

تأثیر عیوب تهی جای بر ارتعاش خطی نانوتشدیدگرهای گرافن با استفاده از مکانیک سازه‌ی مولکولی

سیمای ضیایی (استادیار)

گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه باسوج

خواص منحصر به فرد الکتریکی و مکانیکی نانوسازه‌های کربنی آنها را کاندیداهای مناسبی برای نانوتشدیدگرهای الکترومکانیکی قرار داده است. نظر به این که عیوب تهی جای به واسطه‌ی پیوند قوی تری که میان باند آزاد کربن های همسایه عیب تهی جای با برخی اجرام خارجی برقرار می‌شود می‌توانند در جابجایی اجرام خارجی در پیکره‌ی نانوتشدیدگرها مفید باشند. لذا، در این مطالعه ضمن بررسی تأثیر عیوب تهی جای بر فرکانس طبیعی نانوصفحات آرمچیر و زیگزاک، تأثیر وجود عیوب تهی جای بر جابه‌جایی فرکانس پایه نانوتشدیدگرهای پایه گرافن نیز با استفاده از روش مکانیک سازه‌ی مولکولی بررسی شده است. نتایج حاصله به وضوح نشان می‌دهد صفحات زیگزاک با عیوب تهی جای بزرگ‌تر در میانه‌ی صفحه و شرایط مرزی کاملاً گیردار می‌تواند جابه‌جایی فرکانس پایه بالاتری را به‌ازای اتصال جرم‌های خارجی نسبت به صفحات آرمچیر با همان شرایط نشان دهد.

واژگان کلیدی: جابه‌جایی فرکانس طبیعی، نانوصفحات گرافن معیوب، عیوب مهندسی شده، مکانیک سازه‌ی مولکولی، نانوتشدیدگر معیوب.

ziaee@yu.ac.ir

۱. مقدمه

گرافن، نانورله‌ی مبتنی بر حرکت تلسکوپ‌ی لایه‌های گرافن، و نیز نانوتشدیدگر مبتنی بر ارتعاشات نسبی کوچک صفحات گرافن پیشنهاد شده است.^[۱] بروز عیوب در شبکه‌ی اتمی گرافن به سبب فرایندهای تولید یا به دلیل شرایط محیطی و کارکردی که تحت آن دستگاه گرافن کار می‌کند، اجتناب‌ناپذیر است. این مهم را نیز باید اضافه کرد که در دستگاه‌های زیستی و گرافن تزئین شده با DNA، وجود عیوب برای کاروری مطلوب ضروری است.^[۵] همچنین از مهندسی عیوب گرافن در نانوالکترونیک برای بازکردن یک شکاف باریک، تعیین توالی DNA از طریق نانوروزه‌ها، و غربالگری مولکول‌های گزینش شده از طریق نانوروزه‌های گرافن معلق شده بهره گرفته می‌شود.^[۵] بدین ترتیب، بررسی و درک چگونگی تأثیر عیوب بر خواص کشسان و رفتار مکانیکی صفحات گرافن حائز اهمیت است.

دینامیک مولکولی، نظریه‌ی محیط‌های پیوسته‌ی غیرکلاسیک و مکانیک سازه‌ی مولکولی از جمله روش‌های مرسوم هستند که برای مطالعه‌ی خواص و رفتار مکانیکی صفحات گرافن استفاده می‌شوند.

وانگ و همکاران^[۶] با استفاده از روش دینامیک مولکولی ضمن بررسی رفتار مکانیکی صفحات گرافن معیوب، مکانیک شکست را نیز کوانتیده کرده‌اند. یافته‌های آنها نشان می‌دهد که استحکام صفحه‌ی گرافن به سبب وجود عیوب به طور چشمگیری کاهش می‌یابد و استحکام شکست نه فقط به جهت بارگذاری، بلکه به دما نیز حساس است. با استفاده از دینامیک مولکولی، کارپتر و همکاران^[۸] بازه بحرانی تمرکز عیوب را که منجر به تغییر کیفی پاسخ شکست از ترد به نرم می‌شود، تعیین

خواص منحصر به فرد الکتریکی و مکانیکی نانوسازه‌های کربنی آنها را در زمره‌ی موادی با کاربردهای متنوع قرار داده است.^[۱] نانوسازه‌های کربنی را می‌توان به گروه‌های نانوسازه‌های کربنی صفر بعدی و یک بعدی، فولرن‌ها^۱ و نانولوله‌های کربنی و صفحات گرافن تقسیم کرد.^[۱] گرافن یک شبکه‌ی لانه‌زنبوری در مقیاس اتمی است که از اتم‌های کربن ساخته شده است.^[۲] این صفحه با ضخامت ۱ اتم نه تنها نازک‌ترین ماده‌ی موجود فعلی است^[۲] بلکه دارای خواص الکتریکی، مکانیکی، حرارتی و نورشناختی برجسته‌ی هم هست. در واقع، گرافن دارای مدول کشسان حدود ۱ TPa، استحکام شکست حدود ۱۲۵ GPa، رسانایی حرارتی معادل $5 \times 10^3 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ و مساحت سطح مخصوص معادل $2630 \text{ m}^2\text{g}^{-1}$ است.^[۳] از سوی دیگر به دلیل نسبت بالای سختی به جرم، گرافن در مقیاس میکرو دارای فرکانس‌های تشدید پایه در محدوده‌ی ۱ تا ۱۷۰ مگاهرتز است^[۳] این خواص، گرافن را به یک نامزد مناسب برای استفاده در پوشش سطح، حس‌گرهای شیمیایی، نانوکامپوزیت‌ها با پایه‌ی گرافن،^[۴] مافوق خازن‌ها، الکترودهای ترانما، سلول‌های نیروزای نوری و دستگاه‌های زیستی^[۵] تبدیل کرده است.

در ضمن، براساس شباهت‌سنجی با دستگاه‌های میناتوری که مبتنی بر نانولوله‌ی کربنی باشند، امکان طراحی نوسان‌گر گیگاهرتز مبتنی بر نوسان تلسکوپ‌ی صفحات تاریخ: دریافت ۱۳۹۵/۳/۲۳، اصلاحیه ۱۳۹۵/۸/۲۰، پذیرش ۱۳۹۵/۹/۱۳.

DOI:10.24200/J40.2018.6388

بر فرکانس طبیعی صفحات گرافن تک‌لایه و تعیین شکل مد نظیر فرکانس‌های پایه نیز استفاده شده است.^[۲۲] گوپتا و پاترا^[۲۳] نشان دادند که شکل مد نظیر کوچک‌ترین فرکانس‌های صفحه‌ی گرافن تک‌لایه که با روش مکانیک سازه‌ی مولکولی پیش‌بینی شده به‌طور محسوسی با شکل مدهای حاصل از به‌کارگیری مدل معادل محیط پیوسته‌ی ایزوتروپ کشسان خطی، تفاوت دارد. رفتار مدی صفحات گرافن تک‌لایه چین خورده توسط وانگ و همکاران^[۲۴] مطالعه شده است. یافته‌ها نشان می‌دهد که فرکانس طبیعی صفحه‌ی گرافن چین خورده از صفحه‌ی صاف بزرگ‌تر است و نیز چین‌خوردگی‌ها موجب بزرگ‌تر شدن فرکانس طبیعی صفحه‌ی گرافن با نسبت ابعادی کوچک‌تر از صفحه‌ی گرافن با نسبت ابعادی بزرگ‌تر می‌شود.

مطالعات اخیر درخصوص تشدیدگرهای نانوالکترومکانیکی ساخته شده از نانورق‌های تک‌لایه و چندلایه‌ی گرافن، نشان داده است که گرافن به دلیل داشتن مدول یانگ بالا، جرم پایین و مساحت بزرگ، گزینه‌ی مناسب برای حس‌گری جرم، نیرو و شارژ است.^[۲۴] کیم و پارک^[۲۵] با استفاده از روش دینامیک مولکولی پارامترهای مختلفی همچون دمای محیط، عیوب تهی‌جای تک‌اتمی و کرنش درون صفحه‌ی مکانیکی را بر تشخیص جرم گرافن تک‌لایه کاملاً مقید مورد مطالعه قرار داده‌اند. نتایج آنها نشان می‌دهد که درصد جابه‌جایی فرکانس پایه‌ی گرافن با افزایش کرنش مکانیکی - کششی و کاهش دمای محیط افزایش می‌یابد.^[۲۵] به روشی مشابه، آرش و همکاران قابلیت نانو تشدیدگرهای گرافن را در تشخیص گازهای خنثی که به صورت تصادفی به سطح گرافن چسبیده‌اند، بررسی کردند. آنها وابستگی تعداد و محل اتم‌های گاز، ابعاد گرافن مربعی و نوع شرایط مرزی (کاملاً گیردار و دولبه موازی گیردار) را بر جابه‌جایی فرکانس پایه‌ی گرافن مطالعه کرده‌اند.^[۲۶] سخایی‌پور و همکاران^[۲۷] با استفاده از مکانیک سازه‌ی مولکولی رفتار ارتعاشی حس‌گرهای جرم و آشکارسازهای اتمی غبار ساخته شده از صفحات گرافن بی‌عیب را مطالعه کرده‌اند.^[۲۷] آنها دو شرط مرزی یک‌سر گیردار و دوسرگیردار را مورد مطالعه قرار داده‌اند. با استفاده از مدل ورق غیرمحملی کیرشلف نیز، قابلیت نانوصفحه‌ی گرافن بی‌عیب با شرایط تکیه‌گاهی ساده به‌عنوان نانو تشدیدگر توسط چن و همکاران بررسی شده است.^[۲۸] در این مطالعه تأثیر جرم، محل قرارگیری آن و مقدار پارامتر مقیاس کوچک بر جابه‌جایی فرکانس مورد بحث قرار گرفته است.^[۲۸] مورمو و ادهیکاری^[۲۹] نانو تشدیدگر ساخته شده از نانوصفحه‌ی تک‌لایه‌ی گرافن بی‌عیب یک‌سر گیردار را با استفاده از دو روش مکانیک سازه‌ی مولکولی و مدل ورق غیرمحملی مورد مطالعه قرار داده‌اند. تأثیر میدان مغناطیسی درون صفحه‌ی بر بهبود عملکرد نانو تشدیدگر ساخته شده از گرافن تک‌لایه بی‌عیب با شرایط تکیه‌گاهی ساده نیز توسط کارلیسپیک و همکاران^[۳۰] گزارش شده است.

