

# بررسی اثر سایز صفحه گرافن و دما و طول گردن بر روی خواص مکانیکی نانو غنچه گرافن با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی

مرجان خراسانی<sup>۱</sup>، عبدالحسین فریدون<sup>۲\*</sup>

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک طراحی کاربردی، گروه مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد سمنان، سمنان، ایران

۲- استاد، گروه مهندسی مکانیک، واحد سمنان، دانشگاه آزاد اسلامی، سمنان، ایران

\* سمنان، ۲۵۱۴۶۶۵۳۶۹، marjan\_kh64@yahoo.com

## چکیده

کربن دارای آرایش های متعددی است. نانو غنچه گرافن از تازه ترین آلوتروپ های کربن است و هنوز به صورت آزمایشگاهی در دسترس نیست. نانو غنچه گرافن از اتصال فولرن و صفحه گرافن به هم تشکیل می شود. شبیه سازی دینامیک مولکولی جهت محاسبه خواص مکانیکی نانو غنچه گرافن استفاده شده است. اثر دما و سایز صفحه گرافن و طول گردن در این مجموعه تخمین زده شده است. نتایج نشان میدهد که تا دمای ۸۰۰ کلوین مدول یانگ تغییرات کمی را با افزایش دما تجربه می کند به عبارت دیگر با افزایش دما مدول یانگ تغییر چندانی نمی کند و تنها کمی کاهش می یابد. مشاهده شد که در یک دمای ثابت با افزایش سایز صفحه گرافن مدول یانگ نیز افزایش می یابد. یافته های شبیه سازی ما نه تنها درک کلی از نانو غنچه گرافن را افزایش می دهد بلکه می تواند جهت استفاده مهندسی و پژوهشگرانی که در زمینه توسعه خواص مکانیکی کار می کنند نیز مورد استفاده قرار گیرد.

## کلیدواژگان

شبیه سازی دینامیک مولکولی، نانو غنچه گرافن، مدول یانگ، خواص مکانیکی

## Molecular dynamic simulation for investigation of temperature, neck length and sheet size influence on mechanical properties of graphene nanobud

Marjan khorasani<sup>1</sup>, Abdolhosein Fereidon<sup>2\*</sup>

1- Department of Mechanical Branch, Islamic Azad University, Semnan, Iran Engineering, Semnan

2- Department of Mechanical Engineering, Semnan University, Semnan, Iran.

\* P.O.B. 3514665369 Semnan, Iran, [marjan\\_kh64@yahoo.com](mailto:marjan_kh64@yahoo.com)

## Abstract

Carbon has several allotropes. One of the newest carbon allotrope is graphene nanobud. It isn't available in laboratory. Graphene nanobud is formed by connecting fullerene and graphene sheet. Molecular dynamic simulation is used for calculating mechanical properties of graphene nanobuds. Influence of temperature, neck length and size of graphene sheet are estimated in this study. The results show that Young's modulus has a little change with temperature increase. In another word, with increasing temperature the Young's modulus doesn't change very much and just a little decrease. Also it seen that in constant temperature with increasing the size of graphene sheet, it arises. Our simulation findings afford not only a molecular level understanding of graphene nanobud but also may be instructive to mechanical engineers and scientists who attempt to develop effective mechanical properties.

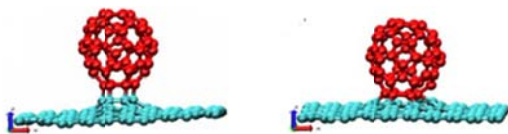
## Keywords

Molecular dynamics simulation, graphene nanobud, Young's modulus, Mechanical properties

