

تحلیل رفتار شکست پلی کریستال نیتريد کربن به روش‌های الگوریتم ژنتیک و دینامیک مولکولی

چکیده

تمرکز تنش و کمانش غیرخطی ناشی از مرزخانه‌ها در ساختارهای دو بعدی و عیوب هندسی به عنوان عوامل اثرگذار بر رفتار شکست مواد دو بعدی معرفی می‌شوند. از آنجایی که رفتار مکانیکی نانوساختارهای پلی کریستال به خوبی شناخته نشده است، در این مقاله، بررسی رفتار مکانیکی نانوصفحات نیتريد کربن به عنوان تابعی از دما و مرزخانه مورد مطالعه قرار گرفت. عملکرد مکانیکی پلی کریستال نیتريد کربن در حضور و عدم حضور ترک لبه‌ای و در دماهای ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین مورد آزمایش قرار گرفت. از شبیه سازی دینامیک مولکولی به عنوان یک روش مقرون به صرفه برای مدلسازی و آزمایش صفحات دو بعدی با انتخاب تابع پتانسیل مناسب و شرایط مرزی استفاده شد. نتایج نشان داد که خواص مکانیکی مونوکریستال نیتريد کربن با افزایش دما کاهش می‌یابد و نتایج در راستای زیگزاگ بالاتر از آرمچیر گزارش شد. همین روند برای ساختار پلی کریستال نیز مشاهده شد که با افزایش دما، مدول یانگ، تنش و کرنش شکست کاهش می‌یابد. همچنین، افزایش طول ترک از ۵ به ۲۵ آنگستروم نیز سبب کاهش خواص مکانیکی شد. از سویی دیگر، افزایش تعداد ناحیه برای پلی کریستال نیتريد کربن موجب کاهش تنش شکست گردید. علاوه بر این، بهینه سازی به روش الگوریتم ژنتیک صورت پذیرفت و نتایج نشان داد که مقدار بهینه‌ی مدول یانگ برای پلی کریستال نیتريد کربن با ۵۳ ناحیه در دمای ۵۸۶/۹۵ کلوین و طول ترک ۶/۵۲ آنگستروم، معادل ۳۳۸/۱۸ گیگاپاسکال است. نتایج بدست آمده از این مطالعه را می‌توان به موارد پیچیده‌تر تعمیم داد تا درک عمیق‌تری از نسل‌های بعدی ساختارهای دو بعدی را پیش بینی نماید.

کلمات کلیدی

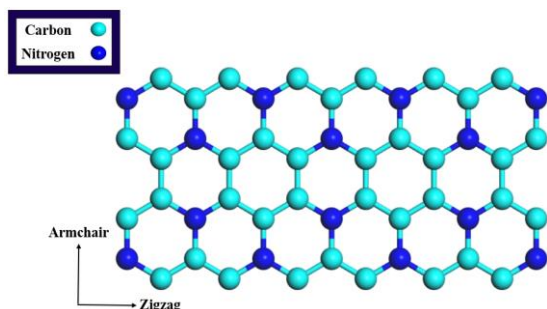
شبیه سازی، الگوریتم ژنتیک، دینامیک مولکولی، پلی کریستال، نیتريد کربن.

Abstract

Stress concentration and nonlinear buckling caused by grain boundaries in two-dimensional structures and geometric defects are introduced as factors affecting the fracture behavior of two-dimensional materials. Since the mechanical behavior of polycrystalline nanostructures is not well known, in this article, the mechanical behavior of carbon nitride nanosheets was studied as a function of temperature and grain boundaries. The mechanical performance of polycrystalline carbon nitride was tested in the presence and absence of edge cracks and at temperatures from 100 K to 900 K. Molecular dynamics simulation was used as a cost-effective method for modeling and testing two-dimensional nanosheets by choosing the appropriate potential function and boundary conditions. The results showed that the mechanical properties of carbon nitride monocrystalline decrease with increasing temperature and the results were reported in zigzag direction higher than armchair. The same trend was observed for the polycrystalline structures. The increase in temperature caused the Young's modulus, failure stress and strain to decrease. Also, increasing the crack length from 5 to 25 angstroms caused a decrease in mechanical properties. On the other hand, increasing the number of regions for carbon nitride polycrystalline decreased the failure stress. In addition, the optimization was carried out by genetic algorithm and the results showed that the optimal value of Young's modulus for carbon nitride polycrystalline with 53 regions at a temperature of 586.95 K and a crack length of 6.52 angstroms is equivalent to 338.18 GPa. The results obtained from this study can be generalized to more complex cases to predict a deeper understanding of the next generations of two-dimensional structures.

Keywords: Simulation, Genetic algorithm, Molecular dynamics, Polycrystalline, Carbon nitride.

توزیع یکنواخت اتم‌های نیتروژن در این ساختار و شعاع اتمی مشابه کربن و نیتروژن سبب شده است تا ساختار نیتريد کربن در بین سایر مواد دو بعدی به صورت منحصر به فرد درآید. با توجه به ساختار قابل توجه نیتريد کربن، خواص چند منظوره- ای را می‌توان برای آن برشمرد. نیتريد کربن دارای رسانایی حرارتی بالا در حدود 815 W/mK ، فاصله باند 1.042 eV ، رسانایی الکتریکی بالا برابر با $10^3 \times 1/41 \text{ S/cm}$ و استحکام 35 گیگاپاسکال است. با توجه به این ویژگی‌ها، نیتريد کربن به عنوان یک گزینه‌ی ایده آل برای کاربردهای در مقیاس نانو و در زمینه‌های الکترونیک، الکترونیک نوری و حسگرها معرفی شده است [۱۲-۱۴].



شکل ۱: مدل اولیه‌ی ساختار لانه زنبوری نیتريد کربن

اگرچه شکل ساختاری نیتريد کربن به صورت شش ضلعی و لانه زنبوری است و کنار هم قرار گرفتن آنها بدون مانع است، اما در دنیای واقعیت، وجود حفره‌ها و عیوب درون این مواد باعث اثرگذاری آنها بر خواص مختلف می‌گردد. ترک و مرزدانه‌ها به عنوان یکی از مهم‌ترین نقص‌های موجود در این ساختارها معرفی شده‌اند که اجتناب ناپذیر هستند. این عیوب هندسی که تحت بارگذاری خارجی ایجاد می‌شوند، سبب ایجاد تغییر شکل هندسی درون صفحه و خارج از صفحه می‌شوند و بر خواص مختلف این ساختارها تاثیر می‌گذارند [۱۵]. مرزدانه‌ها می‌توانند به شکل‌های مختلف در یک ساختار ایجاد شوند. زمانی که تعداد آنها در یک ساختار افزایش یابد، ساختار از حالت مونوکریستال به پلی کریستال تبدیل می‌شود که از کنار هم قرار گرفتن چندین ناحیه تشکیل می‌شوند که بوسیله‌ی این مرزدانه‌ها مرزبندی می‌شوند و از یکدیگر جدا می‌شوند. هر یک از ساختارهای دو بعدی بسته به نوع مرزدانه‌ها و نحوه‌ی چینش آنها کنار یکدیگر، رفتار متفاوتی را از خود نشان می‌دهند [۱۶]. همچنین، ترک با ایجاد شدن در فضاهاى مختلف یک ساختار

در دو دهه‌ی اخیر مواد دو بعدی بطور گسترده توسعه یافته و مورد استفاده قرار گرفته است. در اواسط سال ۲۰۰۰ تک لایه‌های گرافن دو بعدی توسط Geim به ساختار شش ضلعی نیتريد برای الکترونیک گرافن تبدیل شد [۱]. علاقه به مواد کربنی دو بعدی همانطور که در گزارش‌های متعدد به آنها اشاره شده است، بر روی خواص حرارتی، مکانیکی، نوری و الکترونیکی بطور مداوم در دهه‌ی گذشته افزایش یافته است. از همین رو، ورود این مواد در صنایع مختلف همچون الکترونیک، اپتوالکترونیک، هوافضا، دارورسانی و حسگرها با سرعت روزافزونی گسترش یافته است [۲،۳]. در این میان، طراحی و توسعه‌ی انواع دیگر مواد دو بعدی نیز رشد چشمگیری را تجربه کرده‌اند. از این میان، می‌توان به موادی همچون AlN^1 ، ZnO^2 ، GaN^3 ، BeO^4 و TiO_2^5 اشاره نمود [۴-۶]. از آنجایی که فاصله باند صفر گرافن در برخی موارد به عنوان یک اشکال در بعضی صنایع محسوب می‌گردد، اصلاح گرافن با جایگزینی اتم‌هایی همچون نیتروژن و بور به عنوان یک رویکرد مناسب برای ساخت مواد دو بعدی گرافیتی ناهمگن محسوب می‌شود [۷].

با استفاده از این رویکرد، می‌توان با تغییرات و تنظیم برخی پارامترها مانند عناصر مورد استفاده به عنوان اصلاح کننده، به نسل جدیدی از این مواد دست یافت. با توجه به تحقیقات صورت گرفته، ساختارهایی مانند C_3N^6 ، BC_3^7 ، BCN^8 و BN^9 اگرچه ساختار مشابهی نسبت به گرافن دارند، اما خواص شیمیایی و فیزیکی متفاوتی را از خود نشان داده‌اند [۸-۱۱]. C_3N یا نیتريد کربن مانند گرافن یک ساختار شش ضلعی لانه زنبوری است که متشکل از اتم‌های کربن و نیتروژن می‌باشد که با پیوند کووالانسی با یکدیگر پیوند دارند (شکل ۱). در این ساختار، هر اتم نیتروژن با سه اتم کربن احاطه شده است.

