

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

رقم الترتيب .....  
رقم  
التسلسلي .....

كلية الرياضيات وعلوم المادة

\*\*\*\*\*

قسم الفيزياء



مذكرة

ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

فرع: فيزياء

تخصص: فيزياء المواد

من إعداد: حمدون خولة

بغنوان:

المواد ثنائية البعد : دراسة الفونونات للجرافين  
بمحاكاة الديناميكا الجزيئية

نوقشت يوم: 11 / 06 / 2018

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

رئيسا	جامعة ورقلة	أستاذ محاضر أ	د. معرف ياسين
ممتحنا	جامعة ورقلة	أستاذ مساعد أ	أ. لمقدم سومية
مشرفا	جامعة ورقلة	أستاذ محاضر أ	د. بابا حني أم الخير

الموسم الجامعي 2017/2018

# الإهداء



إلهي لا يطيب العيش إلا بشكرك ، ولا يطيب النهار إلا بطاعتك ، ،

ولا تطيب اللحظات إلا بذكرك، ولا تطيب الآخرة إلا بعفوك، ولا تطيب الجنة إلا برويتك "الله جل جلاله".

إلى من بلغ الرسالة وأدى الأمانة، ونصح الأمة، إلى نبي الرحمة ونور العالمين "سيدنا محمد (صلى الله عليه وسلم)".

إلى من كلله الله بالهيبة ولوقار، إلى من علمني العطاء دون انتظار، إلى من أحمل اسمه بكل افتخار

أرجو من الله أن يمد في عمرك لترى ثمارا قد حان قطفها بعد طول انتظار،

وستبقى كلماتك نجوم أهتدي بها اليوم وفي الغد وإلى الأبد "والدي العزيز".

إلى ملاكي في الحياة ، إلى معنى الحب و الصدق والحنان ، إلى نسمة الحياة وسر الوجود

إلى من كان دعائها سر نجاحي وكلامها بلسم جراحي، إلى أعلى الحبايب "أمي الحبيبة". أطل الله في عمرها.

إلى من معهم سعدت وبرفقتهم في دروب الحياة الحلوة والحزينة سيرت إلى من كانوا معي على طريق النجاح والخير الى

إنسي في هذه الحياة "سهيلة، أسحاق ، سفيان، حميدة ، عباس ، سهام ، هندة ، فضيلة ، لياس ، أسامة ، وسام "

إلى كل افراد أقاربي فردا فردا خاصة بنات عمي الرائعين مريم و نادية .

إلى أستاذتي بابا حني أم الخير

إلى كل زملاء في مخبر فيزياء الاشعاع والبلازما (نوال ، فلة ، سايحية ، سعيدة، هاجر ام كلثوم )

إلى كل زملائي واصدقائي دفعة فيزياء 2013



# التشكرات

---

الحمد لله الذي هدانا وما كنا لنهتدي لولا أن هدانا الله.

أشكر المولى القدير ذي الجودي والفضل الكبير على توفيقه لي لتمام هذا العمل.

أتقدم بجزيل الشكر والعرفان لكل من ساهم في أعداد هذه المذكرة وخصوصاً بذكر:

لأستاذة "بابا حني أم الخير" أستاذة محاضرة بجامعة قاصدي مباح على كل الجهود التي بذلتها، و نصائح السامية التي

قدمتها لي خلال مسيرتي في إنجاز هذه المذكرة.

"معريف ياسين" أستاذ محاضر بجامعة ورقلة رئيس لجنة المناقشة.

لمقدم سومية" أستاذة مساعدة بجامعة ورقلة التي شرفاتي بقبولها بمناقشة هذه المذكرة.

"خلفاوي فتحي" أستاذ تعليم عالي على مساعدته بنصائحه وتوجيهاته وتذليله لي للعديد من صعوبات.

كما أشكر كل أعضاء فريق البحث بمخبر لأشعاع والبلازما وفيزياء السطوح بقسم الفيزياء بجامعة قاصدي مباح ورقلة.

فهرس المحتويات

i	الإهداء
ii	التشكرات
iii	فهرس المحتويات
v	فهرس الاشكال
vii	فهرس الجداول
viii	المقدمة العامة

الفصل الأول: عموميات حول الجرافين والمواد ثنائية البعد

3	المقدمة
3	I. التعريف الفيزيائي لحالات المادة
3	I. 1. الحالة الصلبة للمادة وخصائصها الحرارية
4	I.1.1. التمدد الحراري
4	- التمدد الحجمي
4	- التمدد الطولي
5	I.2.1. الناقلية الحرارية
5	I.3.1. السعة الحرارية
6	- نموذج أنشتاين لسعة الحرارة
6	- نموذج دوبراي لسعة الحرارة
7	I.2. تعريف الفونونات
7	I.3. أنواع الشبكات البلورية
7	I.3.1. الشبكات البلورية الخطية أحادية البعد

7	2.3.I. الشبكات البلورية ثلاثية البعد
8	3.3.I. الشبكات البلورية ثنائية البعد
8	II المواد ثنائية البعد
8	1- تعريفها
9	2- بنيتها العامة
9	3- بنيتها البلورية
9	4- البنية الإلكترونية
10	III تصنيفات المواد ثنائية البعد
10	1.1.III. أمثلة عن أبعاد وبنية و خصائص وتطبيقات D2
13	2.1.III. خواص الحرارية والضوئية ولكهربائية لل D2
13	2.III. طرق إنتاج الجرافين والمواد D2
13	1.2.III نمو على السطح المعدنية
13	- نمو الجرافين على طبقات السيليكون
14	- نمو السيليسن على طبقة الفضة Ag
14	- نمو الجرمانيوم على طبقات الذهب Au
14	2.1.III طرق أخرى لإنتاج المواد ثنائية البعد
15	- 2.2.III إنتاج h-BN انطلاقا من MOS(111)
15	2.3.III إنتاج الجرافين بتقنية التششير الميكرو ميكانيكية
15	- 4.III تحويل أكسيد الجرافين
16	IV. تطبيقات المواد ثنائية البعد D2

### الفصل الثاني: المحاكاة بطريقة الديناميكا الجزيئية

20	مقدمة
20	I. الوصف الفيزيائي لخلية المحاكاة
21	II. الظاهرة الفيزيائية

21	1- طاقة التفاعل بين أي ذرتين مفصولتين $i$ و $k$ بمسافة $r_{k,i}$
22	2- القوة التي تطبقها الذرة $k$ على الذرة $i$
18	III. النموذج الرياضي
23	1- معادلات خوارزمية فيرلي
23	2- الوضعيات الابتدائية
23	3- السرعات الابتدائية
23	4- الشروط الحدية السورية
23	IV. مخطط المحاكاة
24	V. مخطط سير البرنامج

### الفصل الثالث: النتائج ومناقشتها

26	مقدمة
26	I.1. مواضع الابتدائية
26	I-2. مواضع بعض الذرات في خلية المحاكاة وذراتها المجاورة
29	II.1.1. مراقبة تغيرات مواضع بعض الذرات خلال زمنية مختلفة وفق المحورين $OY$ و $OX$
30	II.2. تغيرات سرعة بعض الذرات في بدلالة الزمن
31	II.3. تغيرات المسافة بين الذرات بدلالة الزمن
31	III.1. تغيرات التسارع بدلالة الزمن لترتين 50 و 150
32	III.2. تغيرات درجة الحرارة لنظام بدلالة الزمن

### فهرس الاشكال

3	الشكل I . 1. مخطط تحول الطور
5	الشكل I . 2. كيفية انتقال الحرارة
7	الشكل I . 3. اهتزاز الذرات حول موضع اتزانها

8	الشكل I. 4 . شبكة خطية أحادية البعد
8	الشكل I. 5. الشبكة البلورية ثلاثية البعد
8	الشكل I. 6. شبكة ثنائية البعد
9	الشكل I. 7. البنية العامة للمواد ثنائية البعد 2D
9	الشكل I. 8. البنية البلورية للمواد ثنائية البعد 2D
10	الشكل I. 9. البنية الإلكترونية للمواد ثنائية البعد 2D
11	الشكل I. 10. تصنيفات المواد ثنائية البعد 2D
12	شكل I. 11. شكل خلية وبنية و إبعاد بعض المواد 2D
14	الشكل I. 12. تشكيل الجرافين على طبقة السيليكون
14	الشكل I. 13. تشكيل السيليسن على طبقة الفضة
15	الشكل I. 14. نمو الجرمانيين على طبقة الذهب
15	الشكل I. 15. لعملية توليف h-BN على ركيزة من MgO (111)
16	الشكل I. 16. تقنية التقشير المايكروميكانيكية
16	الشكل I. 17. تحول الأكسيد إلى جرافين
16	الشكل I. 18. تحول الأكسيد إلى جرافين
18	الشكل I. 19. مخطط Varlets
17	الشكل II. 1. يمثل كيون Lennard et Jones
19	الشكل II. 2. المواضع الابتدائية لذرات في خلية المحاكاة
19	الشكل II. 3. إبعاد الخلية الأولية الواحدة من خلية المدرسة
20	الشكل II. 4. يمثل رسم تخطيطي للشروط الحدودية في بعدين
21	الشكل II. 5. مخطط البرنامج

## الفهرس

- 26 الشكل III.1. المواضع الابتدائية لذرات خلية المحاكاة
- 29 الشكل III.2. تغيرات مواضع الذرة رقم 150 بدلالة الزمن وفق المحورين OY وOX
- 29 الشكل III.3. تغيرات مواضع الذرة رقم 151 في خلية المحاكاة بدلالة الزمن وفق المحورين OY وOX
- 30 الشكل III.4. إزاحة مستعرضة بعد 60s لكل ذرة من ذرات على المحور OY و OX
- 30 الشكل III.5. سرعة كلا من الذرات 50 ، 70 ، 150 وفق المحورين OX وOY
- 30 الشكل III.6. منحنى وشكل تغيرات المسافة بين الذرات بدلالة الزمن
- 31 الشكل III.7. تغيرات التسارع لذرتين 50 و 150 بدلالة
- 31 الشكل III.8. المنحنى تغيرات درجة الحرارة لنظام بدلالة الزمن

## فهرس الجداول

- 13 الجدول I.1. ثوابت خاصة ببعض المواد 2D
- 27 الجدول III.1. المواضع الابتدائية لبعض ذرات خلية المحاكاة
- 27 الجدول III.2. مواضع الابتدائية لذرات 1، 20، 50، 100 وذراتها المجاور
- 28 الجدول III.3. المسافة بين الذرات 20، 50، 100 المركزية والذرات المجاورة لها



# المقدمة العامة

## مقدمة عامة

تلعب فيزياء المواد دورا مهما في تطبيقات التكنولوجيا الحديثة. تطور هذا الدور في كثير من المجالات نذكر منها البيو فيزياء والتطبيقات الطبية وعلم سطوح المواد. المواد ثنائية البعد 2D مواد اكتشفت حديثا بعد اكتشاف مادة الجرافين 2004 م. تسمى بشيبيات الجرافين. زاد الاهتمام بهذه المواد في السنوات الأخيرة بدافع بنيتها الهيكلية التي تمنحها خصائص مميزة.

الهدف من هذا العمل هو دراسة فونونات احدى هذه المواد واخترنا في هذه الدراسة مادة الجرافين. نستعمل طريقة المحاكاة بالديناميكا الجزيئية. ينقسم هذا العمل الى ثلاث فصول.

✓ الفصل الأول نتطرق فيه الى دراسة عامة للخصائص الحرارية للمواد الصلبة و الفونونات التي تلعب دورا مهما في تحديد هذه الخواص. نتطرق ايضا الى التعريف بالمواد ثنائية البعد 2D و التعريف ببنيتها وخصائصها. نتطرق الى بعض طرق انتاجها و بعض تطبيقاتها.

✓ الفصل الثاني نتطرق فيه الى شرح خطوات البحث. نعرف الظاهرة المدروسة (اهتزازات الذرات في المواد الصلبة) ونعرض طريقة المحاكاة بالديناميكا الجزيئية وخوارزمية Verlet الكمون المستعمل في المحاكاة هو كمون (لينارد - جونس) الذي يصف التفاعل بين الذرات. في الاخير نضع مخطط سير الحساب لبرنامجنا .

✓ الفصل الثالث نقوم فيه بعرض النتائج المتحصل عليها و مناقشتها و استخلاص نمط الاهتزاز في فونونات الجرافين.

## الفصل الأول

عموميات حول الجرافين  
والمواد ثنائية البعد

## الفصل الأول

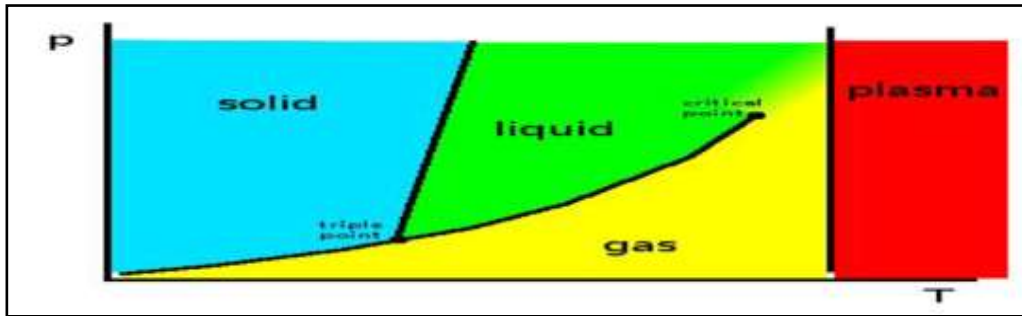
### عموميات حول الجرافين والمواد ثنائية البعد

#### المقدمة

المواد ثنائية البعد هي مواد اكتشفت حديثاً لها أهمية قصوى في ميدان الإلكترونيات الدقيقة والحديثة. من الضروري معرفتها ودراسة خصائصها من أجل استخدامها في مختلف تطبيقات التكنولوجيا الحديثة. هذه التطبيقات الحديثة تتطلب مواد ذات جودة عالية وخصائص محددة. ظهرت المواد ثنائية البعد منذ اكتشاف الجرافين عام 2004م من طرف العالمين كوستيا نوفوسيلوف (Kostya Novoselov) و اندري جيم (Andre Geim). كان لاكتشاف الجرافين الفضل في اكتشاف هذه المواد التي تسمى بأشباه الجرافين. بعض هذه المواد تتكون من نوع واحد من الذرات مثل (Silicéne, Graphéné, ...) و بعضها الآخر يتكون من نوعين من الذرات أو أكثر مثل (h-BN) و (MoS<sub>2</sub>). تم التنبؤ بحوالي 700 مادة مستقرة ثنائية البعد، والعديد منها في طور البحث. هذه المواد لها تقريبا نفس البنية الهيكلية وتتشابه في بعض الخصائص المميزة. يمكن دمج هذه المواد في تطبيقات مختلفة كالهوائيات النقالة المرنة (في طور البحث)، في وسائل المواصلات و تصفية المياه...، في هذا الفصل نقدم لمحة عامة عن هذه المواد كم نبرز أهميتها وخصائصها الحرارية.

