



## پارامترهای مؤثر در مدل سازی مدول یانگ صفحه گرافن

محمود مهرداد شکریه<sup>۱\*</sup>، زهرا شکریه<sup>۲</sup>، سید مجید هاشمیانزاده<sup>۳</sup>

۱- استاد دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

۲- دانشجوی کارشناسی ارشد دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

۳- دانشیار دانشکده شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

\* تهران، صندوق پستی ۱۳۱۱۴-۱۶۸۴۶، shokrieh@iust.ac.ir

**چکیده-** در این تحقیق تأثیر پارامترهای مختلف بر روی مدل سازی مدول یانگ صفحه گرافن بررسی شده است. از جمله می توان به ضخامت تک لایه گرافن، نوع بارگذاری و شرایط مرزی صفحه گرافن، در نظر گرفتن تأثیر اتم های غیر مجاور بر یکدیگر، نوع المان برای پیوند کربن-کربن، خواص مکانیکی پیوند کربن-کربن و ابعاد صفحه گرافن اشاره کرد. در این تحقیق مشاهده شد که ضخامت تک لایه گرافن و نوع المان در نظر گرفته شده در نرم افزار اجزای محدود برای پیوند کربن-کربن در مدل سازی مدول یانگ صفحه گرافن مؤثر می باشند. ضمناً تفاوت در نوع بارگذاری و شرایط مرزی صفحه گرافن تأثیر چندانی روی مدول یانگ صفحه گرافن نمی گذارد و می توان رفتار صفحه گرافن را ایزوتروپیک در نظر گرفت. همچنین در نظر گرفتن تأثیر اتم های غیر مجاور روی یکدیگر باعث افزایش زمان محاسبه و دقت بیشتر در محاسبات می شود. در نظر گرفتن خواص مکانیکی تیرهای نسبت داده شده به پیوندهای کربن-کربن نیز پارامتر مهمی در مدل کردن مدول یانگ صفحه گرافن می باشد. در خصوص ابعاد صفحه گرافن، مشاهده شد که وقتی طول و عرض صفحه گرافن از یک نانومتر کوچکتر شود، تأثیر ابعاد صفحه گرافن بر روی مدول یانگ صفحه گرافن زیاد می شود.

**کلیدواژه ها:** گرافن، نانو، مدول یانگ، ضخامت، شرایط مرزی، اتصال کربن-کربن.

## Effective parameters in modeling of graphene sheet Young's Modulus

M. M. Shokrieh<sup>1\*</sup>, Z. Shokrieh<sup>2</sup>, S. M. Hashemianzadeh<sup>3</sup>

1- Prof., School of Mech. Eng., Iran Univ. of Sci. and Tech, Tehran, Iran

2- MSc Student, School of Mech. Eng., Iran Univ. of Sci. and Tech, Tehran, Iran

3. Assoc. Prof., Dept. of Chemistry, Iran Univ. of Sci. and Tech., Tehran, Iran

\* P.O.B. 16846-13114, Tehran, Iran. shokrieh@iust.ac.ir

**Abstract-** In this research, the effects of different parameters on simulation of Young's modulus of a Graphene sheet are studied. In simulation of Young's modulus of Graphene sheet, different parameters such as the thickness of a single layer of Graphene, type of loading and boundary conditions, effects of interactions non-neighbor atoms, type of element for carbon-carbon bond, mechanical properties of carbon-carbon bond and the size of the Graphene sheet influence the results. It was found that the thickness of a single layer Graphene and the type of element are effective parameters. Moreover, the type of loading and boundary conditions did not influence the Young's modulus of the Graphene sheet. Therefore, the Graphene sheet can be considered as an isotropic material. Considering the effects of interactions of non-neighbor atoms increases the run-time and improves the accuracy of calculations. Mechanical properties of carbon-carbon bond are important parameters and must be chosen carefully. Also, it has been observed that when the length and width of the Graphene sheet are smaller than one nanometer, the size of Graphene sheet has a great influence on the Young's modulus.

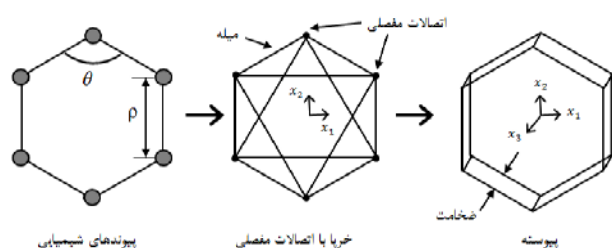
**Keywords:** Graphene, Nano, Young's Modulus, Thickness, Boundary Conditions, Carbon-Carbon Bond.