¹ Aluminum nitride

² Zinc oxide

³ Gallium nitride

⁴ Beryllium oxide

⁵ Titanium dioxide

⁶ Carbon nitride

⁷ Boron carbide

⁸ Boron carbon nitride

⁹ Boron nitride

مانند لبه‌های آن یا مرکز ساختار، تاثیر بسزایی بر خواص مختلف مواد مورد بررسی دارند. در این زمینه تحقیقات گسترده‌ای صورت گرفته است.

فن و همکاران [۱۷] نشان دادند که مرزدانه‌ها منجر به نوسانات درون صفحه‌ای گرافن می‌شود که برای کاهش تغییر انرژی مرزدانه‌ها و همچنین، طول پیوند اتم‌های کربن و تنش اولیه مفید است. ژانگ و همکاران [۱۸] با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی به بررسی فرم‌های مختلفی از مرزدانه‌ها در دماهای مختلف پرداختند. نتایج آنها نشان داد که رابطه‌ی مستقیمی بین زاویه انحراف جهت کریستال و قدرت ذاتی مرزدانه‌ها وجود ندارد و بیشتر تحت تاثیر زاویه‌ی خمش و انرژی مرزدانه‌ها هستند. در تحقیقی دیگر، دادرسی و همکاران [۱۹] با استفاده از دینامیک مولکولی به بررسی خواص مکانیکی ساختار مونوکریستال و پلی کریستال BC_3 پرداختند. نتایج آنها نشان داد که افزایش نواحی در ساختار پلی کریستال باعث کاهش خواص مکانیکی می‌گردد. همچنین، افزایش دما از ۱۰۰ به ۱۰۰۰ کلوین نیز کاهش مدول یانگ، تنش و کرنش شکست را به همراه دارد. باقری و همکاران [۲۰] خواص مکانیکی ساختار پلی کریستال نیتريد کربن را با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد آزمایش قرار دادند. تغییرات نرخ کرنش، تغییرات دما، تغییرات تعداد ناحیه و افزایش طول ترک به عنوان پارامترهای اثر گذار بر خواص مکانیکی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج آنها نشان داد که افزایش طول ترک از 0L به $L/3$ در ساختار پلی کریستال موجب کاهش خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه‌ی شکست می‌گردد. همچنین، افزایش دما از ۱۰۰ به ۱۰۰۰ کلوین نیز کاهش خواص مکانیکی این ساختار را به همراه دارد. از سویی دیگر، افزایش تعداد ناحیه از ۳ ناحیه به ۲۵ ناحیه سبب افزایش مدول یانگ و تنش شکست گشته است. خواص مکانیکی ساختارهای مونوکریستال و پلی کریستال SiC با بهره گیری از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی بوسیله‌ی مولایی و همکاران [۲۱] مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج آنها نشان داد که خواص مکانیکی در راستای آرمچیر بالاتر از زیگزگ است. همچنین، افزایش دما سبب کاهش خواص مکانیکی در هر دو راستا می‌شود. از سویی دیگر، در ساختارهای پلی کریستال، افزایش تعداد ناحیه موجب کاهش مدول یانگ، تنش و کرنش در نقطه‌ی شکست شده است. افزایش طول ترک از ۲۵ آنگستروم به ۱۵۰ آنگستروم

کاهش خواص مکانیکی را به همراه داشته است. شیشیر و همکاران [۲۲] خواص مکانیکی ساختار مونوکریستال نیتريد کربن را با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد آزمایش قرار دادند. آنها به بررسی خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش شکست و چقرمگی شکست در دو راستای آرمچیر و زیگزگ برای دما و طول ترک‌های مختلف پرداختند. نتایج آنها نشان داد که افزایش دما و طول ترک سبب کاهش خواص مکانیکی می‌گردد. همچنین، اثر این دو المان در راستای زیگزگ نسبت به راستای آرمچیر بالاتر گزارش شد. از سویی دیگر، افزایش طول ترک برای هر دو راستای آرمچیر و زیگزگ افزایش خاصیت مکانیکی چقرمگی شکست را به همراه داشته است. در مطالعه‌ی دیگر، شیرازی و همکاران [۲۳] خواص مکانیکی ساختار نیتريد کربن را در حضور ترک با طول‌های مختلف مورد مطالعه قرار دادند. نتایج آنها بیانگر آن است که مقدار تنش شکست از ۱۴۰ گیگاپاسکال در دمای ۲۰۰ کلوین برای ساختار بدون ترک به ۴۰ گیگاپاسکال در دمای ۲۰۰ کلوین و با طول ترک ۱۵۰ آنگستروم کاهش یافته است. از سویی دیگر، مقدار چقرمگی شکست برای ساختار با طول ترک ۲۵ آنگستروم از $6/01 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{0.5}$ در دمای ۲۰۰ کلوین به $4/99 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{0.5}$ در دمای ۹۰۰ کلوین کاهش یافته است.

با توجه به مطالب ارایه شده، اگرچه که تحقیقات گسترده-ای در زمینه‌ی ساختارهای مونو کریستال و پلی کریستال صورت گرفته است، اما کماکان سوال‌های مختلفی در مورد توضیح رفتار مکانیکی و شکست ساختار نیتريد کربن وجود دارد. حضور ترک به عنوان نقص هندسی بر نیتريد کربن چه تاثیری دارد؟ اثر افزایش دما بر ساختار نیتريد کربن به چه صورت است؟ تعداد نواحی ساختار پلی کریستال بر خواص مکانیکی اثر یکسان و مشابه دارد؟ تغییرات طول ترک چه اثری بر مدول یانگ و تنش شکست می‌گذارد؟ برای این منظور، نانوصفحات تک کریستالی و پلی کریستالی نیتريد کربن با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار گرفته است. ابتدا به بررسی ساختارهای مونوکریستال نیتريد کربن در دماهای مختلف و در دو جهت بارگذاری آرمچیر و زیگزگ خواهیم پرداخت. در مرحله‌ی بعد، با در نظر گرفتن پنج نوع از ساختار پلی کریستال نیتريد کربن در دماهای مختلف، خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست مورد بررسی قرار خواهد گرفت. شایان ذکر است که برای هر نوع از این نواحی، چهار حالت مختلف در نظر گرفته

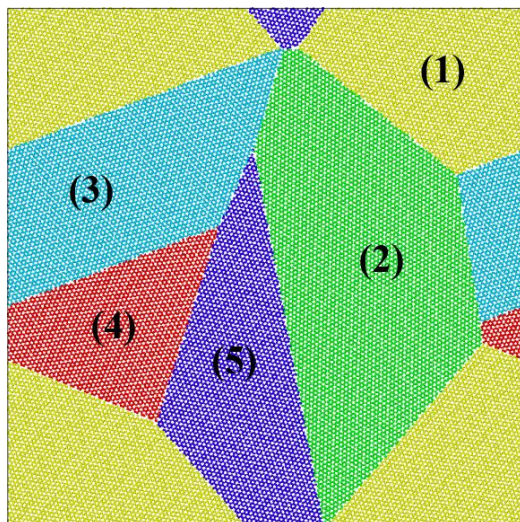
شده است. سپس، اثر تغییرات طول ترک مورد آزمایش قرار خواهد گرفت. در نهایت، مقادیر بهینه‌ی پارامتر مکانیکی با استفاده از روش الگوریتم ژنتیک گزارش خواهد شد. انتظار می‌رود یافته‌های این پژوهش برای درک بهتر خواص مکانیکی، توزیع تنش و طراحی ساختاری مواد دو بعدی مفید واقع شود و علاقه‌ی محققان را برای کاوش بیشتر در این زمینه فراهم سازد.

۲- روش‌های محاسبات

در این مطالعه، از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای مدلسازی و تحلیل خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش شکست و کرنش شکست نانوصفحات نیتريد کربن استفاده شده است [۲۴]. از آنجایی که نتایج بدست آمده از دینامیک مولکولی تحت تاثیر دقت توابع مورد استفاده برای اجرای برهمکنش‌های اتمی و شرایط بارگذاری است، برای این منظور، از پتانسیل Tersoff برای بیان و توصیف برهمکنش‌های بین اتمی C-C و C-N استفاده شده است [۲۵]. پتانسیل ترسوف بدلیل دارا بودن توابع two و three-body قادر به تشخیص مناسب و کافی وابستگی زاویه‌ای مورد نیاز برای توضیح یک پیوند کووالانسی است. همچنین، برای تجسم و نظارت بر خروجی‌های مورد بررسی و موقعیت یابی اتم‌ها از نرم افزار OVITO^۱ استفاده شده است [۲۶]. همانطور که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، نانو ورق تک لایه‌ی نیتريد کربن که در آن، هر اتم نیتروژن بوسیله‌ی سه اتم کربن احاطه شده است، در محاسبات دینامیک مولکولی مورد استفاده قرار گرفته است. دو جهت بارگذاری زیگزاگ و آرمچیر به ترتیب بیانگر جهات X و Y می‌باشد. خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش شکست و کرنش شکست ساختارهای دو بعدی نیتريد کربن با طول و عرض ۱۰ نانومتر×۱۰ نانومتر در دو جهت آرمچیر و زیگزاگ در بازه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین بررسی شده است. برای محاسبه‌ی مدول یانگ از شیب قسمت خطی هر نمودار استفاده شده است.