#### I. التعريف الفيزيائي لحالات المادة

تُعرف حالة المادة بكونها الخاصية الفيزيائية التي تتمتع بها المادة. تختلف حالة المادة باختلاف قوى التماسك بين ذراتها، وطريقة حركتها وانتقالها. توجد في الطبيعة أربع حالات من المادة تختلف عن بعضها البعض باختلاف خواصها وأشكالها وكثافتها والطاقة الحركية التي تمتلكها [1-2]. يمكن للمادة أن تنتقل من طور إلى آخر وفق المخطط الموضح في الشكل (I-1)



الشكل I . 1: مخطط تحول الطور للمادة [1]

#### 1.I. الحالة الصلبة للمادة و خصائصها الحرارية

هي الحالة التي تمتاز فيها المادة بامتلاكها أبعاداً أحادية أو ثنائية أو ثلاثية وشكل وحجم ثابت مضاد أو مقاوم للتغير، ويعود ذلك إلى امتلاكها عدداً من الخصائص الخاصة بها [1-2]. و تتمثل أبرزها في :

- تتحرك ذراتها حركة اهتزازية بشكل جماعي أي غير مستقر حول مواضع اتزانها تعرف هذه العملية بالفونونات. هذه الأخيرة هي المسؤولة عن تغير الخصائص الحرارية (الناقلية الحرارية، السعة الحرارية وتمدد الحراري) للجسم الصلب .

### 1.1.1.I. الخصائص الحرارية للجسم الصلب

1.1.1.I. **التمدد الحراري:** التمدد ينتج عادة جراء الزيادة في درجة الحرارة فعندما تزداد درجة الحرارة تتمدد المواد وتتقلص أو تنضغط عند انخفاضها

[2]. يمكن للتمدد ان يكون طوليا او حجميا.

- **التمدد الحجمي:** يحدث هذا التمدد عندما تزايد درجة الحرارة وتعطى عبارته بالعلاقة التالية [3].

$$\beta = (\Delta V / V_i) / \Delta T \quad (1 - I)$$

$$\Delta V = \beta \cdot \Delta T \cdot V_i \quad (2 - I)$$

$$V_f - V_i = \beta (T_f - T_i) V_i \quad (3 - I)$$

حيث :

$\beta$ : معامل التمدد الحجمي الخطي (1/K)

$T_i$ : درجة الحرارة الابتدائية (K)

$T_f$ : درجة الحرارة النهائية (K)

$\Delta V$ : معدل التغير في الحجم ( $m^3$ )

$V_i$ : الحجم الابتدائي ( $m^3$ )

$V_f$ : الحجم النهائي ( $m^3$ )

- **التمدد الطولي:** تمدد المادة طوليا وفق العلاقة الرياضية التالية [3].

$$\alpha = (\Delta L / L_i) / \Delta T \quad (4 - I)$$

$$\Delta L = \alpha \cdot \Delta T \cdot L_i \quad (5 - I)$$

$$L_f - L_i = \alpha (T_f - T_i) L_i \quad (6 - I)$$

حيث:

$\alpha$ : معامل التمدد الطولي (1/K)

$T_i$ : درجة الحرارة الابتدائية (K)

$T_f$ : درجة الحرارة النهائية (K)

$\Delta L$ : معدل التغير في أطول ( $m$ )

$L_i$ : الطول الابتدائي ( $m$ )

$L_f$ : الطول النهائي ( $m$ )

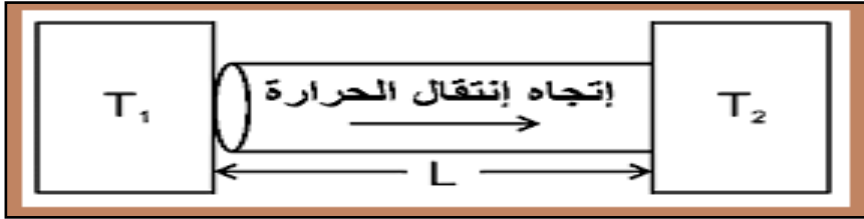
تعطى العلاقة بين معامل التمدد الطولي والحجمي [2]. كالتالي:

$$\beta = 3\alpha \quad (7-I)$$

و يتوقف التمدد الطولي و الحجمي على الإبعاد الاصلية للجسم، مقدار الإرتفاع في درجة حرارة الجسم و نوع مادة الجسم.

### 2.1.1.1. الناقلية الحرارية

يحدث التوصيل الحراري عندما يكون هناك فرق في درجة الحرارة. تنتقل الحرارة في جسم ما عن طريق اهتزاز جزيئاته حول مواضعها الأصلية دون حدوث اية حركة لإنسحابيه لتلك الجزيئات. عندما تسخن قطعة معدنية نلاحظ أن الحرارة تنتقل إلى الطرف الأخر منها خلال فترة زمنية قصيرة. يعود السبب إلى أن جزيئات الطرف الساخن تكتسب طاقة حركية تؤدي إلى زيادة سعة وسرعة الحركة الإهتزازية لتلك الجزيئات. تصطدم هذه الجزيئات بجاراتها التي تهتز بسرعة أقل منها فتنتقل إليها بعض طاقتها الحركية وهكذا تنتقل الطاقة بالتوالي من جزيئ إلى آخر مجاور. الشكل (2-I) يوضح كيفية انتقال الحرارة [1].



الشكل I . 2: كيفية انتقال الحرارة [1].

وجد عمليا إن معدل الجريان الحراري خلال المادة يعتمد على شكل وحجم المادة. ويتناسب طرديا مع الفرق في درجة حرارة نهايتها وفق العلاقة الرياضية التالية [1]:

$$H = (\Delta Q / \Delta T) = (K \cdot A \cdot (T_1 - T_2)) / L \quad (8-I)$$

حيث A: مساحة سطح الجسم

L: المسافة بين نهايتي الجسم

K: ثابت التوصيل الحراري للمادة ووحدته هي  $W.K^{-1}.m^{-1}$

### 1.3-1.1. السعة الحرارية

تعتبر كمية الحرارة Q من الكميات الفيزيائية المهمة في مجال علم المواد والديناميكا الحرارية إذا ما تم تعيينها وقياسها تحت ضغط ثابت P وتعرف بالإنجليزي H [2]:

$$(dQ)_p = dH \quad (9 - I)$$

أما إذا تم قياسها تحت حجم ثابت فتعرف بالطاقة الداخلية

$$(dQ)_v = dE_p \quad (10 - I)$$

إن السعة الحرارية هي تغير كمية الحرارة تغير درجة الحرارة وتعطى بالعلاقات التالية :

تحت ضغط ثابت:

$$(dQ/dT)_p = (dH/dT)_v = C_p \quad (11 - I)$$

تحت حجم ثابت:

$$(dQ/dT)_v = (dE/dT) = C_v \quad (12 - I)$$

**نموذج أنشتاين للسعة الحرارية:** تتكون المادة الصلبة في العادة من بلورات تتخذ فيها الذرات أماكن في الشبكة البلورية. أفترض

أينشتاين أن الاهتزازات التي تقوم بها الذرات تكون ذات طاقة كمومية معينة تلك الطاقة الكمومية تسمى فونونات . وعلى هذا الأساس يمكن أن توصف المادة الصلبة بأنها تحتوي على عدد  $N$  من الهزازات التوافقية يهتز كل منها في اتجاهات حسب إيعادا المادة إذا كانت أحادية أو ثنائية أو ثلاثية البعد ولا تعتمد على بعضها البعض [2-3] .

وتعطى عبارة السعة الحرارية [4]. وفق هذا النموذج بالعلاقة التالية:

$$C_v = 3.N.K_B . (\theta_E/T)^2 \exp(-\theta_E / T) \quad (13 - I)$$

حيث:

$T$ : درجة الحرارة

$\theta_E$ : درجة حرارة أنشتاين

$N$ : عدد الذرات

$K_B$ : ثابت بولتزمان

### نموذج دوباي للسعة الحرارية

هذا النموذج مبني على فكرة حساب اهتزازات الذرات في الشبكة البلورية (والتي هي جزء من الحرارة الداخلية) ومعاملتها كفونونات. هذا بعكس نموذج أينشتاين الذي يعتبر أن المادة الصلبة مكونة من ذرات منفردة لا تؤثر على بعضها البعض وبالتالي لا تتأثر اهتزازاتها باهتزازات الذرات الأخرى [2, 4].

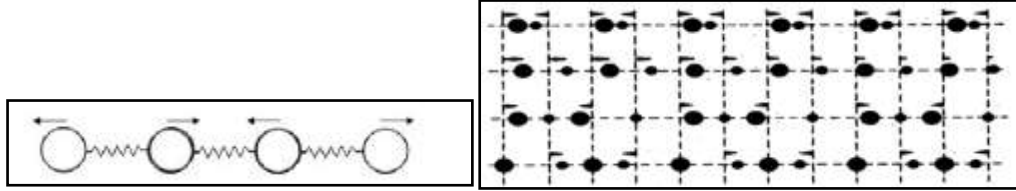
السعة الحرارية حسب هذا النموذج تعطى بالعلاقة :

$$C_v = (dE/dT) = 12 \pi^4 N K_B / 5 \theta_D \quad (14 - I)$$

## 2.I تعريف الفونونات (Phonons)

تهتز ذرات أي مادة صلبة عند أي درجة حرارة محددة حول موضع اتزان خاص، وقد تمثل هذه الإهتزازات بموجات تعرف بالموجات الشبكية تظهر في الذرات على هيئة إزاحات تلقائية متكررة قد تكون طولية أو مستعرضة و تتميز بطول موجي  $\lambda$  و عدد موجي  $k = 2\pi/\lambda$  وسرعة انتشار  $V$  وتردد خطي  $\nu$  وتردد زاوي  $\omega$ . كما تعتبر طاقة ذبذبات الشبكية طاقة مكلمة.

عادة ما يمثل انتقال إزاحة موجية في مادة صلبة بانتقال فونون واحد أو أكثر يحمل طاقة قدرها  $\hbar\omega = \hbar\nu$  وكمية حركة  $\hbar k$  وعلى ذلك فان الذبذبات الحرارية هي في الحقيقة فونونات مستثارة حرارياً والتوصيل الحراري في الجوامد العازلة يعزى في الحقيقة إلى حركة هذه الفونونات. تقدر طاقة الفونون الواحد بالقيمة  $0.1\text{eV}$  [5].



الشكل 3.I: أهتزاز الذرات حول مواضع اتزانها [5]

## 3.I أنواع الشبكات البلورية

### 3.I.1 الشبكات البلورية الخطية أحادية البعد:

لها هيكل مرتب خطياً وهي عبارة عن عقد مرتبة بانتظام في بعد واحد (على خط مستقيم) يتحكم في ترتيبها متجهة الانتقال (انسحاب translation vector). يستفاد من هذه الشبكات للدراسات البسيطة والمبدئية لفهم الحالة الصلبة مثل ذبذبة الشبكات في حالة البعد الواحد [5]

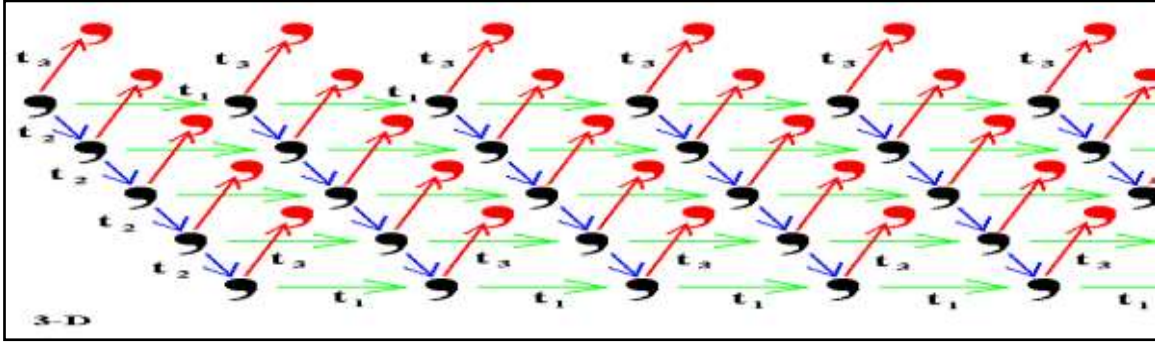


الشكل I . 4: شبكة خطية أحادية البعد [5]

### 3.I.2 الشبكات البلورية ثلاثية البعد :

لتشكيل الشبكة الفضائية ثلاثية البعد نضيف البعد الثالث للشبكة المستوية (ثنائية البعد) كما في الشكل التالي:





الشكل I. 5 : الشبكة البلورية ثلاثية البعد [5]

### 3.3.I الشبكات ثنائية البعد (Bravais lattices in two dimensions)

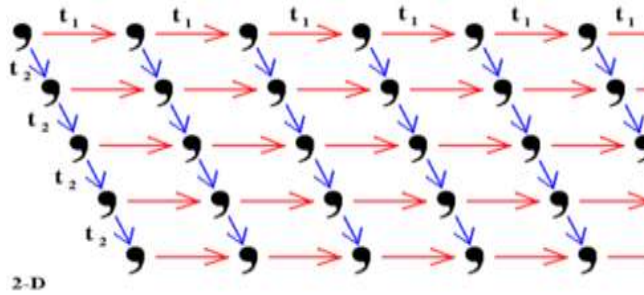
تكون في حالة بلورة بعدين. يمكن تخيل الشبكة الخطية بأنها أخذت متجه انتقال ثاني باتجاه اخر يصنع زاوية ما مع متجهة الإنسحاب الأول ونحصل عندها

على هيكل لترتيب منتظم بشكل خارطة ممتدة بواسطة متجهين [5]

- تكمن أهمية هذه الشبكات في فهم خواص السطوح الفيزيائية للأجسام الجامدة .

- فهم دراسة حيود الإشعة أكس على تلك السطوح بحيث نتمكن من تقدير المسافة بين العقد .

- خواص الأجسام الصلبة.



الشكل I. 6: شبكة ثنائية البعد [5]

## II. المواد ثنائية البعد 2D

### 1.II. تعريفها:

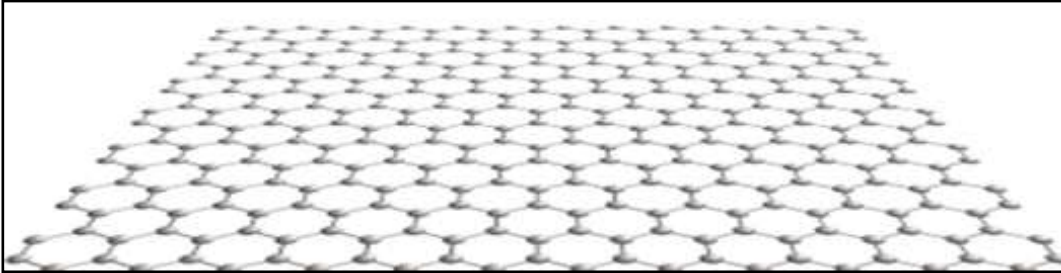
هي مواد بلورية تنتمي إلى فئة الشبكات البلورية ثنائية البعد يشار إليها أحيانا باسم المواد أحادية الطبقة. تتكون من طبقة واحدة من الذرات.

بدأ الاهتمام بها منذ عزل الجرافين عام 2004م وبذلت جهود حثيثة لعزل هذه المواد بسبب خصائصها المميزة [6].