فولرن روی گرافن مانند پرزهایی باعث افزایش چشمگیری در سطح تماس موثر گرافن می شود. انواع مختلفی از نانو غنچه ها تاکنون سنتز و بررسی شده است. از آن جمله می توان به نانو غنچه های متشکل از فولرن + نانولوله و یا فولرن + گرافن اشاره کرد که هر کدام نیز انواع گوناگونی دارند. ناسیبولین و همکارانش [۱] بطور تجربی نانو غنچه هایی را سنتز کرده اند که در آن نانو لوله های کربنی تک جداره با پیوند کووالانسی توسط فولرن ها پوشیده شده اند. روش بکار رفته توسط آنها شامل یک فرایند یک مرحله ای پیوسته بوده است که در آن بخار فروسن در اتمسفری از کربن مونواکسید استفاده شده است. فورست و همکارانش [۲، ۳] طیف عبوری را برای ساختار های متنوعی از نانو غنچه ها محاسبه کرده اند از جمله مطالعات انجام شده می-

## ۱- مقدمه

استحکام پیوند شیمیایی C-C در گرافن و دیگر آلوتروپ های کربن نقش مهمی را در خصوصیات مکانیکی و فیزیکی آنها بازی می کند. پیوند C-C سه لایه هماهنگ قوی ترین پیوند شیمیایی است و ممکن است دلیل نشان دادن خصوصیات مکانیکی خوب گرافن باشد. گرافن ورقه ای دو بعدی (D-2) از اتم های کربن در یک پیکربندی شش ضلعی می باشد که اتم ها با همبند SP<sup>2</sup> به هم متصل شده اند. صفحات گرافن با کنار هم قرار گرفتن اتم های کربن تشکیل می شوند. در یک صفحه گرافن، هر اتم کربن با ۳ اتم کربن دیگر پیوند داده است. این سه پیوند در یک صفحه قرار دارند و زوایای بین آنها با یکدیگر مساوی و برابر با ۱۲۰ درجه است. طول پیوند کربن - کربن در گرافن در حدود ۰/۱۴۲ نانومتر است. نانو غنچه گرافن از اتصال فولرن و صفحه گرافن به هم تشکیل می شود و دارای خواص منحصر بفردی است.



شکل ۱ دو نمونه از نانو غنچه گرافن

## ۲- شبیه سازی

شبیه سازی دینامیک مولکولی روش مناسبی برای مدل سازی میکروسکوپی در مقیاس اتمی و مولکولی فراهم می کند. از حدود ۶۰ سال پیش تا کنون شبیه سازیهای رایانه ای از نظر تعداد و اهمیت، رشد قابل توجهی داشته اند. این روشها با گسترش سریع امکانات رایانه ای و قدرت محاسباتی توسعه بسیاری یافته اند و در حقیقت کاربرد رایانه ها در حل مسائل علمی یک نیروی رانشی قوی برای دستیابی به این پیشرفتها است. از آنجا که شبیه سازیهای رایانه ای شامل حل دقیق مسائل مکانیک آماری هستند، خواص سیستمهای مورد مطالعه با ارزیابی نیروها و انرژیهای بین مولکولی، که معمولاً توسط مدل های نظری تعریف میشوند، تعیین میگردند. روش دینامیک مولکولی یکی از رو به توسعه ترین روش ها در مطالعه رفتار مکانیکی سازه ها و مواد در مقیاس نانو متر است. این روش در ابتدا توسط فیزیک تئوری در اواخر دهه ۱۹۵۰ برسی شد. دینامیک مولکولی یک روش شبیه سازی کامپیوتری است که تغییر هم زمان مجموعه ای از اتم ها توسط جمع بندی معادله حرکت آنها دنبال می شود. جمع بندی توسط حل معادله حرکت نیوتن به صورت عددی انجام می شود و واکنش های بین اتم ها توسط میدان های پتانسیل مکانیک مولکولی تعیین می شود. این مجموعه از شبیه سازی دینامیک مولکولی برای محاسبه خواص ترمودینامیکی سیستم مورد نظر در دماهای مختلف استفاده می شود. برهمکنش میان سیستمهای مورد نظر و اتمهای موجود با استفاده از میدان نیرو مناسب ابربو در نظر گرفته می شود. این میدان نیرو یک روش بس-ذره ای بوده و حتی انتقال بار بین گونه های برهمکنش کننده نیز مورد در نظر گرفته می شود.

