



## The influence of temperature and strain rate on the mechanical properties of graphene-like $C_4N_3$ structure

Ahmet Emin Sentürk\*

Department of Industrial Engineering, Faculty of Engineering and Natural Sciences, Maltepe University, Istanbul, 34857, Turkey

### Highlights:

- Effect of different temperatures on the mechanical properties of graphene-like  $C_4N_3$  structure
- Determination of the mechanical properties of graphene-like  $C_4N_3$  structure at different strain rates
- Investigation of failure process and energetic stability of graphene-like  $C_4N_3$  structure

### Keywords:

- Graphene-like structure
- Molecular dynamics
- Mechanical properties
- Temperature
- Strain rate

### Article Info:

Research Article  
Received: 01.07.2020  
Accepted: 11.10.2021

### DOI:

10.17341/gazimmfd.761601

### Correspondence:

Author: Ahmet Emin Şentürk  
e-mail:  
ahmeteminsenturk@maltepe.edu.tr  
phone: +90 216 626 1050 / 2782

### Graphical/Tabular Abstract

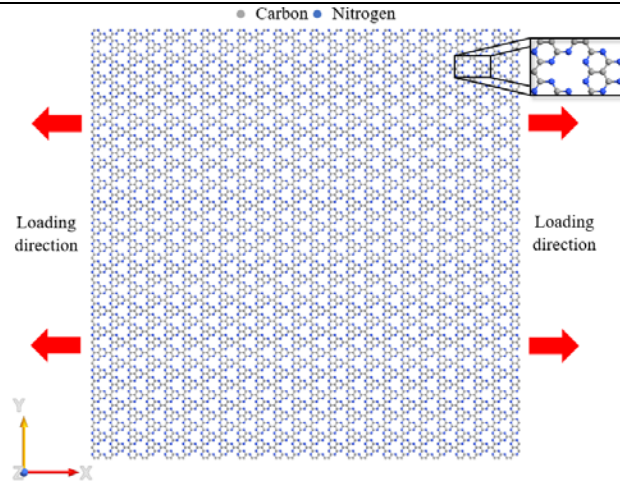


Figure A. Atomic structure of graphene-like  $C_4N_3$  structure

**Purpose:** In this manuscript, the influences of various temperatures along the different loading directions and various strain rates on the mechanical properties of graphene-like  $C_4N_3$  structure were systematically studied, using molecular dynamics (MD) simulations.

### Theory and Methods:

In this manuscript, LAMMPS package, which is open-source MD software, was utilized for implementing all MD simulations of graphene-like  $C_4N_3$  structure. To calculate the mechanical properties, the physical model of this structure consisting of 6827 atoms was built with approximately 15 nm in length and 15 nm in width. To achieve the mechanical properties of graphene-like  $C_4N_3$  structure, uniaxial tensile test was implemented for loading condition at 300 K.

### Results:

As a result of this investigation, the mechanical properties (ultimate tensile strength, Young's modulus and failure strain) of graphene-like  $C_4N_3$  structure gradually decrease with increasing the temperature from 200 K to 900 K. It can be assert that the mechanical properties of graphene-like  $C_4N_3$  structure is isotropic along armchair and zigzag directions. The mechanical properties of graphene-like  $C_4N_3$  structure indicate an increasing trend, as the strain rate increases from  $10^7 \text{ s}^{-1}$  to  $10^9 \text{ s}^{-1}$ . MD simulation results indicate graphene-like  $C_4N_3$  structure shows brittle failure mechanism at 300 K because the rupture and initial debonding of this structure happen at so close strain level.

### Conclusion:

According to the results of MD simulations, graphene-like  $C_4N_3$  structure shows ultra high mechanical properties. The cohesive energy of this structure is negative, which confirms that graphene-like  $C_4N_3$  structure is energetically stable. For graphene-like  $C_4N_3$  structure, the lower mechanical properties values occur at higher temperatures since the atomic bonds become weaker. In addition, when the strain rate increases, the ultimate tensile strength, Young's modulus and failure strain of graphene-like  $C_4N_3$  structure show an increasing trend.



## Sıcaklık ve gerinim hızının grafen benzeri $C_4N_3$ yapısının mekanik özellikleri üzerindeki etkisi

Ahmet Emin Senturk\*

Maltepe Üniversitesi, Mühendislik ve Doğa Bilimleri Fakültesi, Endüstri Mühendisliği Bölümü, 34857 Maltepe İstanbul, Türkiye

### Ö N E Ç İ K A N L A R

- Farklı sıcaklıkların grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının mekanik özelliklerine etkisi
- Farklı gerinim hızlarında grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının mekanik özelliklerinin belirlenmesi
- Grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının deformasyon sürecinin ve enerjik kararlılığının incelenmesi

### Makale Bilgileri

Araştırma Makalesi

Geliş: 07.07.2020

Kabul: 11.10.2021

### DOI:

10.17341/gazimmfd.761601

### Anahtar Kelimeler:

Grafen benzeri yapı,  
moleküler dinamik,  
mekanik özellikler,  
sıcaklık,  
gerinim hızı

### ÖZ

Son yıllarda, iki boyutlu (2B) karbon bazlı nanomalzemeler sahip oldukları yüksek fiziksel özellikleri nedeniyle yoğun ilgi görmektedir. Bu çalışmada, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının mekanik özellikleri moleküler dinamik (MD) simülasyonları kullanılarak detaylı bir şekilde incelenmiştir. MD simülasyonları sonuçlarına göre, bu yapı üstün mekanik özellikler (çekme dayanımı, elastisite modülü ve kopma gerinimi) göstermektedir. Grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının mekanik özellikleri farklı yüklemeye yönlerinde 200 K ile 900 K arasındaki beş farklı sıcaklıkta ve  $10^7 s^{-1}$  ile  $10^9 s^{-1}$  arasındaki farklı gerinim hızlarında incelenmiştir. MD sonuçları, bu 2B yapıların mekanik özelliklerinin, sıcaklık arttıkça, yüksek sıcaklığın zayıflatma etkisi nedeniyle yavaş yavaş azaldığını göstermektedir. MD sonuçları, bu yapının mekanik özelliklerinin, yüksek sıcaklığın atomlar arasındaki bağlanma enerjisini zayıflatma etkisi nedeniyle sıcaklık arttıkça yavaş yavaş azaldığı görülmektedir. Ayrıca, gerinim hızı arttığında, mekanik özellikler artış eğilimi göstermektedir. Bu yapının mekanik özellikleri armchair ve zigzag yönlerinde gerçekleştirilen yüklemeler sonucunda izotropiktir. Ek olarak, 300 K'de grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının şekil değiştirme süreci incelenmiştir. MD simülasyon sonuçları göstermiştir ki bu yapının gevrek kırılma mekanizmasına sahiptir. Bu çalışma sonuçlarının, gerçekleştirilecek 2B karbon-bazlı nano cihazların mekanik yönetimi için fayda sağlayacağı beklenmektedir.

