

ارتعاشات آزاد نانوصفحات دولایه‌ی گرافن - برن‌نیتريد با استفاده از نظریه‌ی آیفانتیس و روش ریتز

سیما ضیایی (استادیار)

گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه باسوج

مهندسی مکانیک شریف، (پاییز ۱۳۹۶)
دوری ۲ - ۳، شماره ۲، ص. ۱۱۳-۱۰۳

نانوتشدیدگرهای آشکارساز جرم، نانوحسگرهایی‌اند که جرم‌های خارجی چسبیده به آنها بر اساس جابه‌جایی بسامد پایه‌ی حسگرها شناسایی می‌شوند. در این پژوهش سعی شده است که در کنار تعیین فاصله‌ی تعادلی و تقریب غیرخطی نیروی واندروالز میان نانوصفحات دولایه‌ی برن‌نیتريد - برن‌نیتريد و نانوصفحات دولایه‌ی گرافن - برن‌نیتريد، بسامد پایه‌ی این دو معماری نیز یافت شود و تأثیر شرایط مرزی بر آن بررسی شود. در ضمن، قدرت شناسایی جرم نانوصفحات دولایه با دو معماری متفاوت گرافن - برن‌نیتريد و برن‌نیتريد - برن‌نیتريد نیز مطالعه شده است. به این منظور، از تلفیق نظریه‌ی کلاسیک ورق با نظریه‌ی آیفانتیس بهره گرفته شده است. نتایج بیان می‌کند که معماری برن‌نیتريد - برن‌نیتريد جابه‌جایی بسامد پایه‌ی بیشتری نسبت به معماری گرافن - برن‌نیتريد نشان می‌دهد. در ضمن با افزایش مقیاس کوچک، حساسیت نانوصفحات دولایه‌ی گرافن - برن‌نیتريد مستطیلی به جرم خارجی نسبت به نانوصفحات هم‌وزن مربعی با همان معماری کاهش می‌یابد.

واژگان کلیدی: نانوحسگرهای جرم، نانوصفحات دولایه‌ی گرافن - برن‌نیتريد، نظریه‌ی ورق غیرکلاسیک.

ziaee@yu.ac.ir

۱. مقدمه

نانوسازه‌های دوبعدی مانند نانوصفحات گرافن و نانوصفحات برن‌نیتريد دارای خواص منحصر به فردی هستند که می‌توانند گزینه‌های مناسبی برای گستره‌ی وسیعی از کاربردها باشند. نانوصفحات گرافن با خواص الکتریکی، مکانیکی، حرارتی، و نورشناختی برجسته‌ی خود می‌توانند گزینه‌ی مناسبی برای استفاده در پوشش سطح، حسگرهای شیمیایی، نانوکامپوزیت‌ها با پایه‌ی گرافن،^[۱] ابرخازن‌ها، الکترودهای ترانزا، سلول‌های نیروزای نوری، و دستگاه‌های زیستی^[۲] باشند. از این رو، تحقیقات زیادی درباره‌ی رفتار مکانیکی نانوصفحات گرافن تک‌لایه و چندلایه صورت گرفته است. ظرفیت تحمل بار ایستایی،^[۳-۷] ارتعاشات خطی^[۸-۱۱] و ارتعاشات غیرخطی^[۱۲،۱۳] از جمله مواردی است که بسیار به آنها پرداخته شده است.

نانوصفحه‌ی برن‌نیتريد همچون نانوصفحه‌ی گرافن، دارای ساختار شبکه‌ی لانه‌زنبوری است با این تفاوت که به جای اتم‌های کربن، به صورت یک درمیان اتم‌های برن و نیتروژن در شبکه قرار گرفته‌اند.^[۱۴] نانوسازه‌های برن‌نیتريد علاوه بر پایداری قوی شیمیایی و حرارتی، عایق الکتریکی، و هدایت حرارتی خارق‌العاده، قابلیت حس جرم را نیز از خود نشان می‌دهند^[۱۵] و تاکنون به‌عنوان عایق با هدایت حس‌گرهای در اندازه‌ی نانو از جمله حس‌گرهایی‌اند که با کوچک‌ترین تغییر در کمیت‌های قابل اندازه‌گیری می‌توانند مولکول‌های حاضر شیمیایی و بیولوژیکی را با حساسیتی بالا شناسایی کنند. تشخیص نشستی گاز، تشخیص بیماری‌ها برخی از زمینه‌های کاربردی حس‌گرهای با قابلیت شناسایی با حساسیت بالا هستند.^[۱۶] نانوصفحات گرافن به دلیل مدول الاستیسیته بزرگ، جرم بسیار کوچک، و مساحت سطح بزرگ نانوتشدیدگرهای ایده‌آلی برای تشخیص جرم، نیرو، و شارژ هستند.^[۱۷] آرش و همکاران^[۱۸] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، قابلیت نانوتشدیدگری گرافن را برای کاوش‌گری گازهای نجیب مانند هلیوم، آرگون، و نئون مطالعه کرده‌اند. نتایج

نانوسازه‌های دوبعدی مانند نانوصفحات گرافن و نانوصفحات برن‌نیتريد دارای خواص منحصر به فردی هستند که می‌توانند گزینه‌های مناسبی برای گستره‌ی وسیعی از کاربردها باشند.

نانوصفحات گرافن با خواص الکتریکی، مکانیکی، حرارتی، و نورشناختی برجسته‌ی خود می‌توانند گزینه‌ی مناسبی برای استفاده در پوشش سطح، حسگرهای شیمیایی، نانوکامپوزیت‌ها با پایه‌ی گرافن،^[۱] ابرخازن‌ها، الکترودهای ترانزا، سلول‌های نیروزای نوری، و دستگاه‌های زیستی^[۲] باشند. از این رو، تحقیقات زیادی درباره‌ی رفتار مکانیکی نانوصفحات گرافن تک‌لایه و چندلایه صورت گرفته است. ظرفیت تحمل بار ایستایی،^[۳-۷] ارتعاشات خطی^[۸-۱۱] و ارتعاشات غیرخطی^[۱۲،۱۳] از جمله مواردی است که بسیار به آنها پرداخته شده است.

نانوصفحه‌ی برن‌نیتريد همچون نانوصفحه‌ی گرافن، دارای ساختار شبکه‌ی لانه‌زنبوری است با این تفاوت که به جای اتم‌های کربن، به صورت یک درمیان اتم‌های برن و نیتروژن در شبکه قرار گرفته‌اند.^[۱۴] نانوسازه‌های برن‌نیتريد علاوه بر پایداری قوی شیمیایی و حرارتی، عایق الکتریکی، و هدایت حرارتی خارق‌العاده، قابلیت حس جرم را نیز از خود نشان می‌دهند^[۱۵] و تاکنون به‌عنوان عایق با هدایت

تاریخ: دریافت ۱۳۹۵/۳/۵، اصلاحیه ۱۳۹۵/۶/۲۱، پذیرش ۱۳۹۵/۹/۷.

لنارد - جز ۶-۱۲ به صورت زیر بیان می‌شود: [۱۳]

$$V(r) = 4\varepsilon_{12} \left(\frac{\sigma_{12}^2}{r^{12}} - \frac{\sigma_{12}^6}{r^6} \right) \quad (1)$$

که در آن ε_{12} و σ_{12} پارامترهای لنارد - جتز هستند که مقادیر آنها برای اتم‌های کربن، برن، و نیتروژن در جدول ۱ فهرست شده است. ثابت‌های برن نیتريد و کربن - برن نیتريد بر اساس قانون مخلوط که در آن ε_{12} و σ_{12} به صورت $\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_{12} \varepsilon_2}$ و $\sigma_{12} = (\sigma_1 + \sigma_2)/2$ تعريف می‌شوند، به دست آمده‌اند. [۲۷]

نیروی واندروالز را می‌توان با مشتق‌گیری از انرژی پتانسیل لنارد - جتز ۶-۱۲ نسبت به فاصله‌ی بین اتمی r به دست آورد: [۱۳]

$$F(r) = -\frac{\partial V(r)}{\partial r} = \frac{24\varepsilon_{12}}{\sigma_{12}} \left(2 \left(\frac{\sigma_{12}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{12}}{r} \right)^6 \right) \quad (2)$$

با استفاده از بسط تیلور حول فاصله‌ی تعادلی \bar{r} می‌توان نیروی واندروالز بین دو اتم را که در راستای دو اتم است به صورت زیر تقریب زد:

$$F(r) = F(\bar{r}) - \frac{24\varepsilon_{12}}{\sigma_{12}^2} \left(26 \left(\frac{\sigma_{12}}{\bar{r}} \right)^{12} - 7 \left(\frac{\sigma_{12}}{\bar{r}} \right)^6 \right) (r - \bar{r}) + \frac{12\varepsilon_{12}}{\sigma_{12}^3} \left(364 \left(\frac{\sigma_{12}}{\bar{r}} \right)^{10} - 56 \left(\frac{\sigma_{12}}{\bar{r}} \right)^4 \right) (r - \bar{r})^2 - \frac{336}{\sigma_{12}^4} \left(65 \left(\frac{\sigma_{12}}{\bar{r}} \right)^{16} - 6 \left(\frac{\sigma_{12}}{\bar{r}} \right)^{10} \right) (r - \bar{r})^3 \quad (3)$$

که مقدار نیروی واندروالز در فاصله‌ی تعادلی صفر است (یعنی $F(\bar{r}) = 0$) که مبنایی برای تعیین فاصله‌ی تعادلی نیز هست. [۲۸] جمعه‌زاده و همکاران [۱۳] با استناد به این نکته که نیروی واندروالز تابع فردی از فضای بین دو لایه است از جمله‌ی دوم بسط تیلور صرف نظر کرده‌اند.

برای تعیین برهم‌کنش بین دو لایه‌ی نانوصفحه در راستای عمود بر صفحات، باید برآیند کل نیروهای واندروالز بین کل اتم‌ها در راستای عمود بر صفحه تصویر شود. [۲۸، ۱۳]

آنچه در ادامه می‌آید براساس صفحاتی بی‌نهایت از اتم‌ها و بهره‌گیری از چگالی سطح اتم (یعنی تعداد اتم بر واحد سطح) است. در ضمن چگالی سطح اتم کربن در صفحه‌ی گرافن $\rho_c = 4 / (3\sqrt{3}l_c^2)$ است [۱۳] و چگالی سطح اتم‌های برن و نیتروژن در صفحه‌ی برن نیتريد به ترتیب $\rho_b = 2 / (3\sqrt{3}l_{bn}^2)$ و $\rho_n = 2 / (3\sqrt{3}l_{bn}^2)$ می‌آید که در آن‌ها l_c و l_{bn} به ترتیب طول باند بین اتم‌های برن و نیتروژن و طول باند بین اتم‌های کربن قبل از تغییر شکل هستند.