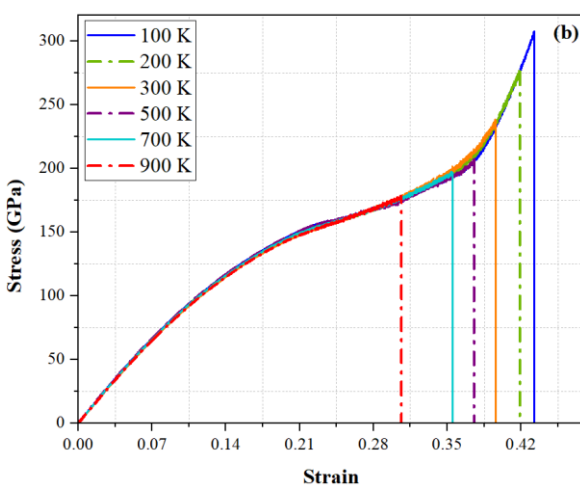
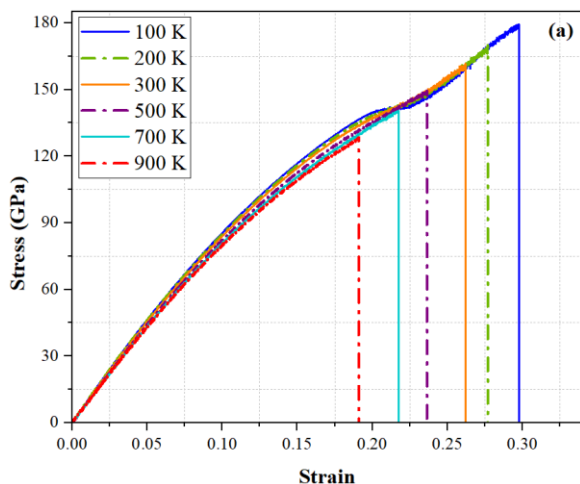
بررسی خواص مکانیکی برای ساختار پلی کریستال با تعداد ناحیه‌ی ۵، ۱۶، ۲۴، ۳۲ و ۵۳ ناحیه مورد مطالعه قرار گرفته است. این مدل‌ها با توزیع تصادفی نواحی با ۴ حالت مختلف در جعبه‌ی شبیه‌سازی آزمایش شده است. نواحی بوسیله‌ی

^۱ Open visualization tool



شکل ۲: ساختار پلی کریستال نیتريد کربن با ۵ ناحیه

برای ایجاد فرآیند بازپخت نانو ساختار نیتريد کربن، ساختارها به مدت ۴۰ ps تا دمای ۱۰۰۰ کلوین گرم شدند و سپس، قبل از اعمال بار کششی، به مدت ۴۰ ps به دمای محیط سرد شدند و با استفاده از فرآیند NVT، شرایط بازآرایی اتم‌ها در مرزدهانه‌های ساختار پلی کریستال تسهیل گشت [۲۷]. در تمام موارد شبیه‌سازی، ابتدا با اعمال الگوریتم Nose-Hoover در دما و فشار ثابت و با استفاده از گام زمانی ps ۰/۰۰۱، سیستم برای مدت زمان ps ۵۰ به حالت تعادل رسیده است. همچنین، سیستم‌های مورد بررسی تحت بار کششی با



شکل ۳. تغییرات تنش- کرنش ساختار مونوکریستال نیتريد کربن، کشش در راستای آرمچير و (b) کشش در راستای زيگزاگ (a)

در جهت آرمچير، مقدار مدول يانگ از ۸۵۱/۲۷ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به ۷۱۱/۰۲ گیگاپاسکال در دمای ۹۰۰ کلوین کاهش یافته است که معادل ۱۶/۴۷ درصد کاهش را نشان می‌دهد. کاهش تنش شکست و کرنش شکست در دماهای بالاتر برای ساختار مونوکریستال نیتريد کربن قابل توجه‌تر بود. تنش شکست با کاهش ۲۸/۳۴ درصدی از حدود ۱۸۰ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به حدود ۱۳۰ گیگاپاسکال در دمای ۹۰۰ کلوین کاهش یافت. خاصیت کرنش شکست نیز کاهش ۳۵/۶۹ درصدی را از خود نشان داده است. مقدار این خاصیت از ۰/۲۹۷ در دمای ۱۰۰ کلوین به ۰/۱۹۱ در دمای ۹۰۰ کلوین کاهش یافته است. شایان ذکر است که مدول الاستیک در مقیاس اتمی ارتباط مستقیمی با پیوندهای شیمیایی دارد و افزایش دما منجر به تضعیف این پیوندها می‌گردد. یک روند نزولی خواص مکانیکی با افزایش دما برای

نرخ کرنش 0.001 ps^{-1} قرار گرفته‌اند. نرخ کرنش با توجه به اندازه‌ی هر ساختار و با توجه به اتم‌های موجود در هر ساختار انتخاب می‌گردد. از آنجایی که تغییرات ناشی از فشار بالا در میان اتم‌های نیتروژن و کربن در ساختار نیتريد کربن باید کنترل شود، مناسب‌ترین مقدار برای نرخ کرنش، 0.001 ps^{-1} می‌باشد [۱۹].

۳- نتایج و بحث

۳-۱- خواص مکانیکی مونوکریستال نیتريد کربن به عنوان تابعی از دما

برای بررسی اثر تغییرات دما از ۱۰۰ کلوین تا ۹۰۰ کلوین، رفتار شکست ساختار مونوکریستال نیتريد کربن در دو راستای آرمچير و زيگزاگ مورد مطالعه قرار گرفت. تمام نمونه‌ها برای هر دو ساختار تحت بارگذاری کششی تک محوری قرار گرفتند و نتایج خواص مکانیکی مدول يانگ، تنش شکست و کرنش شکست آنها گزارش شد.

۳-۱-۱- کشش در راستای آرمچير

منحنی‌های تنش-کرنش ساختار مونوکریستال نیتريد کربن بارگذاری شده در جهت آرمچير در شکل ۳-a نشان داده شده است. همچنین، شکل ۴ نشان دهنده‌ی تمام خصوصیات مکانیکی از جمله مدول يانگ، تنش و کرنش شکست برای ساختار مورد بررسی است. نتایج بدست آمده در این قسمت نشان دهنده‌ی آن است که خصوصیات مکانیکی در جهت زيگزاگ بالاتر از جهت آرمچير می‌باشد. علاوه بر این، خواص مکانیکی در هر دو راستا به طور چشمگیری با افزایش دما کاهش می‌یابد. از آنجایی که افزایش دما سبب افزایش طول پیوندهای C-C و C-N و در نتیجه، کاهش انرژی اتصال اتم‌ها می‌شود، این امر به عنوان یک عامل اثر گذار بر خواص مکانیکی یاد می‌شود. در قسمت خطی نمودارهای تنش-کرنش، ساختار مقاومت مناسبی را از خود نشان می‌دهد و پس از ورود به قسمت غیرخطی و با افزایش کرنش، ساختار به نقطه‌ی شکست می‌رسد و تنش به طور ناگهانی کاهش می‌یابد.

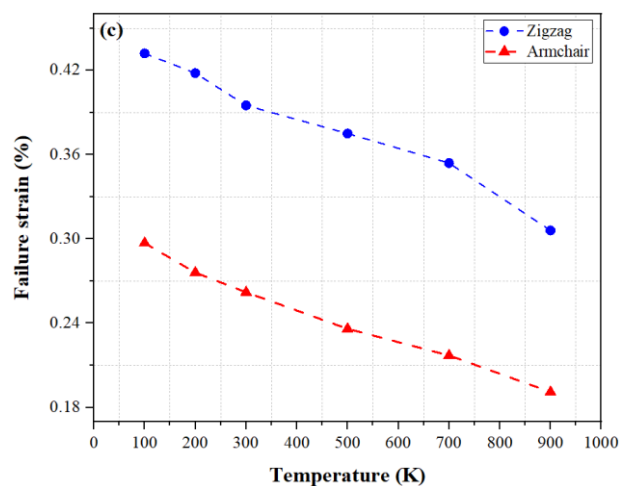
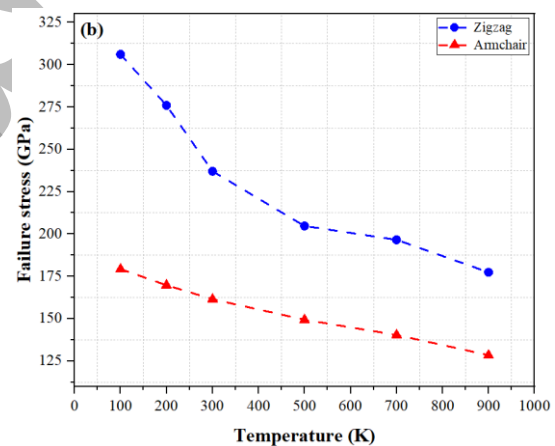
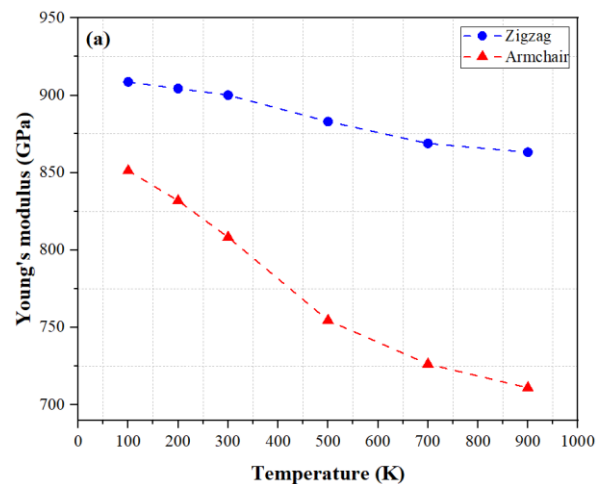
مونوکریستال نیتريد کربن در دماهای مختلف