## The influence of temperature and strain rate on the mechanical properties of graphene-like $C_4N_3$ structure

### H I G H L I G H T S

- Effect of different temperatures on the mechanical properties of graphene-like  $C_4N_3$  structure
- Determination of the mechanical properties of graphene-like  $C_4N_3$  structure at different strain rates
- Investigation of failure process and energetic stability of graphene-like  $C_4N_3$  structure

### Article Info

Research Article

Received: 01.07.2020

Accepted: 11.10.2021

### DOI:

10.17341/gazimmfd.761601

### Keywords:

Graphene-like structure,  
molecular dynamics,  
mechanical properties,  
temperature,  
strain rate

### ABSTRACT

Two-dimensional (2D) carbon-based nanomaterials have received significant attention because of their high physical properties, in recent years. In this investigation, the mechanical properties of graphene-like  $C_4N_3$  structure are studied in detail, using molecular dynamics (MD) simulations. According to the results of MD simulations, this structure shows superior mechanical properties (ultimate tensile strength, Young's modulus and failure strain). The mechanical properties of graphene-like  $C_4N_3$  structure are also examined at five distinct temperatures between 200 K and 900 K along the different loading directions and various strain rates from  $10^7 s^{-1}$  to  $10^9 s^{-1}$ . MD results show that the mechanical properties of this structure gradually decrease as temperature increases, due to the weakening effect of high temperature on the binding energy between atoms. Furthermore, as the strain rate increases, it is revealed that the mechanical properties show an increasing trend. The mechanical properties of this structure are isotropic as a result of loading in the armchair and zigzag directions. Additionally, at 300 K, the failure process of graphene-like  $C_4N_3$  structure is examined. MD simulation results demonstrate that this structure has brittle failure mechanism. The results of this study may be considered helpful for future works of mechanical management of 2D carbon-based nanodevices.

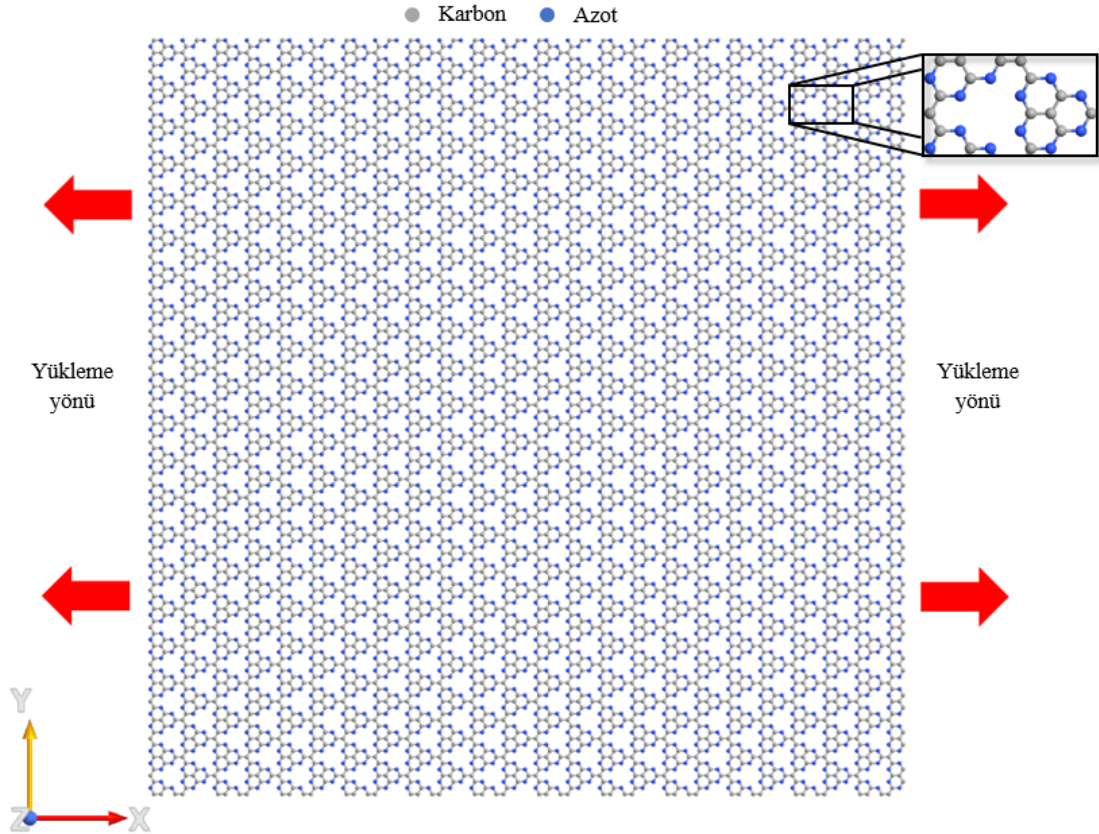
## 1. GİRİŞ (INTRODUCTION)

Nano ölçekli iki boyutlu (2B) malzemeler sahip oldukları mükemmel elektronik yapıları, üstün mekanik özellikleri ve yüksek ısı ve elektriksel iletkenliklerinden dolayı son yıllarda araştırmacılar tarafından yoğun ilgi görmektedir. Özellikle 2B malzemelerin önemi, benzersiz mekanik [1] ve ısı [2] özellikleri, yüksek elektron hareketliliği ve stabilitesine sahip olan grafenden [3-5] elde edilen başarılı sonuçlar sayesinde artmıştır. Bununla birlikte, yarı metalik bir malzeme olarak da sınıflandırılan grafen 0 eV enerji bandı açıklığına sahiptir. Bu nedenle, nano-elektronik cihazlarda uygulama alanları sınırlıdır. Grafende bu kısıtlamayı aşabilmek ve enerji bandı açıklığı oluşturmak için kimyasal katkılandırma [6-8], grafeni nanoşeritler haline getirme [9], heteroyapılar [10-12] ve harici elektrik alan uygulamaları [13, 14] gibi yaygın yöntemler kullanılmaktadır. Gerçekleştirilen düzenlemeler içerisinde en yaygın olarak kullanılan yöntem grafeni metal veya ametal atomlar ile katkılandırmadır. Bu şekilde elde edilen kovalent olarak bağlı karbon (C) ve azot (N) atomlarından oluşan karbon nitrür ( $C_nN_n$ ) yapıları önemli bir aday olarak düşünülmektedir. Sahip oldukları enerji bandı açıklıkları ile nano-elektronik uygulamaların yanı sıra  $C_nN_n$  nanoyapıları enerji dönüşümü ve depolanması ve çevresel uygulamalar kapsamında doğrudan metanol yakıt hücresi ve kataliz işlemlerinde potansiyel uygulamalara sahiptir. Atomik ve

