



## Determination of Orthotropic Elastic Properties and Study of Size Effect of Single-Layer and Double-Layer Graphene Nanoplates Using Atomic Finite Element Method

Akbar Jafari<sup>1\*</sup>, Karim Aliakbari<sup>1</sup>, Mina Amiri<sup>2</sup>, Saeed Rouhi<sup>3</sup>

1. Associate professor, Department of Mechanical Engineering, Technical and Vocational University (TVU), Tehran, Iran.
2. M. Sc. Student, Department of Mechanical Engineering, Sirjan University of Technology, Sirjan, Iran.
3. Assistant professor, Department of Mechanical Engineering, LAN. C., Islamic Azad University, Langarud, Iran.

This study examines the effect of size on the elastic properties of single-layer and double-layer armchair-type graphene nanoplates. To maintain the discrete nature of the nanoplates, they were modeled using equivalent spatial frame structures, with the finite element method employed to predict their elastic properties. The results were then validated by comparison with previous studies. Based on the findings, the mechanical properties of the double-layer nanoplates exhibited a slight difference in size dependence compared to the single-layer sheets. It was also observed that, for both single-layer and double-layer nanoplates, the elastic properties at smaller sizes were direction-dependent. However, as the size increased, the properties transitioned toward orthotropy, and with further enlargement, the dependence diminished, eventually approaching isotropy. Specifically, the results showed that for small nanoplates (30 Å), the Young's moduli in two directions differed by about 6%. At a larger size (100 Å), this difference decreased to around 2%, and at 300 Å, it dropped to approximately 0.7%. Additionally, Poisson's ratios in the two orthogonal directions for single-layer square nanoplates at smaller sizes (10 Å) exhibited a notable difference of 19%. As the size increased to (100 Å), this difference reduced to about 8%, and at 300 Å, it significantly decreased to about 1.5%. These findings suggest that the convergence to isotropy occurs more rapidly for the Young's modulus compared to Poisson's ratio.

### Keywords

Graphene nanoplate  
Layers  
Elastic properties  
Atomic finite element model

Received: 12.23.2024

Revised: 02.18.2025

Accepted: 03.16.2025

### \*Corresponding Author

Akbar Jafari

Email

[a\\_jafari@nus.ac.ir](mailto:a_jafari@nus.ac.ir)

## 1- Introduction

Carbon-based nanomaterials have become highly popular for use in nanomechanical devices and nanocomposites due to their remarkable mechanical, electrical, and thermal properties [1]. Nanotechnology is defined as the ability to fabricate, control, enhance, and utilize materials at the nanoscale. The most distinctive characteristic of this field is the dependence of nanomaterial properties on size, physical shape, and the nature of interatomic bonds. This capability has become even more significant with advancements in atomic-level fabrication and geometry manipulation, which

continue to evolve. Due to their exceptional chemical, mechanical, thermal, and electrical properties, these materials have promising applications in microelectromechanical systems (MEMS), nanoelectromechanical systems (NEMS), optics, and polymer composite reinforcement [2].

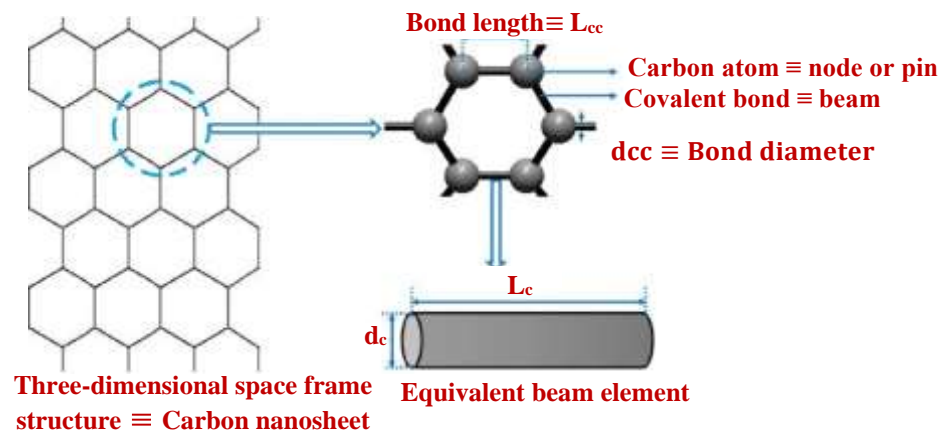
Computational methods in nanomechanics are pursued through atomic-scale approaches, molecular mechanics, finite element method (FEM), and continuum modeling, each with its own advantages and limitations.



Theoretical methods have been extensively developed to estimate the elastic properties of nanostructures, including Young's modulus, shear modulus, and Poisson's ratio. The present study investigates the effect of size on the elastic properties of single-layer and double-layer armchair graphene nanoplates. To preserve the discrete nature of the nanosheets, they were modeled using equivalent space-frame structures. Subsequently, an effective and efficient atomistic finite element method (AFEM) was developed to determine the elastic properties and mechanical behavior of single-layer and double-layer graphene sheets. To validate the methodology, the numerical results for elastic properties were compared with previous studies. This study focuses on the size-dependent elastic properties of both single-layer and double-layer sheets, an aspect that has been less explored in prior research, particularly for double-layer structures.

## 2- Theory and Simulation

In this study, the structure of armchair carbon nanosheets was examined. As schematically shown in Fig. 1, the nanosheet was modeled as a spatial structure based on the molecular structural mechanics approach. Fig. 1 also illustrates part of the hexagonal lattice, where beam elements were used in the finite element model to represent single carbon-carbon covalent bonds. Similar to conventional finite element models, nodes were employed to connect beam elements, forming the graphene structure. In this approach, the nodes represent carbon atoms and are defined based on their atomic coordinates. A modified interatomic potential was used to describe the atomic interactions in graphene. This potential is well-suited for modeling the behavior of carbon-carbon covalent bonds and has been widely applied by researchers in studying the fracture behavior of carbon nanotubes in both purely atomistic and atomistic-based continuum simulations.



**Figure 1: Schematic of the Molecular Structural Mechanics Approach**

In any structure, including carbon nanotubes and graphene, which are entirely composed of carbon-carbon covalent bonds, the molecular potential energies arising from bond interactions are significantly greater than non-bonded (long-range) interactions such as van der Waals forces [3]. Therefore, the total molecular potential energy during the deformation of a single-walled (layered) carbon nanostructure is equivalent to the energy contributions from various types of bond

deformations—namely, the sum of the energies associated with bond stretching/compression, bond angle variations, and bond twisting. Similarly, in the deformation of a spatial frame structure, the total strain energy is the sum of the strain energies resulting from beam elongation, beam bending, and beam torsion. In the molecular structural mechanics approach, the deformation of a carbon nanosheet is analogous to the deformation of a spatial frame structure. Thus, the total molecular potential energy

is equal to the total strain energy, which is expressed by Eq. (1).

$$U_{\text{total}} = U_r + U_\theta + U_\tau = U_A + U_B + U_T \quad (1)$$

Here,  $U_{\text{total}}$  represents the total molecular energy of a deformed bond in a single-layer carbon nanosheet or the total strain energy of a deformed beam structure. The terms  $U_r$ ,  $U_\theta$ , and  $U_\tau$  correspond to the energy contributions from bond stretching, bond angle variations, and bond twisting, respectively. Similarly,  $U_A$ ,  $U_B$ , and  $U_T$  denote the strain energy components resulting from beam elongation, beam bending, and beam torsion, respectively.

A code was developed to generate geometric data in MATLAB. The data were then imported into ANSYS for finite element analysis. To construct the model, atomic positions representing carbon atoms were first defined, followed by the creation of connecting lines representing covalent bonds. The process began by defining a unit cell, which was then repeated along the  $x$  – and  $y$  – directions to form a complete 2D nanosheet. Covalent bonds were modeled using the three-dimensional elastic BEAM4 element, where each node possesses three translational degrees of freedom ( $x$ ,  $y$ ,  $z$ ) and three rotational degrees of freedom about the same axes. In addition to beam elements, interlayer springs were included in the model to account for van der Waals interactions between graphene layers. These interactions were considered only for atom pairs within a cutoff radius  $\sigma$  (where  $\sigma$  is the Lennard-Jones parameter) [4]. Finally, after defining the interlayer springs, their stiffness was assigned based on the equivalent elastic energy of the chemical bonds.

### 3- Results and discussion

Fig. 2a shows the variations of the Young's modulus of the graphene sheet in the  $x$  and  $y$

directions. It is observed that at small sizes, these properties are significantly influenced by the loading direction, leading to noticeable differences. However, as the size increases, this direction-dependence weakens, and ultimately, the two curves converge to a certain value. In other words, as the size of the graphene sheet increases, its elastic property tends towards an isotropic behavior. Based on the graphs, it can be said that at the nanometric dimensions, the armchair graphene sheet is anisotropic, with its flexibility in the  $x$  direction being greater than in the  $y$  direction, though this difference is not significant. Physically, it can be explained that at small sizes, the statistical distribution of the elements in each direction differs noticeably relative to the total elements, but as the size increases, the total number of elements increases, and the difference in the number of elements in the two directions relative to the total decreases. Thus, the directional properties gradually disappear.

For double-layer graphene sheets, the variations in their elastic properties with respect to size are plotted in Fig. 2b. As observed, the trend in the changes of properties is similar to that of the single-layer sheets, with only slight differences between these values and those corresponding to the single-layer sheets. This minor difference arises from the weak van der Waals interactions between the two layers, which are less operative compared to the strong covalent bonds and do not contribute significantly to the results. In fact, it can be said that when the in-plane behavior is considered, the presence of two sheets side by side does not differ much from a single sheet, provided that the load is also proportionally adjusted. In other words, each sheet carries an equivalent load to that of a single sheet from the previous case. Therefore, explanations regarding the physical interpretation of these plots are omitted, and the same explanations for the single-layer sheet can be applied.

