



## ارائه چند روش درشت‌دانه دینامیک مولکولی جهت مدل‌سازی نانوساختارهای سیلیکونی

حسین نجات‌پیش‌کناری<sup>1\*</sup>، پوریا دل‌افروز<sup>2</sup>

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

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

\*nejat@sharif.edu، 1341866866 صندوق پستی

### 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<sup>1\*</sup>, Porya Delafrouz<sup>1</sup>

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 شکل<sup>1</sup> [9] و براساس مانده<sup>2</sup> [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

<sup>1</sup> Shape-based

<sup>2</sup> 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:

www.scribd.com

### 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

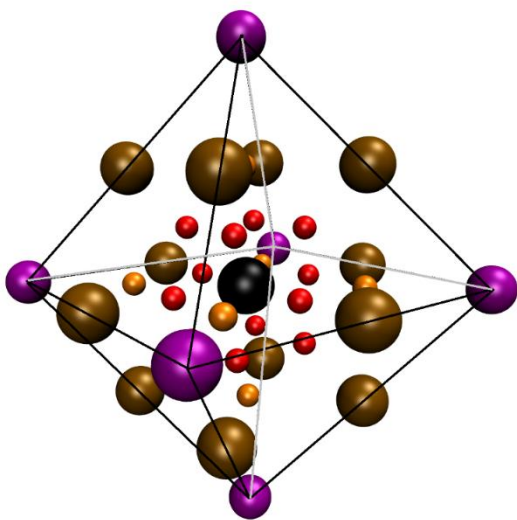


Fig. 1 Bulk bead and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

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 ثابت 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 استیلنر-و بر<sup>1</sup> [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 پر<sup>2</sup> (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.

<sup>1</sup> Stillinger-Weber potential

<sup>2</sup> 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.

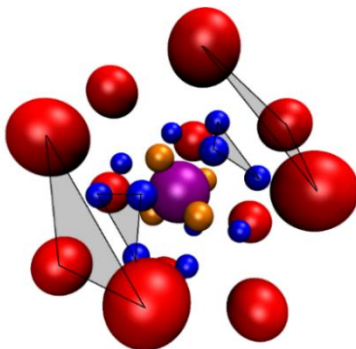
شکل 5 مربوط به یک دانه درشت دانه در حالت بالک است. در این شکل همچنین اتم های مدل تمام اتم و دانه های مدل درشت دانه که با اتم مورد نظر سهم مشترک از اتم های درشت دانه را دارند دیده می شود.

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.

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

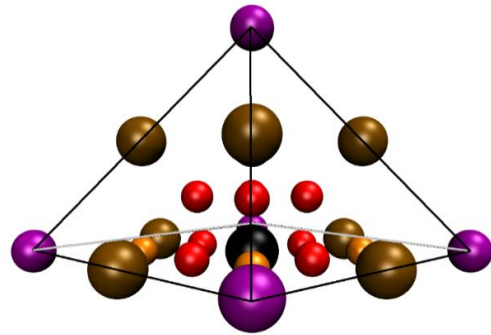
در این قسمت یک دانه سطح را در نظر گرفته می شود. در شکل 6 یک دانه سطح، دانه های درشت دانه مجاور آن و اتم های ساختار تمام اتم مشاهده می شوند.

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 دارند که هر کدام بین سه دانه درشت دانه به صورت رابطه (6) تقسیم می شوند.



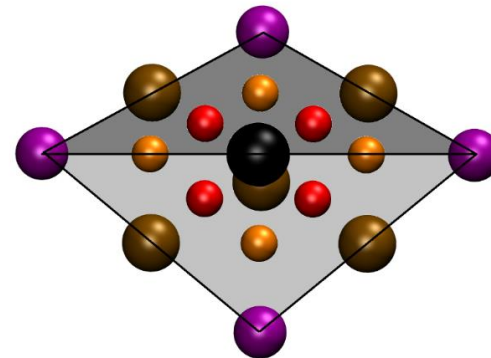
**Fig. 5** Bulk bead in the second FCC structure and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

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

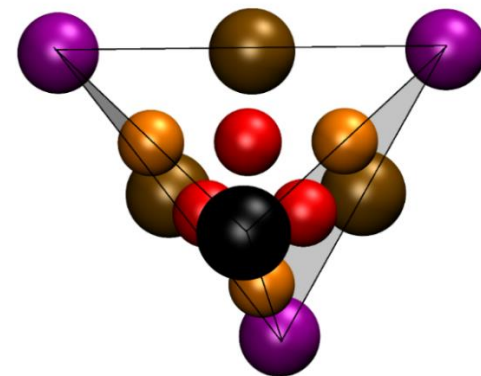
شکل 3 دانه لبه و دانه های درشت دانه و تمام اتم مجاور آن

وجود دارد که دو تا روی لبه و دو تا روی 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.

