نشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر

نشریه مهندسی مکانیک امیرکبیر، دوره ۵۰، شماره ۵، سال ۱۳۹۷، صفحات ۱۰۶۱ تا ۱۰۷۸ DOI: 10.22060/mej.2017.11858.5201



بررسی ار تعاشات آزاد نانوصفحات مرکب گرافن-برن نیترید در محیط حرارتی با استفاده از نظریهٔ آیفانتیس توأم با گرادیان سرعت و روش ریتز

سيما ضيايي*

دانشکده مهندسی، دانشگاه یاسوج، یاسوج، ایران

چکیده: این مطالعه به بررسی ارتعاشات جانبی صفحات تک لایه و چند لایه با معماریهای متفاوت گرافن/برن نیترید 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 نیترید یا صفحات مرکب با چیدمان عمودی، استفاده شده است. برای آمیختن اثر سایز 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 همیلتون توام با روش ریتز استفاده شده است. یافته ها نشان می دهند که در تعداد لایه های ثابت گرافن و برن نیترید 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 نیترید 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.

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 گرادیان سرعت بسامد یایه

۱ – مقدمه

نانوسازههای دو بعدی همچون نانوصفحات گرافن و برن نیترید به دلیل خواص منحصربه فردشان که آنها را کاندیداهای مناسبی برای گسترده وسیعی از کاربردها میگرداند، توجه بسیاری از محققین را به خود جلب کردهاند.

نانوصفحات گرافن دارای خواص الکتریکی، مکانیکی، حرارتی و نور شناختی برجستهای است و میتواند یک نامزد مناسب برای استفاده در پوشش سطح، حسگرهای شیمیایی، نانوکامپوزیتها با پایه گرافن [۱]، مافوق خازنها، الکترودهای ترانما، سلولهای نیروزای نوری و دستگاههای زیستی [۲] باشد؛ لذا تحقیقات قابل ملاحظهای پیرامون رفتار مکانیکی نانوصفحات گرافن در یک یا چند لایه صورت گرفته است. ظرفیت تحمل بار ایستایی [۷–۳]، ارتعاشات خطی [۱۱–۸] و ارتعاشات غیرخطی [۴ و ۱۳– ۱۲] از جمله مواردی است که بسیار به آنها پرداخته شده است.

نانوصفحات برن نیترید، همچون نانوصفحات گرافن، دارای ساختار شبکهای لانه زنبوری هستند با این تفاوت که به جای اتمهای کربن، به صورت یک در میان اتمهای برن و نیتروژن در شبکه قرار گرفتهاند [۱۴]. نانوسازههای برن نیترید خواص پایداری قوی شیمیایی و حرارتی، عایق الکتریکی، هدایت حرارتی خارق العاده و قابلیت حس جرم را از خود نشان

نويسنده عهدهدار مكاتبات: ziaee@yu.ac.ir

میدهند [۱۵] و تاکنون به عنوان عایق با هدایت حرارتی بالا در میکرو/ نانودستگاههای الکترونیکی، ساتع کننده نور ماوراء بنفش در اپتوالکترونیک و پر کنندههای نانو در نانوکامپوزیتهای استحکام بالا و رسانای حرارت استفاده شدهاند [۱۶]. با این وجود، در مقایسه با نانوسازههای کربنی مطالعات چندانی در پیش بینی رفتار مکانیکی این نانوسازهها صورت نگرفته است؛ هرچند که محققین با استفاده از روشهای گوناگون مانند ای – بی اینیشیو۱ [۱۶ و ۱۷]، پتانسیل الکتروستاتیک و لنارد – جونز ۶ – ۱۲ [۱۸] و مکانیک مولکولی [۱۵ و ۱۹]، ثابتهای مکانیکی صفحات برن نیترید را تخمین زدهاند. مدل های اجزا محدود اتمی ترکیبی نشان دادند که نانوصفحات برون نیترید دارای رفتار مکانیکی ارتوتروپیک درون صفحهای می باشند. براساس این نوع شبیه سازی درجه غیرایزوتروپی نانوصفحات برن نیترید ۸۰/۰ تقریب زده شده است [۱۵].

پیش بینی خواص مکانیکی نانوسازههای ترکیبی ساخته شده از گرافن/ برن نیترید به صورت یک سامانه لایهای متشکل از نانوسازههای برن نیترید و نانوسازههای کربنی [۲۰ و ۲۱] یا به صورت یک صفحه با محدودههای کنترل شده مرکب از برن نیترید و گرافن [۲۲]، از جمله مباحثی است که اخیراً به آن پرداخته می شود. در برخی از این سازهها، لایههای نازک برن-نیترید به عنوان زیرلایه یا پوشش محافظتی گرافن عمل می کنند. همچنین این

1 Ab initio

ساختار لایهای برای ساخت تجهیزات عمودی که کلاس جدیدی از تجهیزات الكترونيكي مي باشند، بسيار مورد توجه هستند [٢٣]. ارتعاش و اصطكاك داخلی نانوسازه هیبریدی مشتمل بر تک لایه گرافن قرار گرفته میان دو لایه برن نیترید (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 می باشد؛ 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 می گرداند [۲۰]. خواص مکانیکی نانوصفحه تک لایه مرکب گرافن/برن نیترید در مرجع [۲۲] با استفاده از دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار گرفته است. این مطالعه نشان میدهد که اضافه شدن سطح اندکی برن نیترید به صفحه گرافن منجر به افت قابل ملاحظه استحكام تسليم نانوصفحه مي شود هرچند که نانوصفحه مرکب رفتار مومسان قویتری را نسبت به صفحه گرافن یا برن نیترید خالص از خود نشان میدهد [۲۲]. کرنش فشاری دو محوری در نانوصفحه مرکب تک لایه گرافن/برن نیترید 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 نیترید 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 نانوسازهها، علاوه بر روش آزمایشگاهی، شبیهسازی با روش دینامیک مولکولی و استفاده از نظریههای محیط پیوسته، دو روش نظریه هستند که برای درک رفتار مکانیکی نانوسازهها همچون نانوسازههای کربنی یا نانوسازههای برن نیترید استفاده میشوند. اگرچه شبیهسازی دینامیک مولکولی میتواند نتایج پرباری برای درک رفتار مکانیکی نانوسازهها در اختیار 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 نانوسازهها مطلوب

اهمیت الحاق اثر سایز به نظریههای محیط پیوسته به هنگام بررسی رفتار مکانیکی میکرو/نانوسازهها بر کسی پوشیده نیست و به همین منظور نظریههای محیط پیوسته مرتبه بالاتر که ثابتهای ماده اضافهتری را در بر میگیرند ارائه شدهاند [۲۲ و ۲۸]. در این راستا میندلین [۲۹] نظریه الاستیسیتهای را که دربرگیرنده تأثیر میکروساختار می باشد، ارائه کرد. در

نظریه اولیه میندلین، 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 می باشد. 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 می شود [۲۹]. میندلین 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 میندلین که در آن انرژی کرنشی فقط تابعی از گرادیان مرتبه اول تانسور کرنش میباشد (نظریه ساده شده میندلین فرمت ۲) علاوه بر ثابتهای لامه، پنج ثابت جدید ماده دیگر را نیز دربر می گیرد 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 می باشد [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 می يابد [٢٨]. براساس مطالعات أيفانتيس در حوزه پلاستيسيته و الاستيسيته غیرخطی، آیفانتیس و همکاران نظریه گرادیان الاستیسیته دیگری را با یک مقیاس طول ارائه کردند [۲۸]. معادله حاکمه این نظریه تابعی از کرنش و لايلاسين كرنش مىباشد. مىتوان نشان داد كه نظريه گراديان الاستيسيته آیفانتیس حالت خاصی از نظریه ساده شده میندلین فرمت ۲ برای مسایل استاتیکی میباشد. کافی است که دو ثابت ماده جدید تعریف شده در نظریه ساده شده میندلین فرمت ۲ (حاصل از گروهبندی پنج ثابت ماده جدید تعریف شده در انرژی کرنشی) با هم برابر قرار داده شود تا نظریه ساده شده ميندلين فرمت ٢ به نظريه گراديان الاستيسيته آيفانتيس تبديل شود [٣١]. براساس نظریه گرادیان کرنش میندلین، 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 اتساع¹، تانسور گرادیان کشش انحرافی⁶ و تانسور گرادین چرخش متقارن میباشد [۳۲]. از دیگر نظريههاي غيركلاسيك مرتبه بالا شناخته شده ميتوان به نظريه كويل 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

غیرمحلی میباشد. مقادیر پیشنهادی آنها برای نانوصفحه گرافن زیگزاگ با شرایط مرزی چهار طرف ساده و چهار طرف گیردار به ترتیب ۱/۴۱ نانومتر و ۰/۸۷ نانومتر می باشد. نتایج آنها برای نانوصفحه آرمچیر با شرایط مرزی مشابه با نانوصفحه زیگزاگ به ترتیب ۱/۳۴ نانومتر و ۰/۷۱ نانومتر میباشد. نتايج آنها نشان ميدهد كه مقدار مقياس طول با تغيير نسبت ابعادي نانوورق تغییر نمی کند [۴۲]. این در حالی است که مطالعه شن و همکاران [۴۳] معرف تأثير ابعاد نانوورق بهعلاوه كايراليتي بر مقدار پارامتر غيرمحلي بهكار رفته در شبیهسازی نانوصفحات گرافن میباشد. نتایج أنها [۴۳] نشان میدهد که با تغییر نسبت ابعادی و کایرالیتی نانوصفحات گرافن، مقدار پارامتر غیرمحلی مقدار ($e_0 a$) مقدار بین $e_0 a$ انومتر تغییر می کند. انصاری و سهمنی ($e_0 a$) مناسب پارامتر غیرمحلی برای شبیه سازی کمانش دو-محوری نانوصفحات گرافن تک لایه با شرایط مرزی ساده را پیش بینی نمودند. جالب توجه آن که نتايج أنها نشان مىدهد برخلاف نوع نظريه ورق غيرمحلى استفاده شده در شبیهسازی که بر مقدار مقیاس کوچک تأثیر می گذارد، کایرالیتی تأثیر چندانی بر مقدار مقیاس کوچک ندارد. میاندوآب و همکاران [۴۵] مقدار پارامتر غیرمحلی (e_0a) را به هنگام مطالعه ارتعاش جانبی میکرو-تیرهای پلی سیلیکون، ۸ میکرومتر تخمین زدهاند.

