



دانشکده مهندسی مکانیک

گروه طراحی کاربردی

#### عنوان:

# مدل سازی و شبیه سازی نانو سیم های گروهی سیلیسیم (Si) به منظور پیش بینی خواص مکانیکی آن

دانشجو:

سید امین یاسینی

استاد راهنما:

دكتر محمود شريعتى

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

شهريور ۱۳۹۱



بسمه تعالى

شماره : تاریخ : ۲۹ ۲۰ ۹۷ ویرایش :

Ē

#### فرم صور تجلسه دفاع از پایان نامه تحصیلی دوره کارشناسی ارشد

با تأییدات خداوند متعال و با استعانت از حضرت ولی عصر (عج) ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد آقای سید امین یاسینی رشته مکانیک گرایش طراحی کاربردی تحت عنوان مدل سازی و شبیه سازی نانو سیمهای گروهی سیلیسیم(Si) به منظور پیش بینی خواص مکانیکی آن که در تاریخ ۱۳۹۱/۶/۲۹ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار گردید بـه شـرح ذیل اعلام می گردد:

مردود 🗌	دفاع مجدد 🗌	از ۱۲۲۸۱) 🗹	(با درجه : كر مر رو استي	قبول
	وب ( ۱۸/۹۹ _ ۱۸ )	🗸 ۲_ بسیار خ	۱_ عالی (۲۰ _ ۱۹ )	

۲\_ خوب (۱۷/۹۹ \_۱۶ )

۴\_ قابل قبول ( ۱۵/۹۹ \_ ۱۴ )

۵- نمرہ کمتر از ۱۴ غیر قابل قبول

	امضاء	مرتبة علمي	نام ونام خانوادگی	عضو هيأت داوران
	-	nt,	دکتر محمود شریعتی	ا_استادراهنما
	1	<u>.</u>		۱_ استاد مشاور
	· With	استاديار	دکتر محمد باقر نظری	۱_ نماینده شورای تحصیلات تکمیلی
-	- de ->	استاديار	دكتر مجتبى قطعى	۱_ استاد ممتحن
$\left( \right)$	(SWE)	استاديار	دکتر سید هادی قادری	، ـ استاد ممتحن

رئيس دانشكده: na

## تقديم اثر

این اثر بسیار ناچیز را خدمت پدر و مادر بسیار عزیز ، دلسوز و فداکارم که پیوسته جرعه نوش جام تعیلم و تربیت ، فضیلت و انسانیت آنها بوده ام و همواره چراغ وجودشان روشنگر راه من در سختیها و مشکلات بوده است و خواهد بود، تقدیم می نمایم.

چیدم گلی ز باغ ادب تا بروز عید

در بارگاه میر ادب پرور آورم

حیف است با خسان گل دانش کنی نثار

من گل نثار مردم دانشور آورم

شهريار

## تشكر و قدردانی

سپاس بی کران پروردگار یکتا را که هستی مان بخشید و به طریق علم و دانش رهنمونمان شد و به همنشینی رهروان علم و دانش مفتخرمان نمود و خوشه چینی از علم و معرفت را روزیمان ساخت. به امید آنکه توفیق یابم جز خدمت به خلق او نکوشم.

اعتراف می کنم که نه زبان شکر تو را دارم و نه توان تشکر از بندگان تو؛ اما بر حسب وظیفه، بر خود لازم میدانم از زحمات پدر و مادر عزیزم که در تمام دوران تحصیل همواره مشوق و پشتیبان اینجانب بودهاند کمال تشکر را بنمایم. خدایا نه میتوانم موهایشان را که در راه عزت من سفید شد، سیاه کنم و نه برای دستهای پینهبستهشان که ثمره تلاش برای افتخار من است، مرهمی دارم . پس توفیقم ده که هر لحظه شکر گزارشان باشم و ثانیهثانیه عمرم را در عصای دست بودن ایشان بگذرانم.

همچنین از زحمات استاد ارجمند و شایسته، جناب آقای دکتر محمود شریعتی که مسلماً این پایاننامه بدون راهنماییها و نقطهنظرات ارزنده ایشان راه به جایی نمیبرد، کمال تشکر و سپاسگزاری را دارم و امیدوارم در لحظهلحظه زندگیشان پروردگار متعال یاورشان باشد. آرزویم این است لحظهای از عمر خود را پیرو راه ایشان باشم و بتوانم روزی، تنها بخش کوچکی از زحمات ایشان را جبران نمایم.

از زحمات و راهنماییهای تکتک اعضای خانوادهام که در تمام جنبههای عاطفی، مادی، علمی و معنوی پشتیبان اینجانب بودهاند، کمال تشکر و سپاسگزاری را دارم.

در نهایت از کلیه اساتید محترم، دانشجویان گرامی دانشگاه صنعتی شاهرود و کلیه دوستان صمیمی و مهربانم که به نوعی از وجودشان بهرهمند شدم سپاسگزارم.

با آرزوی موفقیت و بهروزی برای همه عزیزان

سيد امين ياسيني

## تعهد نامه

اینجانب سید امین یاسینی دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته مهندسی مکانیک - گرایش طراحی کاربردی دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایاننامه مدل سازی و شبیه سازی نانو سیم های گروهی سیلیسیم (Si) به منظور پیش بینی خواص مکانیکی آن تحت راهنمائی جناب آقای دکتر **محمود شریعتی** متعهد می شوم:

- تحقیقات در این پایاننامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
  - در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است .
- مطالب مندرج در پایاننامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک
   یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است .
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود میباشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology» به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایح اصلی پایاننامه تأثیرگذار بودهاند در مقالات مستخرج از پایاننامه رعایت میگردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایاننامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است .
- در کلیه مراحل انجام این پایاننامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

تا*ر*یخ: ۱۳۹۱/۶/۲۹

#### مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج ، کتاب ، برنامه های رایانه ای ، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است ) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد . این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود .
  - استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمیباشد.

چکیدہ

كلمات كليدى:

دسته نانو سیم سیلیسیم، مدول یانگ، کمانش، خمش، مکانیک ساختاری

لیست مقالات مستخرج از پایاننامه و آماده جهت ارسال

1- Yasini. S. A. and Shariati. M., (2012), "Mechanical Properties of Silicon Nanowire <110> Using the Structural Mechanics Approach Method", ICNN, P165, P461, Kashan, Iran.

2- Yasini. S. A. and Shariati. M., (2012), "Mechanical Properties of Silicon Nanowire <100>, <110> and <111> with the Method of Mechanical Structure Modeling", ICNNSA, P187, Masjed-Soleyman, Iran.

3- Analyzing the Behavior of Silicon Nanowires <100>, <110> and <111> under Tensile and Torsional Loading.

۴- مدل سازی و شبیه سازی رفتار کمانشی نانو سیم های سیلیسیم <۱۰۰> و <۱۱۱> با استفاده از روش مکانیک ساختاری

نامه	پايان	عناوين

شماره صفحه	عنوان
0	تقدیہ اث
9	تشکر و قدردانی
۲	چکیدہ
ط	لیست مقالات مستخرج از پایان نامه
م	فهرست اشکال پایان نامه
ص	فهرست جداول
	فصل اول: مقدمه
۱	۱–۱ مقدمه
و معرفی ساختار آن	فصل دوم: روش های ساخت نانو سیم سیلیسیم و
۵	۲–۱ مقدمه
9	۲-۲ سیلیسیم (سیلیکون –Si)
۹	۲-۲ روش ساخت نانو سیم سیلیسیم
۱۲	۲-۲ توصيف ساختار نانو سيم سيليسيم
۱۴	۲-۴-۲ ساختار هندسی سطح مقطع نانو سیم سیلیسیم
کانیکی نانو سیم سیلیسیم	فصل سوم: مروری بر مطالعات انجام شده بر روی خواص م
۱۷	مقدمه
۱۸	۳-۲ مروری بر خواص مکانیکی محاسبه شده نانو سیم سیلیسیم

عناوين پايان نامه

## فصل چهارم: مروری بر انواع مدل سازی نانومواد

۲۷۴ مقدمه
۲۴-۲ کلیات روشهای مدلسازی در حوزه نانو۲۸
۳۱–۲–۴ انواع مدل سازی
۴-۳ مدل سازی نانو سیم سیلیسیم با روش مکانیک ساختاری۳۷
فصل پنجم: تحلیل نتایج شبیه سازی نانو سیم سیلیسیم
۵۲۵
۵-۲ تحلیل رفتار مکانیکی نانو سیم منفرد سیلیسیم۵۳
۵–۲–۱ شرایط مرزی و فرضیات۵۳
۵-۲-۲ کشش محوری
۵–۲–۳ پیچش
۵–۲–۴ نسبت پواسون
۵-۲-۵ کمانش
۵-۲-۶ خمش
۵-۳ تحلیل رفتار مکانیکی نانو سیم منفرد در یک دسته سه تایی
۵–۳–۱ شرایط مرزی و فرضیات
۵–۳–۲ کشش محوری

شماره صفحه	عنوان	
٩٣	شحب ۲-۲-۵	
٩٨	- ۳-۳-۵ کمانش	
1 • 1	۵–۳–۴ خمش	
۱۰۶	۵-۴ تحلیل رفتار مکانیکی دسته نانو سیم سیلیسیم	
۱۰۶	۵-۴-۱ شرایط مرزی و فرضیات	
۱۰۷	۵-۴-۲ کشش دسته نانو سیم	
۱۱۰	۵-۴-۵ پیچش دسته نانو سیم	
۱۱۳	۵-۴-۳ خمش دسته نانو سیم	
۱۱۶	۵-۴-۴ کمانش دسته نانو سیم	
۱۲۰	۵-۵ تعداد اتمها و زمان صرف شده برای تحلیلها	
فصل ششم: نتیجه گیری و پیشنهادات		
۱۲۳	۶–۱ نتایج	
١٢۵	۲-۶ پیشنهادات	

## عناوین پایان نامه

مراجع.....

فهرست شكلها

شماره صفحه

## عنوان

## فصل اول

شکار ۱-۱ تعداد وقالات سالیانه ویتشد شده طرق حستجوی نانو سرو سالیسو در ایراس دادگاه اینتینت
ستى ٢٠٠٠ سارى سارى سارى سار سان كېنى بىستېرى ئو سار سارى بې سارى پار سارى پار سارى پارىكى بىرىنى
فصل دوم
شكل ۲-۱. ساختار كووالانسى مشبك بلور سيليسيم
شکل ۲-۲. ۱- بلور سیلیسیم ۲- جهت <۱۱۱> یعنی صفحه ای که قطر مکعب در آن قرار دارد.۳- جهت <۱۱۰>
۴- جهت <۱۰۰> (عکس از نرم افزار CRYSTALMAKER)۸
شکل ۲-۳. مکانیزم رشد نانو سیم با استفاده از نانوخوشه طلا (A)- نمودار فازی (B)- فرایند رشد نانو سیم
شکل ۲-۴. راکتور CVD جهت رشد نانو سیم، عکس نانو سیم با مقیاس ۱۰ میکرومتر
شکل ۲-۵. تصویر برداری HRTEM از سطح مشترک کاتالیست طلا و نانو سیم از یک نانو سیم رشد یافته در جهت
طولی <۱۱۱> (مقیاس ۲۰ نانو متر) (B) تصویر برداری HRTEM از نانو سیم رشد یافته در جهت <۱۱۰>
مقياس ۵ نانو متر
شکل ۲-۶. انواع سطح مقطع ممکن برای نانو سیم سیلیسیم رشد یافته در جهات <۱۱۱>،<۱۱۰>،<۱۰۰>
١۶
شکل ۲-۲. مدل سازی نانو سیم سیلیسیم با پوش سطحی هیدروژن. الف- با نرم افزار DSVIEWERPRO50
فصل سوم
فصل سوم مکار ۳۰۸ تنابی دارانگی در منان با شکارتا بگال)
<b>فصل سوم</b> شکل ۳-۱. تغییرات مدول یانگ برحسب عرض نانوسیم با روش DFT(تابع چگالی)
<b>فصل سوم</b> شکل ۳-۱. تغییرات مدول یانگ برحسب عرض نانوسیم با روش DFT(تابع چگالی)
فصل سوم شکل ۳-۱. تغییرات مدول یانگ برحسب عرض نانوسیم با روش DFT(تابع چگالی)
فصل سوم شکل ۳-۱. تغییرات مدول یانگ برحسب عرض نانوسیم با روش DFT(تابع چگالی)
فصل سوم شکل ۳-۱. تغییرات مدول یانگ برحسب عرض نانوسیم با روش DFT(تابع چگالی)
فصل سوم شکل ۳-۱. تغییرات مدول یانگ برحسب عرض نانوسیم با روش DFT(تابع چگالی)
فصل سوم شكل ۳-۱. تغییرات مدول یانگ برحسب عرض نانوسیم با روش DFT(تابع چگالی)
فصل سوم شکل ۳-۱. تغییرات مدول یانگ برحسب عرض نانوسیم با روش DFT(تابع چگالی)
فصل سوم شکل ۳-۱. تغییرات مدول یانگ برحسب عرض نانوسیم با روش DFT(تابع چگالی)
فصل سوم شکل ۳-۱. تغییرات مدول یانگ برحسب عرض نانوسیم با روش DFT(تابع چگالی)
فصل سوم شکل ۳-۱. تغییرات مدول یانگ برحسب عرض نانوسیم با روش DFT(تابع چگالی)
فصل سوم شکل ۳-۱. تغییرات مدول یانگ برحسب عرض نانوسیم با روش DFT(تابع چگالی)

٣۶	شکل ۴-۴. نمایش پارامترهای رابطه ۴-۱
۴۱	شکل ۴-۵. مدل ساختاری در نرم افزار ABAQUS
۴۲	شکل ۴-۶. شماتیکی از فنر خطی معادل فنر پیچشی در C

فهرست شكلها

شماره صفحه

عنوان

	شكل ۴-۲. نمودار نيرو-جابجايي براي فنر معادل نيروي A.NGLE-BEND. A خط نقطه رابطه ۴-۲۱ B-خط چين
44.	رابطه ۴-۲۵ C -خط پر رابطه غیر خطی بدست آمده از جای گذاری ۴-۷ در ۴-۲۲
۴۵.	شکل ۴-۸. نمونه ای از هندسه مدل شده در نرم افزار ABAQUS
49.	شکل ۴-۹. نمونه ای از مدل سازی دسته نانو سیم های سه تایی در نرم افزار ABAQUS
	شكل ۴-۱۰ الف- نيرو واندروالس برحسب فاصله نانومتر ب- انرژى پتانسيل واندر والس برحسب فاصله دو اتم به
۴۷.	نانومتر
49.	شكل ۴-۱۱. جهات كريستالوگرافي نانو سيم سيليسيم
	فصل پنجم
۵۴.	شکل ۵-۱. نمونه ای از ضخامتهای مدار شده نانو سیمهای سیلیسیم ایعاد بر حسب نانو متر است
D	شکل ۲-۵. نمونه ای از نانو سیم <۱۰۰> و<۱۱۰> تحت کشش محودی ( EFORMATION SCALE FACTOR
۵۷.	
۵٨.	شکل ۵-۳. تغییرات مدول یانگ نانو سیم سیلیسیم<۱۰۰> برحسب عرض آن: الف) در این مطالعه؛ ب) مرجع
۵٩.	شکل ۵-۴. تغییرات مدول یانگ نانو سیم <۱۰۰> با افزایش طول برای ضخامت های گوناگون نانو سیم
۶۰.	شكل ۵-۵ تغييرات مدول يانگ برحسب طول نانو سيم<١١٠>
۶۰.	شكل ۵-۶. تغييرات مدول يانگ برحسب قطر معادل سطح نانو سيم<١١٠>
۶١.	شكل ۵-۷. تغييرات مدول يانگ نانو سيم <١١١> برحسب طول نانو سيم
۶٢.	شكل ۵-۸. تغييرات مدول يانگ نانو سيم سيليسيم<١١١> برحسب قطر دايره معادل
۶٢.	شکل ۵-۹. نمایی از پیچش نانو سیم <۱۰۰> (DEFORMATION SCALE FACTOR 50 )
۶٣.	شكل ۵-۱۰. رفتار مدول برشي برحسب تغييرات طول نانو سيم <۱۰۰>
۶٣.	شكل ۵-۱۱. تغييرات مدول برشي برحسب ضخامت نانو سيم سيليسيم<۱۰۰>
۶۴.	شكل ۵-۱۲. نمايي از پيچش مقطع نانو سيم <۱۱۰> ( DEFORMATION SCALE FACTOR 6 )
۶۴.	شكل ۵-۱۳. رفتار مدول برشي برحسب تغييرات طول نانو سيم<١١٠>
۶۵.	شكل ۵-۱۴. رفتار مدول برشي نانو سيم <۱۱۰>برحسب ضخامت(A)
<i>99</i> .	شكل ۵-۱۵. نمونه اى از پيچش مقطع نانو سيم <۱۱۱> ( DEFORMATION SCALE FACTOR 16.5 )
<i>99</i> .	شكل ۵-۱۶. تغييرات مدول برشي برحسب طول نانو سيم<١١١>
۶۷.	شكل ۵-۱۷. تغييرات مدول برشی نانو سيم <۱۱۱>برحسب ضخامت(A)
۶٨.	شكل ۵-۱۸. تغييرات نسبت پواسون با تغييرات ضخامت نانو سيم<١٠٠>
۶٩.	شكل ۵-۱۹. تغييرات نسبت پواسون نسبت به قطر معادل نانو سيم<١١٠>
γ۰.	شكل ۵-۲۰. تغييرات نسبت پواسون نسبت به ضخامت نانو سيم<١١١>
	شكل ۵-۲۱. نانو سيم فوق نازك<۱۱۱>: الف- محل اندازه گيري نسبت پواسون درسطح مقطع نانو سيم، ب- محل
۷١.	اندازه گیری نسبت پواسون درامتداد طول نانو سیم
۷١.	شکل ۵-۲۲. نمای جانبی(YZ) از کوتاهترین نانو سیم های مورد تحلیل
۷٣.	شکل ۵-۲۳. مقدار مدول یانگ محاسبه شده: الف، مرجع ب، مرجع

فهرست شكلها

شماره صفحه

عنوان

شکل ۵-۲۴. نتایج مقدار مدول یانگ نانو سیم <۱۱۰>از آزمایشات تجربی و شبیه سازی بر حسب قطر معادل سطح
٧۴
شکل ۵-۲۵. نمونه ای از کمانش نانو سیم مدل سازی شده در ABAQUS
شكل ۵-۲۶. تغييرات بار بحراني نانو سيم <۱۰۰> بر حسب نسبت L/A
شكل ۵-۲۷. تغييرات بار بحراني نانو سيم <۱۱۰> بر حسب L/W
شکل ۵-۲۸. بار بحرانی کمانشی برحسب (Io/Lo^2) (ابعاد میکرومتر)
شكل ۵-۲۹. تغييرات بار بحراني كمانشي نانو سيم <۱۱۱> بر حسب L/A
شکل ۵-۳۰. تغییرات بار بحرانی کمانشی طبق رابطه (۵-۲) برحسب نسبت L/A
شکل ۵-۳۱. نمونه ای از شبیه سازی رفتار نانو سیم سیلیسیم تحت بار خمشی
شکل ۵-۳۲. تغییرات جابجایی عرضی بیشینه تحت بار وارده به انتهای آزاد نانو سیم <۱۰۰> برحسب طول
شکل ۵-۳۳. رفتار جابجایی عرضی نانو سیم سیلیسیم<۱۰۰> بر حسب تغییرات ضخامت(عرض)
شکل ۵-۳۴. تغییرات جابجایی عرضی بیشینه تحت بار وارده به انتهای آزاد نانو سیم <۱۱۰> بر حسب طول۸۴
شكل ۵-۳۵. رفتار جابجايي عرضي نانو سيم سيليسيم<١١٠> بر حسب تغييرات ضخامت
شکل ۵-۳۶. تغییرات جابجایی عرضی بیشینه تحت بار وارده به انتهای آزاد نانو سیم <۱۱۱> بر حسب طول۸۶
شكل ۵-۳۷. رفتار جابجايي عرضي نانو سيم سيليسيم<١١١> بر حسب تغييرات ضخامت
شكل ۵-۳۸. تغييرات جابجايي نانو سيم منفرد <۱۰۰> در تحليل كشش محوري
شکل ۵-۳۹. رفتار جابجایی نانو سیم منفرد <۱۰۰> در مجاورت با دو نانو سیم دیگر<۱۰۰>، در تحلیل کشش
محورى
شکل ۵-۴۰. تغیرات جابجایی نانو سیم منفرد <۱۱۰> در تحلیل کشش محوری
شکل ۵-۴۱. رفتار جابجایی نانو سیم منفرد <۱۱۰> در مجاورت با دو نانو سیم دیگر<۱۱۰>، در تحلیل کشش
محوری۹۱
شکل ۵-۴۲. تغییرات جابجایی نانو سیم منفرد <۱۱۱> در تحلیل کشش محوری نسبت به قطر معادل سطح۹۲
شکل ۵-۴۳. رفتار جابجایی نانو سیم منفرد <۱۱۱> در مجاورت با دو نانو سیم دیگر<۱۱۱>، نسبت به قطر معادل
سطح در تحلیل کشش محوری۹۲
شکل ۵-۴۴. تغییرات زاویه پیچش نانو سیم <۱۰۰> در حالت منفرد نسبت به قطرمعادل سطح۹۴
شکل ۵-۴۵. تغییرات زاویه پیچش نانو سیم <۱۰۰> در حالت گروهی۹۴
شکل ۵-۴۶. تغییرات زاویه پیچش نانو سیم <۱۱۰> در حالت منفرد نسبت به قطر معادل سطح۹۵
شکل ۵-۴۷. تغییرات زاویه پیچش نانو سیم <۱۱۰> در حالت گروهی نسبت به قطر معادل سطح۹۶
شکل ۵-۴۸. تغییرات زاویه پیچش نانو سیم <۱۱۱> در حالت منفرد نسبت یه ضخامت سطح مقطع۹۷
شکل ۵-۴۹. تغییرات زاویه پیچش نانو سیم <۱۱۱> در حالت گروهی نسبت به ضخامت سطح مقطع۹۷
شکل ۵-۵. تغییرات بار بحرانی کمانشی نانو سیم سیلیسیم <۱۰۰> بر حسب L/A در حالت گروهی
شکل ۵-۵۱. تغییرات بار بحرانی کمانشی نانو سیم سیلیسیم <۱۱۰> بر حسب L/A در حالت دسته نانو سیم سه تایی
١٠٠

