Journal of Modeling in Engineering 22 (2024) 177-187

Semnan University

Journal of Modeling in Engineering

Journal homepage: https://modelling.semnan.ac.ir/

ISSN: 2783-2538

Research Article

Mechanical Properties Analysis of a Monolayer Biphenylene at Different Temperatures

Mohammad Amin Hemmatpour Khotbesara [a], Masoud Ajri [b,*] , Majid Samadiyan [a]

[a] *MSc. Student, Department of Mechanical Engineering, University of Mohaghegh Ardabili, Iran.*
[b] *Assistant Professor, Department of Mechanical Engineering, University of Mohaghegh Ardabili, Iran.*

PAPER INFO

Paper history:

Received: 02 July 2023
Revised: 26 August 2023
Accepted: 23 October 2023

Keywords:

Carbon allotrope,
Biphenylene,
Molecular dynamics,
Young's modulus,
Ultimate stress.

ABSTRACT

In this study, the mechanical behavior of the newest allotrope of carbon called biphenylene network (BPN) has been investigated using molecular dynamics simulations. The structure of BPN consists of four, six, and eight-membered carbon rings hybridized with sp2. In this study, the interatomic potential is considered to be AIRBO, and the tensile behavior of this structure has been modeled at different temperatures. After simulation, the Young's modulus and yield stress of biphenylene at different temperatures have been obtained in the armchair direction and zig-zag direction. The Young's modulus in the zig-zag direction at all temperatures is about 14 to 29% higher than the other direction, which indicates the orthotropic behavior of this structure. In addition, with the increase in temperature, the failure strain and Young's modulus have decreased due to the increase in the distance between the atoms and the decrease in energy. It has also been shown that the failure of BPN is brittle. The results of this study show that BPN shares some of the exceptional properties of graphene.

DOI: https://doi.org/10.22075/jme.2023.31122.2485

© 2024 Published by Semnan University Press.
This is an open access article under the CC-BY 4.0 license.(https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

*** Corresponding author.**

E-mail address: m.ajri@uma.ac.ir

How to cite this article:
Hemmatpour Khotbesara, M. A., Ajri, M., & Samadiyan, M. (2024). Mechanical properties analysis of a monolayer biphenylene at different temperatures. Journal of Modeling in Engineering, 22(76), 177-187. doi: 10.22075/jme.2023.31122.2485

مقاله پژوهشی

بررسی خواص مکانیکی تک‌لایه بیفنیلن در دماهای مختلف

محمد امین همت‌پور خطبه‌سرا[۱]، مسعود اجری[۲،*]، مجید صمدیان[۱]

اطلاعات مقاله

دریافت مقاله: ۱۴۰۲/۰۴/۱۱
بازنگری مقاله: ۱۴۰۲/۰۶/۰۴
پذیرش مقاله: ۱۴۰۲/۰۸/۰۱

واژگان کلیدی:
آلوتروپ کربن،
بیفنیلن،
دینامیک مولکولی،
مدول یانگ،
تنش حد نهایی.

چکیده

در این مطالعه رفتار مکانیکی جدیدترین آلوتروپ کربن به نام شبکه بیفنیلن (BPN) با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفته است. ساختار BPN از حلقه‌های چهار، شش و هشت‌ضلعی از اتم‌های کربن هیبریدشده با sp^2 تشکیل شده است. پتانسیل بین اتمی در این مطالعه از نوع ایربو در نظرگرفته شده و رفتار کششی این ساختار در دماهای مختلف مدل‌سازی شده است. پس از شبیه‌سازی، مدول یانگ و تنش تسلیم‌بیفنیلن در دماهای مختلف در جهت آرمچیر و در جهت زیگزاگ بدست آمده است. مدول یانگ در جهت زیگزاگ در تمامی دماها حدود ۱۴ تا ۲۹ درصد بیشتر از جهت دیگر است که نشان‌دهنده رفتار ارتوتروپیک این ساختار می‌باشد. علاوه بر این با افزایش دما کرنش شکست و مدول یانگ به دلیل افزایش فاصله بین اتم‌ها و کاهش انرژی کاهش پیدا کرده است. همچنین خواص مکانیکی رفتار شکست ترد تک‌لایه BPN را نشان می‌دهد. نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که BPN برخی از ویژگی‌های استثنایی گرافین را به اشتراک می‌گذارد.

DOI: https://doi.org/10.22075/jme.2023.31122.2485

© 2024 Published by Semnan University Press.
This is an open access article under the CC-BY 4.0 license.(https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

۱-مقدمه

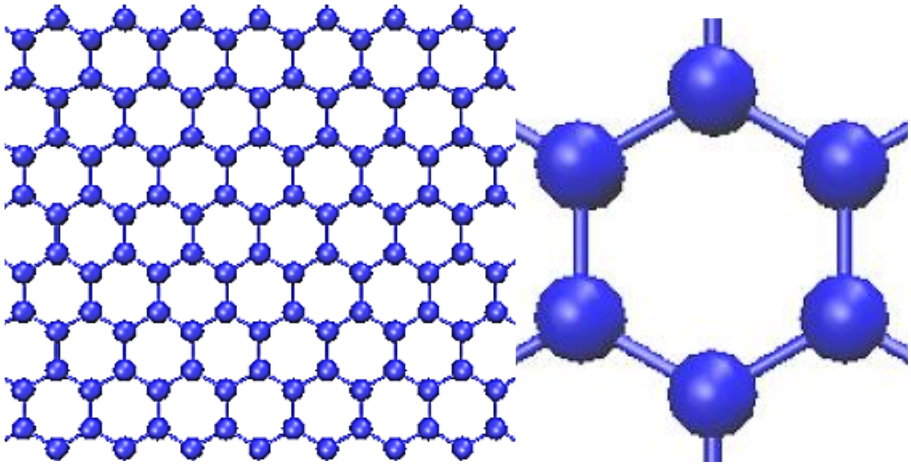
کربن ششمین عنصر جدول تناوبی است بنابراین الکترون‌های حالت پایه آن به صورت $1s^2 2s^2 2p^2$ هستند که چهار الکترون بیرونی آن، الکترون‌های لایه ظرفیت آن را تشکیل می‌دهند. یک اتم کربن، بسته به میزان مشارکت ۳ اوربیتال پی (p) در فرایند هیبریداسیون، می‌تواند متحمل سه نوع هیبریداسیون sp^3، sp^2 و sp شود. مشارکت دو اوربیتال پی موجب شکل‌گیری هیبریداسیون sp^2 می‌شود که دارای پیوندهای دوگانه است که در اطراف هر اتم کربن یک آرایش سه‌ضلعی مسطح با زاویه ۱۲۰ درجه به وجود می‌آید [۱]. آلوتروپ‌های متعدد کربن به دلیل ظرفیت شیمیایی‌اش است و خواص اتصال منحصر به فرد آن می تواند به آلوتروپ‌های مختلف با خواص ساختاری و الکترونیکی استثنایی منجر شود [۲]. تا به امروز حدود ۵۰۰ آلوتروپ برای کربن شناخته شده است [۳, ۴]، که از معروف‌ترین آن‌ها می‌توان الماس، آمورف، گرافیت، فولرن [۵]، گرافین[۲]، فاگرافین، پنتاگرافین [۶]، گرافینیلن و غیره را اشاره کرد. متداول‌ترین آلوتروپ کربن، گرافیت[۳] نام دارد. برخلاف الماس، گرافیت رسانای الکتریکی و حرارتی است و بسیار نرم است [۷]. اگر یک اتم کربن با سه اتم کربن دیگر پیوند برقرار کند صفحه‌ای دوبعدی شکل می‌گیرد که این ورقه‌ها گرافین می‌نامند و سبک‌ترین، قوی‌ترین، نازک‌ترین

* پست الکترونیک نویسنده مسئول: m.ajri@uma.ac.ir
۱. دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک- طراحی کاربردی، دانشکده فنی، دانشگاه محقق اردبیلی، ایران
۲. استادیار گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی، دانشگاه محقق اردبیلی، ایران

[2] Graphene
[3] Graphite

استناد به این مقاله:
همت پور خطبه سرا، محمدامین، اجری، مسعود، و صمدیان، مجید. (۱۴۰۳). بررسی خواص مکانیکی تک لایه بیفنیلن در دماهای مختلف. مدل سازی در مهندسی، ۲۲(۷۶)، ۱۷۷-۱۸۷. doi: 10.22075/jme.2023.31122.2485

و پایدارترین آلوتروپ کربن است. گرافین با استفاده از یک ساختار بلوری لانه زنبوری دوبعدی از اتم‌های کربن با آرایش الکترونی sp^2 تشکیل شده است. آزمایش‌های پیشین نشان داده است که گرافین دارای استحکام فوق‌العاده بالای ۱۳۰ گیگاپاسکال، مدول یانگ بزرگ تا ۱ تراپاسکال و هدایت حرارتی بسیار بالا در محدوده $(mK)/W$ ۳۰۰۰ تا ۵۸۰۰ است که بالاتر از مقدار مشابه در هر آلوتروپ کربن دوبعدی شناخته شده دیگری است و دلیل آن هم پیوند قوی هیبریدشده با sp2 و شبکه لانه زنبوری با تقارن بسیار بالا است [۸-۱۱]. به دلیل استحکام پیوند کووالانسی بین اتم¬های کربن، گرافین استحکام کششی بسیار بالایی دارد. طول پیوند کربن-کربن در گرافین در حدود ۰.۱۴۲ نانومتر است. امروزه ورق گرافین به طور گسترده‌ای در نانوسنسورها، نانونوسانگرها، باتری های الکتریکی، نانوکامپوزیت‌ها، تشدیدکننده‌های الکترومکانیکی، حسگرها، تقویت‌کننده‌ها، الکترودها و غیره به کار برده می‌شود [۱۲]. در شکل (۱) سلول واحد شش‌ضلعی گرافین و شبکه گرافین را در نرم افزار vmd نشان داده شده است [۱۳].



شکل ۱- سلول واحد و شبکه گرافین رسم شده با نرم افزار .vmd

تا به امروز، تعداد زیادی از آلوتروپ‌های کربن دوبعدی جدید از نظر تئوری پیش‌بینی شده‌اند، اگرچه تنها تعداد کمی از آن‌ها با موفقیت در آزمایش‌ها سنتز شده‌اند. اخیراً یک آلوتروپ گرافین جدید به نام بیفنیلن[۴] با موفقیت ساخته شد، با این حال خواص مکانیکی و کاربردهای بالقوه آن هنوز به طور کامل شناخته نشده است [۱۴]. در این مطالعه در سال ۲۰۲۱ فن و همکاران مطالعه تجربی جدیدی را انجام داده‌اند و نوع غیربنزن بیفنیلن را کشف کرده‌اند که به نازکی گرافین و بسیار مسطح است و به اندازه یک اتم است، ساختار BPN از سه حلقه، چهارضلعی و شش‌ضلعی و هشت‌ضلعی از اتم‌های کربن ساخته شده است [۱۴]. در مطالعه دیگری در سال ۲۰۲۱ نشان داده شد که علاوه بر گرافین، شبکه بیفنیلن دومین آلوتروپ کربن هیبریدشده sp^2 خالص است [۱۵]. طبق مطالعات انجام شده در سال ۲۰۲۲ این ساختار دارای ویژگی‌های مکانیکی و حرارتی جذابی است که آن را با گرافین متمایز می‌کند. این یک ساختاری است که از نظر انرژی، مکانیکی، دینامیکی و حرارتی پایدار است و مدول‌های یانگ ناهمسانگرد را در جهات مختلف نشان می‌دهد [۱۶]. از کاربردهای بیفنیلن می‌توان به ذخیره‌سازی هیدروژن و در باتری‌های لیتیوم یونی (LIB) استفاده کرد اشاره کرد، زیرا پیش‌بینی می‌شود لیتیوم را به طور قابل توجهی قوی‌تر از گرافین جذب کند [۱۷]. نانوروبان‌های مبتنی بر بیفنیلن در الکترونیک و اپتوالکترونیک در محدوده مرئی کاربرد دارند [۱۸]. برای مدل‌سازی رفتار نانوساختارهای کربن روش‌های مختلفی وجود دارد که بارزترین این روش‌ها، روش دینامیکی مولکولی[۵] (MD) است [۱۹]. شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی از سه گام اجرایی الف) تعیین شرایط اولیه سیستم، که شامل موقعیت و سرعت اولیه اتم‌ها است، ب) تعیین نیروهای بین مولکولی که نیروی وزن مهم نیست و ج) حل عددی معادلات نیوتن و همه‌ی توابع وابسته به آن‌ها تشکیل شده‌اند. این روش دارای مزایایی همچون دقت بالا با نتایج

[4] Biphenylene (BPN)

[5] Molecular Dynamic (MD)

تجربی، محاسبات مقرون به صرفه در مقایسه با سایر روش‌های اتمی و قابلیت مدل‌سازی تعداد زیادی اتم است [۲۰-۲۲]. برای انجام محاسبات در شبیه‌سازی‌های دینامیک‌مولکولی، باید شرایط معینی بر ساختار اتمی مورد مطالعه اعمال شود که برای این منظور نسبت به انتخاب هنگرد[6] در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی اقدام می‌شود. آقای مارسلو لوپز پریرا جونیور و همکارانش [۲۳] در سال ۲۰۲۲ خواص مکانیکی و حرارتی BPN غیرمعیوب و معیوب را با استفاده از شبیه‌سازی‌های MD کاملا اتمی با میدان نیروی واکنشی ReaxFF که در کد شبیه‌ساز موازی انبوه اتمی / مولکولی (LAMMPS) در مقیاس بزرگ پیاده‌سازی شده است، بررسی کردند. آن‌ها ذکر کردند که پتانسیل ReaxFF امکان تشکیل و شکستن پیوندهای شیمیایی را در طول دینامیک فراهم می‌کند، که برای بررسی مکانیسم‌های شکست ضروری است. مدول یانگ‌های محاسبه‌شده در این مقاله حدود ۱۰۱۹.۴ گیگاپاسکال و ۷۴۵.۵ گیگاپاسکال به ترتیب در جهت‌های آرمچیر[7] و زیگزاگ[8] و نقطه ذوب BPN را ۴۰۲۴ کلوین بدست آوردند که قابل مقایسه با مقدار گرافین است، البته ذوب کامل BPN در حدود ۵۰۰۰ کلوین مشاهده شد. خانم تینگ هان و همکارانش [۲۴] در سال ۲۰۲۲ که بر روی تک‌لایه بیفنیلن از طریق محاسبات جامع تئوری تابعی چگالی[9] انجام دادند متوجه شدند که مقدار مدول یانگ بیفنیلن را در جهت زیگزاگ ۲۵۵.۰۷ نیوتن بر متر و در جهت آرمچیر ۲۰۳.۱۳ نیوتن بر متر بدست آوردند. آقای هُنگ شِن و همکارانش [۲۵] در سال ۲۰۲۲ توسط تئوری تابعی چگالی، مقادیر ۲۵۰.۳۱ و ۲۱۱.۴۶ نیوتن بر متر را برای مدول یانگ بیفنیلن بدست آوردند و ذکر کردند که خواص مکانیکی BPN نسبت به گرافین برتری ندارد. آقای پنقوآ ینگ و همکارانش [۱۵] در سال ۲۰۲۲ شبکه بیفنیلن، پنتاهپتیت و گرافین را مورد مقایسه قرار دادند. تمام محاسبات هدایت حرارتی بر اساس شبیه‌سازی‌های MD در دمای اتاق (۳۰۰ کلوین) با استفاده از بسته منبع باز واحدهای پردازش گرافیکی دینامیک مولکولی[10] انجام شد. بیفنیلن با پتانسیل بین اتمی ایربو مورد شبیه‌سازی قرار گرفت و مقادیر مدول یانگ بیفنیلن را در جهت آرمچیر ۵۶۳.۵ گیگاپاسکال و در جهت زیگزاگ ۶۳۲.۷ گیگاپاسکال بدست آوردند. آن‌ها رسانایی حرارتی شبکه بیفنیلن و پنتاهپتیت را به ترتیب تنها حدود یک سیزدهم و یک هشتم گرافین اعلام کردند که از دلایل آن می‌توان افزایش ناهماهنگی قوی پیوندها که ناشی از کاهش تقارن کریستالی بیفنیلن است. آقای اسدالله بافکری و همکارانش [۲۶] در سال ۲۰۲۱ در مطالعه‌ای با استفاده از محاسبات تئوری عملکردی چگالی، مقدار مدول یانگ بیفنیلن را ۰.۱ تراپاسکال اعلام کردند که از مقدار مربوط به گرافین کوچک‌تر است، در حالی که نسبت پواسون که ۰.۲۶ بدست آمده که مقدار آن بزرگتر از گرافین است و رفتار شکننده‌ای دارد. آقای عبیدالرحمن و همکارانش [۲۷] در سال ۲۰۱۷ با استفاده از محاسبات تئوری تابعی چگالی به بررسی تبدیل فازی بین دو آلوتروپ کربن، از پنتاگرافین یک نیمه‌رسانا به بیفنیلن فلزی تحت بارگذاری کشش تک‌محوری پرداختند، مقدار مدول یانگ بیفنیلن در جهت x یا آرمچیر ۳۵±۶۱۳ گیگاپاسکال و در جهت y یا زیگزاگ ۴۵±۷۱۶ گیگاپاسکال بدست آوردند. ساختار الکترونیکی آن نشان می‌دهد که در هر دو شکل ورق و لوله، فلزی است. خانم یی لو و همکارانش [۲۸] در سال ۲۰۲۱ با استفاده از تئوری تابعی چگالی مقدار مدول یانگ بیفنیلن را در جهت x یا زیگزاگ ۲۵۹.۷ نیوتن بر متر و در جهت y یا آرمچیر ۲۱۲.۴ نیوتن بر متر محاسبه کردند. به بیان دیگر این مقادیر به ترتیب ۷۶۴ گیگاپاسکال و ۶۵۲ گیگاپاسکال هستند. آقای بوهیرا مرتضوی و همکارانش [۲۹] که در مقاله‌ای در سال ۲۰۲۲ با استفاده از روش یادگیری ماشین دقیق، به مطالعه تک‌لایه بیفنیلن پرداختند، مقدار مدول یانگ بیفنیلن را در جهت زیگزاگ ۷۲۹ گیگاپاسکال و در جهت آرمچیر ۶۲۰ گیگاپاسکال بدست آوردند. آن‌ها دریافتند که شبکه بیفنیلن نیز دارای انبساط حرارتی منفی است، که نسبت به گرافین در دمای اتاق دوبرابر می‌باشد. همچنین آن‌ها ذکر کردند که بیفنیلن یک شبکه ناهمسانگرد است و بنابراین خواص مکانیکی و سایر خواص انتقال آن به جهت بستگی دارد.آقای امین حامد مشهدزاده و همکارانش [۳۰] در مطالعه‌ای در سال ۲۰۲۲ با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و نرم افزار لمپس و پتانسیل بین اتمی ترسوف، هدایت حرارتی و مقاومت مکانیکی آن را مورد بررسی قرار دادند. همچنین نویسندگان ذکر کردند که چندین پارامتر مانند دما، گرادیان

[6] Ensemble
[7] Armchair
[8] Zigzag
[9] Density Functional Theory (DFT)
[10] Graphics Processing Units Molecular Dynamics (GPUMD)

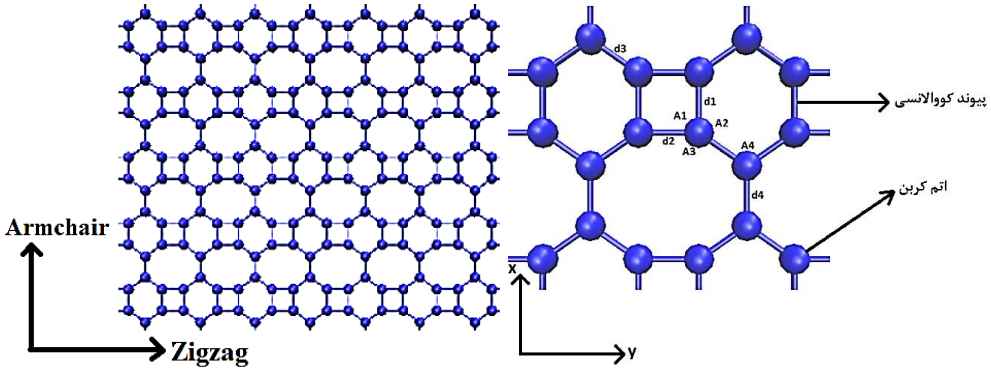
دما، نرخ کرنش، طول ساختار و غیره بر خواص مکانیکی و هدایت حرارتی تأثیر می‌گذارند.

در پژوهش حاضر با استفاده از روش MD، خواص مکانیکی بیفنیلن شامل مدول یانگ و تنش حد نهایی مورد بررسی قرار گرفته است. در مرحله اول انرژی نانوساختار بیفنیلن در دماهای مختلف با هنگرد NPT و با استفاده از الگوریتم گرادیان مزدوج، حداقل‌سازی شده است. سپس با انجام تست کشش در دو جهت آرمچیر و زیگزاگ خواص مکانیکی بدست آمده است. به دلیل اینکه پتانسیل بین اتمی ایربو در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی ساختارهای اتمی متشکل از عناصر کربن و هیدروژن کاربرد وسیعی دارد، در این مطالعه از پتانسیل ایربو استفاده شده است. این پتانسیل برای اولین بار و تاکنون فقط یکبار در مطالعه آقای پنقوآ ینگ [۱۵] برای بررسی خواص مکانیکی تک‌لایه بیفنیلن در دمای محیط استفاده شده است. در مطالعه حاضر، با این پتانسیل خواص مکانیکی تک‌لایه بیفنیلن در دماهای محیط و دماهای بالاتر شامل ۶۰۰ و ۹۰۰ کلوین و بدون هیچ فشاری در هیچ جهتی بررسی شده است.

۲-مدل سازی

۲-۱ ساختار بیفنیلن

همانطور که بیان شد در سال ۲۰۲۱ محققان مطالعه تجربی جدیدی را انجام داده‌اند که در این مطالعه، نوع غیربنزنی بیفنیلن [۱۴] را کشف کرده‌اند که به نازکی گرافین و به اندازه یک اتم است یعنی ۳.۴ آنگستروم (Å). شبکه بیفنیلن دومین آلوتروپ جذاب کربن کاملا هیبریدشده sp^2 خالص است که اخیرا از طریق یک رویکرد از پایین به بالا[11] با موفقیت سنتز شده است و در شکل (۲) نشان داده شده است [۱۵]. ورق بیفنیلن از یک شبکه کربنی با یک سلول واحد که توسط شش اتم کربن است تشکیل شده است و این شبکه کربنی برخلاف حلقه‌های شش‌ضلعی گرافین، از آرایش سه حلقه متناوب چهارضلعی، شش‌ضلعی و هشت-ضلعی از اتم‌های کربن که توسط هیبریداسیون sp^2 هستند به هم متصل شده‌اند تشکیل شده است که از یک شبکه منظم نشات گرفته شده‌اند و متفاوت از گرافین است.



شکل ۲- شبکه بیفنیلن رسم شده با vmd.

ثابت‌های شبکه BPN، ۳.۷۵ آنگستروم (Å) و ۴.۵۲ آنگستروم محاسبه شده‌اند که به ترتیب برای زیگزاگ و آرمچیر هستند و طول‌های پیوند مختلف C-C، d_1=۱.۴۵۸ Å، d_2=۱.۴۵۴ Å ، d_3=۱.۴۰۷ Å و d_4=۱.۴۴۷ Å در بیفنیلن با زاویه‌های پیوند مربوطه A_1=۹۰ درجه، A_2=۱۲۵ درجه، A_3=۱۴۵ درجه و A_4=۱۱۰ درجه که در مطالعات قبلی بدست آماده‌اند [۱۴, ۱۶, ۲۳, ۲۴, ۲۶, ۲۸, ۳۱-۳۸].

۲-۲ پتانسیل‌های بین اتمی

در مطالعه حاضر تمام شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از بسته نرم افزار متن باز شبیه‌ساز انبوه موازی اتمی/مولکولی در مقیاس بزرگ[12] (لمپس) انجام شده است [۳۹]. در این مقاله از دسته پتانسیل‌های بین اتمی غیرپیوندی در بین ذرات برهمکنش کننده در طول شبیه-سازی‌های دینامیک مولکولی در نرم افزار لمپس اعمال شده است. همانطور که بیان شد در این پژوهش از پتانسیل ایربو برای توصیف و تعیین تعامل و برهمکنش‌های بین اتم‌های کربن C-C در ساختار بیفنیلن استفاده شده است [۴۰]. پتانسیل ایربو یک پتانسیل بین اتمی غیرپیوندی سه-جسمی-چند جسمی به شمار می‌رود که این پتانسیل بین

[11] Bottom-up approach

[12] Lammps

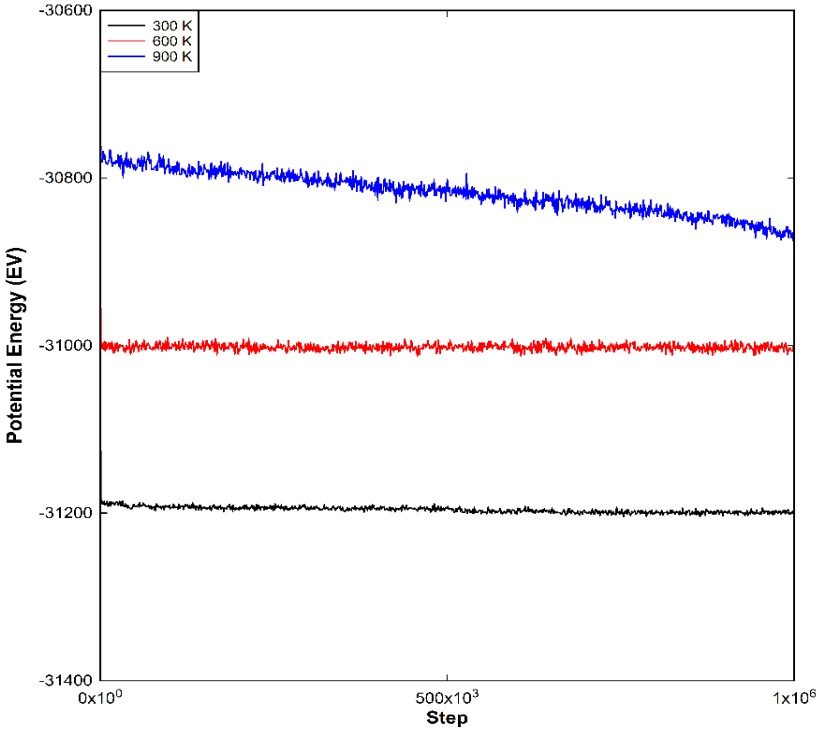
اتمی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ساختارهای اتمی متشکل از عناصر کربن و هیدروژن کاربرد وسیعی دارد. از دیدگاه نظری، این نوع پتانسیل با فرمول‌بندی زیر قابل بیان است:

$$E = E^{REBO} + E^{LJ} + E^{TORS} \quad (۱)$$

که در آن E^{REBO} فعل و انفعالات پیوند کووالانسی از پتانسیل REBO است، E^{LJ} اصطلاح لنارد-جونز (LJ) و E^{Tors} عبارت جبران کننده برهمکنش‌های پیچشی است.

۲-۳ شرایط شبیه‌سازی

در این مطالعه اندازه تک‌لایه مورد مطالعه ۱۱۲×۱۱۶×۳.۴ آنگستروم مکعب می‌باشد. تعداد کل اتم‌های تک‌لایه ۴۶۸۰ است. تک‌لایه بیفنیلن دارای شرایط مرزی پریودیک در جهات x و y است. در دینامیک مولکولی فرآیند متعادل-سازی سیستم از پارامترهای اساسی در صحیح بودن پاسخ‌ها است و به این طریق است که با توجه به نمودارهای زیر می‌توان دریافت که انرژی پتانسیل بین اتمی مورد استفاده در دماهای ۳۰۰، ۶۰۰ و ۹۰۰ کلوین بر اساس روش گرادیان مزدوج به حداقل مقدار خود رسیده است که به اصطلاح گفته می‌شود انرژی حداقل سازی شده است یا مینیمایز شده است که مقادیر آن برابر با منفی ۳۱۲۰۰، ۳۱۰۰۰ و ۳۰۸۰۰ الکترون‌ولت است و در شکل (۳) آورده شده است. با توجه به نمودار شکل (۳) این نتیجه را می‌توان گرفت که، با افزایش دما انرژی پتانسیل هر دما مقادیر مثبت‌تری نسبت به دمای قبل از خود نشان می‌دهد. همچنین می‌توان از روی نمودار، پایدار بودن انرژی ساختار با استفاده از پتانسیل ایربو را مشاهده کرد. از دیدگاه محاسباتی، استفاده از هنگرد مناسب این امتیاز را دارد که شبیه‌سازی بدون از بین رفتن جنبه‌های دینامیکی ساختارهای اتمی صورت می‌گیرد که در این شبیه‌سازی در دماهای مختلف از هنگرد NPT استفاده شده است. هیچ فشاری در هیچ جهتی وارد نمی-شود. مقدار گام زمانی (time step) ۲ fs(فمتو ثانیه) در این شبیه‌سازی در نظر گرفته شده است. مقدار نرخ کرنش۰.۰۰۱ ۱/ps در نظر گرفته شده است. این شبیه‌سازی در دو مرحله صورت گرفته است. در مرحله اول در دماهای مختلف متعادل سازی شده است و مرحله دوم با هنگرد NVT در دماهای مختلف تست کشش انجام گرفته شده است.



شکل ۳- انرژی پتانسیل شبکه بیفنیلن بر حسب گام زمانی برای دماهای مختلف.

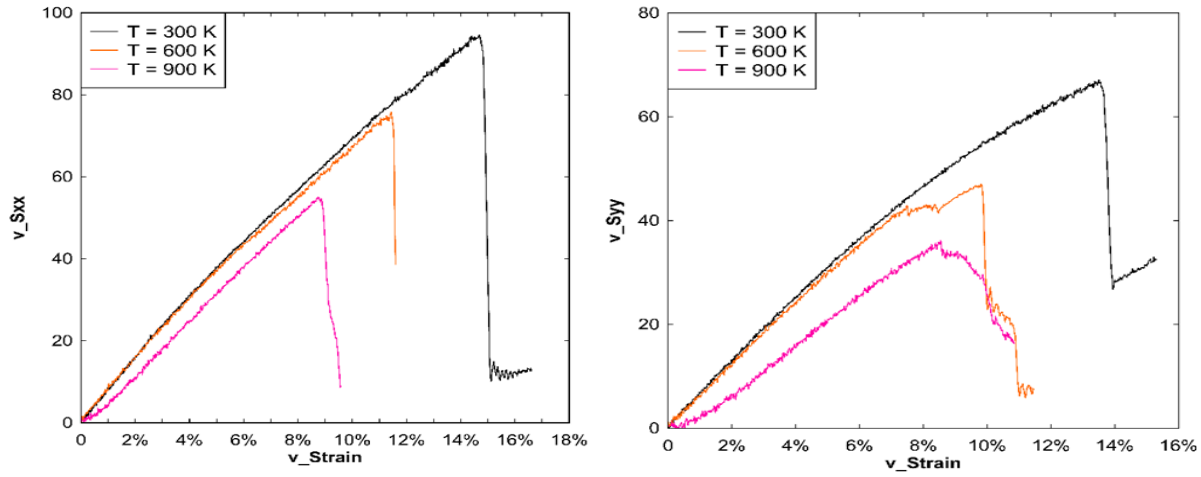
۳- نتایج و بحث

در این بخش به بررسی خروجی‌های شبیه‌سازی پرداخت شده است. خروجی‌های بدست آمده از نظر عددی تا کرنش ۲ درصد گرفته شده‌اند و خواص مکانیکی مانند مدول یانگ در این بازه از کرنش است. با توجه به شکل (۳)، در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از پتانسیل بین اتمی غیرپیوندی ایربو صورت گرفت و مشاهده شد که پتانسیل ایربو می‌تواند توصیف خوبی از برهمکنش‌های کربن-کربن در ساختار بیفنیلن ارائه دهد و توانسته است انرژی سیستم را در حالت پایدار حفظ کند. با توجه به جدول ۱ می‌توان مقادیر مدول یانگ‌های محاسبه‌شده برای تک‌لایه بیفنیلن در این شبیه‌سازی در دماهای مختلف در راستای زیگزاگ و آرمچیر را مشاهده کرد. مدول یانگ‌های بدست آمده در این پژوهش مشابه به مقالات قبلی [۲۶, ۴۰-۳۴] می‌باشد، که برای جهت زیگزاگ در بازه ۶۳۲ تا ۷۶۴ گیگاپاسکال و برای جهت آرمچیر در بازه ۵۶۳ تا ۱۰۱۹ گیگاپاسکال می‌باشد. این اعداد نشان می‌دهد که این نانوساختار خواص مکانیکی قابل توجهی در تمام دماهای مورد مطالعه دارد. علاوه بر این مدول یانگ بیفنیلن کمتر از مدول یانگ گرافین (حدود ۱۰۰۰ گیگاپاسکال) می‌باشد، که با توجه به دانسیته سطحی بیشتر گرافین (تعداد اتم تقسیم بر سطح) نسبت به بیفنیلن و رابطه بین مدول الاستیک و دانسیته اتمی [۴۱] این نتیجه قابل قبول می‌باشد. همچنین نتایج جدول نشان می‌دهند که برای تمام دماها، مدول یانگ در جهت زیگزاگ بین ۱۴ تا ۲۹ درصد از مدول یانگ در جهت آرمچیر بیشتر است، که این نشان دهنده رفتار ارتوتروپی این نانوساختار می‌باشد و نشان می‌دهد که مقاومت در برابر کرنش در جهت زیگزاگ بیشتر از آرمچیر است. این خاصیت ارتوتروپی با نظریه تابعی چگالی (DFT) انجام شده بر روی بیفنیلن [۴۲] و دیگر آلوتروپ های فلزی دوبعدی کربن [۴۳] و انرژی بیشتر مشاهده شده در جهت زیگزاگ نسبت به جهت آرمچیر [۲۷] مطابقت دارد.

در جدول ۱ علاوه بر مقدار مدول یانگ مقادیر تنش حد نهایی محاسبه‌شده برای تک‌لایه بیفنیلن در راستای زیگزاگ و آرمچیر نیز آورده شده است. تنش نهایی برای جهت زیگزاگ در دماهای ۳۰۰، ۶۰۰ و ۹۰۰ کلوین به ترتیب ۹۴، ۷۵ و ۵۵ گیگاپاسکال می‌باشد. این مقادیر برای جهت آرمچیر نیز به ترتیب برابر ۶۶، ۴۷ و ۳۶ گیگاپاسکال می‌باشد. می‌توان دریافت که در جهت زیگزاگ مقدار تنش حد نهایی بیشتر است، بنابراین در این جهت پیوندهای اتمی دیرتر گسسته می‌شوند و شکست تک‌لایه در این جهت در تنش بالایی رخ می‌دهد. همچنین با افزایش دما، مقادیر مدول یانگ و تنش حد نهایی به دلیل افزایش فواصل بین اتمی ساختار و کاهش انرژی اتصال، کاهش می‌یابد. در شکل (۴) نمودار تنش و کرنش مربوط به تست کشش بیفنیلن در دو جهت زیگزاگ و آرمچیر آورده شده است. کاربرد بیفنیلن به عنوان یک نانو ماده کربنی دوبعدی به شدت به مقاومت و پایداری مکانیکی آن بستگی دارد. به منظور تخمین استحکام مکانیکی بیفنیلن، تغییر تنش تحت کرنش تک‌محوری محاسبه شده است.

جدول ۱- جدول مقادیر مدول یانگ و تنش حد نهایی در جهت زیگزاگ و آرمچیر در دماهای مختلف.

Temp (K)	E Zig-Zag (GPa)	E Arm-Chair (GPa)	Ultimate Stress Zig-Zag (GPa)	Ultimate Stress Arm-Chair (GPa)
۳۰۰	۷۹۶	۶۳۸	۹۴	۶۶
۶۰۰	۷۶۵	۵۹۲	۷۵	۴۷
۹۰۰	۵۶۰	۴۹۰	۵۵	۳۶



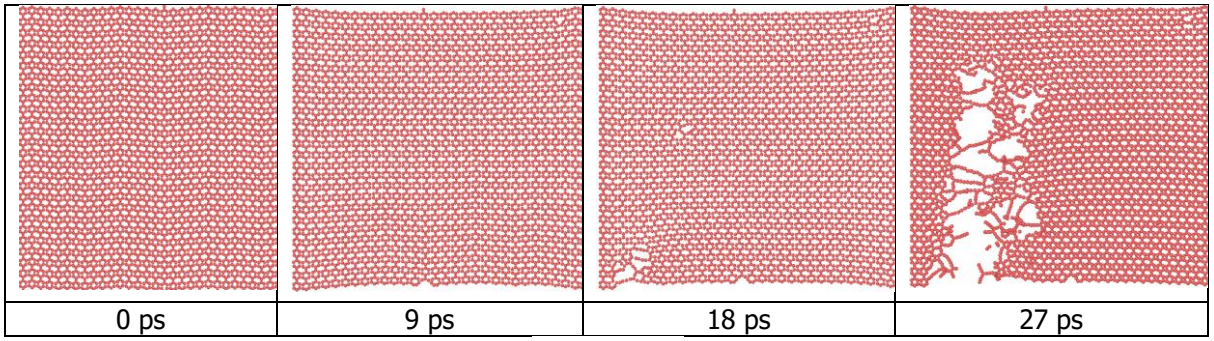
ب- برای جهت زیگزاگ

الف- برای جهت آرمچیر

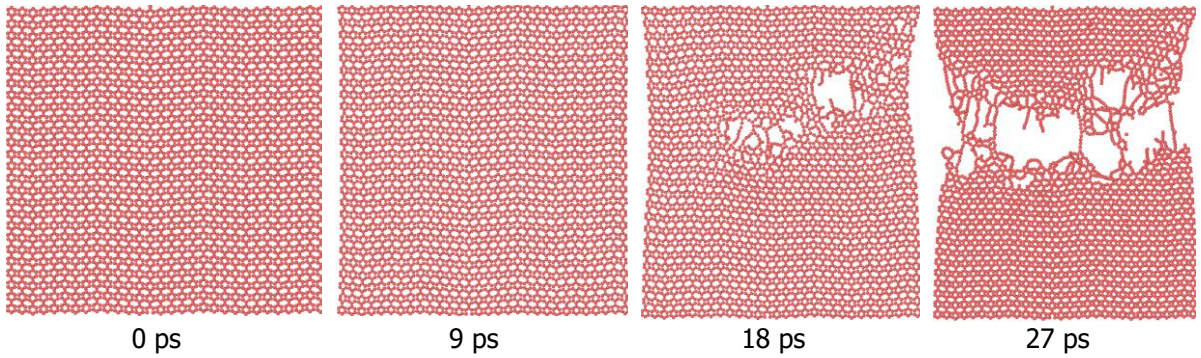
شکل ۴- نمودار تنش کرنش برای تک‌لایه بیفنیلن در جهت آرمچیر و زیگزاگ برای دماهای مختلف.

همانطور که در شکل (۴) نشان داده شده است، ورق زیگزاگ در تمامی دماها از ورق آرمچیر قوی‌تر است به دلیل اینکه مقدار استحکام نهایی در جهت زیگزاگ بیشتر از مقدار استحکام نهایی در جهت آرمچیر است. با توجه به شکل (۴) می‌توان دریافت که کرنش شکست جهت زیگزاگ بیشتر از کرنش شکست در جهت آرمچیر است. همچنین با افزایش دما از ۳۰۰ به ۹۰۰ کلوین مقدار کرنش شکست از حدود ۱۵٪ در جهت زیگزاگ به ۸.۵٪ کاهش می‌یابد. همین نتایج عیناً برای جهت آرمچیر نیز مشاهده می‌شود و کرنش شکست از حدود ۱۴٪ به ۸.۲٪ درصد کاهش پیدا کرده است.

در شکل (۵) تغییرشکل نانوورق بیفنیلن تحت بارگذاری کششی در دو جهت زیگزاگ و آرمچیر برای دمای محیط در زمان‌های مختلف تحلیل نشان داده شده است.



لف- جهت زیگزاگ



ب- جهت آرمچیر

شکل ۵- تست کشش در دو جهت در دمای ۳۰۰ کلوین.

با توجه نمودار شکل (۴) و شکل (۵) برای تک‌لایه بیفنلن مشاهده می‌شود که گسیختگی در این نانوساختار به یکباره رخ می‌دهد و ناحیه غیرخطی خیلی کم می‌باشد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که این ماده به صورت یک ماده ترد رفتار می‌کند و رفتاری شکننده دارد. همچنین بیفینلن در مقابل گرافین، دینامیک شکست متمایزی را نشان می‌دهد. در گام‌های زمانی مساوی، آرایش اتمی بیفنیلن در جهت آرمچِیر، فروپاشی پیوندهای اتمی بیشتری نسبت به جهت زیگزاگ رخ می‌دهد.

۴-نتیجه گیری

در این مطالعه رفتار مکانیکی شبکه بیفنیلن با استفاده از پتانسیل ایربو و شبیه‌سازی دو مرحله‌ای به کمک هنگرد NPT و سپس با هنگرد NVT، بدون هیچ فشاری در هیچ جهتی و در دماهای مختلف ۳۰۰، ۶۰۰ و ۹۰۰ کلوین در هر دو مرحله انجام شد و نتایج زیر بدست آمد:

۱- مقادیر مدول یانگ در جهت زیگزاگ بیشتر از مقادیر مدول یانگ در جهت آرمچِیر است بنابراین مقاومت در برابر کرنش در جهت زیگزاگ بیشتر از جهت آرمچِیر است.

۲- در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از پتانسیل بین اتمی غیرپیوندی ایربو صورت گرفت و مشاهده شد که پتانسیل ایربو می‌تواند توصیف خوبی از برهمکنش‌های کربن-کربن در ساختار بیفنیلن ارائه دهد و توانسته است انرژی سیستم را در حالت پایدار حفظ کند.

۳- با توجه به نمودار تنش کرنش برای تک‌لایه بیفیلین در دو جهت زیگزاگ و آرمچیر می‌توان نتیجه گرفت که این ماده به صورت یک ماده ترد رفتار می‌کند و رفتاری شکننده دارد.

۴- برای دماهای مختلف، استحکام نهایی در جهت زیگزاگ بیشتر از استحکام نهایی در جهت آرمچِیر است.

۵- کرنش شکست در جهت زیگزاگ بیشتر از کرنش شکست در جهت آرمچِیر است.

۶- BPN برخی از خواص استثنایی گرافین را به اشتراک می‌گذارد.

۷- مدول یانگ و تنش حد نهایی شکست با افزایش دما به دلیل افزایش فواصل بین اتمی و کاهش انرژی اتصال کاهش می‌یابد.

مراجع

[1] H.O. Pierson. Handbook of Carbon, Graphite, Diamonds and Fullerenes: Processing, Properties and Applications. *William Andrew*, 2012.

[2] K. Kawasumi, Q. Zhang, Y. Segawa, L.T. Scott, and K. Itami. "A Grossly Warped Nanographene and the Consequences of Multiple Odd-Membered-Ring Defects." *Nature Chemistry* 5, no. 9 (2013): 739-44.

[3] P. Karthik, A. Himaja, and S.P. Singh. "Carbon-Allotropes: Synthesis Methods, Applications and Future Perspectives." *Carbon Letters* 15, no. 4 (2014): 219-37.

[4] C. McCallion, J. Burthem, K. Rees-Unwin, A. Golovanov, and A. Pluen. "Graphene in Therapeutics Delivery: Problems, Solutions and Future Opportunities." *European Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics* 104 (2016): 235-50.

[5] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, and R.E. Smalley. "C60: Buckminsterfullerene." *Nature* 318, no. 6042 (1985): 162-63.

[6] S. Zhang, J. Zhou, Q. Wang, X. Chen, Y. Kawazoe, and P. Jena. "Penta-Graphene: A New Carbon Allotrope." *Proceedings of the National Academy of Sciences* 112, no. 8 (2015): 2372-77.

[7] N. Deprez, and D.S. McLachlan. "The Analysis of the Electrical Conductivity of Graphite Conductivity of Graphite Powders During Compaction." *Journal of Physics D: Applied Physics* 21, no. 1 (1988): 101.

[8] K.D. Sattler. *Carbon Nanomaterials Sourcebook.* Vol. 1: CRC Press Boca Raton, FL, USA, 2016.

[9] C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar, and J. Hone. "Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene." *Science* 321, no. 5887 (2008): 385-88.

[10] A.A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, and C.N. Lau. "Superior Thermal Conductivity of Single-Layer Graphene." *Nano Letters* 8, no. 3 (2008): 902-07.

[11] S. Chen, A.L. Moore, W. Cai, J.W. Suk, J. An, C. Mishra, C. Amos, *C.W. Magnuson, J. Kang, L. Shi, and R.S. Ruoff.* "Raman Measurements of Thermal Transport in Suspended Monolayer Graphene of Variable Sizes in Vacuum and Gaseous Environments." *ACS Nano* 5, no. 1 (2011): 321-28.

[12] S.C. Pradhan, and T. Murmu. "Small Scale Effect on the Buckling of Single-Layered Graphene Sheets under Biaxial Compression Via Nonlocal Continuum Mechanics." *Computational Materials Science* 47, no. 1 (2009): 268-74.

[13] W. Humphrey, A. Dalke, and K. Schulten. "Vmd: Visual Molecular Dynamics." *Journal Of Molecular Graphics* 14, no. 1 (1996): 33-38.

[14] Q. Fan, L. Yan, M.W. Tripp, O. Krejčí, S. Dimosthenous, S.R. Kachel, M. Chen, *A.S. Foster, U. Koert, P. Liljeroth, and J.M. Gottfried.* "Biphenylene Network: A Nonbenzenoid Carbon Allotrope." *Science* 372, no. 6544 (2021): 852-56.

[15] P. Ying, T. Liang, Y. Du, J. Zhang, X. Zeng, and Z. Zhong. "Thermal Transport in Planar Sp2-Hybridized Carbon Allotropes: A Comparative Study of Biphenylene Network, Pentaheptite and Graphene." *International Journal of Heat and Mass Transfer* 183 (2022): 122060.

[16] M.M. Obeid, and Q. Sun. "Assembling Biphenylene into 3d Porous Metallic Carbon Allotrope for Promising Anode of Lithium-Ion Batteries." *Carbon* 188 (2022): 95-103.

[17] P.A. Denis, and F. Iribarne. "Hydrogen Storage in Doped Biphenylene Based Sheets." *Computational and Theoretical Chemistry* 1062 (2015): 30-35.

[18] S. Wang. "O,ptical Response and Excitonic Effects in Graphene Nanoribbons Derived from Biphenylene." *Materials Letters* 167 (2016): 258-61.

[19] M. Zarghami Dehaghani, F. Molaei, C. Spitas, and A.H. Mashhadzadeh. "Thermal Rectification in Nozzle-Like Graphene/Boron Nitride Nanoribbons: A Molecular Dynamics Simulation." *Computational Materials Science* 207 (2022): 111320.

[20] M. Zarghami Dehaghani, F. Molaei, F. Yousefi, S.M. Sajadi, A. Esmaeili, A. Mohaddespour, O. Farzadian, *S. Habibzadeh, A.H. Mashhadzadeh, C. Spitas, and M.R. Saeb.* "An Insight into Thermal Properties of Bc3-Graphene Hetero-Nanosheets: A Molecular Dynamics Study." *Scientific Reports* 11, no. 1 (2021): 23064.

[21] S. Fooladpanjeh, F. Yousefi, F. Molaei, M. Zarghami Dehaghani, S.M. Sajadi, O. Abida, S. Habibzadeh, A. H. Mashhadzadeh, and M.R. Saeb. "Thermal Conductivity of Random Polycrystalline Bc3 Nanosheets: A Step Towards Realistic Simulation of 2d Structures." *Journal of Molecular Graphics and Modelling* 107 (2021): 107977.

[22] M. Zarghami Dehaghani, B. Bagheri, F. Yousefi, A. Nasiriasayesh, A.H. Mashhadzadeh, P. Zarrintaj, N. Rabiee, *M. Bagherzadeh, V. Fierro, A. Celzard, and M.R. Saeb.* "Boron Nitride Nanotube as an Antimicrobial Peptide Carrier: A Theoretical Insight." *International Journal of Nanomedicine* 16 (2021): 1837.

[23] M.L. Pereira, W.F. Da Cunha, R.T. De Sousa, G.D. Amvame Nze, D.S. Galvão, and L.A. Ribeiro. "On the Mechanical Properties and Fracture Patterns of the Nonbenzenoid Carbon Allotrope (Biphenylene Network): A Reactive Molecular Dynamics Study." *Nanoscale* 14, no. 8 (2022): 3200-11.

[24] T. Han, Y. Liu, X. Lv, and F. Li. "Biphenylene Monolayer: A Novel Nonbenzenoid Carbon Allotrope with Potential Application as an Anode Material for High-Performance Sodium-Ion Batteries." *Physical Chemistry Chemical Physics* 24, no. 18 (2022): 10712-16.

[25] H. Shen, , R. Yang, K. Xie, Z. Yu, Y. Zheng, R. Zhang, L. Chen, *B.R. Wu, W.S. Su, and S. Wang.* "Electronic and Optical Properties of Hydrogen-Terminated Biphenylene Nanoribbons: A First-Principles Study." *Physical Chemistry Chemical Physics* 24, no. 1 (2022): 357-65.

[26] A. Bafekry, M. Faraji, M.M. Fadlallah, H.R. Jappor, S. Karbasizadeh, M. Ghergherehchi, and D. Gogova. "Biphenylene Monolayer as a Two-Dimensional Nonbenzenoid Carbon Allotrope: A First-Principles Study." *Journal of Physics: Condensed Matter* 34, no. 1 (2021): 015001.

[27] O. Rahaman, B. Mortazavi, A. Dianat, G. Cuniberti, and T. Rabczuk. "Metamorphosis in Carbon Network: From Penta-Graphene to Biphenylene under Uniaxial Tension." *FlatChem* 1 (2017): 65-73.

[28] Y. Luo, C. Ren, Y. Xu, J. Yu, S. Wang, and M. Sun. "A First Principles Investigation on the Structural, Mechanical, Electronic, and Catalytic Properties of Biphenylene." *Scientific Reports* 11, no. 1 (2021): 19008.

[29] B. Mortazavi, and A.V. Shapeev. "Anisotropic Mechanical Response, High Negative Thermal Expansion, and Outstanding Dynamical Stability of Biphenylene Monolayer Revealed by Machine-Learning Interatomic Potentials." *FlatChem* 32 (2022): 100347.

[30] A.H. Mashhadzadeh, M. Zarghami Dehaghani, F. Molaie, S. Fooladapanjeh, O. Farzadian, and C. Spitas. "A Theoretical Insight into the Mechanical Properties and Phonon Thermal Conductivity of Biphenylene Network Structure." *Computational Materials Science* 214 (2022): 111761.

[31] H.P. Veeravenkata, and A. Jain. "Density Functional Theory Driven Phononic Thermal Conductivity Prediction of Biphenylene: A Comparison with Graphene." *Carbon* 183 (2021): 893-98.

[32] Q. Li, J. Zhou, G. Liu, and X. Wan. "Extraordinary Negative Thermal Expansion of Monolayer Biphenylene." *Carbon* 187 (2022): 349-53.

[33] K. Ke, K. Meng, J. Rong, and X. Yu. "Biphenylene: A Two− Dimensional Graphene− Based Coating with Superior Anti− Corrosion Performance." *Materials* 15, no. 16 (2022): 5675.

[34] O. Farzadian, M. Zarghami Dehaghani, K.V. Kostas, A.H. Mashhadzadeh, and C. Spitas. "A Theoretical Insight into Phonon Heat Transport in Graphene/Biphenylene Superlattice Nanoribbons: A Molecular Dynamic Study." *Nanotechnology* 33, no. 35 (2022): 355705.

[35] G. Liu, T. Chen, X. Li, Z. Xu, and X. Xiao. "Electronic Transport in Biphenylene Network Monolayer: Proposals for 2d Multifunctional Carbon-Based Nanodevices." *Applied Surface Science* 599 (2022): 153993.

[36] M. Zarghami Dehaghani, O. Farzadian, K.V. Kostas, F. Molaei, C. Spitas, and A.H. Mashhadzadeh. "Theoretical Study of Heat Transfer across Biphenylene/H-Bn Superlattice Nanoribbons." *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 144 (2022): 115411.

[37] B.Q. Zhang, and Z.G. Shao. "Structure and Interaction between the Novel Graphene-Like Planar Biphenylene Network and DNA: Molecular Dynamics Simulations." *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 146 (2023): 115547.

[38] X.W. Chen, Z.Z. Lin, and X.M. Li. "Biphenylene Network as Sodium Ion Battery Anode Material." *Physical Chemistry Chemical Physics* (2023).

[39] C.M. Long, M.A. Nascarella, and P.A. Valberg. "Carbon Black Vs. Black Carbon and Other Airborne Materials Containing Elemental Carbon: Physical and Chemical Distinctions." *Environmental Pollution* 181 (2013): 271-86.

[40] M. Tang, and S. Yip. "Atomistic Simulation of Thermomechanical Properties of B-Sic." *Physical Review B* 52, no. 21 (1995): 15150.

[41] O. Rahaman, B. Mortazavi, A. Dianat, G. Cuniberti, and T. Rabczuk. "A Structural Insight into Mechanical Strength of Graphene-Like Carbon and Carbon Nitride Networks." *Nanotechnology* 28, no. 5 (2016): 055707.

[42] M.A. Hudspeth, B.W. Whitman, V. Barone, and J.E. Peralta. "Electronic Properties of the Biphenylene Sheet and Its One-Dimensional Derivatives." *ACS Nano* 4, no. 8 (2010): 4565-70.

[43] H. Terrones, M. Terrones, E. Hernández, N. Grobert, J.C. Charlier, and P.M. Ajayan. "New Metallic Allotropes of Planar and Tubular Carbon." *Physical Review Letters* 84, no. 8 (2000): 1716.