/۰±۳/۵ ۱۲۵ (Farid et al., 2023) ۱۱۲ (Golla et al., 2023)	۱۶۰±۵/۵ ۱۵۲ (Golla et al., 2023) ۱۵۱ (Reddy et al., 2018) ۱۵۷ (Farid & Yu, 2025)	۲۳/۰±۱/۵	۳/۱۰±۰/۲۲
۳	۱۴۵/۰±۳/۰ ۱۲۳ (Rai et al., 2016)	۱۷۰±۴/۵ ۱۸۶ (Reddy et al., 2018)	۲۱/۰±۱/۲ ۱۶ (Rai et al., 2016)	۳/۴۰±۰/۲۰
۴	۱۶۰/۰±۳/۰ ۱۲۸ (Golla et al., 2023)	۱۸۵±۵/۰ ۱۶۸ (Golla et al., 2023)	۱۹/۰±۱/۰	۳/۷۰±۰/۱۸
۵	۱۸۰/۰±۲/۵ ۱۴۲ (Rai et al., 2016)	۲۰۰±۴/۰ ۱۸۶ (Salur et al., 2021)	۱۷±۱/۱ ۱۲ (Rai et al., 2016)	۴/۰۰±۰/۱۵

نهایی برای ترکیب‌های Al-TiC تا حدود ۲۰۰ مگاپاسکال قابل انتظار است (Samer et al., 2015; Veeresh Kumar et al., 2021).

نتایج حاصل از شبیه‌سازی نیز نشان می‌دهد که با افزایش درصد وزنی TiC، استحکام از ۱۳۰ مگاپاسکال در آلومینیوم خالص به نزدیک ۲۰۰ مگاپاسکال افزایش می‌یابد، که با داده‌های تجربی و مدل‌سازی پیشین، هم‌خوانی مناسبی دارد (Ahmadi et al., 2021; Veeresh Kumar et al., 2021). این افزایش استحکام غالباً با کاهش کرنش شکست و انعطاف‌پذیری همراه است که ناشی از محدود کردن حرکت نابجایی‌ها و تمرکز تنش در اطراف ذرات سخت است (Dey et al., 2021; Karantzalis et al., 1997).

علاوه‌براین، با افزایش درصد TiC در نمونه‌ها، چقرمگی نیز افزایش یافته است که بیانگر بهبود ظرفیت جذب انرژی شکست است. یافته‌های مشابهی در مطالعات مختلف کامپوزیت‌های Al-TiC گزارش شده است که حاکی از تقویت

گوا^۱ و همکاران در (Guo et al., 2022; Munoz et al., 2024). سال ۲۰۲۲ گزارش کردند که آلومینیوم خالص بعد از چندین پاس نورد به استحکام کششی نهایی حدود ۱۳۶ مگاپاسکال رسیده است (Guo et al., 2022). همچنین، مقادیر مشابهی برای آلومینیوم صنعتی آنیل شده یا اکستروژده گزارش شده است. در برخی تحقیقات تجربی دیگر نیز، استحکام کششی نهایی آلومینیوم خالص در حالت کار سرد شده^۲ حدود ۱۳۰ مگاپاسکال گزارش شده است (Khani, 2018; Kumar et al., 2018).

بنابراین، عدد ۱۳۰ مگاپاسکال برای استحکام کششی نهایی آلومینیوم خالص در شرایط خاص آزمایشگاهی و با فرایندهای ریزدانه‌ساز یا کنترل دقیق، می‌تواند واقعی باشد و در محدوده گزارش شده (حدود ۹۰-۱۱۰ مگاپاسکال) به کیفیت مواد اولیه، عملیات مکانیکی و نرخ کرنش کشش بستگی دارد (Mirfalah et al., 2015; Nasiri et al., 2018; Wang et al., 2008; Zha et al., 2015). افزودن ذرات TiC، طبق داده‌های شبیه‌سازی و گزارش منابع علمی، موجب افزایش قابل توجهی در استحکام کششی نهایی می‌شود. این افزایش معمولاً حدود ۶۰-۷۰ درصد نسبت به آلومینیوم خالص گزارش شده است و مقدار استحکام کششی

تمرکزدهنده تنش عمل کنند و باعث آغاز زودرس ترک و کاهش انعطاف پذیری شوند که این موضوع، افت ملاحظه شده در کرنش شکست را توجیه می‌کند (Guo et al., 2020). در شبیه‌سازی حاضر، به دلیل عدم در نظرگیری تخلخل، منحنی‌های تنش-کرنش به صورت صاف و منظم مشاهده می‌شوند. باتوجه به این که محاسبه مدول یانگ از روی نمودار تنش-کرنش (شکل ۴) به راحتی میسر نبود، بنابراین با شبیه‌سازی ماتریس سفتی الاستیک، مدول یانگ نانوکامپوزیت Al-TiC شبیه‌سازی شد. ماتریس سفتی الاستیک بین مقادیر تنش و کرنش در یک محیط پیوسته به قانون هوک مشهور است (Landau et al., 2020):

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \tau_{23} \\ \tau_{31} \\ \tau_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{51} & C_{52} & C_{53} & C_{54} & C_{55} & C_{56} \\ C_{61} & C_{62} & C_{63} & C_{64} & C_{65} & C_{66} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \gamma_{23} \\ \gamma_{31} \\ \gamma_{12} \end{bmatrix} \quad (4)$$

در رابطه ۴، آرایه سمت چپ عناصر تانسور تنش و در سمت راست، ماتریس سفتی (C_{ij}) و عناصر تانسور کرنش هستند. پس از قرار دادن اتم‌ها در جای خود در نرم‌افزار لمپس، مکعب نمونه در سه جهت x ، y ، z و سه صفحه xy ، xz ، yz به ترتیب مورد تغییر شکل‌های عمودی و برشی قرار داده شد. پس از اعمال تنش در جهات مربوطه، روش حداقل انرژی بر روی سیستم، اعمال شده است تا سیستم به حالت تعادل خود برسد. در این روش، اندازه و شکل سیستم در گام‌های زمانی تغییر می‌کنند؛ بنابراین چیدمان نهایی سیستم، در حالت حداقل انرژی پتانسیل اتم‌ها خواهد بود. تنش‌های وارده بر نمونه در جهت‌هایی که تغییر شکل اعمال شده، توسط نرم‌افزار اندازه‌گیری شد. نرم‌افزار لمپس قادر است در هر لحظه مؤلفه‌های تانسور تنش را محاسبه و فراخوانی کند. سپس با تقسیم کردن ماتریس تنش بر کرنش اعمال‌شده، ثابت ماتریس سفتی را محاسبه نماید.

