بررسی رفتار مکانیکی نانو لوله فسفرین بدون چروک تحت بارگذاری محوری

هومن اسفندیاری[۱] ، علیرضا ستوده[۲*]

(تاریخ دریافت:۱۳۹۵/۱۱/۱۵، ش.ص ۱۱۷-۱۲۴ ، تاریخ پذیرش:۱۳۹۶/۰۲/۱۸)

چکیده

اخیرا، نانولوله‌های فسفرین مانند نانو لوله‌های کربنی، به دلیل داشتن خواص مکانیکی، حرارتی و الکترونی مناسب بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. بررسی رفتار مکانیکی و خواص موادی این نانو سازه‌ها از اهمیت بسیاری برخوردار است. بنابراین در این پژوهش، ابتدا رفتار کششی و کمانشی نانو لوله فسفرین به روش دینامیک مولکولی شبیه سازی شده و اثرات پارامترهای هندسی بر روی رفتار مکانیکی ماده مطالعه گردیده است. پس از بررسی فوق و تایید نتایج، استحکام کششی و فشاری نانو لوله گزارش شده است. بررسی اثر قطر بر روی رفتار کششی و همچنین تاثیر ضریب منظری بر روی رفتار کمانشی نانو لوله فسفرین، نشان‌دهنده افزایش استحکام کششی ماده با افزایش قطر و کاهش استحکام فشاری با افزایش نسبت منظری می‌باشد. در مرحله بعد، به عنوان اولین تحقیق در این زمینه، اثر نقص بر روی رفتار کششی و فشاری نانو لوله فسفرین مسطح ارزیابی شده است. نتایج نشان می‌دهد که وجود نقص در نانو لوله فسفرین استحکام کششی و کمانشی را به صورت قابل ملاحظه‌ای کاهش می‌دهد. همچنین مشاهده می‌شود که رفتار کمانشی این ماده به وجود نقص نسبت به رفتار کششی حساس‌تر می‌باشد به طوری که با حذف تنها یک اتم، استحکام فشاری این ماده تا ۱۳/۵ درصد و با وجود تنها ۲ درصد نقص در ساختار این ماده، استحکام کششی آن ۴/۳ درصد افت پیدا می‌کند.

واژه‌های کلیدی: نانو لوله فسفرین بدون چروک، رفتار کششی و کمانشی، اثرات نقص، دینامیک مولکولی.

Archive of SID

[۱]- دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی مکانیک و هوافضا، دانشگاه صنعتی شیراز.

[۲]- استاد دانشکده مهندسی مکانیک و هوافضا، دانشگاه صنعتی شیراز.