اگرچه نظریه غیرمحلی ایرینگن به طور گسترده ای برای شبیهسازی رفتار مکانیکی نانوسازههای کربنی به سبب توافق خوبی که میان نتایج حاصل از نظریههای محیط پیوسته غیرمحلی و شبیهسازی دینامیک مولکولی وجود دارد، استفاده میشود؛ اما این نظریه اجازه ساخت تابع انرژی را نمیدهد [۴۶] لذا، نظر به این که 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 کاریان شتاب حاصل میباشد (مانند نظریه ساده شده میندلین فرمت ناوصفحات مرکب گرافن/برن نیترید استفاده شده است. بدین منظور از نظریه آیفانتیس برای استخراج انرژی کرنش سامانه استفاده شده است و گرفته شده است. شایان ذکر است که اسک و آیفانتیس [۴۶] 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 مدهای 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 هوم، 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 تعديل شده حاصل مى گردد [٣٥]. نظريه الاستيسيته غيرمحلى ايرينگن كه بیشمار در تحلیل رفتار مکانیکی (استاتیکی و دینامیکی) نانوساختارها با پایه کربن استفاده می شود [۴۵- ۳۶] دربر گیرنده تانسور تنش و گرادیان تانسور تنش میباشد و فقط براساس یک مقیاس طول ماده جدید بیان می شود [۲۸]. پیرو نتایج موجود، واضح است که انتخاب مناسب پارامتر غیرمحلی موجود در نظریه ایرینگن (مقیاس کوچک) متضمن دقت شبیهسازی رفتار مکانیکی نانوسازههایی همچون نانوسازههای کربنی میباشد. محققینی که رفتار مكانيكي نانوسازهها را با استفاده از دو مدل نظريه الاستيسيته غيرمحلي و شبیهسازی دینامیک مولکولی مطالعه کردهاند، نشان دادند که مقدار مقیاس کوچک یا پارامتر غیرمحلی نه تنها به ماده، بلکه به شرایط مرزی، کایرالیتی^۲، نسبت ابعادی و ماهیت حرکت بستگی دارد [۴۵-۳۷]. ژانگ و همکاران [۳۷] نتایج حاصل از تحلیل کمانش نانولولههای کربنی تک لایه با شرایط مرزى ساده را كه با استفاده از نظريه الاستيسيته غيرمحلى بهدست أورده بودند با نتایج موجود از شبیهسازی دینامیک مولکولی مقایسه کردند و مقدار مقیاس کوچک (e₀) را ۰/۸۲ پیش بینی نمودند. هیو و همکاران [۳۸] به روشی مشابه، مقدار مقیاس کوچک (e_0) را برای تفرق امواج عرضی ۰/۶ و براى تفرق امواج پيچشى بين ١/٢ تا ١/٢٢ اعلام نمودند. خادم الحسيني و همکاران [۳۹] اعلام کردند که مقیاس کوچک (e_0) در تحلیل کمانش پیچشی نانولولههای کربنی تک لایه آرمچیر و زیگزاگ بین ۸۸۵ تا ۸/۸۶ می باشد. انصاری و همکاران [۴۰] نشان دادند که مقدار پارامتر غیر محلی برای تحلیل کمانش محوری نانولولههای کربنی تک لایه با توجه $(e_0 a)$ به شرایط مرزی تغییر میکند. آنها مقدار ۰/۵۴ نانومتر را برای نانولوله با شرایط مرزی ساده، ۰/۵۳۱ نانومتر را برای شرایط مرزی گیردار-گیردار، ۰/۵۵ نانومتر را برای شرایط مرزی گیردار-ساده و ۰/۷۲۲ نانومتر را برای شرایط مرزی گیردار-آزاد پیشنهاد دادند [۴۰]. دوان و همکاران [۴۱] از نتایج شبیه سازی مولکولی برای تخمین مقدار مقیاس کوچک (e_0) به کار رفته در نظریه تیر تیموشنکو غیرمحلی که برای پیش بینی 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 أنها [۴۱]، مقدار پارامتر غیرمحلی (e₀a) می تواند از ۲/۶۶ نانومتر تغییر کند. مقدار پارامتر غیرمحلی (e_0a) گزارش شده توسط انصاری و همکاران [۴۲] برای شبیهسازی ارتعاش جانبی صفحات گرافن تک لایه متضمن تأثير بسزای شرایط مرزی و تأثیر اندک کایرالیتی بر مقدار پارامتر

¹ Eringens theory

² Chirality

کرنش برشی ثابت در ضخامت ورق، نیازمند ضرایب تصحیح برش می باشد تا اختلاف میان بیان تنش واقعی و بیان تنش ثابت فرض شده را جبران کند درحالی که در نظریه های مرتبه بالاتر نیاز به استفاده از ضرایب تصحیح برش برطرف شده است و ضمناً پیش بینی بهتری از رفتار ارتعاشی ورق ها می دهند [۴۹]. برای بهبود نظریه های تغییر شکل برشی مرتبه بالاتر با کاهش پارامترهای نامشخص آنها بدون آن که دقت آنها کاهش یابد، نظریه ورق اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییر شکل برشی مرتبه بالا) توسط شیمپی اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییر شکل برشی مرتبه بالا) توسط شیمپی نانوورق ها مورد استفاده قرار گرفته است [۹۴ و ۵۳–۵۲] . در این مطالعه از نظریه ورق اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییر شکل برشی مرتبه بالا) برای نظریه ورق اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییر شکل برشی مرتبه بالا) برای نظریه ورق اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییر شکل برشی مرتبه بالا) برای نظریه ورق اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییر شکل برشی مرتبه بالا) برای نظریه ورق اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییر شکل برشی مرتبه بالا) برای نظریه ورق اصلاح شده دو منفیره (نظریه تغییر شکل برشی مرتبه بالا) برای نظریه ورق اصلاح شده دو منیره از می می نانوصفحات مرکب گرافن/برن نیترید بهره گرفته شده است.

همان گونه که پیش از این نیز اشاره شد، با توجه به مطالعات اند کی که پیرامون رفتار مکانیکی نانوصفحات مرکب تک لایه و ترکیبی-لایهای متشکل از برن نیترید 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 واندوالز بین صفحات با استفاده از معادله لنارد-جونز ۶–۱۲ شبیهسازی شده است. از نظریه ورق آیفانتیس توأم با گرادیان سرعت به آن و بهره گیری از روش ریتز معادلات مطالعه پان و همکاران [۲۴] که از شرایط مرزی ساده برای شبیهسازی 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 نیترید بهره گرفتهاند، در این مطالعه نیز از این شرط مرزی برای تحلیل رفتار ارتعاشی نانوصفحات مرکب در محیط حرارتی استفاده شده

۲- شبیه سازی نیروی واندروالز بین صفحات

در نانو صفحات دو لایه گرافن-گرافن، برن نیترید-برن نیترید یا گرافن-برن نیترید، برهم کنش بین لایهها با نیروی واندروالز که میتوان آن را با انرژی پتانسیل لنارد-جونز ۶-۱۲تشریح کرد، اداره میشود. از آنجایی که تقریب رفتار مکانیکی نانوصفحات چند لایه مستلزم شبیهسازی مناسب این نیرو میباشد؛ لذا در این بخش ابتدا نیروی واندر والز 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 می شود [۱۳ و ۲۱ و ۵۵–۵۴]:

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

که در آن \mathcal{E}_{12} و \mathcal{T}_{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 نیترید و کربن–برن نیترید براساس قانون مخلوط

جدول ۱: ثابتهای لنارد-جونز برای اتمهای مختلف [۲۱] Table 1. Lenard-Jones constants for different atoms [21]

£,eV	$\sigma, \dot{\mathrm{A}}$	
•/••7980	%/% ۶٩	С
•/••۴١١۶	3/402	В
•/••۶۲۸۱	3/780	N
۰/۰۰۵۰۸۵	٣/۴١	BN
•/••٣۶۶	٣/٣٩	C - BN