۱.۲. نیروی واندروالز بین صفحه‌ی گرافن و برن نیتريد

با توجه به تعريف چگالی سطح اتم (تعداد اتم بر واحد سطح)، تعداد اتم‌های کربن در مساحت dA بر روی صفحه‌ی گرافن $\rho_c dA$ است. [۲۸، ۱۳] فاصله‌ی بین نقطه‌ی

جدول ۱. ثابت‌های لنارد - جتز برای اتم‌های مختلف. [۲۷]

σ (Å)	ε (eV)	
۳٫۳۶۹	۰٫۰۰۲۶۳۵	C
۳٫۴۵۳	۰٫۰۰۰۴۱۱۶	B
۳٫۳۶۵	۰٫۰۰۰۶۲۸۱	N
۳٫۴۱	۰٫۰۰۰۵۰۸۵	BN
۳٫۳۹	۰٫۰۰۰۳۶۶	C - BN

آنها نشان می‌دهد که حساسیت نانوتشدیدگر با توجه به تعداد و محل قرارگیری اتم‌های گاز، ابعاد صفحه‌ی گرافن، و شرایط مرزی تغییر می‌کند. سخایی پور و همکاران [۲۳] با استفاده از روش مکانیک سازه‌ی - مولکولی رفتار ارتعاشی حس‌گرهای جرم ساخته‌شده از صفحات گرافن بی‌عیب را مطالعه کرده‌اند. مورمو و ادھیکاری [۲۴] با استفاده از نظریه‌ی ورق غیرمحللی، امکان استفاده از نانوصفحه‌ی تک‌لایه‌ی گرافن با پیکربندی یک‌سردرگیر را به‌عنوان حسگر جرم بررسی کرده‌اند. به روشی مشابه، کارلیسیک و همکاران [۱۱] تأثیر میدان مغناطیسی بر امکان کاربرد نانوصفحه‌ی تک‌لایه‌ی گرافن با تکیه‌گاه‌های ساده را به‌عنوان نانوحسگر جرم مطالعه کرده‌اند. کیم و پارک [۲۵] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان دادند که دمای محیط و عیوب تهی جای از جمله عوامل مؤثر بر وضوح حس‌گری و فاکتور Q گرافن هستند.

پیش‌بینی خواص مکانیکی نانوسازه‌های ترکیبی ساخته‌شده از گرافن - برن نیتريد به صورت یک سیستم لایه‌ی متشکل از نانوسازه‌های برن نیتريد و نانوسازه‌های کربنی [۲۷، ۲۶] از جمله مباحثی است که اخیراً به آن پرداخته می‌شود. مثلاً ارتعاش و اصطکاک داخلی نانوسازه‌ی هیبریدی مشتمل بر تک‌لایه‌ی گرافن قرارگرفته میان دو لایه‌ی برن نیتريد (BN/G/BN) تحت فشار خارجی بررسی شده است. [۲۶] نتایج نشان می‌دهد که نه تنها ضریب اصطکاک داخلی معماری BN/G/BN، ۶۶٫۶۷ درصد بیشتر از ضریب اصطکاک داخلی یک نانوصفحه‌ی سه‌لایه‌ی گرافن است بلکه بسامد طبیعی این معماری نیز بیشتر است. حساسیت بیشتر بسامد طبیعی درون صفحه‌ی گرافن در معماری BN/G/BN به فشار خارجی، در مقایسه با مواد معمول، این معماری را به‌عنوان حس‌گر در میکرو/نانوحس‌گرهای نیرو حائز اهمیت می‌کند. [۲۶]

با توجه به مطالعات اندکی که درباره‌ی نانوصفحات ترکیبی - لایه‌ی متشکل از برن نیتريد و گرافن شده است، در این مطالعه به ارتعاشات جانبی صفحات دولایه با معماری G/BN پرداخته شده است و با رفتار ارتعاشی صفحات دولایه‌ی گرافن (G/G) و برن نیتريد (BN/BN) مقایسه شده است. همچنین امکان بهره‌گیری از این معماری به‌عنوان نانوحس‌گر جرم بررسی شده است. به این منظور، میزان جابه‌جایی بسامد طبیعی این معماری به‌ازای وجود یک جرم ذره‌ی در میانه‌ی نانورق مطالعه شده است. برای دستیابی به اهداف ذکرشده، ابتدا نیروی واندروالز بین صفحات با استفاده از معادله‌ی لنارد - جونز ۶-۱۲ شبیه‌سازی شده است. با استفاده از نظریه‌ی کلاسیک ورق و الحاق نظریه‌ی آیفانتیس به آن و بهره‌گیری از روش ریلی - ریتز، معادلات حاکم بر ارتعاش جانبی نانوصفحات استخراج شده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که اگرچه کوچکترین بسامد طبیعی معماری G/BN از G/G کوچکتر است، حساسیت آن به وجود جرم در میانه‌ی ورق بیشتر است. تأثیر شکل هندسی نانوصفحه‌ی دولایه‌ی گرافن - برن نیتريد بر حساسیت آن به وجود جرم نیز بررسی شده است.

۲. شبیه‌سازی نیروی واندروالز بین صفحات

در نانوصفحات دولایه‌ی گرافن - گرافن، برن نیتريد - برن نیتريد یا گرافن - برن نیتريد، برهم‌کنش بین لایه‌ها با نیروی واندروالز، که می‌توان آن را با انرژی پتانسیل لنارد - جتز ۶-۱۲ تشریح کرد، اداره می‌شود. [۲۸، ۲۷، ۱۳] از آنجایی‌که تقریب رفتار مکانیکی نانوصفحات چندلایه مستلزم شبیه‌سازی مناسب این نیرو است در این بخش با استفاده از مرجع [۱۳] نیروی واندروالز بین لایه‌ها فرمول‌بندی شده است.

انرژی بین دو اتم به فاصله‌ی r به واسطه‌ی نیروی واندروالز با استفاده از مدل

معادله‌ی (۸) نسبت به \bar{h} می‌توان فاصله‌ی تعادلی را یافت:

$$\bar{h} = \sqrt[6]{\frac{(\rho_b \varepsilon_{CB} \sigma_{CB}^2 + \rho_n \varepsilon_{CN} \sigma_{CN}^2)}{(\rho_b \varepsilon_{CB} \sigma_{CB}^2 + \rho_n \varepsilon_{CN} \sigma_{CN}^2)}} \quad (9)$$

با استفاده از مقادیر فهرست شده در جدول ۱، فاصله‌ی تعادلی میان دو صفحه‌ی گرافن و برن‌نیتريد $\bar{h} = 0.338 \text{ nm}$ به دست می‌آید و پيرو آن مقدار $C_{11} = 124.115 \text{ nN/nm}^2$ - تعیین می‌شود. علامت منفی به دلیل جاذبه‌ی بین ورق‌هاست.

۲.۲. نیروی و اندروالز بین صفحات برن‌نیتريد

به‌طور مشابه، تعداد اتم‌های برن و نیتروژن در مساحت dA بر روی صفحه‌ی برن‌نیتريد به ترتیب $\rho_B dA$ و $\rho_N dA$ است. فاصله‌ی بین نقطه‌ی $(0, 0, 0)$ بر روی صفحه‌ی ۱ برن‌نیتريد و نقطه‌ی (x, y, z) بر روی صفحه‌ی ۲ برن‌نیتريد عبارت است از $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. با تعیین تصویر نیروی و اندروالز بین دو اتم واقع شده در این دو نقطه در راستای z و انتگرال‌گیری بر روی سطح می‌توان اندرکنش بین دو صفحه‌ی برن‌نیتريد - بر واحد سطح را به صورت زیر یافت:

$$q_{bn-bn} = \sum_{i,j=B,N} \left(\begin{aligned} & \rho_j \rho_i \left\{ -\frac{12 \varepsilon_{ji}}{\sigma_{ji}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(26 \left(\frac{\sigma_{ji}}{r} \right)^{12} \right. \right. \\ & \left. \left. - \mathcal{V} \left(\frac{\sigma_{ji}}{r} \right)^\lambda \right) (r - \bar{r}) \frac{z}{r} dx dy \right. \\ & \left. + \frac{12 \varepsilon_{ji}}{\sigma_{ji}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(364 \left(\frac{\sigma_{ji}}{r} \right)^{10} \right. \right. \\ & \left. \left. - 56 \left(\frac{\sigma_{ji}}{r} \right)^\lambda \right) (r - \bar{r})^2 \frac{z}{r} dx dy \right. \\ & \left. - \frac{22 \varepsilon_{ji}}{\sigma_{ji}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(65 \left(\frac{\sigma_{ji}}{r} \right)^{16} \right. \right. \\ & \left. \left. - \mathcal{V} \left(\frac{\sigma_{ji}}{r} \right)^{10} \right) (r - \bar{r})^2 \frac{z}{r} dx dy \right\} \end{aligned} \right) \quad (10)$$

از سوی دیگر می‌توان نشان داد که $(r - \bar{r}) = (w_1 - w_2) \bar{r} / z$. پس:

$$q_{bn-bn} = C_{11}^{bn} (w_1 - w_2) + C_{12}^{bn} (w_1 - w_2)^2 + C_{13}^{bn} (w_1 - w_2)^3 \quad (11)$$

که در آن:

$$C_{11}^{bn} = \sum_{i,j=B,N} -\rho_j \rho_i \left(\frac{24 \varepsilon_{ji}}{\sigma_{ji}^2} \right) \left(\frac{13 \pi \sigma_{ji}^{12}}{3 \bar{h}_{bn}^{12}} - \frac{7 \pi \sigma_{ji}^\lambda}{3 \bar{h}_{bn}^6} \right) \quad (12)$$

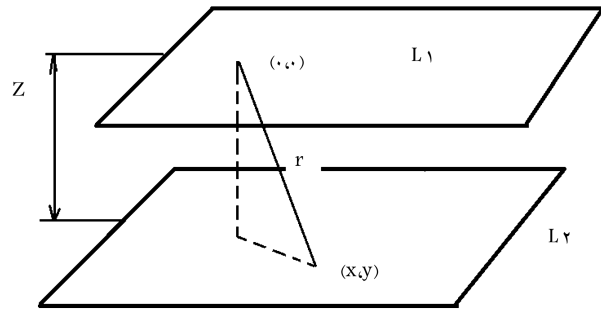
$$C_{12}^{bn} = \sum_{i,j=B,N} \rho_j \rho_i \left(\frac{12 \varepsilon_{ji}}{\sigma_{ji}^2} \right) \left(\frac{364 \pi \sigma_{ji}^{10}}{6 \bar{h}_{bn}^{12}} - \frac{56 \pi \sigma_{ji}^\lambda}{3 \bar{h}_{bn}^6} \right) \quad (13\text{-الف})$$

$$C_{13}^{bn} = \sum_{i,j=B,N} -\rho_j \rho_i \left(\frac{22 \varepsilon_{ji}}{\sigma_{ji}^2} \right) \left(\frac{65 \pi \sigma_{ji}^{16}}{6 \bar{h}_{bn}^{12}} - \frac{2 \pi \sigma_{ji}^\lambda}{3 \bar{h}_{bn}^6} \right) \quad (13\text{-ب})$$

که \bar{h}_{bn} فاصله‌ی تعادلی بین دو صفحه‌ی برن‌نیتريد است.

در حالت تعادل، انرژی پتانسیل ناشی از نیروی و اندروالز در واحد سطح عبارت است از (شکل ۱):

$$\begin{aligned} \Phi &= \sum_{i,j=B,N} 2 \pi \rho_j \rho_i \int_0^\infty \varepsilon_{ji} \left(\left(\frac{\sigma_{ji}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ji}}{r} \right)^\lambda \right) \hat{r} d\hat{r} \\ &= \sum_{i,j=B,N} 4 \pi \rho_j \rho_i \varepsilon_{ji} \sigma_{ji}^6 \left(\frac{\sigma_{ji}^6}{5 \bar{h}_{bn}^{10}} - \frac{1}{2 \bar{h}_{bn}^4} \right) \end{aligned} \quad (14)$$



شکل ۱. پارامترهای هندسی استفاده‌شده برای شبیه‌سازی نیروی و اندروالز بین دو نانوصفحه.