elektronik yapısı kovalent bağlanmayı mümkün kıldığından,  $C_nN_n$  nanoyapıları üstün mekanik, optik, elektronik ve ısı özellikler göstermektedir [15-18]. Bazı  $C_nN_n$  nanoyapıları ve 2B allotropoları deneysel olarak üretilirse de, bazıları henüz teorik olarak incelenmiştir [19-22]. Bu bağlamda, grafen benzeri  $C_2N$ ,  $C_3N$ ,  $C_3N_4$  ve  $C_4N_3$  yapıları için literatürde gerçekleştirilen çalışmalar [23-26] incelendiğinde, bu yapıların enerji bandı açıklıkları sırasıyla, 1,71 eV, 2,7 eV, 2,7 eV ve 2,21 eV değerlerinde olduğu görülmüştür. Aynı zamanda yüksek mekanik özellikler sunan grafen benzeri  $C_2N$ ,  $C_3N$  ve  $C_3N_4$  yapılarının moleküler dinamik (MD) simülasyonları metodu kullanılarak belirlenen elastisite modülleri sırasıyla 0,335, 0,313 ve 0,21 TPa'dır. Bu yapıların çekme dayanımları ise 60, 33-35 ve 25 GPa'dır [23, 27, 28]. Yukarıda verilen literatür araştırmasından görüldüğü üzere, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının mekanik özelliklerinin detaylı olarak araştırıldığı bir çalışma bulunmamaktadır. Bu nedenle bu açığı gidermek amacıyla bu çalışmada MD simülasyonu metodu ile grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının mekanik özellikleri detaylı olarak araştırılmıştır.

## 2. FİZİKSEL MODEL VE SİMÜLASYON METODU (PHYSICAL MODEL AND SIMULATION METHOD)

Bu çalışmada kullanılan 2B grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının boyutları  $15\text{ nm} \times 15\text{ nm}$ 'dir. Ayrıca bu yapı 6827 atomdan oluşacak şekilde modellenmiştir. Şekil 1'de, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının fiziksel modeli gösterilmektedir.



Şekil 1. Grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının atomik yapısı (Atomic structure of graphene-like  $C_4N_3$  structure)

Mavi ve gri toplar sırasıyla N ve C atomlarını temsil etmektedir. Grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının mekanik özellikleri klasik MD simülasyonları kullanılarak belirlenmiştir. Bu çalışmadaki MD simülasyonlar LAMMPS (large-scale atomic/molecular massively parallel simulator) [29] yazılım paketi ile gerçekleştirilmiştir. MD simülasyon sonuçlarının doğruluğu, atomlararası kuvvetleri tanımlayan kuvvet alanlarının uygunluğu ile doğrudan ilişkilidir. Bu çalışmada, atomlar arasındaki etkileşimleri tanımlamak için optimize edilmiş Tersoff potansiyeli [30, 31] kullanılmıştır. C ve N atomları için Lindsay ve Broide [32] ve Matsunaga vd. [33] tarafından belirtilen parametreler kullanılmıştır. Bu parametreler Tablo 1'de verilmiştir.

**Tablo 1.** C ve N atomları için optimize edilmiş Tersoff atomlar-arası potansiyel parametreleri  
(The optimized Tersoff interatomic potential parameters for C and N atoms)

| Parametreler                    | C             | N       |
|---------------------------------|---------------|---------|
| $A$ (eV)                        | 1393,6        | 11.000  |
| $B$ (eV)                        | 430           | 219,45  |
| $\lambda$ ( $\text{\AA}^{-1}$ ) | 3,4879        | 5,7708  |
| $\mu$ ( $\text{\AA}^{-1}$ )     | 2,2119        | 2,5115  |
| $\beta$                         | 0,00000015724 | 0,10562 |
| $n$                             | 0,72751       | 12,4498 |
| $c$                             | 38,049        | 79,934  |
| $d$                             | 4,384         | 134,32  |
| $h$                             | -0,930        | -0,9973 |
| $R$ ( $\text{\AA}^{-1}$ )       | 1,95          | 2,15    |
| $D$ ( $\text{\AA}^{-1}$ )       | 0,15          | 0,15    |

Atomik koordinatların fonksiyonu olarak iki komşu atomun potansiyel enerji formu şu şekilde verilmiştir (Eş. 1-Eş. 4)).

$$E = \sum_i E_i = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \quad (1)$$

burada,

$$V_{ij} = f_C(r_{ij})[f_R(r_{ij}) - b_{ij}f_A(r_{ij})] \quad (2)$$

$$f_R(r_{ij}) = A_{ij}e^{-\lambda_{ij}r_{ij}} \quad (3)$$

$$f_A(r_{ij}) = -B_{ij}e^{-\lambda_{ij}r_{ij}} \quad (4)$$

Kesme fonksiyonu  $f_C(r_{ij})$  şu şekilde verilir (Eş. 5) :

$$f_C(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{r_{ij} - R_{ij}}{S_{ij} - R_{ij}}\right), & R_{ij} < r_{ij} < S_{ij} \\ 0, & r_{ij} > S_{ij} \end{cases} \quad (5)$$

Burada bağ fonksiyonu terimi  $b_{ij}$  şu şekilde verilir (Eş. 6-Eş. 8):

$$b_{ij} = (1 + \beta_i^{n_i} \zeta_{ij}^{n_i})^{-1/2n_i} \quad (6)$$

$$\zeta_{ij}^{n_i} = \sum_{k \neq i,j} f_C(r_{ik}) \omega_{ik} g(\theta_{ijk}) \quad (7)$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{c_i^2}{d_i^2} - \frac{c_i^2}{d_i^2 + (h_i - \cos \theta_{ijk})^2} \quad (8)$$

