

# بررسی عددی ترشوندگی بسترهای مسی با نانورولایه های شبه گرافنی

عارف پیشه ور\*

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه بیرجند، بیرجند، ایران

**چکیده:** در این پژوهش، ترشوندگی بسترهای مسی پوشیده با نانوساختارهای شبه گرافنی - فسفرن، بروفن، ژرمن و سیلیسن - با هدف تعیین نقش پارامترهای مختلف و تعیین شرایط وقوع پدیده شفافیت ترشوندگی برای این دسته از رولایه ها مورد بررسی قرار گرفت. برای این منظور، کلیه شبیه سازی ها به کمک نرم افزار LAMMPS و به روش دینامیک مولکولی انجام شده است. از نانوقطرات متشکل از ۴۰۰۰ مولکول آب در شبیه سازی ها استفاده شده و پتانسیل برهم کنشی مورد استفاده، ترکیبی از پتانسیل کولنی و لنارد جونز می باشد. نتایج شبیه سازی ها نشان می دهد که زاویه تماس سیستم برای نانوقطرات متشکل از ۴۰۰۰ مولکول آب و بزرگتر مستقل از اندازه نانوقطره و برای نانوقطرات کوچکتر، دارای رابطه معکوس می باشد. همچنین، افزایش آبگریزی بستر و آب دوستی رولایه ها بدون توجه به نوع رولایه، با افزایش دمای سیستم مشاهده می شود. از سوی دیگر، افزایش قدرت برهم کنش رولایه، کاهش زاویه تماس سیستم را مشابه رولایه گرافنی به همراه خواهد داشت و بستر نیز بر رفتار ترشوندگی سیستم اثرگذار است اما نه به اندازه ای که رولایه می تواند با تحمیل قدرت برهم کنش خود، رفتار قطره بر روی سطح را تحت تأثیر قرار دهد. رفتار ترشوندگی مشابه ژرمن و سیلیسن در موارد مختلف به چشم می خورد که این تشابه رفتار ترشوندگی را می توان به پارامترهای ساختاری و برهم کنشی نزدیک به هم این دو رولایه نسبت داد. با افزایش تعداد لایه های رویین، اثر رولایه بر بستر غالب می شود اما با افزایش تعداد رولایه ها، میزان تغییرات زاویه تماس نهایی سیستم کاهش می یابد. علاوه بر این، افزایش پهنای چاه پتانسیل بستر، روندی صعودی را برای سیستم بدون رولایه و روندی نزولی را برای سیستم دارای رولایه به همراه دارد که اگر به اختلاف زاویه تماس بین سیستم های متشکل از رولایه های مختلف دقت کنیم، افزایش پهنای چاه پتانسیل برهم کنشی بستر، کاهش این اختلاف زاویه تماس را به همراه خواهد داشت؛ کاهش که بین ژرمن و سایر نانوساختارها محسوس تر می باشد.

**واژگان کلیدی:** نانوساختارهای شبه گرافنی، شفافیت ترشوندگی، دینامیک مولکولی، زاویه تماس، بروفن.

arefpishevar@yahoo.com

بالا) باشد، مانند کاربردهای زیستی، الکترونیکی و حسگری، بکار روند. مثلا، نانومواد دوبعدی، در دارورسانی، برای جذب تعداد زیادی مولکول های دارویی و کنترل بیشتر سینتیک آزاد به کار می روند [۱].

اخیرا با افزایش توجه محققین به این مواد ارزشمند، به تدریج جایگاه فوق العاده مواد دوبعدی آشکارتر شده است. یکی از پرکاربردترین نانوساختارهای دوبعدی که تاکنون در بسیاری از تحقیقات از آن

## ۱- مقدمه

بسیاری از مواد در حالت دو بعدی، خواص منحصر به فردی از خود نشان می دهند که در ساختارهای سه بعدی این خواص را نمی توان یافت. به عنوان مثال در این مواد، به دلیل سطح ویژه بالا، بیشتر اتم ها در سطح قرار دارند. این ویژگی باعث می شود این مواد، در مواردی که نیاز به سطح ویژه بالا (نسبت سطح به حجم

استفاده شده و می شود، گرافن می باشد. در ساختار نواری گرافن، شکل نمودار تابع پاشندگی انرژی در نقطه  $K$  منجر به رخ دادن پدیده های جدیدی مانند اثر کوانتوم هال در دمای اتاق شده است. از همین رو، گرافن تک لایه که ضخامتی به اندازه  $1$  تنه یک اتم دارد، رسانندگی الکتریکی و هدایت گرمایی خارق العاده ای از خود بروز می دهد و به همین دلیل این ماده برای کاربردهایی مانند ترانزیستورها، رساناهای شفاف و مواد واسط حرارتی پیشنهاد می شود [۲-۴].

در سال ۲۰۰۴، نووسلو و گایم نشان دادند که گرافن تنها مادهی دوبعدی ممکن نیست و دیگر ترکیبات دوبعدی نیز می توانند پایدار بوده و بصورت مستقل تولید شوند و این دسته از مواد می توانند به واسطه ی ساختار دو بعدی خود، خواص منحصر به فردی از خود بروز دهند [۵]. جستجو برای کشف مواد مشابه گرافن منجر به اکتشاف طیف وسیعی از مواد از کالکوژنیدهای فلزات انتقالی ( $MoS_2$ ,  $MoO_3$ ,  $MoSe_2$ ,  $WS_2$ ,  $WSe_2$ )، نیتريد بور هگزاگونال (hBN)، تا سایر مواد عنصری (مانند Si) شده است [۶-۱۰].

در ۱۰ سال گذشته، روش های تولید متنوعی برای سنتز، شناسایی و تولید انبوه گرافن ابداع شده که قابل استفاده برای تولید سایر مواد دوبعدی نیز هست. روش های متنوعی برای تولید و بازتولید نانوساختارهای دوبعدی وجود دارد که از آن جمله می توان به روش مکانیکی اشاره کرد. روش لایه لایه شدن مکانیکی برای تولید اغلب ورق های دو بعدی اصلی نظیر گرافن و سایر مواد دو بعدی شناخته می شود. این فرایند شامل جداسازی ورق های دو بعدی منفرد از طریق به کارگیری نیروی مکانیکی، که به صورت مرسوم با استفاده از نوارهای چسبناک انجام می شود، می باشد [۱۱]. مواد زیادی به تازگی با این روش ها سنتز شده اند که تا پیش از این تنها در قلمرو تئوری وجود داشته اند.

در حال حاضر، تعدادی از اتم های جدول تناوبی عناصر که خواص مکانیکی، الکتریکی و تراپردی خاصی نیز از خود نشان داده اند، قادر به پایدار ماندن در فاز دوبعدی نیز می باشند و در این فاز خواص کاملاً متفاوتی را از خود بروز می دهند. این مواد شامل عناصر گروه IV و II-VI نیمه رساناهای مشابه گرافن/گرافان

(هیبرید  $sp^2$  به واسطه ی جذب H هیبرید  $sp^3$ ) و همچنین ساختارهایی به نام سیلیسن<sup>۱</sup> و ژرمن<sup>۲</sup> می باشند. مشابه گرافن، این مواد دوبعدی نیز خواصی کاملاً متفاوت با حالت کپه ای خود دارند. دهه ها پیش از این، فریند و همکارانش ثابت کردند که مواد کپه ای اما با ساختار لایه ای که لایه های آنها به واسطه ی برهم کنش واندروالسی در کنار یکدیگر قرار گرفته اند می توانند بصورت لایه هایی با ضخامت بسیار کم و یا حتی بصورت تک لایه با روش های مکانیکی و یا شیمیایی از توده اصلی تراشیده شوند [۱۲]. تلاش های محققین تجربی تنها توانسته است بخش کوچکی از ویژگی های این مواد منحصر به فرد را شناسایی کند.