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

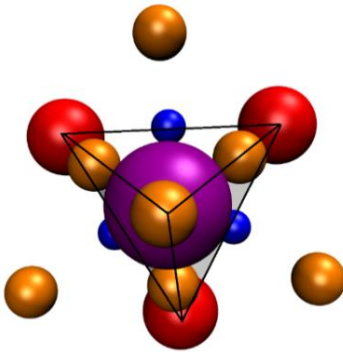
در آخر نیز برای یک اتم در گوشه جرم معادل محاسبه می شود.

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



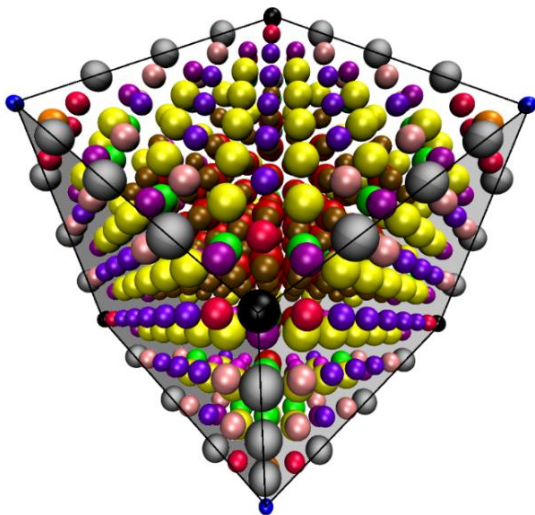
**Fig. 8** Corner bead in the second FCC structure and nearby Coarse-Grained beads and All-Atom atoms

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.

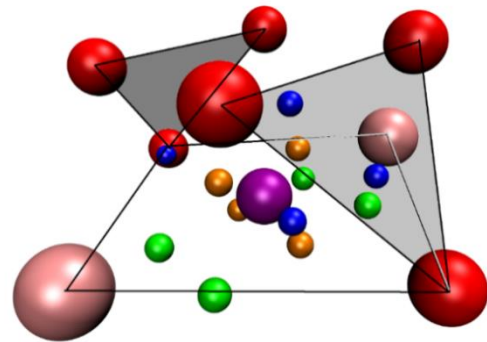
#### 2-4- درشت دانه سازی با استفاده از فاصله بین اتم ها

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.



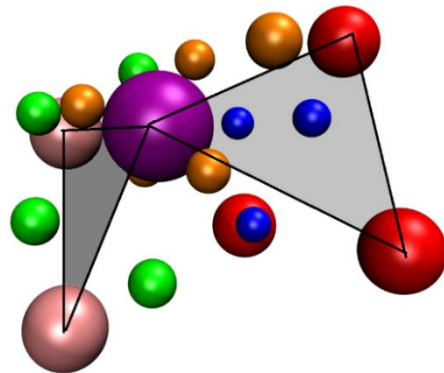
**Fig. 9** Mass disturbance of third Coarse-Grained model for silicon cubic with 8a

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

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

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.

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

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.

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

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



جدول 1 انواع اتم‌های مدل درشت دانه 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 کم رنگ
8	5.2220	بنفش
9	5.5333	قهوه‌ای
10	3.8814	مشکی
11	7.2599	سورمه‌ای
12	10.5761	صورتی
13	10.4667	جیگری

جدول 2 پارامترهای مورد استفاده در پتانسیل استیلینگر وبر برای سیلیکون

Table 2 Parameters used in Stillinger-weber potential for silicon

پارامتر	مقدار	پارامتر	مقدار
$\epsilon$	2.1683	$\cos\theta_0$	-0.3333
$\sigma$	2.0951	$A$	7.0495
$a$	1.80	$B$	0.6022
$\lambda$	21.0	$p$	4.0
$\gamma$	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 می‌توان مانند بالا عمل کرد و در این حالت نیز  $\epsilon$  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 در نهایت به بررسی رفتار دینامیکی فرکانس طبیعی تیر سیلیکونی پرداخته خواهد شد و تأثیر پارامترهای مختلف بر خطای مدل‌های ارائه شده بررسی می‌گردد.

