

## بررسی بخشی از رفتار مکانیکی نانولایه TiO<sub>2</sub> در فاز لپیداکروسیت حسین اثناعشری ایوری <sup>۱</sup>، روحالله حفیظی <sup>۲</sup>

School of Chemistry, University of Southampton, Highfield, Southampton, SO17 1BJ, United Kingdom

با اعمال مقادیر کم کرنش محوری به نانولایه لپیداکروسیت TiO<sub>2</sub> و محاسبه انرژی آنها به کمک نظریه تابعی چگالی و استفاده از قانون هوک مدول یانگ و ضریب پواسون برای نانولایه محاسبه گردید. همچنین کرنش بحرانی و قدرت ایدهآل نانولایه با اعمال کرنش بیشتر محاسبه گردید. مقادیر عددی نسبتا زیاد۲۵۲ و ۳۱۳ گیگاپاسکال برای مدول یانگ و مقادیر نسبتا کم حدود ٤ و ۸ درصد برای کرنش بحرانی به ترتیب در دو راستای x و y بدست آمد.

پتانسیل اکسایش-کاهش آب در محدوده گاف نواری TiO<sub>2</sub> واقع شده است بنابراین نانوساختارهای TiO<sub>2</sub> می توانند موادی مناسب جهت تجزیه آب به کمک نور خورشید و تولید هیدروژن به عنوان سوخت پاک باشند[۱]. از آنجا که در نانولایهها مساحت سطح موثر بیشتر بوده و برای کاربردهای فوتوکاتالیستی مناسبترند تلاش برای ساخت و مطالعه خواص نانولایههای TiO<sub>2</sub> ضروری به نظر میرسد. تنها نانولایه TiO<sub>2</sub> که سنتز آن با روش های شیمیایی گزارش شده است نانولایه لپیداکروسیت (LNS) است[۲]. بطور کلی بررسی رفتار مکانیکی نانولایهها از دو جنبه قابل اهمیت است. اول اینکه در بسیاری از کاربردهای عملی وجود کرنش اجتنابناپذیر است. دوم اینکه با اعمال کرنش می توان خواص الکتریکی از جمله گاف نواری و تحرکیذیری الکترون-حفره را در نیمهرسانا تنظیم کرد[۳]. بنابراین بررسی رفتار مکانیکی نانولایه LNS تحت کرنش می تواند مهم باشد. مواردی که می توانند بخشی از رفتار مکانیکی ماده را تشکیل دهند عبارتند از : حداکثر کرنشی که می توان به ماده اعمال کرد بدون آنکه ساختار اتمی آن دستخوش تغییر شود (کرنش بحرانی) و تنش متناظر با آن (قدرت ایدهآل)؛ میزان تنشی که به ازای کرنش تک محوری خاص به ساختار ماده وارد میشود یا برعکس میزان تغییر شکل ماده در اثر تنش خاص (مدول یانگ) و تغییر شکل ماده در راستای عمود بر کرنش نسبت به کرنش اعمال شده در محدوده قانون هوک (ضریب پواسون). در این کار با اعمال کرنشهای محوری در راستاهای x و y در سطح نانولایه LNS موارد نامبرده شده از رفتار مکانیکی آن بررسی گردید. محاسبات DFT با بستهٔ FHI-aims [٤] و استفاده از تابعی PBE انجام شد. برای ساختار دوبعدی در راستای محور عمود بر لایه (محور z) از Å ۱۲ خلأ استفاده شد. در همه موارد بعد از اعمال کرنش، با ثابتنگهداشتن بردارهای شبکه در راستای محور z و محور/محورهای تحت کرنش ساختار به طور کامل واهلیده شد.

ساختار اتمی LNS در شکل ۱(a) نشان داده شده است. ویژگی های ساختاری بعد از واهلش کامل آن در جای دیگر ارائه شده و در توافق با نتایج دیگران است[٥]. برای یک سیستم دوبعدی که فقط تنش در راستای صفحه وجود دارد شده و در توافق با نتایج دیگران است[٥]. برای یک سیستم دوبعدی که فقط تنش در راستای صفحه وجود دارد  $\tau_{xz} = \tau_{yz} = \sigma_z = 0$  است که در آن، در نمادگذاری ویگت<sup>۱</sup>، S ماتریس تطابق<sup>۲</sup>،  $\epsilon_i \in \sigma_i$  کرنش (تنش) تک محوری در راستای i و  $\gamma_{ij}$  ( $\tau_{ij}$ ) کرنش (تنش) برشی درصفحه ij است.