که در آن

$$\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \tag{(Y)}$$

$$\sigma_{12} = (\sigma_1 + \sigma_2)/2 \tag{(7)}$$

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

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

با استفاده از بسط تیلور حول فاصله تعادلی \overline{r} و با توجه به اینکه نیروی واندر والز 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]:

$$F(r) = -\frac{24\varepsilon_{12}}{\sigma_{12}^2} \left(26 \left(\frac{\sigma_{12}}{\overline{r}} \right)^{14} - 7 \left(\frac{\sigma_{12}}{\overline{r}} \right)^8 \right) (r - \overline{r})$$

$$-\frac{336}{\sigma_{12}^4} \left(65 \left(\frac{\sigma_{12}}{\overline{r}} \right)^{16} - 6 \left(\frac{\sigma_{12}}{\overline{r}} \right)^{10} \right) (r - \overline{r})^3$$
 (δ)

برای تعیین برهم کنش 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:

$$q_i = \sum_{j=1, j \neq i}^{N} q_{ij} \tag{(5)}$$

که در آن q_{ij} معرف برآیند کل نیروی عمود بر واحد سطح ناشی از نیروی واندروالز بین دو لایه iام و jام میباشد و N تعداد لایههاست. شایان ذکر است که q_{ii} صفر میباشد. چگونگی تعیین q_{ij} ها براساس نوع نانوصفحه، گرافن یا برن نیترید، 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 نیترید و چگالی سطح اتمهای کربن در صفحه گرافن به ترتیب

$$\rho_b = 2 / \left(3 \sqrt{3} l_{bn}^2 \right) \tag{Y}$$

$$\rho_n = 2 / \left(3 \sqrt{3} l_{bn}^2 \right) \tag{A}$$

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

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 واندروالز بین صفحه گرافن و برن نیترید

 $\rho_c dA$ 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 نقطه ی میباشد. فاصله بین نقطه (x_i, y_i, z_i) روی صفحه برن نیترید (شکل ۱) عبارت است از $\sum_{i=1}^{2} (x_i - z_i)^2 + (x_i - z_i)^2 + (z_i - z_i)^2$ و $i = i = r + (x_i - x_i)^2 + (y_i - y_i)^2 + (z_i - z_i)^2$ مفحه میباشد. با استفاده از معادله (۵) برای تعیین نیروی واندروالز بین دو صفحه میباشد. در این دو نقطه و تصویر آن در راستای z و انتگرال گیری بر روی کل سطح میتوان اندر کنش بین دو صفحهٔ گرافن –برن نیترید بر واحد سطح را در راستای z به صورت زیر تقریب زد:

$$q_{ij} = \sum_{m=B,N} \begin{pmatrix} \rho_c \rho_m \left\{ -\frac{24\varepsilon_{Cm}}{\sigma_{Cm}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(26\left(\frac{\sigma_{Cm}}{\overline{r}}\right)^{14} \right) \\ -7\left(\frac{\sigma_{Cm}}{\overline{r}}\right)^8 \right) (r-\overline{r}) \frac{(z_i-z_j)}{\overline{r}} dx dy \\ -\frac{336\varepsilon_{Cm}}{\sigma_{Cm}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(65\left(\frac{\sigma_{Cm}}{\overline{r}}\right)^{16} \right) \\ -7\left(\frac{\sigma_{Cm}}{\overline{r}}\right)^{10} (r-\overline{r})^3 \frac{(z_i-z_j)}{\overline{r}^3} dx dy \\ \end{pmatrix}$$
(1.1)

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

$$q_{ij} = \overline{C}_{ij} \left(w_i - w_j \right) + \overline{E}_{ij} \left(w_i - w_j \right)^3 \tag{11}$$

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

$$\overline{E}_{ij} = \sum_{m=B,N} -\rho_c \rho_m \left(\frac{336\varepsilon_{Cm}}{\sigma_{Cm}^2}\right) \left(\frac{65\pi\sigma_{Cm}^{14}}{6\overline{h}_{ij}^{-14}} - \frac{2\pi\sigma_{Cm}^8}{3\overline{h}_{ij}^{-8}}\right)$$
(17)

$$i$$
 که h_{ij} فاصله تعادلی بین دو صفحه گرافن و برن نیترید (صفحه i ام و j ام) میباشد.

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

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

$$h_{ij} \quad \text{\widehat{r}} = \sqrt{\left(x_i - x_j\right)^2 + \left(y_i - y_j\right)^2} \quad \text{\widehat{r}} = \sqrt{\widehat{r}^2 + h_{ij}^2} \quad \text{\widehat{r}}$$

$$b_{ij} \quad \text{\widehat{r}} = \sqrt{\widehat{r}^2 + h_{ij}^2} \quad \text{$$$

۲- ۲- نیروی واندروالز بین صفحات برن-نیترید

اتم های برن و نیتروژن در مساحت dA بر روی صفحه برن نیترید به ترتیب $\rho_B dA$ و $\rho_N dA$ میباشد. فاصله بین نقطه ((x_i, y_i, z_i)) بر روی صفحه ۱ برن نیترید و نقطه ای به مختصات ((z_i, y_i, z_i) روی صفحه ۲ برن نیترید عبارت است از $(x_i - z_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2$. حال با استفاده از معادله (۵) برای تعیین نیروی واندروالز بین دو اتم واقع شده در این دو نقطه و تصویر آن در راستای z و انتگرال گیری بر روی سطح میتوان اندرکنش بین دو صفحهٔ برن نیترید-برن نیترید بر واحد سطح را در راستای z به صورت زیر تقریب زد:

$$q_{ij} = \sum_{m,n=B,N} \begin{pmatrix} \rho_m \rho_n \left\{ -\frac{24\varepsilon_{mn}}{\sigma_{mn}^2} \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} \left(26 \left(\frac{\sigma_{mn}}{\overline{r}} \right)^{14} \right) \\ -7 \left(\frac{\sigma_{mn}}{\overline{r}} \right)^8 \right) (r-\overline{r}) \frac{(z_i - z_j)}{\overline{r}} dx dy \\ -\frac{336\varepsilon_{mn}}{\sigma_{mn}^2} \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} \left(65 \left(\frac{\sigma_{mn}}{\overline{r}} \right)^{16} \\ -7 \left(\frac{\sigma_{mn}}{\overline{r}} \right)^{10} \right) (r-\overline{r})^3 \frac{(z_i - z_j)}{\overline{r}^3} dx dy \\ \end{pmatrix}$$
(10)
$$(r-\overline{r}) = \left(w_i - w_j \right) \overline{r} / \left(z_i - z_j \right) \quad \text{and } z \in \mathbb{R}, \quad z$$

$$q_{ij} = \overline{C}_{ij} \left(w_i - w_j \right) + \overline{E}_{ij} \left(w_i - w_j \right)^3$$
(18)

$$\overline{C}_{ij} = \sum_{m,n=B,N} -\rho_m \rho_n \left(\frac{24\varepsilon_{mn}}{\sigma_{mn}^2}\right) \left(\frac{13\pi\sigma_{mn}^{14}}{3\overline{h}_{ij}^{12}} - \frac{7\pi\sigma_{mn}^8}{3\overline{h}_{ij}^6}\right) \tag{1Y}$$

$$\overline{E}_{ij} = \sum_{m,n=B,N} -\rho_j \rho_i \left(\frac{336\varepsilon_{mn}}{\sigma_{mn}^2}\right) \left(\frac{65\pi\sigma_{mn}^{14}}{6\overline{h}_{ij}^{-14}} - \frac{2\pi\sigma_{mn}^8}{3\overline{h}_{ij}^{-8}}\right) \qquad (1\lambda)$$

که \overline{h}_{ij} فاصله تعادلی بین دو صفحه برن نیترید میباشد. در حالت تعادل انرژی پتانسیل ناشی از نیروی واندروالز بین دو صفحه ام و jام که هر دو از جنس برن نیترید میباشند در واحد سطح عبارت است از (مراجعه شود به شکل ۱ و معادله (۱)):

$$\Phi_{ij} = \sum_{m,n=B,N} 2\pi\rho_m \rho_n \int_0^\infty 4\varepsilon_{mn} \left(\left(\frac{\sigma_{mn}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{mn}}{r} \right)^6 \right) \hat{r} d\hat{r}$$

$$= \sum_{m,n=B,N} 4\pi\rho_m \rho_n \varepsilon_{mn} \sigma_{mn}^6 \left(\frac{\sigma_{mn}^6}{5h_{ij}^{10}} - \frac{1}{2h_{ij}^4} \right)$$

$$h = \hat{r} = \sqrt{\left(r - r \right)^2 + \left(r - r \right)^2} + \left(r - \frac{1}{2h_{ij}^4} - \frac{1}{2h_{ij}^4} \right)$$

$$h = \hat{r} = \sqrt{\left(r - r \right)^2 + \left(r - r \right)^2} + \left(r - \frac{1}{2h_{ij}^4} - \frac{1}{2h_{ij}^4} \right)$$

$$h = \hat{r} = \sqrt{\left(r - r \right)^2 + \left(r - r \right)^2} + \left(r - \frac{1}{2h_{ij}^4} - \frac{1}{2h_{ij$$

$$h_{ij} \quad p = \sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2} \quad q = \sqrt{\hat{r}^2 + h_{ij}^2}$$
 و
فاصله بین دو صفحه برن نیترید (صفحه *i* ام و *i* (م) میباشد.