۳-۱-۲ کشش در راستای زیگزگ

در این بخش به بررسی خواص مکانیکی مونوکریستال نیتريد بور با در نظر گرفتن تغییرات دما در جهت بارگذاری کششی زیگزگ پرداخته شده است. منحنی‌های تنش-کرنش در شکل ۳-b و تغییرات خواص مکانیکی به عنوان تابعی از دما در شکل ۴ نشان داده شده است. رفتار شکست ساختار مورد مطالعه در هر دو جهت بارگذاری آرمچیر و زیگزگ یکسان بوده است. بدین معنا که در جهت زیگزگ نیز افزایش دما باعث کاهش خواص مکانیکی شده است. همانطور که در شکل ۴ مشاهده می‌شود، خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست با افزایش دما از ۱۰۰ به ۹۰۰ کلوین یافته است. بنابراین، حداکثر خواص مورد بررسی برای دمای ۱۰۰ کلوین بدست آمده است، در حالی که کمترین خواص برای دمای ۹۰۰ کلوین گزارش شده است. به عنوان مثال، حداکثر مدول یانگ برای ساختار مونوکریستال نیتريد کربن در دمای ۱۰۰ خاصیت با افزایش دما به ۹۰۰ کلوین حدود ۵ درصد کاهش یافت. علاوه بر این، تنش شکست از ۳۰۶/۱۱ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به ۱۷۷/۴۳ گیگاپاسکال کاهش یافت که معادل ۴۲/۰۳ درصد کاهش را نشان می‌دهد. خاصیت کرنش شکست نیز حدود ۳۰ درصد کاهش (از ۰/۴۳۲ درصد به ۰/۳۰۶ درصد) را نشان می‌دهد. با توجه به ساختار شش ضلعی نیتريد کربن، زاویه‌ی بین تنش بارگذاری شده و باندهای یک ساختار شش ضلعی به ترتیب ۶۰ درجه و ۳۰ درجه در راستای زیگزگ و آرمچیر است که این امر سبب می‌شود تا تنش خارجی بیشتری برای گسیختگی در جهت زیگزگ نیاز باشد. بنابراین، نسبت مقدار تنش نهایی در راستای زیگزگ باید $\sqrt{3}$ برابر (۱/۷۳ برابر) جهت آرمچیر باشد [۲۹].

با نگاهی کلی به نتایج بررسی شده در این قسمت، می‌توان یافت که بیشترین مقادیر خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست برای ساختار مونوکریستال نیتريد کربن در کمترین دما و در راستای زیگزگ بدست آمده است که به ترتیب برابر است با ۹۰۸/۶۷ گیگاپاسکال، ۳۰۶/۱۱ گیگاپاسکال و ۰/۴۳۲ درصد.

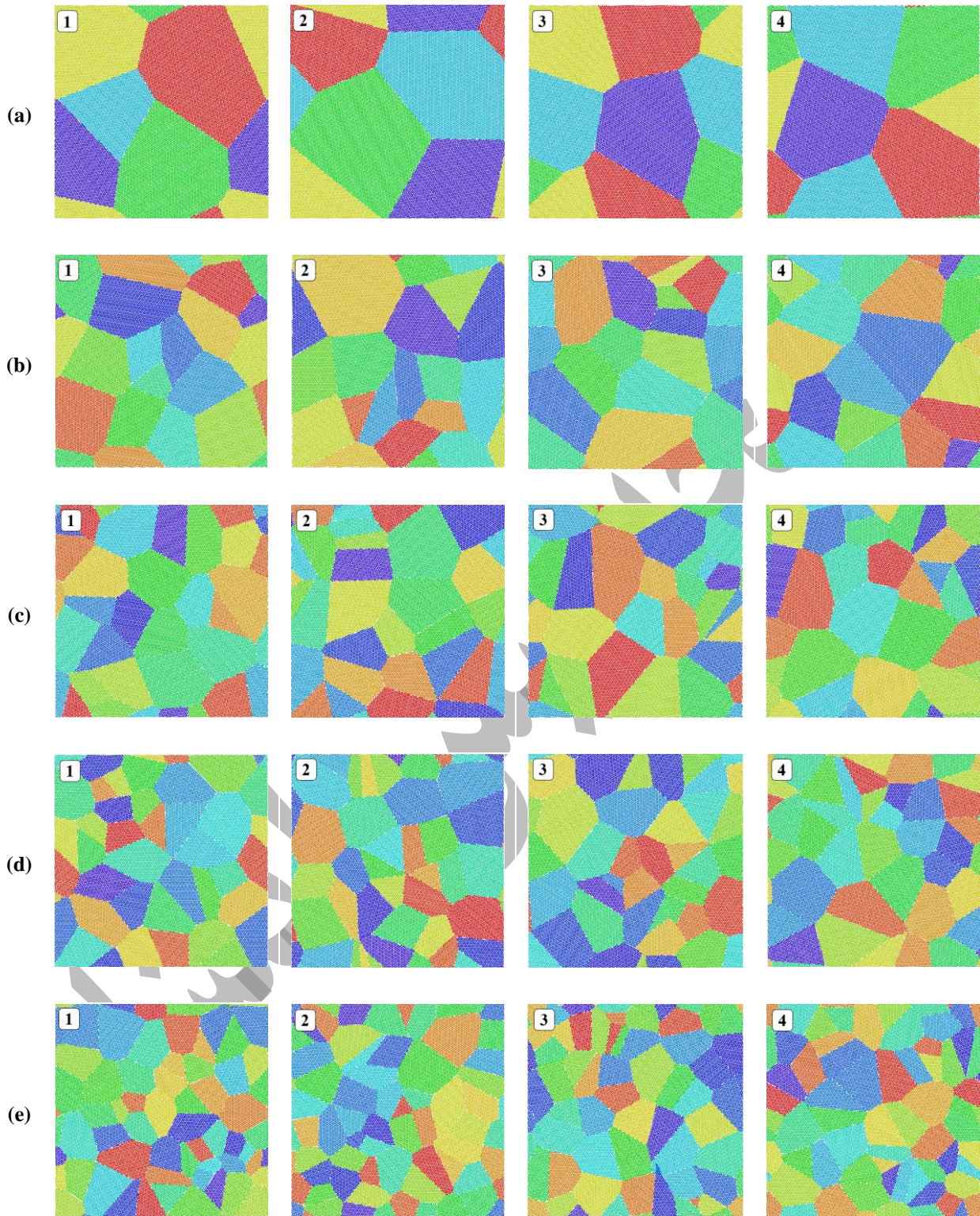
ساختار نیتريد بور بوسیله‌ی باقری و همکاران گزارش شده است [۲۸]. در مطالعه‌ی دیگر، مولایی و همکاران کاهش ۱۶/۱۹، ۴۱/۱۳ و ۴۲/۱۱ درصدی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست ساختار کاربید سیلیسیم را با افزایش دما گزارش کرده‌اند [۲۱].



شکل ۴. (a) مدول یانگ، (b) تنش شکست و (c) کرنش شکست

۳-۲- خواص مکانیکی پلی کریستال نیتريد کربن

از آنجا که در دنیای واقعی، نانوصفحات به صورت کاملاً تک کریستالی حضور ندارند و معمولاً هر لایه از بخش‌های مختلف کریستالی که به صورت تصادفی و در جهات مختلف کنار هم قرار گرفته‌اند، تشکیل شده است. این نواحی با مرزدانه‌هایی که از حلقه‌ها با شکل‌های مختلف هشت ضلعی، هفت ضلعی و پنج ضلعی تشکیل شده است، روبروی یکدیگر قرار می‌گیرند [۳۰]. از همین رو، تعداد نواحی و نحوه‌ی چینش آنها کنار یکدیگر به عنوان یک المان اثرگذار بر خواص مکانیکی نانو ورق‌های پلی کریستالی مورد بحث قرار می‌گیرد. در این بخش، رفتار مکانیکی و شکست ساختار پلی کریستال نیتريد کربن با تعداد ناحیه‌ی ۵، ۱۶، ۲۴، ۳۲ و ۵۳ با چهار چینش تصادفی و در ۳۰۰ کلوین مورد بررسی قرار گرفته است. شکل ۵ نشان دهنده‌ی ساختارهای کریستالی نیتريد کربن برای تعداد نواحی مختلف است.