فهرست شكلها

شماره صفحه

عنوان

شکل ۵-۵۲. تغییرات بار بحرانی کمانشی نانو سیم سیلیسیم <۱۱۱> بر حسب L/A در حالت دسته نانو سیم سه تایی
1 • 1
شکل ۵-۵۳. شبیه سازی نانوسیم منفرد در دسته نانو سیم سه تایی سیلیسیم تحت بارگذاری خمشی
شكل ۵۴-۵ بيشينه جابجايي عرضي نانو سيم سيليسيم <١٠٠> در حالت گروهي
شكل ۵-۵۵ بيشينه جابجايي عرضي نانو سيم سيليسيم <١١٠> در حالت دسته نانو سيم سه تايي
شكل ۵-۵۶. بيشينه جابجايي عرضي نانو سيم سيليسيم <١١١> در حالت دسته نانو سيم سه تايي
شکل ۵-۵۷. نمونه ای از نمای جانبی و سطح مقطع دسته نانو سیمهای سیلیسیم مدل سازی شده تحت بارگذاری
کشش محوری در نرم افزار BAQUSمانین محوری در نرم افزار عام افزار عام محوری در نرم افزار عام محوری در نرم افزار
شکل ۵-۵۸. تغییرات جابجایی طولی دسته نانو سیم سه تایی سیلیسیم <۱۰۰> بر حسب ضخامت(عرض) نانو سیم
منفرد
شکل ۵۹-۵۹. تغییرات جابجایی طولی دسته نانو سیم سه تایی سیلیسیم <۱۱۰> برحسب قطرمعادل سطح نانو سیم
منفرد
شکل ۵-۶۰. تغییرات جابجایی طولی دسته نانو سیم سه تایی سیلیسیم <۱۱۱> برحسب قطرمعادل سطح نانو سیم
منفرد
شکل ۵-۶۱. نمونه ای از نمای سطح مقطع دسته نانو سیمهای سیلیسیم مدل سازی شده تحت بارگذاری پیچشی در
نرم افزار ABAQUS
شکل ۵-۶۲. تغییرات زاویه پیچشی دسته نانوسیم سه تایی سیلیسیم<۱۰۰> برحسب قطرمعادل سطح نانو سیم منفرد
111.
شكل ۵-۶۳. تغييرات زاويه پيچشي دسته نانوسيم سه تايي سيليسيم<١١٠> برحسب قطرمعادل سطح نانو سيم منفرد
۱۱۲
شكل ۵-۶۴. تغييرات زاويه پيچشي دسته نانوسيم سه تايي سيليسيم<١١١> برحسب قطرمعادل سطح نانو سيم منفرد
۱۱۳
شکل ۵-۶۵. نمونه ای از نمای جانبی و سطح مقطع  دسته نانو سیمهای سیلیسیم مدل سازی شده تحت بارگذاری
پیچشی در نرم افزار ABAQUS
شكل ۵-۶۶. تغييرات بيشينه جابجايي عرضي دسته نانوسيم سه تايي سيليسيم<١٠٠> برحسب عرض نانو سيم منفرد
114
شکل ۵-۶۷. تغییرات بیشینه جابجایی عرضی دسته نانوسیم سه تایی سیلیسیم<۱۱۰> برحسب عرض نانو سیم منفرد
110
شکل ۵-۶۸. تغییرات بیشینه جابجایی عرضی دسته نانوسیم سه تایی سیلیسیم<۱۱۱> برحسب عرض نانو سیم منفرد
118
شکل ۵-۶۹. نمونه ای دسته نانو سیمهای سیلیسیم مدل سازی شده تحت بارگذاری کمانشی در نرم افزار ABAQUS
118
شکل ۵-۷۰. تغییرات بار بحرانی کمانشی دسته نانوسیم سه تایی سیلیسیم<۱۰۰> برحسب نسبت L/A
شکل ۵-۷۱. تغییرات بار بحرانی کمانشی دسته نانوسیم سه تایی سیلیسیم<۱۱۰> برحسب نسبت L/W

فهرست شكلها

شماره صفحه	عنوان
دانشی دسته نانوسیم سه تابی سیلیسیم<۱۱۱> برحسب نسبت L/A	شکل ۵-۷۲. تغییرات بار بحرانی ک

۱۲۰	شکل ۵-۷۳. زمان تحلیل و تعداد اتمهای مدل شده برای حالت منفرد ۲۰۰۰ زمان تحلیل و تعداد اتمهای مدل
١٢١	شکل ۵-۷۴. زمان تحلیل و تعداد اتمهای مدل شده برای حالت گروهی
١٢١	شکل ۵-۷۵. مجموع زمان تحلیل و تعداد اتمهای مدل شده برای هر حالت

فهرست جدولها

شماره صفحه

عنوان

۲۵	جدول ۳-۱. محاسبات مدول یانگ نانوسیم سیلیسیم [۱۱۰]
۴۰	جدول ۴-۱. ضرایب میدان های نیرو برای اتم سیلیسیم از روش DREIDING.
۴۸	جدول ۴-۲. روابط بکار گزفته شده در نحلیلها
۵۰	جدول ۴-۳. خواص فیزیکی سیلیسیم
۵۵	جدول ۵-۱. شرایط مرزی و نحوه بار گذاری
، با سایر روشها	جدول ۵-۲. مقایسه مدول یانگ وضریب پواسون محاسبه شده در این پایان نامه
كمانشى	جدول ۵-۳. مقادیر مدول یانگ با استفاده از رابطه اولر جهت محاسبه باربحرانی
٨Υ	جدول ۵-۴. نحوه شرایط مرزی و بارگذاری در دسته نانو سیم
۱۰۶	جدول ۵-۵. نحوه بار گذاری و شرایط مرزی در تحلیل دسته نانو سیم سه تایی.
١٢٠	جدول ۵-۶. کمینه و بیشینه تعداد اتم مدل شده در نرم افزار ABAQUS

# فصل اول

مقدمه

در دنیای امروز کمتر وسیلهای در پیرامون ما وجود دارد که در آن از سیلیسیم<sup>۱</sup> استفاده نشده باشد از رایانهها، مدارات الکترونیکی، تلفن همراه، کنترل تلوزیون تا ماهواره ها و کاوشگرها درهمه به نوعی از سیلیسیم استفاده شده است. خواص منحصر به فرد سیلیسیم در زمینه الکترونیکی، اپتو الکترونیک، حرارتی و مکانیکی آن، سبب شده تا سیلیسیم به عنوان انتخاب ایده آلی برای ساخت مدارهای مجتمع(آی سی)، دستگاه های حافظه، سلول های خورشیدی، و سیستم های میکرو الکترومکانیکی (MEMS) مورد توجه قرار گیرد.[۴–۱]

در سیستم های میکرو الکترومکانیک (MEMS)، با توجه به یک بعدی بودن این سیستمها، سه ساختار اصلی از انتخاب نانو مواد در این سیستم ها، نانو لوله کربنی، نانو سیمهای سیلیسیم و نانو سیمهای اکسید روی است. علت اصلی توجه به این نانو مواد بدان جهت است که این مواد در مقیاس نانو متری خواص منحصر به فردی دارند و خواص این مواد در این مقیاس تا حد زیادی بهبود یافته است. از طرفی با رشد سریع نانو فنآوری و تولید نانو ابزارها، سیستمهای میکروالکترومکانیکی به سوی سیستمهای نانو الکترو مکانیکی(NEMS) سوق داده شده است. از این رو کشف خواص مکانیکی مواد در مقیاس نانو متری، اهمیت حیاتی دارد و کلید ساخت این ابزارها نانو سیم سیلیسیم است. با وجود پتانسیلهای مکانیکی و الکتریکی مناسب در نانو سیم سیلیسیم، طراحی و ساخت این نانو سیمها از جهت رسیدن به خواص مورد دلخواه و تولید مواد نانو ساختار حائز اهمیت است. با بررسی مقالات در زمینه این نانو سیم، به این موضوع پی می بریم که توجه به این نانو سیم در دهه اخیر رشد بسزایی پیدا کرده است و در آغاز راه است (شکل ۱–۱).

ا عنصر سیلیسیم(سیلیسیوم)، سیلیکون نیز نامیده می شود.



شکل ۱-۱. تعداد مقالات سالیانه منتثر شده طبق جستجوی نانو سیم سیلیسیم بر اساس پایگاه اینترنتی webofknowledge.com آنچه در فصل دوم بیان شده است، ابتدا عنصر سیلیسیم بطور اجمالی معرفی، سپس نحوه ساخت و رشد نانو سیم سیلیسیم و انواع آن بیان می شود. درفصل سوم بر مطالعات انجام شده بر روی نانو سیم سیلیسیم مرور میشود. فصل چهارم اشاره کوتاهی به انواع مدل سازی و مدل ساختاری و پتانسیل های آن دارد. در فصل پنجم تحلیل نتایج نانو سیم منفرد و دسته نانو سیم بیان میشود. نتایج در فصل ششم ذکر می گردد.

فصل دوم:

روش های ساخت نانو سیم سیلیسیم و معرفی ساختار آن

#### ۲-۱ مقدمه

امروزه با پیشرفت تکنولوژی و دستیابی بشر به ابعادی در حد نانو، ساخت نانو ابزارها در این ابعاد بسیار حائز اهمیت است. لذا بدست آوردن خواص مکانیکی و الکترونیکی این نانو مواد از ضروریات است. همان طور که در فصل قبل اشاره شد، یکی از مهمترین نانو موادها برای ساخت نانو ابزارها، نانو سیم سیلیسیم است. از این رو مطالعات وسیعی در جهت ساخت این نانو سیم با خواص مورد نیاز در حال انجام است که در ادامه به معرفی عنصر سیلیسیم(سیلیکون) و روش های ساخت این نانو سیم پرداخته می شود.

## Si- سیلیسیم (سیلیکون –Si)

عنصری با عدد اتمی ۱۴ در گروه ۴ جدول تناوبی با نماد Si قرار دارد. سیلیسیم بعد از اکسیژن دومین عنصر در پوسته زمین را تشکیل می دهد و بیشتر بصورت SiO2 و سیلیکاتها در طبیعت یافت می شود. سیلیسیم شبه فلز است. ساختار بلور سیلیسیم، سیلیسیم کاربید، SiC، و سیلیس،SiO2، مانند الماس به صورت کووالانسی مشبک است (شکل ۲–۱).



شكل ۲-۱. ساختار كووالانسى مشبك بلور سيليسيم [7]

سیلیسیم کاربید و سیلیسیم دی اکسید (سیلیس) مانند الماس، سخت و شکننده اند و دمای ذوب زیادی دارند. این اجسام به علت داشتن جفت الکترونهای مستقر در سراسر شبکه بلور رسانایی الکتریکی ندارند. کاربرد صنعتی الماس و سیلیسیم کاربید به سختی آنها مربوط می شود.

سیلیسیم از حرارت دادن سیلیس و کک در دمایی حدود ۳۰۰۰° در کوره الکتریکی بدست میآید. (دمای جوش سیلیسیم ۵۷/۶°C است)

$$SiO_{2(g)} + 2C_{(g)} \xrightarrow{\Delta} Si_{(l)} + 2CO_{(g)}$$

$$(1-7)$$

برای تهیه سیلیسیم جهت مصرف در صنایع الکترونیک، ابتدا سیلیسیم را توسط کلر به سیلیسیم تتراکلرید تبدیل میکنند

$$Si_{(s)} + 2Cl_{2(g)} \longrightarrow SiCl_{4(l)}$$
 (۲-۲) سپس $SiCl_4$  را توسط فلز منیزیم در دمای زیاد می کاهند

$$SiCl_{4(g)} + 2Mg_{(s)} \longrightarrow 2MgCl_{2(s)} + Si_{(s)}$$
 (۳-۲)  
منیزیم کلرید را با شستن توسط آب از سیلیسیم جدا می کنند. سپس سیلیسیم را به حالت مذاب  
در آورده، آن را به صورت میله منجمد می کنند. آنگاه برای تهیه سیلیسیم بسیار خالص جهت صنایع  
الکترونیک از روش ذوب موضعی استفاده می کنند. به این ترتیب که میله سیلیسیم را در کوره  
مخصوص قرار می دهند و با حرکت دادن تدریجی گرمکن کوره، منطقه مذاب را در طول میله پیش  
می برند. با توجه به اینکه ناخالصیها در شبکه بلور خالص جا نمی گیرند، به تدریج در منطقه مذاب وارد  
شده، سرانجام در انتهای میله جمع می شوند. آنچه که مشاهده می شود، شبیه به پدیده نزول نقطه  
انجماد است. در نزول نقطه انجماد، جسم حل شده در محلول باقی می ماند، در حالی که حلال خالص  
منجمد می شود. در روش ذوب موضعی، منطقه مذاب محلولی از ناخالصیها (جسم حل شده) در  
سیلیسیم (حلال) است. در حالی که منطقه بعدی از جامد ناخالص در حال ذوب شدن است، مقداری

از سیلیسیم در منطقه قبلی در حال انجماد است. ناخالصیها موجب نزول نقطه انجماد محلول باقیمانده می شوند که غلظت ناخالصیهای حل شده در آن رو به افزایش است.

این محلول با ناخالصیهای جدید آزاد شده از منطقه ذوب شده مخلوط شده، محلول غلیظتری را تشکیل میدهد. با ادامه این فرایند در طول میله سیلیسیم ناخالص، ناخالصیهای هر منطقه در حالی که سیلیسیم در حال منجمد شدن است، با تمام ناخالصیهای قبلی جمع میشود و سرانجام، به انتهای میله میرسند. پس از قطع این قسمت از میله، این فرایند را تکرار میکنند. پس از چند بار تکرار، سیلیسیم خالص بدست میآید که درجه خلوص آن بیش از ۹۹/۹۹۹۹۹ % است[۵].

اگر به بلور سیلیسیم در جهات کریستالگرافی نگاه کنیم(شکل۲-۲)، متوجه می شویم این ماده در جهات مختلف دارای هندسه متفاوت است. در نتیجه خواص متفاوتی در هر جهت از خود نشان می-دهد، بنابراین محققین نانو با استفاده از این رفتار سعی در ساخت نانو ابزارهای مورد نظر خود هستند و با رشد دادن سیلیسیم در جهت مد نظر به مقصود خود می رسند که در قسمت بعد نحوه رشد دادن نانو سیم ها بیان می شود.



شکل ۲-۲. ۱- بلور سیلیسیم ۲- جهت <۱۱۱> یعنی صفحه ای که قطر مکعب در آن قرار دارد.۳- جهت <۱۱۰> ٤- جهت <۱۰۰> (CrystalMaker ) (عکس از نرم افزار (CrystalMaker)

## ۲-۲ روش ساخت نانو سیم سیلیسیم

به طور کلی ، تهیه نانوسیم ها مستلزم آن است که مواد در طول فرایند رشد، بگونه ای محدود شوند، که تنها رشد در یک جهت که رخ دهد. در سیستم هایی که در آن پیوند اتمی نسبتا متقارن هستند، مانند سیلیسیم، دستیابی به رشد یک بعدی (1D) نیازمند آن است که تقارن در طول رشد شکسته شده باشد[۷]. در طول دهه گذشته، تلاش قابل توجه ای در زمینه ساختن نانوسیمهای مقیاس بزرگ انجام شده است، و روش های مختلف فیزیکی یا شیمیایی برای شکستن تقارن در طول فرایند رشد توسعه یافته اند.

یکی از طرح های رایج، استفاده از یک قالب رشد خطی<sup>۱</sup> است که تنها با هدایت کردن ماده در یک جهت سبب می شود ماده بصورت یک بعدی رشد نماید[۲–۱۱]. در این روش نانوسیمی با قطر قالب تعریف شده ساخته می شود، که اغلب مواد حاصل، چند کریستالی هستند; بنابراین برای کاربردهای الکترونیکی باحساسیت بالا دارای محدودیت قابل توجهی می باشند.

یکی دیگر از روشهایی که چند سال اخیر مورد توجه قرار گرفته است، بهره برداری از یک نانو خوشه<sup>۲</sup> به عنوان کاتالیزور به جهت محدود کردن رشد دریک بعد است. نانو خوشه یا نانوقطره<sup>۳</sup> تا پایان واکنش رشد نانو سیم، درجهت ترجیحی به کار گرفته می شود، این روش بسیار شبیه به یک کاتالیزور بسپار زنده<sup>۴</sup> (پلیمر) است که افزودن مونومر را به زنجیره پلیمری در حال رشد، هدایت می-نماید.

<sup>&#</sup>x27;Linear growth template

<sup>&#</sup>x27; Nanocluster

<sup>&</sup>quot; Nanodroplet

<sup>\*</sup> Living polymer

چندین روش خاص مبتنی بر این روش، برای ساخت نانو سیم سیلیسیم توسعه داده شده است. در ادامه، رشد نانو سیم سیلیسیم براساس کاتالیزور نانوخوشه بیان می شود[۱۲]. در این روش از رسوب دهی شیمیایی از فاز بخار<sup>۱</sup>، فرسایش با لیزر<sup>۲</sup> [۱۰] ،تبخیر فیزیکی<sup>۳</sup> [۱۱] و مایعات فوق بحرانی<sup>۴</sup>[۱۲] استفاده شده است. روش CVD بدلیل دقت بالا و کنترل پذیری، بیشترین گسترش و کاربردیترین روش شده است. از این رو در ادامه این روش بیان می شود.

در این روش از کاتالیست نانو خوشه فلزی جهت رشد نانو سیم های سلیسیم استفاده میشود. در این هنگام نانوخوشه فلزی بطور فعال برای جذب واکنش فاز بخار و اشباع کردن، آن گونه که مورد نظر است عمل می کند و هسته جانشینی برای تبلور سازی می شود. مهمترین ویژگی این روش برای رشد نانو سیم این است که می توان ماده کاتالیزوری که از یک آلیاژ مایع با نانوسیم مورد نظر است را با استفاده از نمودار فازی، انتخاب کرد. سیلیکون(سیلیسیم) از این قبیل مواد است. همچنین می توان با توجه به نمودار فازی، انتخاب کرد. سیلیکون(سیلیسیم) از این قبیل مواد است. همچنین می توان آلیاژ مایع با نانو سیم جامد است. بعنوان مثال یک نمونه از رشد نانو سیم سیلیسیم با کاتالیزور نانو آلیاژ مایع با نانو سیم جامد است. بعنوان مثال یک نمونه از رشد نانو سیم سیلیسیم با کاتالیزور نانو خوشه طلا در شکل(۲-۲) نشان داده شده است. نمودار فاز دوتایی Au-Si میش بینی می کند که نانو تشکیل خواهد شد. وقتی که نانو خوشه با سیلیسیم فوق اشباع می شود. هنگامی که انرژی آزاد بین یک هسته جامد/ مایع Si/Au-Si در سطح مشترک آلیاژ تولید می شود. هنگامی که انرژی آزاد بین سطح مشترک حداقل شد، پس از آن، رشد جامد/ متبلور در سطح مشترک اولیه رخ میدهد، در نتیجه رشد بسیار ناهمسانگرد را تحمیل می کند که باید برای تولید نانوسیم میکامی که انرژی آزاد بین

" Physical evapouration

<sup>&#</sup>x27;Chemical vapour deposition (CVD)

<sup>&</sup>lt;sup>v</sup>Laser ablation

<sup>\*</sup> Supercritical fluids

رشد یک بعدی ترجیحی در صورتی ادامه پیدا می کند که کاتالیست در وضعیت مایع باشد. یک الگو از ویژگی های کلیدی از رشد به روش CVD برای ساخت نانو سیم سیلیسیم در شکل(۲-۳) نشان داده شده است. بطور نمونه رشد لایه زیرین<sup>۱</sup> شامل نانوخوشه طلا در راکتور کوارتز واکنش می-دهد و سپس نانو سیم سیلیسیم در دمای ۴۳۵–۴۶۰ درجه سلسیوس رشد میکند. رشد میتواند با استفاده از Ar,He یا 22 به عنوان گاز حامل انجام شود، که این هم سبب افزایش سطح کنترل برروی رشد میشود.

برای مثال، استفاده از هیدروژن بعنوان گاز حامل میتواند در رشد سطحی جامد و کاهش زبری بی اثر باشد[۱۳] حال آنکه Ar و He می تواند رسوب شعاعی از یک ترکیب خاص پوسته را فراهم آورد. یک نمونه از رشد زیر لایه شامل تعداد بزرگی از نانو سیم های سیلیسیم در شکل (۲-۴) نمایش داده شده است.

<sup>&#</sup>x27; Substrates



شکل ۲-۳. مکانیزم رشد نانو سیم با استفاده از نانوخوشه طلا (a)- نمودار فازی (b)- فرایند رشد نانو سیم[۱٤]



شکل ۲-٤. راکتور CVD جهت رشد نانو سیم، عکس نانو سیم با مقیاس ۱۰ میکرومتر[15]

٤-٢ توصيف ساختار نانو سيم سيليسيم

برای تعیین جزییات ساختار این نانو سیمها، میکروسکوپ الکترونیکی عبوری تفکیک بالا<sup>۱</sup> (HRTEM) بکار گرفته می شود. نانو سیم سیلیسیم سنتز شده، نانو ساختار بلورین منفردی با اقطار یکنواخت است. مطالعات نهایی نشان میدهد نانو سیمهایی که با نانو ذره طلا ساخته میشوند، اغلب با رشد کامل خاتمه مییابند (شکل ۲-۵الف). بنابراین مشاهده قوی، استفاده از مکانیزم رشد بخار-مایع-جامد(VLS) پیشنهاد می گردد[۱۵]. اندازه گیریها منطم ارتباط بین قطر و رشد محورهای نانو سیم سیلیس را نشان میدهد.

برای قطرهای بین ۳ تا ۱۰ نانومتر، ۹۵ درصد نانوسیمهای سیلیسیم رشد طولی در جهت <۱۱۰>، برای قطرهای مابین ۱۰ تا ۲۰ نانومتر، ۶۱ درصد از نانوسیمها رشد طولی در جهت <۱۱۲> دارند و برای اقطار بین ۲۰ تا ۳۰ نانومتر، ۶۴ درصد نانو سیمها به رشد طولی در جهت <۱۱۱> متمایل میشوند.

این نتایج ثابت میکند رشد طولی برای قطرهای کوچک نانو سیمهای سیلیکونی در جهت <۱۱۰> و برای قطرهای بزرگ رشد در جهت <۱۱۱> است. مشاهده میشود، تمایل به جهت رشد براساس رقابت بین انرژی وجه مشترک آلیاژ کاتالیزور مایع/جامد نانوسیم سیلیکونی و سطح انرژی نانو سیم سیلیکون است و میتوان پی برد رشد برتر درجهت این انرژی رخ میدهد.

برای قطرهای بزرگ نانو سیم سیلیکونی، رشد محوری در جهتی شکل می گیرد که، پایین ترین انرژی آزاد منفرد وجه مشترک جامد – مایع<sup>۲</sup>، موازی با صفحه منفرد (۱۱۱) باشد[۱۶]. یک برش عرضی از نانو سیم سیلیسیم در جهت <۱۱۰> در مقیاس ملکولی در شکل (۲-۵ب) نمایش داده شده است.

<sup>&#</sup>x27;High-resolution transmission electron microscopy

<sup>&#</sup>x27; Lowest-free-energy solid-liquid interface



(شکل ۲-۵ الف) تصویر برداری HRTEM از سطح مشتر ک کاتالیست طلا و نانو سیم از یک نانو سیم رشد یافته در جهت طولی <۱۱۱> (مقیاس ۲۰ نانو متر) (b) تصویر برداری HRTEM از نانو سیم رشد یافته در جهت <۱۱۰> مقیاس ۵ نانومتر[1۳] شکل(۲-۵ ب) (a) تصویربرداری TEM از نانو سیم رشد یافته در جهت <۱۱۰> با قطر ۳٫۸ نانو متر (C) تصویر برداری HRTEM از سطح مقطع (b) شکل پایدار نانو سیم (d) سطح مقطع پیش بینی شده بوسیله HRTEff]

این تصویر سطح مقطع با قطر ۳٫۸ نانو متر را نشان می دهد که در جهت <۱۱۰> رشد یافته است که یک سطح شش ضلعی است. مینمم سازی انرژی در جهت <۱۱۰> کاملا وابسته است به سطح انرژی در سه صفحه (۱۱۱) و (۱۰۱) است. مطالعات مشابه ای بر روی رشد نانو سیم سیلیسیم و قطر آن صورت گرفته است. جهت کسب اطلاع بیشتر می توان به مقالات[۲۰–۲۰] مراجعه نمایید. با مشاهده صفحات کریستالگرافی پی به این موضوع می بریم که هر نانو سیم می تواند دارای سطح مقطع متفاوت باشد در بخش بعدی به این موضوع میپردازیم

#### 1-٤-۲ ساختار هندسی سطح مقطع نانو سیم سیلیسیم

با توجه به نظریه اوربیتال ملکولی پیوندهای اتمی در سیلیسیم از نوع SP<sup>3</sup> است. محقیقن با استفاده از روشهای تحلیلی مبتنی بر کمینه سازی انرژی پیوند بین ملکولی به پیش بینی در مورد نحوه پیوند و زاویه پیوند بین دو اتم میپردازند. با داشتن زوایا و طول پیوند میتوان مکان اتمها را در فضا مشخص نمود. با توجه به شکل بلور سیلیسیم میتوان ۴ جهت <۱۰۰>، <۱۱۰>، <۱۱۱> (۲۱] میل این بلور در نظر گرفت[۱۷]-[۲۱]. تئو<sup>۱</sup> و همکاران[۲۱] با بررسی سطوح نانو سیم سیلیسیم امکان وجود سطح مقطعهای گوناگون در این نانو سیم بیان نمودند (شکل ۲–۶). همان طور که در شکل مشاهده میشود برای رشد در جهت <۱۰۱> هشت حالت و برای رشد در جهت <۱۰۰> هشت حالت و برای رشد در جهت <۱۰۰> میلیسیم است که در جهت معاهده میشود برای رشد در جهت در ۲۰۱> هشت حالت و برای رشد در جهت در ۲۰۱> یمی است که در جهت معاد رشکل ۲–۶). همان طور حالت در شکل مشاهده میشود برای رشد در جهت <۱۰۰> معاد حالت و برای رشد در جهت در ۲۰۱> هشت حالت و برای رشد در جهت در ۲۰۱> یمی است که در جهت مد نظر رشد در جهت بیدا کرده است. این سطوح جانبی نانو سیم است که در جهت مد نظر رشد یک کرده است. این سطوح جانبی مبتنی بر صفحات کریستالگرافی است. جهت <۲۱۱> بدلیل وجود یک حالت، بیشتر مورد توجه قرار گرفته است و ساخت چنین نانو سیمی برای خواص مورد نظر نسبت به سایر نانو سیمها با کنترل رشد آسان تر و ضریب اطمینان بیشتری بهره مند است. مطالعات مشابه دیگری همچون لو<sup>۲</sup> وهمکاران[۲۲] و در این زمینه صورت گرفته است و حتی نرم افزارهایی جهت دیگری همچون لو<sup>۲</sup> وهمکاران[۲۲] و در این زمینه صورت گرفته است و حتی نرم افزارهایی جهت دیگری همچون لو<sup>۲</sup> وهمکاران[۲۲] و در این زمینه صورت گرفته است و حتی نرم افزارهایی جهت دیگری همچون لو<sup>۲</sup> وهمکاران[۲۲] و در این زمینه صورت گرفته است و حتی نرم افزارهایی جهت دیگری همچون لو<sup>۲</sup> وهمکاران[۲۲] و در این زمینه صورت گرفته است و حتی نرم افزارهایی جهت دیگری همچون لو<sup>۲</sup> وهمکاران[۲۲] و در این زمینه صورت گرفته است و حتی نرم افزارهایی جهت دیگری همچون لو<sup>۲</sup> وهمکاران[۲۸] و در این زمینه صورت گرفته است و حتی نرم افزارهایی جهت دیگری همچون لو<sup>۲</sup> وهمکاران میخه شده است که می توان به نرم افزار در ۲) قابل مشاهده است.

