



Investigation of the mechanical properties of multilayer graphene helicoids with different geometric characteristics using molecular dynamics simulation

A. najafi¹, S. M. Taheri², R. basafa^{2*}

¹ Department of Mechanical engineering, Emam Hossein University, Tehran, Iran

² Department of Mechanical Engineering, Tehran University, Tehran, Iran

ABSTRACT: Graphene helicoid is a man-made spiral structure that has recently been created with the advent of nanotechnology inspired by nature. In this study, the mechanical properties of multilayer graphene helicoid with different geometric characteristics are studied using molecular dynamics simulation and the relationship between several layers, geometric properties, and mechanical properties of nanoparticles are investigated. The results show that the unique geometric properties of these nanoparticles produce interesting mechanical properties that are highly dependent on their structure. The stages of the tensile behavior of these nanoparticles are altered by increasing the number of layers corresponding to the geometric characteristics of the nanoparticles. One of the most important characteristics of these nanoparticles is their high stretchability, even for some specimens, up to 3000%, which, with the addition of a layer to their structure, decreases sharply. The results also indicate a strong increase in force in the small strain range with the onset of the stretching process due to the strong Van der Waals forces between the adjacent layers. The spring constant for these nanoparticles is calculated in this initial area of the tensile test and, decreases with the addition of the layers. Identifying the properties of multilayered graphene helicoid can lead to an increase in their efficiency and their optimal performance in nanoscale devices and even improve multiscale performance.

Review History:

Received: Aug. 16, 2019

Revised: Dec. 28, 2019

Accepted: Jan. 26, 2020

Available Online: Feb. 15, 2020

Keywords:

Mechanical properties

Multilayer Graphene Helicoid

Molecular Dynamic simulation

Geometric dependent propertie

spiral nanostructures

1. INTRODUCTION

With regards to advancement in the domain of nanotechnology, and the methods of producing nanomaterial, and by patterning the substances available in nature, the researchers have proposed a spiral model based on the nanomaterial. Coiled carbon nanotubes, were studied in experimental [1] and theoretical forms and in molecular model [6-2]. The interesting properties of the coiled carbon nanotubes are due to carbon bonds with sp² hybridization, as well as its spiral structure. Enjoying its spiral geometry, this structure can result in a more energy attraction in nanocomposites [7]. Nowadays, new forms of spiral structures have been made experimentally based on 2D materials such as graphene [9,8], or MoS₂ [10]. Through another research Sharifian et al. [11], reviewed the mechanical properties of the net and functionalized spiral graphenes. They Figured out that by functionalizing the nanostructures in different percentages, and various distributions, we can achieve some completely different mechanical properties.

Despite the studies conducted in the domain of mechanical properties of spiral graphene nanostructures, the influence of the change of geometric characteristics of this spiral structure alongside increase of layers of spiral Graphene, have not yet been reviewed. In this research, we study the mechanical properties of the multilayer spiral graphene with different geometric characteristics. The influence of the increase

of layers in these nanostructures from one to three layers has been reviewed in three different samples. The spring's stability, elasticity, final fracture strength, and the mechanical response procedure under the tensile testing in multilayer spiral Graphene are studies.

2. RESEARCH METHOD

All the calculations have been conducted based on the molecular dynamic method through the LAMMPS Open-source software. The AIREBO Potential [12] was used for the simulation of multi-interactions. This potential has the ability of constituting and breaking the covalent bonds of C-C and C-H, and is made of three parts:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left[E_{ij}^{LJ} + \sum_{k \neq l \neq i, j, k} E_{kijl}^{TORSION} + E_{ij}^{REBO} \right] \quad (1)$$

where the E_{ij}^{REBO} represents the REBO potential, E_{ij}^{LJ} , represents the long-distant interactions and $E_{kijl}^{TORSION}$ represents the spiral interactions. To remove the nonphysical effects, the cut-off radius for the REBO 2 part was taken as 2 angstroms. [13, 14]. Initially, the structure's energy was optimized through the conjugate gradient method. And then, the structure was balanced under the fixed pressure – fixed temperature ensemble (NPT), based on Nosé–Hoover thermostat and Nosé–Hoover

*Corresponding author's email: basafa.reza@yahoo.com



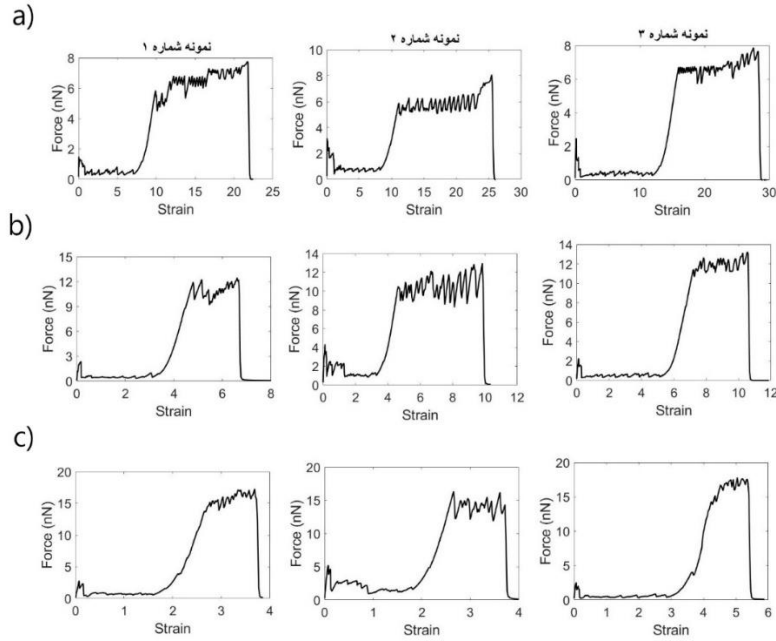


Fig. 1. The tensile behavior of spiral graphene for samples No. 1, 2, and 3 in the forms of (a) single-layer (b) dual-layer and (c) triple-layer

barostat at zero pressure for 400 to 700 ps. The 1K temperature was chosen to review the structures to decrease the influence of thermal fluctuations [4,5].

In all the single-layer structures, seven loops have been used. After balancing, the tensile testing was done to prevent the influences of the number of layers with given the periodic boundary condition. The appropriate strain rate i.e. $10^8 \frac{1}{s}$ is applied all over the tension. This part of the simulation was made through the fixed-temperature ensemble (NVT) under the Nosé–Hoover thermostat. The time step of 1fs is used for all the simulations. To calculate the stress-strain curve, the virial stress relation was used [18]:

$$\sigma_{ij}^{\alpha} = \frac{1}{V^{\alpha}} \left(\frac{1}{2} m^{\alpha} v_i^{\alpha} v_j^{\alpha} + \sum_{\beta=1,n} r_{\alpha\beta}^j f_{\alpha\beta}^i \right) \quad (2)$$

where the β and α represent the atoms and the i and j represent the components of the Cartesian coordinate. m and v indicate the velocity and mass of the atoms respectively. $f_{\alpha\beta}$ and $r_{\alpha\beta}$ respectively indicate the energy and distance between the β and α atoms.

3. RESULTS AND DISCUSSION

Study of the tensile behavior of different spiral Graphene structures for three samples with different geometrical particulars (internal radius, external radius, and nanostructure thickness) were studied with one, two, or three layers. The simultaneous effect of changing the geometrical particulars of the structures and increase of layers were studied. The geometrical particulars have been chosen such that it would be possible to compare the influence of geometrical changes over the tensile behavior of nanostructures.

First, the tensile behavior of the single-layer spiral graphenes are reviewed and then the influence of the increase of layers for each structure is studied. As can be deduced

from Fig. 1, the tensile behavior of the single-layer spiral graphenes is divided into four parts. In the first part that is highly influenced by the Van der Waals forces, the sudden increase of energy was observed. In this part and a strain of 0 to 0.8%, a linear behavior was observed and in this area the spring constant for instances No. 1, 2, and 3 were respectively calculated as $23.5 \frac{nN}{nm}$, 49.5 and 18.97 . In the second area, and after the emancipation of a layer, severe energy loss happens and subsequently, the layering process takes place; such that first of all a layer is separated and the separation process is done gently. Therefore, under a fixed process, the tensile test process continues, up to a level wherein the third area, the layering process is completed and the energy increases particularly in the internal area of the spiral graphene.

In phase No. 4, the bonds rupture begins. The phase continues following a Sawtooth pattern. In fact, by increase of strain and subsequently by increase of energy, the bonds rupture happens. By the end of this phase, the monoatomic carbon chain is created within the structure. By the increase of internal radius in spiral graphene, the increase of elasticity is also observed; while, there are not that much changes in the final energy. Another remarkable point is the little increase of strain in the fourth phase alongside of severe increase of thickness of the spiral nanostructures (increase for 2 times).

By increase of the number of layers in sample No. 1, a remarkable change in tensile behavior is observed. The tensile behavior of spiral graphene in sample No.1, enjoying from two layers, just like its single-layer sample has four samples; though some tangible differences can be seen.

By increase of the number of layers in sample No. 1, the tensile behavior of the triple-layer sample was encountered several changes. The initial phase, just like the former samples was followed by a severe energy increase. The end of phase No.2 seems to have a smaller strain, by an increase of the number of layers. Further, the layers' separation in this phase is in a triple form, and the Van der Waals forces

remain between the three adjacent layers. In the third phase, the layers in a triple form, are almost completely open and the energy increase happens. The remarkable point in the triple-layer sample is the deletion of the fourth phase.

4. CONCLUSION

In this research, the mechanical properties of single-layer and multilayer spiral graphene with geometric characteristics have been reviewed. The change of the number of layers for each structure with special geometric characteristics, has a different influence on the phases of tensile behavior. A number of the most important influences of a change in the number of layers, in proportion to geometric characteristics of the spiral graphenes are listed as follows:

- For all the structures, by an increase of layers of strain limitation in the test, their tension decreases, and the maximum level of energy borne by the nanostructure increases.

- Various phases have been observed in the tensile behavior of nanostructures, which in a comprehensive categorization, they include: 1. The initial phase, including severe energy increase arising from the Van der Waals forces; 2. The second phase, including gentle separation of single-layers from each other; 3. The third phase begins after the complete separation of the layers and in this phase, the energy is highly increased. 4. The fourth phase where the bonds rupture happens at almost a fixed force and creates a Sawtooth pattern.

- The phases mentioned in the former section depend on geometric characteristics and the number of layers and even part of this feature results in deletion of a phase.