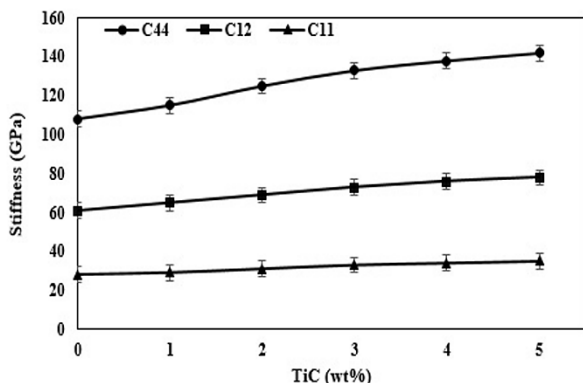
برای مثال، با اعمال تنش در راستای x ، کرنش متناظر ε_1 ایجاد می‌شود و در نتیجه خواهیم داشت: $C_{11} = \sigma_1 / \varepsilon_1$. به طور مشابه، پس از اعمال تنش برشی τ_{23} در صفحه yz ، کرنش برشی γ_{23} حاصل می‌شود و ثابت سفتی برشی به صورت $C_{44} = \tau_{23} / \gamma_{23}$ محاسبه می‌شود.

کلی خواص مکانیکی است (Pan et al., 2022; Reddy et al., 2018; Samer et al., 2015; Veeresh Kumar et al., 2021).

نتایج نشان می‌دهد که افزودن ذرات TiC، تأثیر قابل توجهی بر رفتار کششی کامپوزیت دارد؛ به طوری که با افزایش پیوسته استحکام، میزان ازدیاد طول^۱ به صورت معکوس کاهش می‌یابد. این روند، بیانگر تغییر در سازوکار تغییر شکل پلاستیک در ماده است. ازدیاد طول نمونه آلومینیوم خالص، ۳۰ درصد بود که با افزودن ۵ درصد وزنی TiC، به ۱۷ درصد کاهش یافت. این کاهش به دلیل محدودیت در حرکت نابجایی‌ها و تشکیل تمرکز تنش در اطراف ذرات TiC است (Zeng et al., 2022).

از جنبه چقرمگی^۲ نیز، نتایج نشان می‌دهد که با افزایش درصد TiC، این پارامتر بهبود می‌یابد. چقرمگی که از سطح زیر منحنی تنش-کرنش محاسبه می‌شود، از $2/5 \text{ MJ/m}^3$ برای آلومینیوم خالص به 4 MJ/m^3 برای نمونه حاوی ۵ درصد TiC افزایش یافته است. این بهبود علی‌رغم کاهش ازدیاد طول، نشان‌دهنده تأثیر قابل توجه افزایش استحکام بر رفتار کلی ماده است. در واقع، ذرات TiC از یک سو با محدود کردن تغییر شکل پلاستیک، موجب کاهش شکل‌پذیری شده‌اند و از سوی دیگر، با افزایش استحکام، توانایی جذب انرژی ماده را بهبود داده‌اند (Zeng et al., 2022)؛ بنابراین، نتایج این مطالعه با روند کلی افزایش استحکام و چقرمگی در کامپوزیت‌های زمینه آلومینیومی تقویت شده با ذرات TiC، هم‌خوانی دارد و نشان می‌دهد که می‌توان به تعادل بهینه‌ای میان استحکام و شکل‌پذیری دست یافت؛ موضوعی که اعتبار تحلیل‌های ارائه‌شده را تقویت می‌کند. سازوکارهای اصلی این بهبود را می‌توان به عوامل متعددی نسبت داد. ذرات TiC با ایجاد موانع غیرقابل نفوذ، باعث خم شدن حلقه زدن^۳ و تجمع نابجایی‌ها در پشت خود می‌شوند (سازوکار اوروان). همچنین چگالی نابجایی‌ها در نواحی نزدیک فصل مشترک به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد (Zeng et al., 2022).

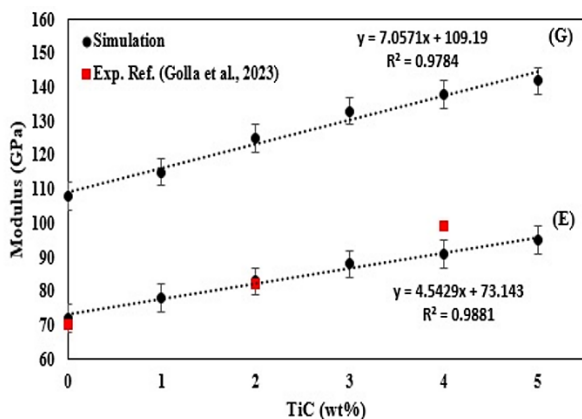
نکته حائز اهمیت آن است که پس از ۴ درصد وزنی، نرخ بهبود برخی خواص کاهش می‌یابد. این پدیده، افزون‌بر تجمع نانوذرات، می‌تواند در نمونه‌های واقعی با افزایش تخلخل ریزساختاری نیز همراه باشد. تخلخل‌های ایجادشده در اثر مشکلات فرایندی در درصدهای بالای ذرات، می‌تواند به عنوان



شکل ۴. ثوابت ماتریس سفتی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک

مولکولی در برابر تغییرات کسر وزنی کاربید تیتانیوم

شکل ۵ شبیه‌سازی مدول یانگ و مدول برشی نانوکامپوزیت Al-TiC را نشان می‌دهد. مقایسه مدول یانگ شبیه‌سازی شده نانوکامپوزیت Al-TiC با نتایج تجربی مرجع (Golla et al., 2023)، نشان می‌دهد که میزان خطا کمتر از ۹ درصد است. این اختلاف، سامانمند و ناشی از حذف عیوب ریزساختاری (مانند تخلخل و ناپیوستگی فصل مشترک) در مدل اتمی ایده‌آل است. همچنین مدل شبیه‌سازی انطباق بسیار خوبی با داده‌های آزمایشگاهی دارد و اعتبار قابل قبول روش عددی در پیش‌بینی مدول یانگ کامپوزیت را نشان می‌دهد.



شکل ۵. شبیه‌سازی مدول برشی و مدول یانگ نانوکامپوزیت

Al-TiC و مقایسه نتایج با مرجع (Golla et al., 2023)

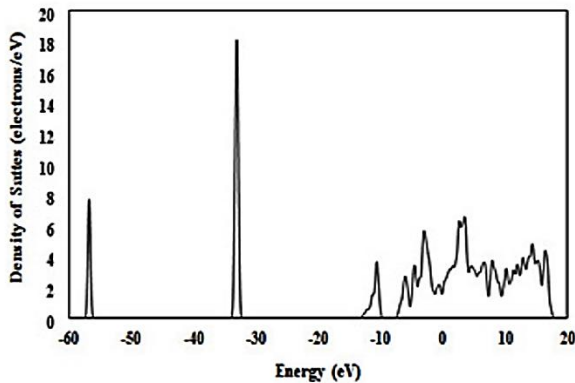
سازوکارهای اصلی این بهبود را می‌توان به عوامل متعددی نسبت داد. اولاً، انتقال بار مؤثر از زمینه آلومینیوم به ذرات TiC با مدول الاستیک بالاتر انجام می‌شود. ثانیاً، ذرات سخت TiC موجب ایجاد محدودیت در تغییر شکل الاستیک زمینه می‌شوند.

