



Ferdowsi
University of
Mashhad

Journal of Applied and Computational Sciences in Mechanics

Page Journal: mechanic-ferdowsi.um.ac.ir



Society of
Manufacturing
Engineering of
Iran

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

Research Article

Mehdi Beynaghi¹, Ali Dadrasi² , Mohsen Taghi Zadeh³

 [10.22067/jacsm.2025.92540.1323](https://doi.org/10.22067/jacsm.2025.92540.1323)

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 2.24 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.

1. Introduction

Nanostructures are essential and integral components of science and technology, widely utilized across various industries [1]. Due to its unique properties, graphene has garnered significant attention from researchers [2]. Similarly, other materials such as boron carbide and carbon nitride exhibit remarkable characteristics comparable to those of graphene [3].

Building on existing research on the mechanical properties of composite structures, this article examines Young's modulus, failure stress, and strain in two-dimensional (2D) graphene and carbon nitride structures—both individually and in hybrid forms—along armchair and zigzag directions. Additionally, the impact of removing carbon and nitrogen atoms on the mechanical properties is explored. Furthermore, the study investigates how a circular geometric defect influences the mechanical

behavior of graphene-carbon nitride composite structures in both armchair and zigzag orientations.

2. Computational method

The molecular dynamics simulation method has been employed to model and analyze the mechanical properties of 2D nanosheets [4]. The Tersoff potential has been utilized to calculate the interactions between carbon-carbon and carbon-nitrogen atoms [5]. The relationship between energy and displacement is defined by the following equation:

$$U_{ij} = f_c(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})] \quad (1)$$

To establish system equilibrium, the NPT process was implemented with a time step of 1 fs and a duration of 50 ps. The graphene and carbon nitride structures have dimensions of 10×10 nm². The X and Y directions correspond to the zigzag and armchair loading orientations, respectively. To regulate temperature within the simulation box, equilibrium was maintained for 50 ps using the Nose-Hoover algorithm under constant temperature and pressure. Following equilibrium, the system was subjected to tensile loading at a strain rate of 0.001 ps⁻¹ to determine stress at each strain and time step. Fig. 1 illustrates the graphene-carbon nitride hybrid structure.

* Manuscript received 2025 March 9, Revised 2025 April 26, Accepted 2025 June 16.

¹ PhD student in Mechanical Engineering, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Iran.

² Corresponding Author: Assistant Professor, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Iran. **Email:** Ali.Dadrasi@hsu.ac.ir

³ Assistant Professor, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Iran.

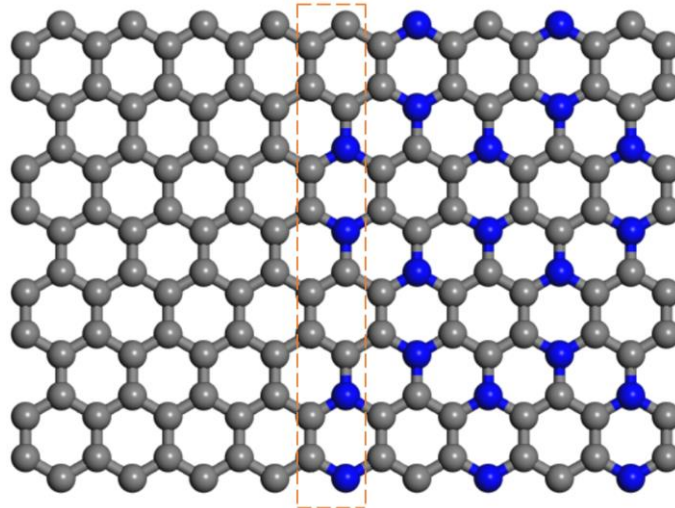


Fig. 1. Scheme of graphene-Carbon nitride hybrid structure.

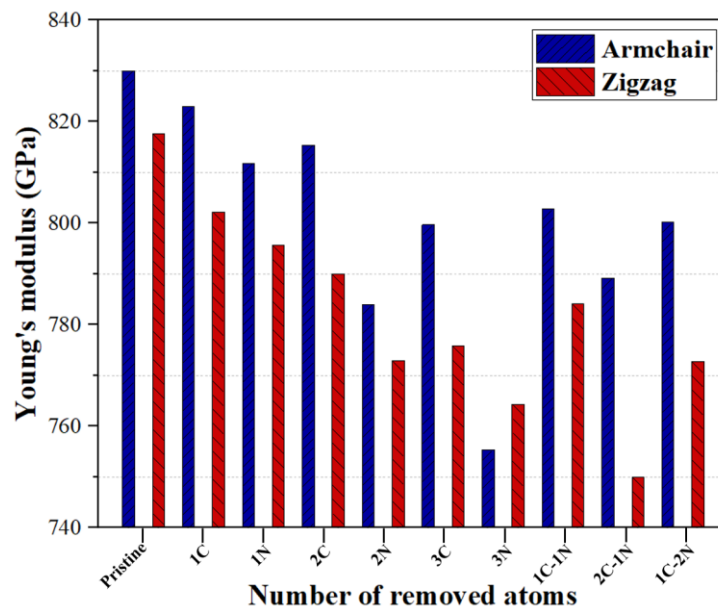


Fig. 2. Variation of Young's modulus in hybrid structure of graphene-Carbon nitride.

3. Results and discussion

3.1 Mechanical properties of defective nanosheets

The results obtained from the study on the removal of carbon and nitrogen atoms in the graphene-carbon nitride hybrid structure are presented in Fig. 2. Notably, most atoms were removed from the interface between the two structures. As shown, the removal of nitrogen atoms had a more significant impact on the Young's modulus than the removal of carbon atoms. Furthermore, the values were consistently higher in the armchair direction than in the zigzag direction. The removal of one carbon atom reduced the Young's modulus to 21.802 GPa and 95.822 GPa in the zigzag and armchair directions, respectively. In contrast, removing one nitrogen atom resulted in values of

66.795 GPa and 81.811 GPa, respectively. A similar decreasing trend was observed when two or three carbon or nitrogen atoms were removed individually. For instance, the Young's modulus in the armchair direction decreased by 1.76% upon the removal of two carbon atoms, compared to the pristine structure. In contrast, the combined removal of carbon and nitrogen atoms produced different results. According to Fig. 2, the simultaneous removal of two carbon atoms and one nitrogen atom had the most pronounced effect on the mechanical properties studied. The Young's modulus in the zigzag direction dropped from 817.66 GPa (pristine structure) to 750.03 GPa. Meanwhile, the corresponding value in the armchair direction was reported to be 789.23 GPa.

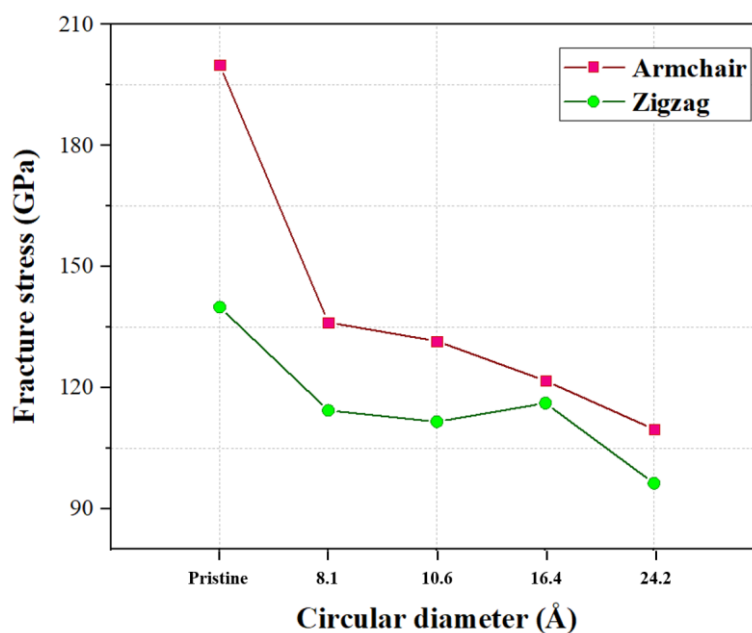


Fig. 3. Variation of fracture stress in hybrid structure of graphene-Carbon nitride.

