



شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بر روی رفتار کمانش گرافن عامل‌دار شده با نایلون ۶ و ۶ در محیط

سیال آبی

شهرام آجری^{۱*}، فاطمه صادقی^۲

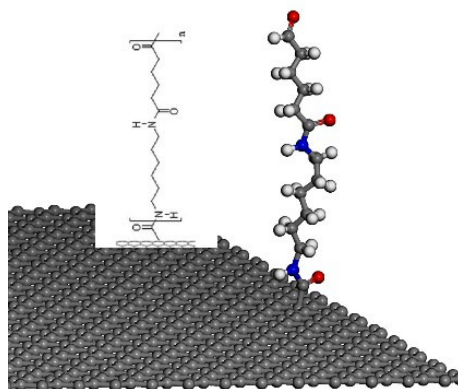
^۱ دانشیار، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه مراغه، مراغه، ایران

^۲ استادیار، دانشکده فناوری‌های نوین، دانشگاه محقق اردبیلی، نمین، ایران

برجسته‌ها

- با استفاده از نرم‌افزار لمپس، رفتار کمانشی گرافن عامل‌دار کووالانسی با نایلون ۶ و ۶ در محیط‌های خلأ و آبی شبیه‌سازی شده است.
- با افزایش درصد وزنی گروه‌های عاملی، نیرو و کرنش بحرانی به ترتیب افزایش و کاهش می‌یابند.

چکیده گرافیکی



مشخصات مقاله

تاریخچه مقاله:

نوع مقاله: علمی پژوهشی

دریافت: ۱۴۰۱/۱۲/۲۵

بازنگری: ۱۴۰۱/۱۲/۲۸

پذیرش: ۱۴۰۲/۰۱/۲۶

ارائه آنلاین: ۱۴۰۲/۰۲/۱۷

*نویسنده مسئول:

sajori@maragheh.ac.ir

کلیدواژه‌ها:

گرافن

عامل‌دار کردن

نایلون ۶ و ۶

کمانش

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

چکیده

در این مقاله، رفتار کمانشی گرافن عامل‌دار شده کووالانسی با نایلون ۶ و ۶ در محیط‌های خلأ و آبی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد تحلیل و بررسی قرار گرفته است. با محاسبه نیروی کمانش بحرانی و کرنش گرافن عامل‌دار، اثرات درصد وزنی، الگوهای مختلف توزیع و شکل‌های اتصال بر روی این مقادیر مطالعه شده است. نشان داده می‌شود که گرافن دارای کرنش و نیروی بحرانی بسیار کوچکی می‌باشد. با عامل‌دار کردن کووالانسی، نیروی بحرانی گرافن عامل‌دار شده افزایش می‌یابد که در حضور مولکول‌های آب، چشمگیرتر است. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که کرنش بحرانی به اندازه نیروی بحرانی به حضور مولکول‌های آب حساس نمی‌باشد. همچنین، با افزایش درصد وزنی گروه‌های عاملی، نیروی بحرانی افزایش می‌یابد. در مقابل، کرنش بحرانی با عامل‌دار کردن گرافن کاهش می‌یابد و کرنش بحرانی گرافن عامل‌دار شده با افزایش درصد وزنی کاهش می‌یابد. نتایج حاصل از این مطالعه می‌تواند به عنوان معیاری برای نانوکامپوزیت‌های مبتنی بر گرافن استفاده شود.

۱- مقدمه

بر اساس تحقیقات انجام‌گرفته بر روی گرافن^۱، اخیراً محققان موفق به جداسازی این نانوساختار شده‌اند [۱] که این امر توجه بسیاری از پژوهشگران و دانشمندان را به تعیین خواص فیزیکی، شیمیایی، الکتریکی و مکانیکی گرافن معطوف داشته است [۲-۱۶]. گرافن یک نانو ساختار دوبعدی هیبرید شده با sp^2 است که کاربردهای بسیار متنوعی در نانو تکنولوژی و بیوتکنولوژی دارد.

علاوه بر خواص ویژه و منحصر به فرد گرافن، نشان داده شده است که بی‌اثر بودن شیمیایی و نیز شکاف باند صفر می‌تواند به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای کاربرد بالقوه گرافن را محدود نماید. مروری بر مطالعات انجام‌شده در این حوزه نشان می‌دهد که با استفاده از عامل‌دار کردن می‌توان این نواقص را برطرف نمود. عامل‌دار کردن خواص ذاتی نانوساختار میزبان را از طریق تغییر هیبریداسیون تغییر می‌دهد [۱۷ و ۱۸]. این امر با استفاده از اتصال گروه‌های عاملی^۲ و اتم‌ها، اعمال میدان‌های خارجی و نیز اعمال بارهای مکانیکی محقق می‌شود [۱۹-۲۳]. از بین رویکردها و روش‌های مختلف پیشنهاد شده، عامل‌دار کردن به‌عنوان یکی از کاربردی‌ترین و کارآمدترین روش‌ها شناخته شده است. از جمله مزایای این روش می‌توان به پراکندگی خوب گرافن عامل‌دار شده در حلال‌های آلی و معدنی مختلف، بهبود سطح مشترک نانوکامپوزیت‌های مبتنی بر گرافن و بهبود پایداری در شرایط فیزیولوژیکی اشاره نمود. همچنین، گرافن عامل‌دار شده دارای طیف وسیعی از کاربردهای بالقوه در سیستم‌های نانوالکترومکانیکی و نانو زیست پزشکی است [۲۴-۳۳].

