بررسی خواص حرارتی صفحه‌ی ایریدا-گرافین

آغاجری ، حامد[1] ؛ داودی، جمال[1]

[1] گروه فیزیک ، دانشگاه زنجان ، زنجان

چکیده

در این مطالعه از بسته نرم افزاری لمپس برای بررسی خواص حرارتی صفحه‌ی دو بعدی ایریدا-گرافین استفاده شده است. پتانسیل بین ذره‌ای AIREBO را برای بیان بر همکنش‌های بین اتم‌های کربن _کربن مورد استفاده قرار دادیم. شرایط مرزی دوره‌ای را در سه راستا اعمال و برای به تعادل رساندن ساختار از آنسامبل کانونی NVT در شرایط ایده آل استفاده کردیم. سپس به بررسی ذوب و رسانندگی گرمایی ساختار پرداختیم. مشاهده کردیم که ایریدا-گرافین دمای ذوب نسبتا بالایی دارد و رسانای خوبی برای گرما نیز می‌باشد.

Investigation of thermal properties of Irida-graphene sheet

Aghajari, Hamed[1]; Davoodi, Jamal[1]

[1] Department of Physics, Zanjan University, Zanjan

Abstract

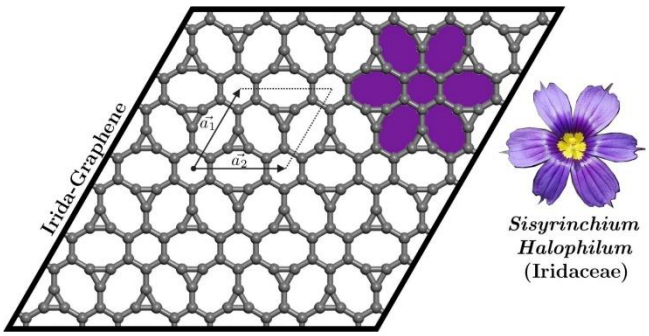
In this study, the Lammps software package was used to investigate the thermal properties of the two-dimensional irida-graphene sheet. The adaptive intermolecular reactive empirical bond order (AIREBO) potential is used to describe the interactions among the carbon atoms. Periodic boundary conditions are applied in the three directions. Also, all system are equilibrated in the canonical ensemble (NVT) at the ambient condition (temperature = 300 °K, pressure = 1 atm and a constant number of particles). Then we investigated the melting and thermal conductivity of the structure. We observed that irida-graphene has a relatively high melting temperature and is a good conductor of heat.

PACS No. 81

مقدمه

چندین ماده مبتنی بر کربن دوبعدی در سال‌های گذشته به دلیل موفقیتی که توسط گرافن به دست آمده است به صورت محاسباتی طراحی شده‌اند. طراحی [۱] و سنتز [۲-٤] آلوتروپ های جدید کربن از زمان ظهور گرافن رشد عظیمی را تجربه کرده است [۵]. آرایش لانه زنبوری دوبعدی آن با ضخامت اتمی خواص مکانیکی، نوری و الکترونیکی منحصربه‌فردی را نشان می‌دهد که برای بسیاری از کاربردهای بالقوه در نانوالکترونیک جالب توجه است [٦]. به همین دلیل، چندین ماده مبتنی بر کربن دو بعدی به صورت محاسباتی در چند سال اخیر پیشنهاد شده است [۷]. کربن آمورف تک لایه [۲]، شبکه بی فنیلن [۳] و شبکه فولرن تک لایه [٤] اخیرا سنتز شدند. سنتز موفقیت‌آمیز این مواد به تحریک طراحی آلوتروپ‌های کربنی دوبعدی جدید که می‌توانند به صورت تجربی به دست آیند، کمک کرده است. یک روند در توسعه آلوتروپ های جدید کربن، پیشنهاد ساختارهایی با حلقه های غیر شش ضلعی و منافذ بزرگ بوده است. انگیزه نهایی این است که مواد مبتنی بر کربن با ساختارهای حلقه‌ای غیر شش ضلعی در مقایسه با گرافن، جاذب بهتری برای اتم‌های لیتیوم هستند[۸]. می توان پاپگرافین (متشکل از ۵-۸-۵ حلقه کربنی) [۹]، فاگرافین [۱۰] و سای-گرافین [۱۱] را که از ۵-٦-۷ حلقه کربنی تشکیل شده اند برجسته کرد. آنها ذاتا فلزی