3.2 Mechanical properties of nanosheets, with circular notches

This section examines the effect of circular defects with varying diameters on the fracture stress of the graphene-carbon nitride structure. To this end, four circular defects with diameters of 1.8, 2.24, 10.6, and 16.4 Å were introduced at the interface between the two materials. As shown in Fig. 3, increasing the diameter of the circular defect results in a reduction of fracture stress. Specifically, the defect with the largest diameter corresponds to the lowest fracture stress observed. It is also notable that, in this analysis, the mechanical property values in the armchair direction are higher than those in the zigzag direction. According to the data in Fig. 3, the fracture stress for the structure with a 2.24 Å defect in the zigzag direction is 26.96 GPa—a decrease of 19.31% compared to the pristine structure. In the armchair direction, the same defect results in a reported fracture stress of 64.109 GPa. This reduction in strength can be attributed to two main factors. First, the removal of a significant number of atoms weakens the interatomic bonding within the structure. Second, stress concentration around the defect region contributes to a further decline in the mechanical integrity of the nanosheet.

4. Conclusion

This paper investigates the mechanical properties—namely Young's modulus, fracture stress, and strain—of two-dimensional structures composed of graphene, carbon nitride, and their hybrid configuration using molecular dynamics simulations under various conditions. The study explores the effects of carbon and nitrogen atom removal, as well as the introduction of circular defects of different

diameters. The results indicate that mechanical properties in the armchair loading direction are higher than those in the zigzag direction. Additionally, in the hybrid structure, the deletion of nitrogen atoms had a greater impact on mechanical performance compared to carbon atom removal. Furthermore, increasing the diameter of the circular defect from 1.8 Å to 2.24 Å led to a reduction in mechanical strength. Overall, the findings suggest that graphene-carbon nitride composite nanosheets hold significant potential for mechanical and electrical applications.

Reference

- [1] S. Ajori, A. Eftekhari, "Mechanical properties and fracture analysis of defective penta-graphene under temperature variation: Insight from molecular dynamics," *Diamond & Related Materials*, vol. 124, pp. 108956, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2022.108956>
- [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, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2022.108956>
- [3] 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, 2024. (In Persian)
- [4] A. Albooyeh, A. Dadrasi, and M. Razavikia, "Investigating the effects 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*, vol. 34, no. 27, pp. 37–48, 2022.

<https://dx.doi.org/10.22067/jacsm.2022.74654.1087>

- [5] J. Tersoff, “Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems,” *Physical Review B*, vol. 39, no. 8, p. 5566, 1989.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.39.5566>



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

مقاله پژوهشی

محسن تقی زاده^(۳)

علی دادرسی^(۲)

مهدی بینقی^(۱)



10.22067/jacsm.2025.92540.1323

چکیده در این مقاله، خواص مکانیکی ساختار ترکیبی گرافن - نیتريد کربن با استفاده از شبیه‌سازی 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 زیگزگ مورد تحلیل قرار گرفت. نتایج نشان داد که خواص مکانیکی ساختار ترکیبی از ساختارهای گرافن و نیتريد کربن به صورت جداگانه، پایین‌تر است. همچنین، حذف اتم‌های نیتروژن اثر بیشتری بر خواص مکانیکی داشت. افزایش قطر نقص دایره باعث کاهش مدول یانگ از ۱۰۲/۲۳ گیگاپاسکال به ۶۸۱/۳۴ گیگاپاسکال در راستای آرمچیر شد. همچنین، مقدار تنش شکست به ترتیب ۳۱/۱۹ و ۴۵/۱۵ درصد در راستای زیگزگ و آرمچیر کاهش یافت.

واژه‌های کلیدی گرافن، نیتريد کربن، دینامیک مولکولی، خواص مکانیکی، نانو ساختار.

مقدمه

دیگر صفحات گرافن می‌باشند، توجه بیشتری داشته باشند [7]. تعداد زیادی از تحقیقات به بررسی خواص مکانیکی، الکتریکی، حرارتی ساختارهای برلیوم اکساید، کاربید بور، نیتريد کربن و نیتريد آلومینیوم اختصاص یافته است.

کیو و همکاران [8] با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی خواص مکانیکی ساختار کاربید سیلیکون پرداختند. در تحقیق دیگر، لیو و همکاران [9] به بررسی خواص مکانیکی ساختار شش ضلعی نیتريد بور پرداختند. نتایج آن‌ها نشان داد که افزایش دما از ۱۰۰ به ۱۲۰۰ کلین سبب کاهش خاصیت مکانیکی مدول یانگ می‌شود. همچنین، استحکام کششی این ساختار از ۱۴۵ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلین به ۱۰۴ گیگاپاسکال در دمای ۱۲۰۰ کلین کاهش یافت. لی و همکاران [10] به بررسی خواص مکانیکی ساختار نیتريد تیتانیوم با استفاده از روش دینامیک مولکولی پرداختند. نتایج آن‌ها بیانگر

در چند دهه گذشته، نانو ساختارهایی که از مواد مختلف تشکیل شده‌اند به بخشی جدایی‌ناپذیر از علم و فناوری بدل شده‌اند و تلاش‌های بسیاری بر آن‌ها صورت گرفته است تا بتوان از آن‌ها در صنایع مختلف استفاده کرد [1]. در میان چندین نانو ساختار که مورد توجه قرار گرفته است، گرافن (شکل ۱) به دلیل ویژگی‌های قابل توجه آن، به عنوان ساختار دوبعدی تک‌لایه که متشکل از اتم‌های کربن می‌باشد، توجه بیشتر محققان را به خود جلب کرده است [2]. این ساختار دارای استحکام بالا، هدایت حرارتی مناسب، خواص الکترونیکی و نوری خوبی است [3] و تمام این ویژگی‌ها سبب شده است تا از این ساختار در صنایع مختلف همچون صنایع الکترونیک [4]، خودروسازی [5]، نانوکامپوزیت‌های پایه پلیمری [6] استفاده شود. همچنین، این ویژگی‌ها موجب شده است تا محققان علاوه بر گرافن، به ساختارهایی که از انواع

* تاریخ دریافت مقاله ۱۴۰۳/۱۲/۱۹ و تاریخ پذیرش آن ۱۴۰۴/۳/۲۶ می باشد.

(۱) دانشجوی دکتری مکانیک، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار.

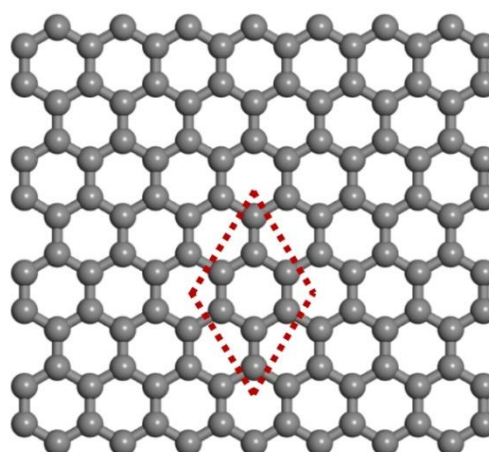
(۲) نویسنده مسئول، استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار.

