http://mjmec.ir

مجله علمی پژوهشی

مهندسی مکانیک مدرس

اردیبهشت ۱۳۹۲، دوره ۱۳ شماره ۲ ص‌ص ۹۳-۹۹

مقاله پژوهشی کامل
تاریخ دریافت ۹۱/۳/۱۵
تاریخ پذیرش ۹۱/۸/۱۲
ارائه در سایت ۹۱/۱۱/۳۰

بررسی خواص مکانیکی گرافین عاملدار شده با هیدروژن با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

عارفه‌السادات هادی‌زاده خیرخواه[۱]، اسماعیل ساعی‌ور ایرانی‌زاد[۲*]

۱- کارشناس ارشد فیزیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران
۲- دانشیار فیزیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران
* تهران، صندوق پستی ۱۴۱۱۵۱۷۵، saievare@modares.ac.ir

چکیده- در این مقاله، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، خواص مکانیکی گرافین عاملدار شده توسط هیدروژن بررسی شده است. استحکام کششی و مدول یانگ به‌دست آمده برای گرافین در تطابق خوبی با نتایج تجربی هستند. هیدروژن‌دار کردن گرافین تاثیر قابل ملاحظه‌ای بر روی خواص مکانیکی گرافین دارد و می‌تواند خواص مکانیکی گرافین را تعدیل کند. این تاثیر در دو حالت پوشش هیدروژن به صورت نامنظم (کاتوره‌ای) و منظم بررسی شده است. مدول‌های یانگ و برشی، استحکام کششی و برشی و کرنش‌های شکست متناظر از جمله پارامترهایی هستند که تاثیر پوشش هیدروژن روی آنها بررسی شده است.

کلیدواژگان: گرافین، خواص مکانیکی، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

Mechanical properties of hydrogen functionalized graphene: A molecular dynamics study

A. Hadizade Kheirkhah [1], E. Saeivar Iranizad[2*]

1- MSc., Physics, Tarbiat Modares Univ., Tehran, Iran
2- Assoc. Prof., Physics, Tarbiat Modares Univ., Tehran, Iran
*P. O. B. 14115175 Tehran, saievare@modares.ac.ir

Abstract- Molecular dynamics simulations have been performed to study the mechanical properties of hydrogen functionalized graphene. We find out that Young's modulus and tensile strength of pristine graphene are in good agreement with experimental results. It is shown that hydrogen functionalization can considerably modify the mechanical properties of graphene. It is also found that the patterned or random hydrogen coverage have different effects on the mechanical properties of graphene. We study the mechanical properties of functionalized graphene under tension and shear deformations. Young's and shear modulus, tensile and shear strengths and tensile and shear fracture strains are parameters that we have calculated in order to investigate the mechanical properties of hydrogen functionalized graphene.

Keywords: Graphene, Mechanical Properties, Molecular Dynamics Simulation

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]

[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.2.14.8]

۱- مقدمه

گرافین یک ماده جدید است که ساختار آن شامل یک تک‌لایه از اتم‌های کربن است که در یک شبکه کریستالی لانه زنبوری قرار دارند[۱]. اگر چه گرافین در چند سال اخیر شناخته شده است[۲]، اما به دلیل خواص فوق‌العاده فیزیکی، شیمیایی و مکانیکی آن بسیار مورد توجه قرار گرفته است. از آنجائی که گرافین خواص الکترونیکی جدیدی، شامل تحرک‌پذیری بالای الکترون را دارد، به عنوان جایگزین برای نسل بعدی قطعات الکترونیکی مورد استفاده قرار می‌گیرد[۳]. همچنین گرافین به دلیل برهم‌کنش کوچک اسپین-مدار ماده‌ای ایده‌ال برای کاربرد در اسپینترونیک است[۴]. گرافین می‌تواند برای ساخت سنسورهای شیمیایی با حساسیت فوق‌العاده مورد استفاده قرار گیرد[۵]. خواص مکانیکی شگفت‌انگیز گرافین موجب می‌شود که در کاربردهای نانو الکترومکانیکی، برای مثال حسگر فشار و ساخت نانو تشدیدکننده‌ها، به‌کار رود[۶]. خواص گرافین می‌تواند به‌وسیله عاملدار کردن شیمیایی[۷]، که عامل موثری برای تنظیم خواص فیزیکی، شیمیایی و مکانیکی است، به‌کار رود. در سال‌های اخیر نشان داده شده است که عاملدار کردن بر روی سطح گرافین، می‌تواند شکاف ذاتی در چگالی الکترونی حالت‌ها ایجاد کند[۸] و ممکن است منجر به ظهور ممان مغناطیسی در سیستم شود[۹].

