مجله مهندسی ساخت و تولید ایران، مهر ۱۴۰۱، دوره ۹، شماره ۷، ص‌ص. ۳۹- ۴۸

ماه‌نامه علمی پژوهشی

مهندسی ساخت و تولید ایران

www.smeir.org

10.22034/IJME.2022.163351

تحلیل دینامیکی ورق گرافن تک لایه تحت یک جرم متحرک با استفاده از روش الاستیسیته غیرمحلی و شبیه‌سازی دینامیک ملکولی

سجاد صیفوری[۱*]، فائزه ابراهیمی[۲]، علی اکبر مجیدی جیرندهی[۳]

۱- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه ولی عصر (عج)، رفسنجان، ایران

۲- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه ولی‌عصر (عج)، رفسنجان، ایران

۳- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

* رفسنجان، صندوق پستی ۵۱۸، sajjad.seifoori@vru.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: ۱۸ مهر ۱۴۰۱

داوری اولیه: ۱۷ آبان ۱۴۰۱

پذیرش: ۳۰ آبان ۱۴۰۱

کلیدواژگان:

ورق گرافن تک لایه

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

تئوری کلاسیک صفحه

نانوذره متحرک

تئوری الاستیسیته غیرمحلی

چکیده

در این تحقیق، به مطالعه تاریخچهٔ زمانی جابه جایی نقطه مرکزی نانو ورق‌های تک‌لایه گرافن تحت عبور جرم متحرک، پرداخته شده است. جهت تحلیل عبور نانوذره بر روی ورق گرافن، از تئوری غیرمحلی الاستیسیته استفاده شده و در نهایت معادلات حاکم، با روش بسط عملکرد ویژه، استخراج شده‌اند. همچنین با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، تاریخچه زمانی جابه‌جایی نقطه مرکزی ورق‌های گرافن تک‌لایه تحت شرایط مرزی مختلف و عبور نانو ذره فلزی با هندسه‌های مختلف (همچون مکعب مربع، کره و تیغه) در راستای طول و از میانه‌ی این ورق‌ها که از جمله پارامترهایی هستند که در تغییر رفتار گرافن مؤثر می باشند، بررسی شده و نتایج حاصل از محاسبات تئوری با شبیه سازی‌های دینامیک مولکولی مربوطه مقایسه گردیده است. افزون بر این، نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای ورق یک لایه گرافن با نتایج حاصل از تئوری الاستیسیته غیرمحلی مربوط به آن، مقایسه شده و یک ضریب غیرمحلی برای مدل موردنظر پیشنهاد شده است. درنتیجه مقایسه‌ی نتایج حاصل از تئوری مربوطه و شبیه‌سازی اطمینان بیشتری را جهت اعتبار سنجی در مورد پاسخ ورق گرافن فراهم خواهد کرد.

Dynamic behavior of single-layer graphene sheets subjected to a moving mass by using a nonlocal elasticity model and a molecular dynamics simulation

Sajjad Seifoori[1*], Faezeh Ebrahimi[1], Ali Akbar Majidi Jirandehi[2]

1- Mechanical Engineering Department, Vali-e-Asr University of Rafsanjan, Rafsanjan, Iran

2- Mechanical Engineering Department, Payame Noor University, Tehran, Iran

* P.O.B. 518, Rafsanjan Iran, sajjad.seifoori@vru.ac.ir

Article Information

Original Research Paper

Received: 10 September 2022

First Decision: 8 November 2022

Accepted: 21 November 2022

Keywords:

Elasticity theory

Dynamic deflection

Graphene sheets

Moving mass

Molecular dynamics simulations

Abstract

In this article, the study of the time history of the displacement of the central point of single-layer graphene nanosheets under the passage of moving mass has been studied. In order to analyze the passage of the nanoparticle on the graphene sheet, the non-local theory of elasticity was used and finally the governing equations were extracted by the special function expansion method. Also, by using molecular dynamics simulation, the time history of the displacement of the central point of single-layer graphene sheets under different boundary conditions and the passage of metal nanoparticles with different geometries (such as square cubes, spheres and blades) along the length and through the middle of these sheets, including There are parameters that are effective in changing the behavior of graphene, and the results of theoretical calculations have been compared with the relevant molecular dynamics simulations. In addition, the results of the molecular dynamics simulation for a single-layer graphene sheet have been compared with the results of the corresponding non-local elasticity theory, and a non-local coefficient has been proposed for the model. As a result, the comparison of the results obtained from the relevant theory and simulation will provide more confidence to validate the response of the graphene sheet.

۱- مقدمه

صفحات گرافن تک لایه و ورق‌های گرافن چند لایه که از مهم ترین انواع نانوساختارها هستند، پتانسیل بالایی برای استفاده در تجهیزات مختلف مانند ترانزیستورها، آشکارسازها، رزوناتورها، سیستم‌های نانو الکترومکانیکی باتری‌های الکتریکی، نانوسنسورها، نانونوسانگرها، نانوکامپوزیت‌ها، تشدیدکننده‌های الکترومکانیکی، پیزوالکتریک‌ها و ... دارند [۱، ۲].

قرارگیری هر گونه بار یا جرم مطابق شکل ۱ بر روی یک سازه (ورق)، به صورت استاتیکی یا دینامیکی به ترتیب موجب تغییرات استاتیکی و دینامیکی در سازه می‌شود. از آن جهت که

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

Please cite this article using:

S. Seifoori, F. Ebrahimi, A. A. Majidi Jirandehi, Dynamic behavior of single-layer graphene sheets subjected to a moving mass by using a nonlocal elasticity model and a molecular dynamics simulation, Iranian Journal of Manufacturing Engineering, Vol. 9, No. 7, pp. 39- 48, 2022 (in Persian). https://www.doi.org/10.22034/IJME.2022.163351

عوامل دینامیکی تأثیرات شدیدتری نسبت به عوامل استاتیکی بر روی سازه‌ها باقی می‌گذارند، اخیراً بررسی پاسخ‌های ارتعاشی و جابه‌جایی‌های عرضی در این سازه‌ها بسیار مورد توجه قرار گرفته است.

در سال‌های اخیر تحقیقات گسترده‌ای در زمینه‌ی عبور بار متحرک در مقیاس میکرومتر بر روی ورق‌های کامپوزیتی و فلزی به‌صورت تحلیلی و تجربی انجام گرفته است [۳]؛ و نتایج تجربی حاصل را با نتایج عددی حاصل از نرم‌افزارهایی چون انسیس و ال اس داینا مقایسه نموده اند و به نتایج قابل قبولی دست یافته اند.

یافتن تأثیر پارامترهای مختلف بر میزان خیز دینامیکی این سازه‌ها، یکی از چالش‌های موجود در طراحی سازه‌های تحت بار متحرک است. در این راستا، مواردی مثل مقدار جرم متحرک عبوری از روی ورق، نوع شبکه بندی (در روش عددی)، مقدار سرعت بار یا جرم متحرک و شرایط مرزی مختلف و هندسه ورق می‌تواند در میزان خیز نقطه مرکزی ورق تأثیرگذار باشد. چنانچه مطابق شکل ۱ ورقی تحت جرم متحرک در نظر گرفته شود، رفتارهایی از قبیل خیز و ارتعاش در ورق قابل مشاهده است.

بنابراین، درک پاسخ دینامیکی صفحات گرافن تک لایه و چند لایه تحت عبور یک نانوذره متحرک ضروری به نظر می‌رسد زیرا می‌توان از آن در طراحی بهینه دستگاه‌هایی با اندازه نانو که در معرض انواع مختلف بارگذاری‌ها هستند، استفاده کرد. درنتیجه با توجه به کاربردهای مختلف بالقوه برای صفحات نانو مانند سیستم نانو الکترومکانیکی از جمله نانوحسگرها، نانوپردازشگرها، تراشه‌های الکترونیکی و ... که مستعد قرارگیری تحت عبور جرم و بار متحرک هستند [۴]؛ و به واسطه‌ی انعطاف پذیری بسیار بالای خود بررسی پاسخ دینامیکی آن‌ها در راستای ضخامت امری ضروری است.

