

Zusammenfassung der Promotionsschrift

**Prognose mechanischer und thermischer Eigenschaften  
von 2D-Materialien mithilfe von Molekulardynamik- und Ab-  
initio-Simulationen auf der Grundlage der  
Dichtefunktionaltheorie**

KUMULATIVE DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades  
Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

an der Fakultät Bauingenieurwesen  
der Bauhaus-Universität Weimar

vorgelegt von

**Rouzbeh Abadi, M.Sc.**

geboren am 21. September 1986 in Ahwaz, Iran

Mentor: Prof. Dr.-Ing. Timon Rabczuk

Status des Doktoranden: Intern

Weimar, Februar 2024

## **Problemstellung und Zielsetzung der Arbeit**

1. Die Temperatur und die topologischen Defekte wirken sich erheblich auf die Bruchfestigkeit von Korngrenzen in einkristallinen, zweidimensionalen hexagonalen Bornitrid-Nanoblättern aus. Zur genauen Vorhersage dieser Eigenschaften ist es wichtig, eine Reihe von Faktoren zu berücksichtigen, einschließlich verschiedener Fehlorientierungswinkel, Defekttypen, Temperaturunterschiede, Belastungsraten und Belastungsbedingungen. Es ist von entscheidender Bedeutung, den Einfluss dieser Faktoren auf die Zugfestigkeit, das Elastizitätsmodul und die Bruchdehnung der Nanoblätter zu ermitteln. Dieses Verständnis ist für die Entwicklung von Materialien mit optimierten mechanischen Eigenschaften unerlässlich.
2. Rissausbreitungen in polykristallinen hexagonalen Bornitrid-Nanoblättern bei unterschiedlichen Temperaturen und Korngrößen sind ebenso essentiell für die Vorhersage makroskopischer Materialkennwerte. Die zentrale Herausforderung besteht darin, den Einfluss der Rissgröße auf Faktoren wie Rissgeschwindigkeit, Rissorientierung und Zugfestigkeit gründlich zu untersuchen. Darüber hinaus ist die Beziehung zwischen den ursprünglichen Risslängen und den mechanischen Eigenschaften der Proben zu ermitteln. Es ist entscheidend, zu erfassen, inwieweit Fehler in den Proben die Ergebnisse beeinflussen, um derartige Materialien zu optimieren.
3. In dieser Arbeit werden molekulardynamische Simulationen durchgeführt, um Nanoporen in polykristallinen Bornitrid-Nanoblättern mittels Beschuss mit Si-, SiC- und Diamantclustern zu erzeugen. Eine zentrale Herausforderung besteht darin, den Einfluss von Faktoren wie kinetischer Energie, Clustergröße und Clustertyp auf die Größe und Topographie der Nanoporen genau zu analysieren. Des Weiteren ist es von großer Bedeutung, die Auswirkungen von externen Zug- und Druckspannungen auf die Fläche, Qualität und Form der erzeugten Nanoporen zu untersuchen. Dies ermöglicht die Entwicklung von maßgeschneiderten Nanoporen, die für spezifische Anwendungen geeignet sind.
4. Ein weiterer Bestandteil dieser Dissertation ist die Entwicklung eines Berechnungsmodell für Graphen-Nanoporen, das in DNA-Sequenzierungsgeräten Anwendung findet. Die zentrale Herausforderung liegt in der Untersuchung des Einflusses unterschiedlicher Typen, Durchmesser und Energien von Si-, SiC- und Diamantclustern auf die Bildung von Nanoporen an verschiedenen Stellen innerhalb der Graphenschicht. Darüber hinaus ist der Einsatz von Bildverarbeitungstechnologien unerlässlich, um die exakte Fläche von sowohl regelmäßigen als auch unregelmäßigen gebohrten Nanoporen zu berechnen. Zudem ist die Auswertung der Beziehung zwischen externen Zug- und Druckspannungen und der Topographie der Nanoporen für die Optimierung des Herstellungsprozesses für DNA-Sequenzierungsgeräte von wesentlicher Bedeutung.
5. Letztendlich soll das Bruch- und Wärmeverhalten von Borophen-Nanofilmen unter verschiedenen Bedingungen und Belastungsszenarien erforscht werden. Das Hauptziel besteht darin, den Zusammenhang zwischen der Gitterstruktur der Nanofilme und ihrer Wärmeleitfähigkeit zu ermitteln, insbesondere im Hinblick auf unterschiedliche Belastungsraten und Temperaturen. Ein weiteres Ziel ist die Identifizierung der Schlüsselfaktoren, die die Bruchfestigkeit von Borophen-Nanofilmen beeinflussen, und die Ableitung von Methoden zur Optimierung ihrer mechanischen Eigenschaften.