## ۱- مقدمه

گرافن<sup>۱</sup> به دلیل خواص مکانیکی، انتقال الکترون و مساحت بالا به موضوع جذابی برای محققان تبدیل شده است. وقتی مقادیر کمی از این صفحات نازک کربنی بطور مناسب با پلیمری ترکیب شوند، می‌توانند خواص فیزیکی پلیمر را بطور خاصی بهبود دهند. بدین منظور مطالعات زیادی برای مدل‌سازی و تحلیل رفتار صفحه گرافن صورت گرفته است. محققان زیادی برای بدست آوردن مدول بانگ گرافن از روش آزمایشگاهی استفاده کرده‌اند. فرانک و همکارانش [۱] با استفاده از میکروسکوپ نیروی اتمی<sup>۲</sup> مدول بانگ صفحه گرافن را ۰/۵ تراپاسکال گزارش کرده‌اند، همچنین لی و همکارانش [۲] توسط میکروسکوپ نیروی اتمی، مدول بانگ را برای تک لایه گرافن ۱/۰ تراپاسکال بدست آورده‌اند. گومز و همکارانش [۳] مدول الاستیک تک لایه گرافن را از طریق آزمایش ۰/۲۵ تراپاسکال ثبت کرده‌اند. مقایسه نتایج آزمایشگاهی مختلف نشان می‌دهد که تفاوت زیادی در اعداد ارایه شده توسط محققین مختلف برای مدول الاستیسیته صفحه نانوغرافن وجود دارد. این امر حاکی از عدم دقت روش‌های موجود آزمایشگاهی و در نتیجه عدم وجود روش آزمایشگاهی استاندارد مورد قبول برای اندازه‌گیری خواص مکانیکی در سطح نانوساختارها می‌باشد. علاوه بر اندازه‌گیری‌های آزمایشگاهی، از روش‌های شبیه‌سازی اتمی نیز برای محاسبه مدول بانگ صفحه گرافن استفاده می‌شود. گائو و هائو [۴] در سال ۲۰۰۹ به وسیله دینامیک مولکولی کوانتومی مدول بانگ گرافن آرمچیر<sup>۳</sup> را ۱/۱ تراپاسکال و مدول بانگ گرافن زیگزاگ<sup>۴</sup> را ۰/۶ تراپاسکال گزارش کرده‌اند. روش دیگر در زمینه ساختارهای نانویی که جدیداً زیاد مورد استفاده قرار می‌گیرد، مکانیک ساختار پیوسته اتمی معادل می‌باشد. در این روش المان‌های معمولی مکانیک سازه‌ای مانند میله‌ها، تیرها و پوسته‌ها با خواص مکانیکی مخصوص خودشان برای شبیه‌سازی رفتار استاتیکی و دینامیکی لایه‌های گرافن و نانولوله‌های کربن بکار برده می‌شوند. در سال ۲۰۰۲ اودگارد و همکارانش [۵] روشی را به

منظور شبیه‌سازی مواد در مقیاس نانو و مدل‌سازی آن‌ها با مکانیک محیط پیوسته ارائه کرده‌اند. روش آن‌ها با معادل سازی ساختارهای گسسته مولکولی با مدل‌های پیوسته معادل آن‌ها، به عنوان یک واسط میان شیمی محاسباتی و مکانیک جامدات عمل می‌کند. در این مدل‌سازی، انرژی پتانسیل مولکولی ساختار گسسته با انرژی کرنشی مدل پیوسته برابر قرار داده می‌شود. در این معادل‌سازی یک مدل خرابا به عنوان یک مدل میانی بین مدل‌های گسسته و پیوسته استفاده می‌شود. در شکل ۱ روند این مدل‌سازی را می‌توان مشاهده کرد. در روش پیشنهادی اودگارد و همکارانش، برای هر ساختار خاص با توجه به هندسه آن و نوع بارگذاری و درجه‌ای از دقت که مدنظر باشد، راه حل مناسب برگزیده می‌شود. این محققین در مورد صفحه گرافیت تنها مؤلفه‌های کششی و خمشی پیوندی را در نظر گرفته و از مؤلفه‌های پیچشی، واندروالسی و غیره صرف‌نظر کرده‌اند.

در سال ۲۰۰۳ لی و چو [۶] روشی را برای ارتباط میان شیمی مولکولی و مکانیک سازه‌ای ارائه کردند. در این روش هر اتم کربن بصورت یک گره در نظر گرفته می‌شود و پیوند کووالانس بین هر دو اتم کربن، بصورت یک المان تیر مدل می‌شود. این محققان از نیروهای غیر پیوندی از قبیل واندروالسی و الکتروستاتیکی صرف‌نظر کرده‌اند و روابطی را برای محاسبه مدول‌های کششی و برشی این تیرها بدست آوردند. در سال ۲۰۱۰ شکریه و رفیعی [۷] با الهام گرفتن از سازه‌های لانه زنبوری شکل بکار گرفته شده به‌عنوان هسته در پنل‌های ساندویچی به محاسبه خواص مکانیکی نانولوله‌ها پرداختند. آن‌ها برای مدل‌سازی برهم کنش پیوندی اتم‌های کربن، به کمک مکانیک سازه‌ها از المان تیر استفاده کردند.



شکل ۱ روند معادل‌سازی ساختار مولکولی گرافیت با مدل پیوسته [۵]

1. Graphene
2. Atomic Force Microscope
3. Armchair
4. Zigzag

همکارانش [۱۱] مدول سطحی ورق گرافن را معادل  $0/362$  تراپاسکال نانومتر گزارش کرده‌اند. در جدول ۱ مقادیر ضخامت و مدول بانگ سطحی ارائه شده توسط محققین مختلف را می‌توان مشاهده کرد. طبق این جدول مشاهده می‌شود که با تقسیم مدول بانگ سطحی بر ضخامت، مدول بانگ‌های گزارش شده برای صفحه گرافن در منابع مختلف، بسیار متفاوت می‌باشد. در نتیجه استفاده از مدول بانگ سطحی می‌تواند پارامتر مناسبی برای مقایسه نتایج باشد. با دقت در جدول ۱ می‌توان دریافت که محققانی که از روش دینامیک مولکولی استفاده کرده‌اند، نتایج متفاوتی را برای مدول بانگ سطحی ارائه داده‌اند. یکی از دلایل این تفاوت، انتخاب پتانسیل‌های برهم‌کنش بین اتمی مختلف می‌باشد. به دلیل بکارگیری مبحث مکانیک محیط پیوسته در این تحقیق و عدم ورود به مبحث دینامیک مولکولی، از ذکر جزئیات صرف‌نظر شده است.