در حل تحلیلی، خیز مرکزی نانوصفحات ارتوتروپیک کاملاً گیردار تک‌لایه گرافن، تحت عبور جرم متحرک در راستای طول ورق به‌صورت تحلیلی دنبال می‌شود. جهت استخراج این پاسخ‌های دینامیکی از معادلات سه‌بعدی الاستیسیته با اعمال فرضیاتی و در نهایت در نظر گرفتن تئوری الاستیسیته دوبعدی غیرمحلی که تئوری ای مناسب جهت تحلیل سازه‌هایی با مقیاس کوچک (نانوساختارها) می‌باشد، خواهیم پرداخت. در تحلیل مطلب ذکر شده، از آن جهت که در مقیاس نانو، پاسخ ورق، به یکسری از خواص ماده از جمله نیروهای بین‌اتمی، فاصله بین‌مولکولی و ثابت ماده، بستگی دارد[۵]؛ اثر مقیاس کوچک در این مقیاس بسیار اهمیت پیدا می‌کند. از آن جهت که تئوری‌های محیط پیوسته کلاسیک، این عوامل را در نظر نمی گیرند، با تکیه بر نظریه ای دیگر، همان طور که سان و ژانگ در سال ۲۰۰۳ میلادی [۶] نشان دادند بهره گیری از تئوری اصلاحی محیط پیوسته که اثرات مقیاس کوچک را در تحلیل و ارائه‌ی پاسخی دقیق در ابعاد نانومتر اعمال می‌کند، بسیار حائز اهمیت است. این تئوری با اعمال ضریبی غیرمحلی که بیان می‌کند تنش در یک نقطه از محیط پیوسته به کرنش‌ها در تمام نقاط آن محیط پیوسته بستگی دارد، در رفع این کاستی برمی آید [۷].

صیفوری و لیاقت اثر ضربه‌ی نانوذرات بر روی نانوتیرهای اویلر برنولی را به کمک تئوری الاستیسیته غیر خطی محاسبه کردند [۸].

در این تحقیق روابط هندسی غیرخطی فون کارمن به همراه تئوری کشش غیرمحلی به کار گرفته شده و تأثیر عوامل متعددی مانند ضخامت لایه پیزوالکتریک، پارامتر غیرمحلی وابسته به مقیاس، ولتاژ خطی خارجی، تعداد بارها، و بزرگی و سرعت بار متحرک، بر رفتار لایه‌های چند لایه بررسی و نتیجه گیری شد که سرعت حرکت همراه با ولتاژ خارجی دو عامل تأثیرگذار هستند.

پرادان و همکاران [۹] فرکانس‌های ورق‌های گرافن تک‌لایه و دولایه را به کمک تئوری صفحه کلاسیک غیرمحلی و نظریه تغییرشکل برشی مرتبه اول مطالعه کردند.

هاشمی و همکاران [۱۰] انحراف دینامیکی سیستم نانو پرتو چندگانه تحت یک نانوذره متحرک را تحلیل کردند و یک مدل مبتنی بر پیوستار غیرمحلی بر اساس نظریه غیرمحلی ارینگن و نظریه پرتو اویلر- برنولی استخراج شد.

نامی و همکاران [۱۱] پاسخ دینامیکی نانوصفحات همسانگرد مستطیلی را تحت یک بار متحرک بر اساس تئوری ورق مرتبه دوم غیرمحلی بررسی کردند.

لی و همکاران [۱۲] رفتار دینامیکی غیرخطی لایه‌های گرافن/پیزوالکتریک را تحت بار عرضی متحرک بررسی کردند.

در سال ۲۰۱۸ ژانگ و همکاران [۱۳] رفتار ارتعاشی غیرخطی ورق‌های گرافن دولایه را با استفاده از مدل فون کارمن با تئوری کشش غیرمحلی برای بررسی اثر مقیاس کوچک از طریق روش ریتز برای حل معادلات دیفرانسیل جزئی جفت شده تجزیه و تحلیل کردند.

سیمسک، ردی و همکاران در سال ۲۰۱۵ [۱۴] ارتعاش اجباری یک میکروپلیت تحت عبور بار متحرک را با بهره‌گیری از

نظریه صفحه غیرکلاسیک کیرشهف به روش نیومارک را مطالعه کردند.

در سال ۲۰۱۸ صیفوری و ایزدی [۱۵] پاسخ یک ورق مستطیلی نازک را با شرایط مرزی کاملاً گیردار تحت ضربه یک جرم قرار دادند و تأثیر پارامترهای مؤثر بر این پاسخ‌ها از قبیل میزان، هندسه و سرعت جرم و نسبت ابعاد به ضخامت ورق را بر روی پاسخ دینامیکی آن بر اساس تاریخچه زمان جابه‌جایی نقطه مرکزی ورق ارائه دادند.

صیفوری و لیاقت در سال ۲۰۱۳ [۱۶] تأثیر حضور نانوذرات بر روی نانوتیر را به کمک مقایسه حل تحلیلی و حل عددی بررسی کردند. در این مطالعه، اثر نانوذره بر روی ورق تک‌لایه گرافن با استفاده از مدل فنر-جرم ارائه شده است. این مدل جابه‌جایی دینامیکی گرافن را تحت بارگذاری ضربه‌ای مورد بررسی قرار داده است. سپس تأثیر نسبت ابعاد، میزان و سرعت بار متحرک را بر پاسخ‌های دینامیکی ورق به دست آوردند.

از آنجا که کسب نتایج تجربی و آزمایشگاهی بر روی سیستم‌های با مقیاس میکرو و نانو کاری بس دشوار و هزینه بر است، صحت استفاده از تئوری‌های سازگار دیگرِ مختص به این مقیاس و سایر روش‌های حل از جمله روش دینامیک مولکولی، بسیار مورد بحث بوده و یکی از جذاب‌ترین مباحث در زمینه علوم مکانیک می‌باشد.

بیشتر سیستم‌هایی که در مقیاس نانو هستند حداقل از چند صد اتم تشکیل شده‌اند؛ این سیستم‌ها به قدری بزرگ هستند که نمی‌توان آن‌ها را بر اساس روش‌های مکانیک کوانتومی مدل‌سازی کرد؛ از این سو بهره‌گیری از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی که یکی از معتبرترین روش‌های حل رفتار سیستم‌های مقیاس نانو می‌باشد، میانبری جهت دستیابی به نتایج آزمایشگاهی است؛ که در این روش برهم‌کنش‌های بین اتم‌ها با بهره‌گیری از یک میدان نیرو به‌صورت کمی تعریف می‌شوند. درنتیجه از این روش که جایگزین مناسبی برای روش‌های آزمایشگاهی است، بهره گرفته شده است [۱۷]. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، نوعی شبیه‌سازی رایانه ای بر پایه ریاضیات، مکانیک آماری و کلاسیک یا به عبارتی انتگرال‌گیری از معادلات نیوتن برای تک‌تک ذرات موجود در سیستم استوار است [۱۸] که در آن مولکول‌ها و اتم‌ها می‌توانند در یک دوره‌ی زمانی مشخص با هم برهمکنش کرده و دیدگاهی از پاسخ اتم‌ها را نشان دهند. این فعل و انفعالات بین اتمی با یک تابع پتانسیلی مناسب با سیستم، قابل توصیف است؛ در نتیجه فیزیک سازه در قالب توابع پتانسیل انرژی در سیستم اعمال می‌شود که به وسیله این توابع پتانسیل، نیروهای وارد به هر یک از اتم‌های سیستم، قابل محاسبه است [۱۹]. سپس با محاسبه‌ی حرکت مجموعه‌ی این اتم‌ها، به کمک قوانین نیوتن، اطلاعات گوناگونی از خواص میکروسکوپی و ماکروسکوپی ذرات قابل استخراج است.

صیفوری و خوش گفتار [۲۰] از روش فنر-جرم و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای بررسی تأثیر ضربه‌ها با هندسه‌ها، شکل‌ها و سرعت‌های مختلف بر روی ورق‌های تک لایه و چندلایه گرافن استفاده کردند. نتایج به دست آمده از مدل جرم فنر به خوبی برای صفحات گرافن دو لایه مربعی و مستطیلی با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، سازش را نشان داد.

صیفوری و حاج عبداللهی در سال ۲۰۱۵ [۲۱]، به تحلیل خیز عرضی یک گرافن تک‌لایه تحت بار ضربه ای با استفاده از روش المان محدود و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پرداختند.