هستند و از ظرفیت نظری بالایی برای جذب اتم های لیتیوم (به ترتیب ۱٤۸۷، ٥٥٦ و ۳۷۲ میلی آمپر ساعت بر گرم) برخوردارند، که این ویژگی ها برای توسعه باتری های لیتیوم یونی کارآمد هستند. بر اساس این عملکردها برای ظرفیت ذخیره‌سازی لیتیوم، طراحی سایر مواد فلزی متخلخل دو بعدی حاوی حلقه‌های ذوب شده با هشت اتم کربن می‌تواند در کاربردهای ذخیره‌سازی انرژی مفید باشد. در این مطالعه ما از یک آلوتروپ کربن دوبعدی all-sp2 جدید به نام Irida-Graphene (IG) استفاده کردیم. IG از حلقه های حاوی ۳-٦-۸ اتم کربن تشکیل شده است. این نام به دلیل آرایش اتمی آن است که شبیه به گل (Sisyrinchium Halophilum - Iridaceae) است که در ایالات متحده به آن "علف چشم آبی نوادا" می گویند (شکل ۱). در این مطالعه ما با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی به بررسی خواص حرارتی ایریدا-گرافین پرداختیم. مشاده شد که ساختار دو بعدی ایریدا-گرافین نقطه ذوب نسبتا بالایی دارد و رسانای خوبی برای گرما نیز هست.

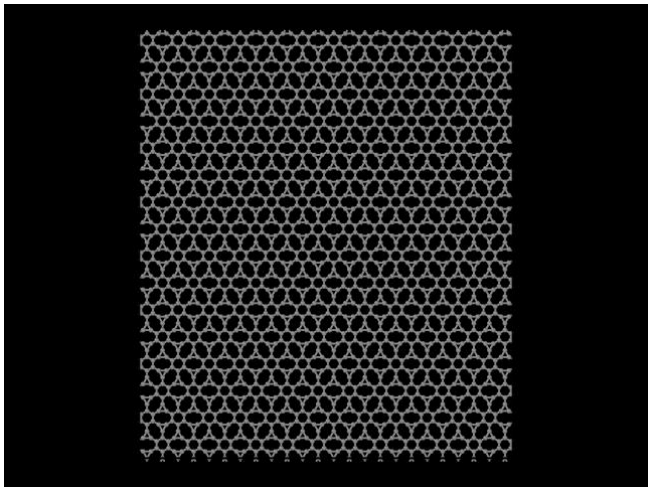


شکل ۱ : نمایش شماتیک ساختار ایریدا-گرافن

روش شبیه سازی

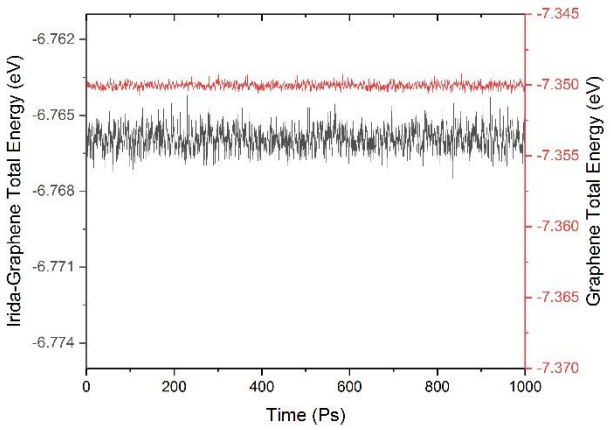
در این پژوهش با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی به مطالعه‌ی ذوب صفحه‌ی دوبعدی ایریدا-گرافین می‌پردازیم. تمامی شبیه سازی‌های انجام شده در این پروژه با استفاده از بسته‌ی نرم-افزاری LAMMPS انجام گرفته است. برای توصیف برهمکنش-های بین اتم‌های کربن در ساختار ایریدا-گرافین از پتانسیل برهمکنشی AIREBO استفاده شده است. از الگوریتم سرعت ورله برای حل معادلات حرکت استفاده کرده‌ایم. شرایط مرزی دوره‌ای را در تمام جهات به منظور حذف اثرات اتم‌های آزاد در لبه‌ها اعمال کردیم. تمامی شبیه سازی‌ها در دمای اتاق ($۳۰۰\ K^{\circ}$) انجام گرفته است.