### 3- شبیه سازی

در این قسمت شبیه سازی مختلف استاتیکی و دینامیکی انجام می‌پذیرد تا میزان دقت مدل‌های ارائه شده بررسی شود. در ابتدا ثوابت الاستیکی محاسبه می‌شود، سپس مدول یانگ به عنوان یک پارامتر استاتیک بررسی خواهد شد. در انتها شبیه سازی‌ها شامل محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی و عرضی این شبیه سازی‌ها شامل محاسبه فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی و عرضی تیرها با اندازه‌های 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 می‌شود. 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 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 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 می‌شود و با استفاده از آن ثوابت الاستیک تعیین

#### 2-5- تعیین پارامترهای پتانسیل استیلینگر-وبر

در این قسمت پارامترهای پتانسیل استیلینگر-وبر طوری تعیین می‌شود که بتوان برای مدل درشت دانه استفاده کرد. ابتدا این پارامترها برای مدل با یک نوع اتم ایجاد می‌شوند، سپس برای دو مدل دیگر تعمیم داده می‌شوند. با توجه به این که هر اتم درشت دانه به جای هشت اتم 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 استیلینگر-وبر برای این که رابطه (9) برقرار باشد، باید در پارامترهای پتانسیل تغییراتی به صورت رابطه (10) ایجاد کرد.

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

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  $\sigma$  می‌توان تأثیر تغییر ثابت شبکه را از بین برد و برای این که انرژی نیز هشت برابر شود نیز می‌توان پارامتر  $\epsilon$  را تغییر داد؛ بنابراین پارامترهای پتانسیل به صورت رابطه (11) تغییر می‌کنند.

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

در قسمت بعد پارامترهای پتانسیل برای حالتی که دو ساختار FCC جدا از هم در نظر گرفته شوند به دست آورده می‌شوند. برای این حالت تنها پارامتری که تغییر می‌کند  $\epsilon$  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  $\epsilon$  جدید میانگین هندسی دو اتم در نظر گرفته می‌شود. بدین ترتیب مقدار  $\epsilon$  برای حالات مختلف به صورت رابطه (12) درمی‌آید.

ابتدا به بررسی تأثیر این پارامتر بر تغییرات طول پرداخته می شود. برای این منظور ضخامت نانواپار 10 شبکه در نظر گرفته می شود و طول این نانواپار 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.

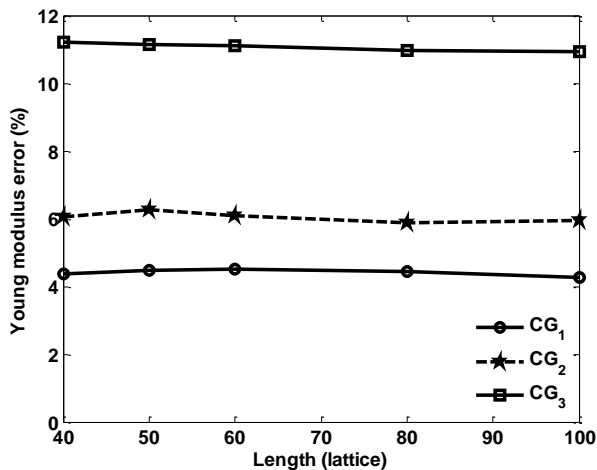


Fig. 10 Young modulus error with respect to length for a silicon nanowire with  $10a$  thickness

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

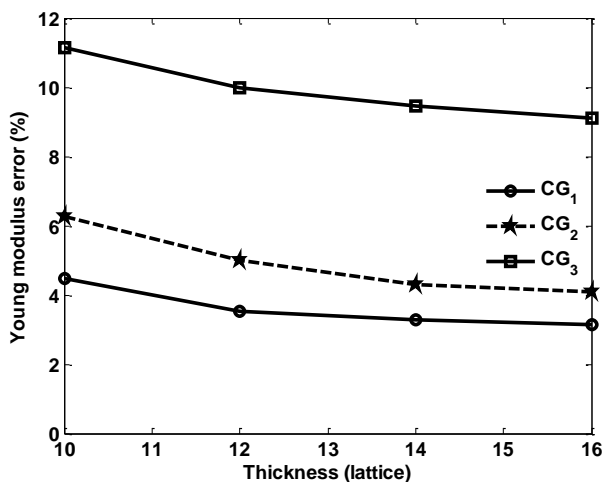


Fig. 11 Young modulus error with respect to thickness for a silicon nanowire with length which is five times bigger than thickness

