



توسعه روش المان محدود مقیاس اتمی بر مبنای شبیه سازی دینامیک مولکولی برای بررسی رفتار مکانیکی گرافن

محمد مهدی ملکوتی¹، عباس منتظری^{2*}

1- دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

2- استادیار، دانشکده مهندسی و علم مواد، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

* صندوق پستی 19395-1999، a_montazeri@kntu.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 19 دی 1394

پذیرش: 30 بهمن 1394

ارائه در سایت: 07 فروردین 1395

کلید واژگان:

گرافن، روش المان محدود در مقیاس اتمی

شبیه سازی دینامیک مولکولی

شرایط مرزی دوره ای

رفتار مکانیکی

چکیده

با توجه به دقت و اعتبار روش های مبتنی بر رفتار اتمی مانند شبیه سازی دینامیک مولکولی (MD)، امروزه این روش ها نقش بسیار مهمی در زمینه مدل سازی ورقه های تک لایه گرافن ایفا می کنند. استفاده از این روش ها به دلیل هزینه های محاسباتی بالا تنها محدود به سیستم های با اندازه کوچک است. علاوه بر این، با توجه به طبیعت گسسته گرافن، از روش های مبتنی بر مکانیک محیط پیوسته نمی توان برای مطالعه ویژگی های مکانیکی آن استفاده کرد. برای غلبه بر این مسائل، در این پژوهش، روش جدید المان محدود در مقیاس اتمی (AFEM) براساس پتانسیل ترسوف - برنر توسعه داده شده است. بهره وری روش پیشنهادی از لحاظ دقت و سرعت با استفاده از یک مثال عددی برای ورق گرافن و مقایسه نتایج با شبیه سازی دینامیک مولکولی نشان داده شده است. مقایسه نتایج نشان دهنده دقت بسیار بالای روش پیشنهادی است. این در حالی است که سرعت این روش تقریباً 100 برابر روش دینامیک مولکولی است، همچنین برای درک بهتر روش، تأثیر عوامل مؤثری همچون طول نخستین پیوند در ساختارهای غیرتصادفی و نیز تعداد اتم ها بر سرعت شبیه سازی بررسی شده است. تاکنون در تمامی مطالعات انجام شده در حوزه ارزیابی رفتار مکانیکی نانوساختارها بر مبنای روش AFEM، شرایط مرزی دوره ای در نظر گرفته نشده است. در همین راستا برای اعمال شرایط مرزی دوره ای در روش AFEM، روش یاد شده توسعه داده شده است. نتایج به دست آمده نشان می دهد که نتایج روش المان محدود مقیاس اتمی بدون لحاظ کردن شرایط مرزی دوره ای، اختلاف بسیاری با نتایج دینامیک مولکولی دارد.

Nanomechanics analysis of graphene via development of an MD-based AFEM

Mohammad Mehdi Malakouti¹, Abbas Montazeri^{2*}

1- Faculty of Mechanical Engineering, K.N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran

2- Faculty of Materials Science and Engineering, K.N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran

* P.O.B. 19395-1999, Tehran, Iran, a_montazeri@kntu.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper

Received 09 January 2016

Accepted 19 February 2016

Available Online 26 March 2016

Keywords:

Graphene, Atomic scale finite element method (AFEM)

Molecular dynamics simulation

Periodic boundary conditions

Mechanical behavior

ABSTRACT

Due to their accuracy and reliability, atomistic-based methods such as molecular dynamics (MD) simulations have played an essential role in the field of predictive modeling of single layered graphene sheets (SLGSs). However, due to the computational costs, applications of these methods are limited to small systems. Additionally, according to the discrete nature of SLGSs, conventional continuum-based methods cannot be utilized to study the mechanical characteristics of them. To overcome these issues, here, a new Atomic-scale Finite Element Method (AFEM) based on the Tersoff-Brenner potential has been developed. Efficiency of the proposed method is evaluated through a numerical example analyzed by both the proposed method and MD simulation. The results show that the computational cost is much reduced (~100 times), while the accuracy of MD simulation is kept. Furthermore, the effects of initial C-C bond length and number of atoms on the speed of the proposed method is investigated. To mimic the MD simulation completely, periodic boundary conditions have been implemented in the extended AFEM. It is demonstrated that there is a noticeable deviation from MD results without considering this type of boundary condition.

1- مقدمه

برجسته الکترونیکی، مکانیکی، حرارتی گرافن و همچنین خواص منحصربه فردش به عنوان یک عامل تقویت کننده در زمینه نانوکامپوزیت اختصاص داده شده است [2-4]. محققان همواره سعی نموده اند که با استفاده از تئوری های جدید و در عین حال روش های ساده تر به نتایج دقیق تری دست پیدا کنند. تاکنون چندین تلاش تجربی برای اندازه گیری مدول یانگ گرافن

با کشف روش تولید ورقه های تک لایه گرافن¹ از گرافیت² با استفاده از روش لایه برداری توسعه یافته [1]، این ماده توجه دانشمندان بسیاری را به خود جلب کرده است. در این راستا، تلاش های تحقیقاتی زیادی به کشف خواص

¹ Graphene

² Graphite

$$E_{\text{tot}}(x) = U_{\text{tot}}(x) - \sum_{i=1}^N \bar{F}_i \cdot x_i \quad (1)$$

ترم نخست عبارت سمت راست U_{tot} انرژی ذخیره‌شده داخلی کل برای یک سیستم شامل N ذره و ترم دوم سمت راست $\bar{F}_i$ نیروی خارجی (در صورت وجود) است. با توجه به این‌که انرژی پتانسیل تابعی از موقعیت اتم‌ها (x) است، می‌توان آن را به صورت دو ذره‌ای مانند پتانسیل لندارد-جونز یا چند ذره‌ای مانند مورس، ترسوف-برنر و ... که به اتم‌های خارج پیوندی نیز وابسته است، در نظر گرفت. در پژوهش کنونی برای مدل‌سازی پیوند کووالانسی کربن-کربن موجود در ساختار گرافن، پتانسیل چند ذره‌ای ترسوف-برنر [10] در نظر گرفته شده است. ساختار کلی انرژی پتانسیل یادشده به صورت رابطه (2) است.

$$V(r_{ij}) = [V^R(r_{ij}) - \bar{b}_{ij} V^A(r_{ij})] f_c(r_{ij}) \quad (2)$$

در رابطه اخیر i و j دو اتم کربن انتهایی هر پیوند و r_{ij} طول پیوند است، همچنین $V^R(r_{ij})$ برهم‌کنش دوجزئی دافعه بین دو اتم یادشده و $V^A(r_{ij})$ نشان‌دهنده قسمت جاذبه این پتانسیل بوده و مطابق روابط (3,4) تعریف می‌شود.

$$V^R(r_{ij}) = \frac{D_e}{S-1} e^{-\sqrt{2S}\beta(r_{ij}-R_e)} \quad (3)$$

$$V^A(r_{ij}) = \frac{D_e S}{S-1} e^{-\sqrt{2/S}\beta(r_{ij}-R_e)} \quad (4)$$

پارامترهای R_e ، S و D_e ، ثابت پتانسیل بوده که برای پیوند کربن-کربن مقادیر مشخصی دارند. $f_c(r_{ij})$ تابع شعاع قطع⁴ و $\bar{b}_{ij}$ مرتبه پیوند⁵ بوده که با توجه به موقعیت اتم‌های همسایه، نیروی جاذبه را نسبت به نیروی دافعه تقویت یا تضعیف می‌کند. ساختار پیشنهادی پتانسیل یادشده برای تعیین انرژی پتانسیل بین دو اتم، یک المان شش اتمی است که در شکل 1 نشان داده شده است. پارامترهای مربوط به این پتانسیل به همراه توضیحات جامع، در مرجع [10] آورده شده است.