یکی از پرکاربردترین گروه‌های عاملی پلیمری با خواص منحصر به فرد مانند ضریب اصطکاک کوچک، چقرمگی قابل توجه، چگالی کم و نیز مقاومت در برابر سایش، نایلون ۶ و ۳۶ است که کاربردهای گسترده‌ای در نانوکامپوزیت‌ها دارد [۳۴-۳۶]. به‌عنوان یک رفتار مکانیکی مهم و قطعی نانوساختارها، رفتار کمانشی^۴ گرافن عامل‌دار کووالانسی با

نایلون ۶ و ۶ با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در این مقاله مورد بررسی قرار می‌گیرد. بدین منظور، الگوهای توزیع مختلفی از اتصال نایلون ۶ و ۶ بر روی سطح گرافن به نام‌های منظم^۵ و تصادفی^۶ در نظر گرفته شده است. همچنین، از آنجایی که ساختارهای عامل‌دار در اکثر موارد در محیط‌های آبی استخراج می‌شوند، شبیه‌سازی در هر دو محیط خلأ و آبی انجام شده است. نتایج حاصل از این مطالعه می‌تواند به‌عنوان معیاری برای نانوکامپوزیت‌های مبتنی بر گرافن استفاده شود.

۲- شبیه‌سازی

در این مقاله، شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی با استفاده از نرم‌افزار لمپس^۷ انجام گرفته است [۳۷]. از مهم‌ترین چالش‌های موجود در تحلیل‌های مکانیکی به طریق دینامیک مولکولی با توجه به نوع ساختار اتمی، تهیهی ورودی مناسب آن ساختار بر اساس میدان نیرویی یا تابع پتانسیل آن است. از آنجایی که برخی از توابع پتانسیل یا میدان‌های نیرویی جهت مطالعهی برخی رفتارهای مکانیکی مناسب نیستند و تنها جهت توصیف فیزیکی سیستم ارائه شده‌اند، انتخاب مناسب آن‌ها و تعیین دقیق ضرایب مربوطه جهت محاسبه تمام اندرکنش‌های موجود در سیستم اتمی را می‌توان مهم‌ترین چالش پیش روی تحلیل‌های مکانیکی دانست.

برای شبیه‌سازی گرافن عامل‌دار شده با نایلون ۶ و ۶ که در آب غوطه‌ور است، از تابع میدان نیرویی امبر^۸ [۳۸ و ۳۹] و برای انتگرال‌گیری از معادلات حرکت نیوتنی در مجموعه آماری کانونی، از الگوریتم ورلت^۹ استفاده شده است. به‌منظور دستیابی و حفظ دمای سیستم شبیه‌سازی شده، از ترموستات انتگرالی نوز- هوور^{۱۰} با گام زمانی ۰/۵ فمتو ثانیه استفاده می‌شود که این امر منجر به کاهش نوسانات دما و افزایش پایداری سیستم می‌شود [۴۰-۴۲].

⁵ Mapped

⁶ Random

⁷ Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)

⁸ AMBER force field

⁹ Verlet algorithm

¹⁰ Nose-Hoover thermostat

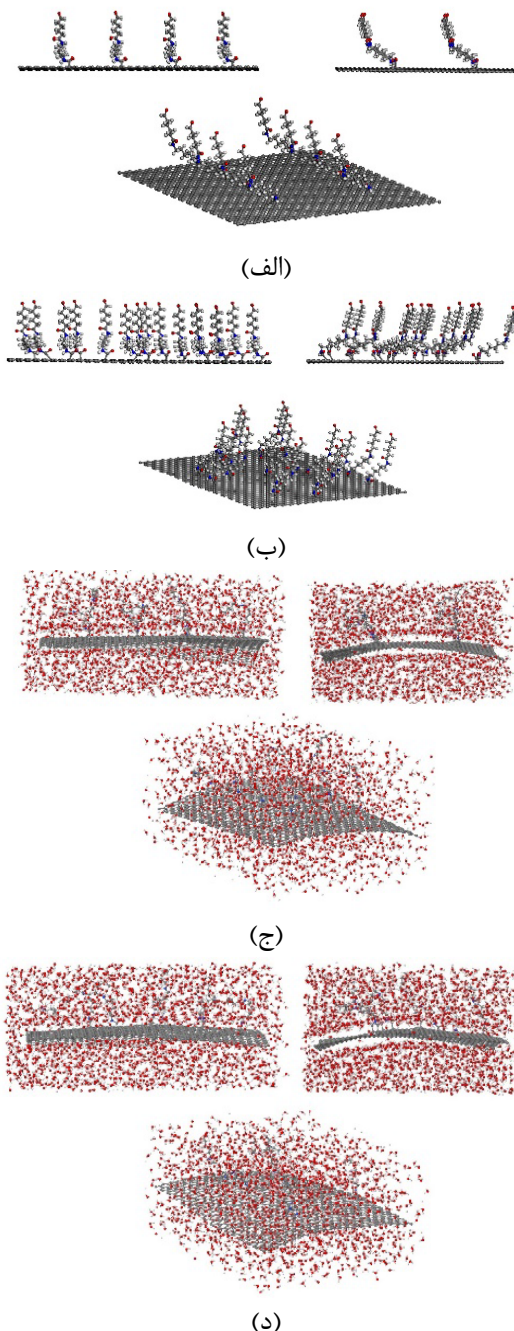
¹ Graphene

² Functional groups

³ 6,6Nylon

⁴ Buckling behavior

این اساس، محدوده درصد وزنی متغیر و از ۳/۵٪ تا ۲۸٪ در نظر گرفته شده است. لازم به ذکر است که چگالی سیال آبی $\frac{gr}{cm^3}$ ۰/۴ می‌باشد و بارهای فشاری نیز در امتداد طول ورق (70 \AA) اعمال می‌شوند.

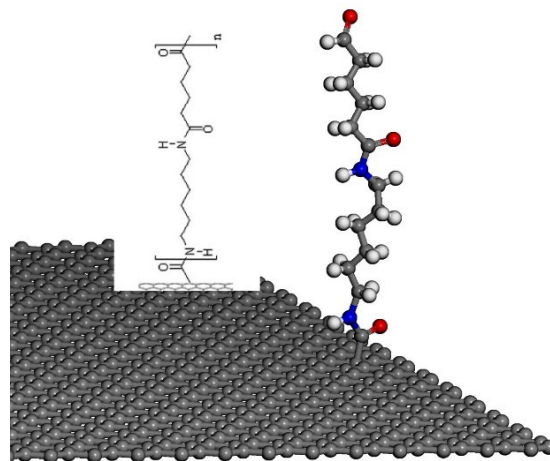


شکل (۲): عامل‌دار کردن یک طرفه با الگوی توزیع: (الف) منظم در محیط خلأ؛ (ب) تصادفی در محیط خلأ؛ (ج) منظم در محیط آبی؛ (د) تصادفی در محیط آبی.