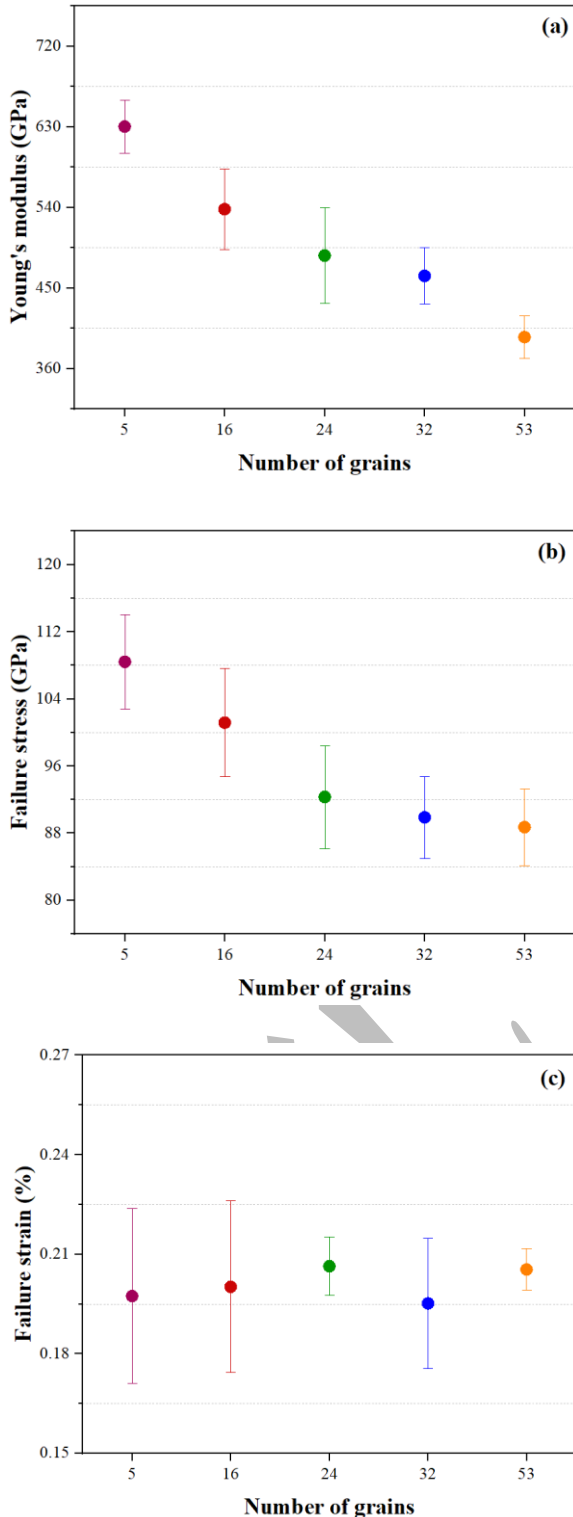


شکل ۵. نمای بالا از ساختارهای پلی کریستال نیتريد کربن با چينش تصادفی ۱، ۲، ۳ و ۴ با تعداد ناحیه‌ی (a) ۵، (b) ۱۶، (c) ۲۴، (d) ۳۲، (e)

۳-۲-۱ تاثیر تغییرات تعداد ناحیه بر رفتار شکست پلی کریستال

نیتريد کربن

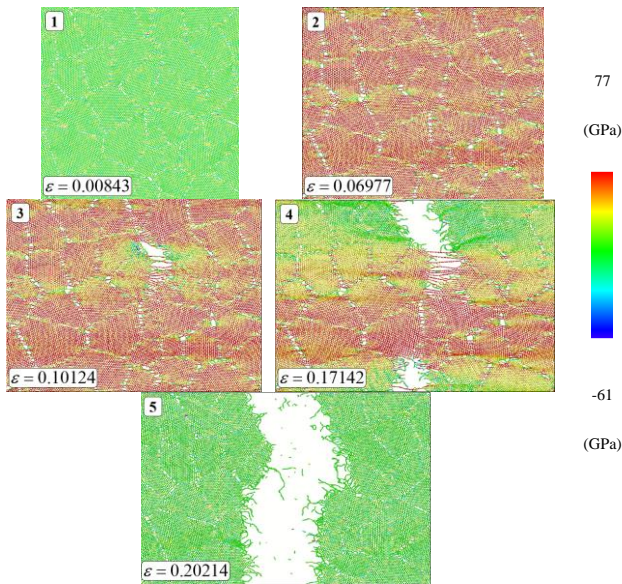
میانگین تغییرات مدول یانگ، تنش شکست و کرنش شکست ساختار پلی کریستال نیتريد کربن به عنوان تابعی از تعداد ناحیه و در دمای ۳۰۰ کلوین در شکل ۶ نشان داده شده است. بر اساس این شکل، با افزایش تعداد ناحیه، مقادیر مدول یانگ (شکل ۶-۱) و تنش شکست (شکل ۶-۲) کاهش می‌یابد. این در حالی است که افزایش تعداد ناحیه باعث افزایش کرنش شکست (شکل ۶-۳) شده است. رفتار نامنظم در خاصیت کرنش شکست را می‌توان به مواردی همچون افزایش فاصله‌ی بین اتم‌ها در دماهای بالا، کاهش انرژی اتصال و تضعیف پیوند شیمیایی نسبت داد [۲۳]. با توجه به نتایج بدست آمده، با افزایش تعداد ناحیه از ۵ ناحیه به ۵۳ ناحیه، خواص مکانیکی یاد شده به ترتیب ۳۲/۴۸، ۱۷/۲۷ و ۱/۱۱ درصد در پلی کریستال نیتريد کربن تغییر کردند. به طور معمول، برهمکنش بین اتم‌های واقع در مرزخانه‌ها در مقایسه با اتم‌هایی که داخل نواحی قرار دارند، ضعیف‌تر است که به عنوان دلیل اصلی گرادیان تنش در ساختارهای پلی کریستال در مقایسه با ساختارهای مونو کریستال بیان می‌شود. این امر سبب می‌شود تا تمرکز تنش در مجاورت مرزخانه‌ها افزایش یابد و خواص مکانیکی را کاهش دهد [۳۱، ۳۲].



شکل ۶. (a) مدول یانگ، (b) تنش شکست و (c) کرنش شکست پلی کریستال نیتريد کربن به عنوان تابعی از تعداد ناحیه

مقایسه‌ی نتایج بدست آمده از ساختار مونوکریستال و پلی کریستال نشان می‌دهد که مقادیر گزارش شده از ساختار مونوکریستال نیتريد کربن در هر دو جهت آرمچیر و زیگزآگ

کردن اتم‌هایی که در مجاورت مسیر خود قرار دارند، شکست ساختار را رقم می‌زنند.



شکل ۷. روند شکست ساختار پلی کریستال نیتريد کربن با ۳۲ ناحیه، چینش تصادفی شماره‌ی ۱ و در دمای ۳۰۰ کلوین

۳-۲-۲ تاثیر طول ترک و تغییرات دما بر رفتار شکست پلی کریستال نیتريد کربن

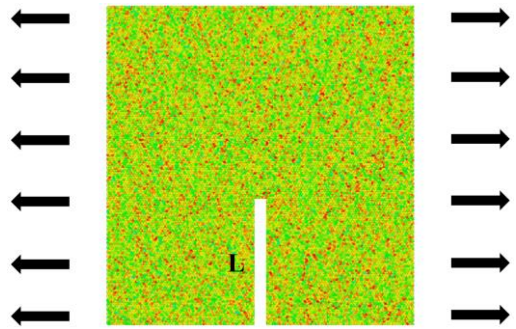
علاوه بر مرزخانه‌ها در نانوصفحات نیتريد کربن، افزایش دما و ترک به عنوان یک نقص هندسی بر عملکرد مکانیکی ساختار پلی کریستال مورد بررسی، اثر گذار هستند. همانطور که قبل‌تر اشاره شد، ساختار با تعداد ۵۳ ناحیه به عنوان یک ساختار همگن (نسبت به دیگر ساختارها) معرفی گردید و در این بخش، این ساختار با چینش تصادفی شماره‌ی ۳ تحت بارگذاری محوری قرار گرفته است. محل قرار گیری ترک و جهت بارگذاری در شکل ۸ نشان داده شده است. ترک با طول-های ۵، ۱۲ و ۲۵ آنگستروم مورد مطالعه قرار گرفته است.

بالتر از نتایج پلی کریستال است. به عنوان مثال، تنش شکست ساختار مونوکریستال در جهت زیگزاگ و آرمچیر و در دمای ۳۰۰ کلوین به ترتیب ۲۳۷/۰۴ و ۱۶۱/۵۷ گیگاپاسکال گزارش شده است که در مقایسه با ساختار پلی کریستال با ۵ ناحیه و در دمای ۳۰۰ کلوین حدود ۵۴ و ۳۳ درصد کاهش یافته است. همچنین، شایان ذکر است که تفاوت بین مقادیر تنش محاسبه شده برای ساختار پلی کریستال که به صورت تصادفی تشکیل شده‌اند و تعداد ناحیه‌ی یکسانی دارند، ناچیز است.

از آنجایی که هر چه تعداد ناحیه در یک ساختار پلی کریستال بیشتر باشد، تعداد اتم‌هایی که در مرزخانه‌ها قرار می‌گیرند، بیشتر می‌شود. در نتیجه، این مناطق به صورت همگن در ساختار اتمی توزیع می‌شوند که هر چه تعداد این مناطق بیشتر باشد، ساختار پلی کریستال مورد بررسی می‌تواند در جریان یکنواخت بارگذاری تک محوری، کرنش بالاتری را تجربه کند. برخی از تحقیقات صورت گرفته در این زمینه به بررسی ساختارهای مختلف پلی کریستال پرداخته‌اند. به عنوان مثال، لی و همکاران [۳۳] با مقایسه‌ی دو ساختار مونو و پلی کریستال گرافن نشان دادند که تنش شکست ساختار مونوکریستال ۲۵ درصد بالاتر از پلی کریستال می‌باشد. همچنین، یک روند مشابه برای نانوصفحات نیتريد بور و پلی کریستال گرافن توسط مرتضوی و همکاران گزارش شده است [۳۵،۳۴]. از سویی دیگر، باقری و همکاران [۲۰] نشان دادند که افزایش تعداد ناحیه برای پلی کریستال نیتريد کربن از ۳ ناحیه به ۲۵ ناحیه سبب کاهش خواص مکانیکی می‌گردد.

