

بررسی ارتعاشات آزاد نانوصفحات مرکب گرافن-برن نیتريد در محیط حرارتی با استفاده از نظریه آیفانتیس توأم با گرادیان سرعت و روش ریتز

سیما ضیایی*

دانشکده مهندسی، دانشگاه یاسوج، یاسوج، ایران

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۸ مرداد ۱۳۹۵
بازنگری: ۵ دی ۱۳۹۵
پذیرش: ۳ بهمن ۱۳۹۵
ارائه آنلاین: ۹ بهمن ۱۳۹۵

کلمات کلیدی:

سازه های مرکب
تئوری ورق اصلاح شده
تئوری آیفانتیس
گرادیان سرعت
بسامد پایه

چکیده: این مطالعه به بررسی ارتعاشات جانبی صفحات تک لایه و چند لایه با معماریهای متفاوت گرافن/برن نیتريد در محیط حرارتی می پردازد. بدین منظور ابتدا نیروی واندوالز بین صفحات با استفاده از معادله لنارد-جونز ۶-۱۲ شبیه سازی شده است. سپس از تئوری ورق اصلاح شده دو متغیره برای شبیه سازی رفتار ارتعاشی صفحات مرکب تک لایه گرافن/برن نیتريد یا صفحات مرکب با چیدمان عمودی، استفاده شده است. برای آمیختن اثر سائز با فرضیات تئوری ورق اصلاح شده دو متغیره، از تئوری آیفانتیس برای استخراج انرژی پتانسیل غیر کلاسیک استفاده شده است، همچنین با یک مقیاس طول اضافی از گرادیان سرعت نیز در استخراج انرژی جنبشی بهره گرفته شده است. برای استخراج معادلات مقادیر ویژه حاکم بر مساله از اصل همپلتون توأم با روش ریتز استفاده شده است. یافته ها نشان می دهند که در تعداد لایه های ثابت گرافن و برن نیتريد با انتخاب چیدمانی مناسب می توان فرکانس پایه غیر هم فاز را کمینه یا بیشینه نمود. در نانوصفحات مرکب تک لایه با کنترل فضای اشغال شده توسط برن نیتريد می توان فرکانس پایه نانو ورق را بهبود بخشید. صرف نظر از نوع ورق مرکب مورد مطالعه، با افزایش دما یا افزایش مقیاس طول، فرکانس پایه کاهش می یابد.

۱- مقدمه

نانوسازه های دو بعدی همچون نانوصفحات گرافن و برن نیتريد به دلیل خواص منحصر به فردشان که آنها را کاندیداهای مناسبی برای گسترده وسیعی از کاربردها می گرداند، توجه بسیاری از محققین را به خود جلب کرده اند.

نانوصفحات گرافن دارای خواص الکتریکی، مکانیکی، حرارتی و نور شناختی برجسته ای است و می تواند یک نامزد مناسب برای استفاده در پوشش سطح، حسگرهای شیمیایی، نانوکامپوزیت ها با پایه گرافن [۱]، مافوق خازن ها، الکترودهای ترانما، سلول های نیروی نوری و دستگاه های زیستی [۲] باشد؛ لذا تحقیقات قابل ملاحظه ای پیرامون رفتار مکانیکی نانوصفحات گرافن در یک یا چند لایه صورت گرفته است. ظرفیت تحمل بار ایستایی [۳-۷]، ارتعاشات خطی [۸-۱۱] و ارتعاشات غیرخطی [۴ و ۱۳-۱۲] از جمله مواردی است که بسیار به آنها پرداخته شده است.

نانوصفحات برن نیتريد، همچون نانوصفحات گرافن، دارای ساختار شبکه ای لانه زنبوری هستند با این تفاوت که به جای اتم های کربن، به صورت یک در میان اتم های برن و نیتروژن در شبکه قرار گرفته اند [۱۴]. نانوسازه های برن نیتريد خواص پایداری قوی شیمیایی و حرارتی، عایق الکتریکی، هدایت حرارتی خارق العاده و قابلیت حس جرم را از خود نشان

می دهند [۱۵] و تاکنون به عنوان عایق با هدایت حرارتی بالا در میکرو/نانودستگاه های الکترونیکی، ساعت کننده نور ماوراء بنفش در اپتوالکترونیک و پرکننده های نانو در نانوکامپوزیت های استحکام بالا و رسانای حرارت استفاده شده اند [۱۶]. با این وجود، در مقایسه با نانوسازه های کربنی مطالعات چندانی در پیش بینی رفتار مکانیکی این نانوسازه ها صورت نگرفته است؛ هرچند که محققین با استفاده از روش های گوناگون مانند ای-بی اینیشیو [۱۶ و ۱۷]، پتانسیل الکتروستاتیک و لنارد-جونز ۶-۱۲ [۱۸] و مکانیک مولکولی [۱۵ و ۱۹]، ثابت های مکانیکی صفحات برن نیتريد را تخمین زده اند. مدل های اجزا محدود اتمی ترکیبی نشان دادند که نانوصفحات برون نیتريد دارای رفتار مکانیکی ارتوتروپیک درون صفحه ای می باشند. براساس این نوع شبیه سازی درجه غیرایزوتروپی نانوصفحات برن نیتريد ۰/۹۸ تقریب زده شده است [۱۵].

پیش بینی خواص مکانیکی نانوسازه های ترکیبی ساخته شده از گرافن/برن نیتريد به صورت یک سامانه لایه ای متشکل از نانوسازه های برن نیتريد و نانوسازه های کربنی [۲۰ و ۲۱] یا به صورت یک صفحه با محدوده های کنترل شده مرکب از برن نیتريد و گرافن [۲۲]، از جمله مباحثی است که اخیراً به آن پرداخته می شود. در برخی از این سازه ها، لایه های نازک برن-نیتريد به عنوان زیرلایه یا پوشش محافظتی گرافن عمل می کنند. همچنین این

ساختار لایه‌ای برای ساخت تجهیزات عمودی که کلاس جدیدی از تجهیزات الکترونیکی می‌باشند، بسیار مورد توجه هستند [۲۳]. ارتعاش و اصطکاک داخلی نانو سازه هیبریدی مشتمل بر تک لایه گرافن قرار گرفته میان دو لایه برن نیتريد (BN/G/BN) تحت فشار خارجی در مرجع [۲۰] مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که نه تنها ضریب اصطکاک داخلی معماری BN/G/BN، ۶۶/۶۷ درصد بیشتر از ضریب اصطکاک داخلی یک نانوصفحه سه لایه از گرافن می‌باشد؛ بلکه بسامد طبیعی این معماری نیز بیشتر است. در مقایسه با مواد معمول، حساسیت بیشتر بسامد طبیعی درون صفحه‌ای گرافن در معماری BN/G/BN به فشار خارجی، این معماری را به عنوان حسگر در میکرو/نانو حسگرهای نیرو حائز اهمیت می‌گرداند [۲۰]. خواص مکانیکی نانوصفحه تک لایه مرکب گرافن/برن نیتريد در مرجع [۲۲] با استفاده از دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار گرفته است. این مطالعه نشان می‌دهد که اضافه شدن سطح اندکی برن نیتريد به صفحه گرافن منجر به افت قابل ملاحظه استحکام تسلیم نانوصفحه می‌شود هرچند که نانوصفحه مرکب رفتار مومسان قویتری را نسبت به صفحه گرافن یا برن نیتريد خالص از خود نشان می‌دهد [۲۲]. کرنش فشاری دو محوری در نانوصفحه مرکب تک لایه گرافن/برن نیتريد در دو شکل مثلثی و متوازی السطوح با شرایط مرزی ساده بعد از سیکل حرارتی دما بالا ناشی از عدم تطابق ضریب انبساط حرارتی آنها نیز توسط پان و همکاران [۲۴] با استفاده از روش اجزا محدود مطالعه شده است.

با توجه به مطالعات اندکی که پیرامون رفتار مکانیکی نانوصفحات مرکب تک لایه و ترکیبی -لایه‌ای متشکل از برن نیتريد و گرافن شده است، در این مطالعه به ارتعاشات جانبی صفحات تک لایه و چند لایه با معماری‌های متفاوت G/BN در محیط حرارتی پرداخته شده است. برای مطالعه رفتار مکانیکی نانو سازه‌ها، علاوه بر روش آزمایشگاهی، شبیه‌سازی با روش دینامیک مولکولی و استفاده از نظریه‌های محیط پیوسته، دو روش نظریه هستند که برای درک رفتار مکانیکی نانو سازه‌ها همچون نانو سازه‌های کربنی یا نانو سازه‌های برن نیتريد استفاده می‌شوند. اگرچه شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌تواند نتایج پربراری برای درک رفتار مکانیکی نانو سازه‌ها در اختیار محققین قرار دهد، با این وجود به سبب نیاز به توان محاسباتی بسیار بالا، این روش محدود به تحلیل سامانه‌های اتمی در ابعاد کوچک و در بازه‌های زمانی بسیار کوچک می‌باشد [۲۵ و ۲۶]. نظر به این که در مقیاس نانو، انجام آزمایش بی‌نهایت سخت و هزینه‌بر است [۲۵ و ۲۶] لذا توسعه مدل‌های مکانیک محیط پیوسته برای تحلیل نظری رفتار مکانیکی نانو سازه‌ها مطلوب محققین می‌باشد.

اهمیت الحاق اثر سائز به نظریه‌های محیط پیوسته به هنگام بررسی رفتار مکانیکی میکرو/نانو سازه‌ها بر کسی پوشیده نیست و به همین منظور نظریه‌های محیط پیوسته مرتبه بالاتر که ثابت‌های ماده اضافه‌تری را در بر می‌گیرند ارائه شده‌اند [۲۷ و ۲۸]. در این راستا میندیلین [۲۹] نظریه الاستیسیته‌ای را که دربرگیرنده تأثیر میکروساختار می‌باشد، ارائه کرد. در

نظریه اولیه میندیلین، انرژی کرنشی به صورت تابعی از کرنش ماکروسکوپی، اختلاف میان تغییرشکل ماکروسکوپی، میکروسکوپی و گرادیان تغییرشکل میکروسکوپی بود [۲۹]. در این نظریه، انرژی کرنشی برای مواد ایزوتروپ دربرگیرنده ۱۶ ضریب ساختاری علاوه بر ثابت‌های لامه^۱ می‌باشد. شایان ذکر است که در این نظریه، انرژی جنبشی نه تنها تابعی از سرعت بلکه تابعی از نرخ تغییرات زمانمند تغییرشکل میکروسکوپی نیز می‌باشد. بدین ترتیب یک مقیاس طول اضافی نیز در تعریف انرژی جنبشی دیده می‌شود [۲۹]. میندیلین این نظریه را ساده کرد و سه ویرایش جدید را که در رابطه فرض شده بین گرادیان تغییرشکل میکروسکوپی و جابه‌جایی ماکروسکوپی با هم متفاوت بودند، ارائه نمود [۲۸]. نظریه ساده شده میندیلین که در آن انرژی کرنشی فقط تابعی از گرادیان مرتبه اول تانسور کرنش می‌باشد (نظریه ساده شده میندیلین فرمت ۲) علاوه بر ثابت‌های لامه، پنج ثابت جدید ماده دیگر را نیز دربر می‌گیرد و نظر به این که در این نظریه ساده شده، انرژی جنبشی تابعی از سرعت و گرادیان سرعت می‌باشد؛ لذا کل ثابت‌های ماده جدید موجود در این نظریه ۶ عدد می‌باشد [۳۰]. در این نظریه، پنج ثابت ماده جدید تعریف شده در انرژی کرنش را می‌توان در دو ثابت جدید گروه‌بندی کرد (برای جزئیات بیشتر به مرجع [۲۸] مراجعه شود) بدین ترتیب تعداد کل ثابت‌های ماده جدید تعریف شده در این نظریه از ۶ به ۳ تقلیل می‌یابد [۲۸]. براساس مطالعات آیفانتیس^۲ در حوزه پلاستیسیته و الاستیسیته غیرخطی، آیفانتیس و همکاران نظریه گرادیان الاستیسیته دیگری را با یک مقیاس طول ارائه کردند [۲۸]. معادله حاکمه این نظریه تابعی از کرنش و لاپلاسین کرنش می‌باشد. می‌توان نشان داد که نظریه گرادیان الاستیسیته آیفانتیس حالت خاصی از نظریه ساده شده میندیلین فرمت ۲ برای مسایل استاتیکی می‌باشد. کافی است که دو ثابت ماده جدید تعریف شده در نظریه ساده شده میندیلین فرمت ۲ (حاصل از گروه‌بندی پنج ثابت ماده جدید تعریف شده در انرژی کرنشی) با هم برابر قرار داده شود تا نظریه ساده شده میندیلین فرمت ۲ به نظریه گرادیان الاستیسیته آیفانتیس تبدیل شود [۳۱]. براساس نظریه گرادیان کرنش میندیلین، نظریه گرادیان کرنش تعدیل شده^۳ ای ارائه شد که در انرژی کرنشی آن فقط ۳ مقیاس طول جدید برای مواد ایزوتروپ الاستیک خطی پیشنهاد شده است [۳۲]. در این نظریه، چگالی انرژی تغییرشکل کل مستقل از تانسور گرادیان چرخش نامتقارن می‌باشد و فقط تابعی از تانسور کرنش متقارن، بردار گرادیان اتساع^۴، تانسور گرادیان کشش انحرافی^۵ و تانسور گرادین چرخش متقارن می‌باشد [۳۲]. از دیگر نظریه‌های غیرکلاسیک مرتبه بالا شناخته شده می‌توان به نظریه کوپل تنش [۳۳] با دو مقیاس طول جدید تعریف شده برای انرژی کرنشی مواد الاستیک ایزوتروپ و نظریه کوپل تنش تعدیل شده [۳۴] با یک مقیاس

1 Lame's constants

2 Aifantis

3 Modified strain gradient theory

4 Dilatation gradient vector

5 Deviatoric stretch gradient tensor

غیرمحملی می‌باشد. مقادیر پیشنهادی آنها برای نانوصفحه گرافن زیگزاگ با شرایط مرزی چهار طرف ساده و چهار طرف گیردار به ترتیب $1/41$ نانومتر و $0/87$ نانومتر می‌باشد. نتایج آنها برای نانوصفحه آرمچیر با شرایط مرزی مشابه با نانوصفحه زیگزاگ به ترتیب $1/34$ نانومتر و $0/71$ نانومتر می‌باشد. نتایج آنها نشان می‌دهد که مقدار مقیاس طول با تغییر نسبت ابعادی نانوروق تغییر نمی‌کند [۴۲]. این در حالی است که مطالعه شن و همکاران [۴۳] معرف تأثیر ابعاد نانوروق به‌علاوه کایرالیته بر مقدار پارامتر غیرمحملی به‌کار رفته در شبیه‌سازی نانوصفحات گرافن می‌باشد. نتایج آنها [۴۳] نشان می‌دهد که با تغییر نسبت ابعادی و کایرالیته نانوصفحات گرافن، مقدار پارامتر غیرمحملی (e_{θ}) بین $0/67-0/22$ نانومتر تغییر می‌کند. انصاری و سهمنی [۴۴] مقدار مناسب پارامتر غیرمحملی برای شبیه‌سازی کمانش دو-محوری نانوصفحات گرافن تک لایه با شرایط مرزی ساده را پیش‌بینی نمودند. جالب توجه آن‌که نتایج آنها نشان می‌دهد برخلاف نوع نظریه ورق غیرمحملی استفاده شده در شبیه‌سازی که بر مقدار مقیاس کوچک تأثیر می‌گذارد، کایرالیته تأثیر چندانی بر مقدار مقیاس کوچک ندارد. میان‌دوب و همکاران [۴۵] مقدار پارامتر غیرمحملی (e_{θ}) را به‌هنگام مطالعه ارتعاش جانبی میکرو-تیرهای پلی‌سیلیکون، ۸ میکرومتر تخمین زده‌اند.

