

## تحلیل ارتعاشات حسگر جرمی گرافنی به کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی

مژده میراخوری

محمد مهدی خطیبی\*

صادق صادق زاده

دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران

استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه سمنان، سمنان، ایران

استادیار، دانشکده فناوری‌های نوین، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

### چکیده

گرافن یکی از جوان‌ترین اعضا خانواده نانو مواد کربنی است که با ساختاری دوبعدی، از خواص فوق‌العاده‌ای برخوردار است که می‌تواند به عنوان حسگر جرمی نیز استفاده شود. با توجه به کاربردهای ویژه حسگر جرمی گرافنی، در این مقاله رفتار ارتعاشی حسگرهای جرمی با روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار گرفته و تغییرات فرکانس طبیعی حسگر در اثر افزایش ابعاد صفحه در دو راستای زیگزاگ و آرمچیر تحت بررسی قرار گرفته است. بدین منظور، در ابتدا یک صفحه گرافن مربعی در محیط دینامیک مولکولی ایجاد شده و جایجایی ذرات از روش دینامیک مولکولی به دست آمده است. جایجایی‌ها با استفاده از روش تجزیه فرکانسی تحلیل و فرکانس طبیعی اول حسگر محاسبه شده است. این مراحل، برای ابعاد دیگری از صفحات گرافنی که در راستای زیگزاگ و آرمچیر تغییر اندازه داشته‌اند نیز انجام گرفته است. همچنین به منظور صحت‌گذاری، فرکانس طبیعی حاصل با نتایج یکی از نظریه‌های مکانیک محیط پیوسته مقایسه شده است. در ادامه با بررسی قابلیت سنجش جرمی صفحه گرافنی با وجود ذرات متمرکز طلا روی آن، حساسیت صفحه گرافنی به جرم ذرات متمرکز محاسبه و ارائه شده است.

واژه‌های کلیدی: گرافن، حسگر جرمی، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، فرکانس طبیعی.

## Vibrational analysis of graphene mass sensor via molecular dynamics simulation

M. Mirakhory

Department of Mechanical Engineering, Semnan University, Semnan, Iran

M. M. Khatibi

Department of Mechanical Engineering, Semnan University, Semnan, Iran

S. Sadeghzadeh

School of New Technologies, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

### Abstract

Graphene is one of the youngest member of the nano-carbon material with two-dimensional structure which has extraordinary mechanical and electrical properties. Graphene sheets can also be used as mass sensors. In this paper, the special applications of this substance as a mass sensor are considered. The vibrational behavior of a graphene mass sensor is studied by molecular dynamics simulation method. Also, the effects of increase the dimensions of the rectangular sheet in two zigzag and armchair directions has been studied on natural frequencies. For this purpose, a square graphene sheet has been created in the molecular dynamic environment and the particle displacement is obtained from the molecular dynamics method. The displacements are analyzed using the frequency domain decomposition method and the first natural frequency of the sheet is calculated. Then, the dimensions of graphene sheet have been changed in the zigzag and armchair directions, and the natural frequency of the sheet is also estimated. In order to validate the method, the estimated natural frequency is compared with the results of one of the improved theories of continuous mechanics. In the following, the ability of graphene sheet for detection of attached mass has been examined using the presence of concentrated gold particles. Finally, the sensitivity of graphene sheet to the attached masses is presented.

**Keywords:** graphene, mass detection, molecular dynamics simulation, natural frequency.

### ۱- مقدمه

خواص مکانیکی مانند چگالی پایین و استحکام بالا، کاربردهای وسیعی نیز برای این ماده در حوزه ساخت فضاپیما و ماهواره‌ها ایجاد کرده است.

تمام پیکربندی‌های اتم‌های کربن، شامل نانو لوله‌های کربن، فولرن‌ها، گرافن‌های چند لایه و حتی گرافیت، خواص آشکارسازی فوق‌العاده‌ای دارند. اندازه کوچک و چگالی کم گرافن باعث شده که یک ماده کاربردی برای عملکردهایی که فرکانس طبیعی در آن‌ها ویژگی کلیدی است، مانند حسگرهای ملکول‌های گازی و تشدید کننده‌های نانو مکانیکی به حساب آید. هم چنین گرافن به سبب پتانسیل بالای سطح خود توانایی خوبی در متصل کردن ملکول‌ها به خود دارد. به همین جهت ورقه‌های گرافن به عنوان عنصرهای ساختاری در وسایل مقیاس نانو مانند حسگرهای الکتروشیمیایی، الکترودها و خازن‌ها کاربرد وسیعی دارند. تشخیص جرم از کاربردهای مهم رزوناتور بر پایه

گرافن یکی از آخرین یافته‌های دانشمندان در علوم و تکنولوژی می‌باشد. این ماده یکی از آلوتروپ‌های کربن با ساختار تک لایه مسطح است که دارای آرایش شش گوشه می‌باشد [۱].

ساختارهای دو بعدی شناخته شده از کربن (گرافن) در مقیاس نانو دارای چگالی پایین، خواص انتقالی بالستیک قابل توجه، بی‌اثری شیمیایی، ظرفیت گرمایی بالا، انتقال نوری مناسب و آب‌گریزی فوق العاده می‌باشند. خواص مکانیکی فوق‌العاده‌ی گرافن به سبب شبکه هگزاگونال و استحکام پیوند کربن-کربن است [۲]. وزن کم، مساحت سطح بالا، سفتی زیاد، فرکانس تشدید بالا و حساسیت بالا به تغییرات محیط که نتیجه ساختار نوار الکترونیکی و شبکه لانه زنبوری دوبعدی اتم‌های کربن می‌باشد، از دیگر ویژگی‌های خاص گرافن است [۳، ۴].

\* نویسنده مکاتبه کننده، آدرس پست الکترونیکی: mmkhatibi@semnan.ac.ir

تاریخ دریافت: ۹۶/۰۸/۲۷

تاریخ پذیرش: ۹۷/۱۰/۲۴

گرافن (GBRs) می‌باشد [۵]. تشخیص جرم به کمک حسگر جرمی صفحه گرافنی، بر اساس حساسیت فرکانس رزونانس به جرم متصل شده می‌باشد و به دلیل استفاده از آن‌ها به عنوان حسگر، درک رفتار دینامیکی صفحه گرافنی موضوعی حائز اهمیت است [۶].

محمدی و همکاران [۷] ارتعاشات آزاد صفحات گرافن را برای شرایط مرزی مختلف با مدل مکانیک پیوسته غیرمحلّی بررسی کردند. آن‌ها طی تحقیقاتشان به رابطه مستقیم فرکانس بدون بعد با شعاع صفحه دایروی در تمامی مودها پی بردند. همچنین دریافتند که تاثیر پارامترهای غیرمحلّی بر فرکانس بدون بعد در صفحات گرافنی دایروی نسبت به صفحات معمول دیگر کمتر است. صارمی فروشانی و اظهاری [۸] ارتعاشات غیر محلّی صفحات گرافن تک لایه و چند لایه را با روش نوار محدود<sup>۱</sup> مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها مشاهده کردند که تاثیر پارامترهای غیرمحلّی روی صفحه تک لایه به طور قابل توجهی بیشتر است و نتایج صفحات چندلایه گرافنی که نیروهای واندروالسی بین آن‌ها فعال می‌باشد، تحت تاثیر پارامترهای غیرمحلّی نمی‌باشند. قشوقی برق و رضوی [۹] مدل تحلیلی ساده‌ای را برای پیش‌بینی پاسخ ارتعاش آزاد صفحه گرافن مستطیلی با شرایط مرزی گیردار و مفصلی توسعه دادند. در این مطالعه مثال‌های مختلف از صفحات ارتوتروپیک، ایزوتروپیک و مدرج وابسته برای صحت سنجی مدل پیشنهادی، ارائه شده است و مشاهده شد که مدل پیشنهادی برای صفحات ضخم و نازک مفصلی و با ضخامت کم در شرط مرزی گیردار از دقت کافی برخوردار است. پرادهان و پادیکار [۱۰] حل تحلیلی ارتعاشی صفحات نانو مثل گرافن را از معادلات حرکت نظریه غیر محلّی به کمک روش ناوبر ارائه کردند و تاثیر پارامترهای غیرمحلّی را بر فرکانس‌های طبیعی صفحات نانو بررسی کردند. انتخاب نظریه الاستیسیته غیرمحلّی نسبت به سایر روش‌های مکانیک پیوسته مانند مکانیک هیبرید-آتمی، هزینه محاسبات پایین‌تری را برای تحلیل سازه‌های آتمی ارائه می‌دهد و در مقایسه با آن روش‌ها از دقت خوبی نیز برخوردار است همچنین وابستگی این نظریه به اثر مقیاس امکان پیش‌بینی دقیق رفتار مواد را فراهم می‌سازد. آن‌ها مشاهده کردند که با افزایش شماره مودها فرکانس بدون بعد کاهش می‌یابد و هرچه ابعاد صفحه کوچکتر باشد، تاثیر پارامترهای غیرمحلّی محسوس‌تر و طبق پیش‌بینی، فرکانس‌های بدون بعد کوچکتر خواهد بود. هم چنین دریافتند که با افزایش ضخامت صفحات و مدول یانگ، فرکانس بدون بعد کاهش می‌یابد.

