

تأثیر عیب استون-والز بر استحکام گرافین موج‌دار با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

کارشناسی ارشد، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران
 استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران
 استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه تحصیلات تکمیلی صنعتی و فناوری پیشرفته، کرمان، ایران

امین حمزه‌ای
 عماد جمعه‌زاده*
 مسعود رضایی‌زاده

چکیده

گرافین بدون عیب دارای خصوصیات مکانیکی فوق‌العاده‌ای است، ولی گرافین دارای عیوب ساختاری از جمله عیب استون-والز است که باعث تغییر خواص فیزیکی آن می‌گردد. از طرفی، گرافین به‌طور کلی در اثر شرایط ترمودینامیکی به صورت کاملاً صاف نیست و دارای موج‌هایی است و وجود ناهمواری در سطح گرافین باعث تغییر رفتار گرافین می‌شود. در این مقاله خصوصیات مکانیکی گرافین موج‌دار دارای عیب استون-والز تحت کشش تک محوره مورد مطالعه قرار گرفته است. سطح ناهموار گرافین موج‌دار بوسیله تابع تصادفی با استفاده از نرم افزار MATLAB مدل شده است و گرافین بدون موج و گرافین موج‌دار دارای عیب استون-والز با یکدیگر مقایسه شده‌اند. از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای بررسی تأثیر عیب استون-والز بر روی استحکام نهایی گرافین استفاده شده و برای مدل کردن پیوندهای کووالانسی بین اتم‌های کربن از تابع پتانسیل AIREBO استفاده شده است. همچنین کنترل دمای سیستم توسط ترموستات نوز-هورر انجام گرفته است. نتایج نشان می‌دهند که عیب استون-والز استحکام نهایی گرافین آرمچیر را به شدت کاهش می‌دهد، اما تأثیر کمتری بر استحکام نهایی گرافین در جهت زیگزاگ دارد. همچنین موج‌دار کردن گرافین عیب‌دار باعث افزایش استحکام کششی در جهت زیگزاگ و کاهش آن در جهت آرمچیر خواهد شد.
واژه‌های کلیدی: گرافین موج‌دار، دینامیک مولکولی، عیب استون-والز، استحکام نهایی.

Effect of Stone-Wales Defect on Strength of Rippled Graphene using the Molecular Dynamics Mimulation

A. Hamzei
 E. Jomehzadeh
 M. Rezaeizadeh

Department of Mechanical Engineering, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran
 Department of Mechanical Engineering, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran
 Department of Mechanical Engineering, Graduate University of Advanced Technology, Kerman, Iran

Abstract

Graphene without defect exhibits extraordinary mechanical properties. However, it suffers from defects such as Stone-Wales of atoms. Also, graphene, generally completed by thermodynamic conditions, is not smooth and this can change its behavior. In this paper, the stretching stiffness of a rippled graphene containing Stone-Wales defect under uniaxial tensile load is studied. The corrugated surface of the rippled graphene is modeled by a random function using MATLAB software and the flat and rippled graphene sheets are compared. In order to investigate the effect of Stone-Wales defect on the strength of graphene, the molecular dynamics simulation is used and the AIREBO potential function is utilized to model the covalence bonding of the carbon atoms. Also, the Nose-Hoover thermostat is used to control the temperature of the system. The results show that the existence of Stone-Wales defect considerably reduces the strength of armchair graphene, but less effect on strength in zigzag direction. Also, rippling causes an increasing strength in zigzag direction.

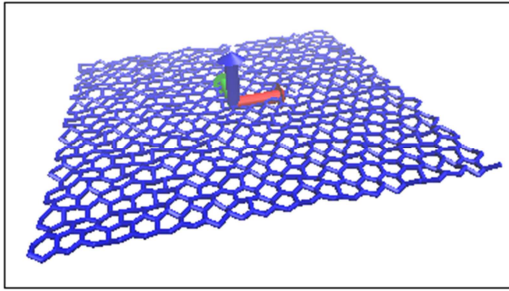
Keywords: Rippled graphene, Molecular dynamics, Stone-Wales defect, Ultimate strength.