در سال های اخیر، صفحات عنصری سیلیسیم و ژرمانیم (به ترتیب سیلیسن و ژرمن) به عنوان مدعیان جدی در حوزه مواد دو بعدی وارد شده اند [۸، ۹، ۱۳]. مطالعات نظری بسیاری وجود دارند که خواص اساسی آنها را بررسی کرده اند در حالی که تحلیل های تجربی در ابتدای راه خود قرار دارند، زیرا روش های سنتز عملی برای ایجاد روش ها و متغیرهای کاملاً مشخص تولید در حالت شناسایی هستند. مطالعات پیش بینی می کنند که این صفحات عنصری می توانند فرمیون های دیراک مشابه با گرافن از خود نشان دهند و روش های بسیار ساده تری ممکن است برای مهندسی پهنای فضای خالی آنها به دست آید. با وجود شبه فلزی بودن، مانع اصلی در شناسایی سیلیسن و ژرمن که بر خلاف گرافن است، این است که آنها در فاز توده ای خود ساختارهای لایه ای با پیوند واندروالس تشکیل نمی دهند. بنابراین، آنها به صورت صفحات آزاد وجود ندارند اما به صورت ساختارهای adlayer روی بستر های منظم سنتز می شوند [۱۴]. با وجود این حقیقت، یافته های استثنایی از طریق تحلیل های تجربی و نظری، در کنار سازگاری آن با قطعات الکترونیکی پایه سیلیسیم موجود، شناسایی سیلیسن دو بعدی و سایر عناصر گروه IV (ژرمن، استان) را ترغیب می کند. اخیراً، فسفرن<sup>۳</sup> (ساختار دو بعدی بنیادی که شامل بلورهای فسفر سیاه است) که به صورت یک نانو صفحه دو بعدی آزاد وجود دارد، نیز به خانواده مواد عنصری اضافه شده است، زیرا خواص نیمه رسانایی عالی مشابه با گرافن دارد. هر چند، قبل از این که این مواد بتوانند به عنوان گزینه های قابل اعتماد برای نسل

<sup>3</sup> Stanene

<sup>4</sup> Phosphorene

<sup>1</sup> Silicene

<sup>2</sup> Germanene

بعدی کاربردهای الکترونیکی معرفی شوند، موارد زیادی برای شناسایی باقی مانده است [۱۵، ۱۶].

از سوی دیگر، یکی از مسائلی که برای سیستم های در تماس با مایعات اهمیت دارد، مسأله ترشوندگی سطوح سیستم است. لذا مفهوم ترشوندگی، اهمیت بالایی در فناوری‌هایی مانند استفاده از حسگرها [۱۷]، پوشش‌ها [۱۸]، نانوشاره‌ها [۱۹] و مسائل بیوفیزیکی [۲۰] دارد. نتایج پژوهش‌ها و کارهای تجربی در زمینه ترشوندگی نشان می‌دهد که میزان ترشوندگی یک سیستم را می‌توان با افزودن یک رولایه مناسب یا ایجاد تغییر در پارامترهای مؤثر، ثابت نگه داشت، کم نمود یا افزایش داد! ثابت نگه داشتن زاویه تماس را می‌توان معادل برقراری شرایط برای وقوع پدیده ای دانست که اولین بار رفیعی و همکاران وی با بررسی ترشوندگی Si، Au، Cu و شیشه در حضور تک لایه گرافن مطرح ساختند. آن‌ها این پدیده را شفافیت ترشوندگی نامیده و به صورت ساده این‌گونه تعریف کردند که صفحه گرافن "در واقع وجود دارد" اما به نظر می‌رسد "وجود ندارد" [۲۱]. این ادعا، شروع یک چالش جدید و پابرجا شد که هنوز هم با گذشت حدود یک دهه، اجماعی در مورد آن وجود ندارد.

نتایج تحقیقات و آزمایشات انجام شده نشان می‌دهد که وقوع این پدیده به پارامترهای مختلفی وابسته است. به عنوان مثال، کیم و همکاران نشان دادند تأثیر جای گذاری صفحات گرافن بر روی بستر مس، بصورت افزایش زاویه تماس از ۸۶ درجه به ۱۲۵ درجه نمایان می‌گردد [۲۲]. نتایج پژوهش لای و همکاران نشان می‌دهد که رفتار ترشوندگی مس پوشیده شده با گرافن، شباهت بیشتری با رفتار ترشوندگی صفحه گرافیت تنها دارد تا مس تنها. لذا عدم شفافیت ترشوندگی تأیید شد [۲۳]. این درحالی است که از مهم ترین و قابل توجه ترین کاربردهای پدیده شفافیت ترشوندگی می‌توان به تبدیل سطوح آب‌گریز به سطوح ابرآب‌گریز<sup>۲</sup> اشاره کرد [۲۴]. در یسکیل و همکاران با در نظر گرفتن یک لایه بسیار نازک آب<sup>۳</sup> در زیر صفحه گرافن، نشان دادند که حضور لایه آب در زیر صفحه گرافن می‌تواند انرژی آزاد سطح و به دنبال آن، زاویه تماس آب بر روی گرافن را تغییر داده و زاویه تماس آب بر روی گرافن در حدود ۷ درجه کاهش پیدا می‌کند. علاوه بر این، شفافیت

ترشوندگی نیز با افزایش ضخامت لایه گرافن، کم و کمتر می‌شود تا نهایتاً در ضخامتی در حدود ۵ انگستروم، به مقداری بسیار ناچیز می‌رسد [۲۵]. گذار بین حالت های ترشونده و ناترشونده برای گرافن دولایه تحت تأثیر عوامل مختلف [۲۶] نیز خود دلیلی واضح بر اهمیت بالای شرایط سیستمی و محیطی بر رفتار ترشوندگی گرافن می‌باشد. عواملی که می‌توان میزان تأثیر هر یک بر وقوع شفافیت ترشوندگی گرافن را در شرایط مختلف بررسی و در یک جمع بندی مفصل ارائه نمود.

مواردی مشابه را برای نانولوله های کربنی نیز در پژوهش های مختلف دنبال کرده اند. به عنوان مثال، موضوع تأثیر قدرت برهم کنش را ما پیش از این برای نانولوله های کربنی نیز بررسی کردیم که نتایج حاصل از آن نشان داد که با تغییر قدرت برهم کنش نانولوله کربنی با مولکول های سازنده آب عبوری از داخل نانولوله می‌توان سرعت خروج آب را کنترل نمود [۲۷]. علاوه بر این، موضوع عبور آب از داخل نانولوله های کربنی در شرایط مختلف از جمله برای نانولوله های متشکل از نوارهای آب‌دوست و آب‌گریز [۲۸] و نانولوله های ناهمگن [۲۹] و همچنین تأثیر هندسه نانولوله ها در کنار تغییر پارامتر برهم کنشی<sup>۳</sup> [۳۰] نیز برای نانو ساختارهای کربنی بررسی شده است.

یکی از مسائلی که همواره مورد نظر بوده است و باید به آن توجه ویژه داشت، حفاظت از سطوحی است که غالباً ارزشمند بوده و ارتباط مستقیم و مستمر آن‌ها با آب و مایعات مشابه، تغییراتی را در ویژگی های اصلی این سطوح ایجاد خواهد کرد. بنابراین، موضوعی که اهمیت زیادی پیدا می‌کند این است که چطور می‌توان با استفاده از یک رولایه مناسب، بدون تغییر در خواص ترشوندگی بستر، از آن در برابر تغییر ناخواسته خواص محافظت نمود. یکی از رولایه های دوبعدی پر کاربرد در این زمینه، گرافن است که پیش از این [۳۱] مورد بررسی قرار گرفت.