(۳) استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار.

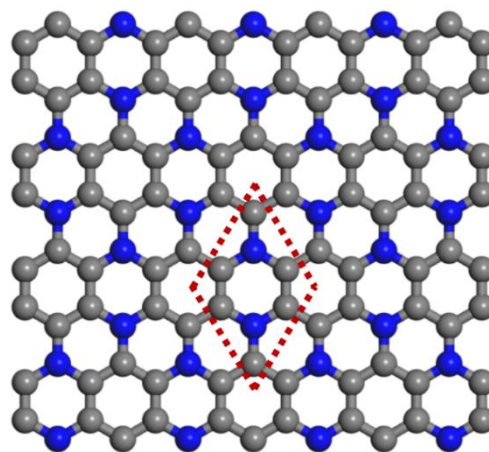
و به عنوان مواد مبتنی بر نیتريد معرفی می‌گردند نیز، به دلیل پتانسیل بالایی که در کاربردهای متنوع دارند، توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده‌اند. نیتريد کربن، نیتريد بور، نیتريد گالیوم و نیتريد آلومینیوم به عنوان نماینده این مواد قابل استفاده می‌باشند [12-16]. نیتريد کربن (شکل ۱) دارای کاربردهای متنوعی در ذخیره‌سازی انرژی، جذب گاز، فوتوکاتالیز و دستگاه‌های نانوالکترومکانیک می‌باشد. این ساختار نیمه هادی به صورت شش ضلعی و لانه‌زنبوری می‌باشد و دارای شکاف باند eV ۰/۳۹ است [17]. مطالعات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان می‌دهد که نانوصفحات نیتريد کربن دارای مدول الاستیک ۳۴۱ گیگاپاسکال، رسانایی حرارتی 815 W/mK می‌باشد و می‌تواند تا دمای ۴۰۰۰ کلوین را تحمل کند [18].

مایلی فرتاش و همکاران [19] به بررسی خواص مکانیکی ساختار ترکیبی نیتريد کربن و کاربید بور به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پرداختند. آن‌ها با ایجاد نقص‌های 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 می‌گردد. همچنین، افزایش قطر نقص هندسی موجب کاهش خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست می‌شود. در این مطالعه، همچنین، نشان داده شد زمانی که عیوب هندسی در نانوصفحات نیتريد کربن حضور دارند، خواص مکانیکی مطلوب‌تری حاصل شده است. بررسی خواص مکانیکی ساختار ترکیبی گرافن و نیتريد بور به وسیله دینگ و همکاران [20] صورت گرفت. آن‌ها با استفاده از حذف اتم‌های کربن، نیتروژن و بور در حالت‌های 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 کلوین سبب ایجاد یک سیر نزولی در خواص مکانیکی گردید. ستورک [21] به بررسی خواص مکانیکی ساختار ترکیبی کاربید بور و نیتريد کربن به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پرداخت. نتایج آن‌ها نشان داد که حذف اتم در فصل مشترک هر دو ساختار سبب کاهش خواص مکانیکی می‌گردد. همچنین، حذف اتم بور اثر بیشتری بر خواص مکانیکی دارد. از سویی دیگر، افزایش حذف اتم‌های کربن، بور و نیتروژن از ۵ اتم به ۲۰

آن است که مقدار مدول یانگ و تنش شکست در راستای بارگذاری X بالاتر از راستای بارگذاری Y می‌باشد. بررسی خواص مکانیکی ساختار دوبعدی کاربید بور به وسیله دادرسی و همکاران صورت گرفت [11]. نتایج آن‌ها نشان داد که مقدار خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش و کرنش شکست در راستای آرمچیر بالاتر از راستای زیگزآگ می‌باشد. همچنین، افزایش دما از ۱۰۰ به ۱۰۰۰ کلوین سبب کاهش خواص مکانیکی در هر دو راستای آرمچیر و زیگزآگ می‌گردد.



(الف)



(ب)

شکل ۱ ساختارهای دوبعدی: (الف) گرافن، (ب) نیتريد کربن. هر اتم نیتروژن در ساختار نیتريد کربن به وسیله 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

ساختارهای دوبعدی که از خانواده گرافن محسوب می‌شوند

جداگانه اتم‌های نیتروژن و کربن در مرز ساختار ترکیبی می‌تواند به یک اهرم قابل بررسی تبدیل گردد؛ به گونه‌ای که تغییرات تعداد و مکان حذف آن‌ها را می‌توان یک عامل مؤثر و قابل تأمل معرفی کرد.

روش محاسبات

در این مطالعه، از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای مدل‌سازی و تحلیل خواص مکانیکی نانوصفحات گرافن، نیتريد کربن و حالت ترکیبی این دو ساختار استفاده شده است [22]. برهمکنش بین اتم‌های کربن - کربن و کربن - نیتروژن با استفاده از پتانسیل ترسوف محاسبه شده است [23]. برخلاف پتانسیل‌های دیگر، پتانسیل ترسوف اثرات مرتبه پیوند را در نظر می‌گیرد و امکان نمایش واقع‌بینانه‌تری از تشکیل و شکستن پیوند را فراهم می‌کند که هنگام مطالعه نقص‌های هندسی ضروری است. علاوه بر این، این پتانسیل، رفتار مکانیکی مواد دوبعدی را با دقت بالا ثبت می‌کند و آن را برای بررسی چگونگی تأثیر نقص‌های ساختاری بر خواص مکانیکی مناسب می‌سازد. رابطه بین انرژی و جابه‌جایی در معادله زیر برقرار است:

$$U_{ij} = f_c(r_{ij})[f_R(r_{ij}) + b_{ij}f_A(r_{ij})] \quad (1)$$

در این رابطه، f_R پتانسیل دافعه، f_A نماد پتانسیل جاذبه است. همچنین، b_{ij} مرتبه 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 [24]. هر سه تابع از معادلات زیر به دست می‌آیند:

$$F_R(ij) = -A_{ij}e^{\lambda_{ij}r_{ij}}, f_A(ij) = -B_{ij}\mu_{ij}r_{ij}$$

$$f_c(ij) = \begin{cases} 1 & r_{ij} < R_{ij} \\ 1/2 + 1/2 \cos(\frac{\pi(r_{ij} - R_{ij})}{S_{ij} - R_{ij}}) & R_{ij} < r_{ij} < S_{ij} \\ 0 & r_{ij} > S_{ij} \end{cases} \quad (2)$$

$$f_R(ij) = -A_{ij}e^{\lambda_{ij}r_{ij}}, f_A(ij) = -B_{ij}\mu_{ij}r_{ij}$$

$$b_{ij} = X_{ij}(1 + B_1^{\text{ni}}\xi_{ij}^{\text{ni}})^{-0.5n_i}, \xi_{ij} = \sum_{k \neq i,j} f_c(r_{ik})\omega_{ik}g(\theta_{ijk})$$

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

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

اتم موجب کاهش مدول یانگ، استحکام کششی و کرنش شکست می‌شود.

با توجه به مطالب یاد شده، تحقیقات گسترده‌ای در زمینه 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 نقص‌های عمودی برای افزایش فاصله اتم‌ها از یکدیگر می‌تواند عواقب متعددی به همراه داشته باشد که بر عملکرد ساختارهای ترکیبی اثر بگذارد. از سویی دیگر، تفاوت در فاصله‌های بین اتمی در قسمت‌های راست و چپ ساختار ترکیبی می‌تواند منجر به ایجاد نقص به ویژه در فصل مشترک آن شود که مطالعه آن‌ها می‌تواند به عملکرد بهتر این ساختارها در زمینه‌های 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 زیگزگ مورد مطالعه قرار گرفته است. همچنین، اثر حذف اتم‌های 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 زیگزگ بررسی شده است.