پس از کمینه کردن اولیه انرژی سیستم و رسیدن به ساختار تعادلی در دمای محیط (۳۰۰ کلوین)، به کل سیستم مدت‌زمان حداکثر ۳۰۰ پیکو ثانیه فرصت داده می‌شود که با استفاده از ترموستات انتخابی به تعادل دمایی و ساختار تعادلی خود برسد. سپس، جابجایی‌های فشاری محوری به‌اندازه ۰/۰۰۵ آنگستروم بر مرزهای گرافن در هر مرحله زمانی اعمال می‌شود. علاوه بر این، سیستم در پایان هر مرحله بارگذاری به مدت ۵ پیکو ثانیه به آرامش می‌رسد. بر این اساس، انرژی پتانسیل، نیروها و کرنش‌های مربوطه محاسبه می‌شوند [۱۷ و ۱۸] تا زمانی که پدیده کمانش رخ دهد. همچنین، نمونه‌هایی از شکل‌های مود برای سازه‌های تحت کمانش ارائه شده است.

۳- مدل‌های شبیه‌سازی

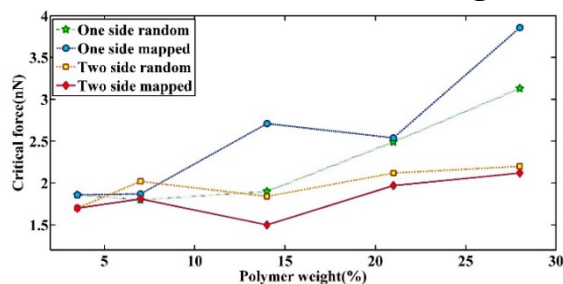
در شکل ۱، ساختار مولکولی نایلون ۶ و ۶ که در عامل‌دار کردن گرافن مورد استفاده قرار گرفته نشان داده شده است. ابعاد گرافن‌ها در مدل‌سازی $50 \text{ \AA} \times 70 \text{ \AA}$ است. مدل‌ها بر اساس دو دسته‌بندی اصلی تهیه شده‌اند.



شکل (۱): نمایش شماتیک نایلون ۶ و ۶.

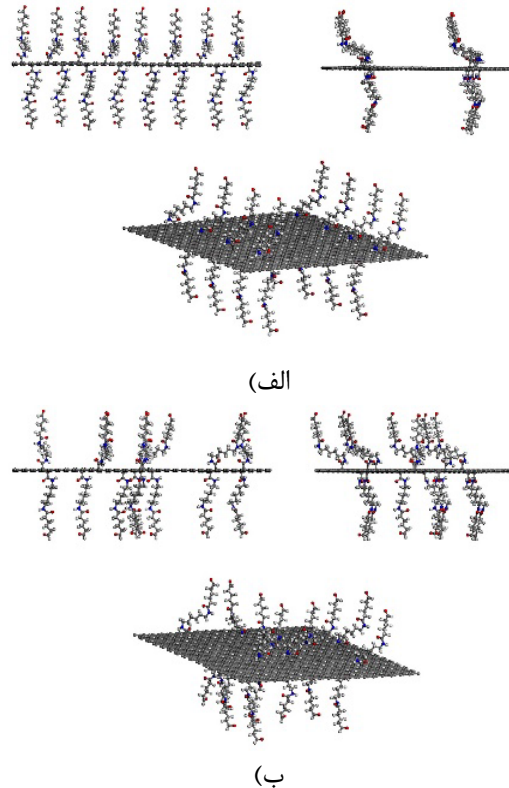
دسته‌بندی اول مربوط به عامل‌دار کردن گرافن در یک طرف از سطح آن می‌باشد که برای الگوهای مختلف توزیع (منظم و تصادفی) در محیط‌های خلأ و آبی در شکل ۲ نشان داده شده است. دسته‌بندی دوم نیز مربوط به عامل‌دار کردن گرافن در هر دو طرف از سطح آن می‌باشد که برای الگوهای مختلف توزیع در محیط خلأ در شکل ۳ ارائه شده است. بر

وزنی گروه‌های عاملی، نیروی کمانش بحرانی تقریباً در یک روند خطی افزایش می‌یابد. همچنین، مشاهده می‌شود که عامل‌دار کردن یک طرفه نسبت به عامل‌دار کردن دو طرفه تأثیر قابل‌ملاحظه‌تری در افزایش نیروی کمانش دارد. شایان‌ذکر است که در درصد‌های وزنی پایین، نوع الگوی توزیع و پیکربندی آن، تفاوت محسوسی را در مقدار نیروی کمانش بحرانی گرافن عامل‌دار ایجاد نمی‌کند. به‌عنوان مثال، مشاهده می‌شود که با افزایش درصد وزنی به ۲۸٪ برای حالت عامل‌دار کردن یک طرفه، نیروی کمانش بحرانی برای الگوهای توزیع منظم و تصادفی به ترتیب به میزان ۲/۲ و ۱/۸ برابر افزایش می‌یابد. در صورتی که برای حالت عامل‌دار کردن دو طرفه، نیروی کمانش بحرانی برای الگوهای توزیع منظم و تصادفی به ترتیب به میزان ۱/۲ و ۱/۱۷ برابر افزایش می‌یابد.



شکل (۴): تغییرات نیروی بحرانی با درصد وزنی نایلون ۶ و ۶ در محیط خلأ.