## **Stand der Wissenschaft**

6. Die Entdeckung von 2D-Materialien hat ein revolutionäres Forschungsfeld in der Materialwissenschaft eröffnet. Durch die einzigartigen Eigenschaften dieser Materialien, wie hohe Zugfestigkeit, hervorragende thermische Leitfähigkeit und

ausgezeichnete elektronische Eigenschaften, werden sie in vielen technologischen Anwendungen eingesetzt. Trotz des umfangreichen Forschungsinteresses bestehen jedoch immer noch Herausforderungen in Bezug auf die Synthese, Charakterisierung und Anwendung dieser Materialien, die weiter untersucht und gelöst werden müssen.

7. Die Entdeckung von 2D-Materialien hat ebenso in der medizinischen Branche ein innovatives Forschungsfeld eröffnet, das in dieser Dissertation detailliert behandelt wird. Die herausragenden strukturellen Eigenschaften von 2D-hexagonalen Materialien prädestinieren sie für den Einsatz in DNA-Sequenziergeräten, um DNA-Fragmente im Genom abzulesen und so eine Früherkennung von Krebs und anderen Krankheiten zu ermöglichen. Das grundlegende Konzept basiert darauf, eine Graphenmembran zu erzeugen, sie in eine leitfähige Flüssigkeit zu tauchen und an einem Ende eine Spannung anzulegen. Dies fördert die Passage der DNA durch die winzigen Poren des Graphens. Dieser Prozess, bekannt als Nanoporen-Sequenzierung, ermöglicht die Analyse der DNA-Sequenz, Nukleotid für Nukleotid.
8. 2D-hexagonale Materialien sind vielversprechende Kandidaten als Nanofüllstoffe zur Verstärkung von Polymer-Nanokompositen. Ihre exzellenten thermischen Eigenschaften tragen zur Verbesserung der thermischen Stabilität und Leitfähigkeit von Nanokompositen bei. Weiterhin könnte die 2D-Geometrie dieser Materialien eine reduzierte Grenzflächenwärmebeständigkeit ermöglichen, wodurch eine höhere Wärmeleitfähigkeit erreicht werden kann. In Anbetracht dieser Eigenschaften ziehen Forscher zunehmend die Verwendung dieser Materialien in diversen Anwendungsbereichen in Betracht, darunter die Entwicklung von Lithium-Ionen-Batterien, leichten Sensoren, strukturellen Komponenten mit hohem Festigkeits-Gewichts-Verhältnis und viele medizinische Anwendungen.

## **Forschungsmethodik**

9. Für die Erzeugung einer Vielzahl an Schichten und Partikeln zur Erforschung von 2D-Materialien wird ein spezialisiertes Computerprogramm entwickelt. Dieses Programm ermöglicht sowohl die Generierung von makellosen (defektfreien) als auch polykristallinen Nanoschichten unterschiedlicher Korngrößen und Defekte. Zudem können Nanopartikel erzeugt werden, die in Studien zur DNA-Sequenzierung verwendet werden.
10. Die Molekulardynamik (MD) wird zur Simulation von 2D-Nanoschichtmaterialien auf molekularer Ebene eingesetzt. Sie stellt ein wirksames computerbasiertes Werkzeug für die Untersuchung der physischen Bewegungen von Atomen und Molekülen in umfangreichen atomaren bzw. molekularen Systemen dar. Diese Methode findet Verwendung zur Beurteilung der Versagensmechanismen von defekten Nanoschichten, wobei verschiedene initiale Defekte wie Risse, Kerben und Stone-Wales-Punktdefekte berücksichtigt werden. Anschließend werden die mechanischen und thermischen Eigenschaften sowohl von makellosen und polykristallinen als auch von defekten Nanoschichten ermittelt. Die Wechselwirkung zwischen den Partikeln wird durch die Tersoff-Potenzialfunktion bestimmt und die MD-Simulationen werden mittels des Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) durchgeführt. Für die Visualisierung der Ergebnisse wird Open-Source-Software wie OVITO und VMD genutzt.
11. Die reaktive Molekulardynamik (RXMD) wird angewendet, um die mechanischen Eigenschaften von Borophen-Nanofilmen zu untersuchen und ermöglicht chemische Reaktionen sowie eine präzise Darstellung von chemiebasierten Phänomenen auf der