چنان که مشاهده می‌شود مطالعه‌ی درخصوص تأثیر بزرگی عیوب تهی‌جای، محل قرارگیری آن و شکل هندسی نانوصفحات گرافن تلفیق شده با شرایط مرزی مختلف، بر عملکرد نانو تشدیدگرها یا بر خواص ارتعاشی صفحات گرافن صورت نگرفته است. هدف این پژوهش مطالعه‌ی تأثیر عیوب تهی‌جای بر فرکانس‌های طبیعی و شکل مد نظیرشان و نیز درصد جابه‌جایی فرکانس طبیعی به‌ازای اضافه شدن جرم خارجی، با استفاده از روش مکانیک سازه‌ی مولکولی به‌عنوان روشی کارآمد و در عین حال مقرون به صرفه (از نظر زمانی) است.

۲. مدل مکانیک سازه‌ی مولکولی

بعد از کارهای آزمایشگاهی، شبیه‌سازی سازه‌های کربنی با استفاده از مدل‌سازی

کردند. مطالعه‌ی کار و همکاران^[۹] روی رفتار شکست و گسترش ترک‌ها در گرافن معیوب نشان می‌دهد که اگر عیب کم‌تر از 1 nm باشد تنش‌های شکست را می‌توان با فرمول گریفیث توصیف کرد. ژو و آلورا^[۱۱] با استفاده از روش دینامیک مولکولی ارتباط بین استحکام شکست کاهش یافته‌ی گرافن تک‌لایه با دما، نرخ بارگذاری و طول مشخصه‌ی ترک‌ها را بررسی کرده‌اند. مقایسه‌ی نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با نتایج نظریه‌ی مکانیک شکست کوانتومی نشان می‌دهد که سوراخ‌های بزرگ منجر به افت شدید استحکام گرافن می‌شوند در حالی که بر اثر عیوب، اندکی مدول یانگ کاهش می‌یابد. سان و همکاران^[۴] از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای مطالعه‌ی چگونگی تأثیر عیوب تک‌بر استحکام کششی صفحه‌ی تک‌لایه‌ی گرافن استفاده کرده‌اند. یافته‌های آنها نشان می‌دهد که حضور عیب تهی‌جای تک‌اتمی منجر به کاهش $17/7\%$ درصدی استحکام شکست گرافن می‌شود. وجود عیب تهی‌جای تک‌اتمی در مرکز گرافن منجر به تمرکز تنش می‌شود که تخریب عضوهای سازه‌ی حلقوی حول عیب تهی‌جای و رشد ترک را در پی دارد.^[۴] مطالعه‌ی زندگی تاشرو و همکاران^[۵] درخصوص تأثیر عیوب بر مدول کشسان و استحکام گرافن نشان می‌دهد که مدول کشسان دوبردی گرافن و استحکام شکست گرافن حساسیت کمی به عیوب از نوع sp^2 حتی با چگالی بالا دارد. در حالی که عیوب تهی‌جای خواص مکانیکی گرافن را شدیداً تقلیل می‌دهند.^[۵]

سخایی‌پور^[۱۱] روهی و انصاری^[۱۲] و چاندر و همکاران^[۱۳] با استفاده از مدل اجزاء محدود اتمی (مکانیک سازه‌ی مولکولی)، نیروی کماتش کشسان صفحات بی‌عیب تک‌لایه‌ی گرافن را به دست آورده و تأثیر شرایط مرزی و نسبت ابعادی بر ظرفیت تحمل بار صفحه‌ی گرافن را بررسی کرده‌اند. پرادهام^[۱۴] نتیجه‌ی مشابهی را با استفاده از نظریه‌ی کشسان غیرمحملی و تغییر شکل برشی مرتبه‌بالا به دست آورده است. فرجی‌پور و همکاران^[۱۵] کماتش نانوصفحات دایروی گرافن تحت بار فشاری - شعاعی را با استفاده از مدل ورق پیوسته‌ی غیرمحملی مطالعه کرده‌اند. انصاری و همکاران^[۱۶] کماتش دومجموری و رفتار ارتعاشی گرافن را با استفاده از نظریه‌ی ورق بر پایه‌ی اتم‌گرایی غیرمحملی بررسی کرده‌اند. بررسی تأثیر عیوب تهی‌جای بر بار بحرانی کماتش صفحات تک‌لایه‌ی گرافن توسط ترپس و واتیستاس^[۲] نشان می‌دهد که تنش بحرانی کماتش با افزایش چگالی عیوب کاهش می‌یابد. ترپس و واتیستاس^[۲] از مدل اجزاء محدود برای مطالعه‌ی خود استفاده کردند.

میانرودی و همکاران^[۱۷] خواص ارتعاشی غیرخطی صفحه‌ی گرافن تک‌لایه را با استفاده از مدل غشایی پیش‌بینی کرده‌اند؛ آنها نتیجه گرفته‌اند که فرکانس پایه‌ی غیرخطی صفحه‌ی گرافن تک‌لایه با افزایش پیش‌کشش و سرعت اولیه افزایش می‌یابد. همچنین دریافته‌اند که با افزایش پیش‌کشش اثرات سرعت اولیه روی فرکانس پایه ضعیف می‌شود به‌گونه‌ی که تقریباً فرکانس پایه مستقل از سرعت اولیه است. مورمو و پرادهان^[۱۸] با استفاده از نظریه‌ی کشسان غیرمحملی پاسخ ارتعاشی نانوصفحه‌ی گرافن تک‌لایه را مطالعه کرده‌اند؛ نتایج عددی آنها نشان می‌دهد که فرکانس‌های پایه شدیداً به ضریب مقیاس کوچک وابسته‌اند. شن و همکاران^[۱۹] با استفاده از مدل ورق غیرمحملی تأثیر دما بر نسبت فرکانس پایه‌ی خطی به غیرخطی را بررسی کرده‌اند. سخایی‌پور و همکاران^[۲۰] ارتعاش خطی صفحه‌ی گرافن تک‌لایه‌ی زیگزاگ و آرمچیر را با کمک مکانیک سازه‌ی مولکولی شبیه‌سازی کردند. نتایج آنها نشان می‌دهد که فرکانس‌های طبیعی پایه مستقل از کایرالیته و نسبت ابعادی است. در حالی که نتایج گزارش شده توسط هاشمیان و همکاران^[۲۱] که از روشی مشابه برای پیش‌بینی خواص ارتعاشی صفحات گرافن تک‌لایه با شرط مرزی گیردار - آزاد و گیردار - گیردار استفاده کرده‌اند نشان می‌دهد که فرکانس پایه با افزایش نسبت ابعادی کاهش می‌یابد. روش مکانیک سازه‌ی مولکولی برای بررسی اثر پیش‌کشش

جدول ۱. مقادیر ثابت میدان نیرویی مکانیک مولکولی. [۳۱،۳۲،۳۳]

nNA^{-1}	۶۵٫۲	k_r
$nNArad^{-2}$	۸٫۷۶	k_θ
$nNArad^{-2}$	۲٫۷۸	k_φ

آنها در پی تحلیل بهینه‌سازی، مقدار بهینه‌ی قطر تیر و نسبت پواسون را به ترتیب ۰٫۱ نانومتر و ۰٫۳۷ یافتند. [۳۳] نظر به این که نسبت قطر به طول المان تیر معادل (d/L) آن را در محدوده‌ی تیرهای ضخیم قرار می‌دهد، در این مطالعه پیرو مطالعات پیشین، [۳۳] برای بررسی تأثیر عیوب تهی‌جای بر فرکانس طبیعی صفحات گرافن با استفاده از مکانیک سازه‌ی مولکولی از المان‌های تیر تیموشنکو برای تعیین ماتریس سختی بهره گرفته شده است (در پیوست الف ترم‌هایی نظیر ماتریس سختی المان در دستگاه محلی^۳ آورده شده است). در ضمن فرض شده است که اتم‌های کربن به صورت جرم‌های متمرکز در محل تلاقی هر سه تیر قرار گرفته‌اند (در پیوست الف ماتریس جرم نظیر هر گره آورده شده است). نهایتاً با استفاده از روش تحلیل مودال و بهره‌گیری از روش المان محدود می‌توان فرکانس‌های پایه (ω_i) و شکل مد نظیر آنها را مطابق معادله‌ی ۷ یافت:

$$([K] - \omega_i^2 [M])\{U\} = 0 \quad (7)$$

که در آن $[K]$ و $[M]$ به ترتیب ماتریس سختی و ماتریس جرم سازه است.