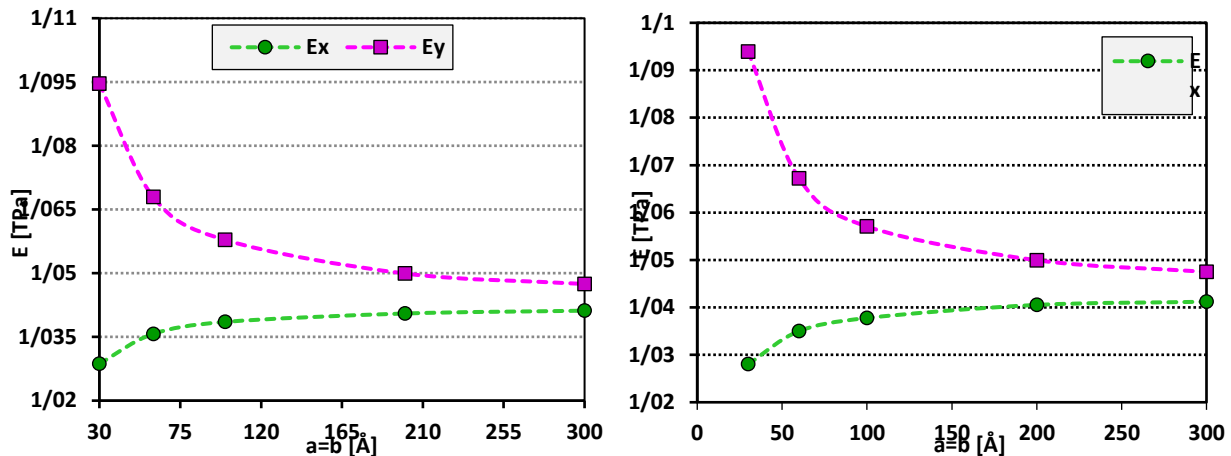


Figure 2: Young's modulus of the nanosheet as a function of its size; a) single layer and b) double layer

#### 4- Conclusion

In this study, square single-layer and double-layer graphene sheets with different sizes ranging from 30 to 300 Å were studied to determine their elastic properties. The following conclusions were drawn:

- 1- It was observed that for very small sheet sizes, the values of properties in the x and y directions were strongly influenced by the loading direction, showing significant differences. However, as the size increased, this direction dependence declined, and eventually, both curves converged to a specific value. In fact, as the size increased, the behavior gradually tended towards orthotropy and eventually isotropy.
- 2- According to numerical results, for small nanosheet sizes (30 Å), the Young's moduli in the two directions differ by about 6%. For larger sizes (100 Å), this difference decreases to about 2%, and as the nanosheet size increases to 300 Å, the difference reduces further to approximately 0.7%.
- 3- Based on the results, Poisson's ratios in the two orthogonal directions for single-layer square nanosheets at small sizes (10 Å) show a

significant difference of about 19%. As the size increases to 100 Å, the difference reduces to about 8%, and finally, as the nanosheet size reaches 300 Å, the difference becomes much smaller, around 1.5%. The numerical comparison confirms that the convergence towards isotropy occurs faster for the Young's modulus than for Poisson's ratio.

#### 5- References

- [1] S. Iijima, "Helical microtubules of graphitic carbon," *Nature*, vol. 354, pp. 56–58, 1991. [Online]. doi: [10.1038/354056a0](https://doi.org/10.1038/354056a0)
- [2] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and A. Jorio, "Unusual properties and structure of carbon nanotubes," *Annual Review of Materials Research*, vol. 34, pp. 247–278, 2004. [Online]. doi: [10.1146/annurev.matsci.34.040203.112300](https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.34.040203.112300)
- [3] C. Li, T.-W. Chou, A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes, *Int. J. Solids Struct.* 40 (2003) 2487–2499.
- [4] S. K. Georgantzinos and N. K. Anifantis, "Vibration analysis of multi-walled carbon nanotubes using a spring–mass based finite element model," *Computational Materials Science*, vol. 47, pp. 168–177, 2009.



## تعیین خواص الاستیک ارتوتروپیک و مطالعه اثر اندازه نانوصفحات گرافنی یک لایه و دو لایه با استفاده از روش اجزاء محدود اتمی

اکبر جعفری<sup>۱\*</sup>، کریم علی اکبری<sup>۱</sup>، مینا امیری<sup>۲</sup>، سعید روحی<sup>۳</sup>

۱- دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه ملی مهارت، تهران، ایران.

۲- دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی سیرجان، سیرجان، ایران.

۳- استادیار، گروه مهندسی مکانیک، واحد لنگرود، دانشگاه آزاد اسلامی، لنگرود، ایران.

### کلمات کلیدی

نانوصفحه گرافن  
لایه‌ها  
خواص الاستیک  
مدل المان محدود اتمی

دریافت مقاله: ۱۴۰۳/۱۰/۰۳

بازنگری مقاله: ۱۴۰۳/۱۱/۳۰

پذیرش مقاله: ۱۴۰۳/۱۲/۲۶

\*نویسنده مسئول

اکبر جعفری

ایمیل

[a\\_jafari@nus.ac.ir](mailto:a_jafari@nus.ac.ir)

### چکیده

در مطالعه حاضر، اثر اندازه روی خواص الاستیک نانوصفحات گرافنی نوع آرمیچری یک لایه و دو لایه بررسی شد. به منظور حفظ ماهیت گسسته نانوصفحات، با ساختارهای قاب فضایی معادل سازی شد و سپس روش المان محدود برای پیش‌بینی خواص الاستیک استفاده گردید. برای تایید نتایج، مقادیر عددی با تحقیقات دیگران مقایسه گردید. براساس نتایج، تابعیت وابستگی خواص مکانیکی صفحات دو لایه به اندازه آنها، اختلاف جزئی نسبت به تابعیت در صفحات یک لایه دارد. همچنین مشخص شد که در هر دو نوع تک لایه و دو لایه، خواص الاستیک در اندازه‌های کوچک نانوصفحه، وابسته به جهت بوده هر چند با افزایش اندازه به سمت ارتوتروپی رفته و با افزایش بیشتر اندازه نانوصفحه، این وابستگی کمتر شده و در نهایت به سمت ایزوتروپی میل می‌کند. در همین رابطه، نتایج نشان داد که در نانوصفحه کوچک ( $30 \text{ \AA}$ )، مدول‌های یانگ در دو راستا دارای اختلاف حدود ۶٪؛ در اندازه بزرگتر ( $100 \text{ \AA}$ ) این اختلاف به حدود ۲٪ رسیده و با بزرگتر شدن نانوصفحه به  $300 \text{ \AA}$  این اختلاف به حدود ۷٪ کاهش یافته است. بعلاوه، ضرایب پواسون در دو راستای متعامد، در نانوصفحات مربعی یک لایه در ابعاد کوچک ( $10 \text{ \AA}$ )، دارای اختلاف قابل توجه حدود ۱۹٪ است؛ با رسیدن به اندازه ( $100 \text{ \AA}$ ) اختلاف به حدود ۸٪ رسیده و در نهایت با رسیدن اندازه نانوصفحه به  $300 \text{ \AA}$ ، اختلاف خیلی کمتر شده و به حدود ۵٪/۱ رسیده است. این نتایج عددی نشان می‌دهد که همگرایی به ایزوتروپی در مدول یانگ سریع‌تر از نسبت پواسون رخ داده است.

### ۱- مقدمه

الکترونیک برجسته کاربردهای بالقوه‌ای در سیستم‌های میکروالکترومکانیکی، نانوالکترومکانیکی، اپتیک و تقویت کامپوزیت‌های پلیمری دارند [۴-۲]. یکی از مواد کلیدی در زمینه نانو ساختارها، صفحات تک لایه گرافیت هستند که به گرافن معروف شده‌اند و امروزه فناوری تولید آنها به اندازه کافی پیشرفت کرده است. با توجه به تولید موفقیت‌آمیز صفحات گرافنی و کاربردهای گسترده آنها در زمینه‌های مختلف، تحقیقات و تلاش‌های تجربی زیادی به کشف خواص حرارتی، شیمیایی، مکانیکی و الکترونیکی غیر معمول آنها و بررسی رفتار مکانیکی آنها اختصاص یافته است [۵،۶].

نانومواد کربنی به دلیل خواص مکانیکی، الکترونیکی و حرارتی قابل توجهی که دارد، به نانومواد محبوب در ساخت دستگاه‌های نانومکانیکی و نانوکامپوزیت‌ها تبدیل شده است [۱]. فناوری نانو به صورت توانایی در ساخت، کنترل، تقویت ماده و بکارگیری مواد در ابعاد نانومتری شناخته می‌شود. متمایزترین مشخصه این قلمرو وابستگی خواص نانومواد به اندازه، شکل فیزیکی و چگونگی پیوندهای بین اتمی آنها است. این قابلیت از آنجا اهمیت بیشتری پیدا می‌کند که امروزه توانایی ساخت و تغییر هندسه در حد اتمی فراهم شده و فناوری آن در حال توسعه است. این مواد به جهت خواص شیمیایی، مکانیکی، حرارتی و



رفتار ارتعاشی صفحات گرافنی ناقص استفاده کردند و دریافتند که فرکانس‌های طبیعی این صفحات با حضور نواقص در ساختار اتمی کاهش می‌یابد [۱۱].

واقعیت این است که شبیه‌سازی‌های اتمی و مبتنی بر محیط پیوسته به ترتیب برای افزایش و کاهش مقیاس با محدودیت مواجه هستند، لذا به عنوان رویکردی دیگر، روش‌های محاسبه چندمقیاسی برای مطالعه سیستم‌های نسبتاً بزرگ ولی با ساختار نانو توسعه یافته‌اند. نمونه‌ای از این روش‌ها ترکیب مکانیک مولکولی و المان محدود کلاسیک است و تحت عنوان المان محدود با پایه مقیاس اتمی نیز مطرح شده‌اند. این روش‌ها قابلیت در نظر گرفتن ماهیت گسسته اتم‌ها، لحاظ میدان نیرویی اطراف آن‌ها و پدیده‌های رخ داده در مقیاس اتمی را دارند و سرعت محاسباتی قابل توجهی برای سیستم‌های فاقد انرژی جنبشی و سیستم‌هایی که خواص‌شان به دما حساس نیست دارند [۱۲]. علاوه بر این با استفاده از این روش‌ها می‌توان نیروی کمانشی، فرکانس‌های طبیعی و مودهای ارتعاشی نانو ساختارها را با استفاده از ماتریس‌های سختی و جرم محاسبه کرد. از طرف دیگر، معمولاً نسبت به روش دینامیک مولکولی هزینه محاسباتی کمتری دارند.

روش اجزاء محدود اتمی (AFEM) برای نخستین بار توسط لیو و همکاران [۱۳] معرفی شد. در مطالعه دیگری روش مذکور را برای بررسی رفتار مکانیکی نانولوله‌های کربنی تک جداره پیشنهاد کردند [۱۴]. ملکوتی و منتظری با توجه به ماهیت گسسته صفحات گرافنی تک لایه، AFEM جدیدی بر اساس پتانسیل ترسف- برنر ارائه نمودند [۱۵]. بدین منظور، رفتار مکانیکی گرافن تحت بارگذاری کششی با استفاده از AFEM بررسی و مدول یانگ  $0.813$  ترا پاسکال و مقاومت نهایی  $130/92$  گیگا پاسکال را برای صفحه گرافنی کامل بدست آوردند.

