



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

* تهران، صندوق پستی 1341866866، nejat@sharif.edu

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 نگاشت 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*}, Pourya 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

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

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

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:

2-3- درشت‌دانه‌سازی با استفاده از جداکردن دو ساختار FCC

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

در ابتدا تمام دانه‌های درشت‌دانه مانند هم در نظر گرفته می‌شوند و برای پیدا کردن جرم معادل دانه‌های درشت‌دانه، یک دانه در قسمت بالک ماده در نظر گرفته و سهم آن نیز محاسبه می‌شود. همان‌طور 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. اتم‌های قرمز بین دانه بالک و دانه‌های قهوه‌ای مشترک هستند؛ بنابراین نیمی از آن‌ها سهم هر دانه بالک است. اتم‌های نارنجی نیز بین دانه‌های بنفش، قهوه‌ای و دانه بالک مشترک است به‌طوری‌که هر اتم مدل تمام اتم بین 6 دانه مدل درشت‌دانه تقسیم می‌شود، همچنین یک اتم در محل قرارگیری خود دانه بالک وجود دارد؛ بنابراین می‌توان سهم هر دانه بالک را به‌صورت رابطه (1) مشخص کرد:

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

سپس جرم دانه‌های گوشه، لبه و سطح تعیین می‌گردد. برای مشخص کردن جرم معادل این دانه‌ها نیز مانند حالت پیشین عمل می‌گردد. برای دانه‌های سطح براساس شکل 8، اتم قرمز رنگ وجود دارد که از هر کدام نیمی سهم دانه سطح و نیمی دیگر سهم دانه قهوه‌ای 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 اتم‌های روی سطح بین 5 دانه درشت‌دانه تقسیم می‌شوند؛ بنابراین سهم هر دانه سطح به‌صورت رابطه (2) محاسبه می‌شود.

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

برای دانه‌های لبه نیز می‌توان از شکل 2 استفاده کرد.

در شکل 5، 3 اتم قرمز وجود دارد که مانند قبل بین دانه لبه و دانه قهوه‌ای مجاور با اتم مدل تمام اتم تقسیم می‌شود، همچنین 4 اتم نارنجی

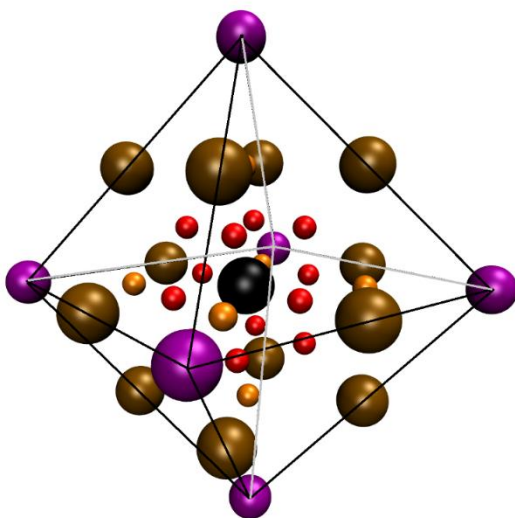


Fig. 1 Bulk bead and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

شکل 1 دانه بالک و دانه‌های درشت‌دانه و تمام اتم مجاور آن

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

ادامه مقاله بدین صورت خواهد بود. در بخش 2 ابتدا روش درشت‌دانه معرفی می‌شود. در بخش 3 با استفاده از شبیه‌سازی‌های حالت بالک ماده، صحت مدل ارائه شده بررسی می‌شود. همچنین با استفاده از شبیه‌سازی‌های مختلف استاتیکی و دینامیکی میزان دقت مدل ارائه‌شده برای پیش‌بینی رفتار اندازه‌های کوچک مورد بررسی قرار می‌گیرد. در انتها در بخش 5 نتیجه‌گیری آورده خواهد شد.

2- روش

ابتدا باید ساختار درشت‌دانه ایجاد و سپس با توجه به ساختار جدید پارامترهای پتانسیلی تعیین شود. اتم‌های سیلیکون براساس ساختار الماسی در کنار هم قرار می‌گیرند و پتانسیل استفاده‌شده برای این اتم نیز پتانسیل استیلینگر-ویر¹ [17] است.

2-1- تعیین ساختار مناسب برای مدل درشت‌دانه

ابتدا باید ساختار مناسب برای چیدن اتم‌ها را پیدا کرد. برای این منظور به این صورت عمل می‌شود که اتم‌های درشت‌دانه با همان ساختار الماسی و با ثابت شبکه دو برابر ثابت شبکه سیلیکون چیده می‌شوند. مرحله بعد تعیین نگاشت جرم بین حالت تمام اتم و درشت‌دانه است برای این منظور سه روش ارائه شده که در ادامه به آن‌ها پرداخته خواهد شد.

2-2- درشت‌دانه‌سازی 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 این‌که در این حالت تعداد اتم‌ها به میزان 1/8 کاهش می‌یابد و چگالی ساختار باید ثابت بماند، در نتیجه جرم دانه‌ها در این حالت 8 برابر اتم‌های سیلیکون در نظر گرفته می‌شود.