در بین ساختارهای پلی کریستال مورد مطالعه، ساختار با ۵۳ ناحیه با میانگین مقادیر ۳۹۹/۰۹ گیگاپاسکال و ۸۸/۷۱ گیگاپاسکال برای مدول ینگ و تنش شکست به عنوان همگن-ترین ساختار در مقایسه با ساختارهای دیگر معرفی گردید. بنابراین، ساختار با ۵۳ ناحیه و چینش تصادفی شماره‌ی ۳ (شکل ۵) برای مرحله‌ی بعد انتخاب شد. شکل ۷، روند شکست ساختار پلی کریستال نیتريد کربن با ۳۲ ناحیه و چینش تصادفی شماره‌ی ۱ در دمای ۳۰۰ کلوین را نشان می‌دهد. همان طور که مشخص است، افزایش کرنش و جدا شدن پیوندهای کربن-کربن و کربن-نیتروژن سبب پیدایش حفره-های ریز در امتداد مرزخانه‌ها می‌شود. این حفره‌ها همچون ترک‌های کوچک عمل کرده و در امتداد مرزخانه‌ها منتشر می‌شود که منجر به کاهش مقاومت ساختار می‌شود. در نهایت، این ترک‌ها در جهت عمود بر بارگذاری کششی و بوسیله‌ی جدا

در دمای ۱۰۰ کلوین به ۰/۱۲۷ بدست آمده است که نشان دهنده‌ی ۶۱/۶۳ درصد کاهش می‌باشد. در حالی که برای نمونه با طول ترک ۱۲ آنگستروم حدود ۴۳ درصد کاهش از دمای ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین را نشان می‌دهد.



شکل ۸. محل قرار گیری ترک با طول L و جهت بارگذاری در راستای X

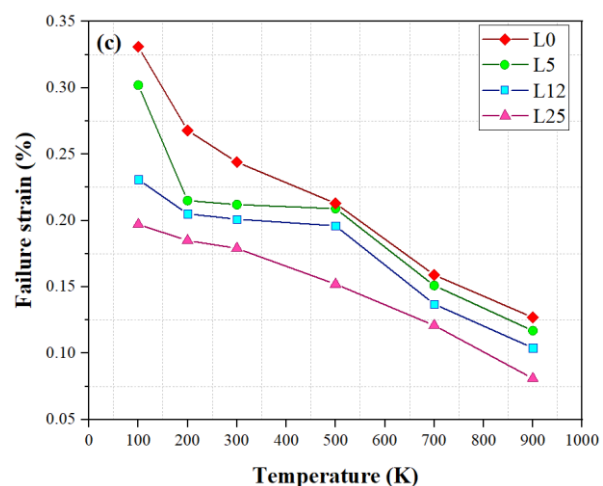
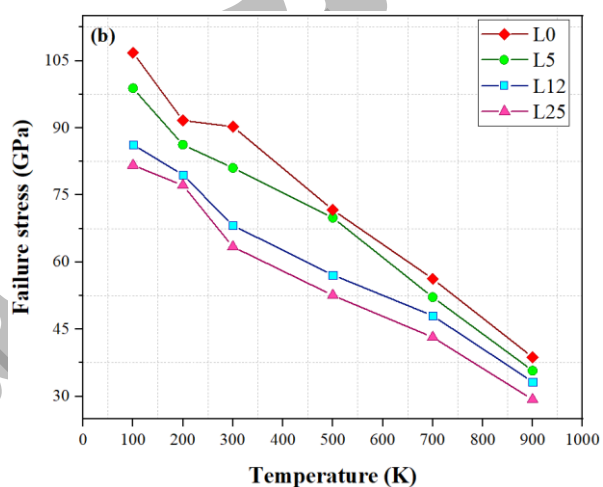
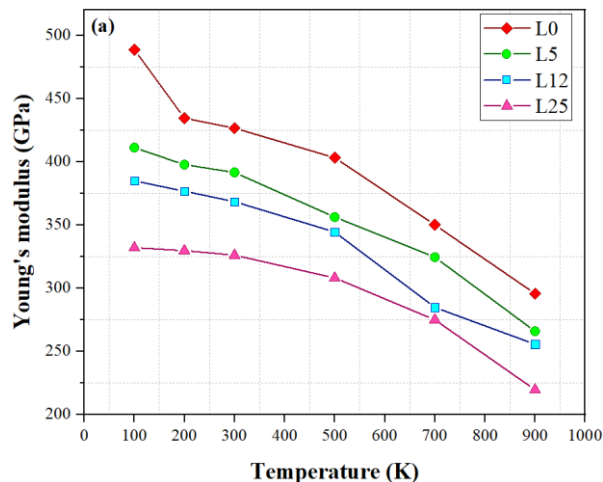
همانطور که در شکل ۹ نشان داده شده است، تمام المان‌های مکانیکی از قبیل مدول یانگ، تنش شکست و کرنش شکست با افزایش دما و افزایش طول ترک یک روند نزولی را پیموده‌اند. بالاترین خواص گزارش شده برای ساختار بدون ترک در دمای ۱۰۰ کلوین است، در حالی که کمترین مقادیر بدست آمده برای ساختار با طول ترک ۲۵ آنگستروم و در دمای ۹۰۰ کلوین ارایه شده است. همان طور که در شکل ۹-a نشان داده شده است، مدول یانگ برای ساختار بدون ترک ۴۴۸/۶۸ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین بدست آمد و با افزایش دما تا ۹۰۰ کلوین، حدود ۳۵ درصد کاهش یافت و به مقدار ۲۹۵/۵۱ گیگاپاسکال رسید. مدول یانگ برای صفحات با طول‌های ترک ۵، ۱۲ و ۲۵ آنگستروم نیز روند نزولی خود را پیمودند. به عنوان مثال، مقدار این خاصیت مکانیکی برای طول‌های ترک یاد شده و در دمای ۱۰۰ کلوین، به ترتیب ۴۱۱/۱۶، ۳۸۴/۸۱ و ۳۳۱/۹۷ گیگاپاسکال گزارش شده است که معادل ۸/۳، ۱۴/۲۲ و ۲۶ درصد کاهش یافته‌اند. شکل ۹-b روند تغییرات تنش شکست ساختار پلی کریستال نیتريد کربن را در شرایط مختلف نشان می‌دهد. تنش شکست برای ساختار بدون ترک و در دمای ۹۰۰ کلوین تقریباً یک سوم تنش در دمای ۱۰۰ کلوین گزارش شده است (۳۸/۷۶ گیگاپاسکال در مقایسه با ۱۰۶/۸۲ گیگاپاسکال). این رفتار کاهشی را می‌توان به غلبه‌ی فاصله‌ی بین اتمی بر اثر تغییرات دما و به دنبال آن، کاهش انرژی اتصال، تضعیف پیوندهای شیمیایی و در نتیجه، کاهش خواص مکانیکی نسبت داد. همچنین، تنش شکست برای ساختار با طول ترک ۲۵ آنگستروم نزدیک به ۲۴ درصد و ۲۵ درصد کمتر از ساختار بدون ترک در دمای ۱۰۰ و ۹۰۰ کلوین بدست آمد. روند مشابهی برای کرنش شکست (شکل ۹-c) نیز گزارش شد. کرنش شکست ساختار بدون ترک از ۰/۳۳۱

زمانی که یک ساختار تحت بار کششی محوری قرار می‌گیرد، تغییر شکل بوسیله‌ی انتقال انرژی جنبشی به انرژی کرنش در دماهای بالاتر صورت می‌گیرد که منجر به شکست ساختار در نرخ کرنش‌های پایین‌تر می‌شود [۳۶]. به طور کلی، کمترین خواص مکانیکی بدست آمده برای مدول یانگ، تنش و کرنش شکست برای ساختار پلی کریستال نیتريد کربن با طول ترک ۲۵ آنگستروم و در دمای ۹۰۰ کلون معادل ۲۱۹/۴۸ گیگاپاسکال، ۲۹/۳۱ گیگاپاسکال و ۰/۱۷۸ بود. یک روند نزولی برای ساختار MoS_2 توسط بائو و همکاران گزارش شد [۳۷]. نتایج آنها نشان می‌دهد که افزایش دما و تغییرات طول ترک برای این ساختار موجب کاهش خواص مکانیکی می‌گردد. در مطالعه‌ی دیگر، زاهدی و همکاران [۳۸] با کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی، روند کاهش خواص مکانیکی ساختار کاربید بور را با افزایش طول ترک و تغییرات دما گزارش کردند.

۳-۳- بهینه سازی

در این بخش، از روش الگوریتم ژنتیک برای دستیابی به مقدار بهینه‌ی خاصیت مکانیکی مدول یانگ استفاده شده است. الگوریتم ژنتیک به عنوان یک روش هوشمند و اکتشافی برای حل مسائل بهینه سازی در علوم مهندسی استفاده می‌شود که یک روش مقرون به صرفه نیز است. برای یافتن بهترین شرایط برای بهینه سازی شرایط مختلف آزمایشگاهی، الگوریتم ژنتیک یکی از بهترین روش‌ها می‌باشد. در این روش، جمعیتی از راه حل‌های کاندید برای شروع انتخاب می‌شوند که هر المان انتخابی دارای مجموعه‌ای از خواص (کروموزوم‌های مربوط به خود) است که این قابلیت را دارد تا جهش یافته و باعث افزایش جمعیت شود. راه حل‌ها به صورت دو به دو نشان داده می‌شود. هر المان به صورت تصادفی و در یک فرآیند تکراری تلاش می‌کند تا جمعیت افزایش یابد. در هر بخش و برای هر نسل، تابع هزینه برای هر المان ارزیابی می‌شود. فرد یا المان مناسب‌تر به صورت تصادفی از جمعیت انتخاب می‌شود و هر دو فرد انتخاب شده دو فرد جدید را ایجاد می‌کنند. زمانی این الگوریتم خاتمه می‌یابد که به حداکثر تعداد نسل یا یک سطح تناسب تعریف شده رسیده باشد [۳۹، ۴۰].

