

## بررسی فرایند ذوب ساختار کربنی پنتاهکسوتیت با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

پرستو جلیلی، ندا موسوی، جمال داودی

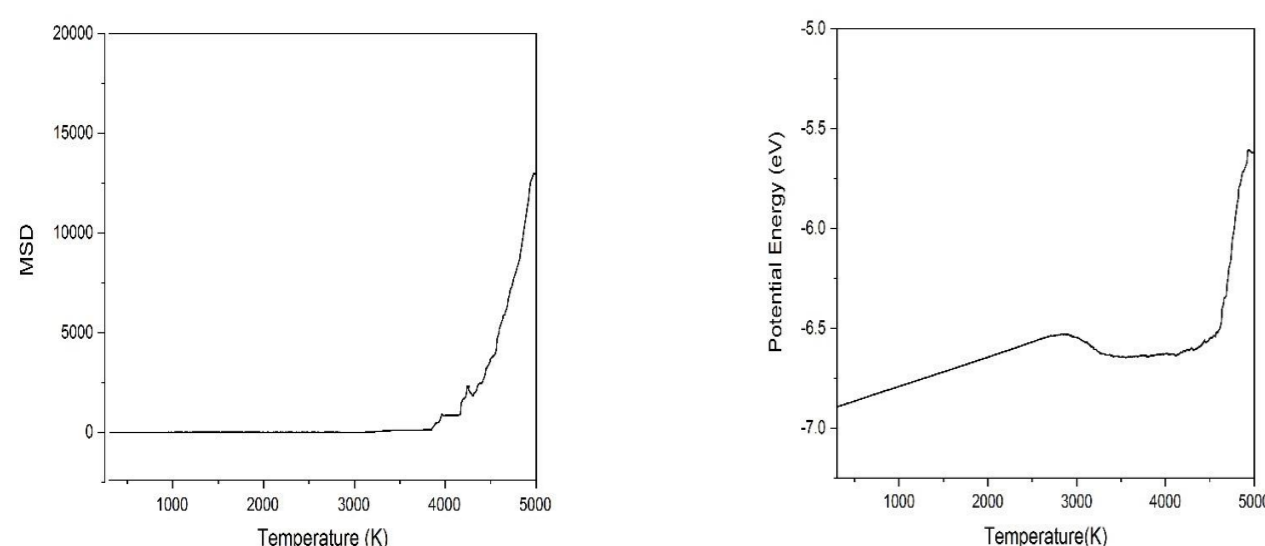
دانشکده فیزیک دانشگاه زنجان

Parastoojalili30@gmail.com, Mousavi.neda@znu.ac.ir, jdavoodi@znu.ac.ir

### یافته‌ها

#### فرایند ذوب

برای آشکار کردن گذار فاز از جامد به مایع، منحنی تغییرات انرژی پتانسیل و میانگین مربع جابه‌جایی (MSD) را بر حسب دما رسم می‌کنیم (شکل ۳). با توجه به شکل ۳ قسمت الف، مشاهده می‌کنیم که با افزایش دما انرژی پتانسیل تقریباً به طور خطی افزایش پیدا می‌کند تا تقریباً در دمای ۳۲۳۸ کلوین ساختار شروع به تغییر شکل کند و سپس در دمای ۳۸۶۹ تغییر فاز کاملاً شروع می‌شود (با یک پرش ناگهانی در انرژی که متناسب با گرمای نهان ذوب می‌باشد) ذوب شروع می‌شود. در نقطه ذوب یک تغییر ناگهانی که ناشی از جذب گرمای نهان است را مشاهده می‌کنیم. همانطور که در نمودار شکل ۳ قسمت ب مشاهده می‌شود تا دمای ۳۲۳۸ کلوین، میانگین مربع جابه‌جایی ذرات یک مقدار ثابت دارد سپس یک مقدار انحراف مشاهده می‌شود و بعد تغییرات زیاد که ناشی از شروع فرایند تغییر ساختار می‌باشد را مشاهده می‌کنیم.



شکل ۲ (الف) (ب)