اگرچه نظریه غیرمحملی ایرینگن به‌طور گسترده‌ای برای شبیه‌سازی رفتار مکانیکی نانو سازه‌های کربنی به سبب توافق خوبی که میان نتایج حاصل از نظریه‌های محیط پیوسته غیرمحملی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی وجود دارد، استفاده می‌شود؛ اما این نظریه اجازه ساخت تابع انرژی را نمی‌دهد [۴۶]، لذا، نظر به این‌که یک نظریه گرادیان الاستیسیته قوی برای تحلیل رفتار دینامیکی میکرو/نانو سازه‌ها از ترکیب گرادیان کرنش پایدار با گرادیان شتاب حاصل می‌باشد (مانند نظریه ساده شده میندلین فرمت ۲) [۲۸]، در این مطالعه از این نوع نظریه در شبیه‌سازی رفتار ارتعاشی نانوصفحات مرکب گرافن/برن نیتريد استفاده شده است. بدین منظور از نظریه آیفانتیس برای استخراج انرژی کرنش سامانه استفاده شده است و در نگارش انرژی جنبشی نه تنها از سرعت بلکه از گرادیان سرعت نیز بهره گرفته شده است. شایان ذکر است که اسک و آیفانتیس [۴۷] با استفاده از تلفیق نظریه گرادیان کرنش پایدار با گرادیان شتاب به تحلیل دینامیکی نانولوله‌های کربنی پرداخته‌اند و با بهره‌گیری از نتایج حاصل از شبیه‌سازی مولکولی مقادیر نظیر مقیاس‌های طول را تقریب زده‌اند.

می‌دانیم که نظریه ورق کیرشوف فقط برای پیش‌بینی مدهای پایین ارتعاش صفحات نازک مناسب است. مطالعات انجام شده نشان می‌دهد که نظریه ورق کیرشوف بسامدهای مرتبه بالای ورق‌های نازک را نیز دست بالا برآورد می‌کند [۴۸] و این مهم با استفاده از نظریه‌های دیگر ورق مانند نظریه تغییرشکل برشی مرتبه اول یا نظریه‌های تغییرشکل برشی مرتبه بالا مانند نظریه تغییرشکل برشی مرتبه سوم، نظریه تغییرشکل برشی مثلثاتی، نظریه تغییرشکل برشی مرتبه چهارم و نظریه تغییرشکل برشی عمومی قابل تصحیح است. نظریه تغییرشکل برشی مرتبه اول با فرض

طول جدید تعریف شده در انرژی کرنشی اشاره کرد. می‌توان نشان داد که نظریه کوپل تنش تعدیل شده حالت خاصی از نظریه گرادیان کرنش تعدیل شده می‌باشد. اگر در نظریه گرادیان کرنش تعدیل شده، ۲ مقیاس طول از ۳ مقیاس طول ماده تعریف شده، صفر گذاشته شود، گرادیان کوپل تنش تعدیل شده حاصل می‌گردد [۳۵]. نظریه الاستیسیته غیرمحملی ایرینگن^۱ که بی‌شمار در تحلیل رفتار مکانیکی (استاتیکی و دینامیکی) نانوساختارها با پایه کربن استفاده می‌شود [۴۵-۳۶] دربرگیرنده تانسور تنش و گرادیان تانسور تنش می‌باشد و فقط براساس یک مقیاس طول ماده جدید بیان می‌شود [۲۸]. پیرو نتایج موجود، واضح است که انتخاب مناسب پارامتر غیرمحملی موجود در نظریه ایرینگن (مقیاس کوچک) متضمن دقت شبیه‌سازی رفتار مکانیکی نانو سازه‌هایی همچون نانو سازه‌های کربنی می‌باشد. محققینی که رفتار مکانیکی نانو سازه‌ها را با استفاده از دو مدل نظریه الاستیسیته غیرمحملی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مطالعه کرده‌اند، نشان دادند که مقدار مقیاس کوچک یا پارامتر غیرمحملی نه تنها به ماده، بلکه به شرایط مرزی، کایرالیته^۲، نسبت ابعادی و ماهیت حرکت بستگی دارد [۳۷-۴۵]. ژانگ و همکاران [۳۷] نتایج حاصل از تحلیل کمانش نانولوله‌های کربنی تک لایه با شرایط مرزی ساده را که با استفاده از نظریه الاستیسیته غیرمحملی به‌دست آورده بودند با نتایج موجود از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مقایسه کردند و مقدار مقیاس کوچک (e_{θ}) را $0/82$ پیش‌بینی نمودند. هیو و همکاران [۳۸] به روشی مشابه، مقدار مقیاس کوچک (e_{θ}) را برای تفرق امواج عرضی $0/6$ و برای تفرق امواج پیچشی بین $0/2$ تا $0/23$ اعلام نمودند. خادم الحسینی و همکاران [۳۹] اعلام کردند که مقیاس کوچک (e_{θ}) در تحلیل کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی تک لایه آرمچیر و زیگزاگ بین $0/85$ تا $0/86$ می‌باشد. انصاری و همکاران [۴۰] نشان دادند که مقدار پارامتر غیرمحملی (e_{θ}) برای تحلیل کمانش محوری نانولوله‌های کربنی تک لایه با توجه به شرایط مرزی تغییر می‌کند. آنها مقدار $0/54$ نانومتر را برای نانولوله با شرایط مرزی ساده، $0/531$ نانومتر را برای شرایط مرزی گیردار-گیردار، $0/55$ نانومتر را برای شرایط مرزی گیردار-ساده و $0/722$ نانومتر را برای شرایط مرزی گیردار-آزاد پیشنهاد دادند [۴۰]. دوان و همکاران [۴۱] از نتایج شبیه‌سازی مولکولی برای تخمین مقدار مقیاس کوچک (e_{θ}) به‌کار رفته در نظریه تیر تیموشنکو غیرمحملی که برای پیش‌بینی بسامدهای طبیعی نانولوله‌های کربنی تک لایه با شرایط مرزی گیردار-گیردار و یک سر درگیر استفاده شده بود، بهره گرفتند. نتایج آنها نشان می‌دهد که شرایط مرزی، نسبت ابعادی و شکل مد بر مقدار مقیاس طول تأثیر بسزایی دارد. براساس گزارش آنها [۴۱]، مقدار پارامتر غیرمحملی (e_{θ}) می‌تواند از 0 تا $2/66$ نانومتر تغییر کند. مقدار پارامتر غیرمحملی (e_{θ}) گزارش شده توسط انصاری و همکاران [۴۲] برای شبیه‌سازی ارتعاش جانبی صفحات گرافن تک لایه متضمن تأثیر بسزای شرایط مرزی و تأثیر اندک کایرالیته بر مقدار پارامتر

1 Eringens theory

2 Chirality

$$\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \quad (2)$$

$$\sigma_{12} = (\sigma_1 + \sigma_2)/2 \quad (3)$$

می‌باشند، به‌دست آمده‌اند [۲۱].

جدول ۱: ثابت‌های لنارد-جونز برای اتم‌های مختلف [۲۱]

Table 1. Lenard-Jones constants for different atoms [21]

	ε, eV	$\sigma, \text{\AA}$
C	۰/۰۰۲۶۳۵	۳/۳۶۹
B	۰/۰۰۴۱۱۶	۳/۴۵۳
N	۰/۰۰۶۲۸۱	۳/۳۶۵
BN	۰/۰۰۵۰۸۵	۳/۴۱
C - BN	۰/۰۰۳۶۶	۳/۳۹

نیروی واندروالز را می‌توان با مشتق‌گیری از انرژی پتانسیل لنارد-جونز نسبت به فاصله بین اتم‌ها، r ، به‌دست آورد [۱۳ و ۵۴]:

$$F(r) = -\frac{\partial V(r)}{\partial r} = \frac{24\varepsilon_{12}}{\sigma_{12}} \left(2 \left(\frac{\sigma_{12}}{r} \right)^{13} - \left(\frac{\sigma_{12}}{r} \right)^7 \right) \quad (4)$$

با استفاده از بسط تیلور حول فاصله تعادلی \bar{r} و با توجه به اینکه نیروی واندروالز تابعی فرد است [۱۳] می‌توان نیروی واندروالز بین دو اتم را که در راستای دو اتم است، به صورت زیر تقریب زد [۱۳ و ۵۴]:

$$F(r) = -\frac{24\varepsilon_{12}}{\sigma_{12}^2} \left(26 \left(\frac{\sigma_{12}}{\bar{r}} \right)^{14} - 7 \left(\frac{\sigma_{12}}{\bar{r}} \right)^8 \right) (r - \bar{r}) - \frac{336}{\sigma_{12}^4} \left(65 \left(\frac{\sigma_{12}}{\bar{r}} \right)^{16} - 6 \left(\frac{\sigma_{12}}{\bar{r}} \right)^{10} \right) (r - \bar{r})^3 \quad (5)$$

برای تعیین برهم‌کنش بین دو لایه نانوصفحه در راستای عمود بر صفحات، باید برآیند کل نیروهای واندروالز بین کل اتم‌ها در راستای عمود بر صفحه تصویر شود.

بدین ترتیب کل نیروی عمود بر واحد سطح وارد بر صفحه i ام به صورت زیر قابل بیان است:

$$q_i = \sum_{j=1, j \neq i}^N q_{ij} \quad (6)$$

که در آن q_{ij} معرف برآیند کل نیروی عمود بر واحد سطح ناشی از نیروی واندروالز بین دو لایه i ام و j ام می‌باشد و N تعداد لایه‌هاست. شایان ذکر است که q_{ii} صفر می‌باشد. چگونگی تعیین q_{ij} ها براساس نوع نانوصفحه، گرافن یا برن نیتريد، در زیر آورده شده است.

آنچه در پی می‌آید براساس صفحاتی بی‌نهایت از اتم‌ها می‌باشد. در ضمن چگالی سطح اتم‌های برن و نیتروژن در صفحه برن نیتريد و چگالی سطح اتم‌های کربن در صفحه گرافن به ترتیب

کرنش برشی ثابت در ضخامت ورق، نیازمند ضرایب تصحیح برش می‌باشد تا اختلاف میان بیان تنش واقعی و بیان تنش ثابت فرض شده را جبران کند درحالی‌که در نظریه‌های مرتبه بالاتر نیاز به استفاده از ضرایب تصحیح برش برطرف شده است و ضمناً پیش‌بینی بهتری از رفتار ارتعاشی ورق‌ها می‌دهند [۴۹]. برای بهبود نظریه‌های تغییرشکل برشی مرتبه بالاتر با کاهش پارامترهای نامشخص آنها بدون آن‌که دقت آنها کاهش یابد، نظریه ورق اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییرشکل برشی مرتبه بالا) توسط شیمی [۵۰، ۵۱] پیشنهاد داده شد. این نظریه اخیراً برای مطالعه رفتار مکانیکی نانورق‌ها مورد استفاده قرار گرفته است [۴۹ و ۵۳-۵۲]. در این مطالعه از نظریه ورق اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییرشکل برشی مرتبه بالا) برای استخراج معادلات حاکم بر رفتار ارتعاشی نانوصفحات مرکب گرافن/برن نیتريد بهره گرفته شده است.

همان‌گونه که پیش از این نیز اشاره شد، با توجه به مطالعات اندکی که پیرامون رفتار مکانیکی نانوصفحات مرکب تک لایه و ترکیبی-لایه‌ای متشکل از برن نیتريد و گرافن شده است، در این مطالعه به ارتعاشات جانبی صفحات تک لایه و چند لایه با معماری‌های متفاوت G/BN در محیط حرارتی پرداخته شده است. بدین منظور ابتدا نیروی واندروالز بین صفحات با استفاده از معادله لنارد-جونز ۶-۱۲ شبیه‌سازی شده است. از نظریه ورق اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییرشکل برشی مرتبه بالا) و الحاق نظریه آیفانتیس توأم با گرادیان سرعت به آن بهره‌گیری از روش ریتز معادلات حاکم بر ارتعاش جانبی نانوصفحات استخراج شده است. همچنین در پی مطالعه پان و همکاران [۲۴] که از شرایط مرزی ساده برای شبیه‌سازی کرنش فشاری دو محوری ناشی از بار حرارتی نانوصفحات مرکب تک لایه گرافن/برن نیتريد بهره گرفته‌اند، در این مطالعه نیز از این شرط مرزی برای تحلیل رفتار ارتعاشی نانوصفحات مرکب در محیط حرارتی استفاده شده است.

۲- شبیه‌سازی نیروی واندروالز بین صفحات

در نانو صفحات دو لایه گرافن-گرافن، برن نیتريد-برن نیتريد یا گرافن-برن نیتريد، برهم‌کنش بین لایه‌ها با نیروی واندروالز که می‌توان آن را با انرژی پتانسیل لنارد-جونز ۶-۱۲ تشریح کرد، اداره می‌شود. از آنجایی که تقریب رفتار مکانیکی نانوصفحات چند لایه مستلزم شبیه‌سازی مناسب این نیرو می‌باشد؛ لذا در این بخش ابتدا نیروی واندروالز بین لایه‌ها فرموله شده است.