بر روی صفحه گرافن و نقطه‌ی (x, y, z) به مختصات $(0, 0, 0)$ برن‌نیتريد (شکل ۱) عبارت است از $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. با تعیین تصویر نیروی و اندروالز بین دو اتم واقع شده در این دو نقطه در راستای z و انتگرال‌گیری بر روی سطح می‌توان اندرکنش بین دو صفحه‌ی گرافن - برن‌نیتريد بر واحد سطح را به صورت زیر یافت:

$$q_{gr-bn} = \sum_{i=B,N} \left(\begin{aligned} & \rho_c \rho_i \left\{ -\frac{12 \varepsilon_{Ci}}{\sigma_{Ci}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(26 \left(\frac{\sigma_{Ci}}{r} \right)^{12} \right. \right. \\ & \left. \left. - \mathcal{V} \left(\frac{\sigma_{Ci}}{r} \right)^\lambda \right) (r - \bar{r}) \frac{z}{r} dx dy \right. \\ & \left. + \frac{12 \varepsilon_{Ci}}{\sigma_{Ci}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(364 \left(\frac{\sigma_{Ci}}{r} \right)^{10} \right. \right. \\ & \left. \left. - 56 \left(\frac{\sigma_{Ci}}{r} \right)^\lambda \right) (r - \bar{r})^2 \frac{z}{r} dx dy \right. \\ & \left. - \frac{22 \varepsilon_{Ci}}{\sigma_{Ci}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(65 \left(\frac{\sigma_{Ci}}{r} \right)^{16} \right. \right. \\ & \left. \left. - \mathcal{V} \left(\frac{\sigma_{Ci}}{r} \right)^{10} \right) (r - \bar{r})^2 \frac{z}{r} dx dy \right\} \end{aligned} \right) \quad (4)$$

از سوی دیگر می‌توان نشان داد که $(r - \bar{r}) = (w_1 - w_2) \bar{r} / z$. پس:

$$q_{gr-bn} = C_{11} (w_1 - w_2) + C_{12} (w_1 - w_2)^2 + C_{13} (w_1 - w_2)^3 \quad (5)$$

که در آن:

$$C_{11} = \sum_{i=B,N} -\rho_c \rho_i \left(\frac{24 \varepsilon_{Ci}}{\sigma_{Ci}^2} \right) \left(\frac{13 \pi \sigma_{Ci}^{12}}{3 \bar{h}^{12}} - \frac{7 \pi \sigma_{Ci}^\lambda}{3 \bar{h}^6} \right) \quad (6)$$

$$C_{12} = \sum_{i=B,N} \rho_c \rho_i \left(\frac{12 \varepsilon_{Ci}}{\sigma_{Ci}^2} \right) \left(\frac{364 \pi \sigma_{Ci}^{10}}{6 \bar{h}^{12}} - \frac{56 \pi \sigma_{Ci}^\lambda}{3 \bar{h}^6} \right) \quad (7\text{-الف})$$

$$C_{13} = \sum_{i=B,N} -\rho_c \rho_i \left(\frac{22 \varepsilon_{Ci}}{\sigma_{Ci}^2} \right) \left(\frac{65 \pi \sigma_{Ci}^{16}}{6 \bar{h}^{12}} - \frac{2 \pi \sigma_{Ci}^\lambda}{3 \bar{h}^6} \right) \quad (7\text{-ب})$$

که \bar{h} فاصله‌ی تعادلی بین دو صفحه‌ی گرافن و برن‌نیتريد است.

در حالت تعادل، انرژی پتانسیل ناشی از نیروی و اندروالز در واحد سطح عبارت است از (شکل ۱):

$$\begin{aligned} \Phi &= \sum_{i=B,N} 2 \pi \rho_c \rho_i \int_0^\infty \varepsilon_{Ci} \left(\left(\frac{\sigma_{Ci}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{Ci}}{r} \right)^\lambda \right) \hat{r} d\hat{r} \\ &= \sum_{i=B,N} 4 \pi \rho_c \rho_i \varepsilon_{Ci} \sigma_{Ci}^6 \left(\frac{\sigma_{Ci}^6}{5 \bar{h}^{10}} - \frac{1}{2 \bar{h}^4} \right) \end{aligned} \quad (8)$$

که $\bar{h} = \sqrt{\bar{r}^2 + \bar{z}^2}$ و $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$. با توجه به اینکه انرژی پتانسیل ناشی از نیروی و اندروالز در فاصله‌ی تعادلی کمینه می‌شود. [۲۸] لذا با صفر گذاشتن مشتق

که E_1 و E_2 معرف مدول کشسان در راستای اصلی ۱ و ۲ ورق ارتوتروپ هستند. ν_{12} و ν_{21} نسبت بواسون و G_{12} مدول صلبیت برشی‌اند. طبق فرضیات حاکم بر نظریه‌ی ورق کیرشوف، می‌توان معادله‌ی ۲ را بر اساس مؤلفه‌های بردار جابه‌جایی هر نقطه (یعنی (u_0, v_0, w_0)) با مختصات (x, y, z) در صفحه‌ی میانی ورق نوشت. برای جزئیات بیشتر به مرجع [۳۰] مراجعه شود. پیرو نظریه‌ی ساده‌شده‌ی میدلین وردش انرژی جنبشی را می‌توان به صورت زیر بیان کرد: [۲۹]

$$\delta T = \int_V (\bar{\rho} \dot{u} \delta u + \bar{\rho} \dot{v} \delta v + \bar{\rho} \dot{w} \delta w) dV + \int_V (\bar{\rho} l^i (\dot{u}_{,i} \delta u_{,i} + \dot{v}_{,i} \delta v_{,i} + \dot{w}_{,i} \delta w_{,i})) dV + M \dot{w} (x_m, y_m) \delta w (x_m, y_m) \quad (22)$$

در معادله‌ی ۲۲، u ، v و w مؤلفه‌های بردار جابه‌جایی هر نقطه از ورق به مختصات (x, y, z) هستند که طبق فرضیات ورق کیرشوف برحسب مؤلفه‌های بردار جابه‌جایی نقطه در صفحه‌ی میانی ورق مربوطه قابل بیان‌اند. (.) مشتق جزئی نسبت به زمان و i معرف مشتق جزئی نسبت به هر یک از مؤلفه‌های مختصات (x, y, z) است. در این معادله M معرف جرم ذره‌ی است که در موقعیت (x_m, y_m) بر روی ورق قرار گرفته است. وردش کار نیروی و اندروالز را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\delta W = \int_A \bar{C} (w_1 - w_2) (\delta w_1 - \delta w_2) dA \quad (23)$$

که در آن \bar{C} معرف سختی فنر خطی است که برای مدل‌سازی اندرکنش و اندروالز استفاده شده است (معادلات ۶ و ۱۲ را ملاحظه کنید).

بعد از جایگزین کردن معادلات ۱۸ تا ۲۳ در معادله‌ی ۱۷ و تقریب مؤلفه‌های بردار جابه‌جایی صفحه‌ی میانی هر ورق با توابعی که شرایط مرزی هندسی آن ورق را ارضا می‌کنند (طبق نظریه‌ی ریتز)، می‌توان دسته معادله دیفرانسیل معمولی حاکم بر ارتعاش جانبی ورق‌ها را که کاملاً مستقل از جابه‌جایی در صفحه‌ی ورق‌هاست، یافت:

$$\begin{bmatrix} [M_{mnpq}^{(1)}] & [0] \\ [0] & [M_{mnpq}^{(2)}] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{w}_{pq}^{(1)} \\ \ddot{w}_{pq}^{(2)} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} [K_{mnpq}^{(1)}] & [K_{mnpq}^{(12)}] \\ [K_{mnpq}^{(21)}] & [K_{mnpq}^{(2)}] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_{pq}^{(1)} \\ w_{pq}^{(2)} \end{bmatrix} = 0 \quad (24)$$

در معادله‌ی ۲۴ مقادیر M_{mnpq} و K_{mnpq} به ترتیب در معادلات ۲-الف تا ۵-الف در پیوست الف تعریف شده‌اند. تقریب جابه‌جایی جانبی ورق و توابع مورد استفاده در پیوست الف آورده شده است. با تعریف بردار $\begin{bmatrix} \ddot{w}_{pq}^{(1)} \\ \ddot{w}_{pq}^{(2)} \end{bmatrix}^T$ به صورت $\begin{bmatrix} w_{pq}^{(1)} \\ w_{pq}^{(2)} \end{bmatrix}^T$ ، دسته معادلات (۲۴) به معادلات مقادیر ویژه‌ی بسامد تبدیل می‌شوند.

۳. اعتبارسنجی مدل

در معادلات ۴ تا ۹ اگر طول باند l_{bn} با طول باند l_e جایگزین شود و پارامترهای لنارد - جنز بر اساس ارتباط‌های کرن محاسبه شوند، می‌توان تقریب خطی نیروی و اندروالز بین دو صفحه‌ی گرالفن را یافت. اگر از پارامترهای لنارد - جنز

که $r = \sqrt{\hat{r}^2 + \bar{h}^2}$ و $\hat{r} = \sqrt{x^2 + y^2}$. با توجه به اینکه انرژی پتانسیل ناشی از نیروی و اندروالز در فاصله‌ی تعادلی کمیته می‌شود، [۲۸] با صفر گذاشتن مشتق معادله‌ی (۱۴) نسبت به \bar{h}_{bn} می‌توان فاصله‌ی تعادلی را یافت:

$$\bar{h}_{bn} = \sqrt[6]{\left(\frac{D_{BB} \sigma_{BB}^e + D_{NN} \sigma_{NN}^e + 2D_{BN} \sigma_{BN}^e}{D_{BB} + D_{NN} + 2D_{BN}} \right)} \quad (15)$$

که در آن:

$$D_{ij} = 4\pi\rho_i\rho_j\varepsilon_{ij}\sigma_{ij}^e \quad i, j = B, N \quad (16)$$

با استفاده از مقادیر موجود در جدول ۱، $\bar{h}_{bn} = 0.34067 \text{ nm}$ به دست می‌آید و پیرو این فاصله‌ی تعادلی، $C_{ij}^{bn} = -1667027 \text{ nN/nm}^2$. علامت منفی به دلیل جاذبه بین ورق‌هاست.