تمامی شبیه سازی ها با استفاده از نرم افزارهای لمس انجام و خواص ترمودینامیکی و مکانیکی از آنالیز داده های خط سیر فضای فازی محاسبه می شوند. برای آنالیز داده ها و مدل سازی و مشاهده ساختارها از نرم افزار وی.ام.دی استفاده می شود. وی.ام.دی برنامه تجسم مولکولی برای نمایش، متحرک سازی و تجزیه و تحلیل سیستم های بزرگ بیومولکولی با استفاده از گرافیک سه بعدی بوده که بیش از شصت فرمت ملکولی از جمله خروجی لمپس را پشتیبانی می کند [۱۵].

شرایط مرزی تناوبی اعمال میشود و برای رسیدن به تعادل از گروه هم فشار-هم دما استفاده میگردد. برای این حالت، فشار در مقدار ۱ بار ثابت نگه داشته شده و دما در محدوده ۱ تا ۸۰۰ کلونین تغییر می کند. مقدار نرخ کرنش ۰/۰۱ یک بر روی پیکونانیه برای کل فرایند این ثابت بوده همچنین گام زمانی انجام فرایند ۱ فمتونانیه می باشد. مدل های مختلف نانو غنچه گرافن با سه سایز صفحه گرافن در شکل ۲ نشان داده شده است. و همچنین در شکل ۳ چهار مدل نانو غنچه گرافن با طول گردن متفاوت آورده شده است. جدول ۱ تعداد اتم ها را در این سیستم ها نشان می دهد.

توان به تحقیق گوپتا و همکارانش اشاره کرد. آنها موفق به سنتز گرافیت متصل به فولرن (C60) شده اند [۳]. آنها مشاهده کردند که فولرن یک شبکه شش ضلعی دو بعدی درمیان لایه های گرافن تشکیل می دهد. بررسی های تی.ای.ام.انسان می دهد که هیچ پیوند کووالانسی بین فولرن و گرافن و یا فولرن ها تشکیل نشده است. برخی تحقیقات تئوری [۴-۷] و تجربی [8-10]، تلاش کرده اند تا ساختار هیبریدی این سیستم را بررسی کنند. یو و همکارانش ساختار های هیبریدی متنوعی را روی نانو صفحات گرافن آتپیه کرده اند، سیستم هایی چون نانو صفحات گرافن + نانولوله های کربنی و همچنین نانو صفحات گرافن + فولرن. نتایج مطالعات آنها نشان داده است که ظرفیت ویژه نانو صفحه های کربنی، نانو صفحه های کربنی + کربن نانولوله و نانو صفحه های کربنی + فولرن در مقایسه با گرافیت افزایش چشمگیری را نشان می دهد. این نتیجه می تواند مربوط به افزایش فاصله ی بین صفحات باشد. نانو غنچه های گرافنی<sup>۳</sup> که اولین بار توسط محاسبات تئوری معرفی شد، یک هیبرید نانو کربن دو بعدی و صفر بعدی (بدون بعد) است. [۷]. دو نوع از نانو غنچه های گرافنی ارائه شده است. در نوع اول نانو غنچه های گرافنی، باکی بال<sup>۴</sup> به صورت کووالانسی به تک لایه گرافن متصل می شود در حالی که در نوع دوم باکی بال شکسته شده با یک صفحه گرافن میوب ترکیب می شود. در هر دو مورد مولکولهای C60، یک شبکه پریودیک را روی صفحه گرافن شکل می دهند. محاسبات تئوری دی.اف.تی<sup>۵</sup> نشان داده است که شکل های گوناگون نانو غنچه های گرافنی از نظر دمایی در یک دمای بالا (تقریباً ۸۰۰ کلونین) پایدار هستند. نوع اول می تواند نیمه هادی یا نیمه فلزی باشد که بستگی به الگوی اتصال شیمیایی بین C60 و صفحه گرافن دارد. نوع دوم عموماً نیمه فلزی است. ساختار الکترونیکی گرافن تک لایه در نوع دوم نانو غنچه های گرافنی هنوز حفظ شده است، به غیر از تک لایه گرافن پاره شده. بالاخره، نانو غنچه های گرافنی های چند لایه ای یک ساختار شبکه متخلخل هستند که ممکن است برای ذخیره گاز استفاده شوند. [۷]. همچنین محاسبات تئوری پیش بینی کرده اند که نانو غنچه های گرافن ممکن است خصوصیات انتشار میدان بهتری را نسبت به گرافن و فولرن ارائه دهند که منجر به پیشنهاد امکان تولید وسایل انتشار میدان مسطح با نانو غنچه گرافن پریودیک می شود. اخیراً پیش بینی شده است که بعضی از نانو غنچه های گرافن ممکن است رفتار مغناطیسی از خود نشان دهند [۱۱]. نانو غنچه های گرافن مغناطیسی نقش مهمی را در اسپینترونیک<sup>۶</sup> بازی خواهد کرد. به علاوه نانو غنچه گرافن ممکن است کاربردهای بالقوه ای در ذخیره گاز داشته باشد مثل ذخیره هیدروژن، متان و دی اکسید کربن. [۱۲، ۱۳] طراحی نانو غنچه های گرافنی راه حل جالبی را برای دوری کردن از انباشته شدن دوباره گرافن در آزمایش ها ارائه می دهد. نانو غنچه های گرافن چند لایه یک ساختار شبکه ای متخلخل با سطح تماس بالا هستند و ممکن است برای واکنش ورود لیتیم به دست آید [۱۴].