آدهی کاری و چوژاری [۱۱] یک چهارچوب ریاضی را برای استفاده از ورق گرافن تک لایه به عنوان حسگر جرمی گسترش داده‌اند. آن‌ها برای بیان رابطه بین جرم متصل و تغییر فرکانس رزونانس از روابط انرژی پتانسیل و جنبشی ورق گرافن استفاده کردند و ثوابت بدون بعدی را پیشنهاد داده‌اند. شن و همکاران [۱۲] امکان استفاده از ورقه‌های گرافن تک لایه به عنوان حسگر نانومکانیکی و تاثیرات اندازه را بر نظریه کلاسیک بررسی کردند. در کار آن‌ها فرکانس‌های طبیعی یک حسگر نانومکانیکی با استفاده از روش گلرکین استخراج شده است. آرش و همکاران [۱۳] عملکرد ورقه‌های گرافن تک لایه را به عنوان

حسگر جرمی در تشخیص گازهای نجیب با آنالیز ارتعاشی ورقه‌های گرافن به وسیله شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی کردند. آن‌ها اثر تعداد و موقعیت اتم‌های گاز، ابعاد و شرایط مرزی ورقه‌های گرافن را بر حساسیت حسگر مطالعه و بررسی کردند. تسیامکی و همکاران [۱۴] ورق گرافن دایره‌ای را به عنوان حسگر جرمی مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها دریافتند که حسگر جرمی در شرایط مرزی گیردار، دارای حساسیت فرکانسی بالاتری نسبت به سایر شرایط مرزی می‌باشد. صادق زاده [۱۴] یک روش بر پایه نظریه الاستیسیته غیر محلّی برای بررسی رفتار ارتعاشی ورقه‌های کربنی ارائه کرده است. همچنین به بررسی اثر تعداد لایه و وجود ذره خارجی بر فرکانس‌های طبیعی ورق به کمک یک تکنیک آنالیزمودال-دینامیک مولکولی پرداخته است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که با افزایش جرم، تغییرات فرکانس و حساسیت حسگر افزایش می‌یابد و با افزایش تعداد لایه‌ها، حساسیت افزایش و تغییرات فرکانس اندکی کاهش می‌یابد. گانگ و همکاران [۱۵] از روش اجزا محدود برای محاسبه فرکانس طبیعی و تغییرات فرکانس حسگر گرافنی دایره‌ای شکل استفاده کردند. این تحقیق نشان می‌دهد یک رابطه خطی لگاریتمی میان تغییرات فرکانس طبیعی و جرم متصل وجود دارد. همچنین حساسیت هنگامی که دما کمتر است بیشتر می‌شود و حساسیت ورقه‌های گرافن هنگامی که تعداد لایه‌ها ۷ باشد به بیشینه خود می‌رسد. وانگ در مطالعات خود به منظور تشخیص اتم‌ها یا مولکول‌ها، حسگرهای ساخته شده از نانو تیوب‌ها و صفحات گرافنی را بر اساس آنالیز ارتعاش و انتشار امواج در مطالعات آزمایشگاهی، مدل‌سازی آتمی و مکانیک پیوسته، معرفی و بازنگری کرده است [۱۶، ۱۷]. جلالی و نائی [۱۸] قابلیت کاربرد صفحه تک لایه گرافنی به عنوان حسگر رزونانسی را در حضور ذره فلزی اضافه شده، با روش‌های دینامیک مولکولی و الاستیسیته غیر محلّی مورد تحقیق قرار دادند و تاثیر پارامترهای غیر محلّی و نحوه توزیع جرم اضافه شده بر سطح صفحه گرافنی را بر تغییرات فرکانس بررسی کردند. آن‌ها دریافتند هنگامی که ذره اضافه شده به‌طور یکنواخت‌تری در سطح صفحه گرافنی توزیع شده باشد، نسبت به وقتی که در مرکز متمرکز است حساسیت کاهش می‌یابد. اگرچه در این حالت تاثیر پارامترهای غیر محلّی کمتر می‌باشد.

نظریه مکانیک محیط پیوسته کلاسیک مستقل از اثر مقیاس می‌باشد و قادر نیست اثر مقیاس را بر رفتار مواد پیش‌بینی کند در حالی که نتایج تحقیقات تجربی و شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی حاکی از آن است که اثر مقیاس بر خواص مکانیکی و ارتعاشی نانوسازه‌ها از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است و همین امر موجب شده است تا محققان جهت بررسی رفتار ارتعاشی نانو صفحات گرافنی از نظریه‌های غیر کلاسیک بهره ببرند [۷، ۱۰، ۱۹، ۲۰]. نظریه‌های مختلفی مانند نظریه تنش‌های الاستیسیته کوپله، نظریه گرادبان کرنشی و نظریه اصلاح شده تنش‌های الاستیسیته کوپله اثر مقیاس را در تحلیل‌های خود لحاظ می‌کنند و در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نیز ماهیت غیرمحلّی بودن به این صورت است که تنش در یک نقطه نه تنها به کرنش آن نقطه بلکه به کرنش محدوده اطراف آن نقطه نیز وابسته می‌باشد [۲۱]. همچنین بررسی تحقیقات صورت گرفته در زمینه حسگر جرمی گرافنی نشان می‌دهد که به دلیل مزایایی چون دارا بودن اثر مقیاس، دقت بالاتر، زمان تحقیق کوتاه‌تر و هزینه کمتر،

<sup>۱</sup> Finite Strip Method

$$\begin{aligned} \varepsilon_{xx} &= \frac{\partial u}{\partial x} - z \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} \\ \varepsilon_{yy} &= \frac{\partial v}{\partial x} - z \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} \\ \varepsilon_{zz} &= 0 \\ \varepsilon_{xy} &= \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} - 2z \frac{\partial^2 w}{\partial x \partial y} \right) \end{aligned} \quad (4)$$

که  $\varepsilon_{xx}$  و  $\varepsilon_{yy}$  و  $\varepsilon_{zz}$  کرنش‌های نرمال و  $\varepsilon_{xy}$  کرنش برشی هستند. در نهایت با استفاده از قانون هوک و مداخله دادن روابط و پارامترهای غیر محلی، معادله حاکم با مولفه‌های جابجایی، بصورت رابطه (5) برای صفحه تعریف می‌شوند [10]:

$$\begin{aligned} -D\nabla^4 w + \mu \nabla^2 \left[ -q - \frac{\partial}{\partial x} \left( N_0^{xx} \frac{\partial w}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left( N_0^{yy} \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( N_0^{xy} \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( N_0^{xy} \frac{\partial w}{\partial x} \right) + m_0 \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - m_2 \left( \frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial t^2} + \frac{\partial^4 w}{\partial y^2 \partial t^2} \right) \right] + \\ q + \frac{\partial}{\partial x} \left( N_0^{xx} \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( N_0^{yy} \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( N_0^{xy} \frac{\partial w}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( N_0^{xy} \frac{\partial w}{\partial x} \right) = \\ m_0 \frac{\partial^2 w}{\partial t^2} - m_2 \left( \frac{\partial^4 w}{\partial x^2 \partial t^2} + \frac{\partial^4 w}{\partial y^2 \partial t^2} \right) \end{aligned} \quad (5)$$