انرژی بین دو اتم به فاصله r به واسطه نیروی واندروالز با استفاده از مدل لنارد-جونز ۶-۱۲ به صورت زیر بیان می‌شود [۱۳ و ۲۱ و ۵۵-۵۴]:

$$V(r) = 4\varepsilon_{12} \left(\frac{\sigma_{12}^{12}}{r^{12}} - \frac{\sigma_{12}^6}{r^6} \right) \quad (1)$$

که در آن ε_{12} و σ_{12} دو پارامتر لنارد-جونز می‌باشند که مقادیر آنها برای اتم‌های کربن، برن و نیتروژن در جدول ۱ فهرست شده است. شایان ذکر است که ثابت‌های برن نیتريد و کربن-برن نیتريد براساس قانون مخلوط که در آن

که $r = \sqrt{\bar{r}^2 + h_{ij}^2}$ و $\bar{r} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}$ و h_{ij} فاصله بین دو صفحه گرافن و برن نیتريد (صفحه i ام و j ام) می‌باشد.

۲-۲ نیروی و اندروالز بین صفحات برن-نیتريد

اتم‌های برن و نیتروژن در مساحت dA بر روی صفحه برن نیتريد به ترتيب $\rho_B dA$ و $\rho_N dA$ می‌باشد. فاصله بین نقطه (x_i, y_i, z_i) بر روی صفحه ۱ برن نیتريد و نقطه‌ای به مختصات (x_j, y_j, z_j) روی صفحه ۲ برن نیتريد عبارت است از $r = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$. حال با استفاده از معادله (۵) برای تعیین نیروی و اندروالز بین دو اتم واقع شده در این دو نقطه و تصویر آن در راستای z و انتگرال‌گیری بر روی سطح می‌توان اندرکنش بین دو صفحه برن نیتريد-برن نیتريد بر واحد سطح را در راستای z به صورت زیر تقریب زد:

$$q_{ij} = \sum_{m,n=B,N} \left(\rho_m \rho_n \left\{ -\frac{24\epsilon_{mn}}{\sigma_{mn}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(26 \left(\frac{\sigma_{mn}}{\bar{r}} \right)^{14} - 7 \left(\frac{\sigma_{mn}}{\bar{r}} \right)^8 \right) (r - \bar{r}) \frac{(z_i - z_j)}{\bar{r}} dx dy \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{336\epsilon_{mn}}{\sigma_{mn}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(65 \left(\frac{\sigma_{mn}}{\bar{r}} \right)^{16} - 7 \left(\frac{\sigma_{mn}}{\bar{r}} \right)^{10} \right) (r - \bar{r})^3 \frac{(z_i - z_j)}{\bar{r}^3} dx dy \right\} \right) \quad (15)$$

از سوی دیگر می‌توان نشان داد که $(r - \bar{r}) = (w_i - w_j) \bar{r} / (z_i - z_j)$

$$q_{ij} = \bar{C}_{ij} (w_i - w_j) + \bar{E}_{ij} (w_i - w_j)^3 \quad (16)$$

که در آن

$$\bar{C}_{ij} = \sum_{m,n=B,N} -\rho_m \rho_n \left(\frac{24\epsilon_{mn}}{\sigma_{mn}^2} \right) \left(\frac{13\pi\sigma_{mn}^{14}}{3\bar{h}_{ij}^{12}} - \frac{7\pi\sigma_{mn}^8}{3\bar{h}_{ij}^6} \right) \quad (17)$$

$$\bar{E}_{ij} = \sum_{m,n=B,N} -\rho_j \rho_i \left(\frac{336\epsilon_{mn}}{\sigma_{mn}^2} \right) \left(\frac{65\pi\sigma_{mn}^{14}}{6\bar{h}_{ij}^{14}} - \frac{2\pi\sigma_{mn}^8}{3\bar{h}_{ij}^8} \right) \quad (18)$$

که \bar{h}_{ij} فاصله تعادلی بین دو صفحه برن نیتريد می‌باشد.

در حالت تعادل انرژی پتانسیل ناشی از نیروی و اندروالز بین دو صفحه i ام و j ام که هر دو از جنس برن نیتريد می‌باشند در واحد سطح عبارت است از (مراجعه شود به شکل ۱ و معادله (۱)):

$$\Phi_{ij} = \sum_{m,n=B,N} 2\pi\rho_m\rho_n \int_0^\infty 4\epsilon_{mn} \left(\left(\frac{\sigma_{mn}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{mn}}{r} \right)^6 \right) \bar{r} d\bar{r} \\ = \sum_{m,n=B,N} 4\pi\rho_m\rho_n \epsilon_{mn} \sigma_{mn}^6 \left(\frac{\sigma_{mn}^6}{5h_{ij}^{10}} - \frac{1}{2h_{ij}^4} \right) \quad (19)$$

که $r = \sqrt{\bar{r}^2 + h_{ij}^2}$ و $\bar{r} = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2}$ و h_{ij} فاصله بین دو صفحه برن نیتريد (صفحه i ام و j ام) می‌باشد.

۲-۳ نیروی و اندروالز بین صفحات گرافن

به طوری مشابه می‌توان نیروی عمود بر واحد سطح ناشی از اندرکنش

$$\rho_b = 2 / (3\sqrt{3}l_{bn}^2) \quad (7)$$

$$\rho_n = 2 / (3\sqrt{3}l_{bn}^2) \quad (8)$$

$$\rho_c = 4 / (3\sqrt{3}l_c^2) \quad (9)$$

می‌باشند که در آنها l_{bn} و l_c به ترتیب طول باند بین اتم‌های برن و نیتروژن و طول باند بین اتم‌های کربن قبل از تغییر شکل می‌باشند.

۲-۱ نیروی و اندروالز بین صفحه گرافن و برن نیتريد

تعداد اتم‌های کربن در مساحت dA بر روی صفحه گرافن $\rho_c dA$ می‌باشد. فاصله بین نقطه (x_i, y_i, z_i) بر روی صفحه گرافن و نقطه‌ای به مختصات (x_j, y_j, z_j) روی صفحه برن نیتريد (شکل ۱) عبارت است از $r = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}$ و i و j معرف شماره صفحه می‌باشد. با استفاده از معادله (۵) برای تعیین نیروی و اندروالز بین دو اتم واقع شده در این دو نقطه و تصویر آن در راستای z و انتگرال‌گیری بر روی کل سطح می‌توان اندرکنش بین دو صفحه گرافن-برن نیتريد بر واحد سطح را در راستای z به صورت زیر تقریب زد:

$$q_{ij} = \sum_{m=B,N} \left(\rho_c \rho_m \left\{ -\frac{24\epsilon_{Cm}}{\sigma_{Cm}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(26 \left(\frac{\sigma_{Cm}}{\bar{r}} \right)^{14} - 7 \left(\frac{\sigma_{Cm}}{\bar{r}} \right)^8 \right) (r - \bar{r}) \frac{(z_i - z_j)}{\bar{r}} dx dy \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{336\epsilon_{Cm}}{\sigma_{Cm}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(65 \left(\frac{\sigma_{Cm}}{\bar{r}} \right)^{16} - 7 \left(\frac{\sigma_{Cm}}{\bar{r}} \right)^{10} \right) (r - \bar{r})^3 \frac{(z_i - z_j)}{\bar{r}^3} dx dy \right\} \right) \quad (10)$$

از سوی دیگر می‌توان نشان داد که $(r - \bar{r}) = (w_i - w_j) \bar{r} / (z_i - z_j)$

$$q_{ij} = \bar{C}_{ij} (w_i - w_j) + \bar{E}_{ij} (w_i - w_j)^3 \quad (11)$$

که در آن

$$\bar{C}_{ij} = \sum_{m=B,N} -\rho_c \rho_m \left(\frac{24\epsilon_{Cm}}{\sigma_{Cm}^2} \right) \left(\frac{13\pi\sigma_{Cm}^{14}}{3\bar{h}_{ij}^{12}} - \frac{7\pi\sigma_{Cm}^8}{3\bar{h}_{ij}^6} \right) \quad (12)$$

$$\bar{E}_{ij} = \sum_{m=B,N} -\rho_c \rho_m \left(\frac{336\epsilon_{Cm}}{\sigma_{Cm}^2} \right) \left(\frac{65\pi\sigma_{Cm}^{14}}{6\bar{h}_{ij}^{14}} - \frac{2\pi\sigma_{Cm}^8}{3\bar{h}_{ij}^8} \right) \quad (13)$$

که \bar{h}_{ij} فاصله تعادلی بین دو صفحه گرافن و برن نیتريد (صفحه i ام و j ام) می‌باشد.

در حالت تعادل انرژی پتانسیل ناشی از نیروی و اندروالز بین دو صفحه i ام و j ام در واحد سطح عبارت است از (مراجعه شود به شکل ۱ و معادله (۱)):

$$\Phi_{ij} = \sum_{i=B,N} 2\pi\rho_c\rho_i \int_0^\infty 4\epsilon_{Ci} \left(\left(\frac{\sigma_{Ci}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{Ci}}{r} \right)^6 \right) \bar{r} d\bar{r} \\ = \sum_{i=B,N} 4\pi\rho_c\rho_i \epsilon_{Ci} \sigma_{Ci}^6 \left(\frac{\sigma_{Ci}^6}{5h_{ij}^{10}} - \frac{1}{2h_{ij}^4} \right) \quad (14)$$

۲-۵- استخراج معادلات حاکم بر ارتعاش جانبی صفحات N لایه گرافن/ برن نیتريد

در این بخش با استفاده از اصل همیلتون و استفاده از روش ریتز دسته معادلات دیفرانسیل حاکم بر ارتعاش جانبی صفحات گرافن/برن نیتريد استخراج می‌شود. برای تلفیق اثر سائز با فرضیات حاکم بر نظریه ورق اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییرشکل برشی مرتبه بالا) از نظریه آیفانتیس توأم با گردایان سرعت استفاده شده است.

پیرو اصل همیلتون معادله (۲۵) برقرار می‌باشد:

$$\int_0^{t_1} \left(\sum_{k=1}^N (\delta T^{(k)} - \delta U^{(k)}) + \delta W \right) dt = 0 \quad (25)$$

که در آن $T^{(k)}$ و $U^{(k)}$ به ترتیب معرف انرژی جنبشی کل و انرژی کرنشی کل صفحه k ام هستند و W کار نیروی و اندروالز می‌باشد. N معرف تعداد لایه‌های ساختار می‌باشد.

پیرو نظریه ساده شده میندلین، تغییرات انرژی جنبشی را می‌توان به صورت زیر بیان کرد [۲۸]:

$$\delta T = \int_V (\rho \dot{u} \delta \dot{u} + \rho \dot{v} \delta \dot{v} + \rho \dot{w} \delta \dot{w}) dV + \int_V \left(\rho l_1^2 (\dot{u}_{,i} \delta \dot{u}_{,i} + \dot{v}_{,i} \delta \dot{v}_{,i} + \dot{w}_{,i} \delta \dot{w}_{,i}) \right) dV \quad (26)$$

در معادله (۲۶)، l_1 مقیاس طول می‌باشد؛ u و v و w مؤلفه‌های بردار جابجایی هر نقطه از ورق به مختصات (x, y, z) می‌باشد که طبق فرضیات ورق اصلاح شده دو متغیره قابل بیان برحسب مؤلفه‌های بردار جابه‌جایی نقطه در صفحه میانی ورق مربوطه می‌باشند یعنی $[\delta_0]$:

$$u(x, y, z) = u_0 - z \frac{\partial w_b}{\partial x} + f(z) \frac{\partial w_s}{\partial x} \quad (27)$$

$$v(x, y, z) = v_0 - z \frac{\partial w_b}{\partial y} + f(z) \frac{\partial w_s}{\partial y} \quad (28)$$

$$w(x, y, z) = w_b(x, y, 0) + w_s(x, y, 0) \quad (29)$$

و تابع $f(z)$ به صورت زیر تعریف می‌شود $[\delta_0]$:

$$f(z) = z \left(\frac{1}{4} - \frac{5}{3} \left(\frac{z}{h} \right)^2 \right) \quad (30)$$

(v_0, u_0) مؤلفه‌های بردار جابه‌جایی هر نقطه با مختصات $(x, y, 0)$ در صفحه میانی ورق می‌باشند، w_b و w_s به ترتیب جزء خمشی و برشی جابه‌جایی جانبی ورق می‌باشند $[\delta_0]$. مشتق جزئی نسبت به زمان و $(\cdot)_{,i}$ معرف مشتق جزئی نسبت به هر یک از مؤلفه‌های مختصات (x, y, z) می‌باشد. طبق نظریه آیفانتیس δU برای هر صفحه به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\delta U = \int_V \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} dV \quad (31)$$

که در آن σ_{ij} و ε_{ij} به ترتیب مؤلفه‌های تانسور تنش و کرنش می‌باشند و مؤلفه‌های تانسور تنش در آن برای هر صفحه به صورت زیر تعریف می‌شوند [۲۸]:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \left(\varepsilon_{kl} - l^2 \varepsilon_{kl,mm} \right) \quad (32)$$

بین دو صفحه گرافن-گرافن و انرژی پتانسیل واحد بر سطح نظیر آن را برای دو صفحه گرافن-گرافن به صورت زیر تقریب زد (برای جزئیات مراجعه شود به زیربخش ۱-۲ و ۲-۲).

$$q_{ij} = \rho_c^2 \left\{ -\frac{24 \varepsilon_{CC}}{\sigma_{CC}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(26 \left(\frac{\sigma_{CC}}{\bar{r}} \right)^4 - 7 \left(\frac{\sigma_{CC}}{\bar{r}} \right)^8 \right) (r - \bar{r}) \frac{(z_i - z_j)}{\bar{r}} dx dy - \frac{336 \varepsilon_{CC}}{\sigma_{CC}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(65 \left(\frac{\sigma_{CC}}{\bar{r}} \right)^{16} - 7 \left(\frac{\sigma_{CC}}{\bar{r}} \right)^{10} \right) (r - \bar{r})^3 \frac{(z_i - z_j)}{\bar{r}^3} dx dy \right\} \approx \quad (20)$$

$$\bar{C}_{ij} (w_i - w_j) + \bar{E}_{ij} (w_i - w_j)^3 \quad (21)$$

$$\Phi_{ij} = 4\pi \rho_c^2 \varepsilon_{CC} \sigma_{CC}^6 \left(\frac{\sigma_{CC}^6}{5h_{ij}^{10}} - \frac{1}{2h_{ij}^4} \right) \quad (21)$$

که در آن

$$\bar{C}_{ij} = -\rho_c^2 \left(\frac{24 \varepsilon_{CC}}{\sigma_{CC}^2} \right) \left(\frac{13\pi \sigma_{CC}^{14}}{3\bar{h}_{ij}^{12}} - \frac{7\pi \sigma_{CC}^8}{3\bar{h}_{ij}^6} \right) \quad (22)$$

$$\bar{E}_{ij} = -\rho_c^2 \left(\frac{336 \varepsilon_{CC}}{\sigma_{CC}^2} \right) \left(\frac{65\pi \sigma_{CC}^{14}}{6\bar{h}_{ij}^{14}} - \frac{2\pi \sigma_{CC}^8}{3\bar{h}_{ij}^8} \right) \quad (23)$$

و \bar{h}_{ij} و h_{ij} به ترتیب فاصله تعادلی و فاصله بین دو صفحه گرافن (صفحه i ام و j ام) می‌باشد.

