

توسعه روش المان محدود مقیاس اتمی بر مبنای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای بررسی رفتار مکانیکی گرافن

محمد مهدی ملکوتی¹, عباس منتظری^{2*}

1- دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

2- استادیار، دانشکده مهندسی و علم مواد، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

* تهران، صندوق پستی 19395-1999، a_montazeri@kntu.ac.ir

چکیده

با توجه به دقت و اعتبار روش‌های مبتنی بر رفتار اتمی مانند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD)، امروزه این روش‌ها نقش بسیار مهمی در زمینه مدل‌سازی ورقه‌های تک لایه گرافن ایفا می‌کنند. استفاده از این روش‌ها به دلیل هزینه‌های محاسباتی بالا تنها محدود به سیستم‌های با اندازه کوچک است. علاوه بر این، با توجه به طبیعت گسسته گرافن، از روش‌های مبتنی بر مکانیک محیط پیوسته نمی‌توان برای مطالعه ویژگی‌های مکانیکی آن استفاده کرد. برای غلبه بر این مساله، در این پژوهش، روش جدید المان محدود در مقیاس اتمی (AFEM) براساس پتانسیل ترسوف-برنر توسعه داده است. بهره‌وری روش پیشنهادی از لحاظ دقت و سرعت با استفاده از یک مثال عددی برای گرافن و مقایسه نتایج با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان داده است. مقایسه نتایج نشان دهنده دقت بسیار بالای روش پیشنهادی است. این در حالی است که سرعت این روش تقریباً 100 برابر روش دینامیک مولکولی است. همچنین برای درک بهتر روش، تأثیر عوامل مؤثری همچون طول نخستین پیوند در ساختارهای غیرتعادلی و نیز تعداد اتم‌ها بر سرعت شبیه‌سازی بررسی شده است. تاکنون در تمامی مطالعات انجام شده در حوزه ارزیابی رفتار مکانیکی نانوساختارها بر مبنای روش AFEM، شرایط مرزی دورهای درنظر گرفته نشده است. در همین راستا برای اعمال شرایط مرزی دورهای در روش AFEM، روش یادشده توسعه داده است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که تأثیر روش المان محدود مقیاس اتمی بدون لحاظ کردن شرایط مرزی دورهای، اختلاف بسیاری با نتایج دینامیک مولکولی دارد.

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 19 دی 1394

پذیرش: 30 بهمن 1394

ارائه در سایت: 07 فروردین 1395

کلید واژگان:

گرافن، روش المان محدود در مقیاس اتمی

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

شرایط مرزی دورهای

رفتار مکانیکی

Nanomechanics analysis of graphene via development of an MD-based AFEM

Mohammad Mehdi Malakouti¹, Abbas Montazeri^{2*}

1- Faculty of Mechanical Engineering, K.N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran

2- Faculty of Materials Science and Engineering, K.N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran

* P.O.B. 19395-1999, Tehran, Iran, a_montazeri@kntu.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper

Received 09 January 2016

Accepted 19 February 2016

Available Online 26 March 2016

Keywords:

Graphene, Atomic scale finite element method (AFEM)
Molecular dynamics simulation
Periodic boundary conditions
Mechanical behavior

ABSTRACT

Due to their accuracy and reliability, atomistic-based methods such as molecular dynamics (MD) simulations have played an essential role in the field of predictive modeling of single layered graphene sheets (SLGSs). However, due to the computational costs, applications of these methods are limited to small systems. Additionally, according to the discrete nature of SLGSs, conventional continuum-based methods cannot be utilized to study the mechanical characteristics of them. To overcome these issues, here, a new Atomic-scale Finite Element Method (AFEM) based on the Tersoff-Brenner potential has been developed. Efficiency of the proposed method is evaluated through a numerical example analyzed by both the proposed method and MD simulation. The results show that the computational cost is much reduced (~100 times), while the accuracy of MD simulation is kept. Furthermore, the effects of initial C-C bond length and number of atoms on the speed of the proposed method is investigated. To mimic the MD simulation completely, periodic boundary conditions have been implemented in the extended AFEM. It is demonstrated that there is a noticeable deviation from MD results without considering this type of boundary condition.

برجسته الکترونیکی، مکانیکی، حرارتی گرافن و همچنین خواص منحصر به فردش به عنوان یک عامل تقویت‌کننده در زمینه نانوکامپیویزیت اختصاص داده شده است [4-2]. محققان همواره سعی نموده‌اند که با استفاده از تئوری‌های جدید و در عین حال روش‌های ساده‌تر به نتایج دقیق‌تری دست پیدا کنند. تاکنون چندین تلاش تجربی برای اندازه‌گیری مدول یانگ گرافن

1- مقدمه

با کشف روش تولید ورقه‌های تک لایه گرافن¹ از گرافیت² با استفاده از روش لایه‌برداری توسعه یافته [1]. این ماده توجه دانشمندان بسیاری را به خود جلب کرده است. در این راستا، تلاش‌های تحقیقاتی زیادی به کشف خواص

¹ Graphene

² Graphite

$$E_{\text{tot}}(x) = U_{\text{tot}}(x) - \sum_{i=1}^N \bar{F}_i \cdot x_i \quad (1)$$

ترم نخست عبارت سمت راست U_{tot} انرژی ذخیره شده داخلی کل برای یک سیستم شامل N ذره و ترم دوم سمت راست \bar{F}_i نیروی خارجی (در صورت وجود) است. با توجه به این که انرژی پتانسیل تابعی از موقعیت اتمها (x) است، می‌توان آن را به صورت دو ذره‌ای مانند پتانسیل لنارد-جونز یا چند ذره‌ای مانند مورس، ترسوف-برنر و ... که به اتم‌های خارج پیوندی نیز وابسته است، در نظر گرفت. در پژوهش کنونی برای مدل‌سازی پیوند کوالانسی کربن-کربن موجود در ساختار گرافن، پتانسیل چند ذره‌ای ترسوف-برنر [10] درنظر گرفته شده است. ساختار کلی انرژی پتانسیل یادشده به صورت رابطه (2) است.

$$V(r_{ij}) = [V^R(r_{ij}) - \bar{b}_{ij}V^A(r_{ij})]f_c(r_{ij}) \quad (2)$$

در رابطه اخیر i و j اتم کربن انتهای هر پیوند و r_{ij} طول پیوند است، همچنین $V^R(r_{ij})$ برهم‌کنش دوچرخی دافعه بین دو اتم یادشده و $V^A(r_{ij})$ نشان‌دهنده قسمت جاذبه این پتانسیل بوده و مطابق روابط (4.3) تعریف می‌شود.

$$V^R(r_{ij}) = \frac{D_e}{S-1} e^{-\sqrt{2S}\beta(r_{ij}-R_e)} \quad (3)$$

$$V^A(r_{ij}) = \frac{D_e S}{S-1} e^{-\sqrt{2/S}\beta(r_{ij}-R_e)} \quad (4)$$

پارامترهای R_e , β , D_e و S , ثوابت پتانسیل بوده که برای پیوند کربن-کربن مقادیر مشخصی دارند. $f_c(r_{ij})$ تابع شعاع قطع⁴ و \bar{b}_{ij} مرتبه پیوند⁵ بوده که با توجه به موقعیت اتم‌های همسایه، نیروی جاذبه را نسبت به نیروی دافعه تقویت یا تضعیف می‌کند. ساختار پیشنهادی پتانسیل یادشده برای تعیین انرژی پتانسیل بین دو اتم، یک المان شش اتمی است که در شکل 1 نشان داده شده است. پارامترهای مربوط به این پتانسیل به همراه توضیحات جامع، در مرجع [10] آورده شده است.