با توجه به نتایج بدست آمده در بخش‌های قبلی، در این بخش، مقدار بهینه‌ی مدول یانگ برای ساختار پلی کریستال نیتريد کربن با ۵۳ ناحیه و چینش تصادفی شماره‌ی ۳ مورد مطالعه قرار گرفته است. شایان ذکر است که المان‌های ورودی

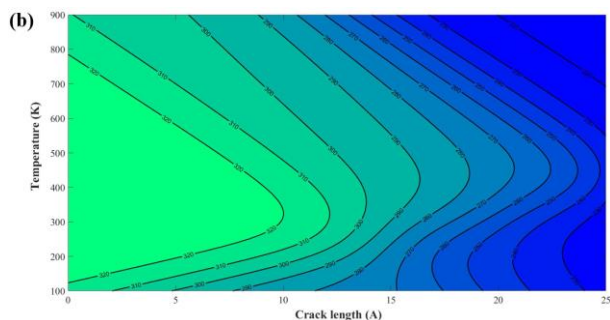
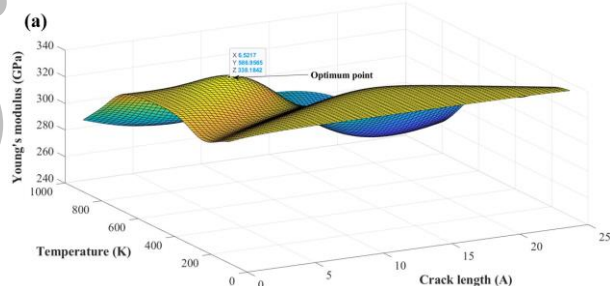


شکل ۹. (a) مدول یانگ، (b) تنش شکست و (c) کرنش شکست پلی کریستال نیتريد کربن با ۵۳ ناحیه و چینش تصادفی شماره‌ی ۳، تحت تاثیر طول‌های ترک مختلف و تغییرات دما در محدوده‌ی ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلون

۴- جمع بندی

در این مطالعه، بررسی رفتار شکست نانوصفحات نیتريد کربن در دو حالت مونوکریستال و پلی کریستال مورد بررسی قرار گرفت. برای این منظور، با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی و با اعمال پتانسیل مناسب و شرایط مرزی دوره‌ای، تاثیر تغییرات دما و طول ترک مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان داد که خواص مکانیکی مونوکریستال نیتريد کربن بدون در نظر گرفتن جهت بارگذاری، با افزایش دما از ۱۰۰ کلوین به ۹۰۰ کلوین کاهش می‌یابد. شایان ذکر است که خواص مکانیکی نانوصفحات نیتريد کربن در جهت زیگزاگ بالاتر از آرمچیر گزارش شد. بیشترین مقدار مدول یانگ در دمای ۱۰۰ کلوین، برابر با ۹۰۸/۶۷ گیگاپاسکال و در راستای زیگزاگ بدست آمد. در مقابل، کمترین مقدار این خاصیت مکانیکی در راستای آرمچیر و در دمای ۹۰۰ کلوین، معادل ۷۱۱/۰۲ گیگاپاسکال گزارش شد. همچنین، تنش شکست در راستای زیگزاگ از ۳۰۶/۱۱ گیگاپاسکال و در دمای ۱۰۰ کلوین به ۱۷۷/۴۳ گیگاپاسکال و در دمای ۹۰۰ کلوین کاهش یافت که معادل ۴۲/۰۳ درصد است. علاوه بر این، اثر تغییرات دما بر پلی کریستال نیتريد کربن با تعداد نواحی مختلف و چهار چینش تصادفی مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان داد که افزایش تعداد ناحیه سبب کاهش مدول یانگ و تنش شکست می‌شود. مرزدهانه‌ها به عنوان منبع اصلی تمرکز تنش ایفای نقش کردند و انتشار ترک از این نواحی صورت گرفت. همچنین، خواص مکانیکی پلی کریستال نیتريد کربن پایین‌تر از مونوکریستال آن بود. سپس، سه طول ترک ۵، ۱۲ و ۲۵ آنگستروم به صورت ترک لبه‌ای در دماهای مختلف آزمایش شد. خواص مکانیکی به عنوان تابعی از دما و طول ترک کاهش یافت. مدول یانگ برای طول ترک ۲۵ آنگستروم از ۳۳۱/۹۷ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به ۲۱۹/۴۸ گیگاپاسکال و در دمای ۹۰۰ کلوین کاهش یافت. همچنین، تنش شکست برای طول ترک ۱۲ آنگستروم برابر با ۶۱/۴۴ درصد کاهش یافت. در بخش پایانی، بهینه سازی مدول یانگ پلی کریستال با ۵۳ ناحیه و چینش تصادفی شماره ۳ مورد آزمایش قرار گرفت و نتایج نشان داد که مقدار بهینه‌ی این خاصیت مکانیکی معادل ۳۳۸/۱۸ گیگاپاسکال در دمای ۵۸۶/۹۵ کلوین و با طول ترک ۶/۵۲ آنگستروم گزارش شد.

برای بهینه سازی این خاصیت مکانیکی، دو پارامتر دما و طول ترم است. شرایط فرض شده برای بهینه سازی به روش الگوریتم ژنتیک به شرح زیر می‌باشد؛ الگوریتم از نوع باینری بوده و برای هر متغیر ۱۰ بیت اختصاص داده شده است. به این ترتیب، تعداد بیت هر کروموزوم ۲۰ بیت است. نقاط شروع اولیه به صورت تصادفی انتخاب شده‌اند. تعداد نقاط هم پوشانی با توجه به طول کروموزوم، ۵ نقطه و احتمال جهش برابر با ۰/۰۱ فرض شده است. شکل ۱۰-a نشان دهنده‌ی نمودار سه بعدی تغییرات مدول یانگ بر حسب دو متغیر دما و طول ترک می‌باشد. مقدار بهینه‌ی گزارش شده برای مدول یانگ در دما ۵۸۶/۹۵ کلوین و طول ترک ۶/۵۲ آنگستروم بدست آمده است و مقدار آن برابر با ۳۳۸/۱۸ است. همچنین، اثر دو پارامتر مورد بررسی در نمودار شکل ۱۰-b به نمایش گذاشته شده است. همانطور که مشخص است، افزایش طول ترک سبب کاهش خاصیت مدول یانگ می‌گردد و بیشترین مقدار این خاصیت مکانیکی در بازه‌ی دمایی ۳۰۰ تا ۵۰۰ کلوین و طول ترک ۰/۱ تا ۳/۴ آنگستروم بدست آمده است. بازه‌های گزارش شده به طراح کمک می‌کند تا با انتخاب دما و طول ترک مناسب، بیشترین مقدار مدول یانگ را بدست آورد.



شکل ۱۰. (a) نمودار سه بعدی مدول یانگ به ازای تغییرات دما و طول ترک و (b) نمودار دو بعدی بر حسب تغییرات دما و طول ترک

- [1] K. Novoselo *et al.*, "Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films," *Med. Clin. (Barc.)*, vol. 146, no. 2, pp. 93–94, (2016), doi: 10.1016/j.medcli.2015.04.005.
- [2] A. R. Albooyeh, A. Dadrasi, and A. H. Mashhadzadeh, "Effect of point defects and low-density carbon-doped on mechanical properties of BNNTs: A molecular dynamics study," *Mater. Chem. Phys.*, vol. 239, no. August 2019, p. 122107, (2020), doi: 10.1016/j.matchemphys.2019.122107.
- [3] P. Samadipakchin, H. R. Mortaheb, and A. Zolfaghari, "ZnO nanotubes: Preparation and photocatalytic performance evaluation," *J. Photochem. Photobiol. A Chem.*, vol. 337, pp. 91–99, (2017), doi: 10.1016/j.jphotochem.2017.01.018.
- [4] A. Hamed Mashhadzadeh, A. Fereidoon, and M. Ghorbanzadeh Ahangari, "Atomistic modeling of interfacial interaction between polyvinyl chloride and polypropylene with Boron-Nitride monolayer sheet: A density functional theory study," *Superlattices Microstruct.*, vol. 111, pp. 23–31, (2017), doi: 10.1016/j.spmi.2017.04.038.
- [5] A. Hamed Mashhadzadeh, M. Ghorbanzadeh Ahangari, A. Salmankhani, and M. Fataliyan, "Density functional theory study of adsorption properties of non-carbon, carbon and functionalized graphene surfaces towards the zinc and lead atoms," *Phys. E Low-Dimensional Syst. Nanostructures*, vol. 104, pp. 275–285, (2018), doi: 10.1016/j.physe.2018.08.010.
- [6] M. G. Ahangari, A. H. Mashhadzadeh, M. Fathalian, A. Dadrasi, Y. Rostamiyan, and A. Mallahi, "Effect of various defects on mechanical and electronic properties of zinc-oxide graphene-like structure: A DFT study," *Vacuum*, vol. 165, no. November 2018, pp. 26–34, (2019), doi: 10.1016/j.vacuum.2019.04.003.
- [7] T. Kuila, S. Bose, A. K. Mishra, P. Khanra, N. H. Kim, and J. H. Lee, "Chemical functionalization of graphene and its applications," *Prog. Mater. Sci.*, vol. 57, no. 7, pp. 1061–1105, (2012), doi: 10.1016/j.pmatsci.2012.03.002.
- [8] J. Mahmood *et al.*, "Two-dimensional polyaniline (C₃N) from carbonized organic single crystals in solid state," *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, vol. 113, no. 27, pp. 7414–7419, (2016), doi: 10.1073/pnas.1605318113.
- [9] K. Belasfar, M. Houmad, M. Boujnah, A. Benyoussef, and A. EL Kenz, "First-principles study of BC₃ monolayer as anodes for lithium-ion and sodium-ion batteries applications," *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 139, no. December 2019, p. 109319, (2020), doi: 10.1016/j.jpcs.2019.109319.
- [10] S. Thomas and S. U. Lee, "Atomistic insights into the anisotropic mechanical properties and role of ripples on the thermal expansion of h-BCN monolayers," *RSC Adv.*, vol. 9, no. 3, pp. 1238–1246, (2019), doi: 10.1039/C8RA08076C.
- [11] B. Mortazavi, G. R. Berdiyrov, M. Makaremi, and T. Rabczuk, "Mechanical responses of two-dimensional MoTe₂; pristine 2H, 1T and 1T' and 1T'/2H heterostructure," *Extrem. Mech. Lett.*, vol. 20, pp. 65–72, (2018), doi: 10.1016/j.eml.2018.01.005.
- [12] D. Ma *et al.*, "C₃N monolayers as promising candidates for NO₂ sensors," *Sensors Actuators, B Chem.*, vol. 266, no. 2, pp. 664–673, (2018), doi: 10.1016/j.snb.2018.03.159.
- [13] Y. Wang, Z. Jiao, S. Ma, and Y. Guo, "Probing C₃N/Graphene heterostructures as anode materials for Li-ion batteries," *J. Power Sources*, vol. 413, no. December 2018, pp. 117–124, (2019), doi: 10.1016/j.jpowsour.2018.12.031.
- [14] M. Makaremi, B. Mortazavi, and C. V. Singh, "Adsorption of Metallic, Metalloidal, and Nonmetallic Adatoms on Two-Dimensional C₃N," *J. Phys. Chem. C*, vol. 121, no. 34, pp. 18575–18583, (2017), doi: 10.1021/acs.jpcc.7b04511.