Nanoskala. Für die Untersuchung der Wärmeleitfähigkeit wird die Gleichgewichtsmolekulardynamik (EMD) genutzt. Bei diesem Ansatz definiert das reaktive Kraftfeld (ReaxFF) die Wechselwirkungen zwischen den beteiligten Partikeln.

## Ergebnisse

12. In detaillierten Molekulardynamik-Simulationen wurden die mechanischen Eigenschaften und die Versagensmechanismen von hexagonalen Bornitrid-Nanoschichten (h-BN) unter Zugbelastung eingehend analysiert. Die Untersuchungen zeigen außerordentliche mechanische Eigenschaften fehlerfreier h-BN-Nanoschichten auf, darunter eine Zugfestigkeit von 144 GPa und ein Elastizitätsmodul von 800 GPa. Im Gegensatz dazu zeigten Modelle mit Bi-Kristallstruktur und vielfältigen Defekten an ihren Grenzflächen eine reduzierte Zugfestigkeit von 8% bis 52%.
13. Ich habe das grundlegende strukturelle Verhalten von polykristallinen hexagonalen Nanoschichten analysiert und die Auswirkungen dieser Strukturen auf die Verteilung von Defekten beim mechanischen Versagen der Nanoschichten untersucht. Dabei wurde festgestellt, dass die Anzahl der Kristallkörner in größeren Nanoschichten zunimmt. Zudem zeigte sich, dass bei größeren Fehlorientierungswinkeln zwischen zwei benachbarten Kristallkörnern vermehrt Defekte entlang der Körnergrenzen auftreten. Dies wirkt sich negativ auf die mechanischen und thermischen Eigenschaften des Materials aus.
14. Die Zugfestigkeit der Nanoschicht verringert sich deutlich, wenn Nanorisse und Nanokerben vorhanden sind – es wurde eine Abnahme um 20% bis 39% beobachtet. Es zeigte sich, dass ein Anstieg in der Länge der Risse und im Radius der Kerben zu einer weiteren Schwächung der Zähigkeit der Nanoschicht führt. Zusätzlich wurde beobachtet, dass die Nanoschicht bei erhöhten Temperaturen weniger belastungsresistent ist, da die interatomaren Bindungen bei extremen Temperaturen nachlassen.
15. Ich habe den Prozess zur Erzeugung von Nanoporen für DNA-Sequenzierungsgeräte genauer untersucht. Unsere Molekulardynamik-Simulationen verwenden Si-, SiC- und Diamant-Atomcluster, um sowohl fehlerfreie als auch polykristalline h-BN- und Graphennanoschichten zu bombardieren. Es zeigt sich, dass die gewünschten Nanoporen mit der erwarteten Größe und Topographie durch Anpassung der kinetischen Energie sowie der Größe und Beschaffenheit des Clusters erzeugt werden können. Dabei zeigten Si- und SiC-Cluster im Vergleich zu Diamant-Clustern vielversprechendere Resultate hinsichtlich der Erzeugung von Nanoporen in den h-BN-Modellen.
16. Ich führte umfangreiche Analysen mit Hilfe der reaktiven Molekulardynamik und der Gleichgewichtsmolekulardynamik durch, um die mechanischen und thermischen Eigenschaften von sowohl fehlerfreien als auch polykristallinen einlagigen Borophen-Nanofilmen zu untersuchen. Die Wärmeleitfähigkeit des fehlerfreien Borophen-Nanofilms, der eine wabenförmige Atomstruktur aufweist, liegt bei  $35 \pm 10 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ . Diese Erkenntnis deutet auf eine hohe Wärmeleitfähigkeit in Relation zum Gewicht hin und positioniert dieses Material daher als vielversprechenden Kandidaten für Anwendungen in Batterie- und Wasserstoffspeichertechnologien.