۲- ۳- نیروی واندروالز بین صفحات گرافن

به طوری مشابه میتوان نیروی عمود بر واحد سطح ناشی از اندرکنش 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 ۲-۱ و ۲-۲).

$$q_{ij} = \rho_c^2 \left\{ -\frac{24\varepsilon_{CC}}{\sigma_{CC}^2} \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} \left(26 \left(\frac{\sigma_{CC}}{\overline{r}} \right)^{14} -7 \left(\frac{\sigma_{CC}}{\overline{r}} \right)^8 \right) (r-\overline{r}) \frac{(z_i - z_j)}{\overline{r}} dx dy -\frac{336\varepsilon_{CC}}{\sigma_{CC}^2} \int_{-\infty-\infty}^{+\infty+\infty} \left(65 \left(\frac{\sigma_{CC}}{\overline{r}} \right)^{16} \right) (r-\overline{r})^3 \frac{(z_i - z_j)}{\overline{r}^3} dx dy \right\} \approx (\gamma \cdot)$$

$$-7 \left(\frac{\sigma_{CC}}{\overline{r}} \right)^{10} \left(r-\overline{r} \right)^3 \frac{(z_i - z_j)}{\overline{r}^3} dx dy \right\} \approx \overline{C}_{ij} \left(w_i - w_j \right) + \overline{E}_{ij} \left(w_i - w_j \right)^3 \qquad (\gamma \cdot)$$

$$\Phi_{ij} = 4\pi \rho_c^2 \varepsilon_{CC} \, \sigma_{CC}^6 \left(\frac{\sigma_{CC}^6}{5h_{ij}^{10}} - \frac{1}{2h_{ij}^4} \right) \tag{(71)}$$

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

$$\overline{E}_{ij} = -\rho_C^2 \left(\frac{336\varepsilon_{CC}}{\sigma_{CC}^2}\right) \left(\frac{65\pi\sigma_{CC}^{14}}{6\overline{h}_{ij}^{14}} - \frac{2\pi\sigma_{CC}^8}{3\overline{h}_{ij}^8}\right)$$
(YY)

و \overline{h}_{ij} و h_{ij} به ترتیب فاصله تعادلی و فاصله بین دو صفحه گرافن (صفحه \overline{h}_{ij} و \overline{h}_{ij} می اشد.

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 می شود.

$$\Phi = \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^{N} \Phi_{ij}$$
(۲۴)

که N معرف تعداد لایهها است. توجه داشته باشید که در فاصله تعادلی انرژی پتانسیل کمینه می باشد [۵۵]. لذا با صفر قرار دادن مشتق انرژی



Fig. 1. Position of the ith and jth 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 ضرورتا مجاور یکدیگر نیستند به همراه پارامترهای هندسی استفاده شده برای شبیهسازی نیروی واندروالز بین این دو نانو صفحه

پتانسیل کل نسبت به $h_{i\,(i\,+1)}$ میتوان فاصله تعادلی لایههای مجاور را یافت.

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

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

پیرو اصل همیلتون معادله (۲۵) برقرار میباشد:
$$\int_{0}^{t_{1}} \left(\sum_{k=1}^{N} \left(\delta T^{\left(k\right)} - \delta U^{\left(k\right)} \right) + \delta W \right) dt = 0$$
(۲۵)

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

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

$$\delta T = \int_{V} (\rho \dot{u} \delta \dot{u} + \rho \dot{v} \delta \dot{v} + \rho \dot{w} \delta \dot{w}) dV + \int_{V} (\rho l_{1}^{2} (\dot{u}_{,i} \delta \dot{u}_{,i} + \dot{v}_{,i} \delta \dot{v}_{,i} + \dot{w}_{,i} \delta \dot{w}_{,i} +)) dV$$
(YF)

در معادله (۲۶) ، I_1 مقیاس طول میباشد؛ u ، v و w مؤلفههای بردار جابجایی هر نقطه از ورق به مختصات (x_iv_iz) میباشد که طبق فرضیات ورق اصلاح شده دو متغیره قابل بیان برحسب مؤلفههای بردار جابهجایی نقطه در صفحه میانی ورق مربوطه میباشند یعنی [۵۰]:

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

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

$$w(x, y, z) = w_b(x, y, 0) + w_s(x, y, 0)$$
(Y9)

و تابع
$$(z)$$
 به صورت زیر تعریف می شود $[-\Delta]:$
 $f(z) = z \left(\frac{1}{4} - \frac{5}{3} \left(\frac{z}{h}\right)^2\right)$ (۳۰)

(x,y,0) مؤلفههای بردار جابهجایی هر نقطه با مختصات (x,y,0) در صفحه میانی ورق میباشند، W_b و W_b ترتیب جزء خمشی و برشی جابهجایی جانبی ورق میباشند [۵۰]. (.) مشتق جزئی نسبت به زمان و () معرف مشتق جزئی نسبت به هر یک از مؤلفههای مختصات (x,y,z) میباشد. معرف مشتق جزئی نسبت به هر یک از مؤلفههای مختصات (x,y,z) میباشد. $\delta U = \int_V \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} dV$ (۳۱)

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]:

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

که در آن $\varepsilon_{k1,mm}$ لاپلاسین تانسور کرنش و I 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]:

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

$$Q_{11} = \frac{E}{1 - v^2}, Q_{12} = \frac{vE}{1 - v^2}$$

$$Q_{66} = G = \frac{E}{2(1 + v)}$$
(3.4)

که E معرف مدول الاستیک ورق میباشد. v نسبت پواسون و G مدول صلبیت برشی هستند.

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_0}{\partial x} - z \frac{\partial^2 w_b}{\partial x^2} + f(z) \frac{\partial^2 w_s}{\partial x^2} - \alpha \Delta T \tag{(76)}$$

$$\varepsilon_{yy} = \frac{\partial v_0}{\partial y} - z \frac{\partial^2 w_b}{\partial y^2} + f(z) \frac{\partial^2 w_s}{\partial y^2} - \alpha \Delta T \tag{79}$$

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

$$\varepsilon_{XZ} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w_S}{\partial x} + \frac{df(z)}{dz} \frac{\partial w_S}{\partial x} \right)$$
(TA)

$$\varepsilon_{yz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial w_s}{\partial y} + \frac{df(z)}{dz} \frac{\partial w_s}{\partial y} \right) \tag{(49)}$$

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

$$f(z) = z \left(\frac{1}{4} - \frac{5}{3} \left(\frac{z}{h}\right)^2\right) \tag{(4.1)}$$

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

در ضمن α معرف ضریب انبساط حرارتی و ΔT تغییر یکنواخت دما را نشان میدهد. تغییرات کار نیروی خارجی را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\delta W = \int_{A} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \overline{C}_{ij} \left(w_i - w_j \right) \left(\delta w_i - \delta w_j \right) dA \tag{47}$$

که در آن $(-\overline{c}_{ij})$ معرف سختی فنر خطی است که برای مدلسازی

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

$$\begin{bmatrix} M_{mnpq} \end{bmatrix}^{(11)} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \begin{bmatrix} M_{mnpq} \end{bmatrix}^{(NN)} \end{bmatrix}^{\left[\begin{bmatrix} \ddot{r}_{pq} \end{bmatrix}^{(1)} \\ \dots \\ \begin{bmatrix} \ddot{r}_{pq} \end{bmatrix}^{(N)} \end{bmatrix}^{+}$$

$$\begin{bmatrix} K_{mnpq}^{11} \end{bmatrix} & \dots & \begin{bmatrix} K_{mnpq}^{1N} \end{bmatrix}^{\left[r_{pq} \end{bmatrix}^{(1)} \\ \dots \\ \begin{bmatrix} K_{mnpq}^{N1} \end{bmatrix} & \dots & \begin{bmatrix} K_{mnpq}^{NN} \end{bmatrix}^{\left[\begin{bmatrix} r_{pq} \end{bmatrix}^{(1)} \\ \dots \\ [r_{pq} \end{bmatrix}^{(N)} \end{bmatrix}^{+} = 0$$

$$\begin{bmatrix} K_{mnpq}^{N1} \end{bmatrix} \dots & \begin{bmatrix} K_{mnpq}^{NN} \end{bmatrix}^{\left[K_{pq} \end{bmatrix}^{(N)} \end{bmatrix}^{-}$$