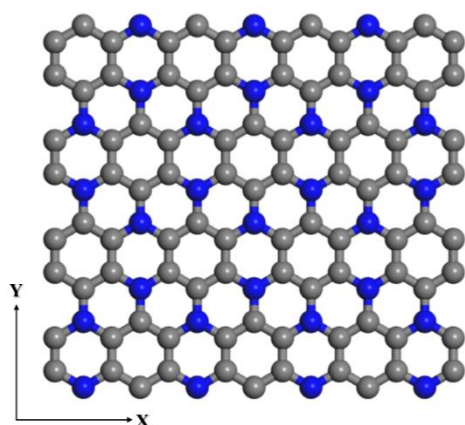
دو ساختار گرافن و نیتريد کربن به دلیل رسانایی الکتریکی بالا و پایداری مکانیکی به عنوان مواد مناسب در کاربردهای ذخیره‌سازی انرژی و صنعت خودروسازی مورد استفاده قرار می‌گیرد. از همین رو، درک چگونگی تأثیر نقص‌های هندسی، از جمله حذف اتم‌ها (به صورت یک اتم، دو و یا سه اتم) بر خواص مکانیکی، می‌تواند به طراحی مواد بهینه کمک کند تا ضعف ساختاری را به حداقل برساند و در عین حال، انعطاف‌پذیری آن را حفظ کند. بررسی این دو ساختار به صورت جداگانه و حالت ترکیبی آن‌ها می‌تواند به بسیاری از پرسش‌های موجود در این زمینه پاسخ دهد. هدف از انتخاب دو ساختار شش ضلعی گرافن و نیتريد کربن، کشف روابط بنیادی بین نقص‌های هندسی و رفتار مکانیکی بود که می‌تواند راه را برای نوآوری‌های آینده در مواد دوبعدی مهندسی شده هموار کند. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که جهت بارگذاری آرمچیر خواص بالاتری را به نمایش می‌گذارد و حذف اتم‌های نیتروژن اثر بیشتری بر خواص مکانیکی مورد بررسی دارد. همچنین، افزایش قطر دایره به عنوان یک نقص هندسی سبب کاهش خواص مکانیکی می‌گردد. حذف

نتایج و بحث

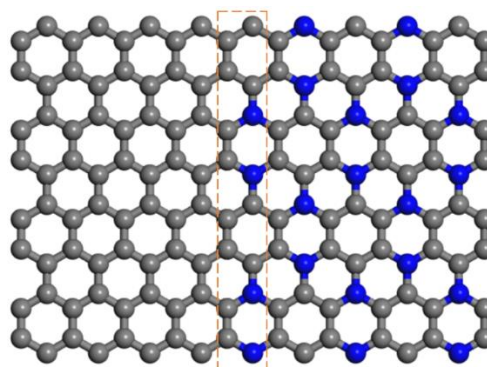
بررسی خواص مکانیکی ساختارهای دو بعدی

شکل (۳) منحنی تنش - کرنش ساختارهای گرافن، نیتريد کربن و حالت ترکیبی هر دو ساختار را در دو راستای آرمچیر و زیگزگ 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 زیگزگ می‌باشد. این در حالی است که این مقادیر در راستای آرمچیر به ترتیب $۲۴۱/۸۱$ ، $۲۲۶/۴۶$ و $۱۹۹/۹۱$ گیگاپاسکال و $۰/۴۱۸$ ، $۰/۴۰۵$ و $۰/۳۴۱$ درصد در راستای آرمچیر است. همان طور 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 به دست آمده در راستای آرمچیر بالاتر از زیگزگ می‌باشد. ساختار شش ضلعی نانوصفحات سبب می‌شود که زاویه بین تنش بارگذاری و لبه‌های پیوند اتم‌ها به ترتیب ۶۰ درجه و ۳۰ درجه در راستاهای زیگزگ و آرمچیر باشد که موجب می‌شود تا تنش خارجی بیشتری در راستای زیگزگ برای گسیخته شدن پیوند بین اتم‌های کربن - کربن و کربن - نیتروژن ایجاد شود. بنابراین، نسبت تنش نهایی در جهت زیگزگ به جهت آرمچیر نزدیک به $\sqrt{3}$ خواهد بود [24]. با توجه به جدول (۱) اختلاف مقادیر مدول یانگ برای تمامی ساختارها در هر دو جهت قابل چشم‌پوشی می‌باشد. شایان ذکر است که مقدار مدول یانگ 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 زیگزگ به ترتیب $۶/۳۶$ ، $۵/۶۵$ و $۱/۵۱$ درصد افزایش یافته است. نانوصفحات در جهت آرمچیر انعطاف‌پذیری و در نتیجه، مقاومت در برابر تنش بیشتری 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 [25]. ژانو و همکاران یک رفتار مشابه از خواص مکانیکی ساختارهای گرافن و نیتريد بور را گزارش کرده‌اند [26]. همچنین باقری و همکاران [27] نشان

از فرایند 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 ۱۰×۱۰ نانومتر مربع می‌باشد و تعداد کل اتم‌ها ۴۰۳۲ اتم در نظر گرفته شده است. دو جهت بارگذاری زیگزگ 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 جعبه شبیه‌سازی 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 $۰/۰۰۱ \text{ ps}^{-1}$ قرار گرفته است تا تنش در هر کرنش و گام زمانی به دست آید. در نهایت، نمودار تنش - کرنش برای بررسی خواص مکانیکی ساختارهای مورد بررسی با استفاده از اطلاعات به دست آمده ترسیم شده است. شکل (۲) ساختار ترکیبی گرافن - نیتريد کربن و راستای X و Y را به نمایش گذاشته است.



(الف)



(ب)

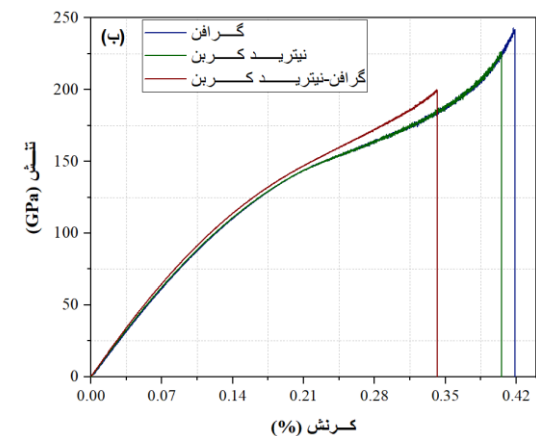
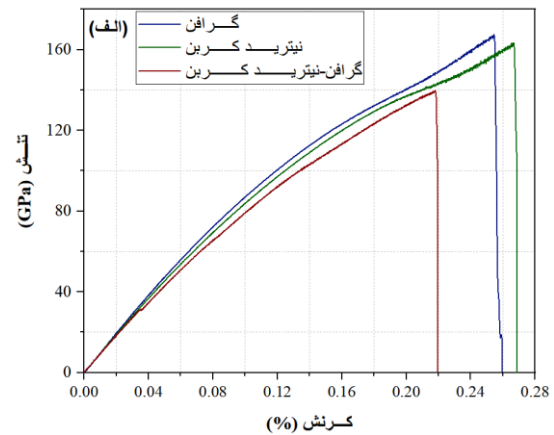
شکل ۲ (الف) نمایش راستای X و Y، (ب) نمایش فصل مشترک نانوساختار گرافن و نیتريد کربن

بررسی تأثیر 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 دهنده حالت‌های مختلف از حذف اتم‌های کربن و نیتروژن می‌باشد. شایان ذکر است که بیشتر اتم‌ها از فصل مشترک دو ساختار حذف شده است.