شکل ۲

الف) انرژی پتانسیل بر حسب دما

ب) تغییرات میانگین مربع جابه‌جایی اتم‌ها (MSD) بر حسب دما

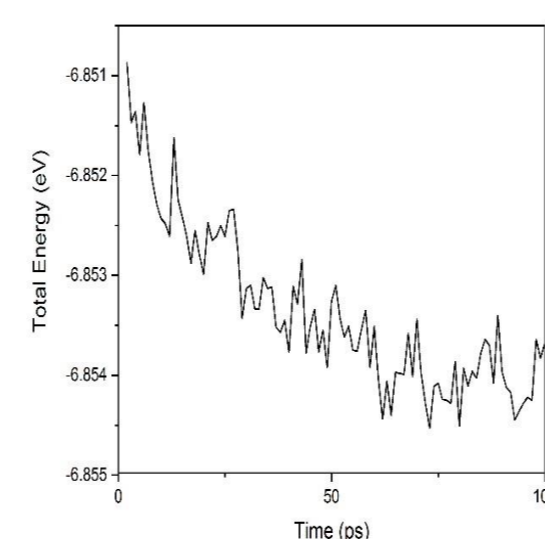
### مواد و روش‌ها

#### جزئیات شبیه‌سازی:

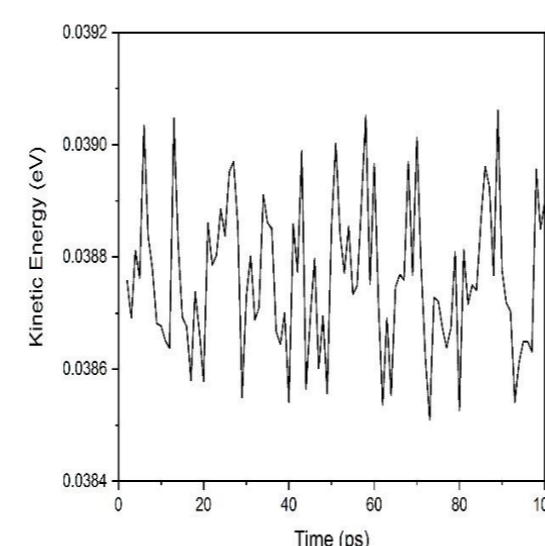
پتانسیل مورد استفاده در این شبیه‌سازی پتانسیل ایربو<sup>۱۰</sup> می‌باشد. در اولین مرحله با هنگرد NPT ساختار پنتاهکسوتیت را در دمای ۳۰۰ کلوین و فشار ۱ اتمسفر با ۱۰۰۰۰۰ گام زمانی یک فمتوثانیه، به تعادل رساندیم. شرایط مرزی دوره‌ای را در سه راستای X و Y و Z اعمال کردیم (در راستای Z بین صفحات خلا در نظر گرفتیم و جعبه شبیه‌سازی را بزرگ انتخاب کردیم تا در این راستا برهمکنش بین اتمها وجود نداشته باشد). سپس شروع به افزایش دمای ساختار با هنگرد NVT و در مدت ۰.۱ نانو ثانیه با نرخ ۰.۰۰۱ کلوین بر گام زمانی کرده و طی افزایش دما نحوه تغییرات انرژی پتانسیل و میانگین مربع جابه‌جایی را بر حسب دما محاسبه کردیم.

#### فرایند تعادل

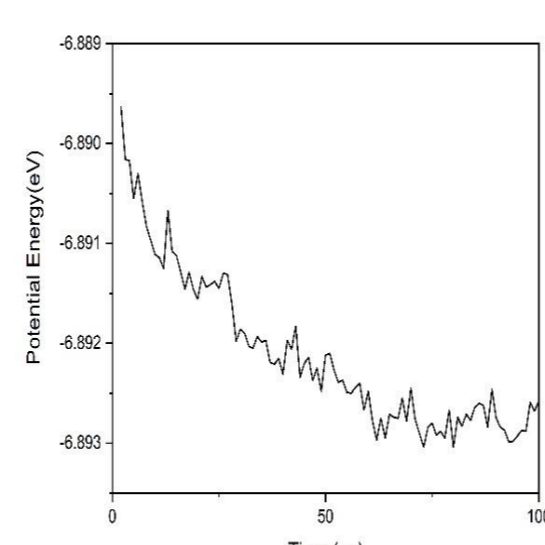
فرایند به تعادل رساندن سیستم را از طریق نحوه تغییرات انرژی جنبشی، فشار و انرژی پتانسیل بررسی کردیم. نمودارهای انرژی پتانسیل، جنبشی، انرژی کل و فشار را بر حسب زمان در شکل (۲) نمایش داده‌ایم. همانطور که در شکلها مشاهده می‌کنیم، در حالت تعادل کمیت‌های مورد نظر حول یک مقدار ثابت افت و خیز دارند.