### ۳- تأثیر نوع بارگذاری و شرایط مرزی

در این قسمت به تأثیر نوع بارگذاری و شرایط مرزی صفحه گرافن در نرم‌افزار اجزای محدود، روی مقدار مدول الاستیسیته پرداخته شده است. در سال ۲۰۱۰ شکرپه و رفیعی [۷] با در نظر گرفتن  $0/34$  نانومتر برای ضخامت صفحه گرافن، از طریق روش عددی مدول بانگ صفحه گرافن را محاسبه و  $1/14$  تراپاسکال برای گرافن آرمچیر و  $1/09$  تراپاسکال را برای گرافن زیگزاک گزارش کرده‌اند. این محققان به علت اختلاف اندک این دو مدول بانگ، رفتار ایزوتروپیک برای صفحه گرافن ذکر کرده‌اند. این در حالی است که گائو و هائو [۴] در سال ۲۰۰۹ به وسیله دینامیک مولکولی کوانتومی مدول بانگ گرافن آرمچیر را  $1/1$  تراپاسکال و مدول بانگ گرافن زیگزاک را  $0/6$  تراپاسکال گزارش کرده‌اند. این محققان ضخامت صفحه گرافن را  $0/335$  نانومتر در نظر گرفته‌اند. در این تحقیق برای نمونه چهار نوع مختلف بارگذاری در شکل ۲ (الف تا د) در نرم‌افزار مدل شده و نتایج آن در جدول ۲ دسته‌بندی شده است. لازم به ذکر است که شکل‌های ۲-الف و ب بیانگر گرافن آرمچیر و شکل‌های ۲-ج و د بیانگر گرافن زیگزاک می‌باشند.

در شکل‌های ۲-الف و ج، بار گسترده روی صفحه گرافن اعمال شده و در شکل‌های ۲-ب و د، بار به‌صورت نقطه‌ای

شکرپه و رفیعی مقدار  $1/04$  تراپاسکال را برای مدول بانگ صفحه گرافن از طریق رابطه بالا بدست آوردند. آن‌ها از طریق روش عددی نیز مدول بانگ صفحه گرافن را محاسبه کرده و رفتار صفحه گرافن را ایزوتروپیک گزارش کردند. چانگ و گائو [۸] مدول بانگ صفحه گرافیت را  $1/06$  تراپاسکال گزارش کرده و آنها نیز رفتار صفحه گرافیت را ایزوتروپیک فرض کرده‌اند.

بر اساس مکانیک سازه‌ها و در نظر گرفتن المان تیر برای برهم‌کنش پیوندهای کربن-کربن، در مدل‌سازی صفحه گرافن پارامترهای مختلفی روی مدول بانگ صفحه گرافن تأثیرگذار هستند که از جمله می‌توان به ضخامت تک لایه گرافن، نوع بارگذاری و شرایط مرزی صفحه گرافن، در نظر گرفتن تأثیر اتم‌های غیرمجاور بر یکدیگر، نوع المان استفاده شده برای پیوند کربن-کربن، خواص مکانیکی پیوند کربن-کربن و ابعاد صفحه گرافن اشاره کرد. تفاوت‌های موجود در نتایج بدست آمده در تحقیقات مختلف در مدل‌سازی صفحه گرافن نیز به دلیل همین پارامترها و عدم توجه به تأثیر آنها در فرآیند مدل‌سازی می‌باشد. در این تحقیق تأثیر پارامترهای مختلف بر روی مدل‌سازی مدول بانگ سطحی صفحه گرافن بررسی شده است. در ادامه به جزئیات تأثیر هر یک از این عوامل پرداخته شده است. در این تحقیق از نرم افزار اجزای محدود اباکوس [۹] برای مدل‌سازی استفاده شده است.

### ۲- تأثیر ضخامت تک لایه گرافن

مقدار در نظر گرفته شده برای ضخامت لایه گرافن روی نتایج مدل‌سازی از جمله مدول بانگ صفحه گرافن تأثیرگذار است. با بررسی مقالات گوناگون، ملاحظه می‌شود که مقادیر متفاوتی برای ضخامت ورق گرافن ارائه شده است. بیشتر محققان از فاصله بین لایه‌های ورق‌های گرافن در گرافیت که معادل  $0/34$  نانومتر می‌باشد، استفاده می‌کنند. یاکوبسن و همکارانش [۱۰]، مقدار  $0/66$  نانومتر را گزارش کرده‌اند. اودگارد و همکارانش [۵] مقادیر  $0/68$  و  $0/57$  نانومتر را بدست آورده‌اند. برخی از پژوهشگران نظیر چانگ و گائو [۸]، تعریف جدیدی از مدول بانگ تحت عنوان مدول بانگ سطحی ارائه کرده‌اند که از حاصلضرب مدول بانگ متداول در ضخامت آن بدست می‌آید. این تعریف با سفتی داخل صفحه‌ای ورق‌ها و پوسته‌ها در مکانیک جامدات تطابق دارد. با توجه به این تعریف، ونگ و

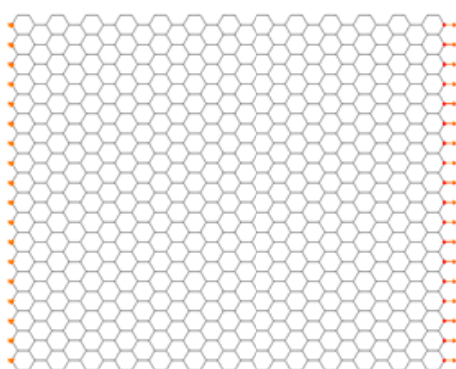
#### ۴- تأثیر در نظر گرفتن اثر اتم‌های غیرمجاور بر یکدیگر

در مدل‌سازی صفحه گرافن می‌توان علاوه بر تأثیر اتم‌های کربن مجاور، تأثیر اتم‌های غیر مجاور را نیز در نظر گرفت. هر اتم کربن دارای چهار ظرفیت می‌باشد، این بدان معناست که اتم کربن می‌تواند چهار پیوند کووالانس برقرار نماید.