## 2.II. بنية المواد ثنائية البعد

### 2.1. II. بنيتها العامة :

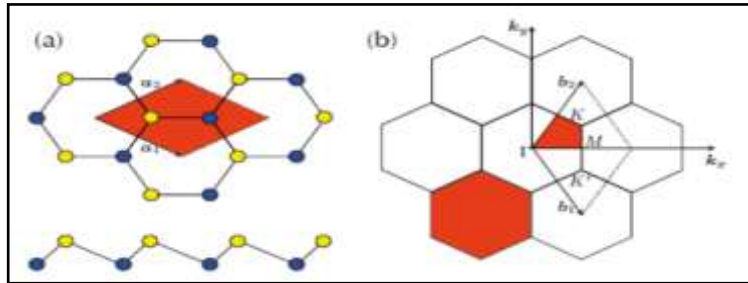
ترتب ذرات هذه المواد (ذات النمط التهجين  $sp^2$ ) في نمط سداسي منتظم ويختلف طول الرابطة بين ذرتين من مادة الى أخرى حسب نوع الذرات المشكلة لكل منها. تكون ذرات هذه المواد مترابطة بشكل كبير وهذا ما يكسبها خصائص مميزة [7]



الشكل (1-7): البنية العامة للمواد ثنائية البعد [8]2D

### 2-2-II. بنيتها البلورية :

هذه المواد ثنائي الإبعاد ذات بنية بلورية سداسية. تتألف من ذرات مترابطة وتظهر على شكل خلية نحل ترتبط ذراتها بروابط تساهمية. تحوي الخلية الواحدة لكل منها على صنفين من الذرات A و B. تبعدان عن بعضها البعض بمسافة a. تتألف الخلية من شبكتين ثلاثيتين متطابقتين [9].

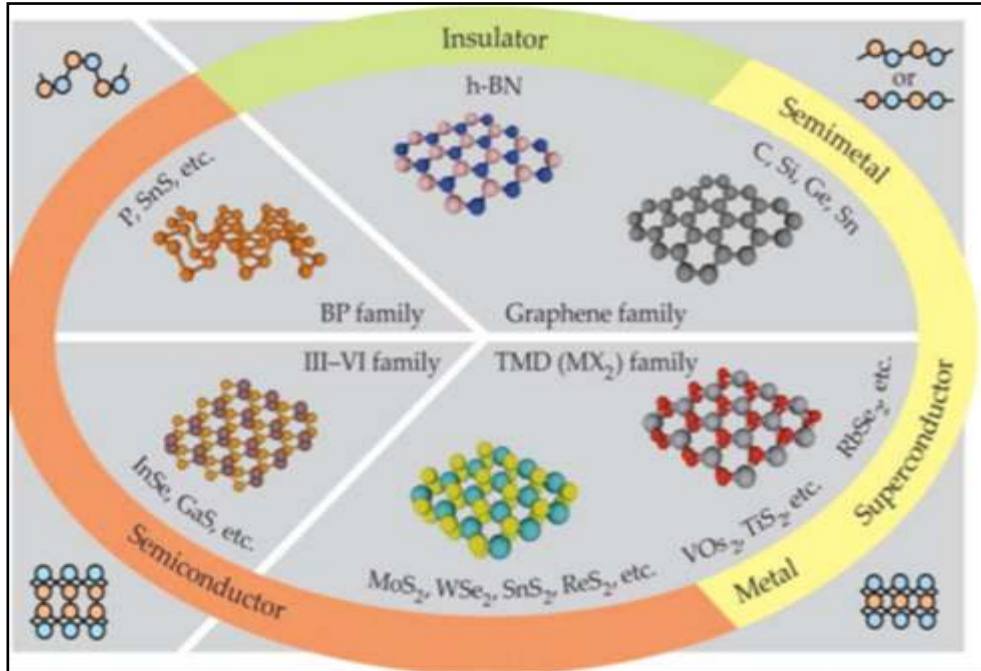


الشكل (1-8): البنية البلورية للمواد ثنائية البعد [10]2D

## 3.II. تصنيفات المواد ثنائية البعد 2D:

تم التنبؤ بحوالي 700 مادة ثنائية البعد كونها مستقرة والعديد منها لم يتم تصنيعها. تصنف حسب ذرات المشكلة لها منها مشكلة من نوع واحد من الذرات وهي عائلة المجموعة IV مثل الجرافين (Graphène) مشكل من ذرات C مثل السيليسن (Silicène) مشكل من ذرات Si والجرمانين (Germanène) مشكل من ذرات Ge..... الخ، ومنها من مشكلة من نوعين مختلفين من الذرات أو أكثر مثل عائلة العوازل مثل

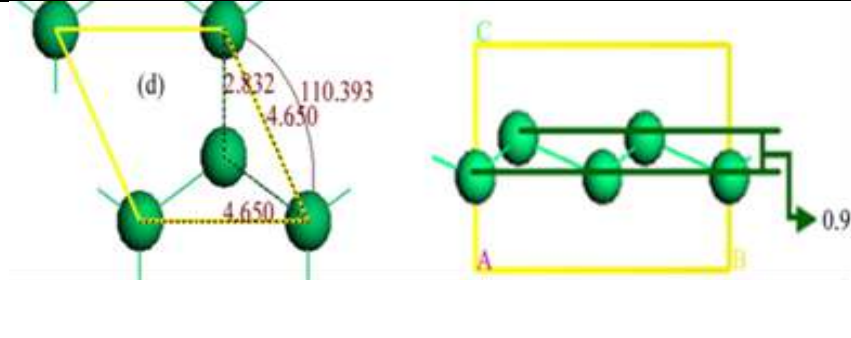
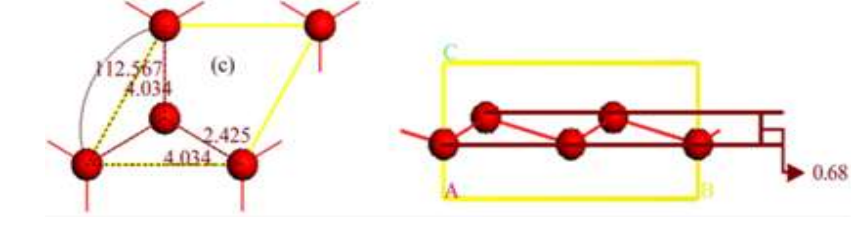
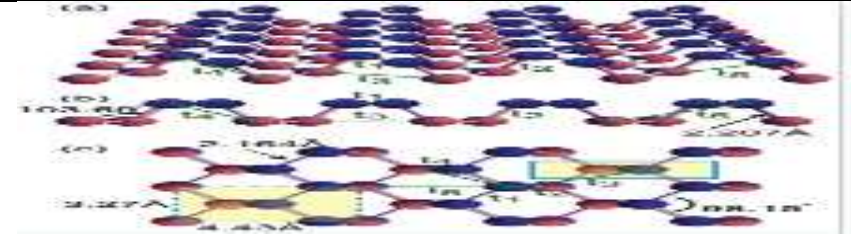
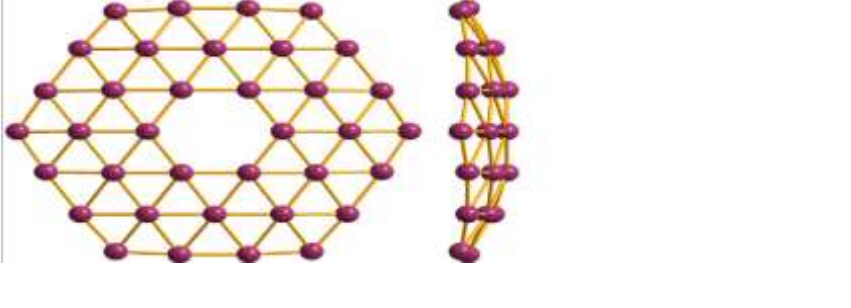
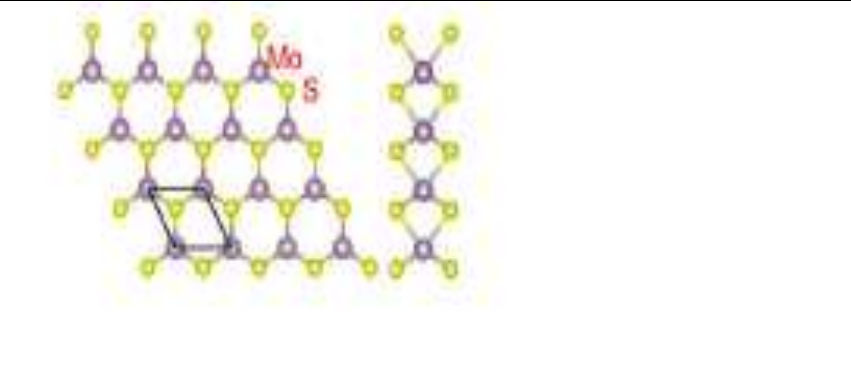
بورون النتريد (h-BN) متشكل من ذرات B و N وعائلة أنصاف النواقل و النواقل الفائقة... الخ والشكل الموالي يوضح مختلف تصنيفات المواد ثنائية البعد.

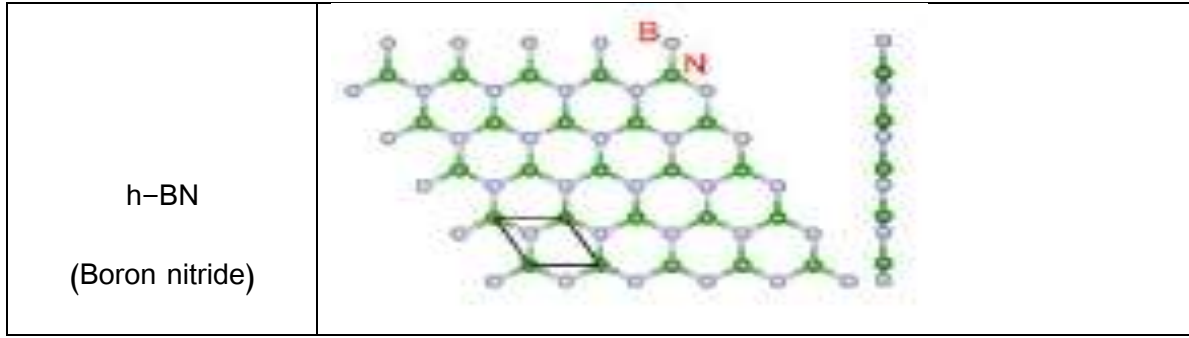


الشكل I. 10: تصنيفات المواد ثنائية البعد 2D [12]

III. أمثلة عن إبعاد وبنية وخصائص وتطبيقات بعض المواد ثنائية البعد

الذرة المشكلة لكل مادة	شكل الخلية و ابعادها
C (Graphène)	
Si (Silicéce)	

<p>Sn (Stanéne)</p>	 <p>(d) 2.832 110.393 4.650 4.650</p> <p>0.9</p>
<p>Ge (Germanéne)</p>	 <p>(c) 112.567 4.034 2.425 4.034</p> <p>0.68</p>
<p>Phosphorene</p>	 <p>(a) 3.36 3.20 3.20 102.96 102.96 102.96</p> <p>(b) 2.164 2.164 2.164 109.47 109.47 109.47</p> <p>(c) 2.164 2.164 2.164 109.47 109.47 109.47</p>
<p>Borophéne</p>	
<p>MoS<sub>2</sub></p>	 <p>Mo S</p>



شكل I . 11 : شكل خلية وبنية و ابعاد بعض المواد 2D [13.6]

	$\alpha(A^\circ)$	$h(A^\circ)$	$d(A^\circ)$	$\theta^\circ$	$M(kg)$	$Y_{2D}(N/m)$	$W_m(cm^{-1})$	$\theta_D(K)$
C	2.45	/	1.41	120	12.01	34.19	1599	2539
Si	3.86	0.41	2.82	116.3	28.09	62.8	554	680
Ge	4.06	0.69	2.44	112.3	72.64	43.5	286	352
Sn	4.67	0.85	2.83	111.3	118.71	23.5	182	198
h-BN	2.52	/	1.44	/	24.82	27.1118	271	/
MOS2	3.16	/	/	/	.12715	118	/	/

الجدول I . 12 : ثوابت خاصة ببعض المواد [17-14].

حيث :

- $\alpha(A^\circ)$ : ثابت الخلية
- $h(A^\circ)$ : ارتفاع عن الاستواء
- $d(A^\circ)$ : اقرب مسافة بين ذرتين
- $\theta^\circ$ : الزاوية بين ذرتين A و B
- $M(kg)$ : الكتلة المتوسطة
- $Y_{2D}(N/m)$ : ثابت المرونة
- $W_m(cm^{-1})$ : التردد
- $\theta_D(K)$ : درجة حرارة دوباي

### III. 1. الخواص الحرارية والكهربائية والضوئية لعناصر المجموعة IV وبعض المواد 2D

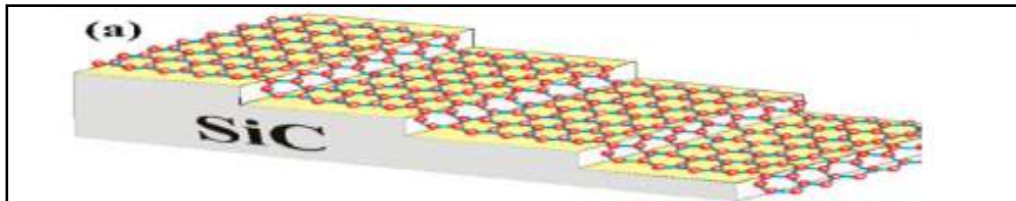
- 1- الناقلية الحرارية: للجرافين تتراوح ما بين  $(W/m.K)$  3000 الى  $(W/m.K)$  5000 للسيليسن تقدر ب  $9.4 w/m.K$  و للجرمانين  $2.7 W/m.K$  و للستائين  $15.8 W/m.K$  [15]. الناقلية الحرارية ل h-NB تقدر تتراوح ما بين  $100 W/m.K$  إلى  $270 W/m.K$  [18].
- 2- السعة الحرارية: للجرافين تقدر  $C = 2500 J/Kg.K$  [19].
- 3- درجة حرارة دوباي: للجرافين تقدر  $\theta_D=1599 K$  و للسيليسن تقدر  $\theta_D=680 K$  و للجرمانين  $\theta_D=352 K$  و للستائين  $\theta_D=198 K$  [15].
- 4- الناقلية الكهربائية: للجرافين تعادل  $7200 S/m$  [5].
- 5- حركة الإلكترونات والثقوب: للجرافين  $3.39 \cdot 10^5 cm^{-1}v^{-1}s^{-1}$  [20].
- 6- ثابت المرونة: لل MoS2 يقدر ب  $118 N/m$  [18] ثابت المرونة لبورون النتريد h- BN يقدر ب  $271 N/m$  [16].
- 7- سرعة فيرمي: للجرافين  $V_f = 1.01 \cdot 10^6 m.s^{-1}$  و للسيليسن  $V_f = 0.65 \cdot 10^6 m.s^{-1}$  و للجرمانين  $V_f = 0.62 \cdot 10^6 m.s^{-1}$  و الستائين  $V_f = 0.55 \cdot 10^6 m.s^{-1}$  [5].
- 8- القوة: للجرافين أقوى بجوالي 200 مرة من الفولاذ و من النحاس بجوالي 300 مرة [21].
- 9- شفافية ضوئية: للجرافين تقدر ب % 97.7 [22].
- 10- التمدد: الجرافين يتمدد نسبة % 20 زيادة عن طوله الأصلي [22].
- 11- الإستقرار الحراري: للسيليسن يصل إلى  $1500 K$  أي نسبة الإستقرار الحراري لهذه المادة تقدر % 30 [15].