## ۲- مدلسازی

در این پژوهش، چهار ساختار شبه گرافنی فسفرن، بروفن، ژرمن و سیلیسن به عنوان رولایه، شبیه سازی شده اند که نحوه چینش

<sup>3</sup> Water Slab

<sup>1</sup> Wetting Transparency

<sup>2</sup> Super-Hydrophobic surfaces

افزار لمپس [۳۲] با گام زمانی ۲ فمتوثانیه در یک آنسامبل nve و بر روی خوشه محاسباتی زعفران دانشگاه بیرجند انجام شده اند. هر کدام از شبیه سازی ها در ۵۰۰ هزار گام اجرا شده و سیستم پس از گذشت ۲۰۰ پیکوثانیه (۱۰۰ هزار گام زمانی) به تعادل رسیده است. برای شبیه سازی دینامیک مولکولی تمامی سیستم ها، از آب با مدل Tip4P-Ew استفاده شد. پارامترهای اصلی این مدل در جدول شماره ۲ آورده شده است.

جدول شماره ۲. پارامترهای اصلی مدل Tip4P-Ew که در شبیه سازی های انجام شده مورد استفاده قرار گرفته اند [۳۹].

پارامتر	مقدار	پارامتر	مقدار
O mass (u)	۱۵/۹۹۹۴	$\sigma_{OO}$ (Å)	۳/۱۶۷
H mass (u)	۱/۰۰۸	$\epsilon_{HH}$ (kcal/mol)	.
OH bond (Å)	۱	$\sigma_{HH}$ (Å)	.
$\epsilon_{OO}$ (kcal/mol)	۰/۱۶۲۷	HOH angle (degree)	۱۰۴/۵۲

پتانسیل برهم کنشی کل که ترکیبی از پتانسیل لنارد جونز و کولنی می باشد، طبق رابطه ۱ تعریف شده است.

$$U_{tot}(r_{ij}) = U_{LJ}(r_{ij}) + U_C(r_{ij}) \quad (1)$$

$$= 4\epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right] + \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \frac{q_i q_j}{r_{ij}}$$

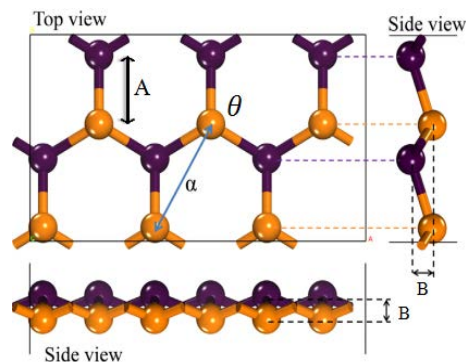
که در این رابطه،  $\epsilon_{ij}$  و  $\sigma_{ij}$  به ترتیب پارامترهایی از جنس انرژی و طول هستند که به نوع اتم های برهم کنشگر بستگی دارند. اگر  $\epsilon_{ii}$  و  $\sigma_{ii}$  را پارامترهای برهم کنش دو اتم یکسان در نظر بگیریم، برای محاسبه  $\epsilon_{ij}$  و  $\sigma_{ij}$  از روابط زیر استفاده شده است:

$$\begin{cases} \sigma_{ij} = \frac{1}{2}(\sigma_{ii} + \sigma_{jj}) \\ \epsilon_{ij} = (\epsilon_{ii} * \epsilon_{jj})^{\frac{1}{2}} \end{cases} \quad (2)$$

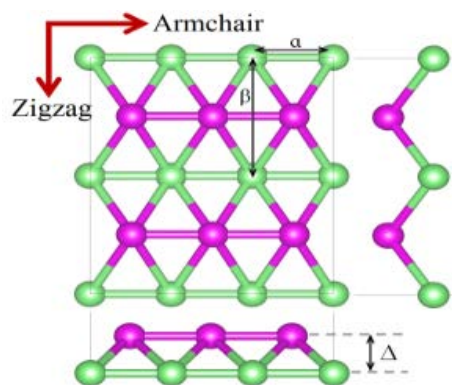
دمای سیستم ۲۹۸ کلین می باشد و از سیستم نواری استفاده شده است. ضمناً در تمامی محاسبات، سیستم پس از رسیدن به تعادل مورد بررسی قرار گرفته است. برای ثابت نگه داشتن فواصل و زوایای پیوندی از الگوریتم SHAKE [۳۸] استفاده شده است. حالت اولیه قطره که متشکل از ۴۰۰۰ مولکول آب می باشد، به صورت مکعبی است که در فاصله ۴ انگسترومی از بالاترین لایه سطحی سیستم شبیه سازی قرار گرفته است. در کلیه شبیه سازی

اتم ها در هریک از ساختارها در شکل ۱ و پارامترهای این نانوساختارها در جدول ۱ آمده است. نانورولایه های شبیه سازی شده، ساختاری چروکیده دارند که به عنوان پارامتر B در شکل ۱ در نظر گرفته شده است. صفر بودن این پارامتر برای گرافن، به معنای ساختار تخت گرافن می باشد.

کلیه شبیه سازی ها به روش دینامیک مولکولی و به کمک نرم



### ژرمن، فسفرن و سیلیسن



### بروفن

شکل ۱. نحوه چپش اتم ها در ساختار نانورولایه های شبه گرافنی

جدول شماره ۱. پارامترهای ساختاری نانورولایه های شبه گرافنی

مرجع	زاویه پیوند $\theta$	پارامتر C (Å)	پارامتر B (Å)	پارامتر A (Å)	طول پیوند (Å)	نانوساختار
[۲۱]	۱۲۰	۲/۴۶	.	۱/۴۲		گرافن
[۳۳]	۹۸/۱۵	۴/۴۳	۲/۱۴۴	۲/۲۰۷		فسفرن
[۳۴]	۱۱۶/۱۳	۳/۹۰۲	۰/۴۴۲	۲/۲۷۷		سیلیسن
[۳۵]						
[۳۵]	۱۱۱/۸۶	۴/۰۷۷	۰/۶۶۰	۲/۴۴۲		ژرمن
[۳۶]						
[۳۷]		$\beta = 2.9 \text{ \AA}$	$\alpha = 1.7 \text{ \AA}$			بروفن
			$\Delta = 0.8 \text{ \AA}$			

هدف اصلی این پژوهش این است که با بررسی ترشوندگی سیستم های متشکل از بستر مسی و رولایه شبه گرافنی در شرایط مختلف، امکان وقوع پدیده شفافیت ترشوندگی برای نانورولایه های شبه گرافنی از قبیل فسفرن، بروفن،<sup>۲</sup> ژرمن و سیلیسن به دقت مورد بررسی قرار گیرد. بنابراین، اثر پارامترهایی از جمله دما، قدرت برهم کنش بستر و رولایه، پهنای چاه پتانسیل، تعداد لایه های رویین و دما بر ترشوندگی سیستم مورد بررسی قرار می گیرد. برای شبیه سازی سیستم های مختلف، از پارامترهایی که در جدول ۳ آمده است استفاده شد.

