

بررسی اثر نقص هندسی و حذف اتم در ساختار ترکیبی گرافن- نیتريد کربن به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی

مهدی بینقی^۱، علی دادرسی^{۲*}، محسن تقی زاده^۳

۱- دانشجوی دکتری مکانیک، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار، ایران

۲ و ۳- استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی مهندسی، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار، ایران

چکیده

در این مقاله، خواص مکانیکی ساختار ترکیبی گرافن- نیتريد کربن با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. حذف اتم‌های کربن، نیتروژن و حضور نقص‌های دایروی با قطرهای مختلف مطالعه شد. با استفاده از پتانسیل ترسوف، نقص دایروی با قطرهای ۸/۱، ۱۰/۶، ۱۶/۴ و ۲۴/۲ آنگستروم در دو راستای آرمچیر و زیگزاگ مورد تحلیل قرار گرفت. نتایج نشان داد که خواص مکانیکی ساختار ترکیبی از ساختارهای گرافن و نیتريد کربن به صورت جداگانه، پایین تر است. همچنین، حذف اتم‌های نیتروژن اثر بیشتری بر خواص مکانیکی داشت. افزایش قطر نقص دایره باعث کاهش مدول یانگ از ۸۰۲/۲۳ گیگاپاسکال به ۶۸۱/۳۴ گیگاپاسکال در راستای آرمچیر شد. همچنین، مقدار تنش شکست به ترتیب ۳۱/۱۹ و ۴۵/۱۵ درصد در راستای زیگزاگ و آرمچیر کاهش یافت.

کلمات کلیدی: گرافن، نیتريد کربن، دینامیک مولکولی، خواص مکانیکی، نانوساختار

Effect of Geometric Defects and Vacancy in Graphene-Carbon Nitride Hybrid by Molecular Dynamics Simulation Method

Mehdi Beynaghi¹, Ali Dadrasi^{2*}, Mohsen Taghi Zadeh³

Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Iran

Abstract

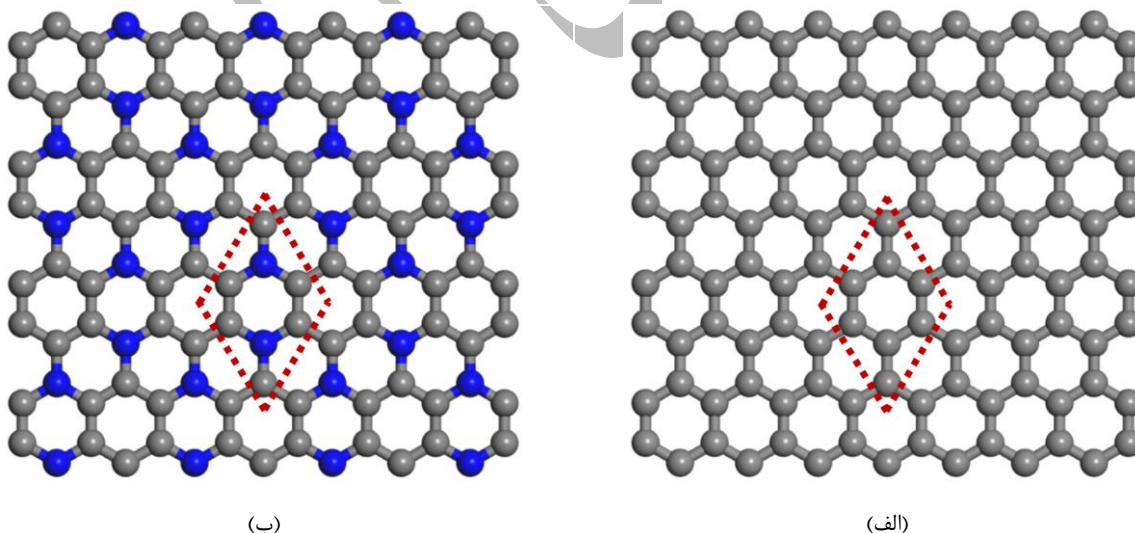
In this paper, we investigate the mechanical properties of graphene-carbon nitride hybrid using molecular dynamics simulations. We studied the impact of vacancies and circular defects of various diameters on these properties. We analyzed circular defects with diameters of 1.8, 10.6, 16.4, and 22.4 Å in both armchair and zigzag directions using the Tersoff potential. The results indicate that the mechanical properties of the hybrid structure are inferior to those of graphene and carbon nitride individually. Additionally, the removal of nitrogen atoms had a more significant impact on mechanical properties. Increasing the diameter of the

circular defect reduced the Young's modulus from 802.23 GPa to 681.34 GPa in the armchair direction. Furthermore, fracture stress decreased by 31.19% and 45.15% in the zigzag and armchair directions, respectively.

Keywords: Graphene, Carbon nitride, Molecular dynamics, Mechanical properties, Nanostructure

مقدمه

در چند دهه‌ی گذشته، نانو ساختارهایی که از مواد مختلف تشکیل شده‌اند به بخشی جدایی ناپذیر از علم و فناوری بدل شده است و تلاش‌های بسیاری بر آنها صورت گرفته است تا بتوان از آنها در صنایع مختلف استفاده نمود [۱]. در میان چندین نانو ساختار که مورد توجه قرار گرفته است، گرافن (شکل ۱) به دلیل ویژگی‌های قابل توجه آن، به عنوان ساختار دو بعدی تک لایه که متشکل از اتم‌های کربن می‌باشد، توجه بیشتر محققان را به خود جلب کرده است [۲]. این ساختار دارای استحکام بالا، هدایت حرارتی مناسب، خواص الکترونیکی و نوری خوبی می‌باشد [۳] و تمام این ویژگی‌ها سبب شده است تا از این ساختار در صنایع مختلف همچون صنایع الکترونیک [۴]، خودروسازی [۵]، نانوکامپوزیت‌های پایه پلیمری [۶] استفاده شود. همچنین، این ویژگی‌ها موجب شده است تا محققان علاوه بر گرافن، به ساختارهایی که از انواع دیگر صفحات گرافن می‌باشند، توجه بیشتری داشته باشند [۷]. تعداد زیادی از تحقیقات به بررسی خواص مکانیکی، الکتریکی، حرارتی ساختارهای برلیوم اکساید، کاربید بور، نیتريد کربن و نیتريد آلومینیوم صورت گرفته است.



شکل ۱: ساختارهای دو بعدی (الف) گرافن، (ب) نیتريد کربن. هر اتم نیتروژن در ساختار نیتريد کربن بوسیله‌ی سه اتم کربن احاطه شده است. سلول واحد برای هر دو ساختار شش ضلعی نشان داده شده است که برای ساختار گرافن شامل هشت اتم کربن و برای ساختار نیتريد کربن شامل دو اتم نیتروژن و شش اتم کربن و می‌باشد.

کیو و همکاران [۸] با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی به بررسی خواص مکانیکی ساختار کاربید سیلیکون پرداختند. در تحقیق دیگر، لیو و همکاران [۹] به بررسی خواص مکانیکی ساختار شش ضلعی نیتريد بور پرداختند. نتایج آنها نشان داد که افزایش دما از ۱۰۰ به ۱۲۰۰ کلوین سبب کاهش خاصیت مکانیکی مدول یانگ می شود. همچنین، استحکام کششی این ساختار از ۱۴۵ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به ۱۰۴ گیگاپاسکال در دمای ۱۲۰۰ کلوین کاهش یافت. لی و همکاران [۱۰] به بررسی خواص مکانیکی ساختار نیتريد تیتانیوم با استفاده از روش دینامیک مولکولی پرداختند. نتایج آنها بیانگر آن است که مقدار مدول یانگ و تنش شکست در راستای بارگذاری X بالاتر از راستای بارگذاری Y می باشد. بررسی خواص مکانیکی ساختار دو بعدی کاربید بور بوسیله‌ی دادرسی و همکاران صورت گرفت [۱۱]. نتایج آنها نشان داد که مقدار خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست در راستای آرمچیر بالاتر از راستای زیگزگ می باشد. همچنین، افزایش دما از ۱۰۰ به ۱۰۰۰ کلوین سبب کاهش خواص مکانیکی در هر دو راستای آرمچیر و زیگزگ می گردد.