که  $D = Eh^3/12(1 - \nu^2)$  و همچنین  $m_0, m_2, \mu, q, N_0$  ها به ترتیب به جرم، نسبت به واحد سطح، ممان اینرسی جرم، بار عرضی توزیع شده، پارامتر غیرمحلی و نیروهای درون صفحه‌ای هستند. برای حل معادله (5) از روش ناپیر استفاده می‌شود. اگر فرض شود که هیچ نیرویی به صفحه اعمال نشود:

$$N_0^{xx} = N_0^{yy} = N_0^{xy} = q = 0 \quad (6)$$

در نتیجه معادله حاکم بصورت رابطه (7) کاهش خواهد یافت [10]:

$$-D(\alpha^2 + \beta^2)^2 W_{mn} = -M_{mn} \lambda_{mn} \omega_{mn} W_{mn} \quad (7)$$

که  $\omega_{mn}$  فرکانس‌های طبیعی می‌باشند و از رابطه (8) بدست می‌آیند [10]:

$$\omega_{mn}^c = \sqrt{\frac{D(\alpha^2 + \beta^2)^2}{M_{mn} \lambda_{mn}}} \quad (8)$$

که  $\alpha, \beta, \lambda$  بصورت رابطه (9) تعریف می‌شوند [10]:

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{m\pi}{a}, \quad \beta = \frac{n\pi}{a} \\ \lambda_{mn} &= 1 + \mu(\alpha^2 + \beta^2) \\ M_{mn} &= m_0 + m_2(\alpha^2 + \beta^2) \end{aligned} \quad (9)$$

که  $m$  و  $n$  نمایانگر شماره‌دهنده مود می‌باشند.

## ۲-۲- روابط حاکم بر دینامیک مولکولی

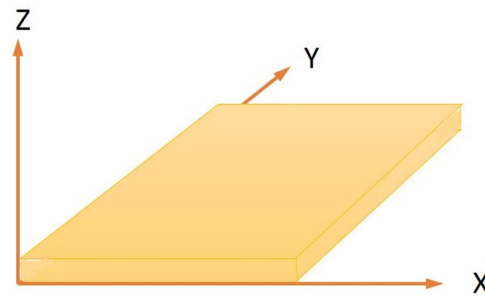
مطالعه رفتار دینامیکی سازه‌ها در مقیاس‌های کوچک امری چالش برانگیز و دشوار است. محققان برای بررسی خواص مکانیکی، حرارتی و الکتریکی و از طرفی رفتار دینامیکی و ارتعاشی مواد مختلف در مقیاس نانو از روش‌های گوناگونی استفاده می‌کنند. از جمله روش‌هایی که برای بررسی رفتار ارتعاشی صفحات گرافن می‌توان از آن بهره برد، روش دینامیک مولکولی است که در تحقیق حاضر مورد استفاده قرار گرفته است. دینامیک مولکولی یکی از شاخه‌های فیزیک محاسباتی

محققان از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی جهت بررسی خواص ارتعاشی و سنجش جرم این ماده بهره برده‌اند ولی تا کنون رفتار حسگر از لحاظ نحوه چینش اتم‌ها در هندسه مستطیلی مورد بررسی قرار نگرفته است. یعنی در حالتی که مساحت صفحه ثابت است، در ضلع بزرگتر صفحه، ذرات می‌توانند در راستای زیگزاگ و یا آرمچیر چیده شوند و اثرات این نحوه چینش بر فرکانس طبیعی حسگر و حساسیت فرکانسی آن تاکنون مورد مطالعه قرار نگرفته است. از آنجا که چیدمان اتم‌ها در مقدار فرکانس رزونانس صفحه و در نتیجه حساسیت فرکانس نسبت به وجود جرم خارجی موثر است؛ بنابراین این موضوع به عنوان هدف اصلی این تحقیق در نظر گرفته شده است. به منظور دستیابی به این هدف، ابتدا فرکانس طبیعی اساسی دو صفحه گرافنی با ابعاد متفاوت بدست آمده و با نتایج حاصل از یک نظریه الاستیسیته غیر محلی و نیز نتایج سایر محققان مقایسه شده است. پس از اطمینان از صحت و دقت مدل‌سازی دینامیک مولکولی حاضر، به بررسی قابلیت سنجش جرمی صفحه گرافنی مربعی و نیز مستطیلی در حضور ذرات متمرکز طلا پرداخته می‌شود. با استفاده از نتایج حاصل، تغییرات فرکانس طبیعی، حساسیت فرکانس نسبت به تغییرات جرم و تاثیر چینش ذرات در حالت‌های مختلف بر فرکانس صفحات مستطیلی مورد مطالعه و بررسی قرار می‌گیرد.

## ۲- مبانی و روش‌ها

### ۲-۱- روابط نظری صفحه کلاسیک غیر محلی

در شکل ۱ یک صفحه همگن تک لایه که به عنوان مدل نظری صفحه گرافنی استفاده خواهد شد، نشان داده شده است.



شکل ۱- صفحه معمولی تک لایه

روابط (۱) تا (۳) معادلات جابجایی برای صفحه تک لایه را بیان می‌کنند [10]:

$$u_x = u(x, y, t) - z \frac{\partial w}{\partial x} \quad (1)$$

$$u_y = v(x, y, t) - z \frac{\partial w}{\partial y} \quad (2)$$

$$u_z = w(x, y, t) \quad (3)$$

که در آن‌ها  $u$  و  $v$  به ترتیب جابجایی نقطه  $(x, y, 0)$  در جهت‌های  $x$  و  $y$  را نشان می‌دهد.

روابط کرنش از معادلات کرنش-جابجایی به صورت زیر می‌باشند [10]:

تکین روی آن اعمال می‌شود و بدین ترتیب مقادیر فرکانس‌های طبیعی و شکل مودها حاصل می‌شوند.

روابط حاکم بر روش تجزیه فرکانسی برپایه رابطه بین خروجی‌ها و ورودی‌های یک سیستم (رابطه ۱۴) استوار هستند [۲۶].

$$G_{yy}(j\omega) = \bar{H}(j\omega)G_{xx}(j\omega)H^T(j\omega) \quad (14)$$

که در آن ماتریس چگالی طیفی توان ورودی،  $G_{xx}$  ماتریس چگالی طیفی توان خروجی و  $H(j\omega)$  ماتریس تابع پاسخ فرکانسی می‌باشد. چگالی توان پاسخ‌ها را می‌توان بر حسب شکل مودها و قطب‌های سیستم به صورت رابطه ۱۵ بیان کرد [۲۷، ۲۵]:

$$G_{yy}(j\omega) = \sum_{k=1}^n \frac{d_k \phi_k \phi_k^t}{j\omega - \lambda_k} + \frac{\bar{d}_k \bar{\phi}_k \bar{\phi}_k^t}{j\omega - \bar{\lambda}_k} \quad (15)$$

که  $d_k$  یک اسکالر،  $\phi_k$  بردار شکل مود  $k$ ام،  $\lambda_k$  نشان دهنده  $k$  امین فرکانس طبیعی و علامت "-" نشان دهنده مزدوج مختلط می‌باشد.