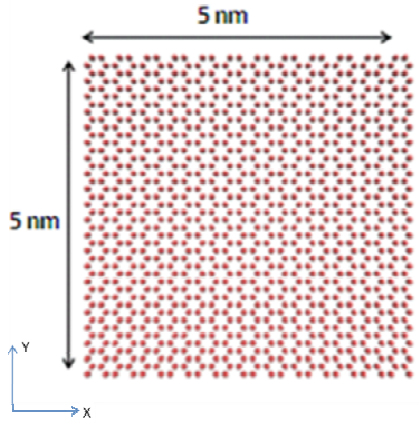
بیشتر مطالعات انجام شده در مورد گرافین عاملدار شده، تاثیر گروه عاملی را بر روی خواص الکترونی، شیمیایی و گرمایی گرافین بررسی کرده است. این در حالی است که کارهای کمی در زمینه تاثیر گروه عاملی بر روی خواص مکانیکی گرافین انجام گرفته است. بررسی خواص مکانیکی گرافین عاملدار شده برای کاربردهای گرافین به عنوان حسگر یا نانو تشدیدکننده‌ها و مواد کامپوزیت بسیار مهم است[۱۰]. برای مثال، فرکانس تشدید یک صفحه گرافین عاملدارشده[۶]، به جرم و مدول الاستیکی صفحات گرافین بستگی دارد. بنابراین دانستن این که چطور مدول الاستیک صفحات گرافین به پوشش اتم‌های جذب‌شده بستگی دارد، ضروری است. همچنین در کاربردهایی که صفحات گرافین عاملدار شده به عنوان غشاهای نفوذناپذیر یا سد انتخابی به‌کار می‌روند، فهم دقیق از تاثیر عاملدار شدن بر روی استحکام و رفتار شکست صفحات گرافین ضروری است.

در این مقاله، به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، تاثیر عاملدار کردن بر روی خواص مکانیکی گرافین بررسی می‌شود. در این مطالعه روی گروه عاملی هیدروژن متمرکز می‌شویم که قبلا به طور تجربی و نظری مورد مطالعه قرار گرفته است [۱۲،۱۱]. به روش دینامیک مولکولی نشان داده می‌شود که پوشش هیدروژن به صورت نامنظم (کاتوره‌ای) و منظم (الگومند) می‌تواند خواص مکانیکی گرافین را به صورت قابل ملاحظه‌ای تغییر دهد.

۲- روش شبیه‌سازی

صفحات گرافین شبیه‌سازی شده طوری درنظر گرفته می‌شوند که لبه‌های زیگزاگ و آرمچیر آنها در راستای X و Y مطابق شکل ۱ قرار داشته باشند.

ابعاد شبیه‌سازی در حدود ۵۰×۵۰ آنگستروم است که شامل ۱۰۰۸ اتم کربن است. بارگذاری‌های کششی محوری و برشی با نرخ کرنش $۰/۰۰۰۰۵\ ps^{-1}$ در راستاهای مختلف گرافین (آرمچیر و زیگزاگ) اعمال می‌شوند. شرایط مرزی پریودیک در دو جهت X و Y اعمال می‌شود. قبل از بارگذاری، لازم است که پیکربندی اولیه به آرامش برسد تا مطمئن شویم که سیستم در حال تعادل است. تمام شبیه‌سازی‌ها در دمای ثابت ۳۰۰ کلوین انجام می‌شود و تثبیت دما با ترموستات نوز-هوور انجام می‌شود [۱۳]. گام زمانی مورد استفاده در شبیه‌سازی ۱ fs است. پتانسیل ایریبو که برای شبیه‌سازی کربن و هیدروکربن‌ها معرفی شده است، در این شبیه‌سازی به‌کار می‌رود[۱۴]. کلیه شبیه‌سازی‌ها توسط نرم‌افزار لمپس انجام گرفته‌اند[۱۵].



