



تشخیص آسیب در صفحه گرافن در اثر بارگذاری ضربه‌ای

سجاد سیفوری^۱ و *، مهدی محمودی میمند^۲، علی اکبر مجیدی جیرندهی^۳

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

۲- دانشیار، دانشکده فنی کاسپین، پردیس فنی، دانشگاه تهران، رضوانشهر، گیلان، ایران

۳- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه ولی عصر (عج)، رفسنجان، ایران

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

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

چکیده

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی

دریافت: ۱۵ آبان ۱۴۰۱

داوری اولیه: ۲۹ آبان ۱۴۰۱

پذیرش: ۱۰ اسفند ۱۴۰۱

کلیدواژگان:

گرافن

ضربه

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

ورق‌های گرافن در طول فرایند ساخت و عمر کاربردی خود، تحت بارها و حوادث متفاوتی نظیر برخورد جرم‌ها یا بارهای مختلف قرار می‌گیرند که سبب تغییر شکل، جابه‌جایی و ارتعاشاتی در اتم‌های کربن و بعضاً پارگی ورق گرافن می‌شوند. در این مقاله اثر پارامترهای ضربه‌زننده و ورق گرافن بر الگوی شکست ورق گرافن بررسی شده است. صفحات گرافن با ابعاد متفاوت و ضربه‌زننده در شکل‌های مختلف انتخاب گردیده است و ابزار جمع‌آوری داده‌ها نرم‌افزار لمپس و روش تحلیل بر اساس روش دینامیک مولکولی می‌باشد. شبیه‌سازی توسط نرم‌افزار لمپس که روشی بسیار دقیق و نزدیک به شرایط آزمایشگاهی می‌باشد، بر اساس گام زمان و انحراف نقطه مرکزی صفحه صورت گرفته است و تأثیر برخی از پارامترها مانند جرم، تعداد لایه‌های ورق گرافن، شکل‌های مختلفی شامل مکعب، کره و مخروط و همچنین ابعاد متفاوت ورق گرافن بر روی پارگی ورق بررسی شده است. با بررسی تأثیر هندسه‌های مختلف ضربه‌زننده (کره و مکعبی و مخروطی) مشاهده شد که ورق گرافن با برخورد ضربه‌زننده کره‌ی بیشترین جابه‌جایی اتم‌های میانی را داشته است و ضربه‌زننده مخروطی سبب بیشترین تعداد پیوند شکسته شده در ورق گرافن، نسبت به دو ضربه‌زننده دیگر می‌گردد. با افزایش جرم ضربه‌زننده کره‌ی و افزایش ابعاد ورق گرافن، تعداد پیوندهای شکسته شده بیشتر شده درحالی‌که سرعت شکسته شدن پیوندها با افزایش جرم ضربه‌زننده کمتر شده است؛ همچنین با افزایش ابعاد ورق گرافن، سرعت شکستن پیوندها بیشتر شده است. علاوه بر این با افزایش تعداد لایه‌ها، مقدار جابه‌جایی اتم‌های میانی صفحه کمتر و سرعت لازم برای شکستن پیوندها بیشتر شده است.

Damage detection on the graphene sheet due to impact loading

Sajjad Seifoori^{1, 2*}, Mahdi Mahmoudi-Meymand¹, Ali Akbar Majidi-Jirandehi³

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

2- Caspian Faculty of Engineering, College of Engineering, University of Tehran, Rezvanshahr, Gilan, Iran

3- Department of Mechanical Engineering, Payame Noor University, Tehran, Iran

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

Article Information

Original Research Paper

Received: 6 November 2022

First Decision: 20 November 2022

Accepted: 1 March 2023

Keywords:

Graphene

Impact

Molecular dynamics simulation

Abstract

Graphene sheets are subjected to various loads and events during the manufacturing process and their functional life, such as collisions with different masses or loads, which cause deformation, displacement, and vibrations in carbon atoms and sometimes rupture of graphene sheets. Graphene sheets with different lengths and impactors in different forms of selection and data collection tools are Lamps and Molecular Dynamics software. Simulation by Lamps software, which is a very accurate method and close to laboratory conditions; Based on the time step and the deviation of the central point of the page; The effect of some parameters such as mass, number of layers of graphene sheet, different shapes including cube, sphere and cone as well as different lengths of graphene sheet on sheet tearing was investigated. Therefore, with the increase in the mass of the spherical impactor and the increase in the length of the graphene sheet, the number of broken bonds increased, while the speed of breaking the bonds decreased with the increase in the mass of the impactor, and with the increase in the length of the graphene sheet, the speed of breaking the bonds increased. Then, by examining the effect of different impactor geometries (spherical, cubic, and conical), it was observed that the surface during the spherical impactor has the most displacement of the middle atoms of the plane and the conical impactor has the highest number of broken bonds compared to the two impactors. also with the increase in the number of layers, the amount of displacement of the atoms in the middle of the plane is less and the speed required to break the bonds has increased.

Please cite this article using:

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

S. Seifoori, M. Mahmoudi Meymand, A.A. Majidi Jirandehi, Damage detection on the graphene sheet due to impact loading, Iranian Journal of Manufacturing Engineering, Vol. 9, No. 8, pp. 26- 33, 2022 (in Persian). <https://www.doi.org/10.22034/IJME.2023.368764.1707>

۱- مقدمه

برخی از فیلم‌های گرافن مستطیلی یک لایه با چهار لبه بسته شده پرداختند. صیغوری و حاج عبداللهی [۱۳] به بررسی رفتار ضربه بر ورق‌های گرافن تک لایه بر اساس مدل تحلیلی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از مدل جرم-فنر برای پیش‌بینی حداکثر انحراف دینامیکی ورق گرافن تک لایه با اعمال ضربه قبل از شکستن پرداختند. صیغوری [۱۴] به تحلیل دینامیک مولکولی رفتار ضربه‌ای نانولوله‌های کربنی پرداخت و تحلیل دینامیکی اثر یک نانوذره روی نانولوله‌های کربنی بر اساس دو درجه مدل آزادی را بررسی کرد. صیغوری و خوش‌گفتار [۱۵] به بررسی ارتعاشات ورق‌های گرافن چندلایه تحت پرتابه مختلف بر اساس مدل تحلیلی و دینامیک مولکولی و همچنین بررسی ضربه پرتابه با مدل جرم و فنر سه درجه آزادی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پرداختند. صیغوری و همکاران [۱۶] به مطالعه اثر ضربه نانوذرات بر نانولوله‌های کربنی دوجداره با استفاده از تئوری غیرمحللی الاستیسیته و میزان تغییر شکل دینامیکی وسط نانوتیر دو جداره با افزایش سرعت برخورد نانوذره پرداختند.