شکل (۵) نتایج به دست آمده از خواص مکانیکی مدول ینگ، 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 زیگزگ است. گزارش شده است. حذف ۱ اتم کربن مقدار مدول ینگ را به ۸۰۲/۲۱ و ۸۲۲/۹۵ گیگاپاسکال در راستای زیگزگ 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 به دست 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 زیگزگ و آرمچیر کاهش یافته است. همچنین مقدار کرنش شکست برای حذف ۱ اتم نیتروژن به ترتیب ۰/۲۰۲ و ۰/۲۳۱ درصد در راستای زیگزگ 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 ینگ، 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 ینگ، تنش و کرنش شکست برای ساختار ترکیبی گرافن - نیتريد کربن با حذف ۳ اتم نیتروژن در راستای زیگزگ 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

دادند که اگرچه تنش و کرنش شکست ساختار نیتريد کربن در جهت آرمچیر بالاتر از جهت زیگزگ می‌باشد، اما تغییرات مدول ینگ برای هر دو جهت بارگذاری ناچیز می‌باشد.



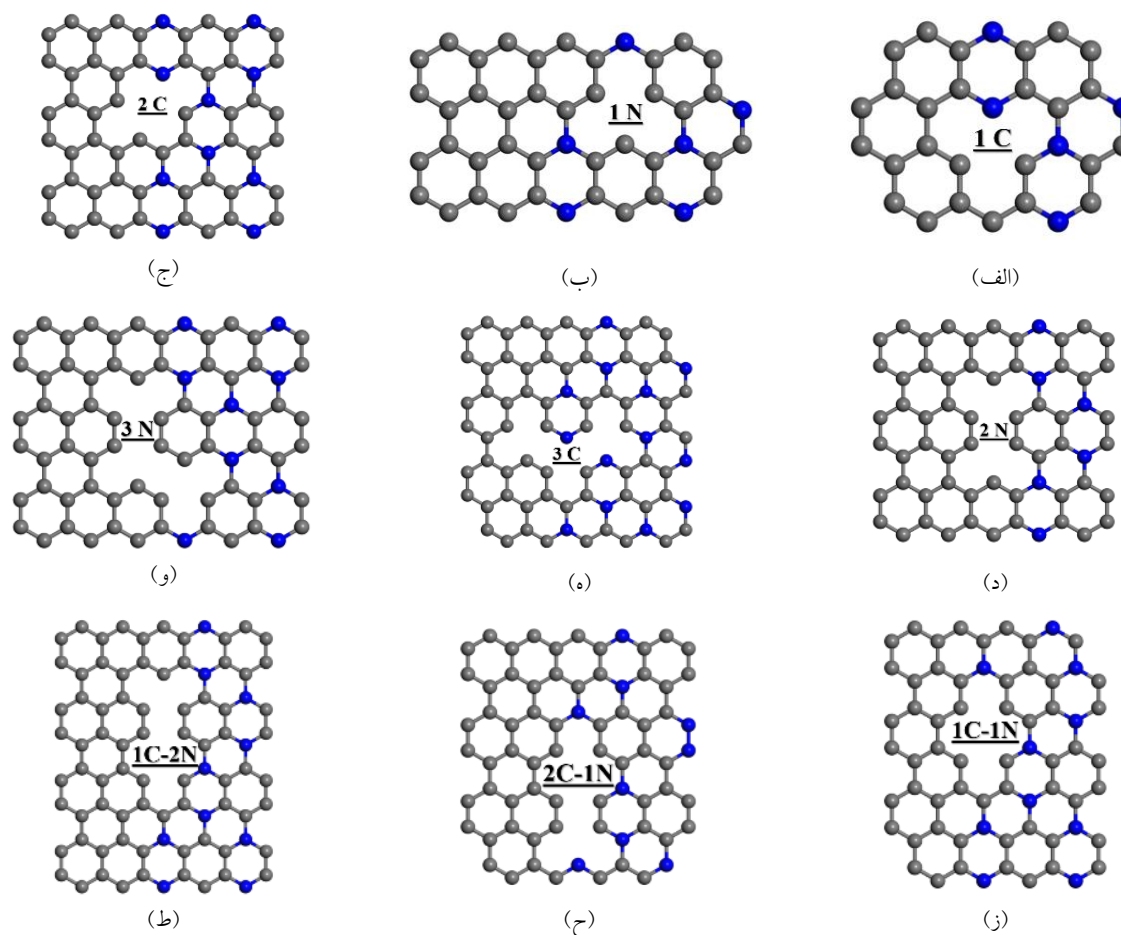
شکل ۳ تغییرات تنش - کرنش برای ساختارهای گرافن، نیتريد کربن و حالت ترکیبی آنها: (الف) جهت بارگذاری زیگزگ، (ب) جهت بارگذاری آرمچیر

جدول ۱ خواص مکانیکی مدول ینگ، تنش و کرنش شکست ساختارهای گرافن، نیتريد کربن و ترکیب آنها

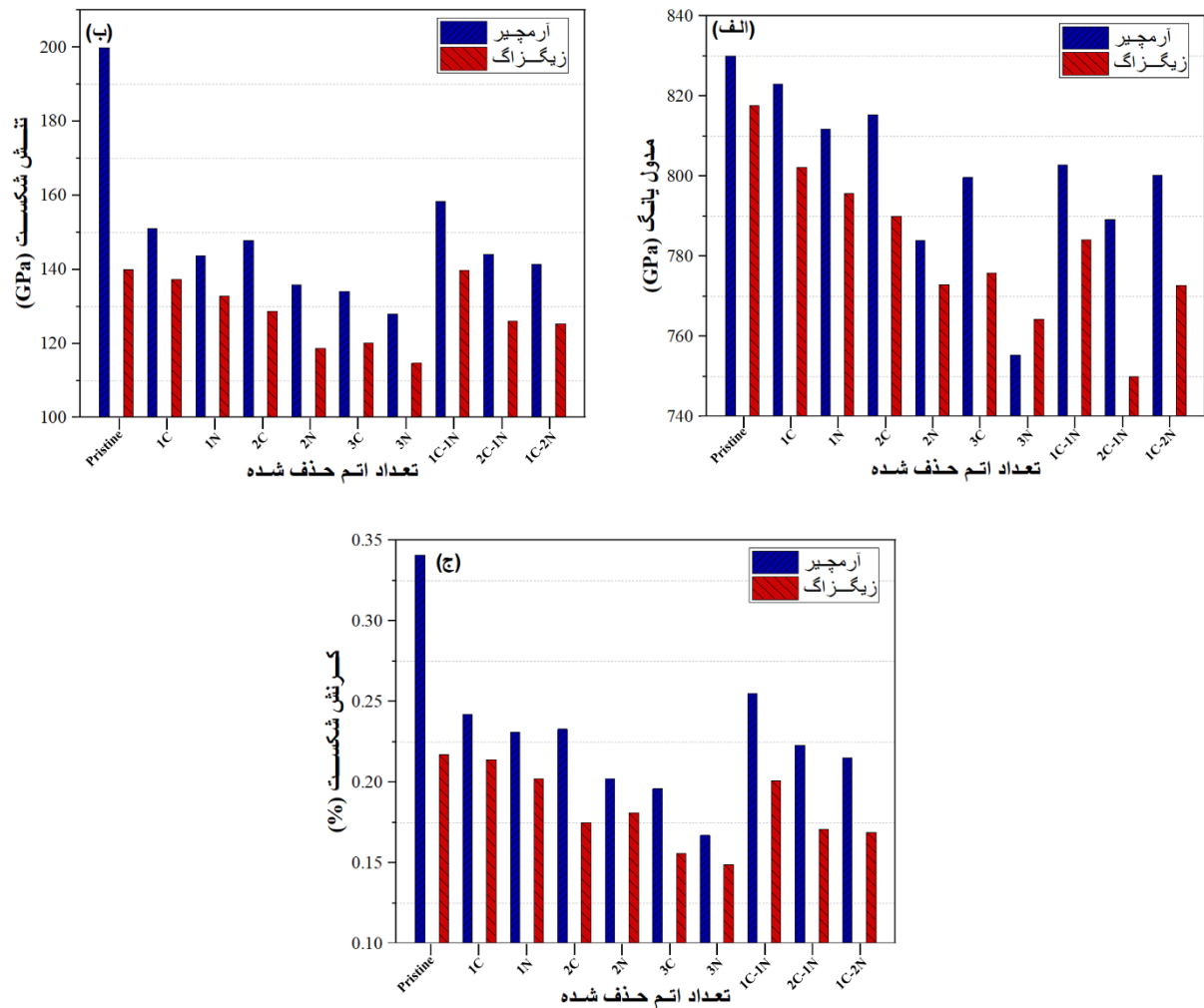
ساختار	جهت بارگذاری	مدول ینگ (GPa)	تنش شکست (GPa)	کرنش شکست (%)
گرافن	زیگزگ	۸۸۵/۰۵	۱۶۷/۵۱	۰/۲۵۴
	آرمچیر	۹۴۱/۳۴	۲۴۱/۸۱	۰/۴۱۸
نیتريد کربن	زیگزگ	۸۲۲/۸۴	۱۶۳/۲۱	۰/۲۶۵
	آرمچیر	۸۶۹/۳۵	۲۲۶/۴۶	۰/۴۰۵
گرافن - نیتريد کربن	زیگزگ	۸۱۷/۶۶	۱۳۹/۹۱	۰/۲۱۷
	آرمچیر	۸۳۰/۰۵	۱۹۹/۹۱	۰/۳۴۱