2- تعیین المان در مقیاس اتمی

نخستین مرحله در AFEM مانند FEM تقسیم یک سیستم به قسمت‌های کوچک‌تر به نام المان است. برای تعیین المان در مقیاس اتمی ابتدا باید رابطه اتمی در یک نانوساختار مشخص شود، بدین منظور ناحیه تعامل تعیین کننده برهم‌کنش بین یک اتم (اتم مینا) و اتم‌های همسایه‌اش، تعریف می‌شود. در مقیاس اتمی این ناحیه تعامل و شماره اتم مینا به ترتیب به عنوان المان و شماره المان در نظر گرفته می‌شود. همسایگی‌ها در این ناحیه به پتانسیل بین اتمی و نوع ساختار اتمی ماده مورد نظر بستگی دارد.

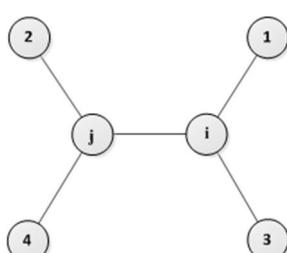


Fig. 1 The 6-node element representing the angle bending in graphene structure based on the Tersoff-Brenner potential

شکل ۱ المان شش اتمی برای نمایش خمش پیوند در ساختار گرافن با پتانسیل ترسوف-برنر

⁴ Cut-off radius
⁵ Bond order

صورت گرفته است. لی و همکارانش در سال 2008 خواص الاستیک و استحکام شکست ذاتی غشای گرافن تک‌لایه آزاد را به وسیله میکروسکوپ نیروی اتمی¹ اندازه‌گیری کردند. آن‌ها مدول یانگ تک‌لایه گرافن را 1.0 تراپاسکال بدست آوردند [5]. در پژوهشی دیگر، زانگ و پان، مدول یانگ ترق گرافن را 0.89 تراپاسکال اندازه‌گیری کردند [6]. لی و همکارانش در سال 2012 مدول الاستیک تک‌لایه گرافن را از طریق آزمایش 2.4 تراپاسکال ثبت کردند [7]. مقایسه نتایج تجربی مختلف نشان می‌دهد که تفاوت بسیاری در اعداد ارائه شده توسط محققان مختلف برای مدول یانگ ورق گرافن وجود دارد. این امر حاکی از فقدان دقت روش‌های تجربی و در نتیجه فقدان وجود روش آزمایشگاهی استاندارد برای اندازه‌گیری خواص مکانیکی در مقیاس نانو است؛ بنابراین، تعیین کمی خواص مکانیکی توسط روش‌های مدل‌سازی از اهمیت بهسزایی برخوردار است.

به طور کلی روش‌های مدل‌سازی سیستم‌های نانومتری را می‌توان به دو دسته اصلی تقسیم‌بندی کرد. دسته نخست روش‌های مبتنی بر شیمی محاسباتی و دسته دوم روش‌های مبتنی بر نانومکانیک محاسباتی است. حالی که روش‌های دسته نخست از دقت بالاتری نسبت به دسته دوم برخوردارند، روش‌های دسته دوم سرعت بیشتری نسبت به روش‌های دسته نخست دارند [8]. در پژوهش کنونی تلاش شده است برای تعیین خواص مکانیکی ورق گرافن روشی ارائه شود که ویژگی‌های هر دو دسته را دارد. این روش به «روش المان محدود مقیاس اتمی²» شهرت دارد که نخستین بار توسط لیو و همکارانش در سال 2003 برای تعیین خواص مکانیکی نanolوله‌های کربنی ابداع شده است [9].

در این روش، ابتدا با توجه به برهم‌کنش یک اتم با اتم‌های همسایه‌اش، یک ناحیه تعامل تعریف می‌شود. با توجه به این تعریف، هر ناحیه تعامل می‌تواند به عنوان المان و هر اتم به عنوان یک گره در چارچوب روش المان محدود³ درنظر گرفته شود، سپس تلاش می‌شود مشابه روش المان محدود که استفاده از آن در مکانیک محیط‌های پیوسته راچ است، از شرط کمینه کردن انرژی پتانسیل برای تعیین ماتریس سفتی و بردار نیروی غیرتعادلی المان استفاده شود. در نهایت برای تعیین صحت نتایج و نشان دادن دقت محاسبات روش ارائه شده، نتایج به دست آمده با نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مقایسه می‌شود. مقایسه نتایج نشان‌دهنده دقت بالای روش ارائه شده است. این در حالی است که سرعت محاسبات در روش ارائه شده به میزان چشم‌گیری بیش از سرعت محاسبات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است.

2- جزئیات روش المان محدود مقیاس اتمی

روش موسوم به المان محدود مقیاس اتمی (AFEM) از حیث ساختاری کاملاً شبیه روش المان محدود (FEM) است با این تفاوت که در آن هر ناحیه تعامل (برهم‌کنش محلی) می‌تواند به عنوان المان و هر اتم به عنوان یک گره در چارچوب FEM درنظر گرفته شود. ارتباط بین این دو روش از آن جا ناشی می‌شود که در AFEM مشابه FEM از شرط کمینه کردن انرژی پتانسیل برای تعیین ماتریس سفتی المان استفاده می‌شود. نکته مهم آن است که در این روش، موقعیت تعادلی اتم‌ها با مشتق‌گیری از پتانسیل‌های بین اتمی به دست می‌آید. انرژی پتانسیل کل یک سیستم (E_{tot}) از دو بخش به صورت رابطه (1) تشکیل شده است.

¹ Atomic Force Microscopy (AFM)

² Atomic-scale Finite Element Method (AFEM)

³ Finite Element Method (FEM)

$$u^{(k)} = x^{(k+1)} - x^k \quad (10)$$

تکرار نخستین ($k = 0$) در پیکربندی نخستین سیستم اتمی، با موقعیت $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_N^{(0)})^T$ آغاز می‌شود. وظیفه اصلی الگوریتم تکرار، یافتن موقعیتی با سیستم دارای کمینه انرژی است. روش تکراری نیوتن [13] یکی از روش‌هایی است که بهمنظور ارائه حل دقیق سیستم معادلات جبری غیرخطی استفاده می‌شود. در این روش، الگوریتم تکرار در هر بار اعمال نیروی خارجی تا هنگامی اداهه می‌یابد که با صفرشدن بردار نیروی غیرتعادلی، تعادل برقرار شود. در اینجا جهت ارزیابی همگرایی از مقایسه اختلاف نرم انرژی $\|u_{n+1}^{k+1} - u_{n+1}^{(k+1)}\| \leq \text{tot}$ استفاده شده است.

2-3- استخراج درایه‌های ماتریس سفتی و بردار نیرو

با توجه به ساختار اتمی پتانسیل ترسوف-برنر (المان شش اتمی) و المان ده اتمی تعیین شده برای ساختار گرافن، هر المان ده اتمی گرافن از سه المان شش اتمی تشکیل می‌شود (شکل 2). پس انرژی پتانسیل داخلی کل (U_{tot}^e) اعمالی بر اتم مبنا ناشی از سه المان شش اتمی به صورت رابطه (11) بیان می‌شود.

$$U_{\text{tot}}^{\text{e}} = V(r_{12}) + V(r_{13}) + V(r_{14}) \quad (11)$$

درنهایت با توجه به انرژی پتانسیل کل در رابطه (11) و این که در هر المان فقط برهم کنش هایی لحظه می شوند که اتم مبنا در آن درگیر باشد، درایه های ماتریس سفتی و بردار نیروی غیرتعادلی صفحه ای (هر اتم 2 درجه آزادی انتقالی داراست) مربوط به یک المان گرافن براساس مشتقات بیان شده در رابطه (8) به صورت واحد (12) است.

$$K^{(e)} = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial^2 U_{\text{tot}}^e}{\partial x_1 \partial x_1}\right)_{2 \times 2} & \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 U_{\text{tot}}^e}{\partial x_1 \partial x_i}\right)_{2 \times 18} \\ \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 U_{\text{tot}}^e}{\partial x_i \partial x_1}\right)_{18 \times 2} & (0)_{18 \times 18} \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$P^{(e)} = \begin{bmatrix} \left(\bar{F}_1 - \frac{\partial \mathbf{f}_1^e}{\partial x_1} \right)_{2 \times 1} \\ (0)_{10 \times 1} \end{bmatrix} \quad (13)$$

در رابطه اخیر، \bar{F}_1 نیروهای خارجی وارد بر هر المان بوده که بر اتم منیای المان، اعماء مم شود.