'Teo



شکل ۲-۲. انواع سطح مقطع ممکن برای نانو سیم سیلیسیم رشد یافته در جهات <۱۱۱>،<۱۱۰>،<۱۰۰>،<۱۱۰>



شکل ۲-۲. مدل سازی نانو سیم سیلیسیم با پوش سطحی هیدروژن. الف- با نرم افزار DSViewerPro50 ب- مدل سازی با Accelrys MS Modelling 3.1

با توجه به مطالب ذکرشده در مورد اهمیت نانو سیم سیلیسیم، روشهای رشد آن و ساختار این نانو مواد، محقیق با روشهای گوناگون تجربی و شبیه سازی به محاسبه خواص مکانیکی و سایر خواص مورد نیاز پرداخته اند که در فصل بعد مروری گذرا به مواردی از این مطالعات می شود.

## فصل سوم:

مروری بر مطالعات انجام شده بر روی خواص مکانیکی نانو سیم سیلیسیم

#### ۳-۱ مقدمه

در دهه اخیر با رشد سامانه های میکرو الکترو مکانیک و سوق دادن این سامانه ها به سمت نانو الکترو مکانیک، محقیقن به بررسی خواص مواد بکار رفته در این سامانه ها و بهبود آنها هستند. یکی از پرکاربردترین مواد در این سامانه ها سیلیسیم است که دارای خواص الکتریکی و مکانیکی حائز اهمیتی است. در ادامه مروری بر بعضی از مطالعات انجام شده بر روی خواص مکانیکی سیلیسیم پرداخته می-شود.

## ۲-۳ مروری بر خواص مکانیکی محاسبه شده نانو سیم سیلیسیم

با تغییر قطر و طول در ابعاد نانو، خواص مکانیکی نسبت به حالت توده و پرحجم از اتمهای ماده تغییر قابل ملاحظه ای می نماید. لذا بدست آوردن این خواص اهمیت پیدا می کنند. محاسبه خواص ماده بر اساس حالت پرحجم و توده از اتمها، در مقیاس نانو با خطا و انحراف از واقعیت مواجه است. این انحراف بدلیل نسبت بزرگ سطح به حجم است که با کوچکتر شدن ابعاد به طور مشهود قابل مشاهده است. یک راه ساده از درک این اثر، این است که لایه ای از مواد در سطح و لبه ها، خواص مکانیکی شان با خواص کل ماده از قبیل مدول الاستیسیته و غیره... متفاوت است.

لی و رود<sup>۱</sup>(۲۰۰۷–۲۰۰۶)[۲۳–۲۴] برای بررسی اثر سطح به حجم به یک سری از مطلعات دقیق و جامع برروی نانو سیم سیلیسیم <۱۰۰> پرداختند<sup>۲</sup>. مطالعه آنها بر اساس افزایش قطر این نانو سیم بود. با محاسبه مدول یانگ، فهمیدند مدول یانگ تا قطر ۲/۵ – ۲ نانومتر با نسبت ملایمی از نسبت سطح به حجم افزایش مییابد شکل(۳–۱). بررسیها نشان داد که منشأ این رفتار تنش فشاری در

<sup>&#</sup>x27;Lee and Rudd

<sup>&</sup>lt;sup>۲</sup> در این تحقیق، نانو سیم دارای پوشش سطحی با اتم های هیدروژن است.

سطح است. برای به دست آوردن دیدی بهتر نسبت به ساز و کار در مقیاس اتمی، میتوان مدول یانگ را به دوقسمت، اولی ناشی از هسته (هسته اتم Si) و دومی سطح مشترک (اتم های سطحی Si و اتم های سطحی سیستم Si-H، H-H ) تجزیه نمود.

این تجزیه نشان میدهد، اثر سطح که در مقیاس بزرگتر از مقیاس اتمی غیر حساس بود، در این مقیاس اثر پرنگتری در مدول یانگ دارد و مدول یانگ به شدت به آن وابسته است. این نتایج براساس اصول اولیه مطابقت مطلوبی با پتانسیل های اتمی تجربی و تکنیک های محیط پیوسته دارد[۲۵]؛ به استثنای سیم های با قطر بسیار کوچک که استفاده از این روش با شکست مواجه می شود.



شکل ۳-۱. تغییرات مدول یانگ برحسب عرض نانوسیم با روش DFT(تابع چگالی)جهت مقایسه با حالت تحلیل بر اساس محیط پیوسته ذکر شده، خط ممتد بر اساس رابطه  $E = E_{bulk}^{DFT} - \frac{c}{w}$  که w عرض سیم و C=66.11 GPa/nm، رسم شده است[۲۳].

<sup>&#</sup>x27;First-principles

<sup>&#</sup>x27; Ma

<sup>&</sup>quot; Ultrathin
<۱۱۲> با قطر۴/۰ تا ۲ نانو متر بود و تغییرات مدول یانگ با دما را نیز با استفاده از روش تابع چگالی بررسی نمودند.

در حالی که نتایج لی و رود[۲۳] برای سیم <۱۰۰> قابل قبول بود، آنها نشان دادند (۲۰۰۷) که مدول یانگ در قطر سیم های مشابه، اما رشد یافته در جهات مختلف، بطور قابل ملاحظهای متفاوت است. به طور خاص، آنها پی بردند بیشترین مقدار مدول یانگ برای نانو سیم سیلیسیم <۱۱۰> است؛ در حالی که نانو سیم <۱۰۰> کمترین مقدار را دارد. نتایج این تحقیق مطابقت خوبی با کار لئو<sup>۱</sup> وهمکاران دارد(۲۰۰۸) [۲۵]که در آن نسبت پواسون در نظر گرفته شده است (شکل(۳-

قابل توجه اینکه برای محاسبه مدول یانگ باید یک تعریف یکسان از سطح مقطع نانو سیم داشته باشیم و این امکان پذیر نیست. این مشکل بدان جهت است که در حدود کوانتومی تعریف قطر و ضخامت موثر ابر الکترونی برای اتم ها بسیار سخت است. یک روش و پرکاربردترین روش انتخاب قطر، در نظر گرفتن قطر نانو سیم، حد فاصل بین دورترین سطح کراندار، اتمهای سطح خارجی است. انتخاب اتمهای هیدروژن بعنوان اتم های سطح خارجی اختیاری است.



' Leu

#### شکل ۳-۲. محاسبه تنش برحسب قطر نانو سیم[۲۵]

لئو و همکاران از روی مطالعه تغییرات خواص مکانیکی محاسبه شده نشان دادند که تابع خطای تخمینی  $\delta r_0$  در برآورد شعاع ro بدست می آید که خطا در مدول یانگ بصورت  $\frac{2\delta r_0}{r_0}$  است و در سیم- های بزرگ به صفر میل میکند( $\infty \leftarrow r_0$ ). از سوی دیگر، در نظر گرفتن قطر در محاسبه نسبت پواسون<sup>1</sup>، بسیار حساس است، به این دلیل که خطا بصورت ( $\frac{\delta r - \delta r_0}{r_0} + \frac{\delta r - \delta r_0}{r - r_0}$ ) جمله اول در شعاعهای بزرگ بی اثر می شود؛ معادی که معمولا کوچک است، می تواند قابل توجه باشد.

تحلیل نانو سیم تحت بار خمشی و کمانشی نسبتا کمتر بررسی شده است، هرچند اندازه گیری-های مبتنی بر روشهای تجربی از آن گزارش شده است. بطور نمونه طبیب آذر و همکاران(۲۰۰۵) [۲۷] که مطالعات آنها بیشتر در محدوده یک صد تا دویست نانو متر بود، با استفاده از AFM به انجام آزمایش بروی نانو سیم سیلیسیم پرداختند. آنها مدول یانگ برای نانو سیم طولی رشد یافته در جهت کریستالی [۱۱۱] برای دو قطر ۱۹۰ تا ۲۰۰ نانومتر با شرایط مرزی دو انتها ثابت و یک انتها ثابت بین کریستالی ۲۵۰۱ برای دو قطر ۱۹۰ تا ۲۰۰ نانومتر با شرایط مرزی دو انتها ثابت و یک انتها ثابت بین موا و ممکاران[۲۸] برای دو قطر ۱۹۰ تا ۲۰۰ نانومتر با شرایط مرزی دو انتها ثابت و یک انتها ثابت بین موا و مرد کردند(شکل ۳–۳). هیسن<sup>۳</sup> و همکاران[۲۸] با انجام آزمایش بروی نانوسیم-سیلیسیم مدول الاستیسیته را برابر ۲۰۰GPa محاسبه کردند. البته اشارهای به نوع نانو سیم نکردند و سطح مقطع آن را دایره فرض نمودند. نتایج این تحقیق درشکل(۳–۴) قابل مشاهده است. همچنین از این نوع آزمایشات میتوان به مطالعات هافمن<sup>۴</sup> و همکاران[۲۹] اشاره نمود. توجه کمتر به این نوع تحلیلها احتمالا ناشی از دشواری مطالعه یک نانوسیم خمیده در شبیه ازی های اتمی است

- ' Strain
- ۳ Hsin
- <sup>\*</sup>Hoffman

<sup>&#</sup>x27;Poisson's ratio



شکل ۳-۳. نمودار بار-جابجایی برای حالتی که نیرو به نقطه ای از تیر به طول x=L/4 و x=L/2 اعمال می شود[۲۷].



شکل ۳-٤. تغییر رفتار کمانشی با تصویر برداری SEM و نمودار (g)- بار بحرانی-کرنش،(h)-تنش-کرنش[۲۸]

فراتر از تغییر شکل الاستیک، مواد دستخوش تغییر شکل بدون بازگشت پلاستیک می شوند، که قبل از شکست رخ می دهد. رفتار پلاستیک برای نانوسیم سیلیسیم <۱۰۰> توسط جاستو<sup>۱</sup> و همکاران مطالعه شده است[۳۰]. همچنین منون<sup>۲</sup> نیز رفتار پلاستیک نانو سیم سیلیسیم <۱۱۱> را

' Justo

' Menon

بررسی نمود[۳۱]. این دو مطالعه مبتنی بر پتانسیل اتمی استیلینگر-وبر<sup>۱</sup>[۳۲] و جاستو[۳۳] انجام شده است.

در کششهای کوچک ٤ ، تنش بصورت خطی افزایش مییابد، همان گونه که در وضعیت الاستیک انتظار میرود؛ در حالی که در تغییر شکل بزرگتر، رفتار پلاستیک به نظر میرسد تا زمانی که در 0.10 ~ ٤ شکستگی رخ می دهد.کیزیوکا<sup>۲</sup> و همکاران بطور آزمایشگاهی نشان دادند شکست تا 2.50 ~ ٤ به تاخیر می افتد که برخلاف پیش بینی های تئوری است [۳۴]. لازم به ذکر است که مطالعات نظری با فرض خالص بودن نانو سیمها در نظر گرفته شده است؛ در حالی که سیمها در آزمایشهای تجربی، با یک لایه نازک اکسید پوشیده شده است. بنابراین مقایسه دقیق آن دشوار است. تعجب آور نیست که یک روکش سطحی با جنس متفاوت از مواد، می تواند اختلاف قابل توجه، در پاسخ خواص مکانیکی ایجاد کند به همین دلیل است که اهمیت و ضرورت پوشش سطحی در مقیاس نانو پدیدار می شود .

چی یانگ تانگ<sup>۳</sup> و همکاران [۳۵] با استفاده از مکانیک ملکولی و معادله سه بعدی ترسوف خواص مکانیکی نانوسیم سیلیسیم <۱۱۰> با قطر تقریی ۱۱/۷ و طول ۳۰۱/۴ آنگسترم به تعداد ۸۶۳۰ اتم تحت کشش محوری و فشاری با شبیه سازی دینامیک ملکولی بررسی کردند. در این شبیه سازی اعمال نیرو تا جایی که شکست پیوند رخ بدهد ادامه پیدا کرد که این از مزیتهای مهم این شبیه سازی است (شکلهای۳–۵ و ۳–۶).

<sup>&#</sup>x27;Stillinger and Weber

<sup>&#</sup>x27; Kizuka

<sup>&</sup>quot; Chi Yan Tang





شکل ۳-٦. نمودار تنش-کرنش نانو سیم سیلیسیم <۱۱۰> تحت فشار[۳۵]

مدول یانگ گزارش شده از این روش ۳۵۲GPa و بار بحرانی کمانشی N ۷- ۱/۴۶E است. این روش با گام زمانی ۲/۵ fs در حدود تعداد ۱۵۰۰۰ گام زمانی صورت گرفته است. البته با توجه به مقدار مدول یانگ گزارش شده، در مقایسه با مطالعات مشابه، نتایج این مطالعه نیازمند بررسی بیشتر است. کوکاراس<sup>۱</sup> و همکاران(۲۰۱۱) با استفاده از روابط تابع چگالی و آب اینشیو<sup>۲</sup>، و معادل قرار دادن آنها با روابط الاستیسیته، مدول یانگ را برای نانو سیم بسیار نازک [۱۰۱] با پوشش سطحی هیدروژن بدست آوردند.[۳۶]. نتایج این تحقیق در جدول۳-۱ قابل مشاهده است.

' Koukaras

<sup>&#</sup>x27; ab initio



شکل ۲-۳. سطح مقطع نانو سیم سیلیسیم ۵.45 nm², (b) 0.74 nm², (c) 1.12 nm² شکل ۲-۳.

جدول ۳-۱. محاسبات مدول یانگ نانوسیم سیلیسیم [۱۱۰] [۳۲]

Structure	Layers	No. Si atoms (Cros Sec; All)	Diameter (nm)	L <sub>o</sub> (nm)	Y (GPa)	ν	Y <sup>a</sup> (GPa)	v٩
1 (a)	10	12: 122	0.67	3.9	150	0.17	139	0.13
1 (a)	20	12; 242	0.67	7.7	145	0.09		0.12
1 (b)	10	18; 187	0.86	3.8	151	0.24	141	0.14
1 (b)	21	18; 385	0.87	8.0	148	0,11		
1 (c)	11	28; 318	1.06	4.2	155	0.20	145	0,15

و از مطالعات دیگر بروی نانو سیم سیلیسیم می توان به تحقیق موارا و آمرال<sup>۱</sup>(۲۰۰۵) ، یاهنگ جینگ<sup>۲</sup> و همکاران(۲۰۰۹) [۳۷،۳۸]، الونا فورمانچوک<sup>۳</sup> و همکاران [۵۷،۵۸] اشاره نمود .

همان طور که مشاهده شد، مطالعه بر روی خواص مکانیکی نانو سیمهای سیلیسیم در مقیاس نانو از اهمیت خاصی بهرهمند است. از طرفی مطالعات انجام شده برای نانو سیمها با طول و قطر محدود است و اکثرا رفتار مکانیکی این مواد در کشش ساده بررسی شده است.

در این پایان نامه سعی شده است با کمک مدلسازی مکانیک ساختاری<sup>†</sup> و میدانهای نیروی بین اتمی<sup>6</sup> خواص مکانیکی نانو سیم سیلیسیم از قبیل مدول یانگ، مدول برشی رفتار کمانشی و

- \* Structural mechanics approach
- <sup>°</sup> Force field interaction

<sup>&#</sup>x27; Moura and Amaral

<sup>&#</sup>x27;Yuhang Jing

<sup>&</sup>quot; Al'ona Furmanchuk

ضریب پواسون با طول و ضخامت متفاوت بین ۲۳ تا ۲۰ نانومتر بررسی شود. در ادامه رفتار کششی، پیچشی، خمشی و کمانشی یک نانو سیم منفرد هنگامی که در دسته نانو سیمهای سه تایی قرار می-گیرد بصورت منفرد در دسته نانو سیم و گروهی، مطالعه میشود. در فصل بعد اشاره ای کوتاه به انواع مدلسازی در محدوده نانو می گردد. در انتهای آن مدلسازی بکار رفته در این پایاننامه بیان میشود.

فصل چهارم:

# مروری بر انواع مدل سازی نانومواد

فصل. ٢

#### ٤-۱ مقدمه

انجام آزمایشات گران قیمت و گاها همراه با خطای بالا و عدم سهولت در فراهم کردن دستگاههای اندازه گیری در حوزه نانو سبب شده است، محققین رو به مدل سازی و شبیه سازی در این حوزه بیاورند. در این فصل به گوشه ای از انواع مدل سازی ها پرداخته می شود.

## ۲-٤ کلیات روشهای مدلسازی در حوزه نانو

ارتباط با دنیای واقعی در مقیاس نانو به دلیل هزینههای بالا و دسترسی کم برای اکثر افراد فعال در حوزه های مختلف فناوری نانو، امری ناشدنی است. بیشتر افراد در ابتدای مراحل آشنایی با فناوری در مقیاس نانو دریک فضای ذهنی سعی بر این دارند که خود را با اصول و قواعد مقیاس اتمی آشنا کنند. دنیای ذهنی و دست نایافتنی نانو را میتوان با توسعه نرم افزار های شبیه سازی واقعی، ملموس تر کرد. در جایی که استفاده از نرم افزار های شبیه سازی میتواند برای آموزش سریع افراد استفاده شود، نیاز به دستگاه واقعی نیست. برای مثال می تواند برای آموزش سریع افراد استفاده شود، نیاز به دستگاه واقعی نیست. برای مثال می تواند برای آموزش سریع افراد استفاده شود، نیاز به دستگاه واقعی نیست برای میتواند برای آموزش سریع افراد استفاده شود، نیاز به دستگاه واقعی نیست. برای مثال، این نرم افزارها می تواند تمام جزئیات کاری یک میکروسکوپ الکترونی روبشی (نانوسکوپ) را بدون نیاز به خرید دستگاه آموزش دهد و روند آماده سازی نمونه را الکترونی روبشی (نانوسکوپ) را بدون نیاز به خرید دستگاه آموزش دهد و روند آماده سازی نمونه را سرین کند. موضوعات لازم برای انجام شبیه سازی زیاد هستند و سطح کار آنها بسته به کاربردشان میتواند در حوزه های آموزش، پژوهش، آزمایشگاه و محاسبات و طراحی به کار رود. اهمیت مدل سازی در شناخت رفتار ماده در شکل (۴–۱) نشان داده شده است. اولین تلاش برای درک رفتار ماده، سازی در ماده سازی نردی را مادی ایز ماده، میتواند در حوزه های آموزش، پژوهش، آزمایشگاه و محاسبات و طراحی به کار رود. اهمیت مدل میزی در شناخت رفتار ماده در شکل (۴–۱) نشان داده شده است. اولین تلاش برای درک رفتار ماده، سازی در میزه مشاهدات آزمایشگاهی است.

اندازه گیری دقیق اطلاعات مشاهده شده متعاقبا برای توسعه مدلهایی که تحت شرایط مشابه، رفتار مشاهده شده را پیشبینی می کنند به کار می رود. مدلها برای توسعه و تکمیل تئوریها لازم و ضروری میباشند. تئوری بعد از مقایسه رفتار پیش بینی شده در شبیه سازی آزمایشات ، قابل استفاده شده است. این مقایسه از یک سو به تئوری اعتبار می بخشد و از سوی دیگر به منظور اصلاح تئوری مدلسازی دادهها، حلقه باز خوردی، مهیا میسازد. بنابراین، توسعه واقعی نظریه توصیف ساختار و رفتار مواد به شدت وابسته به شیوه ، درست مدل سازی و شبیه سازی است[۳۹].



شکل ٤-١. نمودار مراحل روند توسعه تئوری و معتبر سازی نتایج آزمایشات [۳۹]

خواص مکانیکی مواد نانوساختار می تواند توسط یک مجموعه از روشهای محاسباتی معین شود. این روش مدلسازیها همان گونه که در شکل(۴–۲) نشان داه شده، اساسا در طیف گسترده ای از طول و مقیاس زمانی محدود شده است[۳۹].

تکنیک شیمی محاسباتی که برای طول و مقیاس زمانی کوچک، جهت پیش بینی ساختار اتمی، در درجه اول بکار می رود، تئوری اصول اولیه <sup>۱</sup> است. برای طولها و مقیاسهای زمانی بزرگتر، جهت پیش بینی رفتار مکانیکی مواد و سازههای مهندسی از مکانیک محاسباتی استفاده میشود. روشهای مدلسازی شیمی محاسباتی و مکانیک محاسباتی مبنی بر اصول کاملا محرز علم و مهندسی توسعه یافته است. با این حال، در طول و مقیاس زمانی متوسط به خوبی، همانند مقیاسهای بزرگ و کوچک توسعه نیافته اند.

<sup>&#</sup>x27; First-principles theory

بنابراین، شیوههای مدلسازی چند مقیاسی ( به کار گرفته شده، امکان استفاده از مدلسازی شیمی-



شکل ٤-٢. محدوده کاربرد روشهای مدلسازی در مقیاس طول و زمان مختلف جهت تعیین خواص مکانیکی نانوسیمها

محاسباتی و مکانیک محاسباتی جهت پیش بینی ساختار و خواص مواد را فراهم آورده است. همانطور که در شکل(۴–۲) نشان داده شد، هر یک از روشهای مدلسازی در دسته وسیعی از ابزار مدلسازی مربوطه میباشند. ابزارهای مدلسازی مکانیک کوانتومی<sup>۲</sup> و نانو مکانیک<sup>۳</sup> با فرض ساختار ملکولی گسسته است. مکانیک ساختاری<sup>۴</sup> و میکرومکانیک<sup>۱</sup> براساس ساختار پیوسته ماده مفروض میباشد.

<sup>&</sup>lt;sup>\</sup> Multiscale modeling techniques

<sup>&#</sup>x27; Quantum mechanical

<sup>&</sup>quot; Nanomechanical

<sup>\*</sup> Structural Mechanics

شکل(۴-۳) ارتباط خاص بین شیوه های مدلسازی در مکانیک محاسباتی و شیمی محاسباتی را نشان میدهد[۴۰].

روشهای مدلسازی نانو مواد که بیان شد را میتوان برای مدلسازی نانوسیمها استفاده کرد. توسعه مدلسازیها بدلیل اهمیت نانو لولههای کربنی، بیشتر در این زمینه بوده است.