burada kesme fonksiyonu  $f_C$ , itme ve çekim çifti potansiyelleri ise sırasıyla,  $f_R$  ve  $f_A$  olarak tanımlanmıştır. Şunu vurgulamakta gerekir ki, optimize edilmiş Tersoff potansiyeli kullanılarak elde edilen, grafenin ve 2B nano-yapıların elastisite modülü, çekme dayanımı [34, 35] ve ısı iletkenlik katsayısı [36, 37] değerleri deneysel olarak ölçülen değerlere diğer potansiyeller ile elde edilen değerlerden daha yakın olduğu bulunmuştur. Grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının mekanik özellikleri belirlenirken periyodik sınır koşulları 2B yapının düzlemsel yönleri boyunca uygulanmıştır. Grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının, yükmeden önce, potansiyel enerjisinin sabit ve minimum olması için eşlenik gradyan yöntemi ile 2B yapının en stabil hale getirilmesi gerçekleştirilmiştir. 0,5 fs sabit zaman adımı, simülasyon sırasındaki dengesizliklerin önüne geçebilmek için seçilmiştir. Nose-Hoover termostat ve barostatı da bütün MD simülasyonlarda kullanılmıştır [38]. Deformasyon kontrol metodu ile, grafenin elastisite modülünü belirlemek için, tek eksenli çekme testi simülasyonu gerçekleştirilmiştir. 300 K sıcaklığında, simülasyonlarda yükleme durumu NVT (sabit molekül sayısı (N), hacim (V) ve sıcaklık (T)) ortamında ve yükleme eksen (X) boyunca da mühendislik gerinim hızı  $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$  olacak şekilde belirlenmiştir. Ayrıca bu sistemde başlangıç aşamasından itibaren gerçekleştirilen sıcak ölçeklendirilmesi ile sıcaklık kontrolü sağlanır. Her gerinim seviyesine karşılık gelen gerilme değerleri hesaplanarak gerilme-gerinim eğrisini elde edilmiştir. Eş. 9 ve Eş. 10 kullanımı ile gerilme ve gerinim eğrisi oluşturulmakta ve Eş. 11 kullanımı ile de elastisite modülü ( $E$ ) belirlenmektedir. Eş. 11 ile aynı sonucu veren gerilme-gerinim eğrisinin doğrusal kısmının eğiminden yararlanılmıştır [39].

$$\varepsilon = \frac{l - l_0}{l_0} \quad (9)$$

$$\sigma = \frac{1}{At} \frac{\partial U}{\partial \varepsilon} \quad (10)$$

$$E = \frac{1}{At} \frac{\partial^2 U}{\partial^2 \varepsilon} \quad (11)$$

Burada;  $l$ ,  $l_0$ ,  $A$ ,  $t$  ve  $U$  sırasıyla, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının son ve başlangıç durumundaki uzunluğu, yüzey alanı, kalınlığı ve gerinim enerjisidir.

### 3. SONUÇLAR VE TARTIŞMALAR (RESULTS AND DISCUSSIONS)

İlk olarak, kullanılan MD simülasyonu yöntemini doğrulamak için, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısına fiziksel olarak oldukça yakın bir model olan ve literatürde detaylı bir şekilde araştırılan grafen benzeri  $C_3N_4$  yapısının mekanik

özellikleri araştırılmıştır. Şekil 2’de, grafen benzeri  $C_3N_4$  ve  $C_4N_3$  yapılarının tek eksenli gerilim-gerinim eğrisi verilmiştir.

300 K ve  $10^9 \text{ s}^{-1}$  gerinim hızında, grafen benzeri  $C_3N_4$  yapısının düşük gerinim seviyelerinde (gerinim değeri 0,05’e ulaşmaya kadar) elastisite modülü 0,21 TPa olarak hesaplanmıştır. Ayrıca MD simülasyon sonuçları, bu yapının maksimum çekme dayanımı değerinin de 25 GPa olduğunu göstermektedir. Elde edilen bu sonuçlar, grafen benzeri  $C_3N_4$  yapısı için elastisite modülü ve çekme dayanımı sırasıyla 0,21 TPa ve 25 GPa olarak hesaplanan MD simülasyon çalışmaları [40] ile uyumludur.

### 3.1. Enerji Kararlılığı (Energy Stability)

Öncelikle gerçekleştirilen geometri optimizasyonu sonucu, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısında C-C ve C-N bağ uzunlukları sırasıyla 1,42 ve 1,35 Å olarak ölçülmüştür. Bu bağ uzunlukları yoğunluk fonksiyoneli teorisi ile edilmiş olan C-C bağ uzunluğu için 1,42 Å ve C-N bağ uzunluğu için 1,34 Å sonuçlarına yakındır [41]. Grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının enerji kararlılığını inceleyebilmek için, atom başına bağlanma enerjisi (kohesif enerji) şu şekilde belirlenmiştir:

$$E_{bağ} = \left( \sum_i E_i - E_t \right) / n \quad (12)$$

burada  $E_t$ ,  $E_i$  ve  $n$  sırasıyla, hücre başına toplam enerji,  $i$ ’inci izole atomun enerjisi ve hücredeki toplam atom sayısını ifade etmektedir. Elde edilen MD simülasyon sonucuna göre grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının bağlanma enerjisi negatif

olmakta ve hesaplanan değer  $-7,16 \text{ eV}$ ’dir. Bu da grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının enerji olarak kararlı olduğunu doğrulamaktadır. Tek eksenli gerilim-gerinim eğrisi Şekil 2’de verilen grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının elastisite modülü 0,25 TPa olarak belirlenmiştir. Ayrıca grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının çekme dayanımı ve kopma gerinimi sırasıyla, 29 GPa ve 0,116’dır.

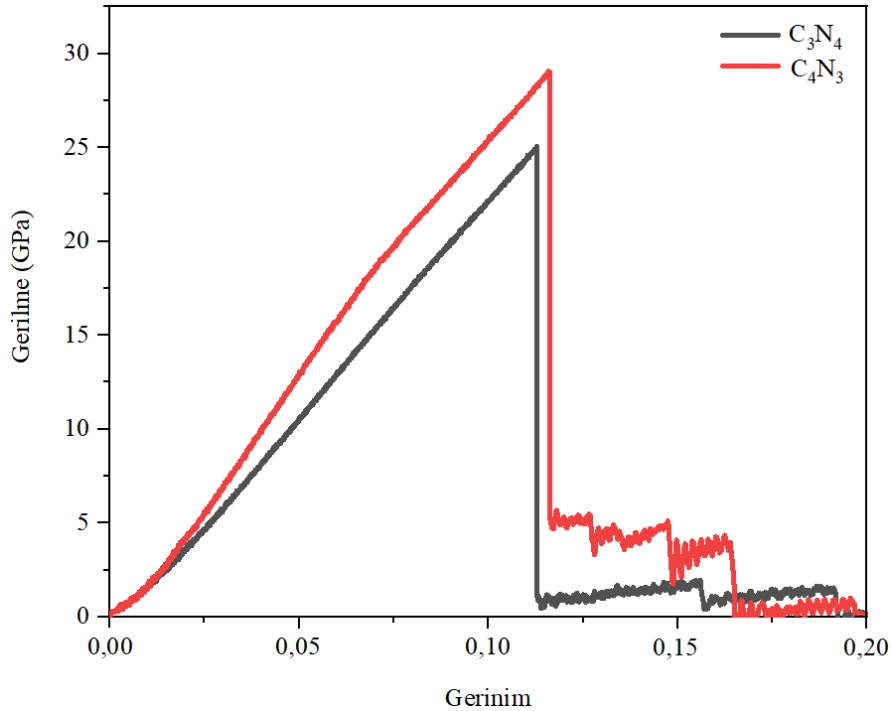
### 3.2. Deformasyon Süreci (Failure Process)

Şekil 3’de, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının gerinim değerlerindeki değişime bağlı olarak deformasyon süreci gösterilmiştir.