ساختارهای دو بعدی که از خانواده‌ی گرافن محسوب می شوند و به عنوان مواد مبتنی بر نیتريد معرفی می گردند نیز، به دلیل پتانسیل بالایی که در کاربردهای متنوع دارند، توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده اند. نیتريد کربن، نیتريد بور، نیتريد گالیوم و نیتريد آلومینیوم به عنوان نماینده‌ی این مواد قابل استفاده می باشند [۱۶-۱۲]. نیتريد کربن (شکل ۱) دارای کاربردهای متنوعی در ذخیره سازی انرژی، جذب گاز، فوتوکاتالیز و دستگاه های نانوالکترومکانیک می باشد. این ساختار نیمه هادی به صورت شش ضلعی و لانه زنبوری می باشد و دارای شکاف باند 0.39 eV است [۱۷]. مطالعات شبیه سازی دینامیک مولکولی نشان می دهد که نانوصفحات نیتريد کربن دارای مدول الاستیک 341 GPa ، رسانایی حرارتی 815 W/mK می باشد و می تواند تا دمای 4000 K کلوین را تحمل نماید [۱۸].

مایلی فرتاش و همکاران [۱۹] به بررسی خواص مکانیکی ساختار ترکیبی نیتريد کربن و کاربید بور به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی پرداختند. آنها با ایجاد نقص های دایروی و مربعی در ساختار، دریافتند که نقص هندسی مربعی اثر کمتری بر خواص مکانیکی دارد. از سویی دیگر، افزایش قطر نقص هندسی دایروی سبب تشدید غلظت تنش در اطراف نقص می گردد. همچنین، افزایش قطر نقص هندسی موجب کاهش خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست می شود. در این مطالعه، همچنین، نشان داده شد زمانی که عیوب هندسی در نانوصفحات نیتريد کربن حضور دارند، خواص مکانیکی مطلوب تری حاصل شده است. بررسی خواص مکانیکی ساختار ترکیبی گرافن و نیتريد بور بوسیله‌ی دینگ و همکاران [۲۰] صورت گرفت. آنها با استفاده حذف اتم های کربن، نیتروژن و بور در حالت های مختلف، به بررسی خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست پرداختند. نتایج آنها نشان داد که حذف اتم کربن در فصل مشترک دو ساختار، اثر بیشتری بر خواص مکانیکی دارد. همچنین، تغییرات دما از ۱۰ کلوین به ۵۰۰

کلون سبب ایجاد یک سیر نزولی در خواص مکانیکی گردید. سنتورک [۲۱] به بررسی خواص مکانیکی ساختار ترکیبی کاربرید بور و نیتريد کربن به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی پرداخت. نتایج آنها نشان داد که حذف اتم در فصل مشترک هر دو ساختار سبب کاهش خواص مکانیکی می گردد. همچنین، حذف اتم بور اثر بیشتری بر خواص مکانیکی را دارد. از سویی دیگر، افزایش حذف اتم های کربن، بور و نیتروژن از ۵ اتم به ۲۰ اتم موجب کاهش مدول یانگ، استحکام کششی و کرنش شکست می شود.

با توجه به مطالب یاد شده، تحقیقات گسترده ای در زمینه ی خواص مکانیکی ساختارهای ترکیبی صورت گرفته است. به دلیل حضور ذرات نانو در نانوصفحات ترکیبی، احتمال بروز عیوب هندسی در تولید آن زیاد است. علاوه بر این، ایجاد نقص های عمدی برای افزایش فاصله ی اتم ها از یکدیگر می تواند عواقب متعددی به همراه داشته باشد که بر عملکرد ساختارهای ترکیبی اثر بگذارد. از سویی دیگر، تفاوت در فاصله های بین اتمی در قسمت های راست و چپ ساختار ترکیبی می تواند منجر به ایجاد نقص به ویژه در فصل مشترک آن شود که مطالعه ی آنها می تواند به عملکرد بهتر این ساختارها در زمینه های مختلف کمک کند. از این رو، در این مقاله، خواص مکانیکی ساختارهای گرافن و نیتريد کربن در دو حالت جداگانه و ترکیبی در دو راستای آرمچیر و زیگزاگ مورد مطالعه قرار گرفته است. همچنین، اثر حذف اتم های کربن و نیتروژن بر خواص مکانیکی مورد بررسی قرار گرفته است. به علاوه، اثر نقص هندسی دایروی بر رفتار مکانیکی ساختار ترکیبی گرافن- نیتريد کربن در دو راستای آرمچیر و زیگزاگ بررسی شده است.

دو ساختار گرافن و نیتريد کربن به دلیل رسانایی الکتریکی بالا و پایداری مکانیکی به عنوان مواد مناسب در کاربردهای ذخیره سازی انرژی و صنعت خودروسازی مورد استفاده قرار می گیرد. از همین رو، درک چگونگی تاثیر نقص های هندسی، از جمله حذف اتم ها (به صورت یک اتم، دو و یا سه اتم) بر خواص مکانیکی، می تواند به طراحی مواد بهینه کمک کند تا ضعف ساختاری را به حداقل برساند و در عین حال، انعطاف پذیری آن را حفظ نماید. بررسی این دو ساختار به صورت جداگانه و حالت ترکیبی آنها می تواند به بسیاری از پرسش های موجود در این زمینه پاسخ دهد. هدف از انتخاب دو ساختار شش ضلعی گرافن و نیتريد کربن، کشف روابط بنیادی بین نقص های هندسی و رفتار مکانیکی بود که می تواند راه را برای نوآوری های آینده در مواد دو بعدی مهندسی شده هموار کند. نتایج بدست آمده نشان می دهد که جهت بارگذاری آرمچیر خواص بالاتری را به نمایش می گذارد و حذف اتم های نیتروژن اثر بیشتری بر خواص مکانیکی مورد بررسی دارد. همچنین، افزایش قطر دایره به عنوان یک نقص هندسی سبب کاهش خواص مکانیکی می گردد. حذف جداگانه ی اتم های نیتروژن و کربن در مرز ساختار ترکیبی می تواند به یک اهرم قابل بررسی تبدیل گردد؛ به گونه ای که تغییرات تعداد و مکان حذف آنها را می توان یک عامل موثر و قابل تامل معرفی کرد.

روش محاسبات

در این مطالعه، از شبیه سازی دینامیک مولکولی برای مدلسازی و تحلیل خواص مکانیکی نانوصفحات گرافن، نیتريد کربن و حالت ترکیبی این دو ساختار استفاده شده است [۲۲]. برهمکنش بین اتم‌های کربن- کربن و کربن- نیتروژن با استفاده از پتانسیل ترسوف محاسبه شده است [۲۳]. برخلاف پتانسیل‌های دیگر، پتانسیل ترسوف اثرات مرتبه پیوند را در نظر می‌گیرد و امکان نمایش واقع بینانه‌تری از تشکیل و شکستن پیوند را فراهم می‌کند که هنگام مطالعه‌ی نقص‌های هندسی ضروری است. علاوه بر این، این پتانسیل، رفتار مکانیکی مواد دو بعدی را با دقت بالا ثبت می‌کند و آن را برای بررسی چگونگی تاثیر نقص‌های ساختاری بر خواص مکانیکی مناسب می‌سازد. رابطه‌ی بین انرژی و جابجایی در معادله‌ی زیر برقرار است:

$$U_{ij} = f_c(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})] \quad (۱)$$

در این رابطه، f_R پتانسیل دافعه، f_A نماد پتانسیل جاذبه است. همچنین، b_{ij} مرتبه‌ی پیوند بین i و j است. افزایش هماهنگی پیوند باعث کاهش B می‌گردد. f_c نیز به عنوان یک تابع تناوبی برای محاسبات cutoff استفاده می‌شود [۲۴]. هر سه تابع از معادلات زیر بدست می‌آیند:

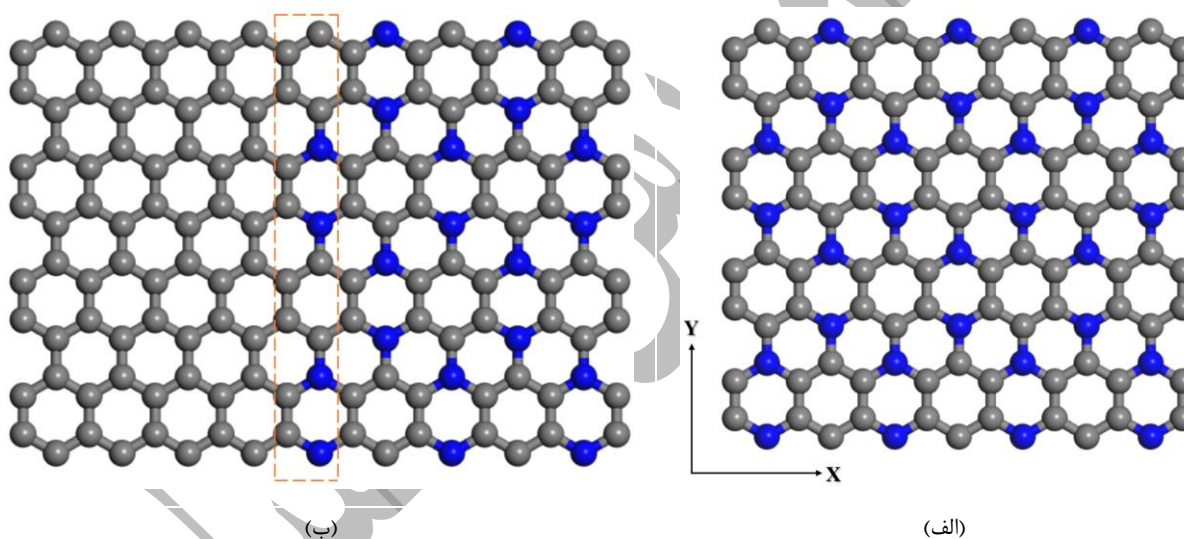
$$\begin{aligned} f_R(ij) &= -A_{ij}e^{\lambda_{ij}r_{ij}}, f_A(ij) = -B_{ij}e^{\mu_{ij}r_{ij}} \\ f_c(ij) &= \begin{cases} 1 & r_{ij} < R_{ij} \\ 1/2 + 1/2 \cos\left(\frac{\pi(r_{ij} - R_{ij})}{S_{ij} - R_{ij}}\right) & R_{ij} < r_{ij} < S_{ij} \\ 0 & r_{ij} > S_{ij} \end{cases} \\ f_R(ij) &= -A_{ij}e^{\lambda_{ij}r_{ij}}, f_A(ij) = -B_{ij}e^{\mu_{ij}r_{ij}} \end{aligned} \quad (۲)$$

$$b_{ij} = X_{ij} (1 + B_i^{ni} \xi_{ij}^{ni})^{-0.5n_i}, \xi_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik}) \omega_{ik} g(\theta_{ijk})$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{G_i^2}{d_i^2} - \frac{G_i^2}{(h_i + \cos \theta_{ijk})^2}$$

$$\omega_{ik} = e[\mu_{ik}^3 (r_{ij} - r_{ik})^3], \lambda_{ij} = \frac{(\lambda_i + \lambda_j)}{2}, \mu_{ij} = \frac{(\mu_i + \mu_j)}{2}$$

از فرآیند NPT با گام زمانی ۱ فمتوثانیه و به مدت ۵۰ پیکوثانیه برای دستیابی به تعادل سیستم استفاده شده است. ابعاد ساختار گرافن و نیتريد کربن به صورت جداگانه و در حالت ترکیبی 10×10 نانومتر مربع می‌باشد و تعداد کل اتم‌ها ۴۰۳۲ اتم در نظر گرفته شده است. دو جهت بارگذاری زیگزاگ و آرمچیر به ترتیب بیانگر جهت‌های X و Y می‌باشند. همچنین، شرایط مرزی دوره‌ای (تناوبی) در هر دو راستای X و Y اعمال شده است. برای کنترل دما در جعبه‌ی شبیه سازی با اعمال الگوریتم Nose-Hoover در دما و فشار ثابت (دما ۳۰۰ کلوین و فشار صفر در نظر گرفته شده است) و با استفاده از گام زمانی ۰/۰۰۱ پیکوثانیه، سیستم برای مدت زمان ۵۰ پیکوثانیه به حالت تعادل رسیده است. پس از تعادل، سیستم تحت بار کششی با نرخ کرنش 0.001 ps^{-1} قرار گرفته است تا تنش در هر کرنش و گام زمانی بدست آید. در نهایت، نمودار تنش-کرنش برای بررسی خواص مکانیکی ساختارهای مورد بررسی با استفاده از اطلاعات بدست آمده ترسیم شده است. شکل ۲، ساختار ترکیبی گرافن-نیتريد کربن و راستای X و Y را به نمایش گذاشته است.



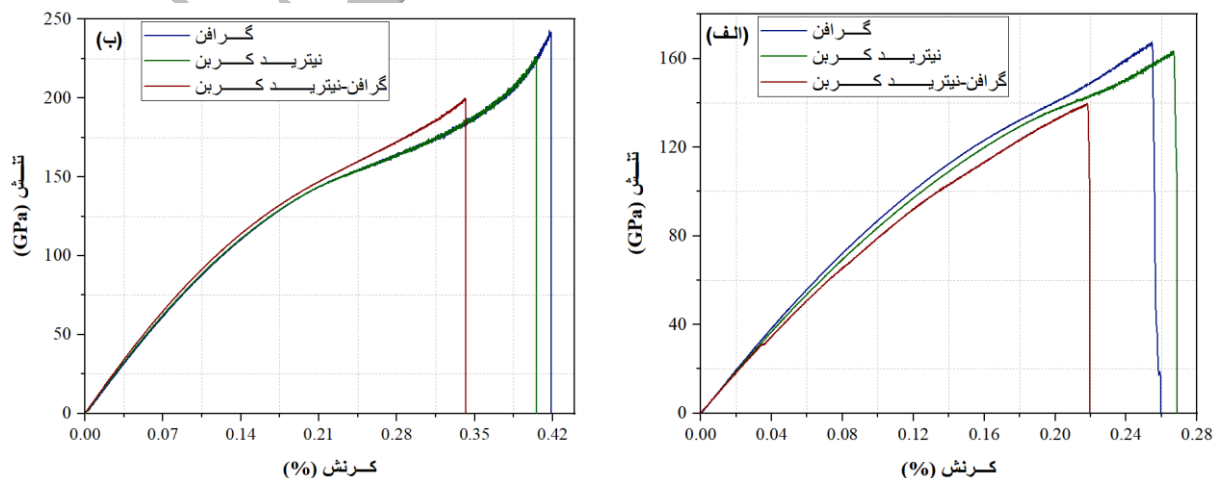
شکل ۲: الف) نمایش راستای X و Y، ب) نمایش فصل مشترک نانوساختار گرافن و نیتريد کربن.

نتایج و بحث

بررسی خواص مکانیکی ساختارهای دو بعدی

شکل ۳ منحنی تنش-کرنش ساختارهای گرافن، نیتريد کربن و حالت ترکیبی هر دو ساختار را در دو راستای آرمچیر و زیگزاگ به نمایش گذاشته است. همان طور که قابل مشاهده است، تنش و کرنش شکست برای ساختار گرافن، نیتريد کربن و حالت ترکیبی