در معادله (۴۳) مقادیر $M_{mnpq} e K_{mnpq}$ مقادیر (۴۳) مقادیر $K_{mnpq} e K_{mnpq}$ معرف تردار (۴۵–الف) تا (۶–الف) در ضمیمه تعریف شدهاند و $[r_{pq}]^{(k)}$ معرف بردار جابهجایی لایه k ام میباشد که معرف جابهجایی درون صفحه و جانبی میباشد. همچنین NS معرف تعداد توابع شکل استفاده شده در تقریب مؤلفه های 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 نانوورقها 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:

$$u_{0}(x, y, t) = \sum_{p=1}^{NS} \sum_{q=1}^{NS} U_{pq}(t) \sin(\frac{p\pi x}{a}) \cos\left(\frac{q\pi y}{b}\right)$$

$$v_{0}(x, y, t) = \sum_{p=1}^{NS} \sum_{q=1}^{NS} V_{pq}(t) \cos(\frac{p\pi x}{a}) \sin\left(\frac{q\pi y}{b}\right)$$

$$w_{b}(x, y, t) = \sum_{p=1}^{NS} \sum_{q=1}^{NS} W_{Bpq}(t) \sin(\frac{p\pi x}{a}) \sin\left(\frac{q\pi y}{b}\right)$$

$$w_{s}(x, y, t) = \sum_{p=1}^{NS} \sum_{q=1}^{NS} W_{Spq}(t) \sin(\frac{p\pi x}{a}) \sin\left(\frac{q\pi y}{b}\right)$$
(ff)

لذا بردار جابهجایی
$${(k) \choose pq} = {r_{pq} \choose pq}$$
 به صورت زیر تعریف می شوند:
 $[r_{pq}]^{(k)} = {[U_{pq}] \quad [V_{pq}] \quad [W_{Bpq}] \quad [W_{Spq}]}^T$ (۴۵)

نظر به این که در ارتعاش آزاد خطی، بردار شتاب را می توان به صورت
زیر برحسب بردار جابهجایی بیان کرد [۵۶]،
$$[\ddot{r}_{pq}^{1} \dots \ddot{r}_{pq}^{N}]^{(T)} = \omega^{2}[r_{pq}^{1} \dots r_{pq}^{N}]^{(T)}$$
 (۴۶)

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

$$\begin{bmatrix} \begin{bmatrix} M_{mnpq} \end{bmatrix}^{(11)} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \begin{bmatrix} M_{mnpq} \end{bmatrix}^{(NN)} \end{bmatrix}^{(-1)} \times \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} K_{mnpq}^{11} \end{bmatrix} & \cdots & \begin{bmatrix} K_{mnpq}^{1N} \end{bmatrix} = \omega^2 \begin{bmatrix} [r_{pq}]^{(1)} \\ \vdots \\ [K_{mnpq}^{N1}] & \cdots & [K_{mnpq}^{NN}] \end{bmatrix} = \omega^2 \begin{bmatrix} [r_{pq}]^{(1)} \\ \vdots \\ [r_{pq}]^{(N)} \end{bmatrix}$$
(*V)

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

۳- اعتبارسنجی مدل

۳- ۱- اعتبارسنجی مدل خطی نیروی واندوالز 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 $\sigma = 7/9$ ۶۸meV یک ناتو صفحه با لایه گرافن از مرجع [۵۴] میباشد، محاسبه شده است

و با نتایج موجود در مرجع [۵۴] مقایسه شدهاند (مراجعه شود به جدول ۲). همانگونه که دیده می شود، هم خوانی خوبی بین نتایج دیده می شود و براساس گزارش اعداد تا چهار رقم اعشار درصد اختلاف میان نتایج کمتر از ۱/۱ درصد می باشد. باید توجه داشت که علامت منفی معرف جذب دو لایه و علامت مثبت معرف دفع دولایه می باشد [۵۴].

شایان ذکر است که مقادیر گزارش شده متفاوتی برای پارامترهای لنارد-جونز در مراجع مختلف دیده می شود که این تفاوت ها تأثیر قابل توجهی بر ضرایب تقریب خطی نیروی واندروالز دارد. به عنوان نمونه مقادیر موجود در مرجع [۲۱] نیز (یعنی ۲/۶۳۵me۷ = ع و $\dot{A} = ۳/۳۶۹ = \sigma$) 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 می دهد که با کاهش حدودی ۱۱ درصد مقدار ع و ۱ درصد مقدار σ ، بیشترین ضریب تقریب خطی نیروی واندروالز که بین لایههای مجاور دیده می شود ۲۸ درصد کاهش می یابد.

از سوی دیگر فاصله تعادلی محاسبه شده برای دو صفحه برن نیترید براساس معادلات پیشنهاد شده ۰/۳۴۰۶۷ نانومتر است که حدوداً ۱۰ درصد کمتر از مقدار گزارش شده در مرجع [۵۷] یعنی ۰/۳۸ نانومتر میباشد و

جدول ۲: مقایسه ضرایب تقریب خطی نیروی واندروالز، ^۱-GPa.nm بین هر دو لایه از یک نانوصفحه گرافن ۱۰ لایهای (اعداد بالایی در هر ردیف مقادیر گزارش شده در مرجع [62] 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 d	ata and the d	ata reported	by Ref. [54] a	re shown by t	the lower num	bers and upp	e <mark>r numbers</mark> , r	espectively)	
$j = $ \ •	j =٩	$j = \lambda$	<i>j</i> = Y	$j = \mathfrak{P}$	$j = \Delta$	j =۴	j = r	j =۲	j = 1	شماره لايه
•/•••٢٣	•/•••۴٧	۰/۰۰۱۰۵	•/••78۵	•/••٧٩•	•/•٣•1٢	۰/۱۶۸۸۹	۱/۸۷۲۰۶	-1+8/801	*	: .
•/•••٢	•/•••۵	•/••١•	•/••78	•/••٧٩	•/•٣•١	•/١۶٨٩	١/٨٧٢٢	-1+1/808	•	l = r
•/•••۴٧	۰/۰۰۱۰۵	•/••780	•/••٧٩•	•/•٣•١٢	•/1۶۸۸۹	١/٨٧٢٠۶	-1+8/801	•	-1+1/801	: .
•/•••۵	•/•• ١•	•/••78	•/••٧٩	•/•٣•١	۰/۱۶۸۹	1/8722	-1+1/808	•	-1+1/808	l = 0
۰/۰۰۱۰۵	•/••780	•/••\٩•	•/•٣•١٢	•/\۶٨٨٩	١/٨٧٢٠۶	-1+1/801	•	-1+8/801	۱/۸۷۲۰۶	: u
•/••١•	•/••78	•/••٧٩	•/•٣•١	•/١۶٨٩	1/8722	-1+1/8081	•	-1+1/808	1/8722	l = 0
•/••780	•/••\٩•	•/•٣•١٢	۰/۱۶۸۸۹	۱/۸۷۲۰۶	-1+8/801	*	-1+8/801	۱/۸۷۲۰۶	۰/۱۶۸۸۹	; _¥
•/••78	•/••Y٩	•/•٣•١	•/1889	1/8722	-1+1/808	•	-1•1/808	1/8722	•/١۶٨٩	$\iota = 0$
•/••٧٩•	•/•٣•١٢	۰/۱۶۸۸۹	۱/۸۷۲۰۶	-1+8/801	*	-1+1/801	۱/۸۷۲۰۶	۰/۱۶۸۸۹	•/•٣•1٢	i ->
•/••Y٩	•/•٣•١	۰/۱۶۸۹	1/8722	-1+1/808	•	-1+1/808	1/8722	•/1889	•/•٣•١	$\iota = \omega$
•/•٣•١٢	•/1۶٨٨٩	۱/۸۷۲۰۶	-1+8/801	•	-1+8/801	۱/۸۷۲۰۶	۰/۱۶۸۸۹	•/•٣•١٢	•/••\٩•	i _6
•/•٣•١	۰/۱۶۸۹	1/8722	-1+1/808	*	-1+1/808	1/8722	۰/۱۶۸۹	•/•٣•١	•/••\٩	<i>i =/</i>
•/1۶٨٨٩	۱/۸۷۲۰۶	-1+8/801	•	-1+1/801	۱/۸۷۲۰۶	۰/۱۶۸۸۹	•/•٣•١٢	•/••٧٩•	•/••780	i –v
•/١۶٨٩	1/8722	-1+1/808	•	-1+1/808	1/8422	•/١۶٨٩	•/•٣•١	•/••Y٩	•/••78	$\iota = \iota$
١/٨٧٢٠۶	-1+8/801	•	-1+8/801	۱/۸۷۲۰۶	۰/۱۶۸۸۹	•/•٣•17	•/••\٩•	•/••780	۰/۰۰۱۰۵	i — A
1/8722	-1+1/808	•	-1+1/808	1/8722	•/1۶۸۹	•/•٣•١	•/••٧٩	•/••78	•/••)•	1 = ~
-1+8/801	•	-1+8/801	۱/۸۷۲۰۶	•/\۶٨٨٩	•/•٣•١٢	•/••\٩•	•/••78۵	۰/۰۰۱۰۵	•/•••۴٧	i — 9
-1+1/808	*	-1+1/808	1/8722	۰/۱۶۸۹	•/•٣•١	•/••\٩	•/••78	•/••)•	•/•••۵	$\iota = \iota$
•	-1+1/801	۱/۸۷۲۰۶	•/1۶٨٨٩	•/•٣•١٢	•/••٧٩•	•/••780	۰/۰۰۱۰۵	•/•••۴٧	•/•••٢٣	i - 1
•	-1+1/808	1/8722	٠/١۶٨٩	•/•٣•١	•/••٧٩	•/••78	•/••١•	•/•••۵	•/•••٢	$\iota = 1$