این تحقیق به بررسی رفتار دینامیکی ورق گرافن تک لایه تحت ضربه یک نانوذره متحرک بر اساس شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی می‌پردازد و تاریخچه زمانی و حداکثر مقدار انحراف نقطه مرکزی ورق به عنوان دو شاخص اصلی در نظر گرفته شده و تحت شرایط مختلف گزارش می شود. همچنین روش تحلیلی به تفضیل بر اساس تئوری غیر محلی توضیح داده شده و سپس با نتایج تجربی و همچنین نتایج شبیه سازی دینامیک ملکولی مقایسه شده است. بررسی رفتار دینامیکی ورق گرافن تک لایه با شرایط مرزی مختلف، تحت عبور نانو ذرات متحرک با استفاده از تئوری الاستیسیته غیرخطی و ارائه ضرایب غیرمحلی مناسب با مقایسه نتایج تحلیلی و شبیه سازی دینامیک ملکولی از موارد نواوری این تحقیق می باشند.

۲- تئوری الاستیسیته غیرمحلی

همان‌طور که در شکل ۱ مشاهده می گردد، محور x در راستای طول ورق و محور y در راستای عرض و محور z در راستای ضخامت ورق می‌باشد؛ که با نماد h نشان داده شده است.

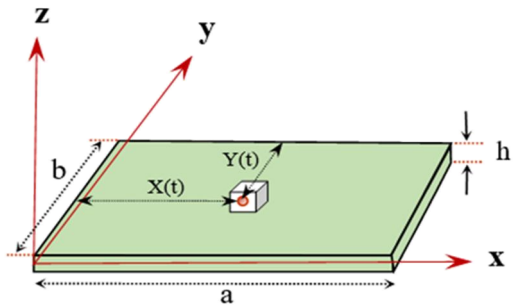

Fig. 1 Cartesian coordinate system used for graphene sheet

شکل ۱ دستگاه مختصات کارتزین مورد استفاده برای ورق گرافن

همان‌طور که قبلاً به این نکته اشاره شد که در تئوری‌های کلاسیک محلی، برخلاف تئوری‌های کلاسیک غیرمحلی تنش در یک نقطه تنها به کرنش در همان نقطه بستگی دارد، نظریه ارائه شده توسط ارینگن [۲۲، ۲۳] جهت رفع این خلأ، که بر اساس مشاهدات تجربی پراکندگی فونون شبکه اتمی حاصل شد [۹]، شامل اطلاعاتی در مورد نیروهای بین‌اتمی و طول مقیاس درونی اتم‌ها است که در معادلات ساختاری به‌عنوان یک پارامتر تأثیر دارد. تانسور تنش نقطه‌ی x به‌صورت رابطه (۱) بیان می‌شود:

$$\int_{\upsilon} k(|x'-x|,\tau)\sigma_{ij}^{l}(x')dx' \qquad (۱)$$

$\sigma_{ij}^{l}(x')$ تانسور تنش محلی نقطه x (Euclidean norm) و $k(|x'-x|,\tau)$ تابع کِرنل است که مدول غیرمحلی را بیان می‌کند و $|x'-x|$ فاصله می‌باشد.

رابطه تنش و کرنش نقطه‌ی x طبق قانون تعمیم یافته هوک، برای یک محیط پیوسته به‌صورت زیر است:

$$\sigma_{ij}^{l}(x')=C_{ijkl}\varepsilon_{kl}(x') \qquad (۲)$$

C_{ijkl} تانسور مرتبه چهارم مدول الاستیسیته و ε_{kl} تانسور کرنش می‌باشند. در نتیجه رفتار ساختاری غیرمحلی یک جامد کاملاً الاستیک، یا به عبارتی رابطه‌ی تانسور تنش محلی و غیرمحلی را با اعمال پارامتر غیرمحلی (μ) می‌توان به فرم دیفرانسیلی زیر نوشت [۲۴]:

$$(1-\mu\nabla^2)\sigma_{ij}^{nl}=C_{ijkl}\varepsilon_{kl} \qquad (۳)$$

$$\mu=(e_0\alpha)^2 \qquad (۴)$$

$$(1-\mu\nabla^2)\sigma_{ij}^{nl}=\sigma_{ij}^{l}(x') \qquad (۵)$$

۲-۱- معادلات تنش و کرنش غیرمحلی

با استفاده از معادله (۵) رابطه تنش-کرنش غیرمحلی برای یک ورق اورتوتروپیک به صورت رابطه (۶) نوشته می‌شود:

$$\begin{Bmatrix}\sigma_{xx}^{nl}\\ \sigma_{yy}^{nl}\\ \sigma_{xy}^{nl}\end{Bmatrix}-\mu\nabla^2\begin{Bmatrix}\sigma_{xx}^{nl}\\ \sigma_{yy}^{nl}\\ \sigma_{xy}^{nl}\end{Bmatrix}=\begin{bmatrix}E_1/(1-\upsilon_{12}\upsilon_{21}) & \upsilon_{12}E/(1-\upsilon_{12}\upsilon_{21}) & 0\\ \upsilon_{12}E_2/(1-\upsilon_{12}\upsilon_{21}) & E_2/(1-\upsilon_{12}\upsilon_{21}) & 0\\ 0 & 0 & 2G_{12}\end{bmatrix}\begin{Bmatrix}\varepsilon_{xx}\\ \varepsilon_{yy}\\ \varepsilon_{xy}\end{Bmatrix} \qquad (۶)$$

که در آن E_1 و E_2 به ترتیب مدول الاستیسیته ورق در راستاهای اصلی ماده یعنی x و y بوده و با یکدیگر برابر هستند. G_{12} مدول برشی ورق در صفحه‌ی xy و υ_{12} و υ_{21} ضرایب پواسون می‌باشند که این دو نیز با یکدیگر برابر هستند. c_{ijkl} تانسور مرتبه چهارم مدول الاستیسیته و ε_{kl} تانسور کرنش می‌باشند.

۲-۲- معادلات حرکت بر اساس منتجه‌های تنش

از معادله‌ی (۳) می‌توان فهمید که رفتار غیرمحلی از طریق روابط ساختاری به مسئله وارد می‌شوند. اصل کار مجازی از روابط ساختاری یعنی روابط تنش و کرنش مستقل است؛ بنابراین می‌توان از این روش برای استخراج معادلات حرکت صفحات استفاده کرد.

ممان‌های اینرسی جرم به‌صورت زیر تعریف می‌شوند [۹]:

$$m_0=\int_{-h/2}^{h/2}\rho dz\,,\quad m_2=\int_{-h/2}^{h/2}\rho h^2 dz \qquad (۷)$$

در شکل ۲ منتجه‌های تنش در یک المان از صفحه به نمایش گذاشته شده است.

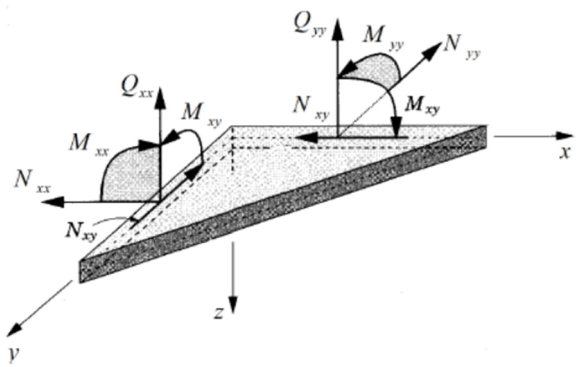

Fig. 2 Results of stress on an element

شکل ۲ منتجه‌های تتنش بر روی یک المان

۲-۳- معادلات حرکت بر حسب جابه‌جایی

در اینجا $D=\frac{Eh^3}{12(1-\upsilon^2)}$ صلبیت خمشی ورق را نشان می‌دهد که در نهایت با جایگذاری روابط فوق در معادلات حرکت بر اساس منتجه‌های تنش می‌توان معادلات حاکم بر ورق را توسط ترم‌های جابه‌جایی ورق به صورت رابطه (۸) نوشت:

$$\begin{aligned}&-D\nabla^4 w^c+\mu\nabla^2\Big[-q-\frac{\partial}{\partial x}(N_0^{xx}\frac{\partial w^c}{\partial x})\\&-\frac{\partial}{\partial y}(N_0^{yy}\frac{\partial w^c}{\partial y})-\frac{\partial}{\partial x}(N_0^{xy}\frac{\partial w^c}{\partial y})\\&-\frac{\partial}{\partial y}(N_0^{xy}\frac{\partial w^c}{\partial x})+m_0\frac{\partial^2 w^c}{\partial t^2}-m_2(\frac{\partial^4 w^c}{\partial x^2\partial t^2}+\frac{\partial^4 w^c}{\partial y^2\partial t^2})\Big]\\&+q+\Big[-q-\frac{\partial}{\partial x}(N_0^{xx}\frac{\partial w^c}{\partial x})-\frac{\partial}{\partial y}(N_0^{yy}\frac{\partial w^c}{\partial y})\\&-\frac{\partial}{\partial x}(N_0^{xy}\frac{\partial w^c}{\partial y})-\frac{\partial}{\partial y}(N_0^{xy}\frac{\partial w^c}{\partial x})\\&=m_0\frac{\partial^2 w^c}{\partial t^2}-m_2(\frac{\partial^4 w^c}{\partial x^2\partial t^2}+\frac{\partial^4 w^c}{\partial y^2\partial t^2})\end{aligned} \qquad (۸)$$