۳. اعتبارسنجی مدل

برای اعتبارسنجی مدل از نتایج حاصل از مطالعات پیشین، [۱۹] که در آن فرکانس پایه‌ی نانوصفحات گرافن با استفاده از روش دینامیک مولکولی تعیین شده‌اند، بهره گرفته شده است. با توجه به جرم مخصوص نانوصفحه‌ی گرافن موجود در آن مطالعه، جرم‌های متمرکز استفاده شده در رأس شش ضلعی‌های منظم صفحه‌ی گرافن تعیین شده است. بدین منظور با استفاده از رابطه‌ی پیشنهادی ژیانگ و همکاران [۳۳] تعداد اتم در سطح dA با رابطه‌ی $dA \frac{4}{3} (\sqrt{3} l_0)^2 \rho h$ (طول پیوند کربن - کربن است) تعریف شده است. بدین ترتیب می‌توان نشان داد که مقدار جرم نظیر هر جرم متمرکز شده در رأس شش ضلعی‌ها (که دقیقاً موقعیت قرارگیری هر اتم کربن است) با جرم مخصوص گزارش شده برای صفحه‌ی گرافن با رابطه‌ی ۸ مرتبط است:

$$m_0 = \frac{4}{3} \sqrt{3} l_0^2 \rho h \quad (8)$$

که در آن ρ معرف جرم مخصوص صفحه‌ی گرافن (kg/m^2) و h معرف ضخامت مؤثر صفحه‌ی گرافن است. نظر به این که مقدار جرم مخصوص و ضخامت مؤثر صفحه‌ی گرافن گزارش شده توسط شن و همکاران [۱۹] به‌گونه‌ی است که مقدار ρh بین $10^{-9} \times 792,263$ تا $10^{-9} \times 4,6137$ کیلوگرم بر متر مربع تغییر می‌کند، مقدار m_0 استفاده شده در مدل‌سازی از متوسط‌گیری مقادیر نظیر حاصل از معادله‌ی ۶، یعنی $10^{-27} \times 20,93$ کیلوگرم استفاده شده است. در جدول ۲ نتایج حاصل از شبیه‌سازی به روش مکانیک سازه‌ی مولکولی و دینامیک مولکولی مقایسه شده است.

چنان که ملاحظه می‌شود تطابق خوبی بین نتایج موجود است و میزان خطا کم‌تر از ۲ درصد است.

اتمی شامل دینامیک مولکولی کلاسیک، دینامیک مولکولی تی - بی^۲ و نظریه‌ی تابعی چگالی بیشتر مورد توجه محققین بوده است؛ چرا که هر مسئله‌ی مرتبط با حرکت‌های مولکولی یا اتمی را می‌توان با بهره‌گیری از این روش‌ها با دقت بالا مدل کرد. نظر به این که مدل‌سازی آمیستی بسیار زمان‌بر است کاربرد آنها به سیستم‌هایی با تعداد اندک مولکول یا اتم خلاصه می‌شود و معمولاً به مطالعه‌ی پدیده‌هایی با طول عمر نسبتاً کوتاه (از پیکوثانیه تا نانوثانیه) محدود می‌شود. [۳۱] اگرچه مشکل زمان‌بر بودن شبیه‌سازی به روش مدل‌سازی اتمی، در مکانیک محیط‌های پیوسته برطرف شده اما، در این روش جزئیات مشخصه‌های سازه‌های کربنی مانند کایرالیته نادیده گرفته شده است. [۳۱] در روش مکانیک سازه‌ی مولکولی پاسخ مکانیکی سازه‌های کربنی را می‌توان در مقیاس اتمی و در بازه زمانی مقرون به صرفه‌تری تعیین کرد. [۳۱] در روش مکانیک سازه‌ی مولکولی سازه‌های اتمی مانند نانولوله‌های کربنی یا نانوصفحات گرافن با استفاده از المان‌های تیر همچون یک قاب فضایی ساخته می‌شوند. برای تعیین ارتباط صریح بین پارامترهای سختی المان‌های تیر معادل و ثابت‌های میدان نیرویی در مکانیک مولکولی، از معادل‌سازی انرژی‌های کرنشی هر المان در سازه مکانیکی (معادله‌ی ۲) و انرژی‌های پتانسیل هر پیوند (معادله‌ی ۱) استفاده می‌شود: [۳۳،۳۴]

$$U_P = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum (U_\varphi + U_\omega) + \sum U_{vdw} \quad (1)$$

$$U_{S,E} = \sum U_A + \sum U_M + \sum U_T + \sum U_V \quad (2)$$

معادله‌ی ۱ معرف کل انرژی پتانسیل از نقطه‌نظر دینامیک مولکولی است که شامل اثر متقابل پیوندهای کووالانسی شامل کشش پیوند (U_r)، چرخش زاویه‌ی پیوند (U_θ)، پیچش زاویه‌ی دوسطحی (U_φ)، پیچش خارج از صفحه (U_ω) و اثر متقابل غیر پیوندی واندروالس (U_{vdw}) است. معادله‌ی ۲ معرف تغییر در انرژی کرنشی یک قاب فضایی حاصل از تغییر شکل است. در این معادله U_A ، U_M ، U_T و U_V به ترتیب معرف انرژی کرنشی حاصل از کشش محوری، خمش، پیچش و نیروی برشی است.

اسکارپا و همکاران [۳۲] با معادل قرار دادن معادله‌های ۱ و ۲ ارتباط مستقیم بین ثابت‌های میدان نیرویی مکانیک مولکولی و پارامترهای مکانیک سازه‌ی را برای المان تیر تیموشنکو به دست آورده‌اند:

$$k_r = EA/L, \quad k_\varphi = GJ/L, \quad k_\theta = (EI/L)(4C_1 + C_2)/16(C_1 + C_2) \quad (3)$$

که در آن:

$$C_1 = 112L^2 k_\varphi + 192L^2 k_\varphi v + 64L^2 k_\varphi v^2 \quad (4)$$

$$C_2 = 9d^2 k_r + 18d^2 k_r v + 9d^2 k_r v^2 \quad (5)$$

و EA ، EI و GJ به ترتیب معرف سختی کششی، سختی خمشی و صلبیت پیچشی در سازه مکانیکی است. L طول المان تیر است که با طول باند کربن - کربن معادل گرفته می‌شود؛ v نسبت پواسون d قطر مقطع دایره‌ی تیر است. در جدول ۱ مقادیر ثابت میدان نیرویی مکانیک مولکولی استفاده شده در مطالعات انجام شده [۳۳،۳۱،۳۲] فهرست شده است.

وانگ و همکاران [۳۳] خواص المان تیر ایزوتروپ با سطح مقطع دایره‌ی را که باید در مدل‌سازی استفاده شود، استخراج کرده‌اند:

$$d < 2 \sqrt{6 \frac{k_\theta}{k_r}}, \quad E = \frac{k_r L}{4 \pi k_\theta}, \quad G = \frac{k_\varphi E}{2 k_\theta} \quad (6)$$

جدول ۲. مقایسه‌ی فرکانس پایه (GHz) نانوصفحات گرافن تعیین شده به دو روش دینامیک مولکولی^[۱۹] و مکانیک سازه‌ی مولکولی.

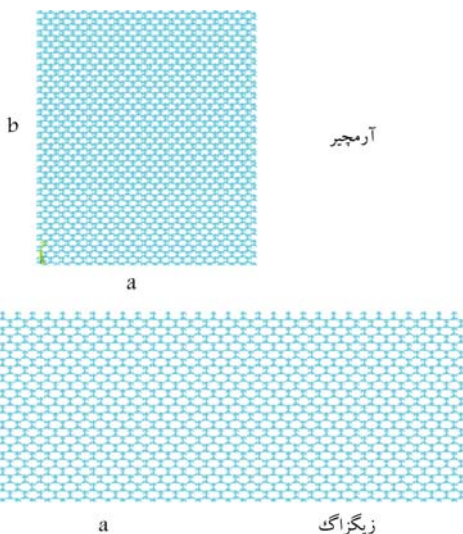
آرمچیر			زیگزاگ		
ابعاد نانوصفحه	روش حاضر	[۱۹]	ابعاد نانوصفحه	روش حاضر	[۱۹]
۴,۸۴۴ × ۹,۵۱۹	۵۷,۳	۵۷	۹,۴۹۶ × ۴,۸۷۷	۶۷,۲۹	۶۶,۳
۴,۸۴۷ × ۶,۹۹۵	۷۶,۶	۷۶,۴	۷,۰۶۵ × ۴,۸۸۷	۸۱	۸۱,۲
۴,۸۵۵ × ۴,۸۸۸	۱۱۵	۱۱۴,۴	۴,۸۸۸ × ۴,۸۵۵	۱۱۲,۹	۱۱۴,۲

جدول ۳. تأثیر تعداد و چگونگی پراکندگی اتم‌های از دست رفته بر ۳ فرکانس طبیعی اول (گیگاهرتز) نانو صفحه‌ی گرافن.