انجام شبیه‌سازی‌ها در محیط آبی نشان می‌دهد که نیروی کمانش بحرانی گرافن عامل‌دار در محیط آبی نسبت به محیط خلأ به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد (شکل ۵). همچنین، تغییر نیروی کمانش بحرانی گرافن عامل‌دار با درصد وزنی در مقایسه با گرافن در خلأ افزایش می‌یابد. به‌عنوان مثال، مشاهده می‌شود که با افزایش درصد وزنی به ۲۸٪ برای حالت عامل‌دار کردن یک طرفه، نیروی کمانش بحرانی برای الگوهای توزیع منظم و تصادفی به ترتیب در حدود ۴/۵ و ۳/۹ برابر افزایش می‌یابد. در صورتی که برای حالت عامل‌دار کردن دو طرفه، نیروی کمانش بحرانی در مقایسه با گرافن خلص، برای الگوهای توزیع منظم و تصادفی به ترتیب به میزان ۲/۳ و ۱/۸ برابر افزایش می‌یابد. با توجه به نمودار کرنش بحرانی که در شکل ۶ نشان داده شده است، مشاهده می‌شود که کرنش بحرانی گرافن

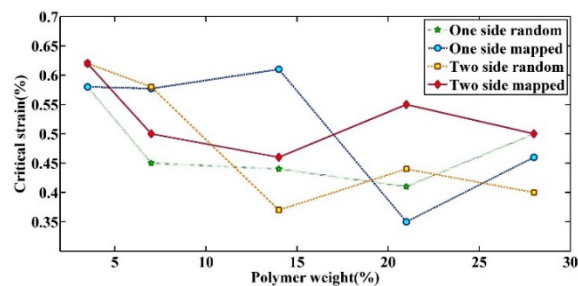


شکل (۳): عامل‌دار کردن دو طرفه با الگوی توزیع: (الف) منظم در محیط خلأ؛ (ب) تصادفی در محیط خلأ.

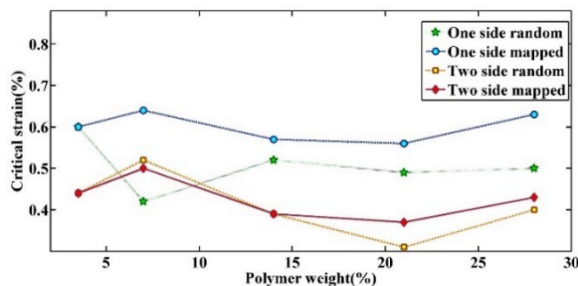
۴- نتایج شبیه‌سازی

به‌منظور اعتبار سنجی نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، یک گرافن خالص که بار فشاری محوری به آن اعمال می‌شود، در نظر گرفته شده است. بر طبق نتایج به‌دست‌آمده، گرافن در کرنش بسیار کوچک به‌اندازه ۰/۷٪ دچار کمانش می‌شود. نیروی بحرانی متناظر نیز در حدود ۱/۸ nN محاسبه شده است که تطابق بسیار خوبی با داده‌های موجود در کارهای قبلی دارد [۴۳]. مقادیر کوچک کرنش و نیروی بحرانی را می‌توان با اثر اعوجاج که در گرافن مشاهده می‌شود، توجیه نمود؛ بنابراین، لبه‌های گرافن ناپایداری خود را در کرنش‌های کوچک از دست می‌دهند و سپس پدیده کمانش رخ می‌دهد.

تغییرات نیروی بحرانی برحسب درصد وزنی نایلون ۶ و ۶ به ازای الگوهای مختلف توزیع در شکل ۴ نشان داده شده است. بر طبق نتایج می‌توان نتیجه گرفت که عامل‌دار کردن سبب افزایش نیروی کمانش گرافن می‌شود و با افزایش درصد



شکل (۶): تغییرات کرنش بحرانی با درصد وزنی نایلون ۶ و ۶ در محیط خلأ.



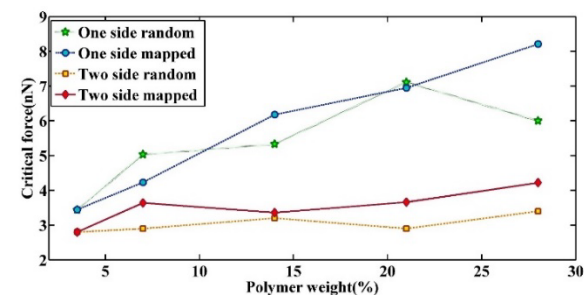
شکل (۷): تغییرات کرنش بحرانی با درصد وزنی نایلون ۶ و ۶ در محیط آبی.

۵- نتیجه گیری

در این مقاله، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، رفتار کمانش گرافن عامل‌دار شده با نایلون ۶ و ۶ مورد بررسی قرار گرفت. دو محیط شبیه‌سازی متفاوت (خلأ و آبی) در نظر گرفته شد و نیروی بحرانی و کرنش بحرانی محاسبه گردید. همچنین، تأثیر درصد وزنی گروه عاملی همراه با الگوهای توزیع (منظم و تصادفی) و نوع پیکربندی (عامل‌دار کردن یک طرفه و دو طرفه) بر روی مقادیر فوق‌الذکر مورد بررسی قرار گرفت. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که عامل‌دار کردن باعث افزایش نیروی بحرانی و کاهش کرنش بحرانی می‌شود. علاوه بر این، مشاهده گردید که با افزایش درصد وزنی گروه‌های عاملی، نیرو و کرنش بحرانی به ترتیب افزایش و کاهش می‌یابند. نتایج شبیه‌سازی همچنین نشان داد که در محیط‌های آبی، حضور مولکول‌های آب منجر به افزایش بیشتر نیروی بحرانی می‌شود، در حالی که کرنش بحرانی به اندازه نیروی بحرانی در محیط‌های آبی حساس نیست.