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 سبز رنگ) هر کدام بین دو اتم تقسیم می شوند. علاوه بر این هشت اتم، شش اتم (اتم های آبی) وجود دارند که هر کدام بین سه دانه درشت دانه به صورت رابطه (6) تقسیم می شوند.

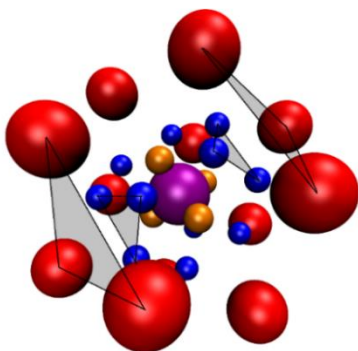


Fig. 5 Bulk bead in the second FCC structure and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

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

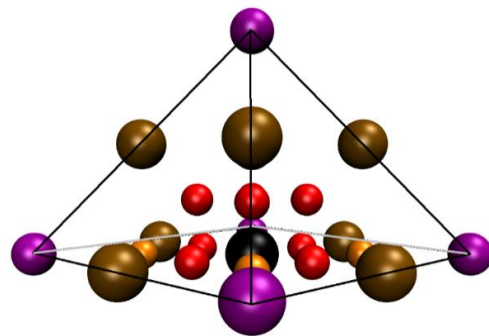


Fig. 2 Surface bead and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

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

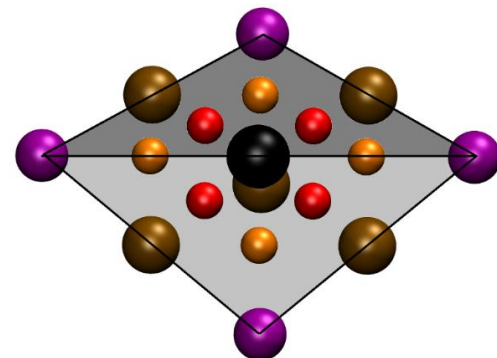


Fig. 3 Edge bead and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

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 سطح ها 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 اتم در 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.

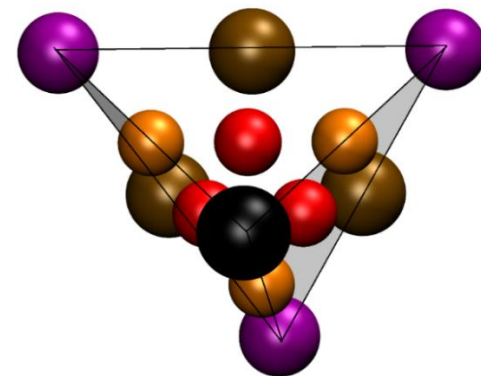


Fig. 4 Corner bead and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

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

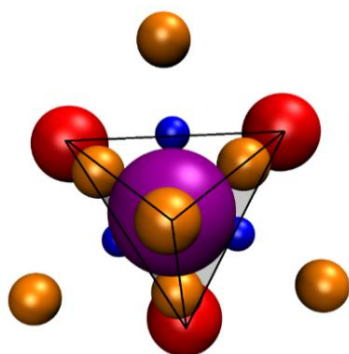


Fig. 8 Corner bead in the second FCC structure and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

شکل 8 دانه گوشه در ساختار FCC دوم و دانه های درشت دانه و تمام اتم مجاور آن

دارند و جرم همه آن ها 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 دانه های گوشه، لبه و سطح به ترتیب با دانه هایی به جرم 3.25، 4.4 و 5.96667 برابر جرم یک اتم سیلیکون جایگزین گردند.

2-4- درشت دانه سازی با استفاده از فاصله بین اتم ها

در این قسمت روشی دیگر برای نگاشت جرمی دانه های درشت دانه ارائه خواهد شد. الگوریتم این روش به این صورت است که هر اتم مدل تمام اتم در نظر گرفته می شود و دانه های درشت دانه که در فاصله کمتر از یک شبکه با آن قرار دارند مشخص می شوند و این اتم با توجه به فاصله بین دانه های درشت دانه تقسیم می شود و این روند برای تمام اتم ها انجام می پذیرد تا سهم هر دانه درشت دانه در مدل جدید مشخص شود. نتایج پیاده سازی 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.

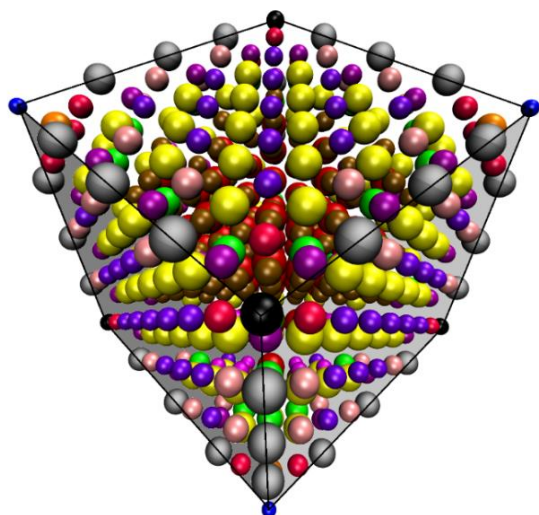


Fig. 9 Mass disturbance of third Coarse-Grained model for silicon cubic with 8a

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

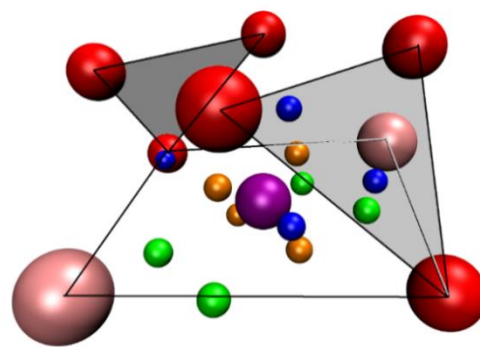


Fig. 6 Surface bead in the second FCC structure and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