[*]- نویسنده مسئول مقاله: setoodeh@sutech.ac.ir

www.SID.ir

پیشگفتار

مواد دو بعدی به دلیل داشتن خواص منحصر به فرد، در سال‌های اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند[۵-۱]. از اولین مواد دو بعدی می‌توان به گرافن اشاره کرد که دارای خواص مکانیکی و حرارتی مناسبی است[۲,۵]. فسفرین[۳] یکی از مواد دو بعدی نیمه رسانا می‌باشد که به دلیل داشتن خواص الکترونی بسیار جالب در ساخت ترانزیستورها، سنسورهای گازی، سلول‌های خورشیدی و باتری‌ها کاربرد فراوان دارد[۹-۶]. تغییر شکل در ساختار اتمی مواد دو بعدی یکی از عواملی است که بر روی خواص فیزیکی این مواد تاثیر گذار است. فی و یانگ[۱۰]، در سال ۲۰۱۴ به مطالعه اثرات کرنش بر روی خواص الکترونی نانو صفحه فسفرین پرداختند. نتایج تحقیق آن‌ها نشان داد که با افزایش کرنش در نانو صفحه فسفرین، خواص الکترونی آن افت پیدا می‌کند. وانگ و همکاران[۱۱]، در سال ۲۰۱۵ به بررسی اثرات کمانش بر روی خواص الکترونی نانو صفحه فسفرین پرداختند. نتایج این تحقیق نشان داد که با ایجاد کمانش در نانو صفحه فسفرین، خواص الکترونی آن افت پیدا می‌کند. نتایج این تحقیقات نشان می‌دهد که مطالعه بر روی خواص مکانیکی ماده فسفرین اهمیت پیدا می‌کند. وی و همکاران[۱۲] در سال ۲۰۱۴ با مطالعه بر روی خواص مکانیکی نانو صفحه فسفرین به این نتیجه رسیدند که این ماده دارای انعطاف پذیری بالایی است. دما، یکی از عوامل مهمی است که بر روی خواص فیزیکی مواد دو بعدی تاثیر زیادی دارد. دانگ و همکاران[۱۳,۱۴]، با بررسی اثرات دما بر روی خواص مکانیکی نانو صفحه فسفرین به این نتیجه رسیدند که با افزایش دما، خواص مکانیکی این ماده افت پیدا می‌کند. یکی از مشکلات ماده فسفرین این است که در مجاورت با هوا، ناپایدار است. از این رو کان و همکاران[۱۵] در سال ۲۰۱۶ به بررسی رفتار کمانشی نانو لوله فسفرین با پوشش کربن پرداختند. نتایج این تحقیق نشان داد که با قرار دادن نانو لوله فسفرین در درون نانو لوله کربن، استحکام فشاری این ماده افزایش پیدا می‌کند. فنگ و همکاران[۱۶] در سال ۲۰۱۶ به بررسی رفتار کششی و کمانشی نانو لوله فسفرین پرداختند. نتایج نشان داد که نانو لوله فسفرین در جهت آرمچیر[۴] استحکام کششی و کمانشی بهتری دارد. یکی از عوامل دیگر که بر روی خواص مکانیکی، حرارتی و الکترونی مواد دو بعدی تاثیر گذار است، وجود نقص در این گونه مواد می‌باشد. تولید مواد در ابعاد میکرو و نانو به صورت بدون نقص تقریبا غیر ممکن است و گونه‌های متنوعی از نقص در ساختار مواد می‌تواند ظاهر شود. ژن و همکاران[۱۷] در سال ۲۰۱۶ به بررسی اثر نقص بر روی رفتار کششی نانو صفحه فسفرین پرداختند. در نتایج این تحقیق مشاهده شد که با افزایش نقص، استحکام کششی نانو صفحه فسفرین کاهش پیدا می‌کند. باید به این نکته اشاره کرد که نانو لوله‌ها از نانو صفحه‌ها به‌وجود می‌آیند و به همین علت متداول است که نانو لوله‌ها را مواد دو بعدی خطاب کنند.

بررسی تحقیقات موجود نشان می‌دهد، تاکنون تحقیق خاصی بر روی خواص مکانیکی نانو لوله فسفرین با وجود نقص انجام نشده است. از این رو در این پژوهش به بررسی اثر نقص بر روی رفتار کششی و کمانشی نانو لوله فسفرین پرداخته شده است. شبیه سازی در این تحقیق به روش دینامیک مولکولی[۵] انجام شده است. دینامیک مولکولی یک روش تعینی دقیق می‌باشد که در شبیه سازی سیستم‌ها با ابعاد نانو بسیار متداول است.

شبیه سازی دینامیک مولکولی

فسفر، یکی از اعضای غیر فلزی چند ظرفیتی گروه نیتروژن می‌باشد. فسفر سفید، قرمز و سیاه سه آلوتروپ مهم این عنصر هستند. فسفر سیاه از حرارت دادن فسفر سفید زیر فشار بالا به‌دست می‌آید. از نگاه ترمودینامیکی، فسفر سیاه شکل پایدار فسفر در دمای اتاق است. فسفر سیاه تک لایه را فسفرین گویند. فسفرین، یک ماده دو بعدی نیمه رسانا می‌باشد که طول پیوند اتمی آن ۰/۲۴۵ نانو متر است. فسفرین، ساختار شبکه‌ای شش ضلعی شبیه به کربن دارد. شکل ۱ نانو لوله فسفرین را در جهت