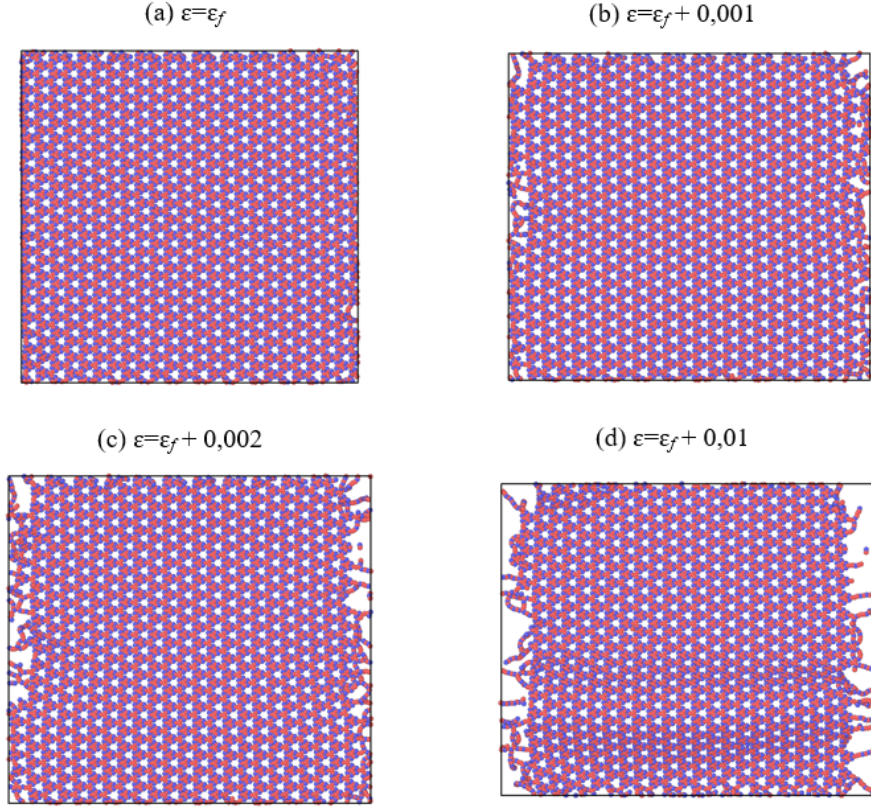
İlk olarak Şekil 3a’da görüldüğü gibi deformasyon kenar kısımlarda birkaç bağın bozulmasıyla başlamaktadır. Daha sonra Şekil 3b ve Şekil 3c’de deformasyon ilerlemekte ve son olarak Şekil 3d’de yapının yırtılmasıyla son bulmaktadır. MD simülasyon sonuçlarımız, başlangıçtaki bağda gerçekleşen bozulma ile yapının yırtılmasının çok yakın gerilme seviyelerinde gerçekleştiğini göstermiştir. Bu nedenle, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının oda sıcaklığına yakın 300 K’de gevrek kırılma mekanizması gösterdiği görülmektedir. Ayrıca gerçekleştirilen çalışmalarda [23, 27, 28, 40, 42], grafen benzeri  $C_3N_4$ ,  $C_3N$ ,  $C_2N$ ,  $C_3N_3$  ve  $B_3C_3$  yapılarının da benzer şekilde deformasyon süreci sonunda gevrek kırılma mekanizmasına sahip olduğu vurgulanmıştır.

### 3.3. Sıcaklık Etkisi (Temperature Effect)

Bu bölümde, farklı sıcaklıkların grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının mekanik özellikleri üzerindeki etkisi incelenmiştir.



Şekil 2. Grafen benzeri  $C_3N_4$  ve  $C_4N_3$  yapılarının gerilme-gerinim eğrileri (Stress-strain curves of defect-free graphene-like  $C_3N_4$  and  $C_4N_3$  structures)



**Şekil 3.** Grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının farklı gerinim seviyelerindeki deformasyon süreci.  $\epsilon_f$  yapının çekme dayanımındaki gerinimi (Failure process of graphene-like  $C_4N_3$  structure at different strain levels.  $\epsilon_f$  is the structure's strain at ultimate tensile strength)

İlk olarak, Tablo 2'de, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının mekanik özellikleri armchair ve zigzag yönleri boyunca 200-900 K arasındaki çeşitli sıcaklıklar altında verilmiştir.

**Tablo 2.** 200 K ile 900 K arasındaki farklı sıcaklıklarda zigzag ve armchair yönlerinde grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının mekanik özellikleri

(Mechanical properties of graphene-like  $C_4N_3$  structure in zigzag and armchair directions under the different temperatures between 200 K and 900 K)

| Yön      | Sıcaklık (K) | Elastisite modülü (TPa) | Çekme dayanımı (GPa) | Kopma gerinimi |
|----------|--------------|-------------------------|----------------------|----------------|
| Armchair | 200          | 0,268                   | 30,8                 | 0,125          |
| Zigzag   | 200          | 0,271                   | 31                   | 0,127          |
| Armchair | 300          | 0,25                    | 29                   | 0,116          |
| Zigzag   | 300          | 0,255                   | 29,3                 | 0,117          |
| Armchair | 500          | 0,231                   | 27                   | 0,105          |
| Zigzag   | 500          | 0,233                   | 27,2                 | 0,108          |
| Armchair | 700          | 0,214                   | 25,3                 | 0,095          |
| Zigzag   | 700          | 0,218                   | 25,8                 | 0,099          |
| Armchair | 900          | 0,198                   | 23,4                 | 0,084          |
| Zigzag   | 900          | 0,201                   | 23,8                 | 0,087          |

Bu sonuçlara göre, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının çekme dayanımı, elastisite modülü ve kopma gerinimi değerleri sıcaklığın 900 K'ye kadar artırılmasıyla yavaş yavaş azalmaktadır. Sıcaklık arttıkça bu yapının elastisite modülü değeri düşer, çünkü atomlar arasındaki bağlanma enerjisi