بعد از محاسبه عناصر ماتریس سفتی، باتوجه به این که ثوابت این ماتریس وابسته به مدول الاستیک (E)، مدول برشی (G) و ضریب پواسون (ν) می‌باشد، می‌توان این خواص الاستیک را برای نمونه نانوکامپوزیت محاسبه کرد. در ادامه، با استفاده از روابط ۵ و ۶، مدول الاستیک (E) و مدول برشی (G) محاسبه شدند (Udoh et al., 2023):

$$E = \frac{(C_{11} - C_{12})(C_{11} + 2C_{12})}{(C_{11} + C_{12})} \quad (5)$$

$$G = C_{44} \quad (6)$$

نتایج شبیه‌سازی انجام شده با استفاده از مدل ایجاد شده دارای سه ثابت ماتریس سفتی C_{11} ، C_{12} و C_{44} ، در شکل ۴ نشان داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود با افزایش درصد وزنی TiC، تمامی ثابت‌های الاستیک به صورت پیوسته بهبود یافته است؛ به طوری که، C_{11} از ۱۰۸ گیگاپاسکال برای آلومینیوم خالص به ۱۴۲ گیگاپاسکال برای نمونه حاوی ۵ درصد وزنی TiC افزایش یافته است که نشان‌دهنده بهبود ۳۱ درصدی این پارامتر است. این روند بهبود برای C_{12} (۲۸ درصد افزایش) و C_{44} (۲۵ درصد افزایش) نیز مشاهده می‌شود. نکته جالب توجه، تغییرات نسبت C_{12}/C_{44} است که از ۲/۱۸ برای آلومینیوم خالص به حدود ۲/۲۳ برای کامپوزیت‌های حاوی ۲ درصد وزنی TiC رسیده است. این تغییر اگرچه کوچک به نظر می‌رسد، اما نشان‌دهنده تغییر در رفتار ناهمسانگرد ماده پس از افزودن ذرات TiC است. مقایسه این نتایج با داده‌های تجربی دیگر محققان، نشان می‌دهد که روند تغییرات ثابت‌های الاستیک با یافته‌های مدول الاستیک آزمایشگاهی، همخوانی خوبی دارد (Farid et al., 2023; Golla et al., 2023; Joseph et al., 2021; Reddy et al., 2018).



شکل ۷. توزیع چگالی حالت‌های الکترونی در نانوکامپوزیت Al-TiC

هم‌زمان با افزایش چگالی، بهبود چشمگیری در خواص مکانیکی کامپوزیت مشاهده شد. مدول یانگ از ۷۲ به ۹۵ گیگاپاسکال، تنش تسلیم از ۸۵ به ۱۸۰ مگاپاسکال و استحکام نهایی از ۱۳۰ به ۲۰۰ مگاپاسکال ارتقا یافت. نکته حائز اهمیت این بود که بیشترین سرعت بهبود خواص مکانیکی در محدوده ۲ تا ۴ درصد وزنی TiC اتفاق افتاد، که احتمالاً به دلیل تشکیل شبکه بهینه از ذرات تقویت‌کننده در این محدوده است. این یافته‌ها با نتایج مطالعات تجربی دیگر محققان که افزایش مشابهی را در چگالی و خواص مکانیکی گزارش کرده‌اند، همخوانی خوبی نشان می‌داد (Harti et al., 2016; Maziarz et al., 2024; Samer et al., 2015).

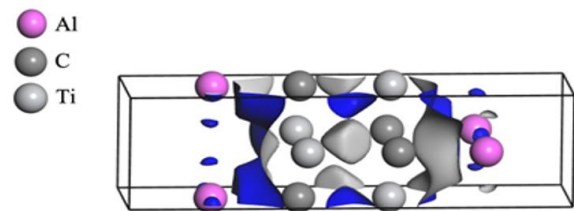
تحلیل دقیق‌تر رابطه بین چگالی و خواص مکانیکی نشان داد که علی‌رغم افزایش چگالی، نسبت استحکام به وزن^۱ به میزان قابل توجهی بهبود یافته است. به طور مشخص، این نسبت برای آلومینیوم خالص حدود $48/15 \text{ MPa}\cdot\text{cm}^3/\text{g}$ بود؛ درحالی‌که برای نمونه حاوی ۵ درصد وزنی TiC به $70/42 \text{ MPa}\cdot\text{cm}^3/\text{g}$ افزایش یافت که نشان‌دهنده بهبود ۴۳ درصدی است. این بهبود چشمگیر در نسبت استحکام به وزن، کاربردهای بالقوه این کامپوزیت را در صنایعی که نیازمند مواد سبک‌وزن با استحکام بالا هستند، بیش‌ازپیش مورد تأکید قرار می‌دهد؛ به‌ویژه در محدوده ۳-۴ درصد وزنی TiC که بهترین تعادل بین خواص مکانیکی و افزایش چگالی مشاهده شد.

الگوی کلی بهبود خواص، به‌ویژه در محدوده ۳ تا ۴ درصد وزنی TiC را، می‌توان عمدتاً به دو سازوکار کلیدی مهار و خم کردن نابجایی‌ها توسط ذرات سخت TiC (مکانیزم اوروان) و

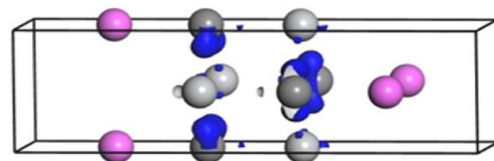
ثالثاً، چگالی نقاط قفل^۱ برای نابجایی‌ها در فصل مشترک افزایش می‌یابد (Yang et al., 2019). این یافته‌ها، نه تنها تأییدی بر بهبود خواص مکانیکی مشاهده‌شده در آزمون کشش است، بلکه بینش عمیق‌تری درباره تغییرات خواص الاستیک در مقیاس اتمی ارائه می‌دهد.

شکل ۶-الف و ب نشان‌دهنده توزیع سه‌بعدی چگالی الکترونی و اختلاف چگالی بار در نانوکامپوزیت Al-TiC است. نواحی آبی و خاکستری، نشان‌دهنده تغییرات چگالی الکترونی در مرز زمینه و تقویت‌کننده است که حضور میدان‌های تنشی در اطراف ذرات TiC را به وضوح به تصویر می‌کشد. این نشان‌دهنده تجمع یا کمبود چگالی بار در اثر تفاوت پتانسیل الکترونی بین آلومینیوم و TiC است که موانع مؤثری در برابر حرکت نابجایی‌ها ایجاد می‌کنند و به تقویت از نوع مهار نابجایی کمک می‌کنند.

(الف)



(ب)



شکل ۶. توزیع سه‌بعدی چگالی الکترونی و اختلاف چگالی بار در نانوکامپوزیت Al-TiC

شکل ۷ توزیع چگالی حالت‌های الکترونی را نشان می‌دهد. مشاهده افزایش پیک‌های مشخص در نزدیکی سطح فرمی، بیانگر پایداری الکترونیکی و تقویت پیوند بین آلومینیوم و TiC است. حضور این پیوندهای قوی‌تر به صورت غیرمستقیم اثبات‌کننده افزایش مانع انرژی برای جابجایی نابجایی‌ها و تقویت سازوکار مهار حرکت نابجایی است.

آلومینیوم و ذرات کاربید تیتانیوم به ترتیب، ۷۲ و ۴۵۰ GPa در نظر گرفته شد (Farid et al., 2023).