سیستم‌های اتمی از جمله نانو ساختارهای کربنی بسیار به ساختارهای خرپا یا قاب فضایی شباهت دارند. امروزه محققان با استناد به این شباهت، با پیشینه مکانیک جامدات، سیستم‌های اتمی را به عنوان ساختارهای قاب فضایی در نظر می‌گیرند و سپس FEM را برای پیش‌بینی خواص و رفتار مکانیکی آنها استفاده می‌کنند. ایده اصلی این روش جایگزینی نیروی بین اتمی با المان‌های تیر الاستیک سه‌بعدی و اتم‌های کربن با المان‌های جرم نقطه‌ای در محل گره‌های المان‌های تیر است [۱۲]. در روش مذکور فقط فرم هارمونیک انرژی‌های پتانسیل بین‌اتمی دوجزئی در نظر گرفته می‌شود و مشابه

با توجه به سرعت تعیین پاسخ و هزینه کمتر، روش‌های مطالعه تئوری معمولاً مسیری مناسب برای کاهش آزمون و خطای مطالعات تجربی و آزمایشگاهی در نظر گرفته می‌شود. روش‌های محاسباتی در حوزه نانومکانیک با رویکردهای اتمی، مکانیک مولکولی، روش اجزاء محدود (FEM) و محیط پیوسته دنبال می‌شود که هر کدام مزایا و معایب خاص خود را دارند. بررسی ادبیات موضوع نشان می‌دهد که تاکنون بسیاری از محققین با استفاده از رویکردهای تئوری فوق به بررسی جنبه‌های مختلف نانو ساختارها و به ویژه گرافن پرداخته‌اند که در ادامه به برخی از این موارد اشاره خواهد شد. روش‌های اتمی مانند تنگ بست و تئوری تابعی چگالی به دلیل دقت و قابلیت اطمینان مطلوب در تحلیل رفتار مکانیکی صفحات تک لایه گرافن مورد استفاده قرار گرفته‌اند [۷]. یکی دیگر از رویکردهای مطالعه تئوری، شبیه‌سازی با روش‌های مبتنی بر دینامیک مولکولی (MD) است که در مطالعات مختلف در مورد نانو ساختارها گزارش شده است. یکی از مزایای این روش‌ها امکان معادل‌سازی ساختارهای اتمی و در نظر گرفتن پدیده‌های شیمیایی مانند شکست و تشکیل پیوند و میدان نیرو در اطراف اتم‌ها است و اصولاً هر مشکلی که مربوط به حرکت‌های مولکولی و اتمی باشد با این تکنیک‌ها قابل شبیه‌سازی است [۸]. برای مثال از این روش در تحلیل رفتار مکانیکی صفحات گرافنی تک لایه پرداخته شده و خواصی از قبیل استحکام نهایی، مدول یانگ و وابستگی خواص الاستیک به دما مورد مطالعه قرار گرفته است. در این رابطه، اخیراً وانگ و ژانگ با استفاده از شبیه‌سازی‌های MD، مدول یانگ و استحکام شکست گرافن دو لایه را محاسبه کردند. آنها نشان دادند که دما تأثیر کمی روی مدول الاستیک دارد، اما در استحکام شکست نقش کلیدی را ایفا می‌کند [۹].

رویکرد تئوری دیگر مبتنی بر محیط پیوسته است که قادر به مدل‌سازی رفتار ساختارهای مقیاس کوچک است. به عنوان مثال جعفری و همکاران، ارتعاشات آزاد نانوصفحات را با استفاده از تئوری کلاسیک و تئوری‌های غیر کلاسیک مختلف مانند گرادیان کرنش مرتبه اول، گرادیان کرنش مرتبه دوم، فرم دیفرانسیل غیرمحملی و گرادیان ضمنی مورد مطالعه قرار دادند [۱۰]. در این مطالعه، روش ناوبر و روش گلرکین برای حل عددی معادلات دیفرانسیل جزئی و تعیین پاسخ‌های پارامتریک برای فرکانس‌های طبیعی صفحه اتخاذ شدند و اثر پارامترهای مختلف از قبیل خواص کلاسیک و غیرمحملی، شرایط مرزی و اندازه صفحه روی فرکانس‌های طبیعی مورد بررسی قرار گرفت. اسبقیان نامین و همکاران از تئوری الاستیسیته غیرمحملی برای مطالعه

در اندازه‌های نانو به صورت قطعی و با قابلیت تکرار به سختی میسر است.

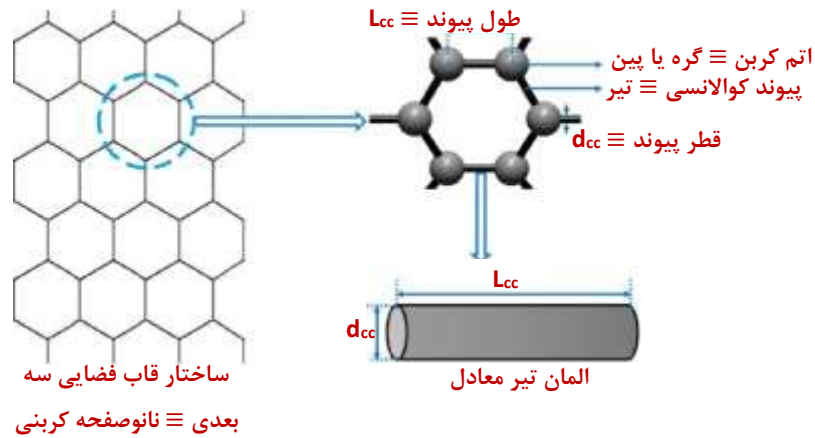
با توجه به عوامل و مشکلات ذکر شده، امروزه روش‌های تئوری به صورت گسترده‌ای برای بدست‌آوردن خواص الاستیک نانوساختارها مانند مدول یانگ، مدول برشی و ضریب پواسون توسعه یافته و از اهمیت بالایی برخوردارند. با این توضیحات، در مطالعه حاضر اثر اندازه روی خواص الاستیک نانوصفحات گرافنی نوع آرمیچری یک لایه و دو لایه مورد مطالعه قرار گرفته شده است. به منظور حفظ ماهیت گسسته نانوصفحات، با ساختارهای قاب فضایی معادل‌سازی شد. سپس روش المان محدود اتمی (AFEM) مؤثر و کارآمد برای تعیین خواص الاستیک و رفتار مکانیکی صفحات گرافن یک لایه و دوباره توسعه داده شده است. به منظور تایید روش انجام کار، نتایج عددی در زمینه خواص الاستیک با نتایج تحقیقات دیگران اعتبارسنجی گردید. مطالعه حاضر تأثیر اندازه بر خواص الاستیک صفحات یک لایه و دو لایه است که در مطالعات قبلی به ویژه صفحات دو لایه کمتر مورد توجه قرار گرفته شده است.

## ۲- تئوری و شبیه‌سازی مسأله

### ۲-۱- تئوری مسأله

در این مطالعه، ساختار نانوصفحه کربنی آرمیچر مورد بررسی قرار گرفت. همانطور که در شکل ۱ بصورت شماتیک نشان داده شده، طبق رویکرد مکانیک ساختاری مولکولی، نانوصفحه به عنوان یک ساختار فضایی مدل‌سازی شده است. شکل ۱ همچنین بخشی از شبکه شش ضلعی را نشان می‌دهد که المان‌های تیر در نمایش پیوندهای کووالانسی منفرد کربن-کربن در المان محدود استفاده شده است. همانند مدل‌های المان محدود متداول، از گره‌ها جهت اتصال المان‌های تیر برای تشکیل ساختار گرافن استفاده شد. در این مورد، گره‌ها نشان‌دهنده اتم‌های کربن هستند و با همان مختصات اتمی تعریف می‌شوند. پتانسیل بین اتمی اصلاح شده برای توصیف رفتار برهم‌کنش‌های اتمی در گرافن استفاده شد. این پتانسیل برای توصیف رفتار پیوند کووالانسی کربن-کربن مناسب است و توسط چندین پژوهشگر در مطالعه شکست نانولوله کربنی در هر دو شبیه‌سازی پیوسته اتمی خالص [۲۰،۲۱] و مبتنی بر اتمی [۲۲-۲۵]، استفاده شده است.

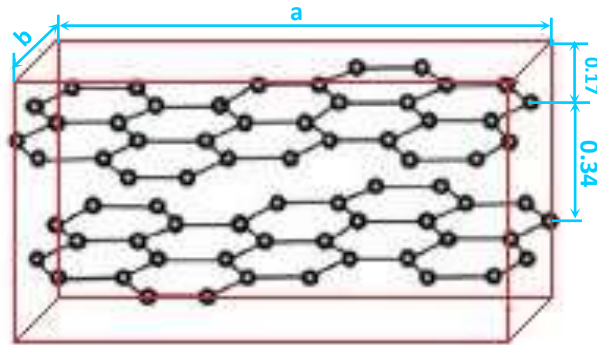
روش قبل نمی‌توان هر نوع تابع پتانسیلی را در نظر گرفت [۷]؛ اما مزیت این روش این است که می‌تواند برهم‌کنش‌های دوجزئی را به خوبی در نظر بگیرد و ماهیت گسسته نانوساختارها را شبیه‌سازی کند. بعلاوه، نسبت به روش دینامیک ملکولی کلاسیک از سرعت بسیار بالایی برخوردار است. همچنین می‌تواند برای مدل‌سازی سیستم‌های مقیاس کوچک ولی با تعداد زیاد درجه آزادی مورد استفاده قرار گیرد. جعفری و همکاران با این روش و البته بهبود آن با ترکیب المان‌های پیوسته تیر و میله با المان‌های فنر متمرکز، خواص مکانیکی و پیروالکتریک نانولوله‌های بر-نیتريد را تعیین نمودند [۱۶]. براساس برخی نتایج تحقیق مذکور، با افزایش قطر نانولوله‌ها خواص مکانیکی به سمت مقادیر مشخصی همگرا گردید. نتایج آنها نشان داد که مدول یانگ از حدود ۰/۷ ترا پاسکال در قطرهای کم به حدود ۱/۱ ترا پاسکال در قطرهای زیاد همگرا شد. سخایی پور و همکاران مدل مذکور را برای مطالعه ویژگی‌های ارتعاشی صفحات گرافنی یک لایه کامل پیشنهاد کردند که پتانسیل کاربرد به عنوان سنسورهای کرنش را دارد [۱۷]. باید اذعان نمود که روش‌های محاسباتی نمی‌توانند برای مطالعه رفتار مواد از جمله گرافن کافی باشند و در نهایت نتایج آزمایشگاهی و تجربی ملاک قضاوت و عملکرد واقعی خواهد بود. بعلاوه، با مقایسه نتایج تئوری با نتایج آزمایشگاهی امکان اعتبارسنجی و صحت‌سنجی نتایج فراهم می‌گردد. هرچند مطالعات آزمایشگاهی مختلفی برای تعیین خواص نانوساختارها از جمله گرافن گزارش شده ولی همچنان دستورالعمل‌های استاندارد برای اندازه‌گیری خواص مکانیکی ساختارهای مقیاس کوچک تثبیت نشده است. لی و همکاران با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی، خواص الاستیک و استحکام شکست غشای گرافن تک لایه را اندازه‌گیری کرده و مدول یانگ  $1/1 \pm 0$  ترا پاسکال را بدست آوردند [۱۸]. در مطالعه‌ای دیگر ژانگ و پان این مدول را ۰/۸۹ ترا پاسکال اندازه‌گیری کردند [۱۹]. این نتایج و البته مواردی از این قبیل نشان می‌دهد که معمولاً محدوده‌ای از مقادیر برای هر یک از ویژگی‌های نانوساختارها گزارش شده که بعضاً اختلاف قابل توجهی دارند که این تلقی را ایجاد می‌کند که شاید ابهامات یا نقاط ضعفی در روش‌های آزمایشگاهی در مقیاس نانو وجود دارد. یکی از دلایل این پدیده می‌تواند نویزهای موجود در محیط باشد که سبب اختلال و خطای احتمالی در نتایج می‌شود. علاوه بر این، نواقص موجود در نانوساختار و تمرکز تنش در تکیه‌گاه‌ها نیز می‌تواند نتایج را تحت تأثیر قرار دهد. همچنین معمولاً امکان پیاده‌سازی شرایط آزمایشگاهی



شکل ۱: شمانیک رویکرد مکانیک ساختاری مولکولی

ضخامت هر لایه و فاصله بین لایه‌ها بر اساس نتایج تجربی معادل طول پیوند بین اتم‌های کربن  $0.34 \text{ nm} = 3.4 \text{ \AA}$  لحاظ شده است [۲۶].