این رابطه بیان می‌کند که در هر فرکانس تعداد محدودی مود در ایجاد پاسخ سیستم شرکت می‌نمایند. در نزدیکی فرکانس‌های طبیعی سیستم، فقط یک مود، به طرز قابل توجهی پاسخ سیستم را می‌سازد. لذا پاسخ در این فرکانس، بسیار شبیه شکل مود این فرکانس خواهد بود. اگر ماتریس چگالی طیفی توان پاسخ، در هر فرکانس به مقادیر و بردارهای تکین آن تجزیه گردد، از آنجایی که مقادیر تکین در ارتباط مستقیم با ضریب شرکت مودها می‌باشند، تعداد مقادیر تکین غیر صفر، نشان دهنده تعداد مودهایی است که پاسخ سیستم را در آن فرکانس می‌سازند و قله‌های اولین مقدار تکین سیستم، معادل با فرکانس‌های طبیعی سیستم خواهد بود [۲۸].

## ۲-۴- مدل‌سازی

یکی از کاربردهای صفحات گرافن که امروزه بسیار مورد توجه قرار گرفته، توانایی تشخیص جرم می‌باشد که به عنوان حسگر جرمی می‌تواند وجود ذرات ریز دیگری را روی سطح صفحه تشخیص دهد. روش تشخیص وجود جرم، بدین صورت است که با مقایسه فرکانس طبیعی صفحه در حضور ذرات و بدون حضور ذرات، امکان شناسایی فراهم می‌گردد. به منظور بررسی حساسیت فرکانس طبیعی به جرم اضافه شده، ابتدا باید فرکانس صفحه بدون حضور ذره استخراج گردد و سپس ذره‌ای بر روی صفحه قرار گیرد و مجدداً فرکانس طبیعی محاسبه شود و از این طریق حساسیت فرکانس طبیعی نسبت به جرم به دست آید (رابطه ۱۶) [۱۴].

$$\text{Sensitivity} = \frac{\omega_{GS} - \omega_H}{\omega_{GS}} \quad (16)$$

که  $\omega_H$  فرکانس طبیعی در حضور ذره روی سطح صفحه گرافن و  $\omega_{GS}$  فرکانس طبیعی صفحه بدون وجود ذره می‌باشد.

از این رو در این تحقیق برای بررسی رفتار ارتعاشی حسگر جرمی و محاسبه حساسیت فرکانس، ابتدا یک صفحه گرافن با هندسه مربعی در محیط دینامیک مولکولی ایجاد شده است (شکل ۲). شرایط مرزی به صورت SSSS در نظر گرفته شده است. به منظور تحریک صفحه نیرویی به مدت ۰/۵ پیکوثانیه در وسط صفحه اعمال گردیده و سپس جابجایی تمام ذرات در مدت ۴۹۸/۵ پیکوثانیه اندازه‌گیری

است که استفاده از آن در تحقیقاتی که آزمایش آن‌ها پرهزینه و زمان‌بر است، پیشنهاد می‌شود. در این روش با تعیین نوع، موقعیت و خواص ذرات، برهمکنش میان آن‌ها در بازه‌هایی از زمان بر اساس قوانین فیزیکی شبیه‌سازی می‌شود. بدین ترتیب پاسخ و خروجی این روش می‌تواند جابجایی هر یک از ذرات باشد، به گونه‌ای که شرایط تعریف شده برای شبیه‌سازی را ارضا کند.

به عبارت دیگر این روش بر پایه قانون دوم نیوتن می‌باشد. با شناخت نیروهای اعمالی به هر یک از ذرات می‌توان شتاب هر یک را به دست آورد. نیروها معمولاً از توابع پتانسیل حاصل می‌شوند که بیانگر انرژی پتانسیل سیستم هستند (رابطه ۱۰) [۲۲].

$$F_i(r_1, r_2, \dots, r_N) = \nabla_{r_i} U(r_1, r_2, \dots, r_N) \quad (10)$$

که  $r_i$  و  $F_i$  به ترتیب بیانگر موقعیت و نیروی وارد بر ذره  $i$  ام،  $U$  تابع انرژی پتانسیل و  $N$  تعداد ذرات است.

در غیاب نیروهای خارجی انرژی پتانسیل به صورت مجموعی از تعاملات دو طرفه بین ذرات بصورت رابطه (۱۱) بیان می‌شود [۲۲]:

$$U = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N u(r_{ij}) \quad (11)$$

که  $r_{ij} = r_i - r_j$  بردار موقعیت می‌باشد.

بدین ترتیب نیروهای وارده بر ذرات به صورت رابطه (۱۲) حاصل می‌شوند [۲۲]:

$$F_i = \sum_{j \neq i}^N \frac{du(r_{ij})}{dr_{ij}} \frac{r_{ij}}{|r_{ij}|} \quad (12)$$

بنابراین برای تعیین مقدار نیرو لازم است که انرژی پتانسیل بین ذرات مشخص باشد. تاکنون محققان روابط مختلفی برای بیان انرژی پتانسیل ارائه کرده‌اند. یکی از روابط پرکاربرد، رابطه لئونارد-جونز<sup>۱</sup> است که به صورت رابطه (۱۳) تعریف می‌شود [۲۲]:

$$u_{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (13)$$

در نتیجه با استفاده از روابط (۱۰) تا (۱۳) و به کارگیری قانون دوم نیوتن برای هر یک از ذرات می‌توان جابجایی هر ذره را به دست آورد.

## ۲-۳- روابط حاکم بر روش تجزیه فرکانسی

روش‌های آنالیز ارتعاشات محیطی به دو دسته کلی؛ پارامتری و غیر پارامتری تقسیم بندی می‌شوند. روش‌های غیر پارامتری با انجام یک مجموعه عملیات ریاضی، بر روی داده‌های اندازه‌گیری شده، در حوزه فرکانس، به استخراج مشخصات دینامیکی سازه می‌پردازند [۲۳] در حالیکه در روش‌های پارامتری، یک مدل پارامتری برای سیستم، در حوزه زمان تقریب زده شده و مستقیماً بر روی پاسخ‌های بدست آمده از داده‌های اندازه‌گیری منطبق می‌شود و مدل دینامیکی سیستم استخراج می‌گردد. یکی از روش‌های غیر پارامتری، روش تجزیه فرکانسی است. در این روش که توسط برینکر و همکارانش [۲۴، ۲۵] ارائه شده، ابتدا ماتریس چگالی طیفی تخمین زده می‌شود و سپس روش تجزیه مقادیر

<sup>1</sup> Lennard-Jones

جدول ۲- نتایج فرکانس طبیعی اساسی صفحات گرافنی مربعی در ابعاد مختلف در حالت SSSS

a (nm)	b (nm)	مرجع	$\mu$ (nm)	$\omega$ (1.1) (THz)
۱۰	۱۰	جلالی و همکاران [18]	۰	۰/۰۶۵۶
			۱	۰/۰۶۰۰
		پرادهان و همکاران [10]	۰	۰/۰۶۵۴
			۱	۰/۰۵۹۸
۱۰/۰۷۸۸	۱۰/۱۲۰۰	معادله (۸)	۰	۰/۰۶۷۸
			۱	۰/۰۶۰۳
		دینامیک مولکولی (مطالعه حاضر)	---	۰/۰۶۰۳
۲/۵	۲/۵	جلالی و همکاران [18]	۰	۰/۰۹۹۷
			۱	۰/۴۸۹۳
		پرادهان و همکاران [10]	۰	۱/۰۰۶۲
			۱	۰/۴۹۳۴
۲/۵۵۶۲	۲/۵۳۰۰	معادله (۸)	۰	۱/۰۸۴۲
			۰/۹۶	۰/۴۸۷۱
		دینامیک مولکولی (مطالعه حاضر)	---	۰/۴۸۳۴

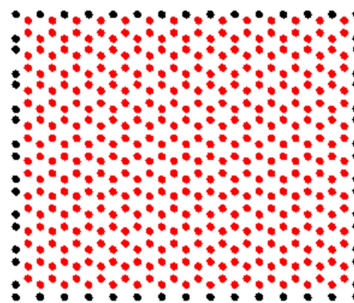
جدول ۲ نشان می‌دهد که روش مورد استفاده در این پژوهش با دقت مناسبی فرکانس طبیعی ورق را محاسبه می‌کند.