[3]- Phosphorene

[4]- armchair

[5]- Molecular Dynamics

Archive of SID

www.SID.ir

زیگزاگ[6] نشان می‌دهد. در این شکل اتم‌های ماده فسفرین مسطح فرض شده‌اند که هر اتم با سه اتم دیگر دارای پیوند کوالانسی است. دینامیک مولکولی، یک روش تعینی است. به این مفهوم که حالت سیستم در هر زمان آتی را می‌توان از حالت فعلی آن پیش‌بینی کرد. در این روش با اعمال معادلات حرکت نیوتن، مجموعه‌ای از موقعیت‌های اتمی به صورت پی‌درپی بدست می‌آید. در یک شبیه‌سازی به روش دینامیک مولکولی، رفتار دینامیکی واقعی سیستم محاسبه می‌شود که با استفاده از آن می‌توان در یک بازه زمانی خاص، خواص سیستم را محاسبه کرد. در این روش فرض می‌شود که انرژی کل موجود در هر مجموعه اتمی به شرط آن‌که تغییری از خارج بر آن وارد نشود، ثابت می‌ماند. این انرژی شامل دو بخش کلی پتانسیل و جنبشی است. با فرض ثابت بودن جرم مولکول‌ها انرژی پتانسیل تابع موقعیت و انرژی جنبشی تابع اندازه حرکت اتم‌ها است[۱۸]. به طور کلی می‌توان گفت، روش‌هایی که با پتانسیل‌های بین اتمی سروکار دارند، به عنوان روش‌های دینامیک مولکولی شناخته می‌شوند. در این روش از حرکت الکترون‌ها صرف نظر می‌شود و انرژی سیستم صرفا براساس مکان هسته اتم‌ها به‌دست می‌آید. این روش در بسیاری از موارد رفتار سیستم را با دقت روش مکانیک کوانتومی شبیه سازی می‌کند. بنابراین، یکی از بهترین روش‌ها برای شبیه سازی سیستم‌ها با تعداد اتم بالا روش دینامیک مولکولی است. در این روش حرکت اتم‌ها بر اساس نیروی مبادله شده بین آن‌ها به‌دست می‌آید. نیروهای وارد شده به هر اتم در یک سیستم اتمی، به تابع پتانسیل آن سیستم بستگی دارد. تابع پتانسیل یک سیستم N ذره‌ای توصیف می‌کند، چگونه انرژی پتانسیل این سیستم به مکان اتم‌ها وابسته است. نیروهای وارد شده به هر ذره در شبیه سازی‌های دینامیک مولکولی از رابطه ۱ به‌دست می‌آیند.

$$F_i = \frac{\partial U(r_1, r_2, ..., r_n)}{\partial r_i} \qquad (۱)$$

در این رابطه U تابع پتانسیل سیستم و r فاصله بین اتم‌ها می‌باشد. همان‌گونه که از رابطه بالا مشخص است، تابع پتانسیل یک سیستم به فاصله بین اتم‌ها وابسته است. با مشتق گرفتن از تابع پتانسیل نسبت به فاصله بین اتم‌ها، نیروی وارد شده به هراتم به‌دست می‌آید.

در این پژوهش از نرم افزار لمپس[7] و تابع پتانسیل S-W برای شبیه سازی سیستم استفاده شده است. برای هر سه جهت، شرایط مرزی متناوب[8] به‌کار گرفته شده است. دمای سیستم T=0 K ، گام زمانی ۰/۵ fs و ضخامت ماده فسفرین ۰/۵۲۴ نانو متر لحاظ شده است. در این پژوهش رفتار کششی و کمانشی نانو لوله فسفرین در جهت زیگزاگ مورد بررسی قرار گرفته است.