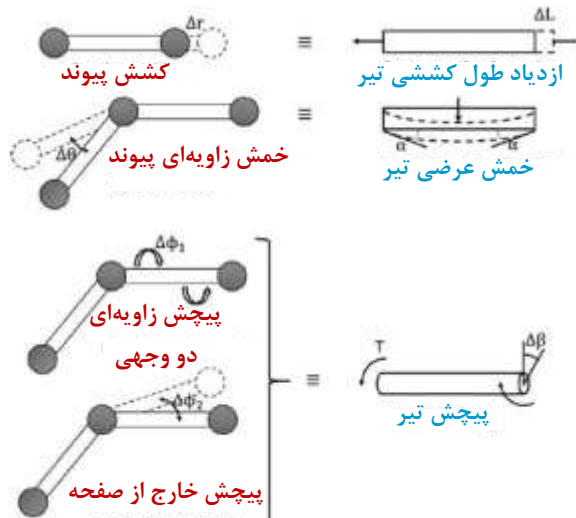
از طرفی، یک صفحه چند لایه با تکرار یک صفحه دو بعدی در جهت Z ایجاد می‌شود. همان‌طور که در شکل ۲ نشان داده شده،



شکل ۲: فاصله بین لایه‌ای در صفحات دو لایه

باشد. این تغییر شکل‌ها به ترتیب مشابه با اجزای تیر/میله تحت بار محوری، خمش تیر به دلیل نیروی عرضی و پیچش تیر در اثر پیچش است.

تغییر شکل ساختاری گرافن تک لایه می‌تواند ناشی از تغییر فاصله محوری پیوند، تغییر زاویه پیوند (خمش پیوند)، پیچش دو وجهی پیوند و پیچش خارج از صفحه در پیوند کربن-کربن مطابق شکل ۳



شکل ۳: مقایسه تغییر شکل‌ها در پیوند بین اتم‌های کربن و نمایش قاب فضایی معادل آن

$$\vec{F}_r = -kx; \vec{F}_a = -\vec{F}_r = kx \quad (۳)$$

$$U = \int_0^x kx dx = \frac{1}{2} kx^2 \quad (۴)$$

در اینجا،  $F_r$  نیروی بازگرداننده فنر با سختی  $k$  است که با قانون هوک توصیف شده است. با استفاده از رابطه (۴)، انرژی‌های فضایی مولکولی در تغییر شکل پیوند را می‌توان با معادلات (۵) و (۶) تعیین نمود [۷،۲۸]. به طور مشابه، انرژی‌های کرنش المان تیر به دلیل تغییر شکل آن، که توسط نظریه مکانیک سازه ارائه می‌گردد با رابطه (۷) تعیین می‌گردد [۷،۲۸].

$$U_r = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2; U_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\Delta \theta)^2 \quad (۵)$$

$$U_\tau = \frac{1}{2} k_\tau (\Delta \phi)^2, \text{ where } \Delta \phi = \Delta \phi_1 + \Delta \phi_2 \quad (۶)$$

$$U_A = \frac{EA}{2L} (\Delta L)^2;$$

$$U_B = \frac{EI}{2L} (2\alpha)^2; \quad (۷)$$

$$U_T = \frac{GJ}{2L} (\Delta \beta)^2$$

در اینجا،  $k_r$ ،  $k_\theta$  و  $k_\tau$  سختی متناظر پیوندهای کووالانسی کربن-کربن به ترتیب در تغییر طول پیوند، تغییر زاویه پیوند و پیچش پیوند هستند. مطابق شکل ۳، در حالی که  $\Delta r$ ،  $\Delta \theta$  و  $\Delta \phi$  به ترتیب تغییرات در طول پیوند، زاویه پیوند درون صفحه و زاویه پیچش پیوند هستند.  $L$  و  $A$  به ترتیب نشان دهنده طول تیر و سطح مقطع،  $I$  و  $J$  به ترتیب نشان دهنده ممان دوم و ممان دوم قطبی مساحت مقطع تیر حول محور مرکزی آن و  $E$  و  $G$  به ترتیب نشان دهنده مدول یانگ و مدول برشی ماده تیر هستند. مطابق شکل ۳، در حالی که  $\Delta L$ ،  $\alpha$  و  $\Delta \beta$  به ترتیب تغییر طول محوری تیر، زاویه خمش تیر، و زاویه پیچش تیر هستند. در رویکرد مکانیک ساختاری مولکولی،  $U_r$  معادل  $U_A$  و  $U_\theta$  معادل  $U_B$  (تغییر طول پیوند معادل تغییر طول تیر است)،  $U_\tau$  معادل  $U_T$  و  $2\alpha$  معادل  $\Delta \theta$  (تغییر زاویه پیوند معادل خمش تیر است) و  $\Delta \beta$  معادل  $\Delta \phi$  (پیچ خوردگی پیوند معادل پیچش تیر است) هستند. معادل‌سازی این انرژی‌های متناظر مکانیک مولکولی و مکانیک ساختاری، مجموعه معادلات (۸) را نتیجه می‌دهد [۷،۲۸].

در هر ساختاری از جمله نانولوله‌های کربنی و گرافن که به طور کامل از پیوندهای کووالانسی کربن-کربن تشکیل شده است، انرژی‌های فضایی مولکولی ناشی از برهم‌کنش‌های پیوندی بسیار بیشتر از برهم‌کنش‌های غیر پیوندی (دوربرد) مانند برهم‌کنش واندروالس است [۷]؛ بنابراین، کل انرژی فضایی مولکولی در طول تغییر شکل نانو ساختار کربنی تک لایه (لایه) برابر با انرژی‌های ناشی از انواع تغییر شکل‌های پیوند یعنی مجموع انرژی‌های ناشی از کشش/فشار پیوند، تغییر زاویه پیوند و پیچش پیوند است. به طور مشابه، کل انرژی کرنش در تغییر شکل ساختاری قاب فضایی برابر مجموع انرژی‌های کرنش ناشی از تغییر طول تیر، خمش تیر و پیچش تیر است. در رویکرد مکانیک ساختاری مولکولی، تغییر شکل نانوصفحه کربنی همان تغییر شکل ساختاری قاب فضایی است. بنابراین، کل انرژی‌های فضایی مولکولی برابر با جمع کل انرژی‌های کرنش است که با معادله (۱) نشان داده می‌شود.

$$U_{\text{total}} = U_r + U_\theta + U_\tau = U_A + U_B + U_T \quad (۱)$$

در اینجا،  $U_{\text{total}}$  کل انرژی مولکولی یک تغییر شکل پیوند نانوصفحه کربنی تک لایه یا کل انرژی کرنش تغییر شکل ساختاری تیر است.  $U_r$ ،  $U_\theta$  و  $U_\tau$  به ترتیب انرژی‌های ناشی از تغییر طول پیوند، تغییر زاویه پیوند و پیچش پیوند هستند.  $U_A$ ،  $U_B$  و  $U_T$  به ترتیب انرژی‌های کرنشی ناشی از تغییر طول، خمش تیر و پیچش تیر هستند. مشخص شده است که تغییر شکل‌های پیوند در حرکت‌های ارتعاشی نانو ساختارهای کربنی بسیار کوچک‌تر از ابعاد کلی آنهاست [۷،۲۷]. بنابراین، با فرض تغییر شکل‌های کوچک، همانطور که در رابطه (۲) نشان داده شده، انرژی پتانسیل کل این نوسان‌گر، برابر کار انجام‌شده برای تغییر شکل آن است.

$$U = \int_0^x dW = \int_0^x \vec{F}_a \cdot d\vec{x} = \int_0^x F_a dx \quad (۲)$$

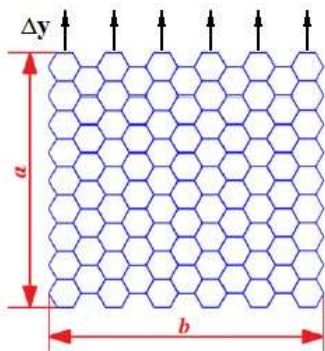
در اینجا  $U$  انرژی پتانسیل نوسان‌گر و  $x$  بیانگر تغییر شکل است.  $dW$  کار جزیی است که در تغییر شکل نوسان‌گر با مقدار جزیی  $dx$  انجام می‌شود که همان حاصل ضرب نیروی وارد شده برای تغییر شکل آن ( $\vec{F}_a$ ) و تغییر شکل جزیی در جهت نیرو ( $dx$ ) است. همانطور که در رابطه (۳) نشان داده شده است، نیروی اعمال شده برای تغییر شکل نوسان‌گر در هر حالتی برابر نیروی بازگرداننده ناشی از سختی فنر در آن نمونه است. بنابراین کل انرژی پتانسیل این نوسان‌گر با رابطه (۴) به دست می‌آید.

$$G = 8.701 \times 10^{-9} \text{N}\cdot\text{A}^{-2}$$

لازم به ذکر است که نسبت پواسون در فرمول سختی تیر استاندارد اوپلر وجود ندارد ولی باید به این نکته اشاره کرد که نتایج فوق با قیود محدودیت ضریب پواسون سازگار نیست. با این حال ثابت شده که نسبت پواسون تأثیر کمی بر خواص مؤثر نانو ساختارهای کربنی دارد [۲۹]. برای تعیین خواص الاستیک گرافن، از تئوری الاستیسیته دوبعدی ارتوتروپیک استفاده می‌شود که در آن تنش‌های عمود بر صفحه نادیده گرفته می‌شود. در واقع طی این تحلیل، خواص الاستیک شامل مدول‌های یانگ  $E_x$  و  $E_y$ ، مدول برشی  $G_{xy}$  و ضرایب پواسون  $\nu_{xy}$  و  $\nu_{yx}$  تعیین می‌شود. براساس تئوری الاستیسیته خطی دوبعدی، روابط تنش- کرنش به شرح زیر است:

$$\begin{Bmatrix} \epsilon_x \\ \epsilon_y \\ \epsilon_{xy} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/E_x & -\nu_{xy}/E_x & 0 \\ -\nu_{yx}/E_y & 1/E_y & 0 \\ 0 & 0 & 1/2G_{xy} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \tau_{xy} \end{Bmatrix} \quad (11)$$

در معادله فوق  $E_x$  و  $E_y$  نشان‌دهنده مدول‌های یانگ در جهات  $x$  و  $y$ ،  $G_{xy}$  مدول برشی،  $\nu_{xy}$  و  $\nu_{yx}$  ضرایب پواسون،  $\sigma_x$ ،  $\sigma_y$  و  $\tau_{xy}$  مؤلفه‌های تنش و  $\epsilon_x$ ،  $\epsilon_y$  و  $\epsilon_{xy}$  مؤلفه‌های کرنش در حالت تنش صفحه‌ای هستند. برای تعیین خواص الاستیک با اعمال شرایط مرزی مناسب، نیروهای تکیه‌گاهی و به دنبال آن مؤلفه‌های مختلف تنش تعیین می‌شود. از سوی دیگر، با اعمال شرایط مرزی جابجایی، مقادیر طول تغییر می‌کند و متعاقباً کرنش‌ها مشخص می‌شود. با مؤلفه‌های تنش و کرنش، خواص الاستیک صفحه با حل معادله ماتریسی (۱۱) تعیین می‌شود. اعمال شرط مرزی جابجایی برای تعیین خواص مطابق شکل ۴ است.