۳.۲. استخراج معادلات حاکم بر ارتعاش جانبی صفحات دو لایه

در این بخش با استفاده از اصل همیلتون و استفاده از روش ریالی - ریتز دسته معادلات دیفرانسیل حاکم بر ارتعاش جانبی صفحات گرالفن - برنیتزید و برنیتزید - برنیتزید استخراج می‌شوند. برای تلفیق اثر اندازه با فرضیات حاکم بر نظریه‌ی ورق کیرشوف از نظریه‌ی آیفانتیس استفاده شده است. پیرو اصل همیلتون معادله‌ی (۱۷) برقرار است:

$$\int_0^t \sum_{k=1}^2 (\delta T^{(k)} - \delta U^{(k)} + \delta W) dt = 0 \quad (17)$$

که در آن $T^{(k)}$ و $U^{(k)}$ به ترتیب معرف انرژی جنبشی کل و انرژی کرنشی کل صفحه‌ی k ام هستند و W کار نیروی و اندروالز است. طبق نظریه‌ی آیفانتیس، δU برای هر صفحه به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\delta U = \int_V \sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij} dV \quad (18)$$

که در آن σ_{ij} و ε_{ij} به ترتیب مؤلفه‌های تانسور تنش و کرنش هستند که به صورت زیر به هم مرتبط می‌شوند: [۲۹]

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} (\varepsilon_{kl} - l^i \varepsilon_{kl,mm}) \quad (19)$$

که $\varepsilon_{kl,mm}$ لاپلاسیان تانسور کرنش و l مقیاس طول است. C_{ijkl} را می‌توان بر اساس فرضیات حاکم بر نظریه‌ی ورق کیرشوف برای یک ورق ارتوتروپ به صورت زیر نوشت:

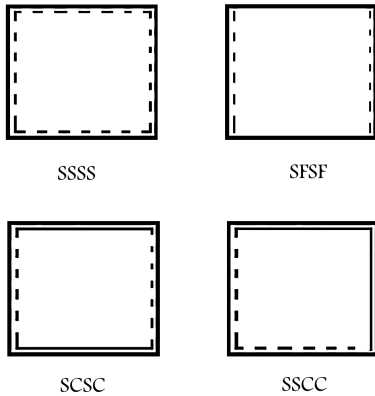
$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} Q_{11} & Q_{12} & 0 \\ Q_{12} & Q_{22} & 0 \\ 0 & 0 & Q_{66} \end{bmatrix} \quad (20)$$

که:

$$\begin{aligned} Q_{11} &= \frac{E_1}{1 - \nu_{12}\nu_{21}} \\ Q_{22} &= \frac{E_2}{1 - \nu_{12}\nu_{21}} \\ Q_{12} &= \frac{\nu_{12}E_2}{1 - \nu_{12}\nu_{21}} = \frac{\nu_{21}E_1}{1 - \nu_{12}\nu_{21}} \\ Q_{66} &= G_{12} \end{aligned} \quad (21)$$

جدول ۳. مقایسه‌ی بسامدهای بی بعد ورق مربعی کلاسیک (صرف نظر از مقیاس طول) با مقادیر موجود. [۳۰]

شرط مرزی	نتایج حاصل	مرجع [۳۰]	درصد خطا
SSSS	۱۹٫۷۶	۱۹٫۷۳	۰٫۲
SFSF	۹٫۶۷۱	۹٫۶۳۱	۰٫۴
SCSC	۲۹٫۰۹۵	۲۸٫۹۵۱	۰٫۵
SSCC	۲۷٫۲۲۲	۲۷٫۰۸۷	۰٫۵



شکل ۳. نمایش شرایط مرزی به کار گرفته شده.

جدول ۴. تأثیر اضافه شدن جرم بر بسامد پایه‌ی (THz) نانو صفحات تک لایه‌ی گرافن.

(a, b)	m_0 (kg)	نتایج حاصل	نتایج موجود در مرجع [۳۲]	درصد خطا
$(10, 10)$	10^{-22}	۰٫۰۶۷۶	۰٫۰۶۷۴	۰٫۲
	10^{-23}	۰٫۰۵۶۲	۰٫۰۵۶۰۱	۰٫۳
$(20, 10)$	10^{-22}	۰٫۰۴۲۷	۰٫۰۴۲۶	۰٫۲
	10^{-23}	۰٫۰۳۸۵	۰٫۰۳۸۴	۰٫۲

مقایسه که در جدول ۳ فهرست شده است، تطابق خوبی را نشان می‌دهند. اختلاف موجود می‌تواند ناشی از تفاوت در مقدار ضریب پواسون نانو صفحه‌ی برن‌نیتريد با مقدار نظیر به کار گرفته شده [۳۰] باشد. در محاسبات حاضر برای کاهش حجم محاسبات از مقدار $m = n = 3$ استفاده شده است.

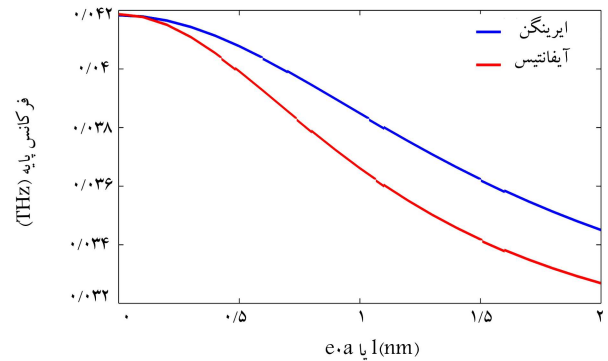
در جدول‌های ۱ و ۳، S، F، C و به ترتیب اختصار شرایط مرزی تکیه‌گاه ساده، آزاد، و گیردار هستند. شرایط مرزی SSSS، SFSF، SCSC و SSCC در شکل ۳ نشان داده شده‌اند.

همچنین به منظور اعتبارسنجی نتایج حاصل از جابه‌جایی بسامد پایه‌ی نانو صفحات به ازای اضافه شدن جرم خارجی، نتایج حاصل از تحلیل نانو صفحه‌ی تک لایه‌ی گرافن با شرایط تکیه‌گاهی ساده با نتایج موجود [۳۲] مقایسه شده است (جدول ۴). با استفاده از روش حل ناویر، حل دقیقی ارائه شده است. [۳۲] به این منظور از خواص مکانیکی و هندسی پیشنهادی [۳۲] برای محاسبات استفاده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود تطابق خوبی میان نتایج وجود دارد. در محاسبات حاضر برای کاهش حجم محاسبات از مقدار $m = n = 3$ استفاده شده است. باید توجه داشت که با افزایش تعداد جملات چندجمله‌ی به کاررفته در تقریب مؤلفه‌ی بردار جابه‌جایی می‌توان خطا را کاهش داد.

جدول ۲. مقایسه‌ی بسامد طبیعی اول (THz) نانو صفحات دولایه‌ی گرافن با نتایج حاصل از فرمول موجود [۱۲].

مدل حاضر	مرجع [۱۲]	a/b
۰٫۰۵۰۶۷	۰٫۰۵۰۶*	۲٫۴۷۷۸
۰٫۰۴۳۴	۰٫۰۴۳۳۶*	۳٫۰۸۶۸
۰٫۰۴۱۸۶	۰٫۰۴۱۸۳*	۳٫۶۹۵۹

* نتایج بر اساس فرمول پیشنهادی [۱۲]



شکل ۲. مقایسه‌ی نظریه‌ی غیرمحملی ایرینگن و نظریه‌ی آیفانتیس در تخمین بسامد اول نانو صفحات دولایه‌ی گرافن.

پیشنهاد شده [۱۲] استفاده شود، ضریب سختی فذرخطی معادل نیروی واندروالز 10^0 گیگاپاسکال بر نانومتر به دست می‌آید که در مقایسه با مقدار محاسبه شده در این مرجع یعنی 99.99 گیگاپاسکال بر نانومتر از دقت خوبی برخوردار است. از سوی دیگر فاصله‌ی تعادلی محاسبه شده برای دو صفحه‌ی برن‌نیتريد بر اساس معادلات ۱۴ تا ۱۶، 0.34067 نانومتر است که حدوداً 10% کمتر از مقدار گزارش شده [۳۱] یعنی 0.38 نانومتر است که می‌تواند معرف یک نتیجه‌ی قابل قبول باشد.

از سوی دیگر با استفاده از معادله‌ی پیشنهاد شده، [۱۲] بسامد طبیعی نانو صفحات دولایه‌ی گرافن با فرض صفر بودن مقیاس کوچک (نظریه‌ی کلاسیک) محاسبه شده و با نتایج حاصل از حل معادله ۲۴ با فرض صفر بودن مقیاس طول (نظریه‌ی کلاسیک)، مقایسه شده است. نتایج این مقایسه در جدول ۲ فهرست شده است. مقایسه‌ی نتایج، توافق خوبی را نشان می‌دهد.

در شکل ۲ تأثیر افزایش مقیاس طول بر بسامد اول نانو صفحات گرافن دولایه به همراه مقدار پیش‌بینی شده [۱۲] با استفاده از نظریه‌ی غیرمحملی ایرینگن نشان داده شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود افزایش مقیاس طول در نظریه‌ی آیفانتیس و افزایش مقیاس کوچک در نظریه‌ی غیرمحملی ایرینگن تأثیر یکسانی بر رفتار ارتعاشی صفحات دولایه‌ی گرافن دارد؛ یعنی، هر دو منجر به کاهش مقدار بسامد می‌شوند که خود امکان بهره‌گرفتن از نظریه‌ی آیفانتیس برای تخمین رفتار ارتعاشی نانو صفحات گرافن را تأیید می‌کند، هرچند که نرخ کاهش بسامد با افزایش مقیاس طول در نظریه‌ی آیفانتیس به مراتب بیشتر از نظریه‌ی ایرینگن است.

با توجه به اینکه میزان غیرایزوتروپی (E_2/E_1) صفحات برن‌نیتريد حدود 0.98 است، که بسیار به ۱ نزدیک است، برای اعتبارسنجی بسامد پایه‌ی حاصل به ازای شرایط مرزی مختلف، بسامد بی‌بعد شده‌ی نانو صفحه‌ی تک لایه‌ی مربعی برن‌نیتريد (با فرض صفر بودن مقیاس طول) با بسامد پایه‌ی بی‌بعد صفحات ایزوتروپ مربعی موجود [۳۰] مقایسه شده‌اند. به این منظور صفحات برن‌نیتريد به صورت صفحات ایزوتروپ مدل شده‌اند (یعنی $E = \sqrt{E_1 E_2}$ ، $\nu = \sqrt{\nu_1 \nu_2}$ ، $G_{12} = \frac{E}{2(1+\nu)}$). نتایج این

۴. نتایج عددی و بحث

در این بخش از خواص مکانیکی موجود در مراجع برای شبیه‌سازی نانوصفحات گرافن و برنیتريد استفاده شده است. [۱۵، ۱۲]

در جدول ۵ تأثیر شرایط مرزی و مقیاس کوچک بر کوچک‌ترین بسامد طبیعی نانوصفحه‌ی دولایه‌ی گرافن - برنیتريد مربعی به ابعاد 5×5 نانومتر فهرست شده است. همان‌گونه که انتظار می‌رود با افزایش سختی فیود مکانیکی، کوچک‌ترین بسامد طبیعی افزایش می‌یابد درحالی‌که افزایش مقیاس کوچک تأثیری معکوس بر کوچک‌ترین بسامد طبیعی دارد.

در جدول‌های ۶ و ۷ نسبت کوچک‌ترین بسامد طبیعی نانوصفحه‌ی دولایه‌ی گرافن - برنیتريد (G/BN) به ترتیب به نانوصفحه‌ی دولایه‌ی گرافن (G/G) و نانوصفحه‌ی دولایه‌ی برنیتريد (BN/BN) مربعی با ابعاد مشابه فهرست شده است. به‌وضوح دیده می‌شود که کوچک‌ترین بسامد طبیعی نانوصفحه‌ی دولایه‌ی گرافن - برنیتريد از بسامد پایه‌ی نانوصفحه‌ی دولایه‌ی گرافن کمتر و از نانوصفحه‌ی دولایه‌ی برنیتريد بیشتر است. در ضمن، میزان اختلاف میان بسامدهای پایه‌ی معماری‌های مختلف نانوصفحات دولایه، تابعی از شرایط مرزی و مقیاس کوچک است.