نتایج و بحث

کشش

شکل ۲، رفتار کششی نانو لوله فسفرین (۲۰،۰) را نشان می‌دهد. در این شکل نتیجه حاصل از پژوهش فنگ و همکاران[۱۶] با نتیجه حاصل از این تحقیق جهت اعتبار سنجی، مقایسه شده است. تنش نهایی کششی در پژوهش فنگ و همکاران ۳/۲۰۶ GPa و در این تحقیق ۳/۲ GPa به‌دست آمده است. کرنش نهایی شکست برای هر دو پژوهش ۰/۳ به‌دست آمده است.

همان‌گونه که از شکل مشخص است رفتار ماده فسفرین الاستیک غیر خطی می‌باشد. ناحیه الاستیک خطی برای این ماده بسیار کوچک می‌باشد و نمودار تنش-کرنش خیلی سریع وارد ناحیه الاستیک غیر خطی می‌شود.

در شکل ۳، اثرات نقص بر روی رفتار کششی نانو لوله فسفرین (۲۰،۰) نشان داده شده است. همان‌گونه که از شکل مشخص است، با افزایش درصد نقص، استحکام نهایی کششی ۴/۳ درصد کاهش پیدا کرده است. وجود نقص بر روی کرنش نهایی کششی تاثیر چندانی نداشته است. با

[6]- zigzag

[7] -Lammps

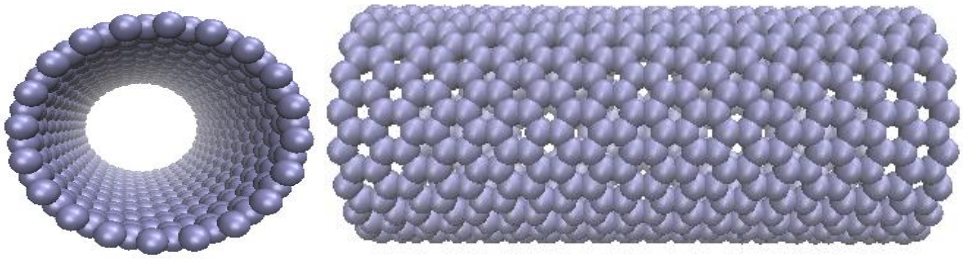
[8]- Periodic Boundary Condition

Archive of SID

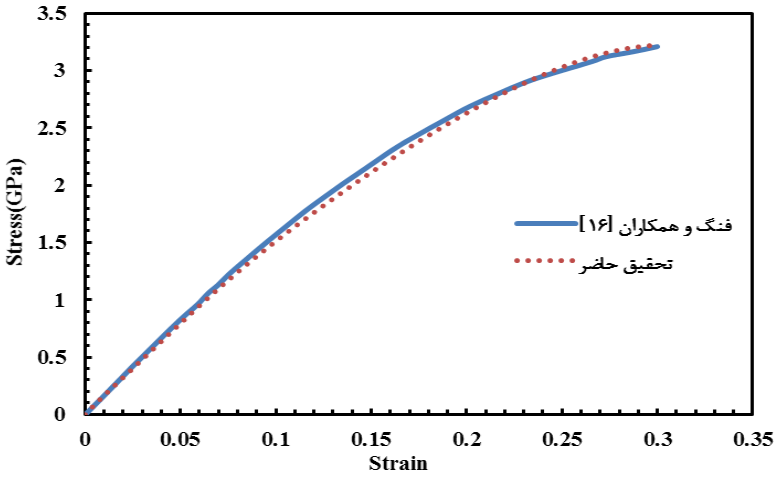
www.SID.ir

وجود ۲ درصد نقص، کرنش نهایی کششی تنها ۰/۴ درصد افت پیدا کرده است.