مشبندی-4-2

با توجه به تعریف المان در مقیاس اتمی، یک سیستم N اتمی دارای N المان اتمی است. بنابراین این المان‌ها از نظر فضایی با المان‌های مجاورشان

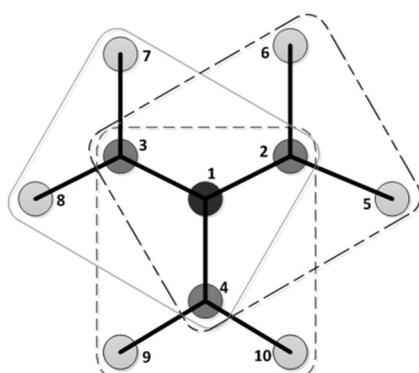


Fig. 2 The 10-node element used in the proposed method

با توجه به ساختار شش ضلعی گرافن و نوع پتانسیل انتخابی برای بیان برهمکنش‌های بین‌اتمی در آن (ترسوف- برزن)، المان ده گره‌ای مطابق شکل ۲، المانی منتخب برای گرافن در روش AFEM، است. این المان دارای دو همسایگی است. همسایگی نخست آن اتم‌های $\{2,3,4\}$ و همسایگی دوم آن اتم‌های $\{5,6,7,8,9,10\}$ است. اتم‌های نخستین همسایگی با دو نوع برهمکنش کششی و خمشی (متنااسب با تغییر طول و زاویه پیوندها) و اتم‌های دومین همسایگی فقط با برهمکنش خمشی (متنااسب با تغییر زاویه پیوندها) بر اتم مبنا تأثیر می‌گذارند.

AFEM-2-2 استخراج چارچوب

همان‌طور که در بالا بیان شد، ایجاد یک سیستم در حال تعادل، مستلزم رابطه (۵) است.

$$\frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial x} = 0 \quad (5)$$

با پیش‌بینی موقعیت نخستین اتم‌های کربن موجود در ساختار گرافن به صورت بردار $(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_N^{(0)})^T$ سه جمله نخست بسط تیلور تابع انرژی پتانسیل کل، حول موقعیت نخستین به صورت رابطه (6) بیان می‌شود.

$$E_{\text{tot}}(x) \cong E_{\text{tot}}(x^{(0)}) + \frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial x} \Big|_{x=x^{(0)}} \cdot (x - x^{(0)}) \\ + \frac{1}{2} (x - x^{(0)})^T \cdot \frac{\partial^2 E_{\text{tot}}}{\partial x \partial x} \Big|_{x=x^{(0)}} \cdot (x - x^{(0)}) \quad (6)$$

درنهایت با تعریف بردار جایه‌جایی اتم‌ها به صورت $x^{(0)} = x - u$ و سپس جایگذاری رابطه (6) در رابطه (5)، می‌توان معادله‌ای مشابه با چارچوب المان محدود به صورت رابطه (7) ایجاد کرد.

$$Ku = P \quad (7)$$

که در اینجا روابط (۸) را خواهیم داشت.

$$K = \left. \frac{\partial^2 U_{\text{tot}}}{\partial x \partial x} \right|_{x=x^{(0)}} \quad (\text{a-8})$$

$$P = \bar{F}_i - \frac{\partial U_{\text{tot}}}{\partial x} \Big|_{x=x^{(0)}} \quad (\text{b-8})$$

در روابط بالا K و P به ترتیب ماتریس سفتی و بردار نیروی غیرتعادلی است. ابعاد (K) و (P) در فضای دو بعدی به ترتیب $2N \times 2N$ و $1 \times 2N$ است. علاوه بر این، چونتابع پتانسیل ترسوف-برن در هر نقطه دارای مشتق مرتبه دوم پیوسته است [11]، مطابق با قضیه یانگ [12]، ماتریس درجه دوم (K) متقارن خواهد بود. این قضیه بیان می کند که اگر تابعی در هر نقطه دارای مشتق مرتبه دوم پیوسته باشد، ماتریس شامل درایه های مشتقات مرتبه دوم این تابع، متقارن می شود.

با توجه به این که رابطه بین نیرو و جابجایی در چارچوب کلی AFEM و FEM خطی است (با نادیده گرفتن ترم‌های مرتبه بالای بسط تیلور)، به منظور به کارگیری این رابطه خطی برای سیستم‌های غیرخطی لازم است تا از یک الگوریتم تکرار استفاده شود. پس با تغییر در نماد ماتریس سفتی و بردار نیروی غیرتعادلی، برای مرحله تکرار k معادلات سیستم خطی به صورت روابط (9) بدست می‌آید.

$$K^{(k)} = \left. \frac{\partial^2 U_{\text{tot}}}{\partial x \partial x} \right|_{(0)} \quad (\text{a-9})$$

$$P^{(k)} = \bar{F}_i - \frac{\partial U_{\text{tot}}^{(k)}}{\partial x} \quad (\text{b-9})$$

نیز هر تکا k_i موقعیت اتم i به صورت ابسط (10) به وزیر شود.

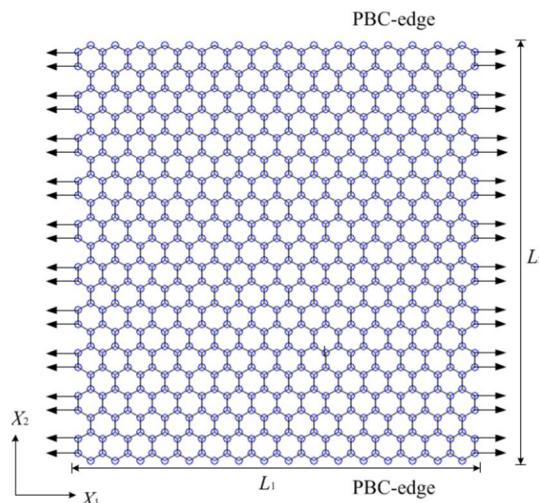


Fig. 3 Schematic illustration of imposing the tensile load on the SLGS sample

شکل 3 تصویر شماتیک از اعمال بار کشی بر نمونه گرافن

آنگستروم فرض شده است.

شرایط مرزی گرافن در روش AFEM مطابق با شرایط مرزی MD است، با این تفاوت که در AFEM به جای اعمال نرخ کرنش به کار گرفته شده در MD، نیروی خارجی اعمال می‌شود. بارگذاری از مقدار صفر آغاز و با افزایش به حالت حدی می‌رسد. در هنگام شبیه‌سازی امکان استفاده از گام‌های بارگذاری متفاوت وجود دارد. برای نمونه می‌توان جهت تسريع عملیات محاسباتی برای گام‌های نخستین مدل‌سازی که رفتار ماده خطی است، مقادیر بزرگ انتخاب کرد؛ بنابراین می‌توان پیش‌بینی کرد که روش AFEM قادر به بررسی رفتار نقطه‌ای یک ماده در هر بارگذاری دلخواه باشد. شکل 4 نتش و کرنش دو نمونه بارگذاری محاسبه شده با روش AFEM به همراه نمودار نتش-کرنش به دست آمده از روش MD را نشان می‌دهد. نقاط دایره‌ای شکل نشان‌دهنده نتش و کرنش نقطه‌ای گرافن تحت نیروی خارجی 20 و 45 الکترون‌ولت بر آنگستروم است که با نتایج به دست آمده با روش MD تطابق بسیار خوبی دارند. این نتایج نشان می‌دهند که روش AFEM بدون نیاز به داشتن پیش‌بینی از رفتار ماده می‌تواند رفتار ماده را در هر بارگذاری خارجی دلخواه پیش‌بینی کند.