شکل ۱ تصویر شماتیک از صفحه گرافین شبیه‌سازی شده

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.2.14.8]

به منظور محاسبه منحنی‌های تنش-کرنش در طول تغییر شکل، تنش اتمی برای هر اتم کربن در صفحه گرافین مطابق رابطه زیر محاسبه می‌شود:

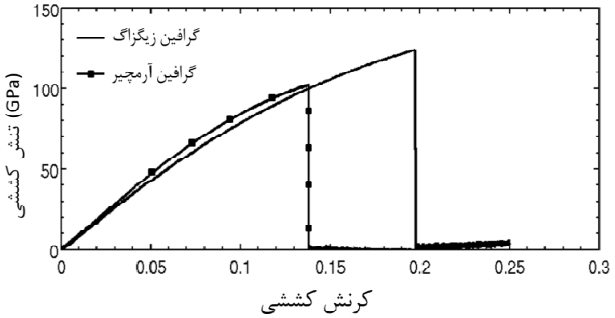
$$\sigma_{ij}^{\alpha} = \frac{1}{V^{\alpha}}\left(\frac{1}{2}m^{\alpha}v_i^{\alpha}v_j^{\alpha} + \sum_{\beta=1,n} r_{\alpha\beta}^{j} f_{\alpha\beta}^{i}\right) \qquad (۱)$$

که i و j اندیس‌ها را در دستگاه مختصات کارتزین نشان می‌دهند. α و β اندیس‌های اتمی هستند و m^{α} و v^{β} به ترتیب جرم و سرعت اتم α را نشان می‌دهد. $r_{\alpha\beta}$ فاصله بین اتم‌های α و β را نشان می‌دهد. همچنین V^{α} حجم اتمی اتم α را نشان می‌دهد. حجم اتمی از صفحه گرافین آرامش یافته اولیه با ضخامت ۳/۴ آنگستروم تعیین می‌شود[۱۷،۱۶]. بعد از اینکه تنش هر اتم کربن به‌دست آمد، تنش صفحه گرافین به‌وسیله میانگین‌گیری بر روی تمام اتم‌های کربن در صفحه به‌دست می‌آید.

از منحنی‌های تنش-کرنش، مدول الاستیک E، استحکام کششی σ (تنشی که در آن گرافین تحت کشش گسیخته و شکسته می‌شود) و کرنش شکست ε (کرنش متناظر با استحکام کششی)، مدول برشی G، استحکام برشی τ (تنشی که در آن گرافین تحت برش گسیخته و شکسته می‌شود) و کرنش برشی شکست γ (کرنش متناظر با استحکام برشی) می‌تواند به‌دست آید. مدول الاستیک و مدول برشی با محاسبه شیب ابتدای منحنی تنش-کرنش به‌دست می‌آید و بقیه کمیت‌ها از روی پیک نمودار تنش کرنش به‌دست می‌آیند.

۳- نتایج

برای اعتبار بخشیدن به مدل محاسباتی و کد شبیه‌سازی کامپیوتری، ابتدا خواص مکانیکی گرافین را محاسبه می‌کنیم و نتایج را با نتایج تجربی اخیر مقایسه می‌کنیم. در شکل ۲ منحنی‌های تنش-کرنش صفحه گرافین، که تحت بارگذاری کششی در دو راستای زیگزاگ و آرمچیر قرار دارد، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به‌دست آمده‌اند. مدول یانگ و استحکام کششی گرافین از منحنی‌های تنش-کرنش شکل ۲ به‌دست آمده و در جدول ۱ ارائه شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج به‌دست آمده در تطابق خوبی با نتایج تجربی هستند[۱۸].



شکل ۲ منحنی تنش- کرنش گرافین دست نخورده با بارگذاری کششی اعمال شده در راستای آرمچیر و زیگزاگ

جدول ۱ مقایسه مدول یانگ و استحکام کششی گرافین با نتایج تجربی

	استحکام کششی σ (GPa)	مدول یانگ E (TPa)
گرافین آرمچیر	۱۰۲/۷	۰/۹۵
گرافین زیگزاگ	۱۲۴/۴	۰/۸۸
مقدار متوسط راستاهای آرمچیر و زیگزاگ	۱۱۳/۵	۰/۹۱
مقدار اندازه‌گیری شده تجربی[۱۸]	۱۲۳/۵	۱/۰۱