بررسی کیفی نتایج نیز نشان داد که تغییر در هیبریداسیون نوع پیوند کربنی در ورق از sp^2 به sp^3 و نیز اعمال

عامل‌دار نسبت به گرافن خالص کوچک‌تر می‌باشد. همچنین، با افزایش درصد وزنی گروه‌های عاملی، کرنش بحرانی گرافن با تغییرات زیادی کاهش می‌یابد. نتایج حاصل از شبیه‌سازی گویای این مطلب است که کرنش بحرانی حساسیت زیادی به نوع الگوی توزیع (منظم و تصادفی) و نیز نوع پیکربندی (یک طرفه و دو طرفه) ندارد. بر طبق نتایج حاصل از شبیه‌سازی برای حالت عامل‌دار کردن یک طرفه، بیشترین کاهش در کمانش بحرانی برای الگوهای توزیع منظم و تصادفی به ترتیب در حدود ۵۱٪ و ۴۳٪ است. این در حالی است که برای حالت عامل‌دار کردن دو طرفه، کرنش بحرانی برای الگوهای توزیع منظم و تصادفی تقریباً به اندازه ۳۶٪ و ۴۸٪ کاهش می‌یابد. بر اساس کرنش بحرانی محاسبه شده برای گرافن عامل‌دار در محیط آبی، مشخص شده است که تغییر کرنش بحرانی با درصد وزنی در حضور مولکول‌های آب در مقایسه با گرافن عامل‌دار در خلأ کمتر می‌شود (شکل ۷). همچنین، می‌توان مشاهده نمود که در محیط‌های آبی، کرنش بحرانی گرافن عامل‌دار که در آن گروه‌های عاملی در یک طرف گرافن متصل هستند نسبت به حالتی که گروه‌های عاملی در دو طرف گرافن متصل هستند، بیشتر است. به عنوان مثال، برای حالت عامل‌دار کردن یک طرفه، بیشترین کاهش در کرنش بحرانی برای الگوهای توزیع منظم و تصادفی به ترتیب در حدود ۲۲٪ و ۴۱٪ است. در صورتی که برای حالت عامل‌دار کردن دو طرفه، کرنش بحرانی برای الگوهای توزیع منظم و تصادفی تقریباً به اندازه ۴۸٪ و ۵۶٪ کاهش می‌یابد. شکل‌های ۸ و ۹ نیز بیانگر نمونه‌های از حالت کمانش در مدل‌های مختلف مطالعه شده در این مقاله می‌باشد.



شکل (۸): تغییرات نیروی بحرانی با درصد وزنی نایلون ۶ و ۶ در محیط آبی.

contact organic field-effect transistors. *Advanced Materials*. 2008; 20(17):3289-3293.

[10] Wang X, Ouyang Y, Li X, Wang H, Guo J, Dai H. Room-temperature all-semiconducting sub-10-nm graphene nanoribbon field-effect transistors. *Physical Review Letters*. 2008; 100(20):206803.

[11] Lin YM, Avouris P. Strong suppression of electrical noise in bilayer graphene nanodevices. *Nano Letters*. 2008; 8(8):2119-2125.

[12] Wang QH, Hersam MC. Room-temperature molecular-resolution characterization of self-assembled organic monolayers on epitaxial graphene. *Nature Chemistry*. 2009; 1(3):206-211.

[13] Si Y, Samulski ET. Synthesis of water soluble graphene. *Nano Letters*. 2008; 8(6):1679-1682.

[14] Wang X, Li X, Zhang L, Yoon Y, Weber PK, Wang H, Guo J, Dai H. N-doping of graphene through electrothermal reactions with ammonia. *Science*. 2009; 324(5928):768-771.

[15] Mouhat F, Coudert FX, Bocquet ML. Structure and chemistry of graphene oxide in liquid water from first principles. *Nature Communications*. 2020; 11(1): 1566.

[16] Geim AK, Novoselov KS. The rise of graphene. *Nature Materials*. 2007; 6(3):183-191.

[17] Ansari R, Ajori S, Rouhi S. Structural and elastic properties and stability characteristics of oxygenated carbon nanotubes under physical adsorption of polymers. *Applied Surface Science*. 2015; 332:640-647.

[18] Ansari R, Ajori S, Ameri A. Elastic and structural properties and buckling behavior of single-walled carbon nanotubes under chemical adsorption of atomic oxygen and hydroxyl. *Chemical Physics Letters*. 2014; 616:120-125.

[19] Coletti C, Riedl C, Lee DS, Krauss B, Patthey L, von Klitzing K, Smet JH, Starke U. Charge neutrality and band-gap tuning of epitaxial graphene on SiC by molecular doping. *Physical Review B*. 2010; 81(23): 235401.

[20] Wu M, Cao C, Jiang JZ. Light non-metallic atom (B, N, O and F)-doped graphene: a first-principles study. *Nanotechnology*. 2010; 21(50):505202.

[21] Cocco G, Cadelano E, Colombo L. Gap opening in graphene by shear strain. *Physical Review B*. 2010; 81(24): 241412.

[22] Park J, Lee WH, Huh S, Sim SH, Kim SB, Cho K, Hong BH, Kim KS. Work-function engineering of graphene electrodes by self-assembled monolayers for high-performance organic field-effect transistors. *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2011; 2(8):841-845.

[23] Park J, Jo SB, Yu YJ, Kim Y, Yang JW, Lee WH, Kim HH, Hong BH, Kim P, Cho K, Kim KS. Single-gate

نیروهای واندروالسی بین ورق و گروه عاملی، دو پارامتر مهم در تغییر نیروی بحرانی است که با توجه به نوع، اندازه و مقدار تغییر ساختار ورق، هرکدام می‌توانند اثر بیشتری بر روی رفتار ساختار و مقادیر آن داشته باشند. همچنین، مولکول‌های سیال با اعمال نیروهای واندروالسی یا پیوندهای هیدروژنی احتمالی (بر اساس نوع اتم‌ها) مانند فشار خارجی بر روی سازه عمل می‌کنند. لذا؛ از این رو بر استحکام و پایداری مکانیکی سازه اثرگذار خواهند بود.

۶- مراجع

[1] Novoselov KS, Geim AK, Morozov SV, Jiang DE, Zhang Y, Dubonos SV, Grigorieva IV, Firsov AA. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*. 2004; 306(5696):666-669.