2-1- تعیین المان در مقیاس اتمی

نخستین مرحله در AFEM مانند FEM تقسیم یک سیستم به قسمت‌های کوچک‌تر به نام المان است. برای تعیین المان در مقیاس اتمی ابتدا باید رابطه اتمی در یک نانو ساختار مشخص شود، بدین منظور ناحیه تعامل تعیین‌کننده برهم‌کنش بین یک اتم (اتم مبنا) و اتم‌های همسایه‌اش، تعریف می‌شود. در مقیاس اتمی این ناحیه تعامل و شماره اتم مبنا به ترتیب به‌عنوان المان و شماره المان در نظر گرفته می‌شود. همسایگی‌ها در این ناحیه به پتانسیل بین اتمی و نوع ساختار اتمی ماده مورد نظر بستگی دارد.

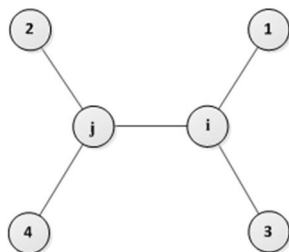


Fig. 1 The 6-node element representing the angle bending in graphene structure based on the Tersoff-Brenner potential

شکل 1 المان شش اتمی برای نمایش خمش پیوند در ساختار گرافن با پتانسیل

ترسوف-برنر

صورت گرفته است. لی و همکارانش در سال 2008 خواص الاستیک و استحکام شکست ذاتی غشای گرافن تک‌لایه آزاد را به وسیله میکروسکوپ نیروی اتمی¹ اندازه‌گیری کردند. آن‌ها مدول یانگ تک‌لایه گرافن را 1.0 تراپاسکال به‌دست آوردند [5]. در پژوهشی دیگر، ژانگ و یان، مدول یانگ ورق گرافن را 0.89 تراپاسکال اندازه‌گیری کردند [6]. لی و همکارانش در سال 2012 مدول الاستیک تک‌لایه گرافن را از طریق آزمایش 2.4 تراپاسکال ثبت کرده‌اند [7]. مقایسه نتایج تجربی مختلف نشان می‌دهد که تفاوت بسیاری در اعداد ارائه‌شده توسط محققان مختلف برای مدول یانگ ورق گرافن وجود دارد. این امر حاکی از فقدان دقت روش‌های تجربی و در نتیجه فقدان وجود روش آزمایشگاهی استاندارد برای اندازه‌گیری خواص مکانیکی در مقیاس نانو است؛ بنابراین، تعیین کمی خواص مکانیکی توسط روش‌های مدل‌سازی از اهمیت به‌سزایی برخوردار است.

به‌طور کلی روش‌های مدل‌سازی سیستم‌های نانومتری را می‌توان به دو دسته اصلی تقسیم‌بندی کرد. دسته نخست روش‌های مبتنی بر شیمی محاسباتی و دسته دوم روش‌های مبتنی بر نانومکانیک محاسباتی است. در حالی که روش‌های دسته نخست از دقت بالاتری نسبت به دسته دوم برخوردارند، روش‌های دسته دوم سرعت بیشتری نسبت به روش‌های دسته نخست دارند [8]. در پژوهش کنونی تلاش شده است برای تعیین خواص مکانیکی ورق گرافن روشی ارائه شود که ویژگی‌های هر دودسته را دارا باشد. این روش به «روش المان محدود مقیاس اتمی² (AFEM)» شهرت دارد که نخستین بار توسط لیو و همکارانش در سال 2003 برای تعیین خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی ابداع شده است [9].

در این روش، ابتدا با توجه به برهم‌کنش یک اتم با اتم‌های همسایه‌اش، یک ناحیه تعامل تعریف می‌شود. با توجه به این تعریف، هر ناحیه تعامل می‌تواند به‌عنوان المان و هر اتم به‌عنوان یک گره در چارچوب روش المان محدود³ در نظر گرفته شود، سپس تلاش می‌شود مشابه روش المان محدود که استفاده از آن در مکانیک محیط‌های پیوسته رایج است، از شرط کمینه کردن انرژی پتانسیل برای تعیین ماتریس سفتی و بردار نیروی غیرتعادلی المان استفاده شود. در نهایت برای تعیین صحت نتایج و نشان دادن دقت محاسبات روش ارائه شده، نتایج به‌دست‌آمده با نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مقایسه می‌شود. مقایسه نتایج نشان‌دهنده دقت بالای روش ارائه شده است. این در حالی است که سرعت محاسبات در روش ارائه‌شده به میزان چشم‌گیری بیش از سرعت محاسبات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است.

2- جزئیات روش المان محدود مقیاس اتمی

روش موسوم به المان محدود مقیاس اتمی (AFEM) از حیث ساختاری کاملاً شبیه روش المان محدود (FEM) است با این تفاوت که در آن هر ناحیه تعامل (برهم‌کنش محلی) می‌تواند به‌عنوان المان و هر اتم به‌عنوان یک گره در چارچوب FEM در نظر گرفته شود. ارتباط بین این دو روش از آنجا ناشی می‌شود که در AFEM مشابه FEM از شرط کمینه‌کردن انرژی پتانسیل برای تعیین ماتریس سفتی المان استفاده می‌شود. نکته مهم آن است که در این روش، موقعیت تعادلی اتم‌ها با مشتق‌گیری از پتانسیل‌های بین اتمی به‌دست می‌آید. انرژی پتانسیل کل یک سیستم (E_{tot}) از دو بخش به‌صورت رابطه (1) تشکیل شده است.

¹ Atomic Force Microscopy (AFM)

² Atomic-scale Finite Element Method (AFEM)

³ Finite Element Method (FEM)

⁴ Cut-off radius

⁵ Bond order

$$u^{(k)} = x^{(k+1)} - x^{(k)} \quad (10)$$

تکرار نخستین ($k = 0$) در پیکربندی نخستین سیستم اتمی، با موقعیت $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_N^{(0)})^T$ آغاز می شود. وظیفه اصلی الگوریتم تکرار، یافتن موقعیتی با سیستم دارای کمینه انرژی است. روش تکراری نیوتن [13] یکی از روش هایی است که به منظور ارائه حل دقیق سیستم معادلات جبری غیرخطی استفاده می شود. در این روش، الگوریتم تکرار در هر بار اعمال نیروی خارجی تا هنگامی ادامه می یابد که با صفر شدن بردار نیروی غیرتعادلی، تعادل برقرار شود. در این جا جهت ارزیابی همگرایی از مقایسه اختلاف نرم انرژی $\|u_{n+1}^{k+1} \cdot P(x_n + u_{n+1}^{k+1})\| \leq \text{tot}$ استفاده شده است.

2-3- استخراج درایه های ماتریس سفتی و بردار نیرو

با توجه به ساختار اتمی پتانسیل ترسوف- برنر (المان شش اتمی) و المان ده اتمی تعیین شده برای ساختار گرافن، هر المان ده اتمی گرافن از سه المان شش اتمی تشکیل می شود (شکل 2). پس انرژی پتانسیل داخلی کل (U_{tot}^e) اعمالی بر اتم مبنا ناشی از سه المان شش اتمی به صورت رابطه (11) بیان می شود.

$$U_{\text{tot}}^e = V(r_{12}) + V(r_{13}) + V(r_{14}) \quad (11)$$

در نهایت با توجه به انرژی پتانسیل کل در رابطه (11) و این که در هر المان فقط برهم کنش هایی لحاظ می شوند که اتم مبنا در آن درگیر باشد، درایه های ماتریس سفتی و بردار نیروی غیرتعادلی صفحه ای (هر اتم 2 درجه آزادی انتقالی داراست) مربوط به یک المان گرافن براساس مشتقات بیان شده در رابطه (8) به صورت روابط (12,13) است.

$$K^{(e)} = \begin{bmatrix} \left(\frac{\partial^2 U_{\text{tot}}^e}{\partial x_1 \partial x_1} \right)_{2 \times 2} & \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 U_{\text{tot}}^e}{\partial x_1 \partial x_i} \right)_{2 \times 18} \\ \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 U_{\text{tot}}^e}{\partial x_i \partial x_1} \right)_{18 \times 2} & (0)_{18 \times 18} \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$P^{(e)} = \begin{bmatrix} \bar{F}_1 - \frac{\partial U_{\text{tot}}^e}{\partial x_1} \bigg|_{x=x^{(0)}} \\ (0)_{18 \times 1} \end{bmatrix} \quad (13)$$

در رابطه اخیر، $\bar{F}_1$ نیروهای خارجی وارد بر هر المان بوده که بر اتم مبنای المان اعمال می شود.

2-4- مش بندی

با توجه به تعریف المان در مقیاس اتمی، یک سیستم N اتمی دارای N المان اتمی است. بنابراین این المان ها از نظر فضایی با المان های مجاورشان

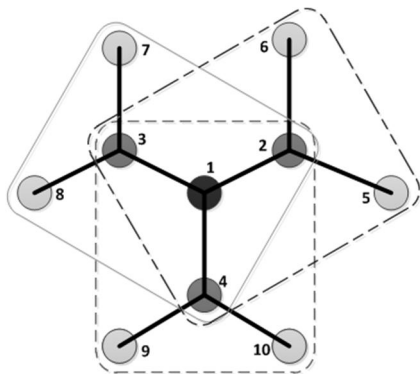


Fig. 2 The 10-node element used in the proposed method

شکل 2 المان ده اتمی به کار رفته در روش پیشنهادی

با توجه به ساختار شش ضلعی گرافن و نوع پتانسیل انتخابی برای بیان برهم کنش های بین اتمی در آن (ترسوف- برنر)، المان ده گره ای مطابق شکل 2، المانی منتخب برای گرافن در روش AFEM، است. این المان دارای دو همسایگی است. همسایگی نخست آن اتم های $\{2,3,4\}$ و همسایگی دوم آن اتم های $\{5,6,7,8,9,10\}$ است. اتم های نخستین همسایگی با دو نوع برهم کنش کششی و خمشی (متناسب با تغییر طول و زاویه پیوندها) و اتم های دومین همسایگی فقط با برهم کنش خمشی (متناسب با تغییر زاویه پیوندها) بر اتم مبنا تأثیر می گذارند.

2-2- استخراج چارچوب AFEM

همان طور که در بالا بیان شد، ایجاد یک سیستم در حال تعادل، مستلزم رابطه (5) است.

$$\frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial x} = 0 \quad (5)$$

با پیش بینی موقعیت نخستین اتم های کرین موجود در ساختار گرافن به صورت بردار $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_N^{(0)})^T$ سه جمله نخست بسط تیلور تابع انرژی پتانسیل کل، حول موقعیت نخستین به صورت رابطه (6) بیان می شود.

$$E_{\text{tot}}(x) \cong E_{\text{tot}}(x^{(0)}) + \frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial x} \bigg|_{x=x^{(0)}} \cdot (x - x^{(0)}) + \frac{1}{2} (x - x^{(0)})^T \cdot \frac{\partial^2 E_{\text{tot}}}{\partial x \partial x} \bigg|_{x=x^{(0)}} \cdot (x - x^{(0)}) \quad (6)$$

در نهایت با تعریف بردار جابه جایی اتم ها به صورت $u = x - x^{(0)}$ و سپس جای گذاری رابطه (6) در رابطه (5)، می توان معادله ای مشابه با چارچوب المان محدود به صورت رابطه (7) ایجاد کرد.

$$Ku = P \quad (7)$$

که در این جا روابط (8) را خواهیم داشت.

$$K = \frac{\partial^2 U_{\text{tot}}}{\partial x \partial x} \bigg|_{x=x^{(0)}} \quad (\text{a-8})$$

$$P = \bar{F}_i - \frac{\partial U_{\text{tot}}}{\partial x} \bigg|_{x=x^{(0)}} \quad (\text{b-8})$$

در روابط بالا K و P به ترتیب ماتریس سفتی و بردار نیروی غیرتعادلی است. ابعاد (K) و (P) در فضای دوبعدی به ترتیب $2N \times 1$ و $2N \times 2N$ است. علاوه بر این، چون تابع پتانسیل ترسوف- برنر در هر نقطه دارای مشتق مرتبه دوم پیوسته است [11]، مطابق با قضیه یانگ [12]، ماتریس درجه دوم (K) متقارن خواهد بود. این قضیه بیان می کند که اگر تابعی در هر نقطه دارای مشتق مرتبه دوم پیوسته باشد، ماتریس شامل درایه های مشتقات مرتبه دوم این تابع، متقارن می شود.

با توجه به این که رابطه بین نیرو و جابجایی در چارچوب کلی AFEM و FEM خطی است (با نادیده گرفتن ترم های مرتبه بالای بسط تیلور)، به منظور به کارگیری این رابطه خطی برای سیستم های غیرخطی لازم است تا از یک الگوریتم تکرار استفاده شود. پس با تغییر در نماد ماتریس سفتی و بردار نیروی غیرتعادلی، برای مرحله تکرار k ام معادلات سیستم خطی به صورت روابط (9) به دست می آید.

$$K^{(k)} = \frac{\partial^2 U_{\text{tot}}^{(k)}}{\partial x \partial x} \bigg|_{x=x^{(0)}} \quad (\text{a-9})$$

$$P^{(k)} = \bar{F}_i - \frac{\partial U_{\text{tot}}^{(k)}}{\partial x} \bigg|_{x=x^{(0)}} \quad (\text{b-9})$$

در هر تکرار k ، موقعیت اتمی به صورت رابطه (10) به روز می شود.

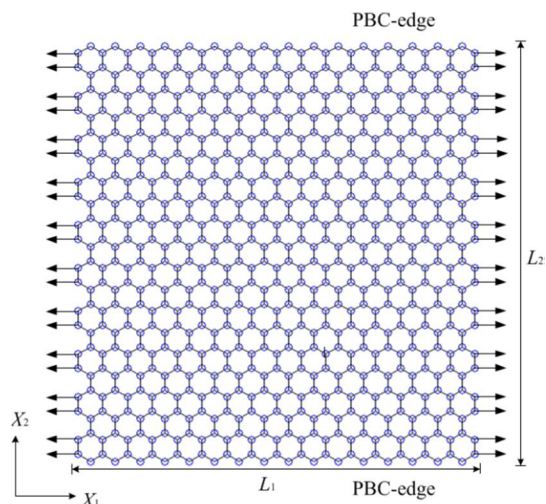


Fig. 3 Schematic illustration of imposing the tensile load on the SLGS sample

شکل 3 تصویر شماتیک از اعمال بار کششی بر نمونه گرافنی

آنگستروم فرض شده است.

شرایط مرزی گرافن در روش AFEM مطابق با شرایط مرزی MD است، با این تفاوت که در AFEM به جای اعمال نرخ کرنش به کار گرفته شده در MD، نیروی خارجی اعمال می شود. بارگذاری از مقدار صفر آغاز و با افزایش به حالت حدی می رسد. در هنگام شبیه سازی امکان استفاده از گام های بارگذاری متفاوت وجود دارد. برای نمونه می توان جهت تسریع عملیات محاسباتی برای گام های نخستین مدل سازی که رفتار ماده خطی است، مقادیر بزرگ انتخاب کرد؛ بنابراین می توان پیش بینی کرد که روش AFEM قادر به بررسی رفتار نقطه ای یک ماده در هر بارگذاری دلخواه باشد. شکل 4 تنش و کرنش دو نمونه بارگذاری محاسبه شده با روش AFEM به همراه نمودار تنش - کرنش به دست آمده از روش MD را نشان می دهد. نقاط دایره ای شکل نشان دهنده تنش و کرنش نقطه ای گرافن تحت نیروی خارجی 20 و 45 الکترون ولت بر آنگستروم است که با نتایج به دست آمده با روش MD تطابق بسیار خوبی دارند. این نتایج نشان می دهند که روش AFEM بدون نیاز به داشتن پیشینه از رفتار ماده می تواند رفتار ماده را در هر بارگذاری خارجی دلخواه پیش بینی کند.