آنها به ترتیب ۱۶۷/۵۱، ۱۶۳/۲۱ و ۱۳۹/۹۱ گیگاپاسکال و ۰/۲۵۴، ۰/۲۶۵ و ۰/۲۱۷ درصد در راستای زیگزاگ می‌باشد. این در حالی است که این مقادیر در راستای آرمچیر به ترتیب ۲۴۱/۸۱، ۲۲۶/۴۶ و ۱۹۹/۹۱ گیگاپاسکال و ۰/۴۰۵، ۰/۴۱۸ و ۰/۳۴۱ درصد در راستای آرمچیر است. همانطور که مشخص است، مقادیر خواص مکانیکی تنش و کرنش شکست ساختار گرافن بالاتر از نیتريد کربن و حالت ترکیبی آنها می‌باشد. از سویی دیگر، نتایج بدست آمده در راستای آرمچیر بالاتر از زیگزاگ می‌باشد. ساختار شش ضلعی نانوصفحات سبب می‌شود که زاویه‌ی بین تنش بارگذاری و لبه‌های پیوند اتم‌ها به ترتیب ۶۰ درجه و ۳۰ درجه در راستاهای زیگزاگ و آرمچیر باشد که موجب می‌شود تا تنش خارجی بیشتری در راستای زیگزاگ برای گسیخته شدن پیوند بین اتم‌های کربن-کربن و کربن-نیتروژن ایجاد شود. بنابراین، نسبت تنش نهایی در جهت زیگزاگ به جهت آرمچیر نزدیک به $\sqrt{3}$ خواهد بود [۲۴]. با توجه به جدول ۱، اختلاف مقادیر مدول ینگ برای تمامی ساختارها در هر دو جهت قابل چشم پوشی می‌باشد. شایان ذکر است که مقدار مدول ینگ برای نانوساختارهای گرافن، نیتريد کربن و حالت ترکیبی آنها به ترتیب ۹۴۱/۳۴، ۸۶۹/۳۵ و ۸۳۰/۰۵ گیگاپاسکال در راستای آرمچیر می‌باشد که نسبت به جهت بارگذاری در راستای زیگزاگ به ترتیب ۶/۳۶، ۵/۶۵ و ۱/۵۱ درصد افزایش یافته است. نانوصفحات در جهت آرمچیر انعطاف پذیری و در نتیجه، مقاومت در برابر تنش بیشتر از خود نشان داده است. افزایش تنش باعث از بین رفتن پیوند بین اتم‌ها و ایجاد حلقه‌های بزرگتر می‌شود که به دلیل توزیع تنش بر ساختار اتمی، رفتار شکست را تغییر می‌دهد. این امر سبب می‌شود تا تنش متمرکز در نانوصفحات به طور ناگهانی افزایش یابد و منجر به تخریب ساختار شود [۲۵]. ژانو و همکاران یک رفتار مشابه از خواص مکانیکی ساختارهای گرافن و نیتريد بور را گزارش کرده‌اند [۲۶]. همچنین، باقری و همکاران [۲۷] نشان دادند که اگرچه تنش و کرنش شکست ساختار نیتريد کربن در جهت آرمچیر بالاتر از جهت زیگزاگ می‌باشد، اما تغییرات مدول ینگ برای هر دو جهت بارگذاری ناچیز می‌باشد.



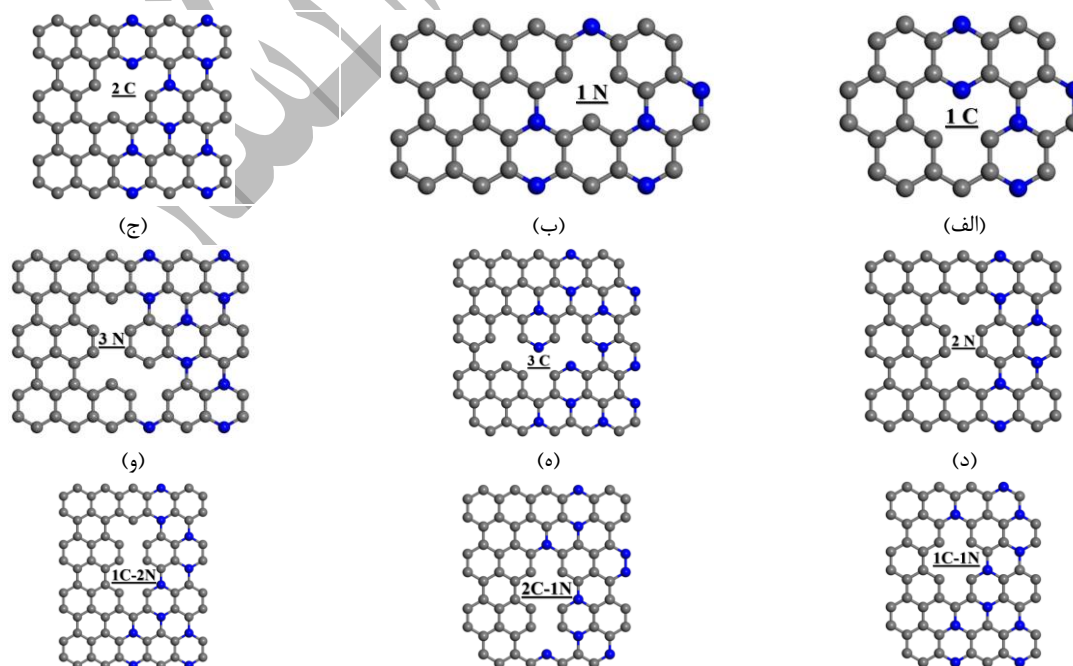
شکل ۳: تغییرات تنش-کرنش برای ساختارهای گرافن، نیتريد کربن و حالت ترکیبی آنها: الف) جهت بارگذاری زیگزاگ، ب) جهت بارگذاری آرمچیر.

جدول ۱: خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست ساختارهای گرافن، نیتريد کربن و ترکيب آنها.

ساختار	جهت بارگذاري	مدول يانگ (GPa)	تنش شکست (GPa)	کرنش شکست (%)
گرافن	زيگزاگ	۸۸۵/۰۵	۱۶۷/۵۱	۰/۲۵۴
	آرمچير	۹۴۱/۳۴	۲۴۱/۸۱	۰/۴۱۸
نيتريد کربن	زيگزاگ	۸۲۲/۸۴	۱۶۳/۲۱	۰/۲۶۵
	آرمچير	۸۶۹/۳۵	۲۲۶/۴۶	۰/۴۰۵
گرافن-نيتريد کربن	زيگزاگ	۸۱۷/۶۶	۱۳۹/۹۱	۰/۲۱۷
	آرمچير	۸۳۰/۰۵	۱۹۹/۹۱	۰/۳۴۱

بررسی تاثیر حذف اتم بر خواص مکانیکی ساختار ترکیبی گرافن- نیتريد کربن

در این بخش، به بررسی اثر حذف اتم‌های کربن و نیتروژن در ساختار ترکیبی گرافن- نیتريد کربن پرداخته شده است. شکل ۴ نشان دهنده‌ی حالت‌های مختلف از حذف اتم‌های کربن و نیتروژن می‌باشد. شایان ذکر است که بیشتر اتم‌ها از فصل مشترک دو ساختار حذف شده است.



(ز)

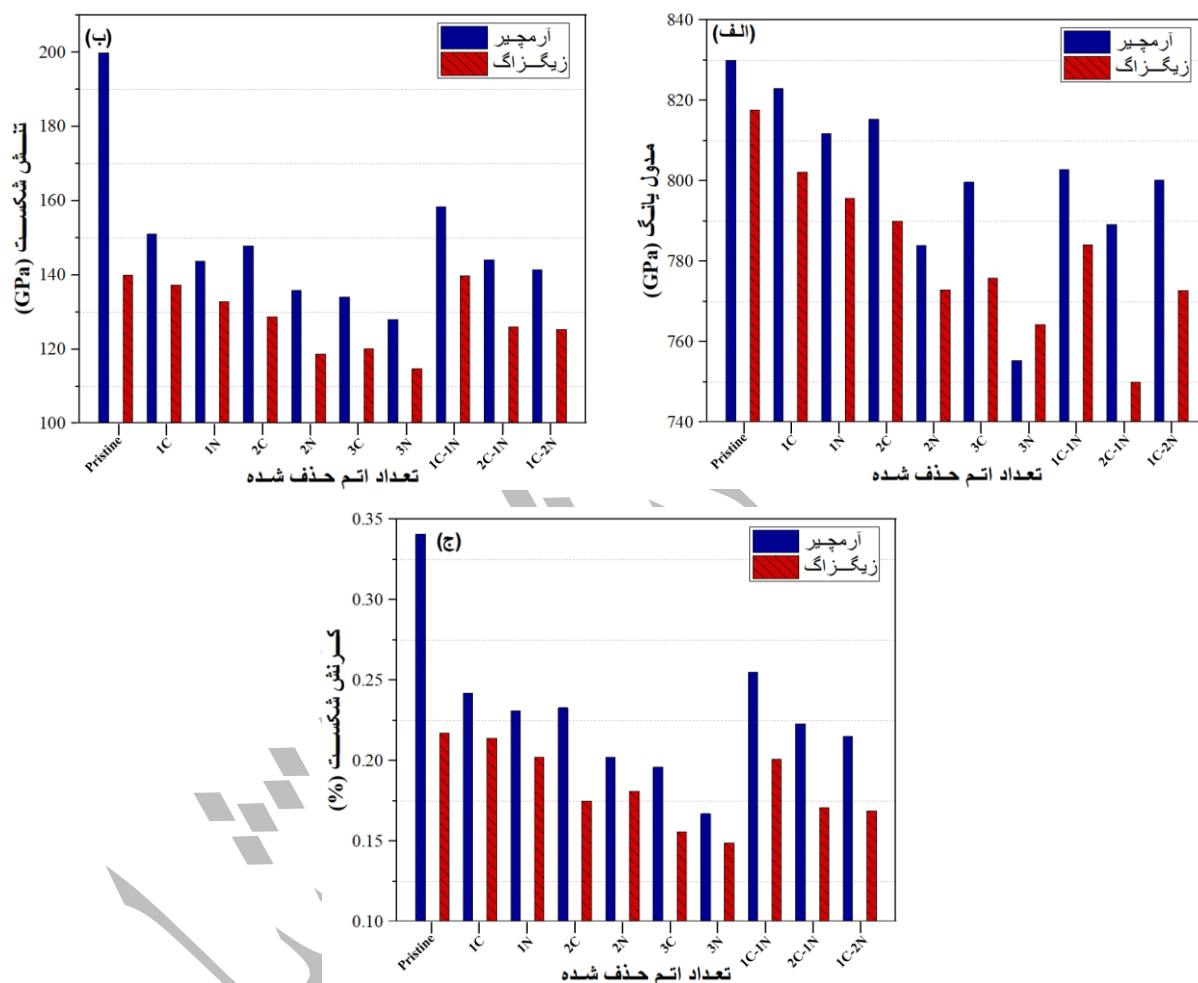
(ح)