جدول شماره ۳. پارامترهای برهم کنشی مورد استفاده برای شبیه سازی نانوساختارهای دوبعدی

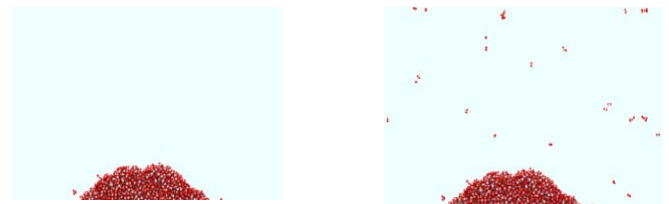
مرجع	$\sigma_{ij}$ (انگستروم)	$\epsilon_{ij}$ (کیلوکالری بر مول)	اتم های برهم کنش کننده
[۲۱]	۳/۱۶۶۰	۰/۱۵۵۳۰	اکسیژن - اکسیژن
[۳۳]	۳/۲۴۷۲	۰/۲۴۹۲۰	فسفر - اکسیژن
[۳۶, ۳۵]	۳/۷۱۷۲	۰/۲۵۵۱۵	ژرمنیوم - اکسیژن
[۴۰]	۲/۶۳۰۵	۰/۴۰۹۳۵۲	سیلیسیوم - اکسیژن
[۳۷]	۳/۳۰۹۵	۰/۱۲۱۳۹	بور - اکسیژن

### ۳-۱- اثر دما

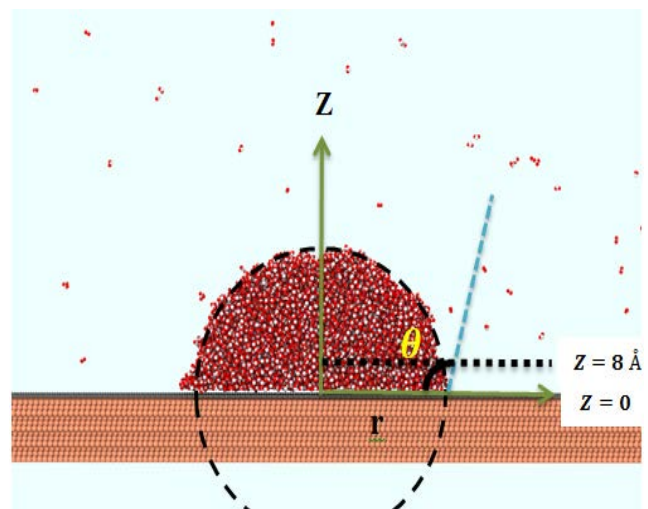
برای بررسی اثر دما بر زاویه تماس سیستم های متشکل از مس پوشانده شده با رولایه های شبه گرافنی، ۱۲ حالت دمایی بین ۲۶۰ تا ۳۵۰ کلوین مورد تحلیل و بررسی قرار گرفت. نتیجه شبیه سازی ها در شکل ۴ آمده است. به جز مس بدون رولایه، در سایر سیستم ها، روندی نزولی برای زاویه تماس با افزایش دما دیده می شود. هیچ یک از سیستم ها، شفافیت ترشوندگی را از خود نشان نمی دهند. در محدوده دمایی ۲۹۰ تا ۳۱۰ کلوین، اختلاف زوایای تماس بین سیستم های چهارگانه کمتر از بازه های دمایی قبل و بعد است. اختلاف بسیار اندک زاویه تماس سیستم های با رولایه سیلیسن و فسفرن جالب به نظر می رسد به طوری که این اختلاف، تقریباً در بازه دمایی ۳۰۰ تا ۳۴۰ کلوین به صفر می رسد. در شبیه سازی

ها از مس با سمتگیری بلوری ۱۱۱ به عنوان بستر استفاده شد. ابعاد جعبه شبیه سازی  $300 \text{ \AA} \times 22.25 \text{ \AA} \times 307.7 \text{ \AA}$  می باشد و شعاع قطع پتانسیل در تمامی شبیه سازی ها ۲۰ انگستروم در نظر گرفته شد. برای محاسبه زاویه تماس، الگوریتمی به کمک نرم افزار متمتیکا طراحی شده است که ابتدا فایل موقعیت مکانی مولکول های آب را فراخوانی کرده و پس از حذف فاز بخار و تعیین وضعیت پروفایل چگالی قطره، براساس میانگین خروجی ها، دایره ای برازش و زاویه تماس سیستم به کمک شیب خط مماس بر دایره تعیین می شود. شکل ۲، وضعیت سیستم را قبل و بعد از حذف فاز بخار و شکل ۳، دایره برازش شده در گام نهایی را نشان می دهد. جزئیات الگوریتم محاسبه زاویه تماس در مقاله قبلی ما آمده است [۳۱].

### ۳- نتایج و بحث



شکل ۲. حذف دقیق فاز بخار؛ سیستم اولیه (سمت راست)، سیستم پس از حذف مولکول های بخار (سمت چپ).

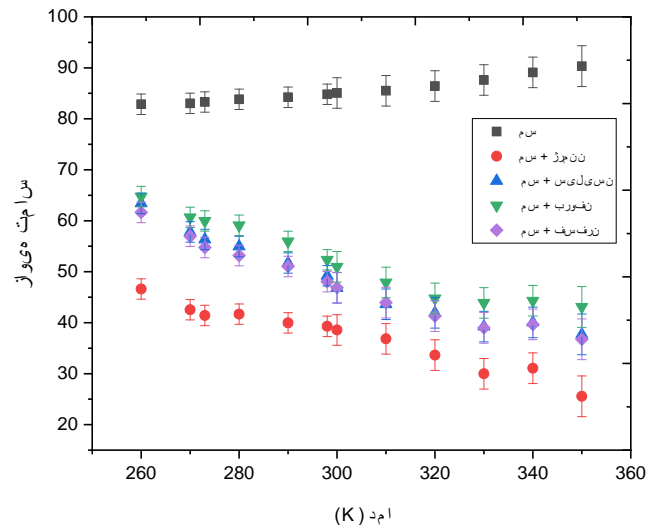


شکل ۳. شبیه برازش دایره براساس میانگین خروجی ها (مرکز دایره در  $(0, Z_f)$  و شعاع  $r_f$ ، مربوط به نقاط تشکیل دهنده دایره در  $z > z_0 = 8 \text{ \AA}$  است. پارامتر  $r_f$  شعاع پایه نانوقطره می باشد.)

<sup>2</sup> Borophene

<sup>1</sup> Mathematica

های این قسمت، شعاع قطع پتانسیل در ۲۰ انگستروم ثابت نگه شد.

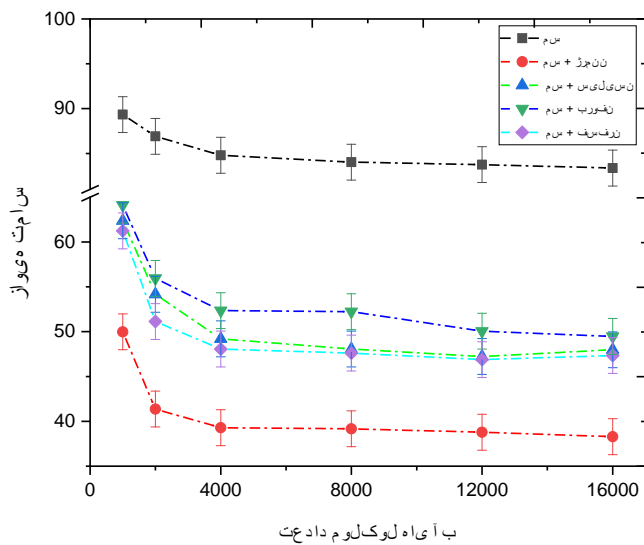


شکل ۴. روند تغییرات دمایی زاویه تماس مس و مس پوشانده شده با رولایه های شبه گرافنی

نکته دیگری که باید به آن توجه داشت، تمامی سیستم های دارای رولایه در این بخش در فاز آب دوست قرار دارند و افزایش دمای سیستم، میزان آب دوستی مجموعه را افزایش می دهد. طبق شکل ۴، زاویه تماس سیستم متشکل از مس پوشیده شده با بروفن، سیلیسن، فسفرن و ژرمن به ترتیب از حدود  $2 \pm 64$ ،  $2 \pm 47$  و  $2 \pm 27$  درجه طی یک روند نسبتاً خطی به  $41 \pm 45$ ،  $41 \pm 22$ ،  $40 \pm 2$  و  $340$  درجه و در قالب روندی رو به رشد زاویه تماس در غیاب رولایه دیده می شود. البته باید توجه داشت که اختلاف دمای ۹۰ درجه بین اولین و آخرین حالت دمایی سیستم، تنها به میزان حدود ۸ درجه بر زاویه تماس سیستم بستر بدون رولایه اثرگذار بوده است و این درحالی است که برای حالت هایی که رولایه به سیستم افزوده شده، اختلاف زاویه بین ۲۰ تا ۲۳ درجه می باشد. به عبارت بهتر، نتایج بدست آمده نشان می دهد که نانوقطره در حضور رولایه، با افزایش دما، آب دوست تر از قبل می شود ولی در غیاب رولایه، افزایش دمای سیستم، افزایش مختصر زاویه تماس و کاهش آب دوستی سطح را بدنبال دارد.