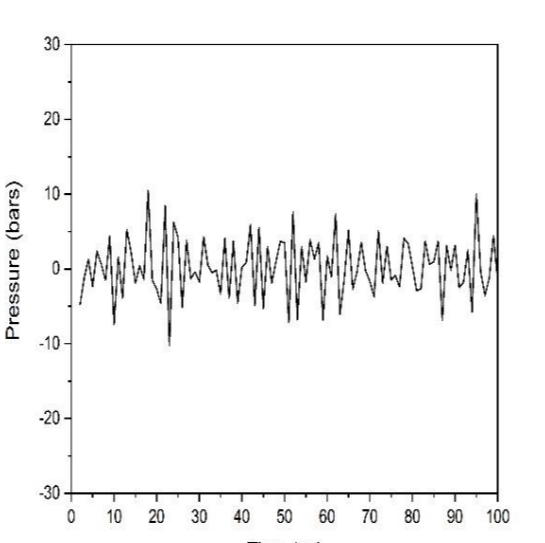
الف) نمودار تغییرات انرژی کل بر حسب زمان در فرایند تعادل



ب) نمودار تغییرات انرژی جنبشی بر حسب زمان در فرایند تعادل



پ) نمودار تغییرات انرژی پتانسیل بر حسب زمان در فرایند تعادل



ت) نمودار تغییرات فشار بر حسب زمان در فرایند تعادل

#### فرایند ذوب:

بعد از رسیدن به حالت تعادل، شروع به افزایش دما با گام‌های ۰.۰۰۱ کلوین می‌کنیم تا جایی این کار را ادامه می‌دهیم تا گذار فاز مشاهده شود و نقطه ذوب ساختار را بدست آوریم.

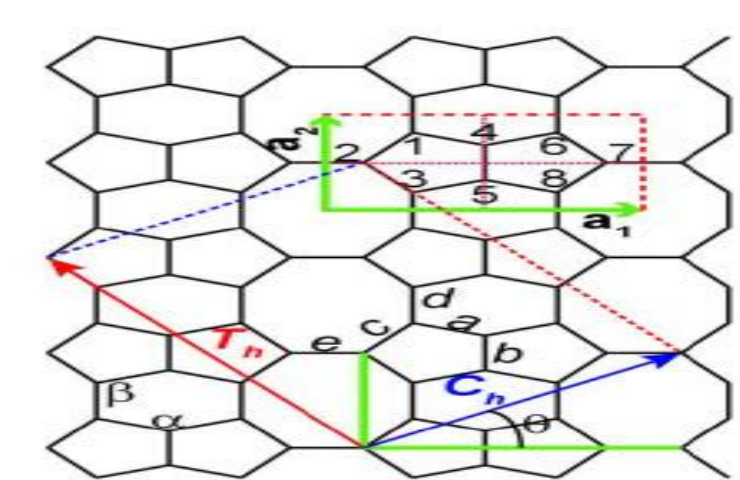
### چکیده

یکی از خواص فیزیکی مهم یک ماده نقطه ذوب آن است. در این پژوهش با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و بسته محاسباتی لمپس، حالت تعادل و فرایند ذوب نانو ساختار پنتاهکسوتیت که یکی از آلوتروپهای دو بعدی کربن یا هیبریداسیون  $sp^2$  می‌باشد، بررسی شد. برای انجام شبیه‌سازی از تابع پتانسیل ایربو برای برهمکنش بین اتمهای کربن-کربن استفاده شده است. در مدت زمان ۱۰۰ ps تعادل سامانه در شبیه‌سازی، نحوه تغییرات فشار، انرژی جنبشی، پتانسیل، انرژی کل به ازای هر اتم با زمان بررسی شد و بعد از به تعادل رسیدن و پایداری سیستم، شروع به افزایش دما کردیم و نحوه تغییرات انرژی پتانسیل و میانگین مربع جابه‌جایی ذرات سیستم با دما را محاسبه کردیم. نتایج نشان می‌دهند که ساختار پنتاهکسوتیت در محدوده دمایی ۳۰۰۰ کلوین شروع به تغییر فاز (ذوب) می‌کند. که در دمای ذوب میانگین مربع جابه‌جایی ذرات و انرژی پتانسیل شروع پرش ناگهانی در مقدار را نشان می‌دهند.

### مقدمه

به علت تمایل کربن به تشکیل هیبریداسیون‌های متنوع، کربن آلوتروپ‌هایی متنوعی دارد. همین موضوع باعث تحقیقات گسترده روی آلوتروپهای مختلف از کربن که متشکل از شبکه‌های متنوعی از حلقه‌های مختلف، همانند: گرافین [۱]، گرافین [۲]، سیکلوکربن [۳]، پنتاهیتیت [۴]، نانولوله کربنی [۵]، نانو مخروط کربنی [۶]، فولرن [۷]..... شده است.

