



ارائه روشی هندسی - تحلیلی برای محاسبه‌ی مدول‌های بین لایه‌ای در گرافن دو لایه

رضا ناظم‌نژاد^{1*}، کامران کمالی²، شاه‌رخ حسینی‌هاشمی³

1- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه دامغان، دامغان

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

3- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران

* صندوق پستی 36716-41167، rnazemnezhad@du.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 12 اسفند 1393

پذیرش: 17 اردیبهشت 1394

ارائه در سایت: 03 خرداد 1394

کلید واژگان:

گرافن دو لایه

پیوندهای واندروالسی

پارامتر عمق پتانسیل

مدول برشی

مدول کششی - فشاری

چکیده

در این پژوهش، با استفاده از مدل‌سازی پیوندهای واندروالسی بین دو لایه گرافن بر اساس تابع پتانسیل لندارد- جونز، مدول کششی - فشاری و مدول برشی بین لایه‌ای یک گرافن دو لایه به صورت تحلیلی محاسبه شده است. با تغییرات پارامتر عمق پتانسیل در تابع پتانسیل لندارد- جونز، که نشان دهنده قدرت پیوند می‌باشد، مدلی برای محاسبه‌ی مدول‌های درون صفحه‌ای و برون صفحه‌ای پیوندهای واندروالسی گرافن دو لایه ارائه شده است. هندسه‌ی یک گرافن دو لایه (آرمچیر یا زیگزگ) بودن و نحوه قرار گرفتن لایه‌ها بر روی یکدیگر (مقدار پارامتر عمق پتانسیل دو پارامتر تعیین کننده در محاسبه مدول‌های پیوندهای واندروالسی می‌باشد. اساس این روش، حرکت دادن یک لایه گرافن بر روی دیگری و اندازه‌گیری تنش‌ها و کرنش‌های درون صفحه‌ای و برون صفحه‌ای می‌باشد. تمامی حرکت‌های لایه‌های گرافن نسبت به یکدیگر به گونه‌ای فرض شده است که تغییرات تنش و کرنش در ناحیه خطی بوده و شکست یا ایجاد پیوند جدید به سبب حرکت نسبی دو لایه رخ ندهد. برای اعتبارسنجی و بررسی دقت روش پیشنهاد شده، مقایسه‌ای بین نتایج بدست آمده از این روش با آنچه در مراجع گزارش شده است انجام گرفته است و صحت و دقت این روش تأیید شده است. در انتها، برای تعدادی از پارامترهای عمق پتانسیل که در مقالات گزارش شده است، مدول برشی در دو راستای زیگزگ و آرمچیر و برای دو لایه چینی ABA و AAA به همراه مدول کششی - فشاری محاسبه شده و رابطه‌ای فرم بسته برای محاسبه این مدول‌ها بر حسب پارامتر عمق پتانسیل ارائه شده است.

Presentation of a geometrical-analytical method for investigation of interlayer moduli in bilayer graphene sheets

Reza Nazemnezhad^{1*}, Kamran Kamali², Shahrokh Hosseini-Hashemi²

1- Department of Mechanical Engineering, Damghan University, Damghan, Iran

2- Department of Mechanical Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

* P.O.B. 36716-41167 Damghan, Iran, rnazemnezhad@du.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 03 March 2015
Accepted 07 May 2015
Available Online 24 May 2015

Keywords:
Bilayer graphene
Van der Waals interactions
Potential depth parameter
Shear modulus
Tensile-compressive modulus

ABSTRACT

The aim of this study is to present a new geometrical-analytical method for determination of tensile-compressive and shear moduli of van der Waals (vdWs) interactions between graphene layers based on the Lennard-Jones potential function. In this method a small flake of monolayer graphene is slid on a large monolayer graphene substrate, and accordingly variations of vdWs forces as well as interlayer shear and normal strains are recorded. It is assumed that the relative displacements of graphene layers are in such a way that they cause only linear strains and stresses, do not create a new bond, and do not break any bonds. Effects of various parameters, chirality angle, stacking pattern, and potential depth parameter, are considered on values of interlayer moduli. Furthermore, close-form relations for interlayer moduli versus the potential depth parameter are presented for ABA and AAA stacking patterns in both zigzag and armchair directions. The results show a linear variation for the interlayer moduli versus the potential depth parameter. It is also observed that the interlayer shear modulus in zigzag direction and the tensile-compressive modulus for AAA stacking pattern are higher than those in armchair direction and for ABA stacking pattern, respectively.

1- مقدمه

زمینه‌های متنوعی از جمله تشدید کننده‌های مکانیکی [3]، حسگرهای گاز [4]، حسگرهای جرم و آشکارسازی گرد و غبار [5]، علوم زیستی و بیوتکنولوژی [7,6]، نیمه هادی‌ها [8]، باتری‌ها [10,9]، سلول‌های سوختی [12,11] و کامپوزیت‌های پلیمری [15-13] کاربرد وسیعی دارد. همچنین با توجه به دارا بودن مقاومت مکانیکی فوق العاده و ضخامت بسیار کم، گرافن‌ها در صنایع هوا و

صفحاتی که اتم‌های کربن در آن توسط پیوندهای هیبریدی sp^2 در رئوس شبکه‌های شش ضلعی در کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند گرافن نام دارد [1]. این ماده، به عنوان نازک‌ترین و قوی‌ترین ماده شناخته شده در جهان، خواص الکتریکی، اپتیکی و حرارتی منحصر به فردی دارد [2]. به همین علت در

Please cite this article using:

R. Nazemnezhad, K. Kamali, Sh. Hosseini-Hashemi, Presentation of a geometrical-analytical method for investigation of interlayer moduli in bilayer graphene sheets, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 7, pp. 89-97, 2015 (In Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

مدول کششی- فشاری و مقادیر $4/5$ و $3/9$ گیگاپاسکال را برای مدول برشی برون صفحه‌ای گرافیت گزارش کرده‌اند. در پژوهش دیگری ساوینی و همکارانش [25]، با استفاده از نظریه تابعی چگالی مقدار مدول برشی و مدول کششی- فشاری بین لایه‌ای در گرافن دو لایه با الگوی لایه‌چینی ABA را به ترتیب $4/8$ و 42 گیگاپاسکال گزارش نمودند. در تعدادی از پژوهش‌ها نیز به منظور در نظر گرفتن اثرات کششی- فشاری پیوندهای واندروالسی بین دو لایه گرافن، پیوندهای واندروالسی را به کمک تابع پتانسیل لنارد- جونز مدل‌سازی کرده و ضریب پیوندهای واندروالسی میان لایه‌های گرافن را محاسبه و در تحلیل‌های مکانیکی از آن استفاده نموده‌اند [26-28].

با توجه به مطالعات صورت گرفته بر روی مدول برشی و مدول کششی- فشاری بین لایه‌ای پیوندهای واندروالسی در گرافن‌های چند لایه، مشاهده می‌شود که تاکنون تاثیر پارامتر عمق پتانسیل در تابع پتانسیل لنارد- جونز مورد بررسی قرار نگرفته است. در حالی که تغییرات این پارامتر، که وابسته به تغییرات دما و فشار محیط می‌باشد، می‌تواند تغییرات بسزایی در قدرت پیوندهای واندروالسی ایجاد کند که متعاقباً باعث تغییر در خواص مکانیکی گرافن‌های چند لایه خواهد شد. این در حالی است که در تحلیل‌های تئوری علاوه بر دما و فشار، هندسه گرافن دو لایه (آرمچیر یا زیگزاگ بودن) نیز حائز اهمیت می‌باشد. به همین منظور، روشی هندسی- تحلیلی برای اندازه‌گیری اثر پارامتر عمق پتانسیل بر روی مدول برشی و مدول کششی- فشاری پیوندهای بین لایه‌ای واندروالسی در گرافن‌ها ارائه شده است. در این پژوهش، ابتدا یک اتم کربن در یک لایه در نظر گرفته شده و با استفاده از تابع پتانسیل لنارد- جونز، نیروی پیوندهای واندروالسی‌ای که با دیگر اتم‌های کربن لایه مجاور برقرار می‌کند مدل‌سازی می‌شود. سپس اتم کربن مورد نظر در راستا و عمود بر صفحه گرافن حرکت داده می‌شود. بدین ترتیب با ایجاد کرنش‌های بین لایه‌ای و عمود بر لایه‌ای و محاسبه تغییرات نیروی پیوندهای واندروالسی، مدول برشی و مدول کششی- فشاری بین لایه‌ای بدست می‌آید. این مدل‌سازی به ازای بازه گسترده‌ای از پارامتر عمق پتانسیل صورت گرفته و رابطه‌ای برای محاسبه‌ی مدول برشی در دو راستای آرمچیر و زیگزاگ و مدول کششی- فشاری بر اساس تغییرات پارامتر عمق پتانسیل برای دو نوع لایه‌چینی ABA و AAA ارائه شده است.