۲- نرم‌افزار دینامیک مولکولی^۱

در این پژوهش از نرم‌افزار دینامیک مولکولی جهت ساخت صفحه گرافن استفاده و برای نمایش نتیجه حاصل، از نرم‌افزار لمپس و ذخیره تصویر بهره گرفته شده است.

جهت جلوگیری از خطای انسانی و بهبود سرعت زمان حل مسائل، این مبحث توسط اتصال دو نرم‌افزار لمپس و متلب، به‌صورت کد نویسی انجام شده است.

۲-۱- نرم‌افزار لمپس

لمپس یک نرم‌افزار شبیه‌سازی با زبان برنامه‌نویسی ++C می‌باشد که بر اساس نظریه دینامیک مولکولی کار می‌کند. این نرم‌افزار با در اختیار داشتن میدان نیروهای متنوع، فراهم‌کننده بستری مناسب برای شبیه‌سازی نمونه‌های مختلفی از سیستم‌های اتمی و مولکولی ساده گرفته تا انواع پروتئین‌ها و سیستم‌های زیستی می‌باشد. از مهم‌ترین ویژگی‌های این نرم‌افزار به شبیه‌سازی سیستم‌های ذره شامل سیستم‌های پرئودیک (کریستال‌ها)، ذرات دانه درشت، مولکول‌های ارگانیک، فلزات، پلیمرهای DNA، پروتئین، ذرات کروی با اندازه‌های معین و ... می‌توان اشاره کرد.

در این مقاله جهت تدوین یافته‌ها، جابه‌جایی اتم‌های میانی صفحه که تحت تأثیر مستقیم ضربه‌زننده قرار دارند، بررسی شده‌اند. جابه‌جایی اتم‌های میانی به دلیل تغییر اندازه سطح

با توجه به سخت و هزینه‌بر بودن انجام آزمایش‌های تجربی برای بررسی رفتار مکانیکی نانوصفحه‌ها، غالباً روش‌های تحلیلی و استفاده از مدل‌های تئوری ترجیح داده می‌شوند؛ البته باید در نظر داشت که تئوری‌های کلاسیک مکانیک محیط پیوسته، در پیش‌بینی این رفتارها ناتوان بوده و در تعیین رفتار ارتعاشی و استاتیکی ذرات در مقیاس نانو، قابل اعتماد نیستند. این نقص، پژوهشگران را بر آن داشته تا با ارائه تئوری‌های اصلاح‌شده، به رفع این مشکل بپردازند. تئوری الاستیسیته غیرمحللی، از جمله این تئوری‌ها است که برای اولین بار توسط ارینگن [۳-۱] ارائه شد و بعدها در بررسی انتشار امواج تنش در کامپوزیت‌ها، خمش، کمانش، شکست و ارتعاشات آزاد و واداشته نانولوله‌های کربنی و ورق‌های گرافن مورد استفاده قرار گرفت [۵، ۴]. تفاوت اصلی بین تئوری‌های کلاسیک و غیرموضعی الاستیسیته، در تعریف تنش است. در تئوری‌های کلاسیک، تنش هر نقطه تنها تابعی از میدان کرنش همان نقطه است؛ در حالی که در تئوری‌های غیرمحللی، حالت تنش در هر نقطه نه تنها تابع میدان کرنش آن نقطه، بلکه تابع کرنش همه نقاط محیط پیوسته در نظر گرفته می‌شود. نیروی پیوندهای کوالانت نیز در نظر گرفته می‌شود؛ اما با وجود صرف‌نظر کردن از نیروهای الکتروستاتیک، همچنان دقت محاسبات مناسب است. این قبیل تئوری‌ها دربرگیرنده اطلاعاتی از نیروهای مابین اتم‌ها و اندازه طول‌های داخلی (اثر مقیاس کوچک) که در روابط ساختاری به‌صورت پارامترهای مادی تعریف می‌شوند، هستند. بررسی اثر ضربه بر روی سازه‌ها مورد توجه محققین زیادی قرار گرفته و در سالیان اخیر، پژوهش‌های فراوانی در زمینه بررسی اثر ضربه بر ساختارهای متفاوت، انجام شده است [۹-۶]. این بار ضربه‌ای که ابزار اعمال آن می‌تواند یک نانوذره باشد، سبب تغییر شکل نانوصفحه شده و همین امر، تغییر خواص آن را در پی خواهد داشت. از این‌رو، مطالعه رفتار نانو صفحات کربنی در مقابل بارهای ضربه‌ای ضروری به نظر می‌رسد. صیغوری و لیاقت به مدل‌سازی و بررسی یک نانوذره تحت ضربه کم‌سرعت روی نانوتیرهای تک لایه با استفاده از تئوری غیرمحللی الاستیسیته و روش المان محدود [۱۰] و همچنین تحلیل و بررسی ضربه کم‌سرعت نانوتیر اویلر-برنولی با استفاده از تئوری غیرمحللی الاستیسیته [۱۱] پرداختند و رفتار غیرمحللی بر روی ترک‌های دینامیکی با استفاده از تئوری غیرمحللی و ماکزیمم تغییر شکل وسط نانوتیر را ارائه کردند. وانگ و همکاران [۱۲] با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی، به بررسی منحنی‌های بار-جابه‌جایی، ویژگی‌های الاستیک و رفتار مکانیکی

^۱ VMD

با توجه به جدول‌های ۱ و ۲ مشاهده می‌گردد که با افزایش جرم ضربه‌زننده، سرعت لازم برای ایجاد آسیب در صفحه و میزان جابه‌جایی اتم‌های میانی صفحه کمتر شده است. دلیل این مسئله را می‌توان افزایش جرم ضربه‌زننده دانست که موجب افزایش انرژی جنبشی و همچنین نیروی تماسی وارد به صفحه و همچنین افزایش تعداد اتم‌های درگیر شده در برخورد ضربه‌زننده به صفحه می‌گردد؛ همچنین سرعت لازم برای ایجاد آسیب در صفحات آرمچیر و زیگزاگ به یکدیگر نزدیک بوده و علی‌رغم بیشتر بودن سرعت آسیب در صفحه آرمچیر نسبت به زیگزاگ در بیشتر موارد، الگوی خاصی قابل پیش‌بینی نمی‌باشد.