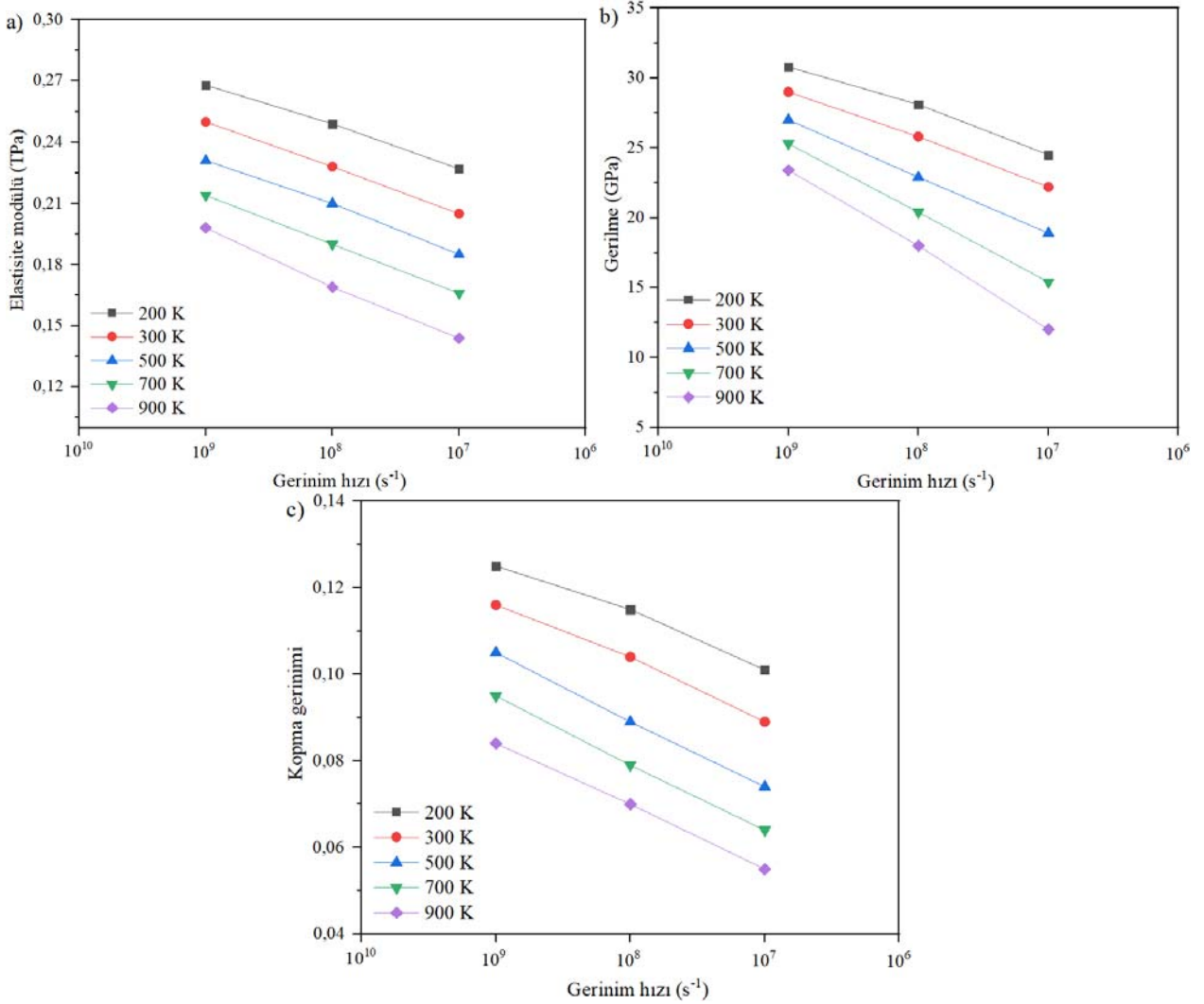
artan sıcaklıkla azalır. Ayrıca, sıcaklığın artmasıyla komşu atomlar arasındaki mesafe artar ve bu da atomların etkileşim enerjisinin azalmasına neden olur. Bu nedenle, bu yapıların kopma gerinimi sıcaklığın artmasıyla azalmaktadır. Belirtmek gerekir ki yükselen kinetik enerji nedeniyle, gerinim enerjisi de sıcaklığın artmasıyla azalır. Bu sebeple, çekme dayanımı da yüksek sıcaklıktan olumsuz olarak etkilenir. Tablo 2'de, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısı armchair yönünde yüklendiğinde, elastisite modülündeki maksimum değişim, sıcaklık 200 K'den 900 K'ye yükseldiğinde yaklaşık %26,1'dir. Sıcaklık 900K'ye yükseltildiğinde, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının çekme dayanımı 300 K'de elde edilen değere göre %19,3 daha düşüktür. Diğerlerine benzer şekilde, sıcaklık 200 K'dan 900 K'ye yükseldiğinde, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının kopma gerinimi azalması yaklaşık %32,8 olarak hesaplanmaktadır. Tablo 2'de, yapı zigzag yönünde yüklendiğinde, sıcaklık 200 K'den 900 K'ye yükseldiğinde, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının elastisite modülündeki maksimum düşüş %25,8'dir. Elastisite modülüne benzer şekilde, sıcaklık 900 K'ye yükseltildiğinde, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının çekme dayanımı 200 K'deki değere göre %23,2 daha düşüktür. Son olarak, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının kopma gerinimi azalması, sıcaklık 200 K'den 900 K'ye yükseldikçe yaklaşık %31,5 azalmıştır. Tablo 2 ortaya koymaktadır ki, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının mekanik özellikleri armchair ve zigzag yönlerinde gerçekleştirilen yüklemeler doğrultusunda izotropiktir. Ek olarak, sıcaklık etkisinin grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısı üzerindeki değişimi

diğer grafen benzeri yapılar ile benzerlik göstermektedir. Senturk [42] sıcaklık etkisinin grafen benzeri  $C_3N_3$  ve  $B_3C_3$  yapıları üzerindeki etkisini incelemiştir. Sıcaklık 200 K'den 900 K'ye yükseldiğinde, grafen benzeri  $C_3N_3$  ve  $B_3C_3$  yapılarının elastisite modülü (armchair doğrultusunda) değerleri sırasıyla %36,3 ve %34 azalmaktadır. Sousa ve arkadaşları da [43] 10 K'den 600 K'ye kadar olan sıcaklık değişiminin grafen benzeri  $C_3N_4$  (triazine tipi) yapısının mekanik özellikleri üzerindeki etkisini incelemiştir. Grafen benzeri  $C_3N_4$  yapısının elastisite modülünün (armchair doğrultusunda) yaklaşık %16,5 azaldığını gözlemlemiştir.