1 ITEM  
2 Graphene nanosheet  
3 Graphene nanobud  
4 bulky ball  
5 DFT  
6 spintronics

## ۳- نتایج و بحث

مدول یانگ، تنش نهایی و کرنش شکست مدل های ذکر شده با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی انجام شده و با یکدیگر مقایسه شده اند. با استفاده از داده های به دست آمده از خروجی نرم افزار نمودار تنش کرنش رسم شده و از روی آنها مدول یانگ و تنش کرنش شکست محاسبه شده است. برای به دست آوردن نتایج دقیق تر و بهتر رفتار الاستیک غیر خطی برای نانو غنچه های گرافن و صفحه گرافن مطابق تحقیقات پیشنهاد می-گردد [۱۶، ۱۷].

برای محاسبه مدول یانگ فرمول زیر در نظر گرفته می شود که D مدول الاستیک مرتبه سوم، E مدول یانگ و C تنش پسماند در نانو غنچه گرافن است (معادله ۱). تنش و کرنش شکست نیز از نمودار تنش کرنش به دست می آید که در ادامه توضیح داده خواهد شد.

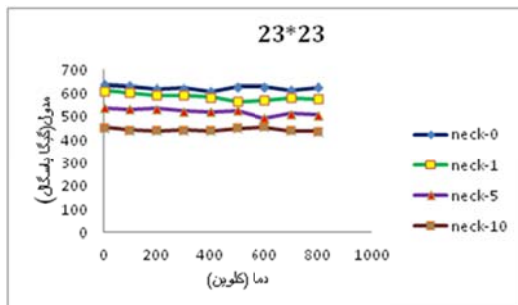
$$\sigma = \frac{\partial U}{\partial \epsilon} = D\epsilon^2 + E\epsilon + C \quad (1)$$

به منظور به دست آوردن رابطه تنش - کرنش ( $\sigma - \epsilon$ ) گرافن، یک چند جمله ای درجه سه روی داده های کرنش ( $\epsilon$ ) و انرژی کرنشی بر واحد حجم (U) فیت شده است.

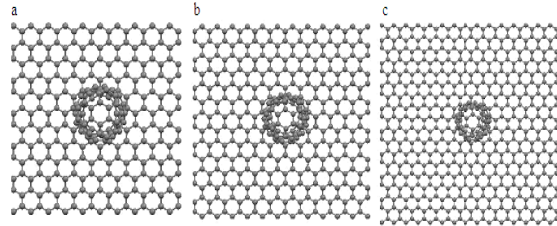
$$U = \frac{D}{3}\epsilon^3 + \frac{E}{2}\epsilon^2 + C\epsilon + K \quad (2)$$