### ۲-۳- نتایج و بحث

پس از اطمینان از دقت نتایج حاصل از مدلسازی در محیط دینامیک مولکولی، در این بخش به بررسی رفتار دینامیکی صفحه گرافنی در حضور ذره خارجی پرداخته می‌شود و تغییرات فرکانس طبیعی اساسی و حساسیت فرکانس بر حسب تغییر جرم ذره خارجی به دست آمده و مورد بحث و بررسی قرار می‌گیرد.

بدین منظور یک صفحه گرافنی با ابعاد تقریبی ۳۴×۳۴ آنگستروم و با ۴۷۹ اتم کربن مدل می‌شود (شکل ۳). شرایط مرزی به گونه‌ای انتخاب شده که یک ردیف از اتم‌های هر ضلع در حالت تکیه‌گاهی ساده قرار گیرد. به منظور محاسبه فرکانس طبیعی، ورق تحت ارتعاشات آزاد قرار می‌گیرد. نحوه تحریک و اندازه گیری جابجایی ذرات ورق مطابق آنچه پیش از این اشاره شد، صورت می‌گیرد.

می‌شود. زمان نمونه برداری یک فمتوثانیه می‌باشد. جابجایی‌های اندازه‌گیری شده به کمک روش تجزیه فرکانسی تحلیل و فرکانس طبیعی سیستم محاسبه می‌گردد.



شکل ۲- صفحه مربعی گرافنی

فرآیند شبیه‌سازی فوق برای صفحه مربعی و نیز صفحات مستطیلی در ابعاد مختلف، در حالت بدون ذره و نیز با تعداد ذره مختلف تکرار و در هر مرحله فرکانس طبیعی اساسی و حساسیت فرکانسی محاسبه شده است.

### ۳- نتایج

#### ۳-۱- مقایسه با تجربیات پیشین، صحنه گذاری

به منظور بررسی صحت روش مورد استفاده، نتایج این تحقیق با نتایج سایر محققان، با شرایط و خواص مکانیکی یکسان (جدول ۱) مقایسه می‌شوند.

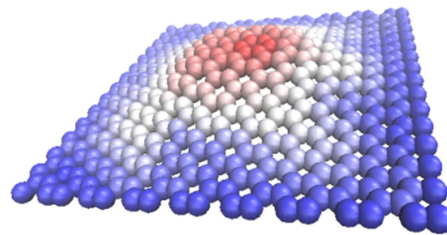
جدول ۱- خواص مکانیکی صفحه یک لایه گرافنی

E (TPa)	$\theta$	$\rho$ (Kg/m <sup>3</sup> )	h (nm)
۱/۰۶	۰/۳	۲۳۰۰	۰/۳۴

به منظور صحنه سنجی، دو ورق گرافنی مربعی با ابعاد تقریبی ۱۰×۱۰ نانومتر و ۲/۵×۲/۵ نانومتر در محیط دینامیک مولکولی ایجاد و با روش مذکور فرکانس طبیعی اساسی آن به دست آمده است. سپس مقادیر فرکانس طبیعی برای هر یک از ورق‌ها از رابطه (۸) محاسبه و از مراجع [۱۰، ۱۸] نیز استخراج شده است. مقدار پارامتر غیر محلی به گونه‌ای انتخاب شده است تا مقدار فرکانس طبیعی حاصل از رابطه (۸) تطابق مناسبی با نتایج سایر محققین داشته باشد. در نتیجه می‌توان نتایج حاصل از روش دینامیک مولکولی را با نتایج سایر محققان و نیز نتایج حاصل از رابطه (۸) مقایسه نمود. نتایج حاصل در جدول ۲ ارائه شده است. در جداول ارائه شده، a و b ابعاد صفحات و  $\mu$  مقدار پارامتر غیر محلی را نمایش می‌دهند.

جدول ۴- فرکانس طبیعی اول صفحه مربعی در حضور ذره طلا

نوع صفحه	ابعاد (nm)	تعداد اتم های طلا	نسبت جرم طلا به گرافن	فرکانس مود اول (THz)	حساسیت
مربع	۳/۴×۳/۴	۱	۰/۰۳۴	۰/۲۱۳۲	۰/۳۲۲۹
		۲	۰/۰۶۸	۰/۲۱	۰/۳۳۳۱
		۳	۰/۱۰۲	۰/۲۰۷۵	۰/۳۴۱۰
		۴	۰/۱۳۶	۰/۲۰۰۲	۰/۳۴۶۲
		۶	۰/۲۰۴	۰/۱۹۰۴	۰/۳۹۵۳
		۹	۰/۳۰۷	۰/۱۸۴۰	۰/۴۱۵۶

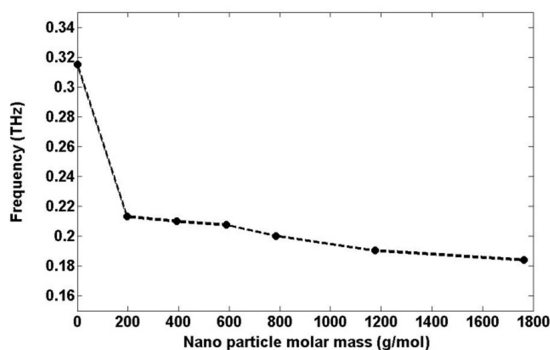


شکل ۳- نمایی از مدل سازی صفحه مربعی گرافنی

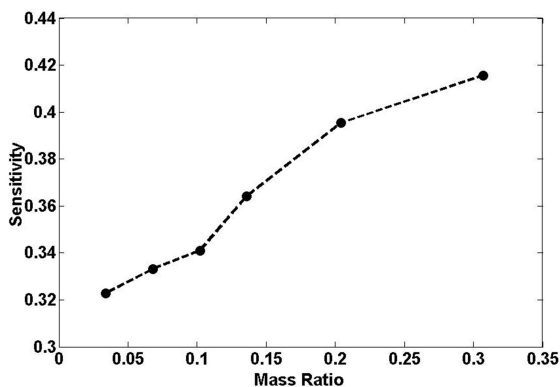
در ابتدا فرکانس طبیعی اول ورق مربعی بدون حضور ذره خارجی محاسبه و با نتایج حاصل از رابطه (۸) مقایسه می شود. (جدول ۳) خواص مورد استفاده در رابطه (۸) بر اساس جدول ۱ می باشد. مقایسه نتایج نشان می دهد که شبیه سازی صورت گرفته با دقت مناسبی فرکانس طبیعی را محاسبه می کند.

جدول ۳- نتیجه فرکانس طبیعی اول صفحه گرافنی مربعی در حالت تکیه گاهی ساده

a (nm)	b (nm)	مرجع	$e_0 a_0$ (nm)	$\omega(1.1)$ (THz)
۳/۴	۳/۴	معادله (۸)	۱	۰/۳۱۹۵
			۱/۰۵	۰/۳۱۴۶
		دینامیک مولکولی (مطالعه حاضر)	---	۰/۳۱۴۹



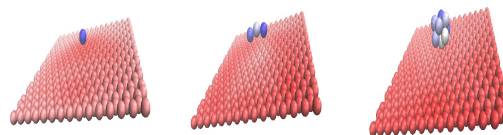
شکل ۵- فرکانس طبیعی اول صفحه گرافن مربعی در حضور اتم های طلا بر حسب جرم مولی ذرات



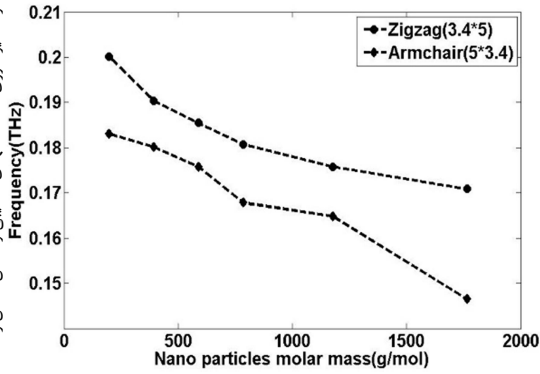
شکل ۶- تغییرات حساسیت صفحه گرافن مربعی در حضور اتم های طلا بر حسب نسبت جرم