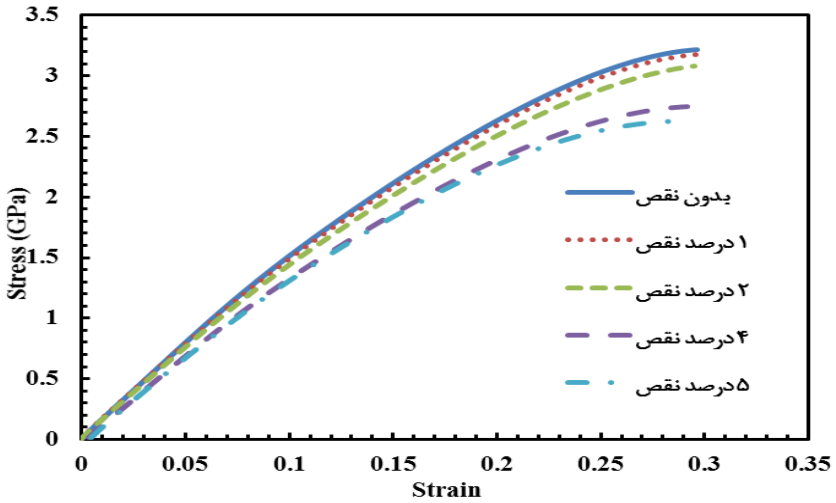
جدول ۱ میزان افت تنش نهایی کششی را در نقص‌های مختلف نشان می‌دهد.



شکل ۱- نانو لوله فسفرین بدون چروک زیگزاگ در دو نمای طولی و عرضی



شکل ۲- رفتار کششی نانو لوله فسفرین (۲۰,۰)



شکل ۳- اثر نقص بر روی رفتار کششی نانو لوله فسفرین(۲۰,۰)

www.SID.ir

جدول۱- میزان افت تنش در رفتار کششی نانو لوله فسفرین در نقص‌های مختلف

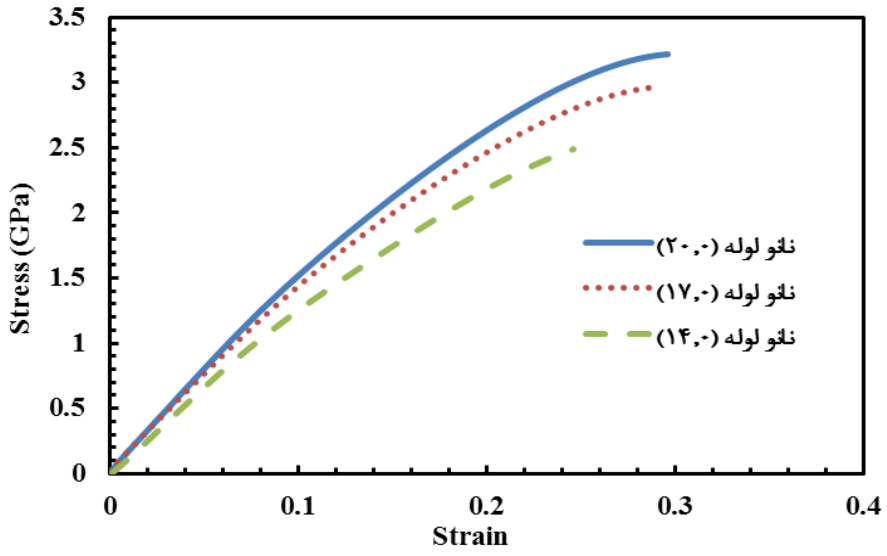
	استحکام نهایی کششی (GPa)	میزان افت استحکام نهایی کششی(درصد)
بدون نقص	۳/۲۱۹	۰
۱درصد نقص	۳/۱۷۴	۱/۴
۲درصد نقص	۳/۰۸	۴/۳
۴درصد نقص	۲/۷۴۶	۱۴/۵
۵درصد نقص	۲/۶	۱۹

شکل ۴، رفتار کششی نانو لوله فسفرین را در قطرهای مختلف نشان می‌دهد. همان‌گونه که از شکل مشخص است، با افزایش قطر نانو لوله، تنش و کرنش نهایی کششی افزایش پیدا می‌کنند. با افزایش ۰/۸ نانو متر قطر نانو لوله، استحکام نهایی کششی ۲۲ درصد و کرنش نهایی ۱۷ درصد افزایش خواهند داشت. با افزایش ۰/۴ نانو متر قطر نانو لوله، استحکام نهایی کششی ۱۵ درصد و کرنش نهایی کششی ۱۷ درصد افزایش پیدا کرده‌اند. همان‌طور که از نتایج مشخص است، قطر نانو لوله و نقص تاثیر زیادی بر روی رفتار کششی دارند.