شکل ۴ (ب) اعمال شرط مرزی جهت تعیین  $\nu_{yx}$  و  $E_y$

المان تیر دارای مقطع دایره‌ای با قطری برابر با قطر پیوند کربن-کربن  $d_{cc}$  است. بنابراین، با قرار دادن  $A = \pi d_{cc}^2/4$  و  $I = \pi d_{cc}^4/64$  در معادله (۸) و با حل آن، معادله (۹) حاصل می‌گردد [۲۸، ۲۷].

$$EA/L = k_r; EI/L = k_\theta; GJ/L = k_\tau \quad (8)$$

$$d_{cc} = 4\sqrt{k_\theta/k_r};$$

$$E = k_r^2 L_{cc} / 4\pi k_\theta; \quad (9)$$

$$G = k_r^2 k_\tau L_{cc} / 8\pi k_\theta^2$$

در اینجا، طول تیر برابر با  $L_{cc} = 1.421 \text{ \AA}$  معادل طول پیوند کووالانسی کربن-کربن در یک شبکه شش‌ضلعی است، و مقادیر  $k_r$ ،  $k_\theta$  و  $k_\tau$  از حوزه مکانیک مولکولی تجربی به شرح

$$k_r = 6.52 \times 10^{-7} \text{Nnm/rad}^2$$

$$k_\theta = 8.76 \times 10^{-10} \text{Nnm/rad}^2$$

$$k_\tau = 2.78 \times 10^{-10} \text{Nnm/rad}^2$$

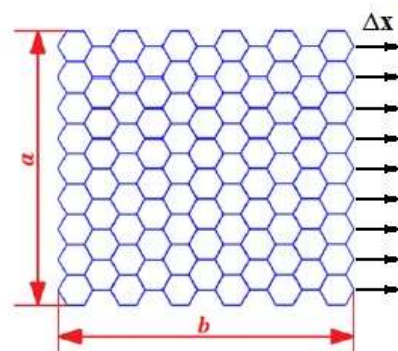
است [۲۸]. پس از وارد کردن این مقادیر در معادله (۹)، رابطه

(۱۰) برای تعیین خواص الاستیک المان تیر معادل پیوند کربن-کربن حاصل می‌گردد.

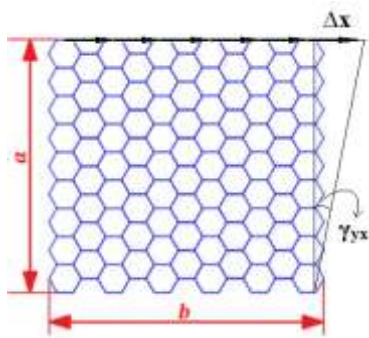
$$d_{cc} = 1.466 \text{ \AA};$$

(10)

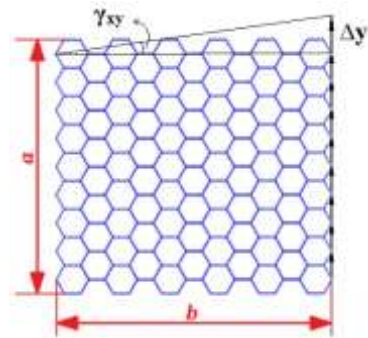
$$E = 5.4875 \times 10^{-8} \text{N}\cdot\text{A}^{-2};$$



شکل ۴ (الف) اعمال شرط مرزی جهت تعیین  $\nu_{xy}$  و  $E_x$



د) اعمال شرط مرزی دیگری جهت تعیین  $G_{yx}$



ج) اعمال شرط مرزی جهت تعیین  $G_{xy}$

شکل ۴: اعمال شرط مرزی جابجایی به منظور تعیین خواص نانو صفحه گرافن

با اعمال جابجایی به اندازه  $\Delta y$  به لبه سمت راست صفحه و  $\Delta x = 0$  روی همین لبه (شکل ۴ ج)، کرنش برشی خالص  $\gamma_{xy} = 2\varepsilon_{xy}$  ایجاد می‌گردد و با استناد به معادلات تنش-کرنش  $G_{xy}$  به صورت زیر تعیین می‌گردد.

$$\gamma_{xy} = 2\varepsilon_{xy} = \tan^{-1}(\Delta y/b) \quad (16)$$

$$G_{xy} = \tau_{xy}/\gamma_{xy} \quad (17)$$

مطابق شکل ۴ د، با اعمال جابجایی به اندازه  $\Delta x$  به لبه بالای صفحه و محدود کردن حرکت آن در جهت  $y$ ، درواقع کرنش برشی  $\gamma_{yx} = 2\varepsilon_{yx}$  ایجاد شده و سایر کرنش‌ها و تنش‌ها صفر خواهند بود. بدین ترتیب، رابطه کلی تنش-کرنش ساده شده و فقط جمله سوم معادله ماتریسی (۱۱) باقی می‌ماند. با این اوصاف کرنش برشی مربوطه از روابط هندسی (۱۸) محاسبه شده و در پی آن مدول برشی از رابطه (۱۹) تعیین می‌گردد. باید اذعان نمود که با فرض حاکم بودن رفتار ارتوتروپیک کامل، انتظار داریم که مدول برشی به دست آمده در این روش با مدول برشی به دست آمده در روش قیل یکسان باشند ولی درواقع ممکن است این تساوی به صورت کامل برقرار نباشد. در ادامه و طی گزارش و بحث نتایج بیشتر به این موضوع پرداخته خواهد شد.

$$\gamma_{yx} = 2\varepsilon_{yx} = \tan^{-1}(\Delta x/a) \quad (18)$$

$$G_{yx} = \tau_{yx}/\gamma_{yx} \quad (19)$$

## ۲-۲- شبیه‌سازی مساله

با توجه به اینکه مدل‌سازی ساختار صفحات گرافنی به‌طور کلی در نرم‌افزار ANSYS به راحتی امکان‌پذیر نیست، بنابراین با توسعه یک برنامه کامپیوتری، مدل‌های هندسی لازم در نرم‌افزار MATLAB

برای تعیین  $E_x$ ، نیاز است که  $\sigma_y$  و  $\tau_{xy}$  صفر در نظر گرفته شوند. برای این منظور، جابجایی به اندازه  $\Delta x$  به وجه سمت راست عمود بر محور  $x$  اعمال می‌شود و وجه مقابل محدود می‌شود و جابجایی‌های مرزهای دیگر که عمود بر محور  $y$  هستند آزاد در نظر گرفته شده که بر اساس آن تنش روی آن مرزها صفر می‌شود (شکل ۴ الف). در نتیجه معادله ماتریسی (۱۱) به معادلات زیر تبدیل می‌شود:

$$\varepsilon_x = \sigma_x/E_x \quad (12)$$

$$\varepsilon_y = -\nu_{yx}\sigma_x/E_y \quad (13)$$

با در دست داشتن مؤلفه‌های تنش و کرنش، مدول یانگ  $E_x$  مستقیماً از رابطه (۱۲) استخراج می‌شود. باین حال، برای تعیین  $\nu_{yx}$  ابتدا باید مقدار  $E_y$  را تعیین کرد و سپس در معادله (۱۳) جایگزین گردد.

با اعمال جابجایی  $\Delta y$  در لبه بالایی صفحه عمود بر محور  $y$  و محدود کردن وجه مقابل و آزاد گذاشتن جابجایی سایر مرزها، تنها  $\sigma_y$  غیر صفر است (شکل ۴ ب) و معادله ماتریسی (۱۱) به صورت زیر می‌شود.

$$\varepsilon_x = -\nu_{xy}\sigma_y/E_x \quad (14)$$

$$\varepsilon_y = \sigma_y/E_y \quad (15)$$

با جایگزینی  $E_x$  به دست آمده از مرحله اول در رابطه (۱۴)،  $\nu_{xy}$  مشخص می‌شود. همچنین مقدار  $E_y$  مستقیماً از رابطه (۱۵) تعیین می‌شود. از طرفی با به دست آوردن  $E_y$  و جایگزینی آن در رابطه (۱۳)،  $\nu_{yx}$  به دست می‌آید.

### ۳- اعتبارسنجی

در این بخش به بررسی صحت نتایج به دست آمده پرداخته می‌شود. ابتدا مدول یانگ و مدول برشی نانو صفحه به دست آمده با مقادیر ارائه شده در مراجع معتبر مقایسه می‌گردد. پس از ساخت گرافن و به دنبال کشف خواص برجسته مکانیکی، الکتریکی و شیمیایی آن، محققان زیادی به مطالعه این نانو ساختار منحصر به فرد پرداختند. به منظور مقایسه، در جدول ۱ نتایج کار حاضر برای مدول یانگ و مدول برشی نانو صفحات گرافنی یک لایه در کنار نتایج تعدادی مراجع ارائه شده است. لازم به ذکر است که تعداد مطالعات قابل توجهی پیرامون مدول یانگ نانو صفحات گرافنی یک لایه و نانولوله‌های کربنی بزرگ صورت گرفته، ولی تعداد محدودی گزارش و مقاله در رابطه با مطالعه مدول برشی منتشر شده است

ایجاد و سپس از نرم افزار ANSYS برای حل معادلات اجزای محدود استفاده شد. در واقع برنامه MATLAB به گونه‌ای تهیه شده است که امکان استفاده از دستورات محیطی ANSYS را فراهم می‌کند.

این مدل یک سازه دوبعدی با طول  $b$  و عرض  $a$  است که شماتیک آن و دستگاه مختصات انتخابی در شکل ۲ و شکل ۴ نشان داده شده است. برای ساخت مدل، ابتدا نقاط آن نشان دهنده اتم‌های کربن و سپس خطوط اتصال آن‌ها نشان دهنده پیوندهای کووالانسی ایجاد می‌شود. برای ایجاد نقاط صفحه ابتدا سلول واحد ایجاد گردیده است و سپس این سلول در جهت  $x$  و  $y$  تکرار می‌شود تا صفحه دوبعدی ایجاد شود.

برای مدل سازی پیوندهای کووالانسی از المان الاستیک سه بعدی BEAM4 استفاده شد که هر گره دارای سه درجه آزادی انتقالی در سه جهت  $x$ ،  $y$  و  $z$  و سه درجه آزادی چرخشی حول محورهای فوق الذکر است. علاوه بر المان‌های تیر، فنرهای بین لایه‌ای نیز در مدل سازی گنجانده شده است که معادل پیوند واندروالسی بین لایه‌ها است. البته، برهم کنش‌های واندروالسی بین دو اتم به شرطی در نظر گرفته می‌شوند که فاصله آن‌ها کمتر یا مساوی با شعاع قطع<sup>۱</sup> یعنی  $\sigma$  (پارامتر لنارد-جونز) باشد [۳۰]. به عبارت دیگر، هیچ پیوندی بین اتم‌هایی که در فواصل بیشتر از مقدار فوق قرار دارند وجود ندارد. در نهایت پس از تعریف فنرهای بین نقاط، سختی لازم برای انرژی الاستیک فنر معادل انرژی پیوند شیمیایی نسبت داده می‌شود.