شکل 6 دانه سطح در ساختار FCC دوم و دانه های درشت دانه و تمام اتم مجاور آن

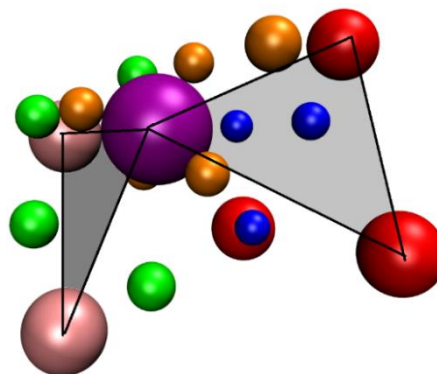


Fig. 7 Edge bead in the second FCC structure and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

شکل 7 اتم لبه در ساختار FCC دوم و اتم های درشت دانه و تمام اتم مجاور آن

$$M_{\text{surface2}} = 6 \times \frac{1}{3} + 4 \times 1 + 4 \times \frac{1}{2} = 8 \quad (6)$$

حالت بعدی (شکل 7) که اتم درشت دانه در آن قرار می گیرد این است که اتم در لبه قرار داشته باشد.

برای اتمی که در لبه قرار داشته باشد مانند حالات قبل 4 اتم (اتم های نارنجی) کاملاً متعلق به دانه درشت دانه است. در این حالت سه تا از اتم های آبی هر کدام بین سه دانه درشت دانه تقسیم می شوند، 4 اتم سبزرنگ هر کدام بین دو دانه به طور مساوی قسمت می شوند و یک اتم نارنجی رنگ دیگر نیز در این قسمت وجود دارد که روی لبه قرار دارد و به طور کامل متعلق به دانه درشت دانه در لبه است. برای دانه درشت دانه در لبه جرم معادل نیز به صورت رابطه (7) محاسبه می شود.

$$M_{\text{edge2}} = 3 \times \frac{1}{3} + 4 \times \frac{1}{2} + 5 \times 1 = 8 \quad (7)$$

آخرین حالت که می توان برای دانه درشت دانه در نظر گرفت این است که این دانه در گوشه قرار گیرد. شکل 8 یک اتم در گوشه و اتم های درشت دانه و تمام اتم مجاور آن را نشان می دهد.

در این حالت سه اتم آبی هر کدام بین سه اتم تقسیم می شوند و بقیه اتم ها به طور کامل سهم دانه درشت دانه در گوشه می شوند. سهم جرمی اتم های گوشه نیز به صورت رابطه (8) محاسبه می شود.

$$M_{\text{corner2}} = 3 \times \frac{1}{3} + 7 \times 1 = 8 \quad (8)$$

در این حالت تمام دانه های درشت دانه سهم مساوی از اتم های تمام اتم

جدول 1 انواع اتم‌های مدل درشت‌دانه سیلیکون

Table 1 Different bead in the third Coarse-Grained model

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 کم‌رنگ
8	5.2220	بنفش
9	5.5333	قهوه‌ای
10	3.8814	مشکی
11	7.2599	سورمه‌ای
12	10.5761	صورتی
13	10.4667	جیگری

2-5- تعیین پارامترهای پتانسیل استلینگر-ویر

در این قسمت پارامترهای پتانسیل استلینگر-ویر طوری تعیین می‌شود که بتوان برای مدل درشت‌دانه استفاده کرد. ابتدا این پارامترها برای مدل با یک نوع اتم ایجاد می‌شوند، سپس برای دو مدل دیگر تعمیم داده می‌شوند. با توجه به این‌که هر اتم درشت‌دانه به‌جای هشت اتم مدل تمام اتم قرار می‌گیرد و ثابت شبکه در این حالت دو برابر شده است می‌توان 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 استلینگر-ویر برای این‌که رابطه (9) برقرار باشد، باید در پارامترهای پتانسیل تغییراتی به صورت رابطه (10) ایجاد کرد.