### III. 2. طرق إنتاج الجرافين والمواد ثنائية البعد

#### III. 2. 1. النمو على السطح المعدنية مثل:

#### نمو الجرافين على طبقة السيليكون Si

هي من أكثر التقنيات المستعملة يتم فيها إنتاج الجرافين بكميات كبيرة ذات جودة عالية [11].



الشكل I . 12: تشكيل الجرافين على طبقة السيليكون [23].



### نمو السيليسن على طبقة الفضة Ag

- في المرحلة الأولى : طبقة من ذرات السيلكون فوق ركيزة من الفضة
- في المرحلة الثانية :تسخين السيلكون لبي غاية ان يبدأ بترسب فوق ركيزة الفضة
- المرحلة الثالثة :نحصل على ذرات السيلكون مرتبة ومتراصة على شكل خلية نحل مشكلة مادة السيليسن..

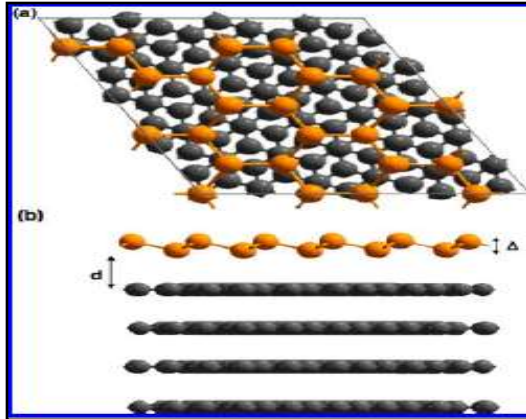


الشكل I . 13: تشكيل السيليسن على طبقة الفضة [5].

### نمو الجرمانيوم على طبقة من الذهب Au

نفس الطريقة والخطوات [24].

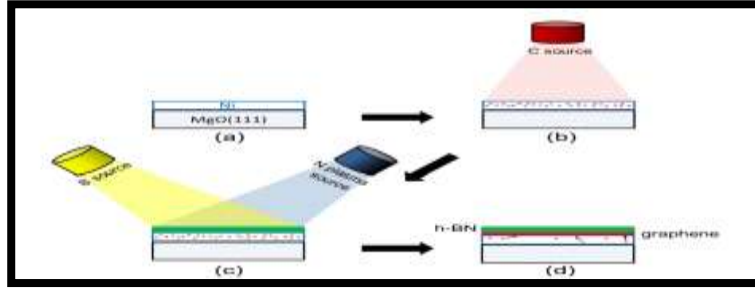
- في المرحلة الأولى : طبقة من ذرات الجرمانيوم فوق ركيزة من الذهب Au
- في المرحلة الثانية :تسخين الجرمانيوم الى غاية غاية ان يبدأ بترسب فوق ركيزة Au
- المرحلة الثالثة :نحصل على ذرات الجرمانيوم مرتبة ومتراصة على شكل خلية نحل مشكلة مادة الجرمانيوم .



الشكل I . 14: نمو الجرمانيوم على طبقة الذهب [24]

### 2.2.II طرق أخرى لإنتاج المواد 2D

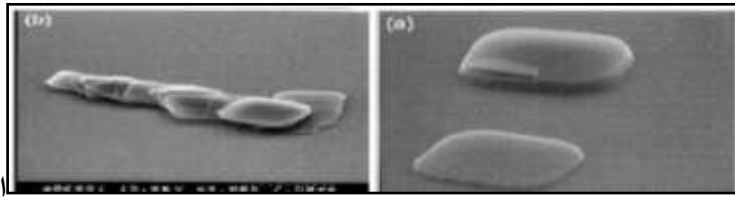
تشكل مادة h-BN على طبقة من MgO (111)



الشكل I. 15: توليف h-BN على ركيزة من MgO(111)

### - إنتاج الجرافين بتقنية التقشير الميكروميكانيكية (Exfoliation micromécanique):

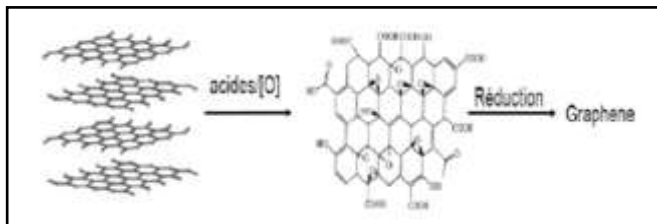
الجرافيت هو أحد المعادن الأرضية المتوفرة طبيعياً و التطبيق الأشهر للجرافيت هو الأقلام الرصاص و الجرافيت ما هو في الحقيقة إلا مجموعة من طبقات الجرافين التي يزلق بعضها فوق بعض لتحقيق ما نراه من خاصية الكتابة على الورق هي أبسط الطرق المستعملة يستعمل فيها الشريط اللاصق وهي لا تحتاج الى درجة حرارة عالية علاوة على ذلك يتم إنتاج الجرافين وذلك بكسر الروابط بين المستويات لأن القوة بين الذرات أكبر من القوة بين المستويات و الجرافيت مادة طبيعة واسعة الإنتشار وطبقات كمية الجرافين المنتجة بهذه التقنية عالية الجودة . ألا إن العيب في هذه التقنية هو أن الكمية المنتجة من الجرافين قليلة جدا [25].



لشكل I. 16: تقنية التقشير الميكروميكانيكية [25]

### - تحويل أكسيد الجرافين Réduction d'oxyde de Graphène:

أكسيد الجرافين هو مادة ثلاثية الأبعاد متناهية الصغر تتكون من ملايين طبقات الكربون المشتقة من أكسيد الجرافين والمعدلة من قبل عدد من مجموعات الأوكسجين بها يتميز أكسيد الجرافين بالاستقرار الكيميائي والذوبان وأحلال في تقنية تتميز بانخفاض كلفتها. ويوضح الشكل الموضح ادناه كيفية تحول أكسيد الجرافين [26].



الشكل I. 17: تحول الأوكسيد الى جرافين [26]



#### IV. تطبيقات المواد ثنائية البعد

يستفاد من المواد 2D في :

- 1- أحزمة التي تستلزم ناقلة كهربائية عالية [17]
- 2 الجرافين هو المادة الأولى ثنائية الأبعاد، ونظراً لما يتمتع به من خصائص مميزة نجد أن المواد الفائقة التي ستلبي احتياجات العصر ستكون مواد من رتبة النانومتر البلورية الهجينة ثنائية الأبعاد وأساسها الجرافين. [20].
- 3 ذات الخواص الإلكترونية والحرارية تستغل في مجال صناعة الإلكترونيات والتراستورات [18]
- 4 في مجال البيئة وتصفية المياه [19]
- 5 ذات الخواص الميكانيكية تستغل في صناعة مواد هجينة فائقة القوة يمكن تسخيرها في الصناعات الثقيلة [20]
- 6 تصنيع الخلايا الشمسية شراخ حاسوبية ضوئية عالية السرعة [20].
- 7 مادة لطلاء فهي مواد تحمي من التآكل [20].
- 8 يمكن استعمال مادة h-BN في صنع أنابيب نانوية لها العديد من الخصائص المميزة مثل المتانة والثباتية الكيميائية و الناقلة الحرارية [26]

#### V. المحاكاة العددية

##### 1.V. مفهوم المحاكاة :

اللغة: هي التقليد [27]

**اصطلاحاً:** هناك عدة تعاريف للمحاكاة يمكن تلخيص أهمها على النحو الآتي:

" المحاكاة العددية هي عبارة عن محاولة إيجاد صورة طبق الأصل من نظام أو نشاط دون أن نحاول الحصول على النظام الحقيقي نفسه". أو يمكن القول أنه "أسلوب رياضي يستلزم تنفيذه على الحاسب الإلكتروني لمعالجة المشاكل التي تتداخل فيها أنواع معينة من العلاقات الرياضية والمنطقية الضرورية لوصف سلوك أو هيئة نظام لعالم حقيقي معقد ولفترات زمنية طويلة [27]."

##### 2.V. طرق المحاكاة:

نحن نقوم بإجراء محاكاة على الحاسب بهدف فهم خصائص مكونات الجزيئات بالتعبير عن تركيبها والتفاعلات الميكروسكوبية بينها وهذا المحاكاة تكمل التجارب التقليدية وتعطينا المقدرة على تعلم شيئاً جديداً لا يمكن أجادها بالطرق الأخرى. وهناك طريقتان رئيسيتان للمحاكاة هما: طريقة تحديدية وهي طريقة الديناميكا الجزيئية وطريقة احتمالية وهي طريقة مونت كارلو وسنتناول هاتين الطريقتين بالشرح كالتالي:

- **طريقة مونت كارلو:** طريقة مونت كارلو هي طريقة لحل المشاكل المختلفة في الرياضيات الحاسوبية عن طريق بناء عملية

عشوائية لكل مشكلة تكون لها متغيرات تساوي الكميات المطلوبة في المشكلة. ويتم تحديد المجاهيل تقريبا عن طريق عمل ملاحظات على العملية العشوائية وحساب الخصائص الإحصائية والتي تتساوى تقريبا مع المتغيرات المطلوبة [28].

- **طريقة الديناميكا الجزيئية:** الديناميكا الجزيئية عبارة عن شكل من أشكال محاكاة الحاسوب حيث يسمح للذرات

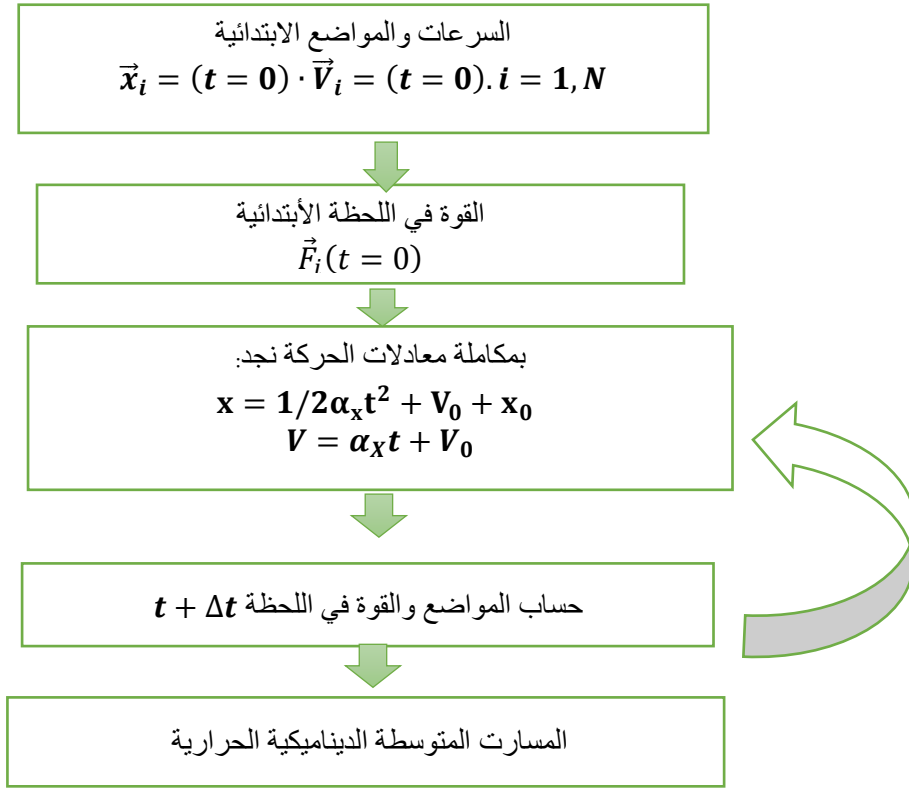
والجزيئات بالتفاعل لفترة زمنية في ظل قوانين الفيزياء ويتم تتبع التطور مع الزمن لمجموعة من الذرات المتفاعلة ومن ثم تكامل معادلات الحركة [29]. وتبنى طريقة محاكاة الديناميكا الجزيئية على القانون الثاني لنيوتن أو معادلة الحركة وحل هذه المعادلات نستعمل خوارزمية فيرلي [29].

### 3.V. خوارزمية فيرلي:

إن طريقة التحريك الجزيئي تعتمد على نتائج معادلات الحركة وتعتمد على نمط الوصف. تستعمل خوارزمية فيرلي. في لحظة وموضع وتسارع

جزيئي ما نستطيع معرفته بمكاملة معادلات نيوتن من اللحظة  $t$  و  $t-\delta t$  إلى اللحظة  $t+\delta t$  [30]. واهم الخطوات ملخصة في المخطط

الموالي:



الشكل I . 18 :مخطط Varlet [31].

## الفصل الثاني

المحاكاة بالديناميكا الجزيئية

الفصل الثاني:المحاكاة بالديناميكا الجزيئيةالمقدمة:

تعد المحاكاة أداة مهمة للمصمم ، فقد استخدم هذا الأسلوب بشكل واسع في بداية الأمر في مجال الفيزياء لوصف الظواهر الفيزيائية والطرق العشوائية لتصادم بين الذرات وقياس الخصائص الترموديناميكية وتعريف الكمونات ، ولهذا كان الإتجاه إلى تنفيذ النماذج على شكل محاكاة المشكلة بظروف مشابهة حقيقية ولكن سرعان ما إنتقل هذا الأسلوب إلى الحياة المدنية وتطبيقات هائلة في مجالات مختلفة وواسعة نذكر منها على سبيل المثال محاكاة طيران طائرة في نفق هوائي أو محاكاة معارك عسكرية واسعة النطاق لتقويم نظم الأسلحة الدفاعية والهجومية أو محاكاة نظام اتصالات هاتفية لتحديد طاقة المكونات الخاصة بها لتوفير خدمة للمستهلكين بشكل كفؤ اقتصادياً....الخ

كما أنها أصبحت أداة هامة للمهندسين والكيميائيين والصيادلة خلال القرن العشرين ، حيث أصبحت جسر بين التجارب والنظريات فالمحاكاة تمدنا بالمعلومات في المستوى الميكروسكوبي وهذا يساعد على فهم الخصائص الميكروسكوبية كما أنها تسمح من خلال التجارب الفكرية بأشياء يستحيل تنفيذها واقعياً ولكن نتائجها تزيد من فهمنا للظاهرة بحيث يمكن تحقيقه.[27]

I الوصف الفيزيائي لخلية المحاكاة :

تترتب ذرات الكربون ذات نمط التهجين  $sp^2$  في هذه المادة في نمط سداسي منتظم ويبلغ طول الرابطة كربون-كربون C-C في الجرافين حوالي

$0.142 \text{ \AA}$  ، لذلك تكون ذرات الكربون متراصة بشكل كبير في خلية الجرافين. خترنا في دراستنا خلية جرافين تتكون من 200 ذرة كربون متماسكة

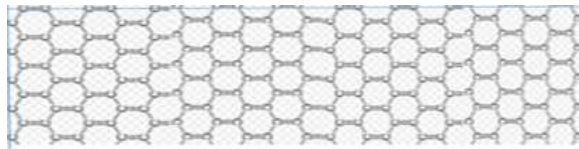
بروابط تساهمية

- الرابطة البسيطة:  $W_1=(C-C)=1200\text{cm}^{-1}$

- الربطتين مضاعفة:  $W_2(C=C)=1600-1680\text{cm}^{-1}$

لتسهيل الدراسة اهتزازات الذرات حول موضع الاتزان الخاص بها اعتبرنا أن كل الرابطة عبارة عن نابض له ثابت مرونة

حيث  $K = 4\mu\pi^2 C^2 W^2 \text{ N/m}$  و  $K_1=(C-C)=7.336221.10^{-15}\text{N/m}$  و  $K_1=(C=C)=8.602950.10^{-15} \text{ N/m}$



الشكل 1.II: خلية جرافين المختارة للدراسة [18].