۲-۴- تعیین فاصله تعادلی میان صفحات

به منظور تعیین فاصله تعادلی بین صفحات، ابتدا انرژی پتانسیل کل سامانه با توجه به فرمول زیر یافت می‌شود.

$$\Phi = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \Phi_{ij} \quad (24)$$

که N معرف تعداد لایه‌ها است. توجه داشته باشید که در فاصله تعادلی انرژی پتانسیل کمینه می‌باشد $[\delta_0]$. لذا با صفر قرار دادن مشتق انرژی پتانسیل کل نسبت به $h_{i(i+1)}$ می‌توان فاصله تعادلی لایه‌های مجاور را یافت.

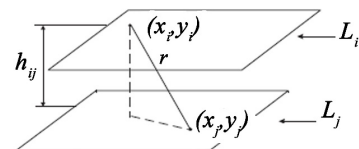


Fig. 1. Position of the i th and j th nanoplate which are not necessarily in vicinity of each other, together with, geometric parameters used to simulate van der waals force.

شکل ۱: موقعیت هندسی نانوصفحه i ام و j ام که ضرورتاً مجاور یکدیگر نیستند به همراه پارامترهای هندسی استفاده شده برای شبیه‌سازی نیروی واندروالز بین این دو نانو صفحه

ورق را ارضا می‌کنند (طبق روش ریتز) در معادله (۲۵)، می‌توان دسته معادله دیفرانسیل معمولی حاکم بر ارتعاش ورق‌ها را یافت:

$$\begin{bmatrix} [M_{mnpq}]^{(11)} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & [M_{mnpq}]^{(NN)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} [\ddot{r}_{pq}]^{(1)} \\ \dots \\ [\ddot{r}_{pq}]^{(N)} \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} [K_{mnpq}^{11}] & \dots & [K_{mnpq}^{1N}] \\ \dots & \dots & \dots \\ [K_{mnpq}^{N1}] & \dots & [K_{mnpq}^{NN}] \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} [r_{pq}]^{(1)} \\ \dots \\ [r_{pq}]^{(N)} \end{Bmatrix} = 0 \quad (43)$$

در معادله (۴۳) مقادیر M_{mnpq} و K_{mnpq} به ترتیب در معادلات (۱-الف) تا (۶-الف) در ضمیمه تعریف شده‌اند و $[r_{pq}]^{(k)}$ معرف بردار جابه‌جایی لایه k ام می‌باشد که معرف جابه‌جایی درون صفحه‌ای و جانبی می‌باشد. همچنین $m, n, p, q = 1, 2, \dots, NS$ و معرف تعداد توابع شکل استفاده شده در تقریب مؤلفه‌های بردار جابه‌جایی می‌باشد.

در این مطالعه ارتعاشات نانوصفحات چند لایه با شرایط مرزی ساده مورد مطالعه قرار گرفته است که از نقطه نظر تحلیل دینامیک مولکولی معادل غیرفعال سازی (ثابت شدن) یک ردیف از اتم‌های مرزی در چهار سوی نانورق‌ها می‌باشد. لذا مؤلفه‌های بردار جابه‌جایی با توابع شکل زیر که پیرو روش ریتز شرایط مرزی هندسی صفحات را ارضا می‌نمایند [۵۰] (در نظریه غیر کلاسیک به کار گرفته شده، معادلات حاکم بر شرط مرزی هندسی نانوصفحات و ماکرو صفحات یکسان هستند)، تقریب خورده‌اند:

$$\begin{aligned} u_0(x, y, t) &= \sum_{p=1}^{NS} \sum_{q=1}^{NS} U_{pq}(t) \sin\left(\frac{p\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{q\pi y}{b}\right) \\ v_0(x, y, t) &= \sum_{p=1}^{NS} \sum_{q=1}^{NS} V_{pq}(t) \cos\left(\frac{p\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{q\pi y}{b}\right) \\ w_b(x, y, t) &= \sum_{p=1}^{NS} \sum_{q=1}^{NS} W_{Bpq}(t) \sin\left(\frac{p\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{q\pi y}{b}\right) \\ w_s(x, y, t) &= \sum_{p=1}^{NS} \sum_{q=1}^{NS} W_{Spq}(t) \sin\left(\frac{p\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{q\pi y}{b}\right) \end{aligned} \quad (44)$$

لذا بردار جابه‌جایی $[r_{pq}]^{(k)}$ به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$[r_{pq}]^{(k)} = \{[U_{pq}] \ [V_{pq}] \ [W_{Bpq}] \ [W_{Spq}]\}^T \quad (45)$$

نظر به این‌که در ارتعاش آزاد خطی، بردار شتاب را می‌توان به صورت زیر برحسب بردار جابه‌جایی بیان کرد [۵۶]:

$$[\ddot{r}_{pq}^1 \ \dots \ \ddot{r}_{pq}^N]^{(T)} = \omega^2 [r_{pq}^1 \ \dots \ r_{pq}^N]^{(T)} \quad (46)$$

لذا با جاگذاری معادله (۴۶) در معادله (۴۳)، معادلات مقادیر ویژه حاکم بر بسامدهای طبیعی حاصل می‌گردد:

که در آن $\varepsilon_{kl,mm}$ لاپلاسیان تانسور کرنش و l مقیاس طول می‌باشند و C_{ijkl} را می‌توان براساس فرضیات حاکم بر نظریه ورق اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییرشکل برشی مرتبه بالا) [۵۰] برای یک صفحه ایزوتروپیک به صورت زیر نوشت [۴۷]:

$$C = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & 0 & 0 & 0 \\ Q_{12} & Q_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Q_{66} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Q_{66} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & Q_{66} \end{bmatrix} \quad (33)$$

که

$$Q_{11} = \frac{E}{1-\nu^2}, Q_{12} = \frac{\nu E}{1-\nu^2} \quad (34)$$

$$Q_{66} = G = \frac{E}{2(1+\nu)}$$

که E معرف مدول الاستیک ورق می‌باشد. ν نسبت پواسون و G مدول صلیب برشی هستند.

طبق فرضیات حاکم بر نظریه ورق اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییرشکل برشی مرتبه بالا) روابط زیر برقرار هستند [۵۰]:

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_0}{\partial x} - z \frac{\partial^2 w_b}{\partial x^2} + f(z) \frac{\partial^2 w_s}{\partial x^2} - \alpha \Delta T \quad (35)$$

$$\varepsilon_{yy} = \frac{\partial v_0}{\partial y} - z \frac{\partial^2 w_b}{\partial y^2} + f(z) \frac{\partial^2 w_s}{\partial y^2} - \alpha \Delta T \quad (36)$$

$$\varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_0}{\partial y} + \frac{\partial v_0}{\partial x} - 2z \frac{\partial^2 w_b}{\partial x \partial y} + 2f(z) \frac{\partial^2 w_s}{\partial x \partial y} \right) \quad (37)$$

$$\varepsilon_{xz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w_s}{\partial x} + \frac{df(z)}{dz} \frac{\partial w_s}{\partial x} \right) \quad (38)$$

$$\varepsilon_{yz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w_s}{\partial y} + \frac{df(z)}{dz} \frac{\partial w_s}{\partial y} \right) \quad (39)$$

که در معادلات (۳۵) تا (۳۹) تابع $f(z)$ و مشتق آن به صورت زیر تعریف شده‌اند [۵۰]:

$$f(z) = z \left(\frac{1}{4} - \frac{5}{3} \left(\frac{z}{h} \right)^2 \right) \quad (40)$$

$$\frac{df(z)}{dz} = \left(\frac{1}{4} - 5 \left(\frac{z}{h} \right)^2 \right) \quad (41)$$

در ضمن α معرف ضریب انبساط حرارتی و ΔT تغییر یکنواخت دما را نشان می‌دهد.

تغییرات کار نیروی خارجی را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\delta W = \int \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \bar{C}_{ij} (w_i - w_j) (\delta w_i - \delta w_j) dA \quad (42)$$

که در آن $(-\bar{C}_{ij})$ معرف سختی فنر خطی است که برای مدل‌سازی اندرکنش واندروالز استفاده شده است (معادلات (۱۲)، (۱۷) و (۲۲) را ملاحظه نمایید).

بعد از جایگزین کردن معادلات (۲۶) تا (۴۲) به همراه تقریب مؤلفه‌های بردار جابه‌جایی صفحه میانی هر ورق با توابعی که شرایط مرزی هندسی آن

براساس گزارش اعداد تا چهار رقم اعشار درصد اختلاف میان نتایج کمتر از ۰/۱ درصد می‌باشد. باید توجه داشت که علامت منفی معرف جذب دو لایه و علامت مثبت معرف دفع دو لایه می‌باشد [۵۴].

شایان ذکر است که مقادیر گزارش شده متفاوتی برای پارامترهای لنارد-جونز در مراجع مختلف دیده می‌شود که این تفاوت‌ها تأثیر قابل توجهی بر ضرایب تقریب خطی نیروی واندروالز دارد. به عنوان نمونه مقادیر موجود در مرجع [۲۱] نیز (یعنی $\epsilon = 2.635\text{meV}$ و $\sigma = 3.369\text{\AA}$) برای تعیین ضرایب تقریب خطی واندروالز در یک نانوصفحه گرافن ۱۰ لایه استفاده شده است. نتایج این محاسبه در جدول ۳ آورده شده است. مقایسه نتایج موجود در جدول ۲ و جدول ۳ نشان می‌دهد که با کاهش حدودی ۱۱ درصد مقدار ϵ و ۱ درصد مقدار σ ، بیشترین ضریب تقریب خطی نیروی واندروالز که بین لایه‌های مجاور دیده می‌شود ۲۸ درصد کاهش می‌یابد.

از سوی دیگر فاصله تعادلی محاسبه شده برای دو صفحه برن نیتريد براساس معادلات پیشنهاد شده $0.34067/\text{\AA}$ نانومتر است که حدوداً ۱۰ درصد کمتر از مقدار گزارش شده در مرجع [۵۷] یعنی $0.38/\text{\AA}$ نانومتر می‌باشد و با افزایش تعداد لایه‌ها به مقدار $0.33/\text{\AA}$ نانومتر نزدیک می‌شود که با نتایج گزارش شده در مرجع [۱۴ و ۵۷] هم‌خوانی خوبی دارد که این امر می‌تواند معرف یک نتیجه قابل قبول باشد.

جدول ۲: مقایسه ضرایب تقریب خطی نیروی واندروالز، $\text{GPa}\cdot\text{nm}^{-1}$ بین هر دو لایه از یک نانوصفحه گرافن ۱۰ لایه‌ای (اعداد بالایی در هر ردیف مقادیر گزارش شده در مرجع [۵۴] می‌باشد و اعداد پایینی حاصل از محاسبات حاضر می‌باشد)

Table 2. Comparison of linear approximation of Lenard-Jones force coefficients between the two layers of a ten-layered graphene nanoplate (the presented data and the data reported by Ref. [54] are shown by the lower numbers and upper numbers, respectively)

شماره لایه	$j = 10$	$j = 9$	$j = 8$	$j = 7$	$j = 6$	$j = 5$	$j = 4$	$j = 3$	$j = 2$	$j = 1$
$i = 1$	0.00023 0.0002	0.00047 0.0005	0.00105 0.0010	0.00265 0.0026	0.00790 0.0079	0.03012 0.0301	0.16889 0.1689	0.87206 0.8722	-1.08651 -1.08656	*
$i = 2$	0.00047 0.0005	0.00105 0.0010	0.00265 0.0026	0.00790 0.0079	0.03012 0.0301	0.16889 0.1689	0.87206 0.8722	-1.08651 -1.08656	*	-1.08651 -1.08656
$i = 3$	0.00105 0.0010	0.00265 0.0026	0.00790 0.0079	0.03012 0.0301	0.16889 0.1689	0.87206 0.8722	-1.08651 -1.08656	*	-1.08651 -1.08656	0.87206 0.8722
$i = 4$	0.00265 0.0026	0.00790 0.0079	0.03012 0.0301	0.16889 0.1689	0.87206 0.8722	-1.08651 -1.08656	*	-1.08651 -1.08656	0.87206 0.8722	0.16889 0.1689
$i = 5$	0.00790 0.0079	0.03012 0.0301	0.16889 0.1689	0.87206 0.8722	-1.08651 -1.08656	*	-1.08651 -1.08656	0.87206 0.8722	0.16889 0.1689	0.03012 0.0301
$i = 6$	0.03012 0.0301	0.16889 0.1689	0.87206 0.8722	-1.08651 -1.08656	*	-1.08651 -1.08656	0.87206 0.8722	0.16889 0.1689	0.03012 0.0301	0.00790 0.0079
$i = 7$	0.16889 0.1689	0.87206 0.8722	-1.08651 -1.08656	*	-1.08651 -1.08656	0.87206 0.8722	0.16889 0.1689	0.03012 0.0301	0.00790 0.0079	0.00265 0.0026
$i = 8$	0.87206 0.8722	-1.08651 -1.08656	*	-1.08651 -1.08656	0.87206 0.8722	0.16889 0.1689	0.03012 0.0301	0.00790 0.0079	0.00265 0.0026	0.00105 0.0010
$i = 9$	-1.08651 -1.08656	*	-1.08651 -1.08656	0.87206 0.8722	0.16889 0.1689	0.03012 0.0301	0.00790 0.0079	0.00265 0.0026	0.00105 0.0010	0.00047 0.0005
$i = 10$	*	-1.08651 -1.08656	0.87206 0.8722	0.16889 0.1689	0.03012 0.0301	0.00790 0.0079	0.00265 0.0026	0.00105 0.0010	0.00047 0.0005	0.00023 0.0002

$$\begin{bmatrix} [M_{mnpq}]^{(11)} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & [M_{mnpq}]^{(NN)} \end{bmatrix}^{(-1)} \times \quad (47)$$

$$\begin{bmatrix} [K_{mnpq}^{11}] & \dots & [K_{mnpq}^{1N}] \\ \dots & \dots & \dots \\ [K_{mnpq}^{N1}] & \dots & [K_{mnpq}^{NN}] \end{bmatrix} = \omega^2 \begin{Bmatrix} [r_{pq}]^{(1)} \\ \dots \\ [r_{pq}]^{(N)} \end{Bmatrix}$$

با حل معادله (۴۷) می‌توان بسامدهای طبیعی و مدهای نظیر آن را یافت.