$$\begin{aligned} \varphi_2 \left(\frac{r_{ij}}{2} \right) &= A_{ij} \varepsilon_{ij} \left[B_{ij} \left(\frac{2\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{p_{ij}} - \left(\frac{2\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{q_{ij}} \right] \\ &\quad \times \exp \left(\frac{2\sigma_{ij}}{r_{ij} - a_{ij}(2\sigma_{ij})} \right) \\ \varphi_3 \left(\frac{r_{ij}}{2}, \frac{r_{ik}}{2}, \theta_{ijk} \right) &= \lambda_{ijk} \varepsilon_{ijk} [\cos \theta_{ijk} - \theta_{0ijk}]^2 \\ &\quad \times \exp \left(\frac{\gamma_{ij}(2\sigma_{ij})}{r_{ij} - a_{ij}(2\sigma_{ij})} \right) \\ &\quad \times \exp \left(\frac{\gamma_{ik}(2\sigma_{ik})}{r_{ik} - a_{ik}(2\sigma_{ik})} \right) \end{aligned} \quad (10)$$

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

با تغییر پارامتر σ می‌توان تأثیر تغییر ثابت شبکه را از بین برد و برای این‌که انرژی نیز هشت برابر شود نیز می‌توان پارامتر ε را تغییر داد؛ بنابراین پارامترهای پتانسیل به‌صورت رابطه (11) تغییر می‌کنند.

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

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

جدول 2 پارامترهای مورد استفاده در پتانسیل استلینگر ویر برای سیلیکون

Table 2 Parameters used in Stillinger-weber potential for silicon

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

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

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

در این قسمت نیز ابتدا به محاسبه ثوابت الاستیک پرداخته می‌شود و پس از آن مدول یانگ در دو حالت کرنش عرضی و طولی محاسبه می‌شود و درنهایت به بررسی رفتار دینامیکی فرکانس طبیعی تیر سیلیکونی پرداخته خواهد شد و تأثیر پارامترهای مختلف بر خطای مدل‌های ارائه‌شده بررسی می‌گردد.

3- شبیه‌سازی

در این قسمت شبیه‌سازی مختلف استاتیکی و دینامیکی انجام می‌پذیرد تا میزان دقت مدل‌های ارائه شده بررسی شود. در ابتدا ثوابت الاستیکی محاسبه می‌شود، سپس مدول یانگ به‌عنوان یک پارامتر استاتیک بررسی خواهد شد. در انتها شبیه‌سازی‌ها دینامیکی برای اعتبارسنجی مدل‌ها ارائه خواهد شد که این شبیه‌سازی‌ها شامل محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی و عرضی تیرها با اندازه‌های مختلف است.

3-1- تعیین ثوابت الاستیک با استفاده از شبیه‌سازی حالت بالک

نخستین گام برای بررسی صحت مدل ارائه‌شده 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 می‌شود. نتایج محاسبه پارامترهای الاستیک برای حالت بالک ماده با استفاده از آزمایش قابل محاسبه است [18]. برای شبیه‌سازی باید یک فایل پتانسیل مناسب انتخاب کرد. در این مقاله از فایل ارائه‌شده 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 به‌دست‌آمده است. با تقسیم این تغییر تنش بر کرنش اعمالی مقادیر ثوابت به‌دست‌آمده است. از آن‌جا که سیستم متقارن در نظر گرفته می‌شود، 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 می‌شوند.

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

ابتدا به بررسی تأثیر این پارامتر بر تغییرات طول پرداخته می‌شود. برای این منظور ضخامت نانوایر 10 شبکه در نظر گرفته می‌شود و طول این نانوایر تغییر داده می‌شود تا میزان خطای مدل‌های ارائه‌شده برحسب طول مشخص شود. نتایج این قسمت در شکل 10 آمده است. نمادهای CG1، CG2 و CG3 به ترتیب بیانگر مدل درشت‌دانه اول، دوم و سوم است.

همان‌طور که در نمودار مشاهده می‌شود خطای محاسبه مدول یانگ با افزایش طول تغییر چندانی نمی‌کند 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 می‌شود. نتایج این شبیه‌سازی‌ها در شکل 11 آمده است.

در شکل 11 مشاهده می‌شود که افزایش ضخامت باعث می‌شود که دقت مدل‌ها افزایش پیدا کند، دلیل این رفتار کاهش نسبت اتم‌های حجم به سطح با افزایش ضخامت است و نشان می‌دهد که این مدل‌ها برای اندازه‌های بزرگ‌تر از دقت بالاتری برخوردار است.

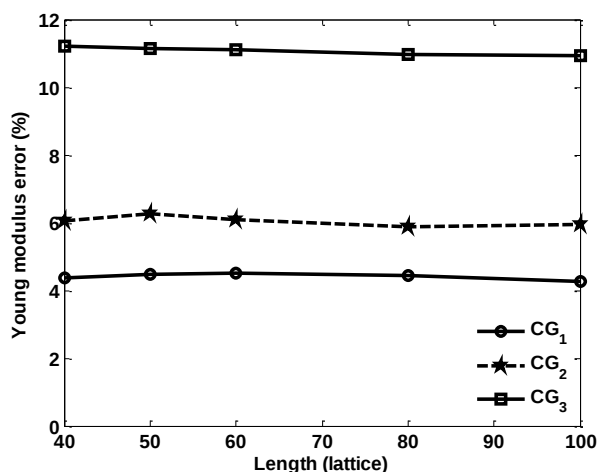


Fig. 10 Young modulus error with respect to length for a silicon nanowire with 10a thickness

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

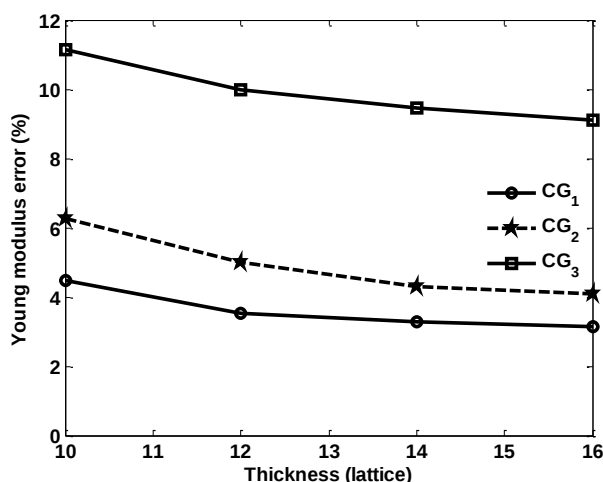


Fig. 11 Young modulus error with respect to thickness for a silicon nanowire with length which is five times bigger than thickness

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

می‌شوند. 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 اندازه‌های مختلف سلول مرکزی ثوابت الاستیک محاسبه می‌شود و برای مدل درشت‌دانه و تمام اتم با هم به صورت جدول‌های 2-4 مقایسه می‌شوند.

مدل درشت‌دانه به‌خوبی می‌تواند رفتار حالت بالک ماده را مانند مدل تمام اتم توصیف کند.

3-2- شبیه‌سازی برای محاسبه مدول یانگ

مدول یانگ را می‌توان با استفاده از انرژی پتانسیل برحسب کرنش نیز محاسبه کرد. برای این منظور پنج کرنش مختلف به تیر داده می‌شود و تغییرات انرژی پتانسیل بر واحد حجم برای این کرنش‌ها محاسبه می‌گردد. انتظار می‌رود 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 نرم‌افزار متلب این تابع بر داده‌های موجود در منحنی منطبق می‌گردد تا مقدار مدول یانگ محاسبه شود. در این قسمت با استفاده از مدل‌های ارائه‌شده به محاسبه مدول یانگ پرداخته می‌شود تا میزان دقت این مدل‌ها در پیش‌بینی رفتار استاتیکی نانوایر سیلیکونی مورد بررسی قرار گیرد؛ سپس با تطبیق دادن یک منحنی سهموی بر این داده‌ها مدول یانگ به‌دست آورده می‌شود.

جدول 3 مقادیر C_{11} (گیگاپاسکال) برای دو مدل درشت‌دانه و تمام اتم برای اندازه سلول‌های 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 درشت‌دانه	151.4	151.4	151.4
خطای نسبی (%)	0	0	0

جدول 4 مقادیر C_{12} (گیگاپاسکال) برای دو مدل درشت‌دانه و تمام اتم برای اندازه سلول‌های 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 درشت‌دانه	76.4	76.4	76.4
خطای نسبی (%)	0	0	0

جدول 5 مقادیر C_{44} (گیگاپاسکال) برای دو مدل درشت‌دانه و تمام اتم برای اندازه سلول‌های 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 درشت‌دانه	56.4	56.4	56.4
خطای نسبی (%)	0	0	0

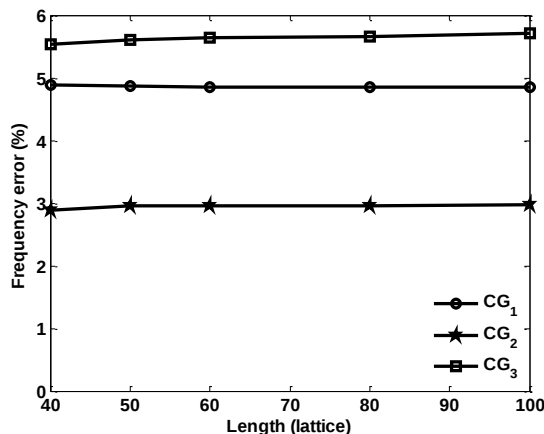


Fig. 12 Natural frequency of longitudinal vibration error with respect to length for a silicon nanowire with $10a$ thickness

شکل 12 خطای محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی نانواپیر سیلیکونی به ضخامت 10 شبکه برای طول‌های مختلف

جدول 6 مقادیر فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی برای سه مدل درشت‌دانه 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	درشت‌دانه اول	درشت‌دانه دوم	درشت‌دانه سوم
فرکانس طبیعی (گیگاهرتز)	233.1	221.8	226.2	219.9

همان‌طور که در شکل 12 مشاهده می‌شود پارامتر طول تأثیری چندانی بر خطای فرکانس طبیعی محاسبه شده از طریق مدل‌های ارائه‌شده ندارد. نسبت اتم‌های سطحی به اتم‌های کل با افزایش طول تغییر نمی‌کند. در بین سه مدل ارائه‌شده مدل دوم نتایج بهتری را پیش‌بینی می‌کند.