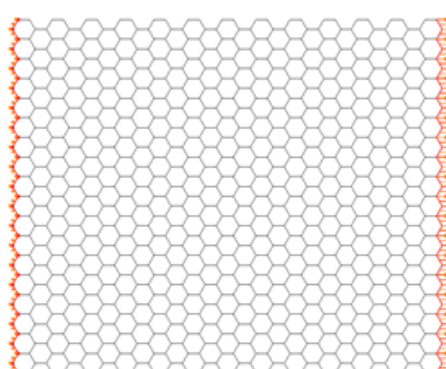
اعمال گشته است. ضخامت صفحه گرافن  $0/34$  نانومتر انتخاب شده است. با توجه به جدول ۲ اختلاف زیادی بین مدول بانگ صفحه گرافن آرمچیر و زیگزاگ دیده نمی‌شود و می‌توان رفتار صفحه گرافن را ایزوتروپیک در نظر گرفت. همچنین نوع بار گسترده و نقطه‌ای نیز تأثیر زیادی در مدول بانگ نمی‌گذارد.

جدول ۱ مقادیر مختلف ضخامت و مدول بانگ سطحی ارائه شده توسط محققین مختلف

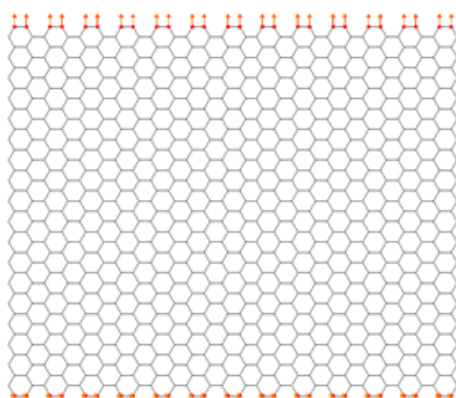
محقق	روش حل	مدول بانگ سطحی (TPa nm)	ضخامت (nm)
یاکوبسن و همکارانش [۱۰]	دینامیک مولکولی	$0/363$	$0/066$
سین و همکارانش [۱۲]	مدل اتصال محکم	$0/377$	$0/074$
کودین و همکارانش [۱۳]	محاسبات اب اینیشیو	$0/345$	$0/089$
لی و همکارانش [۶]	مکانیک سازه‌ای	$0/343$	$0/34$
لو و همکارانش [۱۴]	دینامیک مولکولی	$0/332$	$0/34$
هرناندز و همکارانش [۱۵]	دینامیک مولکولی	$0/416$	گزارش نشده
جین و همکارانش [۱۶]	دینامیک مولکولی	$0/420$	$0/34$
چانگ و همکارانش [۸]	دینامیک مولکولی	$0/360$	$0/34$
وو و همکارانش [۱۷]	دینامیک مولکولی	$0/297$	$0/28$
تسرپس و همکارانش [۱۸]	مکانیک سازه‌ای	$0/350$	$0/34$



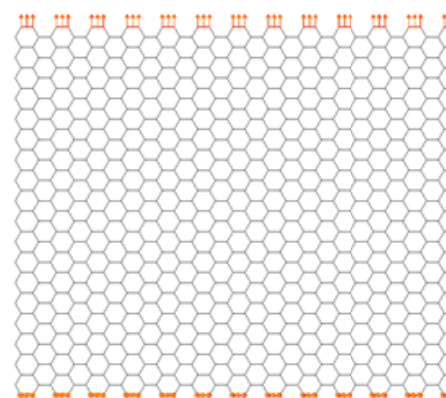
(ب)



(الف)



(د)



(ج)

شکل ۲ انواع مختلف شرایط مرزی و بارگذاری در نرم‌افزار اجزای محدود

می‌شود که نوع المان تیر در نظر گرفته شده برای پیوند کربن-کربن در مدول یانگ صفحه گرافن تأثیرگذار است. در جدول ۴ و ۵ این تفاوت مشهود است. ضخامت صفحه گرافن  $0.34$  نانومتر در نظر گرفته شده است.

مشاهده می‌شود با در نظر گرفتن المان تیر دو گرهی مرتبه سه برای پیوند کربن-کربن، بیشترین مدول یانگ برای هر دو نوع گرافن زیگزاگ و آرمچیر بدست می‌آید و نزدیک به ۱ تراپاسکال می‌باشد. همچنین المان تیر سه گرهی مرتبه دو، کمترین مدول یانگ را نتیجه می‌دهد و المان تیر دو گرهی خطی مقداری بین این دو بدست می‌دهد.

جدول ۲ نتایج مدول یانگ صفحه گرافن برای انواع مختلف

بارگذاری و شرایط مرزی		
مدول یانگ (TPa)	مدول یانگ سطحی (TPa nm)	نوع بارگذاری
۰/۸۰	۰/۲۷۳	الف
۰/۷۷	۰/۲۶۲	ب
۰/۷۸	۰/۲۶۸	ج
۰/۷۸	۰/۲۶۷	د