زیگزاگ ۴,۸۴۴ × ۹,۵۱۹			آرمچیر ۴,۸۴۴ × ۹,۵۱۹			تعداد اتم‌های از دست داده
مد ۱	مد ۲	مد ۳	مد ۱	مد ۲	مد ۳	
۱۵۱,۳۵	۹۷,۳۷	۶۷,۲۹	۱۶۱,۷	۹۸,۹	۵۷,۳	صفر
۱۵۰,۸۴	۹۷,۳۴	۶۷,۱	۱۶۱,۱۱	۹۸,۹۳	۵۷,۱	۱
۱۵۰,۶	۹۷,۱۹	۶۶,۹۲	۱۶۰,۳۵	۹۸,۸	۵۶,۷	۳ (۳ سوراخ تک‌اتمی)
۱۴۹,۹۵	۹۷,۱۵	۶۶,۹۱	۱۶۰,۳۳	۹۸,۷	۵۶,۳	۶ (۳ تا سوراخ دو اتمی)
۱۵۰,۱۳	۹۷,۳۱	۶۶,۸۳	۱۶۰,۳۳	۹۸,۸۷	۵۶,۷	۶ (یک سوراخ در میانه صفحه)
۱۴۹,۶۳	۹۷,۰۵	۶۶,۶۶	۱۵۹,۶	۹۸,۶۵	۵۶,۱	۹ (۳ تا سوراخ ۳ اتمی)
۱۴۹,۳۶	۹۶,۹۲	۶۶,۳۲	۱۵۹,۴	۹۸,۳	۵۵,۷	۲۴ (یک سوراخ در میانه صفحه)
۱۵۰,۷۷	۹۵,۷۹	۶۶,۳۴	۱۶۰,۹	۹۶,۷	۵۵,۱	۵۴ (یک سوراخ در میانه صفحه)
۱۵۴,۵۷	۹۳,۷۰	۶۷,۱۴	۱۵۸,۳	۹۳,۸	۵۵,۳	۹۶ (یک سوراخ در میانه صفحه)
۱۵۹,۳۱	۹۰,۹۶	۶۸,۶۴	۱۵۰,۵	۹۰,۱۶	۵۶,۶۰	۱۵۰ (یک سوراخ در میانه صفحه)
۱۵۱,۷۶	۹۷,۱۶	۶۴,۷۷	۱۵۱,۴	۹۳,۲	۵۳,۱	۹۶ اتم (۱۶ تا سوراخ ۶ اتمی پراکنده بر روی خطوط مرکزی صفحه)
۱۳۷,۱۱	۸۸,۲۱	۶۰,۸۲	۱۴۲,۶	۸۷,۸	۵۱,۱	۹۶ اتم (۹۶ سوراخ تک‌اتمی پراکنده در کل صفحه)

۴. نتایج عددی

پیش‌تر اشاره شد که عیوب تهی‌جای ایجاد شده در لایه‌های گرافن، چه حاصل از فرایند تولید و چه به دلیل شرایط محیطی و کارکردی و تأثیرش بر رفتار مکانیکی نانوصفحات گرافن همچنان از موضوعات مورد توجه محققین است؛ اگرچه دینامیک و نوسازی عیوب تهی‌جای در صفحات گرافن هنوز به‌خوبی درک نشده است.^[۲۳] مطالعه‌ی وانگ و همکاران^[۲۴] نشان می‌دهد که دو عیب تهی‌جای در دمای ۳۰۰۰ درجه کلوین منتشر و یکی می‌شوند تا یک عیب تهی‌جای دو برابر ۵-۸ را بسازند. این عیب در دمایی بالاتر از طریق دگرگونی استون - والز به عیبی با ساختار جدید -- عیب ۵۵۵-۷۷۷ -- تبدیل می‌شود؛ سازه‌ی معیوب با این عیب جدید پایدارتر است. در این مطالعه همچنین می‌توان چگونگی یکی شدن چهار عیب تهی‌جای تک‌اتمی و نوسازی سازه‌ی معیوب در دمای بالاتر از ۳۰۰۰ درجه کلوین به سازه‌ی پایدارتر را مشاهده کرد. در مطالعه‌ی مشابه^[۲۵] نیز اشاره شده است که می‌توان عیوب تهی‌جای را در دماهای پایین برای زمان‌های ماکروسکوپی حفظ کرد. از این بخش فرض بر آن است که در دماهای پایین عیوب تهی‌جای پایدارند و نوسازی نشده‌اند، هرچند با افزایش دما این فرض چندان قابل استناد نیست.

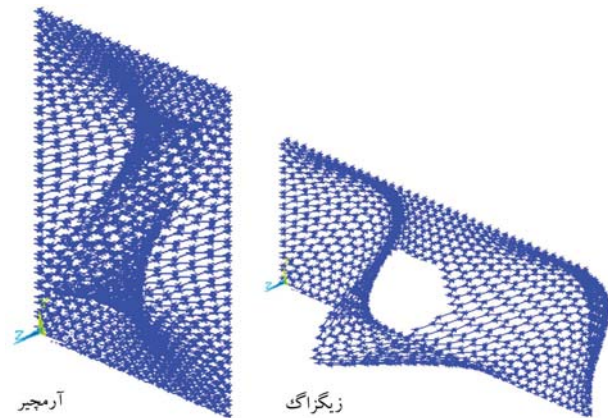
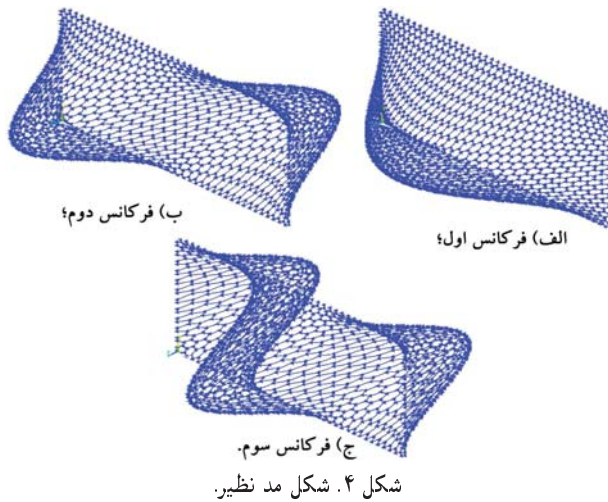


شکل ۱. نمایی از دو صفحه‌ی آرمچیر و زیگزاگ.

اول نانوصفحه دیده شده است (نمایی از برخی عیوب تهی‌جای نام برده شده در جدول ۳ در شکل‌های ۲ و ۳ نشان داده شده است).

از داده‌های جدول ۳ چنین برمی‌آید که اگر اتم‌های گرافن متمرکز در میانه‌ی صفحه برداشته شود بسته به اندازه‌ی سوراخ ایجاد شده، فرکانس طبیعی نانوصفحه‌ی معیوب کاهش یا افزایش می‌یابد. در نانوصفحه‌ی آرمچیر تا حذف ۵۴ اتم، فرکانس طبیعی نانوصفحه کاهش می‌یابد در حالی که با افزایش بیشتر اندازه سوراخ، در

برای بررسی تأثیر عیوب تهی‌جای بر فرکانس طبیعی نانوصفحات گرافن از دو صفحه‌ی آرمچیر و زیگزاگ (شکل ۱) استفاده شده است. در جدول ۳ تأثیر تعداد اتم‌های از دست رفته در نانوصفحه‌ی گرافن و چگونگی پراکندگی آنها بر سه فرکانس



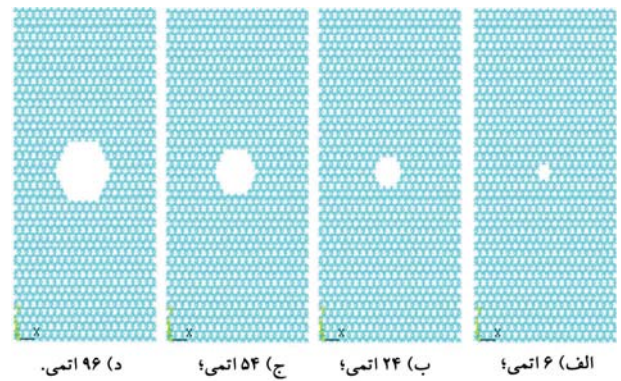
شکل ۵. تأثیر سوراخ ۱۵° اتمی بر شکل مد نظیر فرکانس سوم نانوصفحه‌ی آرمچیر و نانوصفحه‌ی زیگراگ.

از هدر رفتن بیشتر پیوندهای کووالانسی بین اتمی باشد.

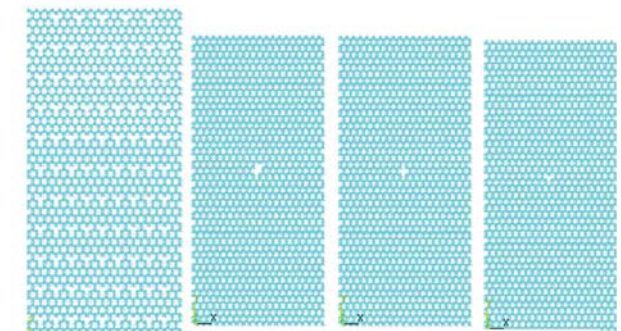
فرکانس پایه‌ی صفحه‌ی آرمچیر معیوب به ابعاد 47855×47888 نیز تعیین شده است. مقدار فرکانس پایه‌ی این صفحه که دارای یک سوراخچه‌ی ۶، ۲۴ و ۵۴ اتمی در میانه‌ی صفحه است به ترتیب $113/588$ ، $43/113$ و $115/93$ گیگاهرتز است. در مقایسه با مقدار فرکانس پایه‌ی صفحه‌ی سالم، مشاهده می‌شود که با افزایش ابعاد سوراخ، فرکانس پایه‌ی نانوصفحه‌ی معیوب از فرکانس پایه‌ی نانوصفحه‌ی سالم فراتر می‌رود. تأثیر کاهش یا افزایش سوراخ‌ها بر فرکانس پایه‌ی نانوصفحات به هنگام استفاده‌ی این ساختارها در ابراری که بارهای ارتعاشی را تحمل می‌کنند برای جلوگیری از بروز تشدید بسیار حائز اهمیت است. همچنین این تغییر در فرکانس پایه شاید بتواند قابلیت کاوشگری جرم‌های خارجی را توسط نانوصفحه‌ی گرافن افزایش دهد.