در نهایت، جابه‌جایی‌های عرضی ورق، با فرض بر صفر بودن

منتجه‌های تنش یا به عبارتی کشش‌ها و صفر قرار دادن ممان دوم جرم m_2 در معادله (۸)، معادله‌ی حرکت برای بار یا جرم متحرک بر روی یک ورق نازک (نانو ورق) به فرم زیر می‌باشد. در ضمن تغییرشکل صفحه میانی با جابه‌جایی وابسته به زمان به‌صورت $W(t)=(x(t),y(t),\mathrm{t})$ تعریف می‌شود. همچنین فرض بر این است که ورق گرافن یکنواخت، همگن و ایزوتروپیک با شرایط مرزی دلخواه و بدون اصطکاک است:

$$D\nabla^4 w^c + m_0\frac{\partial^2 w^c}{\partial t^2} - \mu\nabla^2(\mathrm{m}_0\frac{\partial^2 w^c}{\partial t^2}) = q - \mu\nabla^2 q \qquad (۹)$$

$$\nabla^4 = \frac{\partial^4}{\partial x^4} + 2\frac{\partial^4}{\partial x^2\partial y^2} + \frac{\partial^4}{\partial y^4} \qquad (۱۰)$$

∇ عملگر بای‌هارمونیک[1] و q بار خارجی وارد شده به ورق است. از آن جهت که در اینجا فرض شده است که در مدت زمان حرکت جرم بر روی ورق، بین ورق و جرم متحرک تماماً تماس برقرار باشد، نیروی تحریک‌کننده خارجی حاصل از عبور جرم متحرک بر روی سطح ورق، طبق معادله (۱۱) محاسبه می‌شود:

$$q = -\mu\left\{Mg + M\frac{d^2W}{dt^2}\right\}\delta(x - X(t))\delta(\mathrm{y}-\mathrm{Y(t)}) \qquad (۱۱)$$

q بار متحرک و g شتاب گرانش است. X(t) و Y(t) مربوط به مسیر پارامتریک جرم متحرک، W(t) جابه‌جایی عمودی جرم متحرک و وابسته به زمان است و δ تابع دلتای دیراک می‌باشد.

و بر اساس قائده زنجیره‌ای در تئوری دیفرانسیل جزئی[2]، ترم $\frac{d^2W}{dt^2}$ در معادله (۱۱) به‌صورت زیر بسط داده می‌شود:

$$\frac{d^2W(t)}{dt^2} = \left\{\begin{array}{c} \frac{\partial^2 W}{\partial t^2} + \frac{\partial^2 W}{\partial x^2}\left(\frac{dX(t)}{dt}\right)^2 + \frac{\partial^2 W}{\partial y^2}\left(\frac{dY(t)}{dt}\right)^2 \\ +2\frac{\partial^2 W}{\partial x\partial y}\left(\frac{dX(t)}{dt}\right)\left(\frac{dY(t)}{dt}\right) + 2\frac{\partial^2 W}{\partial x\partial t}\left(\frac{dX(t)}{dt}\right) \\ +2\frac{\partial^2 W}{\partial y\partial t}\left(\frac{dY(t)}{dt}\right) + \frac{\partial W}{\partial x}\left(\frac{d^2X(t)}{dt^2}\right) + \frac{\partial W}{\partial y}\left(\frac{d^2Y(t)}{dt^2}\right) \end{array}\right\} \qquad (۱۲)$$

۳- روش حل

در این تحقیق، تکنیک بسط تابع ویژه برای حل معادلات حاکم بر حرکت جرم متحرک استفاده شده است. برای بررسی پاسخ ورق در صورتی که مقدار بار یا جرم برابر با صفر قرار داده شود (q=0)، از قضیه انبساط[3] رابطه (۱۳) بدست می‌آید.

$$W(\mathrm{x,y},t) = \sum_{j=1}^{\infty}\phi_j(x,y)e^{i\omega_j t} \qquad (۱۳)$$

$\phi_j(x,y)$ شکل مودها و ω_j فرکانس طبیعی j ام ورق و i برابر با $\sqrt{-1}$ می‌باشد.

با جایگذاری معادله (۱۳) در قسمت چپ معادله (۹) و فرض بر اینکه q برابر با صفر باشد، می‌توان رابطه (۱۴) را نوشت:

$$D\nabla^4 = m_0\omega_j^2\left[1-\mu\nabla^2\right] \qquad (۱۴)$$

با حل معادلات ارتعاشات آزاد ورق، فرکانس‌های طبیعی و شکل مودها، استخراج می‌گردد. لازم به ذکر است که، فقط تعداد محدودی از شکل مودها در عمل می‌توانند در معادله (۱۳) استفاده شوند و پرواضح است که هر چه تعداد مود شیپ‌ها بیشتر باشد، حل دقیق‌تر خواهد بود. از قضیه انبساط[4] در ارتعاشات پیوسته، می‌دانیم که حل به‌صورت زیر قابل بیان است:

$$W(x,y,t) = \sum_{j=1}^{n}\phi_j(x,y)Q_j(t) \qquad (۱۵)$$

n تعداد شکل مودهای استفاده شده برای حل و $Q_j(t)$ دامنه‌های معین متغیر با زمان را نشان می‌دهد. اکنون با جایگزینی معادله (۱۱) و (۱۵) در معادله (۹)، و استفاده از معادله (۱۴)، خواهیم داشت:

$$\sum_{j=1}^{n}\left\{\left[\mathrm{Q}_j(t)\omega_j^2(1-\mu\nabla^2) + \frac{d^2}{dt^2}\{\mathrm{Q}_j(t)\}(1-\mu\nabla^2)\right]m_0\phi_j(x,y)\right\} =$$
$$= -M\left[g + \sum_{j=1}^{n}\frac{d^2}{dt^2}\{\phi_j(\mathrm{X(t)},\mathrm{Y(t)})Q_j(t)\}\right]\times\delta(x-X(t))\delta(y-Y(t)) \qquad (۱۶)$$

و با استفاده از معادله (۱۲) خواهیم داشت:

$$\frac{d^2}{dt^2}\{\phi_j(\mathrm{X(t)},\mathrm{Y(t)})Q_j(t)\}$$
$$= \phi_j(\mathrm{X,Y})\frac{d^2Q_j(t)}{dt^2} + 2\left[\frac{\partial\phi_j(\mathrm{X,Y})}{\partial x}\frac{dX}{dt} + \frac{\partial\phi_j(\mathrm{X,Y})}{\partial y}\frac{dY}{dt}\right]\frac{dQ_j(t)}{dt}$$
$$+\left\{\begin{array}{l}\frac{\partial^2\phi_j(\mathrm{X,Y})}{\partial x^2}\left(\frac{dX}{dt}\right)^2 + \frac{\partial^2\phi_j(\mathrm{X,Y})}{\partial y^2}\left(\frac{dY}{dt}\right)^2 \\ +2\frac{\partial^2\phi_j(\mathrm{X,Y})}{\partial x\,\partial y}\frac{dX}{dt}\frac{dY}{dt} + \frac{\partial\phi_j(\mathrm{X,Y})}{\partial x}\frac{d^2X}{dt^2} + \frac{\partial\phi_j(\mathrm{X,Y})}{\partial y}\frac{d^2Y}{dt^2}\end{array}\right\}Q_j(t) \qquad (۱۷)$$

با ضرب دو طرف معادله (۱۶) در $\phi_i = (x,y)$ و انتگرال‌گیری حول سطح ورق و با استفاده از خاصیت ارتونرمالیتی[5] شکل مودها، رابطه (۱۸) بدست می‌آید.