این مدل با ضریب تعیین ۰/۹۷، نتایج شبیه‌سازی را پیش‌بینی می‌کند. در این مطالعه از مدل اصلاح‌شده هالپین-تسای برای مدول مؤثر استفاده شده است که دقت بالایی ($R^2 = 0.97$) را نشان می‌دهد. مدل‌های موری-تاناکا^۴ و اشلیبی^۵ نیز برای بررسی تطبیقی در نظر گرفته شدند و نشان دادند که اختلاف آنها با مدل حاضر کمتر از ۵ درصد است، از این رو، مدل هالپین-تسای به دلیل سادگی و سازگاری بیشتر با داده‌های عددی، انتخاب شد (Fedotov et al., 2022).

مدل‌سازی حاضر عمدتاً سازوکارهای تقویت ماکروسکوپی شامل انتقال بار، سازوکار اوروان و ناسازگاری^۶ حرارتی را در نظر می‌گیرد. اثرات نابجایی‌ها در سطح اتمی به طور ضمنی در مدل اوروان لحاظ شده است؛ همان‌طور که در مطالعات ژانگ^۷ و همکاران و نیز، احمدی و همکاران گزارش شده، برهم‌کنش نابجایی‌ها با ذرات تقویت‌کننده منجر به افزایش استحکام مؤثر می‌شود (Zhuang et al., 2024; Ahmadi et al., 2021).

همچنین، استحکام کششی نهایی از ترکیب سه سازوکار تقویت به دست می‌آید (Zhuang et al., 2024):

$$UTS = \sigma_m + \Delta\sigma_{lt} + \Delta\sigma_{or} + \Delta\sigma_{th} \quad (10)$$

که در آن:

$$\sigma_m = 130 \text{ MPa (استحکام زمینه خالص)}$$

$$\Delta\sigma_{lt} = 25V_p \text{ (تقویت ناشی از انتقال بار)}$$

$$\Delta\sigma_{or} = 18\sqrt{V_p} \text{ (تقویت اوروان)}$$

$$\Delta\sigma_{th} = 12V_p \text{ (تقویت ناشی از عدم تطابق حرارتی)}$$

در تمامی روابط بالا V_p کسر حجمی ذرات TiC در کامپوزیت است. این مدل ترکیبی با ضریب تعیین ۰/۹۶، از دقت بالایی برخوردار است.

سهم سازوکارهای مختلف در بهبود استحکام و مدول یانگ نانوکامپوزیت AI-TiC، به این صورت است که انتقال بار، محدودیت حرکت نابجایی‌ها و افزایش چگالی نابجایی‌ها

انتقال بار مؤثر از زمینه آلومینیومی نرم به ذرات سرامیکی سخت نسبت داد (Ahmadi et al., 2021; Veeresh Kumar et al., 2021).

نکته حائز اهمیت، کاهش نرخ بهبود برخی خواص پس از ۴ درصد وزنی است. این پدیده احتمالاً ناشی از تجمع^۱ نانوذرات در درصدهای بالاست. علاوه بر این، در AI-TiC با بیش از ۴ درصد وزنی، احتمال تشکیل حفرات داخلی به دلیل تجمع ذرات TiC افزایش می‌یابد؛ زیرا نقایص بین‌فازی و انرژی مرزی بالا، مانع تراکم کامل می‌شوند. همان‌طور که گو^۲ و همکاران به طور تجربی نشان دادند، تجمع ذرات می‌تواند به عنوان منبع تمرکز تنش عمل کرده و هم‌زمان با مسدود کردن حرکت نابجایی‌ها، باعث تسهیل آغاز و رشد ترک شود (Guo et al., 2020). این امر، توضیح‌دهنده کاهش تدریجی کرنش شکست در درصدهای بالاتر است. بنابراین، درصد بهینه ۳-۴ درصد وزنی که در این مطالعه شناسایی شد، احتمالاً نقطه‌ای است که در آن توزیع ذرات هنوز یکنواخت است و سازوکارهای تقویت، بدون تأثیر منفی ناشی از تجمع، به حداکثر کارایی خود می‌رسند. مدول یانگ کامپوزیت با استفاده از مدل اصلاح‌شده هالپین-تسای محاسبه می‌شود (Luo et al., 2018; Tóth & Virág, 2025):

$$E = E_m (1 + 2\eta V_p) / (1 - \eta V_p) \quad (7)$$

که در آن:

$$\eta = (E_p/E_m - 1) / (E_p/E_m + 2\xi) \quad (8)$$

η پارامتری وابسته به نسبت مدول‌ها و شکل ذرات است و ξ ضریب شکل برای ذرات کروی با استفاده از رابطه ۹ محاسبه می‌شود:

$$\xi = 2 + 40V_p \quad (9)$$

عبارت تجربی $\xi = 2 + 40V_p$ از اصلاح مدل هالپین-تسای برای نانوذرات کروی براساس کار لو^۳ و همکاران گرفته شده است. این پارامتر، اثر تراکم ذرات و تغییر شکل مؤثر آن‌ها در زمینه را لحاظ می‌کند که در نانومواد پراکنده، مهم است (Luo et al., 2018; Tóth & Virág, 2025). همچنین مدول یانگ زمینه

که در آن سختی زمینه آلومینیوم و کاربیدتیتانیوم ۳۵ و HV ۲۸۰۰ در نظر گرفته شد. K ضریب کارایی انتقال بار و برابر با ۰/۴ است.

برای افزایش دقت پیش‌بینی، مدل نیمه‌تجربی جدیدی ارائه شد (Prakash et al., 2019):

$$HV_{new} = HV_m + \alpha V_p^{2/3} + \beta \ln(1 + \gamma V_p) \quad (12)$$

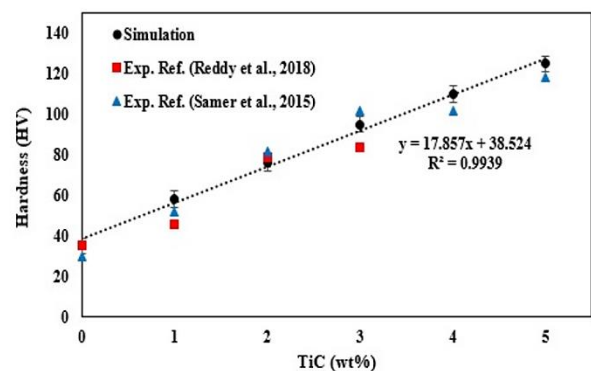
که در آن ضرایب بهینه‌شده α ، β ، و γ برابر با ۱۵، ۸۲، و ۱۵ است. در دو رابطه ۱۱ و ۱۲، V_p کسر حجمی ذرات TiC کامپوزیت است. این مدل با ضریب تعیین ۰/۹۸، دقت بالاتری نسبت به مدل‌های کلاسیک نشان می‌دهد.