(ط)

شکل ۴: ساختار ترکیبی گرافن- نیتريد کربن با حذف اتم‌های کربن و نیتروژن (الف) ۱ اتم کربن، (ب) ۱ اتم نیتروژن، (ج) ۲ اتم کربن، (د) ۲ اتم نیتروژن، (ه) ۳ اتم کربن، (و) ۳ اتم نیتروژن، (ز) ۱ اتم کربن و ۱ اتم نیتروژن، (ح) ۲ اتم کربن و ۱ اتم نیتروژن، (ط) ۱ اتم کربن و ۲ اتم نیتروژن.

شکل ۵ نتایج بدست آمده از خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست نانوصفحات ترکیبی گرافن- نیتريد کربن را به نمایش گذاشته است. همان طور که مشخص است، حذف اتم‌های نیتروژن اثر بیشتری نسبت به حذف اتم‌های کربن بر خواص مکانیکی داشته است. شایان ذکر است که در این قسمت نیز خواص مکانیکی در جهت آرمچیر بالاتر از زیگزاگ گزارش شده است. حذف ۱ اتم کربن مقدار مدول یانگ را به $۸۰۲/۲۱$ و $۸۲۲/۹۵$ گیگاپاسکال در راستای زیگزاگ و آرمچیر کاهش داده است. این در حالی است که مقدار این خاصیت مکانیکی در حذف ۱ اتم نیتروژن به ترتیب $۷۹۵/۶۶$ و $۸۱۱/۸۱$ بدست آمده است. این روند نزولی برای خاصیت مکانیکی تنش شکست نیز قابل مشاهده است. مقدار این خاصیت مکانیکی در حذف ۱ اتم کربن به ترتیب $۱/۴۲$ و $۲۴/۴۵$ درصد در راستای زیگزاگ و آرمچیر کاهش یافته است. همچنین، مقدار کرنش شکست برای حذف ۱ اتم نیتروژن به ترتیب $۰/۲۰۲$ و $۰/۲۳۱$ درصد در راستای زیگزاگ و آرمچیر گزارش شده است. این روند کاهشی برای حذف ۲ و ۳ اتم کربن و نیتروژن (به صورت جداگانه) نیز قابل مشاهده است. مقدار مدول یانگ، تنش و کرنش شکست در حذف ۲ اتم کربن در راستای آرمچیر و نسبت به ساختار بدون نقص به ترتیب $۱/۷۶$ ، $۲۶/۰۲$ و $۳۱/۶۷$ درصد کاهش داشته است. خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست برای ساختار ترکیبی گرافن- نیتريد کربن با حذف ۳ اتم نیتروژن در راستای زیگزاگ و نسبت به ساختار بدون نقص به ترتیب $۶/۵۲$ ، $۱۸/۰۳$ و $۲۸/۱۱$ درصد کاهش داشته است. از سویی دیگر، حذف ترکیبی اتم‌های کربن و نیتروژن نتایج متفاوتی را گزارش کرده است. با توجه به شکل ۴ (ز، ح، ط) و نمودار شکل ۵، حذف ۲ اتم کربن و ۱ اتم نیتروژن به صورت همزمان بیشترین اثر را بر خواص مکانیکی مورد بررسی داشته است. برای این حالت (شکل ۴-ح)، مقدار مدول یانگ در راستای زیگزاگ از $۸۱۷/۶۶$ گیگاپاسکال برای ساختار بدون نقص به $۷۵۰/۰۳$ گیگاپاسکال کاهش یافته است. این در حالی است که مقدار این خاصیت مکانیکی در راستای آرمچیر $۷۸۹/۲۳$ گیگاپاسکال گزارش شده است. همچنین، مقدار تنش و کرنش شکست در راستای زیگزاگ به ترتیب $۹/۹۷$ و $۲۱/۱۹$ درصد کاهش یافته است. همچنین، خواص مکانیکی تنش و کرنش شکست در راستای آرمچیر به ترتیب $۱۴۴/۰۸$ و $۰/۲۲۳$ درصد گزارش شده است. این روند کاهشی در مطالعات قبلی نیز قابل مشاهده می‌باشد. ترانگ و همکاران [۲۸] به بررسی خواص مکانیکی نانوصفحات فسفر سیاه در حضور عیوب هندسی پرداختند. نتایج آنها نشان داد که این نقص‌های هندسی اثر چندانی بر خاصیت مکانیکی مدول یانگ ندارد، اما سبب کاهش مقادیر تنش و کرنش شکست به میزان ۵۳ و ۶۹ درصد می‌شود. در تحقیقی دیگر، فو و همکاران [۲۹] به بررسی اثر حذف اتم‌های کربن در ساختار دو بعدی گرافن پرداختند. نتایج آنها حاکی از آن است که حذف اتم‌های کربن اثر قابل توجهی بر استحکام نهایی ساختار می‌گذارد. خواص مکانیکی ساختار زینک اکساید بوسیله‌ی

آهن‌گری و همکاران مورد بررسی قرار گرفت [۳۰]. آنها با استفاده از حذف اتم‌های اکسیژن و روی در شرایط مختلف به بررسی تغییرات مدول یانگ پرداختند. نتایج آنها نشان می‌دهد که حذف اتم‌های روی اثر بیشتری بر ساختار اکسید روی نسبت به حذف اتم‌های اکسیژن دارد.

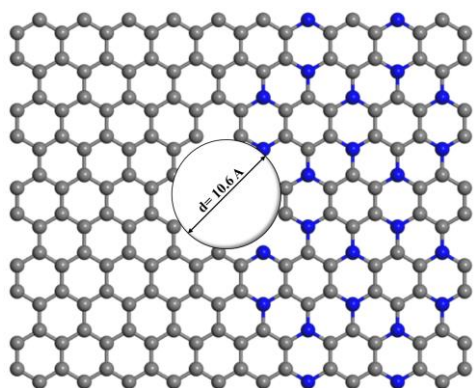


شکل ۵: خواص مکانیکی ساختار ترکیبی گرافن-نیتريد کربن بر تعداد اتم‌های حذف شده‌ی کربن (C) و نیتروژن (N): (الف) مدول یانگ، (ب) تنش شکست، (ج) کرنش شکست.