D مدول الاستیک مرتبه سوم، E مدول یانگ و C هر تنش پسماند در صفحه گرافن است و K انعطاف پذیری کامل به مدل را می دهد. باید توجه داشت که E در این تحقیق کاملاً متفاوت با مدول یانگ متعارفی است که به صورت شیب بخش خطی منحنی  $\sigma - \epsilon$  تعریف می شود. زیرا منحنی  $\sigma - \epsilon$  گرافن غیر خطی است. بنابراین E به صورت شیب اولیه منحنی  $\sigma - \epsilon$  تعریف می شود. تنش با مشتق اول گرفتن از انرژی کرنش در معادله بالا به دست می آید (مشتق نسبت به  $\epsilon$ ).

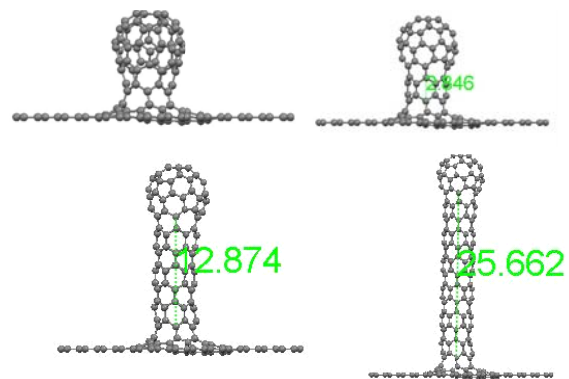
نتایج نشان می دهد که هر چه دما بالاتر می رود مدول کمتر می شود ولی این کاهش قابل توجه نیست. و میتوان نتیجه گرفت که افزایش دما تاثیر زیادی روی مدول یانگ ندارد. همچنین با بیشتر شدن تعداد اتم ها از تک صفر تا تک ده آ مدول کمتر می شود. در شکل ۴ نمودار تغییرات مدول یانگ برای سه سایز صفحه گرافن و چهار مدل نانو غنچه در ۸ دمای بین ۱ تا ۸۰۰ کلوین آورده شده است.



1 neck-0  
2 neck-10



شکل ۲ سه سایز مختلف صفحه گرافن به کار رفته در نانو غنچه (الف) ۲۳\*۲۳\*۲۳ انگستروم (ب) ۲۸\*۲۸\*۲۸ انگستروم (ج) ۳۶\*۳۶\*۳۶ انگستروم



شکل ۳ چهار مدل نانو غنچه گرافن با طول گردن متفاوت

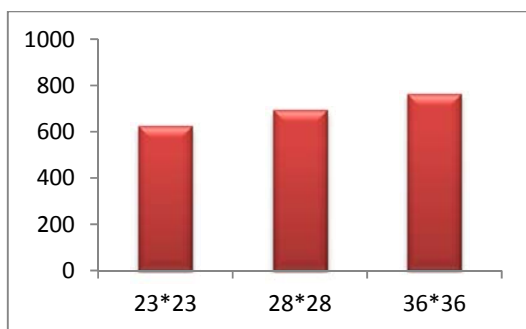
جدول ۱ تعداد اتم ها در سیستم های مختلف نانو غنچه گرافن

سیستم ما	تعداد اتم ها
Graph-۲۳Ax۲۳A-NanoBud-Neck_۰	۳۰۲
Graph-۲۳Ax۲۳A-NanoBud-Neck_۱	۳۱۴
Graph-۲۳Ax۲۳A-NanoBud-Neck_۵	۳۶۲
Graph-۲۳Ax۲۳A-NanoBud-Neck_۱۰	۴۳۴
Graph-۲۸Ax۲۸A-NanoBud-Neck_۰	۳۶۸
Graph-۲۸Ax۲۸A-NanoBud-Neck_۱	۴۱۰
Graph-۲۸Ax۲۸A-NanoBud-Neck_۵	۴۵۸
Graph-۲۸Ax۲۸A-NanoBud-Neck_۱۰	۵۳۰
Graph-۳۶Ax۳۶A-NanoBud-Neck_۰	۶۰۲
Graph-۳۶Ax۳۶A-NanoBud-Neck_۱	۶۱۴
Graph-۳۶Ax۳۶A-NanoBud-Neck_۵	۶۶۲
Graph-۳۶Ax۳۶A-NanoBud-Neck_۱۰	۷۳۴