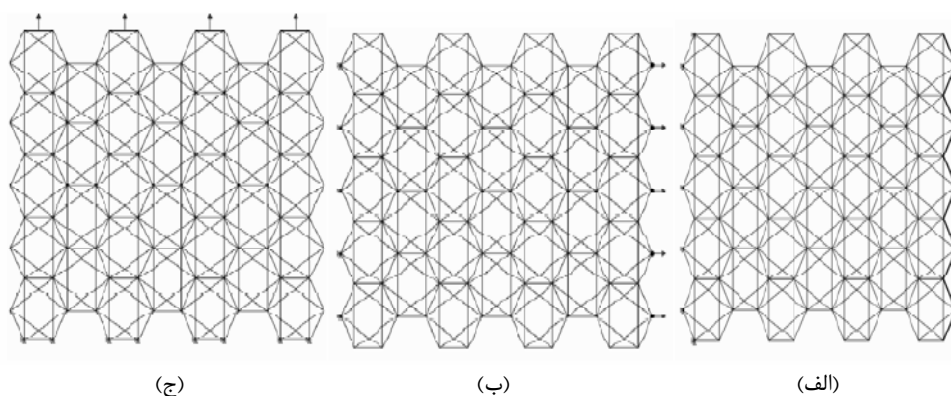
جدول ۳ مدول یانگ صفحه گرافن با در نظر گرفتن تأثیر اتم‌های

غیر مجاور		
مدول یانگ (TPa)	مدول یانگ سطحی (TPa nm)	نوع بارگذاری
۰/۹۶	۰/۳۲۹	الف
۰/۸۸	۰/۳۰۲	ب
۰/۹۵	۰/۳۲۶	ج

اگر تأثیر برهم کنش اتم‌های غیرمجاور در نظر گرفته نشود، هر اتم کربن سه پیوند کووالانس برقرار کرده و یک ظرفیت خالی دارد. در نتیجه این یک ظرفیت را می‌تواند با هریک از اتم‌های غیر مجاور برقرار کند. در هر شش ضلعی سه اتم غیر مجاور برای هر اتم کربن وجود دارد. در تحقیق حاضر به دلیل اینکه اتم غیر مجاور سوم در فاصله دورتری قرار گرفته، از احتمال برقرار شدن پیوند برای این اتم صرف‌نظر شده است. در مدل‌سازی صفحه گرافن تأثیر اتم‌های غیر مجاور را می‌توان به وسیله تیرهایی با سفتی کمتر مدل کرد. در این تحقیق، در شکل ۳ انواع مختلف بارگذاری برای صفحه گرافن نشان داده شده است. ابعاد صفحه  $1/562 \times 1/229$  نانومتر مربع می‌باشد. جدول ۳ بیانگر مدول یانگ صفحه گرافن با در نظر گرفتن تأثیر اتم‌های غیر مجاور می‌باشد. مدول یانگ پیوند کربن-کربن مجاور  $5/78$  تراپاسکال و مدول یانگ پیوند کربن-کربن غیر مجاور  $0/33$  تراپاسکال [۱۹] در نظر گرفته شده است. با توجه به جدول ۳ مشاهده می‌شود که با در نظر گرفتن تأثیر اتم‌های غیر مجاور، مقادیر مدول یانگ سطحی صفحه گرافن بیشتر به مقادیر ارائه شده در منابع (جدول ۲) نزدیک می‌باشد. همچنین مدول الاستیسیته صفحه گرافن خیلی به ۱ تراپاسکال نزدیک می‌شود. البته لحاظ کردن این پارامتر در مدل‌سازی باعث افزایش زمان محاسبه می‌گردد.

## ۵- تأثیر نوع المان

با توجه به اینکه برای مدل‌سازی صفحه گرافن هر پیوند کربن-کربن بصورت یک تیر در نظر گرفته می‌شود، در مدل‌سازی صفحه گرافن در نرم‌افزار اجزای محدود مشاهده



شکل ۳ انواع مختلف شرایط مرزی و بارگذاری اعمال شده روی صفحه گرافن

با وجود اینکه المان تیر دو گرهی مرتبه سه مدول یانگ را نزدیک ۱ تراپاسکال نتیجه می‌دهد ولی با توجه به واقعیت فیزیکی موقعیت اتم‌ها نسبت به یکدیگر و اینکه اتم‌ها همیشه در کوتاهترین مسیر ممکن بهم نیرو وارد می‌کنند، استفاده از المان تیر دو گرهی خطی فیزیکی‌تر است.

#### ۶- تأثیر خواص مکانیکی پیوند کربن-کربن

با توجه به اینکه پیوند کربن-کربن مانند یک تیر در نظر گرفته می‌شود، در مقالات مختلف بر اساس روابط و ثابت‌های نیرویی استفاده شده، برای این پیوند خواص مکانیکی متفاوتی در نظر گرفته شده است. خواصی که به پیوندهای کربن-کربن نسبت داده می‌شود، شامل طول، قطر، مدول یانگ و ضریب پواسون پیوند می‌باشد. برای نمونه در جدول ۶ می‌توان خواص مکانیکی متفاوت ارائه شده توسط چند مرجع را مشاهده کرد. با توجه به جدول ۶ می‌توان دریافت که مقادیر ضریب پواسون نسبت داده شده به پیوندهای کربن-کربن بسیار متفاوت است. در مرجع [۷] با در نظر گرفتن ۰/۱۴۲ و ۰/۱۴۶ و نانومتر به ترتیب برای طول و قطر پیوند، مدول الاستیک و مدول برشی پیوند کربن-کربن به ترتیب ۵/۷۸ و ۰/۸۷۱ تراپاسکال ذکر شده ولی مقدار ضریب پواسون ذکر نشده است