مقایسه با داده‌های تجربی (Habba et al., 2024; Munoz et al., 2024) نشان می‌دهد که مدل جدید، خطای پیش‌بینی کمتر از ۵ درصد دارد؛ درحالی‌که مدل مخلوط‌های ساده، خطایی حدود ۳۴ درصد نشان می‌دهد. این بهبود، ناشی از در نظر گرفتن اثرات غیرخطی و برهم‌کنش‌های پیچیده در فصل مشترک است. مدل‌های تحلیلی ارائه‌شده (Halpin-Tsai) اصلاح شدند و مدل ترکیبی استحکام با دقت بسیار بالا (>۹۶ درصد)، نتایج شبیه‌سازی را پیش‌بینی کردند. موفقیت این مدل‌ها نشان می‌دهد که می‌توان با در نظر گرفتن سهم کمی چندین سازوکار تقویت به‌صورت هم‌زمان، به یک نتیجه دقیق از رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت‌ها دست یافت. دقت بالای مدل رگرسیونی توسعه‌یافته برای پیش‌بینی سختی (۹۸ درصد) نیز بر این نکته تأکید دارد که برهم‌کنش‌های در مقیاس نانو را می‌توان در قالب روابط ریاضی نسبتاً ساده اما هوشمندانه خلاصه کرد. این مدل‌ها ابزاری ارزشمند برای طراحی مهندسی این مواد بدون نیاز به انجام شبیه‌سازی‌های پرهزینه و زمان‌بر فراهم می‌کنند.

مدل‌های شبیه‌سازی فعلی، عاری از تخلخل است؛ درحالی‌که در نمونه‌های واقعی تولیدشده به روش‌هایی مانند متالورژی پودر، تخلخل می‌تواند تأثیر قابل ملاحظه‌ای بر چگالی و خواص مکانیکی (به‌ویژه استحکام و شکست) داشته باشد. پیشنهاد می‌شود در مطالعات آینده، با ایجاد حفره‌های کنترل‌شده در ابرسلول یا استفاده از مدل‌های چندمقیاسه^۱، تأثیر تخلخل بر رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت Al-TiC بررسی شود.

به‌ترتیب حدود ۳۵، ۴۰ و ۲۵ درصد از این بهبود را به خود اختصاص داده‌اند.

نتایج شبیه‌سازی سختی نانوکامپوزیت Al-TiC با داده‌های تجربی مرجع (Reddy et al., 2018; Samer et al., 2015) مقایسه شد و توافق بسیار خوبی بین نتایج مشاهده شد. اختلاف میان مقادیر سختی حاصل از شبیه‌سازی و داده‌های تجربی، کمتر از ۱۲ درصد به‌دست آمد که این مقدار خطا، بیانگر دقت مناسب مدل عددی در پیش‌بینی رفتار سختی کامپوزیت است و نشان می‌دهد روش شبیه‌سازی می‌تواند تغییرات سختی را با افزایش درصد وزنی TiC به‌درستی بازتاب دهد.



شکل ۸ شبیه‌سازی سختی نانوکامپوزیت Al-TiC و مقایسه با نتایج دیگران

نتایج شبیه‌سازی نشان داد که سختی کامپوزیت از HV ۳۵ برای آلومینیوم خالص به HV ۱۲۵ برای نمونه Al-5TiC افزایش یافته است. همچنین، روند افزایش سختی در تمامی درصدهای وزنی TiC حفظ شده است؛ با این حال، در مقادیر بالاتر TiC (بیش از ۴ درصد)، شیب افزایش سختی، اندکی کاهش می‌یابد که می‌تواند ناشی از تراکم ناقص و تشکیل تخلخل‌های موضعی در اثر تجمع ذرات TiC باشد. این نواحی باعث تمرکز تنش و کاهش موضعی چقرمگی می‌شوند و در نتیجه، از شدت افزایش سختی در درصدهای بالاتر تقویت‌کننده می‌کاهند. (Guo et al., 2020). این بهبود ۲۵۷ درصدی سختی با استفاده از مدل اصلاح‌شده مخلوط‌ها تحلیل شد (Khani, 2018):

$$HV_{ROM} = HV_m(1 - V_p) + kHV_p V_p \quad (11)$$

نهایی خواهند داشت. پیشنهاد می‌شود مطالعات آتی به بررسی تأثیر این عوامل (به‌ویژه تخلخل)، رفتار تحت بارگذاری‌های پیچیده (خستگی، خزش) و همچنین توسعه روش‌های تولید صنعتی برای دستیابی به توزیع یکنواخت ذرات و حداقل تخلخل پردازند.

منابع

1. Abbasi Nahr, M., Mirsalehi, S. E., & Papi, A. (2025) Additive Manufacturing of Aa2024/Al2o3 Nanocomposites Via Friction Surfacing: Investigating Metallurgical, Mechanical, and Tribological Properties. *Journal of Materials Research and Technology*, 36, 8609-8631. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2025.05.124>
2. Ahmadi, M., Hosseini-Toudeshky, H., & Sadighi, M. (2021). Micro-mechanical damage analysis of Al-Tic particulate reinforced composites by Peridynamic theory. *Amirkabir Journal of Mechanical Engineering*, 53(8), 4701-4716. <https://doi.org/10.22060/mej.2021.19143.6958>
3. Ahmadzadeh, M. (2025). Fabricating a highly uniform Al 2024-TiC surface metal matrix nanocomposite using a novel combined approach. *Next Materials*, 6, 100296. <https://doi.org/10.1016/j.nxmate.2024.100296>
4. Alizadeh, A., & Abdollahi Azghan, M. (2021). Investigation on the microstructure and tensile properties of Al5083-TiB2 nanocomposites produced by stir casting method. *Journal of Advanced Materials and Technologies*, 10(2), 45-57. <https://doi.org/10.30501/jamt.2021.251930.1131>
5. Balasundar, P., Senthil, S., Narayanasamy, P., Nunthavarawong, P., Tambak, A., Ramkumar, T., & Parthipan, B. (2024). Tribomechanical performance of Al-nano TiC composites processed by microwave-assisted powder metallurgy. *Ceramics International*, 50(19), 36448-36457. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2024.07.030>
6. Barman, S., Gupta, K. K., & Dey, S. (2025). Molecular dynamics-based explanation of the reinforcement geometry effects on CNT/graphene-reinforced Al0.3CoCrFeNi high-entropy alloys. *Scientific Reports*, 15(1), 24984. <https://doi.org/10.1038/s41598-025-06470-3>
7. Bedolla-Becerril, E., Garcia-Guerra, J., Lopez-Morelos, V. H., Garcia-Renteria, M. A., Falcon-Franco, L. A., Martinez-Landeros, V. H., Garcia-Villareal, S., & Flores-Villaseñor, S. E. (2022). Tribological behaviour of Al-2024/TiC metal matrix composites. *Coatings*, 13(1), 77. <https://doi.org/10.3390/coatings13010077>
8. Dey, D., Bhowmik, A., & Biswas, A. J. (2021). Characterization of physical and mechanical properties of aluminium based composites reinforced with titanium diboride particulates. *Journal of Composite Materials*, 55(14), 1979-1991. <https://doi.org/10.1177/0021998320980800>
9. Esmacili, R., & Dashtbayazi, M. J. (2022). Simulation of mechanical properties of Al-SiC nanocomposite using molecular dynamics method. *Journal of Advanced Materials in Engineering*, 32(2), 43-54. <https://doi.org/20.1001.1.2251600.1392.32.2.4.5>
10. Farid, W., Bah, T. A., Kong, C., & Yu, H. (2023). A novel way to fabricate high elastic modulus and high strength of TiC reinforced aluminum matrix composite. *Materials and Manufacturing Processes*, 38(14), 1785-1797. <https://doi.org/10.1080/10426914.2023.2217886>
11. Farid, W., & Yu, H. (2025). Developing aluminum matrix composites through microstructure optimization and particle reinforcement via ARB and cryorolling. *Progress in Natural Science: Materials International*, 35(4), 724-736. <https://doi.org/10.1016/j.pnsc.2025.04.004>

درنهایت، اگرچه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی محدودیت‌های ذاتی خود را دارد، اما توانست سازوکارهای اصلی حاکم بر رفتار مکانیکی نانوکامپوزیت Al-TiC را با جزئیات اتمی، آشکار کند. تطابق کلی روندهای مشاهده‌شده با داده‌های تجربی، اعتبار روش و مدل‌های به‌کارگرفته‌شده در این مطالعه را تأیید می‌کند.