جدول ۱: اعتبارسنجی و مقایسه مدول یانگ و مدول برشی صفحه گرافنی یک لایه

روش	مدول الاستیک (TPa)	مدول برشی (GPa)
کار حاضر - FEM مکانیک ساختاری	۱/۰۴۳	۳۰۲/۳
روش DFT [۳۱]	۰/۹۵-۱/۱	-
روش DFT [۳۲]	۱/۰۵	-
روش MD [۳۳]	۱/۰۳۰۵۳	-
روش MD [۳۴]	۰/۹۱۲	۳۵۸
روش تجربی [۱۸]	۱±۰/۱	-
روش تجربی [۱۹]	۰/۸۹	-
روش FEM مکانیک ساختاری [۳۵]	۱/۳۶۷	۲۸۰
روش FEM مکانیک ساختاری [۳۶]	۰/۸۰	۴۴۰
روش مکانیک پیوسته [۳۷]	۱/۰۴	-
روش AFEM [۱۹]	۰/۸۱۳	-

<sup>۱</sup> Cut off

یک لایه و سپس صفحات دو لایه ارائه شده است. همچنین، تأثیر اندازه صفحه بر خواص الاستیک و رفتار آن از منظر درجه غیر آیزوتروپیی نیز مورد بررسی قرار گرفته است.

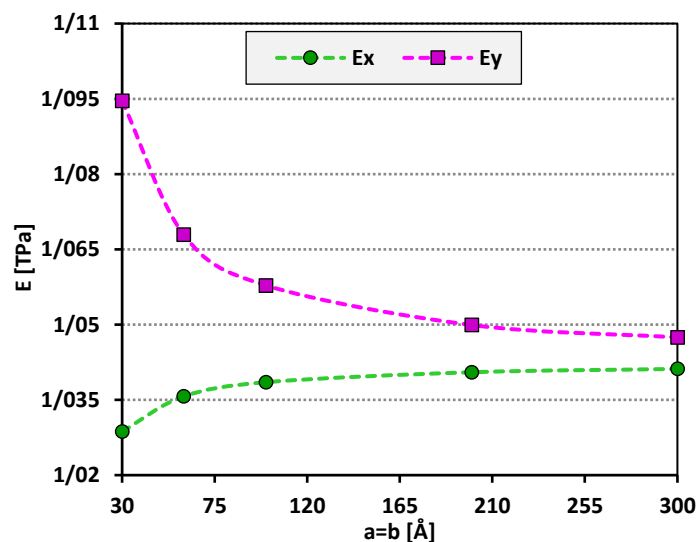
#### ۴-۱- خواص مکانیکی صفحه یک لایه بر حسب اندازه

شکل ۵ تغییرات مدول یانگ صفحه را در جهت  $x$  و  $y$  نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که در اندازه‌های کوچک، این ویژگی‌ها به شدت تحت تأثیر جهت بارگذاری قرار می‌گیرند و تفاوت قابل توجهی دارند. اما با افزایش اندازه، این وابستگی به جهت ضعیف می‌شود و در نهایت دو نمودار به مقدار معینی همگرا می‌شوند. به عبارت دیگر، با افزایش ابعاد صفحه گرافن، خاصیت الاستیک آن به سمت آیزوتروپیک صفحه‌ای متمایل می‌شود. اما بر اساس نمودارها می‌توان گفت که صفحه گرافن آرمچیر در ابعاد نانومتری غیرآیزوتروپ بوده و انعطاف‌پذیری آن در جهت  $x$  بیشتر از جهت  $y$  است، البته این تفاوت معنی‌دار نیست. از نظر فیزیکی می‌توان گفت که در اندازه‌های کوچک صفحه، توزیع آماری المان‌ها در هر جهت به نسبت کل المان‌ها دارای اختلاف محسوسی است، اما با افزایش اندازه، تعداد کل المان‌ها افزایش یافته و تفاوت تعداد المان‌ها در دو جهت به نسبت کل المان‌ها کاهش می‌یابد، بنابراین خواص جهتی به تدریج از بین می‌رود.

اضافه می‌شود که در برخی مراجع مطالعه روی نانولوله‌های کربنی با قطر خیلی بزرگ صورت گرفته که در واقع ابعاد و خواص به سمت تک لایه گرافن میل می‌کنند. مقایسه نتایج نشان می‌دهد که تطابق خوبی بین نتایج تحقیق حاضر و مراجع از جمله نتایج تجربی گزارش شده توسط لی [۱۸] وجود دارد. جالب توجه است که نتایج حاضر نیز تطابق خوبی با مقادیر به دست آمده از شبیه‌سازی MD دارد. علاوه بر این، در مقایسه با مراجعی که با روش مکانیک ساختاری برای تعیین خواص الاستیک صفحات گرافنی استفاده کرده‌اند، تفاوت‌هایی مشاهده می‌شود، اما تأکید می‌شود که نتایج مطالعه حاضر به نتایج روش‌های تجربی و روش‌های دینامیک ملکولی نزدیک‌تر است که نشان‌دهنده دقت مطلوب مدل پیشنهادی است. با وجود تعداد محدود نتایج مدول برشی ولی در مقایسه با مدول یانگ همبستگی کمتری بین نتایج وجود دارد ولی باید اشاره نمود که نتیجه به دست آمده در این تحقیق انطباق بیشتری با نتیجه حاصل از روش MD داشته است.

#### ۴- تجزیه و تحلیل نتایج

به منظور تعیین خواص الاستیک، صفحات مربعی با طول‌های مختلف انتخاب شده و مطابق شکل ۴ تحت چهار شرایط بارگذاری قرار می‌گیرند. در این بخش ابتدا نتایج مربوط به خواص مکانیکی صفحات



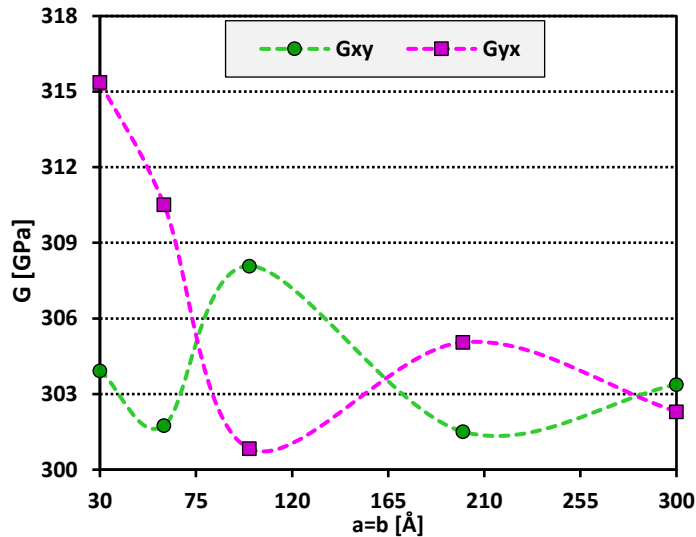
شکل ۵: مدول یانگ صفحه یک لایه بر حسب اندازه صفحه

است، اختلاف محسوسی بین دو نتیجه وجود دارد که بیانگر انحراف از فرض آیزوتروپیی و ارتوتروپیی است. با این حال، با افزایش اندازه صفحه، نوسان دو نمودار کاهش یافته و به تدریج هر دو به سمت یکدیگر همگرا می‌شوند که نشان می‌دهد در اندازه‌های کوچک، صفحه غیرآیزوتروپ است ولی به تدریج با افزایش اندازه، به سمت آیزوتروپیی تمایل ایجاد

ویژگی الاستیک بعدی، مدول برشی است که بر اساس تئوری الاستیسیته دوبعدی با فرض خاصیت ارتوتروپیی با سمبل  $G_{xy}$  معرفی می‌شود. با این حال در اینجا با دو نوع بارگذاری در دو جهت متعامد اندازه‌گیری و با نام‌های  $G_{yx}$  و  $G_{xy}$  معرفی گردیده و نتایج آن‌ها در شکل ۶ ارائه شده است. قابل توجه است که وقتی اندازه صفحه کوچک

مدول برشی پرداخته‌اند که ناشی از مشکلات اجرایی انجام آزمایشات عملی است. چنین مشکلاتی در تئوری نیز وجود دارد و این باعث عدم قطعیت در برآورد مدول برشی می‌شود.

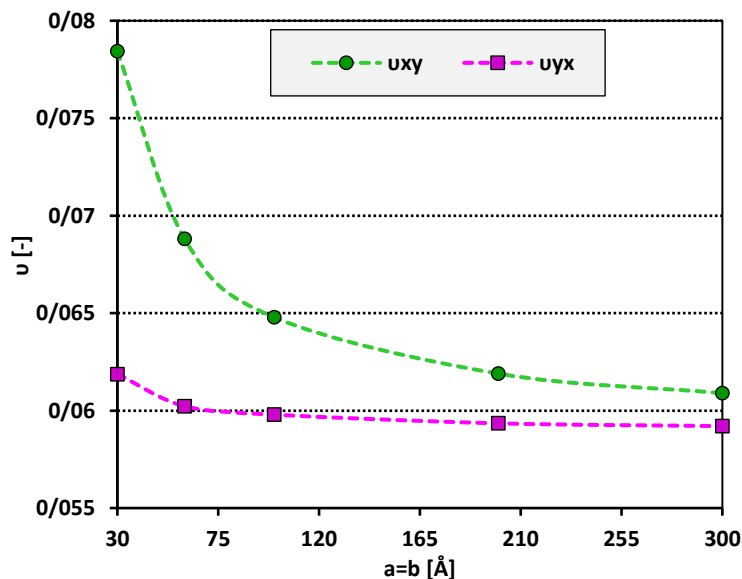
می‌شود که با طبیعت فیزیکی مواد در تطابق است. در اینجا باید به نوسانی بودن ضریب برشی و تفسیر فیزیکی احتمالی آن نیز اشاره نمود. در واقع بر اساس مرور پیشینه تحقیق، تعداد کمی از مراجع به مطالعه



شکل ۶: مدول برشی صفحه یک لایه برحسب اندازه صفحه

آن در جهت X بیشتر از حالت معکوس است. این می‌تواند به دلیل آرایش آرمچیر نانو صفحه باشد که طبق آن تعداد المان‌های مایل در جهت Y نسبت به جهت X بیشتر است و تغییر اندازه عرضی را تسهیل می‌کنند. اما با افزایش اندازه صفحه، این اختلاف کم شده و به تدریج به مقدار یکسانی میل می‌کنند که در مورد تفسیر آن مشابه سایر ضرایب می‌توان به نسبت آماری المان‌های مایل به کل المان‌ها اشاره نمود و معمولاً با افزایش اندازه تمایل به ایزوتروپی افزایش می‌یابد که در این صورت دو نسبت پواسون یکسان می‌شوند.