$$\int_0^a\int_0^b\phi_i(x,y)\left[m_0\omega_j^2\phi_j(x,y) - \mu m_0\omega_j^2\nabla^2\phi_j(x,y)\right]\mathrm{Q}_j(t)$$
$$+\int_0^a\int_0^b\phi_i(x,y)\left[m_0\phi_j(x,y) - \mu m_0\nabla^2\phi_j(x,y)\right]\frac{d^2}{dt^2}\mathrm{Q}_j(t)$$
$$= -\phi_i(x,y)[Mg] - \phi_i(x,y)\left[M\sum_{j=1}^{n}\frac{d^2}{dt^2}\{\phi_j(\mathrm{X(t)},\mathrm{Y(t)})Q_j(t)\}\right]$$
$$\times\delta(x-X(t))\delta(y-Y(t)) \qquad (۱۸)$$

[1] By harmonic
[2] Partial differentiation
[3] Expansion theory
[4] Expansion theory
5 Orthonormality

با استفاده از ویژگی تعامد حاصل انتگرال به‌صورت رابطه (۱۹) است:

$$\int_0^a\int_0^b \phi_i(x,y)\phi_j(x,y)=\begin{cases}0 & i\neq j\\ 1 & i=j\end{cases}\Rightarrow\ =\delta_{ij} \qquad (۱۹)$$

در نتیجه:

$$\left[(m_0\omega_j^2\delta_{ij})-\int_0^a\int_0^b \phi_i(x,y)\mu m_0\omega_j^2\nabla^2\phi_j(x,y)\,\mathrm{dA}\right]\mathrm{Q}_j(t)$$
$$+\left[(m_0\delta_{ij})-\int_0^a\int_0^b \phi_i(x,y)\mu m_0\nabla^2\phi_j(x,y)\,\mathrm{dA}\right]\frac{d^2}{dt^2}\mathrm{Q}_j(t)$$
$$=\left[-\mathrm{Mg}-M\sum_{j=1}^{n}\frac{d^2}{dt^2}\left\{\phi_j(\mathrm{X(t)},\mathrm{Y(t)})Q_j(t)\right\}\right]\phi_i(x,y)$$

(۲۰)

رابطه (۲۰) می‌تواند در قالب ماتریس زیر بیان شود [۲۳]:

$$[M(t)]\frac{d^2}{dt^2}\{\vec{q}(t)\}+[C(t)]\frac{d}{dt}\{\vec{q}(t)\}+[\mathrm{K}(t)]\{\vec{q}(t)\}=\{\vec{F}(t)\}$$

(۲۱)

M، C، K و F به ترتیب ماتریس جرم، ماتریس میرایی، ماتریس سختی و بردار نیرو می‌باشد. که ماتریس‌های نامبرده شده را از معادله‌ی (۲۰) می‌توان با استفاده از فرم بالا به‌صورت زیر تفکیک کرد [۹]:

$$M_{ij}=\delta_{ij}-\int_0^a\int_0^b \mu m_0\phi_i(x,y)\nabla^2\phi_j(x,y)\,\mathrm{dxdy}$$
$$+M\,\phi_i(x(t),y(t))\phi_j(x(t),y(t))$$
$$\mathrm{K}_{ij}=m_0\delta_{ij}-\int_0^a\int_0^b \phi_i(x,y)\mu m_0\omega_j^2\nabla^2\phi_j(x,y)\,\mathrm{dxdy}$$
$$+M\,\phi_j(x,y)\begin{bmatrix}\frac{\partial^2\phi_j(\mathrm{X,Y})}{\partial x^2}\left(\frac{dX}{dt}\right)^2+\frac{\partial^2\phi_j(\mathrm{X,Y})}{\partial y^2}\left(\frac{dY}{dt}\right)^2\\ +2\frac{\partial^2\phi_j(\mathrm{X,Y})}{\partial x\,\partial y}\frac{dX}{dt}\frac{dY}{dt}+\frac{\partial\phi_j(\mathrm{X,Y})}{\partial x}\frac{d^2X}{dt^2}\\ +\frac{\partial\phi_j(\mathrm{X,Y})}{\partial y}\frac{d^2Y}{dt^2}\end{bmatrix}$$
$$\mathrm{C}_{ij}=2M\,\phi_i(\mathrm{X(t)},\mathrm{Y(t)})\left[\frac{\partial\phi_j(\mathrm{X,Y})}{\partial x}\frac{dX}{dt}+\frac{\partial\phi_j(\mathrm{X,Y})}{\partial y}\frac{dY}{dt}\right]$$
$$F_j=-Mg\phi_i(x,y)$$
$$\vec{q}(t)=\begin{bmatrix}Q_1(t)\\ \vdots\\ Q_2(t)\end{bmatrix} \qquad (۲۲)$$

در این مطالعه مود شیپ‌های ورق با شرایط مرزی گیردار توسط کاراکتر مرزی ارتوگونال پلی‌نومیا[1] و الگوریتم گرام-اسمیت[2] محاسبه شده و مجموعه توابع مستقل خطی به‌صورت زیر در نظر گرفته شده است:

$$F_i(x,y)=x^{p_1}(x-a)^{p_2}y^{p_3}(y-b)^{p_4}\times\{1,x,y,x^2,\mathrm{xy},\mathrm{y}^2,x^3,x^2y,xy^2,y^3,x^4,...\}$$

(۲۳)

[1] Characterisitic orthogonal polynomials
[2] Gram-Schmidt

p_1، p_2، p_3 و p_4 بر اساس شرایط مرزی ورق و برای شرایط مرزی گیردار بر روی همه‌ی زوایای ورق تعیین شده‌اند. مود شیپ‌های $\phi_i(\mathrm{X,Y})$ ورق با شرایط مرزی گیردار، می‌توانند توسط الگوریتم گرام-اسمیت به‌صورت زیر تعیین شوند. (در واقع ۱، ۲، ۳، ۴= i و p_i به ترتیب برای شرایط مرزی آزاد، ساده و گیردار برابر با ۰، ۱، ۲ می‌باشد).

$$\phi_i(\mathrm{x,y})=F_i(x,y)$$
$$\phi_i(\mathrm{x,y})=F_i(x,y)-\sum_{j=1}^{i-1}\alpha_{ij}\phi_i(\mathrm{x,y})$$
$$\alpha_{ij}=\frac{\iint F_i(x,y)\phi_i(\mathrm{x,y})dxdy}{\iint \phi_i(\mathrm{x,y})\phi_j(\mathrm{x,y})dxdy} \qquad (۲۴)$$

پس از محاسبه‌ی ماتریس‌های جرم، میرایی، سختی و بردار نیرو با استفاده از مود شیپ‌های به دست آمده، معادله (۲۱) با استفاده از تکنیک انتگرال‌گیری نیومارک[3] جهت آنالیز پاسخ دینامیکی ورق حل شده است [۲۴]. در همین حال فرکانس‌های طبیعی صفحه نیز می‌توانند با استفاده از مود شیپ‌های تولید شده محاسبه شوند [۲۵].

$$\omega_i^2=\frac{\int_0^a\int_0^b D\begin{bmatrix}\left(\frac{\partial^2\phi_i}{\partial x^2}\right)^2+\left(\frac{\partial^2\phi_i}{\partial y^2}\right)^2+2\upsilon\left(\frac{\partial^2\phi_i}{\partial x^2}\right)\\ 2\left(\frac{\partial^2\phi_i}{\partial x^2}\right)^2+2(1-\upsilon)\left(\frac{\partial^2\phi_i}{\partial x\,\partial y}\right)^2\end{bmatrix}dxdy}{\int_0^a\int_0^b \rho h\phi_i^2dxdy} \qquad (۲۵)$$

۴- شبیه سازی دینامیک مولکولی

شبیه‌سازی‌های ارائه شده در این مقاله، در طی فرآیند یکپارچه‌سازی زمانی (NVT) که مجموعه‌ای از دستگاه‌هایی است که با یک منبع تماس گرمایی دارند و دما و تعداد ذرات آن‌ها تماس دارند، استفاده می شود. دمای مورد استفاده ۳۰۰ کلوین می باشد [۲۶]. این مجموعه از الگوریتم ترموستات (NVT) نوز-هوور استفاده می کند که روشی قطعی برای ثابت نگه داشتن دمای سیستم است و به میانگین انرژی جنبشی متصل است [۲۶]. مرحله زمانی شبیه سازی MD حدود ۰/۰۰۱ پیکو ثانیه در نظر گرفته شده و تابع پتانسیل ایربو (AIREBO) برای مدل‌سازی پیوند کووالانسی بین اتم‌های کربن در اشکال مختلف کربن و هیدروکربن‌ها استفاده شده. پتانسیل ایربو در پیش بینی خواص دینامیکی، ارتعاشی و الاستیک و همچنین انرژی نانوساختارهای کربن و هیدروکربن بسیار دقیق است