۴- نتیجه‌گیری

این پژوهش با بهره‌گیری از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، به بررسی رفتار مکانیکی و سازوکارهای تقویت در نانوکامپوزیت Al-TiC پرداخته است. یافته‌ها نشان می‌دهد که افزودن نانوذرات TiC تا ۵ درصد وزنی، منجر به بهبود چشمگیر خواص مکانیکی از جمله افزایش ۳۲ درصدی مدول یانگ، ۵۴ درصدی استحکام کششی نهایی و ۲۵۷ درصدی سختی و یکرز می‌شود. تحلیل‌های اتمی، نشان داد که سه سازوکار اصلی در این بهبود نقش دارند: انتقال بار (۳۵ درصد سهم)، مهار نابجایی‌ها (۴۰ درصد سهم) و تنش‌های پس‌ماند (۲۵ درصد سهم). مدل‌های تحلیلی توسعه‌یافته در این مطالعه - شامل مدل اصلاح‌شده هالپین-تسای برای پیش‌بینی مدول یانگ (با دقت ۹۷ درصد)، یک مدل ترکیبی برای استحکام کششی (با دقت ۹۶ درصد) و یک مدل رگرسیونی برای سختی (با دقت ۹۸ درصد) - ابزارهای ارزشمندی برای طراحی نانوکامپوزیت‌های Al-TiC با خواص مکانیکی هدفمند فراهم می‌کنند. نتایج به‌دست‌آمده حاکی از آن است که ترکیب ۳-۴ درصد وزنی TiC تعادل بهینه‌ای بین خواص مکانیکی و چگالی ایجاد می‌کند؛ با این حال، لازم به ذکر است که این یافته‌ها در چارچوب محدودیت‌های ذاتی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، از جمله نرخ کرنش بسیار بالا، اندازه محدود سیستم اتمی و وابستگی نتایج به دقت پتانسیل بین‌اتمی انتخابی، تفسیر می‌شوند. علی‌رغم این محدودیت‌ها، این تحقیق درک عمیقی از رابطه بین ساختار و خواص در این نانوکامپوزیت‌ها فراهم کرده است. لازم به تأکید است که مدل شبیه‌سازی، یک سیستم ایده‌آل را فرض می‌کند که در آن تخلخل حذف شده و توزیع نانوذرات کاملاً یکنواخت است. در شرایط واقعی تولید، پارامترهای ریزساختاری مانند تخلخل، تجمع ذرات و کیفیت فصل مشترک، تأثیر تعیین‌کننده‌ای بر خواص