در شکل ۴ تأثیر افزایش وزن توده‌ی خارجی اضافه‌شده به میانه‌ی صفحه‌ی گرافن - برنیتريد بر بسامد پایه‌ی نانوصفحه به ابعاد 5×5 نانومتر دیده می‌شود. در این شکل f_0 معرف بسامد پایه‌ی نانوصفحه بدون جرم خارجی است. Δf نمادی برای $f - f_0$ است که در آن f بسامد پایه‌ی نانوصفحه‌ی است که جرم خارجی جدول ۵. کوچک‌ترین بسامد طبیعی نانوصفحه‌ی دولایه‌ی گرافن - برنیتريد (THz).

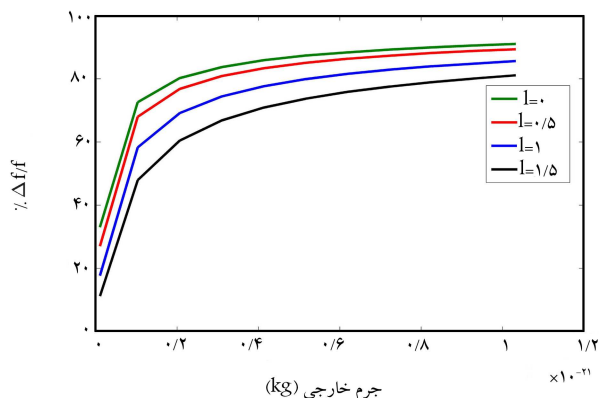
SSCC	SCSC	SSSS	SFSF	ι
۰٫۱۳۸۶	۰٫۱۴۹۲	۰٫۱۰۰۷	۰٫۰۴۹۸	۰
۰٫۱۱۴۴	۰٫۱۳۷۹	۰٫۰۹۳۲	۰٫۰۴۳۹	۰٫۵
۰٫۰۶۹۱	۰٫۱۲۴۰	۰٫۰۸۳۷	۰٫۰۳۸۹	۱
۰٫۰۳۶۶	۰٫۱۱۶۷	۰٫۰۷۸۴	۰٫۰۲۰۳	۱٫۵

جدول ۶. نسبت کوچک‌ترین بسامد طبیعی نانوصفحه‌ی دولایه‌ی گرافن - برنیتريد به کوچک‌ترین بسامد طبیعی نانوصفحه‌ی دولایه‌ی گرافن.

SSCC	SCSC	SSSS	SFSF	ι
۰٫۹۰۰۶	۰٫۹۰۱۵	۰٫۸۹۶۷	۰٫۹۰۷۱	۰
۰٫۹۰۱۵	۰٫۹۰۰۷	۰٫۸۹۷۰	۰٫۹۰۵۲	۰٫۵
۰٫۹۱۱۶	۰٫۸۹۷۹	۰٫۸۹۷۱	۰٫۹۰۴۷	۱
۰٫۸۲۹۹	۰٫۸۹۶۳	۰٫۸۹۷۰	۰٫۸۴۹۴	۱٫۵

جدول ۷. نسبت کوچک‌ترین بسامد طبیعی نانوصفحه‌ی دولایه‌ی گرافن - برنیتريد به کوچک‌ترین بسامد طبیعی نانوصفحه‌ی دولایه‌ی برنیتريد.

SSCC	SCSC	SSSS	SFSF	ι
۱٫۲۶۰۰	۱٫۲۵۷۰	۱٫۲۷۴۷	۱٫۲۳۵۷	۰
۱٫۲۵۷۱	۱٫۲۶۱۷	۱٫۲۷۵۰	۱٫۲۴۳۶	۰٫۵
۱٫۲۱۴۴	۱٫۲۷۰۵	۱٫۲۷۵۹	۱٫۲۳۸۹	۱
۱٫۸۵۷۹	۱٫۲۷۶۸	۱٫۲۷۴۸	۱٫۶۹۱۷	۱٫۵



شکل ۴. درصد جابه‌جایی بسامد پایه‌ی نانوصفحه دولایه‌ی گرافن - برنیتريد با افزایش وزن توده‌ی خارجی اضافه‌شده در میانه‌ی نانوصفحه با شرایط تکیه‌گاهی ساده.

به آن چسبیده است. همان‌گونه که دیده می‌شود با افزایش وزن توده‌ی خارجی چسبیده به نانوصفحه، درصد اختلاف میان بسامدهای پایه‌ی نانوصفحه‌ی جرم خارجی به آن چسبیده و نانوصفحه‌ی بدون جرم خارجی افزایش می‌یابد. هرچند که با افزایش مقیاس کوچک این درصد تغییر، کاهش می‌یابد. این استنتاج‌ها به ترتیب با نتایج گزارش‌شده [۲۲، ۲۳]، که درباره‌ی حساسیت نانوصفحات تک‌لایه‌ی گرافن به جرم خارجی بحث می‌کنند، هم‌خوان است. در مقایسه با نانوصفحات دولایه‌ی گرافن یا برنیتريد (جدول‌های ۸ و ۹)، تغییر در بسامد پایه‌ی نانوصفحات دولایه با معماری گرافن - برنیتريد به‌ازای جرم خارجی و مقیاس کوچک ثابت به مراتب بهتر از نانوصفحات دولایه‌ی گرافن و بدتر از نانوصفحات دولایه‌ی برنیتريد است که قابلیت بیشتر نانوصفحه‌ی دولایه با معماری برنیتريد - برنیتريد را برای شناسایی جرم نشان می‌دهد. با افزایش مقیاس طول، نسبت درصد جابه‌جایی بسامد پایه‌ی نانوصفحه با معماری G/BN به معماری G/G افزایش می‌یابد که کاملاً برعکس تأثیر مقیاس کوچک بر نسبت درصد جابه‌جایی معماری G/BN به BN/BN است.

در شکل ۴ همچون جدول‌های ۸ و ۹ محدوده‌ی تغییرات جرم خارجی واقع در میانه‌ی ورق از 10^{-23} تا 10^{-21} کیلوگرم بوده است.

درصد جابه‌جایی بسامد پایه‌ی نانوصفحات دولایه با معماری G/BN، G/G و BN/BN به‌ازای اضافه‌شدن جرمی با وزن $10^{-24} \times 10^{-33}$ کیلوگرم، به ترتیب ۵٫۶۵، ۴٫۶۳ و ۷٫۰۸۸ در مقیاس طول صفر است که با افزایش مقیاس طول به ۱٫۵ نانومتر به مقادیر ۱٫۲۷، ۱٫۱۴ و ۱٫۷۸ کاهش می‌یابد. در مقایسه با نانوصفحه‌ی تک‌لایه‌ی گرافن با ابعاد برابر (5×5) که درصد جابه‌جایی بسامد پایه در آن میان ۸٫۷۳ تا ۲٫۱۷ به‌ازای تغییر مقیاس طول از صفر تا ۱٫۵ تغییر می‌کند، معماری‌های دولایه بسیار ضعیف عمل می‌کنند. این نتیجه منطبق با گزارش صادق‌زاده [۲۳] است که نشان می‌دهد حساسیت حس‌گر جرم با افزایش تعداد لایه‌های نانوصفحات گرافن کاهش می‌یابد. از سوی دیگر جابه‌جایی بسامد پایه‌ی یک نانوصفحه‌ی تک‌لایه‌ی گرافن با وزنی معادل وزن نانوصفحه‌ی دولایه با معماری G/G به‌ازای مقادیر مختلف مقیاس طول در بازه‌ی صفر تا ۱٫۵ از ۲٫۴۹ تا ۱٫۲۲ است. مقایسه‌ی درصد جابه‌جایی بسامد پایه‌ی نانوصفحات دولایه با معماری G/BN، و BN/BN با این نانوصفحه‌ی تک‌لایه، نشان می‌دهد که این معماری‌ها حس‌گر بهتری برای جرم‌های خارجی در وزن زپتوگرم هستند. نانوصفحه‌ی تک‌لایه‌ی برنیتريد به مراتب به جرم خارجی با وزن یک زپتوگرم حساس‌تر است. نسبت

جدول ۸. تغییر در کوچک‌ترین بسامد طبیعی صفحه‌ی دولایه‌ی گرافن - برن‌نیتريد به ازای اضافه‌شدن جرم خارجی در میانه‌ی صفحه با شرایط تکیه‌گاهی ساده نسبت به نانوصفحه‌ی دولایه‌ی گرافن - گرافن با شرایط هندسی، مرزی، و بارگذاری ثابت (درصد شیفت بسامد پایه‌ی نانوصفحه‌ی G/BN به درصد شیفت بسامد پایه‌ی نانوصفحه‌ی G/G).

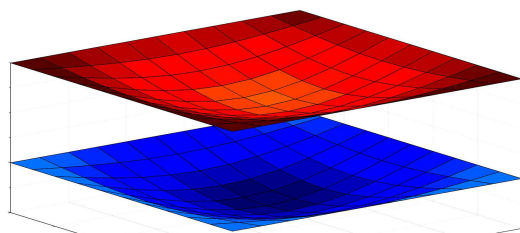
جرم خارجی (گرم)	۱,۰۳×	۱,۰۳×	۲,۰۷×	۳,۱۰×	۴,۱۳×	۵,۱۶×	۶,۲۰×	۷,۲۳×	۸,۲۶×	۹,۲۹×	۱۰,۳۳×
$l = 0$	۱,۱۲۷۶	۱,۰۳۸۹	۱,۰۲۶۵	۱,۰۲۰۹	۱,۰۱۷۷	۱,۰۱۶۱	۱,۰۱۳۹	۱,۰۱۲۸	۱,۰۱۲۵	۱,۰۱۲۱	۱,۰۱۱۶
$l = 0,5$	۱,۱۴۲۰	۱,۰۴۷۱	۱,۰۳۱۳	۱,۰۲۵۱	۱,۰۲۱۵	۱,۰۱۸۵	۱,۰۱۷۵	۱,۰۱۵۰	۱,۰۱۴۸	۱,۰۱۳۲	۱,۰۱۲۷
$l = 1$	۱,۱۷۰۰	۱,۰۶۶۶	۱,۰۴۶۰	۱,۰۳۶۵	۱,۰۳۰۷	۱,۰۲۷۲	۱,۰۲۴۷	۱,۰۲۱۹	۱,۰۲۰۴	۱,۰۱۸۶	۱,۰۱۸۱
$l = 1,5$	۱,۱۹۶۴	۱,۰۸۸۷	۱,۰۶۳۲	۱,۰۵۰۶	۱,۰۴۳۵	۱,۰۳۷۶	۱,۰۳۳۲	۱,۰۳۰۱	۱,۰۲۸۴	۱,۰۲۶۵	۱,۰۲۶۱

جدول ۹. تغییر در کوچک‌ترین بسامد طبیعی صفحه‌ی دولایه‌ی گرافن - برن‌نیتريد به ازای اضافه‌شدن جرم خارجی در میانه‌ی صفحه با شرایط تکیه‌گاهی ساده نسبت به نانوصفحه‌ی دولایه‌ی گرافن - گرافن با شرایط هندسی، مرزی، و بارگذاری ثابت (درصد شیفت بسامد پایه‌ی نانوصفحه‌ی G/BN به درصد شیفت بسامد پایه‌ی نانوصفحه‌ی BN/BN).