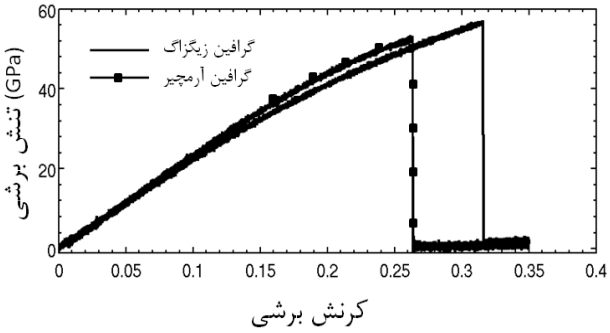
برای اطمینان از اینکه نتایج شبیه‌سازی به ابعاد سیستم وابستگی ندارند، یکبار اندازه طول سیستم دو برابر شده (۵ نانومتر به ۱۰ نانومتر) و یکبار اندازه عرض سیستم دو برابر شد (۵ نانومتر به ۱۰ نانومتر)، که نتایج به‌دست آمده حاکی از عدم وابستگی نتایج به اندازه سیستم هستند.

همچنین خواص مکانیکی گرافین تحت بارگذاری برشی نیز بررسی می‌شود. جهت بارگذاری برشی yx است. همانند حالت بارگذاری کششی، نتایج مدول برشی، استحکام و کرنش شکست برشی در جدول ۲ ارائه شده‌اند و نتایج با نتایج مرجع [۱۹] مقایسه شده است که نشان از صحت روش شبیه‌سازی به‌کار رفته در این مقاله دارند. منحنی تنش-کرنش حاصل از بارگذاری برشی در شکل ۳ نشان داده شده است.

جدول ۲ مقایسه مدول برشی و استحکام برشی گرافین با نتایج شبیه‌سازی دیگر

	استحکام برشی τ (GPa)	مدول برشی G (TPa)
گرافین آرمچیر	۵۳/۴۳	۰/۳۶
نتایج مرجع [۱۹] گرافین آرمچیر	۵۴/۵	۰/۳۷

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.2.14.8]



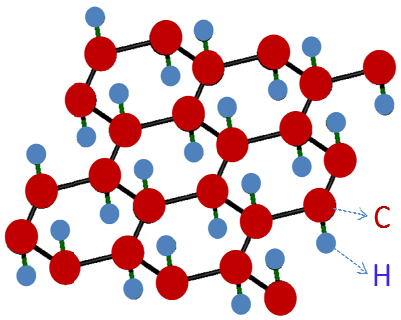
شکل ۳ منحنی تنش-کرنش گرافین با بارگذاری برشی اعمال شده در راستای آرمچیر و زیگزاگ

۱-۳- پوشش هیدروژن کاتوره‌ای

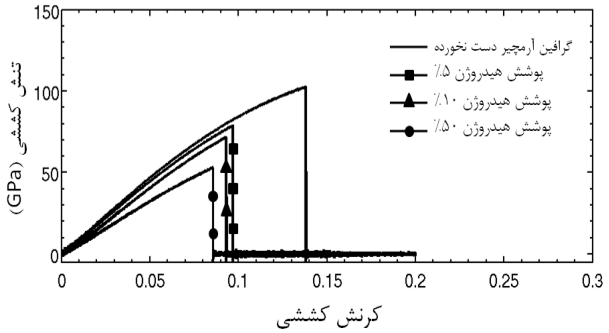
در این قسمت به محاسبه خواص مکانیکی گرافین عاملدار شده با اتم‌های هیدروژن، که به طور کاتوره‌ای روی سطح گرافین توزیع شده‌اند، می‌پردازیم. برای اجتناب از زیاد نزدیک شدن اتم‌های هیدروژن به یکدیگر به دلیل نیروی دافعه قوی بین اتم‌ها، محدودیتی گذاشته می‌شود که دو اتم هیدروژن در یک سمت از صفحه گرافین مجاز به قرار گرفتن روی دو اتم کربن مجاور هم نباشند. شکل ۴ چگونگی موقعیت اتم‌های هیدروژن روی صفحه گرافین را نشان می‌دهد. این توزیع در آزمایشگاه، به صورت تجربی نیز به عنوان یک حالت پایدار معرفی شده است[۲۰].

برای درصدهای مختلف پوشش هیدروژن، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با بارگذاری کششی در راستای آرمچیر انجام شده است. منحنی‌های تنش-کرنش به‌دست آمده در شکل ۵ نشان داده شده‌اند.