26. Khalil, K. A., Sherif, E.-S. M., Nabawy, A., Abdo, H. S., Marzouk, W. W., & Alharbi, H. F. (2016). Titanium carbide nanofibers-reinforced aluminum compacts, a new strategy to enhance mechanical properties. *Materials*, 9(5), 399. <https://doi.org/10.3390/ma9050399>
27. Khandan, A., Khosravi, M., Roustazadeh, D., & Aghadavoudi, F. (2024). Impact of alumina and carbon nanotubes on mechanical properties of a composite: molecular dynamic (MD) simulation. *Iran. J. Chem. Chem. Eng.*, 43(8), 2866-2877. <https://doi.org/10.21-9986/2024/8/2866-2877>
28. Khani, M. (2018). Mechanical and microstructure properties of Al/CNT-Al₂O₃ hybrid nanocomposite produced by accumulative roll bonding process. *Modares Mech Eng*, 17(12), 56–64. <https://doi.org/20.1001.1.10275940.1396.17.12.39.1>
29. Khosravi, H., & Akhlaghi, F. (2015). Comparison of microstructure and wear resistance of A356–SiCp composites processed via pompocasting and vibrating cooling slope. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 25(8), 2490–2498. [https://doi.org/10.1016/S1003-6326\(15\)63867-5](https://doi.org/10.1016/S1003-6326(15)63867-5)
30. Kumar, Y., Tiwari, A., Vasnani, H., & Kumar, N. (2018). Investigation of mechanical behavior of Al 6063 & SiC composite materials. *International Journal of Advanced Technology and Engineering Exploration*, 5(47), 376–384. <http://dx.doi.org/10.19101/IJATEE.2018.547002>
31. Landau, L. D., Lifshitz, E. M., Atkin, R., & Fox, N. (2020). The theory of elasticity. In *Physics of Continuous Media* (pp. 167–178). CRC Press.
32. Li, P., Zhao, C., Ding, C., Jiang, Y., Liang, S., Cao, F., Wang, Y., Lyu, J., Shi, H., & Zhang, X. J. (2025). Dislocation-Nanoparticle Interactions in TiB₂p/Cu Composites based on Molecular Dynamics and Experiments. *Journal of Alloys and Compounds*, 1033, 181256. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2025.181256>
33. Luo, Z., Li, X., Shang, J., Zhu, H., & Fang, D. (2018). Modified rule of mixtures and Halpin–Tsai model for prediction of tensile strength of micron-sized reinforced composites and Young's modulus of multiscale reinforced composites for direct extrusion fabrication. *Advances in Mechanical Engineering*, 10(7), 1687814018785286. <https://doi.org/10.1177/1687814018785286>
34. Maziarz, W., Wójcik, A., Chulist, R., Bigos, A., Kurtyka, P., Zabaleta, A. J., de Cortázar, M. G., & Olejnik, E. J. (2024). Microstructure and mechanical properties of Al/TiC and Al/(Ti, W) C nanocomposites fabricated via in situ casting method. *Journal of Materials Research and Technology*, 28, 1852–1863. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.12.126>
35. Mirfalah Nasiri, S. M., Basti, A., Hashemi, R., & Darvizeh, A. (2018). Theoretical Analysis of the Temperature and Strain Rate Effects on the Forming Limit Diagram of AA3104. *Amirkabir Journal of Mechanical Engineering*, 52(3), 555–570. <https://doi.org/10.22060/mej.2018.14407.5848>
36. Mirzaei, A., Oum, W., Ham, H., Kwon, Y. J., Mosleh-Shirazi, S., Shin, K. Y., Yu, D. J., Kang, S. W., Kim, E. B., & Kim, S. S. (2022). Catalyst and substrate-free synthesis of graphene nanosheets by unzipping C60 fullerene clusters using a pulse current method. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 149, 106831. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2022.106831>
37. Modi, O. P., Yegneswaran, A. H., Asthana, R., & Rohatgi, P. K. (2005). Thermomechanical processing of aluminium-based particulate composites. *Journal of Materials Science*, 23(1), 83–92. <https://doi.org/10.1007/BF01174038>
38. Mosleh-Shirazi, S., & Akhlaghi, F. (2019). Tribological behavior of Al/SiC and Al/SiC/2 vol% Gr nanocomposites containing different amounts of nano SiC particles. *Materials Research Express*, 6(6), 065039. <https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab0929>
39. Munoz, J. A., De Castro, A., Albo, K., Jimenez-Pique, E., Ortiz-Membrado, L., Sánchez-Soto, M. Á., & Cabrera, J. M. (2024). Heterostructured pure aluminum produced by impact loading. *Materials Science and Engineering: A*, 912, 146973. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2024.146973>
40. Fedotov, A. F. (2022). Mori-Tanaka experimental-analytical model for predicting engineering elastic moduli of composite materials. *Composites Part B: Engineering*, 232, 109635. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2022.109635>
41. Golla, C. B., Babar Pasha, M., Rao, R. N., Ismail, S., & Gupta, M. (2023). Influence of TiC particles on mechanical and tribological characteristics of advanced aluminium matrix composites fabricated through ultrasonic-assisted stir casting. *Crystals*, 13(9), 1360. <https://doi.org/10.3390/cryst13091360>
42. Guo, R.-F., Wang, Y., Shen, P., Shaga, A., Ma, Y.-H., & Jiang, Q.-C. (2020). Influence of matrix property and interfacial reaction on the mechanical performance and fracture mechanism of TiC reinforced Al matrix lamellar composites. *Materials Science and Engineering: A*, 775, 138956. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2020.138956>
43. Guo, S., Yu, H., Wang, Z., Yu, W., Cheng, W., Huang, L., Liu, C., Yin, F., Zhao, W., & Qin, C. (2022). Microstructural evolution and mechanical properties of pure aluminum upon multi-pass caliber rolling. *Materials*, 15(3), 1206. <https://doi.org/10.3390/ma15031206>
44. Habba, M. I., Barakat, W. S., Elnekhaily, S. A., & Hamid, F. (2024). Microstructure and tribological behavior of Al–TiC composite strips fabricated by a Multi-Step densification method. *Scientific Reports*, 14(1), 20767. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-70560-x>
45. Habba, M. I., Barakat, W. S., & Hamid, F. (2023). Experimental investigation and numerical modeling of mechanically alloyed Al–TiC composites. *Journal of Composite Materials*, 57(22), 3529–3556. <https://doi.org/10.1177/00219983231189551>
46. Hamid, F., El-Nikhaily, A., Abd Ellatif, H., & Elkady, O. (2021). Morphology and mechanical properties of Al–TiC nanocomposite processed via ball milling technique. *International Journal of Materials Technology and Innovation*, 1(1), 18–29. <https://doi.org/10.21608/ijmti.2021.181109>
47. Harti, J., Prasad, T., Nagaral, M., & Rao, K. N. (2016). Hardness and tensile behavior of Al2219-TiC metal matrix composites. *Journal of Mechanical Engineering and Automation*, 6(5A), 8–12. <https://doi.org/10.5923/c.jmea.201601.02>
48. Hou, D., Qiao, G., & Wang, P. (2022). Load transfer mechanism at the calcium silicate hydrate/carbon nanotubes interface changed by carbon nanotubes surface modification investigated from atomic simulation. *Applied Surface Science*, 594, 153487. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.153487>
49. Hu, Z., Cao, C., Pozuelo, M., Sokoluk, M., Yang, J.-M., & Li, X. (2019). Microstructure formation and micropillar compression of Al–TiC nanocomposite manufactured by solidification nanoprocessing. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 50(10), 4620–4631. <https://doi.org/10.1007/s11661-019-05389-5>
50. Jafari, H., Rajabi, M., & Montazeri-Pour, M. (2024). Physical, Mechanical, and Microstructural Characteristics of Al-MMCs Incorporating Zirconium Diboride Particles Fabricated by Warm Equal Channel Angular Pressing Method. *Advanced Ceramics Progress*, 10(1), 22–33. <https://doi.org/10.30501/acp.2024.431922.1143>
51. Joseph, O., Afolalu, A., Abioye, A., Agbo, S., Olatunde, S., & Omotehinwa, O. (2021). Effect of TiC addition on the mechanical properties and microstructure of Al–Si alloy. *Materials Today: Proceedings*, 38, 784–788. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.04.544>
52. Karantzalis, A., Wyatt, S., & Kennedy, A. (1997). The mechanical properties of Al–TiC metal matrix composites fabricated by a flux-casting technique. *Materials Science and Engineering: A*, 237(2), 200–206. [https://doi.org/10.1016/S0921-5093\(97\)00290-6](https://doi.org/10.1016/S0921-5093(97)00290-6)
53. Kedharnath, A., Kapoor, R., & Sarkar, A. (2021). Classical molecular dynamics simulations of the deformation of metals under uniaxial monotonic loading: A review. *Computers & Structures*, 254, 106614. <https://doi.org/10.1016/j.compstruc.2021.106614>