### ۳-۲- اثر اندازه نانوقطره

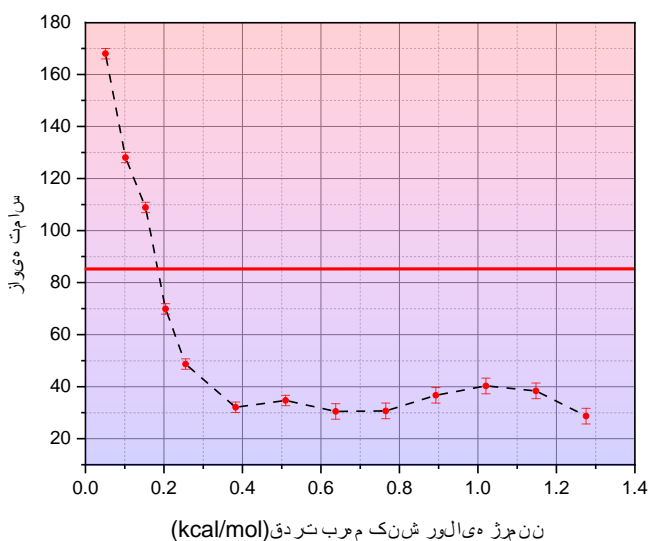
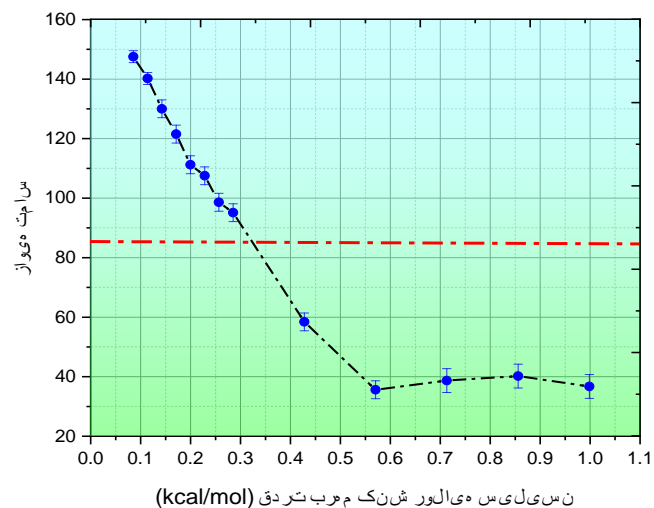
پیش از این به بررسی اثر اندازه نانوقطره بر زاویه تماس سیستم های مس - گرافن پرداخته شده و مشاهده شده که با تقریب بسیار خوبی می توان ادعا کرد که نانوقطرات متشکل از ۴۰۰۰ مولکول آب، روندی مشابه نانوقطرات بزرگتر را از خود نشان می دهند [۳۱]. در اینجا، ۴ سیستم متشکل از مس پوشیده شده با ژرمن، سیلیسن، بروفن و فسفرن شبیه سازی و در هر مورد، برای بررسی میزان تأثیر اندازه نانوقطره بر زاویه تماس مجموعه، شبیه سازی ها برای قطرات متشکل از ۱۰۰۰، ۲۰۰۰، ۴۰۰۰، ۸۰۰۰ و ۱۶۰۰۰ مولکول آب اجرا شد. نتایج بدست آمده به خوبی نشان می دهد که کماکان می توان نانوقطرات متشکل از ۴۰۰۰ مولکول آب را، انتخابی بهینه برای سایر شبیه سازی ها در نظر گرفت. روند تغییرات زاویه تماس با افزایش اندازه نانوقطره در شکل ۵ نشان داده شده است. اختلاف بسیار کم زاویه تماس بین دو سیستم با رولایه سیلیسن و فسفرن در این شکل نیز به خوبی به چشم می خورد و این اختلاف در سیستم های متشکل از ۸۰۰۰ و ۱۲۰۰۰ مولکول آب، تقریباً به صفر می رسد.



شکل ۵. روند تغییرات زاویه تماس با اندازه نانوقطره در سیستم های با رولایه های شبه گرافنی

روند کلی تغییرات زاویه تماس با اندازه نانوقطره برای سیستم مس بدون رولایه و چهار سیستم مس با رولایه های شبه گرافنی، یکسان می باشد و برای نانوقطرات متشکل از مولکول های آب کمتر از ۴۰۰۰، درحالی روندی نزولی را مشاهده می شود که برای نانوقطرات بزرگتر، تغییرات زاویه تماس تقریباً به صفر می رسد. در

درجه تا حدود ۴۰ درجه برای سیلیسن و از حدود ۱۷۰ تا ۳۵ درجه برای ژرمن مشاهده می شود. این روند برای قدرت برهم کنش های بالاتر از حدود  $\epsilon_{Si-O} = 0.55 \text{ kcal/mol}$  برای سیلیسن و  $\epsilon_{Ge-O} = 0.4 \text{ kcal/mol}$  برای ژرمن، به روندی تقریباً ثابت، با افت و خیز زاویه تماس بین ۳۵ تا ۴۰ درجه برای سیلیسن و بین ۳۰ تا ۴۰ درجه برای ژرمن، تبدیل می شود. گذار فاز ترشوندگی سیستم، برای سیلیسن در  $\epsilon_{Si-O} = 0.3 \text{ kcal/mol}$  و برای ژرمن در  $\epsilon_{Ge-O} = 0.18 \text{ kcal/mol}$  رخ می دهد و با افزایش قدرت برهم کنش رولایه، سیستم از حالت آب‌گریز به آب‌دوست تبدیل می شود. افزایش روند آب‌دوستی پیش از این برای گرافن نیز مشاهده شد و در این جا برای سایر رولایه هایی که ساختار مشابه گرافن دارند، همین رویه مشاهده می شود.



شکل ۶ تغییرات زاویه تماس با قدرت برهم کنش رولایه در سیستم های با رولایه های (الف) سیلیسن و (ب) ژرمن

شبهه سازی های این قسمت، دمای سیستم در ۲۹۸ کلوین و شعاع قطع پتانسیل در ۲۰ انگستروم ثابت نگه داشته شده است.