### 3.4. Gerinim Hızı Etkisi (Strain Rate Effect)

Bu bölümde, farklı gerinim hızlarının grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının mekanik özellikleri üzerindeki etkisi araştırılmıştır. Şekil 4'de, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının çekme dayanımı, elastisite modülü ve kopma gerinimi değerleri, farklı sıcaklıklar için armchair yönü boyunca farklı

gerinim hızlarının bir fonksiyonu olarak gösterilmiştir. Şekil 4'de, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının çekme dayanımı, elastisite modülü ve kopma gerinimi değerleri, gerinim hızı  $10^7$  s<sup>-1</sup>'den  $10^9$  s<sup>-1</sup>'e yükseldiğinde artan bir eğilim göstermektedir. Oda sıcaklığında, gerinim hızı  $10^9$  s<sup>-1</sup>'den  $10^7$  s<sup>-1</sup>'e düştüğünde, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının elastisite modülü, çekme dayanımı ve kopma gerinimi değerlerindeki maksimum değişimler sırasıyla yaklaşık %27,2, %48,7 ve %34,5'dir, Şekil 4. Ayrıca, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının elastisite modülü, çekme dayanımı ve kopma gerinimi üzerindeki gerinim hızı etkisi, yüksek sıcaklıkta düşük sıcaklığa göre daha belirgindir. Grafen benzeri bazı yapılar için de gerinim hızının değişim etkileri üzerine incelemeler gerçekleştirilmiştir. Senturk [42] grafen benzeri yapılarından  $C_3N_3$  ve  $B_3C_3$ 'ün farklı gerinim hızlarının mekanik özellikler üzerindeki etkisini araştırmıştır. Grafen benzeri  $C_3N_3$  ve  $B_3C_3$  yapılarının elastisite modülü değerleri sırasıyla %12,4 ve %12 azalmaktadır. Bu çalışmada da gerinim hızının grafen benzeri  $C_3N_3$  ve  $B_3C_3$  yapılarının mekanik özellikleri



Şekil 4. Farklı sıcaklıklar için armchair yönü boyunca çeşitli gerinim hızlarının bir fonksiyonu olarak grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının a) elastisite modülü b) çekme dayanımı ve c) kopma gerinimi (a) Young's modulus b) ultimate tensile strength and c) failure strain of graphene-like  $C_4N_3$  structure as a function of various strain rate along the armchair direction for different temperatures)

üzerindeki etkisinin yüksek sıcaklıklarda daha fazla olduğu görülmektedir. Mortazavi ve arkadaşları [23] grafen benzeri  $C_3N$  yapısının mekanik özelliklerini incelediğinde, gerinim hızının azalması ile mekanik özelliklerin azaldığı görülmüştür.

#### 4. SONUÇLAR (CONCLUSIONS)

Bu makalede, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının mekanik özellikleri (elastisite modülü, çekme dayanımı ve kopma gerinimi) MD simülasyonları kullanılarak incelenmiştir. Ayrıca, farklı sıcaklıkların, gerinim hızlarının ve yükleme yönlerinin bu yapı üzerindeki etkileri incelenmiştir. Bu makaleden elde edilen sonuçlar şu şekildedir:

- Oda sıcaklığında elde edilen MD simülasyon sonuçlarına göre, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısı oldukça yüksek elastisite modülü, çekme dayanımı ve kopma gerinimine sahiptir. Bu değerler sırasıyla, 0,25-0,255 TPa, 29-29,3 GPa ve 0,116-0,117'dir. Ayrıca, bu sonuçlara göre, bu yapının mekanik özellikleri armchair ve zigzag yönlerinde gerçekleştirilen yüklemeler sonucunda izotropiktir.
- Bu çalışmada, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının enerjik olarak kararlı olduğu belirlenmiştir.
- Ek olarak, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının deformasyon süreci 300 K'da incelenmiştir. Elde edilen sonuçlara göre, bu yapının gevrek kırılma mekanizması gösterdiği görülmektedir.
- 200 K ile 900 K arasındaki beş farklı sıcaklığın ve ayrıca  $10^7 s^{-1}$  ve  $10^9 s^{-1}$  arasındaki üç farklı gerinim hızının grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının mekanik özellikleri üzerindeki etkileri incelenmiştir. Yüksek sıcaklıklarda atomlar arasındaki bağların zayıflamasından dolayı grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısı daha düşük mekanik özelliklere sahip olmaktadır. Artan sıcaklıklarda gerçekleştirilen farklı yönlerdeki yüklemelerde de yapının izotropik özelliği devam etmektedir. Ek olarak, gerinim hızı arttığında, grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısının elastisite modülü, çekme dayanımı ve kopma gerinimi değerleri artan bir eğilim gösterir.

Bu çalışmada elde edilen sonuçlar doğrultusunda, üstün mekanik özelliklere sahip grafen benzeri  $C_4N_3$  yapısı ile yeni malzemelerin üretimi, polimerik malzemelere takviye olarak kullanılması, nanotransistörler ve 2B nanomalzeme tabanlı enerji depolama nano aygıtları için yararlı olması beklenmektedir.

#### TEŞEKKÜR (ACKNOWLEDGEMENT)

Bu çalışmada gerçekleştirilen MD simülasyon hesaplamalarının bir kısmı TÜBİTAK ULAKBİM, TRUBA'da gerçekleştirilmiştir.

#### KAYNAKLAR (REFERENCES)

1. Ghosh S., Bao W., Nika D.L., Subrina S., Pokatilov E.P., Lau C.N., Balandin A.A., Dimensional crossover

of thermal transport in few-layer graphene, *Nat Mater*, 9 (7), 555-558, 2010.

2. Lee C., Wei X., Kysar J.W., Hone J., Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene, *Science*, 321 (5887), 385-388, 2008.
3. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Katsnelson M.I., Grigorieva I.V, Dubonos S.V., Firsov A.A., Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene, *Nature*, 438, 197-200, 2005.
4. Zhang Y.B., Tan Y.W., Stormer H.L., Kim P., Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene. *Nature*, 438, 201-204, 2005.
5. Geim A.K., Novoselov K.S., The rise of graphene, *Nat Mater*, 6 (3), 183-191, 2007.
6. Martins T.B., Miwa R.H., da Silva A.J., Fazzio A., Electronic and transport properties of boron-doped graphene nanoribbons, *Phys Rev Lett*, 98 (19), 196803, 2007.
7. Lherbier A., Dubois S.M.-M., Declercq X., Niquet Y.-M., Roche S., Charlier J.-C., Transport properties of graphene containing structural defects, *Phys Rev B*, 86 (7), 075402, 2012.
8. Lherbier A., Blase X., Niquet Y.M., Triozon F., Roche S., Charge transport in chemically doped 2D graphene, *Phys Rev Lett*, 101 (3), 036808, 2008.
9. Wang X., Ouyang Y., Li X., Wang H., Guo J., Dai H., Room-temperature all-semiconducting sub-10-nm graphene nanoribbon field-effect transistors, *Phys Rev Lett*, 100 (20), 206803, 2008.
10. Hashmi A., Farooq U., Hong J., Graphene/phosphorene bilayer: High electron speed, optical property and semiconductor-metal transition with electric field, *Curr Appl Phys*, 16 (3), 318-323, 2016.
11. Gao N., Li J.C., Jiang Q., Tunable band gaps in silicene-MoS<sub>2</sub> heterobilayers, *Phys Chem Chem Phys*, 16 (23), 11673, 2014.
12. You B., Wang X., Zheng Z., Mi W., Black phosphorene/monolayer transition-metal dichalcogenides as two dimensional van der Waals heterostructures: a first-principles study, *Phys Chem Chem Phys*, 18 (10), 7381, 2016.
13. Medvedeva M.V., Blanter Y.M., Piezoconductivity of gated suspended graphene, *Phys Rev B*, 83, 045426, 2011.
14. Ma Y., Dai Y., Guo M., Niu C., Zhu Y., Huang B., Evidence of the existence of magnetism in pristine VX<sub>2</sub> monolayers (X = S, Se) and their strain-induced tunable magnetic properties, *ACS Nano*, 6 (2), 1695-1701, 2012.
15. Zhou Q., Wu M., Zhang M., Xu G., Yao B., Li C., Shi G., Graphene-based electrochemical capacitors with integrated high-performance, *Mater Today Energy*, 6, 181-188, 2017.
16. Lee S.U., Belosludov R.V., Mizuseki H., Kawazoe Y., Designing nanogadgets for nanoelectronic devices with nitrogen-doped capped carbon nanotubes, *Small*, 5 (15), 1769-1775, 2009.