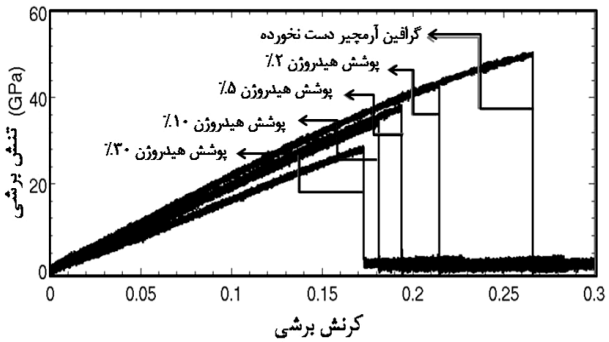
شکل ۶ نیز نتایج متناظر برای تنش برشی را نشان می‌دهد.



شکل ۴ تصویر شماتیک از نحوه قرارگیری اتم‌های هیدروژن بر روی گرافین



شکل ۵ منحنی‌های تنش-کرنش برای گرافین عاملدار شده با درصدهای مختلف هیدروژن تحت کشش در راستای آرمچیر

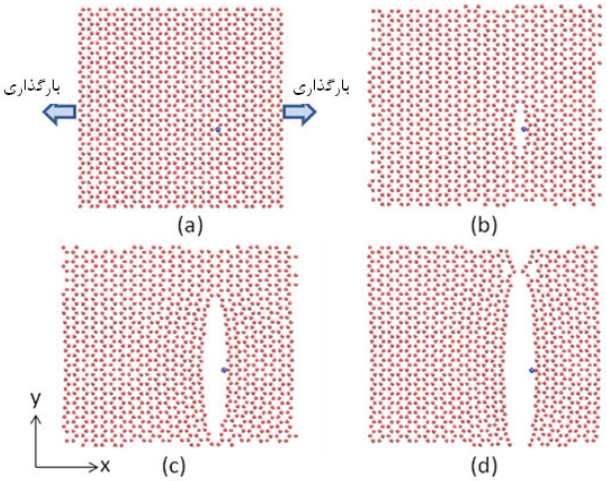


شکل ۶ منحنی‌های تنش-کرنش برای گرافین عاملدار شده با درصدهای مختلف هیدروژن تحت برش در راستای آرمچیر

همان‌طور که در شکل ۵ و ۶ دیده می‌شود، مدول‌های یانگ و برشی با افزایش پوشش اتم‌های هیدروژن کاهش می‌یابند. همچنین دیده می‌شود که استحکام کششی و برشی و کرنش‌های شکست با افزایش هیدروژن کاهش می‌یابند. این کاهش در مقایسه با مدول‌های الاستیک و برشی بیشتر است که نشان می‌دهد استحکام و کرنش شکست به عاملدار کردن بسیار حساس هستند. در مقدار پوشش هیدروژن ۳۰٪، مدول الاستیک، استحکام و کرنش شکست گرافین عاملدار شده تحت بارگذاری کششی به ترتیب کاهش ۲۷٪، ۴۷٪ و ۳۸٪ را نشان می‌دهند. این مقادیر برای بارگذاری برشی به ترتیب برابر ۳۳٪، ۴۳٪ و ۴۰٪ هستند.

برای بررسی دقیق‌تر و فهم بهتر از اثر پوشش هیدروژن، شکل ۷ نشان می‌دهد که وجود تنها یک اتم هیدروژن در گرافین باعث پاره‌شدن گرافین در آن نقطه می‌شود که ناشی از ضعیف بودن استحکام پیوند و تمرکز تنش در آن نقطه است.

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.2.14.8]

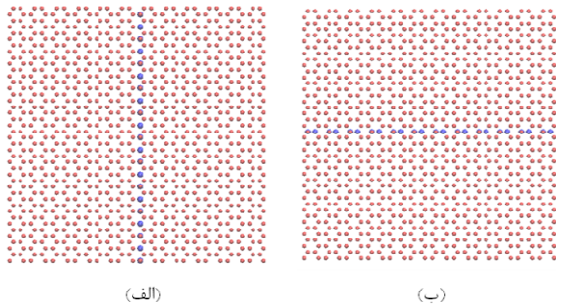


شکل ۷ تصاویر پاره‌شدن صفحه گرافین آرمچیر با پوشش یک اتم هیدروژن (اتم تیره‌رنگ) تحت بارگذاری کششی