در ادامه جهت تعیین رفتار مکانیکی (مدول یانگ، نتش و کرنش نهایی) گرافن، بارگذاری خارجی با گام‌های متناسب با رفتار ماده (گام‌ها ابتدا بزرگ و سپس با افزایش بار کوچک می‌شود) بر گرافن اعمال می‌شود. شکل 5 نمودار نتش-کرنش محاسبه شده از دو روش AFEM و MD را نشان می‌دهد. مطابق با شکل یادشده، یک تطابق بسیار مناسب میان AFEM و MD مشاهده می‌شود. مدول یانگ گرافن با استفاده از روش AFEM و MD به ترتیب برابر با 0.813 و 0.82 تراپاسکال محاسبه شد. در جدول 1 مقایسه نتایج شبیه‌سازی با مقادیر ارائه شده در منابع مختلف آورده شده است. با توجه به این جدول، نتایج بررسی AFEM و MD مطابعه حاضر مطابقت خوبی با گزارش‌های پیشین دارد. مدت زمان شبیه‌سازی در دو روش AFEM و MD برای گرافن یادشده به ترتیب 13 دقیقه و 22 ساعت بوده است. این مطلب نشان می‌دهد که سرعت روش توسعه داده شده در این پژوهش تقریباً 100 برابر روش MD است. تمام شبیه‌سازی‌ها با یک رایانه شخصی با مخصوصات پردازشگر 7 هسته‌ای با سرعت 1.6 گیگاهرتز و حافظه 4 گیگابایت

همپوشانی دارند. پس برای ایجاد مش در ساختار اتمی نمی‌توان از مش‌بندی مرسوم در FEM استفاده کرد. در حقیقت همپوشانی یادشده، این امکان را فراهم می‌کند که به صورت دقیق اثرات نامحلی را مدل‌سازی کرد. به رغم این همپوشانی، سه‌هم برهمنش یک پیوند در ماتریس سفتی و نیروی غیرتعادلی کلی دو بار اعمال نمی‌شود. این نکته را با دقت در ماتریس سفتی محلی می‌توان دریافت، برخی از درایه‌های ماتریس سفتی در رابطه (12) در ضرب 0.5 ضرب شده‌اند.

3- جزئیات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

تمام محاسبات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار LAMMPS¹ که در آزمایشگاه ملی ساندیا [14] توسعه یافته، انجام شده است. برای شبیه‌سازی، ابتدا پیکربندی نخستین یک ورق گرافن با استفاده از نرم‌افزار C-C VMD² [15] ایجاد می‌شود. برای توصیف انرژی پیوندهای کووالانسی C-AIREBO³ از پتانسیل بین‌اتمی⁴ REBO [16] عمل می‌کند که با موفقیت در مطالعات پیشین در خصوص خواص مکانیکی گرافن [19-17] به کار گرفته شده است. یک مسئله مهم که در شبیه‌سازی MD پیش از بارگذاری باید توجه شود، مطابقت نداشتن موقعیت نخستین ورق گرافن با حالت تعادل سیستم است. نخستین مرحله شبیه‌سازی بدون اعمال بار خارجی در 50000 گام زمانی اجرا می‌شود. در نهایت برای شبیه‌سازی تغییر شکل گرافن تحت بارگذاری یکنواخت کششی در جهت مورد نظر، نرخ کرنش 0.005 پیکوثانیه در آن راستا اعمال می‌شود. برای حذف اثرات حرارتی بر نمودار نتش-کرنش و همچنین با توجه به این که AFEM در شکل کنونی قادر به اعمال اثرات درجه حرارت در روند شبیه‌سازی نیست و فقط در دماهای بسیار پایین قابل اجراست، تمام مراحل شبیه‌سازی در دمای ثابت 1 کلوین اجرا شده است. سرعت نخستین، از توزیع ماکسول-بولتزمان در دمای داده شده، به دست آمده است. برای کنترل درجه حرارت شبیه‌سازی، از ترموموستات نوز-هوور [20] و برای انتگرال گیری از معادلات حرکت از روش ورله سرعتی [21]، با گام زمانی 0.5 فرمتوثانیه استفاده شده است. در مورد شرایط مرزی ورق گرافن، در تمام مدل‌سازی‌ها، برای ایجاد یک ورق گرافن بی‌نهایت و حذف اثر طول محدود، شرایط مرزی دورهای⁵ (PBC) در امتداد عمود بر جهت بارگذاری در نظر گرفته شده است. این در حالی است که در جهت بارگذاری، شرایط مرزی آزاد است.

4- نتایج و بحث

4-1 مقایسه نتایج روش MD و AFEM

برای مقایسه دو روش MD و AFEM، در ابتدا نمونه گرافنی با ابعاد 40A⁰ × 40A⁰ (660 Å³) مطابق شکل 3 در نظر گرفته شده است. مطالعات انجام شده پیشین نشان داده که هنگامی که اندازه گرافن مربعی شکل، کمتر از 40 آنگستروم باشد، مدول یانگ با افزایش اندازه، افزایش می‌یابد. برای گرافن با اندازه بزرگ‌تر از 40 آنگستروم مدول یانگ به حالت اشباع رسیده و دیگر تغییر نمی‌کند [22]. بر این اساس و برای حذف اثرات لبه در مطالعه حاضر، از نمونه گرافنی به ابعاد 40 آنگستروم استفاده و همچنین ضخامت گرافن برابر با فاصله بین لایه‌های گرافن در ساختار گرافیت یعنی 3.4

¹ LAMMPS (Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)

² Visual Molecular Dynamics (VMD)

³ Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order (AIREBO)

⁴ Reactive Empirical Bond Order (REBO)

⁵ Periodic Boundary Condition (PBC)

4-2-تعداد تکرار لازم برای همگرایی

همان‌طور که از پیش بیان شد برای یافتن موقعیت تعادلی اتم‌ها با استفاده از روش AFEM لازم است از الگوریتم تکرار استفاده شود. با توجه به این که یکی از عوامل تأثیرگذار بر سرعت شبیه‌سازی (زمان محاسباتی) تعداد تکرار لازم برای همگرایی در هر مرحله است؛ بنابراین در ادامه، تأثیر اختلاف طول اولیه پیوند غیرتعادلی نسبت طول پیوند تعادلی ساختار گرافن (طول پیوند تعادلی ۰.۱۴۵ نانومتر است) و تعداد اتم‌های ساختار بر تعداد تکرار و به تبع آن بر سرعت شبیه‌سازی بررسی می‌شود.

ابتدا برای بررسی تأثیر طول اولیه پیوند بین اتمی، یک گرافن با ابعاد تعادلی $20A^0 \times 20A^0$ (۱۷۰ اتم) که دارای طول پیوند اولیه ۰.۱۴۵، ۰.۱۳۵ و ۰.۱۴ و ۰.۱۵۵ نانومتر و شرایط مرزی بیان شده در شکل ۳ است، در نظر گرفته شده است. با این تفاوت که بر دو لبه آزاد آن نیروی اعمال نمی‌شود.