تحرك پذیری حامل‌های بار، رسانندگی اپتیکی و خواص مکانیکی خاص [۵ و ۴]، رسانندگی گرمایی [۶]، خواص الکتریکی [۷] به ماده‌ای منحصربه‌فرد تبدیل شده است. به‌طور تجربی مقاومت کشش نهایی گرافین ۱۳۰ گیگا پاسکال و مدول یانگ آن یک ترا پاسکال اندازه‌گیری شده است [۸].

روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی روشی بسیار قدرتمند و جامع است که در مطالعه مواد مختلف از آن استفاده شده است [۹ و ۱۰]. این روش برهم‌کنش میان اتم‌ها و مولکول‌ها در بازه‌هایی از زمان بر اساس قوانین اساسی فیزیک، به‌وسیله کامپیوتر شبیه‌سازی می‌شود. این روش برای اولین بار در سال ۱۹۵۷ توسط آلد و واینرابت بر مبنای مدل

۱- مقدمه

گرافین که در واقع ساختار دوبعدی تشکیل‌دهنده گرافیت سه‌بعدی است، برای قرن‌ها در نوک مدادها جهت نوشتن وجود داشته است. اگرچه نزدیک به هفتاد سال پیش فیلپ والاس درباره گرافین نوشت و سپس از آن زمان تلاش‌های زیادی برای ساخت آن صورت گرفته بود اما قضیه‌ای به نام قضیه مرمین-واگنر [۱] در مکانیک آماری و نظریه میدان‌های کوانتومی وجود داشت که ساخت یک ماده دوبعدی را غیرممکن و چنین ماده‌ای را غیرپایدار می‌دانست اما به هر حال این ساختار به‌صورت تک‌لایه در سال ۲۰۰۴ توسط دانشمندانی از دانشگاه منچستر انگلیس جدا گردید [۲ و ۳]. گرافین به علت داشتن خواص فوق‌العاده مانند چگالی بالا و



شکل ۱- مدل هندسی گرافین موج دار

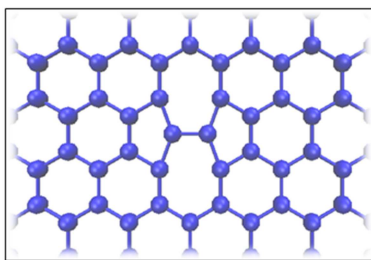
۲- عیب استون-والز

نانولوله‌ها و گرافین دارای ساختار هندسی بسیار منظمی هستند. این مواد در لایه‌های فرآیند ساخت دچار اشکالاتی می‌شوند که خود را در قالب بی‌نظمی‌های هندسی نمایان می‌کنند. یکی از عیب‌های متداول هندسی در ساخت گرافین، عیب استون-والز [۱۸] است که در شکل ۲ قابل مشاهده است.

این عیب به دلیل چرخش یک پیوند اتمی به وجود می‌آید که به همین دلیل در ساختار هندسی گرافین دو پنج‌ضلعی متقابل و دو هفت‌ضلعی متقابل به وجود می‌آید. این عیب محل شروع شکست در اکثر بارگذاری‌های مکانیکی محسوب می‌شود.

۳- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی روشی بسیار قدرتمند و جامع است که در مطالعه مواد مختلف از آن استفاده شده است. در این روش برهم‌کنش میان اتم‌ها و مولکول‌ها در بازه‌هایی از زمان بر اساس قوانین فیزیک، به وسیله کامپیوتر شبیه‌سازی می‌شود. هدف اصلی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی محاسبه رفتار میکروسکوپی سیستم به کمک یک مدل میکروسکوپی است، مدلی که شامل برهم‌کنش‌های مکانیکی بین مولکول‌ها باشد. دینامیک مولکولی توصیف‌کننده تحول تدریجی سیستم با زمان است.



شکل ۲- مدل هندسی عیب استون-والز در ورق گرافین

در این روش، انتگرال‌گیری از معادلات حرکت صورت می‌گیرد تا اطلاعات دینامیکی به دست آیند. در کار حاضر تابع پتانسیل AIREBO برای مدل‌سازی پیوندهای بین‌اتمی صفحه گرافین مورد استفاده قرار گرفته است [۱۹]. این تابع پتانسیل به صورت رابطه (۱) نمایش داده می‌شود:

کره سخت به کار گرفته شد [۱۱]. دینامیک مولکولی شکلی از شبیه‌سازی کامپیوتری است که در آن اتم‌ها و مولکول‌ها اجازه دارند برای یک دوره از زمان تحت قوانین شناخته‌شده فیزیک باهم برهم‌کنش کنند و چشم‌اندازی از حرکت اتم‌ها بدهند. از آنجائی که دستگاه‌های مولکولی عموماً شامل تعداد زیادی از ذرات هستند امکان پذیر نیست که ویژگی‌های دستگاه‌های پیچیده را به‌طور تحلیلی به دست آورد. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی این مسئله را با بکار بردن روش محاسباتی حل می‌کند. این روش یک واسطه بین تجربیات آزمایشگاهی و نظریه ایجاد می‌کند و به‌عنوان یک آزمایش مجازی در نظر گرفته می‌شود.

آجری و همکاران [۱۲] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان دادند که وقوع عیوب مقاومت نهایی و کرنش گرافین را کاهش می‌دهد، درحالی‌که اثر جزئی در مدول یانگ دارد. ونگ و همکاران [۱۳] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان دادند که عیوب می‌توانند باعث از دست رفتن استحکام قابل‌توجهی در گرافین شوند و همچنین دریافتند که گرافین از دما و بارگذاری نیز تأثیر می‌پذیرد. شانگ و شن [۱۴] با استفاده از دینامیک مولکولی روی ورق گرافین تک لایه به این نتیجه رسیدند که مدول یانگ با افزایش دما، کاهش می‌یابد. خار و همکاران [۱۵] روی اثرات عیوب و شکست بر خصوصیات مکانیکی نانولوله کربنی و ورق‌های گرافین با استفاده از تلفیق محیط پیوسته و روش مکانیک مولکولی مطالعه کردند و نشان دادند که اثرات حفره‌ها، شکاف‌ها و ترک‌ها متفاوت است و با شکل هندسی عیب و مقطع در جهت بارگذاری و ساختار اتمی در نزدیکی نقطه شکست ارتباط دارد. انصاری و همکاران [۱۶] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان دادند که وقوع عیوب مقاومت نهایی و کرنش گرافین را کاهش می‌دهد، در حالی‌که اثر جزئی در مدول یانگ دارد. وانگ و همکاران [۱۷] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تأثیر عیوب را بر رفتار کششی و شکست گرافین صاف و گرافین روی بستر پلیمری مورد بررسی قرار دادند. آنها نشان دادند که وجود عیب باعث کاهش تنش نهایی گرافین صاف می‌شود.

همان‌طور که اشاره گردید وجود عیوب در ساختار گرافین باعث تغییر خواص فیزیکی آن می‌گردد. در این مقاله، تأثیر عیب استون-والز بر استحکام نهایی گرافین موج‌دار مورد بررسی قرار گرفته است. ابتدا سطح ناهموار گرافین با یک تابع تصادفی مدل گردیده است و سپس گرافین موج‌دار (شکل ۱) شبیه‌سازی شده است. به‌منظور در نظر گرفتن برهم‌کنش پیچشی از پتانسیل AIREBO برای مدل‌سازی پیوند بین‌اتمی استفاده گردیده است. نتایج نشان می‌دهد که عیب استون-والز باعث کاهش استحکام نهایی گرافین موج‌دار شده و این کاهش برای راستای آرمچر بیشتر از راستای زیگزآگ است. نتایج ارائه‌شده برای گرافین موج‌دار با عیب برای اولین بار ارائه گردیده و می‌توان در طراحی مناسب‌تر گرافین در کاربردهای مختلف از آن‌ها استفاده نمود.

موج‌دار، موج‌های ورق گرافین به‌صورت تصادفی با حداکثر ارتفاع ± 0.3 نانومتر در نظر گرفته‌شده است. این دامنه به‌صورت فرضی در نظر گرفته شده تا وجود ناهم‌واری را بتوان مدلسازی کرد. سپس با ورق گرافین تک لایه بدون موج دارای عیب استون-والز مورد مقایسه قرار گرفته است. موقعیت اتم‌های گرافین موج‌دار توسط برنامه‌ای که در نرم‌افزار MATLAB نوشته شده به‌دست آمده است.