جدول ۴ مدول یانگ برای صفحه نانو غنچه ۲۶×۳۶ آنگستروم در دمای ۱ تا ۸۰۰

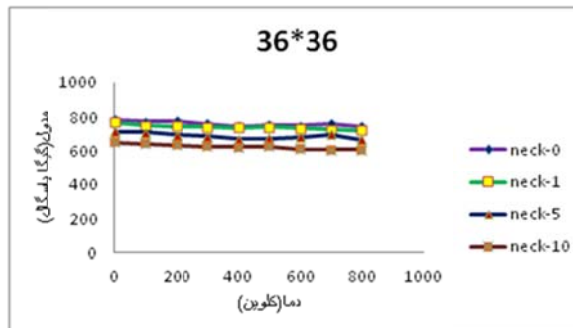
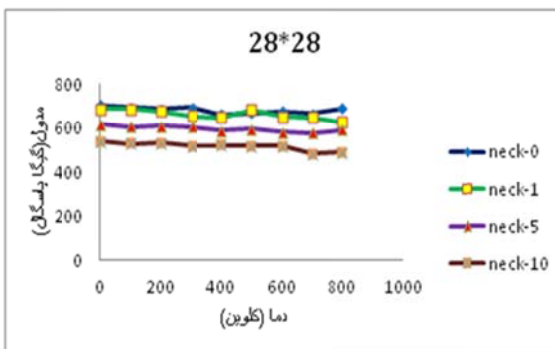
	کلوین									
	1	100	200	300	400	500	600	700	800	1000
Neck-0	۷۸۶,۸۰۱	۷۷۲,۲۱۵	۷۷۸,۹۱۵	۷۸۳,۶۴۹	۷۸۷,۷۵۹	۷۹۲,۱۹۱	۷۹۶,۳۹۸	۷۹۹,۳۷۱	۸۰۲,۳۸۱	۸۰۵,۴۰۱
Neck-1	۷۸۶,۶۴۵	۷۷۲,۲۴۱	۷۸۲,۷۵۹	۷۸۳,۷۱۵	۷۸۷,۵۱۱	۷۹۲,۱۱۲	۷۹۶,۳۶۸	۷۹۹,۱۱۵	۸۰۲,۳۶۸	۸۰۵,۳۶۸
Neck-5	۷۸۶,۶۵۲	۷۷۱,۶۰۹	۸۰۳,۸۱۵	۸۱۵,۸۱۲	۸۱۷,۶۲۸	۸۲۳,۵۹۹	۸۲۸,۳۷۱	۸۳۰,۱۵۲	۸۳۲,۹۱۲	۸۳۴,۹۱۲
Neck-10	۸۲۱,۳۶۸	۸۲۲,۱۵۲	۸۳۱,۳۰۱	۸۳۷,۱۱۵	۸۴۲,۵۱۱	۸۴۸,۳۶۸	۸۵۱,۳۷۱	۸۵۲,۳۶۸	۸۵۳,۳۶۸	۸۵۴,۳۶۸

برای مشاهده تاثیر سایز صفحه گرافن روی مدول یانگ نمودار زیر آورده شده است. همانطور که دیده میشود در یک دمای ثابت با افزایش سایز صفحه گرافن مدول یانگ نیز افزایش می یابد.



شکل ۵ نمودار مدول الاستیک یک نمونه نانو غنچه در دمای مشابه برای سه سایز صفحه گرافن در دمای ۳۰۰ کلوین

برای درک بهتر از روند شکست در نانو غنچه یک نمونه از عکس هایی که با استفاده از نرم افزار وی.ام.دی<sup>۱</sup> و مرکوری<sup>۲</sup> از مراحل شکست نانو غنچه گرافن گرفته شده است، آورده شده است.