در ادامه به بررسی رفتار حسگر جرمی در هندسه مستطیلی پرداخته می شود. مراحل مدل سازی، اعمال شرایط اولیه و تحریک مطابق آنچه پیش از این بیان شد صورت گرفته است. جایابی ذرات با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی به دست آمده و به کمک روش تجزیه فرکانسی، فرکانس طبیعی صفحات به دست آمده است. جدول ۵ فرکانس طبیعی اول صفحات مستطیلی و جدول ۶ حساسیت فرکانسی صفحات را در ابعاد مختلف نشان می دهد. ابعاد مختلف صفحه

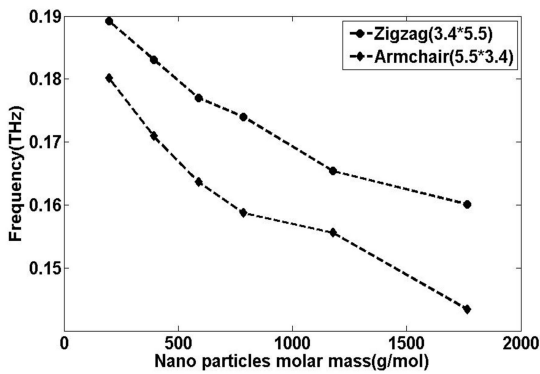
پس از اطمینان از دقت محاسبه فرکانس در ابعاد مورد بررسی، فرکانس طبیعی اول ورق در حضور ذره خارجی به دست می آید. این محاسبه چندین بار تکرار و در هر مرحله با افزایش تعداد ذرات، فرکانس طبیعی مجدداً محاسبه می شود (شکل ۴). نتایج حاصل از این بررسی در جدول ۴ ارائه شده است. ابعاد صفحه گرافنی و همچنین تعداد اتم های طلا موجود روی صفحه گرافنی و حساسیت صفحات به جرم اضافه شده نیز در جدول ارائه شده است. نتایج مندرج در جدول ۴ نشان می دهد که با افزایش تعداد ذرات خارجی، فرکانس طبیعی اول ورق کاهش و حساسیت فرکانسی افزایش می یابد. به منظور بررسی بهتر نتایج، نمودار فرکانس طبیعی بر حسب جرم مولی ذرات طلا در شکل ۵ و حساسیت فرکانسی بر حسب نسبت جرم در شکل ۶ ارائه شده است.



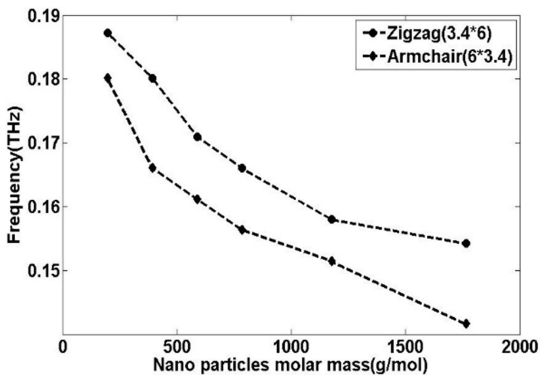
شکل ۴- نمایی از مدل سازی صفحات مربعی گرافنی با تعداد مختلف اتم



شکل ۷- فرکانس طبیعی اول صفحات گرافن مستطیلی با ابعاد  $5 \times 3/4$  و  $3/4 \times 5$  نانومتر در حضور اتم های طلا بر حسب جرم مولی ذرات



شکل ۸- فرکانس طبیعی اول صفحات گرافن مستطیلی با ابعاد  $5/5 \times 3/4$  و  $3/4 \times 5/5$  نانومتر در حضور اتم های طلا بر حسب جرم مولی ذرات



شکل ۹- فرکانس طبیعی اول صفحات گرافن مستطیلی با ابعاد  $6 \times 3/4$  و  $3/4 \times 6$  نانومتر در حضور اتم های طلا بر حسب جرم مولی ذرات

مستطیلی بدین صورت ایجاد شده است که در حالتی که مساحت صفحه ثابت است، یک بار ذرات در راستای ضلع بزرگتر صفحه، به صورت زیگزاگ (حالت زیگزاگ) و بار دیگر به صورت آرمچیر (حالت آرمچیر) چیده شده است.

جدول ۵- فرکانس طبیعی اول صفحات مستطیلی در حضور ذره

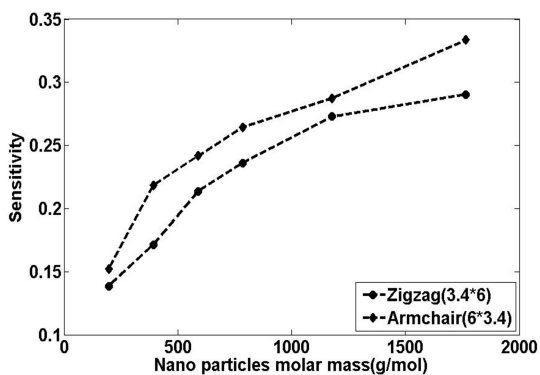
طلا

ابعاد (a×b) (Zigzag-Armchair)	تعداد اتم های طلا				
	۱	۲	۳	۴	۶
۳/۴×۵	۰/۲۰۰۲	۰/۱۸۹۲	۰/۱۸۷۲	۰/۱۸۷۲	۰/۱۷۵۸
۳/۴×۵/۵	۰/۱۹۰۴	۰/۱۸۳۱	۰/۱۸۰۱	۰/۱۸۰۱	۰/۱۷۰۹
۳/۴×۶	۰/۱۸۵۵	۰/۱۷۷۰	۰/۱۷۷۰	۰/۱۷۶۰	۰/۱۶۶۰
۳/۴×۶/۸	۰/۱۸۰۷	۰/۱۷۴۰	۰/۱۷۴۰	۰/۱۷۴۰	۰/۱۶۳۵
۵×۳/۴	۰/۱۷۵۸	۰/۱۶۵۴	۰/۱۶۵۴	۰/۱۶۵۴	۰/۱۵۴۲
۵/۵×۳/۴	۰/۱۷۰۹	۰/۱۶۰۱	۰/۱۶۰۱	۰/۱۶۰۱	۰/۱۴۱۶
ابعاد (a×b) (Zigzag-Armchair)	تعداد اتم های طلا				
۳/۴×۵	۰/۱۸۳۱	۰/۱۸۰۷	۰/۱۸۰۱	۰/۱۸۰۱	۰/۱۶۶۰
۳/۴×۵/۵	۰/۱۸۰۱	۰/۱۷۰۹	۰/۱۶۶۰	۰/۱۶۶۰	۰/۱۶۱۱
۳/۴×۶	۰/۱۷۵۸	۰/۱۶۳۶	۰/۱۶۱۱	۰/۱۶۱۱	۰/۱۵۸۵
۳/۴×۶/۸	۰/۱۶۷۸	۰/۱۵۸۷	۰/۱۵۶۳	۰/۱۵۶۳	۰/۱۵۵۸
۵×۳/۴	۰/۱۶۴۸	۰/۱۵۵۶	۰/۱۵۱۴	۰/۱۵۱۴	۰/۱۴۹۵
۵/۵×۳/۴	۰/۱۶۶۵	۰/۱۴۳۴	۰/۱۴۱۶	۰/۱۴۱۶	۰/۱۳۱۲

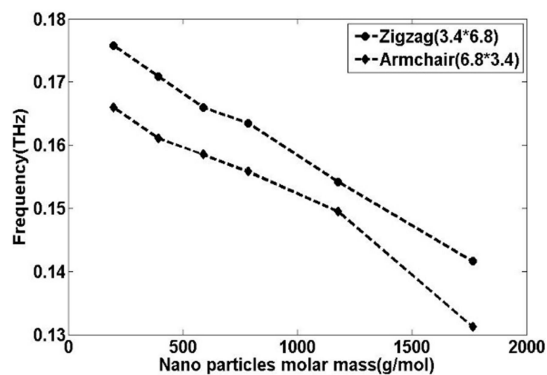
جدول ۶- حساسیت فرکانسی صفحات مستطیلی در حضور ذره طلا