ابتدا ساختار دوبعدی ایریدا-گرافین (شکل ۲) با استفاده از طول پارامترهای موجود در منابع معتبر درون جعبه شبیه سازی چیده شده است. سپس معادلات حرکت با گام زمانی کوچک ۰/۱ فمتوثانیه اعمال شدند. قبل از ذوب، ساختار بوسیله‌ی باروستات و ترموستات نوز-هوور هنگرد NPT با گذشت ۱۰۰ پیکوثانیه به تعادل اولیه رسیده است.



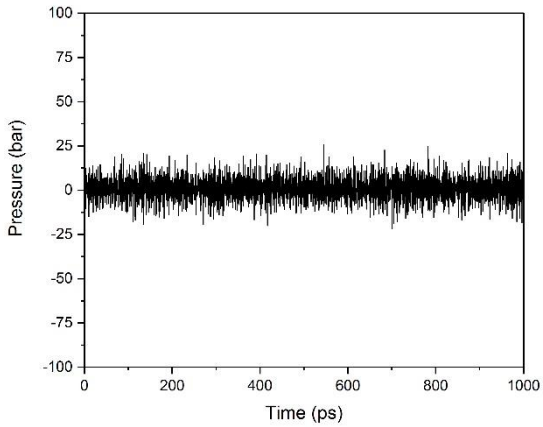
شکل ۲ : ساختار دوبعدی ایریدا-گرافین استفاده شده در این مطالعه

در شکل ۳ و ٤ نمودارهای تعادل ساختار دوبعدی ایریدا-گرافین را مشاهده می‌کنیم. در این نمودارها انرژی و فشار ساختار بر حسب زمان رسم شده‌اند. در شکل ۳ تغییرات انرژی کل ساختار را با گذشت زمان و مقایسه آن با انرژی کل گرافین رسم کرده‌ایم. می‌توان مشاهده کرد که انرژی کل گرافین نسبت به ایریدا-گرافین کمتر است پس گرافین دمای ذوب بیشتری نیز دارد. میبینیم که با گذشت زمان این کمیت‌های فیزیکی حول یک مقدار خاص افت و خیز دارند که بیانگر به تعادل رسیدن ساختار است.



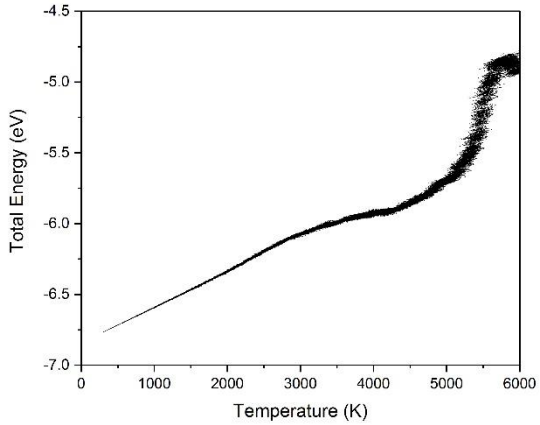
شکل ۳ : تغییرات انرژی کل ساختار با گذشت زمان در فرایند تعادل و مقایسه با انرژی کل گرافین

در شکل زیر تغییرات فشار سیستم با گذشت زمان رسم شده است که به تعادل رسیدن سیستم را نشان می‌دهد.



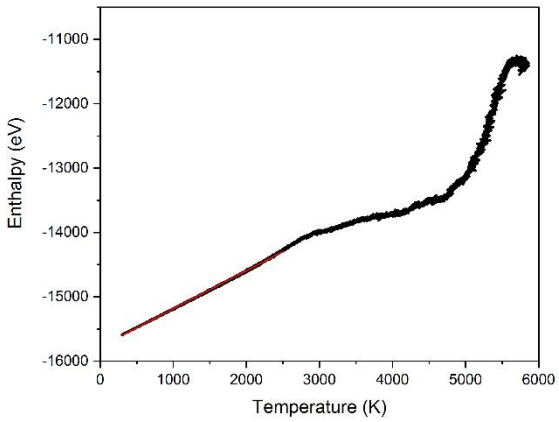
شکل ٤ : تغییرات فشار سیستم با گذشت زمان در فرایند تعادل