کمانش

جدول شماره ۲ رفتار کمانشی نانو لوله فسفرین (۲۱,۰) با ضریب منظری(L/d) ۸ را بیان می‌کند. در این جدول نتایج حاصل از پژوهش کان و همکاران [۱۵] با نتایج حاصل از این پژوهش، جهت اعتبار سنجی، مقایسه شده است.

شکل ۵ اثرات نقص بر روی رفتار کمانشی نانو لوله فسفرین (۲۱,۰) را نشان می‌دهد. وجود نقص، تنش و کرنش نهایی فشاری را کاهش می‌دهد. رفتار کمانشی نانولوله فسفرین به وجود نقص بسیار حساس است. با نبود تنها یک اتم، تنش نهایی فشاری ۱۳/۵ درصد و کرنش نهایی فشاری ۱۰/۵ درصد کاهش پیدا کرده است.



شکل۴- اثر قطر بر روی رفتار کششی نانو لوله فسفرین

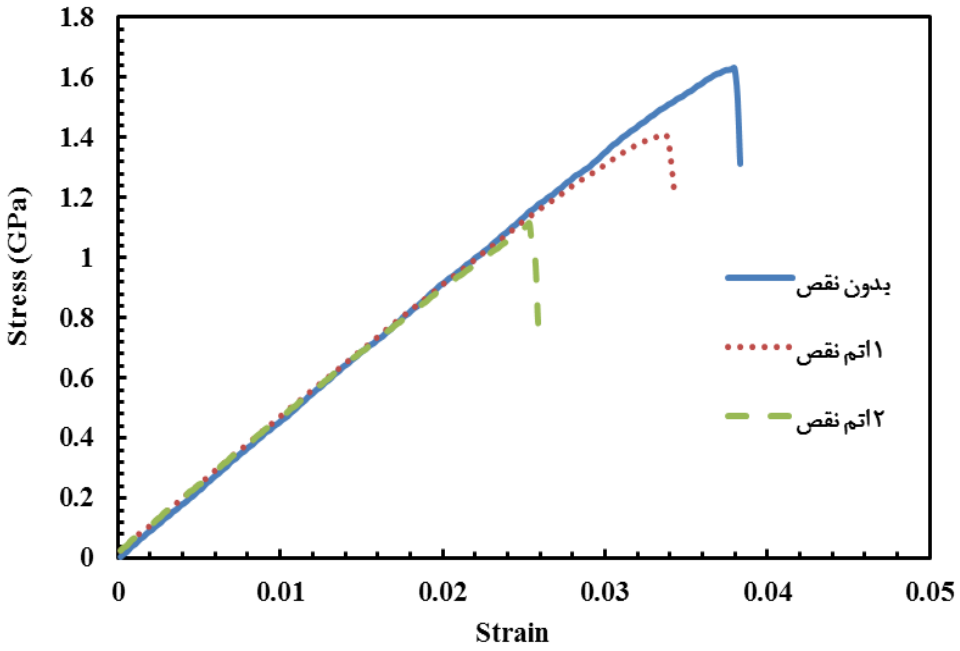
Archive of SID

www.SID.ir

نسبت منظری یا همان نسبت طول به قطر، یکی از عواملی است که روی رفتار کمانشی نانو لوله تاثیر زیادی دارد. شکل ۶ رفتار کمانشی نانو لوله فسفرین را در دو ضریب منظری متفاوت نشان می‌دهد. همان‌گونه که از شکل مشخص است، با افزایش ضریب منظری، تنش و کرنش نهایی فشاری افت پیدا می‌کنند. برای ضریب منظری L/d=۶ تنش نهایی فشاری ۲/۳۹ GPa و کرنش نهایی ۰/۰۵ می‌باشد. همچنین برای ضریب منظری L/*d*=۸ تنش نهایی فشاری ۱/۶۳ GPa و کرنش نهایی ۰/۰۳۸ حاصل شده است. از آنجا که ماده فسفرین در مقایسه با ماده‌ای مثل کربن، نسبتا ضعیف است، استحکام فشاری آن در نسبت‌های منظری بالا بسیار افت پیدا می‌کند.