[3] Newmark`s integration

[۲۷]. همچنین زمان کمتری را صرف می کند و برای شبیه‌سازی اتمی در مقیاس بزرگ مناسب است [۲۸]. در حالی که تابع پتانسیل لنارد-جونز برای مدل‌سازی پیوندهای واندروالسی بین صفحات گرافن استفاده می‌شود. پتانسیل لنارد-جونز یک مدل دقیق برای توصیف خواص اساسی برهمکنش‌های بین اتم‌ها و مولکول‌های ساده ارائه می‌کند. پتانسیل ایربو شامل سه عبارت زیر است [۲۶].

$$E=\frac{1}{2}\sum_{i}\sum_{j\neq i}\left[\mathrm{E}_{ij}^{REBO}+E_{ij}^{LJ}+\sum_{k\neq i,j}\sum_{l\neq i,j,k}E_{kijl}^{TORSION}\right] \qquad (۲۶)$$

۴-۱- میدان پتانسیل EAM

میدان پتانسیل eam اولین بار توسط داو و باسک پیشنهاد شد [۲۹- ۳۰]. این پتانسیل برای تعاملاتِ جفت بین اتم‌ها در فلزات و آلیاژها، جامدات، مایعات، گازها و پتانسیل‌های سطح مناسب بوده و این تعاملات را با استفاده از پتانسیل‌های روش اتم تعبیه شده محاسبه می‌کند. در پژوهش حاضر از این پتانسیل جهت توصیف برهمکنش‌های بین ذرات فلزی (طلا) نانوذره متحرک استفاده شده است.

۴-۲- تابع پتانسیل لئوناردجونز (lj)

لئوناردجونز پتانسیلی مناسب برای پیوندهای ضعیف واندروالسی، یا برهمکنش‌های غیرپیوندی بین ذرات تقویت گرها (نانولوله‌ی کربنی، گرافن و ...) و یک ماتریس یا جهت شبیه‌سازی یک قطره فلز روی یک سطح می توان استفاده کرد.

سبکlj/cut، پتانسیل استاندارد لئونارد-جونز را با رابطه (۲۶) محاسبه می‌کند:

$$E=4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12}-\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6}\right] \qquad r_m=2^{1/6}\sigma \qquad (۲۶)$$

۵- صحت سنجی نتایج تحلیلی با نتایج تجربی

برای صحت‌سنجی نتایج تحلیلی در این پژوهش، به بررسی نتایج پژوهش حاضر با نتایج (مقاله‌ی صیفوری و درویشی نیا) [۳] پرداخته شده است؛ با این تفاوت که مقاله ذکرشده در مورد عبور جرم متحرک بر روی ورق نازک و در مقیاس بزرگ‌تر از نانو (میلی‌متر) می‌باشد. جهت انجام این مقایسه، مقدار ضریب غیرمحلی در کد مربوطه، صفر قرار داده شده تا مقیاس میلی‌متر بدست بیاید. مطابق شکل‌های ۳ و ۴، حل تحلیلی به ترتیب با تعداد مودشیپ‌های (n) ۲، ۳ و ۴ انجام شده و همگرایی در نمودارها قابل ملاحظه است.

همان‌طور که ملاحظه می‌شود، با صفر قرار دادن ضریب غیرمحلی در تئوری الاستیسیته غیرمحلی در این پژوهش، اهمیت اثر اندازه نادیده گرفته شده و به مقیاس میلی‌متر راه یافته‌ایم. مقایسه نتایج حاصل از کد این مقاله با نتایج تجربی [۳] همگرایی مناسبی را نشان می دهد.

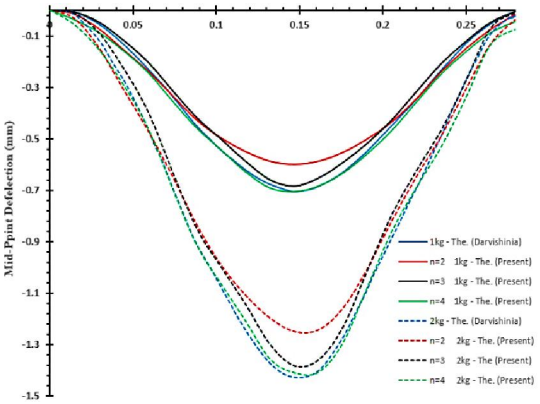

Fig. 3 Analytical results diagram for steel sheet with dimentions 500*450*1 mm^3 and moving mass with speed 1.7 m/s and two masses 1 kg & 2 kg

شکل ۳ نمودار نتایج تحلیلی برای ورق استیل با ابعاد 450*500*1 mm^3 و جرم متحرک با سرعت 1.7 m/s و دو جرم 1 kg و 2 kg

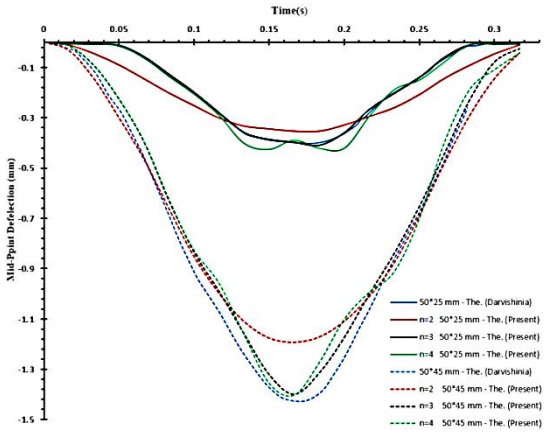

Fig. 4 Analytical results diagram for steel sheet with dimentions 500*450*1 mm^3 & 500*250*1 mm^3 and moving mass with speed 1.5 m/s & 1 m/s with masses 2 kg

شکل ۴ نمودار نتایج تحلیلی برای ورق استیل با ابعاد 500*250*1 , 450*500*1 mm^3mm^3 و جرم متحرک با سرعت 1 m/s، 1.5 m/s و جرم2 kg

۶- مقایسه نتایج تحلیلی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای مدل پیش‌فرض

بیرا تطابق نتایج تحلیلی و دینامیک مولکولی، تاریخچه جابه‌جایی نقطه مرکزی یک مدل پیش فرض در MD و مدل تحلیلی مربوط به آن به کمک نرم‌افزار متلب با یکدیگر مقایسه گردیده است. در شکل ۵ و جدول ۱ ضرایب غیرمحلی مختلفی

برای مدل پیش فرض ارائه شده و در شکل ۶ و جدول ۲ مقدار ضریب غیرمحلی مناسب برای این مدل نمایش داده شده است.

مدل پیش فرض در شبیه‌سازی‌های انجام شده توسط نرم افزار گسترده لمپس، یک ورق گرافن تک لایه با عرض ۳۰ و طول ۱۰۰ آنگستروم با شرایط مرزی چهار طرف گیردار تحت عبور نانوذره متحرک از جنس طلا با هندسه مکعب و ابعاد ۱۵ آنگستروم مکعب و سرعت ۱۰ آنگستروم بر پیکوثانیه و با فاصله‌ی ۰/۱ آنگستروم از ورق گرافن است.