در ادامه جهت تعیین رفتار مکانیکی (مدول یانگ، تنش و کرنش نهایی) گرافن، بارگذاری خارجی با گام های متناسب با رفتار ماده (گام ها ابتدا بزرگ و سپس با افزایش بار کوچک می شود) بر گرافن اعمال می شود. شکل 5 نمودار تنش - کرنش محاسبه شده از دو روش AFEM و MD را نشان می دهد. مطابق با شکل یاد شده، یک تطابق بسیار مناسب میان AFEM و MD مشاهده می شود. مدول یانگ گرافن با استفاده از روش AFEM و MD به ترتیب برابر با 0.813 و 0.82 تراپاسکال محاسبه شد. در جدول 1 مقایسه نتایج شبیه سازی با مقادیر ارائه شده در منابع مختلف آورده شده است. با توجه به این جدول، نتایج بررسی AFEM و MD مطالعه حاضر مطابقت خوبی با گزارش های پیشین دارد. مدت زمان شبیه سازی در دو روش AFEM و MD برای گرافن یاد شده به ترتیب 13 دقیقه و 22 ساعت بوده است. این مطلب نشان می دهد که سرعت روش توسعه داده شده در این پژوهش تقریباً 100 برابر روش MD است. تمام شبیه سازی ها با یک رایانه شخصی با مشخصات پردازشگر 7 هسته ای با سرعت 1.6 گیگاهرتز و حافظه 4 گیگابایت

هم پوشانی دارند. پس برای ایجاد مش در ساختار اتمی نمی توان از مش بندی مرسوم در FEM استفاده کرد. در حقیقت هم پوشانی یاد شده، این امکان را فراهم می کند که به صورت دقیق اثرات نامحلی را مدل سازی کرد. به رغم این هم پوشانی، سهم برهم کنش یک پیوند در ماتریس سفتی و نیروی غیر تعادلی کلی دو بار اعمال نمی شود. این نکته را با دقت در ماتریس سفتی محلی می توان دریافت. برخی از درایه های ماتریس سفتی در رابطه (12) در ضریب 0.5 ضرب شده اند.

3- جزئیات شبیه سازی دینامیک مولکولی

تمام محاسبات شبیه سازی دینامیک مولکولی با استفاده از نرم افزار لمپس¹ که در آزمایشگاه ملی ساندا [14] توسعه یافته، انجام شده است. برای شبیه سازی، ابتدا پیکربندی نخستین یک ورق گرافن با استفاده از نرم افزار VMD² [15] ایجاد می شود. برای توصیف انرژی پیوندهای کووالانسی C-C از پتانسیل بین اتمی AIREBO³ استفاده شده است. این پتانسیل براساس نسل دوم پتانسیل چندجذبی برنر REBO⁴ [16] عمل می کند که با موفقیت در مطالعات پیشین در خصوص خواص مکانیکی گرافن [17-19] به کار گرفته شده است. یک مسئله مهم که در شبیه سازی MD پیش از بارگذاری باید توجه شود، مطابقت نداشتن موقعیت نخستین ورق گرافن با حالت تعادل سیستم است. نخستین مرحله شبیه سازی بدون اعمال بار خارجی در 50000 گام زمانی اجرا می شود. در نهایت برای شبیه سازی تغییر شکل گرافن تحت بارگذاری یکنواخت کششی در جهت مورد نظر، نرخ کرنش 0.005 پیکوثانیه در آن راستا اعمال می شود. برای حذف اثرات حرارتی بر نمودار تنش - کرنش و همچنین با توجه به این که AFEM در شکل کنونی قادر به اعمال اثرات درجه حرارت در روند شبیه سازی نیست و فقط در دماهای بسیار پایین قابل اجراست، تمام مراحل شبیه سازی در دمای ثابت 1 کلون اجرا شده است. سرعت نخستین، از توزیع ماکسول - بولتزمن در دمای داده شده، به دست آمده است. برای کنترل درجه حرارت شبیه سازی، از ترموستات نوز - هوور [20] و برای انتگرال گیری از معادلات حرکت از روش ورله سرعتی [21] با گام زمانی 0.5 فمتوثانیه استفاده شده است. در مورد شرایط مرزی ورق گرافن، در تمام مدل سازی ها، برای ایجاد یک ورق گرافن بی نهایت و حذف اثر طول محدود، شرایط مرزی دوره ای⁵ (PBC) در امتداد عمود بر جهت بارگذاری در نظر گرفته شده است. این در حالی است که در جهت بارگذاری، شرایط مرزی، آزاد است.

4- نتایج و بحث

4-1- مقایسه نتایج روش AFEM و MD

برای مقایسه دو روش AFEM و MD، در ابتدا نمونه گرافنی با ابعاد $40 \text{ Å} \times 40 \text{ Å}$ (660 اتم) مطابق شکل 3 در نظر گرفته شده است. مطالعات انجام شده پیشین نشان داده که هنگامی که اندازه گرافن مربعی شکل، کمتر از 40 آنگستروم باشد، مدول یانگ با افزایش اندازه، افزایش می یابد. برای گرافن با اندازه بزرگ تر از 40 آنگستروم مدول یانگ به حالت اشباع رسیده و دیگر تغییر نمی کند [22]. بر این اساس و برای حذف اثرات لبه در مطالعه حاضر، از نمونه گرافنی به ابعاد 40 آنگستروم استفاده و همچنین ضخامت گرافن برابر با فاصله بین لایه های گرافن در ساختار گرافیت یعنی 3.4

¹ LAMMPS (Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)

² Visual Molecular Dynamics (VMD)

³ Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order (AIREBO)

⁴ Reactive Empirical Bond Order (REBO)

⁵ Periodic Boundary Condition (PBC)

2-4- تعداد تکرار لازم برای همگرایی

همان طور که از پیش بیان شد برای یافتن موقعیت تعادلی اتم ها با استفاده از روش AFEM لازم است از الگوریتم تکرار استفاده شود. با توجه به این که یکی از عوامل تأثیرگذار بر سرعت شبیه سازی (زمان محاسباتی) تعداد تکرار لازم برای همگرایی در هر مرحله است؛ بنابراین در ادامه، تأثیر اختلاف طول اولیه پیوند غیرتعادلی نسبت طول پیوند تعادلی ساختار گرافن (طول پیوند تعادلی 0.145 نانومتر است) و تعداد اتم های ساختار بر تعداد تکرار و به تبع آن بر سرعت شبیه سازی بررسی می شود.

ابتدا برای بررسی تأثیر طول اولیه پیوند بین اتمی، یک گرافن با ابعاد تعادلی $20\text{\AA} \times 20\text{\AA}$ (170 اتم) که دارای طول پیوند اولیه 0.135، 0.14، 0.145، 0.15، 0.155 و شرایط مرزی بیان شده در شکل 3 است، در نظر گرفته شده است. با این تفاوت که بر دو لبه آزاد آن نیرویی اعمال نمی شود.