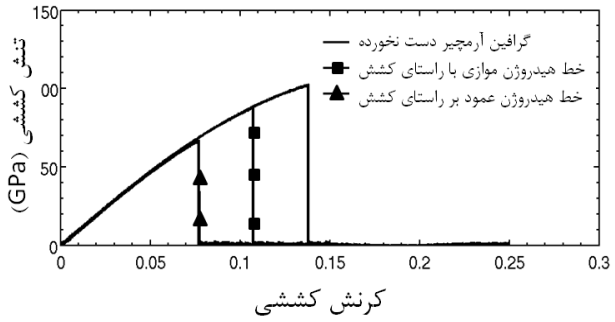
۲-۳- پوشش هیدروژن الگومند

گروه عاملی هیدروژن می‌تواند به صورت الگومند بر روی سطح گرافین قرار گیرند. مطالعات اخیر نشان داده‌اند که عاملدار کردن گرافین به صورت الگومند به صورت تجربی قابل انجام است[۲۱]. در این قسمت ما پوشش هیدروژن را که با الگوی خطی بر روی سطح گرافین قرار دارد مطالعه می‌کنیم. بدین منظور دو الگو را درنظر می گیریم: الف) خط هیدروژن عمود بر راستای کشش و برش مانند شکل ۸-الف، و ب) خط هیدروژن موازی با راستای کشش و برش مانند شکل ۸-ب.

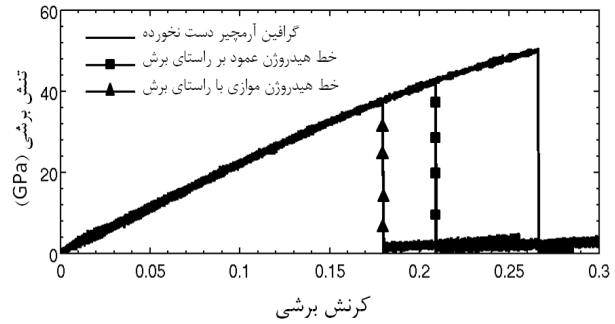
منحنی‌های تنش-کرنش شبیه‌سازی شده برای هر دو الگو برای بارگذاری‌های کششی و برشی در شکل ۹ و شکل ۱۰ نشان داده شده‌اند. نتایج شبیه‌سازی برای بارگذاری کششی (شکل ۹) نشان می‌دهد استحکام کشش و کرنش شکست گرافین، با الگوی خطی هیدروژن عمود بر راستای کشش، کاهش بیشتری را نسبت به حالتی که خط هیدروژن موازی راستای کشش است، نتیجه می‌دهد. این در حالی است که برای بارگذاری برشی (شکل ۱۰) استحکام برش و کرنش شکست، در حالت الگوی خطی هیدروژن موازی با راستای برش، کاهش بیشتری را نسبت به حالتی که خط هیدروژن عمود بر راستای برش است، نتیجه می‌دهد. شکل ۱۱ و ۱۲ تصاویر لحظه‌ای از فرایند تغییر شکل کششی و برشی گرافین آرمچیر عاملدار شده با پوشش خطی هیدروژن عمود بر راستای کشش و موازی با راستای برش را نشان می‌دهند.



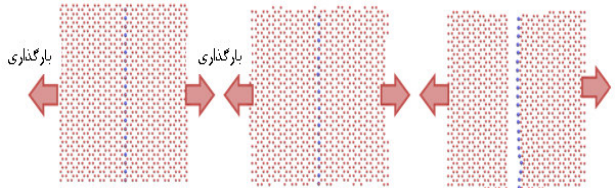
شکل ۸ نحوه قرارگیری اتم‌های هیدروژن روی صفحه گرافین، (الف) در حالت عمود بر راستای کشش و برش (ب) در حالت موازی با راستای کشش و برش



شکل ۹ مقایسه منحنی‌های تنش- کرنش در بارگذاری کششی

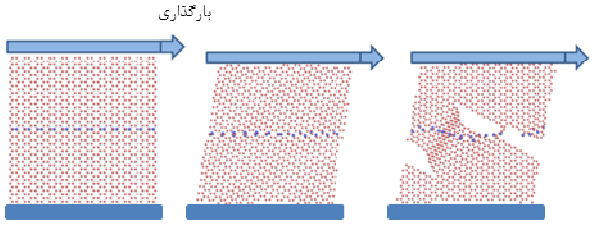


شکل ۱۰ مقایسه منحنی‌های تنش-کرنش در بارگذاری برشی



شکل ۱۱ تصویر پارگی صفحه گرافین عاملدار شده تحت بارگذاری کششی در راستای آرمچیر، راستای خط هیدروژن عمود بر راستای کشش