2- مدل سازی پیوندهای واندروالسی در گرافن دو لایه

برای مدل‌سازی پیوندهای واندروالسی از توابع متفاوتی می‌توان استفاده نمود که یکی از پرکاربردترین این توابع، تابع پتانسیل لنارد- جونز می‌باشد. انرژی پتانسیل بین دو اتم کربن که در دو لایه مجاور هم قرار دارند، با استفاده از تابع پتانسیل لنارد- جونز به صورت رابطه (1) تعریف می‌شود [29].

$$U_{LJ} r = \alpha \left[\left(\frac{\beta}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\beta}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

که در آن U_{LJ} پتانسیل لنارد- جونز، r فاصله دو اتم کربن دارای پیوند واندروالسی، β فاصله‌ای است که در آن انرژی پتانسیل بین دو اتم کربن صفر می‌شود و α پارامتر عمق پتانسیل می‌باشد. با مشتق گرفتن از رابطه (1)، تابع نیروی لنارد- جونز که بیانگر مقدار نیروی بین دو اتم کربن در زمان برقراری پیوند واندروالسی است، به صورت رابطه (2) بدست می‌آید [26].

$$F_{LJ} r = - \frac{dU_{LJ}}{dr} = \frac{\alpha}{\beta} \left[\left(\frac{\beta}{r} \right)^{13} - \left(\frac{\beta}{r} \right)^7 \right] \quad (2)$$

از آنجایی که یک اتم کربن در یک لایه می‌تواند توسط ابر الکترونی خود با ابر الکترونی چندین اتم از لایه مجاور خود نیروی دافعه و جاذبه برقرار کند، بایستی یک شعاع قطع¹⁰ برای پیوندهای واندروالسی تعریف گردد. شعاع

فضا [16] و به عنوان فیلتر در تصفیه آب [17] نیز مورد استفاده قرار گرفته‌اند. گرافن‌ها به صورت تک لایه و چند لایه سنتز می‌شوند. گرافن‌های چند لایه توسط پیوندهای واندروالسی برون صفحه‌ای که ضعیف‌تر از پیوندهای کووالانسی درون صفحه‌ای هستند در کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند. این پیوندهای ضعیف عامل مهمی در تغییر رفتار و خواص مکانیکی و الکتریکی گرافن‌ها محسوب می‌شوند. به همین دلیل بررسی دقیق و جزئی‌تر ویژگی‌های پیوندهای واندروالسی بین صفحات گرافن‌ها از اهمیت بالایی برخوردار است. محققان برای تحلیل رفتار بین‌لایه‌ای گرافن‌ها از روش‌های متفاوتی همچون مکانیک محیط پیوسته، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، المان محدود و مکانیک مولکولی استفاده می‌کنند.

در یکی از این پژوهش‌ها، برای یک گرافن دو لایه با الگوی لایه‌چینی ABA، با استفاده از تابع پتانسیل آبرو¹ و به ازای مقادیر $2/84$ و $45/44$ میلی الکترون ولت برای پارامتر عمق پتانسیل، مقدار مدول برشی بین لایه‌ای به ترتیب $0/288$ و $4/6$ گیگاپاسکال بدست آمده است [18]. لیو و همکارانش [19]، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در نرم‌افزار گرومکس² استفاده از میدان نیرویی دیریدینگ³ مقدار مدول برشی را $0/25$ گیگاپاسکال گزارش نمودند. هجگاتو و همکارانش [20]، با استفاده از نظریه تابعی چگالی⁴ با شرایط مرزی متناوب و استفاده از بسته نرم‌افزاری گوسین⁵، مدول یانگ و مدول برشی برون صفحه‌ای را برای یک گرافن دو لایه بدست آوردند. آنها با مدل‌سازی روش‌های مختلفی در نرم‌افزارهای محاسباتی، در نهایت مقدار 25 گیگاپاسکال را برای مدول یانگ برون صفحه‌ای و مقدار 2 گیگاپاسکال را برای مدول برشی برون صفحه‌ای در الگوی لایه چینی ABA ارائه دادند. با مدل‌سازی پیوندهای کووالانسی به کمک المان‌های تیر غیرخطی و استفاده از تابع پتانسیل مورس⁶ و مدل‌سازی پیوندهای واندروالسی به صورت المان‌های خربای غیرخطی و استفاده از تابع پتانسیل لنارد- جونز، مدول‌های برشی و کششی- فشاری بین لایه‌ای یک گرافن دو لایه با استفاده از روش المان محدود بدست آمده است [21]. با استفاده از این فرضیات، مقدار مدول کششی- فشاری بین لایه‌ای گرافن دو لایه $26/6$ گیگاپاسکال و مدول برشی در دو جهت زیگزاگ و آرمچیر به ترتیب $0/609$ و $0/482$ گیگاپاسکال محاسبه شده است. علاوه بر روش‌های شبیه‌سازی مولکولی و المان محدود، برخی از پژوهشگران با استفاده از روش‌های آزمایشگاهی مقادیر مدول‌های برشی و کششی- فشاری بین لایه‌ای یک گرافن دو لایه را بدست آورده‌اند. بلاکسل و همکارانش [22]، با مطالعات آزمایشگاهی بر روی صفحات گرافن مدول الاستیک پیوندهای واندروالسی در راستای ضخامت را $36/5$ گیگاپاسکال و مدول برشی این پیوندها را در بازه $0/18$ تا $0/35$ گیگاپاسکال گزارش نمودند. در پژوهش آزمایشگاهی دیگری، با استفاده از روش پراکندگی غیرالاستیک اشعه ایکس⁷، مقدار مدول الاستیک و مدول برشی برون صفحه‌ای برای یک بلور گرافیت که شامل چند لایه گرافن می‌باشد به ترتیب $38/7$ و 5 گیگاپاسکال گزارش شده است [23]. مونت و مارزاری [24]، با استفاده از دو روش تئوری تخمین چگالی محلی⁸ و تخمین شیب تعمیم یافته⁹ مقدار مدول‌های برشی و کششی- فشاری برون صفحه‌ای گرافیت را محاسبه و گزارش نمودند. آنها مقادیر $29/5$ و $42/2$ گیگاپاسکال را برای

- 1- AIREBO
- 2- GROMACS software
- 3- Dreiding force field
- 4- Density Functional Theory (DFT)
- 5- GAUSSIAN program package
- 6- Morse Potential function
- 7- Resonant Inelastic X-ray Scattering (RIXS)
- 8- Local Density Approximation (LDA)
- 9- Generalized Gradient Approximation (GGA)

10- Cut-off radius

$$\varepsilon_{zz i} \frac{dz_i}{h_0} \quad (4)$$

در رابطه (4)، h_0 فاصله بین دو لایه گرافن در حالت تعادل می‌باشد که در مراجع مختلفی برابر با 0/34 نانومتر گزارش شده است [31-33]. به منظور محاسبه کرنش عمود بر لایه‌ای پیوندهای واندروالسی، لایه بالایی در بازه‌های مختلفی در راستای عمود بر لایه حرکت داده می‌شود و در هر مرتبه تغییرات فاصله بین دو لایه گرافن اندازه‌گیری می‌شود. در واقع، dz_i بیانگر اختلاف میان فاصله بین دو لایه گرافن در حالتی که لایه بالایی در مرحله i ام به اندازه h_i در راستای عمود بر صفحه حرکت کرده با فاصله تعادلی بین دو لایه گرافن (h_0) می‌باشد که به صورت رابطه (5) تعریف می‌شود.

$$dz_i = h_i - h_0 \quad (5)$$

تنش عمود بر لایه‌ای در مرحله i ام با حرکت لایه بالایی در راستای عمود بر لایه گرافن به صورت رابطه (6) تعریف می‌شود.

$$\sigma_{zz i} = - \left(\frac{dF_{zi}^1}{\frac{1}{\rho}} \frac{dF_{zi}^2}{\rho} \right) \quad (6)$$

در رابطه (6)، ρ تعداد اتم‌های کربن در واحد سطح گرافن می‌باشد که اگر طول پیوند کووالانسی اتم‌های کربن برابر 0/142 نانومتر در نظر گرفته شود، مقدار ρ برابر با $38/17 \times 10^{18}$ اتم بر واحد سطح می‌باشد [34]. به طور معمول اثرات متقابل ذرات در صفحات مختلف با انتگرال‌گیری بر روی دامنه گرافن محاسبه می‌گردد. در این تحقیق، به جای انتگرال‌گیری بر روی سطح گرافن به منظور در نظر گرفتن اثرات متقابل تمامی اتم‌ها با یکدیگر، از پارامتر (ρ) که بیانگر تعداد اتم‌های کربن در واحد سطح گرافن است، استفاده شده است. با استفاده از این پارامتر نیروهای مربوط به تمامی پیوندهایی که تمامی اتم‌ها در یک لایه با اتم‌هایی که در لایه مجاور خود و در شعاع قطع خود هستند، در نظر گرفته می‌شود. در مراجع دیگری همچون مرجع [34]، از پارامتر ρ بجای انتگرال‌گیری روی سطح استفاده شده است. dF_{zi}^1 و dF_{zi}^2 به ترتیب بیانگر مجموع تغییرات مولفه‌ی عمودی نیروهای واندروالسی در مرحله i ام هستند که یک اتم کربن در حالت (1) و یک اتم کربن در حالت (2) از لایه بالایی با سایر اتم‌های کربن لایه پایینی (که در شعاع قطع خود قرار دارند) برقرار کرده‌اند. روابط (7) و (8) نحوه محاسبه $dF_{zi,i}$ را در هر دو حالت (1) و (2) نشان می‌دهد.