#### جدول ۴ تأثیر نوع المان تیر بر مدول یانگ صفحه گرافن آرمچیر

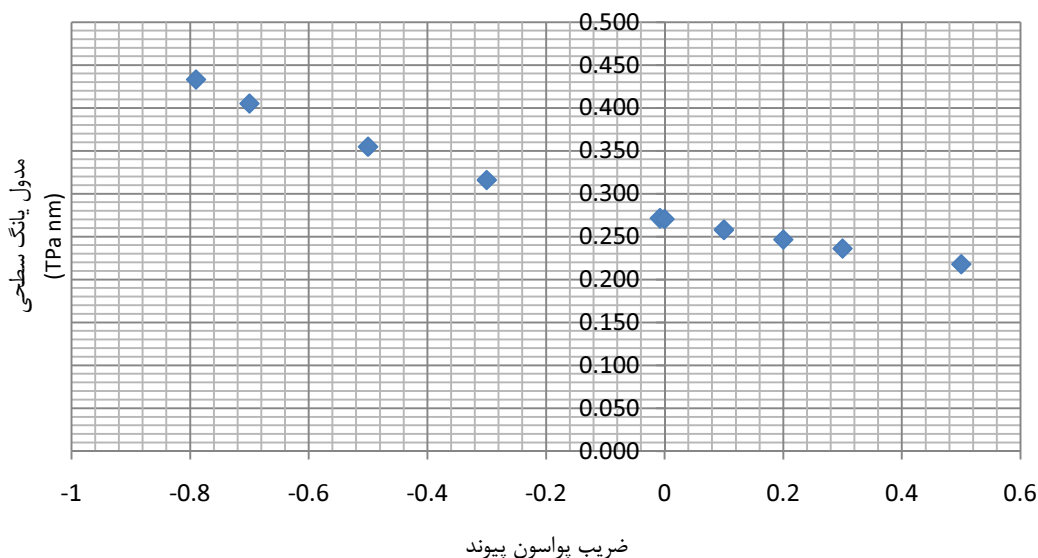
نوع المان	مدول یانگ سطحی (TPa nm)	مدول یانگ (TPa)
المان تیر دوگرهی خطی	۰/۲۷۳	۰/۸۰
المان تیر دوگرهی مرتبه سه	۰/۳۷۱	۱/۰۹
المان تیر سه گرهی مرتبه دو	۰/۲۴۷	۰/۷۲

#### جدول ۵ تأثیر نوع المان تیر بر مدول یانگ صفحه گرافن زیگزآگ

نوع المان	مدول یانگ سطحی (TPa nm)	مدول یانگ (TPa)
المان تیر دوگرهی خطی	۰/۲۶۸	۰/۷۸
المان تیر دوگرهی مرتبه سه	۰/۳۶۵	۱/۰۷
المان تیر سه گرهی مرتبه دو	۰/۲۴۱	۰/۷۰

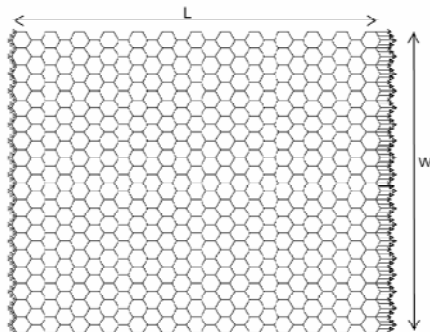
#### جدول ۶ خواص مکانیکی ارائه شده برای پیوند کربن-کربن در مراجع گوناگون

مدل نیرویی	طول پیوند (nm)	قطر پیوند (nm)	ضریب پواسون پیوند	مرجع
امبر	۰/۱۳۵	۰/۹۹	۰/۴۵۵	[۲۰]
امبر	۰/۱۳۵	۰/۰۸۲	-۰/۰۰۸	[۲۰]
امبر	۰/۱۳۵	۰/۵۵	-۰/۵۵۶	[۲۰]
گزارش نشده	۰/۱۴۰	۰/۰۴۲	۰/۳	[۱۹]
امبر	۰/۱۴۲	۰/۱۴۶	گزارش نشده	[۷]



شکل ۴ مدول یانگ سطحی بر حسب ضریب پواسون پیوند

نانومتر برای ضخامت لایه گرافن می‌توان مدول یانگ را نیز محاسبه کرد.



شکل ۵ طول و عرض صفحه گرافن

جدول ۷ مقادیر مدول یانگ برای اندازه‌های مختلف گرافن آرمچیر موجود در منبع [۲۱]

مدول یانگ (TPa)	W (nm)	L (nm)
۰/۹۲۹	۷/۱۳۷	۶/۲۵۲
۰/۹۳۲	۱۰/۵۸۴	۱۰/۵۱۵
۰/۹۳۳	۱۹/۹۳۶	۲۱/۱۷۳

جدول ۸ مدول یانگ سطحی برای اندازه‌های متفاوت صفحه گرافن

مدول یانگ (TPa)	مدول یانگ سطحی (TPa nm)	طول (nm)	عرض (nm)
۰/۷۹	۰/۲۷۰	۱۰/۵۰	۸/۸۵
۰/۷۸	۰/۲۶۷	۱۰/۵۰	۴/۴۲
۰/۸۰	۰/۲۷۳	۵/۳۹	۴/۴۲
۰/۸۰	۰/۲۷۴	۲/۸۴	۴/۴۲
۰/۸۱	۰/۲۷۸	۲/۸۴	۲/۲۱
۰/۹۷	۰/۳۳۰	۰/۷۱	۰/۹۸

مشاهده می‌شود که مدول یانگ سطحی با تغییر طول و عرض صفحه گرافن تغییر زیادی نمی‌کند ولی وقتی مساحت صفحه خیلی کوچک می‌شود و طول و عرض صفحه گرافن از یک نانومتر کمتر می‌شود (۰/۷۱ X ۰/۹۸)، مدول یانگ ناگهان افزایش می‌یابد. این پدیده به تأثیر اندازه<sup>۱</sup> معروف است. برای بررسی این پدیده باید از روش‌های الاستیسیته غیر محلی<sup>۲</sup> یا