- [15] J. Lin and W. Zhou, *Defect in 2D materials beyond graphene*. Elsevier Ltd, 2018. doi: 10.1016/B978-0-08-102053-1.00006-5.
- [16] N. Liu, R. Pidaparti, and X. Wang, "Abnormal linear elasticity in polycrystalline phosphorene," *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 20, no. 13, pp. 8668–8675, (2018), doi: 10.1039/c7cp08540k.
- [17] L. Fan, Z. Bian, Z. Huang, F. Song, Y. Xia, and J. Xu, "New insight into bonding energy and stress distribution of graphene oxide/hexagonal boron nitride: Functional group and grain boundary effect," *Diam. Relat. Mater.*, vol. 127, no. May, (2022), doi: 10.1016/j.diamond.2022.109185.
- [18] I. Strength, F. Behaviors, and G. G. Boundaries, "Nn3001356.Pdf," no. 3, pp. 2704–2711, (2012).
- [19] A. Dadrasi, A. Albooyeh, S. Fooladpanjeh, A. Salmankhani, A. Hamed Mashhadzadeh, and M. R. Saeb, "Theoretical examination of the fracture behavior of BC3 polycrystalline nanosheets: Effect of crack size and temperature," *Mech. Mater.*, vol. 165, no. November 2021, p. 104158, (2022), doi: 10.1016/j.mechmat.2021.104158.
- [20] B. Bagheri *et al.*, "Fracture fingerprint of polycrystalline C3N nanosheets: Theoretical basis," *J. Mol. Graph. Model.*, vol. 106, p. 107899, (2021), doi: 10.1016/j.jmgm.2021.107899.
- [21] F. Molaei *et al.*, "Applying molecular dynamics simulation to take the fracture fingerprint of polycrystalline SiC nanosheets," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 200, no. April, p. 110770, (2021), doi: 10.1016/j.commatsci.2021.110770.
- [22] M. I. R. Shishir, M. S. R. Elapolu, and A. Tabarraei, "Investigation of fracture and mechanical properties of monolayer C3N using molecular dynamic simulations," *Mech. Mater.*, vol. 160, no. May, (2021), doi: 10.1016/j.mechmat.2021.103895.
- [23] A. H. N. Shirazi, R. Abadi, M. Izadifar, N. Alajlan, and T. Rabczuk, "Mechanical responses of pristine and defective C3N nanosheets studied by molecular dynamics simulations," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 147, pp. 316–321, (2018), doi: 10.1016/j.commatsci.2018.01.058.
- [24] S. A. Adcock and J. A. McCammon, "Molecular dynamics: Survey of methods for simulating the activity of proteins," *Chem. Rev.*, vol. 106, no. 5, pp. 1589–1615, (2006), doi: 10.1021/cr040426m.
- [25] B. S. Lee and S. Park, "Applying Tersoff-potential and bond-softening models in a molecular dynamics study of femtosecond laser processing," *J. Appl. Phys.*, vol. 126, no. 4, (2019), doi: 10.1063/1.5096013.
- [26] A. Stukowski, "Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool," *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 18, no. 1, (2010), doi: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.
- [27] F. L. Guo *et al.*, "Experimental characterization and molecular dynamics simulation of thermal stability, mechanical properties and liquid oxygen compatibility of multiple epoxy systems for cryotank applications," *Extrem. Mech. Lett.*, vol. 44, p. 101227, (2021), doi: 10.1016/j.eml.2021.101227.
- [28] B. Bagheri *et al.*, "Correlation between surface topological defects and fracture mechanism of γ -graphyne-like boron nitride nanosheets," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 188, no. November, p. 110152, (2021), doi: 10.1016/j.commatsci.2020.110152.
- [29] Z. Ni, H. Bu, M. Zou, H. Yi, K. Bi, and Y. Chen, "Anisotropic mechanical properties of graphene sheets from molecular dynamics," *Phys. B Condens. Matter*, vol. 405, no. 5, pp. 1301–1306, (2010), doi: 10.1016/j.physb.2009.11.071.
- [30] B. Wang, Y. Puzyrev, and S. T. Pantelides, "Strain enhanced defect reactivity at grain boundaries in polycrystalline graphene," *Carbon N. Y.*, vol. 49, no. 12, pp. 3983–3988, (2011), doi: 10.1016/j.carbon.2011.05.038.
- [31] A. Dadrasi, S. Fooladpanjeh, A. Albooyeh, A. Salmankhani, A. Hamed Mashhadzadeh, and M. R. Saeb, "A

theoretical insight into the fracture behavior of the edge-cracked polycrystalline BC3 nanosheets,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 192, p. 110345, (2021), doi: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110345>.

- [32] A. Dadrasi, S. Fooladpanjeh, K. E. Eshkalak, S. Sadeghzadeh, and M. R. Saeb, “Crack pathway analysis in graphene-like BC3 nanosheets: Towards a deeper understanding,” *J. Mol. Graph. Model.*, vol. 107, no. April, p. 107980, (2021), doi: 10.1016/j.jmgm.2021.107980.
- [33] G. H. Lee *et al.*, “High-strength chemical-vapor-deposited graphene and grain boundaries,” *Science (80-.)*, vol. 340, no. 6136, pp. 1074–1076, (2013), doi: 10.1126/science.1235126.
- [34] B. Mortazavi and G. Cuniberti, “Mechanical properties of polycrystalline boron-nitride nanosheets,” *RSC Adv.*, vol. 4, no. 37, pp. 19137–19143, (2014), doi: 10.1039/c4ra01103a.
- [35] B. Mortazavi and G. Cuniberti, “Atomistic modeling of mechanical properties of polycrystalline graphene,” *Nanotechnology*, vol. 25, no. 21, (2014), doi: 10.1088/0957-4484/25/21/215704.
- [36] B. Mortazavi *et al.*, “Tensile mechanical properties of c-BN thin layers under tension: A molecular dynamics simulation,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 131, no. February, pp. 315–320, (2017), doi: 10.1016/j.commatsci.2017.01.046.
- [37] H. Bao *et al.*, “Molecular Dynamics Simulation of Nanocrack Propagation in Single-Layer MoS2 Nanosheets,” *J. Phys. Chem. C*, vol. 122, no. 2, pp. 1351–1360, (2018), doi: 10.1021/acs.jpcc.7b10094.
- [38] R. K. Zahedi, A. H. N. Shirazi, P. Alimouri, N. Alajlan, and T. Rabczuk, “Mechanical properties of graphene-like BC3; a molecular dynamics study,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 168, no. May, pp. 1–10, (2019), doi: 10.1016/j.commatsci.2019.05.053.
- [39] A. Dadrasi, S. Fooladpanjeh, and A. Alavi Gharahbagh, “Interactions between HA/GO/epoxy resin nanocomposites: optimization, modeling and mechanical performance using central composite design and genetic algorithm,” *J. Brazilian Soc. Mech. Sci. Eng.*, vol. 41, no. 2, (2019), doi: 10.1007/s40430-019-1564-7.
- [40] A. Dadrasi, A. R. Albooyeh, S. Fooladpanjeh, M. D. Shad, and M. Beynaghi, “RSM and ANN modeling of the energy absorption behavior of steel thin-walled columns: a multi-objective optimization using the genetic algorithm,” *J. Brazilian Soc. Mech. Sci. Eng.*, vol. 42, no. 11, (2020), doi: 10.1007/s40430-020-02643-5.