$$dF_{zi}^k = F_{zi}^k - F_{z0}^k \quad (7)$$

$$F_{zi}^k = \sum_{j=1}^s F_{Lj}(r_i^{kj}) \quad \theta_{zi}^{kj} r_i^{ks} \leq \beta \quad (8)$$

بالانویس k می‌تواند اعداد 1 یا 2 را شامل شود که عدد 1 نشان‌دهنده اتم‌های حالت (1) و عدد 2 نشان‌دهنده اتم‌های حالت (2) می‌باشد. زیرنویس i نیز بیانگر بازه حرکت لایه بالایی است. بالانویس j نیز بیانگر شماره اتمی است که در شعاع قطع قرار دارد و آخرین اتمی که در این محدوده قرار دارد با s نشان داده شده است. r_i^{kj} نشان‌دهنده فاصله دو اتم در پیوند واندروالسی بعد از جابجایی صفحه بالایی به اندازه dz_i می‌باشد. سری فوق تا جایی که فاصله بین دو اتم با پیوند واندروالسی کمتر از شعاع قطع باشد ادامه می‌یابد F_{z0}^k ، بیانگر مجموع مولفه‌های عمودی نیروهای واندروالسی یک اتم کربن در حالت k زمانی که دو لایه گرافن در فاصله تعادلی از یکدیگر قرار دارند می‌باشد. زاویه‌ی برون صفحه‌ای است که بیانگر زاویه بین پیوندهای واندروالسی و محور عمود بر صفحه گرافن بعد از حرکت لایه بالایی گرافن به اندازه dz_i می‌باشد.

برای محاسبه مدول برشی پیوندهای واندروالسی در یک گرافن دولایه با الگوی لایه‌چینی ABA، بایستی راستای مورد نظر مشخص گردد. مدول برشی

قطع، فاصله‌ای است که در محدوده این فاصله، ابر الکترونی یک اتم کربن در یک لایه بر روی ابر الکترونی اتم‌های سایر لایه‌ها تاثیر می‌گذارند و این مقدار معمولاً 2/5 برابر مقدار β در نظر گرفته می‌شود [30]. ابعاد صفحه پایینی نسبت به صفحه بالایی به اندازه کافی بزرگ در نظر گرفته می‌شود تا اثرات لبه‌ای در هنگام کشیده شدن صفحه بالایی بر روی صفحه پایینی از بین برود. در شکل 1 شماتیک یک گرافن دو لایه با الگوی لایه‌چینی ABA و AAA از دو نما نشان داده شده است. با توجه به شکل 1، در لایه‌چینی ABA نیمه‌ای از اتم‌های کربن در لایه‌ی بالایی دقیقاً در بالای یکی از اتم‌های کربن در لایه‌ی پایینی قرار دارد (حالت (1)) و نیمه‌ی دیگر از اتم‌های کربن لایه بالایی در مرکز یکی از شبکه‌های شش ضلعی اتم‌های کربن لایه پایینی قرار دارند (حالت (2)). به همین دلیل برای محاسبه نیروهای واندروالسی بین لایه‌ای در این نوع لایه‌چینی بایستی اثرات ناشی از هر دو حالت (1) و (2) در نظر گرفته شود. در لایه‌چینی AAA تمامی اتم‌های کربن در لایه بالایی در حالت (1) قرار گرفته‌اند و برای محاسبه نیروهای بین اتمی باید تنها اثرات ناشی از حالت (1) لحاظ گردد.

3- روش تحلیلی محاسبه مدول پیوندهای واندروالسی

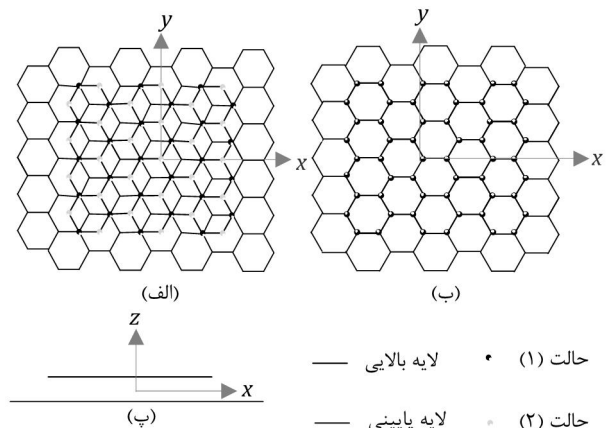
برای محاسبه مدول برشی و مدول کششی- فشاری پیوندهای واندروالسی بایستی تنش‌ها و کرنش‌های ناشی از حرکت‌های نسبی دو لایه مورد بررسی قرار گیرد.

3-1- الگوی لایه‌چینی ABA

مدول کششی- فشاری پیوندهای واندروالسی در یک گرافن دو لایه با الگوی لایه‌چینی ABA، به صورت رابطه (3) تعریف می‌شود.

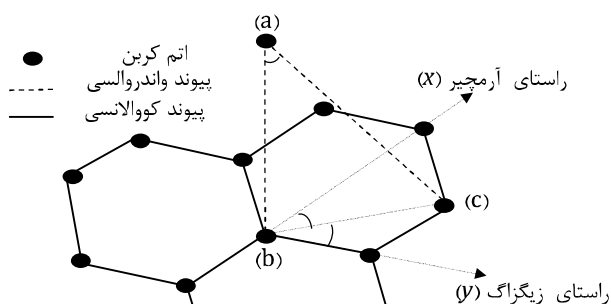
$$E = \frac{\sigma_{zz}}{\varepsilon_{zz}} \quad (3)$$

که در رابطه فوق E مدول کششی- فشاری پیوندهای واندروالسی بین دو لایه گرافن می‌باشد. متغیرهای ε_{zz} و σ_{zz} به ترتیب بیانگر کرنش و تنش عمود بر لایه‌ای پیوندهای واندروالسی هستند. به منظور محاسبه‌ی مدول کششی- فشاری پیوندهای واندروالسی، در ابتدا لایه بالایی در راستای عمود بر لایه در بازه‌های مختلفی (i) حرکت داده می‌شوند و در هر مرتبه مقدار تنش و کرنش محاسبه می‌شود. با محاسبه شیب نمودار تنش- کرنشی که هر نقطه از آن نمودار تنش و کرنش مختص یک بازه را نشان می‌دهد، مدول کششی- فشاری پیوندهای واندروالسی بدست می‌آید. کرنش عمود بر لایه‌ای در مرحله i ام، با حرکت لایه بالایی گرافن در راستای عمود بر لایه به صورت رابطه (4) محاسبه می‌شود.

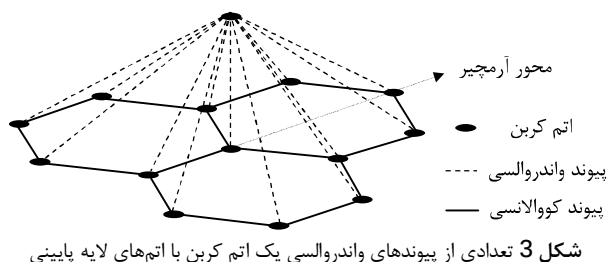


شکل 2، زوایای برون صفحه‌ای (θ_{zi}) و درون صفحه‌ای در راستای آرمچیر و زیگزاگ (θ_{xi} و θ_{yi}) برای پیوند واندروالسی بین دو اتم (a) و (c) را به صورت شماتیک نشان می‌دهد. به علت آن که حرکت اتم کربن مورد نظر در صفحه بالایی در راستاهای مختلف بسیار کوچک در نظر گرفته شده است، میزان کرنش ایجاد شده بسیار کم بوده و در نتیجه مدول کششی- فشاری و مدول برشی بدست آمده برای این محدوده از کرنش‌ها مورد قبول می‌باشد. با توجه به تعاریف فوق با حرکت دادن یک اتم از لایه بالایی در راستای عمود بر صفحه گرافن و در راستای آرمچیر و زیگزاگ در بازه‌های کوچک و مشخص کردن سه پارامتر فاصله‌ی بین دو اتم دارای پیوند واندروالسی (r_i)، زاویه برون صفحه‌ای (θ_{zi}) و زاویه درون صفحه‌ای در راستای آرمچیر و زیگزاگ (θ_{xi} یا θ_{yi}) در هر بازه از جابجایی اتم مورد نظر، می‌توان مقدار تنش و کرنش ایجاد شده در پیوندهای واندروالسی را محاسبه نمود. از آنجا که اتم‌های لایه بالایی در لایه‌چینی ABA در دو حالت متفاوت قرار دارند، تغییرات نیروهای واندروالسی برای هر کدام از حالت‌ها بایستی جداگانه محاسبه گردد.