در شکل ۴، شکل مد نظیر سه فرکانس اول نانوصفحات سالم زیگراگ، به ابعاد ذکر شده در جدول ۳ نشان داده شده است. شکل مد صفحات آرمچیر مشابه صفحات زیگراگ است. همچنین تأثیر یک سوراخ ۱۵° اتمی بر شکل مد نظیر فرکانس سوم این نانوصفحات در شکل ۵ نشان داده شده است.

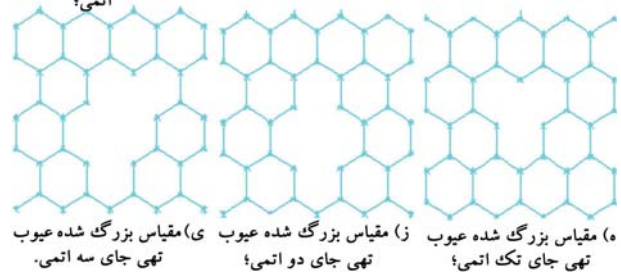
در شکل ۶ تأثیر فاصله‌ی سوراخچه‌ی ۶ اتمی از لبه‌ی نانوصفحه‌ی گرافن بر فرکانس پایه‌ی آن دیده شده است. سوراخ‌ها روی بلندترین خط مرکزی صفحات جابه‌جا شده است. ابعاد نانوصفحات مورد استفاده در جدول ۳ موجود است.



شکل ۲. نمایش سوراخچه ۶، ۲۴، ۵۴ و ۹۶ اتمی در میانه‌ی ورق آرمچیر.



شکل ۳. نمایش عیب نهی جای.



فرکانس طبیعی یک روند افزایشی دیده می‌شود. این در حالی است که در نانوصفحه‌ی زیگراگ نانوصفحه‌ی یک سوراخ ۵۴ اتمی را در بر می‌گیرد دارای فرکانسی بالاتر از صفحه‌ی با یک سوراخ ۲۴ اتمی است.

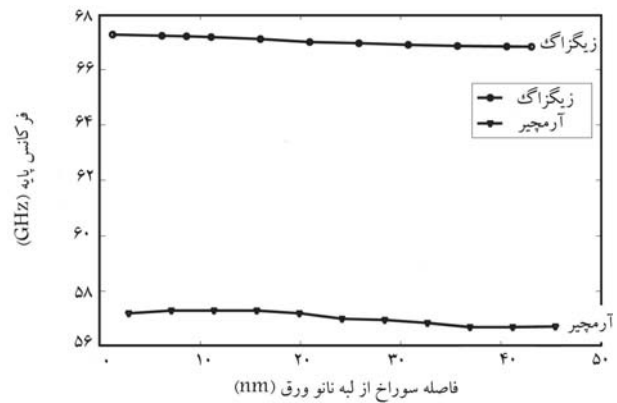
در شکل ۲ نمایی از سوراخچه‌ی ۶ تا ۹۶ اتمی در میانه‌ی صفحه‌ی آرمچیر نشان داده شده است. همچنین در شکل ۳ می‌توان نمایی از عیب نهی جای تک‌اتمی، دو‌اتمی و سه‌اتمی در میانه‌ی صفحه را دید. در اشکال ۳-ه، ۳-ز و ۳-ی، به ترتیب عیب نهی‌جای تک‌اتمی، دو‌اتمی و سه‌اتمی در مقیاسی بزرگ نیز نشان داده شده است.

در شکل ۳ نمایی از صفحه‌ی آرمچیر با ۹۶ عیب نهی‌جای تک‌اتمی نیز دیده می‌شود (شکل ۳-د). در مقایسه با شکل‌های الف تا ج، مقیاس بزرگ‌تری برای ترسیم شکل ۳-د استفاده شده است تا پراکندگی عیوب بهتر دیده شود.

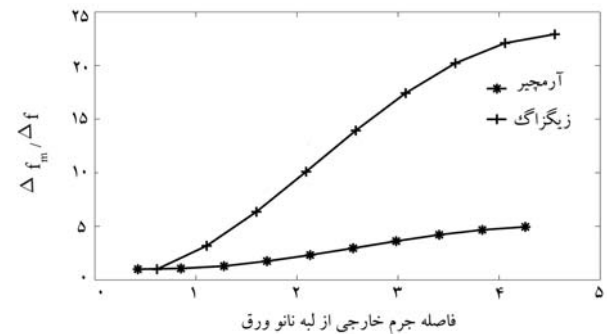
در مقایسه‌ی فرکانس پایه‌ی طبیعی نانوصفحاتی که اتم مساوی از دست داده‌اند، دیده می‌شود که صرف نظر از نوع کابالیته‌ی، نانوصفحه‌ی که عیوب نهی‌جای بیشتری دارد، از فرکانس طبیعی پایین‌تری نیز برخوردار است (جدول ۳) که می‌تواند ناشی

جدول ۴. تأثیر افزایش جرم و بزرگی سوراخ بر میزان جابه‌جایی فرکانس پایه نانوصفحات گرافن.

Δf (GHz)	تعداد اتم‌های ازدست رفته	جرم خارجی	تعداد جرم‌های متصل شده
۰٫۳۹	۰٫۳۵	۰٫۱۲۱۳۰۷	۱
۰٫۷۳	۰٫۶۱۸	۰٫۲۴۲۶۱۴	۲
۱٫۰۵۵	۰٫۷۹	۰٫۳۶۳۹۲۱	۳
۰٫۴۱	۰٫۳۶	۰٫۱۲۱۳۰۷	۱
۰٫۴۷۶	۰٫۶۷۸	۰٫۲۴۲۶۱۴	۲
۰٫۹۰۵	۱٫۰۲۹	۰٫۳۶۳۹۲۱	۳
۰٫۳۱۲	۰٫۳۷۹ (۲ تا سوراخ تک‌اتمی)	۰٫۱۲۱۳۰۷	۱
۰٫۷۵۵	۰٫۵۹ (۲ تا سوراخ تک‌اتمی)	۰٫۲۴۲۶۱۴	۲
۰٫۹۴	۰٫۸۹۸ (۲ تا سوراخ تک‌اتمی)	۰٫۳۶۳۹۲۱	۳
۰٫۳۱۳	۰٫۲۸۲ (۳ تا سوراخ تک‌اتمی)	۰٫۱۲۱۳۰۷	۱
۰٫۴	۰٫۴۹۳ (۳ تا سوراخ تک‌اتمی)	۰٫۲۴۲۶۱۴	۲
۰٫۸۴۲	۰٫۸۱ (۳ تا سوراخ تک‌اتمی)	۰٫۳۶۳۹۲۱	۳
۰٫۳۲۲	۰٫۳۳۸ (۲ سوراخ دو اتمی)	۰٫۱۲۱۳۰۷	۱
۰٫۷۶۷	۰٫۶۹۸ (۱ سوراخ دو اتمی)	۰٫۲۴۲۶۱۴	۲
۰٫۹۵۶	۰٫۹۵۱ (۲ سوراخ دو اتمی)	۰٫۳۶۳۹۲۱	۳
۰٫۳۲۹	۰٫۳۶۹ (۱ سوراخ سه اتمی)	۰٫۱۲۱۳۰۷	۱
۰٫۷۱۹	۰٫۶۹۸ (۱ سوراخ سه اتمی)	۰٫۲۴۲۶۱۴	۲
۱٫۱۸۴	۱٫۰۴۷ (۱ سوراخ سه اتمی)	۰٫۳۶۳۹۲۱	۳
۰٫۳۲۷۶	۰٫۲۸۵ (۳ تا سوراخ دو اتمی)	۰٫۱۲۱۳۰۷	۱
۰٫۷۸۸۶	۰٫۶۴۴ (۳ تا سوراخ دو اتمی)	۰٫۲۴۲۶۱۴	۲
۱٫۱۶۱۶	۰٫۹۳۳ (۳ تا سوراخ دو اتمی)	۰٫۳۶۳۹۲۱	۳
۰٫۳۳۳	۰٫۳۴۶ (۳ تا سوراخ ۳ اتمی)	۰٫۱۲۱۳۰۷	۱
۰٫۸۰۷	۰٫۶۷۸ (۳ تا سوراخ ۳ اتمی)	۰٫۲۴۲۶۱۴	۲
۱٫۲۳۸	۱٫۰۳ (۳ تا سوراخ ۳ اتمی)	۰٫۳۶۳۹۲۱	۳



شکل ۶. تأثیر فاصله سوراخ ۶ اتمی از لبه ورق بر تغییرات فرکانس پایه زیگزراگ و آرمچیر.



شکل ۷. تأثیر محل قرارگیری جرم متمرکز در بلندترین خط میانی ورق در جابه‌جایی فرکانس پایه.