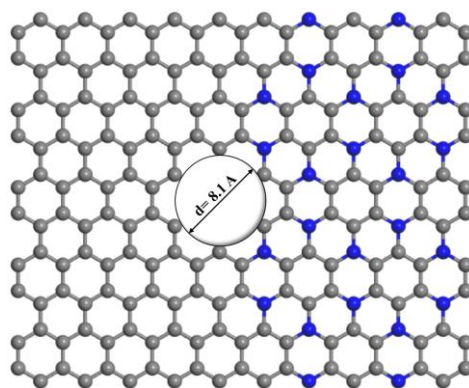
بررسی نقص دایروی بر خواص مکانیکی ساختار ترکیبی گرافن-نیتريد کربن

در این بخش، به بررسی اثر حضور نقص‌های دایروی با قطرهای مختلف بر خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست پرداخته شده است. بدین منظور، ۴ اندازه قطر مختلف ۸/۱، ۱۰/۶، ۱۶/۴ و ۲۴/۲ آنگستروم در فصل مشترک دو ساختار گرافن و نیتريد کربن تعبیه شده است که در شکل ۶ قابل مشاهده می‌باشد. با توجه به نتایج گزارش شده در شکل ۷، می‌توان دریافت که

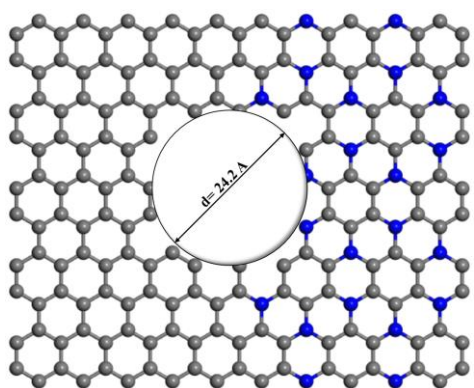
افزایش قطر نقص دایروی سبب کاهش هر سه خاصیت مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست شده است، به طوری که نقص دایروی با بیشترین قطر دارای کمترین خواص مکانیکی می باشد. شایان ذکر است که در این بخش نیز مقادیر خواص مکانیکی در راستای آرمچیر بالاتر از راستای زیگزاگ می باشد. با توجه به نتایج ارایه شده در شکل ۷، مقدار مدول یانگ از ۸۱۷/۶۶ گیگاپاسکال برای ساختار بدون نقص و در راستای زیگزاگ به ۶۴۹/۱۷ گیگاپاسکال در حضور نقص دایروی با قطر ۲۴/۲ آنگستروم کاهش یافته است. این در حالی است که این خاصیت مکانیکی در راستای آرمچیر ۶۸۱/۳۴ گیگاپاسکال گزارش شده است. همچنین، مقادیر تنش و کرنش شکست برای ساختار با نقص دایروی ۲۴/۲ آنگستروم و در راستای زیگزاگ به ترتیب ۹۶/۲۶ گیگاپاسکال و ۰/۱۴۳ درصد بدست آمده است که نسبت به ساختار بدون نقص به ترتیب ۳۱/۱۹ و ۵۸/۰۶ درصد کاهش داشته است. مقادیر تنش و کرنش شکست برای این ساختار و در راستای آرمچیر به ترتیب ۱۰۹/۶۴ گیگاپاسکال و ۰/۱۷۷ درصد گزارش شده است. این نکته قابل توجه است که حذف تعداد زیادی از اتم‌ها در یک ساختار موجب می شود که پیوند بین اتم‌ها تضعیف شود و کاهش مقاومت ساختار را به همراه داشته باشد. از سویی دیگر، تمرکز تنش به عنوان عامل دیگری که بر استحکام نانوصفحات اثرگذار است، معرفی می گردد. زمانی که اتم‌های کربن و نیتروژن حذف می شوند، تمرکز تنش در اطراف نواحی خالی افزایش می یابد و با افزایش نرخ کرنش، ساختار از این قسمت‌ها گسیخته می شوند [۳۱-۳۳]. در تحقیقات انجام شده بر ساختارهای دو بعدی و بررسی اثر نقص‌های هندسی، نتایج مشابهی گزارش شده است. شیرازی و همکاران [۳۴] به بررسی خواص مکانیکی ساختار شش ضلعی نیتريد کربن در حضور نقص دایروی با قطرهای مختلف پرداختند. نتایج آنها نشان داد که افزایش قطر نقص دایروی سبب کاهش استحکام کششی در ساختار می شود. در مطالعه‌ای دیگر، عینعلی پور و همکاران به بررسی ساختار ترکیبی گرافن- نیتريد بور پرداختند [۳۵]. نتایج آنها نشان داد که حضور نقص دایروی در ساختار نیتريد بور اثر بیشتری بر خواص مکانیکی می گذارد. همچنین، افزایش تعداد نقص دایروی با قطر ثابت سبب کاهش مدول یانگ و تنش شکست ساختار ترکیبی گرافن- نیتريد بور می گردد. فرتاش و همکاران [۱۹] اثر مکان، تعداد و قطر نقص دایروی را بر ساختار ترکیبی کاربید بور- نیتريد کربن مورد مطالعه قرار دادند. نتایج آنها نشان داد که افزایش قطر نقص دایره سبب افزایش غلظت تنش اطراف نقص شود. همچنین، افزایش تعداد نقص دایروی با قطر ثابت موجب کاهش استحکام کششی ساختار ترکیبی کاربید بور- نیتريد کربن می گردد. از سویی دیگر، نتایج آنها نشان داد که حضور نقص‌های هندسی در ساختار کاربید بور اثر بیشتر بر خواص مکانیکی می گذارد.



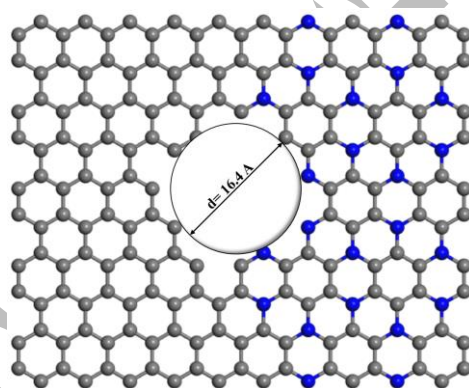
(ب)



(الف)

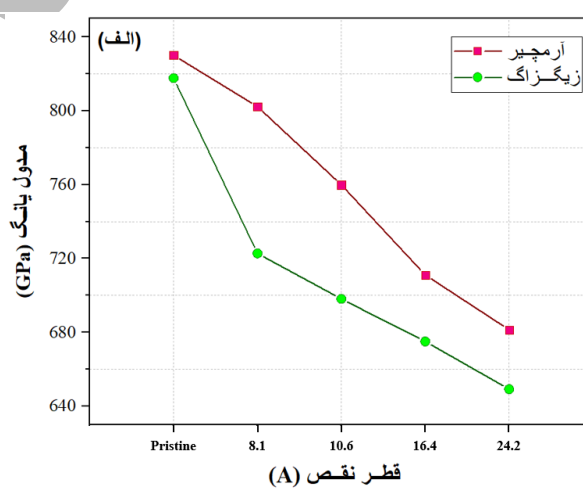
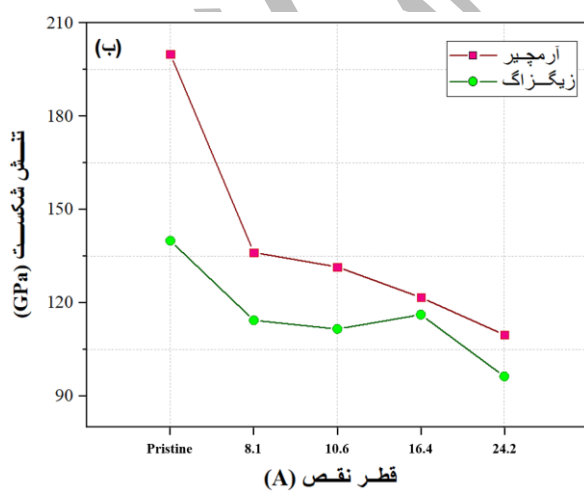


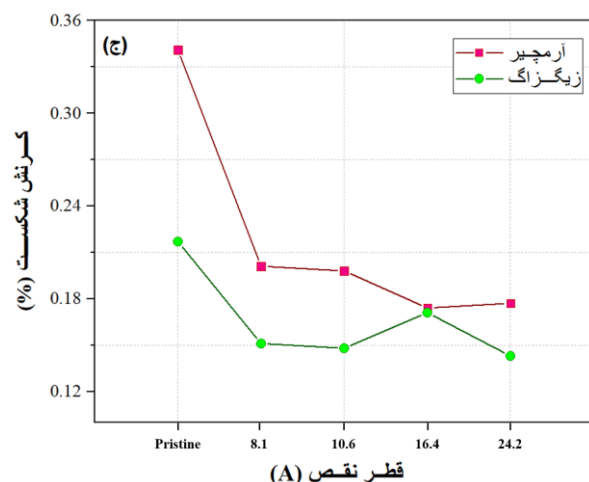
(د)



(ج)

شکل ۶: حضور نقص دایروی در ساختار ترکیبی گرافن-نیتريد کربن با قطرهای الف) ۸/۱، ب) ۱۰/۶، ج) ۱۶/۴، د) ۲۴/۲ آنگستروم.