در ادامه مطابق جدول‌های ۳ و ۴، شکل‌های ۱ و ۲ با توجه به لزوم ثابت بودن پارامترهای متغیر به‌جز جرم، سرعت یکسانی که در آن پیوند اتم‌های ورق گرافن دچار شکست شده است را در نظر گرفته و شبیه‌سازی‌ها انجام شده است.

جدول ۳ بیشترین جابه‌جایی صفحه ۵۰ در ۵۰ آنگستروم مربع آرمچیر تحت تأثیر ضربه‌زننده کروی با سرعت ثابت ۱۵ ($\text{\AA}/ps$) همراه با افزایش شعاع ضربه‌زننده

Table 3 Maximum displacement of the 50x50 angstrom square armchair under the influence of a spherical impactor with a constant speed of $15\text{\AA}/ps$ with increasing impactor radius

تعداد پیوندهای شکسته شده	بیشترین جابه‌جایی (\AA)	شعاع ضربه‌زننده (\AA)
8	-1.6	10
11	-1.9	11
14	-2.1	12
15	-2.6	13
15	-2.7	14
16	-2.8	15

جدول ۴ بیشترین جابه‌جایی صفحه ۵۰ در ۵۰ آنگستروم مربع زیگزاگ تحت تأثیر ضربه‌زننده کروی با سرعت ثابت ۱۶ ($\text{\AA}/ps$) همراه با افزایش شعاع ضربه‌زننده

Table 4 Maximum displacement of the 50x50 angstrom square zigzag under the influence of a spherical impactor with a constant speed of $16\text{\AA}/ps$ with increasing impactor radius

تعداد پیوندهای شکسته شده	بیشترین جابه‌جایی (\AA)	شعاع ضربه‌زننده (\AA)
9	-2.0	10
11	-2.2	11
12	-2.4	12
12	-2.5	13
13	-2.6	14
15	-2.9	15

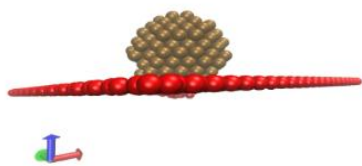


Fig. 1 Impact of spherical impactor with graphene sheet

شکل ۱ برخورد ضربه‌زننده کروی با ورق گرافن

درگیر با ضربه‌زننده، همراه با تغییر حجم و جرم ضربه‌زننده انتخاب شده است و با توجه به اینکه ضربه در مرکز صفحه اعمال می‌شود، تعداد ۶ اتم که با فاصله‌ای به اندازه یک پیوند از مرکز صفحه قرار دارند، انتخاب شده و در ادامه مقدار میانگین جابه‌جایی این ۶ اتم تحت عنوان جابه‌جایی اتم‌های میانی صفحه در نظر گرفته شده است.

۳- تأثیر افزایش جرم ضربه‌زننده بر روی ورق گرافن

جرم ضربه‌زننده وابسته به حجم و چگالی آن است. نظر به اینکه جنس ضربه‌زننده از نانوذره طلا می‌باشد و چگالی آن یک مقدار ثابت است، برای تغییر جرم، پارامترهای وابسته به حجم آن تغییر داده شده است. برای بررسی این قسمت، صفحه گرافن ۵۰ در ۵۰ آنگستروم مربع آرمچیر و زیگزاگ به‌عنوان صفحه ثابت و ضربه‌زننده به‌صورت کروی در نظر گرفته شده است؛ در نتیجه برای تغییر جرم، شعاع ضربه‌زننده از ۱۰ تا ۱۵ آنگستروم تغییر داده شده است.

مطابق جدول‌های ۱ و ۲ با تغییر جرم ضربه‌زننده (تغییر شعاع ضربه‌زننده)، ابتدا سرعتی که در آن اولین شکست در صفحه گرافن رخ داده است، یافته شده است سپس بیشترین جابه‌جایی اتم‌های میانی آن و تعداد پیوندهای شکسته شده، طی برخورد ضربه‌زننده به دست آمده است.

جدول ۱ اولین سرعت شکست در صفحه ۵۰ در ۵۰ آنگستروم مربع آرمچیر با افزایش شعاع ضربه‌زننده

Table 1 The first failure speed in the 50x50 angstrom square armature plate with increasing impactor radius

تعداد پیوندهای شکسته شده	بیشترین جابه‌جایی (\AA)	سرعت	شعاع ضربه‌زننده (\AA)
1	-6.3	6.5	10
1	-5.9	6.1	11
1	-4.5	5	12
1	-4.7	5.3	13
1	-3.3	4.6	14
1	-1.6	4	15

جدول ۲ اولین سرعت شکست در صفحه ۵۰ در ۵۰ آنگستروم مربع زیگزاگ با افزایش شعاع ضربه‌زننده

Table 2 The first failure speed in the 50x50 angstrom square zigzag plate with increasing impactor radius

تعداد پیوندهای شکسته شده	بیشترین جابه‌جایی (\AA)	سرعت	شعاع ضربه‌زننده (\AA)
1	-6.3	5.8	10
1	-6.2	6	11
1	-4.9	5.1	12
1	-2.6	4.2	13
1	-2.9	4.4	14
1	-2.3	4.4	15