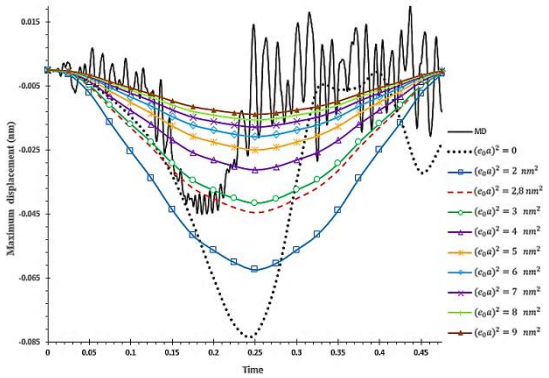

Fig. 5 Diagram of different non-local coefficients for graphene sheet with dimensions 3*10 nm^2

شکل ۵ نمودار ضرایب غیرمحلی مختلف برای ورق گرافن با ابعاد ۱۰*۳ nm^2

جدول ۱ ضرایب غیرمحلی مختلف برای ورق گرافن با ابعاد ۱۰*۳ nm^2

Table 1 Different non-local coefficients for graphene sheets with dimensions 10*3 nm^2

$(e_0a)^2$ nm^2	ماکزیمم دفلکشن ورق گرافن (nm)
MD	-۰/۴۳۸۸۰
۰	-۰/۰۸۲۵۵
۱	-۰/۱۲۴۸۳
۲	-۰/۰۶۲۴۱
۲/۸	-۰/۰۴۴۵۸
۳	-۰/۰۴۱۶۱
۴	-۰/۰۳۱۲۱
۵	-۰/۰۲۴۹۷
۶	-۰/۰۲۰۸
۷	-۰/۰۱۷۸۳
۸	-۰/۰۱۵۶
۹	-۰/۰۱۳۸۷

مطابق جدول ۲ و شکل ۶ ورق پیش‌فرض با ابعاد ۳ در ۱۰ نانومتر مربع، در حل تحلیلی با ضریب غیرمحلی ۲/۸ نانومتر مربع بیشترین تطابق با نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی را دارد.

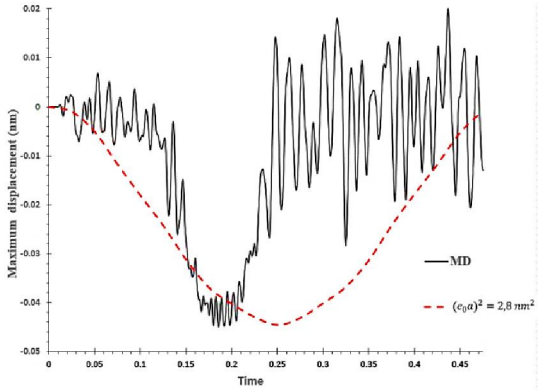

Fig. 6 Proposed non-local coefficient for graphene sheets with dimensions 10*3 nm^2

شکل ۶ ضریب غیرمحلی پیشنهادی برای ورق گرافن با ابعاد 10*3 nm^2

جدول ۲ ضرایب غیرمحلی مختلف برای ورق گرافن با ابعاد ۱۰*۳ nm^2

Table 2 Different non-local coefficients for graphene sheets with dimensions 10*3 nm^2

$(e_0a)^2$ nm^2	بیشترین جابه‌جایی ورق گرافن (نانومتر)
VMD	-۰/۰۴۳۸۸
۲/۸	-۰/۰۴۴۵۸

۶-۱- اثر هندسه نانوذرات در حال حرکت بر روی ورق گرافن تک‌لایه

برای بررسی تأثیر شکل هندسی نانوذره متحرک بر روی پاسخ دینامیکی ورق گرافن با ابعاد ۳۰×۱۰۰ آنگستروم مربع، نانوذره به‌صورت ذرات مکعبی، کروی و تیغه با جرم یکسان و حجم‌های مختلف با سرعت عبور ۱۰ آنگستروم بر پیکوثانیه مطابق شکل ۷ مدل شده است.

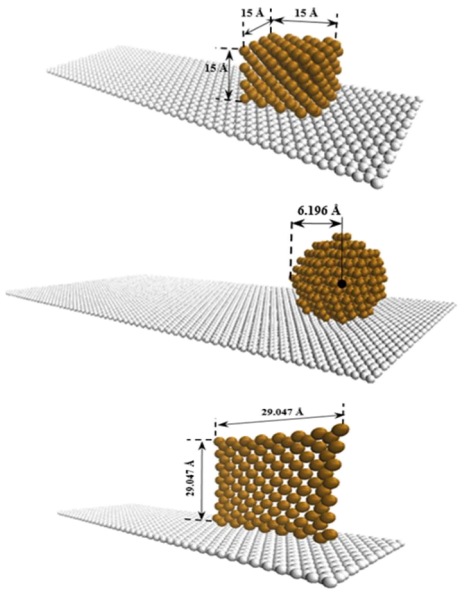

Fig. 7 Md simulation for moving load with cubic, sphere and blade geometry

شکل ۷ شبیه سازی دینامیک ملکوای بار متحرک با هندسه‌های مکعب، کره و تیغه

جدول ۳ بیشترین جابه‌جایی و شکل ۸ تاریخچه زمانی نقطه مرکزی ورق را برای اشکال مختلف نانوذره متحرک نشان می‌دهد.

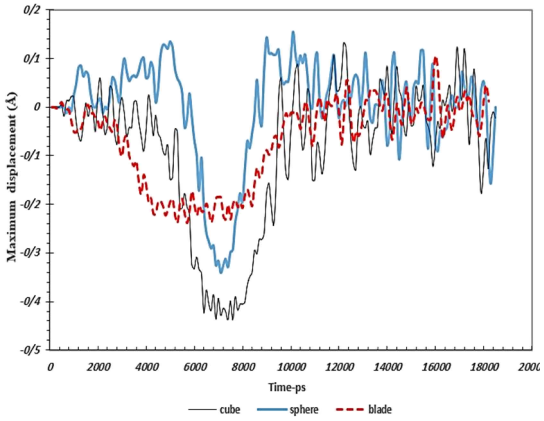

Fig. 8 Graph of the time history of the central point displacement of the graphene sheet under the effect of nanoparticles with different geometry and the same mass

شکل ۸ نمودار تاریخچه زمانی جابه‌جایی نقطه مرکزی ورق گرافن تحت اثر نانوذره با هندسه متفاوت و جرم یکسان

جدول ۳ بیشترین خیز عرضی ورق گرافن تحت عبور نانوذره با هندسه‌ی متفاوت و جرم یکسان

Table 3 The maximum lateral deflection of the graphene sheet under the passage of nanoparticles with different geometry and the same mass

هندسه	بیشترین جابه‌جایی (آنگستروم)
مکعب	-۰٫۴۳۸۸۲
کره	-۰٫۳۸۳۸۴
تیغه	-۰٫۳۴۷۸۹۸

همان‌طور که از شکل ۸ و جدول ۳ مشاهده می‌گردد هندسه مکعب بیشترین جابه‌جایی و تیغه کمترین جابه‌جایی را داشته است و این بعلت هندسه سه جرم می‌باشد که در حالت مکعب سطح تماس با ورق گرافن در طول مسیر بیشتر است.

۶-۲- شرایط مرزی مختلف بر جابه‌جایی نقطه مرکزگرافن

در این قسمت اثر شرایط مرزی بر پاسخ دینامیکی ورق گرافن یک لایه ۳۰×۱۰۰ آنگستروم مربع تحت حرکت نانوذره با هندسه مکعبی نیز بررسی شده است. شرایط مرزی در نظر گرفته شده در جدول ۴ و در شکل ۹ که با حروف C و F نمایش داده شده‌اند، به ترتیب شرایط مرزی کلمپ و آزاد می‌باشند. در این راستا ۳ شرط مرزی CCCC (حالت شبیه‌سازی پیش‌فرض)، FCFC، CFCF، در نظر گرفته شده‌اند و طریقه‌ی نام‌گذاری شرایط مرزی، ساعتگرد و از مرز مجاور با جرم متحرک قبل از شروع حرکت انتخاب شده است.