شکل ۷: خواص مکانیکی ساختار ترکیبی گرافن-نیتريد کربن بر قطر نقص‌های دایروی، الف) مدول یانگ، ب) تنش شکست، ج) کرنش شکست.

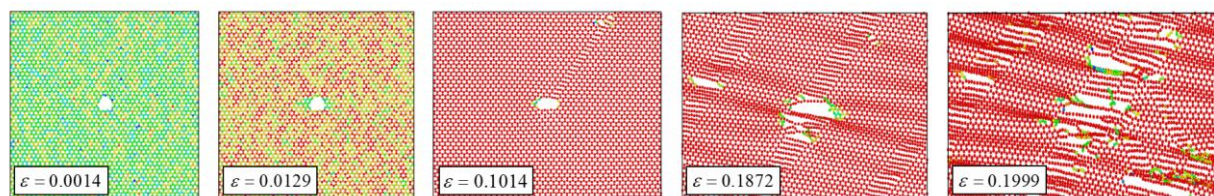
برای درک بهتر نتایج بدست آمده از این مطالعه و نتایج بدست آمده در مطالعات قبلی، جدول ۲ ارائه شده است.

جدول ۲: مقایسه‌ی نتایج مطالعات گذشته و مطالعه‌ی پیش رو بر خواص مکانیکی نانو مواد دو بعدی.

ساختار	پتانسیل	راستای کشش	نوع نقص	اندازه ساختار	خواص مکانیکی	منبع
گرافن-نیتريد کربن	ترسوف	آرمچیر	دایره (قطر ۱۶/۴ آنگستروم)	۱۰×۱۰ نانومتر مربع	مدول یانگ	مطالعه‌ی حاضر
نیتريد کربن-برن نیتريد	ترسوف	آرمچیر	دایره (قطر ۱۵ آنگستروم)	۷×۶ نانومتر مربع	مدول یانگ	[۳۶]
نیتريد کربن-کاربید بور	ترسوف	آرمچیر	دایره (قطر ۱۵ آنگستروم)	۵۱×۵۹ نانومتر مربع	مدول یانگ	[۱۹]
گرافن-نیتريد کربن	ترسوف	آرمچیر	حذف اتم (۱ اتم نیتروژن)	۱۰×۱۰ نانومتر مربع	کرنش شکست	مطالعه‌ی حاضر
گرافن-نیتريد بور	ترسوف	آرمچیر	حذف اتم (۱ اتم نیتروژن)	۱۵×۷ نانومتر مربع	کرنش شکست	[۲۰]
نیتريد کربن-کاربید بور	ترسوف	آرمچیر	حذف اتم (۵ اتم نیتروژن)	۳۰×۱۴ نانومتر مربع	کرنش شکست	[۲۱]

روند تغییرات شکست ساختار ترکیبی گرافن-نیتريد کربن در حضور نقص دایروی با قطر ۸/۱ آنگستروم در شکل ۸ به نمایش گذاشته شده است. همان گونه که مشاهده می‌شود، تمرکز تنش در اطراف نقص هندسی با افزایش کرنش تشدید می‌شود که همین امر، موجب ایجاد شکست در ساختار می‌گردد. این روند تا زمانی ادامه پیدا می‌کند که مقاومت ساختار به کمترین مقدار خود برسد و صفحه از هم گسیخته شود؛ به طوری که این گسیختگی در ساختار در راستای عمود بر جهت بارگذاری انتشار پیدا می‌کند و

شکست کامل ساختار مورد مطالعه در کرنش ۰/۲۰۱ درصد انجام می‌پذیرد. افزایش کرنش باعث گسترش و رشد عیوب هندسی می‌شود که در پی آن، گسستن پیوندهای بین اتمی کربن-کربن و کربن-نیتروژن را به همراه دارد [۳۶-۳۸].



شکل ۸: روند شکست ساختار ترکیبی گرافن-نیتريد کربن با نقص دایروی با قطر ۸/۱ آنگستروم.

جمع بندی

خواص مکانیکی قابل توجه ساختارهای دو بعدی باعث شده است که نظر بسیاری از محققان را به خود جلب نمایند. همچنین، بررسی پیوند بین اتم‌ها در این ساختارهای ترکیبی در حضور نقص‌های هندسی مختلف حائز اهمیت است. از این رو، بررسی خواص مکانیکی ساختارهای ترکیبی و شناسایی ویژگی‌های آنها مسیرهای نوینی را در زمینه‌های مختلف مهندسی فراهم می‌آورد. در این مقاله، خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست ساختارهای دو بعدی گرافن، نیتريد کربن و حالت ترکیبی آنها با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی در شرایط مختلف مورد مطالعه قرار گرفت. المان‌های حذف اتم کربن و نیتروژن، همچنین، حضور نقص دایروی با قطرهای مختلف مورد آزمایش قرار گرفت. نتایج نشان داد که خواص مکانیکی ساختارهای گرافن و نیتريد کربن به صورت جداگانه، بالاتر از حالت ترکیبی آنها است. همچنین، نتایج بدست آمده در جهت بارگذاری آرمچیر بالاتر از جهت بارگذاری زیگزاگ گزارش شد. مقدار مدول یانگ برای ساختار ترکیبی گرافن-نیتريد کربن به ترتیب ۸۱۷/۶۶ و ۸۳۰/۰۵ گیگاپاسکال در راستای زیگزاگ و آرمچیر گزارش شد. نتایج بدست آمده از ساختار ترکیبی و حذف اتم‌های کربن و نیتروژن در حالت‌های مختلف حاکی از آن است که حذف اتم‌های نیتروژن نسبت به اتم‌های کربن اثر بیشتری بر خواص مکانیکی دارد. مقدار تنش شکست برای ساختار ترکیبی با حذف ۳ اتم نیتروژن و در جهت آرمچیر برابر ۱۲۸/۰۱ گیگاپاسکال گزارش شد که این خاصیت مکانیکی برای ساختار با حذف ۳ اتم کربن، معادل ۱۳۴/۱۲ بدست آمد. از سویی دیگر، افزایش قطر نقص دایروی از ۸/۱ آنگستروم به ۲۴/۲ آنگستروم سبب کاهش خواص مکانیکی شد. مقدار مدول یانگ برای ساختار ترکیبی گرافن-نیتريد کربن در حضور نقص دایروی با

قطر ۸/۱ آنگستروم و در راستای آرمچیر از ۸۰۲/۲۳ گیگاپاسکال به ۶۸۱/۳۴ گیگاپاسکال برای ساختار با نقص دایروی به قطر ۲۴/۲ آنگستروم کاهش یافت. نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که نانوصفحات ترکیبی گرافن- نیتريد کربن را می‌توان به عنوان یک ساختار امیدوارکننده برای کاربردهای مکانیکی و الکتریکی معرفی کرد.

واژه نامه

Carbon	کربن	Nanocomposite	نانوکامپوزیت
Graphene	گرافن	Electronic	الکترونیک
Boron Carbide	کاربید بور	Beryllium Oxide	برلیوم اکساید
Aluminum Nitride	نیتريد آلومینیوم	Carbon Nitride	نیتريد کربن
Silicon Carbide	کاربید سیلیکون	Young's Modulus	مدول یانگ
Zigzag	زیگزاک	Armchair	آرمچیر
Tersoff	ترسوف	Kelvin	کلوین
		Picosecond	پیکوثانیه

مراجع

- [1] S. Ajori, A. Eftekhar, "Mechanical properties and fracture analysis of defective penta-graphene under temperature variation: Insight from molecular dynamics," *Diamond & Related Materials*, Pp. 108956, September, (2022).
- [2] A. Kataria, A. Verma, M. Sanjay, S. Siengchin, "Molecular modeling of 2D graphene grain boundaries: Mechanical and fracture aspects," *Materials Today: Proceedings*, Pp. 2404-2408, July, (2022).
- [3] S. Sadeghzadeh, M. Ghojavand, J. Mahmoudi, "Influence of Stone-Wales defects on the mechanical properties of graphene-like polyaniline (PANI) C₃N nanosheets," *Diamond & Related Materials*, P. 11-18, March, (2019).
- [4] Q. Peng, Z. Huang, Y. Zhang, Z. Hu, "Effect of Strain Rate, Temperature, Vacancy, and Microcracks on Mechanical Properties of 8-16-4 Graphyne," *Nanomaterials*, Pp. 556, July, (2024).