براساس شکل ۶، با نزدیک شدن سوراخ به لبه‌ی نانوصفحه، فرکانس پایه‌ی نانوصفحه به فرکانس نانوصفحه‌ی بی‌عیب نزدیک می‌شود (به ترتیب ۵۷٫۲ و ۶۷٫۲ گیگاهرتز برای نانوصفحه‌ی آرمچیر و زیگزراگ)، اما فرکانس پایه با توجه به محل سوراخ چندان متغیر نیست.

تأثیر اضافه شدن جرم خارجی بر جابه‌جایی فرکانس پایه‌ی نانوصفحات گرافن با دو کایرالیته‌ی آرمچیر و زیگزراگ (ابعاد در جدول ۳ موجود است) نیز بررسی شده و نتایج در جدول ۴ خلاصه شده است. در این جدول Δf معرف $f - f_0$ است (f_0 و f به ترتیب معرف فرکانس پایه‌ی نانوصفحه‌ی بدون جرم خارجی و با جرم خارجی‌اند). در این جدول فرض بر تمرکز عیوب و جرم‌های متصل شده در بخش میانی صفحه بوده است چرا که تمرکز جرم متصل شده در میانه ورق نسبت به هر منطقه‌ی دیگری بیشترین تغییر در فرکانس پایه را ایجاد می‌کند. در شکل ۷ نسبت جابه‌جایی فرکانس پایه به‌ازای اضافه شدن جرمی معادل ۰٫۴۱۶۹۶۵ زپتاگرم در بلندترین خط میانی نانورق‌ها (Δf_m) به جابه‌جایی فرکانس پایه به‌ازای اضافه شدن همان مقدار جرم در نزدیکی لبه ورق (Δf_0) نشان داده شده است. چنان که مشاهده می‌شود با افزایش فاصله‌ی اتصال جرم خارجی از لبه‌ی خارجی، به جابه‌جایی فرکانس پایه افزوده می‌شود. به یاد داشته باشیم که در یک سیستم جرم و فنر ساده، نانورق می‌تواند نقش سختی فنر سیستم را ایفا کند، که سختی آن زمانی که جرم در میانه‌ی ورق قرار دارد کمینه است. لذا به‌ازای جرم ثابت متصل شده به ورق، زمانی که جرم متمرکز در میانه‌ی ورق قرار دارد کم‌ترین فرکانس پایه را تولید می‌کند که منجر به بیشینه شدن جابه‌جایی فرکانس پایه می‌شود.

مطالعات انجام شده روی جذب مولکول‌ها و/یا نانوذرات به گرافن نشان می‌دهد که عیوب تهی‌جای می‌تواند یک مهار نانوذرات و یا محل اتصال مولکول‌ها باشد. [۲۸-۳۶] سانیا و همکاران [۳۶] نشان داده‌اند که هر مولکولی مانند H_2O ، O_2 ، CO ، B_2 و N_2 که در نزدیکی مرکز گرافن با باندهای آزاد غیراشباع باشد بلافاصله جذب آن می‌شود. مطالعه‌ی گیو و همکاران [۳۷] بر روی برهمکنش آرگنین - گلیسین - آسپارتیک اسید و صفحه‌ی گرافن نشان می‌دهد که گرافن معیوبی که دارای عیوب تهی‌جای است نسبت به گرافن سالم، برهمکنشی قوی‌تر با RGD دارد که این مهم به سبب برهمکنش بین اتم‌های آزاد C با NH_3^+ و گوانیدین است. همچنین لیم و همکاران [۳۸] نشان دادند که عیوب تهی‌جای گرافن به عنوان نقاط مهار نانوذرات فلزی خالص Al_{13} و Fe_{13} عمل می‌کنند. پیوند قوی بین نانوذرات Al_{13} و Fe_{13} با گرافن معیوب ناشی از هیبریدی شدن (پیوندزنی) قوی نانوذرات با باند آزاد sp^1 کربن‌های نزدیک تهی‌جای است. لذا مطابق شکل ۶، وجود عیوب تهی‌جای در

۵. نتیجه گیری

از آنجا که بروز عیوب در شبکه‌ی اتمی گرافن به سبب فرایندهای تولید یا به دلیل شرایط محیطی و کارکردی دستگاه گرافن اجتناب‌ناپذیر است، در این مطالعه تأثیر عیوب تهی‌جای از نظر بزرگی، محل قرارگیری و تعداد بر فرکانس طبیعی نانوصفحات آرمچیر و زیگزاگ بررسی شده است. در ضمن تأثیر استفاده از عیوب تهی‌جای برای جذب مهندسی شده‌ی اجرام خارجی در میانه‌ی ورق تشدیدگر بر حساسیت به جرم خارجی صفحات تشدیدگر بررسی شده است. برای این مطالعه از روش مکانیک سازه‌ی مولکولی استفاده شده است. نتایج حاصله نشان می‌دهد که:

۱. صرف نظر از نوع کایرالیته‌ی، فرکانس پایه‌ی نانوصفحاتی که یک سوراخ در میانه‌ی صفحه‌ی خود دارند بسته به میزان بزرگی سوراخ نسبت به ابعاد صفحه از فرکانس پایه‌ی نانوصفحه‌ی سالم می‌تواند کوچک‌تر یا بزرگ‌تر باشد. فرکانس پایه‌ی نانوصفحات دارای سوراخ تک‌اتمی یا ۶ اتمی غالباً کوچک‌تر از فرکانس پایه‌ی نانوصفحه‌ی سالم است.
۲. در نانوصفحات مستطیلی به مساحت تقریباً مشابه، نوع کایرالیته‌ی بر بزرگی سوراخی که در آن فرکانس پایه‌ی نانوصفحه رشد می‌کند تأثیر می‌گذارد.
۳. با کوچک‌تر شدن سوراخ‌ها و افزایش تعدادشان، فرکانس پایه‌ی نانوصفحه نسبت به ورق‌ی مشابه با تعداد سوراخ‌های کم‌تر اما اندازه‌ی بزرگ‌تر بیشتر کاهش می‌یابد که می‌تواند به سبب از دست رفتن بیشتر پیوندهای کووالانسی بین اتمی باشد.
۴. هرچه سوراخ به مرز مقید شده نزدیک‌تر باشد تأثیر سوراخ بر فرکانس پایه‌ی نانوصفحه کاهش می‌یابد.
۵. تمرکز جرم متصل شده در میانه‌ی ورق نسبت به هر منطقه دیگری بیشترین تغییر در فرکانس پایه را ایجاد می‌کند.
۶. اگرچه وجود عیوب تهی‌جای در میانه‌ی ورق بیشترین کاهش در فرکانس پایه را به دنبال دارد اما با توجه به پیوند قوی‌تری که میان برخی مولکول‌ها با اتم‌های کربن در محل عیوب رخ می‌دهد شاید وجود این عیوب در میانه ورق به صورت هدایت شده‌تری جرم‌های خارجی را به میانه‌ی ورق جذب کند که در مقایسه با جاگیری تصادفی جرم‌ها می‌تواند در ایجاد جابه‌جایی بیشتر فرکانس مفید باشد.
۷. با سخت‌تر شدن شرایط مرزی و به تبع آن افزایش فرکانس پایه در حالی که جرم صفحه ثابت مانده است، حساسیت ورق‌ها هم آرمچیر و هم زیگزاگ به جرم خارجی افزایش می‌یابد.
۸. صفحات زیگزاگ غالباً به وجود جرم‌های خارجی چسبیده به ورق حساس‌ترند.

جدول ۵. تأثیر شرایط مرزی بر حساسیت ورق‌های آرمچیر و زیگزاگ معیوب به جرم خارجی.

شرط مرزی	آرمچیر Δf (GHz)	زیگزاگ Δf (GHz)
SSSS	۱,۰۴۷	۱,۱۸۴
CCFF	۰,۲۱۹	۰,۲۶۱
CCSS	۱,۱۰۱	۱,۵۲۴
CCCC	۲,۴۷۴	۲,۶۹

میانه‌ی ورق مستطیلی بیشترین کاهش را در فرکانس پایه به دنبال دارد، اما شاید وجود این عیوب در میانه‌ی ورق به صورت هدایت شده‌تری جرم‌های خارجی را به میانه‌ی ورق جذب کند که در مقایسه با جاگیری تصادفی جرم‌ها می‌تواند مفید باشد (شکل ۷).

پیرو نتایج موجود در جدول ۴، صفحات زیگزاگ مستطیلی غالباً حساسیت بیشتری به جرم خارجی نشان می‌دهند و نسبت به صفحات آرمچیر مستطیلی دارای تغییر در فرکانس پایه بیشتری هستند. از سوی دیگر در تعداد اتم‌های از دست رفته برابر، سوراخ بزرگ‌تر در میانه ورق حساسیت بیشتری به وجود جرم خارجی نشان می‌دهد مثلاً جابه‌جایی در فرکانس پایه ورق آرمچیر (زیگزاگ) با یک عیب تهی‌جای دو اتمی ۱,۰۵ گیگاهرتز (۱,۰۷ گیگاهرتز) برابر ورق‌ی با دو عیب تهی‌جای تک‌اتمی است که برای یک عیب سه اتمی به مقدار ۱,۳ گیگاهرتز (۱,۴ گیگاهرتز) رشد می‌کند. باید به خاطر داشت که تأثیر عیوب تهی‌جای تک‌اتمی متعدد در کاهش فرکانس پایه به مراتب بیشتر از یک سوراخ بزرگ با همان تعداد اتم از دست رفته است که ناشی از تفاوت در تعداد پیوندهای کووالانسی از بین رفته است.