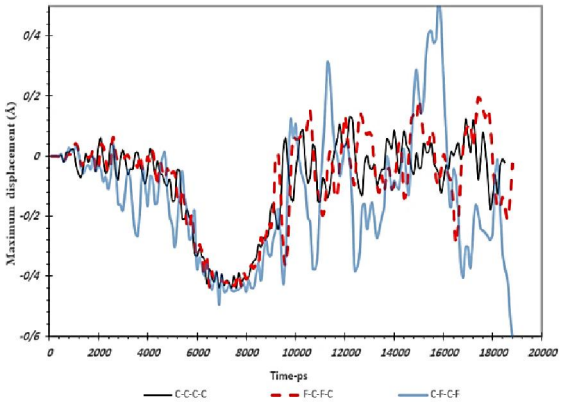

Fig. 9 Time history diagram of the central point displacement of the graphene sheet with different boundary conditions under the passage of the moving mass

شکل ۹ نمودار تاریخچه زمانی جابه‌جایی نقطه مرکزی ورق گرافن با شرایط مرزی مختلف تحت عبور جرم متحرک

جدول ۴ بیشترین جابه‌جایی عرضی ورق گرافن با شرایط مرزی مختلف تحت عبور نانوذره

Table 4 Maximum transverse displacement of graphene sheet with boundary conditions different under the passage of nanoparticles

شرایط مرزی	بیشترین جابه‌جایی (آنگستروم)
C-C-C-C	-۰٫۴۳۸۸۲
F-C-F-C	-۰٫۴۳۵۳۴
C-F-C-F	-۰٫۴۹۵۷۰

مطابق جدول ۴ و شکل ۹ در دو حالت C-C-C-C و F-C-F-C جابه‌جایی نقطه مرکزی ورق گرافن تقریباً مشابه می‌باشد. در حالت C-F-C-F نسبت به حالت F-C-F-C، به دلیل شرایط مرزی آزاد در طول ورق نسبت به عرض آن، شاهد جابه جایی بیشتری در ورق گرافن می باشیم. به عبارتی هر چه شرایط مرزی مقیدتر باشد، جابه جایی مرکز ورق کاهش می یابد.

۷- جمع بندی

در این پژوهش، به کمک تئوری الاستیسیته غیر خطی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به کمک نرم‌افزار لمپس (LAMMPS)، جهت بررسی تأثیر نانوذرات متحرک بر روی سطح ورق گرافن بهره گرفته شده است. در این راستا جهت تطابق دو روش تحلیلی و عددی، یک ضریب غیر محلی برای مدلی از ورق گرافن با ابعاد ۳۰*۱۰۰ آنگستروم مربع و نانوذره از جنس طلا با ابعاد ۱۵ آنگستروم مکعب با سرعت عبور ۱۰ آنگستروم بر پیکوثانیه پیشنهاد شده است و جهت صحت سنجی روش تحلیلی به کمک مقاله [۲۳] صحت نتایج با ورق گرافن در دو ابعاد مختلف نشان داده شده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای ورق یک لایه گرافن با نتایج حاصل از

تئوری الاستیسیته غیر محلی مربوط به آن، مقایسه شده و برای هر یک از ابعاد مختلف ورق، مقدار پارامتر غیر محلی مناسب پیشنهاد شده است. تاریخچه زمان جابه جایی ورق گرافن با سه نانو ذره کره، تیغه و مکعب با انرژی جنبشی یکسان نشان می دهد که نانوذرات مکعب و کره نسبت به تیغه پایدارتر هستند. به طور خلاصه، نانو ذره مکعب مسبب بیشترین جابه جایی و پایداری نسبت به نانوذرات کره و تیغه است.

۸- مراجع

[1] Y. Liu, B. Xie, Z. Zhang, Q. Zheng, Z. Xu, Mechanical properties of graphene papers, J. Mech. Phys. Solids 60 (4) (2012) 591–605.

[2] Seifoori, Sajjad, M. Mirzaei, and H. Afjoland. "Experimental and FE analysis for accurate measurement of deflection in CFRP and GFRP laminates under bending." *Measurement* 153 (2020): 107445

[3] S. Seifoori, A. Mahdian Parrany, and S. Darvishinia, "Experimental studies on the dynamic response of thin rectangular plates subjected to moving mass," J. Vib. Control., 27 (5-6), 685-697 (2020).

[4] I. Esen, "Dynamics of size-dependant Timoshenko micro beams subjected to moving loads," Int. J. Mech. Sci., 175, 105501 (2020).

[5] Seifoori S, Liaghat G. Low velocity impact on Timoshenko nanobeam using a nonlocal elasticity theory. *Modares Mechanical Engineering* 2013; 13 (8) :151-160. (in Persian فارسی)

[6] C. T. Sun, and H. Zhang, "Size-dependent elastic moduli of platelike nanomaterials," J. Appl. Phys., 93, 1212-1218 (2003).

[7] P. Sharma, S. Ganti, and N. Bhate, "Effect of surfaces on the size-dependent elastic state of nano-inhomogeneities," Appl. Phys. Lett., 82, 535-538 (2003).

[8] Seifoori S, Liaghat G. Impact of a nanoparticle on Euler–Bernoulli nanobeam using a nonlocal elasticity model. *Modares Mechanical Engineering* 2013; 13 (3) :37-44.

[9] S. C. Pradhan, and J. K. Phadikar, "Nonlocal elasticity theory for vibration of nanoplates," 325 (1-2), 206-223 (2009).

[10] S.H. Hashemi, H.B. Khaniki, Dynamic response of multiple nanobeam system under a moving nanoparticle, Alexandria Eng. J. 57 (1) (2018) 343–356.

[11] M.R. Nami, M. Janghorban, Dynamic analysis of isotropic nano plates subjected to moving load using state-space method based on nonlocal second order plate theory, J. Mech. Sci. Technol. 29 (6) (2015) 2423–2426.

[12] H.B. Li, X. Wang, Nonlinear dynamic characteristics of graphene/piezoelectric laminated films in sensing moving loads, Sens. Actuators, A 238 (2016) 80–94.

[13] Y. Zhang, K. M. Liew, and D. Hui, D. "Characterizing nonlinear vibration behavior of bilayer graphene thin films," Compos. B. Eng., 145, 197-205 (2018).

[14] M. Şimşek, M. Aydın, H. H. Yurtcu, and J. N. Reddy, "Size-dependent vibration of a microplate under the action of a moving load based on the modified couple stress theory," Acta Mech., 226 (11), 3807-3822 (2015).

[15] Seifoori, Sajjad, R. Izadi, G. H. Liaghat, and Ahmad Mahdian Parrany. "An experimental study on damage intensity in composite plates subjected to low-velocity impacts." Polymer Testing 93 (2021): 106887.

[16] S. Seifoori, and G. H. Liaghat, "Low velocity impact of a nanoparticle on nanobeams by using a nonlocal elasticity model and explicit finite element modeling," Int. J. Mech. Sci., 69, 85-93 .(۲۰۱۳)

[17] Seifoori, Sajjad, Fatemeh Abbaspour, and Ehsan Zamani. "Molecular dynamics simulation of impact behavior in multi-walled carbon nanotubes." *Superlattices and Microstructures* 140 (2020): 106447.

[18] D. K. Butler, "Near-Surface Geophysics," Society of Exploration Geophysicists (2005).

[19] P. Plympton, "National status report: Home energy rating systems and energy-efficient mortgages (No. NREL/TP-550-27635)," National Renewable Energy Lab., Golden, CO (US), (2000).

[20] S. Seifoori, M.J. Khoshgoftar, Impact and vibration response of multi-layered graphene sheets under different striker based on the analytical model and molecular dynamics, Super Lattices and Microst. 135 (2019) 106249.

[21] S. Seifoori, and H. Hajabdollahi, "Impact behavior of single-layered graphene sheets based on analytical model and molecular dynamics simulation," Appl. Surf. Sci., 351, 565-572 (2015).

[22] A. C. Eringen, "On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves," J. Appl. Phys., 54 (9), 4703-4710 (1983).

[23] A. C. Eringen, and D. G. B. Edelen, "On nonlocal elasticity," Int. J. Eng. Sci., 10 (3), 233-248 (1972).

[24] E. Chen, M. Li, N. Ferguson, and Y. Lu, "An adaptive higher order finite element model and modal energy for the vibration of a traveling string," J. VIB. Control., 25 (5), 996-1007 (2019).

[25] S. S. Rao, "Vibration of Continuous Systems," John Wiley and Sons, (2019).

[26] LAMMPS: Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator, http:// lammps.sandia.gov, 2017.

[27] H.N. Pishkenari, P.G. Ghanbari, Vibrational properties of C60: a comparison among different inter-atomic potentials, Comput. Mater. Sci. 122 (2016) 38–45.

[28] D.W. Brenner, The art and science of an analytic potential, Phys. Stat. Sol. (b) 217 (1) (2000) 23–40.

[29] M. S. Daw, and M. I. Baskes, "Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals," Phys. Rev. B 29, 6443-53 (1984).

[30] Seifoori, Sajjad, F. Ebrahimi, Ahmad Mahdian Parrany, and G. H. Liaghat. "Dynamic analysis of single–layered graphene sheet subjected to a moving nanoparticle: A molecular dynamics study." Materials Science and Engineering: B 285 (2022): 115956.