اگر برای بدست آوردن ضریب پواسون پیوند از رابطه ۱ استفاده شود، مقدار ۲/۳۱ بدست می‌آید.

$$\nu = -1 + E / 2G \quad (1)$$

در حالیکه با استفاده از معادلات موجود در مرجع [۲۰] و در نظر گرفتن طول و قطر پیوند یاد شده، ضریب پواسون ۰/۷۹- برای پیوند کربن-کربن بدست می‌آید. با در نظر گرفتن المان دو گرهی مرتبه سه در نرم افزار اجزای محدود با تغییر ضریب پواسون، تغییری در مدول یانگ سطحی صفحه گرافن ایجاد نمی‌شود ولی اگر برای پیوند کربن-کربن از المان تیر دو گرهی خطی استفاده شود، مدول یانگ سطحی تابعی از ضریب پواسون خواهد بود. در شکل ۴ مقادیر مدول یانگ سطحی صفحه گرافن تحت بارگذاری نوع a را برای ضریب پواسون‌های مختلف می‌توان مشاهده کرد. با توجه به مدول‌های یانگ سطحی ارائه شده توسط محققین در جدول ۱ و نمودار موجود در شکل ۴، به نظر می‌رسد ضریب پواسون مناسب برای تیر شبیه‌سازی شده برای پیوند کربن-کربن در محدوده بین ۰/۷۵- تا ۰/۱ باشد.

## ۷- تأثیر ابعاد صفحه گرافن

تعداد اتم‌های کربن در نظر گرفته شده در صفحه گرافن یا به عبارت دیگر اندازه صفحه گرافن نیز پارامتری است که باید در مدل‌سازی به آن دقت شود. در مقاله‌های گوناگون اندازه‌های متفاوتی برای صفحه گرافن در نظر گرفته شده است. اندازه‌ای که برای صفحه گرافن در نظر گرفته می‌شود باید با واقعیت فیزیکی نیز سازگار باشد. اسکارپا و همکارانش [۲۰] ابعاد ۶/۸۸۷ X ۷/۹۹۳ نانومتر مربع را برای صفحه گرافن در نظر گرفته‌اند. شکل ۵ طول و عرض صفحه گرافن را مشخص می‌کند. مئو و روسی [۲۱] نیز برای صفحه گرافن مساحت‌های متفاوتی را در نظر گرفته‌اند. در جدول ۷ می‌توان مقادیر مدول یانگ گرافن آرمچیر را که توسط این محققان برای اندازه‌های مختلف صفحه گرافن بدست آورده شده، مشاهده کرد. در این مرجع ضخامت لایه گرافن ۰/۳۴ نانومتر ذکر شده است.

در جدول ۸ می‌توان مدول یانگ سطحی را که در این تحقیق اندازه‌گیری شده، برای اندازه‌های متفاوت طول و عرض صفحه گرافن آرمچیر مشاهده کرد. با در نظر گرفتن ۰/۳۴

1. Size Effect
2. Nonlocal Elasticity

انتخاب المان تیر دو گرهی خطی برای پیوند کربن-کربن، مدول بانگ سطحی تابعی از ضریب پواسون خواهد بود. در خصوص ابعاد صفحه گرافن، مشاهده شد که وقتی طول و عرض صفحه گرافن از یک نانومتر کوچکتر شود، تأثیر ابعاد صفحه گرافن بر روی مدول بانگ سطحی زیاد می‌شود. در نظر گرفتن نتایج بدست آمده در این تحقیق، می‌تواند منجر به مدل‌سازی صحیح‌تر مدول بانگ تک لایه گرافن شود.

## ۹- مراجع

- [1] Frank I.W., Tanenbaum D.M., Van der Zande A.M. and McEuen P.L., "Mechanical Properties of Suspended Graphene Sheets", *J. Vac. Sci. Technol B*, Vol. 25, No. 6, 2007, pp. 2558-2561.
- [2] Lee C., Wei X., Kysar J.W. and Hone J., "Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene", *Science*, Vol. 321, No. 5887, 2008, pp. 385-388.
- [3] Gomez-Navarro C., Burghard M. and Kern K., "Elastic Properties of Chemically Derived Single Graphene Sheets", *Nano Lett*, Vol. 8, No. 7, 2008, pp. 2045-2049.
- [4] Gao Y. and Hao P., "Mechanical Properties of Monolayer Graphene Under Tensile and Compressive Loading", *Physica E*, Vol. 41, No. 8, 2009, pp. 1561-1566.
- [5] Odegard G.M., Gates T.S., Nicholson L.M. and Wise K.E., "Equivalent-Continuum Modeling of Nano-Structured Materials", *Comp Sci and Tech*, Vol. 62, No. 14, 2002, pp. 1869-1880.
- [6] Li C. and Chou T-W., "A Structural Mechanics Approach for the Analysis of Carbon Nanotubes", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 40, 2003, pp. 2487-2499.
- [7] Shokrieh M.M. and Rafiee R., "Prediction of Young's Modulus of Graphene Sheets and Carbon Nanotubes using Nanoscale Continuum Mechanics Approach", *Materials and Design*, Vol. 31, No. 2, 2010, pp. 790-795.
- [8] Chang T. and Gao H., "Size-Dependent Elastic Properties of a Single-Walled Carbon Nanotube Via a Molecular Mechanics Model", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 51, No. 6, 2003, pp. 1059-1074.
- [9] ABAQUS, Standard User's Manual Version 6.10, Hibbit, Karlsson, Sorensen, Inc., Pawtucket, R.I, 2011.
- [10] Yakobson B.I., Brabec C.J. and Bernholc J., "Nanomechanics of Carbon Tubes: Instabilities Beyond Linear Response", *Phys Rev Lett*, Vol. 76, No. 14, 1996, pp. 2511-2514.