پس از تعادل دمای صفحه را افزایش دادیم تا ساختار ذوب شود. شکل‌های ۵ و ٦ و ۷ نیز فرایند ذوب را در سیستم نشان می‌دهند. نمودارهای انرژی، آنتالپی و میانگین مربع جابه‌جایی اتم‌های ایریدا-گرافین را بر حسب دما برای بررسی فرایند ذوب رسم نموده‌ایم. تغییرات ناگهانی در این نمودارها بیانگر ذوب ساختار است. با بررسی شکل‌های ۵ ، ٦ و ۷ مشاهده می‌کنیم که در دمایی حدود ٤۵۰۰ K نمودارهای انرژی و میانگین مربع جابه‌جایی دچار تغییر ناگهانی می‌شوند که بیانگر شروع ذوب ساختار دوبعدی ایریدا-گرافین است. در شکل ۵ تغییرات انرژی کل با افزایش دما در طی فرایند ذوب را مشاهده می‌کنیم.



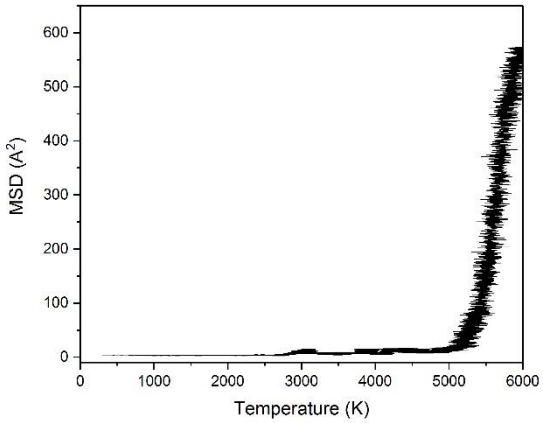
شکل ۵ : نمودار انرژی کل برحسب دما در فرایند ذوب

نمودار زیر (شکل ٦) تغییرات آنتالپی سیستم را با افزایش دما نشان می‌دهد. با بررسی شیب نمودار در بازه دمایی ۳۰۰ تا ۲۵۰۰ کلوین ظرفیت گرمایی در فشار ثابت سیستم در این دما ۰/۵۹ الکترون ولت بر کلوین بدست می‌آید.



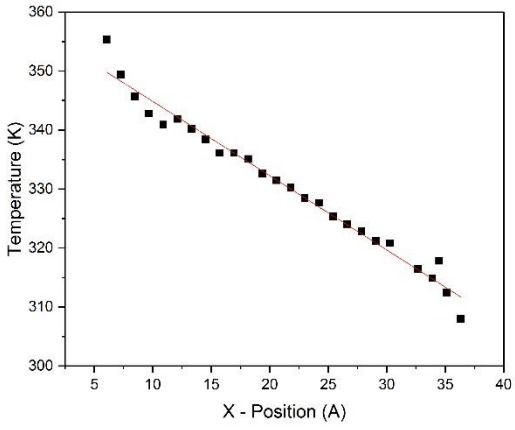
شکل ٦ : نمودار آنتالپی بر حسب دما در فرایند ذوب

همچنین تغییرات میانگین مربع جابجایی اتم‌ها (MSD) برحسب دما در شکل ۷ رسم شده است. مشاهده می‌کنیم که در دمای حدود ٤۵۰۰ K تغییر ناگهانی در روند نمودار ایجاد شده که بیانگر آغاز فرایند ذوب است.



شکل ۷ : نمودار میانگین مربع جابه‌جایی اتم‌ها برحسب دما در فرایند ذوب

پس از بررسی فرایند ذوب ساختار به بررسی رسانندگی گرمایی آن با استفاده از قانون فوریه پرداختیم. برای ایجاد یک گرادیان دمایی در ساختار در سمت چپ یک حمام گرم با دمای ۳۶۰ K و در سمت راست یک حمام سرد با دمای ۳۰۰ K در نظر گرفتیم (شکل ۸). با استفاده از گرادیان دمایی بدست آمده و شار گرمایی عبوری از صفحه و استفاده از رابطه‌ی $\kappa = -\frac{J}{\nabla T}$ رسانندگی گرمایی ساختار را $\kappa = 1201.46\ \frac{w}{mK}$ بدست آوردیم که کمتر از مقدار بدست آمده برای گرافین ($4000\ \frac{w}{mK}$) [۱۲] است.