۳- اعتبارسنجی مدل

۳-۱- اعتبارسنجی مدل خطی نیروی واندروالز بین نانوصفحات و فاصله تعادلی

جهت اعتبارسنجی معادلات استخراج شده جهت تقریب خطی اندرکنش بین نانوصفحات چند لایه ضرایب تقریب خطی نیروی واندروالز یک نانو صفحه ۱۰ لایه گرافن با استفاده از مقادیر $\epsilon = 2.968\text{meV}$ و $\sigma = 3.407\text{\AA}$ که برگرفته از مرجع [۵۴] می‌باشد، محاسبه شده است و با نتایج موجود در مرجع [۵۴] مقایسه شده‌اند (مراجعه شود به جدول ۲). همان‌گونه که دیده می‌شود، هم‌خوانی خوبی بین نتایج دیده می‌شود و

جدول ۳: ضرایب تقریب خطی نیروی واندروالز، $\text{GPa}\cdot\text{nm}^{-1}$ بین هر دو لایه از یک نانوصفحه گرافن 10 لایه‌ای به ازاء $\epsilon=2.635 \text{ meV}$ و $\sigma=3.369 \text{ A}$

Table 3. Linear approximation of Lenard-Jones force coefficients between two layers of ten-layered graphene nanoplate with $\epsilon=2.635 \text{ meV}$ and $\sigma=3.369 \text{ A}$

شماره لایه	$j=1$	$j=2$	$j=3$	$j=4$	$j=5$	$j=6$	$j=7$	$j=8$	$j=9$	$j=10$
$i=1$	۰	-۷۷/۶۴۹	۱/۵۵۷۰	۰/۱۴۰۲	۰/۲۵۰	۰/۰۶۶	۰/۰۲۲	۰/۰۰۹	۰/۰۰۴	۰/۰۰۲
$i=2$	-۷۷/۶۴۹	۰	-۷۷/۶۴۹	۱/۵۵۷۰	۰/۱۴۰۲	۰/۲۵۰	۰/۰۶۶	۰/۰۲۲	۰/۰۰۹	۰/۰۰۴
$i=3$	۱/۵۵۷۰	-۷۷/۶۴۹	۰	-۷۷/۶۴۹	۱/۵۵۷۰	۰/۱۴۰۲	۰/۲۵۰	۰/۰۶۶	۰/۰۲۲	۰/۰۰۹
$i=4$	۰/۱۴۰۲	۰/۵۵۷۰	-۷۷/۶۴۹	۰	-۷۷/۶۴۹	۱/۵۵۷۰	۰/۱۴۰۲	۰/۲۵۰	۰/۰۶۶	۰/۰۲۲
$i=5$	۰/۲۵۰	۰/۱۴۰۲	۱/۵۵۷۰	-۷۷/۶۴۹	۰	-۷۷/۶۴۹	۱/۵۵۷۰	۰/۱۴۰۲	۰/۲۵۰	۰/۰۶۶
$i=6$	۰/۰۶۶	۰/۲۵۰	۰/۱۴۰۲	۱/۵۵۷۰	-۷۷/۶۴۹	۰	-۷۷/۶۴۹	۱/۵۵۷۰	۰/۱۴۰۲	۰/۲۵۰
$i=7$	۰/۰۲۲	۰/۰۶۶	۰/۲۵۰	۰/۱۴۰۲	۱/۵۵۷۰	-۷۷/۶۴۹	۰	-۷۷/۶۴۹	۱/۵۵۷۰	۰/۱۴۰۲
$i=8$	۰/۰۰۹	۰/۰۲۲	۰/۰۶۶	۰/۲۵۰	۰/۱۴۰۲	۱/۵۵۷۰	-۷۷/۶۴۹	۰	-۷۷/۶۴۹	۱/۵۵۷۰
$i=9$	۰/۰۰۴	۰/۰۰۹	۰/۰۲۲	۰/۰۶۶	۰/۲۵۰	۰/۱۴۰۲	۱/۵۵۷۰	-۷۷/۶۴۹	۰	-۷۷/۶۴۹
$i=10$	۰/۰۰۲	۰/۰۰۴	۰/۰۰۹	۰/۰۲۲	۰/۰۶۶	۰/۲۵۰	۰/۱۴۰۲	۱/۵۵۷۰	-۷۷/۶۴۹	۰

جدول ۴: مقایسه بین بسامدهای بی‌بعد شده $\Omega_{mn} = \omega_{mn} h \sqrt{\rho/G}$ و Ω_{mn} مربعی با شرایط مرزی ساده

Table 4. Comparison between dimensionless frequencies ($\Omega_{mn} = \omega_{mn} h \sqrt{\rho/G}$) of a simply supported square plate

Ω_{mn}	نتایج موجود در مرجع [۵۰]	نتایج حاصل از ورق ردی [۵۰]	% اختلاف با نتایج موجود در مرجع [۵۰]	% اختلاف نتایج حاصل از ورق ردی [۵۰]
Ω_{11}	۰/۰۹۳۰	۰/۰۹۳۱	۰/۰۲	-۰/۰۸۵
Ω_{12}	۰/۲۲۱۹۵	۰/۲۲۲۲	-۰/۰۲	-۰/۰۲۲
Ω_{22}	۰/۳۴۰۶۲	۰/۳۴۰۶	۰/۰۵۸	-۰/۱۴
Ω_{13}	۰/۴۱۵۰۶	۰/۴۱۵۱	-۰/۰۰۹۶	-۰/۱۷
Ω_{23}	۰/۵۲۰۷۹	۰/۵۲۰۸	-۰/۰۰۱۹	-۰/۲۵

۳-۲- اعتبارسنجی معادلات استخراج شده حاکم بر بسامد طبیعی نانوصفحات

جهت صحت‌سنجی معادلات استخراج شده حاکم بر ارتعاش نانورق‌ها، در ابتدا پنج بسامد اول بی‌بعد شده صفحه تک لایه کلاسیک ($l = l_1 = 0$) با نتایج موجود در مراجع [۵۰] در جدول ۴ مقایسه شده‌اند. درصد اختلاف مقادیر پیش‌بینی شده با نتایج گزارش شده در مرجع [۵۰] که با استفاده از نظریه ورق اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییرشکل برشی مرتبه بالا) حاصل شده‌اند نیز در جدول ۴ فهرست شده است. همان‌گونه که دیده می‌شود توافق خوبی میان داده‌ها وجود دارد. درصد اختلاف مقادیر پیش‌بینی شده با استفاده از نظریه ورق اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییرشکل برشی مرتبه بالا) و

نظریه ورق ردی نیز در جدول ۴ فهرست شده است. به منظور تأیید درستی نتایج حاصل از شبیه‌سازی نانوصفحات چند لایه، بسامد پایه هم‌فاز و غیر هم‌فاز یک نانوصفحه ده لایه گرافن که ضرایب مدل نیروی واندروالز بین لایه‌های آن در جدول ۲ فهرست شده است، محاسبه شده و با نتایج حاصل از فرمول پیشنهادی در مرجع [۵۸] مقایسه شده است. نتیجه این مقایسه در جدول ۵ نشان داده شده است و براساس درصد اختلاف موجود (ستون سوم در جدول ۵) توافق خوبی بین داده‌ها وجود دارد. اختلاف ۴/۲۷ درصد بین مقادیر پیش‌بینی شده برای بسامد غیر هم‌فاز، ناشی از این مهم است که در مرجع [۵۸] از فرضیات حاکم بر نظریه ورق کیرشوف برای مطالعه رفتار ارتعاشی صفحات گرافن چند لایه بهره گرفته شده است و پذیرفته شده است که نظریه ورق کیرشوف فقط در پیش‌بینی بسامد پایه ورق‌های نازک (بسامد نظیر پایین‌ترین مد) از دقت خوبی برخوردار است و بسامدهای مدهای بالاتر را بیشتر از مقدار واقعی تقریب می‌زند [۴۷].

جدول ۵: مقایسه بین بسامدهای پایه هم‌فاز و غیر هم‌فاز بی‌بعد شده یک نانوصفحه 10 لایه مربعی با شرایط مرزی ساده ($\Omega_{mn} = \omega_{mn} h \sqrt{\rho/G}$)

Table 5. Comparison between in-phase and out-of-phase dimensionless fundamental frequencies ($\Omega_{mn} = \omega_{mn} h \sqrt{\rho/G}$) of a ten-layered simply supported square nanoplate

Ω_{mn}	نتایج حاضر	با استفاده از فرمول پیشنهادی در مرجع [۵۸]	درصد اختلاف
Ω_{11} (هم‌فاز)	۰/۱۰۱۲	۰/۱۰۱۵	-۰/۲
Ω_{11} (غیر هم‌فاز)	۰/۰۸۷۲۷	۰/۰۹۱۱۷	-۴/۲۷

افزایش تعداد نوارهای برن نیتريد منجر به کاهش بیشتر بسامد پایه می‌گردد. باید یادآوری نمود که در تمام نمونه‌ها سطح اشغال شده توسط صفحات برن نیتريد ثابت می‌باشد. تأثیر کاهشی افزایش دما بر بسامد پایه به سبب اثر نرم‌شدگی بار حرارتی-فشاری درون صفحه‌ای حاصله نیز در جدول ۷ مشهود می‌باشد. این درحالی است که نتایج حاصل از نظریه کلاسیک ($l = 0\text{nm}$) رفتاری متفاوت را نشان می‌دهد (جدول ۸).

تمام ورق‌های مستطیلی نشان داده شده در شکل ۲ دارای طول و عرضی به اندازه ۱۱ و ۵ نانومتر می‌باشند. در تمام نمونه‌ها مساحت اشغال شده توسط برن نیتريد ۱۵ نانومتر مربع می‌باشد. در نمونه‌های نواری، نوارهای برن نیتريد دارای مساحت‌های برابر و نوارهای گرافن نیز دارای سطوح برابر هستند.

در نمونه‌های معرفی شده با نماد "مربعی" سطوح برن نیتريد در میانه ورق گرافن پراکنده شده‌اند. در نمونه "مربعی ۱" طول و عرض صفحه برن نیتريد به ترتیب ۵ و ۳ می‌باشد. این سطح در نمونه "مربعی ۲" به دو سطح مساوی که از یکدیگر به اندازه ۲ نانومتر فاصله دارند، تقسیم شده‌اند. فاصله طولی چهار سطح مساوی برن نیتريد در نمونه "مربعی ۳"، ۲ نانومتر و فاصله عرضی آنها ۱ نانومتر است.

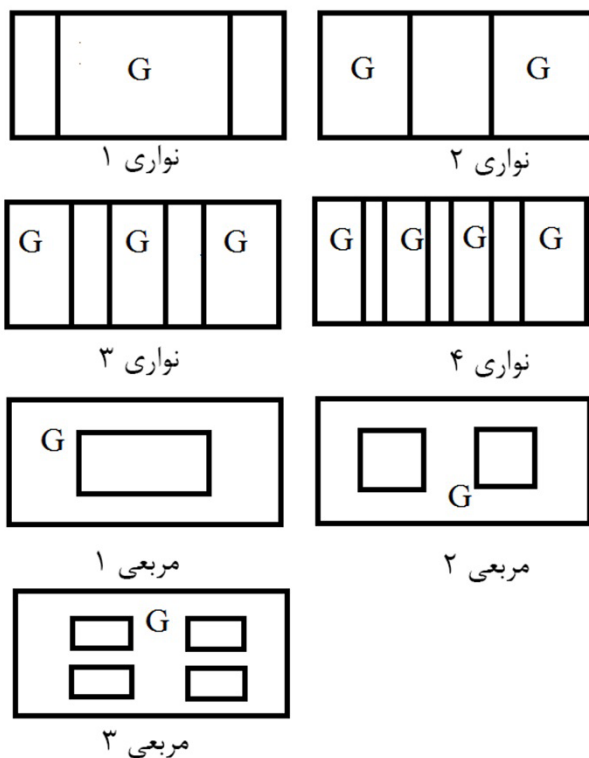


Fig. 2. Geometric dimensions and in-plane layout of G/BN

شکل ۲: ابعاد هندسی و چیدمان درون صفحه‌ای گرافن/برن نیتريد.

همان‌گونه که جدول ۸ نشان می‌دهد در برخی از ورق‌های مرکب بسامد پایه از بسامد پایه صفحه خالص گرافن بیشتر است و در میان نمونه‌های

۳-۳- امکان‌سنجی استفاده از نظریه آیفانتیس توأم با گرادیان سرعت در تخمین رفتار ارتعاشی نانوصفحات گرافن/برن نیتريد

در جدول ۶ نشان داده شده است که با استفاده از نظریه آیفانتیس توأم با گرادیان سرعت و انتخاب مناسب مقیاس طول در حالی که $l = l_1$ گذاشته شده است، می‌توان بسامد طبیعی نانوصفحات گرافن را پیش‌بینی کرد. بدین منظور از مقادیر بسامد پایه موجود در مرجع [۱۲] که براساس شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تعیین شده‌اند، بهره گرفته شده است. خواص مواد و ابعاد هندسی مربوط به نانوصفحه دولایه آرمچیر I موجود در این مرجع برای داده‌گیری استفاده شده است. البته شایان ذکر است که با توجه به نسبت غیر ایزوتروپی نزدیک به ۱ صفحات گرافن، صفحات دو لایه گرافن به صورت ایزوتروپ مدل شده‌اند.

جدول ۶: پیش‌بینی بسامد پایه گرافن (GHz) دو لایه با استفاده از نظریه آیفانتیس توأم با گرادیان سرعت تحت دما

Table 6. Prediction of a two-layered graphene fundamental frequency by Aifantis's theory with velocity gradient in thermal environment

اختلاف دما K	مقیاس طول $l = l_1$ nm	روش حاضر	شبیه‌سازی دینامیک مولکولی [۱۲]
۰	۰/۱۱۵	۵۰/۴۲	۵۰/۴۲
۱۰۰	۰/۳۵	۳۹/۶۳	۳۹/۶۲
۲۰۰	۰/۳۵	۳۷/۴۲	۳۷/۴

۴- نتایج عددی و بحث

در این بخش از خواص ترمومکانیکی موجود در مرجع [۵۹] برای شبیه‌سازی نانوصفحات تک لایه مرکب یا چند لایه گرافن/برن نیتريد استفاده شده است.