در این پژوهش ساختار کربنی پنتاهکسوتیت را بررسی می‌کنیم که یکی از آلوتروپهای دو بعدی کربن یا هیبریداسیون  $sp^2$  می‌باشد. این نانو ساختار از دو پنج ضلعی که روبه‌روی هم قرار دارند و توسط چهار ۸ ضلعی و دو ۶ ضلعی احاطه شده‌اند تشکیل شده است (شکل ۱). شش ضلعیها در این صفحه منظم نیستند و شامل دو نوع زاویه هستند. با وجود این طول پیوندهای اتمهای کربن با همسایه‌ها به‌طور قابل توجهی از طول هیبرید شده گرافن منحرف نمی‌شود. ساختار این ورقه را می‌توان از گرافن با تبدیل SW یکی از پیوندها در یک سلول واحد مستطیل شکل بدست آورد [۸]. این ساختار تقارن کمتری نسبت به گرافن دارد و همین باعث خواص فیزیکی متفاوت آن شده است. استحکام این ساختار دو بعدی قابل مقایسه با گرافن بوده، ولی رسانش حرارتی کلی ورقه از گرافن کمتر است و به‌طور الکترونیکی فلز می‌باشد. از این ورقه می‌توان برای ساخت نانولوله‌های یک بعدی استفاده کرد [۸].



شکل (۱) |۸|

یکی از تکنیک‌هایی که می‌توان خواص گرمایی و مکانیکی مواد را محاسبه کرد، روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی است شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یکی از ابزارهای قوی برای به دست آوردن خصوصیات ماکروسکوپی و میکروسکوپی مواد است. به ویژه برای کمیت‌هایی که دستیابی به مقادیر تجربی آنها در شرایط غیر متعارفی سخت است می‌توان از تکنیک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده کرد. مهمترین بخش در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده از پتانسیل برهمکنش مناسب می‌باشد [۹]. در این مقاله سعی داریم با استفاده از نرم افزار شبیه‌ساز لمپس [۱۰] که یک کد دینامیک مولکولی کلاسیک می‌باشد، ساختار پنتاهکسوتیت را به تعادل برسانیم و سپس با افزایش دما نحوه تغییرات انرژی پتانسیل و پارامتر میانگین مربعی جابه‌جایی ذرات را با افزایش دما بررسی کنیم. تابع پتانسیل مورد استفاده در این شبیه‌سازی پتانسیل ایربو [۱۱] می‌باشد که این پتانسیل بین اتمی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ساختارهای اتمی متشکل از عناصر کربن و هیدروژن کاربرد وسیعی دارد و یک پتانسیل غیر پیوندی می‌باشد.

### بحث و نتیجه‌گیری

پنتاهکسوتیت یک ساختار دو بعدی از کربن با هیبریداسیون  $sp^2$  می‌باشد که می‌تواند به شکل نانولوله هم مورد استفاده قرار گیرد. این ساختار شامل حلقه‌های ۵-۶-۸ حلقه‌ای از کربن است که در این پژوهش فرایند به تعادل رسیدن و فرایند ذوب آن با استفاده از روش دینامیک مولکولی و پکیج شبیه‌ساز لمپس بررسی و دمای ذوب آن محاسبه شد.

### مراجع

- [۱] Q. Song, B. Wang, K. Deng, X. Feng, M. Wagner, J.D. Gale, K. Mu'llen, L. Zhi, Graphylene, *J. Mater. Chem. C*, 1 (2013) 38-41.
- [۲] L. Li, X. Kong, F.M. Peeters, Carbon N. Y. 141 (2019) 712-718.
- [۳] M. Liu, M. Liu, L. She, Z. Zha, J. Pan, S. Li, T. Li, Y. He, Z. Cai, J. Wang, Y. Zheng, X. Qiu, *D. Zhong, Nat. Commun.* 8 (2017) 14924.
- [۴] V.H. Crespi, L.X. Benedict, M.L. Cohen, S.G. Louie, *Phys. Rev.* 53 (1996) R13303-R13305.
- [۵] J. Zhong, J. Chiou, C. Dong, P.-A. Glans, W.-F. Pong, C. Chang, Z. Wu, *J. Guo, Appl. Phys. Lett.* 100 (2012) 201605.
- [۶] E. Vessally, F. Behmgham, B. Massoumi, A. Hosseini, L. Edjlali, *Vacuum.* 134 (2016) 40-47.
- [۷] L. Rapoport, N. Fleischer, R. Tenne, *J. Mater. Chem.* 15 (2005) 1782-1788.
- [۸] B.R. Sharma, A. Manjanath, A.K. Singh, *Sci. Rep.* 4 (2014) 1-6.
- [۹] ج. داودی، محسن عسکری‌خواه، مجله پژوهش فیزیک ۱۱(۱۳۹۰)، ۱۶۱-۱۶۱.
- [۱۰] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of computational physics.* 1995;117(1):1-19.
- [۱۱] Steven J. Stuart, Alan B. Tutein, and Judith A. Harrison, A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions, *The Journal of Chemical Physics.* 2000. 112, 6472.