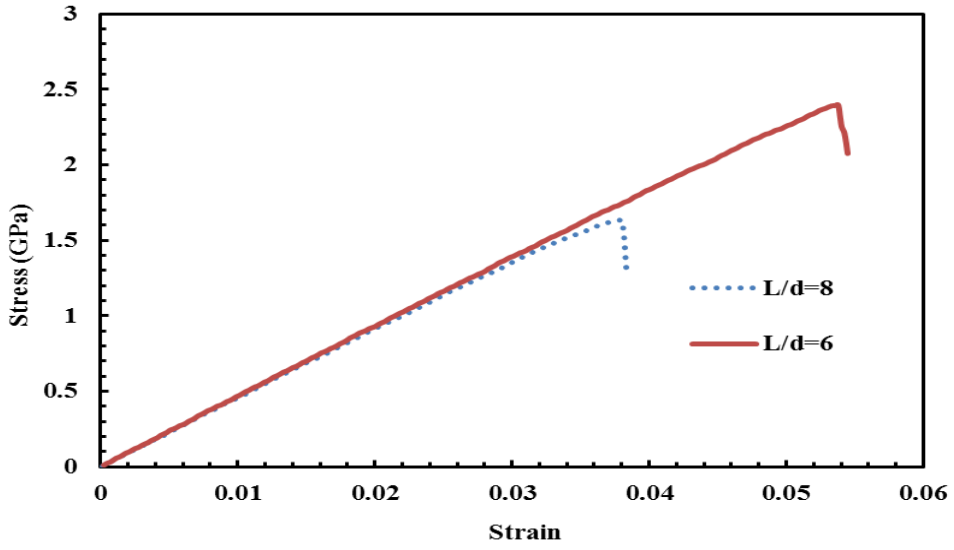
جدول۲- خواص کمانشی نانو لوله فسفرین

	تنش نهایی فشاری(GPa)	کرنش نهایی فشاری
کان و همکاران [۱۵]	۱/۶۱	۰/۰۴
تحقیق حاضر	۱/۶۴	۰/۰۳۸



شکل۵- اثر نقص بر روی رفتار کمانشی نانو لوله فسفرین(۲۱,۰)

www.SID.ir



شکل۶- تاثیر ضریب منظری بر روی رفتار کمانشی نانو لوله فسفرین

نتیجه‌گیری

در ادامه نتایج مهم استخراج شده در این مقاله گزارش شده است.

- نقص در نانو لوله فسفرین، استحکام کششی و کمانشی را به شدت کاهش می‌دهد.
- اثر نقص بر روی کرنش نهایی کششی نانو لوله فسفرین بسیار ناچیز است.
- رفتار کمانشی نانو لوله فسفرین به وجود نقص بسیار حساس است. با نقص تنها یک اتم، تنش و کرنش نهایی فشاری، به شدت کاهش پیدا می‌کنند.
- با افزایش قطر نانو لوله، استحکام نهایی کششی افزایش پیدا می‌کند.
- ضریب منظری بر روی رفتار کمانشی نانو لوله فسفرین تاثیر چشم‌گیری دارد. با افزایش ضریب منظری، تنش نهایی فشاری به شدت کاهش پیدا می‌کند.

در انتها، همان‌گونه که از نتایج مشخص است، رفتار مکانیکی نانو لوله فسفرین علی رغم خواص مکانیکی بسیار مناسب، به وجود نقص بسیار حساس می‌باشد. در تولید این گونه مواد باید روش‌هایی به‌کار گرفته شود که نقص در آن‌ها به حداقل برسد. مخصوصا برای زمانی که قرار است این مواد تحت فشار باشند؛ چون عدم وجود تنها یک اتم می‌تواند، تاثیر زیادی بر روی رفتار کمانشی و پایداری آن‌ها داشته باشد.