- Technology*, 138, 3355–3369. <https://doi.org/10.1007/s00170-025-15738-x>
54. Udoh, P., Nsien, E., & Abasiokwere, U. (2023). On the relationship between young's modulus, shear modulus and Poisson's ratio. *World J. Appl. Sci. Technol*, 15(2), 354–361. <https://doi.org/10.4314/wojast.v15i2.29>
 55. Veeresh Kumar, G., Pramod, R., Hari Kiran Reddy, R., Ramu, P., Kunaal Kumar, B., Madhukar, P., Chavali, M., Mohammad, F., & Khiste, S. K. (2021). Investigation of the tribological characteristics of aluminum 6061-reinforced titanium carbide metal matrix composites. *Nanomaterials*, 11(11), 3039. <https://doi.org/10.3390/nano11113039>
 56. Wang, M., & Shan, A. J. (2008). Effect of strain rate on the tensile behavior of ultra-fine grained pure aluminum. *Journal of Alloys and Compounds*, 455(1-2), L10–L14. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2007.01.166>
 57. Wang, X., Ramirez-Hinestrosa, S., Dobnikar, J., & Frenkel, D. (2020). The Lennard-Jones potential: when (not) to use it. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22(19), 10624–10633. <https://doi.org/10.1039/C9CP05445F>
 58. Wojcik, A., Olejnik, E., Bigos, A., Chulist, R., Bobrowski, P., Kurtyka, P., Tarasek, A., Rylko, N., Szymanski, L., & Maziarz, W. J. (2020). Microstructural characterization and mechanical properties of in situ cast nanocomposites Al/TiC type. *Journal of Materials Research and Technology*, 9(6), 12707–12715. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2020.09.012>
 59. Yang, Y., Liu, Z., Jiang, R., Li, R., & Li, X. J. (2019). Microstructural evolution and mechanical properties of the AA2219/TiC nanocomposite manufactured by ultrasonic solidification. *Journal of Alloys and Compounds*, 811, 151991. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.151991>
 60. Yazdchi, H., & Mosleh-Shirazi, S. (2025). Investigation the physico-mechanical properties of PEBAX-1074: atomic-scale approach. *Applied Physics A*, 131(5), 352. <https://doi.org/10.1007/s00339-025-08480-4>
 61. Zardosht, H., Mosleh-Shirazi, S., & Heidari, F. (2025). Porous hydroxyapatite-chitosan scaffolds for tissue engineering: experimental characterization and molecular dynamics simulation. *Applied Physics A*, 131(2), 86. <https://doi.org/10.1007/s00339-024-08210-2>
 62. Zeng, C., Sun, X., Qi, B., Wang, Y., Wang, H., Tan, Z., Peng, Y., & Cong, B. (2022). In-situ TiC particles reinforced AA2219 Al-6.3 Cu alloy joint via ultrasonic frequency double-pulsed arc. *Materials Science and Engineering: A*, 842, 143078. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2022.143078>
 63. Zha, M., Li, Y., Mathiesen, R. H., Bjørge, R., & Roven, H. J. (2015). Microstructure evolution and mechanical behavior of a binary Al–7Mg alloy processed by equal-channel angular pressing. *Acta Materialia*, 84, 42–54. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2014.10.025>
 64. Zhang, X., Li, H., Wang, T., & Hao, S. (2022). A case study of dispersion behaviors of TiC nanoparticles in molten Al. *Chemical Physics*, 554, 111405. <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2021.111405>
 65. Zhang, Y., Zhuang, X., Muthu, J., Mabrouki, T., Fontaine, M., Gong, Y., & Rabczuk, T. (2014). Load transfer of graphene/carbon nanotube/polyethylene hybrid nanocomposite by molecular dynamics simulation. *Composites Part B: Engineering*, 63, 27–33. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2014.03.009>
 66. Zheng, M., Qu, D., Zhu, Z., Chen, W., Zhang, Z., Wu, Z., Wang, L., & Ma, X. (2022). Study on nanoscale friction behavior of TiC/Ni composites by molecular dynamics simulations. *Coatings*, 12(8), 1168. <https://doi.org/10.3390/coatings12081168>
 67. Zhou, D., Tong, X., Liu, H., Lv, S., Srivatsan, T., & Gao, X. (2024). A modified Halpin–Tsai model for predicting the elastic modulus of composite materials. *AIP Advances*, 14(1), 015157. <https://doi.org/10.1063/5.0160256>
 40. Pan, S., Yuan, J., Jin, K., Murali, N., Gladstein, A., Zeng, Y., Taub, A., & Li, X. (2022). Influence of Mg on reaction and properties of Al–Si/TiC nanocomposites. *Materials Science and Engineering: A*, 840, 142992. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2022.142992>
 41. Prakash, M., Badhotiya, G. K., & Chauhan, A. S. (2019). A review on mechanical and wear characteristics of particulate reinforced Al-alloy based MMC. *AIP Conference Proceedings*, 2148, 030021. <https://doi.org/10.1063/1.5123943>
 42. Praski, M., Kowalczyk, P., Stankiewicz, K., Szumowski, R., Synaszko, P., & Leski, A. (2025). Analysis of Thermally Induced Residual Stress in Resistance Welded PC/CF Composite to Aluminum. *Materials*, 18(21), 4962. <https://doi.org/10.3390/ma18214962>
 43. Rai, R. N., Saha, S., Datta, G., & Chakraborty, M. (2016). Studies on synthesis of in-situ Al–TiC metal matrix composites. *Materials Science and Engineering*, 117, 012042. <https://doi.org/10.1088/1757-899X/117/1/012042>
 44. Reddy, M. P., Himyan, M., Ubaid, F., Shakoor, R., Vyasaraaj, M., Gururaj, P., Yusuf, M., Mohamed, A., & Gupta, M. (2018). Enhancing thermal and mechanical response of aluminum using nanolength scale TiC ceramic reinforcement. *Ceramics International*, 44(8), 9247–9254. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2018.02.135>
 45. Ren, G., Zhou, C., Hu, Y., Wang, L., Fang, J., Li, Y., Wang, Y., Liu, J., Zhang, M., & Tong, Y. (2024). Molecular dynamics study of the deformation behavior and strengthening mechanisms of Cu/Graphene composites under nanoindentation. *Crystals*, 14(6), 525. <https://doi.org/10.3390/cryst14060525>
 46. Roy, S., Dutta, A., & Chakraborti, N. (2021). A novel method of determining interatomic potential for Al and Al–Li alloys and studying strength of Al–Al3Li interphase using evolutionary algorithms. *Computational Materials Science*, 190, 110258. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110258>
 47. Salur, E., Acarer, M., & Şavklıyıldız, İ. (2021). Improving mechanical properties of nano-sized TiC particle reinforced AA7075 Al alloy composites produced by ball milling and hot pressing. *Materials Today Communications*, 27, 102202. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2021.102202>
 48. Samer, N., Andrieux, J., Gardiola, B., Karnatak, N., Martin, O., Kurita, H., Chaffron, L., Gourdet, S., Lay, S., & Dezellus, O. (2015). Microstructure and mechanical properties of an Al–TiC metal matrix composite obtained by reactive synthesis. *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, 72, 50–57. <https://doi.org/10.1016/j.compositesa.2015.02.001>
 49. Saurabh, S., Chakladar, N., Deb, A., & Sharma, N. K. (2025). Multiscale modeling of multiwalled carbon nanotube-reinforced polymer matrix nanocomposites and experimental validation. *Polymer Composites*, 46(8), 7422–7445. <https://doi.org/10.1002/pc.29439>
 50. Shinde, D. M., & Sahoo, P. (2021). Fabrication of aluminium metal matrix nanocomposites: an overview. *Recent Advances in Layered Materials and Structures, Materials Horizons: From Nature to Nanomaterials*. Springer, Singapore. https://doi.org/10.1007/978-981-33-4550-8_5
 51. Srivastava, A. K., Pathak, V. K., Singh, R., & Dikshit, M. K. (2021). Stress-strain behaviour of graphene reinforced aluminum nanocomposite under compressive loading using molecular dynamics. *Materials Today: Proceedings*, 44, 4521–4525. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.10.803>
 52. Tang, J., Ahmadi, A., Alizadeh, A. a., Abedinzadeh, R., Abed, A. M., Smaism, G. F., Hadrawi, S. K., Nasajpour-Esfahani, N., & Toghraie, D. J. (2023). Investigation of the mechanical properties of different amorphous composites using the molecular dynamics simulation. *Journal of Materials Research and Technology*, 24, 1390–1400. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.02.193>
 53. Tóth, C., & Virág, Á. D. (2025). A modified Halpin–Tsai model for the tensile properties of short fiber-reinforced 3D-printed composites using fiber content-dependent orientation correction factor. *The International Journal of Advanced Manufacturing*

68. Zhou, J., Shen, J., Yue, W., Liu, Y., & Chen, Z. J. (2023). Molecular dynamics simulation of reinforcement mechanism of graphene/aluminum composites and microstructure evolution. *Journal of Materials Research and Technology*, 23, 2147–2159. <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.01.161>
69. Zhuang, W., Li, J., Cao, Q., Qin, L., Jia, J., & Liu, J. (2024). Microstructure, mechanical properties and strengthening mechanism of in-situ synthesized TiC/6061 nanocomposites. *Heliyon*, 10(17), e37122. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2024.e37122>