تأثیر پارامتر ضخامت برای طول نرمال‌شده

در این قسمت طول هر نانواپیر متناسب با ضخامت تغییر می‌کند و برای ضخامت‌های مختلف این شبیه‌سازی‌ها انجام و فرکانس طبیعی سیستم در این حالات محاسبه می‌شود و خطای محاسبه فرکانس طبیعی نسبت به مدل تمام اتم برای 3 مدل درشت‌دانه به‌دست آورده می‌شود. نتایج مربوط به طول‌های 8 برابر ضخامت در شکل 13 آورده شده است.

با افزایش ضخامت میزان خطای فرکانس طولی کاهش پیدا می‌کند. این رفتار با توجه به کاهش نسبت اتم‌های سطح به حجم قابل پیش‌بینی بود. با افزایش ضخامت تعداد اتم‌هایی که در داخل ماده و به دور از سطح قرار دارند افزایش پیدا می‌کند، در حالی که تفاوت تعداد اتم‌های سطح با نسبت کمتری اتفاق می‌افتد و هنگامی که تعداد اتم‌های سطح کاهش یابد تیر به حالت بالک نزدیک‌تر می‌شود و مدل‌های ارائه شده واقعی‌تر می‌گردند، زیرا برای ارائه این مدل‌ها فرض می‌شود که سیستم ساختار متناوب دارد. در این حالت نیز مدل درشت‌دانه دوم بهتر می‌تواند فرکانس طولی سیستم را پیش‌بینی کند.

اثر پارامتر ضخامت

در این قسمت به بررسی تأثیر پارامتر ضخامت بر نانواپیری به طول 100 شبکه پرداخته می‌شود. برای این شبیه‌سازی‌ها ضخامت واپر از 8 شبکه تا 20 شبکه تغییر می‌کند. خطای محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی برای سه روش درشت‌دانه در شکل 14 آمده است.

3-3- شبیه‌سازی دینامیکی نانواپیر سیلیکونی

در این قسمت ارتعاشات تیر برای مدل‌هایی که ارائه شده است بررسی و با استفاده از این شبیه‌سازی‌ها فرکانس طبیعی تیر در حالات مختلف بررسی می‌شود. در این شبیه‌سازی‌ها دو فرکانس طولی و عرضی تیر به‌صورت جداگانه محاسبه می‌شوند. شبیه‌سازی این قسمت نیز با استفاده از نرم‌افزار LAMMPS است. مراحل این شبیه‌سازی‌ها به شرح زیر است.

- 1) پس از مینیمم‌کردن سیستم، دو شبکه انتهایی تیر (در حالت درشت‌دانه یک شبکه) ثابت می‌شود و بقیه تیر در دمای 0.001 کلوین ریلکس می‌شود.
- 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 می‌شود تا انتهای تیر به‌اندازه یک درصد طول تیر جابه‌جا شود.
- 3) در مرحله بعد انتهای تیر ثابت می‌شود و بقیه تیر در دمای 0.001 کلوین ریلکس می‌شود تا سیستم به حالت تعادل برسد و تیر انحنای لازم را پیدا کند.
- 4) در مرحله آخر نیز انتهای تیر آزاد می‌شود و کل تیر با هنگرد nve حل می‌شود و ارتعاشات انتهایی تیر برای به دست آوردن فرکانس طبیعی موردبررسی قرار می‌گیرد.

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

در این مرحله برای تیری از جنس سیلیکون شبیه‌سازی‌ها انجام خواهد شد و فرکانس طولی و عرضی برای آن محاسبه خواهد شد. برای این شبیه‌سازی‌ها می‌توان از فایل‌های LAMMPS مربوط به شبیه‌سازی نانواپیر 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 شبیه‌سازی‌ها 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 نانواپیر سیلیکونی

در این بخش ارتعاشات طولی نانواپیرهای سیلیکونی با استفاده از سه روش ارائه‌شده و روش تمام اتم مورد بررسی قرار می‌گیرد. برای این که صحت مدل‌های ارائه‌شده بررسی شود برای نانواپیرهای با اندازه‌های مختلف شبیه‌سازی‌ها انجام می‌شود و خطای محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی در سه روش درشت‌دانه ارائه‌شده با هم مقایسه می‌شوند.

در شبیه‌سازی‌های این قسمت تأثیر پارامترهای مختلف موردبررسی قرار می‌گیرد. پارامترهایی که با توجه به آن‌ها اندازه واپرها مشخص می‌شود، طول، ضخامت و مقیاس است که در ادامه نتایج آن‌ها آورده خواهد شد.

بررسی اثر طول

در این شبیه‌سازی‌ها برای تیر با ضخامت 10 شبکه طول تیر تغییر داده می‌شود تا تأثیر این پارامتر بر خطای مدل‌های ارائه‌شده مشخص شود. نتایج مربوط به این شبیه‌سازی‌ها در شکل 12 آمده است. مقادیر محاسبه شده برای فرکانس‌های طبیعی برای تیری به طول 80 شبکه و ضخامت 10 شبکه در جدول 6 آمده است.