Archive of SID

References:

1-K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, and A.A. Firsov, "Electric field effect in atomically thin carbon films", Science, Vol.306, pp.666-669, 2004.

2-C. Soldano, A. Mahmood, and E. Dujardin, "Production, properties and potential of graphen", Carbon, Vol.48, pp.2127-2150, 2010.

www.SID.ir

3-R. Mas-Balleste, C. Gomes-Navaro, J. Gomes-Herrero, and F. Zamora,"2D materials to graphene and beyond", Nanoscale, Vol.3, pp.20-30, 2011.

4-S.Z. Butler, S.M. Hollen, L. Cao, and Y. Cui,"Progress challenges and opportunities in two dimensional material beyond graphene", ACS Nano, Vol.7, pp.2898-926, 2013.

5-S. Zhu, Y. Hung, and T. Li, "Exteremely compliant and highly stretchable patterned graphene", Appl.Phys.Lett, Vol.104, pp.151-173, 2014.

6-M. Buscema, D.J. Groenendijk, G.A. Steele, H.S.J. Van der zant, and A. Castellanos-Gomes, "Photovoltaic effrct in few-layer black Phosphorus PN junctions defined by local electrostatic gating" ,Nature communications, Vol.5, pp.46-51, 2014.

7- L.Z. Kou, T. Fraunhrim, and C.F. Chen, "Phosphorene as a superior gas sensor selective adsorption and distinc I-V response", Physical chemistry Lett, Vol.5, pp.2675-2681, 2014.

8- Y.X. Deng, Z. Luo, N.J. Conrad, H. Liu, Y.J. Gong, S. Najmaei, P.M. Ajayam, J. Lou, X.F. Xu, and P.D. Ye, "black phosphorus mono-layar Mos2 van der waals heterojunction p-n diode", ACS Nano, Vol.8, pp.8292-9, 2014.

9-W.F. Li, Y. Yang, and G. Zhang, "Ultrafast and directional diffusion of lithium in phosphorene for high-performance lithium-ion battery", Nano Lett, Vol.15, pp.1691-7

10-R. Fei, and L. Yang, "Strain Engineering the anisotropic Electrical Conductance of few-layer black phosphorus", Nano Lett, Vol.14, pp.2884-89, 2014.

11-G. Wang, G.C. Loh, R. Pendey, and S.P. Karna, "out of plane structural flexibility of phosphorene", Nanotechnology, Vol.27, pp.(7), 2015.

12-Q. Wei, and X. Peng, "superior mechanical flexibility of phosphorene and few-layer black phosphorus", APPL PHYS LETT, Vol.104.251915, 2014.

13-S. Zheng-Dong, Q.X. Pei, Z. Ding, J.W. Jiang, and Y.W. Zhang, "mechanical properties and fracture behavior of single layer phosphorene at finite temperatures", Physics D, Vol.48,2015.

14-Y. Zhaoyao, Z. Junhua, and W. Ning, "Temprature-dependent Mechanical properties of mono-layer black phosphorus by molecular dynamics simulation" , Physics Letters, Vol.107, 023107, 2015.

15-C. Kun, W. Jing, Y. Likui, and W.Ning, "Mechanical behavior of composite double wall nanotubes from carbon and phosphorus", Materials Science, Vol.1, 2016.

16-H. Feng, X. Liao, H. Xiao,and X.Chen, "Effects of intrinsic strain on the structural stability and mechanical properties of phosphorene nanotubes", Nanotechnology, Vol.27, 2016.

17-D. Zhen and X.Qing, "Atomic vacancies significantly degrade the mechanical properties of phosphorene", Nanotechnology, Vol.27, 2016.

۱۸- و. حسینی و م. وحدتی " تاثیر هندسه و سرعت ابزار بر تولید حرارت در فرایند برش نانو متری تک بلور مسی با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی" مجله مواد نوین، دوره ۳، شماره۸، ص ۵۷-۴۵ ، تابستان ۱۳۹۱.

Archive of SID

www.SID.ir