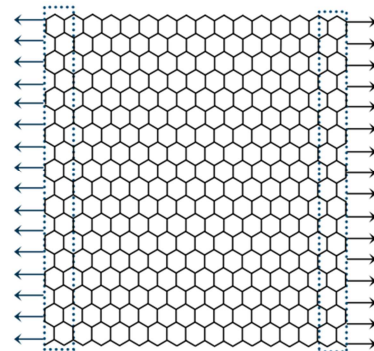
۴- نتایج عددی

منحنی تنش و کرنش گرافین زیگزگ و آرمچیر بدون موج دارای عیب استون-والز در دمای 300 کلوین در شکل ۴ نشان داده شده است. همان‌طور که در منحنی تنش و کرنش گرافین بدون موج با عیب استون-والز مشخص می‌باشد تنش و کرنش شکست با عیب استون-والز برای گرافین زیگزگ برابر 94 گیگا پاسکال و $15/6\%$ و برای گرافین آرمچیر 73 گیگا پاسکال و $10/14\%$ می‌باشد که نسبت به حالت گرافین بدون عیب تنش زیگزگ $14/5\%$ کاهش یافته و کرنش زیگزگ $26/5\%$ کاهش یافته است. همچنین تنش در این ورق معیوب نسبت به گرافین بدون عیب در لبه آرمچیر 20% و کرنش نیز 33% کاهش داشته است. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که تاثیر عیب استون-والز در کاهش استحکام گرافین در راستای زیگزگ بیشتر از راستای آرمچیر است. همچنین مشاهده می‌شود که وجود این عیب بر شیب نمودار تنش-کرنش که نشان‌دهنده سفتی کششی گرافین است هیچگونه تاثیری ندارد.

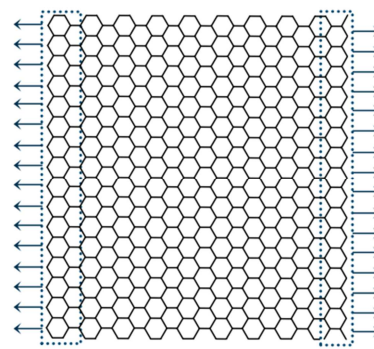
در شکل ۵ تصویری از ورق گرافین با عیب استون-والز از ابتدای شبیه‌سازی تا زمان شکست آورده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود شکست گرافین از محل وجود عیب استون-والز شروع می‌شود و به همین دلیل وجود این عیب باعث کاهش استحکام سیستم می‌گردد. منحنی تنش و کرنش گرافین موج‌دار با عیب استون-والز با حداکثر دامنه 0.3 آنگستروم در شکل ۶ نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود تنش و کرنش گرافین موج‌دار زیگزگ با عیب استون-والز به ترتیب برابر 98 گیگا پاسکال و $17/16\%$ می‌باشد. با مقایسه این نتایج با حالت گرافین صاف با عیب (شکل ۴-الف) مشخص می‌شود که تنش و کرنش شکست گرافین موج‌دار با عیب استون-والز در جهت زیگزگ بیشتر از مقادیر مربوط به گرافین صاف است. همچنین با مقایسه این نمودار با شکل مربوط به گرافین صاف (شکل ۴ الف) می‌توان نتیجه گرفت که وجود ناهم‌واری سطح باعث افزایش تنش و کرنش شکست گرافین با عیب استون-والز می‌گردد.

$$E^{AIREBO} = \sum_i \sum_{i \neq j} \left[E_{ij}^{REBO} + E_{ij}^{LJ} + \sum_{k \neq i,j} \sum_{L \neq i,j,k} E_{ijkl}^{Torsion} \right] \quad (1)$$

که در آن E^{AIREBO} انرژی پتانسیل پیوندی کل اتم‌ها، E^{REBO} قسمت پتانسیل REBO که برهم‌کنش پیوندهای بین اتم‌ها را توضیح می‌دهد، E^{LJ} پتانسیل لنارد-جونز که شامل برهم‌کنش بدون پیوند بین اتم‌هاست. همچنین $E^{Torsion}$ برهم‌کنش پیچشی بین اتم‌ها در انرژی کل را نشان می‌دهد که این برهم‌کنش پیچشی زمانی که شبیه‌سازی ساختار منحنی یا ناهموار مانند گرافین موج‌دار دارد دارای اهمیت ویژه‌ای است. به‌منظور مطالعه رفتار مکانیکی گرافین از نرم‌افزار LAMMPS جهت شبیه‌سازی استفاده شده است. برای از بین بردن اثرات سطحی از شرایط مرزی دوره‌ای در راستای عمود بر صفحه استفاده شده و همچنین برای کنترل دما ترموستات نوز-هاور^۱ در این پژوهش مورد استفاده قرار گرفته است [۲۰].