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 [29] به بررسی اثر حذف اتم‌های کربن در ساختار دوبعدی گرافن پرداختند. نتایج آن‌ها حاکی از آن است که حذف اتم‌های کربن اثر قابل توجه بر استحکام نهایی ساختار می‌گذارد. خواص مکانیکی ساختار زینک اکساید به وسیله آهنگری و همکاران مورد بررسی قرار گرفت [30]. 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.

بیشترین اثر را بر خواص مکانیکی مورد بررسی داشته است. برای این حالت (شکل ۴ - ح) مقدار مدول یانگ در راستای زیگزگ 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 آرمچر ۷۸۹/۲۳ گیگاپاسکال گزارش شده است. همچنین مقدار تنش و کرنش شکست در راستای زیگزگ به ترتیب ۹/۹۷ و ۲۱/۱۹ درصد کاهش یافته است. همچنین خواص مکانیکی تنش و کرنش شکست در راستای آرمچر به ترتیب ۱۴۴/۰۸ گیگاپاسکال و ۰/۲۲۳ درصد گزارش شده است. این روند کاهشی در مطالعات قبلی نیز قابل مشاهده می‌باشد. ترانگ و همکاران [28] به بررسی خواص مکانیکی نانوصفحات فسفر سیاه در حضور عیوب هندسی



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

بررسی نقص دایروی بر خواص مکانیکی ساختار

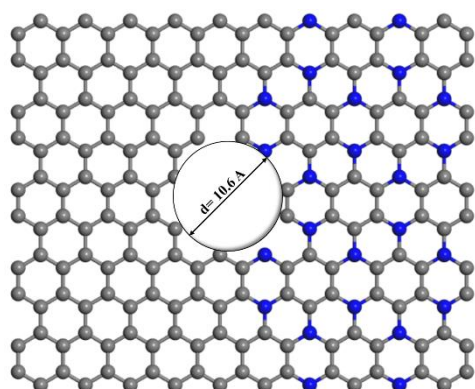
ترکیبی گرافن - نیتريد کربن

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

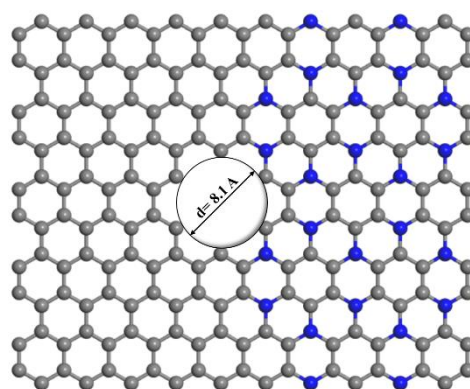
مکانیکی می‌باشد. شایان ذکر است که در این بخش نیز مقادیر خواص مکانیکی در راستای آرمچیر بالاتر از راستای زیگزاگ می‌باشد. با توجه به نتایج ارائه شده در شکل (۷) مقدار مدول یانگ از ۸۱۷/۶۶ گیگاپاسکال برای ساختار بدون نقص و در راستای زیگزاگ به ۶۴۹/۱۷ گیگاپاسکال در حضور نقص دایروی با قطر ۲۴/۲ آنگستروم کاهش یافته 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 به دست آمده است که نسبت به ساختار بدون نقص به ترتیب ۳۱/۱۹ و ۵۸/۰۶ درصد

کاشی در ساختار می‌شود. در مطالعه‌ای دیگر، عینعلی‌پور و همکاران به بررسی ساختار ترکیبی گرافن - نیتريد بور پرداختند [35]. نتایج آن‌ها نشان داد که حضور نقص دایروی در ساختار نیتريد بور اثر بیشتری بر خواص مکانیکی می‌گذارد. همچنین، افزایش تعداد نقص دایروی با قطر ثابت سبب کاهش مدول یانگ و تنش شکست ساختار ترکیبی گرافن - نیتريد بور می‌گردد. فرتاش و همکاران [19] 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 می‌گردد. از سویی دیگر، نتایج آن‌ها نشان داد که حضور نقص‌های هندسی در ساختار کاربید بور اثر بیشتر بر خواص مکانیکی می‌گذارد.

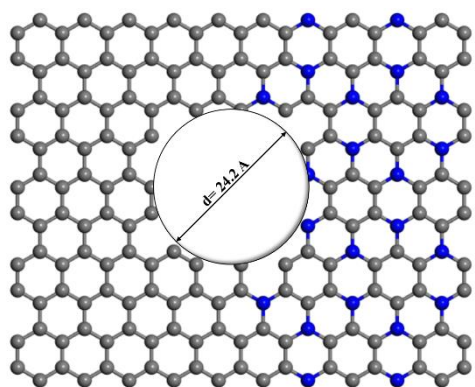
کاهش داشته است. مقادیر تنش و کرنش شکست برای این ساختار و در راستای آرمچیر به ترتیب $109/64$ گیگاپاسکال و $0/177$ درصد گزارش شده است. این نکته قابل توجه است که حذف تعداد زیادی از اتم‌ها در یک ساختار موجب می‌شود که پیوند بین اتم‌ها تضعیف شود و کاهش مقاومت ساختار را به همراه داشته باشد. از سویی دیگر، تمرکز تنش به عنوان عامل دیگری که بر استحکام نانوصفحات اثرگذار است، معرفی می‌گردد. زمانی که اتم‌های کربن و نیتروژن حذف می‌شوند، تمرکز تنش در اطراف نواحی خالی افزایش می‌یابد و با افزایش نرخ کرنش، ساختار از این قسمت‌ها گسیخته می‌شوند [31-33]. در تحقیقات انجام شده بر ساختارهای دوبعدی و بررسی اثر نقص‌های هندسی، نتایج مشابه گزارش شده است. شیرازی و همکاران [34] 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