شکل 11 خطای محاسبه مدول یانگ برحسب تغییرات ضخامت برای یک نانواپار 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 نانواپار 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

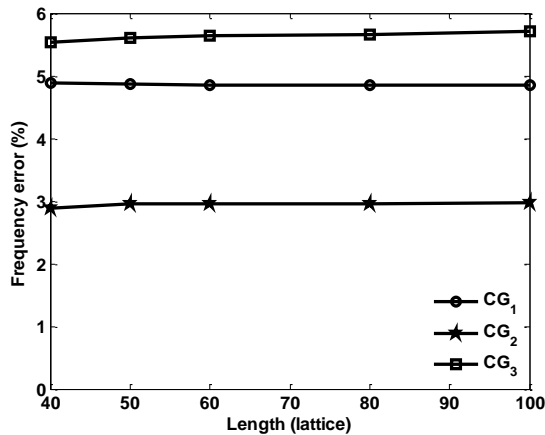


Fig. 12 Natural frequency of longitudinal vibration error with respect to length for a silicon nanowire with  $10a$  thickness

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 کلون 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 کلون 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.

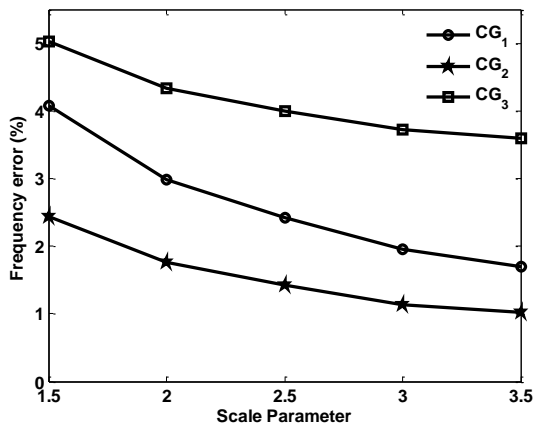


Fig. 15 The effect of scaling factor on natural frequency of longitudinal vibration of various silicon nanowires

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 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.

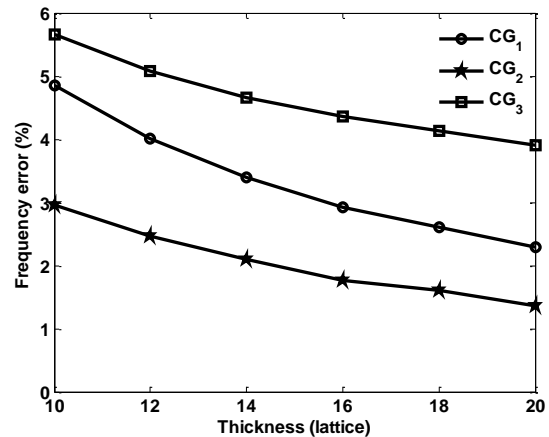


Fig. 13 The error of natural longitudinal vibration frequency with respect to length for a silicon nanowire with length which is eight times bigger than thickness

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

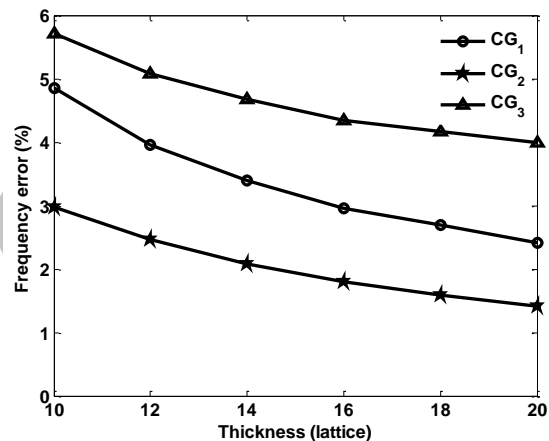


Fig. 14 The effect of thickness on natural frequency of longitudinal vibration of various silicon nanowires with 100a length

شکل 14 تأثیر پارامتر ضخامت بر خطای فرکانس طبیعی ارتعاشات طولی نانویار 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 نانویار 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