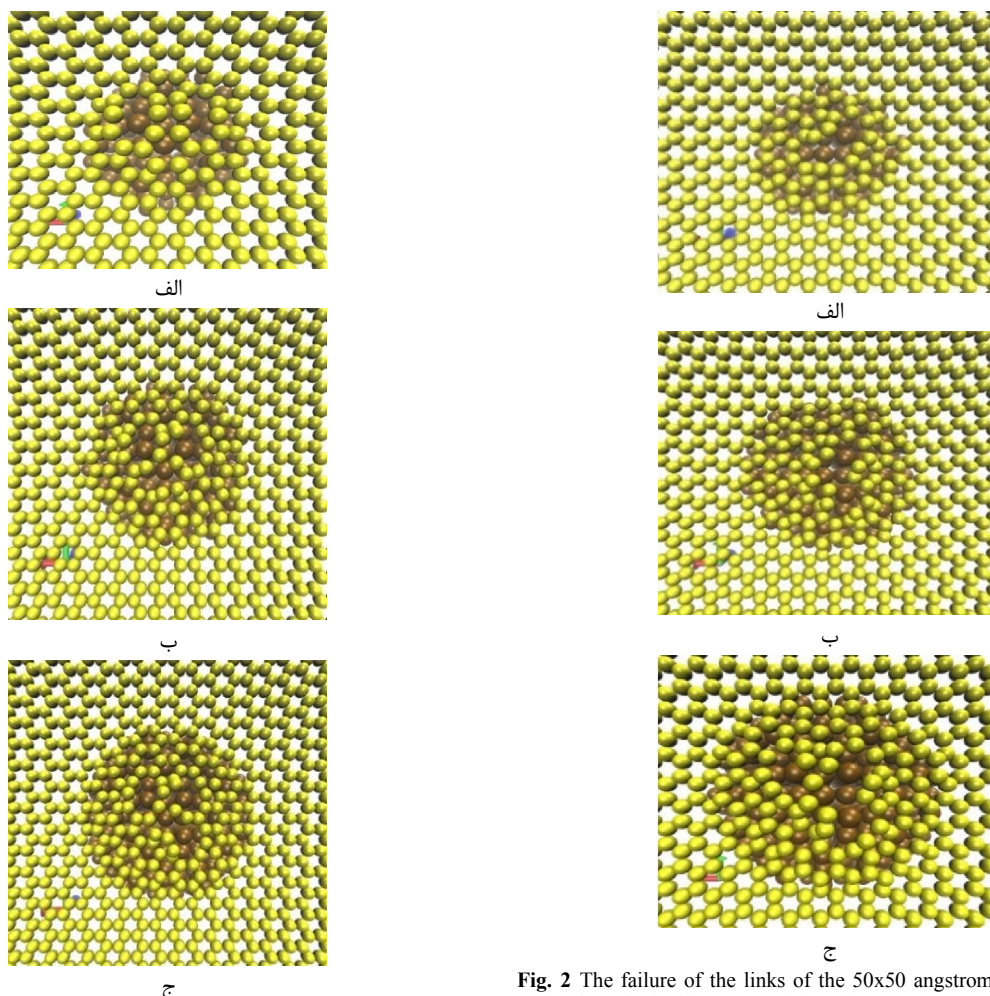


Fig. 2 The failure of the links of the 50x50 angstrom square armchair under the spherical impactor with radii: a) 10 angstrom b) 12 angstrom c) 14 angstrom

شکل ۲ شکست پیوندهای صفحه ۵۰ در ۵۰ آنگستروم مربع آرمچیر تحت ضربه‌زننده کروی به شعاع‌های: الف) ۱۰ آنگستروم ب) ۱۲ آنگستروم ج) ۱۴ آنگستروم

Fig. 3 The failure of the links of the 50x50 angstrom square zigzag under the spherical impactor with radii: a) 10 angstrom b) 12 angstrom c) 14 angstrom

شکل ۳ شکست پیوندهای صفحه ۵۰ در ۵۰ آنگستروم مربع زیگزاگ تحت ضربه‌زننده کروی به شعاع‌های: الف) ۱۰ آنگستروم ب) ۱۲ آنگستروم ج) ۱۴ آنگستروم

۳-۱- تأثیر نوع ضربه‌زننده بر تعداد پیوندهای شکسته شده صفحه و میزان جابه‌جایی اتم‌های میانی صفحه

در این قسمت با در نظر گرفتن جرم و سرعت ثابت برای ضربه‌زننده، با تغییر نوع ضربه‌زننده مطابق شکل ۴، میزان جابه‌جایی اتم‌های میانی و تعداد پیوندهای شکسته شده بررسی شده است.

مطابق جدول‌های ۵ و ۶ صفحه گرافن به کار برده شده در این شبیه‌سازی از نوع ۵۰ در ۵۰ آنگستروم مربع نوع آرمچیر و زیگزاگ بوده که سرعت ۲۵ آنگستروم بر پیکوثانیه به‌عنوان سرعت ثابت ضربه‌زننده در نظر گرفته شده است. انتخاب این

همان‌طور که از جدول‌های ۳ و ۴ مشخص است، شبیه‌سازی‌ها نشان می‌دهد با ثابت بودن سرعت شکست در صفحه ۵۰ در ۵۰ آنگستروم مربع آرمچیر و زیگزاگ، با افزایش جرم ضربه‌زننده مقدار جابه‌جایی اتم‌های میانی صفحه همراه تعداد پیوندهای جدا شده افزایش یافته است. علت این افزایش را می‌توان در افزایش انرژی جنبشی ضربه‌زننده و همچنین افزایش تعداد اتم‌های درگیر به دلیل هندسه کروی ضربه‌زننده، در ضربه دانست. همچنین مشاهده شد که برای صفحه آرمچیر پس از برخورد ضربه‌زننده کروی، الگوی شکست در یک خط گسترش پیدا کرده است درحالی‌که برای صفحه زیگزاگ الگوی شکست به‌صورت نقطه‌ای و متراکم رخ داده است.