REFERENCES

- [1] X. Zhang, X. Zhang, D. Bernaerts, G. Van Tendeloo, S. Amelinckx, J. Van Landuyt, V. Ivanov, J. Nagy, P. Lambin, A. Lucas, The texture of catalytically grown coil-shaped carbon nanotubules, *EPL (Europhysics Letters)*, 27(2) (1994) 141.
- [2] C. Chuang, Y.-C. Fan, B.-Y. Jin, Generalized classification scheme of toroidal and helical carbon nanotubes, *J. Chem. Inf. Model.*, 49(2) (2009) 361-368.
- [3] P. Chen, Y. Xu, S. He, X. Sun, S. Pan, J. Deng, D. Chen, H. Peng, Hierarchically arranged helical fibre actuators driven by solvents and vapours, *Nature Nanotechnology*, 10 (2015) 1077.
- [4] J. Wu, J. He, G.M. Odegard, S. Nagao, Q. Zheng, Z. Zhang, Giant stretchability and reversibility of tightly wound helical carbon nanotubes, *J. Am. Chem. Soc.*, 135(37) (2013) 13775-13785.
- [5] A. Sharifian, M. Baghani, J. Wu, G.M. Odegard, M. Baniassadi, Insight into Geometry-Controlled Mechanical Properties of Spiral Carbon-Based Nanostructures, *J. Phys. Chem. C*, 123(5) (2019) 3226-3238.
- [6] C. Chuang, Y.-C. Fan, B.-Y. Jin, Dual space approach to the classification of toroidal carbon nanotubes, *J. Chem. Inf. Model.*, 49(7) (2009) 1679-1686.
- [7] E. Yousefi, M. Mahdavi, M. Baniassadi, Investigating mechanical properties of coiled carbon nanotube reinforced nanocomposite.
- [8] F. Xu, H. Yu, A. Sadrzadeh, B.I. Yakobson, Riemann surfaces of carbon as graphene nanosolenoids, *Nano Lett.*, 16(1) (2015) 34-39.
- [9] M. Daigle, D. Miao, A. Lucotti, M. Tommasini, J.F. Morin, Helically coiled graphene nanoribbons, *Angew. Chem.*, 129(22) (2017) 6309-6313.
- [10] S. Amelinckx, X. Zhang, D. Bernaerts, X. Zhang, V. Ivanov, J. Nagy, A formation mechanism for catalytically grown helix-shaped graphite nanotubes, *Science*, 265(5172) (1994) 635-639.
- [11] A. Sharifian, A. Moshfegh, A. Javadzadegan, H.H. Afrouzi, M. Baghani, M. Baniassadi, Hydrogenation-Controlled Mechanical Properties in Graphene Helicoids: Exceptionally Distribution-Dependent Behavior, *PCCP*, 21(23) (2019) 12423-12433.
- [12] S.J. Stuart, A.B. Tutein, J.A. Harrison, A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions, *J. Chem. Phys.*, 112(14) (2000) 6472-6486.
- [13] O. Shenderova, D. Brenner, A. Omeltchenko, X. Su, L. Yang, Atomistic modeling of the fracture of polycrystalline diamond, *Phys. Rev. B*, 61(6) (2000) 3877.

HOW TO CITE THIS ARTICLE

A. Najafi, S.M. Taheri, R. Basafa, Investigation of the mechanical properties of multilayer graphene helicoids with different geometric characteristics using molecular dynamics simulation. *Amirkabir J. Mech Eng.*, 53(special issue 2) (2021) 293-296.

DOI: [10.22060/mej.2020.16923.6473](https://doi.org/10.22060/mej.2020.16923.6473)





بررسی خواص مکانیکی گرافن‌های ماریپیچ چندلایه با مشخصات هندسی متفاوت با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

امین نجفی^۱، سیدمهدی طاهری^۲، رضا باصفا^{۳*}

^۱ دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه امام حسین (ع)، تهران، ایران

^۲ دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه تهران، تهران، ایران

^۳ شرکت آب و فاضلاب جنوب غربی استان تهران، ایران

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۳۹۸/۰۵/۲۵

بازنگری: ۱۳۹۸/۱۰/۰۷

پذیرش: ۱۳۹۸/۱۱/۰۶

ارائه آنلاین: ۱۳۹۸/۱۱/۲۶

کلمات کلیدی:

خواص مکانیکی

گرافن ماریپیچ چندلایه

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

خواص وابسته به هندسه

نانوذرات فنری شکل

خلاصه: گرافن ماریپیچ از جمله ساختارهای ماریپیچی شکل دست‌ساز بشر است که اخیراً با پیشرفت نانوتکنولوژی و با الهام از طبیعت ایجاد شده است. در این تحقیق به بررسی خواص مکانیکی گرافن‌های ماریپیچ چندلایه با مشخصات هندسی متفاوت با استفاده از روش دینامیک مولکولی پرداخته می‌شود و ارتباط بین تعداد لایه‌ها، مشخصات هندسی و خواص مکانیکی نانوذرات بررسی می‌شود. نتایج نشان داده‌اند که ویژگی‌های هندسی منحصر به فرد این نانوذرات موجب بروز خواص مکانیکی جالبی می‌شود که به شدت به ساختار آن‌ها وابسته است. به گونه‌ای که با افزایش تعداد لایه‌ها متناسب با مشخصه‌های هندسی نانوذرات، مراحل رفتار کششی آن‌ها تغییر می‌کند. از جمله مهم‌ترین ویژگی‌های این نانوذرات کش‌پذیری شدید آن‌ها حتی برای برخی نمونه‌ها تا حدود ۳۰۰٪ است که با افزوده شدن یک لایه به ساختار آن‌ها به شدت کاهش می‌یابد. همچنین، نتایج بیانگر افزایش شدید نیرو در محدوده کرنشی کوچک، هم‌زمان با شروع فرآیند کشش هستند که به دلیل نیروهای واندرالس قوی بین لایه‌ها است. ثابت فنر برای این نانوذرات در این ناحیه اولیه آزمون کشش محاسبه شده است و با افزوده شدن لایه‌ها مقدار آن کاهش می‌یابد. شناسایی خواص گرافن‌های ماریپیچ چندلایه می‌تواند منجر به افزایش کارایی آن‌ها و عملکرد بهینه‌شان در ادوات نانومقیاس و حتی بهبود کارایی‌های چندمقیاسی شان شود.

۱- مقدمه

خواص سنجی نانومواد از جمله مهم‌ترین عوامل موثر به کارگیری آن‌ها در ادوات مقیاس نانو/ماکرو است. خواص مکانیکی، حرارتی، شیمیایی و الکتریکی نانومواد از جمله پرکاربردترین مسائل این حوزه است. نانومواد پایه کربنی همچون گرافن [۱، ۲] و نانولوله کربنی [۳] با دارا بودن خواص جالب و ویژه فیزیکی [۴]، الکتریکی [۵]، حرارتی [۶، ۷] و مکانیکی [۸، ۹] توجهات بسیاری را به خود جلب نمودند. به‌عنوان مثال خواص ویژه الکتریکی گرافن موجب کاربرد در اسپینترونیک^۱ شده است [۱۰]. همچنین، در حوزه‌های الکترومکانیکی همچون وسایل نانو الکترونیک [۱۱]، نانو سوییچ‌ها [۱۲] و نانورزوناتورها [۸] کاربرد فراوانی پیدا کرده است. از دیگر کاربردهای

در سال‌های اخیر افزایش علاقه‌مندی به حوزه نانوفناوری موجب تمرکز چشمگیر تحقیقات در این حوزه شده است. همچنین، کاربردهای ویژه نانوفناوری در حوزه‌های مختلفی همچون خواص سنجی نانومواد، نانوکامپوزیت‌ها، سیستم‌های بیولوژیک، نانوپوشش‌ها و سایر موارد در کنار کارآمدی قابل توجه‌شان از دیگر دلایل افزایش علاقه‌مندی به این حوزه بوده است. نیاز روزافزون به کوچک‌تر کردن وسایل مورد استفاده، از مهم‌ترین دغدغه‌های پیش‌روی محققان است که با بهره‌گیری از نانومواد به‌صورت چشمگیری این نیاز در حال کنترل شدن است.

1 Spintronics

* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: basafa.reza@yahoo.com

حقوق مؤلفین به نویسندگان و حقوق ناشر به انتشارات دانشگاه امیرکبیر داده شده است. این مقاله تحت لیسانس آفرینندگی مردمی (Creative Commons License) در دسترس شما قرار گرفته است. برای جزئیات این لیسانس، از آدرس <https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode> دیدن فرمائید.



این دسته از نانوموادها می‌توان به استفاده آن‌ها بعنوان تقویت‌کننده در نانوکامپوزیت‌ها اشاره کرد که با توجه به خواص مکانیکی و شیمیایی فوق‌العاده‌شان موجب افزایش مقاومت کششی نانوکامپوزیت می‌شوند [۱۳]. همچنین، خواص حرارتی نانوکامپوزیت‌ها نیز از این مواد به شدت تاثیر می‌پذیرند [۱۴].

امروزه به منظور کنترل خواص نانومواد از روش‌های متنوعی همچون تغییر پارامترهای هندسی نانومواد، تشکیل ساختارهای ترکیبی، عامل‌دار کردن نانومواد، ناخالص‌سازی شیمیایی^۱ و دیگر موارد استفاده می‌کنند. عامل‌دار کردن شیمیایی بر روی نانومواد کربنی چون گرافن، گرافن چندلایه، آلوتروپ‌های گرافن به منظور تنظیم خواص فیزیکی، شیمیایی [۱۵]، مکانیکی [۱۶، ۱۷] و الکتریکی [۱۸] انجام گرفته است. همچنین، ناخالص‌سازی شیمیایی و ایجاد ساختارهای ترکیبی موجب تغییر جالب خواص الکتریکی و مکانیکی شده است که می‌تواند منجر به افزایش حوزه‌های کاربردی نانوذرات به عنوان مثال در نانوکامپوزیت‌ها [۱۹] و یا حوزه سلول‌های سوختی [۲۰] شود. این نانومواد در حوزه‌های مختلفی همچون صنایع دریایی، صنایع هوافضا، تصفیه آب کاربرد دارد. از آن‌ها در کنترل خواص الکتریکی، مکانیکی و حرارتی در سازه‌های دریایی استفاده می‌شود. استفاده از نانوساختارهایی با تعداد لایه‌های مختلف منجر به کنترل خواص آن‌ها می‌شود. به عبارتی دیگر، نانوساختارهای کربنی با تعداد لایه‌های مختلف، خواص مکانیکی، حرارتی و الکتریکی متفاوتی را نشان می‌دهند. در ساختارهایی همچون گرافن، چند لایه کربنی کنار یکدیگر قرار می‌گیرند و بدون اینکه تشکیل پیوند کوالانسی دهند به دلیل وجود نیروهای واندوالس بین لایه‌های مجاور تشکیل ساختارهای چندلایه می‌دهند. همچنین، همین روند در ساختار نانولوله کربنی نیز مشاهده شده است؛ به طوری که چند نانولوله کربنی درون یکدیگر قرار گرفته‌اند. ایجاد ساختارهای چندلایه موجب تغییر قابل توجه خواص مکانیکی، الکتریکی و حرارتی نانوذرات می‌شود که به صورت تجربی و مدل‌سازی مولکولی بررسی شده است [۲۱-۲۳].