## II . الظاهرة الفيزيائية :

تعتبر الإهتزازات الذرية عملية تلقائية في مختلف المواد او الجوامد البلورية (الاجسام الصلبة ) عند درجة حرارة T ، يكون متوسط طاقة كل ذرة من ذرات هو  $K_B T$  حيث  $K_B$  ثابت بولتزمان

تؤدي هذه الطاقة إلى اهتزاز كل ذرة من ذرات حول موضع اتزان خاص، كلما ارتفعت درجة الحرارة اتسع نطاق هذه الإهتزازات التي يطلق عليها اهتزازات الشبكة وتؤدي إلى تولد سيل من الموجات داخل البلورة تعرف بالأموج المرنة. وتستثير هذه الموجات بدورها كافة الذرات في الشبكة البلورية في تحرك جماعي يعرف بالنمط المعتاد لذبذبات الشبكة [1].

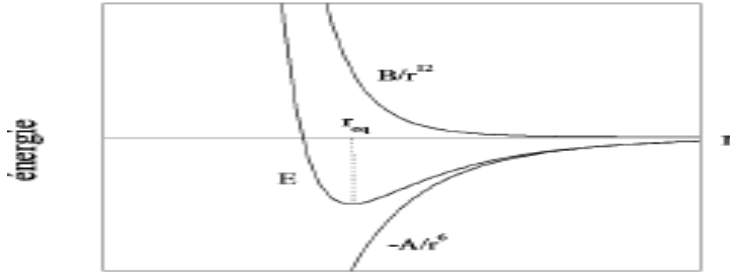
ولتحاكي هذه الظاهرة على مادة الجرافين ( Graphène ) البلورية السالفة الذكر ودراسة فونونات مادة الجرافين نتطرق الى حساب ودراسة :

### 1.II طاقة التفاعل بين أي ذرتين مفصولتين $i$ و $k$ بمسافة $r_{k,i}$

تعطى بكون لينارد - وجونس ( Lennard et Jones ) المعرف بالعبرة التالية [31]:

$$U = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\delta}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\delta}{r} \right)^6 \right] \quad (2.II)$$

و الموضح في الشكل (2-I) :




الشكل 2.II: يمثل كمن Lennard et Jones [31]


بجيث :


$\varepsilon$  و  $\delta$  تسمى بمعاملات لينارد و جونس وتقدر قيمتها بنسبة لذرتين كربون كربون:

$$\varepsilon = 0.045J, \delta = 3.5 \cdot 10^{-10}m [3]$$

$r(i, j)$  لمسافة بين الذرتين وتحسب بعلاقة التالية: 

$$r_{ik} = \|\vec{r}_k - \vec{r}_i\| \text{ و } \vec{r}(i, k) = \vec{r}_k - \vec{r}_i$$

$\left( \frac{\delta}{r_{ik}} \right)^{12}$  : طاقة التنافر 

يمثل طاقة التجاذب  $\left(\frac{\delta}{r_{ik}}\right)^6$  

2.II. لقوة التي تطبقها الذرة k على الذرة i تعطى وفق العلاقة التالية:

$$F_{k,i} = \frac{24}{r_{ki}} \left( 2 \left( \frac{\delta}{r_{ki}} \right)^{12} - \left( \frac{\delta}{r_{ki}} \right)^6 \right) \quad (3. II)$$

III. النموذج الرياضي

1.III. معادلات الحركة:

معادلات الحركة لذرة i هي:

$$\frac{d^2 x_i}{dt^2} = \alpha_{x,i} = \frac{1}{m} \sum_{k \neq i} F_{k,i} \frac{x_i - x_k}{r_{ki}} \quad (4.II)$$

$$\frac{d^2 y_i}{dt^2} = \alpha_{y,i} = \frac{1}{m} \sum_{k \neq i} F_{k,i} \frac{y_i - y_k}{r_{ki}} \quad (5.II)$$

حيث  $F_i$  القوة المؤثرة على الجسم i بسبب تفاعله مع الذرات و  $m_i$  هي كتلته و  $\alpha_i$  هو تسارعه [29]

الخوارزمية العددية التي نستعملها لحل هذه المعادلات التفاضلية هي خوارزمية فيرلي.

2.III. معادلات خوارزمية فيرلي]

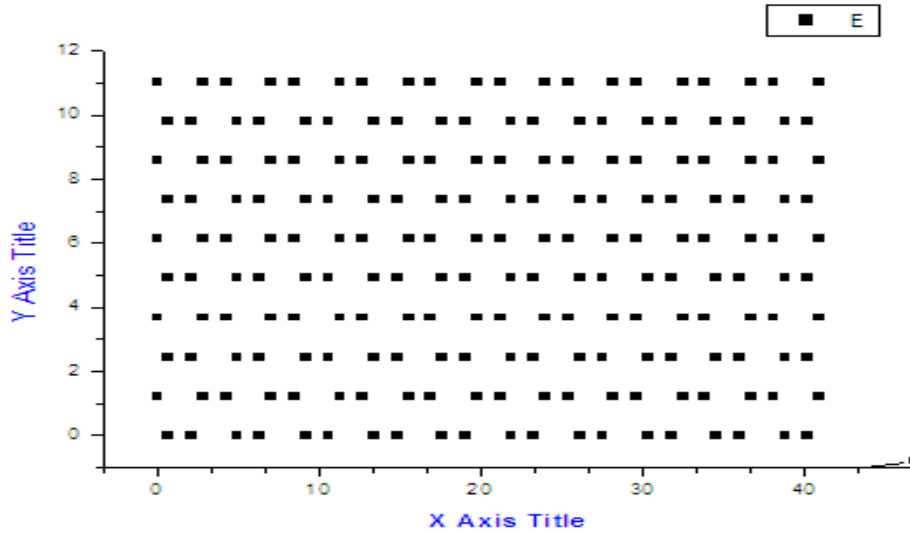
$$x_{i,n+1} = 2x_{i,n} - x_{i,n-1} + (\Delta t)^2 \alpha_{x,i,n} \quad (6.II)$$

$$y_{i,n+1} = 2y_{i,n} - y_{i,n-1} + (\Delta t)^2 \alpha_{y,i,n}. \quad (7.II)$$

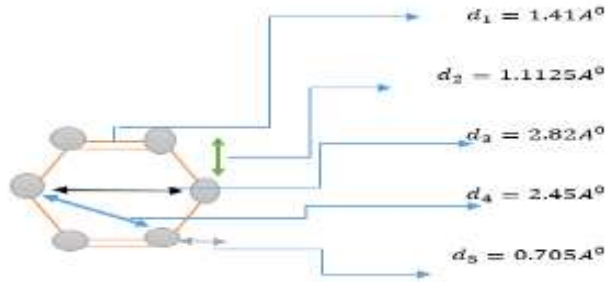
3.III. الوضعيات والسرعات الابتدائية:

- المواضع الابتدائية: يوضح الشكل 1.II المواضع الابتدائية ل 200 ذرة كربون حيث تعتمد على ابعاد الخلية الأولية الموضحة في

الشكل (2. II).



الشكل II.3: المواضع الابتدائية لذرات في خلية المحاكاة



الشكل II.4: إبعاد الخلية الأولية الواحدة من خلية المدروسة

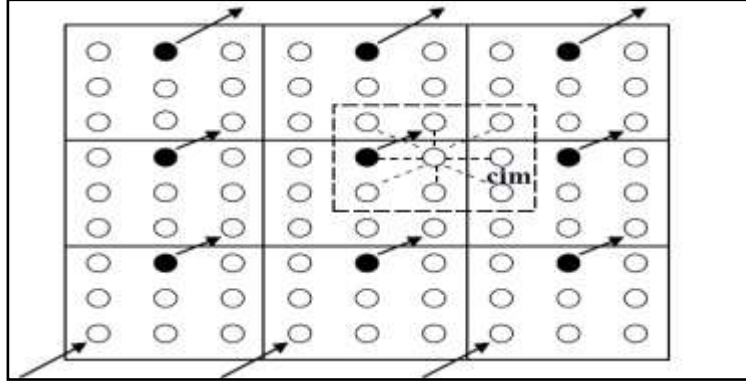
- **السرعات الابتدائية:** قمنا باعطاء سرعات عشوائية لكل ذرة من ذرات الخلية حسب توزيع ماكسويل بولتزمان .
- **الشروط الحدية الدورية:** من أجل التقليل من أثر الحواف نستعمل الشروط الحدية الدورية.

حيث:

$$(x_i > L) \rightarrow x_i = x_i - L, (x_i < 0) \rightarrow x_i = x_i + L$$

$$(y_i > q) \rightarrow y_i = y_i - q, (y_i < 0) \rightarrow y_i = y_i + q$$

عند الدراسة يجب أخذ بعين الاعتبار تأثير الذرات المتواجدة في حدود خلية المحاكات حيث أختيرت خلية واحدة في جميع أنحاء الفضاء



الشكل 5.II: يمثل رسم تخطيطي للشروط الحدودية في بعدين [32].

معرفة الطاقة في مثل هذه الظواهر مهم لنمذجتها وندرس في هذه الحالة طاقة اهتزازات الذرات حول مواضع الاتزان وهي كالتالي :

$$E_p = \frac{1}{2} K_B T = \frac{1}{2} m X^2 \quad (8-II) \quad \text{- الطاقة الكامنة :}$$

$$E_T = K_B T = \sum_{i=1}^N \frac{m V^2}{N} \quad (9-II) \quad \text{- الطاقة الحرارية:}$$

$$T(t) = \frac{1}{N K_B} \sum_{i=1}^N m_i V_i(t)^2 \quad (10-II) \quad \text{- درجة الحرارة}$$

-

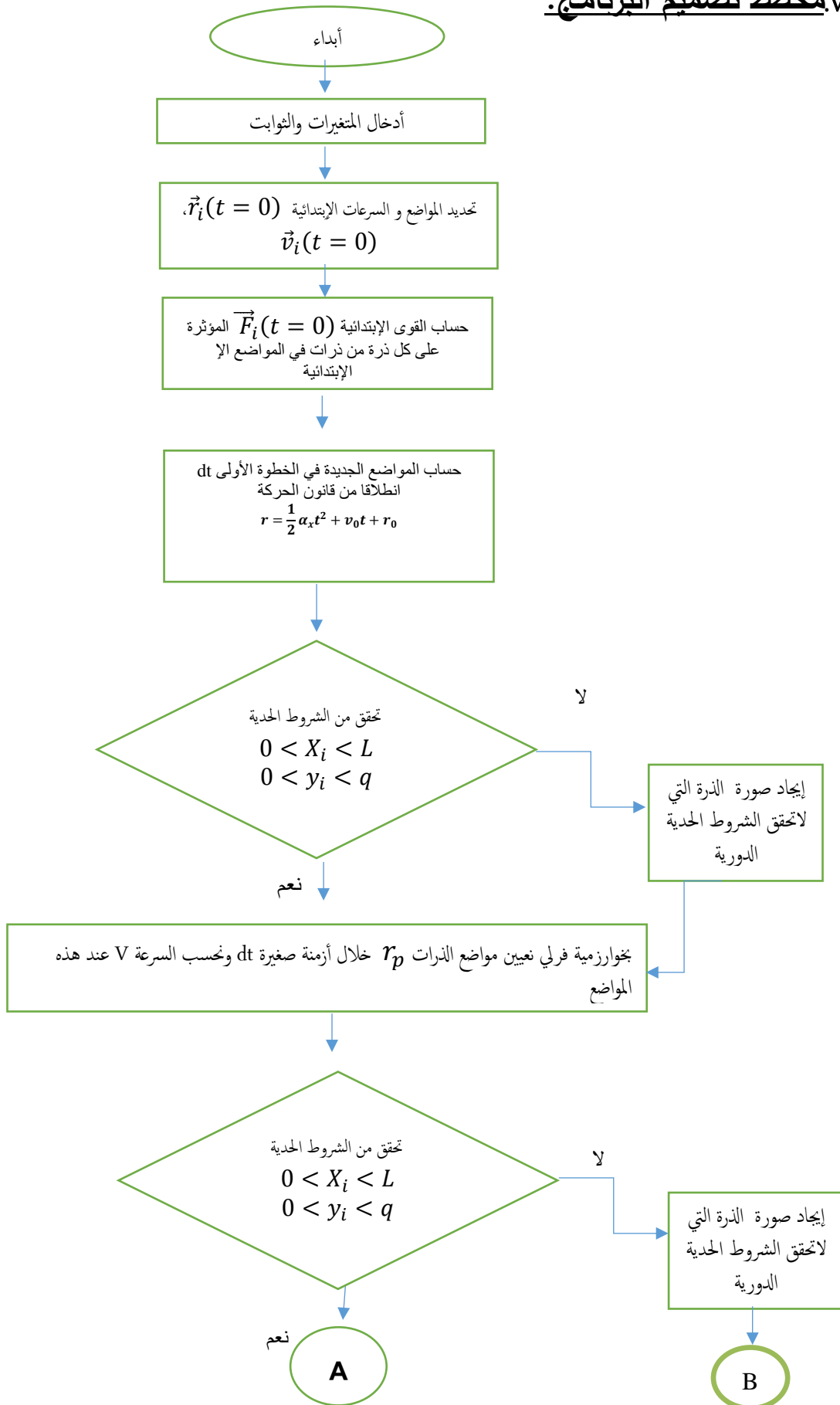
#### IV . مخطط المحاكاة:

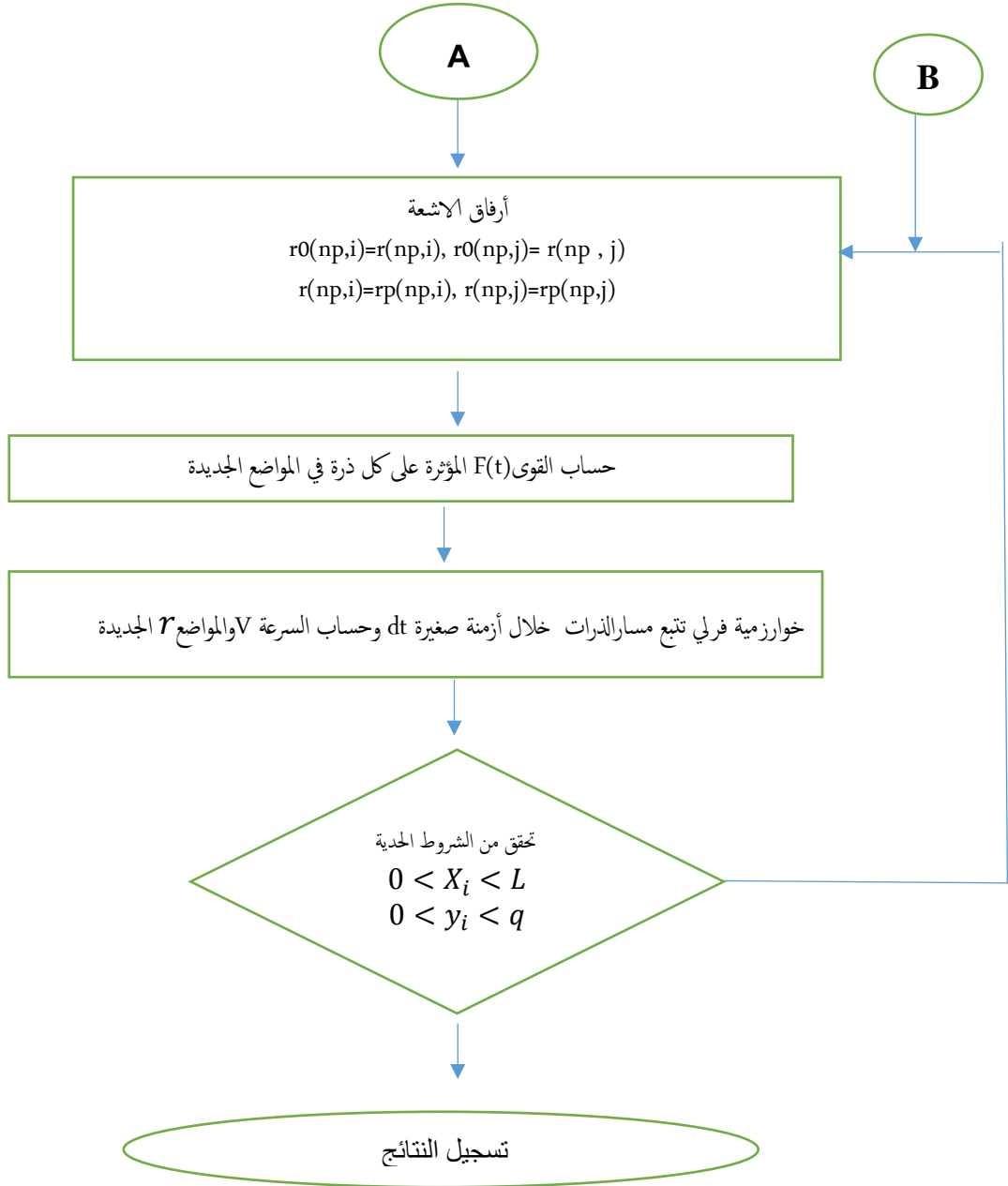
انجزنا برنامج بلغة الفورتران لنمذجة الظاهرة المدروسة، الخطوات التي اتبعناها هي كالتالي:

- 1- حساب خطوة الزمن  $\tau = 0.2 \times 10^{-15} s$
  - 2- اختيار خلية المحاكاة بحيث تتوزع فيها حوالي 200 ذرة بشكل منتظم ودوري
  - 3- مركزة كل ذرة وتحديد الذرات المجاورة لها او صورها وبعدها عن هذه الذرات.
  - 4- من اجل تتبع مسارات هذه الذرة نحسب القوى المؤثرة عليها.
- خطوات المحاكاة ممثلة في المخطط ادناه



v. مخطط تصميم البرنامج:





الشكل I.I. 5: مخطط تصميم البرنامج



الفصل الثالث:  
النتائج ومناقشتها

## الفصل الثالث :

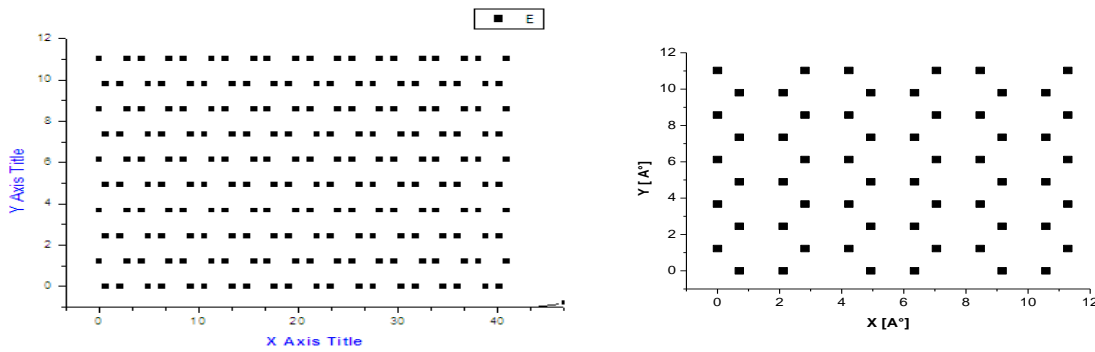
### النتائج ومناقشتها

#### المقدمة:

في هذه الدراسة نقوم بمحاكاة ظاهرة اهتزازات الذرات وتحديد نمط الاهتزازات لذرات خلية الجرافين. ندرس تغير المواضع، السرعات و التسارعات مع الزمن للذرات هذه المادة. ثم تحققنا من حساباتنا بحساب درجة حرارة النظام. انجزنا المحاكاة بلغة الفورترن

#### I.1.المواضع الابتدائية:

من خلال البرنامج قمنا بإيجاد المواضع الابتدائية لذرات خلية المحاكاة كما هي مبينة في الشكل:



الشكل I I I . 1: المواضع الابتدائية لذرات خلية المحاكاة

نلاحظ ان كل ذرة تبعد بمسافة  $d_2=1.41 \text{ \AA}$  عن احدى جارتها في احد الطرفين وبمسافة  $d_3=2.82 \text{ \AA}$  عن جارتها في الطرف الاخر وفق المحور

OY يبعد كل صف من الذرات عن الاخر بمسافة  $d_4=1.1125 \text{ \AA}$  وفق المحور

من خلال الشكل المتحصل عليه نلاحظ ان توزيع الذرات يتوافق مع البنية الهيكلية العامة لمادة الجرافين

#### I.1.1. مواضع بعض الذرات في خلية المحاكاة وذراتها المجاورة

من خلال البرنامج قمنا بمركزة كل ذرة من ذرات خلية المحاكاة وفق شروط حدية دورية وتحديد اقرب الذرات المجاورة لها وكذلك البعد بينها و الجداول

(1-I) (2-I)، (3-I) توضح بعض الذرات وذراتها المجاورة والبعد بينها .

الجدول III.1: المواضع الابتدائية لبعض ذرات خلية المحاكاة

	Atomes 1	Atomes 20	Atomes 50	Atomes100
سطر	1	10	3	5
عمود	1	20	10	20
x	0.7050000	40.185000	19.035000	40.185000
y	0	0	2.450000	4.900000

الجدول III.2: مواضع الابتدائية لذرات 1، 20، 50 وذراتها المجاورة

الجوار	الذرة رقم 1 في خلية المحاكاة		الذرة رقم 20 في خلية المحاكاة		الذرة رقم 50 في خلية المحاكاة		الذرة رقم 100 في خلية المحاكاة	
	رقم السطر	رقم العمود	رقم العمود	رقم السطر	رقم السطر	رقم العمود	رقم السطر	رقم العمود
i=1	7	19	6	18	9	8	1	18
i=2	7	20	6	19	9	9	1	19
i=3	7	1	6	20	9	10	1	20
i=4	7	2	6	1	9	11	1	1
i=5	7	18	6	2	9	12	1	2
i=6	8	19	7	18	10	8	2	18
i=7	8	20	7	19	10	9	2	19
i=8	8	1	7	20	10	10	2	20
i=9	8	2	7	1	10	11	2	1
i=10	8	18	7	2	10	12	2	2
i=11	9	19	8	18	1	8	3	18
i=12	9	20	8	19	1	9	3	19
i=13	9	1	8	20	1	10	3	20
i=14	9	2	8	1	1	11	3	1
i=15	9	18	8	2	1	12	3	2
i=16	10	19	9	18	1	8	4	18
i=17	10	20	9	19	2	9	4	19
i=18	10	1	9	20	2	10	4	20
i=19	10	2	9	1	2	11	4	1
i=20	10	18	9	2	2	12	4	2
i=21	1	19	10	18	2	8	5	18
i=22	1	1	10	19	3	9	5	19
i=23	1	2	10	1	3	11	5	1
i=24	1	18	10	2	3	12	5	2
i=25	1	19	10	18	3	8	5	18
i=26	2	20	1	19	3	9	6	19
i=27	2	1	1	20	4	10	6	20
i=28	2	2	1	1	4	11	6	1
i=29	2	18	1	2	4	12	6	2
i=30	2	19	1	18	4	8	6	18
i=31	3	20	2	19	4	9	7	19
i=32	3	1	2	20	5	10	7	20
i=33	3	2	2	1	5	11	7	1
i=34	3	18	2	2	5	12	7	2
i=35	3	19	2	18	5	8	7	18
i=36	4	20	3	19	5	9	8	19
i=37	4	1	3	20	6	10	8	20
i=38	4	2	3	1	6	11	8	1

i=39	4	18	3	2	6	12	8	2
i=40	4	19	3	18	6	8	8	18
i=41	5	20	4	19	6	9	9	19
i=42	5	1	4	20	7	10	9	20
i=43	5	2	4	1	7	11	9	1
i=44	5	3	4	2	7	12	9	2

من خلال النتائج نلاحظ ان لكل ذرة ممركة لخلية المحاكاة 44 ذرة مجاورة (قرب جوار).

الجدول 3.III: المسافة بين الذرات 20، 50، 100 المركزية والذرات المجاورة لها

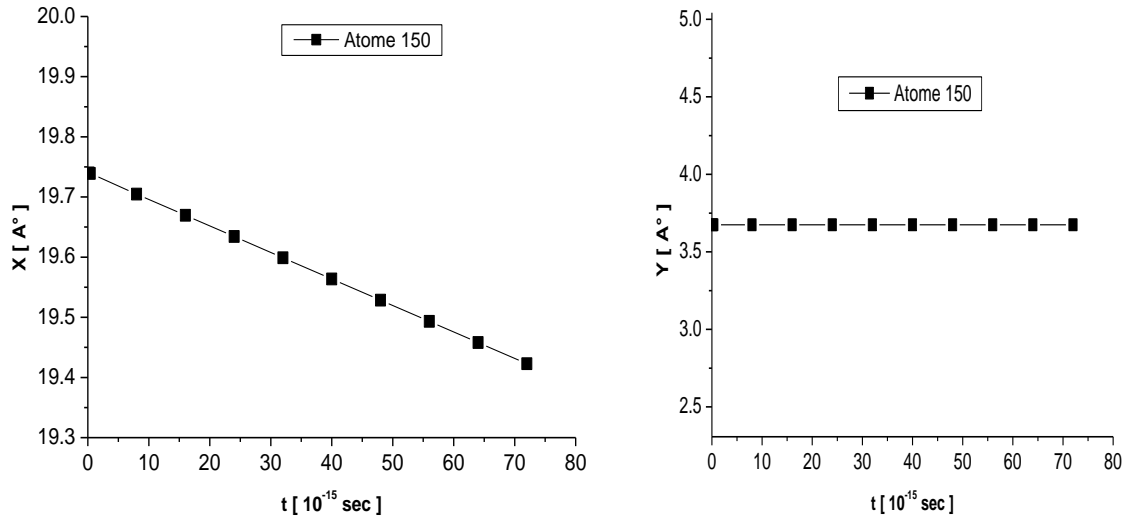
الذرة رقم 20 في خلية المحاكاة				الذرة رقم 50 في خلية المحاكاة				الذرة رقم 100 في خلية المحاكاة			
r(x,y)	Dy	dx	الجوار	r(x,y)	dy	dx	الجوار	r(x,y)	d y	Dx	الجوار
8.48029	7.35	4.23	138	8.48029	7.35	4.23	168	6.47	4.9	4.23	18
7.48402	7.35	1.41	139	7.48402	7.35	1.41	169	5.09	4.9	1.41	19
7.35	7.35	0	140	7.35	7.35	0	170	4.9	4.9	0	20
40.15834	7.35	39.48	121	7.87241	7.35	2.82	171	39.78	4.9	39.48	1
38.77302	7.35	38.07	122	8.48029	7.35	4.23	172	38.38	4.9	38.07	2
9.27126	8.575	3.525	158	9.27126	8.575	3.525	188	5.09	3.675	3.525	38
8.83198	8.575	2.115	159	8.83198	8.575	2.115	189	4.24	3.675	2.115	39
8.60393	8.575	0.705	160	8.60393	8.575	0.705	190	3.74	3.675	0.705	40
41.08971	8.575	40.185	141	8.83198	8.575	2.115	191	40.35	3.675	40.185	21
38.35632	8.575	37.365	142	9.89368	8.575	4.935	192	37.54	3.675	37.365	22
10.67394	9.8	4.23	178	4.88829	2.45	4.23	8	4.88	2.45	4.23	58
9.90091	9.8	1.41	179	2.82677	2.45	1.41	9	2.82	2.45	1.41	59
9.8	9.8	0	180	2.45	2.45	0	10	2.45	2.45	0	60
40.67813	9.8	39.48	161	3.73563	2.45	2.82	11	39.55	2.45	39.48	41
39.31113	9.8	38.07	162	4.88829	2.45	4.23	12	38.14	2.45	38.07	42
11.57481	11.025	3.525	198	3.73179	1.225	3.525	28	3.73	1.225	3.525	78
11.22603	11.025	2.115	199	2.44415	1.225	2.115	29	2.44	1.225	2.115	79
11.04752	11.025	0.705	200	1.41338	1.225	0.705	30	1.413	1.225	0.705	80
41.66995	11.025	40.185	181	2.44415	1.225	2.115	31	40.20	1.225	40.185	61
38.95759	11.025	37.365	182	5.08477	1.225	4.935	32	37.38	1.225	37.36	62
4.23	0	4.23	18	4.23	0	4.23	48	4.23	0	4.23	98
1.41	0	1.41	19	1.41	0	1.41	49	1.41	0	1.41	99
39.48	0	39.48	1	2.82	0	2.82	51	39.48	0	39.48	81
38.07	0	38.07	2	4.23	0	4.23	52	38.07	0	38.07	82
3.73179	1.225	3.525	38	3.73179	1.225	3.525	68	3.73	1.225	3.52	118
2.44414	1.225	2.115	39	2.44415	1.225	2.115	69	2.44	1.225	2.11	119
1.41338	1.225	0.705	40	1.41338	1.225	0.705	70	1.41	1.225	0.70	120
40.20366	1.225	40.185	21	2.44415	1.225	2.115	71	40.20	1.225	40.18	101
37.38507	1.225	37.365	22	5.08477	1.225	4.935	72	37.38	1.225	37.36	102
4.88829	2.45	4.23	58	4.88829	2.45	4.23	88	4.88	2.45	4.23	138
2.82677	2.45	1.41	59	2.82677	2.45	1.41	89	2.82	2.45	1.41	139
2.45	2.45	0	60	2.45	2.45	0	90	2.45	2.45	0	140
39.55594	2.45	39.48	41	3.73563	2.45	2.82	91	39.55	2.45	39.48	121
38.14875	2.45	38.07	42	4.88829	2.45	4.23	92	38.14	2.45	38.07	122
5.09227	3.675	3.525	78	5.09227	3.675	3.525	108	5.09	3.675	3.52	158
4.24015	3.675	2.115	79	4.24015	3.675	2.115	109	4.24	3.675	2.11	159
3.74201	3.675	0.705	80	3.74201	3.675	0.705	110	3.74	3.675	0.70	160
40.35269	3.675	40.185	61	4.24015	3.675	2.115	111	40.35	3.675	40.18	141
37.54529	3.675	37.365	62	6.15304	3.675	4.935	112	37.54	3.675	37.36	142
6.47325	4.9	4.23	98	6.47325	4.9	4.23	128	6.47	4.9	4.23	178
5.09883	4.9	1.41	99	5.09883	4.9	1.41	129	5.09	4.9	1.41	179
4.9	4.9	0	100	4.9	4.9	0	130	4.90	4.9	0	180
39.78291	4.9	39.48	81	5.65353	4.9	2.82	131	39.78	4.9	39.48	161
38.38404	4.9	38.07	82	6.47325	4.9	4.23	132	38.38	4.9	38.07	162