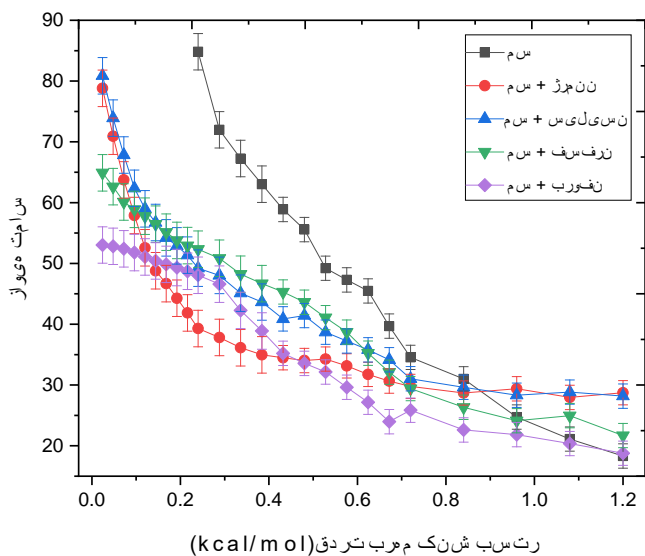
تمامی سیستم ها اعم از سیستم های دارا و فاقد رولایه، همان طور که در شکل ۵ نشان داده شده است، در فاز آب‌دوست قرار دارند. برای قطراتی که از کمتر از ۴۰۰۰ مولکول تشکیل شده اند، تأثیر اندازه نانوقطره بر ترشوندگی سیستم، محسوس تر است و افزایش آب‌دوستی سیستم با افزایش اندازه قطره مشاهده می شود ولی برای نانوقطرات بزرگتر، رشد ابعاد قطره نتوانسته است تأثیر زیادی بر زاویه تماس سیستم داشته باشد. شاید بتوان این موضوع را این گونه توجیه کرد که سطح پوشیده شده توسط اولین لایه از مولکول های آب که دقیقاً در مجاورت سطح بالایی سیستم قرار گرفته اند و می توان آن را لایه جاذب نامید، با افزایش اندازه نانوقطره افزایش می یابد ولی نرخ رشد سطح بالاتر از نرخ رشد ارتفاع نانوقطره می باشد. به عبارت بهتر، با توجه به اینکه مولکول های آب در لایه های بالاتر، تمایل دارند کمترین فاصله را با سطح داشته باشند، با افزایش سطح لایه اول، تعداد لایه های بالایی کمتر شده و نانوقطره پهن شده تری را روی سطح شاهد خواهیم بود.

### ۳-۲- اثر قدرت برهم کنشی رولایه

پیش از این، به بررسی اثر رولایه بر تعیین رفتار ترشوندگی سیستم پرداخته شد و مشاهده شد که رولایه در مقایسه با بستر، نقش پررنگ تری در تعیین رفتار ترشوندگی سیستم دارد که می توان علت را در کمتر بودن فاصله نانوقطره با اتم های سازنده رولایه در مقایسه با اتم های بستر دانست. هدف از این بخش، بررسی همین موضوع برای رولایه های شبه گرافنی است، بطوری که نتایج بدست آمده را با نتایجی که برای گرافن حاصل شده، مقایسه کرد. برای این منظور، میزان تأثیر قدرت برهم کنش رولایه به عنوان نمونه برای دو سیستم با رولایه های سیلیسن و ژرمن بررسی شد. در شبهه سازی های این قسمت، دمای سیستم در ۲۹۸ کلوین و شعاع قطع پتانسیل در ۲۰ انگستروم ثابت نگه داشته شد.

روند تغییرات زاویه تماس با قدرت برهم کنش رولایه در شکل ۶ نشان داده شده است. تا حدود  $\epsilon_{Si-O} = 0.55 \text{ kcal/mol}$  برای سیلیسن و  $\epsilon_{Ge-O} = 0.4 \text{ kcal/mol}$  برای ژرمن، با افزایش قدرت رولایه، روندی اکیدا نزولی برای زاویه تماس، از حدود ۱۴۰

به پارامترهای ساختاری و برهم کنشی نزدیک به هم این دو رولایه نسبت داد.



شکل ۷. تغییرات زاویه تماس با قدرت برهم کنش بستر در سیستم های با رولایه های شبه گرافنی

جدول شماره ۴. وقوع شفافیت ترشوندگی نانوساختارهای دوبعدی

ردیف	نوع رولایه	$\epsilon_{Cu-O}$ پیش بینی شده (کیلوکالری بر مول)	زاویه تماس سیستم در حالت رولایه شفاف (درجه)
۱	ژرمن	۰/۸۸	۲۹±۲
۲	سیلیسن	۰/۸۷	۲۹±۲
۳	فسفرن	۰/۹۹	۲۵±۲
۴	بروفن	۱/۲	۲۰±۲

### ۳-۵- اثر تعداد لایه های رویین

تاکنون در بررسی سیستم های دارای رولایه، تمرکز بیشتر بر روی تک لایه های لایه نشانی شده بر روی بستر بوده است. در اینجا، به منظور بررسی اثر تعداد لایه های رویین، چهار حالت تک لایه، دولایه، سه لایه و چهارلایه برای رولایه های شبه گرافنی ژرمن، سیلیسن، فسفرن و بروفن شبیه سازی و بررسی شد. در شبیه سازی های این قسمت، دمای سیستم در ۲۹۸ کلوین و شعاع قطع پتانسیل در ۲۰ انگستروم ثابت نگه داشته شد. همانطور که در شکل ۸ نشان داده شده است، به جز رولایه سیلیسن، در مورد سه رولایه

خط افقی نمایش داده شده در شکل ۶، زاویه تماس مس بدون رولایه را نشان می دهد. محل تقاطع هر یک از منحنی ها با این خط افقی، شفافیت ترشوندگی هر یک از این دو سیستم را نشان می دهد. برای سیلیسن در  $\epsilon_{Si-O} = 0.32 \text{ kcal/mol}$  و برای ژرمن در  $\epsilon_{Ge-O} = 0.19 \text{ kcal/mol}$ ، رولایه شفاف می باشد.

### ۳-۴- اثر قدرت برهم کنشی بستر

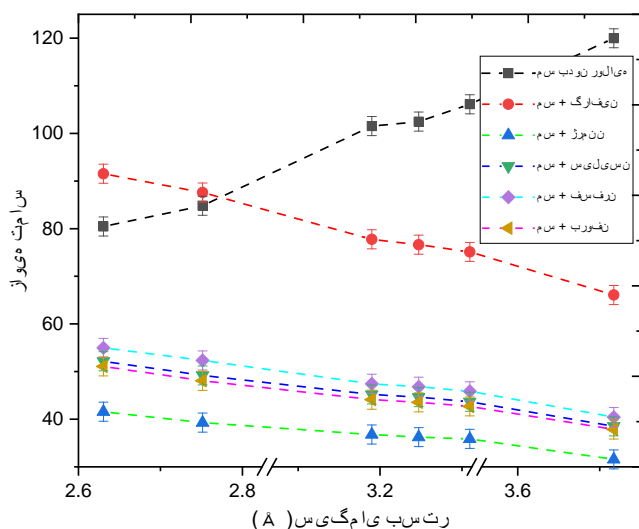
مشابه بحث رولایه، برای بررسی اثر قدرت برهم کنش بستر بر رفتار ترشوندگی سیستم، برای رولایه های گرافنی، نقش بستر در تعیین رفتار ترشوندگی سیستم بررسی شد. نتایج نشان می داد که بستر نیز بر رفتار ترشوندگی سیستم اثرگذار است اما نه به اندازه ای که رولایه می تواند با تحمیل قدرت برهم کنش خود، رفتار قطره بر روی سطح را تحت تأثیر قرار دهد. حال که برای گرافن، این بررسی ها انجام شد و مشخص شد که علاوه بر رولایه، قدرت برهم کنش بستر نیز بر زاویه تماس سیستم تأثیرگذار بوده و با افزایش قدرت برهم کنش بستر، می توان سیستمی آب دوست تر از قبل ایجاد کرد، در این بخش به بررسی اثر بستر مسی بر رفتار ترشوندگی سیستم در حضور رولایه های شبه گرافنی پرداخته می شود. در شبیه سازی های این قسمت، دمای سیستم در ۲۹۸ کلوین و شعاع قطع پتانسیل در ۲۰ انگستروم ثابت نگه داشته شد.

در این بخش، روند تغییرات زاویه تماس برای مس بدون رولایه و مس پوشیده شده با رولایه های شبه گرافنی چهارگانه ژرمن، سیلیسن، فسفرن و بروفن مورد بررسی قرار گرفت. از آنجایی که شفافیت ترشوندگی رولایه دقیقاً در جایی رخ می دهد که محل تقاطع منحنی مربوط به مس بدون رولایه با هریک از منحنی های مرتبط با سیستم های دارای رولایه است، طبق منحنی های شکل ۷، محدوده وقوع شفافیت ترشوندگی برای این سیستم های چهارگانه در جدول ۴ آورده شده است. برای تمامی سیستم ها، شفافیت ترشوندگی رولایه در فاز آب دوست مشاهده می شود.