همان طور که از پیش بیان شد، یکی از روش های ارزیابی همگرایی الگوریتم تکرار، اختلاف نرم انرژی است. مطابق با نمودار شکل 7 تغییرات نرم انرژی برای گرافنی با طول های نخستین پیوند بیان شده، بررسی شده است. نمودار مربوطه نشان می دهد که با افزایش تکرار اختلاف نرم انرژی کاهش می یابد. همچنین با توجه به این نمودار می توان مشاهده کرد که تأثیرگذارترین گام تکرار برای رسیدن به حالت تعادلی ساختار، گام دوم است و تأثیر گام های بعدی به تدریج بسیار کم می شود. برای تعیین تعداد گام

جدول 1 مقایسه مدول یانگ به دست آمده توسط مطالعه حاضر با مقادیر ارائه شده در منابع

Table 1 Comparison of the Young modulus obtained by the present study and the ones given in the literature

مدول یانگ (تراپاسکال)	روش حل	محقق
1.05	مکانیک کوانتومی	لیو و همکارانش [23]
0.725	دینامیک مولکولی	لو و هوآنگ [8]
1.272	دینامیک مولکولی	گوپتا و همکارانش [24]
0.945	مکانیک مولکولی	منو و روسی [25]
0.84	مکانیک مولکولی	تردالکار و همکارانش [26]
0.80	مکانیک سازه مولکولی	شکریه و همکارانش [27]
0.832	دینامیک مولکولی	پی و همکارانش [28]
0.813	المان محدود مقیاس اتمی	کار حاضر
0.82	دینامیک مولکولی	کار حاضر

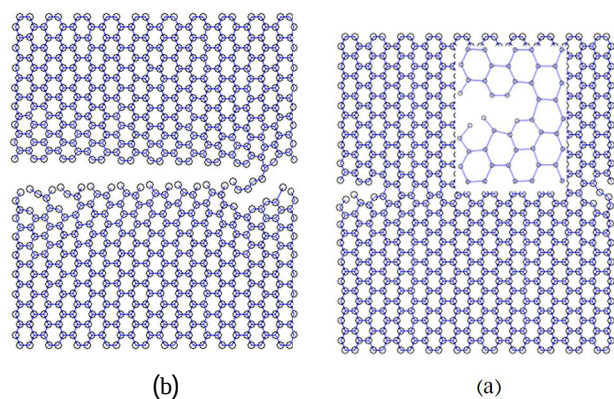


Fig. 6 Failure process of the perfect sample (a) early stages of fracture (b) final configuration

شکل 6 فرآیند شکست یک گرافن بی نقص، (الف) مراحل اولیه و (ب) نهایی شکست

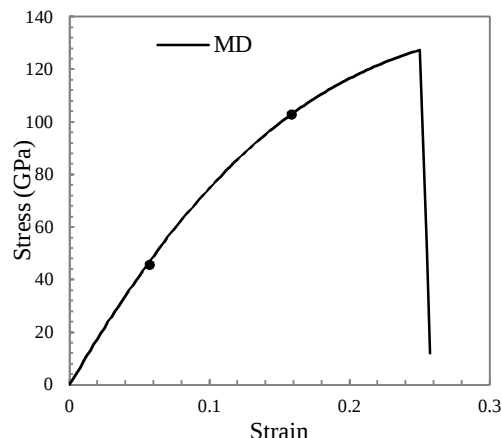


Fig. 4 Accurate prediction of the stress-strain curve in two special loadings by the proposed AFEM ignoring the history-dependent mechanical behavior of the sample

شکل 4 پیش بینی دقیق روش AFEM پیشنهادی از تنش - کرنش در دو بارگذاری بر گرافن نمونه بدون اطلاع از پیشینه رفتار مکانیکی آن

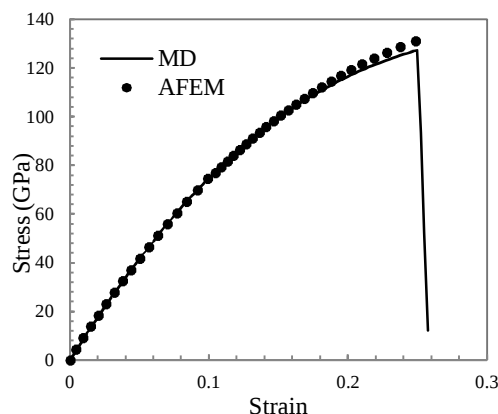


Fig. 5 Validation of the proposed AFEM: Stress-Strain curve of the sample obtained by this method is completely in accordance with the MD results

شکل 5 اعتبار سنجی AFEM پیشنهادی: منحنی تنش - کرنش نمونه به دست آمده توسط این روش به طور کامل با نتایج MD مطابق است.

انجام شده است. همچنین در شکل 6 فرآیند شکست گرافن به روش AFEM نشان داده شده است.

همان طور که در شکل مشاهده می شود ترک ایجاد شده در وسط گرافن نخست به شکل زیگزاگی رشد می کند، ولی در ادامه به صورت خط مستقیم در راستای عمود بر جهت بارگذاری تغییر مسیر می دهد. یکی از نکات قابل اشاره در این پژوهش آن است که هنگامی گرافن در اثر رشد ترک به دو گرافن مجزا تقسیم شده، هر یک از گرافن های ایجاد شده دارای شرایط مرزی جدید می گردند (یک لبه آن آزاد بوده و لبه دیگر تحت بارگذاری خارجی قرار دارد). در نتیجه چنین سیستمی با شرایط مرزی بیان شده از نظر المان محدود غیرقابل حل است (تعداد مجهولات بیشتر از تعداد معادلات است)؛ بنابراین با کامل شدن گسیختگی در گرافن، کد المان محدود توسعه داده شده با اعلام ناپایداری در جواب از اجرا خارج می شود. نکته مهم آن است که مطابق شکل 5 کرنش گسیختگی متناسب با وضعیت ناپایداری که توسط روش AFEM پیش بینی می شوند در تطابق کامل با نتایج MD است.

مکانیکی نانوساختارها، شرایط مرزی دوره‌ای در نظر گرفته نشده است. در این پژوهش روشی برای بررسی تأثیر شرایط مرزی دوره‌ای در سطح مقیاس اتمی توسعه داده شده است.

با توجه به این که ماده مورد بررسی این پژوهش جامد و جامدات برخلاف مایعات و گازها دارای شکل مشخصی است و اتم‌های آن‌ها فقط می‌توانند در جای خود نوسان کنند؛ بنابراین می‌توان برای ایجاد یک گرافن دارای شرایط مرزی دوره‌ای مطابق شکل 9 عمل کرد. در این شکل، اتم‌های درون مستطیل اتم‌های واقعی گرافن و اتم‌های بیرون مستطیل اتم‌های مازادی است که وجود خارجی ندارند و تنها برای ایجاد شرایط مرزی دوره‌ای اضافه می‌شوند. مبنای افزودن این اتم‌ها، المان ده اتمی نشان داده شده در شکل 2 است. به عبارت دیگر، چون تعداد همسایه‌های اتم‌های لبه برای ایجاد المان ده اتمی کمتر است، این اتم‌ها اضافه می‌شوند تا این کمبود جبران شود. توجه شود اتم‌های مازاد در شبیه سازی به عنوان اتم مبنای المان ده اتمی در نظر گرفته نمی‌شوند.