من خلال النتائج لموضحة في الجدول نلاحظ ان أكبر مسافة بين الذرة المجاورة والذرة المركزية في حدود  $40.35269A^\circ$  واقل مسافة في حدود  $2.45A^\circ$

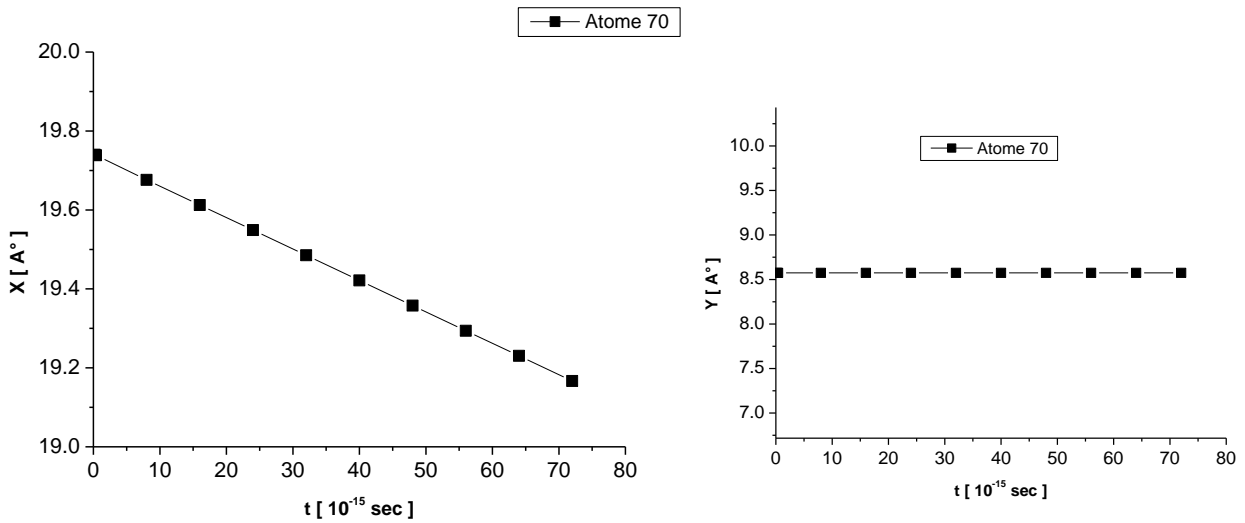
## 1.II مراقبة تغيرات مواضع بعض الذرات خلال زمنية مختلفة وفق المحورين OX و OY

تبين الاشكال تغير مواضع بعض الذرات بدلالة الزمن، حيث يقدر الفاصل الزمني  $dt = 0.2 \times 10^{-15} s$

- تتجه كل من الذرتين 150 70 الاتجاه السالب للمحور OX لان فاصلتها تتناقص بدلالة الزمن وتبقى فاصلتها على OY ثابتة كما هو موضح في الشكل ونفسر هذا ان الرابطة المضاعفة على المحور OX اقوى من الرابطة البسيطة على المحور OY .

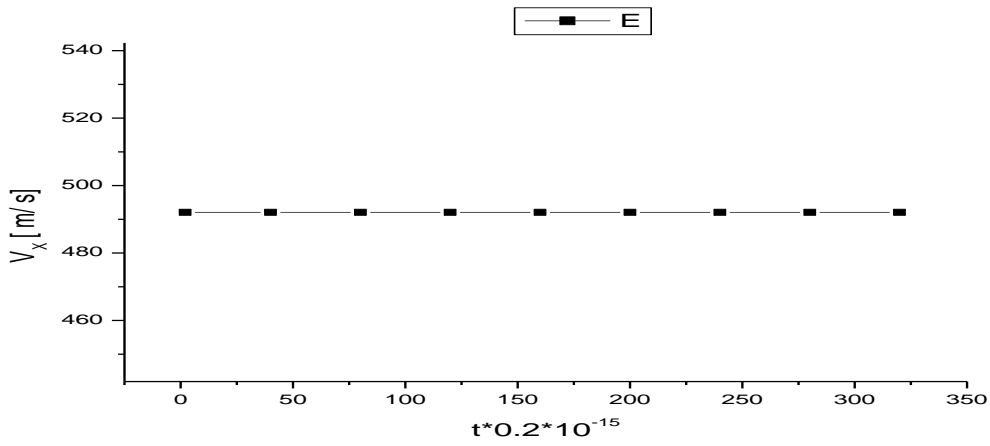
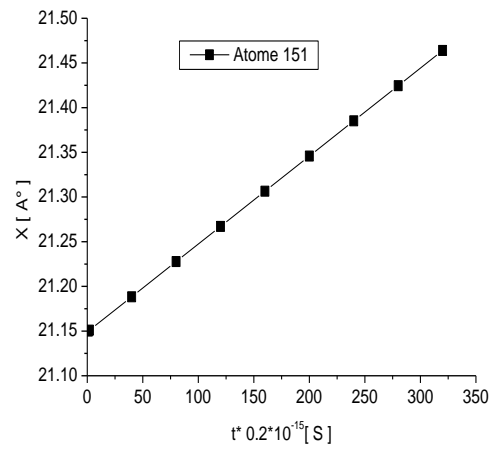
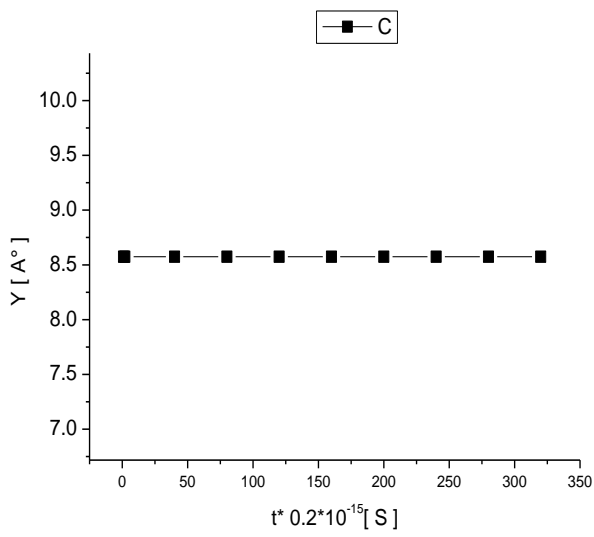


الشكل I II 1: تغيرات مواضع الذرة رقم 150 بدلالة الزمن وفق المحورين OX و OY

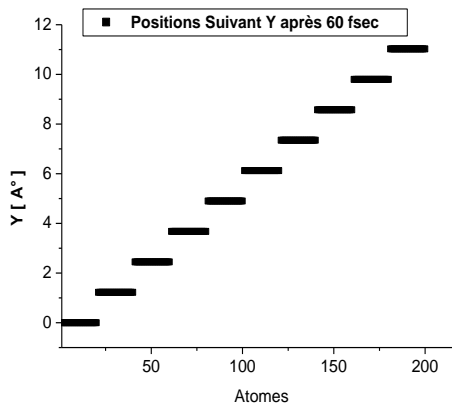
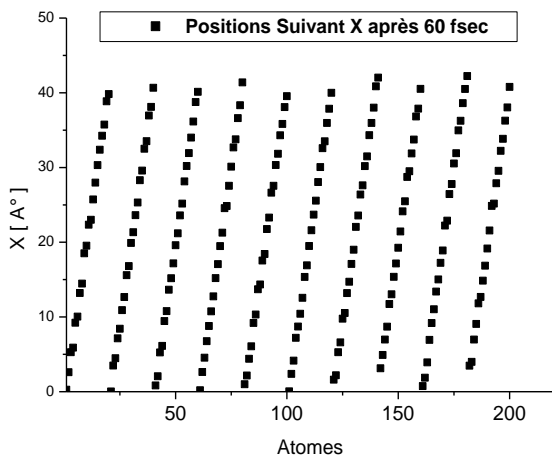


الشكل I II 2: تغيرات مواضع الذرة رقم 151 في خلية المحاكاة بدلالة الزمن وفق المحورين OX و OY





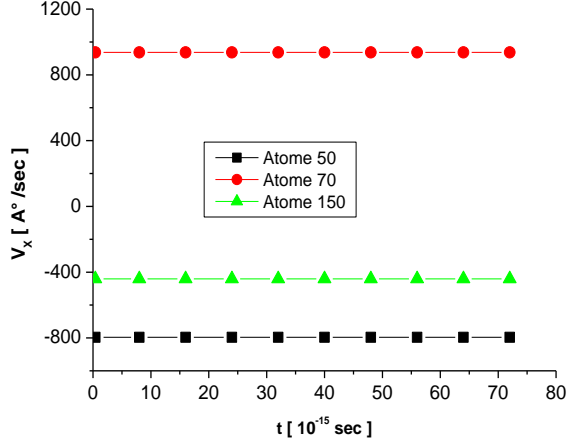
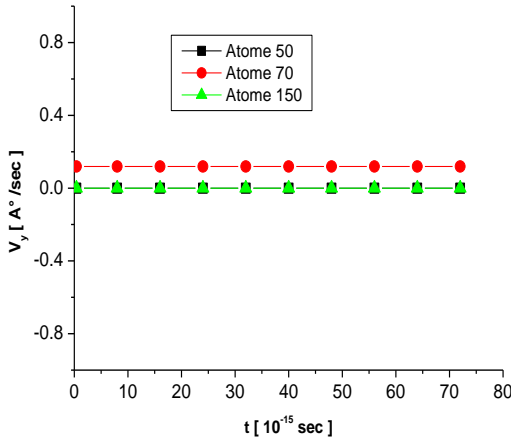
الشكل 3.I I I: تغيرات الموضع و سرعة الذرة رقم 150 وفق المحورين OX و YO



الشكل 4.I I I: إزاحة مستعرضة بعد 60s لكل ذرة من ذرات على المحور OY و OX

تنزاح الذرات وفق المحور  $ox$  وتبقى تراتيبها ثابتة وفق المحور  $oy$  وفق نمط طولي (longation).

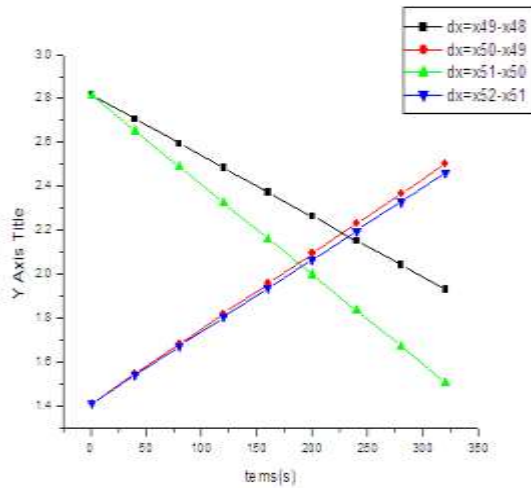
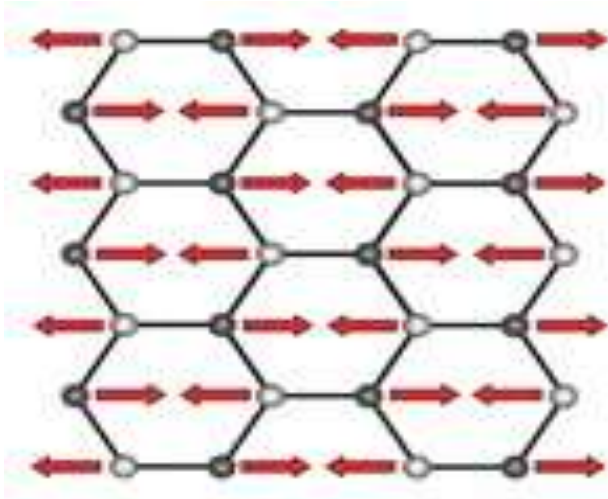
2-II) تغيرات سرعة بعض الذرات بدلالة الزمن



الشكل III. 5: سرعة كلا من الذرات 50 ، 70 ، 150 وفق المحورين  $OY$  و  $OX$

- للذرات سرعات ثابتة ومختلفة وفق المحور  $OX$ .
- تكون سرعات الذرات وفق المحور  $OY$  معدومة او مهيمنة كما هو مبين في الشكل .
- تهتز ذرات الجرافين حول موضع توازنها وفق المحور  $OX$  ومنه نمط الاهتزاز (Longitudinale) للرابطة المضاعفة .

3-II) تغيرات المسافة بين الذرات بدلالة الزمن



الشكل III. 6: منحنى وشكل تغيرات المسافة بين الذرات بدلالة الزمن

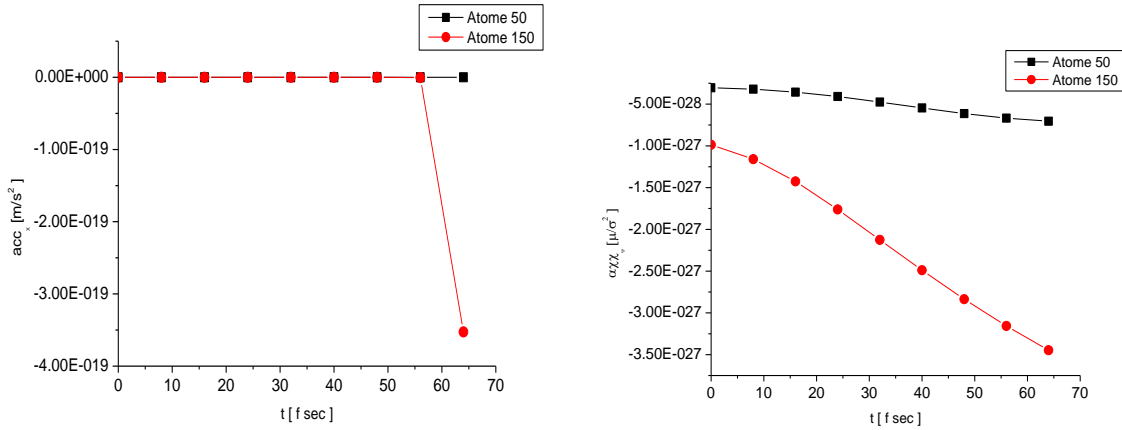
يبين الشكل (1-I) تغيرات المسافة بين الذرات 48-49 و 49-50 و 50-51 بدلالة الزمن حيث بينت النتائج أنه

- لا يوجد اهتزاز على المحور  $OY$  .
- على المحور  $OX$  تناقص والمسافة بين الذرات  $dx = x_{49} - x_{48}$  و  $dx = x_{51} - x_{50}$

في الوقت الذي تزداد فيه المسافة بين الذرات 50-49 و 51-52

$$dx = x_{52} - x_{51} \text{ و } dx = x_{50} - x_{49}$$

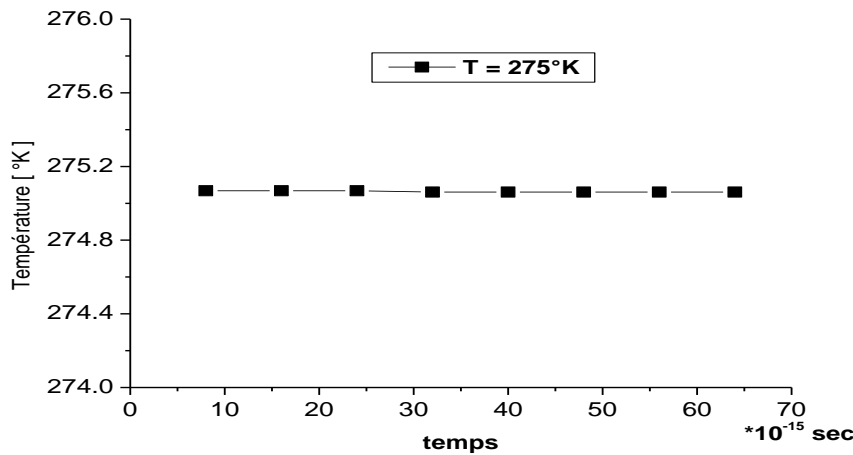
**1-III) تغيرات التسارع بدلالة الزمن لذرتين 50 و 150:**



الشكل 7.III: تغيرات التسارع لذرتين 50 و 150 بدلالة

- يتناقص التسارع لذرتين وفق المحور OX
- تبقى قيمته ثابتة وفق المحور OY

**III - 2) تغيرات درجة الحرارة لنظام بدلالة الزمن**



الشكل 8.III: يمثل المنحنى تغيرات درجة الحرارة لنظام بدلالة الزمن

نلاحظ أن درجة الحرارة للنظام تبقى ثابتة وقيمتها متوافق مع السرعات الابتدائية المعطاة لذرات .

