



دانشگاه گیلان  
دانشکده مهندسی مکانیک

جلسه دفاع پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد  
رشته مهندسی مکانیک گرایش طراحی کاربردی

## مطالعه رفتار مکانیکی و ارتعاشی نانو حسگرهای جرمی گرافن / نیتريد بور

### چکیده:

با ورود به مقیاس اتمی و مولکولی، رفتار و خواص ساختارها و خصوصیات ذاتی آن‌ها از جمله استحکام، مقاومت در برابر خوردگی و غیره دچار تغییرات قابل توجه می‌شوند. بررسی خواص مکانیکی و ارتعاشی نانو ساختارها با استفاده از روش تحلیلی و مدل اوربیتال مولکولی امری زمانبر و پرهزینه خواهد بود. لذا با استفاده از روش‌های نیمه تجربی زمان استخراج خواص و بررسی رفتار کاهش چشمگیری یافته است. یکی از روش‌های نیمه تجربی، دینامیک مولکولی است. که نرم‌افزارهای متعددی بر پایه آن توسعه داده شده است. در این پایان‌نامه از نرم‌افزار LAMMPS برای شبیه‌سازی رفتار کششی و ارتعاشی مولکول‌های کربن، نیتروژن و بور در نانو ساختارهای مستطیلی شکل استفاده شده است. فرکانس‌های طبیعی، شکل مود، مدول یانگ و استحکام نهایی کشش برای صفحه مستطیلی گرافن، نیتريد بور، گرافن با ناخالصی نیتروژن یا بور و در انتها نانو ساختار ترکیبی گرافن/ نیتريد بور مورد بررسی قرار گرفته است. با افزودن ناخالصی به گرافن، مدول یانگ و استحکام نهایی کاهش یافته است. روند کاهش در خصوص ناخالصی بور شدیدتر بوده است. همچنین با توجه به رابطه مستقیم بین مدول یانگ و فرکانس طبیعی، با در نظر گرفتن ابعاد و شرایط مرزی یکسان، بدیهی است که افزایش ناخالصی سبب کاهش فرکانس‌های طبیعی نیز شده است. در نانو ساختار ترکیبی گرافن/ نیتريد بور، اثر نحوه اتصال نانو ساختار نیتريد بور به گرافن بر فرکانس طبیعی، مدول یانگ و استحکام نهایی کشش مورد مطالعه قرار گرفته است. با توجه به بیشتر بودن انرژی پیوند کربن- نیتروژن در مقایسه با کربن- بور، اتصال بین نانو ساختار گرفتن در لبه نیتروژن‌دار نانو ساختار نیتريد بور، استحکام نهایی کشش و مدول یانگ بیشتری را به دنبال داشته است. نحوه اتصال دو نانو ساختار می‌تواند از نوع هگزاگونال، اوکتاگونال و یا دکاگونال باشد؛ که به دلیل پایداری بیشتر ساختار هگزاگونال، در اتصال نوع هگزاگونالی که دو طرف پیوند کربن و نیتروژن باشند، بیشترین مدول یانگ و استحکام نهایی کشش را معادل با به ترتیب 770 و 131 گیگاپاسکال به دست داده است. در مورد نانو ساختار ترکیبی گرافن/ نیتريد بور نیز با توجه به رابطه مستقیم بین مدول یانگ و فرکانس طبیعی، بیشترین فرکانس طبیعی برای اتصال نوع هگزاگونال و اتم‌های کربن و نیتروژن درگیر در پیوند به دست آمده است.

نام دانشجو:

محبوبه مهربانی

اساتید راهنما:

دکتر محمدرضا آشوری - دکتر محمد مهدی خطیبی

اساتید داور:

دکتر احمد قاسمی قلعه بهمن \_ دکتر میثم شکوری

یکشنبه 1398/6/24 - ساعت 16 - سمعی بصری دفاعیه

زمان و محل دفاع: