



ارائه چند روش درشت‌دانه دینامیک مولکولی جهت مدل‌سازی نانوساختارهای سیلیکونی

حسین نجات‌پیش‌کناری^{1*}، پوریا دل‌افروز²

1- استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

2- دانشجوی کارشناسی‌ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

*nejat@sharif.edu، صندوق‌پستی 1341866866

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 01 دی 1395

پذیرش: 21 اسفند 1395

ارائه در سایت: 03 اردیبهشت 1396

کلید واژگان:

دینامیک مولکولی تسریع شده

روش درشت‌دانه

ساختارهای سیلیکونی

پتانسیل استلینگر وبر

چکیده

با توجه به پیشرفت سریع نانوتکنولوژی کاربرد مواد در ابعاد نانو نیز به شدت افزایش یافته است. به دلیل افزایش اثرات سطح در اندازه‌های کوچک تئوری‌های کلاسیک توانایی مدل‌سازی سیستم‌های ابعاد نانو را ندارند. از طرف دیگر روش‌های دقیق در اندازه‌های کوچک که بر مبنای کوانتوم و مدل‌سازی اتمی هستند، بسیار زمان‌بر بوده و در نتیجه استفاده از آن‌ها به اندازه‌های خیلی کوچک و بازه زمانی شبیه‌سازی کوتاه محدود می‌شود. در این تحقیق روش‌های درشت‌دانه برای شتاب دادن به شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی برای بررسی ساختارهای سیلیکونی ارائه شده است. در این روش پس از اعمال کردن نگاهت مناسب بین دانه‌های مدل درشت‌دانه و اتم‌های ساختار اصلی، پارامترهای سیستم به گونه‌ای تغییر می‌یابد که خواص فیزیکی مدل درشت‌دانه و تمام اتم یکسان باشد. با استفاده از شبیه‌سازی‌های استاتیکی و دینامیکی مختلف و بررسی اثر اندازه، سرعت و دقت مدل‌ها بررسی می‌شود. خطای مدل درشت‌دانه ارائه شده برای محاسبه مدول یانگ، ارتعاشات طولی و عرضی کمتر از 5% است، در حالی که این روش در حدود 8 برابر سریع‌تر است.

Development of Coarse-Graining Methods for Modeling of Silicon Nanostructures

Hossein Nejat Pishkenari^{1*}, Porya Delafrouz¹

1- Department of Mechanical Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran

* P.O.B. 1341866866 Tehran, Iran, nejat@sharif.edu

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 21 December 2016
Accepted 11 March 2017
Available Online 23 April 2017

Keywords:
Accelerated Molecular Dynamics
Coarse-Graining Model
Silicon Structures
Stillinger-Weber Potential

ABSTRACT

With the rapid progress of nanotechnology, application of nano-scale materials has been extensively increased. Due to increase of surface effects at small sizes, the classical theories are not capable of modeling nano-scale systems. On the other hand, more accurate methods at small sizes are based on the quantum and atomistic models which are too time consuming, and hence using these methods is limited to very small sizes for a short period of time. In this research coarse-graining models for accelerating molecular dynamics simulations for the analysis of silicon structures are proposed. In this technique, after assigning a proper map between beads of the coarse-grained model and atoms of the main structure, the system parameters are modified in a scheme in which the original model and the coarse-grained models have the same physical properties. By using various static and dynamic simulations and evaluating the size effect, the accuracy and speed of the proposed model is examined. The error of this CG model for investigating the Young modulus, longitudinal and transversal vibration is less than 5 percent, while it is about 8 times faster than AA model.

1- مقدمه

کاهش تعداد اتم‌هاست. هرچند این کار دقت را به دلیل کم‌کردن درجات آزادی سیستم کاهش می‌دهد، اما افزایش سرعتی که این روش‌ها به دنبال دارند استفاده از آن‌ها را توجیه‌پذیر می‌کند. تا به حال فقط برای سیستم‌های بیولوژیکی دو مدل درشت‌دانه پذیرفته شده براساس شکل¹ [9] و براساس مانده² [10] وجود دارد که شبیه‌سازی بسیاری با استفاده از آن‌ها انجام شده است.

سیلیکون یکی از مواد اصلی برای ساخت سنسورهای در ابعاد نانو است [11]. برای تحلیل این ماده با استفاده از دینامیک مولکولی پژوهش‌هایی انجام شده است [12-14] که با ابعاد واقعی همچنان فاصله دارند و مدل

با توجه به این‌که ساخت ابزارهای الکترومکانیکی پیشرفت‌های زیادی داشته است، ولی همچنان تحلیل آن‌ها به دلیل بالا بودن تعداد اتم‌ها با استفاده از روش‌های دقیقی چون دینامیک مولکولی مقدور نیست [1]. با وجود این‌که می‌توان سیستم‌هایی با میلیون‌ها اتم را با استفاده از سوپرایانه‌ها شبیه‌سازی کرد، اما این تعداد اتم با تعداد اتم‌های موجود در سیستم‌های واقعی فاصله دارد [2,3]. پس روش‌هایی برای افزایش سرعت این شبیه‌سازی‌ها ارائه شده است.

روش‌هایی که برای افزایش سرعت شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی استفاده می‌شوند به دو دسته تقسیم می‌شوند: روش‌های چند مقیاسی [4-6] و درشت‌دانه [7,8]. در روش‌های درشت‌دانه افزایش سرعت شبیه‌سازی در پی

¹ Shape-based
² Residue-based

Please cite this article using:

H. Nejat Pishkenari, P. Delafrouz, Development of Coarse-Graining Methods for Modeling of Silicon Nanostructures, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 4, pp. 267-276, 2017 (in Persian)

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

H. Nejat Pishkenari, P. Delafrouz, Development of Coarse-Graining Methods for Modeling of Silicon Nanostructures, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 4, pp. 267-276, 2017 (in Persian)

2-3- درشت دانه سازی با استفاده از جدا کردن دو ساختار FCC

در این قسمت نیز از این نکته که هر ساختار الماسی متشکل از دو ساختار FCC است، استفاده می شود با این تفاوت که هر ساختار FCC جداگانه مدل می شوند. برای این منظور ساختار نخست که مرکز آن در مبدأ قرار دارد جداگانه مدل می شود.

در ابتدا تمام دانه های درشت دانه مانند هم در نظر گرفته می شوند و برای پیداکردن جرم معادل دانه های درشت دانه، یک دانه در قسمت بالک ماده در نظر گرفته و سهم آن نیز محاسبه می شود. همان طور که در شکل 1 قابل مشاهده است در اطراف هر دانه بالک (اتم مشکی)، 12 اتم قرمز رنگ و 6 اتم نارنجی رنگ از مدل تمام اتم قرار دارد. اتم های قرمز بین دانه بالک و دانه های قهوه ای مشترک هستند؛ بنابراین نیمی از آن ها سهم هر دانه بالک است. اتم های نارنجی نیز بین دانه های بنفش، قهوه ای و دانه بالک مشترک است به طوری که هر اتم مدل تمام اتم بین 6 دانه مدل درشت دانه تقسیم می شود، همچنین یک اتم در محل قرارگیری خود دانه بالک وجود دارد؛ بنابراین می توان سهم هر دانه بالک را به صورت رابطه (1) مشخص کرد:

$$M_{\text{bulk}} = 1 + 12 \times \frac{1}{2} + 6 \times \frac{1}{6} = 8 \quad (1)$$

سپس جرم دانه های گوشه، لبه و سطح تعیین می گردد. برای مشخص کردن جرم معادل این دانه ها نیز مانند حالت پیشین عمل می گردد. برای دانه های سطح بر اساس شکل 8، 8 اتم قرمز رنگ وجود دارد که از هر کدام نیمی سهم دانه سطح و نیمی دیگر سهم دانه قهوه ای است. 5 اتم نارنجی نیز وجود دارد که 4 تا روی سطح و 1 عدد بالای سطح قرار دارند. اتمی که روی سطح قرار ندارد مانند حالت بالک بین 6 دانه، ولی اتم های روی سطح بین 5 دانه درشت دانه تقسیم می شوند؛ بنابراین سهم هر دانه سطح به صورت رابطه (2) محاسبه می شود.

$$M_{\text{surface}} = 1 + 8 \times \frac{1}{2} + \frac{1}{6} + 4 \times \frac{1}{5} = \frac{179}{30} \quad (2)$$

برای دانه های لبه نیز می توان از شکل 2 استفاده کرد. در شکل 5.3 اتم قرمز وجود دارد که مانند قبل بین دانه لبه و دانه قهوه ای مجاور با اتم مدل تمام اتم تقسیم می شود، همچنین 4 اتم نارنجی

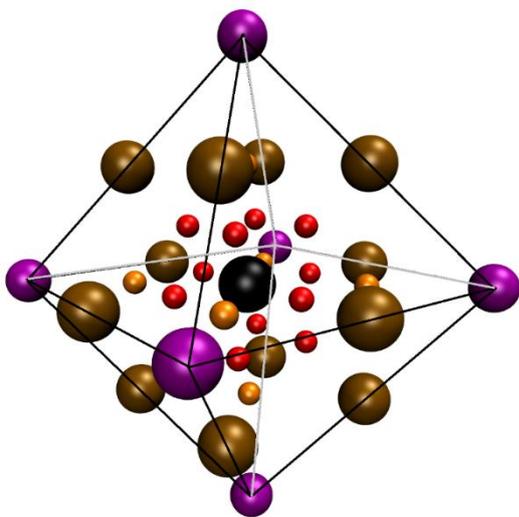


Fig. 1 Bulk bead and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

شکل 1 دانه بالک و دانه های درشت دانه و تمام اتم مجاور آن

درشت دانه مناسب برای تحلیل رفتار این ماده موجود نیست و فقط چند مورد روش چندمقیاسی برای افزایش سرعت شبیه سازی ها ارائه شده است [16,15]. در این پژوهش یک مدل درشت دانه ارائه شده که ایده اصلی آن کاهش درجات آزادی سیستم است، بدین صورت که یک دانه به جای چندین اتم قرار می گیرد. این روش برای حالتی در نظر گرفته می شود که شبکه بلوری سیستم دچار نقص نباشد. برای این حالت ابتدا مشخص می شود که ساختار درشت دانه جدید چگونه باشد. پس از مشخص شدن این ساختار باید با توجه به آن، جرم دانه ها مشخص شود. پارامترهای پتانسیلی جدید باید پس از مشخص شدن ساختار اتمی و جرم دانه ها تعیین گردند به صورتی که مدل جدید خواص فیزیکی ماده را بتواند به درستی پیش بینی کند برای همین پس از تولید مدل جدید، ابتدا شبیه سازی های مربوط به حالت بالک آن انجام می پذیرد و خواصی چون ثوابت الاستیک و مدول بالک با استفاده از مدل تمام اتم و درشت دانه محاسبه و با هم مقایسه می شود که نتایج این دو مدل از تطابق کامل برخوردار است. در مرحله بعد میزان دقت این مدل برای اندازه های کوچک باید مورد بررسی قرار گیرد که برای این قسمت محاسبه مدول یانگ و محاسبه فرکانس ارتعاشات نانو وایر سیلیکونی مورد بررسی قرار می گیرد.

ادامه مقاله بدین صورت خواهد بود. در بخش 2 ابتدا روش درشت دانه معرفی می شود. در بخش 3 با استفاده از شبیه سازی های حالت بالک ماده، صحت مدل ارائه شده بررسی می شود. همچنین با استفاده از شبیه سازی های مختلف استاتیکی و دینامیکی میزان دقت مدل ارائه شده برای پیش بینی رفتار اندازه های کوچک مورد بررسی قرار می گیرد. در انتها در بخش 5 نتیجه گیری آورده خواهد شد.

2- روش

ابتدا باید ساختار درشت دانه ایجاد و سپس با توجه به ساختار جدید پارامترهای پتانسیلی تعیین شود. اتم های سیلیکون بر اساس ساختار الماسی در کنار هم قرار می گیرند و پتانسیل استفاده شده برای این اتم نیز پتانسیل استیلینگر-و بر¹ [17] است.

2-1- تعیین ساختار مناسب برای مدل درشت دانه

ابتدا باید ساختار مناسب برای چیدن اتم ها را پیدا کرد. برای این منظور به این صورت عمل می شود که اتم های درشت دانه با همان ساختار الماسی و با ثابت شبکه دو برابر ثابت شبکه سیلیکون چیده می شوند. مرحله بعد تعیین نگاشت جرم بین حالت تمام اتم و درشت دانه است برای این منظور سه روش ارائه شده که در ادامه به آن ها پرداخته خواهد شد.

2-2- درشت دانه سازی با استفاده از یک نوع اتم

ساختار الماسی از دو ساختار وجوه مرکز پر² (FCC) تشکیل شده است که مرکز یکی از این ساختارها به اندازه 0.25 برابر ثابت شبکه در هر سه راستا با مرکز دیگری اختلاف دارد. برای ساختار وجوه مرکز پر در هر واحد این ساختار هشت اتم در رئوس مکعب قرار دارند و شش اتم نیز در مرکز وجوه مکعب واحد قرار دارند. با توجه به این که در این حالت تعداد اتم ها به میزان 1/8 کاهش می یابد و چگالی ساختار باید ثابت بماند، در نتیجه جرم دانه ها در این حالت 8 برابر اتم های سیلیکون در نظر گرفته می شود.

¹ Stillinger-Weber potential

² Face-centered cubic

جرم معادل برای دانه گوشه نیز به صورت رابطه (4) قابل محاسبه است.

$$M_{\text{corner}} = 1 + 3 \times \frac{1}{2} + 3 \times \frac{1}{4} = 3.25 \quad (4)$$

با استفاده از جرم های معادل محاسبه شده در بالا جرم اتم های سطح، لبه و گوشه تغییر داده می شوند.

برای مدل سازی ساختار FCC دوم، دو ساختار FCC با 0.25 برابر ثابت شبکه اختلاف در سه راستا از مرکز به صورت تمام اتم و درشت دانه چیده می شوند. نکته قابل توجه در این حالت این است که اتم های درشت دانه بین اتم های تمام اتم قرار می گیرند و مکان هیچ اتم درشت دانه ای با مکان اتم مدل تمام اتم یکسان نیست، سپس برای این دو ساختار جرم معادل برای مدل درشت دانه محاسبه می گردد که در ادامه حالات مختلف مورد بررسی قرار می گیرد.

شکل 5 مربوط به یک دانه درشت دانه در حالت بالک است. در این شکل همچنین اتم های مدل تمام اتم و دانه های مدل درشت دانه که با اتم مورد نظر سهم مشترک از اتم های درشت دانه را دارند دیده می شود.

همان طور که در شکل 5 مشاهده می شود در اطراف اتم بالک که با رنگ بنفش در شکل مشخص شده چهار اتم مدل تمام اتم وجود دارد (اتم های نارنجی رنگ) که سهم کامل از آن ها مربوط به دانه حالت بالک است. همچنین 12 اتم مدل تمام اتم (اتم های آبی) وجود دارند که هر کدام از آن ها بین دو دانه قرمز و دانه بالک تقسیم می شوند. برای نمونه اتم های که در یک صفحه قرار دارند مشخص شده اند. به این ترتیب از هر کدام از این اتم ها یک سوم سهم به دانه بالک می رسد. بدین ترتیب سهم هر دانه بالک هشت اتم تمام اتم به صورت رابطه (5) است.

$$M_{\text{bulk2}} = 4 \times 1 + 12 \times \frac{1}{3} = 8 \quad (5)$$

در این قسمت یک دانه سطح را در نظر گرفته می شود. در شکل 6 یک دانه سطح، دانه های درشت دانه مجاور آن و اتم های ساختار تمام اتم مشاهده می شوند.

در این حالت نیز در اطراف هر دانه سطح (دانه بنفش) چهار اتم تمام اتم قرار دارند که متعلق به این دانه است و با رنگ نارنجی مشخص شده اند. در این حالت نسبت به حالت دانه بالک چهار اتم مدل تمام اتم حذف و همچنین 4 اتم مدل درشت دانه حذف می شوند، به همین دلیل اتم های مدل تمام اتم نزدیک به سطح که 4 عدد است (اتم های سبزرنگ) هر کدام بین دو اتم تقسیم می شوند. علاوه بر این هشت اتم، شش اتم (اتم های آبی) وجود دارد که هر کدام بین سه دانه درشت دانه به صورت رابطه (6) تقسیم می شوند.

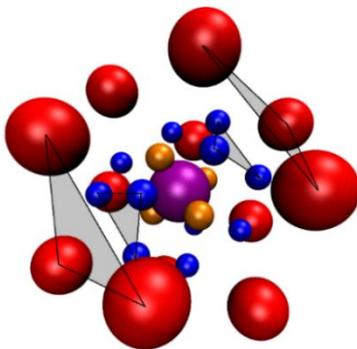


Fig. 5 Bulk bead in the second FCC structure and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

شکل 5 دانه بالک در ساختار FCC دوم و دانه های درشت دانه و تمام اتم مجاور آن

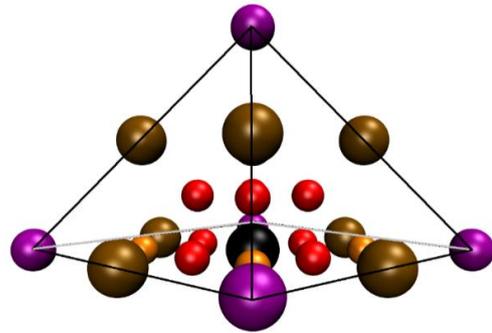


Fig. 2 Surface bead and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

شکل 2 دانه سطح و دانه های درشت دانه و تمام اتم مجاور آن

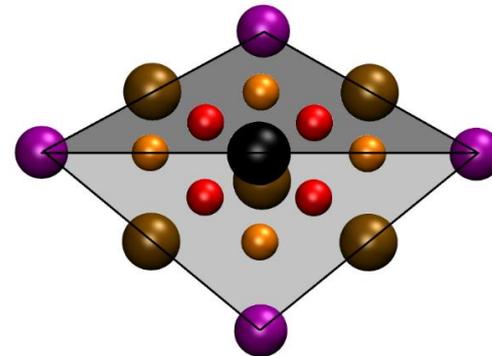


Fig. 3 Edge bead and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

شکل 3 دانه لبه و دانه های درشت دانه و تمام اتم مجاور آن

وجود دارد که دو تا روی لبه و دو تا روی سطحها قرار دارند. اتم هایی که روی لبه قرار دارند بین 4 دانه مدل درشت دانه تقسیم می شوند و اتم هایی که روی سطح های کناری قرار دارند بین 5 دانه تقسیم می شوند؛ بنابراین جرم معادل برای این حالت به صورت رابطه (5) محاسبه می شود.

$$M_{\text{edge}} = 1 + 5 \times \frac{1}{2} + 2 \times \frac{1}{4} + 2 \times \frac{1}{5} = 4.4 \quad (3)$$

در آخر نیز برای یک گوشه جرم معادل محاسبه می شود.

همان طور که در شکل 4 مشاهده می گردد سه اتم قرمز وجود دارد که از هر کدام نیمی سهم دانه گوشه است و 3 اتم نارنجی که هر کدام بین 4 دانه مدل درشت دانه تقسیم می شوند.

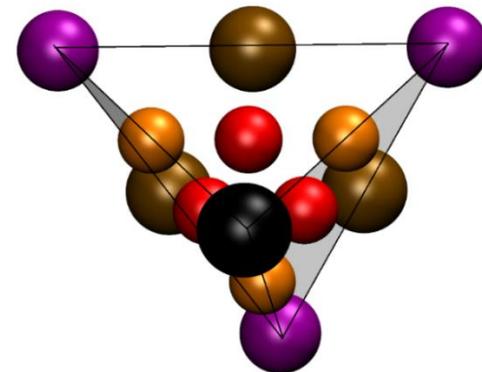


Fig. 4 Corner bead and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

شکل 4 دانه گوشه و دانه های درشت دانه و تمام اتم مجاور آن

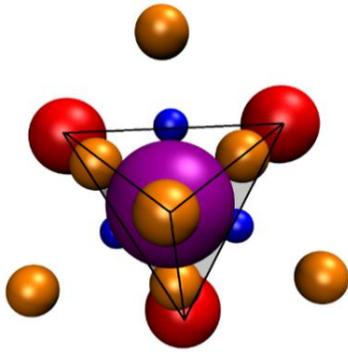


Fig. 8 Corner bead in the second FCC structure and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

شکل 8 دانه گوشه در ساختار FCC دوم و دانه‌های درشت‌دانه و تمام اتم مجاور آن

دارند و جرم همه آن‌ها هشت برابر جرم یک اتم سیلیکون است. پس برای تولید این مدل کافی است که یک ساختار الماسی با ثابت شبکه دو برابر ثابت شبکه سیلیکون و جرم 8 برابر جرم یک اتم سیلیکون ساخته شود، سپس دانه‌های گوشه، لبه و سطح به ترتیب با دانه‌هایی به جرم 3.25، 4.4 و 5.96667 برابر جرم یک اتم سیلیکون جایگزین گردند.

2-4- درشت‌دانه‌سازی با استفاده از فاصله بین اتم‌ها

در این قسمت روشی دیگر برای نگاشت جرمی دانه‌های درشت‌دانه ارائه خواهد شد. الگوریتم این روش به این صورت است که هر اتم مدل تمام اتم در نظر گرفته می‌شود و دانه‌های درشت‌دانه که در فاصله کمتر از یک شبکه با آن قرار دارند مشخص می‌شوند و این اتم با توجه به فاصله بین دانه‌های درشت‌دانه تقسیم می‌شود و این روند برای تمام اتم‌ها انجام می‌پذیرد تا سهم هر دانه درشت‌دانه در مدل جدید مشخص شود. نتایج پیاده‌سازی این الگوریتم برای یک ساختار 8 در 8 در 8 شبکه در شکل 9 آورده شده است. در جدول 1 مقدار این توزیع جرم به همراه رنگ اتم در شکل 9 آمده است.

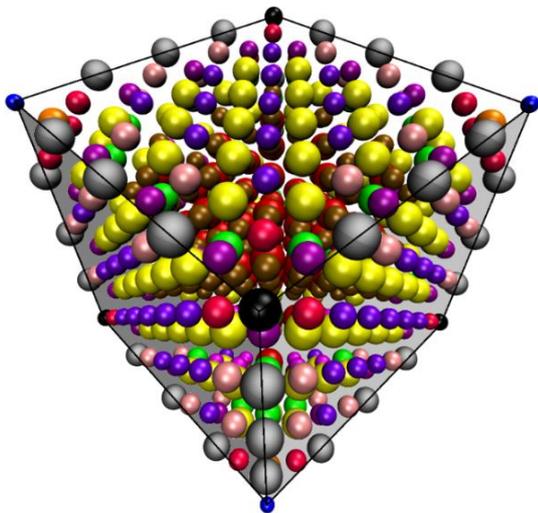


Fig. 9 Mass disturbance of third Coarse-Grained model for silicon cubic with 8a

شکل 9 توزیع جرم در مدل درشت‌دانه برای سیلیکون برای یک مکعب به ضلع 8

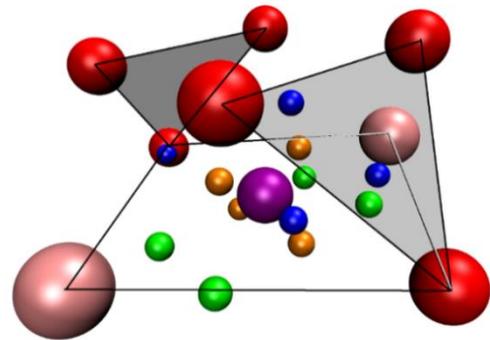


Fig. 6 Surface bead in the second FCC structure and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

شکل 6 دانه سطح در ساختار FCC دوم و دانه‌های درشت‌دانه و تمام اتم مجاور آن

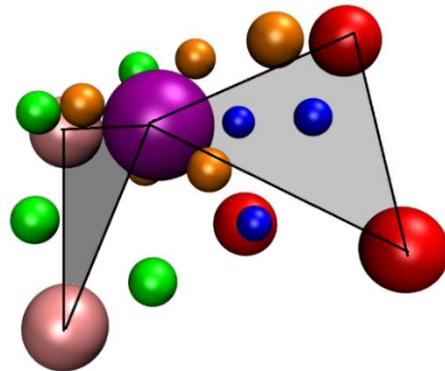


Fig. 7 Edge bead in the second FCC structure and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

شکل 7 اتم لبه در ساختار FCC دوم و اتم‌های درشت‌دانه و تمام اتم مجاور آن

$$M_{\text{surface}2} = 6 \times \frac{1}{3} + 4 \times 1 + 4 \times \frac{1}{2} = 8 \quad (6)$$

حالت بعدی (شکل 7) که اتم درشت‌دانه در آن قرار می‌گیرد این است که اتم در لبه قرار داشته باشد.

برای اتمی که در لبه قرار داشته باشد مانند حالات قبل 4 اتم (اتم‌های نارنجی) کاملاً متعلق به دانه درشت‌دانه است. در این حالت سه تا از اتم‌های آبی هر کدام بین سه دانه درشت‌دانه تقسیم می‌شوند، 4 اتم سبزرنگ هر کدام بین دو دانه به‌طور مساوی قسمت می‌شوند و یک اتم نارنجی رنگ دیگر نیز در این قسمت وجود دارد که روی لبه قرار دارد و به‌طور کامل متعلق به دانه درشت‌دانه در لبه است. برای دانه درشت‌دانه در لبه جرم معادل نیز به‌صورت رابطه (7) محاسبه می‌شود.

$$M_{\text{edge}2} = 3 \times \frac{1}{3} + 4 \times \frac{1}{2} + 5 \times 1 = 8 \quad (7)$$

آخرین حالت که می‌توان برای دانه درشت‌دانه در نظر گرفت این است که این دانه در گوشه قرار گیرد. شکل 8 یک اتم در گوشه و اتم‌های درشت‌دانه و تمام اتم مجاور آن را نشان می‌دهد.

در این حالت سه اتم آبی هر کدام بین سه اتم تقسیم می‌شوند و بقیه اتم‌ها به‌طور کامل سهم دانه درشت‌دانه در گوشه می‌شوند. سهم جرمی اتم‌های گوشه نیز به صورت رابطه (8) محاسبه می‌شود.

$$M_{\text{corner}2} = 3 \times \frac{1}{3} + 7 \times 1 = 8 \quad (8)$$

در این حالت تمام دانه‌های درشت‌دانه سهم مساوی از اتم‌های تمام اتم

جدول 1 انواع اتم های مدل درشت دانه سیلیکون

نوع اتم	جرم معادل	رنگ
1	3.3316	آبی
2	7.4732	قرمز
3	5.0070	نارنجی
4	5.3974	زرد
5	5.0788	خاکستری
6	10.6855	سبز
7	7.3665	صورتی کم رنگ
8	5.2220	بنفش
9	5.5333	قهوه ای
10	3.8814	مشکی
11	7.2599	سورمه ای
12	10.5761	صورتی
13	10.4667	جیگری

Table 1 Different bead in the third Coarse-Grained model

جدول 2 پارامترهای مورد استفاده در پتانسیل استیلینگر وبر برای سیلیکون

پارامتر	مقدار	پارامتر	مقدار
ϵ	2.1683	$\cos\theta_0$	-0.3333
σ	2.0951	A	7.0495
a	1.80	B	0.6022
λ	21.0	p	4.0
γ	1.20	q	0.0

$$\begin{aligned} \epsilon_{\text{bulk}} &= 8\epsilon_{\text{aa}}, \epsilon_{\text{surface}} = 5.9667\epsilon_{\text{aa}}, \epsilon_{\text{edge}} = 4.4\epsilon_{\text{aa}} \\ \epsilon_{\text{corner}} &= 3.25\epsilon_{\text{aa}}, \epsilon_{\text{bulk-surface}} = 6.9089\epsilon_{\text{aa}} \\ \epsilon_{\text{bulk-edge}} &= 5.9329\epsilon_{\text{aa}}, \epsilon_{\text{bulk-corner}} = 5.0990\epsilon_{\text{aa}} \\ \epsilon_{\text{surface-edge}} &= 5.1238\epsilon_{\text{aa}} \\ \epsilon_{\text{surface-corner}} &= 4.4035\epsilon_{\text{aa}} \\ \epsilon_{\text{edge-corner}} &= 5.9329\epsilon_{\text{aa}} \end{aligned} \quad (12)$$

برای حالتی که 13 نوع دانه وجود دارد نیز می توان مانند بالا عمل کرد و در این حالت نیز ϵ متناسب با جرم هر اتم در نظر گرفته می شود.

در این قسمت نیز ابتدا به محاسبه ثوابت الاستیک پرداخته می شود و پس از آن مدول یانگ در دو حالت کرنش عرضی و طولی محاسبه می شود و در نهایت به بررسی رفتار دینامیکی فرکانس طبیعی تیر سیلیکونی پرداخته خواهد شد و تأثیر پارامترهای مختلف بر خطای مدل های ارائه شده بررسی می گردد.

3- شبیه سازی

در این قسمت شبیه سازی مختلف استاتیکی و دینامیکی انجام می پذیرد تا میزان دقت مدل های ارائه شده بررسی شود. در ابتدا ثوابت الاستیکی محاسبه می شود، سپس مدول یانگ به عنوان یک پارامتر استاتیک بررسی خواهد شد. در انتها شبیه سازی ها شامل محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی و عرضی تیرها با اندازه های مختلف است.

3-1- تعیین ثوابت الاستیک با استفاده از شبیه سازی حالت بالک

نخستین گام برای بررسی صحت مدل ارائه شده این است که بررسی شود که این مدل توانایی توصیف حالت بالک ماده را دارد. برای این منظور یک ساختار فلزی که در سه راستا متناوب است در نظر گرفته می شود. نتایج محاسبه پارامترهای الاستیک برای حالت بالک ماده با استفاده از آزمایش قابل محاسبه است [18]. برای شبیه سازی باید یک فایل پتانسیل مناسب انتخاب کرد. در این مقاله از فایل ارائه شده توسط ژو و همکاران [19] استفاده شده است.

برای به دست آوردن ثوابت الاستیک در راستاهای مختلف یک تغییر طول در آن راستا به سلول مرکزی داده و سپس تغییر تنش به دست آمده است. با تقسیم این تغییر تنش بر کرنش اعمالی مقادیر ثوابت به دست آمده است. از آنجا که سیستم متقارن در نظر گرفته می شود، ماتریس خواص الاستیک دارای تقارن به صورت رابطه (13) است.

$$\begin{aligned} C_{11} &= C_{22} = C_{33} \\ C_{12} &= C_{13} = C_{23} \\ C_{44} &= C_{55} = C_{66} \end{aligned} \quad (13)$$

به همین دلیل فقط پارامترهای C_{11} ، C_{12} و C_{44} گزارش می شوند.

ابتدا باید صحت پتانسیل استفاده شده بررسی شود. برای این موضوع یک سلول از جنس سیلیکون با ابعاد 20 شبکه در 20 شبکه در 20 شبکه به عنوان سلول مرکزی در نظر گرفته می شود و با استفاده از آن ثوابت الاستیک تعیین

2-5- تعیین پارامترهای پتانسیل استیلینگر-وبر

در این قسمت پارامترهای پتانسیل استیلینگر-وبر طوری تعیین می شود که بتوان برای مدل درشت دانه استفاده کرد. ابتدا این پارامترها برای مدل با یک نوع اتم ایجاد می شوند، سپس برای دو مدل دیگر تعمیم داده می شوند. با توجه به این که هر اتم درشت دانه به جای هشت اتم مدل تمام اتم قرار می گیرد و ثابت شبکه در این حالت دو برابر شده است می توان مدل زیر را به صورت رابطه (9) برای پتانسیل ارائه کرد.

$$E_{\text{new}}(r_{ij}, r_{ik}) = 8E_{\text{aa}} \left(\frac{r_{ij}}{2}, \frac{r_{ik}}{2} \right) \quad (9)$$

با توجه به رابطه پتانسیل استیلینگر-وبر برای این که رابطه (9) برقرار باشد، باید در پارامترهای پتانسیل تغییراتی به صورت رابطه (10) ایجاد کرد.

$$\begin{aligned} \varphi_2 \left(\frac{r_{ij}}{2} \right) &= A_{ij} \epsilon_{ij} \left[B_{ij} \left(\frac{2\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{p_{ij}} - \left(\frac{2\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{q_{ij}} \right] \\ &\quad \times \exp \left(\frac{2\sigma_{ij}}{r_{ij} - a_{ij}(2\sigma_{ij})} \right) \\ \varphi_3 \left(\frac{r_{ij}}{2}, \frac{r_{ik}}{2}, \theta_{ijk} \right) &= \lambda_{ijk} \epsilon_{ijk} [\cos\theta_{ijk} - \theta_{oijk}]^2 \\ &\quad \times \exp \left(\frac{\gamma_{ij}(2\sigma_{ij})}{r_{ij} - a_{ij}(2\sigma_{ij})} \right) \\ &\quad \times \exp \left(\frac{\gamma_{ik}(2\sigma_{ik})}{r_{ik} - a_{ik}(2\sigma_{ik})} \right) \end{aligned} \quad (10)$$

در روابط بالا ثوابتی استفاده شده که مقادیر آن ها برای حالت تمام اتم برای اتم سیلیکون در جدول 2 آمده است [17].

با تغییر پارامتر σ می توان تأثیر تغییر ثابت شبکه را از بین برد و برای این که انرژی نیز هشت برابر شود نیز می توان پارامتر ϵ را تغییر داد؛ بنابراین پارامترهای پتانسیل به صورت رابطه (11) تغییر می کنند.

$$\sigma_{\text{new}} = 2\sigma_{\text{aa}}, \epsilon_{\text{new}} = 8\epsilon_{\text{aa}} \quad (11)$$

در قسمت بعد پارامترهای پتانسیل برای حالتی که دو ساختار FCC جدا از هم در نظر گرفته شوند به دست آورده می شوند. برای این حالت تنها پارامتری که تغییر می کند ϵ است. این پارامتر متناسب با جرم هر اتم در نظر گرفته می شود. نکته دیگر که در این قسمت وجود دارد این است که نیروهای بین اتم های مختلف چگونه مدل شوند که برای این کار پارامتر ϵ جدید میانگین هندسی دو اتم در نظر گرفته می شود. بدین ترتیب مقدار ϵ برای حالات مختلف به صورت رابطه (12) در می آید.

ابتدا به بررسی تأثیر این پارامتر بر تغییرات طول پرداخته می شود. برای این منظور ضخامت نانواپر 10 شبکه در نظر گرفته می شود و طول این نانواپر تغییر داده می شود تا میزان خطای مدل های ارائه شده برحسب طول مشخص شود. نتایج این قسمت در شکل 10 آمده است. نمادهای CG1، CG2 و CG3 به ترتیب بیانگر مدل درشت دانه اول، دوم و سوم است. همان طور که در نمودار مشاهده می شود خطای محاسبه مدول یانگ با افزایش طول تغییر چندانی نمی کند و تقریباً ثابت است. پارامتر دیگری که باید مورد بررسی قرار گیرد، تغییر ضخامت است. برای این منظور ضخامت تیر تغییر داده و طول تیر نیز برای این قسمت 5 برابر ضخامت در نظر گرفته می شود. نتایج این شبیه سازی ها در شکل 11 آمده است. در شکل 11 مشاهده می شود که افزایش ضخامت باعث می شود که دقت مدل ها افزایش پیدا کند، دلیل این رفتار کاهش نسبت اتم های حجم به سطح با افزایش ضخامت است و نشان می دهد که این مدل ها برای اندازه های بزرگ تر از دقت بالاتری برخوردار است.

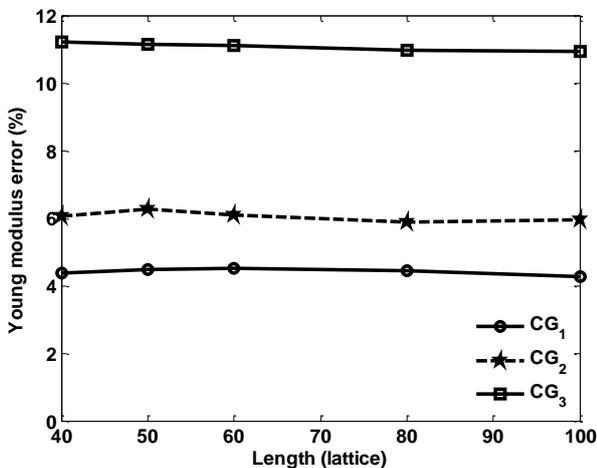


Fig. 10 Young modulus error with respect to length for a silicon nanowire with $10a$ thickness

شکل 10 خطای محاسبه مدول یانگ برحسب تغییرات طول برای یک نانواپر سیلیکونی به ضخامت 10 شبکه

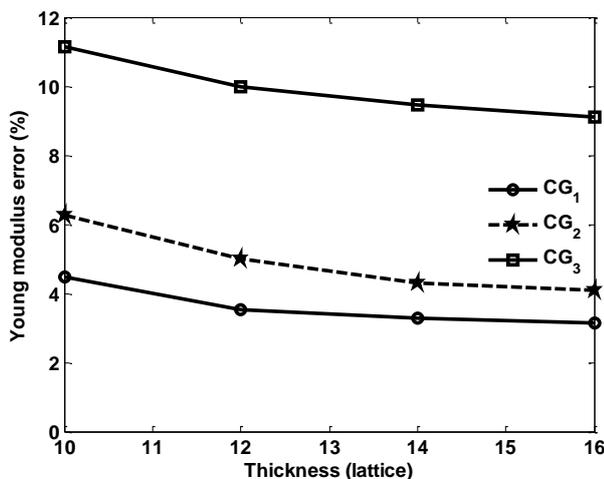


Fig. 11 Young modulus error with respect to thickness for a silicon nanowire with length which is five times bigger than thickness

شکل 11 خطای محاسبه مدول یانگ برحسب تغییرات ضخامت برای یک نانواپر سیلیکونی با طول 5 برابر ضخامت

می شوند. جدول 3 مربوط به پارامتر C_{11} ، جدول 4 مربوط به پارامتر C_{12} و جدول 5 مربوط به پارامتر C_{44} است.

در این قسمت برای اندازه های مختلف سلول مرکزی ثوابت الاستیک محاسبه می شود و برای مدل درشت دانه و تمام اتم با هم به صورت جدول های 2-4 مقایسه می شوند.

مدل درشت دانه به خوبی می تواند رفتار حالت بالک ماده را مانند مدل تمام اتم توصیف کند.

3-2- شبیه سازی برای محاسبه مدول یانگ

مدول یانگ را می توان با استفاده از انرژی پتانسیل برحسب کرنش نیز محاسبه کرد. برای این منظور پنج کرنش مختلف به تیر داده می شود و تغییرات انرژی پتانسیل بر واحد حجم برای این کرنش ها محاسبه می گردد. انتظار می رود انرژی پتانسیل بر واحد حجم طبق رابطه (14) تغییر کند.

$$\frac{\Delta U}{V} = \frac{1}{2} E \varepsilon^2 \quad (14)$$

با استفاده از نرم افزار متلب این تابع بر داده های موجود در منحنی منطبق می گردد تا مقدار مدول یانگ محاسبه شود. در این قسمت با استفاده از مدل های ارائه شده به محاسبه مدول یانگ پرداخته می شود تا میزان دقت این مدل ها در پیش بینی رفتار استاتیکی نانواپر سیلیکونی مورد بررسی قرار گیرد؛ سپس با تطبیق دادن یک منحنی سهموی بر این داده ها مدول یانگ به دست آورده می شود.

جدول 3 مقادیر C_{11} (گیگاپاسکال) برای دو مدل درشت دانه و تمام اتم برای اندازه سلول های مختلف

Table 3 C_{11} (GPa) values for Coarse-Grained model and All-Atom model with various unit cells

اندازه سلول مرکزی (تعداد شبکه)	20	10	6
مدل تمام اتم	151.4	151.4	151.4
مدل درشت دانه	151.4	151.4	151.4
خطای نسبی (%)	0	0	0

جدول 4 مقادیر C_{12} (گیگاپاسکال) برای دو مدل درشت دانه و تمام اتم برای اندازه سلول های مختلف

Table 4 C_{12} (GPa) values for Coarse-Grained model and All-Atom model with various unit cells

اندازه سلول مرکزی (تعداد شبکه)	20	10	6
مدل تمام اتم	76.4	76.4	76.4
مدل درشت دانه	76.4	76.4	76.4
خطای نسبی (%)	0	0	0

جدول 5 مقادیر C_{44} (گیگاپاسکال) برای دو مدل درشت دانه و تمام اتم برای اندازه سلول های مختلف

Table 5 C_{44} (GPa) value for Coarse-Grained model and All-Atom model with various unit cell

اندازه سلول مرکزی (تعداد شبکه)	20	10	6
مدل تمام اتم	56.4	56.4	56.4
مدل درشت دانه	56.4	56.4	56.4
خطای نسبی (%)	0	0	0

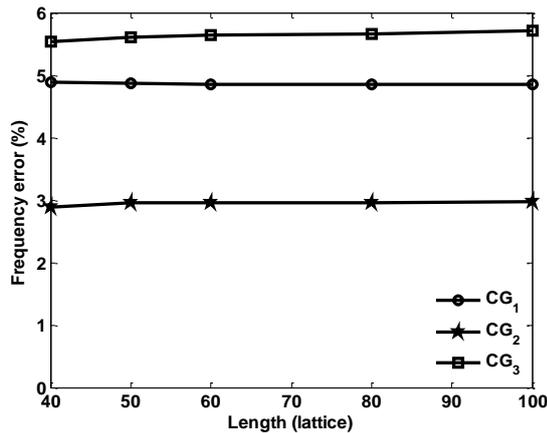


Fig. 12 Natural frequency of longitudinal vibration error with respect to length for a silicon nanowire with $10a$ thickness

شکل 12 خطای محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی نانوویبر سیلیکونی به ضخامت 10 شبکه برای طول های مختلف

جدول 6 مقادیر فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی برای سه مدل درشت دانه و تمام اتم

برای تیری به طول 80 شبکه و ضخامت 10 شبکه

Table 6 Natural frequency of longitudinal vibration for three Coarse-Grained models and All-Atom model for a silicon nanowire with $10a$ thickness and $80a$ length

مدل	تمام اتم	درشت دانه اول	درشت دانه دوم	درشت دانه سوم
فرکانس طبیعی (گیگاهرتز)	233.1	221.8	226.2	219.9

همان طور که در شکل 12 مشاهده می شود پارامتر طول تأثیری چندانی بر خطای فرکانس طبیعی محاسبه شده از طریق مدل های ارائه شده ندارد. نسبت اتم های سطحی به اتم های کل با افزایش طول تغییر نمی کند. در بین سه مدل ارائه شده مدل دوم نتایج بهتری را پیش بینی می کند.

تأثیر پارامتر ضخامت برای طول نرمال شده

در این قسمت طول هر نانوویبر متناسب با ضخامت تغییر می کند و برای ضخامت های مختلف این شبیه سازی ها انجام و فرکانس طبیعی سیستم در این حالات محاسبه می شود و خطای محاسبه فرکانس طبیعی نسبت به مدل تمام اتم برای 3 مدل درشت دانه به دست آورده می شود. نتایج مربوط به طول های 8 برابر ضخامت در شکل 13 آورده شده است.

با افزایش ضخامت میزان خطای فرکانس طولی کاهش پیدا می کند. این رفتار با توجه به کاهش نسبت اتم های سطحی به حجم قابل پیش بینی بود. با افزایش ضخامت تعداد اتم هایی که در داخل ماده و به دور از سطح قرار دارند افزایش پیدا می کند، در حالی که تفاوت تعداد اتم های سطحی با نسبت کمتری اتفاق می افتد و هنگامی که تعداد اتم های سطحی کاهش یابد تیر به حالت بالک نزدیک تر می شود و مدل های ارائه شده واقعی تر می گردند، زیرا برای ارائه این مدل ها فرض می شود که سیستم ساختار متناوب دارد. در این حالت نیز مدل درشت دانه دوم بهتر می تواند فرکانس طولی سیستم را پیش بینی کند.

اثر پارامتر ضخامت

در این قسمت به بررسی تأثیر پارامتر ضخامت بر نانوویبری به طول 100 شبکه پرداخته می شود. برای این شبیه سازی ها ضخامت وایر از 8 شبکه تا 20 شبکه تغییر می کند. خطای محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی برای سه روش درشت دانه در شکل 14 آمده است.

3-3- شبیه سازی دینامیکی نانوویبر سیلیکونی

در این قسمت ارتعاشات تیر برای مدل هایی که ارائه شده است بررسی و با استفاده از این شبیه سازی ها فرکانس طبیعی تیر در حالات مختلف بررسی می شود. در این شبیه سازی ها دو فرکانس طولی و عرضی تیر به صورت جداگانه محاسبه می شوند. شبیه سازی این قسمت نیز با استفاده از نرم افزار LAMMPS است. مراحل این شبیه سازی ها به شرح زیر است.

(1) پس از مینیمم کردن سیستم، دو شبکه انتهایی تیر (در حالت

درشت دانه یک شبکه) ثابت می شود و بقیه تیر در دمای 0.001 کلوین ریلکس می شود.

(2) سپس لایه انتهایی تیر در راستای طول برای محاسبه فرکانس

طولی و محور خنثی در لایه انتهایی تیر در راستای ارتفاع برای محاسبه فرکانس عرضی با سرعت ثابت کشیده می شود تا انتهای تیر به اندازه یک درصد طول تیر جابه جا شود.

(3) در مرحله بعد انتهای تیر ثابت می شود و بقیه تیر در دمای 0.001

کلوین ریلکس می شود تا سیستم به حالت تعادل برسد و تیر انحنای لازم را پیدا کند.

(4) در مرحله آخر نیز انتهای تیر آزاد می شود و کل تیر با هنگرد nve

حل می شود و ارتعاشات انتهایی تیر برای به دست آوردن فرکانس طبیعی مورد بررسی قرار می گیرد.

برای محاسبه فرکانس طبیعی یک تابع سینوسی به تغییرات انتهایی تیر در زمان حل با هنگرد nve منطبق می گردد و با استفاده از این روش فرکانس طبیعی تیر را محاسبه می گردد.

در این مرحله برای تیری از جنس سیلیکون شبیه سازی ها انجام خواهد شد و فرکانس طولی و عرضی برای آن محاسبه خواهد شد. برای این شبیه سازی ها می توان از فایل های LAMMPS مربوط به شبیه سازی نانوویبر از جنس طلا استفاده کرد. تنها تغییراتی که در فایل ورودی LAMMPS برای این قسمت باید ایجاد شود مربوط به چیدمان و پتانسیل استفاده شده است. مانند قبل برای شروع شبیه سازی ها لازم است گام زمانی مناسب تعیین شود تا سرعت محاسبات تا حدی افزایش پیدا کند که تأثیری بر دقت پاسخ نداشته باشد.

3-3-1- بررسی ارتعاشات طولی نانوویبر سیلیکونی

در این بخش ارتعاشات طولی نانوویبرهای سیلیکونی با استفاده از سه روش ارائه شده و روش تمام اتم مورد بررسی قرار می گیرد. برای این که صحت مدل های ارائه شده بررسی شود برای نانوویبرهای با اندازه های مختلف شبیه سازی ها انجام می شود و خطای محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی در سه روش درشت دانه ارائه شده با هم مقایسه می شوند.

در شبیه سازی های این قسمت تأثیر پارامترهای مختلف مورد بررسی قرار می گیرد. پارامترهایی که با توجه به آن ها اندازه وایرها مشخص می شود، طول، ضخامت و مقیاس است که در ادامه نتایج آن ها آورده خواهد شد.

بررسی اثر طول

در این شبیه سازی ها برای تیر با ضخامت 10 شبکه طول تیر تغییر داده می شود تا تأثیر این پارامتر بر خطای مدل های ارائه شده مشخص شود. نتایج مربوط به این شبیه سازی ها در شکل 12 آمده است. مقادیر محاسبه شده برای فرکانس های طبیعی برای تیری به طول 80 شبکه و ضخامت 10 شبکه در جدول 6 آمده است.

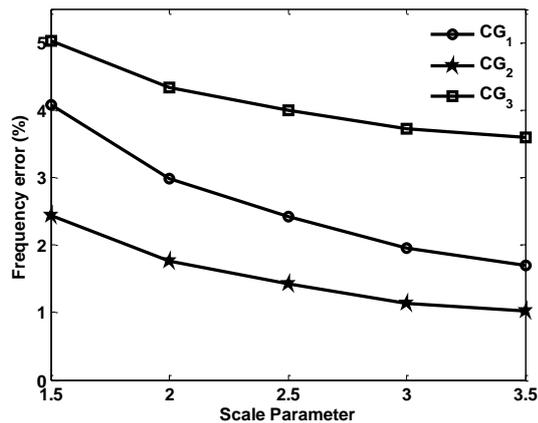


Fig. 15 The effect of scaling factor on natural frequency of longitudinal vibration of various silicon nanowires

شکل 15 تأثیر پارامتر مقیاس بر خطای فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی نانویار سیلیکونی

عرضی مورد بررسی قرار گیرد. در این قسمت با توجه به ارتعاشات انتهایی تیر فرکانس طبیعی تیر محاسبه و نتایج سه مدل ارائه‌شده با نتایج مدل تمام اتم مقایسه می‌شود تا توانایی این مدل‌ها برای تخمین ارتعاشات عرضی مورد ارزیابی قرار گیرد. برای تحقق این امر در ادامه تأثیر پارامترهای ضخامت، طول و مقیاس در شبیه‌سازی‌ها در نظر گرفته می‌شود. با توجه به این‌که نتایج مدل درشت‌دانه سوم مناسب نبود، در این قسمت شبیه‌سازی مربوط به آن انجام نگرفت.

بررسی اثر تغییر ضخامت

برای بررسی این پارامتر طول تیر برابر با 100 شبکه در نظر گرفته می‌شود و ضخامت تیر از 10 شبکه تا 20 شبکه تغییر داده می‌شود. نتایج مربوط به این قسمت در شکل 16 آمده است.

پیش‌بینی می‌شد با افزایش ضخامت و کاهش نسبت سطح به حجم خطای مدل‌ها نیز کاهش پیدا کند. براساس شکل این روند کاهشی مشاهده می‌شود. میزان خطای محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات عرضی از میزان خطای محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی بیشتر است و این نشان می‌دهد مدل‌های ارائه‌شده برای تحلیل ارتعاشات طولی کارآمدتر است. دلیل این موضوع این است که در ارتعاشات طولی ساختار بلوری فقط در یک راستا دچار تغییرات می‌شود در حالی که برای ارتعاشات عرضی یک نیروی برشی در ساختار به وجود می‌آید که خطای مدل‌های ارائه شده را افزایش می‌دهد.

تأثیر پارامتر مقیاس

برای بررسی این پارامتر نیز یک وایر با طول 40 شبکه، عرض و ضخامت 8 شبکه در نظر گرفته می‌شود و برای شبیه‌سازی‌های مختلف تمام ابعاد این وایر چند برابر می‌شود، در این حالت نیز با توجه به عدم توانایی مدل‌های ارائه‌شده برای پیش‌بینی تیر با ضخامت 8 شبکه، پارامتر مقیاس از 1.5 تا 3.5 تغییر می‌کند. نتایج مربوط به این شبیه‌سازی‌ها در شکل 17 آمده است.

همان‌طور که مشاهده می‌شود با کاهش نسبت سطح به حجم خطای محاسبه فرکانس کاهش می‌یابد، این روند کاهشی ادامه می‌یابد تا زمانی که برای هر یک از مدل‌ها به یک مقدار ثابت می‌رسد و این نشان می‌دهد که مدل‌های ارائه‌شده حتی در اندازه‌های بزرگ با اندکی خطا رفتار ارتعاشات عرضی را پیش‌بینی می‌کنند.

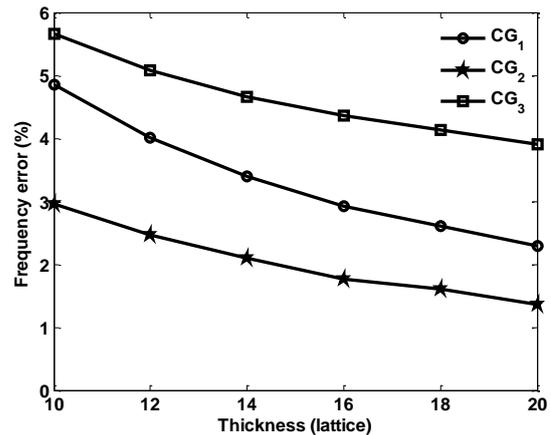


Fig. 13 The error of natural longitudinal vibration frequency with respect to length for a silicon nanowire with length which is eight times bigger than thickness

شکل 13 خطای محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی نانویار سیلیکونی با ضخامت‌های مختلف و طول 8 برابر ضخامت

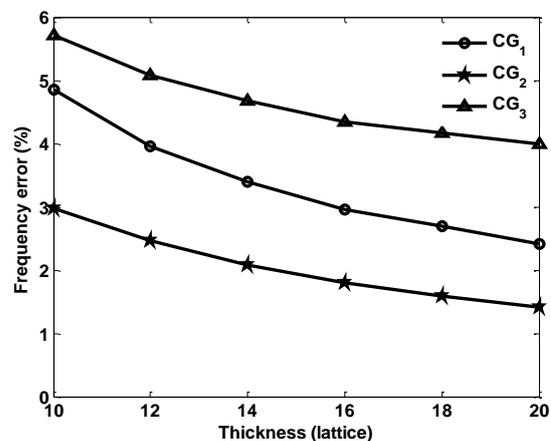


Fig. 14 The effect of thickness on natural frequency of longitudinal vibration of various silicon nanowires with 100a length

شکل 14 تأثیر پارامتر ضخامت بر خطای فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی نانویار سیلیکونی به طول 100 شبکه

مقدار خطا برای تمام روش‌های درشت‌دانه به‌جز روش سوم به سمت صفر می‌رود و این روند نزولی خطا با توجه به کاهش نسبت سطح به حجم قابل پیش‌بینی بود.

اثر پارامتر مقیاس

آخرین پارامتری که در این قسمت مورد بررسی قرار می‌گیرد پارامتر مقیاس است. برای شبیه‌سازی‌ها اندازه وایر پایه 40 در 8 در 8 در نظر گرفته می‌شود. با توجه به این‌که مدل‌های ارائه‌شده برای سطح مقطع 8 در 8 به‌خوبی نمی‌توانند سیستم را شبیه‌سازی کنند، به همین دلیل در شکل 15 نتایج به ازای پارامتر مقیاس بزرگ‌تر از 1.5 آورده شده است.

با افزایش اندازه و کاهش نسبت اتم‌های سطح به حجم، خطای فرکانس طبیعی برای مدل‌های ارائه‌شده به سمت صفر میل می‌کند.

3-3-2- بررسی ارتعاشات عرضی نانویار سیلیکونی

پس از آن‌که صحت مدل‌های ارائه‌شده برای بررسی ارتعاشات طولی بررسی شد باید میزان دقت این مدل‌ها در پیش‌بینی فرکانس طبیعی ارتعاشات

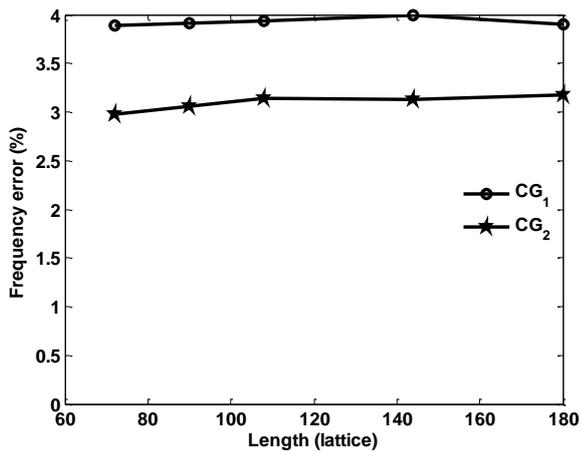


Fig. 18 Natural frequency of transverse vibration error with respect to length for a silicon nanowire with $18a$ thickness

شکل 18 خطای محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات عرضی نانویار سیلیکونی به ضخامت 18 شبکه برای طول های مختلف

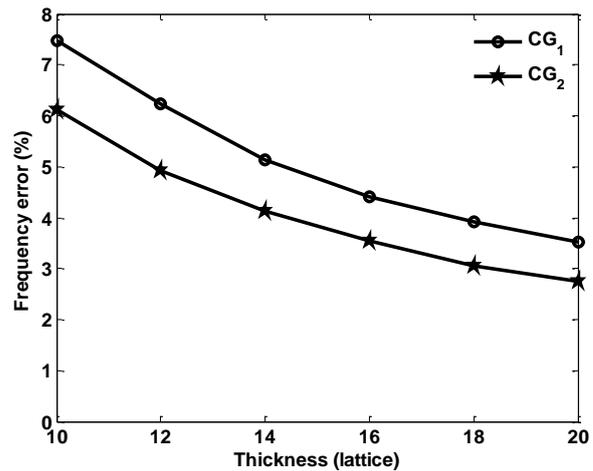


Fig. 16 The effect of thickness on natural frequency of transverse vibration of various silicon nanowires with $100a$ length

شکل 16 تأثیر پارامتر ضخامت بر خطای فرکانس طبیعی ارتعاشات عرضی نانویار سیلیکونی به طول 100 شبکه

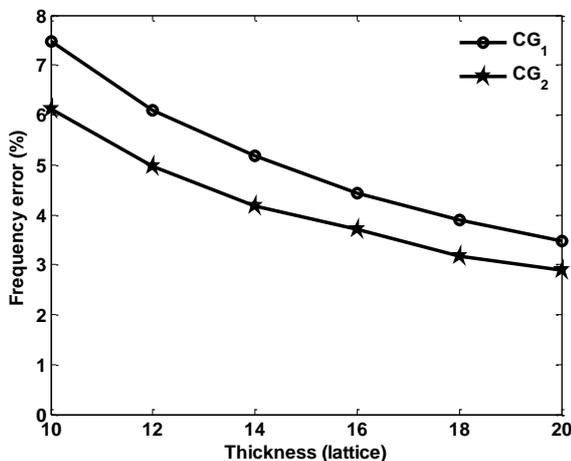


Fig. 19 Natural frequency of transverse vibration error with respect to length for a silicon nanowire with length which is ten times bigger than thickness

شکل 19 خطای محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات عرضی نانویار سیلیکونی با ضخامت های مختلف و طول برابر ضخامت

افزایش ضخامت در نانویارها سبب کاهش نسبت اتم سطح اتم حجم می شود و این سبب می شود که تیر به حالت بالک نزدیک شود و خطای مدل های ارائه شده به صفر نزدیک شود که این روند در شکل 19 به خوبی مشاهده می شود، ولی این خطا به صفر نمی رسد. همچنین مشاهده می شود که میزان خطا به یک مقدار ثابت غیر صفر میل می کند و این نشان می دهد که مدل های ارائه شده برای پیش بینی ارتعاشات عرضی به خوبی عمل نمی کنند. هرچند این مقدار خطا با توجه به افزایش سرعتی که در محاسبات ایجاد می شود قابل پذیرش است.