[2] Ansari R, Ajori S, Motevalli B. Mechanical properties of defective single-layered graphene sheets via molecular dynamics simulation. *Superlattices and Microstructures*. 2012; 51(2):274-289.

[3] Bedi D, Sharma S, Tiwari SK, Ajori S. Effect of defects and boundary conditions on the vibrational behavior of carbon nanotube and graphene: A molecular dynamics perspective. *Diamond and Related Materials*. 2022; 126: 109052.

[4] Osman A, Elhakeem A, Kaytbay S, Ahmed A. A comprehensive review on the thermal, electrical, and mechanical properties of graphene-based multi-functional epoxy composites. *Advanced Composites and Hybrid Materials*. 2022; 5(2): 547-605.

[5] Wijerathne D, Gong Y, Afroj S, Karim N, Abeykoon C. Mechanical and thermal properties of graphene nanoplatelets-reinforced recycled polycarbonate composites. *International Journal of Lightweight Materials and Manufacture*. 2023; 6(1): 117-128.

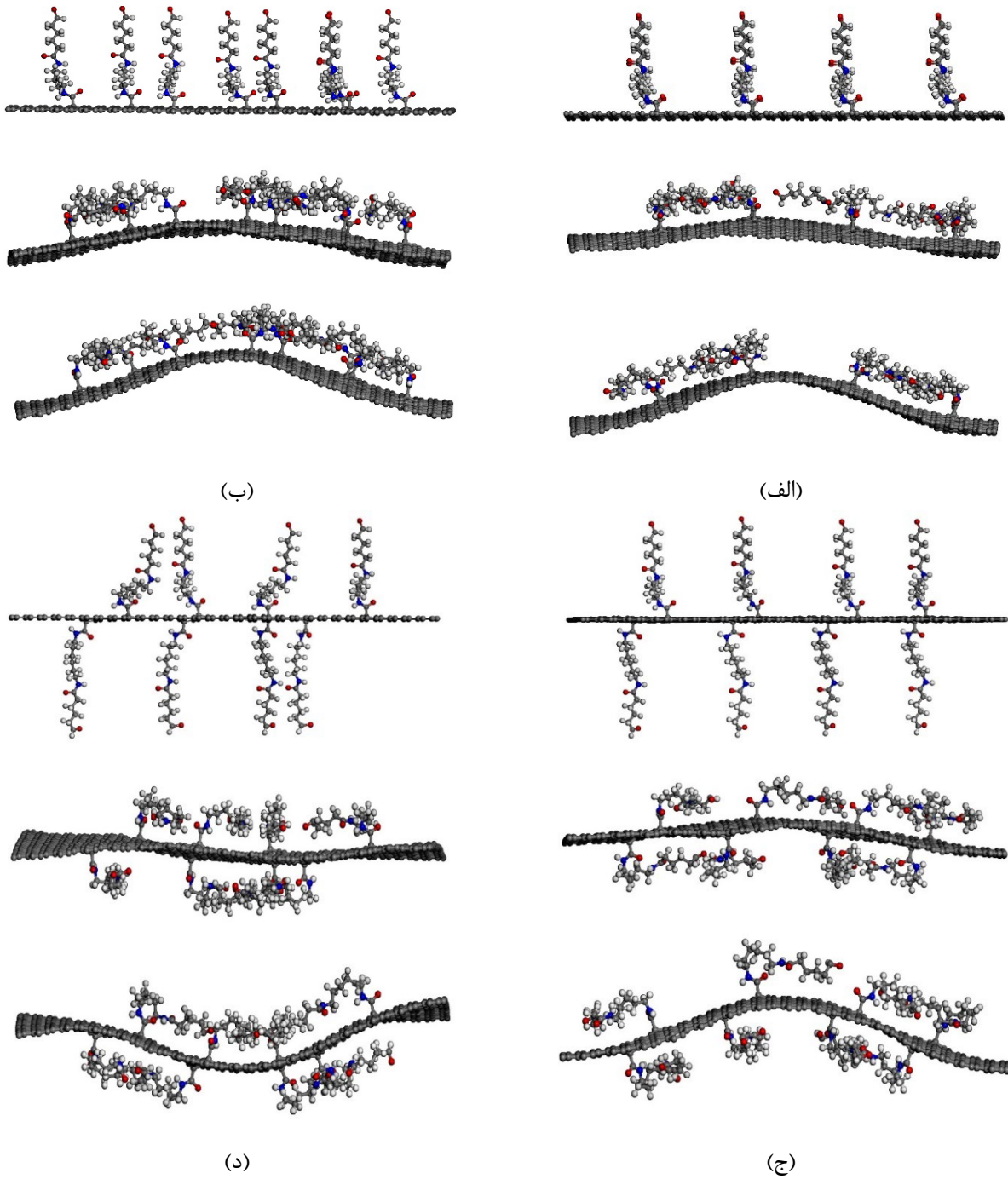
[6] Elsaid K, Abdelkareem MA, Maghrabie HM, Sayed ET, Wilberforce T, Baroutaji A, Olabi AG. Thermophysical properties of graphene-based nanofluids. *International Journal of Thermofluids*. 2021; 10: 100073.

[7] Hassanpour S, Mehralian F, Firouz-Abadi RD, Borhan-Panah MR, Rahmanian M. Prediction of in-plane elastic properties of graphene in the framework of first strain gradient theory. *Meccanica*. 2019; 54: 299-310.

