

بررسی خواص مکانیکی تک‌لایه بیفنیلین در دماهای مختلف

محمد امین همت پور خطبه سرا^۱، مسعود اجری*^۲، مجید صمدیان^۳

اطلاعات مقاله	چکیده
دریافت مقاله: ۱۴۰۲/۰۴/۱۰ پذیرش مقاله: ۱۴۰۲/۰۷/۱۵	در این مطالعه رفتار مکانیکی جدیدترین آلوتروپ کربن به نام شبکه بیفنیلین (BPN) با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفته است. ساختار BPN از حلقه‌های چهار، شش و هشت‌ضلعی از اتم‌های کربن هیبرید شده با sp^2 تشکیل شده است. پتانسیل بین اتمی در این مطالعه از نوع ایربو در نظر گرفته شده و رفتار کششی این ساختار در دماهای مختلف مدل‌سازی شده است. پس از شبیه‌سازی، مدول یانگ و تنش تسلیم بیفنیلین 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 انوتروپیک 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

^۱ دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک- طراحی کاربردی، دانشکده فنی، دانشگاه محقق اردبیلی، ایران
manhprm@gmail.com

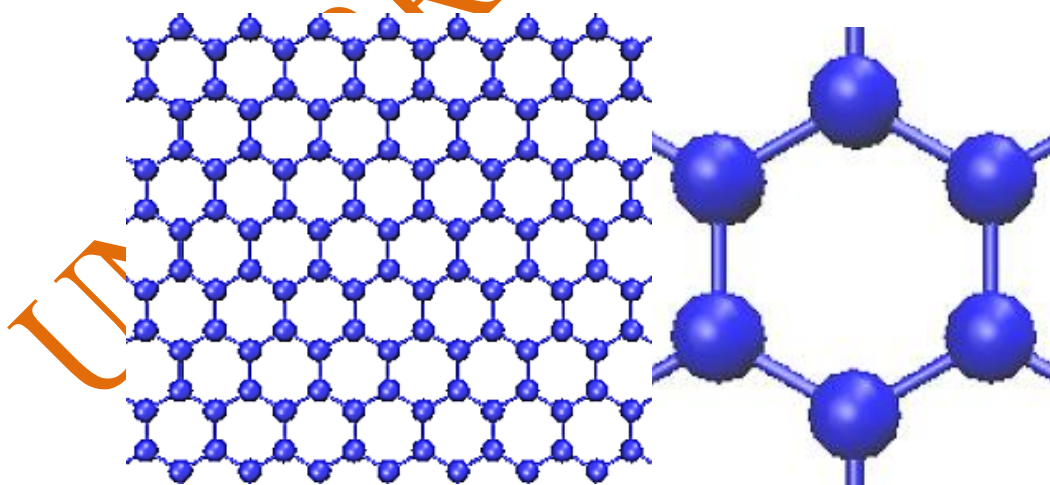
^۲ استادیار گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی، دانشگاه محقق اردبیلی، ایران
m.ajri@uma.ac.ir*

^۳ دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک- طراحی کاربردی، دانشکده فنی، دانشگاه محقق اردبیلی، ایران
majidsamadiyan77@gmail.com

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 120° درجه به وجود می‌آید [۱]. آلوتروپ‌های متعدد کربن به دلیل ظرفیت شیمیایی‌اش است و خواص اتصال منحصر به فرد آن می‌تواند 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^۱، فایگرافین، پنتاگرافین [۶]، گرافینیلین و غیره را اشاره کرد. متداول‌ترین آلوتروپ کربن، گرافیت^۲ 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 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 130 گیگاپاسکال، مدول یانگ بزرگ تا 1 تراپاسکال و هدایت حرارتی بسیار بالا در محدوده 3000 تا 5800 W/(mK) است که بالاتر از مقدار مشابه در هر آلوتروپ کربن دوبعدی شناخته شده دیگری است و دلیل آن هم پیوند قوی هیبرید شده با sp^2 و شبکه لانه زنبوری با تقارن بسیار بالا است [۸-۱۱]. به دلیل استحکام پیوند کووالانسی بین اتم‌های کربن، گرافین استحکام کششی بسیار بالایی دارد. طول پیوند کربن-کربن در گرافین در حدود 0.142 نانومتر است. امروزه ورق گرافین به طور گسترده‌ای در نانوسنسورها، نانوسانگرها، باتری‌های 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.

² Graphite

¹ Graphene

روش‌های اتمی و قابلیت مدل‌سازی تعداد زیادی اتم است [۲۰-۲۲]. برای انجام محاسبات در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی، باید شرایط معینی بر ساختار اتمی مورد مطالعه اعمال شود که برای این منظور نسبت به انتخاب هنگرد^۳ در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی اقدام می‌شود. آقای مارسلو لوپز پیرا جونیور و همکارانش [۲۳] در سال ۲۰۲۲ خواص مکانیکی و حرارتی BPN غیرمعیوب و معیوب را با استفاده از شبیه‌سازی‌های MD کاملاً اتمی با میدان نیروی واکنشی ReaxFF که در کد شبیه‌ساز موزی 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^۴ و زیگزاگ^۵ و نقطه ذوب BPN را ۴۰۲۴ کلون بدست آوردند که قابل مقایسه با مقدار گرافین است، البته ذوب کامل BPN در حدود ۵۰۰۰ کلون مشاهده شد. خانم تینگ هان و همکارانش [۲۴] در سال ۲۰۲۲ که بر روی تک‌لایه بیفنیلین از طریق محاسبات جامع تئوری تابعی چگالی^۶ انجام دادند متوجه شدند که مقدار مدول یانگ بیفنیلین را در جهت زیگزاگ^۵ ۲۵۵.۰۷ نیوتن بر متر و در جهت آرمچیر^۴ ۲۰۳.۱۳ نیوتن بر متر بدست آوردند. آقای هنگ شن و همکارانش [۲۵] در سال ۲۰۲۲ توسط تئوری تابعی چگالی، مقادیر ۲۵۰.۳۱ و ۲۱۱.۴۶ نیوتن بر متر را برای مدول یانگ بیفنیلین بدست آوردند و ذکر کردند که خواص مکانیکی BPN نسبت به گرافین برتری ندارد. آقای پنقوا ینگ و همکارانش [۱۵] در سال ۲۰۲۲ شبکه بیفنیلین، پنتاهیتیت و گرافین را مورد مقایسه قرار دادند. تمام محاسبات هدایت حرارتی بر اساس شبیه‌سازی‌های MD در دمای اتاق (۳۰۰ کلون) با استفاده از بسته منبع باز واحدهای پردازش گرافیکی دینامیک مولکولی^۷ انجام شد. بیفنیلین با پتانسیل بین اتمی ایربو مورد

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 بیفنیلین^۱ 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 غیربازن بیفنیلین 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 بیفنیلین 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 بیفنیلین 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 بیفنیلین در الکترونیک و اپتوالکترونیک در محدوده مرئی کاربرد دارند [۱۸]. برای مدل‌سازی رفتار نانو ساختارهای کربن روش‌های مختلفی وجود دارد که بازرترین این روش‌ها، روش دینامیکی مولکولی^۲ (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 هم‌همی توابع وابسته به آن‌ها تشکیل شده‌اند. این روش دارای مزایایی همچون دقت بالا با نتایج تجربی، محاسبات مقرون به صرفه در مقایسه با سایر

⁵ Zigzag

⁶ Density Functional Theory (DFT)

⁷ Graphics Processing Units Molecular Dynamics (GPUMD)

¹ Biphenylene (BPN)

² Molecular Dynamic (MD)

³ Ensemble

⁴ Armchair

شبیه‌سازی قرار گرفت و مقادیر مدول یانگ بیفینیلن را در جهت آرمچیر ۵۶۳.۵ گیگاپاسکال و در جهت زیگزگاک ۶۳۲.۷ گیگاپاسکال بدست آوردند. آن‌ها رسانایی حرارتی شبکه بیفینیلن 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 بیفینیلن است. آقای اسدالله بافکری و همکارانش [۲۶] در سال ۲۰۲۱ در مطالعه‌ای با استفاده از محاسبات تئوری عملکردی چگالی، مقدار مدول یانگ بیفینیلن را ۰.۱ تراپاسکال اعلام کردند که از مقدار مربوط به گرافین کوچک‌تر است، در حالی که نسبت بواسون 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 بیفینیلن فلزی تحت بارگذاری کشش تک‌محوری پرداختند، مقدار مدول یانگ بیفینیلن در جهت X یا آرمچیر 613 ± 35 گیگاپاسکال و در جهت Y یا زیگزگاک 716 ± 45 گیگاپاسکال بدست آوردند. ساختار الکترونیکی آن نشان می‌دهد که در هر دو شکل ورق و لوله، فلزی است. خانم بی‌لو و همکارانش [۲۸] در سال ۲۰۲۱ با استفاده از تئوری تابعی چگالی مقدار مدول یانگ بیفینیلن را در جهت X یا زیگزگاک 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 بیفینیلن پرداختند، مقدار مدول یانگ بیفینیلن را در جهت زیگزگاک ۷۲۹ گیگاپاسکال و در جهت آرمچیر ۶۲۰ گیگاپاسکال بدست آوردند. آن‌ها دریافتند که شبکه بیفینیلن نیز دارای انبساط حرارتی منفی است، که نسبت به گرافین در دمای اتاق دوبرابر می‌باشد. همچنین آن‌ها ذکر کردند که بیفینیلن 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 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 بیفینیلن شامل مدول یانگ و تنش حد نهایی مورد بررسی قرار گرفته است. در مرحله اول انرژی نانوساختار بیفینیلن 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 زیگزگاک 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 بیفینیلن در دمای محیط استفاده شده است. در مطالعه حاضر، با این پتانسیل خواص مکانیکی تک‌لایه بیفینیلن در دماهای محیط و دماهای بالاتر شامل ۶۰۰ و ۹۰۰ کلوین و بدون هیچ فشاری در هیچ جهتی بررسی شده است.

۲- مدل سازی

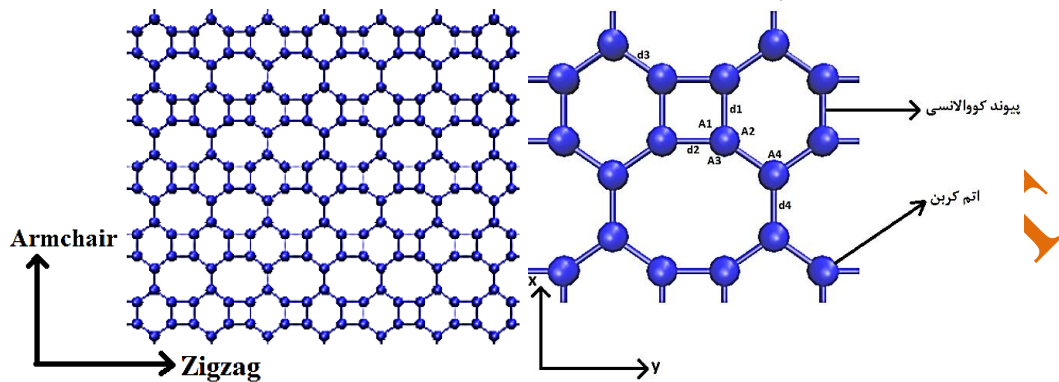
۲-۱ ساختار بیفینیلن

همانطور که بیان شد در سال ۲۰۲۱ محققان مطالعه تجربی جدیدی را انجام داده‌اند که در این مطالعه، نوع غیربنزن بیفینیلن [۱۴] را کشف کرده‌اند که به نازکی گرافین و به اندازه یک اتم است یعنی ۳.۴ آنگستروم (Å). شبکه بیفینیلن دومین آلوتروپ جذاب کربن کاملاً هیبرید شده sp^2 خالص است که اخیراً از طریق یک رویکرد از پایین به بالا با موفقیت سنتز شده است و در شکل (۲) نشان داده شده است [۱۵]. ورق بیفینیلن از یک شبکه کربنی با یک سلول واحد که توسط شش اتم کربن است تشکیل شده است و این شبکه کربنی برخلاف

¹ Bottom-up approach

شده است که از یک شبکه منظم نشات گرفته شده‌اند و متفاوت از گرافین است.

حلقه‌های شش‌ضلعی گرافین، از آرایش سه حلقه متناوب چهارضلعی، شش‌ضلعی و هشت‌ضلعی از اتم‌های کربن که توسط هیبریداسیون sp^2 هستند به هم متصل شده‌اند تشکیل



شکل ۲- شبکه بیفنیلین رسم شده با vmd.

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:

$$E = E^{REBO} + E^{LJ} + E^{TORS} \quad (1)$$

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

۲-۳ شرایط شبیه‌سازی

در این مطالعه اندازه تک‌لایه مورد مطالعه $112 \times 116 \times 3.4$ آنگستروم مکعب می‌باشد. تعداد کل اتم‌های تک‌لایه ۴۶۸۰ است. تک‌لایه بیفنیلین دارای شرایط مرزی پریودیک در جهات x و y است. در دینامیک مولکولی فرآیند متعادل‌سازی 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 کلین 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

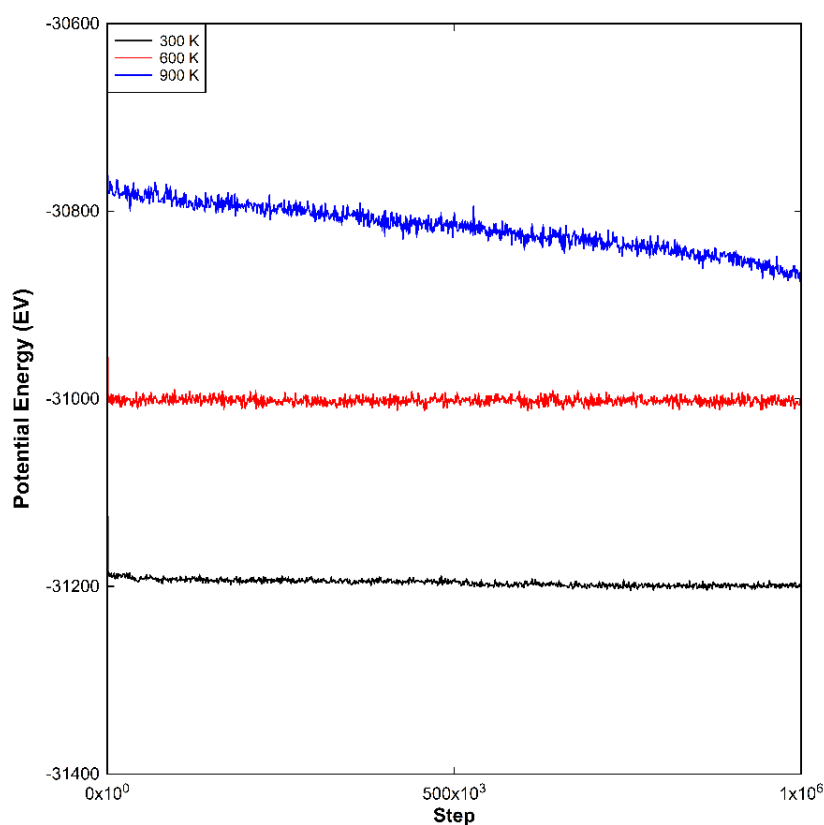
ثابت‌های شبکه BPN، ۳.۷۵ آنگستروم (Å) و ۴.۵۲ آنگستروم محاسبه شده‌اند که به ترتیب برای زیگزاگ و آرمچیر هستند و طول‌های پیوند مختلف C-C، $d_1 = 1.458 \text{ \AA}$ ، $d_2 = 1.454 \text{ \AA}$ ، $d_3 = 1.407 \text{ \AA}$ و $d_4 = 1.447 \text{ \AA}$ در بیفنیلین با زاویه‌های پیوند مربوطه $A_1 = 90^\circ$ ، $A_2 = 125^\circ$ ، $A_3 = 145^\circ$ و $A_4 = 110^\circ$ درجه که در مطالعات قبلی بدست آمده‌اند [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^۱ (لمپس) انجام شده است [۳۹]. در این مقاله از دسته پتانسیل‌های بین اتمی غیرپیوندی در بین ذرات برهمکنش‌کننده در طول شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی در نرم افزار لمپس اعمال شده است. همانطور که بیان شد در این پژوهش از پتانسیل ایروو برای توصیف و تعیین تعامل و برهمکنش‌های بین اتم‌های کربن C-C در ساختار بیفنیلین استفاده شده است [۴۰]. پتانسیل ایروو یک پتانسیل بین اتمی غیرپیوندی سه‌جسمی - چند جسمی به شمار می‌رود که این پتانسیل بین اتمی در

¹ Lammmps

مقادیر آن برابر با منفی ۳۱۲۰۰، ۳۱۰۰۰ و ۳۰۸۰۰ الکترون-ولت است و در شکل (۳) آورده شده است.



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

شده است و مرحله دوم با هنگرد NVT در دماهای مختلف تست کشش انجام گرفته شده است.

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 غیر پیوندی ایربو صورت گرفت و مشاهده شد که پتانسیل ایربو می‌تواند توصیف خوبی از برهمکنش‌های کربن-کربن در ساختار بیفینیلین ارائه دهد و توانسته است انرژی سیستم را در حالت پایدار حفظ کند. با توجه به جدول ۱- می‌توان مقادیر مدول

با توجه به نمودار شکل (۳) این نتیجه را می‌توان گرفت که، با افزایش دما انرژی پتانسیل هر دما مقادیر مثبت تری 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 نمی‌شود. مقدار گام زمانی (time step) ۲ fs (فمتو ثانیه) در این شبیه‌سازی در نظر گرفته شده است. مقدار نرخ کرنش ۱/ps در ۰.۰۰۱ در نظر گرفته شده است. این شبیه‌سازی در دو مرحله صورت گرفته است. در مرحله اول در دماهای مختلف متعادل سازی

است. این خاصیت ارتوتروپی با نظریه تابعی چگالی (DFT) انجام شده بر روی بیفنیلین [۴۲] و دیگر آلوتروپ های فلزی دوبعدی کربن [۴۳] و انرژی بیشتر مشاهده شده در جهت زیگزاگ نسبت به جهت آرمچیر [۲۷] مطابقت دارد.

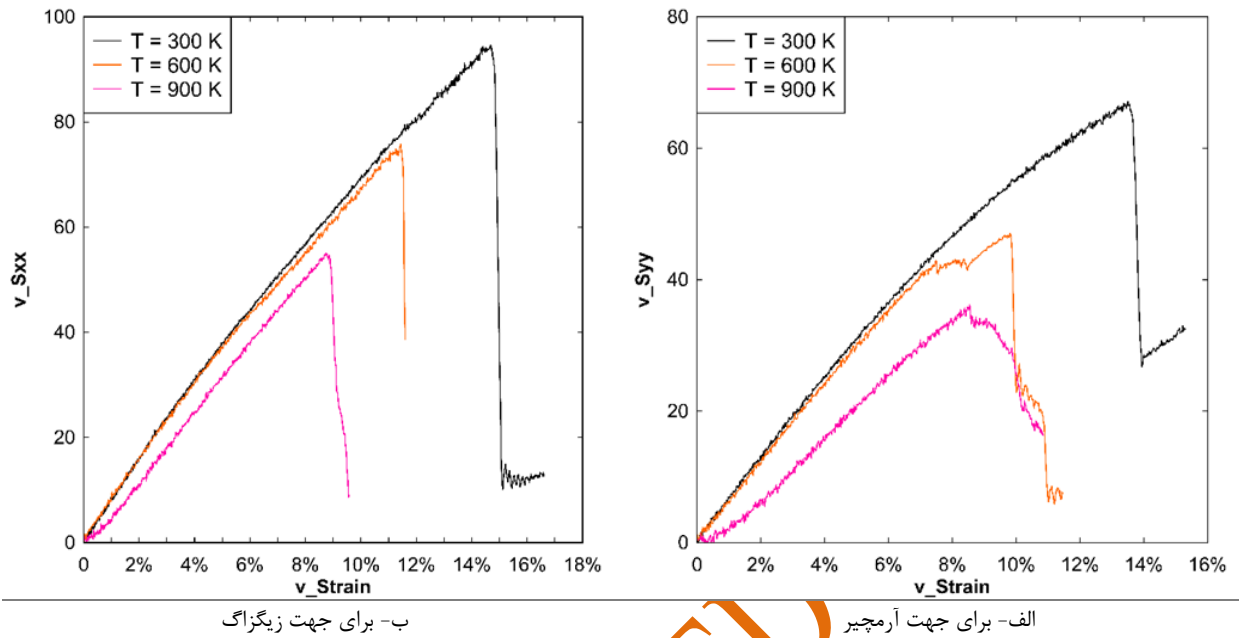
در جدول-۱ علاوه بر مقدار مدول یانگ مقادیر تنش حد نهایی محاسبه شده برای تک لایه بیفنیلین در راستای زیگزاگ و آرمچیر نیز آورده شده است. تنش نهایی برای جهت زیگزاگ در دماهای ۳۰۰، ۶۰۰ و ۹۰۰ کلوین به ترتیب ۹۴، ۷۵ و ۵۵ گیگاپاسکال می باشد. این مقادیر برای جهت آرمچیر نیز به ترتیب برابر ۶۶، ۴۷ و ۳۶ گیگاپاسکال می باشد. می توان دریافت که در جهت زیگزاگ مقدار تنش حد نهایی بیشتر است، بنابراین در این جهت پیوندهای اتمی دیرتر گسسته می شوند و شکست تک لایه در این جهت در تنش بالایی رخ می دهد. همچنین با افزایش دما، مقادیر مدول یانگ و تنش حد نهایی به دلیل افزایش فواصل بین اتمی ساختار و کاهش انرژی اتصال، کاهش می یابد.

یانگ های محاسبه شده برای تک لایه بیفنیلین در این شبیه سازی در دماهای مختلف در راستای زیگزاگ و آرمچیر را مشاهده کرد. مدول یانگ های بدست آمده در این پژوهش مشابه به مقالات قبلی [۲۶، ۳۴-۴۰] می باشد، که برای جهت زیگزاگ در بازه ۶۳۲ تا ۷۶۴ گیگاپاسکال و برای جهت آرمچیر در بازه ۵۶۳ تا ۱۰۱۹ گیگاپاسکال می باشد. این اعداد نشان می دهد که این نانوساختار خواص مکانیکی قابل توجهی در تمام دماهای مورد مطالعه دارد. علاوه بر این مدول یانگ بیفنیلین کمتر از مدول یانگ گرافین (حدود ۱۰۰۰ گیگاپاسکال) می باشد، که با توجه به دانسیته سطحی بیشتر گرافین (تعداد اتم تقسیم بر سطح) نسبت به بیفنیلین و رابطه بین مدول الاستیک و دانسیته اتمی [۴۱] این نتیجه قابل قبول می باشد. همچنین نتایج جدول نشان می دهند 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 می باشد و نشان می دهد که مقاومت در برابر کرنش در جهت زیگزاگ بیشتر از آرمچیر

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

در شکل (۴) نمودار تنش و کرنش مربوط به تست کشش بیفنیلین در دو جهت زیگزاگ و آرمچیر آورده شده است.

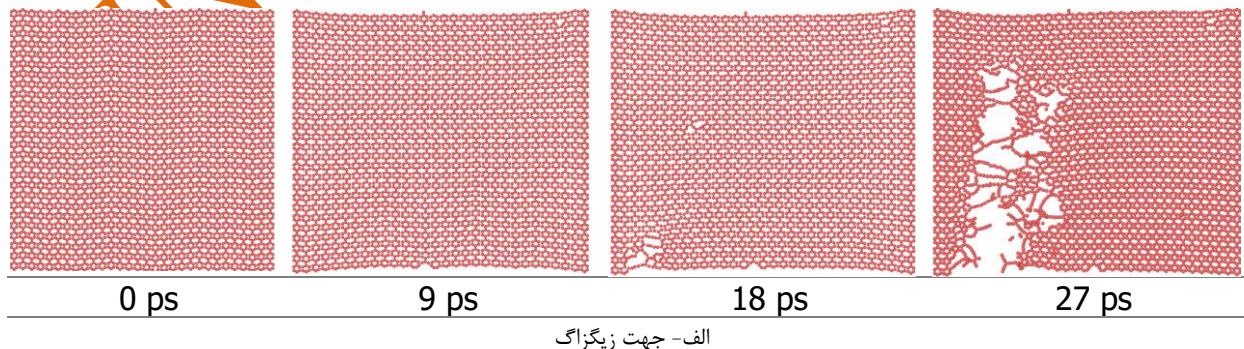


شکل ۴- نمودار تنش کرنش برای تک‌لایه بیفنیلین در جهت آرمچیر و زیگزاگ برای دماهای مختلف.

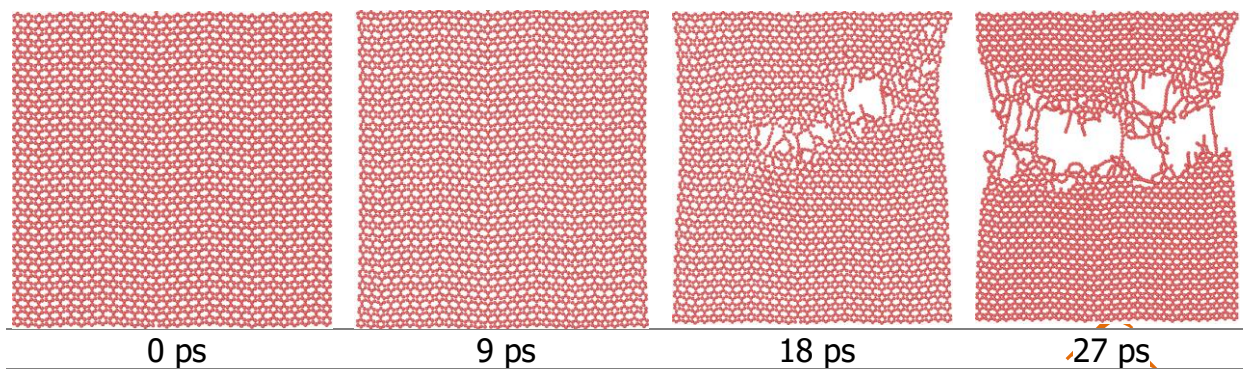
آرمچیر است. همچنین با افزایش دما از ۳۰۰ به ۹۰۰ کلوین مقدار کرنش شکست از حدود ۱۵٪ در جهت زیگزاگ به ۸.۵٪ کاهش می‌یابد. همین نتایج عیناً برای جهت آرمچیر نیز مشاهده می‌شود و کرنش شکست از حدود ۱۴٪ به ۸.۲٪ درصد کاهش پیدا کرده است.

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

کاربرد بیفنیلین به عنوان یک نانو ماده کربنی دوبعدی به شدت به مقاومت و پایداری مکانیکی آن بستگی دارد. به منظور تخمین استحکام مکانیکی بیفنیلین، تغییر تنش تحت کرنش تک‌محوری محاسبه شده است. 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



الف- جهت زیگزاگ



ب- جهت آرمچیر

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

۲- در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از پتانسیل بین اتمی غیرپیوندی اربو صورت گرفت و مشاهده شد که پتانسیل اربو 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 بیفنیلن 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 آرمچیر است.

۵- کرنش شکست در جهت زیگزاگ بیشتر از کرنش شکست در جهت آرمچیر 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.

با توجه نمودار شکل (۴) و شکل (۵) برای تک‌لایه بیفنیلن 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 بیفنیلن در مقابل گرافین، دینامیک شکست متمایزی را نشان می‌دهد. در گام-های زمانی مساوی، آرایش اتمی بیفنیلن در جهت آرمچیر، فروپاشی پیوندهای اتمی بیشتری نسبت به جهت زیگزاگ رخ می‌دهد.

۴- نتیجه گیری

در این مطالعه رفتار مکانیکی شبکه بیفنیلن با استفاده از پتانسیل اربو 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 آرمچیر است بنابراین مقاومت در برابر کرنش در جهت زیگزاگ بیشتر از جهت آرمچیر است.

- [١] H. O. Pierson, *Handbook of carbon, graphite, diamonds and fullerenes: processing, properties and applications*. William Andrew, 2012.
- [٢] 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*, vol. 5, no. 9, pp. 739-744, 2013.
- [٣] P. Karthik, A. Himaja, and S. P. Singh, "Carbon-allotropes: synthesis methods, applications and future perspectives," *Carbon letters*, vol. 15, no. 4, pp. 219-235, 2014.
- [٤] 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*, vol. 104, pp. 235-250, 2016.
- [٥] H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O'Brien, R. F. Curl, and R. E. Smalley, "C60: Buckminsterfullerene," *nature*, vol. 318, no. 6042, pp. 162-163, 1985.
- [٦] 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*, vol. 112, no. 8, pp. 2372-2377, 2015.
- [٧] N. Deprez and D. McLachlan, "The analysis of the electrical conductivity of graphite conductivity of graphite powders during compaction," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 21, no. 1, p. 101, 1988.
- [٨] K. D. Sattler, *Carbon nanomaterials sourcebook*. CRC Press Boca Raton, FL, USA, 2016.
- [٩] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, "Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene," *science*, vol. 321, no. 5887, pp. 385-388, 2008.
- [١٠] A. A. Balandin *et al.*, "Superior thermal conductivity of single-layer graphene," *Nano letters*, vol. 8, no. 3, pp. 902-907, 2008.
- [١١] S. Chen *et al.*, "Raman measurements of thermal transport in suspended monolayer graphene of variable sizes in vacuum and gaseous environments," *ACS nano*, vol. 5, no. 1, pp. 321-328, 2011.
- [١٢] S. Pradhan and T. Murnu, "Small scale effect on the buckling of single-layered graphene sheets under biaxial compression via nonlocal continuum mechanics," *Computational materials science*, vol. 47, no. 1, pp. 268-274, 2009.
- [١٣] W. Humphrey, A. Dalke, and K. Schulten, "VMD: visual molecular dynamics," *Journal of molecular graphics*, vol. 14, no. 1, pp. 33-38, 1996.
- [١٤] Q. Fan *et al.*, "Biphenylene network: A nonbenzenoid carbon allotrope," *Science*, vol. 372, no. 6544, pp. 852-856, 2021.
- [١٥] 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*, vol. 183, p. 122060, 2022.
- [١٦] M. M. Obeid and Q. Sun, "Assembling biphenylene into 3D porous metallic carbon allotrope for promising anode of lithium-ion batteries," *Carbon*, vol. 188, pp. 95-103, 2022.
- [١٧] P. A. Denis and F. Iribarne, "Hydrogen storage in doped biphenylene based sheets," *Computational and theoretical chemistry*, vol. 1062, pp. 30-35, 2015.
- [١٨] S. Wang, "Optical response and excitonic effects in graphene nanoribbons derived from biphenylene," *Materials Letters*, vol. 167, pp. 258-261, 2016.

- [19] M. Z. Dehaghani, F. Molaie, C. Spitas, and A. H. Mashhadzadeh, "Thermal rectification in nozzle-like graphene/boron nitride nanoribbons: A molecular dynamics simulation," *Computational Materials Science*, vol. 207, p. 111320, 2022.
- [20] M. Z. Dehaghani *et al.*, "An insight into thermal properties of BC₃-graphene hetero-nanosheets: A molecular dynamics study," *Scientific reports*, vol. 11, no. 1, p. 23064, 2021.
- [21] S. Fooladpanjeh *et al.*, "Thermal conductivity of random polycrystalline BC₃ nanosheets: A step towards realistic simulation of 2D structures," *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, vol. 107, p. 107977, 2021.
- [22] M. Z. Dehaghani *et al.*, "Boron nitride nanotube as an antimicrobial peptide carrier: a theoretical insight," *International Journal of Nanomedicine*, vol. 16, p. 1837, 2021.
- [23] M. Pereira, W. da Cunha, R. de Sousa, G. A. Nze, D. Galvão, and L. Ribeiro, "On the mechanical properties and fracture patterns of the nonbenzenoid carbon allotrope (biphenylene network): a reactive molecular dynamics study," *Nanoscale*, vol. 14, no. 8, pp. 3200-3211, 2022.
- [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*, vol. 24, no. 18, pp. 10712-10716, 2022.
- [25] H. Shen *et al.*, "Electronic and optical properties of hydrogen-terminated biphenylene nanoribbons: a first-principles study," *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 24, no. 1, pp. 357-365, 2022.
- [26] A. Bafekry *et al.*, "Biphenylene monolayer as a two-dimensional nonbenzenoid carbon allotrope: a first-principles study," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 34, no. 1, p. 015001, 2021.
- [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*, vol. 1, pp. 65-73, 2017.
- [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*, vol. 11, no. 1, p. 19008, 2021.
- [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*, vol. 32, p. 100347, 2022.
- [30] A. H. Mashhadzadeh, M. Z. Dehaghani, F. Molaie, S. Fooladpanjeh, O. Farzadian, and C. Spitas, "A theoretical insight into the mechanical properties and phonon thermal conductivity of biphenylene network structure," *Computational Materials Science*, vol. 214, p. 111761, 2022.
- [31] H. P. Veeravenkata and A. Jain, "Density functional theory driven phononic thermal conductivity prediction of biphenylene: A comparison with graphene," *Carbon*, vol. 183, pp. 893-898, 2021.
- [32] Q. Li, J. Zhou, G. Liu, and X. Wan, "Extraordinary negative thermal expansion of monolayer biphenylene," *Carbon*, vol. 187, pp. 349-353, 2022.
- [33] K. Ke, K. Meng, J. Rong, and X. Yu, "Biphenylene: A Two-Dimensional Graphene-Based Coating with Superior Anti-Corrosion Performance," *Materials*, vol. 15, no. 16, p. 5675, 2022.
- [34] O. Farzadian, M. Z. 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*, vol. 33, no. 35, p. 355705, 2022.
- [٣٥] 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*, vol. 59, p. 153993, 2022.
- [٣٦] M. Z. 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*, vol. 144, p. 115411, 2022.
- [٣٧] 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*, vol. 146, p. 115547, 2023.
- [٣٨] X.-W. Chen, Z.-Z. Lin, and X.-M. Li, "Biphenylene Network as Sodium Ion Battery Anode Material," *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2023.
- [٣٩] 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*, vol. 181, pp. 271-286, 2013.
- [٤٠] M. Tang and S. Yip, "Atomistic simulation of thermomechanical properties of β -SiC," *Physical Review B*, vol. 51, no. 21, p. 15150, 1995.
- [٤١] 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*, vol. 28, no. 5, p. 055707, 2016.
- [٤٢] 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*, vol. 4, no. 8, pp. 4565-4570, 2010.
- [٤٣] H. Terrones, M. Terrones, E. Hernández, N. Grobert, J.-C. Charlier, and P. Ajayan, "New metallic allotropes of planar and tubular carbon," *Physical review letters*, vol. 84, no. 8, p. 1716, 2000.

Mechanical properties analysis of a monolayer biphenylene at different temperatures

Mohammad Amin Hemmatpour Khotbesara¹, Masoud Ajri ^{2*}, Majid Samadiyan ¹

1..MSc. Student, Department of Mechanical Engineering, University of Mohaghegh Ardabili, Iran.

2. Assistant Professor, Department of Mechanical Engineering, University of Mohaghegh Ardabili, Iran.

*Corresponding Author: m.ajri@uma.ac.ir

ARTICLE INFO

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 sp^2 . 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.

UNCORRECTED PROOF