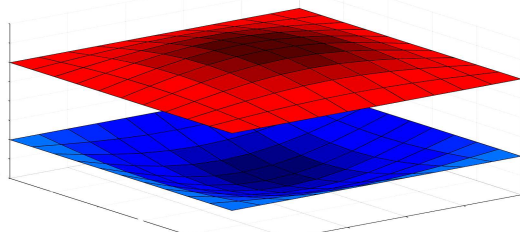
جرم خارجی (گرم)	۱,۰۳×	۱,۰۳×	۲,۰۷×	۳,۱۰×	۴,۱۳×	۵,۱۶×	۶,۲۰×	۷,۲۳×	۸,۲۶×	۹,۲۹×	۱۰,۳۳×
$l = 0$	۰,۸۷۲۸	۰,۹۵۹۳	۰,۹۷۲۵	۰,۹۷۷۱	۰,۹۸۰۸	۰,۹۸۳۶	۰,۹۸۳۵	۰,۹۸۶۵	۰,۹۸۷۳	۰,۹۸۸۳	۰,۹۸۸۳
$l = 0,5$	۰,۸۵۵۶	۰,۹۵۰۸	۰,۹۶۶۶	۰,۹۷۲۷	۰,۹۷۶۶	۰,۹۷۹۵	۰,۹۸۱۹	۰,۹۸۲۲	۰,۹۸۴۳	۰,۹۸۵۵	۰,۹۸۵۴
$l = 1$	۰,۸۳۴۵	۰,۹۳۲۹	۰,۹۵۳۳	۰,۹۶۳۱	۰,۹۶۸۵	۰,۹۷۲۸	۰,۹۷۵۰	۰,۹۷۶۵	۰,۹۷۸۶	۰,۹۷۹۷	۰,۹۸۰۷
$l = 1,5$	۰,۸۱۲۱	۰,۹۱۰۳	۰,۹۳۶۶	۰,۹۴۹۳	۰,۹۵۶۵	۰,۹۶۰۶	۰,۹۶۶۳	۰,۹۶۷۴	۰,۹۷۱۱	۰,۹۷۱۷	۰,۹۷۴۴

نشان می‌دهد. مدهای هم‌فاز و غیر هم‌فاز نظیر کوچک‌ترین بسامدهای نظیر در شکل ۵ نشان داده شده است.

درصد جابه‌جایی بسامد نظیر اولین مد غیرهم‌فاز به درصد جابه‌جایی بسامد نظیر اولین مد هم‌فاز یک نانوصفحه‌ی دولایه‌ی مربعی با معماری گرافن - برن‌نیتريد به ازای اضافه‌شدن جرمی با وزن تقریبی ۱ زپتوگرم ($10^{-24} \times 1,0325$) برای مقادیر ۰,۵، ۱ و ۱,۵ مقیاس کوچک به ترتیب ۱,۴۳۶۹، ۱,۳۶۳۲، ۱,۴۳۶۹ و ۱,۵۷۵۹ است. این نتایج نشان می‌دهد که استفاده از جابه‌جایی بسامد نظیر مد



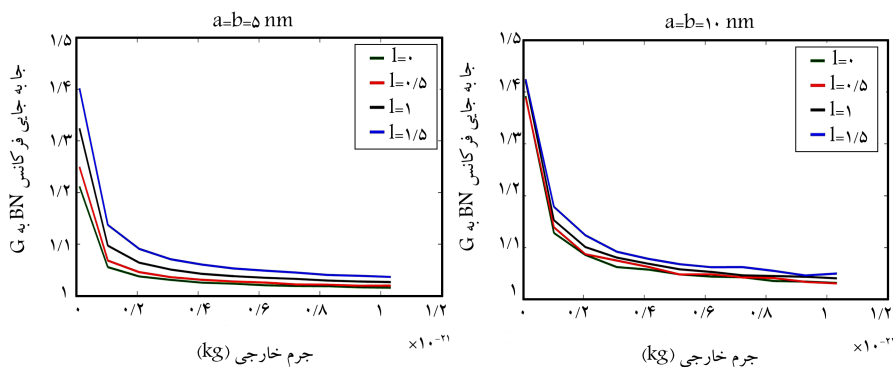
الف) اولین مد هم‌فاز؛



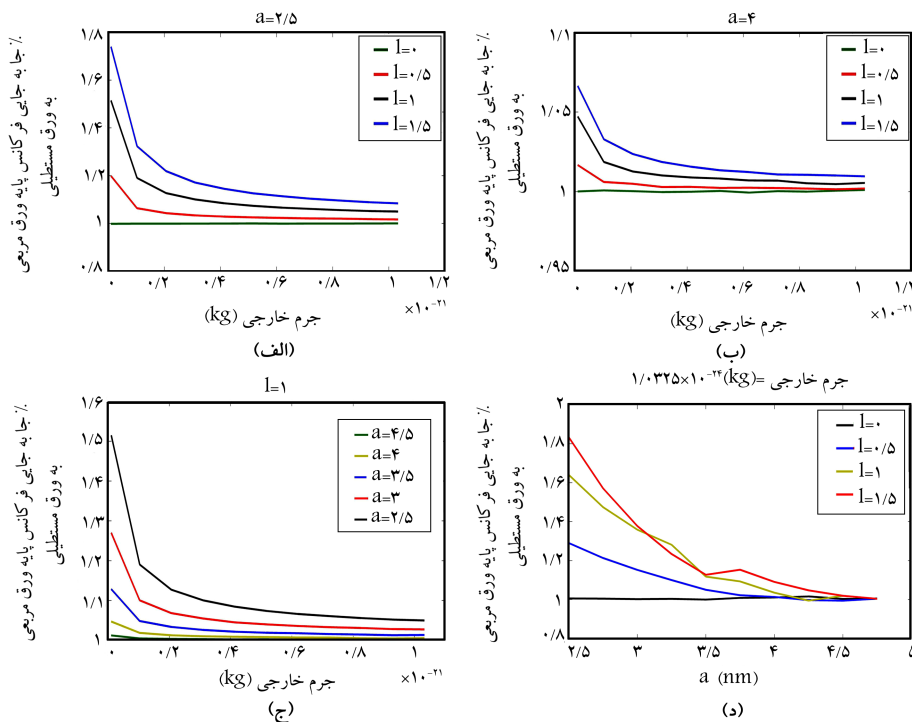
ب) اولین مد غیر هم‌فاز.

شکل ۵. اولین مد هم‌فاز و غیرهم‌فاز.

جابه‌جایی بسامد پایه‌ی تک‌لایه‌ی برن‌نیتريد تک‌لایه به ابعاد 5×5 و 10×10 حداقل $1,42$ برابر نانوصفحه‌ی گرافن با ابعاد مشابه است. با توجه به داده‌های گزارش شده برای خواص مکانیکی و ضخامت ورق شبیه‌سازی‌شده‌ی نانوصفحات تک‌لایه‌ی گرافن و برن‌نیتريد، سختی خمشی نانوصفحات برن‌نیتريد به‌مراتب کمتر از سختی خمشی نانو صفحات گرافن است [۳۴] که می‌تواند نه تنها ناشی از تفاوت میان مقدار مدول الاستیسیته بلکه به‌سبب کوچک‌تر بودن ضخامت پیشنهادشده برای نانوصفحه‌ی برن‌نیتريد نسبت به نانوصفحه‌ی گرافن [۳۵] نیز باشد. نظر به اینکه تأثیر کاهش ضخامت نانو ورق برن‌نیتريد در کاهش سختی خمشی از مرتبه ۳ و در کاهش جرم کل نانوصفحه از مرتبه ۱ است، انتظار می‌رود بسامد پایه‌ی نانوصفحات برن‌نیتريد از نانوصفحات گرافن کمتر باشد که نتایج حاصل از محاسبات نیز این نتیجه را تأیید می‌کند. از سوی دیگر، در بزرگی جابه‌جایی بسامد پایه به ازای اضافه‌شدن جرم خارجی به نانوصفحه، میزان بزرگی وزن جرم خارجی نسبت به جرم کل نانوصفحه از اهمیت به‌سزایی برخوردار است. لذا همان‌گونه که گزارش شده جابه‌جایی بسامد پایه‌ی نانو نشد دیگر با افزایش تعداد جرم‌های خارجی متصل شده به نانو صفحه [۳۲] یا با اتصال جرم وزین‌تر [۳۲] افزایش می‌یابد. پس، چون به ازای وزن ثابت جرم خارجی، نسبت وزن جرم خارجی به جرم کل نانوصفحه در نانو صفحات متشکل از حداقل یک لایه‌ی برن‌نیتريد (G/BN یا BN/BN) بزرگ‌تر از مقدار مشابه در نانوصفحات گرافن (G/G) هم‌اندازه است، حساسیت نانوصفحات متشکل از برن‌نیتريد به جرم خارجی بیشتر از نانوصفحات گرافن است. به‌دلیلی مشابه در ساختارهای هم‌جنس (تک‌لایه یا دولایه)، با افزایش سطح نانوصفحات مربعی حساسیت به‌حضور جرم خارجی کاهش می‌یابد. کوچک‌ترین بسامد پایه در نانوصفحات دولایه، بسامد نظیر مد هم‌فاز است که در نانو صفحات هم‌جنس (G/G و BN/BN) بسیار به بسامد پایه‌ی نانوصفحه‌ی تک‌لایه‌ی نظیر با همان ابعاد نزدیک است. این مهم چرایی برتری نانوصفحات دولایه را در تشخیص جرم نسبت به نانوصفحات تک‌لایه که دارای جرمی برابر با نانوصفحه‌ی دولایه هستند،



شکل ۶. تأثیر افزایش وزن جرم خارجی افزوده شده به میانه‌ی نانوصفحه و مقیاس طول بر نسبت درصد جابه‌جایی بسامد پایه‌ی تک‌لایه‌ی برن نیترید بر تک‌لایه‌ی گرافن.



شکل ۷. تأثیر استفاده از شکل مستطیلی ($a \times b = 25$) نسبت به شکل مربعی (5×5 نانومتر) نانوصفحه دولایه با معماری گرافن - برن نیترید به عنوان حس‌گر جرم.

گرفته شده است که جرم کل نانوصفحه‌ی دولایه در حالت مستطیلی و مربعی با هم برابر شود. براساس شکل ۷ می‌توان استنتاج کرد که صرف‌نظر از مقدار مقیاس کوچک، با کاهش نسبت ابعادی (a/b) حساسیت نانوصفحه‌ی دولایه‌ی گرافن - برن نیترید نسبت به آشکارسازی جرم خارجی کاهش می‌یابد. هرچند که افزایش مقیاس کوچک تأثیر کاهنده‌تری بر این حساسیت دارد. افزایش وزن جرم خارجی، حساسیت به جرم خارجی صفحات مربعی و مستطیلی را به هم نزدیک‌تر می‌کند تا جایی که بیشترین برتری نانو صفحات مربعی نسبت به مستطیلی در زپتوگرم (شکل ۷د) دیده می‌شود. کمترین وزن جرم خارجی در شکل‌های ۶ و ۷، 10^{-22} کیلوگرم است.