همان‌طور که از پیش بیان شد، یکی از روش‌های ارزیابی همگرایی الگوریتم تکرار، اختلاف نرم انرژی است. مطابق با نمودار شکل ۷ تغییرات نرم انرژی برای گرافنی با طول‌های مختلف نشان‌پیوند بیان شده، بررسی شده است. نمودار مربوطه نشان می‌دهد که با افزایش تکرار اختلاف نرم انرژی کاهش می‌یابد. همچنین با توجه به این نمودار می‌توان مشاهده کرد که تأثیرگذارترین گام تکرار برای رسیدن به حالت تعادلی ساختار، گام دوم است و تأثیر گام‌های بعدی به تدریج بسیار کم می‌شود. برای تعیین تعداد گام

جدول ۱ مقایسه مدول یانگ به دست آمده توسط مطالعه حاضر با مقادیر ارائه شده در منابع

Table 1 Comparison of the Young modulus obtained by the present study and the ones given in the literature

مدول یانگ (تراباسکال)	روش حل	محقق
1.05	مکانیک کوانتومی	[23]
0.725	دینامیک مولکولی	لو و هوانگ [8]
1.272	دینامیک مولکولی	گوپتا و همکارانش [24]
0.945	مکانیک مولکولی	مئو و روسی [25]
0.84	مکانیک مولکولی	تردالکار و همکارانش [26]
0.80	مکانیک سازه مولکولی	شکریه و همکارانش [27]
0.832	دینامیک مولکولی	بی و همکارانش [28]
0.813	المان محدود مقیاس اتمی	کار حاضر
0.82	دینامیک مولکولی	کار حاضر

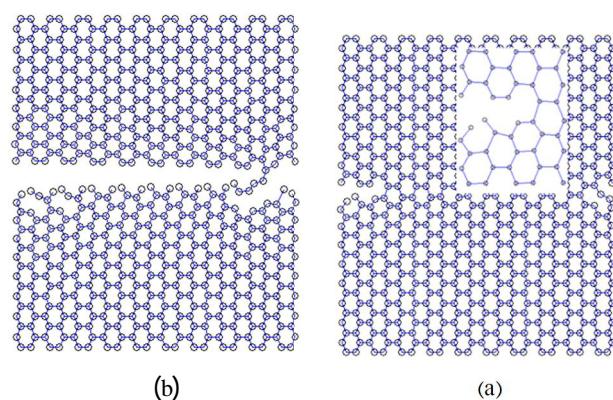


Fig. 6 Failure process of the perfect sample (a) early stages of fracture (b) final configuration

شکل ۶ فرآیند شکست یک گرافن بی‌نقص، (الف) مراحل اولیه و (ب) نهایی شکست

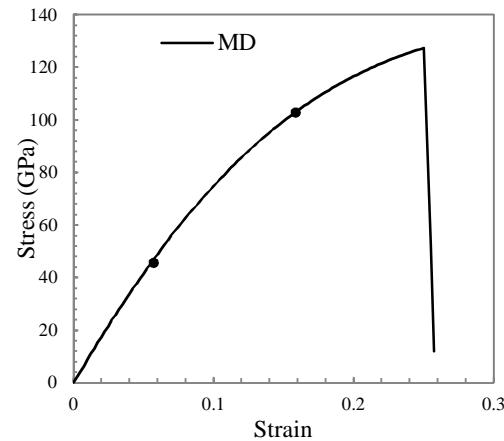


Fig. 4 پیش‌بینی دقیق روش AFEM پیشنهادی از تنش-کرنش در دو بارگذاری

بر گرافن نمونه بدون اطلاع از پیشینه رفتار مکانیکی آن

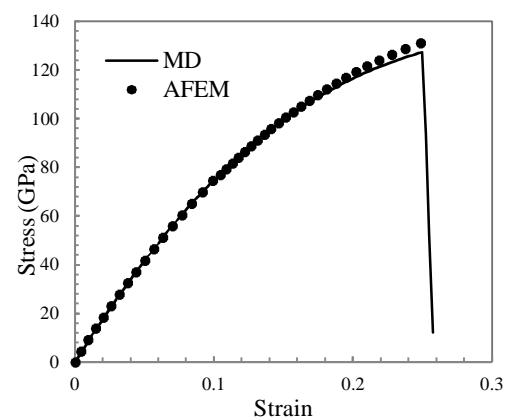


Fig. 5 اعتبار سنجی AFEM پیشنهادی: منحنی تنش-کرنش نمونه به دست آمده توسط این روش به طور کامل با نتایج MD مطابق است

انجام شده است. همچنین در شکل ۶ فرآیند شکست گرافن به روش AFEM نشان داده شده است.

همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود ترک ایجاد شده در وسط گرافن نخست به شکل زیگزاگی رشد می‌کند، ولی در ادامه به صورت خط مستقیم در راستای عمود بر جهت بارگذاری تغییر مسیر می‌دهد. یکی از نکات قابل اشاره در این پژوهش آن است که هنگامی گرافن در اثر رشد ترک به دو گرافن مجزا تقسیم شده، هر یک از گرافن‌های ایجاد شده دارای شرایط مرزی جدید می‌گردد (یک لبه آن آزاد بوده و لبه دیگر تحت بارگذاری خارجی قرار دارد). در نتیجه چنین سیستمی با شرایط مرزی بیان شده از نظر المان محدود غیرقابل حل است (تعداد مجهولات بیشتر از تعداد معادلات است؛ بنابراین با کامل شدن گسیختگی در گرافن، کد المان محدود توسعه داده شده با اعلام ناپایداری در جواب از اجرا خارج می‌شود. نکته مهم آن است که مطابق شکل ۵ کرنش گسیختگی متناسب با وضعیت ناپایداری که توسط روش AFEM پیش‌بینی می‌شوند در تطابق کامل با نتایج MD است).

مکانیکی نانوساختارها، شرایط مرزی دورهای درنظر گرفته نشده است. در این پژوهش روشی برای بررسی تأثیر شرایط مرزی دورهای در سطح مقیاس اتمی توسعه داده شده است.

با توجه به این که ماده مورد بررسی این پژوهش جامد و جامدات برخلاف مایعات و گازها دارای شکل مشخصی است و اتمهای آن‌ها فقط می‌توانند در جای خود نوسان کنند؛ بنابراین می‌توان برای ایجاد یک گرافن دارای شرایط مرزی دورهای مطابق شکل 9 عمل کرد. در این شکل، اتمهای درون مستطیل اتمهای واقعی گرافن و اتمهای بیرون مستطیل اتمهای مازادی است که وجود خارجی ندارند و تنها برای ایجاد شرایط مرزی دورهای اضافه می‌شوند. مبنای افروzen این اتمها، المان ده اتمی نشان داده شده در شکل 2 است. به عبارت دیگر، چون تعداد همسایه‌های اتمهای لبه برای ایجاد المان ده اتمی کمتر است، این اتمها اضافه می‌شوند تا این کمبود جبران شود. توجه شود اتمهای مازاد در شبیه‌سازی به عنوان اتم مبنای المان ده اتمی در نظر گرفته نمی‌شوند.