(الف)



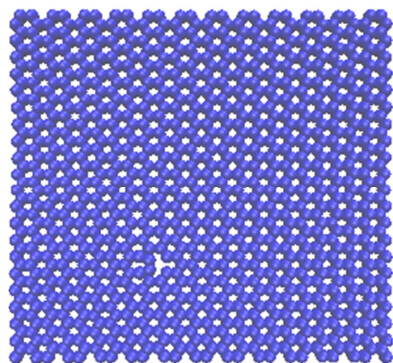
(ب)

شکل ۳- نمایش ورق گرافین تحت کشش تک محوره در راستای الف) زیگزگ (ب) آرمچیر

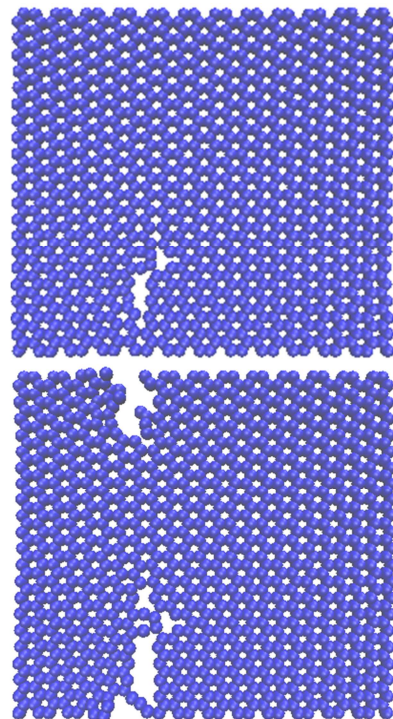
هندسه مدل برای شبیه‌سازی به‌صورت یک ورق گرافین با ابعاد $4/8 \times 6/1$ نانومتر شامل حدود 1160 اتم کربن که فاصله بین پیوندهای کربن 0.142 نانومتر می‌باشد شبیه‌سازی شده است (شکل ۳)، همچنین در شبیه‌سازی از نرخ کرنش 0.001 بر پیکو ثانیه و گام زمانی 1 فمتوثانیه استفاده گردیده است [۱۶].

با توجه به اینکه گرافین به دلیل شرایط ترمودینامیکی به‌صورت کاملاً صاف نمی‌باشد بنابراین به‌منظور تحلیل دقیق‌تر این سازه لازم است که سطح آن به‌صورت موج‌دار مدل شود. برای شبیه‌سازی گرافین

¹ Nose-Hoover thermostat

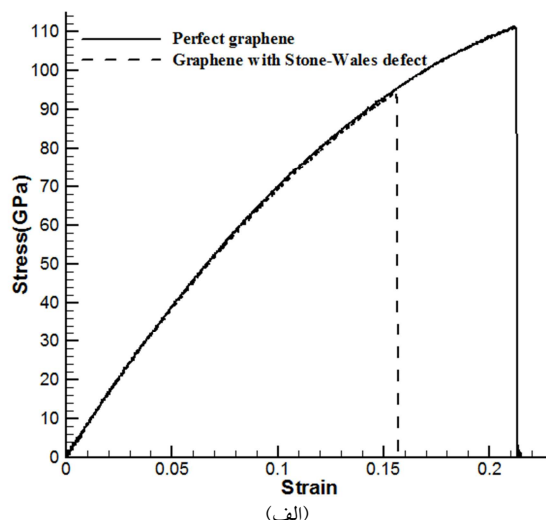


(الف)

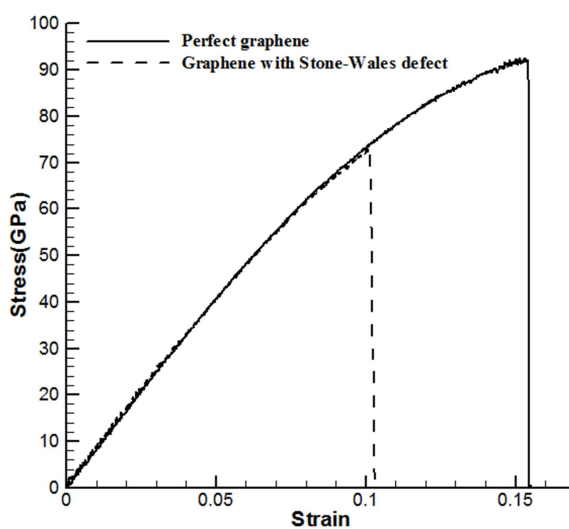


(ب)