۵. نتیجه‌گیری

در این پژوهش با استفاده از تلفیق نظریه‌ی کلاسیک ورق و نظریه‌ی آیفانتیس - برای اضافه‌کردن تأثیر مقیاس کوچک به نظریه‌ی محیط پیوسته کلاسیک، بسامد پایه‌ی نانو صفحات دولایه با معماری‌های متفاوت گرافن - گرافن، گرافن - برن نیترید و

غیرهم‌فاز برای شناسایی جرم‌های خارجی با وزن ۱ زپتوگرم می‌تواند مناسب‌تر باشد. تأثیر افزایش وزن جرم خارجی و مقیاس طول بر نسبت درصد جابه‌جایی بسامد پایه‌ی نانوصفحه‌ی تک‌لایه‌ی برن نیترید به نانوصفحه‌ی تک‌لایه‌ی گرافن با دو ابعاد 5×5 و 10×10 در شکل ۶ نشان داده شده است. در این شکل، کمترین وزن جرم خارجی 10^{-19} گرم است. همان‌گونه که مشاهده می‌شود با افزایش وزن جرم خارجی، برتری نانوصفحه‌ی تک‌لایه‌ی برن نیترید نسبت به نانوصفحه‌ی گرافن در حساسیت به جرم خارجی کاهش می‌یابد و حساسیت این دو نانوصفحه به حضور جرم خارجی به هم نزدیک‌تر می‌شود که ممکن است علت آن این باشد که جرم کل نانوصفحه‌ی تک‌لایه‌ی گرافن و برن نیترید تحت تأثیر وزن جرم خارجی قرار می‌گیرد. باید توجه داشت که در نانوصفحه‌های کوچک‌تر، افزایش مقیاس کوچک تأثیر فزاینده‌ی حساسیت به جرم نانوصفحه‌ی برن نیترید دارد.

تأثیر تغییر ابعاد نانوصفحه‌ی دولایه از مربعی به مستطیلی بر درصد جابه‌جایی بسامد پایه‌ی نانو سازه به ازای اضافه‌شدن جرم خارجی به میانه‌ی صفحه در شکل ۷ نشان داده شده است. در این بررسی ابعاد نانوصفحه‌ی مستطیلی به گونه‌ی در نظر

۲. صفحات برنیتريد دولایه‌ی مربعی بیشترین حساسیت را به اضافه شدن جرم در میانه‌ی صفحه نشان می‌دهند و نسبت به دو معماری دیگر بیشترین درصد جابه‌جایی در بسامد پایه آنها دیده می‌شود.
۳. در مقایسه با نانوصفحات تک‌لایه‌ی گرافن با ابعاد مشابه، نانوصفحات دو لایه حساسیت کمتری به جرم دارند در حالی‌که در مقایسه با نانوصفحات تک‌لایه‌ی هم‌جرم با نانوصفحات دو لایه، نانوصفحات دو لایه در تشخیص جرم خارجی بهتر عمل می‌کنند.
۴. نانو صفحات دولایه با معماری G/BN مستطیلی نسبت به مربعی با افزایش مقیاس طول حساسیت کمتری به جرم‌های خارجی نشان می‌دهند.

برنیتريد - برنیتريد با و بدون جرم خارجی در میانه‌ی ورق مطالعه شد. به این منظور با توجه به اهمیت فاصله‌ی تعادلی بین صفحات و تقریب خطی نیروی واندروالز میان صفحات، در ابتدا فاصله‌ی تعادلی میان صفحات و نیروی واندروالز با استفاده از انرژی پتانسیل لئارد - جنز ۶-۱۲ تقریب زده شد. سپس با استفاده از اصل همیلتون و بهره‌گیری از روش ریتز بسامد پایه‌ی نانوصفحات دولایه با معماری‌های مختلف تعیین شد. نتایج نشان می‌دهد که:

۱. صرف نظر از شرایط مرزی و مقدار مقیاس طول بسامد پایه‌ی نانوصفحات دولایه‌ی مربعی گرافن - گرافن بیشتر از نانوصفحات گرافن - برنیتريد است و بسامد پایه‌ی برنیتريد - برنیتريد کمترین است.

پانوشت

1. Ab Initio

منابع (References)

1. Sun, X.Y., Fu, Z., Xia, M. and Xu, Y. "Effect of vacancy defect on the tensile behavior of grapheme", *Theoretical and Applied Mechanics Letters*, **4**, article. 0510021-5 (2014). DoI :10.1063/2.1405102
2. Zandiatashbar, A., Lee, G.-H., An, S.J., Lee, S., Mathew, N., Terrones, M., Hayashi, T., Picu, C.R., Hone, J. and Koratkar, N. "Effect of defects on the intrinsic strength and stiffness of grapheme", *Nature Communications* (2014). DoI :10.1038/ncomms4186
3. Murmu, L. and Pradhan, S.C. "Buckling of biaxially compressed orthotropic plates at small scales", *Mechanics Research Communications*, **36**, pp. 933-938 (2009).
4. Mahdavi, M.H., Jiang, L.Y. and Sun, X. "Nonlinear vibration and postbuckling analysis of single layer grapheme sheet embedded in a polymer matrix", *Physica E*, **44**, pp. 1708-1715 (2012).
5. Ansari, R. and Sahmani, S. "Prediction of biaxial buckling of single-layered grapheme sheets based on nonlocal plate models and molecular dynamics simulations", *Applied Mathematical Modelling*, **37**, pp. 7338-7351 (2013).
6. Anjomshoa, A., Shahidi, A.R., Hassani, B. and Jomehzadeh, E. "Finite element buckling analysis of multi-layered grapheme sheets on elastic substrate based on nonlocal elasticity theory", *Applied Mathematical Modelling*, **38**, pp. 5934-5955 (2014).
7. Karlicic, D., Cajic, M., Kozic, P. and Pavlovic, I. "Temperature effects on the vibration and stability behavior of multi-layered graphene sheets embedded in an elastic medium", *Composite Structures*, **131**, pp.672-681 (2015)
8. Pradhan, S.C. and Phadikar, J.K. "Small scale effect on vibration of embedded multilayered graphene sheets based on nonlocal continuum models", *Physics Letters A*, **373**, pp. 1062-1069 (2009).
9. Ziaee, S. "Free vibration of single-layered graphene sheets based on different gradient elasticity theories", *Sharif Journal of Mechanical Engineering*, **33**(3), pp.29-36 (2017).
10. Karlicic, D., Kozic, P. and Pavlovic, R. "Free transverse vibration of nonlocal viscoelastic orthotropic multi-nanoplate system (MNPS) embedded in a viscoelastic medium", *Composite Structures*, **115**, pp. 89-99 (2014).
11. Karličić, D., Kozić, P., Adhikari, S., Cajić, M., Murmu, T. and Lazarević, M. "Nonlocal mass-nano-sensor model based on the damped vibration of single-layer graphene sheet influenced by in-plane magnetic field", *International Journal of Mechanical Sciences*, **96-97**, pp. 132-142 (2015).
12. Shen, H.S., Xu, Y-M. and Zhang, C.-L. "Prediction of nonlinear vibration of bilayer graphene sheets in thermal environments via molecular dynamics simulations and nonlocal elasticity", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **267**, pp. 458-470 (2013).
13. Jomehzadeh, E., Saidi, A.R. and Pugno, N.M. "Large amplitude vibration of a bilayer grapheme embedded in

a nonlinear polymer matrix”, *Physica E*, **44**, pp. 1973-1982 (2012).

14. Golberg, D., Bando, Y., Huang, Y., Terao, T., Mitome, M., Tang, C. and Zhi, C. “Boron nitride nanotubes and nanosheets”, *ACS Nano*, **4**, pp. 2979-2993 (2010).
15. Boldrin, L., Scarpa, F., Chwdhury, R. and Adhikari, S. “Effective mechanical properties of hexagonal boron nitride nanosheets”, *Nanotechnology*, **22**, article. 505702 (2011).
<http://dx.doi.org/10.1088/09574484/22/50/505702>
16. Peng, Q., Ji, W. and De, S. “Mechanical properties of the hexagonal boron nitride monolayer: Ab initio study”, *Computational Materials Science*, **56**, pp. 11-17 (2012).
17. Kudin, K.N., Scuseria, G.E. and Yakobson, B.I. “C2F, BN, and C nanoshell elasticity from ab initio computations”, *Physical Review B*, **64**, pp. 235406 (2001).
18. Green, J.F., Bolland, T.K. and Bolland, J.W. “Theoretical elastic behavior for hexagonal boron nitride”, *Journal of Chemical Physics*, **64**, pp. 656-662 (1976).
19. Akdim, B., Pachter, R., Duan, X. and Adams, W. “Comparative theoretical study of single-wall carbon and boron-nitride nanotubes”, *Physical Review B*, **67**, pp. 245404 (2003).
20. Bunch, J.S., van der Zande, A.M., Verbridge, S.S., Frank, I.W., Tanenbaum, D.M., Parpia, J.M., Craighead, H.G. and McEuen, P.L. “Electromechanical Resonators from Graphene Sheets”, *Science*, **315**, pp. 490-493 (2007).
21. Wang, Q. and Arash, B. “A review on applications of carbon nanotubes and graphenes as nano-resonator sensors”, *Computational Materials Science*, **82**, pp. 350-360 (2014).
22. Arash, B., Wang, Q. and Duan, W.H. “Detection of gas atoms via vibration of graphenes”, *Physics Letters A*, **375**, pp. 2411-2415 (2011).
23. Sakhaee-Pour, A., Ahmadian, M.T. and Vafai, A. “Applications of single-layered graphene sheets as mass sensors and atomistic dust detectors”, *Solid State Communications*, **145**, pp. 168-172 (2008).
24. Murmu, T. and Adhikari, S. “Nonlocal mass nanosensors based on vibrating monolayer graphene sheets”, *Sensors and Actuators B: Chemical*, **188**, pp.v1319-1327v(2013).
25. Kim, S.Y. and Park, H.S. “On the utility of vacancies and tensile strain-induced quality factor enhancement for mass sensing using graphene monolayers”, *Nanotechnology*, **21**, pp. 105710 (2010).
26. Yuan, J. and Liew, K.M. “Internal friction characteristic and analysis of inplane natural frequency of tri-layer complexes formed from graphenes and boron nitride nanosheets”, *RSC Advances*, **4**, pp. 45425-45432 (2014).
27. Baowan, D. and Hill, J.M. “Nested boron nitride and carbon-boron nitride nanocones”, *Micro and Nano Letters*, **2**, pp.46-49 (2007).
28. Jiang, L.Y., Huang, Y., Jiang, H., Ravichandran, G., Gao, H., Hwang, K.C. and Liu, B. “A cohesive law for carbon nanotube/polymer interfaces based on the van der Waals force”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **54**, pp. 2436-2452 (2006).
29. Askes, H. and Aifantis, E.C. “Gradient elasticity in statics and dynamics: An overview of formulations, length scale identification procedures, finite element implementations and new results”, *International-Journal of Solids and Structures*, **48**, pp. 1962-1990 (2011).
30. Reddy, J.N., *Theory and Analysis of Elastic Plates*, Second Edition, CRC Press (2007).
31. Wang, X., Zhi, C., Weng, Q., Bando, Y. and Golberg, D. “Boron Nitride nanosheets: Novel syntheses and applications in polymeric composites”, *Journal of Physics: Conference Series*, **471**, pp. 012003 (2013).
<http://dx.doi.org/10.1088/17426596/471/1/012003>
32. Asemi, H.R., Asemi, S.R., Farajpour, A. and Mohammadi, M. “Nanoscale mass detection based on vibrating piezoelectric ultrathin films under thermo-electromechanical loads”, *Physica E*, **68**, pp. 112-122 (2015).
33. Sadeghzadeh, S. “Nanoparticle mass detection by single and multilayer graphene sheets: Theory and simulations”, *Applied Mathematical Modelling*, **40**, pp. 7862-7879 (2016).
34. Singh, S.K., Neek-Amal, M., Costamagna, S. and Peeters, F.M. “Thermomechanical properties of a single hexagonal boron nitride sheet”, *Physical Review B*, **87**, pp. 84106 (2013).
35. Panchal, M.B., Upadhyay, S.H. and Harsha, S.P. “Vibration analysis of single walled boron nitride nanotube based nanoresonators”, *Journal of Nanotechnology in Engineering and Medicine*, **3**, pp. 031004 (2012).