جدول ۶ بیشترین جابه‌جایی اتم‌های میانی صفحه ۵۰ در ۵۰ (Å)² زیگزاگ با سرعت ۲۵ (Å/ps) تحت ضربه‌زنده‌های مختلف

Table 6 The maximum displacement of the middle atoms of the 50x50 angstrom square zigzag with a speed of 25 Å/ps under different impactors

نوع ضربه‌زنده	بیشترین جابه‌جایی (Å)	تعداد پیوندهای شکسته شده
کروی	-2.31034	14
مکعبی	-0.71173	9
مخروطی	-1.97595	15

با توجه به جدول‌های ۵ و ۶ مشاهده می‌شود که بیشترین میزان جابه‌جایی اتم‌های میانی صفحه تحت سرعت ثابت ضربه‌زنده، به وسیله ضربه‌زنده کروی و کمترین میزان جابه‌جایی توسط ضربه‌زنده مکعبی رخ داده است؛ همچنین بیشترین تعداد پیوندهای شکسته شده در صفحه متعلق به ضربه‌زنده مخروطی است. این مسئله با افزایش سطح درگیر شده توسط این دو ضربه‌زنده و مقدار تمرکز نیرو در ضربه‌زنده و ایجاد بیشترین تمرکز تنش مرتبط است. به همین جهت کمترین سرعت لازم جهت ایجاد شکست در پیوندهای صفحه، متعلق به ضربه‌زنده مخروطی است که تمرکز نیروی بیشتری به همراه سطح درگیر کمتری دارد اما جابه‌جایی اتم‌های میانی آن نسبت به ضربه‌زنده کروی کمتر است.

۴- تأثیر تغییر ابعاد ورق گرافن

برای بررسی تأثیر تغییر ابعاد ورق گرافن، اندازه‌های متفاوت از ورق گرافن مطابق شکل ۵، در دو شکل آرمچیر و زیگزاگ، تحت یک ضربه‌زنده کروی با جرم (به شعاع ۱۰ آنگستروم) و سرعت ثابت شبیه‌سازی شده است.

برای انتخاب سرعت ثابتی که شکست در شش صفحه شبیه‌سازی شده رخ داده است، ابتدا سرعت اولیه‌ای که در آن شکست بین پیوندها شروع می‌شود مطابق نتایج جدول‌های ۷ و ۸ مشخص شده است؛ سپس نتایج شبیه‌سازی‌ها با سرعت ثابتی که شکسته شدن پیوندها قطعی است در جدول‌های ۹ و ۱۰ قابل مشاهده می‌باشد.

جدول ۷ تغییر ابعاد ورق گرافن آرمچیر و سرعت شکست اولیه تحت ضربه‌زنده کروی با شعاع ۱۰ (Å)

Table 7 Changing the Lengths of the armchair graphene sheet and the initial fracture speed under a spherical impactor with a radius of 10 angstrom

ابعاد صفحه	تعداد اتم‌ها	سرعت شکست (Å/ps)	بیشترین جابه‌جایی (Å)	تعداد پیوندهای شکسته شده
50 در 50	1008	6.5	-6.3	1
85.4 در 27.3	1008	4.5	-4.0	1
100 در 100	3936	8.8	-15.0	1
46.9 در 200.2	3936	4.4	-4.1	1

سرعت به دلیل اطمینان از شکسته شدن پیوند(ها) در این سرعت، در هر هندسه‌ای از ضربه‌زنده بوده است (اولین شکست در صفحه گرافن زیگزاگ تحت ضربه‌زنده مکعبی در سرعت ۲۲ آنگستروم بر پیکوتانیه ایجاد شده است).

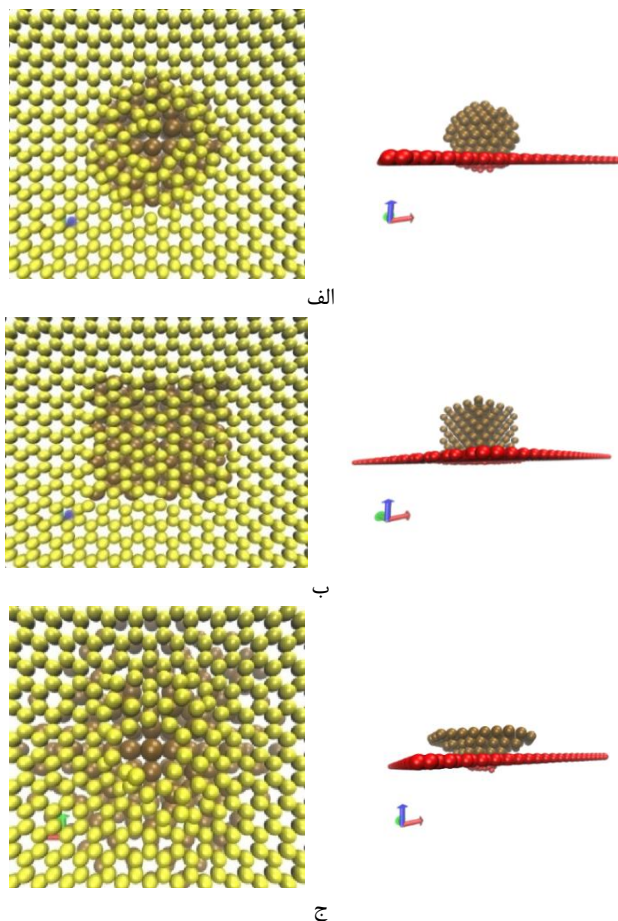


Fig. 4 Fracture of bonds on a 50x50 angstrom square plane with a constant mass and speed of 25 (Å/ps) under: a) spherical impactor with a radius of 10 angstrom b) cubic impactor with a length of 16.1199 angstrom c) cone impactor with a radius of 20 angstrom and a height of 10 angstrom

شکل ۴ شکست پیوندها در صفحه ۵۰ در ۵۰ (Å)² با جرم و سرعت ثابت ۲۵ (Å/ps) تحت: الف) ضربه‌زنده کروی به شعاع ۱۰ (Å) ب) ضربه‌زنده مکعبی به طول ۱۶,۱۱۹۹ (Å) ج) ضربه‌زنده مخروطی به شعاع ۲۰ (Å) و ارتفاع ۱۰ (Å)

جدول ۵ بیشترین جابه‌جایی اتم‌های میانی صفحه ۵۰ در ۵۰ (Å)² آرمچیر با سرعت ۲۵ (Å/ps) تحت ضربه‌زنده‌های مختلف

Table 5 The maximum displacement of the middle atoms of the 50x50 angstrom square armchair with a speed of 25 Å/ps under different impactors

نوع ضربه‌زنده	بیشترین جابه‌جایی (Å)	تعداد پیوندهای شکسته شده
کروی	-1.9	13
مکعبی	-0.7	8
مخروطی	-1.8	15

شده است که دلیل آن افزایش انعطاف‌پذیری ورق گرافن در اثر افزایش فاصله اتم‌های محل اصابت، از اتم‌های چهار طرف ورق گرافن که ثابت^۱ شده‌اند، می‌باشد.