شکل ۵- نمایش ورق گرافین دارای عیب استون-والز (الف) در ابتدای شبیه‌سازی (ب) در حالت شکست



(الف)

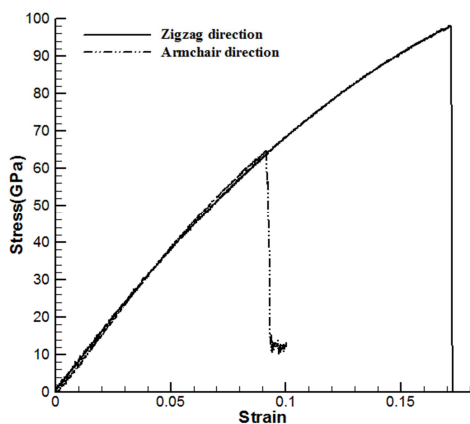


(ب)

شکل ۴- منحنی تنش- کرنش گرافین صاف با عیب استون-والز (الف) زیگزاگ (ب) آرمچیر

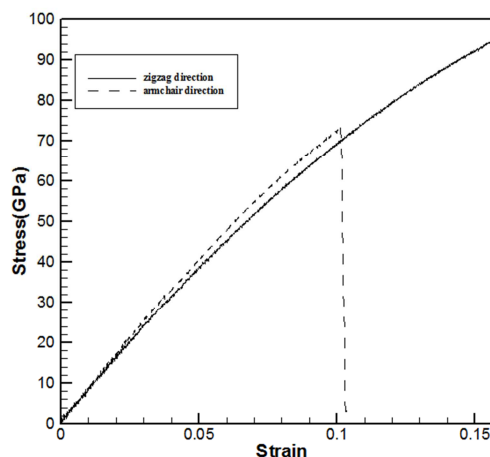
در صورتی که برای گرافین موجدار در راستای آرمچیر شکست در تنش و کرنش کمتری نسبت به حالت صاف اتفاق می‌افتد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که موجدار کردن گرافین عیب‌دار باعث افزایش استحکام کششی در جهت زیگزاگ خواهد شد.

به منظور مقایسه بهتر تأثیر زاویه لبه ورق بر شکست گرافین صاف دارای عیب استون-والز، منحنی تنش-کرنش گرافین با عیب استون-والز برای دو حالت زیگزاگ و آرمچیر در شکل ۷ رسم شده است. همانطور که مشاهده می‌شود وجود عیب در گرافین صاف نیز باعث کاهش استحکام نهایی می‌شود. با مقایسه این شکل با شکل ۶ می‌توان نتیجه گرفت که تأثیر لبه زیگزاگ بر افزایش استحکام و کرنش نهایی در حالت موجدار بیشتر از حالت صاف است.



شکل ۶- منحنی تنش- کرنش گرافین موجدار زیگزاگ و آرمچیر با عیب استون-والز

- using transistors based on CVD-grown graphene sheets, *Adv. Mater.*, vol. 22, no. 14, pp. 1649–1653, 2010.
- [8] Lee C., Wei X., Kysar J. W., and Hone J., Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene, *Science*, Vol. 321, No. 5887, pp. 385–388, 2008.
- [9] Tsai J. L., and Tu J. F., Characterizing mechanical properties of graphite using molecular dynamics simulation, *Material and design*, Vol. 31, No. 1, pp. 194–198, 2010.
- [10] Ansari R., Motevalli B., Montazeri A., and Ajori S., Fracture analysis of monolayer graphene sheets with double vacancy defects via MD simulation, *Solid State Communication*, Vol. 151, No. 17, pp. 1141–1146, 2011.
- [11] Alder B.J., and Wainwright T.E., Phase Transition for a Hard Sphere System, *Journal of chemical physics*, Vol. 27, pp. 1208, 1957.
- [12] Ajori S., Ansari R., and Mirnezhad M., Mechanical properties of defective graphyne using molecular dynamics simulations, *Material science engineering: A*, Vol. 561, pp. 34–39, 2013.
- [13] Wang M. C., Yan C., Ma L., Hu N., and Chen M. W., Effect of defects on fracture strength of graphene sheets, *Computational material science*, Vol. 54, pp. 236–239, 2012.
- [14] Xiang Y., and Shen H., Shear buckling of rippled graphene by molecular dynamics simulation, *Material Today Communication*, Vol. 3, pp. 149–155, 2015.
- [15] Khare R., Mielke S.L., Paci J.T., Zhang S., Ballarini R., and Schatz G.C., Coupled quantum mechanical/molecular mechanical modeling of the fracture of defective carbon nanotubes and graphene sheets, *Physical review B*, Vol. 75, No. 7, pp. 075412, 2007.
- [16] Ansari R., Ajori S., and Motevalli B., Mechanical properties of defective single-layered graphene sheets via molecular dynamics simulation, *Superlattices Microstruct.*, Vol. 51, no. 2, pp. 274–289, 2012.
- [17] Wang M., Yan C., and Hu N., “Deformation and Failure of graphene sheet and graphene-polymer interface”, *The International Conference on Fracture 13*, 2013
- [18] Stone A., and Wales D., Theoretical studies of icosahedral C₆₀ and some related structures, *Chemical Physics Letters*, Vol. 128, pp. 501–503, 1986.
- [19] Stuart S., Tutein A., and Harrison J., A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions, *Journal of chemical physics*, Vol. 112, No. 14, pp. 6472–6486, 2000.
- [20] Hoover W., Canonical dynamics, Equilibrium phase space distributions, *Physical review A*, Vol. 31, No. 3, pp. 1695–1697, 1985.



شکل ۷- منحنی تنش- کرنش گرافین بدون موج زیگزاگ و آرمچیر با عیب استون- والز

۵- نتیجه‌گیری

در این مقاله تأثیر عیب استون-والز بر استحکام شکست گرافین موجدار مورد بررسی قرار گرفت. ابتدا با فرض حالت موجی شکل برای سطح گرافین و ایجاد عیب استون-والز، موقعیت اتم‌ها تعیین گردیدند. سپس از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای تعیین رفتار گرافین موجدار تحت نیروهای صفحه‌ای استفاده شد. بدین منظور پیوندهای کووالانسی بین اتم‌های کربن گرافین با استفاده از تابع پتانسیل AIREBO مدل شدند. نتایج نشان می‌دهند که عیب استون-والز استحکام نهایی گرافین موجدار با شدت کاهش می‌دهد و این کاهش استحکام در جهت آرمچیر شدیدتر از جهت زیگزاگ است. همچنین موجدار کردن گرافین عیب‌دار باعث افزایش استحکام نهایی در جهت زیگزاگ و کاهش آن در جهت آرمچیر می‌شود.

۶- تشکر و قدردانی

نویسندگان مقاله از ستاد ویژه توسعه فناوری نانو بابت حمایت از این مقاله کمال تشکر را دارند.

۷- مراجع

- [1] Mermin N.D., Crystalline Order in Two Dimensions, Vol. 176, No. 1, pp. 250–254, 1968.
- [2] Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., and Jiang D., Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films, *Science Magazine*, Vol. 306, No. 5696, pp. 666–669, 2004.
- [3] Novoselov K. S., Jiang D., Schedin F., Booth T. J., Khotkevich V. V., Morozov S. V., and Geim A. K., Two dimensional atomic crystals, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, Vol. 102, No. 30, pp. 10451–10453, 2005.
- [4] Ovid'ko I., Mechanical Properties of Graphene, *Review on advanced materials science*, Vol. 34, pp. 1–11, 2013.
- [5] Stankovich S., Dikin D. A., Dommett G. H. B., Kohlhaas K. M., Zimney E. J., Stach E. A., Piner R. D., Nguyen S. T., and Ruoff R. S., Graphene-based composite materials, *Nature*, Vol. 442, No. 7100, pp. 282–286, 2006.
- [6] Mortazavi B., Thermal conductivity and tensile response of defective graphene: A molecular dynamics study, Vol. 3, 2013.
- [7] Dong X., Shi Y., Huang W., Chen P., and Li L. J., Electrical detection of DNA hybridization with single-base specificity