در ادامه به مطالعه ضریب پواسون نانو صفحه در اندازه‌های مختلف پرداخته‌شده و نمودارهای آن در شکل ۷ ارائه شده است. در اینجا نیز مشاهده می‌شود که در ابعاد کوچک، تفاوت بین دو نسبت پواسون کوچک و بزرگ قابل توجه است اما با افزایش اندازه صفحه، این دو نمودار به یک مقدار همگرا می‌شوند. طبق نمودارها، هر دو نسبت پواسون مثبت است که نشان می‌دهد با کشش صفحه در هر جهت، در جهت عمود بر آن لاغر می‌شود و  $\nu_{xy}$  بزرگ‌تر نشان‌دهنده این واقعیت است که وقتی صفحه در جهت Y بارگذاری می‌شود میزان لاغر شدن



شکل ۷: ضرایب پواسون نانو صفحه یک لایه برحسب اندازه صفحه

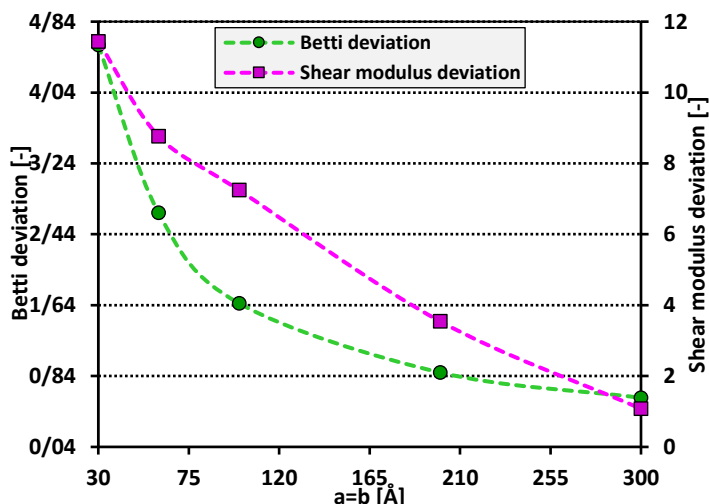
است، اما با افزایش اندازه که در آن وابستگی ویژگی‌ها به جهت خیلی کم می‌شود، دو نمودار کاهش پیدا کرده و به سمت صفر میل می‌کنند. در مورد چرایی وجود چنین وابستگی می‌توان به وابستگی رفتار به اندازه اشاره کرد که نشان می‌دهد هر چه اندازه کوچک‌تر باشد شدت وابستگی بیشتر است، البته در اندازه‌های کوچک باید به خطای فرض پیوستگی نیز اشاره نمود. در عین حال باید توجه داشت که این روابط برای مواد ارتوتروپ تعریف شده است و صفر نبودن این دو متغیر می‌تواند بیانگر غیرایزوتروپی از مرتبه بالاتری نسبت به ارتوتروپی باشد. در هر صورت با کنار هم قرار دادن نتایج این دو کمیت و نمودار تغییرات مدول یانگ، مدول برشی و ضریب پواسون می‌توان گفت که با افزایش اندازه صفحه میزان خطا کاهش می‌یابد و صفحه نیز به حالت ارتوتروپ میل می‌کند و اگر اندازه آن خیلی بزرگ شود به ایزوتروپ صفحه‌ای تبدیل می‌شود.

به منظور بررسی رفتار ارتوتروپیک یا ایزوتروپیک این نانو صفحات معیارهای انحراف بتی و انحراف مدول برشی به صورت زیر تعریف می‌گردد. در واقع در حالت ایزوتروپیک و ارتوتروپیک، انحراف بتی و انحراف مدول برشی صفر است و وجود مقدار غیر صفر می‌تواند معیاری از انحراف از فرض رفتار مذکور باشد.

$$Betti\ deviation = \left| \frac{E_x}{u_{xy}} - \frac{E_y}{u_{yx}} \right| \quad (20)$$

$$Shear\ modulus\ deviation = |G_{xy} - G_{yx}| \quad (21)$$

همان‌طور که در شکل ۸ مشاهده می‌شود، در اندازه‌های کوچک که ویژگی‌ها به شدت تحت تأثیر جهت قرار می‌گیرند، تفاوت بین این دو معیار در مقایسه با صفر زیاد است و رفتار نانو صفحه غیرارتوتروپ

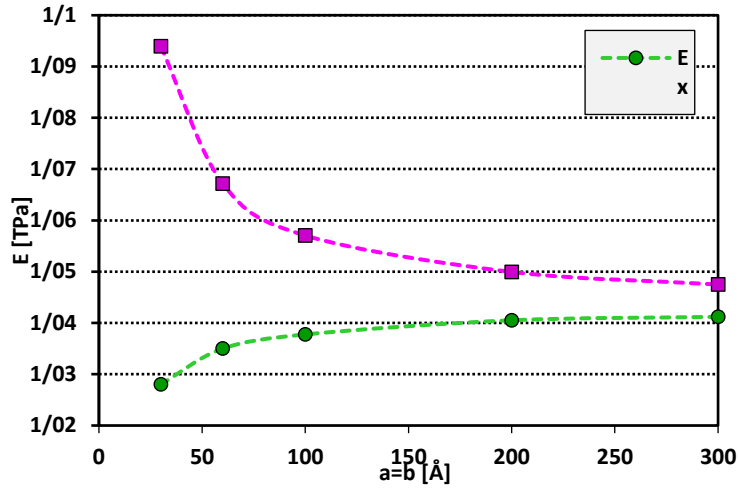


شکل ۸: انحراف نسبت بتی و انحراف مدول برشی نانو صفحه یک لایه برحسب اندازه آن

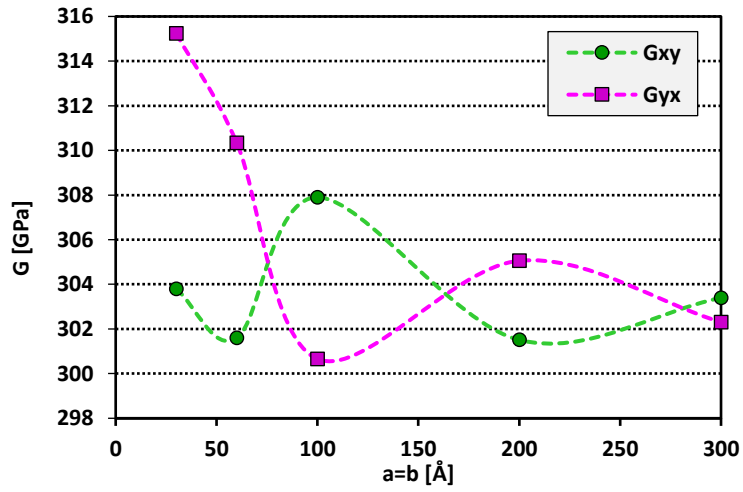
کوالانسی قوی کمتر مؤثر بوده و سهم قابل توجهی در نتایج ندارد. در واقع می‌توان گفت که هرگاه رفتار درون صفحه‌ای در نظر گرفته شود، وجود دو صفحه در کنار یکدیگر تفاوت چندانی با یک صفحه ندارد، مشروط بر این‌که مقدار بار نیز به همان نسبت تغییر کند. به عبارت دیگر، هر صفحه، تقریباً باری معادل بار تک صفحه از قسمت قبلی را حمل می‌کند. بنابراین از ارائه توضیحات در مورد دلایل و تفسیر فیزیکی این نمودارهای صرف نظر شده و می‌توان به همان توضیحات مربوط به صفحه تک لایه اشاره نمود.

#### ۴-۲- خواص مکانیکی صفحه دو لایه برحسب اندازه

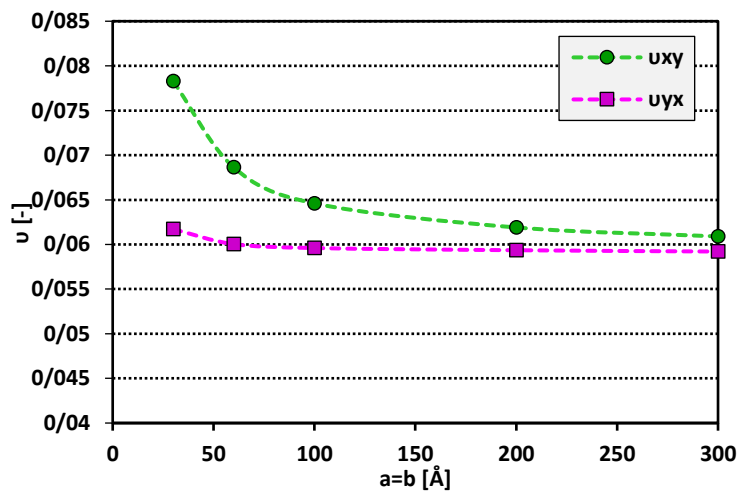
پس از مطالعه خواص الاستیک صفحات یک لایه نوبت به مطالعه خواص صفحه دو لایه می‌رسد که برای این منظور تغییرات خواص الاستیک آن برحسب اندازه آن‌ها در شکل ۹ تا شکل ۱۱ ترسیم شده‌اند. همان‌گونه که مشاهده می‌شود روند تغییر خواص مشابه صفحات یک لایه است و تفاوت جزئی بین این مقادیر و نتایج مربوط به صفحات تک لایه وجود دارد. این تفاوت جزئی به دلیل برهم-کنش‌های ضعیف واندروالسی بین دو لایه است که نسبت به پیوندهای



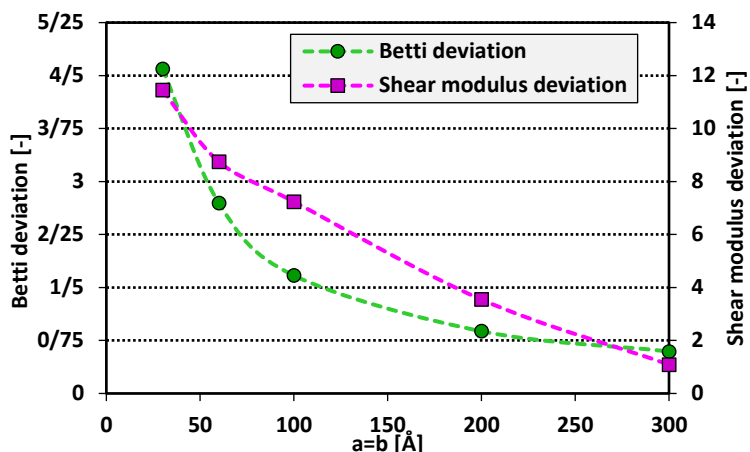
شکل ۹: مدول یانگ نانو صفحه دو لایه برحسب اندازه آن



شکل ۱۰: مدول برشی نانو صفحه دو لایه برحسب اندازه آن



شکل ۱۱: ضرایب پواسون نانو صفحه دو لایه برحسب اندازه آن



شکل ۱۲: انحراف نسبت بتی و مدول برشی نانو صفحه دو لایه برحسب اندازه آن

مراجع، انطباق بیشتری با نتایج روش MD دارد که با توجه به هزینه محاسباتی کمتر یک مزیت محسوب می‌شود.

۳- براساس نتایج عددی، در نانو صفحه کوچک (30 Å)، مدول های یانگ در دو راستا دارای اختلاف حدود ۶٪، در اندازه بزرگ تر (100 Å) این اختلاف به حدود ۲٪ رسیده و با بزرگ تر شدن نانو صفحه به 300 Å این اختلاف به حدود ۷٪ کاهش یافته است.

۴- طبق نتایج حاصل، ضرایب پواسون در دو راستای متعامد، در نانو صفحات مربعی یک لایه در ابعاد کوچک (10 Å)، دارای اختلاف قابل توجه حدود ۱۹٪ است؛ با رسیدن به اندازه (100 Å) اختلاف به حدود ۸٪ رسیده و در نهایت با رسیدن اندازه نانو صفحه به 300 Å، اختلاف خیلی کمتر شده و به حدود ۱/۵٪ رسیده است. مقایسه نتایج عددی ثابت می‌کند که همگرایی به ایزوتروپی در مدول یانگ سریع تر از نسبت پواسون رخ داده است.