۴-۱- نانوصفحات ترکیبی تک لایه گرافن/برن نیتريد

شکل ۲ چگونگی منطقه‌بندی نانوصفحات ترکیبی تک لایه گرافن/برن نیتريد را که در این مطالعه مورد بررسی قرار گرفته‌اند نشان می‌دهد. اختصار استفاده شده در زیر هر شکل برای نامگذاری هر صفحه مرکب استفاده شده و در متن و/یا جداول و شکل‌ها از آنها استفاده می‌شود. انتخاب نوع چیدمان (نواری و مربعی)، از چیدمان‌های پیشنهاد شده در مرجع [۶۰] اقتباس شده‌اند. فرض شده است که کل مساحت گرافن نسبت به مساحت کل نانورق ثابت باقی می‌ماند. در جدول ۷ تأثیر افزایش دما و چیدمان درون صفحه‌ای گرافن/برن نیتريد بر کوچکترین بسامد طبیعی نانوصفحه مرکب فهرست شده است. همان‌گونه که از داده‌های جدول برمی‌آید، اضافه شدن برن نیتريد به صفحات گرافن منجر به کاهش بسامد پایه نانوصفحه نسبت به گرافن خالص می‌گردد. باید توجه داشت که چگونگی قرار گرفتن صفحه برن نیتريد در صفحه گرافن، تعداد و محل تمرکز آن بر بسامد پایه نانورق مرکب حاصله، تأثیرگذار است. در نانورق‌های نواری که با دو نوار گرافن محصور شده‌اند،

جدول ۹: تأثیر افزایش سطح برن نیتريد نسبت به سطح کل نانوصفحه مرکب بر کوچکترین بسامد طبیعی (THz) نانوصفحه مرکب درون صفحه‌ای گرافن/برن نیتريد ($\Delta T=0K$)

Table 9. The effects of increasing the BN area-to-total area on the fundamental natural frequency of in-plane heterostructures

$l = 1$ nm	$l = 0.5$ nm	$l = 0$ nm	درصد سطح برن نیتريد به سطح کل
۰/۱۳۵۲	۰/۱۴۲۰	۰/۱۶۰۴	۰
۰/۱۳۵۰	۰/۱۴۲۰	۰/۱۶۱۲	۵/۵۵
۰/۱۳۴۷	۰/۱۴۱۹	۰/۱۶۲۰	۱۰/۵۵
۰/۱۳۴۲	۰/۱۴۱۷	۰/۱۶۲۶	۱۵/۵۵
۰/۱۳۳۴	۰/۱۴۰۰	۰/۱۶۲۹	۲۰/۵۵
۰/۱۳۳۱	۰/۱۳۹۹	۰/۱۶۲۶	۲۵/۵۵
۰/۱۳۰۲	۰/۱۳۸۰	۰/۱۶۱۵	۳۰/۵۵
۰/۱۲۷۷	۰/۱۳۵۲	۰/۱۵۹۵	۳۵/۵۵
۰/۱۲۴۶	۰/۱۳۱۷	۰/۱۵۶۵	۴۰/۵۵

جدول ۱۰: تأثیر تعداد لایه‌ها و چیدمان لایه‌های گرافن و برن نیتريد بر بسامد پایه هم‌فاز و غیرهم‌فاز ($\Delta T=0K$ ، $l=0.5nm$)

The effects of number of layers as well as layers arrangement on in-phase and out-of-phase frequencies ($\Delta T=0K$ ، $l=0.5nm$)

بسامد غیر هم‌فاز $\bar{\omega}_{11}, THz$	بسامد هم‌فاز ω_{11}, THz	تعداد لایه و نوع چیدمان
۳/۱۲۲۸	۰/۲۵۱۱	BN/G/BN
۲/۸۴۰۷	۰/۲۵۱۱	G/BN/BN
۲/۲۳۹۵	۰/۲۵۹۱	G/BN/G
۲/۲۳۵۹	۰/۲۵۹۱	G/G/BN
۱/۹۹۹۱	۰/۲۴۶۵	BN/BN/G/BN/BN
۱/۹۲۵۶	۰/۲۴۶۵	G/BN/BN/BN/BN
۱/۹۷۰۲	۰/۲۴۶۵	BN/BN/BN/G/BN
۱/۶۴۶۶	۰/۲۵۳۰	G/BN/BN/BN/G
۱/۶۸۵۲	۰/۲۵۳۰	BN/G/BN/G/BN
۱/۶۵۲۹	۰/۲۵۳۰	G/G/BN/BN/BN
۱/۶۴۵۵	۰/۲۵۳۰	BN/G/G/BN/BN

۴-۲- صفحات مرکب لایه‌ای گرافن/برن نیتريد

تأثیر تعداد لایه‌های گرافن و برن نیتريد در نانوصفحه چند لایه و چگونگی چیدمان آنها بر کوچکترین بسامد هم‌فاز و غیر هم‌فاز نانوصفحه چند لایه در جدول ۱۰ بررسی شده است. نانو صفحات مربعی دارای ابعاد ۵ نانومتر در ۵ نانومتر می‌باشند.

در جدول ۱۰، BN معرف نانوصفحه برن نیتريد و G معرف نانوصفحه گرافن می‌باشد. براساس نتایج موجود در جدول ۱۰، در تعداد لایه برابر،

جدول ۷: تأثیر چیدمان درون صفحه‌ای گرافن/برن نیتريد بر کوچکترین بسامد طبیعی (THz) نانو صفحه مرکب ($l=0.5nm$)

Table 7. The effects of in-plane layout of G/BN on the fundamental natural frequency (THz) of heterostructures ($l=0.5nm$)

$\Delta T = 200$ K	$\Delta T = 100$ K	$\Delta T = 0$ K	نام شکل
۰/۱۳۸۱	۰/۱۴۱۳	۰/۱۴۲۰	گرافن
۰/۱۳۳۱	۰/۱۳۵۲	۰/۱۳۵۶	نواری ۱
۰/۱۳۷۵	۰/۱۴۱۰	۰/۱۴۱۷	نواری ۲
۰/۱۳۶۱	۰/۱۳۹۵	۰/۱۴۰۱	نواری ۳
۰/۱۳۵۲	۰/۱۳۸۵	۰/۱۳۹۰	نواری ۴
۰/۱۳۰۲	۰/۱۳۴۸	۰/۱۳۵۸	مربعی ۱
۰/۱۳۲۲	۰/۱۳۶۳	۰/۱۳۷۱	مربعی ۲
۰/۱۳۳۱	۰/۱۳۵۴	۰/۱۳۵۶	مربعی ۳

جدول ۸: تأثیر مقیاس طول بر کوچکترین بسامد طبیعی (THz) نانو صفحه مرکب درون صفحه‌ای گرافن/برن نیتريد ($\Delta T=0K$)

Table 8. The effects of length scale values on the fundamental natural frequency (THz) of heterostructures ($\Delta T=0K$)

$l = 1$ nm	$l = 0.5$ nm	$l = 0$ nm	نام شکل
۰/۱۳۵۲	۰/۱۴۲۰	۰/۱۶۰۴	گرافن
۰/۱۳۰۰	۰/۱۳۵۶	۰/۱۵۴۲	نواری ۱
۰/۱۳۴۲	۰/۱۴۱۷	۰/۱۶۲۶	نواری ۲
۰/۱۳۳۲	۰/۱۴۰۱	۰/۱۶۰۵	نواری ۳
۰/۱۳۲۴	۰/۱۳۹۰	۰/۱۵۹۰	نواری ۴
۰/۱۲۵۷	۰/۱۳۵۸	۰/۱۶۳۸	مربعی ۱
۰/۱۲۸۴	۰/۱۳۷۱	۰/۱۶۱۵	مربعی ۲
۰/۱۳۲۳	۰/۱۳۵۶	۰/۱۴۹۳	مربعی ۳

بررسی شده، بیشترین اختلاف متعلق به صفحه مربعی ۱ می‌باشد. براساس جدول ۸، همان‌گونه که انتظار می‌رود با افزایش مقیاس طول بسامد پایه هر ترکیب‌بندی کاهش می‌یابد.

تأثیر افزایش سطح برن نیتريد نسبت به سطح کل نانورق مرکب بر بسامد پایه، در جدول ۹ نشان داده شده است. بدین منظور نانورق مرکب «نواری ۲» مورد استفاده قرار گرفته است. براساس جدول ۹ درصد سطح اشغال شده توسط برن نیتريد می‌تواند بر افزایش یا کاهش بسامد صفحه مرکب مدل شده براساس نظریه کلاسیک ($l=0$) نسبت به بسامد گرافن خالص تأثیر بگذارد هرچند که به نظر می‌رسد با اعمال مقیاس طول، بسامد صفحه مرکب روندی کاهشی را طی می‌کند.

۵- نتیجه‌گیری

در این مطالعه بسامد پایه نانوصفحات مرکب ساخته شده از گرافن و برن نیتريد تک لایه و چند لایه بر پایه مدل غیرکلاسیک ورق اصلاح شده دومتغیره تخمین زده شده است.

با توجه به اهمیت نیروی واندوالز در مطالعه نانوصفحات چند لایه شکل گرفته براساس این نیرو، در ابتدا تقریب خطی نیروی واندوالز میان صفحات گرافن/برن نیتريد فرموله گشته است. دیده می‌شود که سختی نظیر فتر خطی معادل نیروی واندوالز میان لایه‌ها براساس چیدمان لایه‌ها تغییر می‌کند. همچنین نتایج نشان می‌دهند که:

۱. پارامترهای لندرجونز تأثیر قابل توجهی بر ضرایب تقریب خطی نیروی واندوالز دارند که به نوبه خود می‌تواند بر مقادیر پیش‌بینی شده بسامدهای غیر هم‌فاز نانوصفحات چند لایه تأثیرگذار باشد.
۲. در تعداد لایه‌های ثابت، تغییر در چیدمان تأثیری بر بسامد هم‌فاز نانوصفحه مرکب ندارد.
۳. با چیدمان مناسب لایه‌های گرافن و برن نیتريد می‌توان بسامد غیر هم‌فاز را کمینه یا بیشینه کرد.
۴. با افزایش تعداد لایه‌های برن نیتريد که به صورت زیر لایه گرافن یا پوشاننده گرافن استفاده می‌شوند، بسامد پایه نانوصفحه مرکب کاهش می‌یابد.
۵. در نانوصفحه تک لایه مرکب نواری، در نسبت سطح برن نیتريد به سطح گرافن ثابت، نانوصفحه‌ای که با تعداد نوارهای برن نیتريد بیشتری تقسیم شده است دارای بسامد پایه کمتری است.
۶. با افزایش دما و مقیاس طول بسامد طبیعی نانوصفحات مرکب (تک لایه یا لایه‌ای) کاهش می‌یابد.

نانوصفحه‌ای که دارای صفحات گرافن بیشتری است، دارای بسامد پایه بزرگتری است؛ اما با افزایش تعداد لایه‌های برن نیتريد (به ازای تعداد صفحات گرافن ثابت) بسامد پایه کاهش می‌یابد. در تعداد ثابت لایه‌ها (لایه‌های گرافن و برن نیتريد) تغییر در چیدمان صفحات بر بسامد پایه هم‌فاز بی‌تأثیر است که به سبب غیرفعال بودن نیروی واندوالز معادل شده در مد ارتعاش هم‌فاز می‌باشد. در حالی که تغییر در چیدمان منجر به تغییر در سختی فتر خطی معادل نیروی واندوالز می‌گردد که بیشترین تأثیر را در بسامدهای غیرهم‌فاز نشان می‌دهد؛ لذا بسامد پایه غیرهم‌فاز تحت تأثیر چیدمان افزایش یا کاهش می‌یابند.

تأثیر کاهش افزایش دما و مقیاس طول بر بسامد پایه هم‌فاز و غیر هم‌فاز در شکل ۳ نشان داده شده است. همان‌گونه که دیده می‌شود تأثیر دما بر بسامد غیرهم‌فاز چندان ملموس نیست.

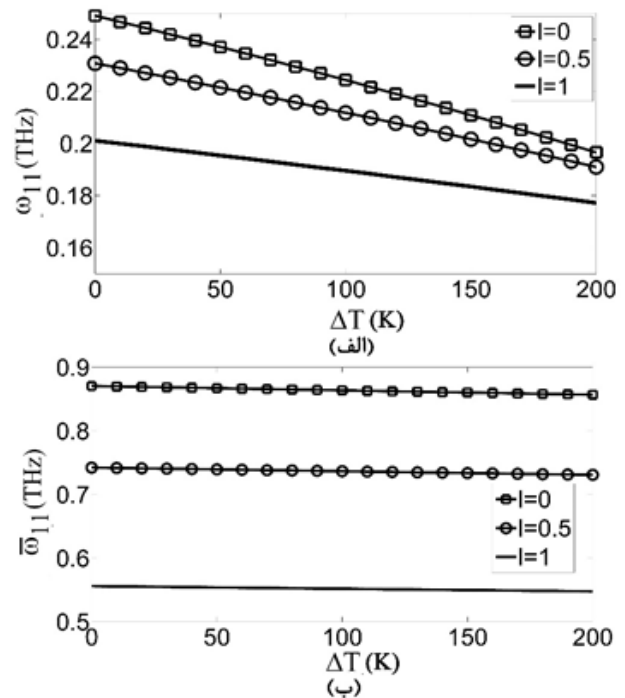


Fig. 3. The effects of temperature rise and length scale values on (a) the in-phase and (b) out-of-phase natural frequencies of BN/BN/G/BN/BN/G/BN/BN/G/BN/BN

شکل ۳: تأثیر افزایش دما، K و مقیاس طول، nm بر بسامد الف) هم‌فاز (ω_{11}) و ب) غیر هم‌فاز (ω_{11}) نانو صفحه ۱۱ لایه با چیدمان BN/BN/G/BN/BN/G/BN/BN/G/BN/BN

ضمیمه الف

$$[K]_{mnpq}^{(kk)} = \begin{bmatrix} [K]_{uu} & [K]_{uv} & 0 & 0 \\ [K]_{vu} & [K]_{vv} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & [K]_{w_b w_b} & [K]_{w_b w_s} \\ 0 & 0 & [K]_{w_s w_b} & [K]_{w_s w_s} \end{bmatrix}^{(kk)}$$

(الف-۳)