پیوست الف

در معادله‌ی ۱-الف و جدول ۱-الف تخمین استفاده شده برای جابه‌جایی جانبی ورق که در محاسبات به‌کار رفته، آمده است:

$$w = \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N w_{ij} \varphi_i(x) \phi_j(y) \quad (۱-الف)$$

که $\varphi_i(x)\phi_j(y)$ با توجه به شرایط مرزی ورق تعیین و در جدول ۱-الف فهرست شده است.^[۳۰]

جدول ۱-الف. $\varphi_i(x)\phi_j(y)$ با توجه به شرایط مرزی با توجه به شرایط مرزی.^[۳۰]

$\varphi_i(x)\phi_j(y)$	شرط مرزی
$\left(\left(\frac{x}{a}\right)^i - \left(\frac{x}{a}\right)^{i+1}\right) \left(\left(\frac{y}{b}\right)^j - \left(\frac{y}{b}\right)^{j+1}\right)$	SSSS
$\left(\left(\frac{x}{a}\right)^i - \left(\frac{x}{a}\right)^{i+1}\right) \left(\left(\frac{y}{b}\right)^{j-1}\right)$	SFSF
$\left(\left(\frac{x}{a}\right)^{i+1} - \left(\frac{x}{a}\right)^{i+2}\right) \left(\left(\frac{y}{b}\right)^{j+1} - \left(\frac{y}{b}\right)^{j+2}\right)$	CCSS
$\left(\left(\frac{x}{a}\right)^i - \left(\frac{x}{a}\right)^{i+1}\right) \left(\left(\frac{y}{b}\right)^{j+1} - 2\left(\frac{y}{b}\right)^{j+2} + \left(\frac{y}{b}\right)^{j+3}\right)$	SCSC

$$\begin{aligned}
 & + \frac{(h_k)^\tau}{12} l^\tau \int_a^b \int_a^b \left[Q_{11}^{(k)} \left(\frac{\partial^\tau \varphi_p^{(k)}}{\partial x^\tau} \frac{\partial^\tau \varphi_m^{(k)}}{\partial x^\tau} \phi_q^{(k)} \phi_n^{(k)} \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. + \frac{\partial^\tau \varphi_p^{(k)}}{\partial x^\tau} \frac{\partial^\tau \varphi_m^{(k)}}{\partial x^\tau} \frac{\partial^\tau \phi_q^{(k)}}{\partial y^\tau} \phi_n^{(k)} \right) \right] dx dy \\
 & + \frac{(h_k)^\tau}{12} l^\tau \int_a^b \int_a^b \left[Q_{11}^{(k)} \left(\frac{\partial^\tau \phi_q^{(k)}}{\partial y^\tau} \frac{\partial^\tau \varphi_m^{(k)}}{\partial x^\tau} \frac{\partial^\tau \varphi_p^{(k)}}{\partial x^\tau} \phi_n^{(k)} \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. + \frac{\partial^\tau \phi_q^{(k)}}{\partial y^\tau} \frac{\partial^\tau \varphi_m^{(k)}}{\partial x^\tau} \varphi_p^{(k)} \phi_n^{(k)} \right) \right] dx dy \\
 & - \frac{(h_k)^\tau}{12} \int_a^b \int_a^b \left[Q_{11}^{(k)} \frac{\partial^\tau \phi_q^{(k)}}{\partial y^\tau} \frac{\partial^\tau \phi_n^{(k)}}{\partial y^\tau} \varphi_p^{(k)} \varphi_m^{(k)} \right. \\
 & \quad \left. + Q_{11}^{(k)} \frac{\partial^\tau \phi_n^{(k)}}{\partial y^\tau} \frac{\partial^\tau \varphi_p^{(k)}}{\partial x^\tau} \varphi_m^{(k)} \phi_q^{(k)} \right] dx dy \\
 & + \frac{(h_k)^\tau}{12} l^\tau \int_a^b \int_a^b \left[Q_{11}^{(k)} \left(\frac{\partial^\tau \phi_q^{(k)}}{\partial y^\tau} \frac{\partial^\tau \phi_n^{(k)}}{\partial y^\tau} \varphi_p^{(k)} \varphi_m^{(k)} \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. + \frac{\partial^\tau \varphi_p^{(k)}}{\partial x^\tau} \frac{\partial^\tau \phi_q^{(k)}}{\partial y^\tau} \frac{\partial^\tau \phi_n^{(k)}}{\partial y^\tau} \varphi_m^{(k)} \right) \right] dx dy \\
 & + \frac{(h_k)^\tau}{12} l^\tau \int_a^b \int_a^b \left[Q_{11}^{(k)} \left(\frac{\partial^\tau \phi_q^{(k)}}{\partial y^\tau} \frac{\partial^\tau \phi_n^{(k)}}{\partial y^\tau} \frac{\partial^\tau \varphi_p^{(k)}}{\partial x^\tau} \varphi_m^{(k)} \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. + \frac{\partial^\tau \phi_q^{(k)}}{\partial y^\tau} \frac{\partial^\tau \varphi_p^{(k)}}{\partial x^\tau} \varphi_m^{(k)} \phi_n^{(k)} \right) \right] dx dy \\
 & - \frac{(h_k)^\tau}{3} \int_a^b \int_a^b \left[Q_{\tau\tau}^{(k)} \frac{\partial \varphi_p^{(k)}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_m^{(k)}}{\partial x} \frac{\partial \phi_q^{(k)}}{\partial y} \frac{\partial \phi_n^{(k)}}{\partial y} \right] dx dy \\
 & + \frac{(h_k)^\tau}{3} l^\tau \int_a^b \int_a^b Q_{\tau\tau}^{(k)} \left(\frac{\partial^\tau \varphi_p^{(k)}}{\partial x^\tau} \frac{\partial \varphi_m^{(k)}}{\partial x} \frac{\partial \phi_q^{(k)}}{\partial y} \frac{\partial \phi_n^{(k)}}{\partial y} \right. \\
 & \quad \left. + \frac{\partial \varphi_p^{(k)}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_m^{(k)}}{\partial x} \frac{\partial^\tau \phi_q^{(k)}}{\partial y^\tau} \frac{\partial \phi_n^{(k)}}{\partial y} \right) dx dy \\
 & - \int_a^b \int_a^b \bar{C} \varphi_p^{(k)} \varphi_m^{(k)} \phi_q^{(k)} \phi_n^{(k)} dx dy \tag{الف-۵}
 \end{aligned}$$

در ادامه معادلات حاکم بر مؤلفه‌های ماتریس سختی و ماتریس جرم آورده شده است. در معادلات زیر a و b معرف طول و عرض نانوصفحه است. $h^{(k)}$ و M_k به ترتیب ضخامت و چگالی جرم نانوصفحه k ام ($k = 1, 2$) است. $\bar{\rho}^{(k)}$ معرف جرم ذره‌یی است که مقدار آن برای نانوصفحه‌ی دوم ($k = 2$) صفر است و بر روی نانوصفحه‌ی اول و در مختصات (x_m, y_m) قرار گرفته است.

$$\begin{aligned}
 M_{mnpq}^{(k)} & = \frac{-\bar{\rho}^{(k)}}{12} (h^\tau)^{(k)} \int_a^b \int_a^b \left(\frac{\partial \phi_p^{(k)}}{\partial y} \frac{\partial \phi_m^{(k)}}{\partial y} \varphi_q^{(k)} \varphi_n^{(k)} \right) dx dy \\
 & - \frac{\bar{\rho}^{(k)}}{12} (h^\tau)^{(k)} \int_a^b \int_a^b \left(\frac{\partial \varphi_q^{(k)}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_n^{(k)}}{\partial x} \phi_p^{(k)} \phi_m^{(k)} \right) dx dy \\
 & - \int_a^b \int_a^b \bar{\rho}^{(k)} h^{(k)} \phi_p^{(k)} \varphi_q^{(k)} \phi_m^{(k)} \varphi_n^{(k)} dx dy \\
 & - l_1^\tau \int_a^b \int_a^b \tau \bar{\rho}^{(k)} h^{(k)} \left(\frac{\partial \phi_p^{(k)}}{\partial y} \frac{\partial \phi_m^{(k)}}{\partial y} \varphi_q^{(k)} \varphi_n^{(k)} \right. \\
 & \quad \left. + \frac{\partial \varphi_q^{(k)}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_n^{(k)}}{\partial x} \phi_p^{(k)} \phi_m^{(k)} \right) dx dy \\
 & - l_1^\tau \int_a^b \int_a^b \frac{\bar{\rho}^{(k)}}{12} (h^\tau)^{(k)} \left(\frac{\partial^\tau \phi_p^{(k)}}{\partial y^\tau} \frac{\partial^\tau \phi_m^{(k)}}{\partial y^\tau} \varphi_q^{(k)} \varphi_n^{(k)} \right) dx dy \\
 & - l_1^\tau \int_a^b \int_a^b \frac{\bar{\rho}^{(k)}}{12} (h^\tau)^{(k)} \left(\frac{\partial^\tau \varphi_q^{(k)}}{\partial x^\tau} \frac{\partial^\tau \varphi_n^{(k)}}{\partial x^\tau} \phi_p^{(k)} \phi_m^{(k)} \right) dx dy \\
 & - l_1^\tau \int_a^b \int_a^b \frac{\bar{\rho}^{(k)}}{12} (h^\tau)^{(k)} \left(\tau \frac{\partial \phi_p^{(k)}}{\partial y} \frac{\partial \phi_m^{(k)}}{\partial y} \frac{\partial \varphi_q^{(k)}}{\partial x} \frac{\partial \varphi_n^{(k)}}{\partial x} \right) dx dy \\
 & - M_k \phi_p^{(k)}(y_m) \phi_m^{(k)}(y_m) \varphi_n^{(k)}(x_m) \varphi_q^{(k)}(x_m) \tag{الف-۲}
 \end{aligned}$$

$$K_{mnpq}^{(1\tau)} = \int_a^b \int_a^b \bar{C} \varphi_p^{(\tau)} \varphi_m^{(1)} \phi_q^{(\tau)} \phi_n^{(1)} dx dy \tag{الف-۳}$$

$$K_{mnpq}^{(\tau 1)} = \int_a^b \int_a^b \bar{C} \varphi_p^{(1)} \varphi_m^{(\tau)} \phi_q^{(1)} \phi_n^{(\tau)} dx dy \tag{الف-۴}$$

$$\begin{aligned}
 K_{mnpq}^{(k)} & = -\frac{(h_k)^\tau}{12} \int_a^b \int_a^b \left[Q_{11}^{(k)} \frac{\partial^\tau \varphi_p^{(k)}}{\partial x^\tau} \frac{\partial^\tau \varphi_m^{(k)}}{\partial x^\tau} \phi_q^{(k)} \phi_n^{(k)} \right. \\
 & \quad \left. + Q_{11}^{(k)} \frac{\partial^\tau \phi_q^{(k)}}{\partial y^\tau} \frac{\partial^\tau \varphi_m^{(k)}}{\partial x^\tau} \varphi_p^{(k)} \phi_n^{(k)} \right] dx dy
 \end{aligned}$$