شکل ٤-٣. انواع روش مدل سازی نانوسیمها

# ۲-۲-۴ انواع مدل سازی

# الف – مکانیک کوانتومی

مدلهای مکانیک کوانتومی (QM) از روی اصول و قوانین اولیه ایجاد می شوند. مدلهای QM از نظر محاسباتی بسیار پرهزینه هستند. بنابراین مدلهای QM به سیستمهای کوچک محدود می شوند، کمتر از ۱۰۰ اتم، که می توانند مطالعات نانو سیمها را شدیدا محدود کنند. مدلهای QM مبتنی بر

<sup>&#</sup>x27; Micromechanical

نظریههای قانون اول (اصول اولیه) هستند. نقطه شروع QM معادله موج شرودینگر<sup>۲</sup> است. این معادله، یک معادله مقدار ویژه مرتبه دوم است که نمیتوان آن را برای هیچ سیستم ملکولی به طور دقیق حل کرد. برای ساده سازی مسئله، تقریب بورن- اپن هیمر<sup>۳</sup> اعمال میشود. این تقریب بیان می-کند که جرمهای الکترون و درنتیجه مومنتوم از نظر مقدار کمتر از هستههای سنگین است.

تعدادی از رایج ترین روشهای حل در حوزه مکانیک کوانتومی، روش اوربیتالهای ملکولی<sup>۱</sup>، روش " از ابتدا(انیشیو)<sup>۵</sup>، روش نیمه تجربی<sup>2</sup>، و تئوری تابع چگالی<sup>۷</sup> هستند. فرضیههای اوربیتال مولکولی به طور کلی برای سیستمهای پیچیده استفاده نمیشوند؛ اما برای مطالعه سیستمهای پیوند پای $(\pi)$  برای حلقههای کربن اتمی مورد استفاده قرار گرفتهاند. روشهای "از ابتدا"، روشهای بسیار دشوار و بیشتر مبتنی بر قوانین اولیه هستند. روشهای نیمه تجربی تعدادی از انتگرالها یا ترمهای معادله شرودینگر را ساده می کنند؛ اما دقت آنها مشابه روشهای "از ابتدا" است. تئوری تابع چگالی (DFT) یک روش رایج است. TPT تابع موج کامل را محاسبه نمی کند و درعوض چگالی الکترون را تعیین می کند.

# ب- روش مونت کارلو MC

مونت کارلو از دسته مدلهای احتمالاتی ریاضی است که برای پیش بینی رفتار و نتیجه یک سیستم بکار میرود. نتایج مونت کارلو ذاتا آماری و تابع قوانین احتمال است. در اغلب موارد، این روش شامل

<sup>\</sup> First principle approaches

- ' Schrödinger Equation
- <sup>\*</sup> Born-Oppenheimer approximation
- \* Molecular orbitals method
- ° ab-initio method
- ' Semi-empirical method
- <sup>v</sup> Density functional theory

بیشترین یکپارچه سازی چند بعدی در فضای نمونه است. برای تعیین خواص مواد از تکنیکهای مختلف مونت کارلو کلاسیک<sup>۱</sup>، حجمی<sup>۲</sup>، کوانتومی<sup>۳</sup> و جنبشی<sup>۴</sup> می توان استفاده کرد.

مونت كارلو كلاسيك:

این روش شامل تشکیل نمونههایی از روی توزیع تابع احتمال، برای بدست آوردن خواص ترمودینامیکی یا ساختار هایی با کمترین میزان انرژی می باشند.

مونت کار لو کوانتومی :

از حرکت به صورت تصادفی برای محاسبه انرژی های مکانیک کوانتوم و توابع موج برای حل مسائل ساختارهای الکترونی استفاده میگردد که اغلب از معادلات شرودینگر به عنوان نقطه شروع استفاده می نمایید.

مونت کارلو حجمی :

در این روش از تولید اعداد تصادفی برای تعیین حجم هر اتم و یا تحلیل های هندسی استفاده می گردد.

مونت كارلو جنبشى :

این روش از شبیه سازی فرایند با استفاده از پارامترهای مقیاس گذاری جهت رسیدن به مقیاسهای زمانی بهره می گیرد. همچنین شبیه سازی دینامیک ملکولی را هنگامی که گرفتارعوامل تصادفی می شود، در بر می گیرد.

از نظر وابستگی به زمان، روش مونت کارلو به مونت کارلو متروپلیس<sup>۱</sup> و مونت کارلو جنبشی تقسیم می شود. کاربرد مونت کارلو متروپلیس برای سیستمهای تحت تعادل است و بنابرین مستقل از

<sup>&#</sup>x27; Classical MC

<sup>&</sup>lt;sup>v</sup> Volumetric MC

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup> volumetric MC

<sup>\*</sup> Kinetic MC

زمان هستند. این شکل روش تولید با توجه به توزیع مکانیک آماری است ، در حالی مونت کارلو-سینتیک(جنبشی)، سیستم های نا متعادل را بررسی می کند[۳۹].

فورد و همکاران با استفاده از تکنیکهای مونت کارلو به مطالعه رفتار مکانیکی و فاز کوارتز، کریستوبالیت و ساختارهای زئولیت پرداختند. مدول بالک پیش بینی شده از این مدل، تطبیق خوبی با مقادیر تجربی پیدا کرده بود. آنها به این نتیجه رسیدند که این مدل میتواند برای تعیین خواص نانوساختارها سیلیکا با جزئیات اتمی بکار گرفت، چن وهمکاران از روش مونت کارلو خواص رسانش نانو سیم سلیس را بررسی کردند[۴۰].

#### ج- ديناميك ملكولى MD

شبیه سازی دینامیک ملکولی یک تکنیک برای محاسبه خصوصیات انتقال و تعادل در یک سیستم چند عضوی کلاسیک میباشد. کلمه کلاسیک به این علت بکار میرود که حرکت هستههای درون ذرات از قوانین مکانیک کلاسیک پیروی میکنند. در این روش از اثرات کوانتوم صرفنظر میگردد که تقریب خوبی برای بسیاری مسائل به شمار میرود. اما درمسائلی همچون حرکتهای چرخشی و انتقالی اتمها و ملکولهای سبک و یا حرکت ارتعاشی با فرکانسهای بالا کمی این تقریب نگران کننده خواهد بود[۴۱].

دینامیک ملکولی کلاسیک مبتنی بر قانون دوم نیوتون در حرکتهای اتمی است. نیروهای اعمال شده به اتمها از انرژی پتانسیل میان اتمها استخراج شدهاند. در نتیجه تئوری دینامیک ملکولی کلاسیک معادلات دیفرانسیل درجه دوم حرکت اتمها را با استفاده از یک الگوریتم عددی حل میکند. به عبارت دیگر، از یک الگوی انتگرال گیری زمان استفاده میکند. روشهای متعددی برای انتگرال-

<sup>1</sup> Metropolis

گیری عددی برحسب زمان وجود دارد. با این وجود، دو روش معروف الگوریتم وارلت<sup>۱</sup> و الگوریتم پیشگویی کننده-اصلاح کننده گییرز<sup>۲</sup>میباشد[۴۱].

#### د - مکانیک ملکولی MM

(MM) یک روش برای مدلسازی پیوند اتمی و نیروهای موجود در داخل و بین ملکولها است. این روش برای مطالعه گستره وسیعی از مسائل، از دینامیک DNA تا گسترش ترک در فلزات مورد استفاده قرار گرفته است و از تقریب بورن- اپن هیمر برای کاهش دادن برهمکنشهای اتمی به برهمکنشهایی که بین هسته اتفاق میافتد، استفاده می کند [۴۲]. هر اتم با اتمهای مجاور پیوندی و غیرپیوندی خود از طریق یک تابع انرژی پتانسیل برهمکنش دارد. در رایج ترین شکل، پتانسیل غیرپیوندی خود از طریق یک تابع انرژی پتانسیل برهمکنش دارد. در رایج ترین شکل، پتانسیل غیرپیوندی خود از طریق یک تابع انرژی پتانسیل برهمکنش دارد. در رایج ترین شکل، پتانسیل جفتی، هر برهمکنش توسط یک ترم جداگانه بیان میشود. معمولا این ترمها توابع چند جملهای یا مثلثاتی هستند؛ هرچند که فرمهای نمایی نیز استفاده شدهاند. این توابع پیچیدهتر برای گروه خاصی از مسائل استفاده میشود[۴۲]. رابطه ۴-۱ یک تابع انرژی عمومی معرفی می کند که اکثر پتانسیلها بر مبائل این تابع هستند. از پتانسیلهای پر کاربرد میتوان به ترسوف-برنر<sup>7</sup>، استیلن-وبر، MM] بر مبنای این تابع هستند. از پتانسیلهای پر کاربرد میتوان به ترسوف-برنر<sup>7</sup>، استیلن-وبر، MM]

$$V(r) = \sum_{bands} k_b (b - b_0)^2 + \sum_{angles} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 + \sum_{torsions} k_\varphi [cos(n\varphi + \delta) + 1] + \sum_{nonbond} \left[\frac{q_i q_j}{r_{ij}} + \frac{A_{ij}}{r_{ij}^{12}} + \frac{C_{ij}}{r_{ij}^6}\right]$$
(1-4)

<sup>&#</sup>x27; Varlet's algorithm

<sup>&#</sup>x27; Gear's predictor-corrector algorithm

<sup>&</sup>quot;Tersoff-Brenner potential

شکل (۴–۴) پارامترهای رابطه ۴–۱ را نشان می دهد. جمله اول میزان تغییرات انرژی در اثر تغییر فاصله اتم ۱–۲ را بیان می کند. جمله دوم تغیرات انرژی پتانسیل در اثر تغییر زاویه بین اتم های ۲– ۴–۳ را نشان می دهد. جمله سوم معرف تغییرات پتانسیل بین صفحاتی است که اتمهای ۱–۲ و ۳–۴ در آن قرار دارند و حول محور۲–۳ میچرخند. این جمله نیز میتواند شامل انرژی پتانسیل ناشی از تغییر زاویه صفحات اتم ۳–۴ و ۲–۳ عمود بر محور۲–۳ باشد. جمله پایانی این رابطه معرف پتانسیل ناشی از پتانسیل غیر پیوندی شامل لنارد–جونز و پتانسیل ناشی از بارهای الکتریکی است.  $b_0 \cdot k_b$ 

برای آشنایی بیشتر با انواع میدان های نیرو و کاربرد آنها می توان به مراجع[۴۴–۴۵] مراجعه شود.



شکل ٤-٤. نمایش پارامترهای رابطه ٤-۱ [٤٤]

#### ه- مدل مکانیک ساختاری

در این مدلسازی پیوندهای اتمی با المانهای مکانیکی همچون فنر، تیر، خرپا و غیره مدل میشوند و با استفاده از پتانسیل میدانهای نیرو، خواص مکانیکی این المانها بدست میآید. این مدلسازی با تقریب بسیار خوب میتواند جایگزین مناسبی برای مدلسازی دینامیک ملکولی و مکانیک ملکولی در شرایط تحلیل استاتیکی و شبه استاتیک مواد جامد باشد. اولین مدلهای ساختاری در حوزه نانولوله-های کربنی معرفی شد و این مدل سازی از سال۲۰۰۲ آغاز گردیده است[۴۶]. در روشهای مکانیک ملکولی هر مسئله مرتبط با حرکت اتمی و ملکولی را میتوان با این روشها مدل کرد؛ اما به علت حجم محاسباتی بالای آنها، این روشها معمولا به سیستمهای کوچک با عمر کوتاهتر از پیکو ثانیه تا نانو ثانیه که شامل تعداد کمی از ملکول و اتمها هستند، محدود میشوند. یک پیشنهاد، استفاده از مدلسازی مکانیک پیوسته میباشد که به علت سهولت در به کارگیری و نیاز به زمان کمتر برای تحلیل، محققان زیادی به آن رو آوردهاند. اما مدلهای بدست آمده از این دیدگاه بدلیل آنکه با خطای نسبتا ملموسی مواجه است، نمیتوانند در مقیاس نانو مورد استفاده قرار گیرند. مدل مکانیک ساختاری علاوه برنداشتن محدودیت درابعاد، از نظر زمان تحلیل نیز نیازمند زمان بسیار

بدلایل ذکر شده، در این پایاننامه از مدل ساختاری برای تحلیل خواص مکانیکی نانو سیمهای سیلیسیم استفاده شده است. در قسمت بعد میدانهای نیرو بکار گرفته شده در مدل ساختاری و مدل ساختاری نانو سیم سیلیسیم معرفی میشود.

## **3-۳ مدل سازی نانو سیم سیلیسیم با روش مکانیک ساختاری**

همان طور که در بخش ۴-۲-۱ قسمت "ه" مدل ساختاری بیان شد، مدل ساختاری با استفاده از المانهای مکانیکی و ارتباط دادن خواص المانها با میدانهای نیروی بین اتمی به تحلیل نانو مواد میپردازد. در اینجا با استفاده از میدان نیروی DREIDING و المانهای مکانیکی تعریف شده در نرمافزار ABAQUS به مدلسازی نانو سیم سیلیسیم پرداخته شده است. استفاده از المانهای نرم-افزار ABAQUS اولین بار توسط پروانه و شریعتی (۲۰۰۹) برای نانو لوله کربنی بکار گرفته شد [۴۶].

یدانهای نیرو بین اتمی را بصورت تابع انرژی پتانسیل زیر تعریف مینماید.  $E = E_{val} + E_{nb}$ (۲-۴) جمله اول در تابع انرژی نشان دهنده مجموع انرژیهای پتانسیل پیوند بین ملکولی است و جمله دوم نشان دهنده انرژیهای پتانسیل غیر پیوندی است.

$$E_{val} = E_B + E_A + E_T + E_I \tag{(7-4)}$$

انرژی پتانسیل غیر پیوندی شامل واندر والس<sup>۵</sup> (E<sub>vdw</sub>) ،الکترواستاتیک<sup>۶</sup> (E<sub>Q</sub>) ، پیوند هیدروژنی<sup>۷</sup> (E<sub>hb</sub>) است.

$$E_{nb} = E_{vdw} + E_Q + E_{hb} \tag{(f-f)}$$

در این روش معادله انرژی پیوند طبق رابطه غیر خطی مورس<sup>^</sup> و هارمونیک شده آن ارائه گردیده است.

$$E_B(R) = D_e \left[ e^{-(\alpha n R - R_e)} - 1 \right]^2 \tag{(a-f)}$$

$$E_B(R) = 1/2K_{ij}[R - R_e]^2$$
 (9-4)

در رابطه (۴–۵) که به تابع پتانسیل مورس مشهور است،  $R_e$  طول پیوند در حالت تعادل است و  $D_e$  انرژی است که در آن پیوند می شکند. رابطه (۴–۶) که هارمونیک شده رابطه (۴–۵) است،  $D_e$  انرژی است که در آن پیوند می شکند. رابطه (۴–۶) که مارمونیک شده رابطه (۴–۵) است، ارای تحلیل در محدوده جابجایی های کوچک بکار می رود. در این رابطه  $K_{ij}$  خواص پیوند بین دو اتم  $i \ e \ f_i$  مشخص می کند. در این پایان امه چون دو اتم  $i \ e \ f_i$  می است با  $K_b$  نمایش داده می -

'Bond stretch

' Bond-angle

- <sup>°</sup> Dihedral angle torsion
- \* Inversion or improper torsion
- $^{\scriptscriptstyle \diamond}$  van der Waals or dispersion
- <sup>\*</sup> Electrostatic
- <sup>v</sup> Explicit hydrogen bonds
- ^ Morse function

برای سایر میدانهای نیرو روابط بصورت زیر است.

$$E_{ijk}(\theta) = 1/2C_{ijk}[\cos(\theta) - \cos(\theta_0)]^2$$
(Y-\*)

$$E_{ijk}(\theta) = 1/2K_{ijk}[\theta - \theta_0]^2 \tag{A-F}$$

برای پتانسیل پیچشی DREIDING، رابطه (۴–۹) پیشنهاد شده است.

$$E_{ijkl}(\varphi) = 1/2V_{jk} \{1 - \cos[n_{jk}(\varphi - \varphi_{jk})]\}$$
(9-4)

و  $v_{jk}$  فرایب ثابتند. بطور مشابه نیز می توان  $p_{jk}$  و  $v_{jk}$  فرایب ثابتند. بطور مشابه نیز می توان  $\phi$  رابطه (۴–۹) رابطه هارمونیک بدست آورد:

$$E_{ijkl}(\varphi) = 1/2K_{ijkl}[\varphi - \varphi_0]^2$$
 (۱۰-۴)  
در این رابطه نیز  $K_{ijkl}$  یک ضریب ثابت است که بر اساس نوع پیوند و اتم مشخص می گردد.

بدلیل سختی محاسبه انرژی پیچش خارج از صفحه برای اتمهایی که در یک صفحه قرار ندارند، در این روش پیشنهاد شده است از رابطه هارمونیک شده میدان نیروی CHARMM' استفاده شود.

$$E_{inv}(\psi) = 1/2K_{inv}[\psi - \psi_0)]$$
 (۱۱-۴)  
(۱۱-۴) پر زاویه بین پیوند il با صفحه jik است.  $K_{inv}$  ضریب ثابت است که بر اساس نوع اتمهای که با هم  
پیوند دارند مشخص می شود.

پتانسیل لنارد-جونز بصورت زیر است:

<sup>&#</sup>x27;Improper torsion

$$E^{Lj} = D_0[\rho^{-12} - 2\rho^{-6}]$$
 (۱۲-۴)  
که در آن  $D_0$  مینه انرژی پتانسیل  
است(عمق چاه پتانسیل). در مدلسازی که در این پایاننامه صورت گرفته است بدلیل ناچیز بودن  
انرژی الکترواستاتیک در برابر سایر انرژیها و همچنین ناچیز بودن اثر انرژی پتانسیل اتمهای  
هیدروژن در سطح خارجی نانوسیم نسبت به اتمهای سیلیسیم، از اتمهای هیدروژن صرف نظر شده  
است. پارامترهای بکار رفته طبق این پتانسیل در جدول ۴-۱) ذکر شده است. بدلیل یکسان در نظر  
گرفتن اتمهای مورد تحلیل ضرایب  $K_{ijkl}$ ،  $K_{ijkl}$ ،  $K_{ijkl}$  نمایش داده می شود.

جدول ٤-١. ضرایب میدان های نیرو برای اتم Si از روش DREIDING

اتم	$K_b^1$	$K_a^2$	K <sub>T</sub> <sup>3</sup>	$K_I^4$	$\mathbf{D}_0{}^5$	$R_0^6$	$\theta_0^7$	$\varphi_{jk}$	$\psi_0$	<b>R</b> <sub>0</sub> <sup>8</sup>
Si	48.65 E-19	0.6951 E-18	6.59 E-21	0.278 E-18	2.15 E-19	0.2347	109.47	180	0	0.427
(J/ra	یچشی (ad <sup>2</sup>	ب هارمونيک پ	J/r) ۳- ضري	، پیوندی(ad <sup>2</sup>	رمونيک زاويه	.) ۲- ضریب ها <sub>و</sub>	يوندی(J/nm	ِمونيک پ	ىريب ھار	۱ – ض

۲- صریب سرمونیک پیوندی(۱۳۳۳/۵۰) ۲- صریب سرمونیک (رویه پیوندی( ۱۳۳۵) ۲- صریب عدریب سرمونیک پیچسی ( ۱۳۳۵) ۴- ضریب هارمونیک پیچشی خارج از صفحه(J/rad<sup>2</sup>) ۵- ضریب کمینه انرژی پتانسیل واندر والس(J) ۶- شعاع اتمی(nm) ۷- زاویه اولیه در زاویه پیوندی(درجه) ۸- شعاع واندر-والس(nm)

در مدلسازی به روش مکانیک ساختاری، همان طور که پیشتر گفته شد؛ خواص مکانیکی المان-ها از روی میدانهای نیرو بین اتمی محاسبه می شود. المانهایی که در این روش مرسوم است و مورد استفاده قرار می گیرد تیر، خرپا، فنر و غیره است. در این پایان نامه با استفاده از المان های تعریف شده در نرم افزار ABAQUS، مانند فنر و Connector به مدل سازی پرداخته شده است.

در المان Connector این توانایی وجود دارد تا برای هر دو نقطه در فضا خواص مکانیکی مورد نظر، بصورت رابطه ای از نیرو و جابجایی بطور خطی و یا غیر خطی تعریف شود. Connector انتخابی از نوع Cartesian + Rotation است. شکل (۴-۵) مدل استفاده شده در نرم افزار ABAQUS را نشان میدهد.



شکل ٤-٥. مدل ساختاری در نرم افزار ABAQUS

در مدلسازی با این نرم افزار، نیاز به داشتن نیرو برحسب جابجایی است. این نیرو همان نیروی

بین ملکولی است. با توجه به پتانسیل میدانهای نیروی بین اتمی ذکر شده نتیجه می شود:

$$F(R - R_e) = \frac{\partial E_{val}}{\partial R} = 2D_e[exp(-\alpha nR + R_e) - 1][exp(-\alpha nR + R_e)] \qquad (17-4)$$

$$F(R - R_e)_{Harmonic} = \left(\frac{\partial E_{val}}{\partial R}\right)_{Harmonic} = K_b[R - R_e] \tag{14-4}$$

با گرفتن مشتق از انرژی کل بین پیوند اتمی نسبت به تغیرات فاصله بین دو اتم، به رابطهای می-رسیم که بیانگر تغییرات نیرو بین دو اتم بر حسب فاصله دو اتم است (رابطه (۴-۱۳))، اگر از انرژی هارمونیک شده نسبت به فاصه مشتق گرفته شود، حاصل نیروی هارمونیک می شود. روابط (۴-۱۳) و (۲-۴) معرف نیروی پیوند(باند) دو اتم برحسب فاصله دو اتم است.

بطور مشابه نسبت به متغیرهای ( $\phi$ ،  $\phi$ ،  $\psi$ ،  $\psi$ ،  $\psi$ ،  $\phi$  ،  $\phi$ ) از انرژی کل پیوندی و غیر پیوندی مشتق گیری مىشود.

$$M_{A} = \frac{\partial E_{val}}{\partial \theta} = -C_{ijk}(\cos(\theta) - \cos(\theta_{0}))\sin(\theta)$$
(10-4)

$$M_{A_{Harmonic}} = \left(\frac{\partial E_{val}}{\partial \theta}\right)_{Harmonic} = K_a[\theta - \theta_0] \tag{19-4}$$

روابط (۴-۱۵) و (۴-۱۶) معرف گشتاور برحسب زاویه پیوندی است.

$$M_T = \frac{\partial E_{val}}{\partial \varphi} = -V_{ij}(\cos(\varphi) - \cos(\varphi_0))\sin(\varphi)$$
(14-4)

$$M_{T_{Harmonic}} = \left(\frac{\partial E_{val}}{\partial \varphi}\right)_{Harmonic} = K_T[\varphi - \varphi_0] \tag{1.1-4}$$

همان طور که مشخص است، روابط (۴-۱۷) و (۴-۱۸) مشخص کننده گشتاور پیچشی حول محور پیوند دو اتم بر حسب زاویه پیچش است. در رابطه (۴-۱۹) گشتاور پیچشی خارج از صفحه معرفی می شود:

$$M_{I_{Harmonic}} = \left(\frac{\partial E_{val}}{\partial \psi}\right)_{Harmonic} = K_{I}[\psi - \psi_{0}] \tag{19-4}$$

طبق این مدل سازی، گشتاور زاویه پیوندی با یک فنر خطی مدل شده است. فنرخطی معادل با گشتاور زاویه پیوندی نشان داده شده در شکل ۴-۶ در B برابر است با:  $(-\theta - \theta_0) = \theta \in \Phi_0$ .