جالب توجه آن که با افزایش تعداد سوراخ‌های چنداتمی، حساسیت صفحات مستطیلی آرمچیر اندکی کاهش، و حساسیت صفحات مستطیلی زیگزاگ اندکی افزایش می‌یابد که می‌تواند ناشی از تفاوت در مسیر گسترش سوراخ انتخاب شده و حتی موقعیت قرارگیری سوراخ‌ها نسبت به لبه‌ی زیگزاگ یا آرمچیر در این دو صفحه باشد.

در جدول ۵ تأثیر شرایط مرزی بر حساسیت ورق‌های آرمچیر و زیگزاگ با یک عیب سه‌اتمی در میانه‌ی ورق به جرم خارجی نشان داده شده است. چنان که مشاهده می‌شود با سخت‌تر شدن شرایط مرزی و به تبع آن افزایش فرکانس پایه در حالی که جرم صفحه ثابت مانده است، حساسیت ورق‌ها -- هم آرمچیر و هم زیگزاگ -- به جرم خارجی افزایش می‌یابد. در این جدول S, C, و F به ترتیب معرف لبه‌ی با شرط مرزی تکیه‌گاهی ساده، گیردار و آزاد است. شایان ذکر است که در ردیف دوم و سوم لبه‌های بلندتر دارای شرط مرزی متفاوت از گیردار هستند.

پانویس‌ها

1. Fullerenes
2. tight-binding
3. local

منابع (References)

1. Lebedeva, I.V., Knizhnik, A.A., Popov, A.M., Lozovik, Y.E. and Potapkin, B.V. "Modeling of grapheme-based NEMS", *Physica E* 44

- communications, **64**, pp. 50-56 (2015).
3. Jomehzadeh, E., Saidi, A.R., Jomehzadeh, Z., Bonaccorso, F., Palermo, V. and Galiotis, C. "Nonlinear subharmonic oscillation of orthotropic graphene-matrix composite", *Computational Materials Science*, **99**, pp. 164-172 (2015).
 4. Sun, X.Y., Fu, Z., Xia, M. and Xu, Y. "Effect of vacancy defect on the tensile behavior of graphene", *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, **4**, Article Number 051002 (2014).
 5. Zandiatashbar, A., Lee, G.-H., An, S.J., Lee, S., Mathew, N., Terrones, M., Hayashi, T., Picu, C.R., Hone, J. and Koratkar, N. "Effect of defects on the intrinsic strength and stiffness of graphene", *Nature Communications*, DOI: 10.1038/ncomms4186 (2014).
 6. Wang, M.C., Yan, C., Ma, L., Hu, N. and Chen, M.W. "Effect of defects on fracture strength of graphenesheets", *Computational Materials Science*, **54**, pp. 236-239 (2012).
 7. Carpenter, C., Ramasubramaniam, A. and Maroudas, D. "Analysis of vacancy-induced amorphization of single-layer graphene", *Applied Physics Letters*, **100**, Article Number 203105 (2012).
 8. Carpenter, C., Maroudas, D. and Ramasubramaniam, A. "Mechanical properties of irradiated single-layer graphene", *Applied Physics Letters*, **103**, Article Number 013102 (2013).
 9. Khare, R., Mielke, S.L., Paci, J.T., Zhang, S., Ballarini, R., Schatz, G.C. and Belytschko, T. "Coupled quantum mechanics/molecular mechanical modeling of the fracture of defective carbon nanotubes and graphene sheets", *Physical Review B*, **75**, pp. 075412-1-12 (2007).
 10. Zhao, H. and Aluru, N.R. "Temperature and strain-rate dependent fracture strength of graphene", *Journal of Applied Physics*, **108**, Article Number 064321 (2010).
 11. Sakhaee-Pour, A. "Elastic buckling of single-layered graphene sheet", *Comput. Mater. Sci.*, **45**, pp. 266-270 (2009).
 12. Rouhi, S. and Ansari, R. "Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheet", *Physica E*, **44**, pp. 764-772 (2012).
 13. Chandra, Y., Chowdhury, R., Adhikaria, S. and Scarpa, F. "Elastic instability of bilayer graphene using atomistic finite element", *Physica E*, **44**, pp. 12-16 (2011).
 14. Pradhan, S.C. "Buckling of single layer graphene sheet based on nonlocal elasticity and higher order shear deformation theory", *Phys. Lett. A*, **373**, pp. 4182-4188 (2009).
 15. Farajpour, A., Mohammadi, M., Shahidi, A.R. and Mahzoon, M. "Axisymmetric buckling of the circular graphene sheets with the nonlocal continuum plate model", *Physica E*, **43**, pp. 1820-1825 (2011).
 16. Ansari, R., Shahabodini, A. and Rouhi, H. "Prediction of the biaxial buckling and vibration behavior of graphene via nonlocal atomistic-based plate theory", *Composite Structure*, **95**, pp. 88-94 (2013).
 17. Mianroodi, J.R., Niaki, S.A., Naghdabadi, R. and Asghari, M. "Nonlinear membrane model for large amplitude vibration of single layer graphene sheets", *Nanotechnology*, **22**, pp. 305703-305708 (2011).
 18. Murmu, T. and Pradhana, S.C. "Vibration analysis of nano-single-layered graphene sheets embedded in elastic medium based on nonlocal elasticity theory", *J. Appl. Phys*, **105**, pp. 064319-8 (2009).
 19. Shen, L., Shen, H.-S. and Zhang, C.-L. "Nonlocal plate model for nonlinear vibration of single layer graphene sheets in thermal environments", *Comput. Mater. Sci.*, **48**, pp. 680-685 (2010).
 20. Sakhaee-Pour, A., Ahmadian, M.T., Naghdabadi R. "Vibrational analysis of single-layered graphene sheets", *Nanotechnology*, **19**, 085702 (2008).
 21. Hashemnia, K., Farid, M. and Vatankhah, R. "Vibration analysis of carbon nanotubes and graphene sheets using molecular structural mechanics approach", *Comput. Mater. Sci.*, **47**, pp. 79-85 (2009).
 22. Gupta, S.S. and Batra, R.C. "Elastic properties and frequencies of free vibrations of single-layer graphene sheets", *J. Comput Theory Nanosci.*, **7**, pp. 2151-2164 (2010).
 23. Wang, C.G., Lan, L., Liu, Y.P., Tan, H.F. and He, X.D. "Vibration characteristics of wrinkled single-layered graphene sheets", *International Journal of Solids and Structures*, **50**, pp. 1812-1823 (2013).
 24. Bunch, J.S., van der Zande, A.M., Verbridge, S.S., Frank, I.W., Tanenbaum, D.M., Parpia, J.M., Craighead, H.G. and McEuen, P.L. "Electromechanical resonators from graphene sheets", *Science*, **315**, pp. 490-493 (2007).
 25. Kim, S.Y. and Park, H.S. "On the utility of vacancies and tensile strain-induced quality factor enhancement for mass sensing using graphene monolayers", *Nanotechnology*, **21**, Article Number 105710 (2010).
 26. Arash, B., Wang, Q. and Duan, W.H. "Detection of gas atoms via vibration of graphenes", *Physics Letters A*, **375**, pp. 2411-2415 (2011).
 27. Sakhaee-Pour, A., Ahmadian, M.T. and Vafai, A. "Applications of single-layered graphene sheets as mass sensors and atomistic dust detectors", *Solid State Communications*, **145**, pp. 168-172 (2008).
 28. Shen, Zh.-B., Tang, H.-L., Li, D.-K. and Tang, G.-J. "Vibration of single-layered graphene sheet-based nanomechanical sensor via nonlocal Kirchhoff plate theory", *Computational Materials Science*, **61**, pp. 200-205 (2012).
 29. Murmu, T. and Adhikari, S. "Nonlocal mass nanosensors based on vibrating monolayer graphene sheets", *Sensors and Actuators B: Chemical*, **188**, pp. 1319-1327 (2013).
 30. Karlicic, D., Kozic, P., Adhikari, S., Cajic, M., Murmu, T. and Lazarevic, M. "Nonlocal mass-nanosensor model based on the damped vibration of single graphene sheet influenced by in-plane magnetic field", *International Journal of Mechanical Sciences*, **96-97**, pp. 132-142 (2015).
 31. Li, C. and Chou, T.-W. "A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes", *International Journal of Solids and Structures*, **40**, pp. 2487-2499 (2003).
 32. Scarpa, F., Adhikari, S. and Phani, A.S. "Effective elastic mechanical properties of single layer graphene sheets", *Nanotechnology*, **20**, pp. 065709-65711 (2009).