که در آن

$$[K]_{uu} = \int_0^a \int_0^b h(Q_{11} \frac{\partial \varphi_{umn}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x} + Q_{66} \frac{\partial \varphi_{umn}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x}) dx dy$$

$$- \int_0^a \int_0^b h l^2 (Q_{11} (\frac{\partial^3 \varphi_{umn}}{\partial x^3} \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x} + \frac{\partial^3 \varphi_{umn}}{\partial x \partial y^2} \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x})) dx dy$$

$$- \int_0^a \int_0^b h l^2 (Q_{66} (\frac{\partial^3 \varphi_{umn}}{\partial y \partial x^2} \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y} + \frac{\partial^3 \varphi_{umn}}{\partial y^3} \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y})) dx dy$$

$$[K]_{uv} = \int_0^a \int_0^b h Q_{12} (\frac{\partial \varphi_{vmn}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x} - l^2 \frac{\partial^3 \varphi_{vmn}}{\partial y^3} \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x}) dx dy$$

$$- \int_0^a \int_0^b (h Q_{12} l^2 \frac{\partial^3 \varphi_{vmn}}{\partial x^2 \partial y} \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x} + Q_{66} h l^2 \frac{\partial^3 \varphi_{vmn}}{\partial y^2 \partial x} \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y}) dx dy$$

$$+ \int_0^a \int_0^b Q_{66} h (\frac{\partial \varphi_{vmn}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y} - l^2 \frac{\partial^3 \varphi_{vmn}}{\partial x^3} \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x}) dx dy$$

$$[K]_{vu} = \int_0^a \int_0^b h Q_{12} (\frac{\partial \varphi_{vpq}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{umn}}{\partial x} - l^2 \frac{\partial \varphi_{vpq}}{\partial y} \frac{\partial^3 \varphi_{umn}}{\partial x^3}) dx dy$$

$$- \int_0^a \int_0^b (h Q_{12} l^2 \frac{\partial \varphi_{vpq}}{\partial y} \frac{\partial^3 \varphi_{umn}}{\partial x \partial y^2} + Q_{66} h l^2 \frac{\partial^3 \varphi_{umn}}{\partial y^3} \frac{\partial \varphi_{vpq}}{\partial x}) dx dy$$

$$+ \int_0^a \int_0^b Q_{66} h (\frac{\partial \varphi_{umn}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{vpq}}{\partial x} - l^2 \frac{\partial^3 \varphi_{umn}}{\partial x^2 \partial y} \frac{\partial \varphi_{vpq}}{\partial x}) dx dy$$

$$[K]_{vv} = \int_0^a \int_0^b h(Q_{11} \frac{\partial \varphi_{vmn}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{vpq}}{\partial y} + Q_{66} \frac{\partial \varphi_{vmn}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{vpq}}{\partial x}) dx dy$$

$$- \int_0^a \int_0^b h l^2 (Q_{11} (\frac{\partial^3 \varphi_{vmn}}{\partial y^3} \frac{\partial \varphi_{vpq}}{\partial y} + \frac{\partial^3 \varphi_{vmn}}{\partial x^2 \partial y} \frac{\partial \varphi_{vpq}}{\partial y})) dx dy$$

$$- \int_0^a \int_0^b h l^2 (Q_{66} (\frac{\partial^3 \varphi_{vmn}}{\partial x^3} \frac{\partial \varphi_{vpq}}{\partial x} + \frac{\partial^3 \varphi_{vmn}}{\partial x \partial y^2} \frac{\partial \varphi_{vpq}}{\partial x})) dx dy$$

$$[M]_{mnpq}^{(kk)} = \begin{bmatrix} [M]_{uu} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & [M]_{vv} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & [M]_{w_b w_b} & [M]_{w_b w_s} \\ 0 & 0 & [M]_{w_s w_b} & [M]_{w_s w_s} \end{bmatrix}^{(kk)}$$

(الف-۱)

که در آن

$$[M]_{uu} = \int_0^a \int_0^b h \rho (\varphi_{umn} \varphi_{upq} + l_1^2 \frac{\partial \varphi_{umn}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x} + l_1^2 \frac{\partial \varphi_{umn}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y}) dx dy$$

$$[M]_{vv} = \int_0^a \int_0^b h \rho (\varphi_{vmn} \varphi_{vpq} + l_1^2 \frac{\partial \varphi_{vmn}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{vpq}}{\partial x} + l_1^2 \frac{\partial \varphi_{vmn}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{vpq}}{\partial y}) dx dy$$

$$[M]_{w_b w_b} = \int_0^a \int_0^b \rho h (\frac{h^2}{12} + 2l_1^2) (\frac{\partial \varphi_{Bmn}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{Bpq}}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_{Bmn}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{Bpq}}{\partial y}) dx dy$$

$$+ \int_0^a \int_0^b \frac{h^3}{12} \rho l_1^2 (\frac{\partial^2 \varphi_{Bmn}}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_{Bmn}}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial y^2} + 2 \frac{\partial^2 \varphi_{Bmn}}{\partial y \partial x} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial y \partial x}) dx dy$$

$$+ \int_0^a \int_0^b \rho h \varphi_{Bmn} \varphi_{Bpq} dx dy$$

$$[M]_{w_b w_s} = \int_0^a \int_0^b \rho h \varphi_{Smn} \varphi_{Bpq} dx dy$$

$$+ \int_0^a \int_0^b \frac{7 \rho l^2 h}{6} (\frac{\partial \varphi_{Smn}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{Bpq}}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_{Smn}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{Bpq}}{\partial y}) dx dy$$

$$[M]_{w_s w_b} = \int_0^a \int_0^b \rho h \varphi_{Bmn} \varphi_{Spq} dx dy$$

$$+ \int_0^a \int_0^b \frac{7 \rho l^2 h}{6} (\frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{Bmn}}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{Bmn}}{\partial y}) dx dy$$

$$[M]_{w_s w_s} = \int_0^a \int_0^b \rho \left[\frac{h^3}{1008} (\frac{\partial \varphi_{Smn}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_{Smn}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial y}) + \varphi_{Smn} \varphi_{Spq} \right] dx dy$$

$$+ \int_0^a \int_0^b \frac{h^3}{1008} \rho l_1^2 (\frac{\partial^2 \varphi_{Smn}}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \varphi_{Spq}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_{Smn}}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \varphi_{Spq}}{\partial y^2} + 2 \frac{\partial^2 \varphi_{Smn}}{\partial y \partial x} \frac{\partial^2 \varphi_{Spq}}{\partial y \partial x}) dx dy$$

$$+ \int_0^a \int_0^b \frac{7 h \rho l_1^2}{6} (\frac{\partial \varphi_{Smn}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_{Smn}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial y}) dx dy$$

(الف-۲)

$$\begin{aligned}
 [K]_{w_s w_s} = & - \int_0^a \int_0^b h \alpha \Delta T (Q_{11} (\frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{Smn}}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{Bmn}}{\partial y})) dx dy \quad (\text{الف-۴}) \\
 & - \int_0^a \int_0^b h \alpha \Delta T Q_{12} (\frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{Smn}}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{Smn}}{\partial y}) dx dy \\
 & + \int_0^a \int_0^b \frac{h^3}{1008} (Q_{11} (\frac{\partial^2 \varphi_{Spq}}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \varphi_{Smn}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_{Spq}}{\partial y^2} \frac{\partial^2 \varphi_{Smn}}{\partial y^2})) dx dy \\
 & + \int_0^a \int_0^b \frac{h^3}{1008} Q_{12} (\frac{\partial^2 \varphi_{Spq}}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \varphi_{Smn}}{\partial y^2}) dx dy \\
 & - \int_0^a \int_0^b \frac{h^3 l^2}{1008} Q_{11} (\frac{\partial^2 \varphi_{Spq}}{\partial x^2} \frac{\partial^4 \varphi_{Smn}}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi_{Spq}}{\partial x^2} \frac{\partial^4 \varphi_{Smn}}{\partial x^4}) dx dy \\
 & - \int_0^a \int_0^b \frac{h^3 l^2}{1008} Q_{11} (\frac{\partial^2 \varphi_{Spq}}{\partial y^2} \frac{\partial^4 \varphi_{Smn}}{\partial y^4} + \frac{\partial^2 \varphi_{Spq}}{\partial y^2} \frac{\partial^4 \varphi_{Smn}}{\partial x^2 \partial y^2}) dx dy \\
 & - \int_0^a \int_0^b \frac{h^3 l^2}{1008} Q_{12} (\frac{\partial^2 \varphi_{Spq}}{\partial y^2} \frac{\partial^4 \varphi_{Smn}}{\partial x^4} + \frac{\partial^2 \varphi_{Spq}}{\partial y^2} \frac{\partial^4 \varphi_{Smn}}{\partial x^2 \partial y^2}) dx dy \\
 & + \int_0^a \int_0^b 4 \frac{h^3}{1008} Q_{66} (\frac{\partial^2 \varphi_{Spq}}{\partial y \partial x} \frac{\partial^2 \varphi_{Smn}}{\partial y \partial x}) dx dy \\
 & - \int_0^a \int_0^b 4 \frac{h^3}{1008} Q_{66} l^2 (\frac{\partial^2 \varphi_{Spq}}{\partial y \partial x} \frac{\partial^4 \varphi_{Smn}}{\partial y \partial x^3} + \frac{\partial^2 \varphi_{Spq}}{\partial y \partial x} \frac{\partial^4 \varphi_{Smn}}{\partial y^3 \partial x}) dx dy \\
 & + \int_0^a \int_0^b (\frac{5h}{6} Q_{66} - \frac{25}{3h} l^2 Q_{66}) (\frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{Smn}}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{Smn}}{\partial y}) dx dy \\
 & - \int_0^a \int_0^b \frac{5h}{6} l^2 Q_{66} (\frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial y} \frac{\partial^3 \varphi_{Smn}}{\partial y^3} + \frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial y} \frac{\partial^3 \varphi_{Smn}}{\partial y \partial x^2}) dx dy \\
 & - \int_0^a \int_0^b \frac{5h}{6} l^2 Q_{66} (\frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial x} \frac{\partial^3 \varphi_{Smn}}{\partial x^3} + \frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial x} \frac{\partial^3 \varphi_{Smn}}{\partial x \partial y^2}) dx dy \\
 & + \sum_{j=1}^N (-\bar{C}_{kj}) \int_0^a \int_0^b \varphi_{smn} \varphi_{spq} dx dy
 \end{aligned}$$

(الف-۴)

9

$$[K_{mnpq}^{(ef)}] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & [K^{ef}]_{BB} & [K^{ef}]_{BS} \\ 0 & 0 & [K^{ef}]_{SB} & [K^{ef}]_{SS} \end{bmatrix}^{(ef)} \quad (e \neq f)$$

(الف-۵)

$$\begin{aligned}
 [K]_{w_b w_b} = & - \int_0^a \int_0^b h \alpha \Delta T (Q_{11} (\frac{\partial \varphi_{Bmn}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{Bpq}}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_{Bmn}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{Bpq}}{\partial y})) dx dy \\
 & - \int_0^a \int_0^b h \alpha \Delta T (Q_{12} (\frac{\partial \varphi_{Bmn}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{Bpq}}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_{Bmn}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{Bpq}}{\partial y})) dx dy \\
 & + \int_0^a \int_0^b \frac{h^3}{12} (Q_{11} (\frac{\partial^2 \varphi_{Bmn}}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi_{Bmn}}{\partial y^2} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial y^2})) dx dy \\
 & + \int_0^a \int_0^b \frac{h^3}{12} Q_{12} (\frac{\partial^2 \varphi_{Bmn}}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi_{Bmn}}{\partial y^2} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial x^2}) dx dy \\
 & - \int_0^a \int_0^b \frac{h^3}{12} l^2 (Q_{11} (\frac{\partial^4 \varphi_{Bmn}}{\partial x^4} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial x^2} + \frac{\partial^4 \varphi_{Bmn}}{\partial y^2 \partial x^2} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial x^2})) dx dy \\
 & - \int_0^a \int_0^b \frac{h^3 l^2}{12} Q_{12} (\frac{\partial^4 \varphi_{Bmn}}{\partial y^4} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial x^2} + \frac{\partial^4 \varphi_{Bmn}}{\partial y^2 \partial x^2} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial x^2}) dx dy \\
 & - \int_0^a \int_0^b \frac{h^3}{12} l^2 (Q_{12} (\frac{\partial^4 \varphi_{Bmn}}{\partial x^4} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial y^2} + \frac{\partial^4 \varphi_{Bmn}}{\partial x^2 \partial y^2} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial y^2})) dx dy \\
 & - \int_0^a \int_0^b \frac{h^3}{12} l^2 Q_{11} (\frac{\partial^4 \varphi_{Bmn}}{\partial y^4} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial y^2} + \frac{\partial^4 \varphi_{Bmn}}{\partial y^2 \partial x^2} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial y^2}) dx dy \\
 & + \int_0^a \int_0^b \frac{4h^3}{12} Q_{66} (\frac{\partial^2 \varphi_{Bmn}}{\partial x \partial y} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial y \partial x} - l^2 \frac{\partial^4 \varphi_{Bmn}}{\partial x^3 \partial y} \frac{\partial^2 \varphi_{Bpq}}{\partial y \partial x}) dx dy \\
 & + \sum_{j=1}^N (-\bar{C}_{kj}) \int_0^a \int_0^b \varphi_{Bmn} \varphi_{Bpq} dx dy
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [K]_{w_b w_s} = & - \int_0^a \int_0^b h \alpha \Delta T (Q_{11} (\frac{\partial \varphi_{Smn}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{Bpq}}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_{Smn}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{Bpq}}{\partial y})) dx dy \\
 & - \int_0^a \int_0^b h \alpha \Delta T Q_{12} (\frac{\partial \varphi_{Smn}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{Bpq}}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_{Smn}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{Bpq}}{\partial y}) dx dy \\
 & + \sum_{j=1}^N (-\bar{C}_{kj}) \int_0^a \int_0^b \varphi_{smn} \varphi_{Bpq} dx dy
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [K]_{w_s w_b} = & - \int_0^a \int_0^b h \alpha \Delta T Q_{11} (\frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{Bmn}}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{Bmn}}{\partial y}) dx dy \\
 & - \int_0^a \int_0^b h \alpha \Delta T Q_{12} (\frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_{Bmn}}{\partial x} + \frac{\partial \varphi_{Spq}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_{Bmn}}{\partial y}) dx dy \\
 & + \sum_{j=1}^N (-\bar{C}_{kj}) \int_0^a \int_0^b \varphi_{spq} \varphi_{Bmn} dx dy
 \end{aligned}$$

and postbuckling analysis of single layer graphene sheet embedded in a polymer matrix, *Physica E*, 44(2012)1708-1715.