Voigt

چکیدہ



شکل ۱: a) ساختار اتمی b LNS) نقاط قرمز رنگ انرژی بر حسب کرنش و خطوط زرد رنگ نمودار برازش آنها به معادله انرژی است.

$$E_s = E(\epsilon) - E_0 = \frac{A_0 t_0}{2} \left( C_{11} \epsilon_x^2 + C_{22} \epsilon_y^2 + 2C_{12} \epsilon_x \epsilon_y \right)$$



شکل ۲: ۵) تنش بر حسب کرنش و ساختار اتمی نانولایه قبل و بعد از کرنش بحرانی b) کرنش در راستای (x) بر حسب کرنش در راستای (y) در شکل c) (x ننش بر حسب کرنش نشان داده شده است. با توجه به شکل با افزایش کرنش، تنش وارد به سیستم افزایش پیدا می کند تا جایی که در یک کرنش مشخص تنش شروع به افت می کند. این نقطه کرنش بحرانی و تنش متناظر با آن قدرت ایده آل<sup>7</sup> نام دارد]۱۰[. بعد از کرنش مشخص تنش شروع به افت می کند. این نقطه کرنش بحرانی و تنش متناظر با آن شده است از ساختار اولیه به ساختاری با گروه فضایی متفاوت )در اینجا آناتاس )0](۲۰۱[( که انرژی آن در کرنش بحرانی کمتر از انرژی ساختار اولیه است گذار می کند. قدرت ایده آل بیشترین تنشی است که می توان به سیستم اعمال کرد بدون آنکه ساختار اتمی آن تغییر کند. هرچند که مدول یانگ در راستای y حدود 3/۱ برابر بیشتر از راستای x است ولی با توجه به شکل ۲)۵( کرنش بحرانی در راستای y کمتر است همچنین قدرت ایده آل در راستای y کمتر از راستای x است ولی با توجه بنابراین راستایی که در آن ماده سخت تر است ) مدول یانگ در راستای y حدود 3/۱ برابر بیشتر از راستای x است. شود. شبیه این رفتار برای فسفرین نیز در مرجع ]۱۰[ گزارش شده است.

- [1] Mor, G. K., Shankar, K., Paulose, M., Varghese, O. K., and Grimes, C. A. Nano Lett., **5** (2005) 191
- [<sup>Y</sup>] Wang, L. and Sasaki, T. Chem. Rev., **114** (2014) 9455.
- [<sup>w</sup>] H. Liu, A. T. Neal, Z. Zhu, Z. Luo, X. Xu, D. Tománek, and P.D. Ye, ACS Nano 8, 4033 (2014). 18
- [<sup>\*</sup>] V. Blum, R. Gehrke, F. Hanke, P. Havu, V. Havu, X. Ren, Comput. Phys. Commun, 180 (2009) 2175.
- [<sup>4</sup>]H.A. Eivari, S.A. Ghasemi, H. Tahmasbi, S. Rostami, S. Faraji, R. Rasoulkhani, S. Goedecker, M. Amsler, Chem. Mater.29 (20) (2017) 8594
- [<sup>7</sup>] J. F. Nye, Physical Properties of Crystals (Clarendon, Oxford, 1985).

[<sup>V</sup>] A. Gomez, M. Poot, G. A. Steele, H. S. Zant, N. Agraït, and G. R. Bollinger, Adv. Mater. 24 (2012) 772
[<sup>A</sup>] L. Song, L. Ci, H. Lu, P. B. Sorokin, C. Jin, J. Ni, A. G. Kvashnin, D. G. Kvashnin, J. Lou, B. Yakobson, and P. M. Ajayan, Nano Lett. 10 (2010) 3209.

[<sup>9</sup>]Elahi, M.; Khaliji, K.; Tabatabaei, S. M.; Pourfath, M.; Asgari, R., Phys. Rev. B 91 (2015,) 115412.
[<sup>1</sup>·] Q. Wei and X. Peng, Appl. Phys. Lett. 104 (2014) 251915.