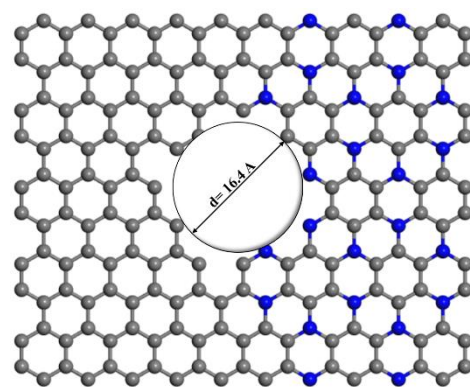
(ب)



(الف)

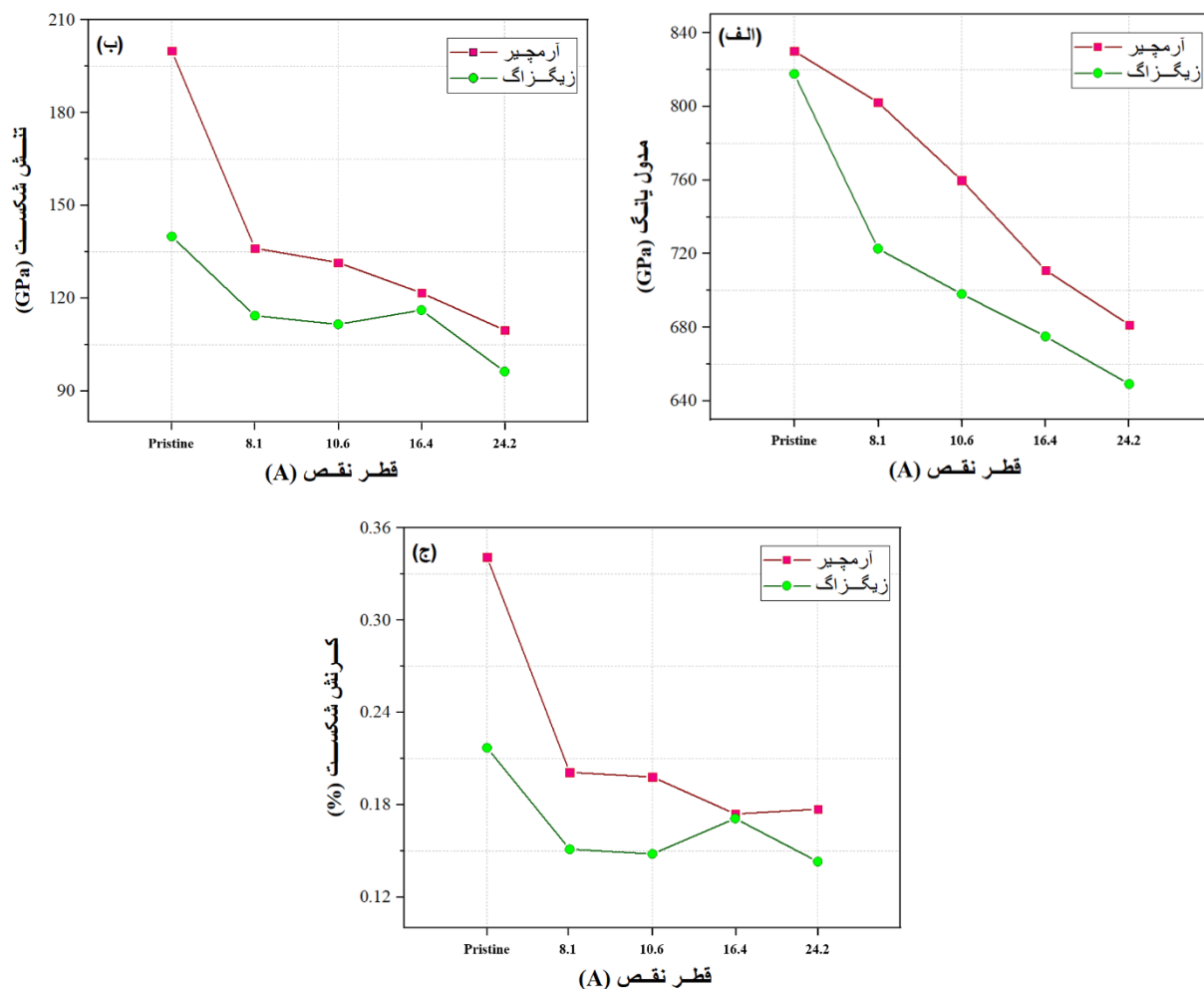


(د)



(ج)

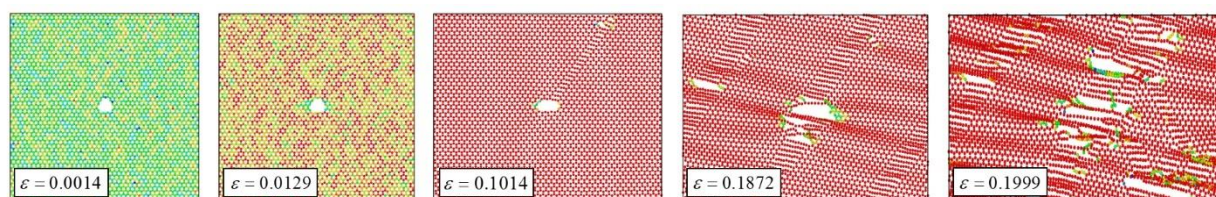
شکل ۶ حضور نقص دایروی در ساختار ترکیبی گرافن - نیتريد کربن با قطرهای (الف) $8/1$ ، (ب) $10/6$ ، (ج) $16/4$ ، (د) $24/2$ آنگستروم



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

جدول ۲ مقایسه نتایج مطالعات گذشته و مطالعه پیش رو بر خواص مکانیکی نانو مواد دوبعدی

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 ۷۱۱/۰۴ گیگاپاسکال	مطالعه حاضر
نیتريد کربن - بون نیتريد	ترسوف	آرمچیر	دایره (قطر ۱۵ آنگستروم)	۷×۶ نانومتر مربع	مدول یانگ ۵۲/۸۹ گیگاپاسکال	[36]
نیتريد کربن - کاربید بور	ترسوف	آرمچیر	دایره (قطر ۱۵ آنگستروم)	۵۱×۵۹ نانومتر مربع	مدول یانگ ۶۸۱ گیگاپاسکال	[19]
گرافن - نیتريد کربن	ترسوف	آرمچیر	حذف اتم (۱ اتم نیتروژن)	۱۰×۱۰ نانومتر مربع	کرنش شکست ۰/۲۲۱	مطالعه حاضر
گرافن - نیتريد بور	ترسوف	آرمچیر	حذف اتم (۱ اتم نیتروژن)	۱۵×۷ نانومتر مربع	کرنش شکست ۰/۱۲۹	[20]
نیتريد کربن - کاربید بور	ترسوف	آرمچیر	حذف اتم (۵ اتم نیتروژن)	۳۰×۱۴ نانومتر مربع	کرنش شکست ۰/۱۸۱	[21]



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

حالت ترکیبی آنها است. همچنین، نتایج به دست 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 به دست 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 به دست 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.