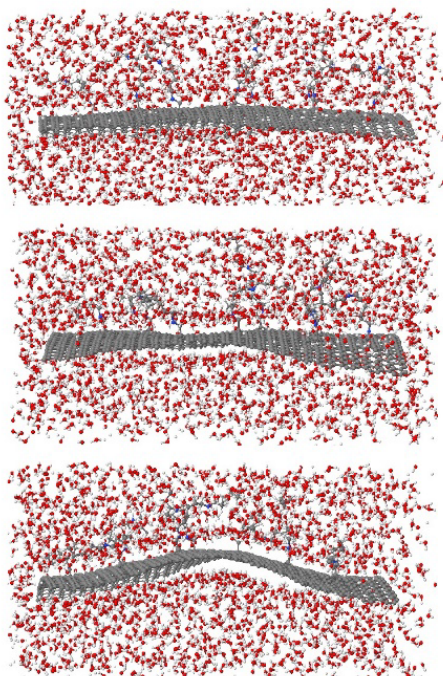
[8] Li G, Li Y, Liu H, Guo Y, Li Y, Zhu D. Architecture of graphdiyne nanoscale films. *Chemical Communications*. 2010; 46(19):3256-3258.

[9] Di CA, Wei D, Yu G, Liu Y, Guo Y, Zhu D. Patterned graphene as source/drain electrodes for bottom-

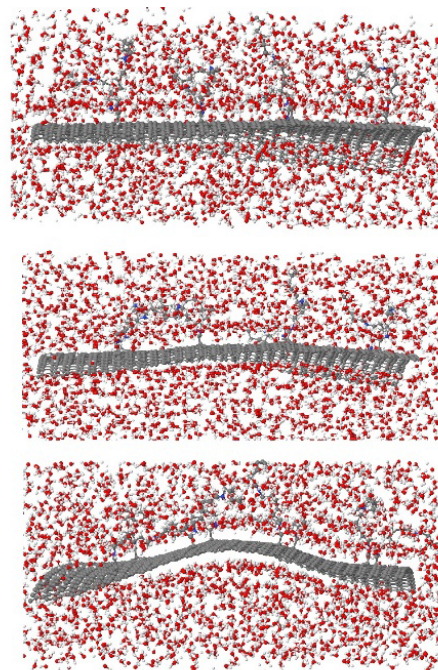
- [35] Chavarria F, Paul DR. Comparison of composites based on nylon 6 and nylon 6,6. *Polymer*. 2004; 45:8501.
- [36] Cho JW, Paul DR. Nylon 6 nanocomposites by melt compounding. *Polymer*. 2001; 42(3):1083-1094.
- [37] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of computational physics*. 1995; 117(1):1-19.
- [38] Cornell WD, Cieplak P, Bayly CI, Gould IR, Merz KM, Ferguson DM, Spellmeyer DC, Fox T, Caldwell JW, Kollman PA. A second generation force field for the simulation of proteins, nucleic acids, and organic molecules. *Journal of the American Chemical Society*. 1995; 117(19):5179-5197.
- [39] Grindon C, Harris S, Evans T, Novik K, Coveney P, Laughton C. Large-scale molecular dynamics simulation of DNA: implementation and validation of the AMBER98 force field in LAMMPS. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2004; 362(1820):1373-1386.
- [40] Zhang CL, Shen HS. Predicting the elastic properties of double-walled carbon nanotubes by molecular dynamics simulation. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2008; 41(5):055404.
- [41] Tildesley DJ, Allen M.P. *Computer simulation of liquids*. Oxford: Clarendon. 1987.
- [42] Hoover WG. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions. *Physical Review A*. 1985; 31(3):1695.
- [43] Gao Y, Hao P. Mechanical properties of monolayer graphene under tensile and compressive loading. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2009; 41(8):1561-1566.
- bandgap opening of bilayer graphene by dual molecular doping. *Advanced Materials*. 2012; 24(3):407-411.
- [24] Behura SK, Wang C, Wen Y, Berry V. Graphene-semiconductor heterojunction sheds light on emerging photovoltaics. *Nature Photonics*. 2019; 13(5): 312-318.
- [25] Karki N, Tiwari H, Tewari C, Rana A, Pandey N, Basak S, Sahoo NG. Functionalized graphene oxide as a vehicle for targeted drug delivery and bioimaging applications. *Journal of Materials Chemistry B*. 2020; 8(36): 8116-8148.
- [26] Sattari S, Adeli M, Beyranvand S, Nemati M. Functionalized graphene platforms for anticancer drug delivery. *International Journal of Nanomedicine*. 2021; 16: 5955.
- [27] Sharma H, Mondal S. Functionalized graphene oxide for chemotherapeutic drug delivery and cancer treatment: a promising material in nanomedicine. *International Journal of Molecular Sciences*. 2020; 21(17): 6280.
- [28] Yang K, Hu L, Ma X, Ye S, Cheng L, Shi X, Li C, Li Y, Liu Z. Multimodal imaging guided photothermal therapy using functionalized graphene nanosheets anchored with magnetic nanoparticles. *Advanced Materials*. 2012; 24(14): 1868-1872.
- [29] Huang P, Xu C, Lin J, Wang C, Wang X, Zhang C, Zhou X, Guo S, Cui D. Folic acid-conjugated graphene oxide loaded with photosensitizers for targeting photodynamic therapy. *Theranostics*. 2011; 1:240.
- [30] Ma X, Tao H, Yang K, Feng L, Cheng L, Shi X, Li Y, Guo L, Liu Z. A functionalized graphene oxide-iron oxide nanocomposite for magnetically targeted drug delivery, photothermal therapy, and magnetic resonance imaging. *Nano Research*. 2012; 5:199-212.
- [31] Zhang S, Yang K, Feng L, Liu Z. In vitro and in vivo behaviors of dextran functionalized graphene. *Carbon*. 2011; 49(12): 4040-4049.
- [32] Tiwari H, Karki N, Pal M, Basak S, Verma RK, Bal R, Kandpal ND, Bisht G, Sahoo NG. Functionalized graphene oxide as a nanocarrier for dual drug delivery applications: The synergistic effect of quercetin and gefitinib against ovarian cancer cells. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*. 2019; 178: 452-459.
- [33] Sagadevan S, Shahid MM, Yiqiang Z, Oh WC, Soga T, Anita Lett J, Alshahateet SF, Fatimah I, Waqar A, Paiman S, Johan MR. Functionalized graphene-based nanocomposites for smart optoelectronic applications. *Nanotechnology Reviews*. 2021; 10(1): 605-635.
- [34] Sengupta R, Ganguly A, Sabharwal S, Chaki TK, Bhowmick A.K. MWCNT reinforced Polyamide-6, 6 films: preparation, characterization and properties. *Journal of Materials Science*. 2007; 42: 923-934.