جدول ۳: ضرایب تقریب خطی نیروی واندروالز، ^۱-GPa.nm بین هر دو لایه از یک نانوصفحه گرافن ۱۰ لایهای به ازاء E=۲/۶۳۵ meV و ۲

Table 3. Linear approximation of Lenard-Jones force coefficients between two layers of ten-layered graphene nanoplate with z=2.635 meV and
σ=3.369 A

j =	j =٩	$j = \lambda$	j = Y	$j = \mathcal{F}$	$j = \Delta$	j =۴	j = r	j = r	j = 1	شماره لايه
•/•••٢	•/•••۴	•/•••٩	•/••٢٢	•/••۶۶	•/•7۵•	+/14+4	١/۵۵۲۰	-YY/۶۴۹	*	i = v
•/•••۴	*/***9	•/••77	•/••۶۶	•/•7۵•	•/14•4	١/۵۵۲٠	-77/۶۴۹	•	- YY /۶۴۹	<i>i</i> =۲
•/•••٩	•/••٢٢	•/••۶۶	•/•۲۵•	•/14•4	1/004.	-77/۶۴۹	•	-77/۶۴۹	١/۵۵۲۰	i =٣
•/••77	•/••۶۶	•/•۲۵•	•/18•8	١/۵۵۲٠	-77/۶۴۹	•	-77/۶۴۹	۰/۵۵۲۰	•/14•4	i =۴
•/••۶۶	•/•۲۵•	•/14•4	١/۵۵۲٠	-77/۶۴۹	•	-77/۶۴۹	١/۵۵۲۰	•/14•4	•/•۲۵•	$i = \Delta$
•/•۲۵•	•/14•4	1/201.	-77/۶۴۹	•	-77/۶۴۹	١/۵۵۲۰	•/14•4	•/•۲۵•	•/••۶۶	i =۶
•/14•4	1/221.	-77/۶۴۹	•	-77/۶۴۹	1/221.	•/14•4	•/•۲۵•	•/••۶۶	•/••77	<i>i</i> =Y
١/۵۵۲+	-77/۶۴۹	•	-77/۶۴۹	١/۵۵۲+	•/14•4	•/•7۵•	•/••۶۶	•/••77	*/***9	$i = \lambda$
-77/۶۴۹	•	-77/۶۴۹	1/227+	•/14•4	•/•۲۵•	•/••۶۶	•/••77	•/•••٩	•/•••۴	<i>i</i> =٩
•	-77/۶۴۹	١/۵۵۲٠	•/14•4	•/•۲۵•	•/••۶۶	•/••٢٢	*/***9	•/•••۴	•/•••٢	<i>i</i> = \ •

جدول ٤: مقایسه بین بسامدهای بی بعد شده $\Omega_{_{mn}}= \omega_{_{mn}}h \sqrt{
ho}/G$ ورق 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

% اختلاف با نتایج حاصل از ورق ردی [۵۰]	% اختلاف با نتایج موجود در مرجع [۵۰]	نتایج حاصل از ورق ردی [۵۰]	نتايج موجود در مرجع [۵۰]	نتايج حاضر	Ω_{mn}
-•/•A۵	•/•٢	•/•9٣١	•/•٩٣•	•/•٩٣•٢	Ω_{11}
-•/•٢٢	-•/•٢	•/7777	•/٢٢٢•	•/77198	Ω_{12}
-•/1۴	۰/۰۰۵۸	•/٣۴١١	•/٣۴•۶	•/٣۴•۶٢	Ω_{22}
-•/\Y	-•/••٩۶	۰/۴۱۵۸	•/۴۱۵۱	•/۴۱۵۰۶	Ω_{13}
-•/۲۵	-•/•• \٩	•/۵۲۲۱	•/۵۲•٨	•/۵۲•٧٩	Ω_{23}

با افزایش تعداد لایهها به مقدار ۳۳/۰ نانومتر نزدیک می شود که با نتایج گزارش شده در مرجع [۱۴ و ۵۷] هم خوانی خوبی دارد که این امر می تواند معرف یک نتیجه قابل قبول باشد.

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

جهت صحتسنجی معادلات استخراج شده حاکم بر ارتعاش نانوورق ها، در ابتدا پنج بسامد اول بی بعد شده صفحه تک لایه کلاسیک ($0 = l_1 = l$) با نتایج موجود در مراجع [۵۰] در جدول ۴ مقایسه شدهاند. درصد اختلاف مقادیر پیش بینی 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. همان گونه که دیده می شود توافق خوبی میان دادهها وجود دارد. درصد اختلاف مقادیر پیش بینی شده با استفاده از نظریه ورق اصلاح شده دو متغیره (نظریه تغییر شکل برشی مرتبه بالا) و نظریه ورق ردی نیز در جدول ۴ فهرست شده است.

به منظور تأیید درستی نتایج حاصل از شبیه سازی نانوصفحات چند لایه، بسامد پایه همفاز و غیر همفاز یک نانوصفحه ده لایه گرافن که ضرایب مدل نیروی واندوالز بین لایه های 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 داده ها وجود دارد. اختلاف ۲/۲۷ 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

جدول ۵: مقایسه بین بسامدهای پایه همفاز و غیر همفاز بی بعد شده یک $\Omega_{mn} = \omega_{mn} h \sqrt{\rho/G}$ نانو صفحه ۱۰ 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

درصد اختلاف	با استفاده از فرمول پیشنهادی در مرجع [۵۸]	نتايج حاضر	Ω_{mn}
-•/٢	•/•١•١۵	•/• ١ • ١٢	(هم فاز Ω_{11}
-۴/۲۷	•/•٩١١V	•/•٨٧٢٧	(غير همفاز) Ω ₁₁

برای مطالعه رفتار ارتعاشی صفحات گرافن چند لایه بهره گرفته شده است و پذیرفته شده است که نظریه ورق کیرشف فقط در پیش بینی بسامد پایه ورق های نازک (بسامد نظیر پایین ترین مد) از دقت خوبی برخوردار است و بسامدهای مدهای بالاتر را بیشتر از مقدار واقعی تقریب میزند [۴۷].

۳– ۳– امکان سنجی استفاده از نظریه آیفانتیس توأم با گرادیان سرعت در تخمین رفتار ارتعاشی نانوصفحات گرافن /برن نیترید

در جدول ۶ نشان داده شده است که با استفاده از نظریه آیفانتیس توأم با \mathcal{R} رادیان سرعت و انتخاب مناسب مقیاس طول در حالی که I = I گذاشته شده است، می توان بسامد طبیعی نانوصفحات گرافن را پیش بینی کرد. بدین منظور از مقادیر بسامد پایه موجود در مرجع [۱۲] که براساس شبیه سازی دینامیک مولکولی تعیین شدهاند، بهره گرفته شده است. خواص مواد و ابعاد هندسی مربوط به نانوصفحه دولایه آرمچیر I موجود در این مرجع برای داده گیری 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 ٦: پیش بینی بسامد پایه گرافن (GHz) دو لایه با استفاده از نظریه آیفانتیس توام 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

شبیهسازی دینامیک مولکولی [۱۲]	روش حاضر	مقياس طول $l=l_1 { m nm}$	اختلاف دما K
۵۰/۴۲	۵۰/۴۲	•/110	*
~ 9/87	۳۹/۶۳	۰/۳۵	١٠٠
۳٧/۴	٣٧/۴٢	۰/۳۵	۲

٤- نتایج عددی و بحث

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

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

شکل ۲ چگونگی منطقهبندی نانوصفات ترکیبی تک لایه گرافن/برن نیترید را که در این مطالعه مورد بررسی قرار گرفتهاند نشان می دهد. 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 می شود. 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 نانوورق ثابت باقی می ماند. در جدول ۷ تأثیر افزایش دما و چیدمان درون صفحه ای گرافن/ برن نیترید بر کوچکترین بسامد طبیعی نانوصفحه مرکب فهرست شده است.

همان گونه که از دادههای جدول برمی آید، اضافه شدن برن نیترید به صفحات گرافن منجر به کاهش بسامد پایه نانوصفحه نسبت به گرافن خالص می گردد. باید توجه داشت که چگونگی قرار گرفتن صفحه برن نیترید در صفحه گرافن، تعداد و محل تمرکز آن بر بسامد پایه نانوورق مرکب حاصله، تأثیر گذار است. در نانوورق های نواری که با دو نوار گرافن محصور شدهاند، افزایش تعداد نوارهای برن نیترید منجر به کاهش بیشتر بسامد پایه می گردد. باید یادآوری نمود که در تمام نمونه ها سطح اشغال شده توسط صفحات برن نیترید ثابت می باشد. تأثیر کاهشی افزایش دما بر بسامد پایه به سبب اثر نرم شدگی بار حرارتی – فشاری درون صفحه ای حاصله نیز در جدول ۷ مشهود می باشد. این در حالی است که نتایج حاصل از نظریه کلاسیک (۲۰۰ = l)

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 نیترید ۱۵ نانومتر مربع میباشد. در نمونههای نواری، نوارهای برن نیترید دارای مساحتهای برابر و نوارهای گرافن نیز دارای سطوح برابر هستند.