17. Li J., Cui W., Sun Y., Chu Y., Cen W., Dong F., Directional electron delivery via a vertical channel between g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> layers promotes photocatalytic efficiency, *J Mater Chem A*, 5, 9358-9364, 2017.
18. Zheng Y., Liu J., Liang J., Jaroniec M., Qiao S.Z., Graphitic carbon nitride materials: controllable synthesis and applications in fuel cells and photocatalysis, *Energy Environ Sci*, 5, 6717-6731, 2012.
19. Zhu G., Lü K., Sun Q., Kawazoe Y., Jena P., Lithium-doped triazine-based graphitic C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> sheet for hydrogen storage at ambient temperature, *Comput Mater Sci*, 81, 275-279, 2014.
20. Li X., Zhang S., Wang Q., Stability and physical properties of a tri-ring based porous g-C<sub>4</sub>N<sub>3</sub> sheet, *Phys Chem Chem Phys*, 15, 7142-7146, 2013.
21. Mannix A.J., Kiraly B., Hersam M.C., Guisinger N.P., Synthesis and chemistry of elemental 2D materials, *Nature Reviews Chemistry*, 1, 0014, 2017.
22. Du A., Sanvito S., Smith S.C., First-principles prediction of metal-free magnetism and intrinsic half-metallicity in graphitic carbon nitride, *Phys Rev Lett*, 2012, 108, 197207.
23. Mortazavi B., Ultra high stiffness and thermal conductivity of graphene like C<sub>3</sub>N, *Carbon*, 118, 25-34, 2017.
24. Mahmood J., Lee E.K., Jung M., Shin D., Choi H.-J., Seo J.-M., Jung S.-M., Kim D., Li F., Lah M.S., Park N., Shin H.-J., Oh J.H., Baek J.-B., Two dimensional polyaniline (C<sub>3</sub>N) from carbonized organic single crystals in solid state, *Proc Natl Acad Sci*, 113, 7414-7419, 2016.
25. Xu Y., Gao S.-P., Band gap of C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> in the GW approximation, *Int J Hydrog Energy*, 37 (15), 11072-11080, 2012.
26. Bafekry A., Neek-Ama M., Tuning the electronic properties of graphene-graphitic carbon nitride heterostructures and heterojunctions by using an electric field, *Phys Rev B*, 101, 085417, 2020.
27. Mortazavi B., Rahaman O., Rabczuk T., Pereira L.F.C., Thermal conductivity and mechanical properties of nitrogenated holey graphene, *Carbon*, 106, 1-8, 2016.
28. Mortazavi B., Cuniberti G., Rabczuk T., Mechanical properties and thermal conductivity of graphitic carbon nitride: A molecular dynamics study, *Comput Mater Sci*, 99, 285-289, 2015.
29. Plimpton S., Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, *J Comp Phys*, 117 (1), 1-19, 1995.
30. Tersoff J., New empirical approach for the structure and energy of covalent systems, *Phys Rev B*, 37 (12), 6991-7000, 1988.
31. Tersoff J., Empirical interatomic potential for carbon, with applications to amorphous carbon, *Phys Rev Lett*, 61, 2879-2882, 1988.
32. Lindsay L., Broido D.A., Optimized Tersoff and Brenner empirical potential parameters for lattice dynamics and phonon thermal transport in carbon nanotubes and graphene, *Phys Rev B*, 81 (20), 205441, 2010.
33. Matsunaga K., Fisher C., Matsubara H., Tersoff potential parameters for simulating cubic boron carbonitrides, *Jpn Soc Appl Phys*, 39 (1), 48-51, 2000.
34. Senturk A.E., Oktem A.S., Konukman A.E.S., Influence of defect locations and nitrogen doping configuration on the mechanical properties of armchair graphene nanoribbons, *J Mol Model*, 24 (2), 43, 2018.
35. Şentürk A., Öktem A., Konukman A., Investigation of the effects of nitrogen doping within different sites of Stone-Wales defects on the mechanical properties of graphene by using a molecular Dynamics simulation method, *Journal of the Faculty of Engineering and Architecture of Gazi University*, 34 (1), 69-78, 2019.
36. Senturk A.E., Oktem A.S., Konukman A.E.S., Effects of the nitrogen doping Configuration and site on the thermal conductivity of defective armchair graphene nanoribbons, *J Mol Model*, 23 (8), 247, 2017.
37. Senturk A.E., Oktem A.S., Konukman A.E.S., Investigation of interfacial thermal resistance of hybrid graphene/hexagonal boron nitride, *Int J Mech Mater Des*, 15 (4), 727-737, 2019.
38. Hoover W.G., Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions, *Phys Rev A*, 31 (3), 1695-1697, 1985.
39. Mortazavi B., Ahzi S., Molecular dynamics study on the thermal conductivity and mechanical properties of boron doped graphene, *Solid State Commun*, 152 (15), 1503-1507, 2012.
40. Senturk A.E., Oktem A.S., Konukman A.E.S., An investigation on the thermo-mechanical properties of boron-doped g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, *Appl Phys A*, 125 (1), 53, 2019.
41. Bafekry A., Stampfl C., Akgenc B., Ghergherehchi M., Control of C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> and C<sub>4</sub>N<sub>3</sub> carbon nitride nanosheets' electronic and magnetic properties through embedded atoms, *Phys Chem Chem Phys*, 22, 2249-2261, 2020.
42. Senturk A.E., Outstanding thermo-mechanical properties of graphene-like B<sub>3</sub>C<sub>3</sub> and C<sub>3</sub>N<sub>3</sub>, *Appl Phys A*, 126 (8), 1-15, 2020.
43. Sousa J.M., Botari T., Perim E., Bizoad R.A., Galvao D.S., Mechanical and structural properties of graphene-like carbon nitride sheets, *RSC Adv*, 6 (80), 76915-76921, 2016.