4- نتیجه گیری

برای تحلیل ارتعاشات سیلیکون سه مدل ارائه شد که به شرح زیر است:

1. مدل درشت دانه با استفاده از یک نوع اتم
2. مدل درشت دانه با در نظر گرفتن دو ساختار FCC جدا از هم
3. مدل درشت دانه با تقسیم هر اتم مدل تمام اتم بین دانه های مدل درشت دانه

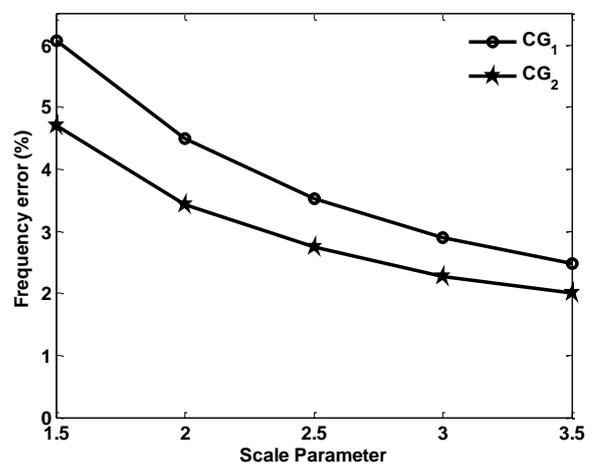


Fig. 17 The effect of scaling factor on natural frequency of transverse vibration of various silicon nanowires

شکل 17 تأثیر پارامتر مقیاس بر خطای فرکانس طبیعی ارتعاشات عرضی نانویار سیلیکونی

تأثیر پارامتر طول

برای بررسی تأثیر این پارامتر برای وایرهای با ضخامت 18 شبکه، طول تغییر داده می شود. طول وایر 4، 5، 6، 8 و 10 برابر ضخامت هر وایر در نظر گرفته می شود. نتایج برای این قسمت در شکل 18 آمده است. با توجه به این که افزایش طول در نسبت تعداد اتم سطح به اتم کل تغییری ایجاد نمی کند انتظار می رود که تغییر در این پارامتر تغییری در خطای محاسبه ایجاد نکند در شکل 8 مشاهده می شود، خطای محاسبه برای مدل اول تقریباً ثابت است، ولی در مدل دوم با افزایش طول مقدار خطا افزایش پیدا می کند.

تأثیر پارامتر ضخامت برای طول نرمال شده

در این قسمت برای ضخامت های مختلف طول متناسب با ضخامت تغییر داده می شود و تأثیر تغییر ضخامت بر خطای مدل های ارائه شده بررسی خواهد شد. ضخامت بین 10-20 شبکه و طول 10 برابر ضخامت هر نانویار تغییر داده می شود. نتایج مربوط به این قسمت در شکل 19 آمده است.

- contact by multiscale simulation, *Thin Solid Films*, Vol. 566, No. 1, pp. 45-53, 2014.
- [6] B. Firoozabadi, M. S. Saidi, M. Rismanian, B. Namirchi, Coarse grain molecular dynamics simulation of drug carrier penetration into cell membrane, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 14, No. 15, pp. 316-322, 2014. (in Persian فارسی)
- [7] H. Li, H. Zhang, X. Cheng, The effect of temperature, defect and strain rate on the mechanical property of multi-layer graphene: Coarse-grained molecular dynamics study, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Vol. 85, No. 1, pp. 97-102, 2017.
- [8] Y. Higuchi, M. Kubo, Coarse-grained molecular dynamics simulation of the void growth process in the block structure of semicrystalline polymers, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 24, No. 5, pp. 55006-55018, 2016.
- [9] S. J. Marrink, H. J. Risselada, S. Yefimov, D. P. Tieleman, A. H. de Vries, The MARTINI force field: Coarse grained model for biomolecular simulations, *Physical Chemistry B*, Vol. 111, No. 27, pp. 7812-7824, 2007.
- [10] M. Cascella, M. Dal Peraro, Challenges and perspectives in biomolecular simulations: from the atomistic picture to multiscale modeling, *CHIMIA International Journal for Chemistry*, Vol. 63, No. 1-2, pp. 14-18, 2009.
- [11] J. Pepper, R. Noring, M. Klemperer, B. Cunningham, A. Petrovich, R. Bousquet, C. Clapp, J. Brady, B. Hugh, Detection of proteins and intact microorganisms using microfabricated flexural plate silicon resonator arrays, *Sensors and Actuators B: Chemical*, Vol. 96, No. 3, pp. 565-575, 2003.
- [12] H. N. Pishkenari, E. Mohagheghian, A. Rasouli, Molecular dynamics study of the thermal expansion coefficient of silicon, *Physics Letters A*, Vol. 380, No. 48, pp. 4039-4043, 2016.
- [13] H. N. Pishkenari, B. Afsharmanesh, E. Akbari, Surface elasticity and size effect on the vibrational behavior of silicon nanoresonators, *Current Applied Physics*, Vol. 15, No. 11, pp. 1389-1396, 2015.
- [14] Q. Huang, Study on size-dependent young's modulus of a silicon nanobeam by molecular dynamics simulation *Nanomaterials*, Vol. 2013, Article ID 319302, 5 pages, 2013.
- [15] H. N. Pishkenari, B. Afsharmanesh, F. Tajaddodianfar, Continuum models calibrated with atomistic simulations for the transverse vibrations of silicon nanowires, *Engineering Science*, Vol. 100, No. 1, pp. 8-24, 2016.
- [16] W.-W. Zhang, H. Yu, S.-Y. Lei, Q.-A. Huang, Modelling of the elastic properties of crystalline silicon using lattice dynamics, *Physics D: Applied Physics*, Vol. 44, No. 33, pp. 335-401, 2011.
- [17] F. H. Stillinger, T. A. Weber, Computer simulation of local order in condensed phases of silicon, *Physical review B*, Vol. 31, No. 8, pp. 52-62, 1985.
- [18] G. Simmons, H. Wang, *Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties: A Handbook*, The MIT Press, Cambridge, 1971.
- [19] X. Zhou, R. Johnson, H. Wadley, Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers, *Physical Review B*, Vol. 69, No. 14, pp. 113-144, 2004.

در ابتدا با استفاده از مدل‌های بالا ثوابت الاستیک برای این مدل‌ها محاسبه شد که تطابق کامل در نتایج مشاهده گردید. سپس مدول یانگ با استفاده از این سه مدل ارائه و نتایج با حالت تمام اتم مقایسه شد. مدل دوم همواره خطایی کمتر از 4% را دارد که در مقایسه با مدل دیگر مقدار کمتری را به خود اختصاص داده است.

در انتها ارتعاشات عرضی و طولی سیلیکون مورد بررسی قرار گرفت که نتایج این شبیه‌سازی‌ها نشان می‌دهد که باز هم مدل دوم ارائه‌شده بهترین تطابق را با مدل تمام اتم دارد. این مدل برای ارتعاشات طولی یک تیر که ضخامت آن بزرگ‌تر از 16 شبکه باشد، با خطایی در حدود 2% فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی را محاسبه می‌کند، اما این خطا برای ارتعاشات عرضی به حدود 4% می‌رسد. با توجه به کاهش هزینه محاسباتی این میزان خطا قابل قبول است.

مدل درشت‌دانه اول نیز همواره نسبت به مدل دوم خطای بیشتری دارد، ولی در برخی مسائل که سرعت محاسبات اهمیت بیشتری دارد می‌توان از این مدل استفاده کرد.

مدل دیگری که در این قسمت ارائه شد مدلی بود که با استفاده از تقسیم جرم اتم‌های مدل تمام اتم بین دانه‌های مدل درشت‌دانه، جرم هرکدام از این دانه‌ها را مشخص می‌کرد. انتظار می‌رفت این مدل بیشترین تطابق را با مدل تمام اتم داشته باشد، اما شبیه‌سازی‌ها نشان دادند که این مدل با هزینه محاسباتی بالا بیشترین خطا را برای تحلیل ارتعاشات تیر سیلیکونی داراست؛ بنابراین استفاده از این مدل توصیه نمی‌شود.

5- مراجع

- [1] J. Phadikar, S. Pradhan, Variational formulation and finite element analysis for nonlocal elastic nanobeams and nanoplates, *Computational Materials Science*, Vol. 49, No. 3, pp. 492-499, 2010.
- [2] J. W. Kang, H. J. Hwang, K.-S. Kim, Molecular dynamics study on vibrational properties of graphene nanoribbon resonator under tensile loading, *Computational Materials Science*, Vol. 65, No. 1, pp. 216-220, 2012.
- [3] A. Ahadi, S. Melin, Size dependence of the Poisson's ratio in single-crystal fcc copper nanobeams, *Computational Materials Science*, Vol. 111, No. 1, pp. 322-327, 2016.
- [4] D. Hinze, U. Atxitia, K. Carva, P. Nieves, O. Chubykalo-Fesenko, P. M. Oppeneer, U. Nowak, Multiscale modeling of ultrafast element-specific magnetization dynamics of ferromagnetic alloys, *Physical Review B*, Vol. 92, No. 5, pp. 054412, 2015.
- [5] J. Mei, Y. Ni, The study of anisotropic behavior of nano-adhesive