در نمونههای معرفی شده با نماد "مربعی" سطوح برن نیترید در میانه ورق گرافن پراکنده شدهاند. در نمونه "مربعی ۱" طول و عرض صفحه برن نیترید 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 نیترید در نمونه "مربعی ۳"، ۲ نانومتر و فاصله عرضی آنها ۱ نانومتر است.





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

جدول ۹: تأثیر افزایش سطح برن نیترید نسبت به سطح کل نانوصفحه مرکب بر کوچکترین بسامد طبیعی(THz) نانوصفحه مرکب درون صفحهای گرافن/برن نیترید (T=۰K)

Table 9. The	effects of incr	easing the BN	area-to-total area o	n the
fundame	ntal natural fre	quency of in-p	olane heterostractur	es

l = 1	l = 0.5	l = 0	درصد سطح برن نيتريد
nm	nm	nm	به سطح کل
•/١٣۵٢	•/147•	•/18•۴	•
۰/۱۳۵۰	•/147•	•/1817	۵/۵۵
•/١٣۴٧	•/١۴١٩	•/187•	۱ • /۵۵
•/1847	•/١۴١٧	•/1878	۱۵/۵۵
•/١٣٣۴	•/1۴••	•/1879	۲۰/۵۵
•/١٣٢١	•/١٣٩٩	•/1878	۲۵/۵۵
•/1٣•٢	•/١٣٨•	۰/۱۶۱۵	۳٠/۵۵
+/17YY	•/١٣۵٢	+/1292	۳۵/۵۵
•/1748	•/١٣١٧	•/1080	4./00

جدول ۱۰: تأثیر تعداد لایهها و چیدمان لایههای گرافن و برن نیترید بر بسامد یایه همفاز و غیرهمفاز ($\Delta T = \cdot K \cdot I = -1/\delta$ nm

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

بسامد غیر همفاز <i>@</i> ₁₁ ,THz	بسامد همفاز ø ₁₁ ,THz	تعداد لایه و نوع چیدمان
۳/۱۲۲ ۸	•/۲۵۱۱	BN/G/BN
۲/۸۴۰۷	•/۲۵۱۱	G/BN/BN
۲/۳۳۹۵	•/٢۵٩١	G/BN/G
٢/٢٣۵٩	•/۲۵۹١	G/G/BN
١/ ٩٩٩ <i>١</i>	•/7480	BN/BN/G/BN/BN
1/9808	•/7480	G/BN/BN/BN/BN
1/9847	•/7480	BN/BN/BN/G/BN
1/8488	•/۲۵۳•	G/BN/BN/BN/G
1/8884	/۲۵۳.	BN/G/BN/G/BN
1/8029	•/۲۵۳•	G/G/BN/BN/BN
1/8400	•/۲۵۳•	BN/G/G/BN/BN

۴- ۲- صفحات مرکب لایه ای گرافن /برن نیترید

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

جدول ۷ : تأثیر چیدمان درون صفحهای گرافن/برن نیترید بر کوچکترین بسامد طبیعی (THz) نانو صفحه مرکب (mm ۱/۰۰۱ه)

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

$\Delta T = 200$	$\Delta T = 100$	$\Delta T = 0$	اہ څکا
K	K	K	نام شكل
•/١٣٨١	•/1۴1٣	•/147•	گرافن
•/١٣٢١	•/١٣۵٢	+/1828	نواری ۱
•/١٣٧۵	•/141•	•/1411	نواری ۲
•/1381	٠/١٣٩۵	•/14•1	نواري ۳
•/١٣۵٢	۰/۱۳۸۵	•/1٣٩•	نواری ۴
•/١٣•٢	•/\٣۴٨	۰/۱۳۵۸	مربعی ۱
•/1877	•/1787	•/١٣٧١	مربعی ۲
•/١٣٣١	•/١٣۵۴	•/1808	مربعی ۳

جدول ۸ : تأثیر مقیاس طول بر کوچکترین بسامد طبیعی (THz) نانو صفحه مرکب درون صفحهای گرافن/برن نیترید (THz-)

Table 8. The effects of length scale values on the fundamental natural frequency (THz) of heterostractures (ΔT =0K)

<i>l</i> =1	<i>l</i> = 0.5	l = 0	الا شکا
nm	nm	nm	ەم سەرل
•/١٣۵٢	•/147•	•/18•۴	گرافن
•/١٣٠•	•/١٣۵۶	•/1047	نواری ۱
•/1846	•/1414	•/1878	نواری ۲
•/١٣٣٢	•/14•1	۰/۱۶۰۵	نواری ۳
•/1874	•/١٣٩•	•/\۵٩•	نواری ۴
+/17av	۰/۱۳۵۸	•/1838	مربعی ۱
•/١٢٨۴	•/١٣٧١	۰/۱۶۱۵	مربعی ۲
•/١٣٢٣	•/1888	•/1494	مربعی ۳

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

تأثیر افزایش سطح برن نیترید نسبت به سطح کل نانوورق مرکب بر بسامد پایه، در جدول ۹ نشان داده شده است. بدین منظور نانوورق مرکب «نواری ۲» مورد استفاده قرار گرفته است. براساس جدول ۹ درصد سطح اشغال شده توسط برن نیترید 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.

در جدول ۱۰، BN معرف نانوصفحه برن نیترید و G معرف نانوصفحه گرافن میباشد. براساس نتایج موجود در جدول ۱۰، در تعداد لایه برابر، نانوصفحهای که دارای صفحات گرافن بیشتری است، دارای بسامد پایه بزرگتری است؛ اما با افزایش تعداد لایههای برن نیترید (به ازای تعداد صفحات گرافن ثابت) بسامد پایه کاهش مییابد. در تعداد ثابت لایهها (لایههای گرافن و برن نیترید) 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 فنر خطی معادل نیروی واندوالز میگردد که بیشترین تأثیر را در بسامدهای غیرهم فاز نشان میدهد؛ لذا بسامد پایه غیرهم فاز تحت تأثیر چیدمان افزایش یا کاهش مییابند.

تأثیر کاهشی افزایش دما و مقیاس طول بر بسامد پایه همفاز و غیر همفاز در شکل ۳ نشان داده شده است. همان گونه که دیده می شود تأثیر دما بر بسامد غیرهم فاز 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

شكل ۳: تأثير افزايش دما ،K و مقياس طول، nm بر بسامد الف) هم فاز (۵₁₁) و ب) غير هم فاز (۵₁₁) نانو صفحه ۱۱ لايه با چيدمانِ BN/BN/G/BN/BN/G/BN/BN/G/BN/BN

٥- نتيجه گيرى

در این مطالعه بسامد پایه نانوصفحات مرکب ساخته شده از گرافن و برن نیترید 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 نیترید فرموله گشته است. دیده می شود که سختی نظیر فنر خطی معادل نیروی واندوالز میان لایه ها براساس چیدمان لایه ها تغییر می کند. همچنین نتایج نشان می دهند که:

- بارامترهای لناردجونز تأثیر قابل توجهی بر ضرایب تقریب خطی نیروی واندروالز دارند که به نوبه خود میتواند بر مقادیر پیشبینی شده بسامدهای غیر همفاز نانوصفحات چند لایه تأثیرگذار باشد.
- در تعداد لایههای ثابت، تغییر در چیدمان تأثیری بر بسامد همفاز نانوصفحه مرکب ندارد.
- ۳. با چیدمان مناسب لایههای گرافن و برن نیترید میتوان بسامد غیر همفاز را کمینه یا بیشینه کرد.
- با افزایش تعداد لایههای برن نیترید که به صورت زیر لایه گرافن یا پوشاننده گرافن استفاده می شوند، بسامد پایه نانوصفحه مرکب کاهش می یابد.
- ۵. در نانوصفحه تک لایه مرکب نواری، در نسبت سطح برن نیترید به سطح گرافن ثابت، نانوصفحهای که با تعداد نوارهای برن نیترید 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.