جدول ۹ تغییر ابعاد ورق گرافن آرمچیر در سرعت ۲۵ ($\text{\AA}/ps$) تحت ضربه‌زننده کروی با شعاع ۱۰ (\AA)

Table 9 Changing the Lengths of the armchair graphene sheet at a speed of 25 ($\text{\AA}/ps$) under a spherical impactor with a radius of 10 angstrom

ابعاد صفحه	تعداد اتم‌ها	بیشترین جابه‌جایی	تعداد پیوندهای شکسته شده
(\AA)	اتم‌ها	(\AA)	شکسته شده
50 در 50	1008	-1.98	13
85.4 در 27.3	1008	-2.05	12
100 در 100	3936	-10.7	14
46.9 در 200.2	3936	-2.29	16

جدول ۱۰ تغییر ابعاد ورق گرافن زیگزاگ در سرعت ۲۵ ($\text{\AA}/ps$) با ضربه‌زننده کروی با شعاع ۱۰ (\AA)

Table 10 Changing the Lengths of the zigzag graphene sheet at a speed of 25($\text{\AA}/ps$) with a spherical impactor with a radius of 10 angstrom

ابعاد صفحه	تعداد اتم‌ها	بیشترین جابه‌جایی	تعداد پیوندهای شکسته شده
(\AA)	اتم‌ها	جابه‌جایی	شکسته شده
(\AA)	اتم‌ها	(\AA)	شکسته شده
50 در 50	1008	-2.31	14
86.1 در 25.9	1008	-2.09359	16
100 در 100	3936	-2.09321	15
56.7 در 174.3	3936	-90.8	14

نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌های جدول‌های ۹ و ۱۰ نشان داده است که با ثابت بودن سرعت، جرم و هندسه ضربه‌زننده و تغییر ابعاد صفحه گرافن، مقدار جابه‌جایی اتم‌های مرکزی صفحه و تعداد پیوندهای شکسته شده بیشتر شده است به نحوی که به وضوح جدا شدن اتم‌ها از صفحه طی برخورد ضربه‌زننده رخ داده است. همان‌طور که پیش‌ازاین اشاره شد این مسئله با محل اصابت ضربه‌زننده و فاصله آن از چهار طرف صفحه ارتباط مستقیم دارد.

۴-۱- تأثیر افزایش لایه‌های صفحه گرافن

در این قسمت ورق گرافن آرمچیر و زیگزاگ با ابعاد ۵۰ در ۵۰ آنگستروم مربع را در دو حالت تک لایه و دو لایه تحت یک ضربه‌زننده کروی به شعاع ۱۰ آنگستروم شبیه‌سازی و نتایج آن در جدول‌های ۱۱ و ۱۲ و شکل ۶ آورده شده است.

جدول ۸ تغییر ابعاد ورق گرافن زیگزاگ و سرعت شکست اولیه تحت ضربه‌زننده کروی با شعاع ۱۰ (\AA)

Table 8 Changing the Lengths of the zigzag graphene sheet and the initial fracture speed under a spherical impactor with a radius of 10 angstrom

ابعاد صفحه	تعداد اتم‌ها	سرعت شکست	بیشترین جابه‌جایی	تعداد پیوندهای شکسته شده
(\AA)	اتم‌ها	($\text{\AA}/ps$)	(\AA)	شکسته شده
50 در 50	1008	5.8	-6.29	1
86.1 در 25.9	1008	4.4	-3.72	1
100 در 100	3936	8.4	-15.36	1
56.7 در 174.3	3936	4.4	-4.02	1

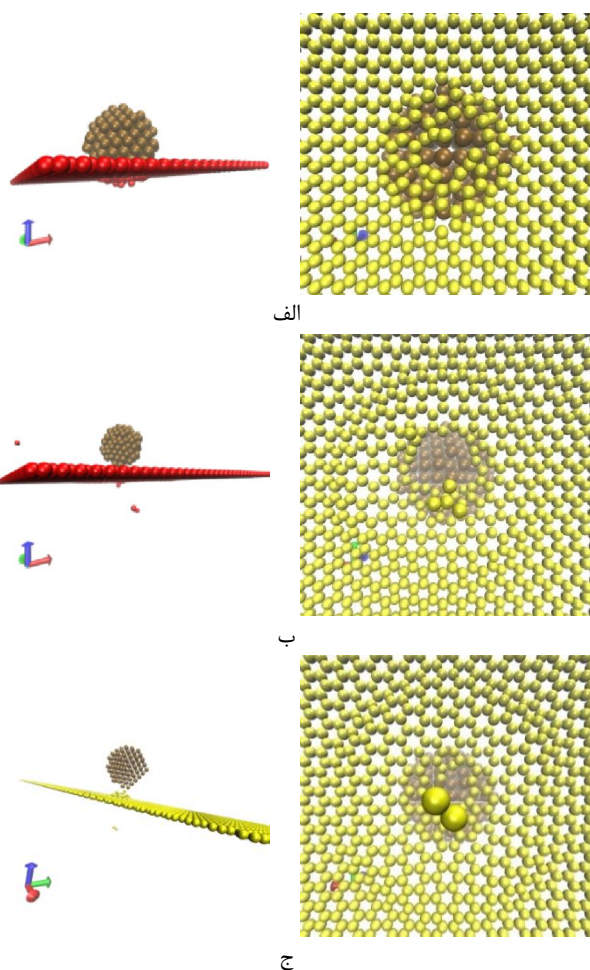


Fig. 5 Fracture of bonds under spherical impactor with radius 10 angstrom at speed 25 ($\text{\AA}/ps$) in graphene sheet: a) Armchair with dimensions 50x50 angstrom square b) Armchair with Dimensions 100x100 angstrom square c) Zigzag with dimensions 174.3x56.7 angstrom square