با توجه به اینکه نمایش تمامی پیوندهای واندروالسی یک اتم در شعاع قطع تعریف شده دشوار است، در شکل 3 به عنوان نمونه بخشی از پیوندهای واندروالسی را که یک اتم با اتم‌های دیگر در حالت (1) می‌تواند برقرار کند، نشان داده شده است. در جدول 1 سه پارامتر فاصله بین دو اتم دارای پیوند واندروالسی، زاویه برون صفحه‌ای و زاویه درون صفحه‌ای در راستای آرمچیر و در حالت اولیه برای محدوده پیوندهای واندروالسی نشان داده شده در شکل 3، آورده شده است. با حرکت یک اتم کربن در لایه بالایی در بازه‌های مختلف و ایجاد کرنش‌های برشی و کششی- فشاری، هر سه پارامتر فوق تغییر کرده و موجب ایجاد تغییرات تنش می‌گردد. با مشخص نمودن پارامترهای مربوط به تابع پتانسیل لنارد- جونز و رسم نموداری که بیانگر میزان تغییرات تنش بر حسب تغییرات کرنش می‌باشد و اندازه‌گیری شیب نمودار، مدول پیوندهای واندروالسی مشخص می‌گردد. مقدار پارامتر β در محاسبات مقداری ثابت و برابر 0/34 نانومتر در نظر گرفته شده است [30].



شکل 2 نمای شماتیک زوایای برون صفحه‌ای و درون صفحه‌ای پیوند واندروالسی بین دو اتم (a) و (c)، (a) دقیقاً در بالای اتم (b) قرار دارد (اتم (a) در حالت (1) قرار گرفته است).



شکل 3 تعدادی از پیوندهای واندروالسی یک اتم کربن با اتم‌های لایه پایینی

در راستای آرمچیر به صورت رابطه (9) تعریف شده است.

$$G = \frac{\tau_{xz}}{\gamma_{xz}} \quad (9)$$

که در رابطه فوق τ_{xz} و γ_{xz} به ترتیب تنش برشی و کرنش برشی بین لایه‌ای پیوندهای واندروالسی در راستای آرمچیر می‌باشد. در رابطه فوق کرنش برشی به صورت رابطه (10) تعریف می‌گردد.

$$d\gamma_{xz} = \frac{dx_i}{h_0} \quad (10)$$

dx_i بیانگر میزان جابجایی لایه بالایی گرافن در راستای آرمچیر در مرحله نام می‌باشد. تنش برشی در راستای آرمچیر نیز به صورت رابطه (11) تعریف می‌گردد.

$$\tau_{xz i} = - \left(\frac{dF_{xi}^1}{\frac{1}{\rho}} - \frac{dF_{xi}^2}{\frac{1}{\rho}} \right) \quad (11)$$

که dF_{xi}^1 و dF_{xi}^2 به ترتیب بیانگر مجموع تغییرات مولفه‌ی افقی نیروهای واندروالسی در راستای آرمچیر و در مرحله نام هستند که یک اتم کربن در حالت (1) و یک اتم کربن در حالت (2) از لایه بالایی با سایر اتم‌های کربن لایه پایینی (که در شعاع قطع خود قرار دارند) برقرار کرده‌اند. روابط (12) و (13) نحوه محاسبه dF_{xi} را در هر دو حالت (1) و (2) نشان می‌دهد.

$$dF_{xi}^k = F_{xi}^k - F_{xi}^k_0 \quad (12)$$

$$F_{xi}^k = \sum_{j=1}^s F_{Lj}(r_i^{kj}) \quad \theta_{zi}^{kj} \quad \theta_{xi}^{kj} \quad r_i^{ks} \leq \beta \quad (13)$$

در روابط فوق θ_{xi}^{kj} زاویه درون صفحه‌ای نام دارد که زاویه بین مولفه درون صفحه‌ای نیروی واندروالسی و محور آرمچیر صفحه گرافنی بعد از حرکت لایه بالایی گرافن به اندازه dx_i در راستای آرمچیر می‌باشد. به منظور محاسبه مدول برشی بین لایه‌ای در راستای زیگزاگ روابط (14) تا (18) حاکم هستند.

$$G = \frac{\tau_{yz}}{\gamma_{yz}} \quad (14)$$

$$\gamma_{yz} = \frac{dy_i}{h_0} \quad (15)$$

$$\tau_{yz} = - \left(\frac{dF_{yi}^1}{\frac{1}{\rho}} - \frac{dF_{yi}^2}{\frac{1}{\rho}} \right) \quad (16)$$

$$dF_{yi}^k = F_{yi}^k - F_{yi}^k_0 \quad (17)$$

$$F_{yi}^k = \sum_{j=1}^s F_{Lj}(r_i^{kj}) \quad \theta_{zi}^{kj} \quad \theta_{yi}^{kj} \quad r_i^{ks} \leq \beta \quad (18)$$

که در روابط فوق اندیس y نشان دهنده راستای زیگزاگ می‌باشد و θ_{yi}^{kj} زاویه درون صفحه‌ای در راستای زیگزاگ است.

3-2- الگوی لایه چینی AAA

با توجه به اینکه در الگوی لایه‌چینی AAA تمامی اتم‌های کربن در حالت (1) قرار دارند، برای بدست آوردن روابط حاکم بر مدول کششی- فشاری و مدول برشی در دو راستای آرمچیر و زیگزاگ، مقدار پارامتر k در روابط حالت ABA برابر 1 خواهد بود و روابط (6)، (11) و (16) به ترتیب به صورت روابط (19) تا (21) تغییر می‌یابند.

$$\sigma_{zz} = \frac{dF_z^1}{\frac{1}{\rho}} \quad (19)$$

$$\tau_{xz} = \frac{dF_x^1}{\frac{1}{\rho}} \quad (20)$$

$$\tau_{yz} = \frac{dF_y^1}{\frac{1}{\rho}} \quad (21)$$

جدول 1 مشخصات اولیه پیوندهای واندروالسی یک اتم کربن در لایه بالایی با تعدادی

از اتم‌های کربن لایه پایینی			
تعداد اتم	فاصله اولیه بین اتم	زاویه اولیه برون صفحه (درجه)	زاویه اولیه درون صفحه (آرمچیر) (درجه)
1	0/340	0	0
1	0/443	39/87	0
1	0/368	22/67	180
2	0/368	22/67	60
2	0/420	35/88	30
2	0/420	35/88	90
2	0/420	35/88	150
2	0/443	39/87	120

جدول 2 مقادیر پارامتر عمق پتانسیل گزارش شده در مراجع

مرجع	پارامتر عمق پتانسیل (meV)
[18]	2/84 ، 45/44
[35]	2/7 - 3/7
[36]	2/168
[37]	2/968
[38]	2/5
[39]	4/5

جدول 3 مقادیر مدول برشی و مدول کششی - فشاری گزارش شده در مراجع برای

گرافن دو لایه با الگوی لایه‌چینی ABA			
مرجع	کابریالیتی	پارامتر عمق پتانسیل (meV)	مدول برشی (GPa)
[18]	-	2/84	0/288
[40]	آرمچیر	44/45	4/6
[21]	آرمچیر	-	3/01
[25]	زیگزاک	-	0/482
[19]	آرمچیر	-	0/609
[23]	-	-	4/8
[41]	-	-	0/25
[20]	-	-	5±3
[42]	-	-	-
[43]	-	-	38/7±7
			40/8
			25
			0/8 ، 30/4
			37/1±5
			4/6±2

به علت آنکه پارامتر عمق پتانسیل با توجه به اندازه طول پیوند واندروالسی و تغییرات شرایط محیطی (دما و فشار) قابل تغییر است، هر یک از مراجع با توجه به تابع پتانسیل در نظر گرفته شده، مقادیر متفاوتی از این پارامتر گزارش داده‌اند که در جدول 2 لیست شده‌اند. به همین دلیل مقدار مدول کششی - فشاری و مدول برشی پیوندهای واندروالسی با توجه به مقادیر متفاوت پارامتر عمق پتانسیل محاسبه می‌شود. با استفاده از کد نویسی در