شکل ۸ : گرادیان دمایی ایجاد شده در طول محور x ساختار

نتیجه گیری

در این پژوهش با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی و نرم افزار لمپس به بررسی خواص حرارتی صفحه دوبعدی ایریدا–گرافین پرداختیم. این ساختار دمای ذوب نسبتا بالایی دارد و در حدود ٤٥٠٠ K فرایند ذوب آن شروع می‌شود. ظرفیت گرمایی این ساختار نیز در محدوده ۳۰۰ تا ۲۵۰۰ کلوین مقدار ۰/۵۹ الکترون ولت برکلوین بدست آمد. پس از آن به بررسی رسانندگی گرمایی آن پرداختیم که نتایج بدست آمده عدد $\kappa = 1201.46\ \frac{w}{mK}$ را نشان داد و دریافتیم که ایریدا–گرافین رسانای خوبی برای انتقال گرما نیز می‌باشد.

مرجع‌ها

[۱] L. Yang, H.Y. He, B.C. Pan, Theoretical prediction of new carbon allotropes, J. Chem. Phys. 138 (2) (2013), 024502.

[۲] Chee-Tat Toh, Hongji Zhang, Junhao Lin, Alexander S Mayorov, Yun-Peng Wang, Carlo M Orofeo, Darim Badur Ferry, Henrik Andersen, Nurbek Kakenov, Zenglong Guo, et al., Synthesis and properties of free-standing monolayer amorphous carbon, Nature 577 (7789) (2020) 199–203..

[۳] Qitang Fan, Linghao Yan, Matthias W Tripp, Ondˇrej Krejˇcí, Stavrina Dimosthenous, Stefan R Kachel, Mengyi Chen, Adam S Foster, Ulrich Koert, Peter Liljeroth, et al., Biphenylene network: A nonbenzenoid carbon allotrope, Science 372 (6544) (2021) 852–856.

[٤] Lingxiang Hou, Xueping Cui, Bo Guan, Shaozhi Wang, Ruian Li, Yunqi Liu, Daoben Zhu, Jian Zheng, Synthesis of a monolayer fullerene network, Nature 606 (7914) (2022) 507–510.

[٥] Andre Konstantin Geim, Graphene: status and prospects, Science 324 (5934) (2009) 1530–1534.

[٦] R.M. Westervelt, Graphene nanoelectronics, Science 320 (5874) (2008) 324–325.

[۷] Xu. Li-Chun, Ru-Zhi Wang, Mao-Sheng Miao, Xiao-Lin Wei, Yuan-Ping Chen, Hui Yan, Woon-Ming Lau, Li-Min Liu, Yan-Ming Ma, Two dimensional dirac carbon allotropes from graphene, Nanoscale 6 (2) (2014) 1113–1118.

[۸] Yu. Yang-Xin, Graphenylene: a promising anode material for lithium-ion batteries with high mobility and storage, J. Mater. Chem. A 1 (43) (2013) 13559–13566.

[۹] Shuaiwei Wang, Baocheng Yang, Houyang Chen, Eli Ruckenstein, Popgraphene: a new 2d planar carbon allotrope composed of 5–8–5 carbon rings for high-performance lithium-ion battery anodes from bottom-up programming, J. Mater. Chem. A 6 (16) (2018) 6815–6821.

[۱۰] Zhenhai Wang, Xiang-Feng Zhou, Xiaoming Zhang, Qiang Zhu, Huafeng Dong, Mingwen Zhao, Artem R Oganov, Phagraphene: a low-energy graphene allotrope composed of 5–6–7 carbon rings with distorted dirac cones, Nano Lett. 15 (9) (2015) 6182–6186.

[۱۱] Xiaoyin Li, Qian Wang, Puru Jena, ψ-graphene: a new metallic allotrope of planar carbon with potential applications as anode materials for lithium-ion batteries, J. Phys. Chem. Lett. 8 (14) (2017) 3234–3241.

[۱۲] Sang, Mingyu, Jongwoon Shin, Kiho Kim, and Ki Jun Yu. "Electronic and thermal properties of graphene and recent advances in graphene based electronics applications." *Nanomaterials* 9, no. 3 (2019): 374.