از نظر اجرا، برای استفاده از اعمال شرایط مرزی دوره‌ای جدید، نیاز نیست مانند روش دینامیک مولکولی برای جستجوی همسایگی اتم‌های

جدول 2 تأثیر طول اولیه پیوند روی تعداد گام‌ها و زمان محاسباتی لازم برای رسیدن نمونه گرافنی به حالت تعادل

Table 2 Effects of initial bond length on the computational time and iterations needed to acquire the equilibrated structure of the graphene sample

طول اولیه پیوند (نانومتر)	تکرار	زمان محاسبات (ثانیه)
0.135	8	15.44
0.14	6	10.98
0.15	6	11.33
0.155	8	14.56

جدول 3 تأثیر تعداد اتم‌ها بر تعداد تکرار و زمان محاسباتی

Table 3 Effects of number of atoms on the required iterations and computational time

ابعاد (انگستروم)	تعداد اتم	تکرار	زمان محاسبات (ثانیه)
20 × 20	170	8	13.24
30 × 29	350	10	30.78
40 × 40	660	12	73.08
50 × 52	984	15	138.10

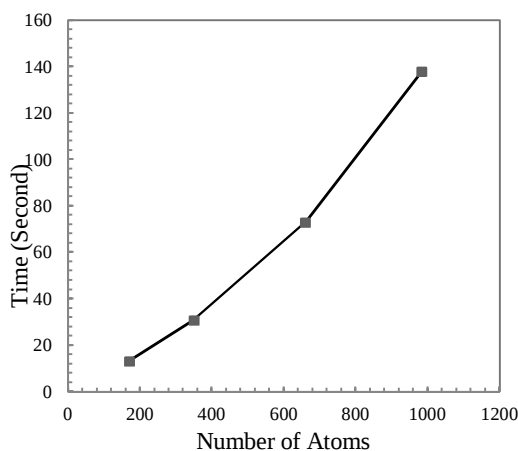


Fig. 8 Non-linear dependence of the computational time on the number of atoms

شکل 8 رابطه غیرخطی بین تعداد اتم‌ها و زمان محاسباتی

تکرار برای همگرایی در این تحقیق فرض شده است که سیستم هنگامی همگرا می‌گردد که مقدار اختلاف نرم انرژی کمتر از 0.001 الکترون‌ولت باشد. با توجه به فرض بیان شده تعداد گام‌ها و به تبع آن زمانی محاسباتی لازم برای رسیدن به تعادل گرافن با طول‌های نخستین پیوند متفاوت در جدول 2 نشان داده شده است. مطابق این جدول مشاهده می‌شود که تعداد تکرار لازم برای ساختار گرافن با طول نخستین پیوند 0.135 با 0.155 نانومتر (اختلاف طول پیوند نسبت به تعادلی ± 0.01 نانومتر) و 0.14 با 0.15 نانومتر (اختلاف طول پیوند نسبت به تعادلی ± 0.005 نانومتر) برابر است؛ بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که تعداد تکرار لازم برای رسیدن به تعادل به اختلاف طول نخستین پیوند غیرتعادلی نسبت پیوند تعادلی گرافن بستگی دارد نه به بزرگی و کوچکی طول اولیه پیوند غیرتعادلی نسبت به پیوند تعادلی.

در ادامه برای بررسی تأثیر تعداد اتم‌ها بر تعداد تکرار و زمان محاسباتی، گرافن‌هایی با ابعاد $40 \times 40 A^\circ$, $30 \times 29 A^\circ$, $20 \times 20 A^\circ$ و $50 \times 52 A^\circ$ که دارای موقعیت تعادلی و شرایط مرزی بیان شده در شکل 3 هستند، در نظر گرفته شده است. همچنین نیروی اعمالی بر دو لبه آزاد هر نمونه، 20 الکترون‌ولت بر آنگستروم است. نتایج حاصل از این بررسی در جدول 3 و شکل 8 نشان داده شده است. با توجه به جدول 3 می‌توان مشاهده کرد که افزایش تعداد اتم‌ها تأثیر کمی بر تعداد تکرارهای لازم برای همگرایی دارد. نکته مهم دیگر آن است که مطابق شکل 8، رابطه بین تعداد اتم‌ها و زمان محاسباتی در روش AFEM غیرخطی است. نتایج جدول 3 نشان می‌دهد که با افزایش تعداد اتم‌ها از 170 به 984 (تقریباً 5.8 برابر) زمان مورد نیاز برای شبیه سازی در روش AFEM تقریباً 10.4 برابر شده است. با توجه به این که شبیه سازی دینامیک مولکولی از مرتبه توان دوم تعداد اتم‌هاست، افزایش 5.8 برابری در تعداد اتم‌ها قطعاً سبب افزایش 33.6 برابری در زمان اجرای شبیه سازی MD می‌شود. بنابراین نه تنها سرعت روش AFEM نسبت به MD بسیار بالاتر است بلکه با افزایش تعداد اتم‌های مورد نظر در شبیه سازی این برتری، نمود بیشتری هم پیدا می‌کند.

4-3- تأثیر شرایط مرزی دوره‌ای

تاکنون در تمامی مطالعات انجام شده بر مبنای AFEM در ارزیابی رفتار

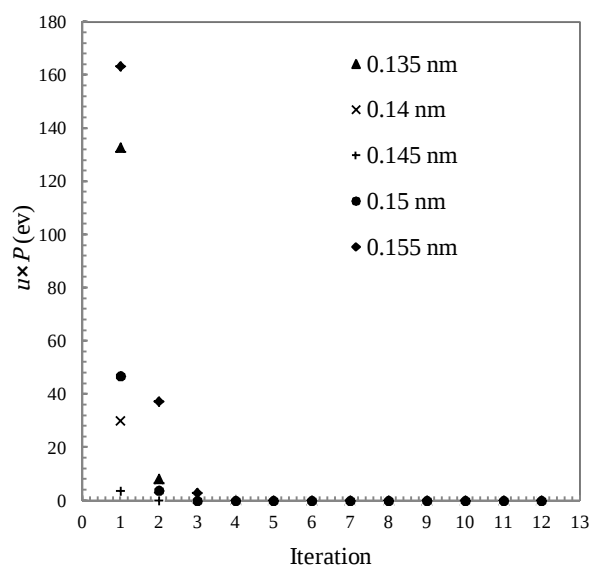


Fig. 7 Effects of initial bond length on the convergence rate of the proposed algorithm

شکل 7 تأثیر طول اولیه پیوند بر روی نرخ همگرایی الگوریتم تکرار پیشنهادی

AFEM، گرافنی مطابق با شکل 3 با لحاظ کردن شرایط مرزی دوره ای (PBC) و آزاد³ (FBC) تحت بارگذاری یکنواخت کششی در نظر گرفته شده است. شکل 11 منحنی تنش- کرنش به دست آمده از مدل سازی AFEM برای نمونه با دو شرایط مرزی بیان شده را نشان می دهد. مطابق با شکل مذکور، می توان مشاهده کرد که مدول یانگ و تنش نهایی شبیه سازی شده برای گرافن دارای شرایط مرزی آزاد با گرافن دارای شرایط مرزی دوره ای کاملاً متفاوت است. برای حالت شرایط مرزی آزاد، مدول یانگ و تنش نهایی به ترتیب برابر با 0.561 تراپاسکال و 110.79 گیگاپاسکال تعیین شد که در مقایسه با شرایط مرزی دوره ای، مقادیر مدول یانگ و تنش نهایی به ترتیب 30 و 15.37 درصد کمتر است (0.813 تراپاسکال و 130.92 گیگاپاسکال). با توجه به نمودار شکل 11 می توان دریافت که نتایج مدل سازی AFEM بدون لحاظ کردن شرایط مرزی دوره ای، اختلاف زیادی با نتایج شبیه سازی MD دارد.