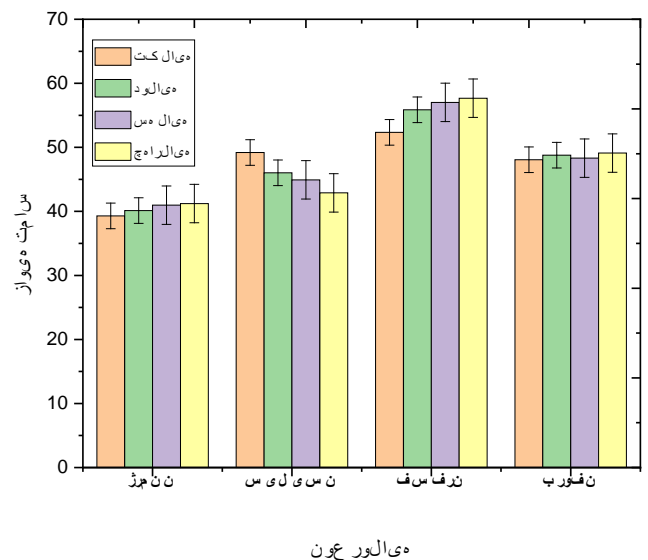
شبیه سازی های مجدد برای سیستم های با قدرت برهم کنشی پیش بینی شده مطابق جدول ۴، وقوع پدیده شفافیت ترشوندگی در محدوده مشخص شده را برای تمامی سیستم ها تأیید کرد. در اینجا نیز همانند بخش قبل، رفتار ترشوندگی مشابه ژرمن و سیلیسن، به چشم می خورد. این تشابه رفتار ترشوندگی را می توان



در شبیه سازی های این قسمت، دمای سیستم در ۲۹۸ کلوین و شعاع قطع پتانسیل در ۲۰ انگستروم ثابت نگه داشته شد. پیش از این، نقش پهنای چاه پتانسیل بر رفتار ترشوندگی سیستم برای رولایه های گرافنی بررسی شده است. نتایج بدست آمده در آن بخش، نشان می داد که پهنای چاه پتانسیل نیز می تواند همانند پارامتر عمق پتانسیل بر رفتار ترشوندگی سیستم اثر بگذارد. در این بخش، رویه ای مشابه را این بار در حضور رولایه های شبه گرافنی پیش گرفته و پارامتر دوم پتانسیل برهم کنشی یا همان پهنای چاه پتانسیل برای بستر تغییر داده خواهد شد تا مشخص شود که این تغییرات تا چه حد می تواند بر زاویه تماس سیستم اثر گذاشته و ترشوندگی مجموعه را تغییر دهد. برای این منظور، پهنای چاه پتانسیل برهم کنشی ۵ رولایه گرافن، ژرمن، سیلیسن، فسفرن و بروفن به همراه پهنای چاه پتانسیل اصلی مس برای بستر لحاظ شد. همانطور که در شکل ۹ نشان داده شده است، افزایش پهنای چاه پتانسیل بستر، روندی صعودی را برای سیستم بدون رولایه و روندی نزولی را برای سیستم دارای رولایه به همراه دارد. اگر به اختلاف زاویه تماس بین سیستم های متشکل از رولایه های مختلف دقت شود، افزایش پهنای چاه پتانسیل برهم کنشی بستر، کاهش این اختلاف زاویه تماس را به همراه خواهد داشت؛ کاهش که بین ژرمن و سایر نانوساختارها محسوس تر می باشد.



شکل ۹. تغییرات زاویه تماس با تغییر پارامتر برهم کنشی بستر (پهنای چاه پتانسیل) در سیستم های با رولایه های شبه گرافنی



شکل ۸. تغییرات زاویه تماس با تعداد رولایه های مورد استفاده در سیستم های با رولایه های شبه گرافنی

دیگر، افزایش زاویه تماس با افزودن تعداد رولایه مشاهده می شود. این افزایش، با افزودن رولایه جدید در هر مرحله نسبت به مرحله قبل، کم و کمتر می شود به طوری که شبیه سازی ها برای فسفرن نشان می دهد که در حالت بستر پوشیده شده با ۵ لایه از نانوساختار شبه گرافنی، تقریباً اختلافی با حالت ۴ لایه وجود ندارد! در مورد رولایه سیلیسن، روند متفاوتی مشاهده می شود به طوری که با افزایش تعداد رولایه ها، زاویه تماس کاهش می یابد! شاید بتوان این موضوع را این گونه توجیه کرد که قدرت برهم کنشی سیلیسن نسبت به سه رولایه دیگر بالاتر بوده و با قدرت برهم کنشی بستر، تفاوت قابل توجهی دارد. بنابراین، افزودن رولایه سیلیسنی که در عمل به معنای جایگزینی لایه ای از مس با لایه ای از سیلیسیوم است، با توجه به قدرت برهم کنش بالاتر سیلیسیوم نسبت به مس، قدرت برهم کنش سیستم را بالاتر برده و زاویه تماس نهایی کاهش می یابد! موضوعی که می تواند روند منظم تر تغییرات زاویه تماس سیستم با رولایه فسفرن و ژرمن را با توجه به قدرت برهم کنش نزدیک به قدرت بستر، و روند نسبتاً نامنظم تغییرات زاویه تماس سیستم با رولایه بروفن را با توجه به قدرت برهم کنش نزدیک به نصف قدرت بستر را به خوبی توجیه نماید!

### ۳-۶- اثر پارامتر پهنای چاه پتانسیل (σ)

در مورد نانولوله های کربنی [۲۷]، در تحقیقی که پیش تر انجام شد، مشخص شد افزایش پهناي چاه پتانسیل منجر به کاهش شعاع نانولوله و در نتیجه، افزایش سرعت شار عبوری از داخل نانولوله می شود. در اینجا به نظر می رسد که با افزایش پهناي چاه پتانسیل بستر، سیستم آب دوست تر از قبل خواهد شد؛ موضوعی که مستقل از وضعیت آب دوستی یا آب گریزی اولیه سیستم می باشد! این افزایش میل آب دوستی سیستم را می توان این گونه تحلیل کرد که با افزایش پهناي چاه پتانسیل، اثرگذاری هریک از اتم های سازنده بستر بر روی مولکول های آب سازنده نانوقطره بیشتر شده و کاهش زاویه تماس را به همراه خواهد داشت.

## ۴- نتیجه گیری

در این مقاله، ترشوندگی بسترهای مسی پوشیده با نانوساختارهای شبه گرافنی (فسفرن، بروفن، ژرمن و سیلیسن) با هدف تعیین نقش پارامترهای مختلفی همچون دما، اندازه نانوقطره، قدرت برهم کنش رولایه و بستر، پهناي چاه پتانسیل و ... بررسی شد. علاوه بر این، شرایط وقوع پدیده شفافیت ترشوندگی برای این دسته از رولایه ها مورد بررسی قرار گرفت که نتایج شبیه سازی ها نشان می دهند، همانند گرافن [۳۱]، نانوساختارهای شبه گرافنی نیز با تقریب خوبی، رویکردی مستقل از اندازه قطرات آب داشته و روند کلی تغییرات زاویه تماس با اندازه نانوقطره برای سیستم مس بدون رولایه و چهار سیستم مس با رولایه های شبه گرافنی، یکسان می باشد. برای نانوقطرات متشکل از مولکول های آب کمتر از ۴۰۰۰، درحالی روندی نزولی مشاهده می شود که برای نانوقطرات بزرگتر، تغییرات زاویه تماس تقریباً به صفر می رسد. در بررسی سیستم های متشکل از مس پوشیده با سیلیسن و ژرمن مشخص شد که روند تغییرات زاویه تماس با تغییر قدرت برهم کنش رولایه های شبه گرافنی در محدوده ای مشخص نزولی بوده و از مرز مشخصی به بعد، روندی تقریباً ثابت را نشان می دهد. علاوه بر این، برای سیستم های با رولایه های شبه گرافنی، افزایش قدرت برهم کنشی بستر، کاهش زاویه تماس سیستم را به همراه دارد که دقیقاً همان روندی است که برای گرافن مشاهده می شود. از سوی دیگر، شبیه سازی ها نشان داد افزایش تعداد رولایه ها برای ژرمن و فسفرن با توجه به نزدیکی قدرت برهم کنش بستر و رولایه، روند صعودی منظم، با اختلاف اندک در هر حالت نسبت به حالت قبل؛