بدلیل کوچک بودن تغییرات زاویه، رابطه (۴-۲۱) فرض شده است:

 $\theta = 2x/L \tag{(7.-f)}$ 

$$\frac{dE_{ijk}}{dx} = F(x) \tag{(1-f)}$$

با استفاده از رابطه (۴-۸) و (۴-۲۰) می توان نوشت:

$$F(x)=rac{4k_{ij}\,x}{L^2}$$
 (۲۲-۴) در اینجا L فاصله دو اتم ، x تغییرات طول فنر خطی است.

$$(\frac{d^2 E_{ijk}}{dx^2})_{x=x_0} = k \tag{(YT-f)}$$

$$x = 2Lsin(\theta/2) \tag{(74-4)}$$

که برطبق پتانسیل DREIDING:

$$C_{ijk} = k_{ij} / (sin(\theta_0))^2 = k_a / (sin(\theta_0))^2$$
(Ya-4)

باتوجه به رابطه (۴-۲۵) و جایگذاری در (۴-۲۳) رابطه فنر خطی هارمونیک شده برابر است با:

$$F(x) = \left(\frac{3k_{ij}}{L^2}\right)x = \left(\frac{3k_a}{L^2}\right)x \tag{(19-4)}$$



شکل ٤-٤. نمودار نیرو-جابجایی برای فنر معادل گشتاور A .Angle-Bend خط نقطه رابطه (٤-٤) B-خط چین رابطه (۲-٤) 2- خط پر رابطه غیر خطی بدست آمده از جای گذاری (٤-٢) (۲-٤)

با مشخص شدن خواص المانها برای مدلسازی نانو سیم سیلیسیم، با توجه به مطالب ذکر شده در فصل دوم، در مورد هندسه این نانو سیم، مطالعات این پایاننامه بروی سه مدل که در شکل ۴-۸ نشان داده شده است معطوف می شود. انتخاب این سه هندسه براساس کاربرد بیشتر و گزارش آزمایشگاهی منتشر شده از نانو سیم ساخته شده است.

<//>



#### شکل ٤-٨. نمونه ای از هندسه مدل شده در نرم افزار ABAQUS

برای دسته نانو سیمها، یک مدل سه تایی از نانو سیم ها انتخاب شده است (شکل ۱-۱شکل ۹-۴). در این مدل از فنر غیر خطی برای مدل کردن نیروی ناشی از پتانسیل لنارد-جونز بین نانو سیمها استفاده شده است (رابطه (۴-۲۷)). در شکل ۴-۱۰)، نمودار پتانسیل لنارد-جونز و نیرو ناشی از آن برحسب فاصله دو اتم ترسیم گردیده است. در این نمودار مشخص می شود؛ که در فاصلهای که مقدار پتانسیل کمینه مقدار خود را دارد نیرو صفر است. این همان طول پیوند واندر والس(۹۵) است.

$$F(x)_{wdv} = dE^{Lj}/dR = D_0 \left[ -(\frac{12}{R})\rho^{-12} + (\frac{12}{R})\rho^{-6} \right]$$
(YV-Y)

در جایی که نیرو، حداکثر می شود این نقطه، نقطه بحرانی یا جهش است. اثر نیروی ناشی از پتانسیل واندر-والس در فاصله ۰/۹ نانومتر بسیار ناچیز(RN F=0.00032 ای) می شود (شکل ۴-۱۰ الف). بدلیل کوچک بودن فواصل و بررسی نانو سیمهایی با طول کوتاه (کمتر از ۱ نانومتر) در مدل سازی انجام شده در این پایاننامه این فاصله ۰/۷۵ نانومتر برای سیلیسیم در نظر گرفته شده است. مقدار نیرو در ۰/۷۵ نانومتر برابر ۰/۱۰۱۱ نانو نیوتن است.

در دسته نانو سیم سهتایی، مرکز هر نانو سیم در راس یک مثلث متساوی الاضلاع قرار گرفته است. فاصله هر نانو سیم از نانو سیم مجاور بگونه ای تعیین شده است که کمترین فاصله اتمهایی که در سطح خارجی نانو سیم با نانو سیم مجاور دارند در فاصله طولی پیوند واندر والس قرار گیرد. شکل ۴-۹) نمونه ای از مدلسازی دسته نانو سیم سیلیسیم را نشان میدهد.



شکل ٤-٩. نمونه ای از مدل سازی دسته نانو سیم های سه تایی در نرم افزار ABAQUS

همان طور که در فصل سوم اشاره شد، تعین ابعاد سطح مقطع نانو سیم، مشکل است و به شدت در خواص مکانیکی موثر است. طبق روشی که در آنجا ذکر شد، سطح مقطع برای <۱۰۰> مربع و ابعاد آن مطابق بزرگترین مربع که اتمهای سطحی، مماس بر اضلاع این مربع باشد، در نظر گرفته میشود. برای <۱۱۱> و <۱۱۰> نیز به همین صورت شش ضلعی انتخاب می شود. برای محاسبه سطح مقطع <۱۱۰> با تقریب خوبی می توان سطح مقطع را دایره و قطر آن را بزرگترین قطر شش ضلعی در نظر گرفت. ولی برای سایر خواص سطح نظیر گشتاور لختی و غیره برای سطح مقطع شش ضلعی، محاسبات انجام شده است.



شکل ٤-١٠ الف- نیرو واندروالس برحسب فاصله نانومتر ب- انرژی پتانسیل واندر والس برحسب فاصله دو اتم به نانومتر

از آن جهت که خواص نانو سیم سیلیسیم در جهت رشد آن مهم است؛ محاسبه و شبیه سازی خواص مکانیکی در یک جهت (جهت رشد) متمرکز شده است. روابط مورد استفاده برای بدست آوردن خواص مکانیکی در جدول ۴-۲) ذکر شده است. در مراجع [۲۸]–[۲۳] از روابط ذکر شده در مقاومت مصالح و الاستیسیته جهت محاسبه مقدار مدول یانگ و نسبت پواسون در مقیاس نانو استفاده شده است. لذا در این پایاننامه نیز برای محاسبه مدول بررشی بطور مشابه از این روابط استفاده می شود و سایر روابط جهت مقایسه با رفتار، در حالت نانو ذکر شده است.

نوع تحليل		
کشش ساده[۴۸]	$E = (F/A)/(\Delta l/l)$	$v_i = rac{arepsilon_i}{arepsilon_j}$
خمش[۴۸]	$y = Fl^3/(3EI)$	$\theta = Fl^2/(2EI)$
[sa] •~ .	$G = Tl/(0.1406\varphi a^4)$	a
پیچس۲۲۱	$G=8.8Tl/(\varphi a^4)$	a
کمانش[۴۸]	$P_{cr} = (n\pi)^2 EI/(\mu l)^2$	$\varepsilon_{cr} = (n\pi)^2 I / (A(\mu l)^2)$

جدول ٤-٢. روابط بکار گرفته شده در تحلیلها

T نیرو محوری، A سطح مقطع نانوسیم، Δ*l* تغییرات جابجایی، I طول نانوسیم، v،G،E بترتیب مدول یانگ ، مدول برشش، ضریب پواسون، F گشتاور پیچشی ، P<sub>c</sub> بار بحرانی کمانش ، μ ضریب طول ستون که در اینجا ۰٫۵ (شرایط مرزی دو طرف گیر دار) است، *ε<sub>cr</sub> کر*نش بحرانی ستون ، n شماره شکل مود کمانش

روابط (۴-۲۸) تا (۳۱-۴) قانون هوک را برای مواد غیر همسانگرد از نوع ارتوتروپیک نشان می-دهد[۵۰]. شکل ۴-۱۱ نیز جهات کریستالگرافی نانو سیم سیلیسیم رشد یافته در سه جهت <۱۰۰>، <۱۱۰> و<۱۱۱> به تصویر می کشد.



شکل ٤-١١. جهات کریستالوگرافی نانو سیم سیلیسیم

در روابط ((۲۸-۴) تا (۳۱-۴)) {ε} بردار کرنش، {σ} بردار تنش، [C] تانسور ضرایب الاستیک، E مدول یانگ، G مدول برشی، ۷ نسبت پواسون است.

$$\{\sigma\} = [C]\{\varepsilon\}$$

$$[S] = [C]^{-1}$$

$$(\gamma \wedge - \gamma)$$

$$\{\boldsymbol{\varepsilon}\} = [\boldsymbol{S}]\{\boldsymbol{\sigma}\} \tag{(\vert \cdots - \vert \cdots)}$$

$$\begin{cases} \varepsilon_{1} \\ \varepsilon_{2} \\ \varepsilon_{3} \\ \varepsilon_{4} \\ \varepsilon_{5} \\ \varepsilon_{6} \end{cases} = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_{1}} & -\frac{\nu_{12}}{E_{2}} & -\frac{\nu_{13}}{E_{3}} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{12}}{E_{1}} & \frac{1}{E_{2}} & -\frac{\nu_{23}}{E_{3}} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{\nu_{13}}{E_{1}} & -\frac{\nu_{23}}{E_{2}} & \frac{1}{E_{3}} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{23}} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{13}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{G_{13}} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{1} \\ \sigma_{2} \\ \sigma_{3} \\ \sigma_{4} \\ \sigma_{5} \\ \sigma_{6} \end{pmatrix}$$
 (T1-F)

وزن اتمی	ثابت شبکه <sup>۲</sup> ( <b>nm</b> )	فاصله صفحات شبکه <sup>۱</sup> (nm)			dyn/cm <sup>2</sup> ضرايب الاستيک			ضریب هدایت حرارتی (cal/sec•cm•oC)	
		(1++)	(11•)	(111)	C11	C <sub>12</sub>	C <sub>44</sub>	· · · · ·	
۲۸/+۹	•/۵۴۳	•/۵۴۳	•/٣٨٣	•,٣١٣	1/T9e1T	•/FTAeIT	•/۶Y1e1Y	•.۳۵۳	

جدول ٤-٣. خواص فيزيكي سيليسيم

در این فصل مروری بر انواع مدل سازیها در حیطه نانو بیان شد و با توجه به مطالب فصل سوم در مورد ساختار هندسی نانو سیم سیلیسیم مدل ساختاری بر مبنی پتانسیل میدانهای نیرو DREIDIN در نرم افزار ABAQUS مدلسازی شد. همچنین روابط مورد استفاده در مدلسازی و محاسبه خواص مکانیکی معرفی گردید. در فصل پیش رو نتایج شبیه سازیها تحت کشش محوری، خمش، پیچش، کمانش گزارش میشود.

<sup>&#</sup>x27; Crystal plan spacing

<sup>&#</sup>x27;Lattice constant

فصل پنجم:

تحليل نتايج شبيه سازي نانو سيم سيليسيم

#### 0-1 مقدمه

خواص مکانیکی مواد تحت آزمایشهایی چون کشش، پیچش و غیره در آزمایشگاه تعیین خواص مکانیکی مواد تعیین میشود. در مقیاس نانو نیز با استفاده از نانوسکوپ و دیگر نانو ابزارها خواص مکانیکی نانو مواد در آزمایشگاه بدست میآید. این آزمایشگاه کوچک صرف نظر از هزینه نیازمند دقت بسیار بالایی در اندازه گیریها است. از طرفی ایجاد شرایط مرزی متفاوت برای هر آزمایش نیز مشکل دیگری برای چنین آزمایشهایی است. ولی با وجود مدلسازیها، محققین دیگر نگران شرایط سخت در چنین آزمایشهایی نیستند.

در این فصل ابتدا رفتار مکانیکی نانوسیم منفرد با طولها و سطح مقطعهای مختلف بررسی، سپس رفتار همین نانوسیم در کنار دو نانوسیم دیگر بصورت منفرد و گروهی رصد می شود، تا مشخص گردد نیروی ناشی از پتانسیل غیر پیوندی بین سه نانوسیم چه تاثیری بر رفتار مکانیکی آنها دارد.

# ۲-0 تحلیل رفتار مکانیکی نانو سیم منفرد سیلیسیم

#### 0-۲-1 شرایط مرزی و فرضیات

در این مطالعه نانو سیم با ضخامتهای مختلف بین ۱ تا ۴ نانومتر با طولهای متفاوت از ۴/۰ تا ۲۰ نانومتر تحت بارگذاریهای کشش محوری، فشاری، عرضی، پیچشی قرار میگیرد. با داشتن تغییرات طول و ابعاد هندسی طبق روابط جدول (۴–۲)، مدول یانگ، مدول برشی، ضریب پواسون، بار بحرانی کمانش و جابجایی عرضی بیشینه انتهای تیر محاسبه میشود. شکل (۵–۱) ضخامت نانو سیمهای مورد تحلیل را نشان میدهد. در تحلیل، نانو سیم بصورت یک تیر یکسرگیردار در نظر گرفته شده است. جدول (۵–۱) شرایط مرزی و نحوه اعمال نیرو و گشتاور را نشان میدهد. صفحات مدور نشان داده شده در ابتدا و انتهای نانو سیمها، بصورت صلب در نظر گرفته شده و برای انتقال نیرو و گشتاور بطور یکنواخت به تمام سطح نانو سیم است و در روند محاسبات هیچ اثری ندارد. لذا برای نمایش بهتر این صفحات از تصویر حذف شدهاند<sup>۱</sup>. همچنین شرایط مرزی و بار گذاری به این صفحات اعمال می شود. همانطور که در فصل چهارم بیان شد، در این مدل سازی از اثر الکترون ها صرف نظر و خواص مکانیکی برای هسته اتم که بصورت یک کره فرض شده، محاسبه گردیده است.



شکل ۵-۱. نمونه ای از ضخامتهای مدل شده نانو سیمهای سیلیسیم، ابعاد بر حسب نانو متر است.

<sup>&</sup>lt;sup>۱</sup> هندسه صفحات در روند تحلیل اثری ندارد. میتوان هندسه صفحات را مربع یا مستطیل نیز در نظر گرفت.

محاسبه نسبت پواسون در محدوده نانو و مدلسازی گسسته بسیار سخت و دشوار است از آن جهت که اندازه گیری دقیق تغییرات فاصله اتمها با توجه به تعریف نسبت پواسون امکان پذیر نیست. از یک طرف ممکن است، اتمی دقیقا در وسط نانو سیم چه ازنظر طولی و چه از نظر عرضی قرار نگیرد. همچنین ساختار نانو سیم در آن نقطه ممکن است نسبت به محور x یا y (z محور در جهت طول نانو سیم است) تقارن نداشته باشد (منظور نقطه مینیمم شدن تغییرات جابجایی عرضی اتمها، در اثر کشش طولی است). لذا سعی به عمل آمده است تا با میانیابی و یا برونیابی بین اتمهای مجاورنقطه مد نظر، ضریب پواسون محاسبه شود.

نوع تحليل	شرایط مرزی در A		شکل نمادین	نمونه مدل سازی شده		
	X	0		صفحات صلب		
	y Z	-				
کشش	$\theta_x$	0	F <= A			
	$\theta_{y}$	0				
	$\theta_z$	0				
	Х	0				
	у	-	¥ ♠			
خمش	Z	-				
عبس	$\theta_{x}$	-				
	$\theta_{y}$	0		000000000000000000000000000000000000000		
	$\theta_z$	0				
	Х	0				
	у	0	Y,			
	Z	0				
پيپس	$\theta_x$	-	_ ' <b>• •</b> <u>A</u>			
	$\theta_{y}$	0	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·			
	$\theta_z$	0				
	Х	0				
	У	0	× <b>↑</b>	1000 100 100 100 100 100 100 100 100 10		
كمانش	Z	-				
عباس	θ <sub>x</sub>	0				
	θ <sub>y</sub>	0				
	$\theta_z$	0				

جدول ۵-۱. شرایط مرزی و نحوه بار گذاری
## 0-۲-۲ کشش محوری

الف – نانو سيم <٠٠ ا>

در این تحلیل نانو سیم با شرایط مرزی ذکر شده تحت بار محوری کششی قرار می گیرد (شکل ۵–۲). با توجه به روابط بیان شده در جدول (۴–۲)، مدول یانگ برای هر نانو سیم محاسبه می شود. در نمودار (۵–۴) مدول یانگ برحسب افزایش طول نانو سیم سیلیسیم <۱۰۰> برای ضخامتهای مختلف رسم شده است. در این نمودار مدول یانگ با افزایش طول، ابتدا روند صعودی دارد. این صعود در حد فاصل ۲/۴ تا ۲/۹ نانومتر است(حد فاصل، فضای صفحه شبکه<۱۰۰>). این افزایش بدلیل فاصله بسیار کم بین اتمها <sup>ا</sup>ست و در حقیقت هیچ اتمی بین اتمهای ابتدا و انتهای تیر مورد آزمایش قرار ندارد.

با افزایش طول، روند تغییر مدول یانگ تقرییا ثابت است که با افزایش ضخامت (عرض) نانو سیم به مدول یانگ در حالت حجمی ماده<sup>۱</sup>(توده ماده) نزدیک می شود. متفاوت بودن رفتار نانو سیم با کوچکترین ضخامت (a=1 nm) بدلیل افزایش نسبت اثر سطح بر حجم نانو سیم است[۲۳]،[۲۴]. روند تغییرات مدول یانگ بیانگر این موضوع است که برای هر ضخامت از هرنانو سیم، مدول یانگ منحصر به فرد است.

بدلیل افزایش حجم محاسبات برای ضخامتهای بزرگتر، طولهای کوتاهتری از این نانوسیم بررسی شده است. لذا، با توجه به روند تغییرات مدول یانگ برای ضخامت های کوچکتر، میتوان روند تغییرات مدول یانگ را نیز برای آنها تعمیم داد.

در شکل (۵–۳ الف) تغییرات مدول یانگ بر اساس تغییرات ضخامت ترسیم شده است. شیب صعودی ابتدای نمودارها بر اثر کوچک بودن طول نانو سیم نسبت به ضخامت (عرض نانو سیم) است،

<sup>&#</sup>x27;Bulk properties

در حقیقت نانو سیم به عنوان یک صفحه است. در محاسبات با توجه به رابطه ذکر شده در جدول (۲-۴)، عملا مخرج کسر بسیار کوچک میشود؛ لذا مدول یانگ مقداری بزرگ و از مقدار حقیقی خود منحرف میشود. بدلیل عدم کاربرد این ابعاد به عنوان نانو سیم، میتوان این محدوده از نانو سیمهای بسیار کوتاه و ضخیم را از ترسیم حذف نمود. با افزایش طول مشاهده میشود مدول الاستیسیته با ضخامتهای گوناگون روند افزایشی و همگرایی به مدول تودهای ماده سیلیسیم دارد.



شکل ۵-۲. نمونه ای از نانو سیم <۱۰۰> و<۱۱۰> تحت کشش محوری (Deformation Scale factor 50)

نتایج مرجع [۵۷] همانند مرجع [۲۳ و۲۴] برای دو هندسه متفاوت از نانو سیم <۱۰۰> محاسبه و در شکل (۵–۳) شده است. در شکل (۵–۳ ب) هندسه یکسان با این پایان نامه با نشانه A معرفی شده است.

در این مرجع طول اولیه نانو سیمها برابر ۲/۲ و ۲/۳ نانومتر و اثر پوشش هیدروژن های روی سطح نیز در نظر گرفته شده است. نتایج این پایان نامه با نتایج این مرجع مطابقت مطلوبی دارد. در این مرجع علت اختلاف را در تفاوت عرض نانو سیم و دمای تحلیل بیان نموده است. هرچند که لی[۲۳] در مورد طول نانو سیمهای مورد تحلیل بطور مشخص اطلاعاتی گزارش نکرده است. این نقیصه در کار ما و دیگر محققان[۲۶] نیز دیده می شود.



شکل ۵-۳. تغییرات مدول یانگ نانو سیم سیلیسیم<۱۰۰> برحسب عرض آن: الف) در این مطالعه؛ ب) مرجع [۵۷]

آزمایشات تجربی که این مراجع به آن استناد کردهاند، مقدار مدول یانگ را برای ضخامتهای کمتر از ۱۰ نانومتر، برابر ۲±۱۸ گیگا پاسکال گزارش میکند[۳۴]. البته قابل توجه اینکه زدودن اکسید از سطح نانو سیم بسیار مهم و سخت است؛ لذا نتایج کاملا دقیق نیست.



شکل ۵-٤. تغییرات مدول یانگ نانو سیم <۱۰۰> با افزایش طول برای ضخامت های گوناگون نانو سیم

ب- نانو سيم <٠١١>

نتایج شبیه سازی نانو سیم سیلیسیم <۱۱۰> نشان میدهد، که در این نوع نانو سیم همانند نانو سیم <۱۰۰>، مدول یانگ برحسب طول روند افزایشی دارد، نمودار (۵–۵) این رفتار را نشان میدهد. در شکل (۵–۶) نیز تغییرات مدول یانگ برحسب ضخامت نانو سیم رسم شده است. (به منظور مقایسه با سایر روشها، نتایج بر حسب قطر دایره معادل سطح رسم شده است). در این نانو سیم سرعت همگرایی به سمت خواص حجمی بیشتر از نانو سیم<۱۰۰> است. ازطرفی مدول یانگ در طولهای بیشتر از ۱/۳۴ نانومتر، در محدوده ای نزدیک به هم به سمت خواص حجمی سیلیسیم میل می کند.



شكل ٥-٥. تغييرات مدول يانگ برحسب طول نانو سيم<١١٠>



شكل ٥-٦. تغييرات مدول يانگ برحسب قطر معادل سطح نانو سيم<١١٠>

نتیجه ذکر شده در شکل (۵–۶) از منبع [۳۸]، مبتنی بر روش دینامیک ملکولی، برای نانو سیم

#### ج- نانو سيم <111>

شبیه سازی آزمایش کشش ساده بر روی نانو سیم سیلیسم <۱۱۱> نشان میدهد که این نانو سیم نیز همانند دو نمونه دیگر، از طول های بسیار کوتاه با افزایش طول، با روند سریع افزایش مقدار مدول-یانگ روبرو است و سپس تغییرات ثابت می شود. نمودار مدول یانگ بر حسب طول و بر حسب قطر معادل سطح به ترتیب در شکل های (۵–۷) و (۵–۸) مشاهده می شود.

به ازای ضخامتهای کمتر از ۱ نانو متر، نانو سیم در محدوده نانو سیمهای فوق باریک قرار می-گیرد. تفاوت آشکار در مدول یانگ این بازه، در شکلهای (۵–۷) و (۵–۸) کاملا مشهود است.



شكل ٥-٧. تغييرات مدول يانگ نانو سيم <١١١> برحسب طول نانو سيم

امحاسبه دقیق مساحت نانو سیم<۱۱۰> بدلیل اینکه شکل سطح مقطع کاملا شش ضلعی نمیباشد، امکان پذیر نیست. لذا نتایج همراه با تقریب با فرض شش ضلعی حل شده است.



شکل ۵-۸. تغییرات مدول یانگ نانو سیم سیلیسیم<۱۱۱> برحسب قطر دایره معادل

٥-٢-٣ پيچش

الف- نانو سيم <٠ • ١>

در شکل (۵–۹) نانو سیم سیلیسیم <۱۰۰> تحت پیچش نشان داده شده است در ادامه نمودار مدول برشی بر حسب تغییرات طول در شکل (۵–۱۰) و تغییرات عرض در شکل (۵–۱۱) رسم شده است.



شکل ۵-۹. نمایی از شبیه سازی پیچش نانو سیم <۰۰ \> (Deformation Scale factor 50)

نتایج گزارش شده از مدول برشی نشان میدهد که در طولهای بسیار کوتاه (ورق نانو سیلیسیم)، مدول برشی با افزایش همراه است و با افزایش ضخامت به مدول برشی حجمی سیلیسیم میل میکند.



شکل ۵-۱۰. رفتار مدول برشی برحسب تغییرات طول نانو سیم <۱۰۰>

این نتایج نیز مانند مدول یانگ، بیان کننده مدول برشی منحصر به فرد برای هر ضخامت است. شکل (۵–۱۱) تغییرات مدول برشی برحسب ضخامت نانو سیم را نشان میدهد. در این شکل همگرایی تمام ضخامتها کاملا مشهود است که این رفتار عدم وابستگی تغییرات مدول برشی را به طول نانو سیم نشان میدهد.



شكل ٥-11. تغييرات مدول برشي برحسب ضخامت نانو سيم سيليسيم<100>

ب- نانو سيم <٠١١>

در شکل (۵–۱۲) نانو سیم سیلیسیم <۱۱۰> تحت پیچش نشان داده شده است. در ادامه نمودار مدول برشی بر حسب تغییرات طول در شکل (۵–۱۳) و برحسب تغییرات ضخامت (a) در شکل (۵–۱۴) رسم شده است.