الخلاصة العامة

### الخلاصة العامة

المواد ثنائية البعد هي مواد جديدة بخصائص فريدة تم اكتشافها منذ عزل الجرافين عام 2004م واعتبرت من أهم المواد المكتشفة القرن 21م وهي محط اهتمام العلماء والباحثين نتيجة خصائصها وقدرتها الفيزيائية ومستقبلها الواعد. لاتزال هذه المواد وتطبيقاتها قيد الدراسة والاكتشاف.

في هذه المذكرة قمنا بالتعريف بهذه المواد. تطرقنا الى اهم خصائصها وتطبيقاتها. انجزنا برنامج بلغة الفرترون يقوم بمحاكاة الاهتزازات في مادة الجرافين. استعملنا المحاكاة بالديناميكا الجزيئية التي تعتمد على خوارزمية فيرلي. تمكنا انطلاقا مما سبق من تتبع ودراسة فنونات مادة الجرافين :

- خلال المحاكاة تكون كل ذرة مركزية تؤثر عليها 44 ذرة مجاورة في مختلف الاتجاهات أهملنا تأثير باقي الذرات.
- وجدنا أن الذرات تهتز وفق المحور الذي توجد فيه الرابطة المضاعفة. فمط الاهتزاز طولي. على المحور الإخر لا يوجد اهتزاز كل صف من الذرات يهتز كمجموعة متوافقة ومتناسقة بشكل شبه مستقل عن الصفوف الأخرى.

- المسافة القصوى بين ذرتين هي  $2.82A^{\circ}$  على احد الطرفين و الدنيا  $1.41 A^{\circ}$  على الطرف الأخر.

- تتقارب الذرتين من بعضها البعض في احد الطرفين في الوقت الذي تتباعد فيه الذرتين عن بعضها في الطرف الاخر.

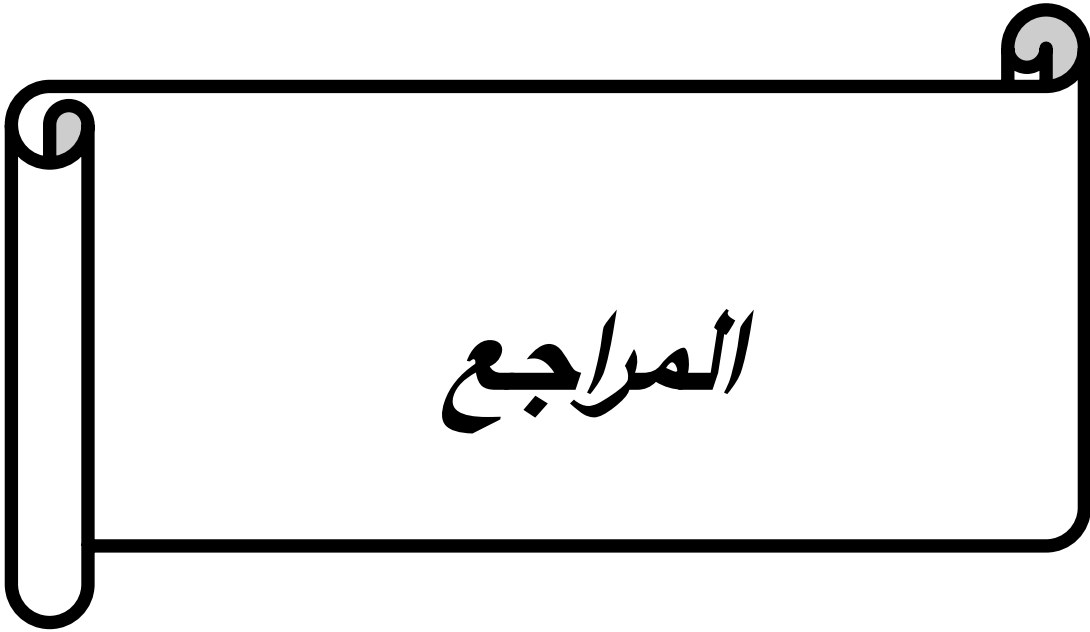
- للذرات سرعات ثابتة خلال الزمن وفق المحور OX وتختلف باختلاف الذرات بينما وفق المحور OY معدومة او ثابتة و محملة

- التسارع يتناقص ويؤول الى قيمة معدومة على المحور OX لكل ذرة من الذرات

- تحققتنا من درجة حرارة النظام فوجدناها في حدود 278K وهي متوافقة مع درجة الحرارة لاختيار السرعات الابتدائية المعطاة للذرات

وأبدت هذه النتائج توافقها مع أعمال سابقة.

يمكن اجراء دراسات أكثر تعمقا وحساب إحدى الخواص هذه المواد وخاصة الحرارية التي تلعب الفنونات دورا مهما فيها.



المراجع

- [1] د . يسري مصطفى: "أساسيات كيمياء الجوامد " : دار النوارس للدعاية والنشر لجامعة المنصرة : (1438هـ / 2017م).
- [2] د. مسعود بن حميد الحياني: "فيزياء الجوامد": جامعة أم القرى كلية العلوم التطبيقية شعبة الفيزياء الطبية: [www.pdfactory.com](http://www.pdfactory.com)
- [3] YingweiFeiabS .KSaxenaab: "*The heat capacity of solids*": vol 51: pp252-254 ( 1987 ) .
- [4 ] Michael Hilke: " *Solid State Physics Lecture notes by* " : McGill University : ( 10/25/ 2006).
- [5] Xining Zang : "*Silicene: Graphene's silicon cousin* " : Graduate Student ME@ Berkeley: (5/02/2013).
- [6] "*Crystal Structure Theory and Applications*": vol 5: pp43:Published Online August in SciRes:(2016).
- [7]M. Elachaby : "*Nanocomposites Graphéne-Polymé Thermoplastique : Fabarication et-Etude des Propriétés Structurales, Thermiques Rhéologiques et Mécaniques*" : Thèse de doctorat :Universite Mohammed V-A( 2012).
- [8] <https://www.youtube.com/watch?v=F8NxvkwkhiI>.
- [9]M. Czernaik-Reczulska, A. Niedzielska, A. Jedrzejak : "*Graphene as a material for solar cells application*" :Material Science: Vol.15:No.4(46) :(2015).
- [10 ] F. Bechstedt: "*Principles of Surface Physics*." :Springer-Verlag: Berlin : (2003) .
- [11] S. Reich, J. Maultzsch, C. Thomsen, and P. Ordejón" *Tight-binding description of Graphene*". In: Phys. Rev. B:vol 66 (3): pp 035412 : (2002).
- [12] P. Ajayan, P. Kim, and K. Banerjee: "*Two-dimensional van der Waals materials*" :Phys. Today: vol. 69:no. 9 : pp 38–44: ( 2016).
-

[13] Xiaokun Gu and Ronggui Yang : "*Phonon transport and thermal conductivity in twodimensional materials*" :Annual Review of Heat Transfer : vol 19: pp1-65: (2015).

[ 14 ] F. Matusalem, M. Marques, L.K. Teles, F. Bechstedt: "*Stability and electronicstructure of two-dimensional allotropes of group-IV materials*" : REVIEW B : vol 92:(2015).

[ 15 ] Jiang, J. W. and H.S. Park, "*Mechanical properties of single-layer black phosphorus*": Journal of Physics D: Applied Physics: vol47(38) : PP. 385304:(2014).

[16]Lu Hua Li and Ying Chen : "*Atomically Thin Boron Nitride: Unique Properties and Applications*":Advanced Functional Materials vol:26:pp 2594-2608: (2016).

[17] Harihar Behera and Gautam Mukhopadhyay : "*First-Principles Study of Structural and Electronic Properties of Germanene*": AIP Conference Proceedings: (2011).

[18]Cooper, R.C "*Nonlinear elastic behavior of two-dimensional molybdenum disulfide*". PHYSICAL REVIEW B : vol 87: (2013).

[19] Jackie D. Renteria 1, Denis L. Nika 2, and Alexander A. Balandin 3: "*Graphene Thermal Properties:Applications in Thermal Management and Energy Storage*": *Appl. Sci* : vol 4 :pp 525-547 : (2011) .

[20 ] <https://www.youtube.com/watch?v=F8NxvkwkhiI>.

[21] A. K. Geim, K. S. Novoselov : "*The rise of graphene Nature Materaile*" :Vol.6: pp:183 - 191: (2007).

[ 22 ] T. Kuilla, S.Bhadra , D.Yao, N.Hoon Kin, S.Bose ,J.Hee : "*Recent advances in graphéne based polymer composites* " :Progress in polymer : vol 35:pp1350-1375 :(2010).

---



[23] K. Kin, J. Young, T. Kim, S. Hocho, H. Jong chung: "A role for grapheme in siliconbased semiconductor devices " :Review insight: Vol. 479:(2011).

[24] Batra , I. P.; García, N.; Rohrer, H.; Salemink, H.; Stoll, E.Ciraci, S. A : "Study of Graphite Surface with STM and Electronic Structure Calculations": Surf. Sci. vol 181: pp126–138 :(1987).

[25]A. Allard: "Etude ab-initio des phonons du Graphène sur substrat métalliques"Université Sciences et Technologies Lille, hèse" :de doctorat en Physique de la matière condensée: (2011).

[26] I. Batra ,P. García, N. Rohrer, H.Salemink, H. Stoll, E.Ciraci:"Study of Graphite Surface with STM and Electronic Structure Calculations":Surf. Sci. 181: pp126–138 : (1987).

[27] أ. القاضي: " محاكاة حركة الجزيئات وحقل القوى الضبابية ": ماجستير جامعة الملك عبد العزيز بجدة: المملكة العربية السعودية (2011).

[28] I. M. SOBOL. R. Messer , J. Stone and P.Fortini, Chicago "The Monte Carlo Method Translated":University of Chicago Press: (1974).

[29]R. J. SADUS: "Molecular Simulation of Fluids": Theory, Algorithms .1 and Object-Orientation, 2nd Edition, Amsterdam: Elsevier Science: (2002).

[30] F. KHELFAOUI; "Modèles de profils Stark d'ions multicharges dans les plasmas chauds": Thèse de Doctorat: Université de Provence: ( 1991).

[31] باديس يدري: "محاضرات في الفيزياء العددية الأعمال التطبيقية": معهد الفيزياء: جامعة باجي مختار: عنابة: الجزائر:جويلية ( 2013).

[32]Y. BENZAHI, "Simulation numérique par la dynamique moléculaire de l'interaction de plasma- surface lors de déposition sur couches minces": Mémoire de magister:Université de Ouargla : (2002).

---

## المواد ثنائية البعد: دراسة الفونونات للجرافين بمحاكاة الديناميكا الجزيئية

### ملخص

هذه المذكرة تعرف بالمواد ثنائية البعد التي اكتشفت حديثا. هذه المواد هي حاليا محط اهتمام الكثير من الباحثين نظرا لخصائصها المتفردة و المميزة. تطرقنا في هذا العمل إلى أهم خصائصها وتطبيقاتها. أنجزنا برنامج بلغة الفورترون يقوم بمحاكاة الاهتزازات في مادة الجرافين. استعملنا المحاكاة بالديناميكا الجزيئية التي تعتمد على خوارزمية فيرلي. تمكنا انطلاقا مما سبق من تتبع ودراسة فنونات مادة الجرافين. حددنا نمط الإهتزاز و قمنا بحساب مواضع الذرات ،سرعاتها و تسارعاتها ودرسنا تغيرها مع الزمن. تحققنا من صحة حساباتنا بحساب درجة حرارة النظام فكانت موافقة لدرجة الحرارة التي تم عندها اختيار السرعات الابتدائية .

الكلمات المفتاحية: المواد ثنائية البعد- فونونات - الجرافين - الديناميكا الجزيئية - نمط الاهتزاز .

## Matériaux bidimensionnels: étude des phonons du graphène en simulant la dynamique moléculaire.

### Sommaire

Ce mémoire identifie les matériaux 2D récemment découvert. Ces matériaux sont actuellement sujet de nombreux recherches en raison de leurs caractéristiques uniques et distinctives. Dans ce travail, nous avons discuté les caractéristiques les plus importantes et les applications de ces matériaux. Nous avons réalisé un programme dans le langage de Fortran, qui simule les vibrations dans le graphène. Nous avons utilisé la simulation par la dynamique moléculaire basée sur l'algorithme de Verlet. Nous avons étudié les Phonons du graphène. Nous avons déterminé le mode de vibration et calculé les positions des atomes, leurs vitesses et accélérations, et nous avons étudié leur évolution avec le temps.

Nous avons vérifié la validité de nos calculs en calculant la température du système et c'était la même que la température à laquelle les vitesses initiales ont été choisies.

**Mots-clés : matériaux 2D – Phonons – Graphène - Dynamique moléculaire – Mode de vibration.**

## **Bidimensional materials: study of graphene phonons using molecular dynamics simulation.**

### Abstract:

This memory identifies newly discovered 2D materials. These materials are currently subject to much research because of their unique and distinctive features. In this work, we discussed the most important features and applications of these materials. We developed a FORTRAN-based computer program, which simulates vibrations in graphene. We used molecular dynamics simulation based on Verlet's algorithm. We studied Phonons of graphene. We determined the mode of vibration and calculated the positions of atoms, their velocities and accelerations, and we studied their evolution over time. We checked the validity of our calculations by calculating the temperature of the system and it was the same as the temperature at which the initial velocities were chosen.

**Keywords: 2D materials - Phonons - Graphene - Molecular dynamics - Vibration mode**