ابعاد (a×b) (Zigzag-Armchair)	تعداد اتم های طلا					
	۱	۲	۳	۴	۶	۹
۳/۴×۵	۰/۲۶۷	۰/۳۰۱	۰/۳۲۱	۰/۳۳۹	۰/۳۵۷	۰/۳۷۵
۳/۴×۵/۵	۰/۲۴۷	۰/۲۷۲	۰/۲۹۶	۰/۳۰۸	۰/۳۲۲	۰/۳۳۳
۳/۴×۶	۰/۱۳۸	۰/۱۷۱	۰/۲۱۳	۰/۲۳۶	۰/۲۷۳	۰/۲۹۰
۳/۴×۶/۸	۰/۱۳۲	۰/۱۵۶	۰/۱۸۰	۰/۱۹۳	۰/۲۳۹	۰/۲۰۱
۵×۳/۴	۰/۳۱۲	۰/۳۲۳	۰/۳۳۹	۰/۳۶۹	۰/۳۸۰	۰/۴۴۹
۵/۵×۳/۴	۰/۲۵۲	۰/۲۹۳	۰/۳۲۳	۰/۳۴۳	۰/۳۵۶	۰/۴۰۶
۶×۳/۴	۰/۱۵۲	۰/۲۱۸	۰/۲۴۱	۰/۲۶۴	۰/۲۸۷	۰/۳۳۳
۶/۸×۳/۴	۰/۱۶۱	۰/۱۸۵	۰/۱۹۸	۰/۲۰۸	۰/۲۴۴	۰/۲۳۶

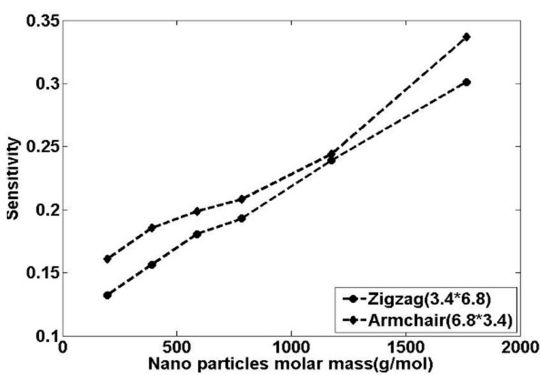
جهت درک بهتر نتایج جداول ۵ و ۶، نمودار نتایج صفحات مستطیلی با مساحت یکسان در دو حالت متفاوت زیگزاگ و آرمچیر در شکل های ۷ تا ۱۴ نمایش داده شده است.



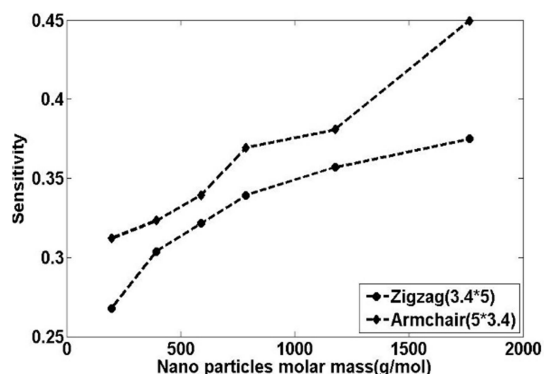
شکل ۱۳- حساسیت فرکانسی صفحات گرافن مستطیلی با ابعاد (۳/۴×۶ و ۶×۳/۴) نانومتر در حضور اتم های طلا بر حسب جرم مولی ذرات



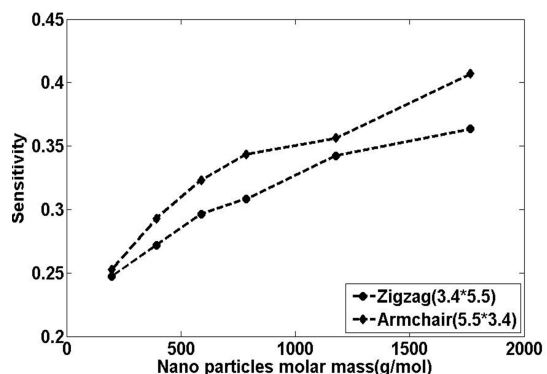
شکل ۱۰- فرکانس طبیعی اول صفحات گرافن مستطیلی با ابعاد (۳/۴×۶/۸ و ۶/۸×۳/۴) نانومتر در حضور اتم های طلا بر حسب جرم مولی ذرات



شکل ۱۴- حساسیت فرکانسی صفحات گرافن مستطیلی با ابعاد (۳/۴×۶/۸ و ۶/۸×۳/۴) نانومتر در حضور اتم های طلا بر حسب جرم مولی ذرات



شکل ۱۱- حساسیت فرکانسی صفحات گرافن مستطیلی با ابعاد (۳/۴×۵ و ۵×۳/۴) نانومتر در حضور اتم های طلا بر حسب جرم مولی ذرات



شکل ۱۲- حساسیت فرکانسی صفحات گرافن مستطیلی با ابعاد (۳/۴×۵/۵ و ۵/۵×۳/۴) نانومتر در حضور اتم های طلا بر حسب جرم مولی ذرات

بررسی نتایج حاصل نشان می‌دهد که، فرکانس طبیعی اول صفحه مربعی با اضافه شدن اولین اتم طلا کاهش یافته است که این امر با توجه به جرم مولی بالای طلا همانطور که انتظار می‌رفت رخ داده است. با اضافه شدن تعداد اتم‌ها، روند کاهشی فرکانس همچنان ادامه دارد اما به دلیل اثر نیروی بین مولکولی ذرات طلا بر هم که به صورت توده بر روی صفحه گرافنی قرار گرفته‌اند، شدت کاهش فرکانس طبیعی کم شده است. نتایج نشان می‌دهد که هرچه جرم اضافه شده یا نسبت جرم، بیشتر باشد، حساسیت صفحه بیشتر خواهد بود. بدین ترتیب تشخیص ذرات با جرم مولی بیشتر توسط صفحه گرافن ساده‌تر خواهد بود. در صفحات مستطیلی نیز مانند صفحه مربعی با اضافه شدن تعداد ذرات فرکانس طبیعی کاهش می‌یابد. این روند کاهشی در فرکانس‌ها برای هر دو حالت از صفحات مستطیلی (زیگزاگ و آرمچیر) صدق می‌کند. با مقایسه فرکانس‌های طبیعی برای صفحات مستطیلی با مساحت یکسان، مشاهده می‌شود که صفحات در حالت زیگزاگ، فرکانس طبیعی بالاتری نسبت به صفحات در حالت آرمچیر دارند و به عبارت دیگر دارای سفتی بالاتری هستند. با بررسی حساسیت فرکانسی صفحات مستطیلی می‌توان مشاهده کرد که با افزایش ابعاد صفحات، حساسیت فرکانسی کاهش می‌یابد و هم چنین صفحات در حضور تعداد ذرات بیشتر، حساسیت بالاتری ارائه می‌دهند. با مقایسه نتایج



[5] Arash B., Wang Q., and Varadan V.K., Carbon Nanotube-Based Sensors for Detection of Gas Atoms. *Journal of Nanotechnology in Engineering and Medicine*, Vol. 2, No.2, pp. 021010-02101, 2011.

[6] Sakhae-Pour A., Ahmadian M.T., and Vafai A., Applications of single-layered graphene sheets as mass sensors and atomistic dust detectors. *Solid State Communications*, Vol. 145, No.4, pp. 168-172, 2008.

[7] Mohammadi M., Ghayour M., and Farajpour A., Free transverse vibration analysis of circular and annular graphene sheets with various boundary conditions using the nonlocal continuum plate model. *Composites Part B: Engineering*, Vol. 45, No.1, pp. 32-42, 2013.