شكل ٥-11. نمايي از پيچش مقطع نانو سيم <110> ( Deformation Scale factor 6 )

مدول برشی این نانو سیم برخلاف مدول یانگ در محدوده طولهای بسیار کوتاه روند نزولی دارد (شکل ۵–۱۳). این رفتار میتواند بدلیل ساختار اتمی و هندسه نانو سیم است. با افزایش طول، مقدار مدول برشی تقریبا ثابت شده و مقدار یکتایی برای هر عرض به خود اختصاص میدهد.



شکل ٥-١٣. رفتار مدول برشي برحسب تغييرات طول نانو سيم<١١٠>

نتایج نشان میدهد، رفتار نانو سیمهای <۱۱۰>، در محدوده طولهای بسیار کوتاه، کاملا مجزا از طولهای بلندتر است.

با توجه به شکلهای (۵–۱۳) و (۵–۱۱) مدول برشی این نانو سیم نسبت به نانو سیم <۱۰۰> روند صعودی سریعتری دارد؛ لذا میتوان پیش بینی نمود در این نانو سیم روند همگرایی به خواص حجمی در ضخامتهای بزرگتر اتفاق افتد.



شکل ۵-1٤. رفتار مدول برشی نانو سیم <۱۱۰>برحسب ضخامت(a)

# <u>ج- نانو سيم <۱۱۱></u>

شکل (۵–۱۵) نمونه ای از پیچش نانو سیم سیلیسیم <۱۱۱> با قطر معادل ۳/۰۶ نانومتر وطول ۵/۴ نانو متر را نشان میدهد. تعداد اتم سیلیسیم در سطح مقطع این نانو سیم ۳۳۸ و کل اتم ها ۲۰۲۸ عدد است. شکل (۵–۱۶) تغییرات مدول برشی نانو سیم <۱۱۱> برحسب طول های گوناگون را نشان می-دهد. در این نمودار در محدوده طولهای کمتر از ۲ نانومتر، مدول برشی، روند نزولی سریعتری از طولهای بلندتر دارد که میتواند علت آن ساختار هندسی و طول بسیار کوتاه این نانو سیم باشد.



شکل ۵-۱۵. نمونه ای از پیچش مقطع نانو سیم <۱۱۱> ( Deformation Scale factor 16.5 )

در همین نمودار، مدول برشی در محدوده ذکر شده (کمتر از ۲ نانومتر)، برای تعدادی از نانوسیم-های <۱۱۱> رسم شده است که می توان این رفتار را به سایر نانو سیم ها نیز تعمیم داد.



شكل ٥-١٦. تغييرات مدول برشي برحسب طول نانو سيم<١١١>

در شکل (۵–۱۷) تغیرات مدول برشی این نانو سیم برحسب تغییرات ضخامت مشاهده می شود. در این نمودار رشد سریع مدول برشی تا ضخامت ۱/۵ نانومتر و همچنین نزدیک بودن مقدار مدول-برشی نانو سیمها با طول های گوناگون کاملا مشخص است.



شکل ۵-۱۷. تغییرات مدول برشی نانو سیم <۱۱۱>برحسب ضخامت(a)

0-۲-2 نسبت یواسون

الف- نانو سيم<٠٠٠

تغییرات نسبت پواسون نسبت به ضخامت در شکل (۵–۱۸) نشان داده شده است. نسبت پواسون برخلاف مدول برشی و مدول یانگ با افزایش ضخامت روند نزولی پیدا میکند و به مقدار نسبت پواسون حجمی ماده همگرا میشود. همانطور که پیشتر ذکر شد، محاسبه نسبت پواسون در ابعاد نانو به راحتی امکان پذیر نیست. با استفاده از میان یابی و یا برون یابی، جابجایی اتمها محاسبه میشود.

برای نانو سیمهای بسیار کوتاه و عرض کم (کمتر از ۱/۵نانومتر)، با توجه به روند صعودی مقدار مدول یانگ، انتظار میرود ضریب پواسون به مقدار ۰٫۵ نزدیک شود و با افزایش ضخامت، نسبت پواسون با روند نزولی همراه است (نانو سیم به ورق سیلیسم تبدیل می شود). جهشهای مشاهده شده در نمودار شکل (۵–۱۸) بدلیل میان یابیها و عدم اندازه گیری دقیق جابجاییهای عرضی اتمهای در سطح نانو سیم است.



شكل ٥-١٨. تغييرات نسبت پواسون با تغييرات ضخامت نانو سيم<١٠٠>

ب- نانو سيم <۱۱>

همانطور که در شکل (۵–۱۹) مشاهده می شود، تغییرات ضریب پواسون نسبت به ضخامت نانو سیم<۱۱۰> همانند نانو سیم <۱۰۰> بر خلاف مدول برشی و مدول یانگ روند کاهشی دارد و به خواص حجمی سیلیسیم میل می کند.

در اینجا نیز به مانند نانو سیمهای<۱۰۰۶، برای نانو سیمهای <۱۱۰۶ با طول بسیار کوتاه (کمتر از ۵/ ۱ نانومتر)، مقدار مدول یانگ افزایش مییابد، لذا انتطار میرود ضریب پواسون نیز افزایش یابد و به حداکثر مقدار خود، یعنی نسبت پواسون گزارش شده از خواص حجمی در جهت <۱۱۰> (۲۳۵) نزدیک شود. روند افزایشی نمودار به سمت این مقدار در این بازه مشخص است. با افزایش ضخامت در طول ثابت، بدلیل تبدیل شدن نانو سیم به ورق نازک سیلیسیم، کاهش مقدار ضریب پوآسون انتظار میرود. این کاهش مسلما تا مقدار کمینه ضریب پواسون پیش میرود. در این مطالعه، مقدار نسبت پواسون برای صفحه (۰۰۱) محاسبه شده است.



شکل ٥-١٩. تغییرات نسبت پواسون نسبت به قطر معادل نانو سیم<١١٠>

با توجه به شکلهای ((۵–۱) و (۴–۱۰)) محاسبه نسبت پواسون برای صفحه مورد نظر تا قطر معادل ۱/۵ نانومتر بدلیل کوچک بودن این صفحه و نزدیک بودن نقطه مورد اندازه گیری به دو صفحه مجاور، دچار انحراف می شود هرچه طول نانو سیم بلندتر می شود، جهش در نمودار محو و مقدار آن به سمت مقدار تودهای گزارش شده، متمایل می شود.

# ج- نانو سيم <١١١>

در شکل (۵–۲۰) تغییرات نسبت پواسون نسبت به قطر معادل سطح ترسیم شده است. نوسانات موجود در نمودار مخصوصا در ابتدای نمودار برای طولهای بلندتر از ۱/۶۸ نانومتر بدلایل ذکر شده در محاسبه و اندازه گیری دقیق نسبت پواسون است. نتایج ذکر شده از منبع [۲۵] در این نمودار رفتاری کاملا متفاوت دارد. در این منبع توضیح خاصی درمورد جهت مورد بررسی در این نانو سیم، بیان نشده است، با توجه به روابط بکار برده شده در منبع مذکور، احتمالا ضریب پواسون برای حالت همسانگرد محاسبه شده است(نسبت تغییرات مساحت به مساحت اولیه). البته قابل توجه است با رجوع به نمودار مدول یانگ (شکل (۵–۷)) در محدوده ضخامت ۵/۰ تا ۱ نانومتر، با افزایش مدول یانگ کاهش ضریب پواسون انتظار میرود. البته نتایج ذکر شده از این منبع با این موضوع مطابقت ندارد.



شکل ۵-۲۰. تغییرات نسبت پواسون نسبت به ضخامت نانو سیم<۱۱۱>

شکل (۵–۲۱) نمونه ای از ساختار نانو سیم فوق نازک <۱۱۱> را نشان میدهد. در شکل (۵–۲۱ الف) (سطح مقطع این نانو سیم) محل نشان داده شده با پیکان مشخص کننده نقطه محاسبه نسبت پواسون است. در شکل (۵–۲۱ ب) کاملا عدم تقارن و نبود هیچ اتمی در روی سطح برای محاسبه نسبت پواسون مشاهده میشود. این شکل بطور گویا علل دشواری در محاسبه ضریب پواسون را بیان مینماید. با بررسی نتایج خواص این نانو سیم، پی به این موضوع برده می شود که این نانو سیم رفتاری کاملا متمایز با سایر نانو سیمهای<۱۱۱> دارد.



شکل ۲۰-۵. نانو سیم فوق نازک<۱۱۱>: الف- محل اندازه گیری نسبت پواسون درسطح مقطع نانو سیم، ب- محل اندازه گیری نسبت پواسون درامتداد طول نانو سیم

شکل (۵-۲۲) کوتاهترین نانو سیمهای مورد تحلیل را نشان میدهد. عدم محاسبه ضریب پواسون در این مدل سازی برای<۱۰۰> بدلیل وجود نداشتن یک اتم در فاصله اتمهای ابتدا و انتها است.



شکل ۵-۲۲. نمای جانبی(yz) از کوتاهترین نانو سیم های مورد تحلیل

همانطور که در فصل سوم اشاره شد، تعیین مساحت سطح مقطع نانو سیم در مقدار مدول یانگ، مدول برشی و ضریب پواسون بسیار موثر است. جدول (۵–۲) مقایسهای است بین خواص مکانیکی محاسبه شده در این پایان نامه با سایر روشها، براساس تعداد اتمهای نانو سیم سیلیسیم مورد آزمایش در هر سطح مقطع و ضحامتهای در نظر گرفته شده برای آن، می باشد.

	Si NW <100>				Si NW <110>				Si NW <111>						
Ref	No. of atom Si	Diameter (nm)	$\mathbf{L}_{0}\left(\mathbf{nm}\right)$	E (GPa)	>	No. of atom Si	Diameter (nm)	L <sub>0</sub> (nm)	E (GPa)	>	No. of atom Si	Diameter (nm)	L <sub>0</sub> (nm)	E (GPa)	>
present study	25	1.12	0.4	49.1	-	56	1.3	0.56	102	0.19	14	0.71	0.70	29.1	0.3
	49	1.56	0.4	53.4	-	84	1.55	0.56	111	0.16	38	1.05	0.70	62.7	0.2
	81	1.99	0.4	61.75	-	-	-	-	-	-	74	1.45	0.70	70.7	0.18
	121	2.42	0.4	62.45	-	-	-	-	-	-	122	-	-	-	-
	225	3.29	0.4	67	-	-	-	-	-	-	364	-	-	-	-
	9	0.68	-	29.4	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	21	1.03	-	57.57	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	25	1.12	-	56.35	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Lee	49	1.56	-	71.05	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
[23]	57	1.68	-	79.62	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	109	2.31	-	89.42	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	205	3.16	-	96.77	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	405	4.42	-	104.1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	21	0.81	-	94	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	25	0.86	-	96	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
Lee	57	1.46	-	103	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
[24]	109	2.11	-	106	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	205	2.93	-	111	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	405	4.22	-	116	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	9	0.43		35	-	48	0.84	-	135	-	-	-	-	-	-
	16	0.65		70	-	108	1.38	-	155	-	38	0.81	-	122.5	-
	25	0.87		83	-	-	-	-	-	-	74	1.22	-	135	-
Ma [26]	36	1.09		98	-	-	-	-	-	-	122	1.62	-	149	-
	49	1.30		103	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	64	1.53		109	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	81	1.74		115	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	100	1.96		118	-	-	-	-	-		-	-	-	-	-
	-	-	-	-	-	6	0.66	0.4	139	0.23	14	0.65	0.95	43	0.05
Leu [25]	-	-	-	-	-	24	1.3	0.39	145	0.28	38	1.06	0.95	100	0.09
	-	-	-	-	-	54	1.94	0.39	150	0.25	74	1.47	0.95	118	0.11
	-	-	-	-		96	2.58	0.39	153	0.2	122	1.87	0.95	131	0.12
Kouka ras [34]	-	-	-	-	-	318 <sup>1</sup>	1.06	4.2	155	0.2	-	-	-	-	-

جدول ٥-٢. مقایسه مدول یانگ وضریب پواسون محاسبه شده در این پایان نامه با سایر روشها

اتعداد اتمها در سطح مقطع نانو سیم برابر ۲۸ عدد است.

نتایج تجربی، مقدار مدول یانگ را برای ابعاد طولی حدود ۱۰ میکرومتر و ضخامت ۲۵ نانومتر، بین ۲۵۰–۹۳ گیکا پاسکال گزارش می نمایند[۲۷]. اندازه گیری های مشابه مقدار مدول یانگ را برای نانو سیم سیلیسیم <۱۱۰> با ضخامتی در محدوده ۱۰ تا ۷۰ نانومتر و طول ۱۰۰ نانومتر، ۵۵ تا ۸۰ گیگاپاسکال نشان میدهد(شکل ۵–۲۳ الف)[۵۵]. لی [۵۶] نیز مقدار مدول یانگ نانو سیم سیلیسیم <۱۱۰> را در محدوده ضخامت ۲۰۰ – ۱۲ نانومتر با طولی به بلندی ۱۳ میکرومتر، ۲۵ تا ۱۷۰ گیگا-پاسکال گزارش می کند(شکل ۵–۳۲ ب). با توجه به نمودارهای (۵–۲۳) رابطه (۵–۱) را میتوان بر این دادهها برازش نمود.

 $F(x) = ax^b$  (۱-۵) در این رابطه x تغیرات ضخامت و مقدار a و b برای شکل (۵–۲۳) به ترتیب ۱۸/ ۱۹– ۲۸/۰ و در شکل (۵–۲۳ ب) به ترتیب ۲۹/۴۸–۲۲/۰ است.



شكل ٥-٢٣. مقدار مدول يانك محاسبه شده: الف، مرجع [٥٥] ب، مرجع [٥٦]

نتایج شبیه سازی با روش دینامیک ملکولی مقدار مدول یانگ برای نانوسیمهای <۱۰۰>، <۱۱۰> و <۱۱۱> با ضخامت به ترتیب ۴/۰۶، ۸۸/۳ و۳/۸۶ نانو متر را به ترتیب ۱۱۰/۴، ۱۲۱/۲، ۱۰۷/۳ گیگا پاسکال بیان می کند. طول نانو سیمها برابر ۳۲٫۸ نانو متر در نظر گرفته شده است[۵۴]. در (شکل ۵–۲۵) جهت مقایسه نتایج برای نانو سیم سیلیسیم <۱۰۰>، رابطه ۵–۱ به همراه نتایج سایر روش ها و این پایان نامه، بر اساس قطر معادل سطح مقطع رسم شده است. در این شکل نتایج تجربی اختلاف زیادی با نتایج حاصل از شبیهسازیها دارد. علت این اختلاف در هیچ یک از منابع مذکور بیان نشده است. روش محاسبه مدول یانگ براساس اندازه گیری فرکانس طبیعی و آزمایش کشش است. امکان یکنواخت نبودن سطح مقطع نانو سیم و همچنین خطای اندازه گیری در این آزمایشات میرود. همانطور که در شکل ۵–۲۵ مشاهده میشود، نتایج این پایاننامه با نتایج حاصل از شبیه سازی دینامیک ملکولی مطابقت مطلوبی دارد.



شکل ۵-۲٤. نتایج مقدار مدول یانگ نانو سیم <۱۱۰> از آزمایشات تجربی و شبیه سازی بر حسب قطر معادل سطح

## 0-۲-0 كمانش

هدف از تحلیل کمانشی بررسی میزان انحراف از رابطه اولر در نانو سیم های سیلیسیم است. شکل (۵-۲۶) نمونه ای از رفتار کمانشی نانو سیم های <۱۱۱>، <۱۰۰>، <۱۰۰> را نشان میدهد.



شکل ۵-۲۵. نمونه ای از کمانش نانو سیم مدل سازی شده در ABAQUS

الف- نانو سيم <٠٠٠>

شکل (۵- ۲۶) رفتار کمانشی نانو سیم <۱۰۰> را به تصویر میکشد. در شکل روند تغییر بار بحرانی برحسب نسبت طول به عرض (L/a) نشان داده شده است<sup>۱</sup>. در این نمودار، مقدار بار بحرانی کمانشی برای دو نانو سیم با کمترین ضخامت (۱ نانومتر) و بیشترین ضخامت (۲٫۱۵ نانومتر) با استفاده از رابطه کمانشی اولر برای طولهای گوناگون رسم شده است. رابطه اولر در جدول (۴-۲) ذکر شده

هدف از بیان نتایج برحسب نسبت L/a به منظور مقایسه بهتر بین نتایج است و همچنین برای بررسی بار بحرانی طبق رابطه اولر نیاز به محاسبه ممان دوم سطح در اشکال هندسی پیچیده نیست.

است. برای استفاده از این رابطه مدول یانگ GPa ۱۲۲/۵ در نظر گرفته شده است<sup>۱</sup>. با بررسی نمودار پی به این موضوع برده میشود که برای طولهای کوتاه، با افزایش ضخامت، بار کمانشی از رابطه اولر منحرف میشود (سیم فوق نازک و کوتاه) و اگر رفتار نمودار برای یک عرض خاص با افزایش طول بررسی شود؛ دیده میشود با افزایش طول انحراف از رابطه اولر کاهش می یابد و تا جایی پیش میرود که بر این رابطه مماس می گردد.



شکل ۵-۲٦. تغییرات بار بحرانی نانو سیم <۱۰۰> بر حسب نسبت L/a

نتایج حاصل از تحلیل این نمودار نشان میدهد، زمانی که نسبت طول به عرض بزرگ می شود، نتایج به رابطه اولر میل می کند. این به خاطر کاهش اثر اتمهای سطحی و افزایش اتمها در حجم است که به معنی خواص حالت تودهای ماده است. علاوه براین در نسبتهای کمتر از ۱۰ و بیشتر از ۰/۵

۱ مدول الاستيسيته حجمي سيليسيم كه در جهت <۱۰۰> بدست آمده است [۵۳].

رفتار کمانشی نانو سیم، از آنچه که محاسبات نشان میدهد منحرف می شود. بهتر است مطالعات تحلیل کمانشی نانو سیم، معطوف به این ابعاد شود.

نتایج ذکر شده از مرجع[۵۴] در این نمودار برای ضخامت ۴/۰۶ نانومتر با طولهای ۱۶۵۲ نانو-متر است. البته هندسه نانو سیم مورد نظر با هندسه در نظر گرفته شده در این پایان نامه متفاوت است. وجوه این نانو سیم از صفحات (۱۰۰) و (۱۰۰) تشکیل شده است در حالی که وجوه نانو سیم <۱۰۰> در این پایان نامه همگی داری صفحات (۱۱۰) است(شکل ۴–۱۰). بطور مشابه با رسم نمودار اولر برای این نتایج مشاهده میشود نمودار در نسبتهای L/a کوچکتر از ۱۰ از رابطه اولر منحرف میشود که این رفتار در نتایج بدست آمده در این پایان نامه نیز دیده میشود.

# ب-نانو سيم<٠١١>

تحلیل کمانش بروی نانوسیم سیلیسیم رشد یافته در جهت <۱۱۰> نشان می دهد، انحراف از رابطه کمانش اولر در مقادیر کمتر از نسبت طول به ضخامت ۸، رخ می دهد (شکل ۵–۲۷). با فرض شش ضلعی بودن سطح مقطع انتظار می رود کمانش در صفحه y<sup>۲</sup> (جایی که ممان اینرسی کمینه مقدار خود را دارد) رخ دهد؛ ولی نتایج نشان می دهد که کمانش در صفحه xz حاصل می شود (شکل ۴–۸). با توجه به نتایج و شکل سطح مقطع، فرض شش ضلعی بودن برای این نانو سیم در کمانش صحیح نمی باشد؛ لذا پیشنهاد می شود هشت ضلعی در نظر گرفته شود. جهت محاسبه بار بحرانی کمانشی، مدول یانگ در نظر گرفته شده در این تحلیل طبق مدول توده ای گزارش شده [۵۵] ۴/۸۹ است. نتایج کمانش از روش دینامیک ملوکولی [۵۴] برای نانو سیم با قطر معادل سطح ۲/۰۶ نانومتر است.

ا صفحات تعريف شده طبق شكل (۴–۸)



شکل ۵-۲۷. تغییرات بار بحرانی نانو سیم <۱۱۰> بر حسب L/w

نتایج تجربی[۲۸] مقدار بار بحرانی بر حسب ممان بر مجذور طول بین ۵ تا ۶۰ نانو نیوتن در ابعاد میکرو با قطر معادل۴۰-۹۰ نانومتر گزارش بیان میکند (شکل ۵-۲۸).



شکل ۵-۲۸. بار بحرانی کمانشی برحسب (10/Lo^2) (ابعاد میکرومتر)

اگر تابعی به فرم رابطه (۵–۱) بر این نتایج بر حسب، طول به قطر معادل سطح برازش شود، با فرض قطر معادل ۶۵ نانومتر مقدار a=-1.86 و b=62934 بدست میآید. این تابع مقدار بار بحرانی را در نسبت L/w برابر ۹/۷، ۹۰۰ نانونیوتن محاسبه می نماید. بار بحرانی طبق رابطه اولر در این نسبت، ۲۱۹۰۰۰ نانو نیوتن است. البته این اختلاف غیر منطقی ریشه در تفاوت محاسبات در حوزه نانو و میکرو دارد. تابعی که برازش شده است بر اساس مقادیر در ابعاد میکرو است و از طرفی در محاسبه برازش تابع بر مقادیر، قطر نانو سیم بطور فرضی، یکنواخت در نظر گرفته شده است و نتایج بار بحرانی در مرجع مذکور بدون اشاره به نوع قطر بطور کلی بیان شده است.

#### ج- نانو سيم <111>

بطور مشابه نمودار بار بحرانی کمانشی بر حسب نسبت ضخامت (۵) به طول نانوسیم (L)، برای نانو سیم <۱۱۱> رسم شده است (شکل ۵-۲۹). انحراف از رابطه اولر برای نسبت های کمتر از ۱۰ کاملا گویا است. بدلیل حجم بالای محاسبات برای ضخامتهای بزرگ، نمودارها، برای محدودهای از نسبت-های طول به ضخامت، رسم شده است که با توجه به روند کلی نمودار میتوان رفتار آنها را مشابه ضخامتهای کوچکتر رسم نمود.

با استفاده از نتایج و برازش منحنی بر نتایج تابعی به فرم رابطه (۵–۲) بدست میآید.

 $F(x) = ae^{b(x)}$  (۲-۵) در رابطه مذکور (nm) طول نانو سیم است و (F(nN) بار بحرانی کمانشی است. a و d ثابتهایی است که از برازش بدست میآید. مقادیر a و d برای ضخامت ۲/۹۱ نانومتر به ترتیب ۳۳۷ و ۲۰۱۰-بدست میآید و این مقادیر برای ضخامت ۶/۰۶ نانومتر به ترتیب ۶۴۹ و ۶۰/۰- محاسبه میشود(شکل ۹-۰۳). در نرم افزار ABAQUS نتایج کمانش از روش اختلالات خطی<sup>۱</sup> بدست میآید و مقدار بار بحرانی کمانشی مربوط به یک مسئله مقدار ویژه است.

نتایج ذکر شده از مرجع [۵۴] برای ضخامت ۳/۸۸ نانومتر میباشد که با توجه به هندسه، معادل ضخامت ۴/۰۶ نانومتر در این پایان نامه است.

<sup>&#</sup>x27;Linear Perturbation



شکل ۵-۲۹. تغییرات بار بحرانی کمانشی نانو سیم <۱۱۱> بر حسب L/a

طبق نظر این مرجع رفتار بار بحرانی مطابقت مطلوبی با رابطه اولر دارد. در مرجع مذکور مقدار مدول یانگ ۱۰۷ گیگا پاسکال محاسبه شده است. نتایج این پایان نامه نشان میدهد در نسبتهای L/a (طول به ضخامت) کمتر از ۱۰ مقادیر بار بحرانی از رابطه اولر منحرف میشود. در این نسبتها مقادیر مدول یانگ وابسته به طول و ضخامت است. در جدول ۵–۳ مقادیر مدول یانگ طبق رابطه اولر برای ضخامت ۴/۰۶ نانومتر محاسبه شده است. قابل توجه است مقادیر بدست آمده در این جدول بطور تقریبی است. مقدار ممان دوم سطح برای ضخامت ۴/۰۶ نانومتر ۴mm ۵۵/۰ و برای ضخامت اینگ برای ضخامت ۱۰۶ نانومتر ۱۳۰ گیگا پاسکال پیشبینی میشود.