نرم‌افزار متلب، مقدار تنش برشی و تنش کششی - فشاری به ازای تغییرات کرنش برشی و کرنش کششی - فشاری بدست آمده است. لازم به ذکر است که همواره پراکندگی داده‌ها نمی‌تواند جنبه منفی داشته باشد بلکه می‌تواند اهمیت موضوع فوق را نشان دهد که مراجع مختلف با روش‌های مختلف به موضوع فوق پرداخته‌اند تا بصورت دقیق‌تر پی به ماهیت موضوع مورد نظر ببرند. پراکندگی مقادیر پارامتر عمق پتانسیل به دلیل شرایط مختلف پیوندهای واندروالسی کربن-کربن (اعم از طول پیوند، دما، فشار و ...) می‌باشد. در مراجع مختلف بنا بر استفاده از نوع تابع پتانسیل استفاده شده (مثل تابع پتانسیل ایربو یا دیریدینگ) جهت مدل‌سازی گرافن دولایه مقادیر متفاوتی را برای مدول‌های برشی و کششی - فشاری بدست آورده‌اند که این اختلاف، به دلیل استفاده از مقادیر متفاوت برای پارامتر عمق پتانسیل که خود آن وابسته به شرایط می‌باشد، است. بسیاری از مراجعی که مدول برشی و مدول کششی - فشاری بین لایه‌ای گرافن‌ها را محاسبه نموده‌اند، به صورت دقیق به مقدار پارامتر عمق پتانسیل در نظر گرفته شده و همچنین در مورد مدول برشی به جهت زیگزاک و آرمچیر اشاره‌ای نکرده‌اند. به همین دلیل پراکندگی زیادی در داده‌های گزارش شده توسط پژوهشگران به چشم می‌خورد. در جدول 3 مقادیر مدول برشی و مدول کششی - فشاری گزارش شده توسط محققان لیست شده است.

4- نتایج

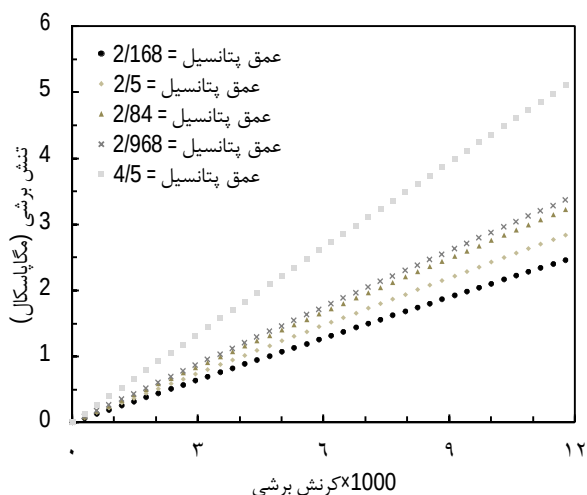
به منظور بررسی اثرات ناشی از نوع لایه‌چینی بر روی مدول کششی - فشاری و مدول برشی گرافن دو لایه، بحث بر روی نتایج در دو بخش ارائه می‌شود.

4-1- لایه‌چینی ABA

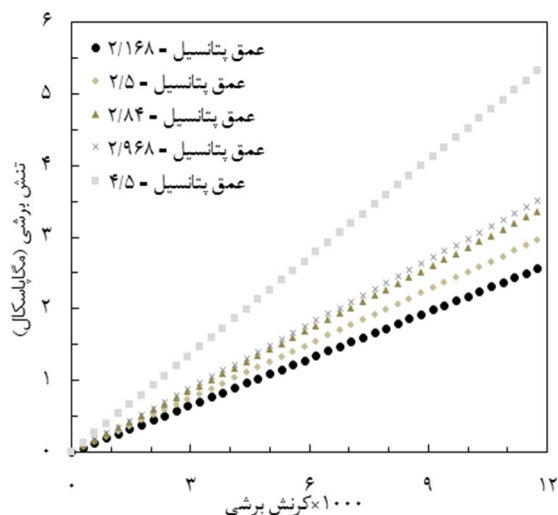
قبل از ارائه نتایج، در جدول 4 مقایسه‌ای بین نتایج روش هندسی - تحلیلی با نتایج سایر روش‌ها انجام گرفته است تا صحت فرمولاسیون ارائه شده و نتایج آن اثبات شود. جدول 4 نشان می‌دهد که دقت نتایج روش هندسی - تحلیلی ارائه شده تطابق بسیار خوبی با سایر نتایج دارد. همان‌طور که پیشتر در بخش 3 توضیح داده شد، به منظور تعیین مدول برشی و مدول کششی - فشاری پیوندهای واندروالسی در گرافن دولایه، باید نمودار تغییرات تنش بر حسب کرنش رسم شود تا بتوان از روی شیب نمودارها، مدول‌های مورد نظر را تعیین نمود. بدین منظور، ابتدا با رسم شکل 4 که نشان دهنده تغییرات تنش عمودی بر حسب کرنش عمودی پیوندهای واندروالسی می‌باشد مشاهده می‌شود که در بازه کرنش‌های 0/004- تا 0/0040، منحنی رفتار خطی از خود نشان می‌دهد بنابراین با تعیین شیب منحنی در این بازه، می‌توان مدول‌های کششی - فشاری یا برشی را تعیین نمود. بعد از تعیین محدوده رفتار خطی منحنی‌های تنش - کرنش، نمودار تغییرات تنش عمودی بر حسب کرنش عمودی به ازای پنج مقدار برای پارامتر عمق پتانسیل در شکل 5 نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش پارامتر عمق پتانسیل که متناسب با افزایش قدرت پیوندهای واندروالسی می‌باشد، اندازه مدول کششی - فشاری (که همان شیب نمودار می‌باشد) افزایش می‌یابد.

جدول 4 مقایسه نتایج روش هندسی - تحلیلی با نتایج سایر مقالات در لایه‌چینی ABA

پارامتر عمق پتانسیل (meV)		روش هندسی - تحلیلی (GPa)		سایر پژوهش‌ها	
مرجع	مقدار مدول (GPa)	راستای زیگزاک	راستای آرمچیر	روش تحلیل	مرجع
مدول برشی	2/84	0/2853	0/2761	دینامیک مولکولی	[18]
	45/44	4/5600	4/4170	دینامیک مولکولی	[18]
مدول کششی - فشاری	2/41	26/71	26/6	مکانیک مولکولی	[21]



شکل 6 نمودار تنش - کرنش برشی در راستای آرمچیر به ازای مقادیر مختلف پارامتر عمق پتانسیل



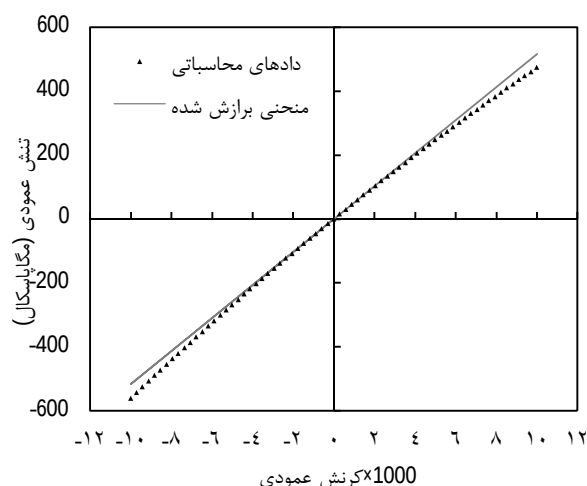
شکل 7 نمودار تنش - کرنش برشی در راستای زیگزاگ به ازای مقادیر مختلف پارامتر عمق پتانسیل

جدول 5 مقادیر مدول کششی- فشاری و مدول برشی به ازای پارامتر عمق پتانسیل با الگوی لایه چینی ABA

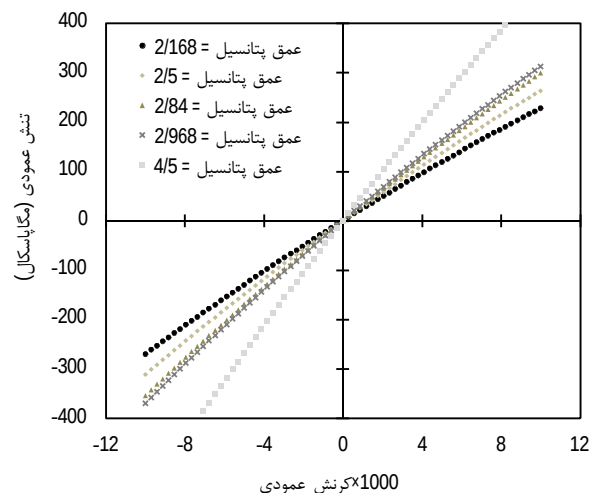
پارامتر عمق پتانسیل (meV)		مدول کششی- فشاری (GPa)		مدول برشی (GPa)	
آرمچیر	زیگزاگ	0/2108	0/2201	0/2108	0/2201
2/168	24/90	28/71	0/2430	0/2510	0/2510
2/5	32/61	34/09	0/2761	0/2853	0/2853
2/84	51/69	521/90	0/4474	0/4540	0/4540
2/968	45/44		4/4170	4/5600	4/5600