از نظر اجراء، برای استفاده از اعمال شرایط مرزی دورهای جدید، نیاز نیست مانند روش دینامیک مولکولی برای جستجوی همسایگی اتمهای

جدول 2 تأثیر طول اولیه پیوند روی تعداد گام‌ها و زمان محاسباتی لازم برای رسیدن نمونه گرافنی به حالت تعادل

طول اولیه پیوند (نانومتر)	تکرار	زمان محاسبات (ثانیه)
15.44	8	0.135
10.98	6	0.14
11.33	6	0.15
14.56	8	0.155

جدول 3 تأثیر تعداد اتم‌ها بر تعداد تکرار و زمان محاسباتی

Table 2 Effects of initial bond length on the computational time and iterations needed to acquire the equilibrated structure of the graphene sample

Table 3 Effects of number of atoms on the required iterations and computational time

زمان محاسبات (ثانیه)	تکرار	تعداد اتم	بعاد (انگستروم)
13.24	8	170	20 × 20
30.78	10	350	30 × 29
73.08	12	660	40 × 40
138.10	15	984	50 × 52

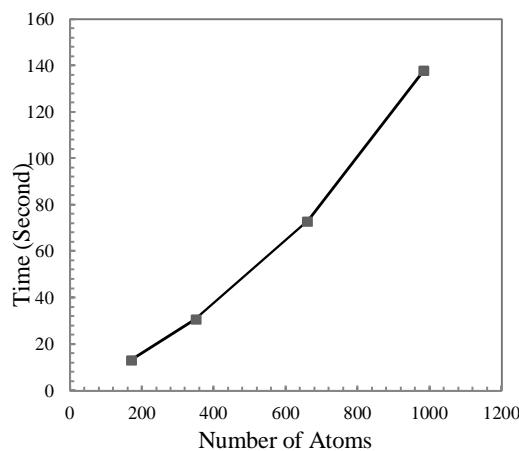


Fig. 8 Non-linear dependence of the computational time on the number of atoms

شکل 8 رابطه غیرخطی بین تعداد اتم‌ها و زمان محاسباتی

تکرار برای همگرایی در این تحقیق فرض شده است که سیستم هنگامی همگرا می‌گردد که مقدار اختلاف نرم انرژی کمتر از 0.001 الکترون‌ولت باشد. با توجه به فرض بیان شده تعداد گام‌ها و به تبع آن زمانی محاسباتی لازم برای رسیدن به تعادل گرافن با طول‌های نخستین پیوند متفاوت در جدول 2 نشان داده شده است. مطابق این جدول مشاهده می‌شود که تعداد تکرار لازم برای ساختار گرافن با طول نخستین پیوند 0.135 با 0.13 نانومتر (اختلاف طول پیوند نسبت به تعادلی $0.01 \pm \text{nano}\text{m}$) و 0.14 با 0.15 نانومتر (اختلاف طول پیوند نسبت به تعادلی $0.005 \pm \text{nano}\text{m}$) برابر است؛ بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که تعداد تکرار لازم برای رسیدن به تعادل به اختلاف طول نخستین پیوند غیرتعادلی نسبت پیوند تعادلی گرافن بستگی دارد نه به بزرگی و کوچکی طول اولیه پیوند غیرتعادلی نسبت به پیوند تعادلی. در ادامه برای بررسی تأثیر تعداد اتم‌ها بر تعداد تکرار و زمان محاسباتی، گرافنهایی با ابعاد $20 A^0 \times 29 A^0$, $30 A^0 \times 40 A^0$ و $50 A^0 \times 52 A^0$ که دارای موقعیت تعادلی و شرایط مرزی بیان شده در شکل 3 هستند، در نظر گرفته شده است، همچنین نیروی اعمالی بر روی آزاد هر نمونه، 20 الکترون‌ولت بر آنگستروم است. نتایج حاصل از این بررسی در جدول 3 و شکل 8 نشان داده شده است. با توجه به جدول 3 می‌توان مشاهده کرد که افزایش تعداد اتم‌ها تأثیر کمی بر تعداد تکرارهای لازم برای همگرایی دارد. نکته مهم دیگر آن است که مطابق شکل 8، رابطه بین تعداد اتم‌ها و زمان محاسباتی در روش AFEM غیرخطی است. نتایج جدول 3 نشان می‌دهد که با افزایش تعداد اتم‌ها از 170 به 984 (قریباً 5.8 برابر) زمان مورد نیاز برای شبیه‌سازی در روش AFEM تقریباً 10.4 برابر شده است. با توجه به این که شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از مرتبه توان دوم تعداد اتم‌هاست، افزایش 5.8 برابری در تعداد اتم‌ها قطعاً سبب افزایش 33.6 برابری در زمان اجرای شبیه‌سازی MD می‌شود. بنابراین نه تنها سرعت روش AFEM نسبت به MD بسیار بالاتر است بلکه با افزایش تعداد اتم‌های مورد نظر در شبیه‌سازی این برتری، نمود بیشتری هم پیدا می‌کند.

4-3-تأثیر شرایط مرزی دورهای

تاكنوون در تمامی مطالعات انجام شده بر مبنای AFEM در ارزیابی رفتار

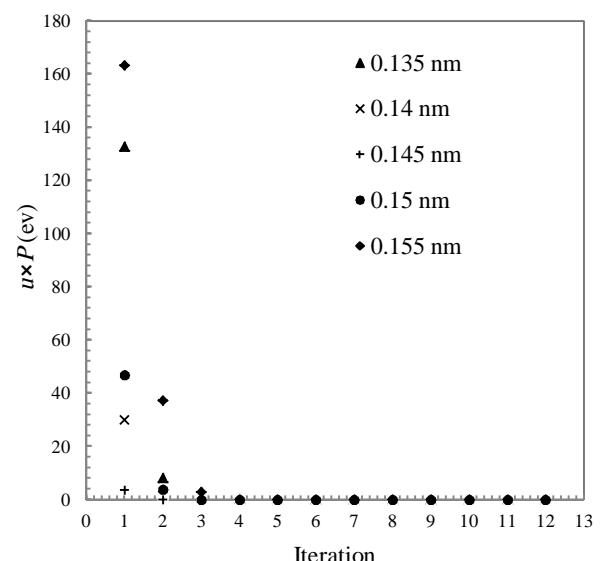


Fig. 7 تأثیر طول اولیه پیوند بر روی نرخ همگرایی الگوریتم تکرار پیشنهادی

شکل 7 تأثیر طول اولیه پیوند بر روی نرخ همگرایی الگوریتم تکرار پیشنهادی

AFEM، گرافنی مطابق با شکل 3 با لاحاظ کردن شرایط مرزی دورهای تحت بارگذاری یکنواخت کششی درنظر گرفته شده است. شکل 11 منحنی تنش - کرنش بهدست آمده از مدل سازی AFEM برای نمونه با دو شرایط مرزی بیان شده را نشان می‌دهد. مطابق با شکل 3 ذکر شده، می‌توان مشاهده کرد که مدول یانگ و تنش نهایی شبیه‌سازی شده برای گرافن دارای شرایط مرزی آزاد با گرافن دارای شرایط مرزی دورهای کاملاً متفاوت است. برای حالت شرایط مرزی آزاد، مدول یانگ و تنش نهایی به ترتیب برابر با 0.561 تراپاسکال و 110.79 گیگاپاسکال تعیین شد که در مقایسه با شرایط مرزی دورهای، مقادیر مدول یانگ و تنش نهایی به ترتیب 30 و 15.37 درصد کمتر است (0.813 تراپاسکال و 130.92 گیگاپاسکال). با توجه به نمودار شکل 11 می‌توان دریافت که نتایج مدل سازی AFEM بدون لاحاظ کردن شرایط مرزی دورهای، اختلاف زیادی با نتایج شبیه‌سازی MD دارد.

5- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، یک روش المان محدود مقیاس اتمی جدید براساس پتانسیل ترسف-برنر برای رسیدن به رفتار مکانیکی گرافن پیشنهاد شد. بدین منظور، رفتار مکانیکی گرافن تحت بارگذاری کششی بهصورت عددی با استفاده از AFEM در یک روش سیستماتیک محاسبه و از طریق شبیه‌سازی MD ارزیابی شد. نتایج حاصل از روش AFEM نشان می‌دهند که این روش برخلاف MD بدون نیاز به داشتن پیشنهاد قلی از رفتار ماده می‌تواند رفتار نقطه ماده را در هر بارگذاری خارجی پیش‌بینی کند، همچنین مدول یانگ گرافن، تنش و کرنش نهایی گرافن بدون نقص با استفاده از روش AFEM به ترتیب برابر با 0.813 تراپاسکال، 130.92 گیگاپاسکال و 0.248 محاسبه شد که با نتایج شبیه‌سازی MD و مقادیر ارائه شده در منابع مختلف مطابقت خوبی دارد. در ادامه تأثیر عوامل مؤثر بر تعداد تکرار و به تبع آن بر سرعت شبیه‌سازی بررسی شد. نتایج بهدست آمده نشان می‌دهند که تعداد تکرار لازم برای رسیدن به تعادل به اختلاف طول نخستین پیوند غیرعادلی نسبت پیوند تعادلی ساختار گرافن بستگی دارد نه به بزرگی و کوچکی طول نخستین پیوند نسبت به پیوند تعادلی، همچنین زمان محاسبات AFEM با تعداد اتم گرافن است. این اتمها در شکل 9 با مرتع کوچک مشخص شده است.

توسعه روش المان محدود مقیاس اتمی برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای بررسی رفتار مکانیکی گرافن موجود در سلول واقعی¹، سلول یادشده توسط سلول‌های کاملاً مشابه (سلول تصویر)² احاطه شود (شکل 10). در این روش، جستجوی اتم‌های همسایگی اتم مینا فقط در میان اتم‌های موجود در سلول واقعی انجام می‌شود. برای نمونه مطابق شکل 10، اگر اتم α اتم مینا المان ده اتمی و اتم γ یکی از اتم‌های موجود در سلول واقعی باشد، برای تعیین همسایگی بودن اتم γ نسبت به اتم مینا α ، ابتدا با استفاده از رابطه (14) موقعیت سه‌گانه‌ای که هر اتم می‌تواند نسبت به اتم مینا دارا باشد محاسبه می‌شود.

$$(14) \quad r'_\gamma(n_\gamma) = r_\gamma + n_\gamma L_\ell, \quad n_\gamma = \{-1, 0, +1\}$$

در رابطه بالا n_γ نشان‌دهنده محورهای مختصات، L_ℓ اندازه سلول واقعی در جهت α و n_γ اعداد صحیح بین 1 و -1 است. در این روش برای آن که طول پیوند غیرواقعی (بین اتم واقعی و تصویری) در تمام مراحل شبیه‌سازی برابر با طول پیوند واقعی (میان دو اتم واقعی موجود در سلول واقعی) باشد، اندازه $L_x = L_1 + R_1 \times \cos \theta$ و $L_y = L_2 + R_2 \times \cos \theta$ (و $R_1 \times \sin \theta$ و $R_2 \times \sin \theta$) طول پیوند و زاویه بین پیوند کربن-کربن در جهت زیگزاگ نسبت به راستای افق که در شکل 9 نشان داده شده است. با توجه به این که در هر بارگذاری مقادیر R_1 ، R_2 و θ تغییر می‌کنند، اندازه سلول مرکزی نیز تغییر می‌کند. با توجه به توضیحات ارائه شده، موقعیت سه‌گانه یادشده به شرح زیراست.

- موقعیت مجازی مثبت ($n_\gamma = +1$): به اندازه طول گرافن در جهت اعمال شرایط مرزی دورهای به موقعیت واقعی اتم اضافه می‌شود.

- موقعیت واقعی ($n_\gamma = 0$):

- موقعیت مجازی منفی ($n_\gamma = -1$): به اندازه طول گرافن در جهت اعمال شرایط مرزی دورهای از موقعیت واقعی اتم کم می‌شود. سپس با استفاده از رابطه (15) کمترین فاصله اتم یادشده با اتم مینا تعیین می‌شود. در نهایت با توجه به اندازه ناحیه المان ده اتمی بررسی می‌شود که فاصله کمینه محاسبه شده از اندازه این ناحیه کمتر است یا خیر. در صورت کمتر بودن، اتم یادشده در لیست همسایگی اتم مینا قرار می‌گیرد.

$$(15) \quad r_{\alpha\gamma} = \min \|r'_\gamma - r_\alpha\|$$

از مایعی روش بیان شده، عدم توانایی ایجاد چهار اتم مازاد در گوشه گرافن است. این اتمها در شکل 9 با مرتع کوچک مشخص شده است.

جهت بررسی تأثیر شرایط مرزی بر نتایج بهدست آمده از مدل سازی

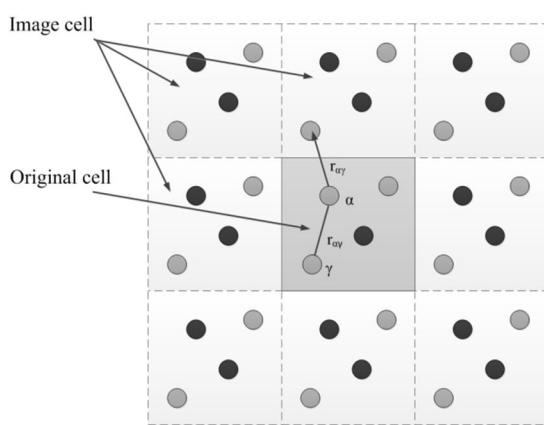


Fig. 10 Substitution of the neighboring atoms in the original cell in place of the image cells in the developed AFEM

شکل 10 جایگزینی اتم‌های همسایگی اتم مینا در سلول اصلی بهجای سلول‌های تصویر در روش AFEM توسعه داده شده

³ Free Boundary Condition (FBC)

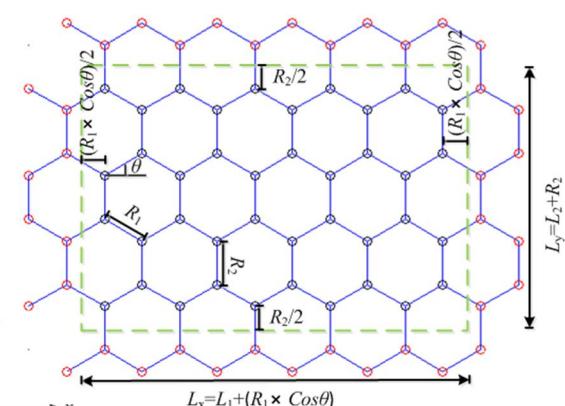


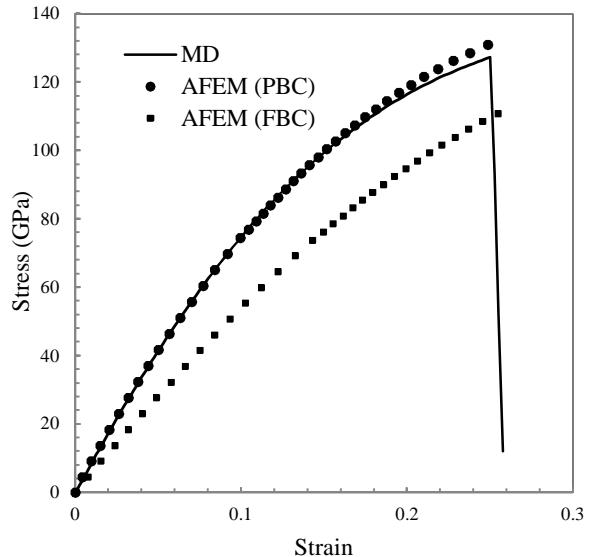
Fig. 9 Imposing Periodic Boundary Conditions in the developed AFEM
شکل 9 اعمال شرایط مرزی دورهای در توسعه داده شده