5- نتیجه گیری

در این پژوهش، یک روش المان محدود مقیاس اتمی جدید بر اساس پتانسیل ترسف- برنر برای رسیدن به رفتار مکانیکی گرافن پیشنهاد شد. بدین منظور، رفتار مکانیکی گرافن تحت بارگذاری کششی به صورت عددی با استفاده از AFEM در یک روش سیستماتیک محاسبه و از طریق شبیه سازی MD ارزیابی شد. نتایج حاصل از روش AFEM نشان می دهند که این روش برخلاف MD بدون نیاز به داشتن پیشینه قبلی از رفتار ماده می تواند رفتار نقطه ماده را در هر بارگذاری خارجی پیش بینی کند، همچنین مدول یانگ گرافن، تنش و کرنش نهایی گرافن بدون نقص با استفاده از روش AFEM به ترتیب برابر با 0.813 تراپاسکال، 130.92 گیگاپاسکال و 0.248 محاسبه شد که با نتایج شبیه سازی MD و مقادیر ارائه شده در منابع مختلف مطابقت خوبی دارد. در ادامه تأثیر عوامل مؤثر بر تعداد تکرار و به تبع آن بر سرعت شبیه سازی بررسی شد. نتایج به دست آمده نشان می دهند که تعداد تکرار لازم برای رسیدن به تعادل به اختلاف طول نخستین پیوند غیر تعادلی نسبت پیوند تعادلی ساختار گرافن بستگی دارد نه به بزرگی و کوچکی طول نخستین پیوند نسبت به پیوند تعادلی، همچنین زمان محاسبات AFEM با تعداد اتم رابطه غیرخطی دارد. در نهایت روشی برای بررسی تأثیر شرایط مرزی دوره ای

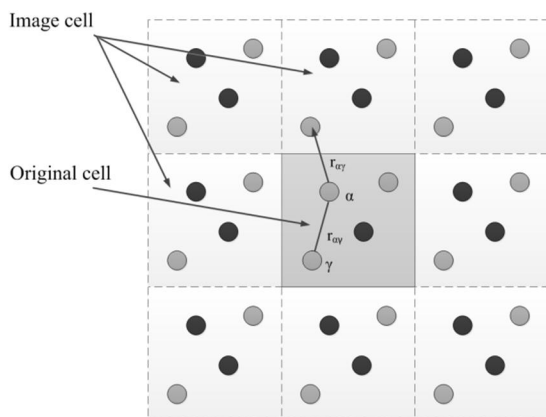


Fig. 10 Substitution of the neighboring atoms in the original cell in place of the image cells in the developed AFEM

شکل 10 جایگزینی اتم های همسایگی اتم مبنا در سلول اصلی به جای سلول های تصویر در روش AFEM توسعه داده شده

موجود در سلول واقعی¹، سلول یاد شده توسط سلول های کاملاً مشابه (سلول تصویر²) احاطه شود (شکل 10). در این روش، جستجوی اتم های همسایگی اتم مبنا فقط در میان اتم های موجود در سلول واقعی انجام می شود. برای نمونه مطابق شکل 10، اگر اتم α اتم مبنا المان ده اتمی و اتم γ یکی از اتم های موجود در سلول واقعی باشد، برای تعیین همسایگی بودن اتم γ نسبت به اتم مبنا α ، ابتدا با استفاده از رابطه (14) موقعیت سه گانه ای که هر اتم می تواند نسبت به اتم مبنا دارا باشد محاسبه می شود.

$$r'_\gamma(n_i) = r_\gamma + n_i L_i \quad n_i = \{-1, 0, +1\} \quad (14)$$

در رابطه بالا n_i نشان دهنده محورهای مختصات، L_i اندازه سلول واقعی در جهت i و n_i اعداد صحیح بین 1 و -1 است. در این روش برای آن که طول پیوند غیر واقعی (بین اتم واقعی و تصویری) در تمام مراحل شبیه سازی برابر با طول پیوند واقعی (میان دو اتم واقعی موجود در سلول واقعی) باشد، اندازه سلول واقعی شبیه سازی شده در راستای x و y به ترتیب $L_x = L_1 + (R_1 \times \cos \theta)$ و $L_y = L_2 + R_2$ در نظر گرفته شده است. L_1 و L_2 اندازه ورق گرافن در همان راستاست، همچنین R_1 و R_2 طول پیوند و θ زاویه بین پیوند کربن- کربن در جهت زیگزاگ نسبت به راستای افق که در شکل 9 نشان داده شده است. با توجه به این که در هر بارگذاری مقادیر R_1 ، R_2 و θ تغییر می کنند، اندازه سلول مرکزی نیز تغییر می کند. با توجه به توضیحات ارائه شده، موقعیت سه گانه یاد شده به شرح زیر است.

- موقعیت مجازی مثبت ($n_i = +1$)؛ به اندازه طول گرافن در جهت اعمال شرایط مرزی دوره ای به موقعیت واقعی اتم اضافه می شود.
- موقعیت واقعی ($n_i = 0$).
- موقعیت مجازی منفی ($n_i = -1$)؛ به اندازه طول گرافن در جهت اعمال شرایط مرزی دوره ای از موقعیت واقعی اتم کم می شود.

سپس با استفاده از رابطه (15) کمترین فاصله اتم یاد شده با اتم مبنا تعیین می شود. در نهایت با توجه به اندازه ناحیه المان ده اتمی بررسی می شود فاصله کمینه محاسبه شده از اندازه این ناحیه کمتر است یا خیر. در صورت کمتر بودن، اتم یاد شده در لیست همسایگی اتم مبنا قرار می گیرد.

$$r_{\alpha\gamma} = \min \|r'_\gamma - r_\alpha\| \quad (15)$$

از معایب روش بیان شده، عدم توانایی ایجاد چهار اتم مازاد در گوشه گرافن است. این اتم ها در شکل 9 با مربع کوچک مشخص شده است. جهت بررسی تأثیر شرایط مرزی بر نتایج به دست آمده از مدل سازی

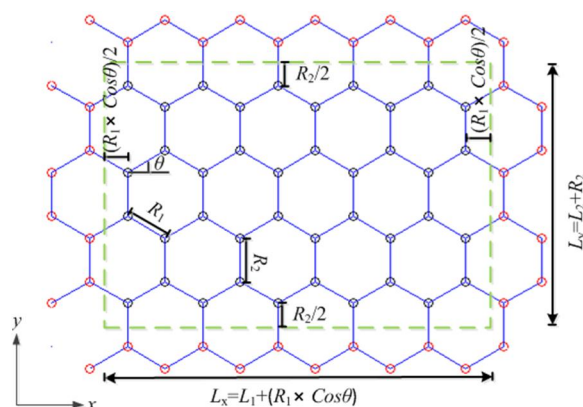


Fig. 9 Imposing Periodic Boundary Conditions in the developed AFEM

شکل 9 اعمال شرایط مرزی دوره ای در AFEM توسعه داده شده

³ Free Boundary Condition (FBC)

¹ Original cell

² Image cell

بالانویس ها	
A	جاذبه بین دو اتم
E	المان
k	گام تکرار
R	دافعه بین دو اتم
زیرنویس ها	
e	حالت تعادل
i	شمارنده اتم
j	شمارنده اتم
n	گام بارگذاری خارجی
α	اتم مبنا
γ	اتم همسایه
ι	محورهای مختصات