دینامیک مولکولی<sup>۱</sup> استفاده شود. با توجه به استفاده از روش مکانیک محیط پیوسته در این تحقیق، بررسی جزئیات موضوع فوق از حوزه مورد بحث در این مقاله خارج است.

## ۸- نتیجه‌گیری

گرافن، تقویت کننده چند منظوره‌ای است که می‌تواند به‌عنوان یک پرکننده با در صد ترکیب حجمی اندک، خواص الکتریکی، گرمایی، مکانیکی و نفوذناپذیری گازی پلیمرها را بهبود دهد. بدین منظور مطالعات زیادی برای مدل‌سازی گرافن و تحلیل رفتار صفحه گرافن صورت گرفته است. بر اساس مکانیک سازه‌ها و در نظر گرفتن المان تیر برای برهم کنش پیوندهای کربن-کربن، در مدل‌سازی صفحه گرافن پارامترهای مختلفی روی نتایج مدل‌سازی تأثیرگذار هستند. از جمله می‌توان به ضخامت تک لایه گرافن، نوع بارگذاری و شرایط مرزی صفحه گرافن، در نظر گرفتن تأثیر اتم‌های غیرمجاور بر یکدیگر، نوع المان استفاده شده برای پیوند کربن-کربن، خواص مکانیکی پیوند کربن-کربن و ابعاد صفحه گرافن اشاره کرد. در این تحقیق درجه اهمیت هر یک از این پارامترها به تفصیل بررسی شد. به دلیل اینکه ضخامت صفحه گرافن در مدول بانگ آن تأثیر می‌گذارد، از پارامتر مدول بانگ سطحی برای ارزیابی نتایج استفاده شد. مشاهده شد که تفاوت نوع بارگذاری صفحه گرافن تأثیر چندانی روی مدول بانگ سطحی صفحه گرافن نمی‌گذارد و می‌توان رفتار صفحه گرافن را ایزوتروپیک در نظر گرفت. پارامتر دیگری که روی رفتار صفحه گرافن تأثیرگذار است، در نظر گرفتن تأثیر اتم‌های غیر مجاور روی یکدیگر به وسیله تیری با سفتی کمتر می‌باشد که باعث افزایش زمان و دقت بیشتر در محاسبه مدول بانگ سطحی است. یکی از پارامترهای مؤثر در نتایج صفحه گرافن، نوع المان در نظر گرفته شده در نرم افزار اجزای محدود برای پیوند کربن-کربن می‌باشد. المان دو گرهی مرتبه سه مدول بانگ سطحی بزرگتری نسبت به المان دو گرهی خطی ایجاد می‌کند ولی استفاده از المان دو گرهی خطی به واقعیت فیزیکی نزدیک‌تر است. در نظر گرفتن خواص مکانیکی تیرهای نسبت داده شده به پیوندهای کربن-کربن، نیز پارامتر مهمی در مدل کردن صفحه گرافن می‌باشد. دیده شده که با



- [17] Wu Y., Zhang X., Leung A.Y.T. and Zhong W., "An Energy-Equivalent Model on Studying the Mechanical Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes", *Thin-Walled Structures*, Vol. 44, No. 6, 2006, pp. 667-676.
- [18] Tserpes K.I. and Papanikos P., "Finite Element Modeling of Single-Walled Carbon Nanotubes", *Composites Part B*, Vol.36, No.5, 2005, pp. 468-477.
- [19] NadimNahas M. and Abd-Rabou M., "Finite Element Modeling of Carbon Nanotubes", *International Journal of Mechanical & Mechatronics IJMME-IJENS*, Vol.10, No.3, 2010, pp. 71-91.
- [20] Scarpa F., Adhikari S. and SrikanthaPhani A., "Effective Elastic Mechanical Properties of Single Layer Graphene Sheets", *Nanotechnology*, Vol.20, No.6, 2009, pp. 11.
- [21] Meo M. and Rossi M., "Prediction of Young's Modulus of Single Wall Carbon Nanotubes by Molecular-Mechanics Based Finite Element Modeling", *Composites Science and Technology*, Vol.66, 2006, pp. 1597-1605.
- [11] Wang Q., "Effective in-Plane Stiffness and Bending Rigidity of Armchair and Zigzag Carbon Nanotubes", *Int J of Solids and Struct*, Vol. 41, No. 20, 2004, pp. 5451-5461.
- [12] Xin Z., Jianjun Z. and Zhong-can O.Y., "Strain Energy and Young's Modulus of Single-Wall Carbon Nanotubes Calculated from Electronic Energy-Band Theory", *Physical Review B*, Vol.62, No.20, 2000, pp. 13692-13696.
- [13] Kudin K.N., Scuseria G.E. and Yakobson B.I., "C2F, BN, and C Nanoshell Elasticity from Ab Initio Computations", *Physical Review B*, Vol.64, No.235406, 2001, pp. 1-10.
- [14] Lu J.P., "Elastic Properties of Carbon Nanotubes and Nanoropes", *Physical Review Letters*, Vol. 79, No. 7, 1997, pp. 1297-1300.
- [15] Hernández E., Goze C., Bernier P. and Rubio A., "Elastic Properties of C and BxCyNz Composite Nanotubes", *Physical Review Letters*, Vol. 80, No. 20, 1998, pp. 4502-4505.
- [16] Jin Y. and Yuan F.G., "Simulation of Elastic Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes", *Composites Science and Technology*, Vol. 63, No. 11, 2003, pp. 1507-1515.