¹ Original cell
² Image cell

بالانویس‌ها	
جاذبه بین دو اتم	<i>A</i>
المان	<i>E</i>
گام تکرار	<i>k</i>
دافعه بین دو اتم	<i>R</i>
زیرنویس‌ها	
حالت تعادل	<i>e</i>
شمارنده اتم	<i>i</i>
شمارنده اتم	<i>j</i>
گام بارگذاری خارجی	<i>n</i>
اتم مبنا	α
اتم همسایه	γ
محورهای مختصات	ι

7- مراجع

- K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. A. Dubonos, I. Grigorieva, A. Firsov, Electric field effect in atomically thin carbon films, *Science*, Vol. 306, No. 5696, pp. 666-669, 2004.
- M. A. Rafiee, J. Rafiee, Z. Wang, H. Song, Z. Z. Yu, N. Koratkar, Enhanced mechanical properties of nanocomposites at low graphene content, *ACS nano*, Vol. 3, No. 12, pp. 3884-3890, 2009.
- M. Rafiee, J. Rafiee, Z. Z. Yu, N. Koratkar, Buckling resistant graphene nanocomposites, *Applied Physics Letters*, Vol. 95, No. 22, pp. 223103-223105, 2009.
- M. A. Rafiee, J. Rafiee, I. Srivastava, Z. Wang, H. Song, Z. Z. Yu, N. Koratkar, Fracture and fatigue in graphene nanocomposites, *Small*, Vol. 6, No. 2, pp. 179-183, 2010.
- C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, J. Hone, Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene, *Science*, Vol. 321, No. 5887, pp. 385-388, 2008.
- Y. Zhang, 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.
- J. U. Lee, D. Yoon, H. Cheong, Estimation of Young's modulus of graphene by Raman spectroscopy, *Nano Letters*, Vol. 12, No. 9, pp. 4444-4448, 2012.
- P. Valavalas, G. Odegard, Modeling techniques for determination of mechanical properties of polymer nanocomposites, *Reviews on Advanced Materials Science*, Vol. 9, pp. 34-44, 2005.
- B. Liu, Y. Huang, H. Jiang, S. Qu, K. Hwang, The atomic-scale finite element method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 193, No. 17, pp. 1849-1864, 2004.
- D. W. Brenner, Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films, *Physical Review B*, Vol. 42, No. 15, pp. 9458, 1990.
- C. A. Floudas, P. M. Pardalos, C. Adjiman, W. R. Esposito, Z. H. Gümus, S. T. Harding, J. L. Klepeis, C. A. Meyer, C. A. Schweiger, *Handbook of Test Problems in Local and Global Optimization*, pp. 199-202: Springer Science & Business Media, 2013.
- R. G. D. Allen, L. S. o. Economics, P. Science, *Mathematical Analysis for Economists*, Macmillan London, pp. 300-305, 1964.
- A. Ibrahimbegovic, *Nonlinear Solid Mechanics: Theoretical Formulations and Finite Element Solution Methods*, pp. 59-61: Springer Science & Business Media, 2009.
- S. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, *Computational Physics*, Vol. 117, No. 1, pp. 1-19, 1995.
- W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten, VMD: visual molecular dynamics, *Molecular Graphics*, Vol. 14, No. 1, pp. 33-38, 1996.
- D. W. Brenner, O. A. Shenderova, J. A. Harrison, S. J. Stuart, B. Ni, S. B. Sinnott, A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons, *Physics: Condensed Matter*, Vol. 14, No. 4, pp. 783-802, 2002.
- R. Ansari, B. Motavalli, A. Montazeri, S. Ajori, Fracture analysis of monolayer graphene sheets with double vacancy defects via MD simulation, *Solid State Communications*, Vol. 151, No. 17, pp. 1141-1146, 2011.
- Q. Lu, R. Huang, Nonlinear mechanics of single-atomic-layer graphene sheets, *Applied Mechanics*, Vol. 1, No. 03, pp. 443-467, 2009.
- M. Neek-Amal, F. Peeters, Graphene nanoribbons subjected to axial stress, *Physical Review B*, Vol. 82, No. 8, pp. 85432-85443, 2010.
- W. G. Hoover, Canonical dynamics: equilibrium phase-space distributions, *Physical Review A*, Vol. 31, No. 3, pp. 1695, 1985.
- W. C. Swope, H. C. Andersen, P. H. Berens, K. R. Wilson, A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water



شکل 11 منحنی تنش - کرنش به دست آمده از مدل سازی AFEM برای شرایط مرزی دوره‌ای (PBC) و آزاد (FBC)

در سطح مقیاس اتمی توسعه داده شد. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که نتایج مدل سازی AFEM بدون لحاظ کردن شرایط مرزی دوره‌ای، اختلاف زیادی با نتایج شبیه‌سازی MD دارد.

6- فهرست عالم

\bar{b}_{ij}	مرتبه پیوند
D_e	پارامتر ثابت پتانسیل ترسوف - برز
E_{tot}	انرژی پتانسیل کل یک سیستم
\bar{F}_i	نیروی خارجی
$f_c(r_{ij})$	تابع شاعع قطع
K	ماتریس سفتی
L_t	اندازه سلول واقعی گرافن
N	تعداد اتم‌های سیستم
n_t	اعداد صحیح میان 1 و -1
P	بردار نیروی غیرتعادلی
R_e	فاصله تعادلی میان دو اتم بدون حضور دیگر اتم‌ها
r_{ij}	فاصله بین دو اتم
S	پارامتر ثابت پتانسیل ترسوف - برز
U_{tot}	انرژی ذخیره شده داخلی کل یک سیستم
U_{tot}^e	انرژی ذخیره شده داخلی کل یک المان ده اتمی
u	بردار جابه‌جایی
V	انرژی پتانسیل بین دو اتم
x	موقعیت اتم‌ها
علامین یونانی	
α	اتم مبنا
β	پارامتر ثابت پتانسیل ترسوف - برز
γ	اتم همسایه

- Composites Science and Technology*, Vol. 66, No. 11, pp. 1597-1605, 2006.
- [26] S. S. Terdalkar, S. Huang, H. Yuan, J. J. Rencis, T. Zhu, S. Zhang, Nanoscale fracture in graphene, *Chemical Physics Letters*, Vol. 494, No. 4, pp. 218-222, 2010.
- [27] M. Shokrieh, Z. Shokrieh, S. Hashemianzadeh, Effective parameters In modeling of graphene sheet young's modulus, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 12, No. 3, pp. 147-155, 2012. (in Persian) (فارسی)
- [28] Q. X. Pei, Y. W. Zhang, V. B. Shenoy, Mechanical properties of methyl functionalized graphene: a molecular dynamics study, *Nanotechnology*, Vol. 21, No. 11, pp. 115709-115717, 2010.
- clusters, *Chemical Physics*, Vol. 76, No. 1, pp. 637-649, 1982.
- [22] J. W. Jiang, J. S. Wang, B. Li, Young's modulus of graphene: a molecular dynamics study, *Physical Review B*, Vol. 80, No. 11, pp. 113405, 2009.
- [23] F. Liu, P. Ming, J. Li, Ab initio calculation of ideal strength and phonon instability of graphene under tension, *Physical Review B*, Vol. 76, No. 6, pp. 64120-64127, 2007.
- [24] S. Gupta, K. Dharamvir, V. Jindal, Elastic moduli of single-walled carbon nanotubes and their ropes, *Physical Review B*, Vol. 72, No. 16, pp. 165428, 2005.
- [25] M. Meo, M. Rossi, Prediction of Young's modulus of single wall carbon nanotubes by molecular-mechanics based finite element modelling,