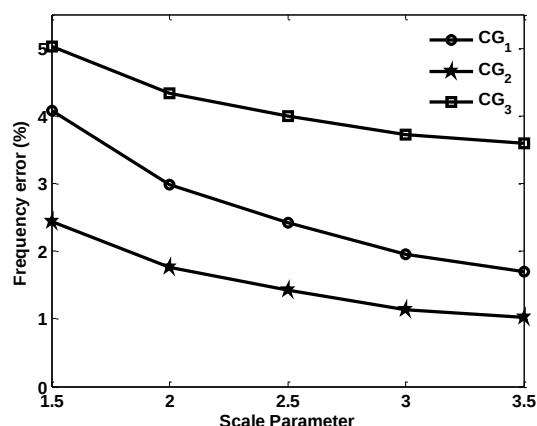


Fig. 15 The effect of scaling factor on natural frequency of longitudinal vibration of various silicon nanowires

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

عرضی مورد بررسی قرار گیرد. در این قسمت با توجه به ارتعاشات انتهای تیر فرکانس طبیعی تیر محاسبه و نتایج سه مدل ارائه شده با نتایج مدل تمام اتم مقایسه می شود تا توانایی این مدل ها برای تخمین ارتعاشات عرضی مورد ارزیابی قرار گیرد. برای تحقق این امر در ادامه تأثیر پارامترهای ضخامت، طول و مقیاس در شبیه سازی ها در نظر گرفته می شود. با توجه به این که نتایج مدل درشت دانه سوم مناسب نبود، در این قسمت شبیه سازی مربوط به آن انجام نگرفت.

بررسی اثر تغییر ضخامت

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

پیش بینی می شد با افزایش ضخامت و کاهش نسبت سطح به حجم خطای مدل ها نیز کاهش پیدا کند. براساس شکل این روند کاهشی مشاهده می شود. میزان خطای محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات عرضی از میزان خطای محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی بیشتر است و این نشان می دهد مدل های ارائه شده برای تحلیل ارتعاشات طولی کارآمدتر است. دلیل این موضوع این است که در ارتعاشات طولی ساختار بلوری فقط در یک راستا دچار تغییرات می شود در حالی که برای ارتعاشات عرضی یک نیروی برشی در ساختار به وجود می آید که خطای مدل های ارائه شده را افزایش می دهد.

تأثیر پارامتر مقیاس

برای بررسی این پارامتر نیز یک وایر با طول 40 شبکه، عرض و ضخامت 8 شبکه در نظر گرفته می شود و برای شبیه سازی های مختلف تمام ابعاد این وایر چند برابر می شود، در این حالت نیز با توجه به عدم توانایی مدل های ارائه شده برای پیش بینی تیر با ضخامت 8 شبکه، پارامتر مقیاس از 1.5 تا 3.5 تغییر می کند. نتایج مربوط به این شبیه سازی ها در شکل 17 آمده است.

همان طور که مشاهده می شود با کاهش نسبت سطح به حجم خطای محاسبه فرکانس کاهش می یابد، این روند کاهشی ادامه می یابد تا زمانی که برای هر یک از مدل ها به یک مقدار ثابت می رسد و این نشان می دهد که مدل های ارائه شده حتی در اندازه های بزرگ با اندکی خطا رفتار ارتعاشات عرضی را پیش بینی می کنند.

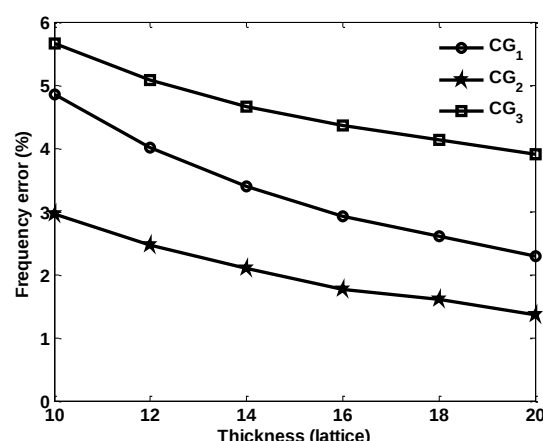


Fig. 13 The error of natural longitudinal vibration frequency with respect to length for a silicon nanowire with length which is eight times bigger than thickness

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

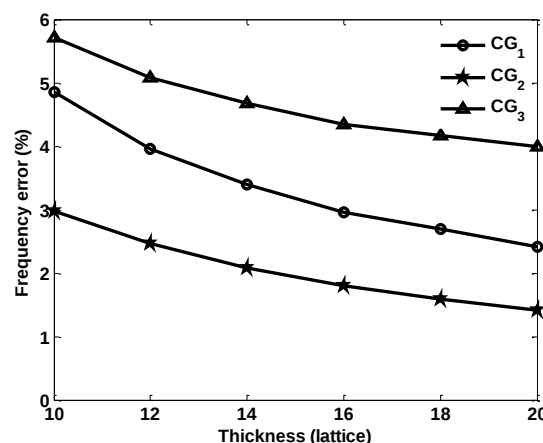


Fig. 14 The effect of thickness on natural frequency of longitudinal vibration of various silicon nanowires with 100a length

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

مقدار خطا برای تمام روش های درشت دانه به جز روش سوم به سمت صفر می رود و این روند نزولی خطا با توجه به کاهش اتم های سطح به حجم قابل پیش بینی بود.