- [5] K. Yang, Y. Chen, F. Pan, S. Wang, Y. Ma, Q. Liu, Buckling Behavior of Substrate Supported Graphene Sheets, *Materials*, 9(32) (2016) DOI:10.3390/ma9010032.
- [6] A. Anjomshoa, A.R. Shahidi, B. Hassani, E. Jomehzadeh, Finite element buckling analysis of multi-layered grapheme sheets on elastic substrate based on nonlocal elasticity theory, *Applied Mathematical Modelling*, 38 (2014) 5934-5955.
- [7] D. Karlicic, M. Cajic, P. Kozic, I. Pavlovic, 2015, Temperature effects on the vibration and stability behavior of multi-layered graphene sheets embedded in an elastic medium, *Composite Structures*, 131(2015) 672-681.
- [8] S.C. Pradhan, J.K. Phadikar, Small scale effect on vibration of embedded multilayered graphene sheets based on nonlocal continuum models, *Physics Letters A*, 373 (2009)1062-1069.
- [9] T. Murmu, S. Adhikari, Nonlocal mass nanosensors based on vibrating monolayer graphene sheets, *Sensors and Actuators B: Chemical*, 188(2013)1319-1327.
- [10] D. Karlicic, P. Kozic, R. Pavlovic, Free transverse vibration of nonlocal viscoelastic orthotropic multi-nanoplate system (MNPS) embedded in a viscoelastic medium, *Composite Structures*, 115 (2014) 89-99.
- [11] D. Karlicic, P. Kozic, S. Adhikari, M. Cajic, T. Mutmu, M. Lazarevic, Nonlocal mass-nanosensor model based on the damped vibration of single-layer grapheme sheet influenced by in-plane magnetic field, *International Journal of Mechanical Sciences*, 96-97 (2015) 132-142.
- [12] H.S. Shen, Y-M Xu, C-L Zhang, Prediction of nonlinear vibration of bilayer graphene sheets in thermal environments via molecular dynamics simulations and nonlocal elasticity, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 267 (2013) 458-470.
- [13] E. Jomehzadeh, A.R. Saidi, N.M. Pugno, Large amplitude vibration of a bilayer grapheme embedded in a nonlinear polymer matrix, *Physica E*, 44(2012)1973-1982.
- [14] D. Golberg, Y. Bando, Y. Huang, T. Terao, M. Mitome, C. Tang, C. Zhi, Boron nitride nanotubes and nanosheets, *ACS Nano*, 4(2010)2979-2993.
- [15] L. Boldrin, F. Scarpa, R. Chwdhury, S. Adhikari, Effective mechanical properties of hexagonal boron nitride nanosheets, *Nanotechnology*, 22(2011) 505702.
- [16] Q. Peng, W. Ji, S. De, Mechanical properties of the hexagonal boron nitride monolayer: Ab initio study,

که e و f معرف شماره ورق‌های مرتبط با نیروی و اندروالز می‌باشد.

9

$$[K^{ef}]_{BB} = \bar{C}_{ef} \int_0^a \int_0^b \varphi_{B_{mn}} \varphi_{B_{pq}} dx dy$$

$$[K^{ef}]_{BS} = \bar{C}_{ef} \int_0^a \int_0^b \varphi_{s_{mn}} \varphi_{B_{pq}} dx dy$$

$$[K^{ef}]_{BS} = \bar{C}_{ef} \int_0^a \int_0^b \varphi_{B_{mn}} \varphi_{s_{pq}} dx dy$$

$$[K^{ef}]_{SS} = \bar{C}_{ef} \int_0^a \int_0^b \varphi_{s_{mn}} \varphi_{s_{pq}} dx dy$$

(الف-۶)

در معادلات بالا a و b معرف طول و عرض ورق‌هاست و ρ ، h و α معرف چگالی مخصوص، ضخامت و ضریب انبساط حرارتی لایه k می‌باشد. $(-\bar{C}_{ef})$ معرف ضریب سختی فنر خطی معادل نیروی و اندروالز میان دو لایه e و f می‌باشد و مقدار \bar{C}_{ef} با توجه به تعداد لایه‌ها و چگونگی چیدمان به شیوه توضیح داده شده در بخش ۲ محاسبه می‌گردد. همچنین N معرف تعداد کل لایه‌های مدل شده می‌باشد.

توابع شکل استفاده شده در معادلات بالا به توجه به شرایط مرزی ساده به صورت زیر انتخاب شده‌اند؛ چرا که شرایط مرزی هندسی را ارضا می‌کنند:

$$\varphi_{umn} = \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \cos\left(\frac{n\pi y}{b}\right)$$

$$\varphi_{vmn} = \cos\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right)$$

$$\varphi_{Bmn} = \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right)$$

$$\varphi_{Smn} = \sin\left(\frac{m\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi y}{b}\right)$$

(الف-۷)

مراجع

- [1] X. Y. Sun, Z. Fu., M. Xia, Y. Xu, Effect of vacancy defect on the tensile behavior of graphene, *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, 4(2014), 051002.
- [2] A. Zandiatashbar, G-H. Lee, S.J. An, S. Lee, N. Mathew, M. Terrones, T. Hayashi, C.R. Picu, J. Hone, N. Koratkar, Effect of defects on the intrinsic strength and stiffness of grapheme, *Nature Communications*, (2014) DOI: 10.1038/ncomms4186.
- [3] L. Murmu, S.C. Pradhan, Buckling of biaxially compressed orthotropic plates at small scales. *Mechanics Research Communications*, 36(2009).933-938.
- [4] M.H. Mahdavi, L.Y. Jiang, X. Sun, Nonlinear vibration

- [30] R.D. Mindlin, N.N. Eshel, On first strain-gradient theories in linear elasticity, *International Journal of Solids and Structures*, 4(1968)109-124.
- [31] B. Altan, E.C. Aifantis, On some aspects in the special theory of gradient elasticity, *Journal of the Mechanical Behavior of Materials*, 8(1997)231-282.
- [32] D.C.C. Lam, F. Yang, A.C.M. Chong, J. Wang, P. Tong, "Experiments and theory in strain gradient elasticity, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 51(2003)1477-1508.
- [33] R.D. Mindlin, H.F. Tiersten, Effects of couple-stresses in linear elasticity, *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 11(1962)415-448.
- [34] F. Yang, A.C. Chong, D.C.C. Lam, P. Tong, Couple stress based strain gradient theory for elasticity, *International Journal of Solids and Structures*, 39(2002)2731-2743.
- [35] A. Ashoori Movassagh, A.M.J. Mahmoodi. A micro-scale modeling of Kirchhoff plate based on modified strain-gradient elasticity theory, *European Journal of Mechanics A-Solids*, 40(2013)50-59.
- [36] S. Ziaee, M. Asadipour, The effect of small scale on torsional buckling of the embedded double-to five-walled nanotubes under axial loading and thermal field, *Amirkabir Journal of Science & Research (Mechanical Engineering)*, 46(2014)25-27.
- [37] Y.Q. Zhang, G.R. Liu, X.Y. Xie, Free transverse vibrations of double-walled carbon nanotubes using a theory of nonlocal elasticity, *Physical Review B*, 9(2005)195404.
- [38] Y.-G. Hu, K.M. Liew, Q. Wang, X.Q. He, B.I. Yakobson, Nonlocal shell model for elastic wave propagation in single- and doublewalled carbon nanotubes, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 56 (2008) 3475-3485.
- [39] F. Khademolhosseini, R.K.N.D. Rajapakse, A. Nojeh, Torsional buckling of carbon nanotubes based on nonlocal elasticity shell models, *Computational Materials Science*, 48(2010)736-742.
- [40] R. Ansari, S. Sahmani, H. Rouhi, Rayleigh-Ritz axial buckling analysis of single-walled carbon nanotubes with different boundary conditions, *Physics Letters A*, 375(2011)1255-1263.
- [41] W.H. Duan, C.M. Wang, Y.Y. Zhang, Calibration of nonlocal scaling effect parameter for free vibration of carbon nanotubes by molecular dynamics, *Journal of Applied Physics*, 101(2007)024305.
- [42] R. Ansari, S. Sahmani, B Arash, , Nonlocal plate model for free vibrations of single-layered graphene sheets, *Physics Letters A*, 375(2010) 53-62.
- Computational Materials Science, 56(2012)11-17.
- [17] K.N. Kudin, G.E. Scuseria, B.I. Yakobson, F2C, BN and C nanoshell elasticity from ab initio computations, *Physical Review B*, 64(2001)235406.
- [18] J.F. Green, T.K. Bolland, J.W. Bolland, Theoretical elastic behavior for hexagonal boron nitride, *Journal of Chemical Physics*, 64(1976) 656-662.
- [19] B. Akdim, R. Pachter, X. Duan, W. Adams, Comparative theoretical study of single-wall carbon and boron-nitride nanotubes, *Physical Review*, 67(2003) 245404.
- [20] J. Yuan, K.M. Liew, Internal friction characteristic and analysis of inplane natural frequency of trilayer complexes formed from graphenes and boron nitride nanosheets, *RSC Advances*, 4(2014)45425-45432.
- [21] D. Baowan, J.M. Hill, Nested boron nitride and carbon-boron nitride nanocones, *Micro and Nano Letters*, 2, (2007)46-49.
- [22] S. Zhao, J. Xue, Mechanical properties of hybrid graphene and hexagonal boron nitride sheets as revealed by molecular dynamic simulations, *Journal of Physics D: A Applied Physics*, 46(2013)135303.
- [23] S. Park, C. Park, G. Kim, Interlayer coupling enhancement in graphene/hexagonal boron nitride heterostructures by intercalated defects or vacancies, *The Journal of Chemical Physics*, 140(2014) 134706.
- [24] W. Pan, J. Xiao, J. Zhu, Y.C. Yu, G. Zhang, Z. Ni, K. Watanabe, T. Taniguchi, Y. Shi, X. Wang, Biaxial Compressive Strain Engineering in graphene/Boron nitride Heterostructures, *Scientific Reports*, 2(893) (2012) doi: 10.1038/srep00893.
- [25] Y. Xiaohu, H. Qiang, Investigation of axially compressed buckling of a multi-walled carbon nanotube under temperature field, *Composites Science and Technology*, 67(2007)125-134.
- [26] Y. Xiaohu, H. Qiang, A continuum mechanics nonlinear postbuckling analysis for single-walled carbon nanotubes under torque, *European Journal of Mechanics A/Solids*, 27 (2008) 796-807.
- [27] J. Lei, Y. He, B. Zhang, Z. Gan, P. Zeng, Bending and vibration of functionally graded sinusoidal microbeams based on the strain gradient elasticity theory. *International Journal of Engineering Science*, 72(2013)36-52.
- [28] H. Askes, E.C. Aifantis, Gradient elasticity in statics and dynamics: An overview of formulations, length scale identification procedures, finite element implementations and new results, *International Journal of Solids and Structures*, 48(2011)1962-1990.
- [29] R.D. Mindlin, Micro-structure in linear elasticity. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*. 16(1964)52-78.

- [53] H.T. Thai, A nonlocal beam theory for bending, buckling, and vibration of nanobeams, *International Journal of Engineering Science*, 52(2012)56–64.
- [54] J. Wang, X. He, S. Kitipornchai, H. Zhang, Geometrical nonlinear free vibration of multi-layered graphene sheets, *Journal of Physics D: Applied Physics*, 44(2011) 13401.
- [55] Y. Jiang, Y. Huang, H. Jiang, G. Ravichandran, H. Gao, K.C. Hwang, B. Liu, A cohesive law for carbon nanotube/polymer interfaces based on the van der Waals force, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54 (2006) 2436 – 2452.
- [56] W. Thomson, M.D. Dahleh, *Theory of vibration with application*, 5th ed, Prentice Hall, 1998.
- [57] X. Wang, C. Zhi, Q. Weng, Y. Bando, D. Golberg, Boron Nitride Nanosheets: novel Syntheses and Applications in polymeric Composites, *Journal of Physics: Conference Series*, 471(2013) 012003.
- [58] S.C. Pradhan, J.K. Phadikar, Small scale effect on vibration of embedded multilayered graphene sheets based on nonlocal continuum models, *Physics Letters A*, 373(2009,)1062-1069.
- [59] S.K. Singh, M. Neek-Amal, S. Costamagna, F.M. Peeters, Thermomechanical properties of a single hexagonal boron nitride sheet, *Physical Review B*, 87(2013)184106, DOI:10.1103/PhysRevB.87.184106.
- [60] Z. Liu, L. Ma, G. Shi, W. Zhou, Y. Gong, S. Lei, X. Yang, J. Zhang, J. Yu, K.P. Hackenberg, A. Babakhani, J-C. Idrobo, R. Vajtai, J. Lou, P.M. Ajayan, In-plane heterostructures of graphene and hexagonal boron nitride with controlled domain sizes, *Nature Nanotechnology*, 8(2013)119-124
- [43] L. Shen, H-S Shen, C-L Zhang, A nonlocal plate model for nonlinear vibration of single layer graphene sheets in thermal environments, *Computational Material Science*, 48(2010)680–685.
- [44] R. Ansari, S. Sahmani, Prediction of biaxial buckling of single-layered graphene sheets based on nonlocal plate models and molecular dynamics simulations, *Applied Mathematical Modelling*, 37(2013)7338-7351
- [45] E.M. Miandoab, H.N. Pishkenari, A. Yousefi-Koma, H. Hoorzad, , Polysiliconnano-beam model based on modified couple stress and Eringen's nonlocal elasticity theories, *Physica E*, 63(2014)223–228.
- [46] J.N. Reddy, Microstructure-dependent couple stress theories of functionally graded beams, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59(2011)2382-2399.
- [47] H. Askes, E.C. Aifantis, Gradient elasticity and flexural wave dispersion in carbon nanotubes, *Physical Review B*, 80 (2009) 195412.
- [48] J.N. Reddy, *Theory and Analysis of Elastic Plates and Shell*, 2th ed, Taylor & Francis Group, 2007.
- [49] P. Malekzadeh, M. Shojaee, Free vibration of nanoplates based on a nonlocal two-variable refined plate theory, *Composite Structures*, 95 (2013) 443-452.
- [50] R.P.Shimpi, Refined plate theory and its variants. *AIAA Journal* 40(2002)137–46.
- [51] R.P. Shimpi, H.G. Patel, Free vibrations of plate using two variable refined plate theory, *Journal of Sound and Vibration*, 296 (2006)979–999.
- [52] S. Narendar, Buckling analysis of micro-/nano-scale plates based on twovariable refined plate theory incorporating nonlocal scale effects, *Composite Structures*, 93(2011) 3093–3103.

برای ارجاع به این مقاله از عبارت زیر استفاده کنید:



Please cite this article using:

S. Ziaee, Free Vibration of Heterostructures of Graphene and Boron Nitride in Thermal Environment via Aifantis Theory with Velocity Gradients and Ritz Method, *Amirkabir J. Mech. Eng.*, 50(5) (2018) 1061-1078.
DOI: 10.22060/mej.2017.11858.5201