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.2.14.8]



شکل ۱۲ تصویر پارگی صفحه گرافین عاملدار شده تحت بارگذاری برشی در راستای آرمچیر، راستای خط هیدروژن موازی با راستای برش

۴- بحث و تحلیل

در این قسمت به بررسی علت تضعیف استحکام گرافین عاملدار شده می‌پردازیم. همان‌طور که می‌دانیم حالت هیبریداسیونی اتم‌های کربن در گرافین sp^2 است و هر اتم کربن سه اوربیتال σ و یک اوربیتال π دارد. طول پیوند C-C ۱/۴۲ آنگستروم است و زاویه پیوند C-C-C، ۱۲۰ درجه است. جذب شیمیایی اتم‌های خارجی یا رادیکال‌ها منجر به تغییر هیبریداسیون از sp^2 به sp^3 می‌شود. اتصال اتم هیدروژن منجر به بالا آمدن اتم کربن متصل به هیدروژن به اندازه ۰/۳ آنگستروم می‌شود. طول پیوند کربن و هیدروژن برابر ۱/۱۱ آنگستروم است و طول پیوندهای کربن-کربن مجاور از ۱/۴۲ به ۱/۵۰ تغییر می‌یابد و زاویه پیوند C-C-C از ۱۲۰ درجه به ۱۱۱ درجه کاهش می‌یابد. همچنین جذب اتم هیدروژن بر روی سطح گرافین منجر به تغییر پیوند کربن از هیدریداسیون صفحه‌ای sp^2 به هیبریداسیون خارج صفحه‌ای sp^3 می‌شود. اتصال اتم هیدروژن پیوند π در گرافین را به پیوند σ تبدیل می‌کند و منجر به تضعیف پیوند می‌شود. علاوه بر این پیوندهای sp^3 برون صفحه‌ای هستند و تحت کشش و برش می‌توانند بچرخند و موجب تضعیف گرافین شوند.

همچنین علت حساسیت کمتر استحکام کششی و برشی و کرنش‌های شکست به پوشش هیدروژن نسبت به مدول‌های یانگ و برشی، تاثیر کمتر هیدروژن در کرنش‌های کوچک است. همچنین از آنجایی که شکست در حد کرنش‌های بالا رخ می‌دهد و به‌وسیله شکسته شدن ضعیف‌ترین پیوندها کنترل می‌شود، حتی پوشش اندک هیدروژن می‌تواند باعث شود که پیوندهایی که در محل قرارگیری اتم‌های هیدروژن هستند هیبریداسیون آنها از sp^2 به sp^3 تغییر یافته و به وضوح باعث کاهش استحکام کششی و برشی شوند. بنابراین، استحکام و کرنش شکست باید نسبت به عاملدار شدن بیشتر حساس باشد.

همچنین، در توجیه کاهش بیشتر استحکام کششی گرافین عاملدار شده در الگویی که خط هیدروژن عمود بر راستای کشش است نسبت به حالتی که خط هیدروژن موازی با راستای کشش است، می‌توان گفت وقتی که پیوندهای sp^3 در یک خط عمود بر راستای کشش هستند، این خط ضعیف، پیوندهای sp^2 قوی در راستای کشش را مختل می‌کند و اثر تضعیف بیشتری بر روی گرافین نسبت به خط موازی با راستای کشش دارد. بر عکس این حالت برای بارگذاری برشی رخ می‌دهد. در این حالت استحکام برشی در گرافین با الگوی خط هیدروژن موازی با راستای برش کاهش بیشتری نسبت به گرافین عاملدار شده با الگوی خط هیدروژن عمود بر راستای برش دارد، چرا که وقتی پیوندهای sp^3 در یک خط موازی راستای برش هستند، پیوندهای sp^2 ناحیه بالا و پایین خود را مختل می‌کنند که این اثر تضعیفی بیشتری بر روی گرافین نسبت به خط پیوندی sp^3 عمود بر راستای برش دارد.

۵- نتیجه‌گیری

در این مقاله، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به منظور مطالعه اثر هیدروژن‌دار کردن گرافین بر روی خواص مکانیکی آن انجام شد. نتایج به‌دست آمده نشان دادند که هیدروژن‌دار کردن می‌تواند عاملی موثر برای کنترل خواص مکانیکی گرافین باشد. همچنین توزیع پوشش هیدروژن می‌تواند اثرات متفاوتی را بر روی استحکام کششی و یا برشی گرافین بگذارد. تاثیر عاملدار کردن بر روی خواص مکانیکی گرافین باید در زمان تحلیل مشخصات نانو قطعات ساخته‌شده از صفحات گرافین عاملدار شده درنظر گرفته شوند.