واژه‌نامه

پیشنهادی نویسنده	واژه لاتین	پیشنهادی ویراستار
نانوکامپوزیت	nanocomposite	مواد مرکب نانویی
کربن	carbon	
الکترونیک	electronic	
گرافن	graphene	

برای درک بهتر نتایج به دست آمده از این مطالعه و نتایج به دست آمده در مطالعات قبلی، جدول (۲) ارائه شده است. 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 [36-38].

جمع‌بندی

خواص مکانیکی قابل توجه ساختارهای دوبعدی باعث شده است که نظر بسیاری از محققان را به خود جلب کند. 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 دوبعدی گرافن، نیتريد کربن و حالت ترکیبی آنها با استفاده از روش شبیه‌سازی 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

	Zigzag	زیگززاگ
	Kelvin	کلوین
	Tersoff	ترسوف
	Picosecond	پیکوثانیه

تقدیر و تشکر

	Beryllium Oxide	برلیوم اکساید
	Boron Carbide	کاربید بور
	Carbon Nitride	نیتريد کربن
	Aluminum Nitride	نیتريد آلومینیوم
پیمون یانگ	Young's Modulus	مدول یانگ
	Silicon Carbide	کاربید سیلیکون
صندلی دسته‌دار	Armchair	آرم‌چیر

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*, vol. 124, pp. 108956, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2022.108956>
- [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, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2022.108956>
- [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*, vol. 101, pp. 11-18, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2019.107555>
- [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*, vol. 14, no. 6, pp. 556, 2024. <https://doi.org/10.3390/nano14060556>
- [5] M. Shishir, M. Raja, A. Tabarraei, "Investigation of fracture and mechanical properties of monolayer C₃N using molecular dynamic simulations," *Mechanics of Materials*, vol. 160, pp. 103895, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2021.103895>
- [6] S. Sadeghzadeh, "Effects of vacancies and divacancies on the failure of C₃N nanosheets," *Diamond & Related Materials*, vol. 89, pp. 257-265, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2018.09.018>
- [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, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2018.09.018>
- [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*, vol. 220, pp. 108996, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2021.108996>

- [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*, vol. 186, pp. 110047, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110047>
- [10] S. Lee, A. Esfandiar, A. Rajabpour, "Mechanical behaviors of titanium nitride and carbide MXenes: A molecular dynamics study," *Applied Surface Science*, p. 150633, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.150633>
- [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*, vol. 192, p. 110345, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110345>
- [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*, vol. 112, p. 117845, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2017.09.005>
- [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, 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*, vol. 239, p. 122107, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2019.122107>
- [15] M. Beynaghi, S. Rahnema, 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*, vol. 36, no.2, pp. 29-46, 2024. (In Persian) <https://doi.org/10.22067/jacsm.2023.83323.1192>
- [16] Z. Cong, S. Lee, "Study of mechanical behavior of BNNT-reinforced aluminum composites using molecular dynamics simulations," *Composite Structures*, vol. 194, pp. 80-86, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2018.03.103>
- [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*, p. 113205, 2017. <https://doi.org/10.1002/adma.201605625>
- [18] B. Mortazavi, "Ultra high stiffness and thermal conductivity of graphene like C₃N," *Carbon*, vol. 118, pp. 11-20, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2017.03.029>
- [19] A. Mayelifartash, M. A. Abdol, and 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*, vol. 126, no. 11, p. 905, 2020. <https://doi.org/10.1007/s00339-020-04088-y>
- [20] C. Ding, Y. Dai, F. Yang, and X. Chu, "A molecular dynamics study of the mechanical properties of the graphene/hexagonal boron nitride planar heterojunction for RRAM," *Materials Today Communications*, vol. 26, p. 101653, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.mtcomm.2020.101653>
- [21] A. E. Senturk, "Exploring the interfacial thermal resistance and mechanical properties of hybrid C₃N-BC₃," *Applied Physics A*, vol. 128, no. 8, p. 638, 2022. <https://doi.org/10.1007/s00339-022-05782-9>

- [22] A. Albooyeh, A. Dadrasi, and M. Razavikia, "Investigating the effects 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*, vol. 34, no. 27, pp. 37–48, 2022. <https://dx.doi.org/10.22067/jacsm.2022.74654.1087>
- [23] J. Tersoff, "Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems," *Physical Review B*, vol. 39, no. 8, p. 5566, 1989. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.39.5566>
- [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, 2019. (In Persian)
- [25] A. Shirazi, "Molecular dynamics investigation of mechanical properties of single-layer phagraphene," *Frontiers of Structural and Civil Engineering*, vol. 13, pp. 495-503, 2019. <https://doi.org/10.1007/s11709-018-0492-4>
- [26] S. Zhao and J. Xue, "Mechanical properties of hybrid graphene and hexagonal boron nitride sheets as revealed by molecular dynamic simulations," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 46, no. 13, p. 135303, 2013. <https://doi.org/10.1088/0022-3727/46/13/135303>
- [27] B. Bagheri, M. Z. Dehaghani, M. E. Safa, P. Zarrintaj, A. H. Mashhadzadeh, M. R. Ganjali, and M. R. Saeb, "Fracture fingerprint of polycrystalline C3N nanosheets: theoretical basis," *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, vol. 106, p. 107899, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2021.107899>
- [28] D. T. Nguyen, M. Q. Le, V. T. Nguyen, and T. L. Bui, "Effects of various defects on the mechanical properties of black phosphorene," *Superlattices and Microstructures*, vol. 112, pp. 186–199, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2017.09.021>
- [29] Y. Fu, T. Ragab, and C. Basaran, "The effect of Stone-Wales defects on the mechanical behavior of graphene nano-ribbons," *Computational Materials Science*, vol. 124, pp. 142–150, 2016. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.07.022>
- [30] 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, pp. 26–34, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2019.04.003>
- [31] 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," *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, vol. 107, p. 107980, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2021.107980>
- [32] S. 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*, vol. 30, no. 1, 2019.
- [33] S. Sadeghzadeh, L. Badrinezhad, and K. E. Eshkalak, "Mechanical properties of C3N-BN hybrid nanosheets: Insights from molecular dynamics simulations," *Diamond and Related Materials*, vol. 147, p. 111323, 2024. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2024.111323>
- [34] 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," *Computational Materials Science*, vol. 147, pp. 316–

- 321, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.01.058>
- [35] K. E. Eshkalak, S. Sadeghzadeh, and M. Jalaly, "Mechanical properties of defective hybrid graphene-boron nitride nanosheets: A molecular dynamics study," *Computational Materials Science*, vol. 149, pp. 170–181, 2018.
- [36] S. Sadeghzadeh, L. Badrinezhad, and K. E. Eshkalak, "Mechanical properties of C3N-BN hybrid nanosheets: Insights from molecular dynamics simulations," *Diamond and Related Materials*, vol. 147, p. 111323, 2024. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2024.111323>
- [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*, vol. 37, no. 3, pp. 43-58, 2025. <https://doi.org/10.22067/jacsm.2024.89435.1284>
- [38] B. Bagheri, M. Z. Dehaghani, Z. Karami, A. Salmankhani, Y. Rostamiyan, P. Zarrintaj, A. H. Mashhadzadeh, and M. R. Saeb, "Correlation between surface topological defects and fracture mechanism of γ -graphyne-like boron nitride nanosheets," *Computational Materials Science*, vol. 188, p. 110152, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110152>
- [39] L. Fan, W. Yao, "Effects of vacancy defects on the mechanical properties of graphene/hexagonal BN superlattice nanoribbons," *New Carbon Materials*, vol. 35, no. 2, pp. 165-175, 2020. [https://doi.org/10.1016/S1872-5805\(20\)60482-6](https://doi.org/10.1016/S1872-5805(20)60482-6)