[8] Sarrami-Foroushani, S. and Azhari M., Nonlocal vibration and buckling analysis of single and multi-layered graphene sheets using finite strip method including van der Waals effects. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Vol. 57, pp. 83-95, 2014.

[9] Ghashochi-Bargh H. and Razavi S., A simple analytical model for free vibration of orthotropic and functionally graded rectangular plates. *Alexandria Engineering Journal*, Vol. 57, No.2, pp.595-607, 2017.

[10] Pradhan S.C. and Phadikar J.K., Nonlocal elasticity theory for vibration of nanoplates. *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 325, No.1, pp. 206-223, 2009.

[11] Adhikari S. and Chowdhury R., Zeptogram sensing from gigahertz vibration: Graphene based nanosensor. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Vol. 44, No.7, pp. 1528-1534, 2012.

[12] Shen Z.B., Tang H.L., Li D.K., and Tang G.J., Vibration of single-layered graphene sheet-based nanomechanical sensor via nonlocal Kirchhoff plate theory. *Computational Materials Science*, Vol. 61, pp. 200-205, 2012.

[13] Arash B., Wang Q., and Duan W.H., Detection of gas atoms via vibration of graphenes. *Physics Letters A*, Vol. 375, No.24, pp. 2411-2415, 2011.

[14] Sadeghzadeh S., Nanoparticle mass detection by single and multilayer graphene sheets: Theory and simulations. *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 40, No.17-18, pp. 7862-7879, 2016.

[15] Gong X., Jiang S., Wang X., Liu S., and Wang S., Finite element analysis of graphene resonator tuned by pressure difference. in *2014 15th International Conference on Electronic Packaging Technology*. 2014.

[16] Wang J., Xu C., Hu H., Wan L., Chen R., Zheng H., Liu F., Zhang M., Shang X., and Wang X., Synthesis, mechanical, and barrier properties of LDPE/graphene nanocomposites using vinyl triethoxysilane as a coupling agent. *Journal of Nanoparticle Research*, Vol. 13, No.2, pp. 869-878, 2011.

[17] Wang Q. and Arash B., A review on applications of carbon nanotubes and graphenes as nano-resonator sensors. *Computational Materials Science*, Vol. 82, pp. 350-360, 2014.

[18] Jalali S.K., Naei M.H., and Pugno N.M., Graphene-Based Resonant Sensors for Detection of Ultra-Fine Nanoparticles: Molecular Dynamics and Nonlocal Elasticity Investigations. *Nano*, Vol. 10, No.2, pp. 1550024, 2014.

[19] Mirakhory M., Khatibi M.M., and Sadeghzadeh S., Vibration analysis of defected and pristine triangular single-layer graphene nanosheets. *Current Applied Physics*, Vol. 18, No.11, pp. 1327-1337, 2018.

[20] Sadeghzadeh, S. and M.M. Khatibi, Vibrational modes and frequencies of borophene in comparison with graphene nanosheets. *Superlattices and Microstructures*, Vol. 117, pp. 271-282, 2018.

[21] Li X., Xiao T., and Xiao N., The application of nonlocal theory method in the coarse-grained molecular dynamics simulations of long-chain

حساسیت برای حالت‌های زیگزاگ و آرمچیر ملاحظه می‌شود که حساسیت در صفحه‌های حالت آرمچیر بیشتر است.

#### ۴- نتیجه گیری

صفحه تک لایه گرافنی با ساختار دو بعدی دارای خواص و کاربردهای ویژه و بعضاً منحصر به فردی است که امروزه نقش پررنگی در علم و صنعت پیدا کرده است. جرم ذره اضافه شده روی سطح صفحه گرافنی می‌تواند با اندازه‌گیری تغییرات فرکانس رزونانس صفحه گرافنی به دست آید. در تحقیق حاضر به بررسی حساسیت فرکانس صفحه گرافن مربعی به اضافه شدن ذرات طلا روی صفحه پرداخته شده و تاثیر افزایش جرم ذرات بر فرکانس طبیعی صفحه مورد مطالعه قرار گرفته است. همچنین تاثیر چیدمان ذرات در صفحه مستطیلی در دو حالت زیگزاگ و آرمچیر در حضور ذرات طلا، مورد بررسی قرار گرفته و نتایج فرکانس طبیعی اساسی و حساسیت فرکانسی محاسبه شده است. نتایج حاصل از این مطالعه را می‌توان بصورت زیر دسته‌بندی نمود:

۱. رفتار دینامیکی و ارتعاشی صفحات گرافنی را می‌توان با دقت خوبی از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار داد.
۲. نتایج نشان می‌دهند که صفحه گرافنی می‌تواند به عنوان حسگر جرمی نانومکانیکی حساسیت بالایی داشته باشد.
۳. فرکانس طبیعی اول صفحه مربعی با اضافه شدن اولین اتم طلا به دلیل جرم مولی بالای این اتم، به میزان ۳۲/۳۹٪ کاهش پیدا کرده است.
۴. با اضافه شدن تعداد اتم‌های طلا و در نتیجه آن، افزایش جرم اضافه شده، فرکانس طبیعی بیشتر کاهش می‌یابد ولی شدت کاهش نسبت به حالتی که اولین ذره به صفحه اضافه شده است؛ به مراتب کمتر است.
۵. افزایش بعد در راستای زیگزاگ در صفحه مستطیلی فرکانس طبیعی بالاتری نسبت به حالت آرمچیر ارائه می‌دهد.
۶. حساسیت فرکانسی برای صفحات مستطیلی با ضلع بزرگتر در راستای آرمچیر بیشتر از حالت زیگزاگ می‌باشد.
۷. نتایج ارائه شده در این تحقیق می‌تواند روش طراحی مفیدی را برای حسگرهای جرمی بر پایه گرافن ارائه دهد.

#### ۵- مراجع

[1] Tsiamaki A.S., Georgantzinos S.K., and Anifantis N.K., Monolayer graphene resonators for mass detection: A structural mechanics feasibility study. *Sensors and Actuators A: Physical*, Vol. 217, pp. 29-38, 2014.

[2] Lee C., Wei X., Kysar J.W., and Hone J., Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *Science*, Vol. 321, No.5887, pp. 385-8, 2008.

[3] Yang L., Park C.W., Son Y.W., Cohen M.L., and Louie S.G., Quasiparticle Energies and Band Gaps in Graphene Nanoribbons. *Physical Review Letters*, Vol. 99, No.18, pp. 186801, 2007.

[4] Zhang C., Kang W., and Wang J., Thermal conductance of one-dimensional materials calculated with typical lattice models. *Physical Review E*, Vol. 94, No.5, pp. 052131, 2016.

- polylactic acid. *Acta Mechanica Solida Sinica*, Vol. 30, No.6, pp. 630-637, 2017.
- [22] Rapaport D.C., *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. 2 ed., Cambridge: Cambridge University Pres, 2004.
- [23] Wenzel, H., *Ambient Vibration Monitoring*, in *Encyclopedia of Structural Health Monitoring*., John Wiley & Sons, Ltd, 2009.
- [24] Le T.P. and Argoul P., Modal identification using the frequency-scale domain decomposition technique of ambient vibration responses. *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 384, pp. 325-338, 2016
- [25] Rune B., Lingmi Z., and Palle A., Modal identification of output-only systems using frequency domain decomposition. *Smart Materials and Structures*, Vol. 10, No.3, pp. 441, 2001.
- [26] Brandt, A., *Noise and vibration analysis : signal analysis and experimental procedures*. 1 ed, John Wiley & Sons, 2011.
- [27] Ewins, D.J., *Modal Testing: Theory, Practice and Application (Mechanical Engineering Research Studies: Engineering Dynamics Series)*. Wiley, 2003.
- [28] Sadeghzadeh S. and Khatibi M.M., Modal identification of single layer graphene nano sheets from ambient responses using frequency domain decomposition. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, Vol. 65, pp. 70-78, 2017