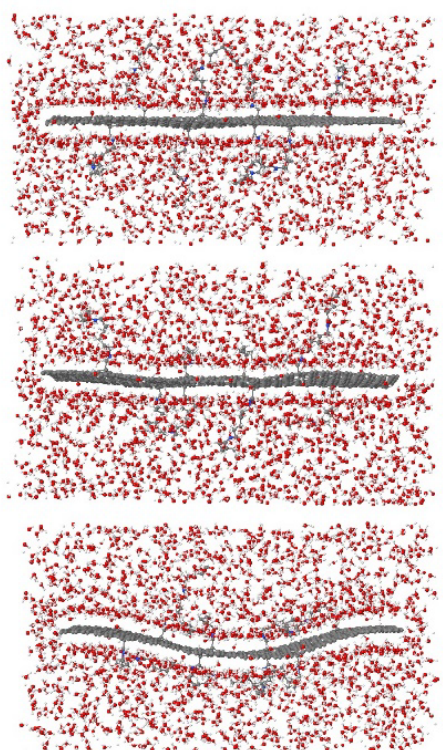
شکل (۸): نمونه‌هایی از اشکال مود کمانش الف) عامل‌دار کردن منظم یک طرفه در محیط خلأ ب) عامل‌دار کردن تصادفی یک طرفه در محیط خلأ ج) عامل‌دار کردن منظم دو طرفه در محیط خلأ د) عامل‌دار کردن تصادفی دو طرفه در محیط خلأ.



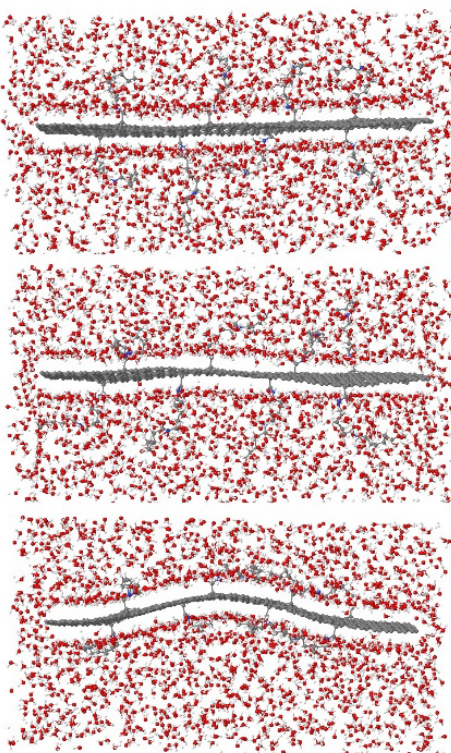
(ب)



(الف)



(د)



(ج)

شکل (۹): نمونه‌هایی از اشکال مود کمانش: الف) عامل‌دار کردن منظم در یک طرفه در محیط آبی؛ ب) عامل‌دار کردن تصادفی یک طرفه در محیط آبی؛ ج) عامل‌دار کردن منظم در دو طرفه در محیط آبی؛ د) عامل‌دار کردن تصادفی دو طرفه در محیط آبی.



A Molecular Dynamics Study on the Buckling Analysis of Functionalized Graphene with Nylon 6,6 in Aqueous Environment

Shahram Ajori^{1*}, Fatemeh Sadeghi²

¹Associate Professor, Department of Mechanical Engineering, University of Maragheh, Maragheh, Iran

²Assistant Professor, Department of Engineering Sciences, Faculty of Advanced Technologies, University of Mohaghegh Ardabili, Namin, Iran

HIGHLIGHTS

- Using Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) package, the buckling behavior of covalently functionalized graphene with nylon 6,6 in vacuum and aqueous environments is simulated.
- The critical force and strain increase and decrease, respectively as the weight percentage of functional groups increases.

ARTICLE INFO

Article history:

Article Type: Research paper

Received: 16 March 2023

Received in revised form: 19 March 2023

Accepted: 15 April 2023

Available online: 7 May 2023

*Correspondence:

sajori@maragheh.ac.ir

How to cite this article:

S. Ajori, F. Sadeghi. A molecular dynamics study on the buckling analysis of functionalized graphene with Nylon 6,6 in aqueous environment. *Journal of Aerospace Mechanics*. 2023; 19(4):1-10.

Keywords:

Graphene

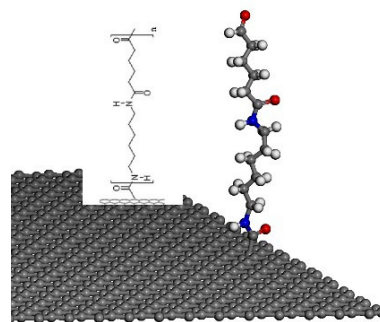
Functionalization

Nylon 6,6

Buckling

Molecular dynamics simulations

GRAPHICAL ABSTRACT



ABSTRACT

In this research, the buckling behavior of covalently functionalized graphene with nylon 6,6 in vacuum and aqueous environments is investigated employing the molecular dynamics (MD) simulations. The critical buckling force and strain of functionalized graphene are computed and the effects of weight percentage, different distribution patterns and attachment configurations on these values are investigated. Graphene is demonstrated to have very small critical strain and force. By covalent functionalization, the critical force of functionalized graphene increases which is more considerable in the presence of water molecules. Moreover, it is found out that critical strain is not as sensitive as critical force to the presence of water molecules. Also, by increasing the weight percentage of functional groups, the critical force increases. By contrast, the critical strain reduces by functionalization and the critical strain of functionalized graphene reduces as the weight percentage increases. The results of this study can be used as the benchmark for the graphene-based nanocomposites.