كمانشي	باربحراني	جهت محاسبه	رابطه اولر	یانگ با استفاده از	٥-٣. مقادير مدول	جدول
6			11 .1			<b>U</b> / · ·

	6 6 7 10 1			· /* · · ·	•
L/a	3.94	4.92	5.9	6.88	7.87
Jing <sup>1</sup> [54] E(GPa)	71.43	100.56	130.32	154.85	180.2
Present Study E(GPa)	115.56	126.056	126.81	120.59	110
1 V 1					

1- Yuhang Jing[54]

در شکل ۵–۳۰ نکته قابل توجه این است که طبق رابطه اولر مقدار بار بحرانی برای نسبتهای طول به ضخامت کمتر از ۵، به شدت افزایش مییابد و این به دلیل کاهش طول یا افزایش ضخامت است. با انحراف از رابطه اولر، این افزایش شیب در نمودار ممکن است با تاخیر رخ دهد، چون یک رفتار طبیعی است و انتظار چنین افزایشی میرود؛ ولی چنین رفتاری در بار بحرانی گزارش شده از مرجع [۵۴] دیده نمی شود.



شکل ۵-۳۰۰. تغییرات بار بحرانی کمانشی طبق رابطه (۵-۲) برحسب نسبت L/a

#### 0-۲-٦ خمش

الف- نانوسيم <٠٠٠>

شکل (۵–۳۱) نمونه ای از مدلسازی نانو سیم سیلیسیم، در نرم افزار ABAQUS تحت تحلیل خمشی است. در نمودار شکل (۵–۳۲) جابجایی عرضی انتهای آزاد تیر(نانو سیم <۱۰۰>) بر حسب طول رسم شده است. برای مقایسه بین رفتار نانو سیم در این ابعاد، نموداری برحسب جابجایی بیشینه طبق رابطه ذکر شده در جدول (۴–۲) برای کمینه عرض و بیشینه عرض نانو سیم رسم گردیده است. انحراف از رابطه ذکر شده برای نانو سیمها با عرض(ضخامت) کمتر از ۳/۶۸ نانومتر کاملا مشهود است. شکل (۵–۳۳) نمودار جابجایی عرضی نانو سیم <۱۰۰> بر حسب تغییرات ضخامت (عرض) نانو سیم <۱۰۰> نشان میدهد. همان طور که انتظار میرود، با افزایش ضخامت جابجایی کاهش مییابد. محدوده بحرانی<sup>۱</sup> در بررسی جابجایی عرضی بین ضخامت های ۵/۰ تا ۴ نانومتر است.

جابجاییهای عرضی زیاد بیانگر تغییر شکل نانو سیم در اثر بار خمشی است. یعنی مقاومت نانو سیم تحت بار اعمالی شکسته میشود. هدف از ذکر این نتایج نشان دادن رفتار نانو سیم تحت بار-گزاری خمشی است.



<sup>&</sup>lt;sup>۱</sup> منظور از محدوده بحرانی در اینجا ناحیه ای است که جابجایی عرضی بیشینه، از روابط جابجایی عرضی بیشینه بدست آمده از روش های مقاومت مصالح منحرف می شود.



شکل ۵-۳۲. تغییرات جابجایی عرضی بیشینه تحت بار وارده به انتهای آزاد نانو سیم <۱۰۰> برحسب طول



شکل ۵-۳۳. رفتار جابجایی عرضی نانو سیم سیلیسیم<۱۰۰> بر حسب تغییرات ضخامت(عرض)

در شکلهای (۵–۳۴) و (۵–۳۵) ترسیم بیشینه جابجایی عرضی نانو سیم <۱۱۰> (در جهت محور x) به ترتیب برحسب طول و ضخامت نانو سیم نشان داده شده است. برای نانو سیم با ضخامت ۳٫۶۸ نانومتر با طولهای متفاوت، مقادیر بدست آمده از شبیه سازی ها برای این نانو سیم، تقریبا منطبق بر رابطه ذکر شده برای جابجایی عرضی بیشینه است.



شکل ۵-۳٤. تغییرات جابجایی عرضی بیشینه تحت بار وارده به انتهای آزاد نانو سیم <۱۱۰> بر حسب طول

در این نانو سیم با افزایش طول در ضخامتهای کوچک، تسلیم نانو سیم <۱۱۰> تحت بار خمشی مشاهده می شود که این رفتار نسبت به نانو سیم <۱۰۰> درطول های کوتاه تری رخ می دهد. این رفتار ریشه در ساختار هندسی این نانو سیم دارد.



شکل ٥-٣٥. رفتار جابجایی عرضی نانو سیم سیلیسیم<١١٠> بر حسب تغییرات ضخامت

ج – نانو سيم <111>

در شکلهای (۵-۳۶) و (۵-۳۷) نیز تغییرات جابجایی برحسب طول و ضخامت نانو سیم <۱۱۱> رسم گردیده است. نتایج نشان میدهد که با افزایش ضخامت، بیشینه جابجایی عرضی انتهای تیر به نتایج حاصل از، رابطه ذکر شده در جدول (۴-۲) همگرا می شود.

بطور نمونه برای ضخامت ۲/۹۱ نانومتر رابطه ۵-۳ برازش می شود. همانطور که در شکل ۵-۳۵ مشاهده می شود، در یک ضخامت ثابت بطور مثال ۲/۹۱ نانومتر نتایج جابجایی عرضی بیشینه برای طول های کوتاهتر از ۷ نانومتر از رابطه ذکر شده در جدول ۲-۴ پیروی می کند و هر چه طول بلندتر می شود، دچار انحراف می گردد. اگر این ضخامت را با ضخامت کوچکتر مقایسه شود به این موضوع پی برده می شود که با افزایش ضخامت طول های بلندتری از رابطه ذکر شده در جدول ۲-۴ تبعیت می کند؛ یعنی با افزایش ضخامت نتایج شبیه سازی به رابطه مذکور می گراید.

$$F(x) = ax^b \tag{(7-\Delta)}$$

در رابطه ۵-۳ مقدار a=0.0034 و مقدار b=2.18 برای ضخامت ۲/۹۱ نانومتر است. این تابع بر مقادیر طول- جابجایی عرضی برازش شده است.



شکل ۵-۳۲. تغییرات جابجایی عرضی بیشینه تحت بار وارده به انتهای آزاد نانو سیم <۱۱۱> بر حسب طول



شکل ۵-۳۷. رفتار جابجایی عرضی نانو سیم سیلیسیم<۱۱۱> بر حسب تغییرات ضخامت

# **0-7** تحلیل رفتار مکانیکی نانو سیم منفرد در یک دسته سه تایی

## ٥-٣-١ شرايط مرزى و فرضيات

تمام فرضیات در نظر گرفته شده برای نانو سیم منفرد برای دسته نانو سیمها نیز در نظر گرفته می-شود. اعمال بار فقط به یک نانو سیم، با همان شرایط مرزی نانو سیم منفرد در هر تحلیل است و شرایط مرزی برای دو نانو سیم دیگر، دو انتها ثابت میباشد(جدول ۵–۴). شکل (۴–۹) هندسه و چیدمان نانو سیمها را در یک دسته سه تایی نسبت به هم نشان میدهد. همانطور که در انتهای فصل چهارم بیان شد

نوع تحليل	شرایط مرزی در A		شکل نمادین	نمونه مدل سازی شده تحت بار <i>گ</i> ذاری		
كشش	x y	0	z 🚽			
	$\frac{z}{\theta_x}$	- 0		000000000		
	θ <sub>y</sub>	0		362233338		
	X	0				
خمش	у	-	z d	X888888		
	$\frac{z}{\theta_x}$	-		0000000		
	$\theta_y$	0	F JA			
	$\theta_z$	0				
	Х	0				
	у	0	_ <sup>Y</sup> ♠□□			
ىىچەر	Z	0	z 🛶			
Ŭ ÷	$\theta_x$	-	T ++- A			
	$\theta_y$	0				
	$\theta_z$	0				
كمانش	Х	0	Y m			
	У	0	z 🚽			
	A Z	-				
	$\theta_{\rm v}$	0	F => A			
	θ <sub>z</sub>	0				

جدول ۵-٤. نحوه شرایط مرزی و بارگذاری در دسته نانو سیم

در تحلیل، نیروی ناشی از پتانسیل غیر پیوندی واندروالس (لنارد-جونز) بین اتمهای هر نانو سیم با نانو سیم مجاور در نظر گرفته شده است. شعاع بی اثر شدن این نیرو طبق شکل(۴–۱۰)، ۷۵/ ۰ نانومتردر نظر گرفته شده است.

## 0-۳-۲ کشش محوری

الف – نانو سيم <١٠٠>

در تحلیل کشش محوری، طبق شرایط مرزی مفروض در جدول (۵–۴) نیروی متمرکز محوری، به نانو سیمی که شرط مرزی انتهای آن آزاد است، وارد می شود. در این تحلیل با توجه به اثر نیروهای ناشی از پتانسیل واندر-والس انتظار کاهش جابجایی طولی (ΔL) برای نانو سیم می ود. جهت مقایسه و ملموس شدن کاهش این جابجایی، نتایج مربوط به تغییرات جابجایی طولی نانو سیم منفرد <۱۰۰> در شکل (۵–۸۳) و در شکل (۵–۳۹) همین تغییرات برای دسته سه تایی نانو سیم ترسیم شده است. قابل توجه اینکه بدلیل حجم زیاد محاسبات، مخصوصا در حالت دسته نانو سیم، محدوده ترسیم نمودارها در این حالت نسبت به نانو سیم منفرد کمتر است.

با مقایسه دو نمودار همان طور که انتظار میرود، جابجایی محوری، در حالت دسته نانو سیم با کاهش مواجه است. البته این کاهش برای نانو سیمها با عرضهای کوچکتر بیشتر است و هر چه عرض نانو سیم در طول ثابت افزایش مییابد، نسبت جابجایی در حالت دسته نانو سیم به حالت منفرد به عدد یک می گراید. محدوده بحرانی <sup>۱</sup> برای بررسی دسته نانو سیم، عرضهای کمتر از ۲ نانو متر است.

با بررسی جابجایی طولی در یک عرض ثابت، روند کندی در افزایش جابجایی طولی درحالت گروهی نسبت به حالت منفرد مشاهده می شود.

ا منظور محدوده ای است که نانو سیم قرار گرفته در یک دسته سه تایی، رفتاری متمایز با حالت منفرد دارد.



شکل ۵-۳۸. تغییرات جابجایی نانو سیم منفرد <۱۰۰> در تحلیل کشش محوری



شکل ۵-۳۹. رفتار جابجایی نانو سیم منفرد <۱۰۰> در مجاورت با دو نانو سیم دیگر<۱۰۰>، در تحلیل کشش محوری

ب- نانو سيم <۱۱۰>

شکل (۵–۴۰) نمودار تغییرات جابجایی محوری نانو سیم سیلیسیم <۱۱۰> در حالت منفرد را نشان میدهد. در ادامه، در شکل (۵–۴۱) تغییرات جابجایی همین نانو سیم در کنار دو نانو سیم مشابه دیگر رسم شده است. محدوده بحرانی این نانو سیم برای قطرهای معادل سطح کمتر از ۲ نانومتر است. در این محدوده میزان جابجایی طولی در دسته نانو سیم کاهش قابل توجه ای دارد که با افزایش ضخامت، مقدار اختلاف جابجایی حالت منفرد با گروهی، به کمترین مقدار خود میگراید. این رفتار نیز مشابه نانو سیم <۱۰۰> است.

در یک عرض ثابت با افزایش طول روند افزایش جابجایی طولی در حالت گروهی نسبت به حالت منفرد به کندی صورت می گیرد. با افزایش طول افزایش، در حقیقت سطح جانبی افزایش می یابد. پر-واضح است که با افزایش سطح جانبی در حقیقت اثر نیرو های واندروالس بیشتر می شود. در طول های بسیار بلند اثر این نیرو ناچیز می شود.



شکل ۵-٤. تغیرات جابجایی نانو سیم منفرد <۱۱۰> در تحلیل کشش محوری



شکل ۵-٤١. رفتار جابجایی نانو سیم منفرد <١١٠> در مجاورت با دو نانو سیم دیگر<١١٠>، در تحلیل کشش محوری

ج- نانو سيم < ۱۱۱>

باتوجه به شکلهای (۵-۴۲) و (۵–۴۳) برای نانو سیم سیلیسیم <۱۱۱>، می توان محدوده بحرانی با قطرهای معادل کمتر از ۲/۵ نانومتر را برای تحلیل کشش محوری در نظر گرفت.

در این نانو سیم نیز همانند دو نانو سیم ذکر شده، در یک عرض ثابت در حالت گروهی با افزایش طول، روند افزایش تغییرات طولی در اثر بار محوری، به کندی نسبت به حالت منفرد رخ می دهد. اثر نیروی ناشی از پتانسیل واندر والس در این نانو سیم بیشتر است و سبب افزایش محدوده بحرانی تا قطر معادل سطح ۲/۵ نانومتر شده است. بطور حتم ساختار هندسی این نانو سیم و نحوه چیدمان در حال دسته سه تایی نسبت به دو نانو سیم دیگر منجر به این نتایج شده است.

کاهش ناگهانی مقادیر در نمودار(۵–۴۳)، در طول ۱/۶۴ نانومتر، غیر منطقی و احتمالا خطای محاسباتی است.


شکل ۵-21. تغییرات جابجایی نانو سیم منفرد <۱۱۱> در تحلیل کشش محوری نسبت به قطر معادل سطح



شکل ۵-٤٣. رفتار جابجایی نانو سیم منفرد <۱۱۱> در مجاورت با دو نانو سیم دیگر<۱۱۱>، نسبت به قطر معادل سطح در

#### تحليل كشش محورى

#### **0-۳-۳ پیچش**

در این تحلیل مطابق شرایط مرزی جدول های (۵–۴) و (۵–۲) نانو سیم تحت ممان پیچشی قرار می-گیرد و میزان تغییرات زاویه پیچش در حالت منفرد و دسته سه تایی محاسبه و نتایج آن بر اساس قطر معادل سطح نانو سیم منفرد بیان می گردد.

#### الف – نانو سيم <٠٠٠>

بطور مشابه با رسم میزان تغییرات زاویه پیچشی برای نانو سیم <۱۰۰> بطور منفرد و گروهی در مجاورت ۲ نانو سیم دیگر، نتایج نشان می دهد میزان تغییرات زاویه پیچش در حالت گروهی با کاهش مواجه است که با افزایش ضخامت در طول ثابت این تغییرات ثابت و با حالت منفرد یکی می شود. شکلهای (۵–۴۴) و (۵– ۴۵) به ترتیب تغییرات زاویه پیچش نانو سیم <۱۰۰> در حالت منفرد و گروهی را نشان می دهد. محدوده بحرانی بررسی دسته نانو سیمهای <۱۰۰> در تحلیل پیچشی همانند کشش محوری عرضهای کمتر از ۲ نانومتر است. برای یکسان سازی در پیچش، نتایج تغییرات زاویه پیچش بر اساس قطر معادل سطح نانو سیم منفرد نوشته شده است.

پدیده ای که در نتایج این تحلیل مشاهده می شود، حد فاصل قطرهای ۱ تا ۲ نانو متر تقعر نمودار درحالت منفرد مثبت است؛ ولی در حالت گروهی از طول های بزرگتر از ۱/۵ نانومتر این تقعر منفی شده است . این بداین معنی است که برخلاف انتظار با افزایش قطر در این فاصله مقدار تغییرات زاویه پیچش نیز افزایش می یابد.

نکته دیگری که در حد فاصل قطرهای ۱تا ۲ نانومتر در دسته نانو سیم سه تایی قابل ذکر می-باشد از طول ۳/۱۲ نانومتر، با افزایش طول، تغییرات زاویه پیچشی به کندی رشد و نتایج مربوط به تغییر زاویه به هم نزدیک می شود.



شکل ٥-٤٤. تغییرات زاویه پیچش نانو سیم <١٠٠> در حالت منفرد نسبت به قطرمعادل سطح



شکل ۵-20. تغییرات زاویه پیچش نانو سیم <۱۰۰> در حالت گروهی

ب – نانو سيم <٠١١>

شکلهای (۵–۴۶) و (۵–۴۷) تغییرات زاویه پیچشی نانو سیم سیلیسیم <۱۱۰> را به ترتیب در حالت منفرد و گروهی نشان میدهد. قطرهای معادل سطح کمتر از ۳/۵ نانومتر محدوده بحرانی در این تحلیل است.

در این نانو سیم برخلاف نانو سیم <۱۰۰> تقعر منفی در نمودار تغییرات زاویه پیچش برحسب قطر معادل سطح دیده نمیشود. این رفتار بدلیل چیدمان در حالت دسته نانو سیم و ساختار هندسی در این نوع نانو سیم است.

همان طور که انتظار میرود در حالت دسته نانو سیم نسبت به حالت منفرد، در قطر یکسان، کاهش میزان زاویه پیچش دیده میشود که با افزایش قطر این کاهش نسبت به حالت منفرد ناچیز می گردد.



شکل ٥-٤٦. تغییرات زاویه پیچش نانو سیم <١١٠> در حالت منفرد نسبت به قطر معادل سطح



شکل ۵-٤٢. تغییرات زاویه پیچش نانو سیم <۱۱۰> در حالت گروهی نسبت به قطر معادل سطح

ج – نانو سيم <١١١>

در این نانو سیم نیز همچون دو نانو سیم دیگر که ذکر شد، انتظار کاهش میزان زاویه پیچش در حالت دسته نانو سیم میرود. محدوده بحرانی در تحلیل پیچشی دسته سه تایی نانو سیم سیلیسیم <۱۱۱> از قطرهای معادل سطح۰ تا ۲/۵ نانومتر است. شکلهای (۵–۴۹) و (۵–۴۹) معین کننده این بازه هستند.

همانطور که مشاهده می شود، با افزایش قطر میزان تغییرات زاویه پیچش به مقدار گزارش شده در حالت منفرد گرایش پیدا می کند. در این نانو سیم در حالت گروهی، تقعر منفی مشاهده نمی شود. ولی نتایج نشان می دهد مقدار تغییرات زاویه برای طول های گوناگون در محدوده بحرانی به هم نزدیک هستند که این رفتار در نانو سیم منفرد در ضخامت های بسیار بزرگ رخ می دهد.

در محدوده بحرانی رفتار نانو سیم با طول ۱/۶۴ نانومتر یک رفتار غیر عادی است. احتمال خطای محاسباتی در آن میرود.



شكل ٥-٤٨. تغييرات زاويه پيچش نانو سيم <١١١> در حالت منفرد نسبت يه ضخامت سطح مقطع



شکل ۵-٤٩. تغییرات زاویه پیچش نانو سیم <۱۱۱> در حالت گروهی نسبت به ضخامت سطح مقطع

#### ٥-٣-٤ كمانش

در بخش قبل با بررسی نمودارهای تغییرات جابجایی طولی و زاویه پیچشی در حالت منفرد و گروهی، محدوده بحرانی برای تحلیلهای کشش محوری و پیچش، در هر یک از نانو سیمهای سیلیسیم <۱۰۰>، <۱۱۰> و <۱۱۱> در نظر گرفته شد. در این قسمت به بررسی تحلیل کمانشی این نانو سیم ها پرداخته می شود.

#### الف – نانو سيم <٠٠٠>

شکل (۵–۵۰) مقدار بار بحرانی کمانشی را در حالت گروهی، برای نانو سیم سیلیسیم رشد یافته در جهت <۱۰۰> بیان می کند. با مقایسه شکل (۵–۵۰) و شکل (۵–۲۶)، بار بحرانی در حالت دسته نانو سیم نسبت به حالت منفرد در محدوده نسبتهای L/a بزرگتر از ۲/۵، با افزایش مواجه است و سپس به مقدرای تقریبا ثابت می گراید. این کمینهترین مقدار برای نازکترین نانو سیم است و با افزایش ضخامت نانو سیم، مقدار این محدوده از نسبتهای بزرگتری شروع می شود. این بدان معنی است که در یک عرض ثابت، با افزایش طول، بار بحرانی تقریبا ثابت می شود. این در حالی است که روند ثابت شدن، بر طبق رابطه اولر، در نسبتهای L/a بزرگتر از ۱۰ رخ می دهد و با افزایش عرض نانو سیم، محدوده بحرانی نیز افزایش می باد و به رابطه اولرمی گراید.

با برازش تابعی مطابق رابطه (۵–۱) برای بار بحرانی در حالت دسته سه تایی نانو سیم، ضرایب این تابع برای ضخامت(عرض) ۲/۱۵ نانومتر b=-0.28 و a=271 میشود. این ضرایب برای حالت منفرد b=-0.43 و a=272 میشود. با افزایش ضخامت، ضریب a کاهش و ضریب b افزایش مییابد.

در یک ضخامت (عرض) ثابت مقادیر بار بحرانی کمانشی کاهش و سپس تقریبا به یک مقدار ثابت میل میکند.، این مقدار نسبت به حالت منفرد بیشتر است.



شکل ۵-۵۰. تغییرات بار بحرانی کمانشی نانو سیم سیلیسیم <۱۰۰> بر حسب L/a در دسته نانو سیم سه تایی

ب – نانو سيم <• ١١>

شکل (۵۵–۵۱) بار بحرانی کمانشی نانو سیم سیلیسیم <۱۱۰> در مجاورت با دو نانو سیم <۱۱۰> در مجاورت با دو نانو سیم <۱۱۰ دیگر را نشان میدهد. در این نمودار محدوده بحرانی از نسبتهای L/w برابر ۱/۵ شروع میشود و با افزایش ضخامت، مقدار بار بحرانی به رابطه اولر میگراید.

برخلاف نانو سیم <۱۰۰> که با افزایش ضخامت، ناحیه بحرانی نیز از نسبتهای بزرگتری شروع می گردد. می شود؛ در این نوع نانو سیم با افزایش ضخامت ناحیه بحرانی از نسبتهای کمتری شروع می گردد. نکته دیگر در نتایج بار بحرانی حالت گروهی در مقایسه با حالت منفرد(شکل ۵-۲۷) مشاهده می شود، در محدوده بحرانی تقعر نمودار بار بحرانی کمانشی منفی است و با افزیش ضخامت این تقعر بیشتر می گردد. تقعر منفی به این معنی است که با افزایش نسبت L/W برخلاف انتظار، افزایش باربحرانی کمانشی را در پی دارد.





#### ج – نانو سيم <١١١>

بار بحرانی کمانشی مربوط به نانو سیم سیلیسیم <۱۱۱> در حالت گروهی در شکل (۵–۵۲) رسم شده است. با مقایسه با شکل(۵–۲۹) محدوده بحرانی این نانو سیم، نسبت L/a بزرگتر از ۲/۵ مشخص می گردد. در این نانو سیم با افزایش ضخامت، کاهش محدوده بحرانی مشاهده می شود. این رفتار در حالی است که بار بحرانی نسبت به حالت منفرد در حال افزایش است. لذا محدوده بحرانی کمی کاهش و به سمت نسبت ۱/۵ می گراید. رفتار متفاوت این نانو سیم مربوط به ساختار هندسی این نانو سیم و همچنین چیدمان نانو سیمها در کنار هم است (شکل ۴–۹).

همان طور که در شکل(۵–۵۲) مشاهده می شود، اثر نیروی واندروالس در این نوع نانو سیم در حالت گروهی نسبت به دو نانو سیم مورد بررسی بسیار بیشتر است و در ضخامتهای بسیار بزرگ باربحرانی کمانشی به رابطه اولر می گراید.



شکل ۵-۵۲. تغییرات بار بحرانی کمانشی نانو سیم سیلیسیم <۱۱۱> بر حسب L/a در حالت دسته نانو سیم سه تایی

٥-٣-٤ خمش

شکل (۵-۵۳) نمونه ای از شبیه سازی، دسته نانو سیمها تحت بارگذاری خمشی را نشان میدهد.