شکل ۵ شکست پیوندها تحت ضربه‌زننده کروی با شعاع ۱۰ (\AA) در سرعت ۲۵ ($\text{\AA}/ps$) در ورق گرافن: الف) آرمچیر با ابعاد ۵۰ در ۵۰ (\AA)^۲ ب) آرمچیر با ابعاد ۱۰۰ در ۱۰۰ (\AA)^۲ ج) زیگزاگ با ابعاد ۱۷۴٫۳ در ۵۶٫۷ (\AA)^۲

همان‌طور که از نتایج جدول‌های ۷ و ۸ مشاهده می‌شود، سرعت شکست اولیه و همچنین جابه‌جایی اتم‌های میانی ورق تحت ضربه‌زننده کروی با بزرگ شدن ابعاد ورق گرافن بیشتر

^۱ Fix

برای اولین شکست پیوندها حدود پنجاه برابر ورق تک لایه می‌باشد. با توجه به شکل ۶، مقدار تغییر شکل ورق دو لایه در اولین شکست، نسبت به ورق تک لایه کمتر می‌باشد.

۵- نتیجه‌گیری و جمع‌بندی

در این پژوهش، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، تاریخچه زمان جابه‌جایی نقطه مرکزی ورق‌های گرافن تک‌لایه، تحت ضربه نانوذره‌های فلزی و در میانه این ورق‌ها و در شرایط مختلفی که در تغییر رفتار گرافن اثرگذار می‌باشند، بررسی شده است و ورق‌های گرافن در ابعاد و شرایط مختلف مورد شبیه‌سازی قرار گرفته‌اند؛ بنابراین ضربه‌زننده از جنس نانو طلا با هندسه‌های مختلف (مکعب مربع، کره و مخروط) انتخاب شده و در حالت‌های متفاوت مطالعه گردیده است.

با افزایش جرم ضربه‌زننده در برخورد با صفحه تک لایه گرافن، سرعت لازم برای شکستن پیوندهای صفحه کمتر شده است؛ بنابراین برای بررسی تأثیر افزایش جرم با در نظر گرفتن یک سرعت ثابت (سرعتی که در آن صفحه قطعاً سوراخ می‌شود)، مقدار جابه‌جایی اتم‌های میانی صفحه همراه تعداد پیوندهای شکسته شده بیشتر شده است؛ همچنین با ثابت در نظر گرفتن جرم و سرعت (سرعتی که در آن صفحه قطعاً سوراخ می‌شود)، شکل‌های متفاوتی از ضربه‌زننده در نظر گرفته شده است (کروی و مکعبی و مخروطی) که در میان این شکل‌ها، کمترین میزان جابه‌جایی اتم‌های میانی و کمترین تعداد پیوندهای شکسته شده در ضربه‌زننده مکعبی مشاهده گردید. از طرفی کمترین سرعت لازم برای شکستن پیوندهای صفحه، در ضربه‌زننده مخروطی مشاهده شد؛ بنابراین مشخص گردید که هر چه سطح درگیر ضربه‌زننده با صفحه گرافن کمتر باشد، جابه‌جایی اتم‌های میانی صفحه بیشتر و تعداد پیوندهای شکسته شده افزایش می‌یابد.

با افزایش ابعاد صفحه گرافن (صفحات ۵۰ در ۵۰ و ۱۰۰ در ۱۰۰ انگستروم مربع و صفحات معادل آن‌ها) تحت ضربه‌زننده با هندسه یکسان به سرعت بیشتری برای شکستن پیوندهای صفحه احتیاج است؛ به همین دلیل در سرعت یکسان (که هر سه صفحه در آن سوراخ می‌شوند) با افزایش طول صفحه، میزان جابه‌جایی اتم‌های میانی و تعداد پیوندهای شکسته شده بیشتر شده است؛ علاوه بر این از شبیه‌سازی صفحات گرافن آرمچیر و زیگزگ با یک لایه و دو لایه تحت ضربه‌زننده کروی مشاهده شد که با افزایش تعداد لایه‌ها، مقدار جابه‌جایی اتم‌های میانی صفحه کمتر و سرعت لازم برای شکستن پیوندها بیشتر شده است.

جدول ۱۱ تأثیر تعداد لایه‌های صفحه گرافن آرمچیر تحت ضربه‌زننده کروی به شعاع ۱۰ (Å)

Table 11 The effect of the number of layers of the armchair graphene sheet under a spherical impactor with a radius of 10 angstrom

تعداد پیوندهای شکسته شده	بیشترین جابه‌جایی (Å)	سرعت \dot{A}/ps	تعداد لایه‌های صفحه
1	-6.31394	6.5	یک لایه
1	-0.0209592	47	دو لایه

جدول ۱۲ تأثیر تعداد لایه‌های صفحه گرافن زیگزگ تحت ضربه‌زننده کروی به شعاع ۱۰ (Å)

Table 12 The effect of the number of layers of the zigzag graphene sheet under a spherical impactor with a radius of 10 angstrom

تعداد پیوندهای شکسته شده	بیشترین جابه‌جایی (Å)	سرعت \dot{A}/ps	تعداد لایه‌های صفحه
1	-6.28618	5.8	یک لایه
1	-0.0208458	43	دو لایه