با قبول بازه 2/84 تا 45/44 میلی الکترون ولت برای تغییرات پارامتر عمق پتانسیل، مقدار مدول کششی- فشاری به ازای 45/44 میلی الکترون ولت بر اساس روش هندسی- تحلیلی ارائه شده در تحقیق حاضر، 521/9 گیگاپاسکال بدست می‌آید. در حالی که مدول الاستیسیته درون صفحه‌ای یک لایه گرافن در حدود دو برابر این مقدار گزارش شده است [21]. این مقدار مدول کششی- فشاری برای پیوندهای ضعیف واندروالسی در برابر پیوندهای قوی کووالانسی بیانگر این موضوع است که این مقدار بسیار بالا

در شکل‌های 6 و 7 نیز نمودار تغییرات تنش برشی بر حسب کرنش برشی به ترتیب در راستای آرمچیر و زیگزاگ نمایش داده شده است. با تعیین شیب نمودارهای تنش-کرنش، مقادیر مدول کششی- فشاری و مدول برشی پیوندهای واندروالسی بین دو لایه گرافن با توجه به کاپرالیته آن و به ازای مقادیر مختلفی از پارامتر عمق پتانسیل در جدول 5 داده شده است. جدول 5 نشان می‌دهد که به ازای یک مقدار مشخص برای پارامتر عمق پتانسیل، مدول برشی برون صفحه‌ای یک گرافن دو لایه در راستای زیگزاگ بزرگتر از راستای آرمچیر است که این امر مطابق با یافته‌های دیگر پژوهشگران می‌باشد [21]. یکی از پژوهش‌های آزمایشگاهی، مقدار مدول برشی بین لایه‌ای را در بازه 5 ± 3 گیگاپاسکال گزارش کرده است [23] که برای رسیدن به این نتایج با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، در پژوهشی دیگر، بازه تغییرات پارامتر عمق پتانسیل از 2/84 تا 45/44 میلی الکترون ولت در نظر گرفته شده است [18]. این در حالی است که در اغلب پژوهش‌های صورت گرفته، تغییرات پارامتر عمق پتانسیل در بازه محدودی گزارش شده است. در یکی از کامل‌ترین پژوهش‌ها، کوکون و همکارانش [35] مقادیر پارامترهای تابع پتانسیل لنارد- جونز را در شرایط مختلف اندازه‌گیری کرده‌اند و برای پارامتر عمق پتانسیل بازه 2/7 تا 3/7 میلی الکترون ولت را گزارش نموده‌اند.



شکل 4 نمونه‌ای از منحنی برازش شده بر داده‌های بدست آمده از روش هندسی- تحلیلی در کشش- فشار



شکل 5 نمودار تنش - کرنش عمودی به ازای مقادیر مختلف عمق پتانسیل

این ارتباط توسط رابطه (1) (تابع پتانسیل لنارد- جونز) و رابطه (2) (تابع نیروی لنارد- جونز) قابل تفسیر می‌باشد. چرا که در روابط (1) و (2)، تابع انرژی پتانسیل و تابع نیروی لنارد- جونز با پارامتر عمق پتانسیل رابطه خطی دارند، بنابراین انتظار می‌رود که مدول کششی- فشاری و مدول برشی بین لایه‌ای یک گرافن دو لایه نیز بصورت خطی بر حسب پارامتر عمق پتانسیل تغییر کنند.

4-2- لایه‌چینی AAA

از لحاظ پایداری، الگوی لایه‌چینی AAA در گرافن دو لایه، الگویی ناپایدار گزارش شده است [44] و به همین دلیل کمتر مورد توجه محققان قرار گرفته است و مراجعی که مقادیر مدول کششی- فشاری و مدول برشی بین لایه‌ای گرافن دو لایه را مورد بررسی قرار داده‌اند اندک می‌باشد. در یکی از پژوهش‌های صورت گرفته در این زمینه با استفاده از روش‌های محاسباتی مختلف، بازه مدول کششی- فشاری 19/26 تا 46/29 گیگاپاسکال گزارش شده است [45]. با استفاده از روش تئوری، مدول برشی بین لایه‌ای برای لایه‌چینی AAA، 3/8- گیگاپاسکال گزارش شده است [25]. در مراجع فوق، به مقدار پارامتر عمق پتانسیل و راستای اندازه‌گیری مدول برشی اشاره‌ای نشده است. منفی بودن مقادیر مدول برشی در حالت لایه چینی AAA به معنی ناپایداری و عدم تعادل این نوع لایه چینی می‌باشد. این منفی بودن مدول برشی از لحاظ فیزیکی به این معنا است که در حالت لایه‌چینی AAA نیروهای بین اتمی بین اتم‌های کربن وجود دارند که مانع از این می‌شوند که در حالت AAA تعادل بین دو لایه و نیروهای بین لایه‌ای رخ دهد. موضوع عدم تعادل و ناپایداری گرافن دو لایه در حالت AAA در مرجع [44] به صورت کامل شرح داده شده است و اگر گرافن در حالت AAA قرار گیرد پس از برداشته شدن قیودی که بر روی لایه‌ها گذاشته شده است تا دو لایه در این حالت قرار گیرند، گرافن دو لایه سریعاً به حالت ABA تغییر خواهند کرد که این موضوع نشان از عدم پایداری و تعادل این نوع لایه‌چینی است. در واقع می‌توان گفت که حالت لایه‌چینی AAA یک نوع لایه چینی با قیود و شرایطی است که تعادل و پایداری سیستم را برهم زده و موجب می‌گردد که در تحلیل‌های عددی و تئوری به جواب‌های دور از انتظار رسید. در این پژوهش، با استفاده از روش هندسی- تحلیلی مقادیر مدول کششی- فشاری و مدول برشی در دو راستای زیگزاگ و آرمچیر محاسبه شده و مقدار مناسب پارامتر عمق پتانسیل متناسب با مدول‌های کششی- فشاری و برشی گزارش شده در مراجع، محاسبه شده است. جدول 6 مقادیر مدول‌های کششی- فشاری و برشی بین لایه‌ای گرافن دو لایه را با استفاده از روش هندسی- تحلیلی نشان می‌دهد. روابط (25) تا (27) به ترتیب رابطه مدول کششی- فشاری و مدول برشی را در راستای آرمچیر و راستای زیگزاگ بر حسب پارامتر عمق پتانسیل در لایه‌چینی AAA نشان می‌دهند. مقادیر پارامتر عمق پتانسیل مناسب با استفاده از روش هندسی- تحلیلی ارائه شده برای مدول‌های کششی- فشاری گزارش شده در مرجع [45]، از 1/462 تا 3/515 میلی الکترون ولت می‌باشد.

$$E \quad \alpha \quad (25)$$

$$G_{xz} \quad - \quad \alpha \quad (26)$$

$$G_{yz} \quad - \quad \alpha \quad (27)$$

همچنین مقدار پارامتر عمق پتانسیل برای مدول برشی گزارش شده در مرجع [25] نیز در راستای آرمچیر و زیگزاگ به ترتیب 21/217 و 21/852 میلی الکترون ولت بدست می‌آید.

برای پارامتر عمق پتانسیل در تابع لنارد- جونز و برای پیوندهای ضعیف واندروالسی دور از واقعیت خواهد بود و باید بررسی‌های بیشتر برای قبول یا رد آن انجام گیرد.

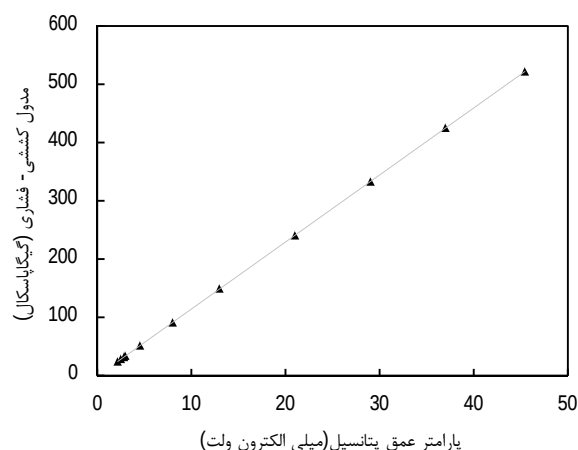
به منظور جامعیت بیشتر نتایج، در این قسمت تلاش شده است تا رابطه‌ای برای مدول‌های کششی- فشاری و مدول برشی بر حسب پارامتر عمق پتانسیل ارائه شود تا پژوهشگران آتی بتوانند مقدار مدول کششی- فشاری یا مدول برشی مورد نیاز خود را بر حسب پارامتر عمق پتانسیل (که وابسته به دما و فشار محیط می‌باشد) بدست آورند. بدین منظور، در شکل‌های 8 و 9، به ترتیب تغییرات مدول کششی- فشاری و مدول برشی (در راستای زیگزاگ و آرمچیر) بر حسب پارامتر عمق پتانسیل رسم شده است. با عبور منحنی از داده‌های رسم شده در شکل‌های 8 و 9، روابط (22) تا (24) بدست می‌آیند که G_{yz} و G_{xz} به ترتیب مدول کششی- فشاری، مدول برشی در راستای آرمچیر و مدول برشی در راستای زیگزاگ و بر حسب گیگاپاسکال بوده و α پارامتر عمق پتانسیل بر حسب میلی الکترون ولت می‌باشد.