- [5] M. Shishir, M. Raja, A. Tabarraei, "Investigation of fracture and mechanical properties of monolayer C₃N using molecular dynamic simulations," *Mechanics of Materials*, Pp. 103895, April, (2021).
- [6] S. Sadeghzadeh, "Effects of vacancies and divacancies on the failure of C₃N nanosheets," *Diamond & Related Materials*, Pp. 257-265 December, (2018).
- [7] J. Singh, R. Kumar, "Effect of the interface on mechanical and fracture properties of lateral graphene/hexagonal boron-nitride heterostructure: A molecular dynamics study," *Diamond & Related Materials*, Pp. 110001, June, (2023).
- [8] C. Qin, Y. Su, J. Yang, X. Wang, B. Chen, Q. Ouyang, D. Zhang, "Microstructural characteristics and mechanical behavior of SiC (CNT)/Al multiphase interfacial micro zones via molecular dynamics simulations," *Composites Part B*, Pp. 108996, September, (2021).
- [9] Y. Liu, Y. Pan, L. Lin, X. Qi, J. Yao, "Mechanical properties and thickness-determined fracture mode of hexagonal boron nitride nanosheets under nanoindentation simulations," *Computational Materials Science*, Pp. 110047, July, (2021).
- [10] S. Lee, A. Esfandiar, A. Rajabpour, "Mechanical behaviors of titanium nitride and carbide MXenes: A molecular dynamics study," *Applied Surface Science*, Pp. 150633, March, (2021).
- [11] A. Dadrasi, S. Fooladpanjeh, A. Albooyeh, A. Salmankhani, M. Saeb, "A theoretical insight into the fracture behavior of the edge-cracked polycrystalline BC₃ nanosheets," *Computational Materials Science*, Pp. 110345, June, (2021).
- [12] M. Ahangari, A. Fereidoon, A. Hamed, "Interlayer interaction and mechanical properties in multi-layer graphene, Boron-Nitride, Aluminum-Nitride and Gallium-Nitride graphene-like structure: A quantum mechanical DFT study," *Superlattices and Microstructures*, Pp. 117845, May, (2017).
- [13] A. Ebrahimi, M. Ajri, "Analyzing Mechanical Properties of Aluminum-graphene Nanocomposite with Vacancy and Pin-holed Defects by Molecular Dynamics Method," *Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, Pp. 33-48, October, (2024). (In Persian)
- [14] A. Albooyeh, A. Dadrasi, A. Hamed, "Effect of point defects and low-density carbon-doped on mechanical properties of BNNTs: A molecular dynamics study," *Materials Chemistry and Physics*, Pp. 122107, June, (2020).
- [15] M. Beynaghi, S. Rahnama, A. Dadrasi, "Analysis of fracture behavior of carbon nitride poly crystalline by genetic algorithm and molecular dynamics methods," *Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, Pp. 29-46, August, (2024). (In Persian)
- [16] Z. Cong, S. Lee, "Study of mechanical behavior of BNNT-reinforced aluminum composites using molecular dynamics simulations," *Composite Structures*, Pp. 80-86, June, (2018).
- [17] S. Yang, C. Ye, G. Ding, Y. Liu, T. Lee, M. Jiang, "2D Materials: C₃N-A 2D Crystalline, Hole-Free, Tunable-Narrow-Bandgap Semiconductor with Ferromagnetic Properties," *Advanced Materials*, Pp. 113205, April, (2017).
- [18] B. Mortazavi, "Ultra high stiffness and thermal conductivity of graphene like C₃N," *Carbon*, Pp. 11-20, September, (2017).
- [19] A. Mayelifartash, M. Abdol, S. Sadeghzadeh, "Mechanical properties of intrinsic and defective hybrid polyaniline (C₃N) -BC₃ nanosheets in the armchair and zigzag configurations: a molecular dynamics study," *Applied Physics A*, Pp. 125043, July, (2020).

- [20] C. Ding, Y. Dai, F. Yang, X. Chu, "A molecular dynamics study of the mechanical properties of the graphene/hexagonal boron nitride planar heterojunction for RRAM," *Materials Today Communications*, Pp. 14-20, November, (2020).
- [21] A. Senturk, "Exploring the interfacial thermal resistance and mechanical properties of hybrid C_3N-BC_3 ," *Applied Physics A*, Pp. 154056, June, (2022).
- [22] A. Albooyeh, A. Dadrasi, M. Razavikia, "Investigation of the Effect of Geometric Defects and Temperature Changes on the Fracture Behavior of Boron Carbide Monocrystalline Structure by Molecular Dynamics," *Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, Pp. 37-48, May, (2022). (In Persian)
- [23] J. Tersoff, "Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems," *Physical Review B*, Pp. 21-30, May, (1988).
- [24] N. Ameli, M. Vahdati, "The Effect of Interatomic Potential Function on Nanometric Machining of Single Crystal Silicon," *Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, Pp. 17-32, December, (2019). (In Persian)
- [25] A. Shirazi, "Molecular dynamics investigation of mechanical properties of single-layer phagraphene," *Frontiers of Structural and Civil Engineering*, Pp. 124985, August, (2018).
- [26] S. Zhao, J. Xue, "Mechanical properties of hybrid graphene and hexagonal boron nitride sheets as revealed by molecular dynamic simulations," *Journal of Physics D: Applied Physics*, Pp. 135303, May, (2013).
- [27] B. Bagheri, M. Zarghami, P. Zarrintaj, M. Saeb, "Fracture fingerprint of polycrystalline C_3N nanosheets: Theoretical basis," *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, Pp. 107899, July, (2021).
- [28] D. Nguyen, M. Le, V. Nguyen, T. Bui, "Effects of various defects on the mechanical properties of black phosphorene," *Superlattices and Microstructures*, Pp. 11-19, May, (2017).
- [29] Y. Fu, T. Ragab, C. Basaran, "The effect of Stone-Wales defects on the mechanical behavior of graphene nano-ribbons," *Computational Materials Science*, Pp. 142-180, May, (2016).
- [30] M. Ahangari, A. Hamed, A. Dadrasi, A. Mallahi, "Effect of various defects on mechanical and electronic properties of zinc oxide graphene-like structure: A DFT study," *Vacuum*, Pp. 26-34, September, (2019).
- [31] A. Dadrasi, S. Fooladpanjeh, K. Eshkalak, M. Saeb, "Crack pathway analysis in graphene-like BC_3 nanosheets: Towards a deeper understanding," *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, Pp. 107980, July, (2021).
- [32] M. Hosseini, "Two-dimensional Transient Dynamic Analysis of Decagonal Quasicrystals subjected to Shock Loading using Meshless Generalized Finite Difference (GFD) Method," *Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, Pp. 97-118, June, (2018). (In Persian)
- [33] S. Sadeghzadeh, L. Badrinezhad, K. Eshkalak, "Mechanical properties of C_3N -BN hybrid nanosheets: Insights from molecular dynamics simulations," *Diamond & Related Materials*, Pp. 111323, April, (2024).
- [34] A. Shirazi, R. Abadi, N. Alajlan, T. Rabczuk, "Mechanical responses of pristine and defective C_3N nanosheets studied by molecular dynamics simulations," *Computational Materials Science*, Pp. 316-321, November, (2018).

- [35] K. Eshkalak, S. Sadeghzadeh, M. Jalaly, "Mechanical properties of defective hybrid graphene-boron nitride nanosheets: A molecular dynamics study," *Computational Materials Science*, Pp. 170-181, July, (2018).
- [36] S. Sadeghzadeh, L. Badrinezhad, K. Eshkalak, "Mechanical properties of C₃N-BN hybrid nanosheets: Insights from molecular dynamics simulations," *Diamond & Related Materials*, Pp. 111323, April, (2024).
- [37] H. Gourabi, S. Hadian, "Study and Finite Element Simulation of the Bistability Phenomenon in Cylindrical Fiber-Reinforced Laminated Composites," *Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics*, Pp. 11-24, June, (2024). (In Persian)
- [38] B. Bagheri, M. Zarghami, A. Salmankhani, P. Zarrintaj, M. Saeb, "Correlation between surface topological defects and fracture mechanism of γ -graphyne-like boron nitride nanosheets," *Computational Materials Science*, Pp. 118748, April, (2020).
- [39] L. Fan, W. Yao, "Effects of vacancy defects on the mechanical properties of graphene/hexagonal BN superlattice nanoribbons," *New Carbon Materials*, Pp. 165-175, May, (2020).