با توجه به پیشرفت در حوزه نانو تکنولوژی و روش‌های ساخت نانومواد و با الگوگیری از مواد موجود در طبیعت، پژوهشگران مدلی مارپیچ بر پایه این نانومواد ارائه دادند. نانولوله‌های کربنی فبری^۲ هم به صورت تجربی [۲۴] و هم به صورت تئوری و مدل مولکولی [۲۵]-

[۲۹] بررسی شده‌اند. خواص جالب نانولوله‌های کربنی فبری برآمده از پیوندهای کربنی با هیبریداسیون sp^2 و هم ناشی از ساختار مارپیچ آن‌ها است. این ساختارها به سبب هندسه مارپیچ خود می‌توانند در نانوکامپوزیت‌ها منجر به جذب انرژی بیشتری شوند [۳۰]. امروزه ساختارهای مارپیچ جدیدی بر اساس مواد دوبعدی همچون گرافن [۳۱، ۳۲] و یا MoS_2 [۳۳] به صورت تجربی به وجود آمده‌اند. گرافن‌های مارپیچ با دارا بودن خواص حرارتی [۳۴] و الکتریکی [۳۱] قابل توجه هستند و با توجه به ساختار فبری مورد توجه بسیار قرار گرفته‌اند. همچنین خواص مکانیکی فوق‌العاده‌ای را از خود نشان داده‌اند. وو^۳ و همکاران [۳۵] در تحقیقی به بررسی خواص مکانیکی گرافن‌های مارپیچ چندلایه با استفاده از محاسبات کوانتومی پرداختند. آن‌ها دریافتند که این مواد در محدوده کرنشی ۷۸ تا ۲۲۲ درصد دارای رفتار برگشت‌پذیر هستند. همچنین، نیروی بیشینه برای این نانومواد بین ۵ تا ۷ نانونیوتن نوسان می‌کند. ژان^۴ و همکاران [۳۶]، [۳۷] با بررسی خواص مکانیکی این دسته از نانومواد به کش‌پذیری بسیار زیادشان (برای برخی نمونه‌ها تا ۲۰ برابر طول اولیه) پی برده‌اند. همچنین، متوجه تحمل نیروی زیاد در ناحیه ابتدایی شده‌اند که به دلیل نیروی واندوالس شدید حاکم بین لایه‌ها می‌باشد. فخرآبادی و سایر نویسندگان [۳۸] به بررسی خواص مکانیکی گرافن مارپیچ یک و دولایه تنها با یک مشخصه هندسی ثابت پرداختند. همچنین، اثر ناخالص‌سازی شیمیایی به وسیله اتم‌های بور و نیتروژن را نیز در این تحقیق بررسی کردند و تاثیرگذاری آن در مراحل مختلف آزمون کشش ساده را مشاهده کردند. آن‌ها دریافتند که با ناخالص‌سازی شیمیایی کرنش نهایی این نانوساختارهای مارپیچ کاهش می‌یابد. در حقیقت، با افزایش درصد ناخالص‌سازی شیمیایی، کاهش بیشتری در کرنش نهایی مشاهده می‌شود. در تحقیقی دیگر شریفیان و همکاران [۳۹] به بررسی خواص مکانیکی گرافن‌های مارپیچ خالص و عامل‌دار شده پرداختند. آن‌ها دریافتند که با عامل‌دار کردن این نانوساختارها در درصدهای مختلف و توزیع‌های مختلف می‌توان به خواص مکانیکی کاملاً متفاوتی دست یافت.

علی‌رغم تحقیقاتی که در حوزه خواص مکانیکی نانوساختارهای گرافن مارپیچ صورت گرفته است، اما بررسی اثر تغییر مشخصات هندسی این ساختار مارپیچ در کنار افزایش تعداد لایه‌های گرافن

3 Wu
4 Zhan

1 Chemical doping
2 Coiled carbon nanotubes

جدول ۱: خصوصیات ساختاری گرافن مارپیچ خالص مورد مطالعه.

Table 1. The characteristics of studied Graphene Helicoids)

انرژی پتانسیل بر تعداد اتم (eV)	طول اولیه (Å)	ضخامت (Å)	قطر خارجی (Å)	قطر داخلی (Å)	تعداد اتم	تعداد لایه	
-۶/۱۷۷۴	۲۴/۴۳۵۵	۴/۸۱	۲۲/۱۳	۱۲/۵	۸۸۲	۱	۱
-۶/۱۷۶۸	۴۹/۳۶۲۵				۱۷۶۴	۲	
-۶/۴۵۰۶۸	۶۷/۷۴۹				۲۶۴۶	۳	
-۶/۹۵۷۲	۲۴/۳۷۷۴	۹/۶۱	۳۱/۶۲	۱۲/۴	۱۸۹۰	۱	۲
-۶/۹۵۷۱	۴۹/۰۲۴۹				۳۷۸۰	۲	
-۶/۹۵۷۱	۷۳/۸۵۲۲				۵۶۷۰	۳	
-۶/۶۲۶۷۸	۲۴/۵۴۲۶	۴/۷۵	۲۷/۳۱	۱۷/۸	۱۱۳۴	۱	۳
-۶/۶۱۵۰۲	۴۸/۸۱۳۱				۲۲۶۸	۲	
-۶/۶۱۵۰۱	۷۳/۲۸۶۴				۳۴۰۲	۳	

تمامی محاسبات بر پایه روش دینامیک مولکولی و در نرم افزار متن باز لمپس^۱ انجام گرفته است. از پتانسیل ایریو^۲ [۴۱] برای شبیه سازی برهم کنش های چندتایی استفاده شده است. این پتانسیل دارای قابلیت تشکیل و شکستن پیوند کوالانسی C-C و C-H است و از سه قسمت تشکیل شده است:

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} [E_{ij}^{LJ} + \sum_{k \neq i, l \neq i, j, k} E_{kijl}^{TORSION} + E_{ij}^{REBO}] \quad (1)$$

که E_{ij}^{REBO} نشانگر پتانسیل ریو، E_{ij}^{LJ} نشانگر برهم کنش های فاصله دور و $E_{kijl}^{TORSION}$ نشانگر برهم کنش پیچشی است. به منظور حذف اثرات غیر فیزیکی، شعاع قطع برای قسمت ریو ۲ آنگستروم در نظر گرفته شده است [۳۶، ۴۲]. همچنین، شعاع برهم کنش فاصله دور برای برهم کنش های واندروالس^۳ ۱۰/۲ انتخاب گشته است [۲۷]. از شرایط مرزی تناوبی در راستای کشش برای جلوگیری از اثرات انتهایی [۲۷، ۲۸، ۴۳، ۴۴] استفاده شده، در حالی که در راستای دیگر شرط مرزی آزاد برقرار است.

ابتدا انرژی ساختار توسط روش گرادیان مزدوج^۴ بهینه شده است، سپس ساختار تحت هنگرد فشار ثابت-دمانابت بر اساس ترموستات نوز-هوور^۵ و باروستات نوز-هوور در فشار صفر برای ۴۰۰ تا ۷۰۰

مارپیچ بررسی نشده است. البته ایجاد ساختارهای مارپیچ چندلایه و بررسی خواص الکتریکی شان با استفاده از محاسبات کوانتومی انجام شده است [۴۰]. در این تحقیق با توجه به خواص قابل توجه گرافن مارپیچ و همچنین کاربردهای منحصر بفردش به دلیل خواص الکتریکی و مکانیکی، به بررسی خواص مکانیکی گرافن مارپیچ چندلایه با ویژگی های هندسی متفاوت پرداخته می شود. اثر افزایش تعداد لایه های این نانو ساختارها از یک لایه تا سه لایه برای سه نمونه مختلف بررسی شده است. این نمونه ها به گونه ای انتخاب شده اند که اثر افزایش شعاع داخلی، شعاع خارجی و ضخامت نانو ساختار مارپیچ لحاظ شود. ثابت فنر، کش پذیری، نیروی نهایی شکست و روند پاسخ مکانیکی تحت آزمون کشش در گرافن مارپیچ چندلایه تحقیق می شود. شناسایی خواص گرافن های مارپیچ چندلایه می تواند منجر به افزایش کارایی آن ها و عملکرد بهینه شان در ادوات نانومقیاس و حتی بهبود کارایی های چندمقیاسی شود.

۲- روش تحقیق

در این تحقیق ساختارهای گرافن مارپیچ چندلایه برای شعاع های درونی و خارجی متفاوت و ضخامت های متفاوت گرافن ایجاد شده اند. پارامترهای هندسی مورد مطالعه گرافن مارپیچ در جدول ۱ لیست شده است که شامل شعاع درونی، شعاع خارجی، تعداد اتم هر ساختار، طول اولیه و انرژی پتانسیل بر تعداد اتم پس از تعادل برای ساختار خالص مورد مطالعه، بیان شده است.

1 LAMMPS
2 AIREBO
3 Van der Waals (vdW)
4 Conjugate gradient
5 Nosé-Hoover

با 10^8 در راستای کشش اعمال شده است. این بخش از شبیه‌سازی با استفاده از هنگرد دما ثابت تحت ترموستات نوز- هوور انجام گرفته است. گام زمانی ۱ فومتوانیه برای تمامی شبیه‌سازی‌ها استفاده شده است. به‌منظور محاسبه نمودار تنش- کرنش، رابطه تنش و پیرال مورد استفاده قرار گرفته شده است [۴۶]:

$$\sigma_{ij}^{\alpha} = \frac{1}{v^{\alpha}} \left(\frac{1}{2} m^{\alpha} v_i^{\alpha} v_j^{\alpha} + \sum_{\beta=1}^n r_{\alpha\beta}^j f_{\alpha\beta}^i \right) \quad (2)$$

که α و β نشان‌دهنده اتم‌ها و i و j نشان‌دهنده مولفه‌های مختصات کارتزین هستند. m و v به ترتیب نشان‌دهنده سرعت و جرم اتم‌ها هستند. $r_{\alpha\beta}$ و $f_{\alpha\beta}$ نیز به ترتیب نشانگر نیرو و فاصله بین اتم‌های α و β است.

از طرفی حجم نانوساختارها با استفاده از محاسبه طول و عرض صفحات گرافنی و ضخامت (۳/۴ آنگسترم) محاسبه شده است. همچنین نیرو نیز از رابطه پیشنهاد داده شده توسط تامپسون [۴۶] و ترم و پیرال به دست آمده است. برای انتگرال‌گیری از معادلات حرکت

پیکوتانیه به تعادل رسیده است. دمای ۱ کلوین برای بررسی ساختارها به‌منظور کاهش اثرات نوسانات حرارتی [۲۷، ۲۸، ۳۶، ۳۷، ۴۴، ۴۵] انتخاب گشته است.

در تمامی ساختارهای تک‌لایه، هفت حلقه به‌کاررفته است. پس از تعادل‌رسانی، آزمون کشش برای جلوگیری از اثرات تعداد لایه‌ها با فرض شرط مرزی تناوبی انجام گرفته است. نرخ کرنش مناسب $\frac{1}{s}$

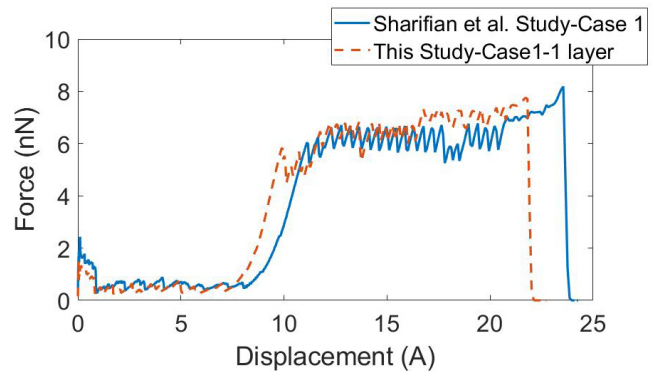


Fig. 1. (The verification of mechanical behavior of sample 1 in comparison with previous studies.)

شکل ۱: صحت‌سنجی نتایج با مقایسه رفتار مکانیکی نمونه شماره ۱ با نمونه مشابه در تحقیقات پیشین.

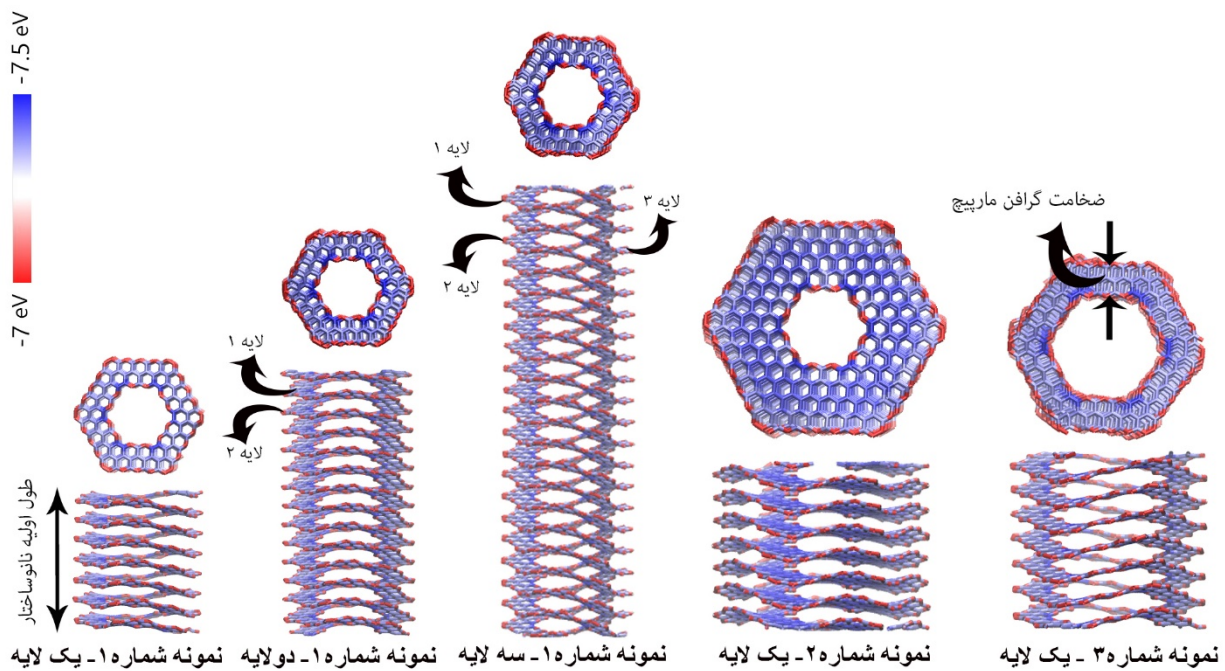


Fig. 2. (The relaxed State of 1,2 and 3 layers of sample1 and 1 layer of samples 2 and 3 on side and top view.)

شکل ۲: حالت تعادلی برای نمونه اول با یک، دو و سه لایه و نمونه دوم و سوم با یک لایه در نمای بالا و نمای کنار.

۱ می‌توان دریافت که با افزایش تعداد لایه‌ها انرژی پتانسیل بر واحد اتم ساختارها تغییر بسیار اندکی دارند و مقدار بسیار اندکی انرژی پتانسیل با افزایش تعداد لایه‌ها افزایش می‌یابد.

۳-۳- بررسی رفتار تحت کشش گرافن مارپیچ

بررسی رفتار کششی ساختارهای مختلف گرافن مارپیچ برای سه نمونه متفاوت با مشخصات هندسی مختلف (شعاع داخلی، شعاع خارجی و ضخامت نانوساختار) با یک، دو و سه لایه بررسی شده است. در حقیقت، تاثیر همزمان تغییر مشخصات هندسی ساختارها با افزایش تعداد لایه‌ها تحقیق شده است. مشخصات هندسی به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که امکان مقایسه اثر تغییرات هندسی بر رفتار کششی نانوساختارها فراهم باشد.

ابتدا به بررسی رفتار کششی گرافن‌های مارپیچ تک‌لایه پرداخته می‌شود و سپس تاثیر افزایش تعداد لایه برای هرساختار بررسی می‌شود. همان‌طور که از شکل ۳ می‌توان برداشت کرد، رفتار کششی گرافن مارپیچ تک‌لایه به چهار قسمت تقسیم می‌شود. در ناحیه اول که به شدت تحت تاثیر نیروهای واندروالس بین لایه‌ها است، افزایش ناگهانی نیرو مشاهده شده است. در این ناحیه و در کرنش ۰ تا ۰/۸ درصد رفتار خطی مشاهده شده است که در این ناحیه ثابت فنر برای نمونه ۱ و ۲ به ترتیب مقادیر $\frac{nN}{nm}$ ۲۳/۵، ۴۹/۵ و ۱۸/۹۷ محاسبه شده است. با توجه به مشخصات هندسی که در جدول ۱ ذکر شده است، افزایش ثابت فنر همراه با افزایش ضخامت نانوساختارها کاملاً مشهود است. همچنین، همان‌طور که در شکل ۳ نشان داده شده است، بیشترین نیرو در مرحله نخست نیز متأثر از ضخامت لایه‌های نانوساختار است. در ناحیه دوم و پس از رهایی یک‌لایه، افت شدید نیرو اتفاق می‌افتد و در ادامه آن فرآیند لایه‌لایه شدن اتفاق می‌افتد. به گونه‌ای که ابتدا یک‌لایه جدا شده و فرآیند جدا شدن به آرامی رخ می‌دهد. بنابراین، تحت یک روند ثابت فرآیند آزمون کشش ادامه می‌یابد تا جایی که در ناحیه سوم فرآیند لایه‌لایه شدن به اتمام رسیده است و افزایش نیرو به ویژه در ناحیه داخلی گرافن مارپیچ رخ می‌دهد. تقریباً برای هر سه نمونه افزایش نیرو به مقدار ثابتی میل می‌کند. البته برای نانوساختار مارپیچ با شعاع داخلی بزرگ‌تر (نمونه شماره ۳)، افزایش نیرو در کرنش بالاتری رخ داده است. این مرحله تا آغاز پاره شدن پیوندها ادامه می‌یابد. بیشترین نیرو برای نمونه‌های ۱، ۲ و

از روش ورله سرعتی^۱ استفاده شده است. کلیه شبیه‌سازی‌ها توسط نرم افزار وی‌ام‌دی^۲ نمایش داده شده است [۴۷].

۳- نتایج و بحث

۳-۱- صحت‌سنجی نتایج

در این بخش پاسخ مکانیکی گرافن مارپیچ تک‌لایه بررسی شده است و با نتایج تحقیقات پیشین [۳۴، ۳۹] مقایسه شده است. مقایسه رفتار مکانیکی گرافن مارپیچ تک‌لایه شماره ۱ با مشخصات ذکر شده در جدول ۱ با گرافن مارپیچ تک‌لایه در تحقیق شریفیان و همکاران [۳۹] با قطر داخلی ۱۰/۸ A و قطر خارجی ۲۶/۸ A انجام گرفته است. در این تحقیق، شریفیان و همکاران با استفاده از روش دینامیک مولکولی به بررسی خواص مکانیکی گرافن‌های مارپیچ تک‌لایه پرداخته‌اند.

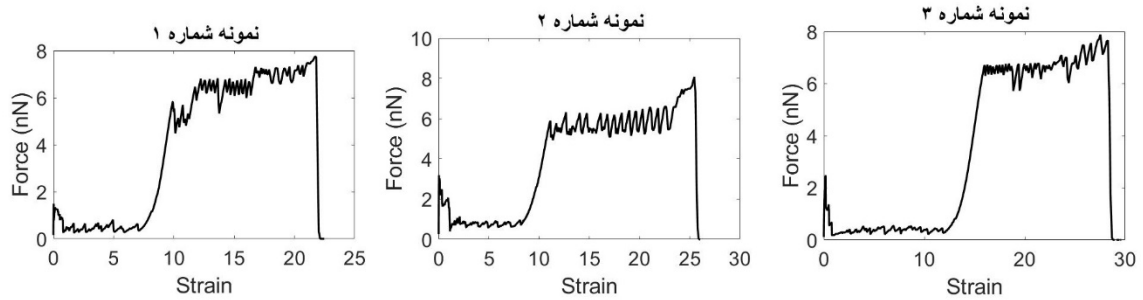
رفتار کلی کاملاً مشابهی دیده می‌شود که حاکی از صحت نتایج است. دلیل اندک تفاوت در ناحیه ابتدایی، بزرگ‌تر بودن ضخامت در تحقیق شریفیان و همکاران است که باعث به وجود آمدن نیروی بزرگ‌تر واندروالس شده است که در ادامه بررسی می‌شود. همچنین نتایج این تحقیق با نتایج تحقیقات پیشین [۲۸، ۳۶، ۳۷] نیز کاملاً در تطابق است. این تطابق نتایج بیانگر درستی شیوه بکاررفته در تحقیق می‌باشد.

۳-۲- بررسی حالت تعادلی گرافن مارپیچ

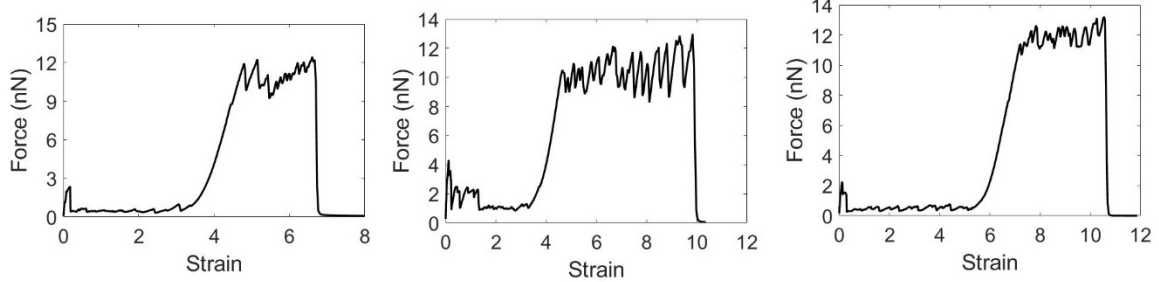
بمنظور بررسی حالت تعادلی گرافن مارپیچ، انرژی پتانسیل نمونه اول با یک، دو و سه لایه و نمونه دوم و سوم با یک‌لایه مورد بررسی قرار گرفته‌اند. همان‌طور که از شکل ۱ از انرژی پتانسیل نانوساختارها نمایان است، برای گرافن مارپیچ خالص قسمت‌های بیرونی و درونی که اتم کربن دارای دو پیوند است حالت ناپایداری را نشان می‌دهند، در حالی که اتم‌های نواحی داخلی حالت پایداری را تجربه می‌کنند. این روند برای تمامی ساختارهای مطالعه شده در این تحقیق حاکم است و وابستگی به تعداد لایه و ضخامت نانوساختار ندارد. مطابق تحقیقات پیشین [۳۴، ۳۷]، وقتی سیستم به تعادل می‌رسد، فاصله بین لایه‌ها برای تمامی ساختارها برابر با ۳/۴ آنگستروم می‌شود، همان‌طور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود. همچنین با توجه به جدول

1 velocity Verlet
2 VMD

الف)



ب)



ج)

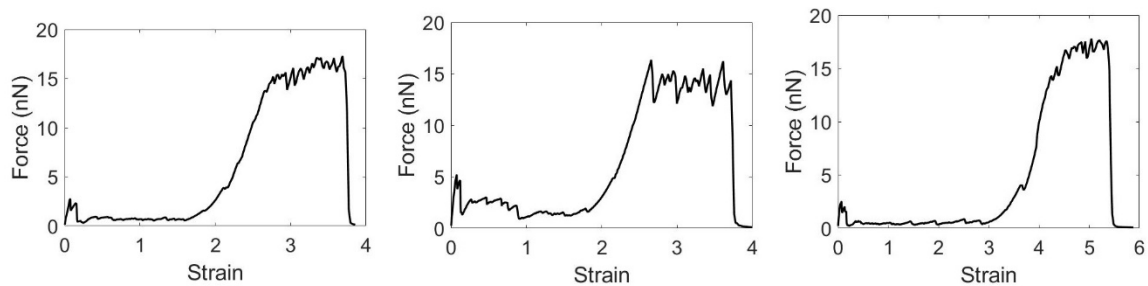


Fig. 3. (The Tensile Behavior of samples 1,2 and 3 for a) 1-layer b) 2-layers c) 3-layers.)

شکل ۳: رفتار کششی گرافن مارپیچ برای نمونه‌های شماره ۱، ۲ و ۳ به صورت الف) تک‌لایه، ب) دولایه و ج) سه‌لایه.

کششی مشاهده شده است. رفتار کششی گرافن مارپیچ نمونه شماره ۱ با دولایه نیز همانند نمونه تک‌لایه آن دارای چهار مرحله است اگرچه که تفاوت‌های محسوسی دیده می‌شود. به منظور ایجاد دید فیزیکی بهتر نسبت به رفتار کششی نمونه شماره ۱، پیکربندی اتمی در مراحل مختلف در شکل ۴ نشان داده شده است. در مرحله نخست تحت تاثیر نیروهای واندروالس، افزایش شدید نیرو رخ می‌دهد. البته ثابت فنر در محدوده کرنشی ۰ تا ۰/۸ درصد برابر $\frac{8}{35} \frac{nN}{nm}$ محاسبه شده است که نسبت به نمونه تک‌لایه افت محسوسی داشته است. در مرحله دوم و با آغاز شدن جدایش لایه‌ها و مرحله لایه‌لایه شدن، افت نیرو رخ می‌دهد. اما در نمونه دولایه در کرنش بسیار کمتری (تقریباً کرنش ۳/۵) نسبت به نمونه تک‌لایه (تقریباً کرنش ۷/۵) این فرآیند به اتمام می‌رسد. نکته قابل توجه در این مرحله این است که جدایش به صورت دولایه برای نانوساختارها رخ می‌دهد و نیروهای واندروالس

۳ به ترتیب برابر است با ۷/۷۵، ۸/۰۶ و ۷/۸۸ nN و متعاقباً بیشترین کرنش برای نمونه‌های مذکور به ترتیب برابر است با ۲۲/۱، ۲۵/۸ و ۲۸/۵.

در مرحله چهارم پاره شدن پیوندها آغاز می‌شود. این مرحله طبق یک الگوی دندانه اره‌ای ادامه می‌یابد. درحقیقت با افزایش کرنش و متعاقباً افزایش نیرو، شکسته شدن پیوندها اتفاق می‌افتد. در پایان این مرحله تک‌زنجیره کربنی^۱ نیز در ساختار ایجاد می‌شود. با افزایش شعاع داخلی در گرافن مارپیچ، افزایش کش‌پذیری مشاهده شده است درحالی که نیروی نهایی تغییری چندانی نمی‌کند. نکته قابل توجه دیگر افزایش اندک کرنش در مرحله چهارم در کنار افزایش شدید (۲ برابر) ضخامت نانوساختارهای مارپیچ است.

با افزایش تعداد لایه برای نمونه شماره ۱، تغییر قابل توجه رفتار

1 Monoatomic carbon chain

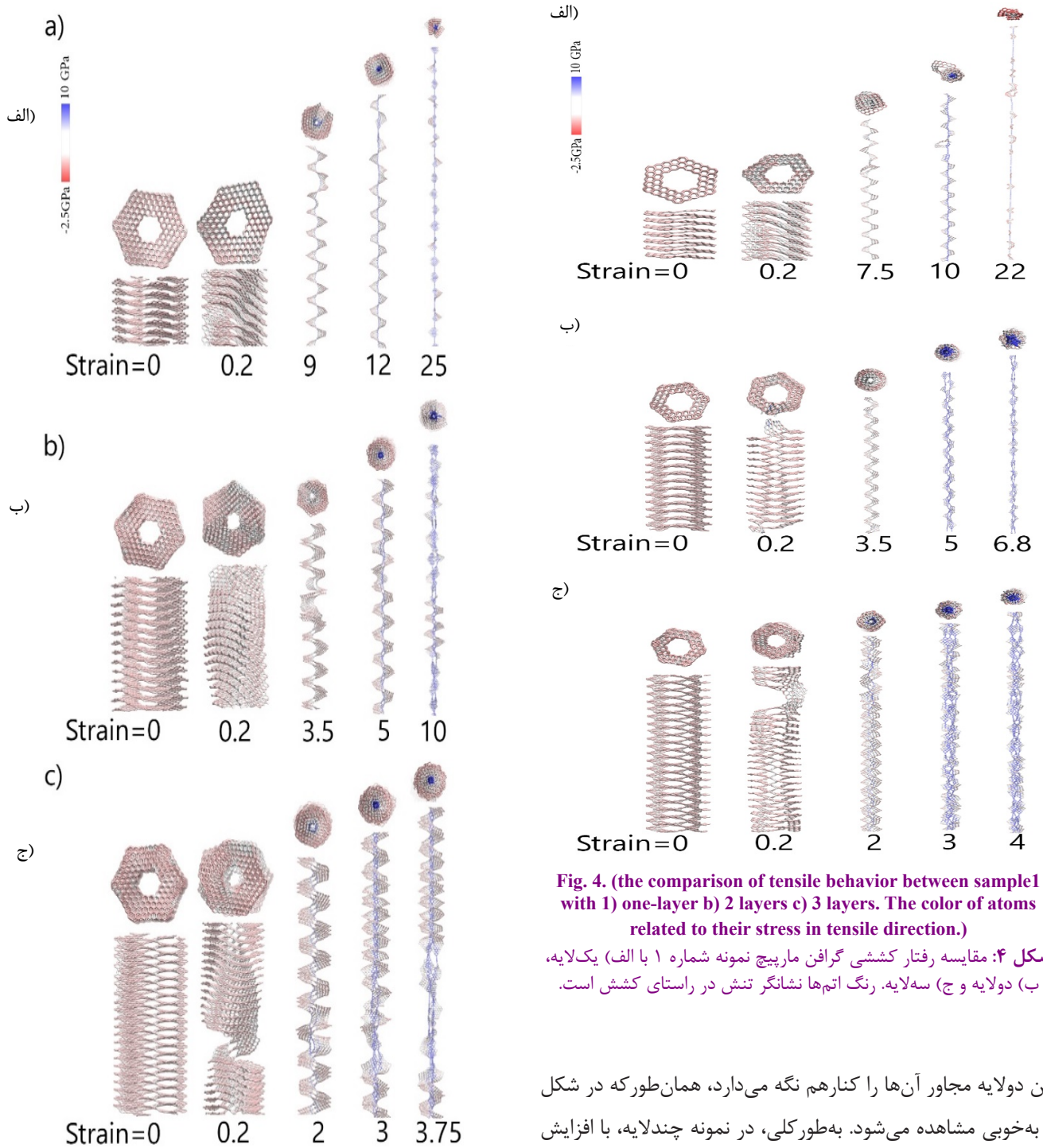


Fig. 4. (the comparison of tensile behavior between sample 1 with 1) one-layer b) 2 layers c) 3 layers. The color of atoms related to their stress in tensile direction.)

شکل ۴: مقایسه رفتار کششی گرافن مارپیچ نمونه شماره ۱ با الف) یک‌لایه، ب) دو لایه و ج) سه لایه. رنگ اتم‌ها نشانگر تنش در راستای کشش است.

Fig. 5. (the comparison of tensile behavior between sample 2 with 1) one-layer b) 2 layers c) 3 layers. The color of atoms related to their stress in tensile direction.)

شکل ۵: مقایسه رفتار کششی گرافن مارپیچ نمونه شماره ۲ با الف) یک‌لایه، ب) دو لایه و ج) سه لایه. رنگ اتم‌ها نشانگر تنش در راستای کشش است.

بین دو لایه مجاور آن‌ها را کنار هم نگه می‌دارد، همان‌طور که در شکل ۴ به خوبی مشاهده می‌شود. به‌طور کلی، در نمونه چندلایه، با افزایش کرنش به دلیل این که لایه‌ها با نیروهای واندروالس کنار هم قرار دارند و نیرویی مانند نیروی پیوندی وجود ندارد که آن‌ها را با افزایش کرنش وادار به جدایش کند، جدایش به صورت چندلایه چندلایه اتفاق می‌افتد. پس از این مرحله یکبار دیگر نیرو به شدت افزایش می‌یابد. افزایش نیرو در این مرحله به مراتب سریع‌تر از نمونه تک‌لایه رخ می‌دهد و در نهایت به نیروی بیشتری میل می‌کند. همچنین افزایش نیرو همانند قبل به شدت در ناحیه مرکزی نانوساختار رخ می‌دهد. با

مشاهده شده است. در عین حال بیشترین نیرو تحمل شده توسط نانوساختارها افزایش می‌یابد.

نمونه شماره ۲ دارای ضخامت بزرگ‌تری نسبت به نمونه در کنار ثابت ماندن سایر ویژگی‌های هندسی است. تاثیر افزایش تعداد لایه‌ها بر روی رفتار کششی این نمونه کمی متفاوت با نمونه شماره ۱ است. به دلیل ساده‌تر شدن بحث، مراحل رفتاری برای نمونه‌های

دولایه و سه‌لایه باهم بحث می‌شود. در مرحله نخست همانند نمونه‌های قبل افزایش نیرو در کرنش بسیار کوچکی برای هر دو نمونه دولایه و سه‌لایه مشاهده شده است و ثابت فنر به ترتیب مقادیر $\frac{nN}{nm}$ ۲۲/۴، ۱۲/۶۹ محاسبه شده است.

همانند نمونه شماره ۱ با تعداد لایه‌ها، ثابت فنر کاهش یافته است. با افزایش تعداد لایه از دولایه به سه‌لایه تغییر محسوسی در ثابت فنر (حدود $\frac{nN}{nm}$ ۱۰ کاهش) به وجود آمده است و برخلاف نمونه شماره ۱، تغییر چندانی در ثابت فنر مشاهده نشده است. در مرحله دوم کاهش نیرو همراه با باز شدن لایه‌ها رخ می‌دهد و با افزایش تعداد لایه‌ها محدوده کرنش این مرحله کاهش می‌یابد. در این نمونه نیز جدایش لایه‌ها به صورت دوگانه و سه‌گانه به ترتیب برای نمونه‌های دولایه و سه‌لایه رخ می‌دهد و افزایش ضخامت و در نتیجه افزایش نیروهای واندروالس تأثیری بر این روند ندارند. در مرحله سوم افزایش نیرو برای نمونه‌های دولایه و سه‌لایه رخ می‌دهد و همانند نمونه قبل با افزایش تعداد لایه‌ها، افزایش نیرو نیز مشاهده می‌شود. همان‌طور که در شکل ۳ و ۴ مشاهده می‌شود، در این نمونه برخلاف نمونه شماره ۱، به وضوح مرحله چهارم برای نمونه سه‌لایه مشاهده می‌شود. با افزایش تعداد لایه، محدوده کرنشی برای نمونه‌ها تقریباً نصف می‌شود. همچنین، با افزایش تعداد لایه‌ها، تعداد تک‌زنجیره‌های کربنی کاهش می‌یابد و از نظر پراکندگی نیز در تعداد لایه‌های بیشتر، در حول و حوش ناحیه شکست بیشتر می‌شوند. بیشترین نیرو برای نمونه شماره ۲ دولایه و سه‌لایه به ترتیب برابر است با ۱۳ nN و ۱۶/۳۵ و متعاقباً بیشترین کرنش برای نمونه‌های مذکور به ترتیب برابر است با ۱۰ و ۳/۷۵.

رفتار کششی نمونه شماره ۳ نیز که دارای ضخامتی برابر با نمونه شماره ۱ و شعاع داخلی بزرگ‌تری است، در نمونه‌های دولایه و سه‌لایه بررسی شده است. در مرحله نخست که همراه با پرش ناگهانی نیرو است، ثابت فنر به ترتیب برای نمونه‌های دولایه و سه‌لایه $\frac{nN}{nm}$ ۱۲/۸۰ و ۱۱/۹۴ محاسبه شده است. با مقایسه ثابت فنر بین نمونه

افزایش کرنش و در مرحله انتهایی، پاره شدن پیوندها آغاز می‌شود. پس از هر پاره شدن اندکی نیرو کاهش یافته و دوباره با افزایش کرنش، نیرو افزایش می‌یابد. این فرآیند یک الگوی دنداندار شبیه دندان‌های اره را ایجاد می‌کند. این فرآیند تا پاره شدن نهایی نانوساختار ادامه می‌یابد. این مرحله نیز در کرنش بسیار کوچک‌تری (تقریباً کرنش ۶/۵) نسبت به نمونه تک‌لایه (تقریباً کرنش ۲۲) به پایان می‌رسد که نشان‌دهنده تاثیر شدید افزایش تعداد لایه بر کرنش ساختارهای مارپیچ است. همچنین، در مرحله پایانی برای نمونه دولایه تعداد تک‌زنجیره‌های کربنی ایجاد شده نسبت به نمونه تک‌لایه به شدت کاهش یافته است. بیشترین نیرو و کرنش برای نمونه دولایه به ترتیب nN ۱۲/۵ و ۶/۸ محاسبه شده است.

با افزایش تعداد لایه نمونه شماره ۱، رفتار کششی نمونه سه‌لایه نیز با تغییراتی همراه شده است. مرحله نخست همانند نمونه‌های پیشین با افزایش شدید نیرو همراه بوده است و ثابت فنر $\frac{nN}{nm}$ ۷/۸۴ محاسبه شده است. البته با مقایسه ثابت فنر برای تعداد لایه‌های مختلف می‌توان به کاهش آن با افزایش تعداد لایه‌های گرافن مارپیچ پی‌برد. در مرحله دوم بار دیگر کاهش نیرو مشاهده شده است و نسبت به تعداد لایه‌های کمتر، در کرنش کمتری این مرحله به پایان می‌رسد. به نظر می‌رسد انتهای مرحله دوم نیز با افزایش تعداد لایه‌ها همراه با کرنش کوچک‌تری باشد. همچنین، جدایش لایه‌ها در این مرحله نیز به صورت سه‌گانه است و نیروهای واندروالس بین سه‌لایه مجاور باقی می‌مانند. در مرحله سوم لایه‌ها به صورت سه‌گانه تقریباً کاملاً باز شده‌اند و افزایش نیرو رخ می‌دهد. در این مرحله، افزایش نیرو تا مقدار بیشتری نسبت به نمونه‌های تک‌لایه و دولایه رخ می‌دهد. بنابراین، در این مرحله نیز با افزایش تعداد لایه‌ها، افزایش مقدار نیرو مشاهده شده است که البته میزان افزایش از یک‌لایه به دولایه حدوداً nN ۶ است و برای از دولایه به سه‌لایه تقریباً nN ۳ است. نکته قابل توجه در نمونه سه‌لایه حذف مرحله چهارم است. به گونه‌ای که افزایش نیرو در مرحله سوم، در کرنش‌های بالاتر با پاره شدن پیوندها همراه می‌شود. باتوجه به شکل ۳ و نمودار دنداندار اره‌ای نیرو که همراه با افزایش نیرو نیز است، این مساله به خوبی مشاهده می‌شود. بیشترین نیرو و کرنش برای نمونه سه‌لایه به ترتیب nN ۱۷/۲۹ و ۳/۸ محاسبه شده است. به طور کلی با بررسی روند افزایش تعداد لایه‌ها کرنش نهایی به شدت کاهش می‌یابد، به طوری که حتی در نمونه سه‌لایه کاهش یک مرحله

مشاهده شده است (نمونه اول و سوم)، درحالی که برای ضخامت‌های بزرگ‌تر نانوساختارهای مارپیچ (نمونه شماره ۲)، تغییرات ثابت فنر شدید است. در مرحله دوم افت نیرو همانند نمونه‌های قبل دیده شده است. همچنین، همان‌طور که در شکل ۳ و ۵ مشاهده می‌شود، محدوده کرنشی این مرحله با افزایش تعداد لایه‌ها به شدت کاهش می‌یابد به طوری که حتی با افزوده شدن یک لایه (نمونه دولایه) محدوده کرنشی نصف می‌شود. با افزوده شدن یک لایه دیگر (نمونه سه لایه)، محدوده کرنشی بار دیگر کاهش می‌یابد. کاهش محدوده کرنشی به معنای باز شدن لایه‌ها از یکدیگر در کرنش‌های کوچک‌تر است. این روند برای هر سه نمونه اول، دوم و سوم تقریباً مشابه است و وابستگی به مشخصات هندسی ندارد.

همچنین در این نمونه نیز باز شدن لایه‌ها برای نمونه‌های دولایه و سه لایه به صورت دوگانه و سه گانه است که در تمامی نمونه‌ها این روند مشاهده شده است و وابستگی به مشخصات هندسی گرافن‌های مارپیچ ندارد. در مرحله سوم، افزایش شدید نیرو به دلیل کش آمدن گرافن مارپیچ باز شده مشاهده می‌شود که با افزایش تعداد لایه‌ها بیشترین نیروی مشاهده شده به شدت افزایش می‌یابد. نکته قابل توجه در این مرحله این است که بیشترین نیرو هیچ وابستگی به مشخصات هندسی ندارد و با افزایش تعداد لایه‌ها برای همه نمونه‌ها تقریباً مشابه رفتار می‌کند. افزون بر این، با توجه به شکل ۳ و ۵ مرحله سوم برای نمونه شماره ۳ با سه لایه همانند نمونه شماره ۱ با سه لایه آخرین مرحله محسوب می‌شود و پاره شدن پیوندها در کرنش‌های بالاتر این مرحله آغاز شده که همچنان همراه با افزایش نیرو و الگوی دندانان اره‌ای است که در نهایت موجب پاره شدن نهایی نانوساختار می‌شود. بنابراین، وجود مرحله چهارم وابسته به ضخامت گرافن‌های مارپیچ و تعداد لایه‌ها است. اگرچه نمونه شماره ۳ با دولایه دارای مرحله چهارم است و تقریباً حول یک نیروی ثابت طبق الگوی دندانان اره‌ای نوسان می‌کند و پاره شدن پیوندها یکی پس از دیگری رخ می‌دهد. همچنین، ایجاد تک‌زنجیره‌های کربنی با افزایش تعداد لایه‌ها کاهش می‌یابد و این فرآیند برای تمامی نمونه‌ها مشاهده شده است. بیشترین نیرو برای نمونه شماره ۳ دولایه و سه لایه به ترتیب برابر است با ۱۳/۲۱ و ۱۷/۸ و متعاقباً بیشترین کرنش برای نمونه‌های مذکور به ترتیب برابر است با ۱۰/۷ و ۵/۵.

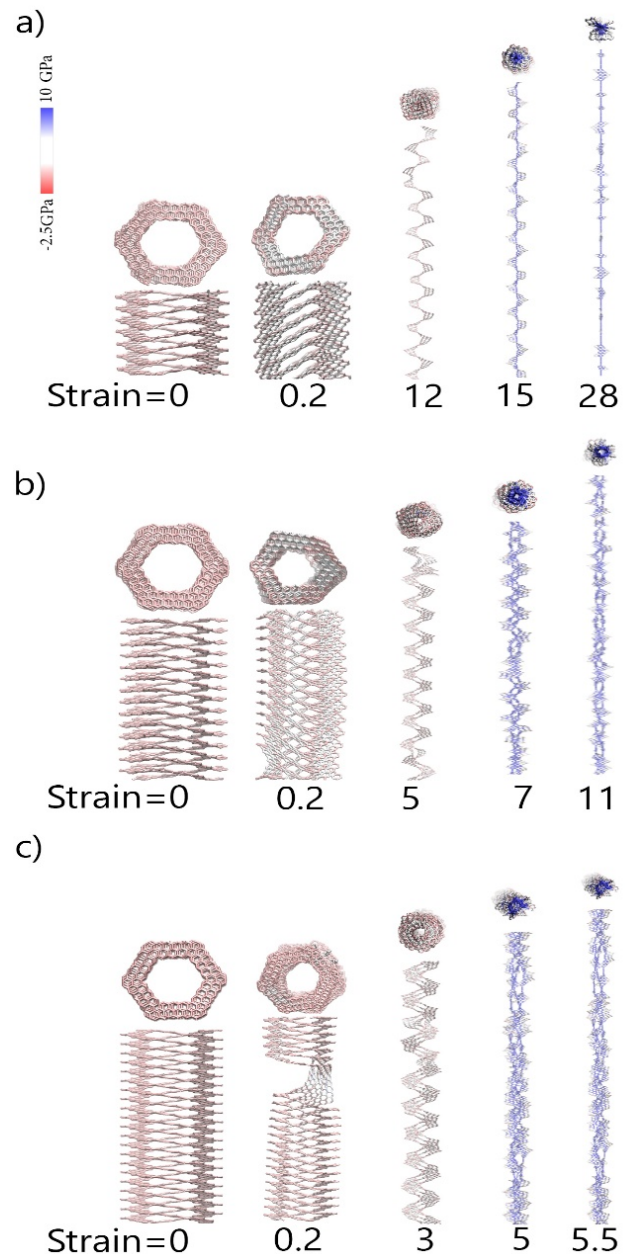


Fig. 6. (the comparison of tensile behavior between sample 3 with 1) one-layer b) 2 layers c) 3 layers. The color of atoms related to their stress in tensile direction.)

شکل ۶: مقایسه رفتار کششی گرافن مارپیچ نمونه شماره ۳ با الف) یک لایه، ب) دولایه و ج) سه لایه. رنگ اتم‌ها نشانگر تنش در راستای کشش است.

اول و نمونه سوم آشکار می‌شود که کاهش ثابت فنر همراه با افزایش تعداد لایه‌ها برای ساختارهای با شعاع‌های داخلی کوچک‌تر، شدیدتر رخ می‌دهد. همچنین، در ضخامت‌های کوچک‌تر گرافن مارپیچ، با افزایش تعداد لایه از دولایه به سه لایه تغییر بسیار کوچکی در ثابت فنر

۳-۴ بررسی رفتار کششی گرافن مارپیچ در کرنش‌های پایین
 است. بعنوان مثال ثابت فنر و مدول الاستیک در محدوده کرنشی کوچک اولیه محاسبه می‌شود و همچنین خواص الاستیک نانوذرات رفتار نانوذرات در کرنش‌های پایین از اهمیت به‌سزایی برخوردار

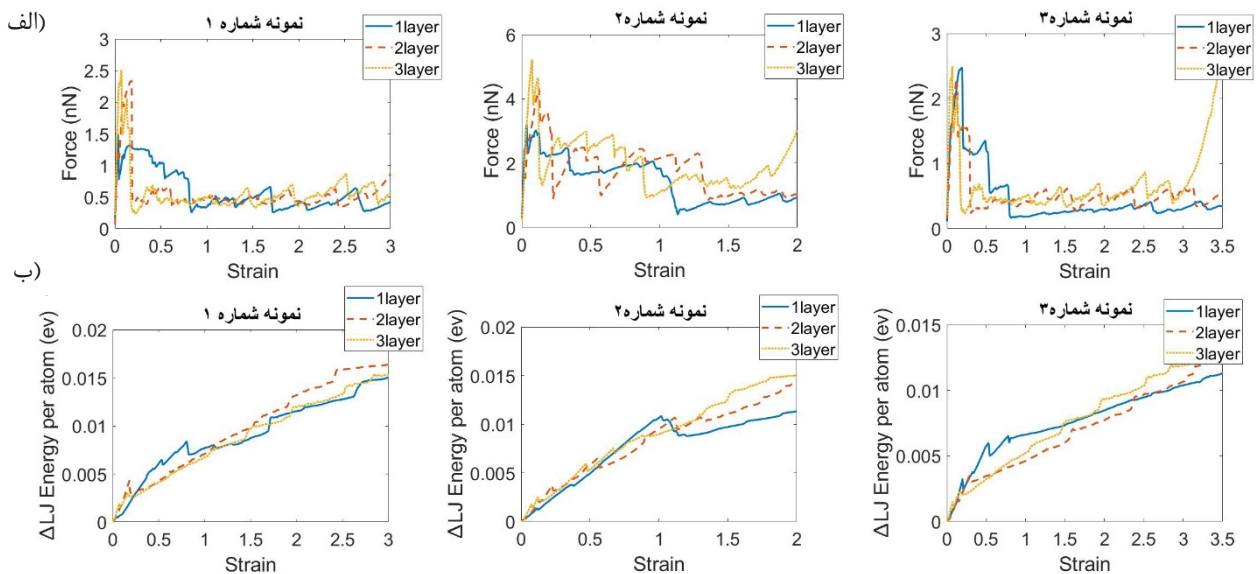


Fig. 7. (the tensile behavior of samples 1,2 and 3 of graphene helicoids for strain areas of 0 to 3.5. a) force-strain diagram b) the VdW energy changes divided to atoms number.)

شکل ۷: رفتار کششی گرافن مارپیچ برای نمونه‌های شماره ۱، ۲ و ۳ در محدوده کرنشی ۰ تا ۳/۵: الف) نمودار نیرو-کرنش و ب) نمودار تغییرات انرژی واندروالس بر تعداد اتم-کرنش برای نمونه‌های ذکرشده در جدول ۱.

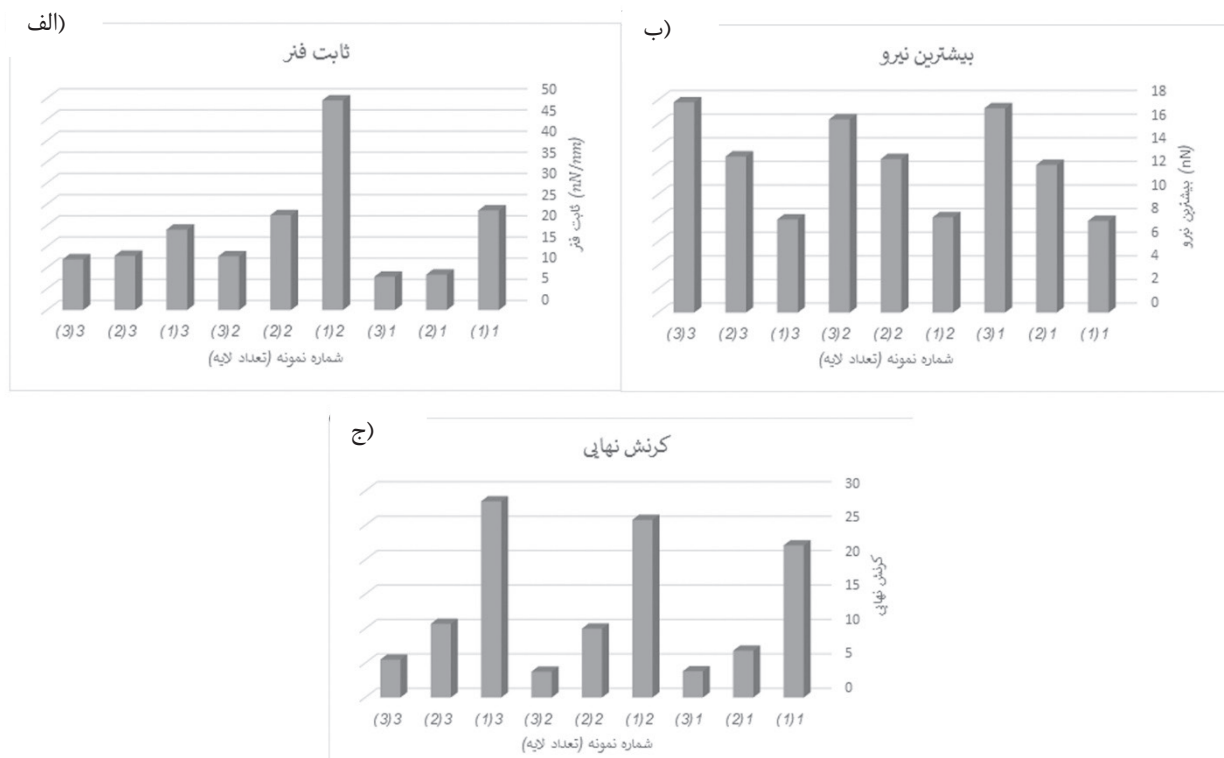


Fig. 8. (the diagram of a) spring constant b) maximum force c) maximum strain for all samples.)

شکل ۸: نمودار میله‌ای برای هر سه نمونه با تعداد لایه‌های مختلف برای پارامتر الف) ثابت فنر، ب) بیشترین نیرو و ج) کرنش نهایی.

برای دسته‌بندی‌های متفاوت بررسی شده است. پارامتر چقرمگی با ایجاد ارتباط بین نیرو و جابه‌جایی به بررسی انرژی جذب شده و تغییر شکل پلاستیک می‌پردازد. پارامتر چقرمگی می‌تواند نقشی اساسی در بررسی‌های جذب انرژی ایفا کند. در این تحقیق برای همه نمونه‌ها بررسی چقرمگی وزنی انجام گرفته است. در چقرمگی وزنی اثر جرم ساختار نیز وارد معادله می‌شود. چقرمگی وزنی تا هنگام شکست طبق معادله (۳) محاسبه شده است:

$$E_T = \frac{\int F(x) dx}{m} \quad (3)$$

که F ، x و m به ترتیب نشانگر نیرو، جابه‌جایی و جرم ساختار هستند. در جدول شماره ۲، چقرمگی برای همه نمونه‌ها محاسبه شده است. با افزایش تعداد لایه‌ها چقرمگی به شدت کاهش می‌یابد. این کاهش برای نمونه شماره ۲ که دارای ضخامت بیشتری است، مقدار کمتری دارد. از جدول ۲ می‌توان برداشت کرد که چقرمگی با افزایش تعداد لایه‌ها تحت دو عامل به شدت کاهش می‌یابد: (۱) افزایش تعداد لایه‌ها و در نتیجه جرم ساختار و (۲) کاهش شدید محدوده کرنشی کلی رفتار کششی گرافن‌های مارپیچ. همچنین، بیشترین مقدار چقرمگی برای نمونه شماره ۱ با یک لایه و کمترین چقرمگی برای نمونه شماره ۲ با سه لایه مشاهده شده است.

جدول ۲: بررسی ارتباط تعداد لایه‌ها و مشخصات هندسی گرافن مارپیچ با چقرمگی.

Table 2. (Investigation of relation between toughness and geometrical properties of Graphene Helicoids)

چقرمگی (J/g)	تعداد لایه	نمونه
۱۲۳۱۸/۸۹	۱	۱
۴۳۵۰/۱۷۷۲	۲	
۳۰۶۸/۹۵۳	۳	
۶۶۴۴/۸۶۳۴	۱	۲
۴۳۵۰/۴۸۹۴	۲	
۱۶۲۶/۶۵۸۷	۳	
۱۰۸۴۸/۰۳۱	۱	۳
۵۶۹۱/۶۱۰۲	۲	
۲۹۷۱/۷۹۱۲	۳	

در این محدوده قرار دارد. بررسی رفتار گرافن‌های مارپیچ به صورت دقیق‌تر در این محدوده می‌تواند منجر به دید فیزیکی بهتری از خواص مکانیکی شود. با بررسی دقیق‌تر محدوده کرنشی مراحل اول و دوم نمونه‌ها که در شکل ۷ نشان داده شده است، جزئیات بیشتری آشکار می‌شود. در نمونه شماره ۱ و ۳ که دارای ضخامت یکسانی هستند، نیرو برای نمونه تک‌لایه نسبت به نمونه‌های چند لایه در کرنش‌های بالاتری سقوط می‌کند، در حالی که در نمونه شماره ۲ تقریباً روند یکسانی دارند. این مساله در نمودار تغییرات انرژی و اندروالس نیز به صورت متفاوت بودن سطح انرژی نمونه تک‌لایه نسبت به چندلایه دیده می‌شود. همچنین، در محدوده کرنشی ۰ تا ۰/۳ برای نمونه‌های شماره ۱ و ۲، نمونه‌های سه‌لایه و دو لایه به ترتیب به مقدار نیروی بیشتری نسبت به نمونه تک‌لایه می‌رسند، در حالی که برای نمونه‌های تک‌لایه و چندلایه شماره ۳، هر سه تقریباً به مقدار ثابتی می‌رسند. این موضوع در حالیست که برای همه نمونه‌ها با افزایش تعداد لایه ثابت فنر کاهش می‌یابد که نشانگر کاهش شیب نیرو بر حسب جابه‌جایی در محدوده کرنشی ۰ تا ۰/۸ درصد است. بعبارتی دلیل این امر را می‌توان این‌گونه بیان کرد که با افزایش تعداد لایه‌ها، نحوه چینش لایه‌ها کنار هم تغییر می‌کند و نیروی یکنواخت بین لایه‌های برای نمونه تک‌لایه - که دقیقاً لایه‌ها کنار هم قرار گرفته‌اند - مشاهده نمی‌شود. به عبارتی دیگر با افزایش کرنش، کمی انرژی صرف جابه‌جایی لایه‌ها می‌شود که از جمله دلایل کاهش ثابت فنر می‌باشد. برای تمامی نمونه‌ها به نظر می‌رسد که رفتار کششی در مرحله دوم مشابه است و وابستگی به تعداد لایه‌ها ندارد. همچنین، مقدار بیشترین نیرو در مرحله اول و قبل از جدایش یک‌لایه به ضخامت نانوساختار وابسته است، در حالی که نیرو در مرحله دوم تقریباً مستقل از ضخامت نانوساختار می‌باشد. در انتهای مرحله دوم شیب نمودار تغییر انرژی و اندروالس کاهش می‌یابد که نشانگر باز شدن لایه‌ها و کاهش اثرگذاری نیروهای واندوالس است. همچنین، برای جمع‌بندی و مقایسه بهتر نتایج، نمودارهای میله‌ای ثابت فنر، بیشترین نیرو و کرنش نهایی در شکل ۸ نمایش داده شده است.

۵-۳- بررسی ارتباط تعداد لایه و مشخصات هندسی گرافن

مارپیچ با چقرمگی

تاکنون به بررسی روند کلی رفتاری گرافن‌های مارپیچ با توجه به پارامترهای گوناگون پرداخته شده است و تغییرات جابه‌جایی و نیرو

- [2] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, Electric field effect in atomically thin carbon films, *Science*, 669-666 (2004) (5696)306.
- [3] S. Iijima, Helical microtubules of graphitic carbon, *Nature*, 56 (1991) (6348)354.
- [4] M.M. Haley, Synthesis and properties of annulenic subunits of graphyne and graphdiyne nanoarchitectures, *Pure Appl. Chem.*, 532-519 (2008) (3)80.
- [5] Q. Peng, W. Ji, S. De, Mechanical properties of graphyne monolayers: a first-principles study, *PCCP*, (2012) (38)14 13391-13385.
- [6] A.A. Balandin, Thermal properties of graphene and nanostructured carbon materials, *Nat. Mater.*, (8)10 581-569 (2011).
- [7] A.A. Balandin, S. Ghosh, W. Bao, I. Calizo, D. Teweldebrhan, F. Miao, C.N. Lau, Superior thermal conductivity of single-layer graphene, *Nano Lett.*, 907-902 (2008) (3)8.
- [8] J.S. Bunch, A.M. Van Der Zande, S.S. Verbridge, I.W. Frank, D.M. Tanenbaum, J.M. Parpia, H.G. Craighead, P.L. McEuen, Electromechanical resonators from graphene sheets, *Science*, 493-490 (2007) (5811)315.
- [9] Y.-W. Son, Y.-W. Son, M.L. Cohen, and S.G. Louie, *Nature (London)* 2006) 347, 444), *Nature (London)*, (2006) 444 347.
- [10] N. Tombros, C. Jozsa, M. Popinciuc, H.T. Jonkman, B.J. Van Wees, Electronic spin transport and spin precession in single graphene layers at room temperature, *Nature*, 571 (2007) (7153)448.
- [11] L. Zhang, S. Zaric, X. Tu, X. Wang, W. Zhao, H. Dai, Assessment of chemically separated carbon nanotubes for nanoelectronics, *J. Am. Chem. Soc.*, -2686 (2008) (8)130 2691.
- [12] O.Y. Loh, H.D. Espinosa, Nanoelectromechanical contact switches, *Nature nanotechnology*, 283 (2012) (5)7.
- [13] Y. Rémond, S. Ahzi, M. Baniassadi, H. Garmestani, Applied RVE reconstruction and homogenization of heterogeneous materials, John Wiley & Sons, 2016.
- [14] M. Mahdavi, E. Yousefi, M. Baniassadi, M. Karimpour, M. Baghani, Effective thermal and mechanical properties

۴- نتیجه گیری

در این تحقیق به بررسی خواص مکانیکی گرافن ماریپج تک لایه و چندلایه با مشخصات هندسی متفاوت پرداخته شده است و مراحل مختلف مشاهده شده در آزمون کشش مطالعه شده است. تغییر تعداد لایه ها برای هر ساختار با مشخصات هندسی خاص، تاثیری متفاوت بر مراحل رفتار کششی دارد. از مهم ترین اثرات تغییر تعداد لایه متناسب با ویژگی های هندسی گرافن های ماریپج می توان موارد زیر را نام برد:

(۱) برای تمامی ساختارها با افزایش تعداد لایه ها محدوده کرنشی در آزمون کشش آنها کاهش می یابد و همچنین بیشترین نیروی تحمل شده توسط نانوساختار افزایش می یابد.

(۲) برای تمامی ساختارها ثابت فنر با افزایش تعداد لایه ها کاهش می یابد ولی میزان کاهش آن وابسته به مشخصات هندسی نانوساختار می باشد.

(۳) مراحل مختلفی در رفتار کششی نانوساختارها مشاهده شده است که در یک دسته بندی جامع شامل: الف) مرحله نخست شامل افزایش نیرو شدید ناشی از نیروهای واندروالس، ب) مرحله دوم که در بردارنده جدایش آرام تک لایه ها از یکدیگر است، ج) مرحله سوم که پس از جدایش کامل لایه ها شروع می شود و نیرو به شدت افزایش می یابد و د) مرحله چهارم که پاره شدن پیوندها تقریباً در یک نیروی ثابت رخ می دهد و یک الگوی دندانانه اره ای را ایجاد می کند.

(۴) مراحل ذکر شده در قسمت قبل وابسته به مشخصات هندسی و تعداد لایه ها هستند که حتی برخی از این ویژگی منجر به حذف یک مرحله خواهد شد.

همچنین چقرمگی نیز با افزایش تعداد لایه ها به شدت کاهش می یابد که این کاهش متأثر از ویژگی های هندسی نانوذرات و تعداد لایه ها است. کنترل خواص و شناخت پاسخ مکانیکی انواع مختلف گرافن ماریپج می تواند بهینه کردن کارایی شان متناسب با جایگاه کاربردی شان و افزایش کاربرد در ادوات نانو مقیاس را به همراه داشته باشد.

مراجع

- [1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S. Morozov, D. Jiang, M. Katsnelson, I. Grigorieva, S. Dubonos, Firsov, AA, Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene, *Nature*, 197 (2005) (7065)438.

- Amelinckx, J. Van Landuyt, V. Ivanov, J. Nagy, P. Lambin, A. Lucas, The texture of catalytically grown coil-shaped carbon nanotubes, *EPL (Europhysics Letters)*, (2)27 141 (1994).
- [25] C. Chuang, Y.-C. Fan, B.-Y. Jin, Generalized classification scheme of toroidal and helical carbon nanotubes, *J. Chem. Inf. Model.*, 368-361 (2009) (2)49.
- [26] P. Chen, Y. Xu, S. He, X. Sun, S. Pan, J. Deng, D. Chen, H. Peng, Hierarchically arranged helical fibre actuators driven by solvents and vapours, *Nature Nanotechnology*, 1077 (2015) 10.
- [27] J. Wu, J. He, G.M. Odegard, S. Nagao, Q. Zheng, Z. Zhang, Giant stretchability and reversibility of tightly wound helical carbon nanotubes, *J. Am. Chem. Soc.*, (37)135 13785-13775 (2013).
- [28] A. Sharifian, M. Baghani, J. Wu, G.M. Odegard, M. Baniassadi, Insight into Geometry-Controlled Mechanical Properties of Spiral Carbon-Based Nanostructures, *J. Phys. Chem. C*, 3238-3226 (2019) (5)123.
- [29] C. Chuang, Y.-C. Fan, B.-Y. Jin, Dual space approach to the classification of toroidal carbon nanotubes, *J. Chem. Inf. Model.*, 1686-1679 (2009) (7)49.
- [30] E. Yousefi, M. Mahdavi, M. Baniassadi, Investigating mechanical properties of coiled carbon nanotube reinforced nanocomposite.
- [31] F. Xu, H. Yu, A. Sadrzadeh, B.I. Yakobson, Riemann surfaces of carbon as graphene nanosolenoids, *Nano Lett.*, 39-34 (2015) (1)16.
- [32] M. Daigle, D. Miao, A. Lucotti, M. Tommasini, J.F. Morin, Helically coiled graphene nanoribbons, *Angew. Chem.*, 6313-6309 (2017) (22)129.
- [33] S. Amelinckx, X. Zhang, D. Bernaerts, X. Zhang, V. Ivanov, J. Nagy, A formation mechanism for catalytically grown helix-shaped graphite nanotubes, *Science*, 639-635 (1994) (5172)265.
- [34] H. Zhan, G. Zhang, C. Yang, Y. Gu, Graphene Helicoid: Distinct Properties Promote Application of Graphene Related Materials in Thermal Management, *J. Phys. Chem. C*, 7612-7605 (2018) (14)122.
- [35] P. Šesták, J. Wu, J. He, J. Pokluda, Z. Zhang, Extraordinary of short carbon fiber/natural rubber composites as a function of mechanical loading, *Appl. Therm. Eng.*, 117 16-8 (2017).
- [15] D. Boukhvalov, M. Katsnelson, Chemical functionalization of graphene with defects, *Nano Lett.*, 4379-4373 (2008) (12)8.
- [16] O.C. Compton, S.W. Cranford, K.W. Putz, Z. An, L.C. Brinson, M.J. Buehler, S.T. Nguyen, Tuning the mechanical properties of graphene oxide paper and its associated polymer nanocomposites by controlling cooperative intersheet hydrogen bonding, *ACS nano*, (2012) (3)6 2019-2008.
- [17] Q.-X. Pei, Y.-W. Zhang, V.B. Shenoy, Mechanical properties of methyl functionalized graphene: a molecular dynamics study, *Nanotechnology*, 115709 (2010) (11)21.
- [18] F. OuYang, B. Huang, Z. Li, J. Xiao, H. Wang, H. Xu, Chemical functionalization of graphene nanoribbons by carboxyl groups on Stone-Wales defects, *J. Phys. Chem. C*, 12007-12003 (2008) (31)112.
- [19] Z. Zabihi, H. Araghi, Effective thermal conductivity of carbon nanostructure based polyethylene nanocomposite: Influence of defected, doped, and hybrid filler, *International Journal of Thermal Sciences*, 189-185 (2017) 120.
- [20] R.I. Jafri, N. Rajalakshmi, S. Ramaprabhu, Nitrogen-doped multi-walled carbon nanocoils as catalyst support for oxygen reduction reaction in proton exchange membrane fuel cell, *J. Power Sources*, (2010) (24)195 8083-8080.
- [21] K. Kim, H.J. Park, B.-C. Woo, K.J. Kim, G.T. Kim, W.S. Yun, Electric property evolution of structurally defected multilayer graphene, *Nano Lett.*, 3096-3092 (2008) (10)8.
- [22] G. Wang, X. Li, Y. Wang, Z. Zheng, Z. Dai, X. Qi, L. Liu, Z. Cheng, Z. Xu, P. Tan, Interlayer Coupling Behaviors of Boron Doped Multilayer Graphene, *J. Phys. Chem. C*, 26043-26034 (2017) (46)121.
- [23] X. Zhang, S. Liu, H. Liu, J. Zhang, X. Yang, Molecular dynamics simulation of the mechanical properties of multilayer graphene oxide nanosheets, *RSC Advances*, 55011-55005 (2017) (87)7.
- [24] X. Zhang, X. Zhang, D. Bernaerts, G. Van Tendeloo, S.

- Chem. Phys., 6486-6472 (2000) (14)112.
- [42] O. Shenderova, D. Brenner, A. Omeltchenko, X. Su, L. Yang, Atomistic modeling of the fracture of polycrystalline diamond, Phys. Rev. B, 3877 (2000) (6)61.
- [43] J. Wu, S. Nagao, J. He, Z. Zhang, Nanohinge-Induced Plasticity of Helical Carbon Nanotubes, Small, (21)9 3566-3561 (2013).
- [44] J. Wu, Q. Shi, Z. Zhang, H.-H. Wu, C. Wang, F. Ning, S. Xiao, J. He, Z. Zhang, Nature-inspired Entwined Coiled Carbon Mechanical Metamaterials: Molecular Dynamics Simulations, Nanoscale, 15653-15641 (2018) (33)10.
- [45] J. Wu, H. Zhao, J. Liu, Z. Zhang, F. Ning, Y. Liu, Nanotube-chirality-controlled tensile characteristics in coiled carbon metastructures, Carbon, 349-335 (2018) 133.
- [46] A.P. Thompson, S.J. Plimpton, W. Mattson, General formulation of pressure and stress tensor for arbitrary many-body interaction potentials under periodic boundary conditions, J. Chem. Phys., (2009) (15)131 154107.
- [47] W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten, VMD: visual molecular dynamics, J. Mol. Graphics, 38-33 (1996) (1)14.
- deformation capacity of smallest carbohelicene springs, PCCP, 18690-18684 (2015) (28)17.
- [36] H. Zhan, Y. Zhang, C. Yang, G. Zhang, Y. Gu, Graphene helicoid as novel nanospring, Carbon, 264-258 (2017) 120.
- [37] H. Zhan, G. Zhang, C. Yang, Y. Gu, Breakdown of Hooke's law at the nanoscale-2D material-based nanosprings, Nanoscale, 18968-18961 (2018) (40)10.
- [38] S. Norouzi, M.M.S. Fakhrebadi, Nanomechanical properties of single-and double-layer graphene spirals: a molecular dynamics simulation, Appl. Phys. A, (5)125 321 (2019).
- [39] A. Sharifian, A. Moshfegh, A. Javadzadegan, H.H. Afrouzi, M. Baghani, M. Baniassadi, Hydrogenation-Controlled Mechanical Properties in Graphene Helicoids: Exceptionally Distribution-Dependent Behavior, PCCP, 12433-12423 (2019) (23)21.
- [40] S.M. Avdoshenko, P. Koskinen, H. Sevinçli, A.A. Popov, C.G. Rocha, Topological signatures in the electronic structure of graphene spirals, Sci. Rep., 1632 (2013) 3.
- [41] S.J. Stuart, A.B. Tutein, J.A. Harrison, A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions, J.

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم

A. Najafi, S.M. Taheri, R. Basafa, Investigation of the mechanical properties of multilayer graphene helicoids with different geometric characteristics using molecular dynamics simulation. *AmirKabir J. Mech Eng.*, 53(special issue 2) (2021) 1237-1250.

DOI: [10.22060/mej.2020.16923.6473](https://doi.org/10.22060/mej.2020.16923.6473)