$$E \quad \alpha \quad (22)$$

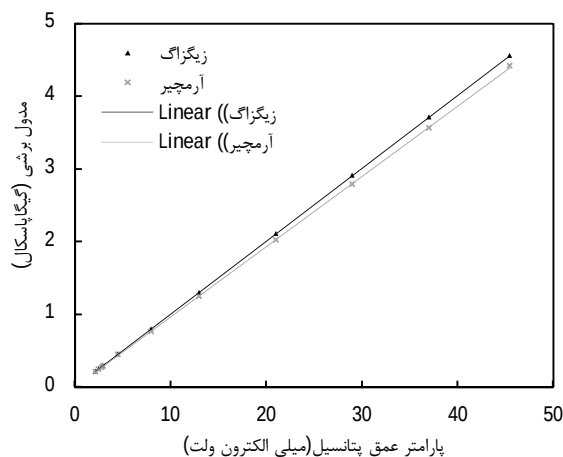
$$G_{xz} \quad \alpha \quad (23)$$

$$G_{yz} \quad \alpha \quad (24)$$

همان‌طور که از شکل‌های 8 و 9 و روابط (22) تا (24) مشاهده می‌شود، مدول کششی- فشاری و مدول برشی بین لایه‌ای گرافن دو لایه با مقدار پارامتر عمق پتانسیل رابطه مستقیم و خطی دارند.



شکل 8 تغییرات مدول کششی- فشاری بین لایه‌ای نسبت به پارامتر عمق پتانسیل



شکل 9 تغییرات مدول برشی بین لایه‌ای نسبت به پارامتر عمق پتانسیل

جدول 6 مقادیر مدول کششی - فشاری و مدول برشی به ازای پارامتر عمق پتانسیل با الگوی لایه‌چینی AAA

پارامتر عمق پتانسیل (meV)	مدول کششی - فشاری (GPa)	مدول برشی (GPa)	
		آرمچیر	زیگزاگ
2/168	28/55	-0/388	-0/377
2/5	32/92	-0/448	-0/435
2/84	37/41	-0/510	-0/492
2/968	39/08	-0/532	-0/516
4/5	59/27	-0/806	-0/783
45/44	598/50	-8/14	-7/90

5- نتیجه‌گیری

در این مقاله، برای محاسبه‌ی مدول کششی - فشاری و مدول برشی پیوندهای واندروالسی بین دو لایه گرافن، یک روش هندسی - تحلیلی ارائه شده است و برای هر یک از آنها، یک رابطه فرم بسته بر حسب پارامتر عمق پتانسیل برای دو لایه چینی AAA و ABA ارائه شده است. در این روش، یک لایه گرافن کوچک بر روی یک لایه گرافن بزرگ یکبار در راستای عمود بر صفحه گرافن (برای تعیین مدول کششی - فشاری) و یکبار در جهت آرمچیر و زیگزاگ (برای تعیین مدول برشی) حرکت داده می‌شود. سپس، تغییرات نیروهای واندروالسی بر اثر حرکت نسبی یک اتم کربن بر روی یک صفحه اندازه‌گیری می‌شود و با استفاده از ضریب تعداد اتم‌های کربن در واحد سطح گرافن (ρ)، مقدار تنش اعمال شده به صفحه گرافن محاسبه می‌گردد. نتایج نشان داد که مدول برشی و مدول کششی - فشاری با پارامتر عمق پتانسیل رابطه‌ای خطی داشته و با افزایش پارامتر عمق پتانسیل، مقدار مدول‌های کششی - فشاری و برشی افزایش می‌یابند. همچنین مشاهده شده است که مقدار مدول برشی بین لایه‌ای در راستای زیگزاگ از آرمچیر بیشتر است. با توجه به اینکه روش‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و مکانیک مولکولی برای تعیین مدول بین لایه‌ای گرافن‌ها دارای محدودیت‌های نرم‌افزاری بوده و نیازمند صرف زمان می‌باشند، استفاده از این روش به علت سادگی و داشتن دقت بسیار بالا، برای تحلیل تئوری گرافن‌های چندلایه دارای مزیت می‌باشد.

6- فهرست علائم

E	مدول کششی - فشاری پیوندهای واندروالسی ($N.m^{-2}$)
F	نیرو ($N.atom^{-1}$)
G	مدول برشی پیوندهای واندروالسی ($N.m^{-2}$)
h	ضخامت (m)
r	فاصله بین دو اتم دارای پیوند واندروالسی (m)
U	انرژی پتانسیل ($N.m$)

علائم یونانی

α	پارامتر عمق پتانسیل (eV)
β	فاصله‌ای که پتانسیل بین دو اتم صفر است (m)
γ	کرنش برشی
ϵ	کرنش کششی - فشاری
ρ	تعداد اتم‌های کربن در واحد سطح ($atom.m^{-2}$)
σ	تنش کششی - فشاری ($N.m^{-2}$)
τ	تنش برشی ($N.m^{-2}$)

زیر نویس‌ها

0	حالت تعادل
---	------------

i	مرتبه جابجایی نام
LJ	لنارد - جونز
x	راستای آرمچیر
y	راستای زیگزاگ
z	راستای عمود بر صفحه گرافن
بالانویس‌ها	
1	اتم‌های کربن قرار گرفته در حالت (1)
2	اتم‌های کربن قرار گرفته در حالت (2)
j	شماره اتم‌ها در محدوده شعاع قطع
k	مشخص کننده حالت (1) و (2) اتم‌های کربن
s	شماره دورترین اتم در محدوده شعاع قطع

7- مراجع

- [1] M. J. Allen, V. C. Tung, and R. B. Kaner, "Honeycomb carbon: a review of graphene," *Chemical reviews*, vol. 110, no. 1, pp. 132–45, Jan. 2010.
- [2] A. K. Geim, "Graphene: status and prospects," *Science (New York, N.Y.)*, vol. 324, no. 2009, pp. 1530–1534, 2009.
- [3] J. S. Bunch, A. M. van der Zande, S. S. Verbridge, I. W. Frank, D. M. Tanenbaum, J. M. Parpia, H. G. Craighead, and P. L. McEuen, "Electromechanical resonators from graphene sheets," *Science (New York, N.Y.)*, vol. 315, no. 5811, pp. 490–3, Jan. 2007.
- [4] H. J. Yoon, D. H. Jun, J. H. Yang, Z. Zhou, S. S. Yang, and M. M.-C. Cheng, "Carbon dioxide gas sensor using a graphene sheet," *Sensors and Actuators B: Chemical*, vol. 157, no. 1, pp. 310–313, Sep. 2011.
- [5] A. Sakhaee-Pour, M. T. Ahmadian, and A. Vafai, "Applications of single-layered graphene sheets as mass sensors and atomistic dust detectors," *Solid State Communications*, vol. 145, no. 4, pp. 168–172, Jan. 2008.
- [6] Z. Wang, X. Zhou, J. Zhang, F. Boey, and H. Zhang, "Direct Electrochemical Reduction of Single-Layer Graphene Oxide and Subsequent Functionalization with Glucose Oxidase," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 113, no. 32, pp. 14071–14075, Aug. 2009.
- [7] Z. Liu, J. T. Robinson, X. Sun, and H. Dai, "PEGylated nanographene oxide for delivery of water-insoluble cancer drugs," *Journal of the American Chemical Society*, vol. 130, no. 33, pp. 10876–7, Aug. 2008.
- [8] K. Kim, J.-Y. Choi, T. Kim, S.-H. Cho, and H.-J. Chung, "A role for graphene in silicon-based semiconductor devices," *Nature*, vol. 479, no. 7373, pp. 338–44, Nov. 2011.
- [9] E. Yoo, J. Kim, E. Hosono, H. Zhou, T. Kudo, and I. Honma, "Large reversible Li storage of graphene nanosheet families for use in rechargeable lithium ion batteries," *Nano letters*, vol. 8, no. 8, pp. 2277–82, Aug. 2008.
- [10] D. Wang, D. Choi, J. Li, Z. Yang, Z. Nie, R. Kou, D. Hu, C. Wang, L. V. Saraf, J. Zhang, I. a. Aksay, and J. Liu, "Self-assembled TiO₂-graphene hybrid nanostructures for enhanced Li-ion insertion," *ACS nano*, vol. 3, no. 4, pp. 907–14, Apr. 2009.
- [11] E. Yoo, T. Okata, T. Akita, M. Kohyama, J. Nakamura, and I. Honma, "Enhanced electrocatalytic activity of Pt subnanoclusters on graphene nanosheet surface," *Nano letters*, vol. 9, no. 6, pp. 2255–2259, 2009.
- [12] B. Seger and P. V. Kamat, "Electrocatalytically Active Graphene-Platinum Nanocomposites. Role of 2-D Carbon Support in PEM Fuel Cells," *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 113, no. 19, pp. 7990–7995, May. 2009.
- [13] S. Stankovich, D. a. Dikin, G. H. B. Dommett, K. M. Kohlhaas, E. J. Zimney, E. a. Stach, R. D. Piner, S. T. Nguyen, and R. S. Ruoff, "Graphene-based composite materials," *Nature*, vol. 442, no. 7100, pp. 282–6, Jul. 2006.
- [14] T. Ramanathan, a. a. Abdala, S. Stankovich, D. a. Dikin, M. Herrera-Alonso, R. D. Piner, D. H. Adamson, H. C. Schniepp, X. Chen, R. S. Ruoff, S. T. Nguyen, I. a. Aksay, R. K. Prud'Homme, and L. C. Brinson, "Functionalized graphene sheets for polymer nanocomposites," *Nature nanotechnology*, vol. 3, no. 6, pp. 327–31, Jun. 2008.
- [15] D. Wang, F. Li, J. Zhao, W. Ren, Z.-G. Chen, J. Tan, Z.-S. Wu, I. Gentle, G. Q. Lu, H. Cheng, C. Paper, and S. Anodic, "Fabrication of graphene/polyaniline composite paper via in situ anodic electropolymerization for high-performance flexible electrode," *Acs Nano*, vol. 3, no. 7, pp. 1745–1752, 2009.
- [16] E. J. Siochi, "Graphene in the sky and beyond," *Nature Nanotechnology*, vol. 9, no. 10, pp. 745–747, 2014.
- [17] Y. Liu, J. H. Dustin Lee, Q. Xia, Y. Ma, Y. Yu, L. Y. Lanry Yung, J. Xie, C. N. Ong, C. D. Vecitis, and Z. Zhou, "A graphene-based electrochemical filter for water purification," *J. Mater. Chem. A*, vol. 2, pp. 16554–16562, 2014.

- [32] J. P. Lu, "Elastic Properties of Carbon Nanotubes and Nanoropes," *Physical Review Letters*, vol. 79, no. 7, p. 10, 1997.
- [33] Y. Jin and F. G. Yuan, "Simulation of elastic properties of single-walled carbon nanotubes," *Composites Science and Technology*, vol. 63, no. 11, pp. 1507–1515, 2003.
- [34] K. Behfar and R. Naghdabadi, "Nanoscale vibrational analysis of a multi-layered graphene sheet embedded in an elastic medium," *Composites Science and Technology*, vol. 65, no. 7–8, pp. 1159–1164, Jun. 2005.
- [35] M. Kaukonen, a. Gulans, P. Havu, and E. Kauppinen, "Lennard-Jones parameters for small diameter carbon nanotubes and water for molecular mechanics simulations from van der Waals density functional calculations," *Journal of Computational Chemistry*, vol. 33, pp. 652–658, 2012.
- [36] Y. Shibuta and J. a. Elliott, "Interaction between two graphene sheets with a turbostratic orientational relationship," *Chemical Physics Letters*, vol. 512, no. 4, pp. 146–150, Aug. 2011.
- [37] R. Saito, R. Matsuo, T. Kimura, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, "Anomalous potential barrier of double-wall carbon nanotube," *Chemical Physics Letters*, vol. 348, no. 3, pp. 187–193, 2001.
- [38] Y. Shibuta and S. Maruyama, "Molecular dynamics of the generation process of double-walled carbon nanotubes from peapods," *Heat Transfer—Asian Research*, vol. 35, no. 13, pp. 254–264, 2006.
- [39] J. H. Walther, R. Jaffe, T. Halicioglu, and P. Koumoutsakos, "Molecular Dynamics Simulations of Carbon Nanotubes in Water," *Center for turbulence research: proceedings of the summer program*, no. 1987, pp. 5–20, 2000.
- [40] Y. Y. Zhang, C. M. Wang, Y. Cheng, and Y. Xiang, "Mechanical properties of bilayer graphene sheets coupled by sp^3 bonding," *Carbon*, vol. 49, no. 13, pp. 4511–4517, Nov. 2011.
- [41] J. C. Boettger, "All-electron full-potential calculation of the electronic band structure, elastic constants, and equation of state for graphite," *Physical Review B*, vol. 55, no. 17, pp. 11202–11211, 1997.
- [42] M. Hasegawa and K. Nishidate, "Semiempirical approach to the energetics of interlayer binding in graphite," *Physical Review B*, vol. 70, no. 20, p. 205431, 2004.
- [43] Y. Chen, R. Nicklow, N. Wakabayashi, and H. G. Smith, "Lattice dynamics of pyrolytic graphite," *Physical Review B*, vol. 5, no. 12, p. 4951, 1972.
- [44] A. L. Rakhmanov, a. V. Rozhkov, a. O. Sboyshakov, and F. Nori, "Instabilities of the AA-stacked graphene bilayer," *Physical Review Letters*, vol. 109, no. 2, pp. 1–4, 2012.
- [45] X. Chen, F. Tian, C. Persson, W. Duan, and N. Chen, "Interlayer interactions in graphites," *Scientific reports*, vol. 3, p. 3046, 2013.
- [18] Y. Shen and H. Wu, "Interlayer shear effect on multilayer graphene subjected to bending," *Applied Physics Letters*, vol. 100, no. 10, p. 101909, 2012.
- [19] Y. Liu, Z. Xu, and Q. Zheng, "The interlayer shear effect on graphene multilayer resonators," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 59, no. 8, pp. 1613–1622, Aug. 2011.
- [20] B. Hajgat , S. G ryel, Y. Dauphin, J.-M. Blairon, H. E. Miltner, G. Van Lier, F. De Proft, and P. Geerlings, "Out-of-plane shear and out-of plane Young's modulus of double-layer graphene," *Chemical Physics Letters*, vol. 564, pp. 37–40, Mar. 2013.
- [21] S. a. Hosseini Kordkheili and H. Moshrefzadeh-Sani, "Mechanical properties of double-layered graphene sheets," *Computational Materials Science*, vol. 69, pp. 335–343, Mar. 2013.
- [22] O. L. Blakslee, D. G. Proctor, E. J. Seldin, G. B. Spence, and T. Weng, "Elastic Constants of Compression of Annealed Pyrolytic Graphite," *Journal of Applied Physics*, vol. 41, pp. 3373–3382, 1970.
- [23] A. Bosak, M. Krisch, M. Mohr, J. Maultzsch, and C. Thomsen, "Elasticity of single-crystalline graphite: Inelastic x-ray scattering study," *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 75, pp. 1–4, 2007.
- [24] N. Mounet and N. Marzari, "First-principles determination of the structural, vibrational and thermodynamic properties of diamond, graphite, and derivatives," *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, vol. 71, pp. 1–14, 2005.
- [25] G. Savini, Y. J. Dappe, S.  berg, J.-C. Charlier, M. I. Katsnelson, and A. Fasolino, "Bending Modes, Elastic Constants and Mechanical Stability of Graphitic Systems," *Carbon*, vol. 49, no. 1, pp. 1–7, 2011.
- [26] X. Q. He, S. Kitipornchai, and K. M. Liew, "Resonance analysis of multi-layered graphene sheets used as nanoscale resonators," *Nanotechnology*, vol. 16, no. 10, p. 2086, 2005.
- [27] X. Q. He, J. B. B. Wang, B. Liu, and K. M. K. M. Liew, "Analysis of nonlinear forced vibration of multi-layered graphene sheets," *Computational Materials Science*, vol. 61, pp. 194–199, Aug. 2012.
- [28] E. Jomehzadeh, a. R. Saidi, and N. M. Pugno, "Large amplitude vibration of a bilayer graphene embedded in a nonlinear polymer matrix," *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 44, no. 10, pp. 1973–1982, 2012.
- [29] J. E. Lennard-Jones, "On the forces between atoms and ions," *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, pp. 584–597, 1925.
- [30] J. Cheng, X. Yuan, L. Zhao, D. Huang, and M. Zhao, "GCMC simulation of hydrogen physisorption on carbon nanotubes and nanotube arrays," *Carbon*, vol. 42, pp. 2019–2024, 2004.
- [31] D. H. Robertson, D. W. Brenner, and J. W. Mintmire, "Energetics of nanoscale graphitic tubules," *Physical Review B*, vol. 45, no. 21, p. 12592, 1992.