ضميمه الف

$$\begin{bmatrix} K_{mnpq}^{(kk)} \\ \begin{bmatrix} K_{mnpq}^{(kk)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} K_{luu} & [K]_{uv} & 0 & 0 & 0 \\ [K]_{vu} & [K]_{vv} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & [K]_{w_{b}w_{b}} & [K]_{w_{b}w_{b}} & [K]_{w_{b}w_{b}} \\ 0 & 0 & [K]_{w_{b}w_{b}} & [K]_{w_{b}w_{b}} \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} K_{luu} = \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} h(Q_{11} \frac{\partial \varphi_{umn}}{\partial x} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x} + Q_{66} \frac{\partial \varphi_{umn}}{\partial x} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x} \end{bmatrix} dxdy$$

$$= \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} hl^{2} (Q_{11} (\frac{\partial^{3} \varphi_{umn}}{\partial x^{3}} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x} + \frac{\partial^{3} \varphi_{umn}}{\partial x \partial y^{2}} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x} \end{bmatrix}) dxdy$$

$$= \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} hl^{2} (Q_{66} (\frac{\partial^{3} \varphi_{umn}}{\partial y \partial x^{2}} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y} + \frac{\partial^{3} \varphi_{umn}}{\partial y^{3}} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y} \end{bmatrix}) dxdy$$

$$= \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} hl^{2} (Q_{66} (\frac{\partial^{3} \varphi_{umn}}{\partial x^{2} \partial y} - l^{2} - \frac{\partial^{3} \varphi_{umn}}{\partial x^{3}} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y}] dxdy$$

$$= \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} hQ_{12} (\frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y} - l^{2} - \frac{\partial^{3} \varphi_{umn}}{\partial x^{3}} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x}] dxdy$$

$$= \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} hQ_{12} (\frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y} - l^{2} - \frac{\partial^{3} \varphi_{umn}}{\partial x^{3}} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x}] dxdy$$

$$= \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} hQ_{12} (\frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y} - l^{2} - \frac{\partial^{3} \varphi_{umn}}{\partial x^{3}} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x}] dxdy$$

$$= \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} hQ_{12} (\frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x} - l^{2} - \frac{\partial^{3} \varphi_{umn}}{\partial y} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x}] dxdy$$

$$= \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} hQ_{12} (\frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y} - l^{2} - \frac{\partial^{3} \varphi_{umn}}{\partial x^{3}} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x}] dxdy$$

$$= \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} hQ_{12} (\frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y} - l^{2} - \frac{\partial^{3} \varphi_{umn}}{\partial x^{3}} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x}] dxdy$$

$$= \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} hQ_{12} (\frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y} - l^{2} - \frac{\partial^{3} \varphi_{umn}}{\partial x^{3}} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x}] dxdy$$

$$= \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} hQ_{12} (\frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y} - \frac{\partial^{3} \varphi_{upq}}{\partial x^{2}} + Q_{66} hl^{2} - \frac{\partial^{3} \varphi_{umn}}{\partial x^{3}} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial x}] dxdy$$

$$= \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} h(Q_{11} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y^{3}} - l^{2} - \frac{\partial^{3} \varphi_{upq}}{\partial y} + \frac{\partial^{3} \varphi_{upq}}{\partial x^{2}} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y}] dxdy$$

$$= \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} hl^{2} (Q_{6} (\frac{\partial^{3} \varphi_{upq}}{\partial x^{3}} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y} + \frac{\partial^{3} \varphi_{upq}}{\partial x^{2}} - \frac{\partial \varphi_{upq}}{\partial y}] dxdy$$

$$\begin{split} \left[K\right]_{w_{y}w_{y}} &= \\ & -\int_{0}^{a}\int_{0}^{b}h\alpha\Delta T(Q_{1}(\frac{\partial\varphi_{Spq}}{\partial x}\frac{\partial\varphi_{Smn}}{\partial x} + \frac{\partial\varphi_{Spq}}{\partial y}\frac{\partial\varphi_{Bmn}}{\partial y})dxdy^{\left(\P-(\Delta I)\right)} \\ & -\int_{0}^{a}\int_{0}^{b}h\alpha\Delta TQ_{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})dxdy \\ & +\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}})dxdy \\ & +\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 x^{2}})dxdy \\ & -\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 y^{2}} + \frac{\partial^{2}\varphi_{Spq}}{\partial x^{2}}\frac{\partial^{4}\varphi_{Smn}}{\partial x^{4}})dxdy \\ & -\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}})dxdy \\ & -\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}})dxdy \\ & -\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}})dxdy \\ & -\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}})dxdy \\ & -\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}})dxdy \\ & -\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}})dxdy \\ & +\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})dxdy \\ & +\int_{0}^{a}\int_{0}^{b}\frac{h^{3}l^{2}}{1008}Q_{00}(\frac{\partial^{2}\varphi_{Spq}}{\partial y^{2}}\frac{\partial^{4}\varphi_{Smn}}{\partial y^{2}}\frac{\partial^{4}\varphi_{Smn}}{\partial x^{2}}\partial y^{2})dxdy \\ & +\int_{0}^{a}\int_{0}^{b}\frac{h^{3}l^{2}}{1008}Q_{00}(\frac{\partial^{2}\varphi_{Spq}}{\partial y^{2}}\frac{\partial^{4}\varphi_{Smn}}{\partial y^{2}}\frac{\partial^{4}\varphi_{Smn}}{\partial y^{2}}\frac{\partial^{4}\varphi_{Smn}}}{\partial y^{2}}\frac{\partial^{4}\varphi_{Smn}}{\partial y^{2}$$

$$\begin{split} & [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}))dxdy \\ & - \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} h\alpha\Delta T(Q_{12}(\frac{\partial\varphi_{Bmn}}{\partial x} \frac{\partial\varphi_{Bpq}}{\partial x^{2}} + \frac{\partial\varphi_{Bmn}}{\partial y^{2}} \frac{\partial\varphi_{Bpq}}{\partial y^{2}}))dxdy \\ & + \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}}))dxdy \\ & + \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 y^{2}})dxdy \\ & - \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} \frac{h^{3}}{12}Q_{12}(\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}})dxdy \\ & - \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} \frac{h^{3}}{12}I^{2}(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}})dxdy \\ & - \int_{0}^{a} \int_{12}^{b} \frac{h^{3}}{12}Q_{21}(\frac{\partial^{4}\varphi_{Bmn}}{\partial x^{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 x^{2}})dxdy \\ & - \int_{0}^{a} \int_{12}^{b} \frac{h^{3}}{12}Q_{20}(\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}})dxdy \\ & + \int_{0}^{x} (-\overline{C}_{k})\int_{0}^{a} \int_{0}^{b} \phi_{Bmn}\varphi_{Bpq}dxdy \\ [K]_{w_{b}w_{b}} = \\ & - \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} h\alpha\Delta TQ_{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})dxdy \\ & + \sum_{j=1}^{N} (-\overline{C}_{k})\int_{0}^{a} \int_{0}^{b} \phi_{smn}\varphi_{Bpq}dxdy \\ [K]_{w_{b}w_{b}} = \\ & - \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} h\alpha\Delta TQ_{12}(\frac{\partial\varphi_{Spq}}{\partial x} \frac{\partial\varphi_{Bmn}}{\partial x} + \frac{\partial\varphi_{Spm}}{\partial y} \frac{\partial\varphi_{Bmn}}{\partial y} \frac{\partial\varphi_{Bmn}}{\partial y})dxdy \\ & + \sum_{j=1}^{N} (-\overline{C}_{k})\int_{0}^{a} \int_{0}^{b} \phi_{smn}\varphi_{Bpq}dxdy \\ [K]_{w_{b}w_{b}} = \\ & - \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} h\alpha\Delta TQ_{12}(\frac{\partial\varphi_{Spq}}{\partial x} \frac{\partial\varphi_{Bmn}}{\partial x} + \frac{\partial\varphi_{Spm}}{\partial y} \frac{\partial\varphi_{Bmn}}{\partial y})dxdy \\ & + \sum_{j=1}^{N} (-\overline{C}_{k})\int_{0}^{a} \int_{0}^{b} \phi_{smn}\varphi_{Bpq}dxdy \\ \\ K_{j=j}(-\overline{C}_{k})(-\overline{C}_{k})\int_{0}^{a} \int_{0}^{b} \phi_{smn}\varphi_{Bpq}dxdy \\ \end{bmatrix}_{j=0}^{a} \int_{0}^{b} h\alpha\Delta TQ_{12}(\frac{\partial\varphi_{Spq}}{\partial x} \frac{\partial\varphi_{Spm}}{\partial y$$

(الف–۵)

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 multinanoplate 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, *ACSNano*,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,

. .

$$\begin{split} [K^{ef}]_{BB} &= \overline{C}_{ef} \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} \varphi_{Bmn} \varphi_{Bpq} \, dx dy \\ [K^{ef}]_{BS} &= \overline{C}_{ef} \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} \varphi_{smn} \varphi_{Bpq} \, dx dy \\ [K^{ef}]_{BS} &= \overline{C}_{ef} \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} \varphi_{Bmn} \varphi_{spq} \, dx dy \\ [K^{ef}]_{SS} &= \overline{C}_{ef} \int_{0}^{a} \int_{0}^{b} \varphi_{smn} \varphi_{spq} \, dx dy \end{split}$$

a در معادلات بالا a و b معرف طول و عرض ورق هاست و ρ ، h و a معرف چگالی مخصوص، ضخامت و ضریب انبساط حرارتی لایه h م می باشد. ($-\overline{C}_{ef}$) معرف ضریب سختی فنر خطی معادل نیروی واندروالز میان دو لایه e و f می باشد و مقدار \overline{C}_{ef} با توجه به تعداد لایه ها و چگونگی چیدمان به شیوه توضیح داده شده در بخش ۲ محاسبه می گردد. همچنین Nمعرف تعداد کل لایه های مدل شده می باشد.

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:

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

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

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

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

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 Matherials*, 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 microscale 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 fivewalled 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 carbonboron 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 Aplied 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 grapheme 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 grapheme 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 grapheme 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-/nanoscale 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