۶- مراجع

[1] Geim A. K., Novoselove K. S., "The Rise of Graphene", *Nature Materials*, Vol. 6, 2007, pp. 183-91

[2] Novoselove K. S., et al., "Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films", *Science*, Vol. 306, 2004, pp. 666-9

[3] Lin Y. M., Jenkis K. A., et al., "Operation of Graphene Transistors at Gigahertz Frequencies", *Nano Lett.*, Vol. 9, 2009, pp. 422-6

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]

[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.2.14.8]

[4] Tombros N., et al., "Electronic Spin Transport and Spin Precession in Single Graphene Layers at Room Temperature", *Nature*, Vol. 445, 2007, pp. 571-4

[5] Schedin F., et al., "Detection of Individual Gas Molecules Adsorbed on Graphene", *Nat. Mater.*, Vol. 6, 2007, pp. 652-5

[6] Bunch J. S., et al., "Impermeable Atomic Membranes from Graphene Sheets", *Nano Lett.*, Vol. 8, 2008, pp. 490-3

[7] Boukhvalov D. W., Katsnelson M. I., "Chemical Functionalization of Graphene", *J. Phys.: Condens. Matter*, Vol. 21, 2009, pp. 344205-17.

[8] Duplock E. J., Scheffler M., Lindan P., "Hallmark of Perfect Graphene" *Phys. Rev. Lett*, Vol. 92, 2004, pp. 225502-09.

[9] Boukhvalov, D. W., Katsnelson M. I., Lichtenstein A. I., "Hydrogen on Graphene: Electronic Structure, Total Energy, Structural Distortions and Magnetism from First-Principles Calculations", *Phys. Rev. B*, Vol. 77, 2008, pp. 035427-35.

[10] Ramanathan T., et. al., "Functionalized Graphene Sheets for Polymer Nanocomposites", *Nat. Nanotech.*, Vol. 3, 2008, pp. 327-31

[11] Rajabpour A., Vaez Alaei S. M., Kowsary, F. "Interface Thermal Resistance and Thermal Rectification in Hybrid Graphene-Graphene Nanoribbons: A Nonequilibrium Molecular Dynamics Study", *Appled. Phys. Lett.,* Vol. 99, 2011, pp. 051917-29.

[12] Sofo J. O., Chaudhari A. S., Barber G. D., "Graphene: A Two Dimensional Hydrocarbon", *Phys. Rev. B,* Vol. 75, 2007, pp. 153401-08.

[13] Nose S., "A Unified Formulation of the Constant Temperature Molecular-Dynamics Methods", *Journal of Chemical Physics,* Vol. 81, 1984, pp. 511-515.

[14] Stuart S. J., Tutein A. B., Harrison J. A., "A Reactive Potential for Hydrocarbons with Intermolecular Interactions" *Journal Of Chemical Physics*, Vol. 112, 2000, pp. 6472-86.

[15] Plimpton S., "Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics", *J Comp Phys,* Vol. 117, 1995, pp. 1-19.

[16] Huang Y., Wu J., Hwang K. C., "Thickness of Graphene and Single-Wall Carbon Nanotubes", *Phys. Rev. B*, Vol. 74, 2006, pp. 245413-19.

[17] Namilae S., Chandra N., Shet C., "Mechanical Behavior of Functionalized Nanotubes", *Chem. Phys. Lett.*, Vol. 387, 2004, pp. 247-252.

[18] Lee C., et al., "Measurement of the Elastic Properties and Intrinsic Strength of Monolayer Graphene", *Science*, Vol. 321, 2008, pp. 385-8.

[19] Min K., Aluru N. R.," Mechanical Properties of Graphene under Shear Deformation", *Appl. Phys. Lett*, Vol. 98, 2011, pp. 013113-19.

[20] Elias D. C., et al., "Control of Graphene Properties by Reversible Hydrogenation", *Science*, Vol. 323, 2009, pp. 1-20.

[21] Sessi P., et al., "Patterning Graphene at the Nanometer Scale via Hydrgen Desorption", *Nano Letters*, Vol. 9, 2009, pp. 4343-4347

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-10-12]

[DOR: 20.1001.1.10275940.1392.13.2.14.8]