۵- در مطالعه حاضر برای بررسی رفتار ارتوتروپیک یا ایزوتروپیک نانو صفحات، معیارهای انحراف بتی و انحراف مدول برشی تعریف گردید. نتایج نشان داد که در اندازه‌های کوچک که خواص به شدت تحت تأثیر جهت هستند مقادیر این دو معیار زیاد بوده و رفتار نانو صفحه غیرایزوتروپ است، اما با افزایش اندازه که وابستگی خواص به جهت خیلی کم می‌شود، دو نمودار کاهش پیدا کرده و به سمت صفر میل می‌کنند.

#### ۶- منابع

[1] S. Iijima, "Helical microtubules of graphitic carbon," *Nature*, vol. 354, pp. 56–58, 1991. [Online]. doi: [10.1038/354056a0](https://doi.org/10.1038/354056a0)

مشابه صفحات یک لایه با مشاهده شکل ۱۲، رفتار غیرایزوتروپیک صفحات دو لایه در اندازه‌های کوچک و سپس ارتوتروپیک و به تدریج ایزوتروپیک بودن این نانو صفحات در مقیاس‌های بزرگ برداشت می‌شود.

#### ۵- نتیجه گیری

برای تعیین خواص الاستیک نانو صفحات، صفحات مربعی یک لایه و دو لایه با ابعاد مختلف بین ۳۰ تا ۳۰۰ انگستروم مورد ارزیابی قرار گرفتند و نتایج زیر حاصل گردید:

۱- مشاهده شد که در اندازه‌های خیلی کوچک صفحات، مقادیر مربوط به خواص در دو جهت  $x$  و  $y$  به شدت تحت تأثیر جهت بارگذاری بوده و تفاوت قابل توجهی دارند، اما با افزایش اندازه، این وابستگی به جهت کاهش یافته و در نهایت دو نمودار به یک مقدار مشخص همگرا می‌شوند. همچنین، در اندازه‌های کوچک که خواص به شدت تحت تأثیر جهت هستند، رفتار نانو صفحه غیرایزوتروپ است، ولی به تدریج با افزایش اندازه به سمت ارتوتروپی و در ادامه به ایزوتروپی میل می‌کند.

۲- نتایج کار حاضر به روش اجزاء محدود مکانیک ساختاری برای مدول یانگ و مدول برشی صفحات گرافنی یک لایه نسبت به روش‌های مختلف ارائه شده در مراجع اعتبارسنجی گردید. با مقایسه مدول یانگ به دست آمده توسط مدل پیشنهادی با مقادیر حاصل از شبیه‌سازی‌های MD مشاهده می‌شود که مدل پیشنهادی از دقت بسیار زیادی برخوردار است. علاوه بر این، در مقایسه با مراجعی که از روشی مشابه تحقیق حاضر برای تعیین خواص الاستیک صفحات گرافنی استفاده کرده‌اند، نتایج دقیق‌تری حاصل شده است که نشان‌دهنده دقت مدل پیشنهادی است. در مقایسه با دیگر مقادیر گزارش شده در رابطه با مدول برشی، ملاحظه شد که نتیجه حاضر نسبت به نتایج مشابه در

- plates; one problem, different answers,” *European Journal of Mechanics*, vol. 59, pp. 124–139, 2016.
- [11] S. F. A. Namin and R. Pilafkan, “Vibration analysis of defective graphene sheets using nonlocal elasticity theory,” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 93, pp. 257–264, 2017.
- [12] B. Liu, Z. Zhang, and Y. Chen, “Atomistic statics approaches—Molecular mechanics, finite element method and continuum analysis,” *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, vol. 5, pp. 1891–1913, 2008.
- [13] B. Liu, Y. Huang, H. Jiang, S. Qu, and K. C. Hwang, “The atomic-scale finite element method,” *Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 193, pp. 1849–1864, 2004.
- [14] B. Liu, H. Jiang, Y. Huang, S. Qu, M.-F. Yu, and K. C. Hwang, “Atomic-scale finite element method in multiscale computation with applications to carbon nanotubes,” *Physical Review B*, vol. 72, p. 035435, 2005.
- [15] M. Malakouti and A. Montazeri, “Nanomechanics analysis of perfect and defected graphene sheets via a novel atomic-scale finite element method,” *Superlattices and Microstructures*, vol. 94, pp. 1–12, 2016.
- [16] A. Jafari, A. A. Khatibi, and M. M. Mashhadi, “Evaluation of mechanical and piezoelectric properties of boron nitride nanotube: a novel electrostructural analogy approach,” *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, vol. 9, pp. 461–468, 2012.
- [17] A. Sakhaee-Pour, M. T. Ahmadian, and A. Vafai, “Potential application of single-layered graphene sheet as strain sensor,” *Solid State Communications*, vol. 147, pp. 336–340, 2008.
- [18] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, “Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene,” *Science*, vol. 321, pp. 385–388, 2008.
- [2] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and A. Jorio, “Unusual properties and structure of carbon nanotubes,” *Annual Review of Materials Research*, vol. 34, pp. 247–278, 2004. [Online]. doi: [10.1146/annurev.matsci.34.040203.112300](https://doi.org/10.1146/annurev.matsci.34.040203.112300)
- [3] A. Alizadeh, M. Heydari Beni, and R. Soltani Bidar, “Fabrication and Investigation of Mechanical Properties of Copper Alloy Matrix Composite Reinforced with Micron Diamond Particles,” *Scientific and Technological Mechanical Engineering*, vol. 3, pp. 117–132, 2024. [Online]. doi: [10.22034/STME.2024.471009.1068](https://doi.org/10.22034/STME.2024.471009.1068) (in Persian)
- [4] A. Alizadeh, M. Lotfian, and M. Heydari Beni, “Preparation of Al-B4C Composite by Mechanical Alloying Method and Investigation of Its Thermomechanical Properties,” *Scientific and Technological Mechanical Engineering*, vol. 3, pp. 163–183, 2024. [Online]. doi: [10.22034/STME.2024.471431.1070](https://doi.org/10.22034/STME.2024.471431.1070) (in Persian)
- [5] C. Q. Ru, “Axially compressed buckling of a double-walled carbon nanotube embedded in an elastic medium,” *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 49, pp. 1265–1279, 2001.
- [6] M. M. Shokrieh, Z. Shokrieh, and S. M. Hashemianzadeh, “Effective parameters in modeling of graphene sheet Young’s modulus,” *Modares Mechanical Engineering*, vol. 12, pp. 147–155, 2012. (in Persian)
- [7] C. Li and T.-W. Chou, “A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes,” *International Journal of Solids and Structures*, vol. 40, pp. 2487–2499, 2003.
- [8] K. I. Tserpes and I. Vattistas, “Buckling analysis of pristine and defected graphene,” *Mechanics Research Communications*, vol. 64, pp. 50–56, 2015.
- [9] L. Wang and Q. Zhang, “Elastic behavior of bilayer graphene under in-plane loadings,” *Current Applied Physics*, vol. 12, pp. 1173–1177, 2012.
- [10] A. Jafari, S. S. Shah-enayati, and A. A. Atai, “Size dependency in vibration analysis of nano

- Composites Part B: Engineering*, vol. 36, pp. 468–477, 2005. [Online].: doi:[10.1016/j.compositesb.2004.10.003](https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2004.10.003)
- [29] S. Singh and V. Dutt, “A reduced form for fundamental transverse modal frequency of carbon nanotubes,” *Materials Today Communications*, vol. 25, p. 101404, 2020. [Online]. doi:[10.1016/j.mtcomm.2020.101404](https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101404)
- [30] S. K. Georgantzinos and N. K. Anifantis, “Vibration analysis of multi-walled carbon nanotubes using a spring–mass based finite element model,” *Computational Materials Science*, vol. 47, pp. 168–177, 2009.
- [31] D. Sánchez-Portal, E. Artacho, J. M. Soler, A. Rubio, and P. Ordejón, “Ab initio structural, elastic, and vibrational properties of carbon nanotubes,” *Physical Review B*, vol. 59, p. 12678, 1999.
- [32] F. Liu, P. Ming, and J. Li, “Ab initio calculation of ideal strength and phonon instability of graphene under tension,” *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 76, p. 064120, 2007.
- [33] B. WenXing, Z. ChangChun, and C. WanZhao, “Simulation of Young’s modulus of single-walled carbon nanotubes by molecular dynamics,” *Physica B: Condensed Matter*, vol. 352, pp. 156–163, 2004.
- [34] J.-L. Tsai and J.-F. Tu, “Characterizing mechanical properties of graphite using molecular dynamics simulation,” *Materials & Design*, vol. 31, pp. 194–199, 2010.
- [35] S. K. Georgantzinos, G. I. Giannopoulos, and N. K. Anifantis, “Numerical investigation of elastic mechanical properties of graphene structures,” *Materials & Design*, vol. 31, pp. 4646–4654, 2010.
- [36] G. I. Giannopoulos, I. A. Liosatos, and A. K. Moukanidis, “Parametric study of elastic mechanical properties of graphene nanoribbons by a new structural mechanics approach,” *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 44, pp. 124–134, 2011.
- [19] Y. Zhang and C. Pan, “Measurements of mechanical properties and number of layers of graphene from nano-indentation,” *Diamond and Related Materials*, vol. 24, pp. 1–5, 2012.
- [20] K. Esfarjani, N. Gorjizadeh, and Z. Nasrollahi, “Molecular dynamics of single wall carbon nanotube growth on nickel surface,” *Computational Materials Science*, vol. 36, pp. 117–120, 2006.
- [21] T. Belytschko, S. P. Xiao, G. C. Schatz, and R. S. Ruoff, “Atomistic simulations of nanotube fracture,” *Physical Review B*, vol. 65, p. 235430, 2002.
- [22] K. M. Liew, B. J. Chen, and Z. M. Xiao, “Analysis of fracture nucleation in carbon nanotubes through atomistic-based continuum theory,” *Physical Review B*, vol. 71, p. 235424, 2005.
- X. Sun and W. Zhao, “Prediction of stiffness and strength of single-walled carbon nanotubes by molecular-mechanics based finite element approach,” *Materials Science and Engineering: A*, vol. 390, pp. 366–371, 2005.
- [24] J. R. Xiao, J. Staniszewski, and J. W. Gillespie Jr, “Fracture and progressive failure of defective graphene sheets and carbon nanotubes,” *Composite Structures*, vol. 88, pp. 602–609, 2009.
- [25] T. Natsuki and M. Endo, “Structural dependence of nonlinear elastic properties for carbon nanotubes using a continuum analysis,” *Applied Physics A*, vol. 80, pp. 1463–1468, 2005.
- [26] G. J. Huguet Rodríguez, “Comparison of finite element buckling solutions for flat plates under complex combined loading to analytical methods,” M.S. thesis, 2015.
- [27] B. R. Gelin, *Molecular Modeling of Polymer Structures and Properties*, Hanser-Gardner Publications, 1994.
- [28] K. I. Tserpes and P. Papanikos, “Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes,”