اثر پارامتر مقیاس

آخرین پارامتری که در این قسمت مورد بررسی قرار می گیرد پارامتر مقیاس است. برای شبیه سازی ها اندازه وایر پایه 40 در 8 در 8 در نظر گرفته می شود. با توجه به این که مدل های ارائه شده برای سطح مقطع 8 در 8 به خوبی نمی توانند سیستم را شبیه سازی کنند، به همین دلیل در شکل 15 نتایج به ازای پارامتر مقیاس بزرگ تر از 1.5 آورده شده است.

با افزایش اندازه و کاهش نسبت اتم های سطح به حجم، خطای فرکانس طبیعی برای مدل های ارائه شده به سمت صفر میل می کند.

3-3-2- بررسی ارتعاشات عرضی نانواپر سیلیکونی

پس از آن که صحت مدل های ارائه شده برای بررسی ارتعاشات طولی بررسی شد باید میزان دقت این مدل ها در پیش بینی فرکانس طبیعی ارتعاشات

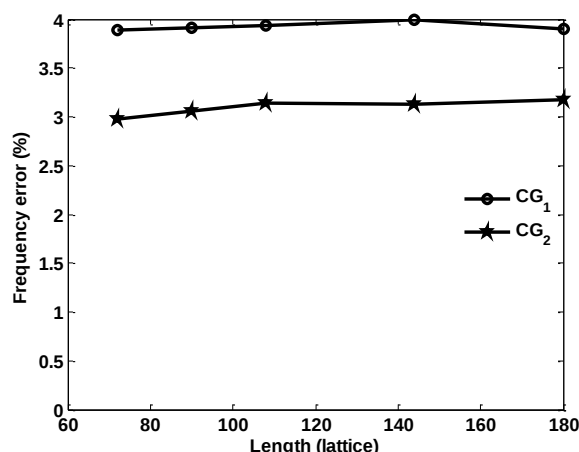


Fig. 18 Natural frequency of transverse vibration error with respect to length for a silicon nanowire with $18a$ thickness

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

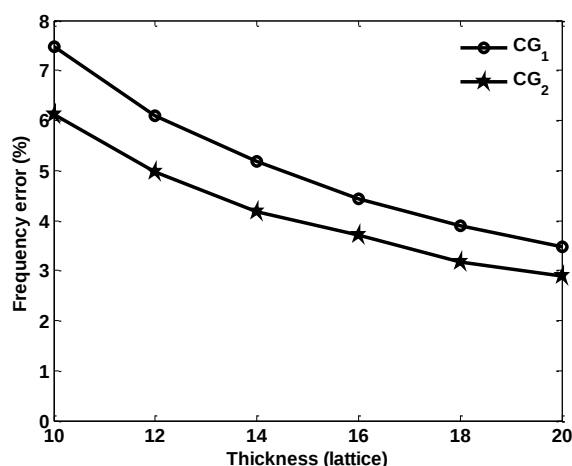


Fig. 19 Natural frequency of transverse vibration error with respect to length for a silicon nanowire with length which is ten times bigger than thickness

شکل 19 خطای محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات عرضی نانویار سیلیکونی با ضخامت های مختلف و طول 10 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

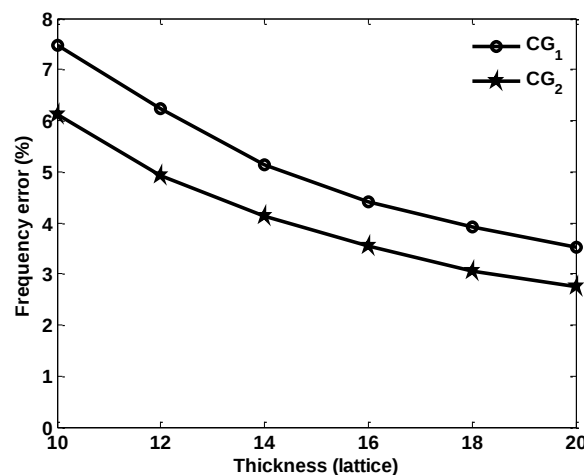


Fig. 16 The effect of thickness on natural frequency of transverse vibration of various silicon nanowires with $100a$ length

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

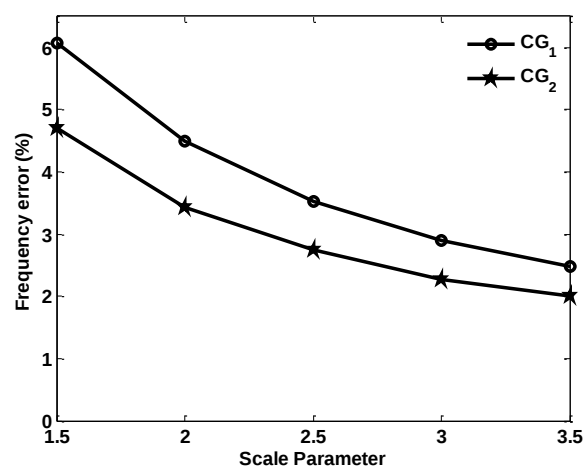


Fig. 17 The effect of scaling factor on natural frequency of transverse vibration of various silicon nanowires

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. Klemperner, 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 مدل 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 تطبیق 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. Hinzke, 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