شکل ۴ مدول یانگ برای سه سایز صفحه گرافن و ۴ مدل نانو غنچه گرافن در ۸ دما

برای درک بهتر روند تغییر نتایج به صورت عددی در جدول ۲ الی ۴ آورده شده است.

جدول ۲ مدول یانگ برای صفحه نانو غنچه ۲۳×۲۳ آنگستروم در دمای ۱ تا ۸۰۰

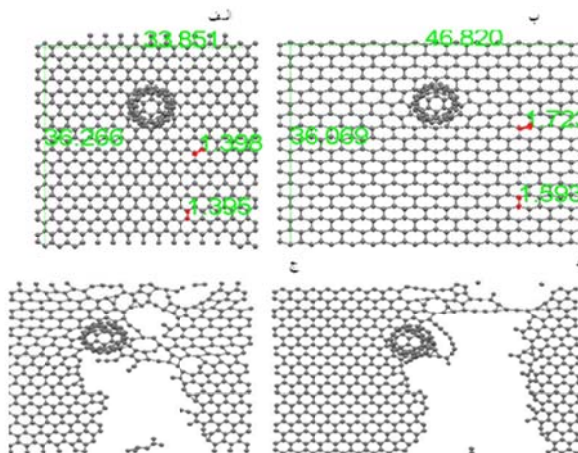
	کلوین									
	1	100	200	300	400	500	600	700	800	1000
Neck-0	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲
Neck-1	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲
Neck-5	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲
Neck-10	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲	۹۹۹,۹۱۲

جدول ۳ مدول یانگ برای صفحه نانو غنچه ۲۸×۲۸ آنگستروم در دمای ۱ تا ۸۰۰

	کلوین									
	1	100	200	300	400	500	600	700	800	1000
Neck-0	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱
Neck-1	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱
Neck-5	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱
Neck-10	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱	۷۸۶,۸۰۱

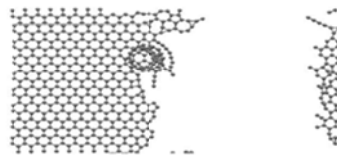
<sup>۱</sup> VMD<sup>۲</sup> Mercury

مشاهده می شود که با افزایش سایز صفحه گرافن، اثر سایز گردن روی مدول یانگ کاهش پیدا می کند. به طور کلی در همه سیستم ها مدول یانگ با افزایش دما کاهش می یابد ولی روند به خصوصی مشاهده نمی شود. برای درک بهتر از روند شکست با استفاده از نرم افزار وی.ام.دی. انیمیشن شکست را مشاهده کردیم که عکس های گرفته شده از این روند قبلا آورده شده است. همانطور که دیده می شود در جهت بارگذاری شاهد افزایش  $31/38$  درصد طول صفحه گرافن  $23/75$  درصد طول پیوند بین اتمی هستیم در حالی که در جهت  $Y$  طول به مقدار  $0/5$  درصد کاهش پیدا کرده است. قابل ذکر است که با توجه به عکس ها شکست تقریباً از محل اتصال گردن به صفحه گرافن شروع می شود و نشان دهنده این است که در این منطقه به دلیل وجود اتصال تمرکز تنش بالاتر است.