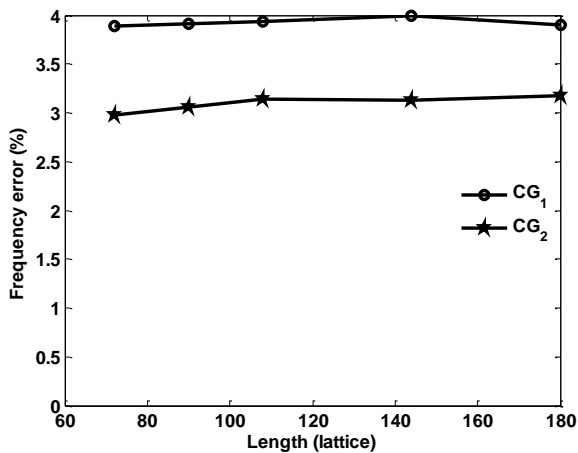


Fig. 18 Natural frequency of transverse vibration error with respect to length for a silicon nanowire with  $18a$  thickness

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

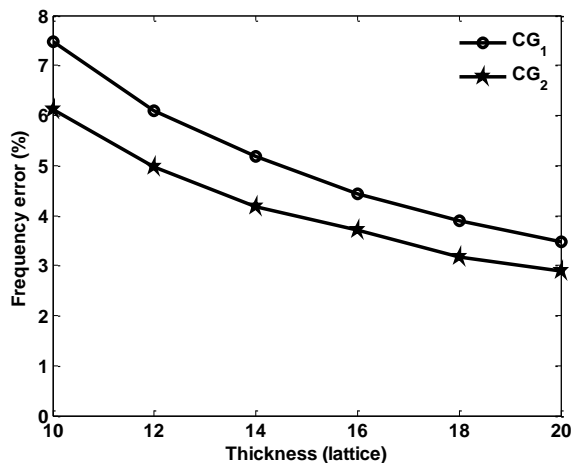


Fig. 19 Natural frequency of transverse vibration error with respect to length for a silicon nanowire with length which is ten times bigger than thickness

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

افزایش ضخامت در نانوایرها 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

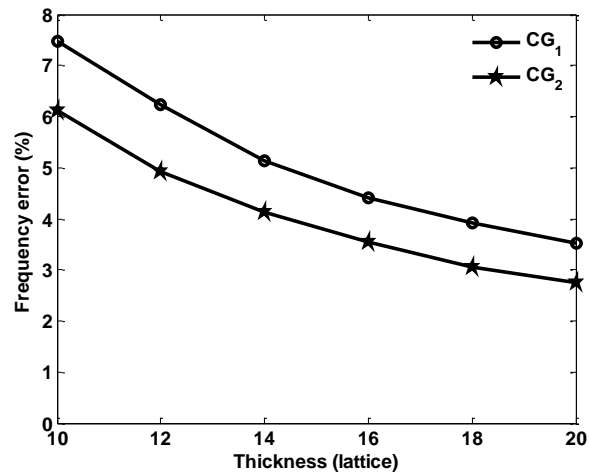


Fig. 16 The effect of thickness on natural frequency of transverse vibration of various silicon nanowires with  $100a$  length

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

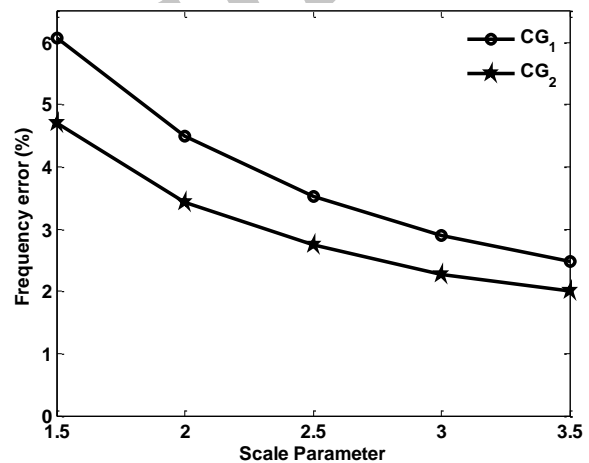


Fig. 17 The effect of scaling factor on natural frequency of transverse vibration of various silicon nanowires

شکل 17 تأثیر پارامتر مقیاس بر خطای فرکانس طبیعی ارتعاشات عرضی نانوایر 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 نانوایر 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