33. Jiang, L.Y., Huang, Y., Jiang, H., Ravichandran, G., Gao, H., Hwang, K.C. and Liu, B. "A cohesive law for carbon nanotube/polymer interfaces based on the van der Waals force", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **54**, pp. 2436-2452 (2006).
34. Wang, C.-Z., Lee, G.-D., Sidney Yip, J. and Ho, K.-M. "Atomistic simulation studies of complex carbon and silicon systems using environment-dependent tight-binding potentials", *Journal Sci Model Simul*, **15**, pp. 97-121 (2008).
35. Sammalkorpi, M., Krashennnikov, A., Kuronen, A., Nordlund, K. and Kaski, K. "Mechanical properties of carbon nanotubes with vacancies and related defects", *Physics Review B*, **71**, Article Number 169906(E) (2005).
36. Sanyal, B., Eriksson, O., Jansson, U. and Grennberg, H. "Molecular adsorption in graphene with divacancy defects", *Physical Review B*, **79**, Article Number 113409 (2009).
37. Guo, Y.-N., Lu, X., Weng, J. and Leng, Y. "Density functional theory study of the interaction of arginine-glycine-aspartic acid with graphene, defective graphene, and graphene", *The Journal of Physical Chemistry C*, **117**, pp. 5708-5717 (2013).
38. Lim, D.-H., Negreira, A.S. and Wilcox, J. "DFT studies on the interaction of defective graphene-supported Fe and Al nanoparticles", *The Journal of Physical Chemistry C*, **115**, pp. 8961-8970 (2011).
39. Luo, Y. "An efficient 3D Timoshenko beam element with consistent shape functions", *Adv. Theor. Appl. Mech.*, **1**, pp. 95-106 (2008).
40. Mohr, G.A., *Finite Element for Solids, Fluids and Optimization*, Oxford University Press, ISBN-13: 978-0198563693 (1992).

پیوست الف

برای استخراج ماتریس سختی نظیر مدل سازه‌ی صفحه‌ی گرافن از ماتریس سختی تیر تیموشنکو استخراج شده در مطالعات قبل [۳۹] بهره گرفته شده است. در شکل ۱ الف، المان تیر با سطح مقطع دایره‌ی در دستگاه مختصات محلی به همراه درجات آزادی آن نشان داده شده است.

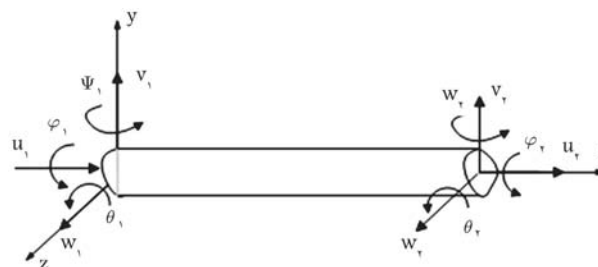
پیرو شکل ۱ الف، برای یک المان دوگره‌ی، بردار جابه‌جایی المان e در دستگاه مختصات محلی چنین تعریف می‌شود: [۳۹]

$$\{\mathbf{U}\}^e = \{u_1, v_1, w_1, \varphi_1, \theta_1, \psi_1, u_2, v_2, w_2, \varphi_2, \theta_2, \psi_2\}^T \quad (\text{الف } 1)$$

و ماتریس سختی المان e در دستگاه محلی مطابق رابطه‌ی ۲ الف تا ۷ الف تعریف می‌شود. [۳۹] شایان ذکر است که این ماتریس دارای بعد 12×12 بوده و متقارن است.

$$k_{11} = k_{77} = -k_{17} = \frac{EA}{L} \quad (\text{الف } 2)$$

$$k_{22} = -k_{28} = k_{27} = -k_{29} = k_{88} = k_{99} = \frac{12kGA EI(\lambda EI + kGAL^2)}{L(\lambda EI - kGAL^2)^2} \quad (\text{الف } 3)$$



شکل ۱ الف. المان تیر و درجات آزادی آن در دستگاه مختصات محلی. [۳۹]

$$k_{26} = k_{212} = -k_{25} = -k_{211} = k_{59} = -k_{68} = -k_{812} = k_{911} = \frac{6kGA EI(\lambda EI + kGAL^2)}{(\lambda EI - kGAL^2)^2} \quad (\text{الف } 4)$$

$$k_{27} = k_{1010} = -k_{210} = \frac{GJ}{L} \quad (\text{الف } 5)$$

$$k_{55} = k_{66} = k_{1111} = k_{1212} = \frac{4EI [(kGA)^2 L^2 + 3kGAL^2 EI + 36(EI)^2]}{L(\lambda EI - kGAL^2)^2} \quad (\text{الف } 6)$$

$$k_{511} = k_{611} = -\frac{2EI [-(kGA)^2 L^2 - 30kGAL^2 EI + 72(EI)^2]}{L(\lambda EI - kGAL^2)^2} \quad (\text{الف } 7)$$

در معادلات بالا k ضریب تصحیح تنش برشی در تیر تیموشنکو است. پیش از فرایند تجمیع المان‌های تیر، با توجه به چرخش هر تیر در صفحه (ماهیت ۶ ضلعی هر سلول در صفحه‌ی گرافن) ماتریس سختی هر المان در دستگاه مختصات کلی باید محاسبه شود:

$$[\bar{\mathbf{K}}]^e = ([\mathbf{T}]^e)^T [\mathbf{K}]^e [\mathbf{T}]^e \quad (\text{الف } 8)$$

و ماتریس $([\mathbf{T}]^e)^T$ معرف ماتریس دوران برای ایجاد ارتباط میان مولفه‌های جابه‌جایی و چرخش در دستگاه مختصات محلی و دستگاه مختصات کلی است.

جدول ۱ الف. مقدار مولفه‌های جابه‌جایی گره‌های مرزی صفحه‌ی گرافن المان‌بندی شده.

گیردار	$\{\mathbf{U}\}_g = \{u_{\bar{x}}, u_{\bar{y}}, u_{\bar{z}}, \theta_{\bar{x}}, \theta_{\bar{y}}, \theta_{\bar{z}}\}^T = \{\circ\}$
تکیه‌گاه ساده در لبه $\bar{x} = \circ, a$	$u_{\bar{x}} = \circ, u_{\bar{z}} = \circ$
تکیه‌گاه ساده در لبه $\bar{y} = \circ, b$	$u_{\bar{y}} = \circ, u_{\bar{z}} = \circ$
تکیه‌گاه آزاد	مولفه‌های جابه‌جایی گره‌های مرزی هیچ قیدی ندارند.

جرم‌های نقطه‌یی است، برابر است. لذا ماتریس جرم برای هر گره کلی $([M]^{(k)})$ در سازه‌ی نظیر صفحه‌ی گرافن چنین تعریف می‌شود.

$$\begin{aligned}
 m_{jj}^{(k)} &= m, & j &= 1, 2, 3 \\
 m_{jj}^{(k)} &= 0, & j &= 4, 5, 6 \\
 m_{ij}^{(k)} &= 0, & i \neq j, \quad i, j &= 1, \dots, 6
 \end{aligned} \tag{الف ۱۶}$$

بدین ترتیب ماتریس جرم نظیر سازه عبارت است از:

$$[M] = \begin{bmatrix} [M]^{(1)} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & [M]^{(k)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & [M]^{(N)} \end{bmatrix} \tag{الف ۱۷}$$

که در آن N معرف N امین گره در یک صفحه‌ی گرافن N گره‌یی است. به هنگام اعمال شرایط مرزی گیردار و نکیه‌گاه ساده مؤلفه‌های جابه‌جایی هر گره مرزی در یک صفحه‌ی گرافن مستطیلی به ابعاد $a \times b$ مطابق جدول الف ۱۸ تعریف شده است.

در جدول الف ۱۸، $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ معرف دستگاه مختصات کلی مستقر شده بر سازه است و $\{U\}_g = \{u_{\bar{x}}, u_{\bar{y}}, u_{\bar{z}}, \theta_{\bar{x}}, \theta_{\bar{y}}, \theta_{\bar{z}}\}^T$ معرف مؤلفه‌های جابه‌جایی در راستای این سه محور و چرخش حول آنها برای هر گره است. شایان ذکر است گره‌های مرزی ایجاد شده در نتیجه‌ی عیوب تهی‌جای مرزهای آزاد در نظر گرفته شده‌اند.

ماتریس سختی نظیر کل سازه $([K])$ از جمع ماتریس‌های $[K]^{(e)}$ نظیر هر المان حاصل می‌شود. در فضای سه‌بعدی ماتریس $[T]^{(e)}$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$[T]^{(e)} = \begin{bmatrix} t^e & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t^e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t^e & 0 \\ 0 & 0 & 0 & t^e \end{bmatrix} \tag{الف ۱۹}$$

که در آن t^e چنین تعیین می‌شود:

$$t^e = \begin{bmatrix} L_{xy}/L & 0 & Z/L \\ 0 & 1 & 0 \\ -Z/L & 0 & L_{xy}/L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X/L_{xy} & Y/L_{xy} & 0 \\ -Y/L_{xy} & X/L_{xy} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{الف ۱۰}$$

که در آن:

$$X = \bar{x}_2 - \bar{x}_1, \tag{الف ۱۱}$$

$$Y = \bar{y}_2 - \bar{y}_1, \tag{الف ۱۲}$$

$$Z = \bar{z}_2 - \bar{z}_1, \tag{الف ۱۳}$$

$$L = \sqrt{X^2 + Y^2 + Z^2} \tag{الف ۱۴}$$

$$L = \sqrt{X^2 + Y^2} \tag{الف ۱۵}$$

در معادلات الف ۱۱ تا الف ۱۳، $(\bar{x}_1, \bar{y}_1, \bar{z}_1)$ و $(\bar{x}_2, \bar{y}_2, \bar{z}_2)$ مختصات گره‌های ابتدا و انتهای هر المان در دستگاه مختصات کلی $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ است.^[۴۰] نظر به این که المان تیر دوگره‌یی تعریف شده است، تعداد کل گره‌های کلی موجود در صفحه‌ی المان‌بندی شده گرافن، با تعداد کل رئوس شش ضلعی که محل قرارگیری