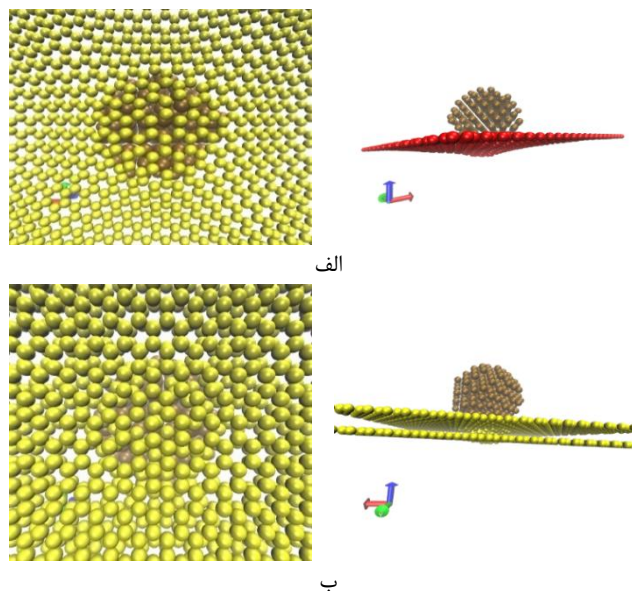


Fig. 6 50x50 angstrom square plate under spherical impactor with radius 10 angstrom: a) one layer b) two layers

شکل ۶ صفحه ۵۰ در ۵۰ (Å)² تحت ضربه‌زننده کروی به شعاع ۱۰ (Å): (الف) یک لایه (ب) دو لایه

طبق نتایج جدول‌های ۱۱ و ۱۲ با افزایش تعداد لایه‌ها مقدار جابه‌جایی اتم‌های میانی صفحه برای نخستین شکست، کمتر شده است که علت آن افزایش سفتی ورق دو لایه و همچنین افزایش تعداد اتم‌های میانی صفحه در محل اصابت در دو لایه است؛ همچنین سرعت لازم برای اولین شکست پیوندها با دو لایه شدن ورق گرافن بیش از هفت برابر شده است؛ بنابراین با دو لایه شدن ورق گرافن به ازای ضربه‌زننده یکسان، انرژی جنبشی لازم

۶- مراجع

- [9] S. Seifoori, G. Liaghat, Low velocity impact of a nanoparticle on nanobeams by using a nonlocal elasticity model and explicit finite element modeling, *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 69, No. 23, pp. 85-93, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.ijmecsci.2013.01.030>
- [10] S. Seifoori, G. Liaghat, Impact of a nanoparticle on Euler-Bernoulli nanobeam using a nonlocal elasticity model, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 13, No. 3, pp. 37-44, 2013. <http://dorl.net/dor/20.1001.1.10275940.1392.13.3.4.0> (in Persian)
- [11] S. Seifoori, G. Liaghat, M. Foladi, Low velocity impact on Timoshenko nanobeam using a nonlocal elasticity theory, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 13, No. 8, pp. 151-160, 2013. <http://dorl.net/dor/20.1001.1.10275940.1392.13.8.6.2> (in Persian)
- [12] W. Wang, S. Li, J. Min, C. Yi, Y. Zhan, M. Li, Nanoindentation experiments for single-layer rectangular graphene films: a molecular dynamics study, *Nanoscale research letters*, Vol. 9, No. 1, pp. 1-8, 2014. <https://doi.org/10.1186%2F1556-276X-9-41>
- [13] S. Seifoori, H. Hajabdollahi, Impact behavior of single-layered graphene sheets based on analytical model and molecular dynamics simulation, *Applied Surface Science*, Vol. 351, No. 2, pp. 565-572, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.05.114>
- [14] S. Seifoori, Molecular dynamics analysis on impact behavior of carbon nanotubes, *Applied Surface Science*, Vol. 326, No. 28, pp. 12-18, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2014.11.095>
- [15] 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, *Superlattices and Microstructures*, Vol. 135, No. 1, pp. 106249, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2019.106249>
- [16] S. Seifoori, F. Abbaspour, E. Zamani, Molecular dynamics simulation of impact behavior in multi-walled carbon nanotubes, *Superlattices and Microstructures*, Vol. 140, No. 39, pp. 106447, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2020.106447>
- [1] M. Li, H. X. Tang, M. L. Roukes, Ultra-sensitive NEMS-based cantilevers for sensing, scanned probe and very high-frequency applications, *Nature nanotechnology*, Vol. 2, No. 2, pp. 114-120, 2007. <https://www.doi.org/10.1038/nnano.2006.208>
- [2] A. C. Eringen, On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves, *Journal of applied physics*, Vol. 54, No. 9, pp. 4703-4710, 2013. <https://www.doi.org/10.1063/1.332803>
- [3] M.E. Golmakani, J. rezatalab, Nonlinear bending analysis of orthotropic nanoplates based on nonlocal model of Eringen using DQM., *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 13, No. 14, pp. 122-136, 2014. <http://dorl.net/dor/20.1001.1.10275940.1392.13.14.19.7> (in Persian)
- [4] M. Jabbarzadeh, H. Talati, A.R. Noroozi, Nonlinear analysis of circular graphene sheet using nonlocal continuum mechanic theory, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 13, No. 13, pp. 57-66, 2014. <http://dorl.net/dor/20.1001.1.10275940.1392.13.14.19.7> (in Persian)
- [5] W. T. Chien, C. S. Chen, H. H. Chen, Resonant frequency analysis of fixed-free single-walled carbon nanotube-based mass sensor, *Sensors and Actuators A: Physical*, Vol. 126, No. 1, pp. 117-121, 2006. <https://doi.org/10.1016/j.sna.2005.10.005>
- [6] S. Seifoori, R. Izadi, G.H. Liaghat, A. Mahdian Parrany, An experimental study on damage intensity in composite plates subjected to low-velocity impacts, *Polymer Testing*, Vol. 93, No. 1, pp. 106887, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.polymertesting.2020.106887>
- [7] A. Nazari, Modeling impact energy of functionally graded steels by artificial neural networks, *Modeling in engineering*, Vol. 14, No. 45, pp. 145-162, 2016. <https://doi.org/10.22075/jme.2017.1770> (in Persian)
- [8] M. Damghani Nouri, H. Rahmani, The effect of rise Time in dynamic stress intensity factor for impact loading. *Modeling in engineering*, Vol. 13, No. 40, pp. 79-87, 2015. <https://doi.org/10.22075/jme.2017.1705> (in Persian)