#### ۵- مراجع

- [1] Fürst, J.A., et al., Electronic transport properties of fullerene functionalized carbon nanotubes: Ab initio and tight-binding calculations. *Physical Review B*, 2009. 80(3): p. 035427.
- [2] Wang, J., et al., Dexamethasone reduces nausea and vomiting after laparoscopic cholecystectomy. *British journal of anaesthesia*, 1999. 83(5): p. 772-775.
- [3] Gupta, V., et al., Synthesis of C 60 intercalated graphite. *Solid state communications*, 2004. 131(3): p. 153-155.
- [4] Saito, S. and A. Oshiyama, Design of C 60-graphite cointercalation compounds. *Physical Review B*, 1994. 49(24): p. 17413.
- [5] Patchkovskii, S., et al., Graphene nanostructures as tunable storage media for molecular hydrogen. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2005. 102(30): p. 10439-10444.
- [6] Yoo, E., et al., Large reversible Li storage of graphene nanosheet families for use in rechargeable lithium ion batteries. *Nano letters*, 2008. 8(8): p. 2277-2282.
- [7] Wu, X. and X.C. Zeng, Periodic graphene nanobuds. *Nano letters*, 2008. 9(1): p. 250-256.
- [8] Delgado, J.L., et al., The first synthesis of a conjugated hybrid of C 60-fullerene and a single-wall carbon nanotube. *Carbon*, 2007. 45(11): p. 2250-2252.
- [9] Zhang, X., et al., Synthesis and characterization of a graphene-C 60 hybrid material. *Carbon*, 2009. 47(1): p. 334-337.
- [10] Büttner, M. and P. Reinke, Fullerene Nanostructures on Defect-Rich Graphite Surfaces. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2009. 113(19): p. 8107-8111.
- [11] Wang, M. and C.M. Li, Magnetic properties of all-carbon graphene-fullerene nanobuds. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2011. 13(13): p. 5945-5951.
- [12] Wang, X., et al., Interaction between nanobuds and hydrogen molecules: A first-principles study. *Physics Letters A*, 2009. 374(1): p. 87-90.
- [13] Terzyk, A., et al., Fullerene-intercalated Graphene Nano-containers—Mechanism of Argon Adsorption and High-pressure CH<sub>4</sub> and CO<sub>2</sub> Storage Capacities. *Adsorption Science & Technology*, 2009. 27(3): p. 281-296.
- [14] Yu, D., et al., Fullerene-grafted graphene for efficient bulk heterojunction polymer photovoltaic devices. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2011. 2(10): p. 1113-1118.
- [15] Humphrey, W., A. Dalke, and K. Schulten, VMD: visual molecular dynamics. *Journal of molecular graphics*, 1996. 14(1): p. 33-38.
- [16] Lee, C., et al., Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *science*, 2008. 321(5887): p. 385-388.
- [17] Khare, R., et al., Coupled quantum mechanical/molecular mechanical modeling of the fracture of defective carbon nanotubes and graphene sheets. *Physical Review B*, 2007. 75(7): p. 075412.



شکل ۶ مراحل شکست یک نمونه از نانو غنچه گرافن

شکل الف قبل از شروع بارگذاری را نشان می دهد. این حالت اولیه است که طول و عرض و همچنین فاصله بین اتم ها تغییر نکرده است. شکل ب یک مرحله قبل از شروع شکست است به طوری که در مرحله بعد شاهد شروع شکست و گسستن پیوند بین اتمها خواهیم بود. شکل های ج و د روند شکست را نشان می دهند و شکل ه حالت نهایی شکست است. همانطور که از تصاویر قابل مشاهده است شکست تقریباً از محل اتصال گردن به صفحه گرافن شروع می شود.

#### ۴- خلاصه و نتیجه گیری

مدول یانگ با افزایش دما تغییر چندانی نمی کند و در رنج  $440$  تا  $760$  گیگا پاسگال قرار دارد. همچنین با مقایسه مدول یانگ نانو غنچه گرافن در دمای اتاق ( $300$  کلوین) که مقدار  $623$  گیگا پاسگال است و مدول یانگ صفحه گرافن در همین شرایط که حدود  $1$  تراپاسگال است در می یابیم که نانو غنچه به طور قابل توجهی استحکام مکانیکی گرافن را کاهش می دهد و این کاهش را می توان با وجود نقص های شبکه گرافن به دلیل ایجاد نانو غنچه و اتصال آن به صفحه گرافن توجیه کرد. همچنین مشاهده می شود که با افزایش طول گردن نیز مدول یانگ کاهش پیدا می کند و این بدین معنی است که به طور مثال neck-0 مستحکم تر از neck-10 است و افزایش طول گردن باعث ناپایداری سیستم نانو غنچه گرافن می شود. همچنین نتایج نشان می دهد که مدول یانگ به سایز صفحه گرافن نیز بستگی دارد به طوری که با افزایش در سایز صفحه گرافن نیز مدول یانگ نیز افزایش می یابد. همچنین