7- مراجع

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. a. Dubonos, I. Grigorieva, A. Firsov, Electric field effect in atomically thin carbon films, *Science*, Vol. 306, No. 5696, pp. 666-669, 2004.
- [2] M. A. Rafiee, J. Rafiee, Z. Wang, H. Song, Z. Z. Yu, N. Koratkar, Enhanced mechanical properties of nanocomposites at low graphene content, *ACS nano*, Vol. 3, No. 12, pp. 3884-3890, 2009.
- [3] M. Rafiee, J. Rafiee, Z. Z. Yu, N. Koratkar, Buckling resistant graphene nanocomposites, *Applied Physics Letters*, Vol. 95, No. 22, pp. 223103-223105, 2009.
- [4] M. A. Rafiee, J. Rafiee, I. Srivastava, Z. Wang, H. Song, Z. Z. Yu, N. Koratkar, Fracture and fatigue in graphene nanocomposites, *Small*, Vol. 6, No. 2, pp. 179-183, 2010.
- [5] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, J. Hone, Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene, *Science*, Vol. 321, No. 5887, pp. 385-388, 2008.
- [6] Y. Zhang, C. Pan, Measurements of mechanical properties and number of layers of graphene from nano-indentation, *Diamond and Related Materials*, Vol. 24, pp. 1-5, 2012.
- [7] J. U. Lee, D. Yoon, H. Cheong, Estimation of Young's modulus of graphene by Raman spectroscopy, *Nano Letters*, Vol. 12, No. 9, pp. 4444-4448, 2012.
- [8] P. Valavala, G. Odegard, Modeling techniques for determination of mechanical properties of polymer nanocomposites, *Reviews on Advanced Materials Science*, Vol. 9, pp. 34-44, 2005.
- [9] B. Liu, Y. Huang, H. Jiang, S. Qu, K. Hwang, The atomic-scale finite element method, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 193, No. 17, pp. 1849-1864, 2004.
- [10] D. W. Brenner, Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films, *Physical Review B*, Vol. 42, No. 15, pp. 9458, 1990.
- [11] C. A. Floudas, P. M. Pardalos, C. Adjiman, W. R. Esposito, Z. H. Gümmüs, S. T. Harding, J. L. Klepeis, C. A. Meyer, C. A. Schweiger, *Handbook of Test Problems in Local and Global Optimization*, pp. 199-202: Springer Science & Business Media, 2013.
- [12] R. G. D. Allen, L. S. o. Economics, P. Science, *Mathematical Analysis for Economists*, Macmillan London, pp. 300-305, 1964.
- [13] A. Ibrahimbegovic, *Nonlinear Solid Mechanics: Theoretical Formulations and Finite Element Solution Methods*, pp. 59-61: Springer Science & Business Media, 2009.
- [14] S. Plimpton, Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, *Computational Physics*, Vol. 117, No. 1, pp. 1-19, 1995.
- [15] W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten, VMD: visual molecular dynamics, *Molecular Graphics*, Vol. 14, No. 1, pp. 33-38, 1996.
- [16] D. W. Brenner, O. A. Shenderova, J. A. Harrison, S. J. Stuart, B. Ni, S. B. Sinnott, A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons, *Physics: Condensed Matter*, Vol. 14, No. 4, pp. 783-802, 2002.
- [17] R. Ansari, B. Motevalli, A. Montazeri, S. Ajori, Fracture analysis of monolayer graphene sheets with double vacancy defects via MD simulation, *Solid State Communications*, Vol. 151, No. 17, pp. 1141-1146, 2011.
- [18] Q. Lu, R. Huang, Nonlinear mechanics of single-atomic-layer graphene sheets, *Applied Mechanics*, Vol. 1, No. 03, pp. 443-467, 2009.
- [19] M. Neek-Amal, F. Peeters, Graphene nanoribbons subjected to axial stress, *Physical Review B*, Vol. 82, No. 8, pp. 85432-85443, 2010.
- [20] W. G. Hoover, Canonical dynamics: equilibrium phase-space distributions, *Physical Review A*, Vol. 31, No. 3, pp. 1695, 1985.
- [21] W. C. Swope, H. C. Andersen, P. H. Berens, K. R. Wilson, A computer simulation method for the calculation of equilibrium constants for the formation of physical clusters of molecules: Application to small water

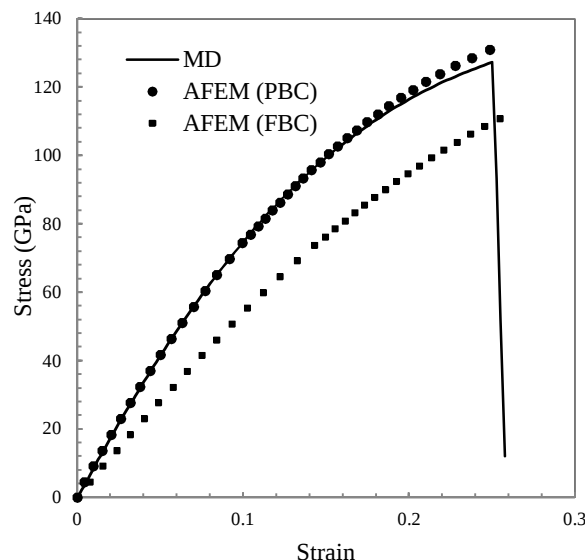


Fig. 11 Stress-strain curve of the sample using extended AFEM considering (a) periodic and (b) free boundary conditions along with the results of MD simulation

شکل 11 منحنی تنش - کرنش به دست آمده از مدل سازی AFEM برای شرایط مرزی دوره ای (PBC) و آزاد (FBC)

در سطح مقیاس اتمی توسعه داده شد. نتایج به دست آمده نشان می دهد که نتایج مدل سازی AFEM بدون لحاظ کردن شرایط مرزی دوره ای، اختلاف زیادی با نتایج شبیه سازی MD دارد.

6- فهرست علائم

$\bar{b}_{ij}$	مرتبه پیوند
D_e	پارامتر ثابت پتانسیل ترسوف - برنر
E_{tot}	انرژی پتانسیل کل یک سیستم
$\bar{F}_i$	نیروی خارجی
$f_c(r_{ij})$	تابع شعاع قطع
K	ماتریس سفتی
L_i	اندازه سلول واقعی گرافن
N	تعداد اتم های سیستم
n_i	اعداد صحیح میان 1 و 1-
P	بردار نیروی غیر تعادلی
R_e	فاصله تعادلی میان دو اتم بدون حضور دیگر اتم ها
r_{ij}	فاصله بین دو اتم
S	پارامتر ثابت پتانسیل ترسوف - برنر
U_{tot}	انرژی ذخیره شده داخلی کل یک سیستم
U_{tot}^e	انرژی ذخیره شده داخلی کل یک المان ده اتمی
u	بردار جابه جایی
V	انرژی پتانسیل بین دو اتم
x	موقعیت اتم ها
علائم یونانی	
α	اتم مبنا
β	پارامتر ثابت پتانسیل ترسوف - برنر
γ	اتم همسایه

- Composites Science and Technology*, Vol. 66, No. 11, pp. 1597-1605, 2006.
- [26] S. S. Terdalkar, S. Huang, H. Yuan, J. J. Rencis, T. Zhu, S. Zhang, Nanoscale fracture in graphene, *Chemical Physics Letters*, Vol. 494, No. 4, pp. 218-222, 2010.
- [27] M. Shokrieh, Z. Shokrieh, S. Hashemianzadeh, Effective parameters In modeling of graphene sheet young's modulus, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 12, No. 3, pp. 147-155, 2012. (in Persian فارسی)
- [28] Q. X. Pei, Y. W. Zhang, V. B. Shenoy, Mechanical properties of methyl functionalized graphene: a molecular dynamics study, *Nanotechnology*, Vol. 21, No. 11, pp. 115709-115717, 2010.
- clusters, *Chemical Physics*, Vol. 76, No. 1, pp. 637-649, 1982.
- [22] J. W. Jiang, J. S. Wang, B. Li, Young's modulus of graphene: a molecular dynamics study, *Physical Review B*, Vol. 80, No. 11, pp. 113405, 2009.
- [23] F. Liu, P. Ming, J. Li, Ab initio calculation of ideal strength and phonon instability of graphene under tension, *Physical Review B*, Vol. 76, No. 6, pp. 64120-64127, 2007.
- [24] S. Gupta, K. Dharamvir, V. Jindal, Elastic moduli of single-walled carbon nanotubes and their ropes, *Physical Review B*, Vol. 72, No. 16, pp. 165428, 2005.
- [25] M. Meo, M. Rossi, Prediction of Young's modulus of single wall carbon nanotubes by molecular-mechanics based finite element modelling,