برای بروفن با توجه به تقریباً دو برابر بودن قدرت بستر نسبت به رولایه، روندی صعودی ولی نامنظم و برای سیلیسن، روندی کاملاً نزولی را برای زاویه تماس به همراه دارد. همچنین، با بررسی سیستم های دارای رولایه های تک لایه تا چهار لایه مشاهده شد که به جز رولایه سیلیسن، در مورد سه رولایه دیگر، افزایش زاویه تماس با افزایش تعداد رولایه مشاهده می شود. ضمناً رفتار ترشوندگی مشابه ژرمن و سیلیسن در بسیاری از موارد به چشم می خورد که این تشابه رفتار ترشوندگی را می توان به پارامترهای ساختاری و برهم کنشی نزدیک به هم این دو رولایه نسبت داد. بررسی اثر پهناي چاه پتانسیل نشان داد که با افزایش پهناي چاه پتانسیل بستر، سیستم آب دوست تر از قبل می شود؛ موضوعی که مستقل از وضعیت آب دوستی یا آب گریزی اولیه سیستم می باشد!

## مراجع

1. S.Goenka, V. Sant, S. Sant, J. Control. Release., 173, 75 (2014).
2. S. Stankovich, et al., Nature., 442, 282 (2006).
3. Y. Zhu, et al., Carbon., 48, 2118 (2010).
4. S. Stankovich, et al., Carbon., 45, 1558 (2007).
5. K.S. Novoselov, et al., Science, 306, 666(2004).
6. S. Balendhran, et al., Adv. Funct. Mater. 23, 3952 (2013).
7. Q.H. Wang, et al., Nat. Nanotechnol., 7(11), 699(2012).
8. Q. Tang, Z. Zhou, Prog. Mater. Sci., 58, 1244 (2013).
9. L.L.Y. Voon, G. Guzmán-Verri, MRS bull., 39, 366 (2014).
10. S. Balendhran, et al., ACS Nano., 7, 9753(2013).
11. P. Blake, et al., Appl. Phys. Lett., 91, 063124(2007).

29. F. Ebrahimi, F. Ramazani, M. Sahimi, Sci. Rep., 8, 1(2018).
30. H. Abtahinia, F. Ebrahimi, J. Chem. Phys., 133, 064502(2010).
31. ابراهیمی، ف. م. ع. پیشه ور، شرایط وقوع پدیده شفافیت ترشوندگی نانورولایه های گرافنی در سیستم مس - گرافن. نانومقیاس، ۱، ۱۰۵ (۲۰۲۲)
32. S. Plimpton, J. Comput. Phys., 117, 1(1995).
33. Y. Xu, et al., Nanoscale., 11, 14491(2019).
34. Q. Peng, X. Wen, S. De, Rsc Adv., 3, 13772(2013).
35. I.-G. Buda, et al., Sci. Rep., 7, 1(2017).
36. A.N. Sosa, et al., J. Mater. Sci., 57, 8516(2022).
37. B. Peng, et al., J. Mat. Chem. C, 4, 3592(2016).
38. J.-P. Ryckaert, G. Ciccotti, H.J. Berendsen, J. Comput. Phys., 23, 327(1977).
39. T.J. Dick, J.D. Madura, *A review of the TIP4p, TIP4p-ew, TIP5p, and TIP5p-e water models*. Annual Reports in Computational Chemistry, 2005. 1: p. 59-74.
40. Bryk, P., et al., *What is the value of water contact angle on silicon?* Mater., 13, 1554(2020).
12. P. Joensen, R. Frindt, S.R. Morrison, Mater. Res. Bull., 21, 457(1986).
13. M. Chhowalla, et al., Nat. Chem., 5, 263 (2013).
14. P. Vogt, et al., Phys. Rev. Lett., 108, 155501(2012).
15. L. Li, et al., Nat. Nanotechnol., 9, 372(2014).
16. H. Liu, et al., ACS Nano, 8, 4033(2014).
17. B.F. Erlanger, et al., Nano Lett., 1, 465 (2001).
18. A. Reisch, et al., Langmuir, 25, 3610(2009).
19. J.C. Rasaiah, S. Garde, G. Hummer, Annu. Rev. Phys. Chem., 59, 713(2008).
20. E. Sackmann, R. Bruinsma, Cell adhesion as wetting transition?, in Physics of bio-molecules and cells. Physique des biomolécules et des cellules. 2002, Springer. p. 285-309.
21. J. Rafiee, et al., Nat. Mater., 11, 217(2012).
22. G.T. Kim, et al., Adv. Mat., 26, 5166 (2014).
23. C.-Y. Lai, et al., Carbon, 80, 784(2014).
24. T. Darmanin, F. Guittard, J. Am. Chem. Soc., 131, 7928 (2009).
25. J. Driskill, et al., J. Chem. Phys., 141, 18C517(2014).
26. F. Baharvand, et al., J. Phys. Chem. C., 124, 28152 (2020).
27. F. Ebrahimi, A. Pishavar, J. Phys. Chem. C., 119, 28389 (2015).
28. F. Ramazani, F. Ebrahimi, J. Phys. Chem. C., 120, 12871 (2016).



# Numerical investigation of wettability of copper substrates with graphene-like nanolayers

Aref Pishevar \*

Department of physics, Faculty of sciences., University of Birjand, Birjand, Iran

**Abstract:** In this research, the wettability of copper substrates covered with graphene-like nanostructures - phosphorene, brophene, germanene and silicene - was investigated with the aim of determining the role of different parameters and determining the conditions for the phenomenon of wetting transparency for this category of top-layers. For this purpose, the simulation software has been done with the help of LAMMPS and molecular dynamics method. Nanodroplets consisting of 4000 water molecules are used in the simulation and the interaction potential is a combination of Coulney and Lennard Jones potential. The results of the simulations show that the contact angle of the system for nanodroplets consisting of 4000 water molecules and larger is independent of the size of the nanodroplet, and for smaller nanodroplets, it has an inverse relationship. Also, an increase in the hydrophobicity of the substrate and the hydrophilicity of the top-layers were observed, regardless of the type of top-layer, with the increase in the temperature of the system. On the other hand, increasing the interaction strength of the top-layer will reduce the contact angle of the system, similar to the graphene top-layer and the substrate also affects the wetting behavior of the system, but not as much as the top-layer can affect the behavior of the droplet on the surface by imposing its interaction strength. The similar wetting behavior of germanene and silicene can be seen in different cases, and this similarity of wetting behavior can be attributed to the close interaction and structural parameters of these two top-layers. With the increase in the number of top-layers, the top-layer effect dominates the substrate, but with the increase in the number of top-layers, decreases the amount of changes in the final contact angle of the system. In addition, the increase in the width of the potential well of the substrate leads to an upward trend for the system without a top-layer and a downward trend for the system with a top-layer, will reduce this contact angle difference; The decrease is more noticeable between germanene and other nanostructures.

**Keywords:** Graphene-like nanostructures, Wetting transparency, Molecular dynamics, Contact angle, Borophene.