شکل ۵-۵۳. شبیه سازی نانوسیم منفرد در دسته نانو سیم سه تایی سیلیسیم تحت بارگذاری خمشی

با مراجعه به شکل (۴–۹ الف) مشاهده می شود نیروی واندروالس در شعاع ۱/۴۲ نانومتر صفر است (نقطعه تعادل). حال اگر فاصله دو اتم زیاد شود، نیرو افزایش می یابد و سپس در نقطه ۱/۴۷ با کاهش مواجه است. اگر این رفتار را در حالت تحلیل خمشی، در دسته نانو سیم بررسی شود بدلیل کاهش نیرو، انتظار افزایش ناگهانی در جابجایی می رود. هم راستا بودن نیروها و جابجایی ها در این نوع تحلیل علت نمایان شدن چنین حالتی است. این پدیده در سایر حالت ها نیز به وقوع می پیوندد ولی اثر نا چیزی دارد.

الف– نانو سيم <١٠٠>

شکل (۵–۵۴) بیشینه جابجایی عرضی نانو سیم سیلیسیم <۱۰۰> را در حالت گروهی نشان میدهد. در مقایسه با شکل (۵–۳۳)، کاهش شدید جابجایی عرضی کاملا نمایان است. جهش در جابجایی عرضی، برای طولهای بلندتر از ۲ نانومتر و عرضهای کمتر از ۱/۵ نانومتر به وقوع میپیوندد. با افزایش عرض، رفتار نانو سیم به رابطه ذکر شده برای جابجایی بیشینه (جدول ۴–۲) که در نتایج بخش ۵–۲–۵ الف نیز نمایش داده شد، متمایل میشود<sup>۱</sup>.

در شکل (۵–۵۴)، نمودار در محدوده جهش دارای تقعر منفی است. همان طور که در بخشهای قبل نیز بیان شد، تقعر منفی نشان دهنده افزایش جابجایی با افزایش ضخامت است که این پدیده برخلاف انتظار رخ میدهد.

نکته دیگر که در مقایسه با حالت منفرد در این شکل دیده می شود، این است که جابجایی های عرضی نانو سیم <۱۰۰> با طول بلند تر از ۴/۲ نانو متر، قبل از نمودار رابطه ذکر شده در جدول (۴- (۲) قرار می گیرد که به مفهوم تاخیر در همگرا شدن نتایج به رابطه مذکور است.

<sup>&</sup>lt;sup>ا</sup> در شکل بطور نمونه بصورت Y for L=0.41 نمایش داده شده است.



شکل ٥-٥٤. بیشینه جابجایی عرضی نانو سیم سیلیسیم <١٠٠> در یک دسته نانو سیم سه تایی

ب – نانو سيم <١١٠>

شکل(۵–۵۵) تغییرات بیشینه جابجایی عرضی نانو سیم <۱۱۰> را در حالت گروهی نشان میدهد. که در مقایسه با شکل(۵–۳۵) با کاهش شدید جابجایی عرضی مواجه است. همانطور که پیشتر بیان شد در تحلیل خمشی بدلیل نوع اعمال بار و نحوه قرار گرفتن نانو سیمها در کنار هم، در حالت دسته نانو سیم اثر نیروی واندروالس بیشتر نمایان میشود. در این نانو سیم بدلیل ساختار هندسی نانو سیم و نحوه قرار گرفتن نانو سیمها در کنار در حالت گروهی، اثری از جهش مقادیر مشاهده نمیشود(شکل

در این نانو سیم در ضخامتهای بسیار زیاد نتایج تحلیل به رابطه ذکر شده در جدول (۴-۲) برای جابجایی بیشینه می گراید.



شکل ٥-٥٥.. بیشینه جابجایی عرضی نانو سیم سیلیسیم <١١٠> در حالت دسته نانو سیم سه تایی

## <u>ج – نانو سيم <ا ا ا> </u>

با ترسیم بیشینه جابجایی عرضی برای نانو سیم سیلیسیم <۱۱۱> در حالت گروهی مشخص می شود محدوده جهش در این نوع نانو سیم حد فاصل ضخامتهای ۱ تا ۲ نانومتر است (شکل (۵–۵۵)). جهش از طول بزرگتر از ۰/۷ نانومتر شروع می شود. کاهش شدید جابجایی در طول ۰/۷ نانومتر، بدلیل افزایش ضخامت در طول ثابت است. همانطور که در شکل مشخص است، در این نانو سیم نیز همانند دو نانو سیم دیگر با افزایش ضخامت نتایج به رابطه ذکر شده در جدول (۴–۲) همگرا می شود.

در این نانو سیم جهش نسبت به نانو سیم <۱۰۰> با شیب بیشتری به وقوع می پیوندد به عبارت دیگر نیروی ناشی از پتانسیل واندروالس در محدوده بحرانی در این چیدمان گروهی، اثر بیشتری نسبت به دو نانو سیم دیگر که مورد بحث قرار گرفت، دارد. با برازش منحنی بر نتایج نانو سیم <۱۱۱> با طول ۳/۲ نانومتر در حالت گروهی طبق رابطه رابطه ۵-۴ ضرایب این رابطه 1.17-a1=3.43 می شود.

$$F(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3$$



شکل ٥٦-٥. بیشینه جابجایی عرضی نانو سیم سیلیسیم <١١١> در حالت دسته نانو سیم سه تایی

طبق رابطه (۵–۴) و ضرایب محاسبه شده، تابع دارای یک نقطه اکسترمم نسبی است و این اکسترمم از نوع ماکزیمم است. این رفتار غیر منطقی است؛ چون بعد از محدوده جهش عملا اثر نیروی واندروالس به کمترین مقدار خود میرسد و مقادیر بیشینه جابجایی عرضی به سمت رابطه ذکر شده در جدول (۴–۲) نزدیک میشود . پیشبینی میشود برای ضخامت های بزرگتر از ناحیه بحرانی، نتایج از یک رابطه مانند (۵–۳) و با درجه حداکثر منفی ۳ پیروی نماید.

# ε-0 تحلیل رفتار مکانیکی دسته نانو سیم سیلیسیم

0-٤-1 شرایط مرزی و فرضیات

فرضیات این تحلیل مشابه تحلیل نانو سیم منفرد در دسته سه تایی از نانو سیمها است. تفاوت اساسی که در این تحلیل دیده می شود، در نحوه اعمال بار و شرایط مرزی است. در اینجا شرایط مرزی انتهای هر سه سیم یکسان و به دلیل چیدمان سه تایی(مثلثی) بار به مرکز ثقل (1/3h) و به هر سه سیم وارد می شود. یک تکیه گاه ثابت(گیردار) و شرایط مرزی و نحوه اعمال بار به تکیه گاه دیگر(A) در جدول ۵-۵ بیان شده است.

نوع تحليل	شرایط مرزی در A		شکل نمادین	نمونه مد <mark>ل سازی شده تحت بار گذاری</mark>	
كشش	Х	0		2000005	
	у	0			
	Z	-			
	$\theta_x$	0			
	θ <sub>y</sub>	0			
	θz	0			
خمش	X	0			
	у	-		893998	
	Z	-		250000	
	$\theta_{x}$	-		666666	
	$\theta_y$	0		866988	
	$\theta_z$	0		250000	
پيچش	Х	0	Υ.		
	У	0			
	z	0			
	$\theta_{\rm x}$	-			
	$\theta_{y}$	0			
	$\theta_z$	0			
کمانش	Х	0	<u> </u>		
	у	0			
	Z A	-			
	$\theta_{\rm x}$	0			
	θz	0			

جدول ٥-٥. نحوه بار گذاری و شرایط مرزی در تحلیل دسته نانو سیم سه تایی

در تحلیل دسته نانو سیم با توجه به نتایج حاصل از تحلیل نانو سیم منفرد و نانو سیم منفرد در دسته نانو سیم سهتایی، برای هر نانو سیم یک طول ثابت در نظر گرفته می شود و رفتار مکانیکی تحت بار گذاری کشش محوری، پیچشی، خمشی و کمانشی نسبت به تغییرات ضخامت هر نانو سیم محاسبه می گردد. طولهای مفروض برای نانو سیم های <۱۰۰>، <۱۱۰> و <۱۱۱> به ترتیب ۳/۱۱، ۴/۶۴ و مراد تانومتر است. نحوه انتخاب این طول ها براساس محدوده بحرانی در تحلیل های بخش ۵-۳ و حجم محاسبات است.

با توجه به نتایج تحلیل کششی نانو سیم منفرد، با افزایش ضخامت نانو سیم مقدار مدول یانگ به خواص حجمی ماده سیلیسیم میل میکند، بنابراین انتظار میرود در حالت دسته نانو سیم که ضخامت نسبت به حالت منفرد افزایش مییابد، رفتاری مشابه حالت حجمی و مطابق روابط ذکر شده براساس مقاومت مصاح و الاستیسیته در جدول ۴-۲ داشته باشد. بطور مشابه برای سایر تحلیلها نیز این رفتار انتظار میرود. بنابراین در این قسمت نتایج حاصل از تحلیل دسته نانو سیمها علاوه بر نتایج قبلی نیز با روابط ذکر شده در جدول ۴-۲ برای حالت دسته نانو سیم، مقایسه میشود.

#### 0-٤-٢ کشش دسته نانو سیم

شکل ۵-۵۷ نمونه ای از مدل سازی دسته نانو سیمها تحت بارگزاری کششی را نشان میدهد.

#### الف- دسته نانو سيم <١٠٠>

با توجه به رابطه بیان شده در جدول ۴-۲ انتظار می رود، با افزایش تعداد نانو سیم منفرد تحت کشش از یک عدد به سه عدد، نسبت مقدار تغییرات جابجایی طولی در حالت منفرد به حالت گروهی ۳ برابر باشد. اما نتایج نشان می دهد، برای ضخامتهای (عرض) کمتر از ۳ نانومتر، مقدار تغییرات جابجایی طولی از این رابطه دچار انحراف می شود. این انحراف ناشی از تاثیر پتانسیل غیر پیوندی لنارد – جونز در این ابعاد است. در شکل ۵-۵۸ نتایج این تحلیل به همراه نتایج حالت منفرد، منفرد در دسته نانو سیم و رابطه ذکر شده در جدول ۴-۲ بر حسب ضخامت نانو سیم منفرد رسم شده است.



شکل ۵-۰۵. نمونه ای از نمای جانبی و سطح مقطع دسته نانو سیمهای سیلیسیم مدل سازی شده تحت بارگذاری کشش محوری در نرم افزار ABAQUS



شکل ٥-٥٨. تغییرات جابجایی طولی دسته نانو سیم سه تایی سیلیسیم <١٠٠> بر حسب ضخامت(عرض) نانو سیم منفرد

نتایج تغییرات طولی در این نانو سیم نیز همانند نانو سیم <۱۰۰> نشان میدهد انحراف از رابطه ذکر شده در جدول ۴-۲ از قطرهای معادل سطح نانو سیم منفرد کمتر از ۳ نانومتر رخ میدهد. در شکل ۵۹-۵ نتایج نشان داده شده است.



شکل ٥-٥٩. تغییرات جابجایی طولی دسته نانو سیم سه تایی سیلیسیم <١١٠> برحسب قطرمعادل سطح نانو سیم منفرد

#### ج- دسته نانو سيم <١١١>

با توجه به شکل ۵-۶۰ در این نانو سیم انحراف از رابطه ذکر شده در جدول ۴-۲ در قطر معادل سطح کمتر از ۳ نانومتر دیده می شود. بیشترین انحراف در قطرهای ۱/۵–۱ نانومتر در محدوده نانو سیمهای بسیار نازک می باشد.



شکل ٥-٦٠. تغییرات جابجایی طولی دسته نانو سیم سه تایی سیلیسیم <١١١> برحسب قطرمعادل سطح نانو سیم منفرد

0-٤-۳ پیچش دسته نانو سیم شکل ۵-۶۱ نمونهای از مدلسازی تحلیل پیچشی دسته نانو سیم ها را در نرم افزار ABAQUS نشان میدهد.



شکل ۵-٦١. نمونه ای از نمای سطح مقطع دسته نانو سیم های سیلیسیم مدل سازی شده تحت بارگذاری پیچشی در نرم افزار ABAQUS

با مقایسه نتایج تحلیل پیچشی و رابطه ذکر شده در جدول ۴-۲ مقدار تغییرات زاویه پیچشی دسته نانو سیم سه تایی برای قطرهای کمتر از ۳ نانومتر، دچار انحراف میشود. نتایج نانوسیم منفرد در دسته نانو سیم حد فاصل قطرهای۲-۱ نانومتر افزایش مقدار تغییرات زاویه پیچش را نشان میدهد که در دسته نانو سیم این روند مشاهده نمیشود؛ ولی مقدار تغییرات زاویه در قطر تقریبی ۱/۱ نانومتر تقریبا مشابه هم است. این نتایج در شکل ۵-۶۲ نشان داده شده است.



شکل ۵-٦٢. تغییرات زاویه پیچشی دسته نانوسیم سه تایی سیلیسیم<۱۰۰> برحسب قطرمعادل سطح نانو سیم منفرد

ب- دسته نانو سيم<١١٠>

در شکل ۵-۶۳ تغییرات زاویه پیچش دسته نانو سیم سه تایی سیلیسیم<۱۱۰> برحسب قطر معادل رسم شده است. نتایج برای قطرهای کمتر از ۳ نانومتر انحراف از رابطه ذکر شده در جدول ۴-۲ را نشان میدهد. بیشینه انحراف در محدوده نانو سیمهای بسیار نازک حدفاصل ۱ تا ۲ نانومتر دیده می-شود.



شکل ۵-٦٣. تغییرات زاویه پیچشی دسته نانوسیم سه تایی سیلیسیم<۱۱۰> برحسب قطرمعادل سطح نانو سیم منفرد

#### ج- دسته نانو سيم <۱۱۱>

در این نانو سیم انحراف شدید از رابطه ذکر شده در جدول ۴-۲، در محدوده نانوسیمهای بسیار نازک دیده می شود. انحراف بر خلاف دو نانو سیم بیان شده از قطر معادل کمتر از ۴ نانومتر شروع می گردد. نکته قابل مشاهده در شکل ۵-۶۴، همگرا شدن نتایج نانو سیم منفرد در دسته نانو سیم سهتایی با رابطه بیان شده در جدول ۴–۲ برای حالت دسته نانو سیم، در قطرهای بزرگتر از ۲/۵ نانومتر می باشد.

با برسی نتایج شکل ۵-۶۴، میتوان بطور کلی محدوده قطرهای کمتر از ۲/۵ نانومتر برای این نانوسیم محدوده انحراف از روابط کلاسیک ارائه شده بر مبنای الاستیسیته و مقاومت مصالح در تحلیل پیچشی دانست. هر چند بطور خاص این محدوده برای نانو سیم منفرد تا قطرهای کمتر از ۵ نانومتر دیده می شود.



شکل ۵-۲٤. تغییرات زاویه پیچشی دسته نانوسیم سه تایی سیلیسیم<۱۱۱> برحسب قطرمعادل سطح نانو سیم منفرد

## 0-٤-۳ خمش دسته نانو سیم

نمونهای از مدل سازی دسته نانو سیم های ۳ تایی تحت بار خمشی درشکل ۵-۶۵ قابل مشاهده است.



شکل ۵-٦٥. نمونه ای از نمای جانبی و سطح مقطع دسته نانو سیمهای سیلیسیم مدل سازی شده تحت بارگذاری پیچشی در نرم افزار ABAQUS

از بررسی نتایج تحلیل بیشینه جابجایی عرضی در نانو سیم منفرد در دسته سه تایی، یک محدوده بحرانی مشخص می شود. در این محدوده جهش در نمودار بیشینه جابجایی عرضی بر حسب ضخامت نانو سیم مشاهده می گردد. در تحلیل دسته نانو سیم این جهش دیده نمی شود ولی همانطور که در شکل ۵-۶۵ دید می شود تقریبا همگرایی بین نتایج و رابطه ذکر شده در جدول ۴-۲ در ضخامتهای بزرگتر از ۳ نانومتر رخ می دهد<sup>۱</sup>.



شكل ٥-٦٦. تغييرات بيشينه جابجايي عرضي دسته نانوسيم سه تايي سيليسيم<١٠٠> برحسب عرض نانو سيم منفرد

با توجه به روند رفتار نانو سیم منفرد در دسته نانو سیم و دسته نانو سیم که در شکل دیده می-شود می توان پیش بینی کرد برای عرض های بیشتر از ۲ نانومتر، رفتار این دو به هم نزدیک و همگرا شوند

<sup>&#</sup>x27; محاسبات انجام شده طبق رابطه ذکر شده در جدول ۴–۲، برای حالت منفرد و با در نظر گرفتن مدول بالک برای هر نانو سیم سیلیسیم است.

در تحلیل خمشی دسته نانو سیم <۱۱۰>انحراف از ضخامتهای(۳) کوچکتر از ۴ نانومتر مشاهده می شود. تغییرات جابجایی عرضی در حالت دسته نانو سیم در شکل ۵-۶۷ رسم شده است. همانطور که در شکل دیده می شود، تغییرات بیشینه جابجایی عرضی در حالت دسته نانو سیم به حالت نانوسیم منفرد در دسته نانو سیم بسیار کم است و رفتاری مشابه هم دارند.



شكل ٥-٦٢. تغييرات بيشينه جابجايي عرضي دسته نانوسيم سه تايي سيليسيم<١١٠> برحسب عرض نانو سيم منفرد

#### ج- دسته نانو سيم <۱۱۱>



شکل ٥-٦٨. تغییرات بیشینه جابجایی عرضی دسته نانوسیم سه تایی سیلیسیم<١١١> برحسب عرض نانو سیم منفرد

0-٤-٤ كمانش دسته نانو سيم

در شکل ۵-۶۹ نمونه ای از مدل سازی دسته نانو سیمها تحت بار کمانشی در نرم افزار ABAQUS مشاهده می شود.



شکل ۵-۲۹. نمونه ای دسته نانو سیمهای سیلیسیم مدل سازی شده تحت بارگذاری کمانشی در نرم افزار ABAQUS

در بررسی نتایج این تحلیل با توجه به مقدار مدول یانگ در حالت توده ماده و رابطه ذکر شده در جدول ۴-۲ مقدار بار بحرانی کمانشی، برای دو حالت منفرد و دسته (سهتایی) نانو سیم محاسبه شده L/a است، جهت مقایسه با نتایج حاصل از تحلیل دسته (سه تایی) نانو سیم <۱۰۰> برحسب نسبت L/a در شکل ۵-۰۷ رسم شده است.

نتایج بار بحرانی کمانشی در حالت دسته نانو سیم با نتایج حاصل از رابطه اولر در حالت توده ماده برای نانو سیم منفرد تقریبا برابر می شود. انحراف از رابطه اولر برای حالت دسته نانوسیم در ضخامت-های کمتر از ۴–۳/۵ نانومتر دیده می شود.



شکل ۵-۷۰. تغییرات بار بحرانی کمانشی دسته نانوسیم سه تایی سیلیسیم<۱۰۰> برحسب نسبت L/a

شکل ۵-۷۱ نتایج حاصل از تحلیل بارکمانشی بحرانی را در حالت دسته نانو سیم نشان میدهد. محدوده ترسیم بار بحرانی برای مقادیر کمتر از ۱۰۰۰ نانو نیوتن است. برخلاف نانو سیم<۱۰۰> نتایج دسته نانو سیم نسبت به رابطه اولر اختلاف زیادی دارد. با توجه به شکل و هندسه سطح مقطع این نانو سیم محاسبه ممان دوم سطح بصورت تقریبی انجام شده است. با توجه به نمودار و روند تغییرات باربحرانی کمانشی، پیشبینی میشود انحراف از رابطه اولر در حالت دسته نانو سیم در ضخامتهای(w) کمتر از ۵-۴ نانو متر رخ دهد.

اگر به محدوده ای نسبت های کمتر از ۱ و حدود ۱ توجه شود، رابطه اولر تمایل زیادی برای میل به سمت مقادیر بزرگ و بینهایت دارد؛ ولی نتایج شبیه سازی نشان میدهد در این محدوده شیب تغییرات بار بحرانی کمانشی نسبت به این رابطه کمتر است. این رفتار هم در حالت منفرد و هم در حالت دسته نانو سیم دیده می شود.



شكل ٥-٧١. تغييرات بار بحراني كمانشي دسته نانوسيم سه تايي سيليسيم<١١٠> برحسب نسبت 1/w

نتایج تحلیل کمانشی دسته نانو سیم سیلیسیم <۱۱۱> نشان میدهد برخلاف حالت منفرد که رفتاری مشابه رابطه اولر درحالت توده ماده دارد و انحراف از نسبتهای کمتر از ۲ مشاهده می شود، در حالت دسته نانو سیم این انحراف تا نسبتهای بسیار بزرگ، در مقادیر کمتر از ۱۰ شروع می گردد. این بدان معنی است که نمی توان از رابطه اولر برای دسته نانو سیمها استفاده کرد.

شکل ۵-۷۲ نتایج این تحلیل را نشان میدهد. همگرایی نتایج نانو سیم منفرد، منفرد در دسته نانوسیم و دسته نانو سیم در نسبتهای بزرگتر از ۳/۵ مشاهده می شود.



شکل ۵-۷۲. تغییرات بار بحرانی کمانشی دسته نانوسیم سه تایی سیلیسیم<۱۱۱> برحسب نسبت 1/2

## **0-0** تعداد اتمها و زمان صرف شده برای تحلیلها

نتایج مورد بررسی با پردازنده دو هستهای اینتل ۲/۳ گیگا هرتزی انجام شده است. زمان تحلیل، تعداد مدل، بیشینه اتمها و غیره در نمودارهای (شکل ۵-۷۳) تا (شکل ۵-۷۵) رسم گردیده است. در جدول ۵-۶) کمینه و بیشینه تعداد اتم های مدل شده در هر دسته از نانو سیمها ذکر شده است.

وضعيت نانو سيم		NWSi<100>	NWSi<110>	NWSi<111>
منفرد	كمينه	۲۵	۵۶	14
	بيشينه	2.20	۲۰۸۰	2.27
گروهي	كمينه	۷۵	188	114
	بيشينه	١٨١۵	۱۸۰۰	TINF

جدول ٥-٦. كمينه و بيشينه تعداد اتم مدل شده در نرم افزار ABAQUS



شکل ۵-۷۳. زمان تحلیل و تعداد اتمهای مدل شده برای حالت منفرد



شکل ۵-۷٤. زمان تحلیل و تعداد اتمهای مدل شده برای حالت گروهی



شکل ۵-۷۵. مجموع زمان تحلیل و تعداد اتمهای مدل شده برای هر حالت

فصل ششم

# نتیجه گیری و پیشنهادات

## :نتیجه گیری و پیشنهادات

## ٦-1 نتايج

با توجه به تحلیل های انجام شده در این پایان نامه نتایج زیر بطور خلاصه حاصل می شود:

- ۱- مدول یانگ در تمام نانو سیمهای سیلیسیم با افزایش ضخامت افزایش مییابد.
- ۲- بیشترین مدول یانگ در هر ضخامت به ترتیب به نانو سیمهای سیلیسیم <۱۱۰>، <۱۱۱> و <۱۰۰> تعلق دارد.
- ۳- رفتار مدول یانگ برای نانو سیم های فوق باریک در مقایسه با نانو سیم های ضخیم تر متفاوت
   است.
- ۴- مدول برشی نیز همانند مدول یانگ در تمامی نانو سیمهای سیلیسیم با افزایش ضخامت، افزایش مییابد.
- ۵- بیشترین مدول برشی در هر ضخامت از نانو سیم به ترتیب مربوط به نانو سیمهای سیلیسیم
   <<p><>>>
- ۶- رفتار مدول برشی نانو سیمهای فوق باریک نیز همانند مدول یانگ در مقایسه با نانو سیمهای ضخیم در متفاوت است.
- ۲- نسبت پواسون در هر صفحه از نانو سیم متفاوت است و با افزایش طول در عرض ثابت،
   افزایش و با افزایش عرض در طول ثابت، کاهش می یابد.
- ۸- بار بحرانی کمانشی برای هر نانو سیم با افزایش نسبت (L/a) در یک عرض ثابت به رابطه اولر
   میل می کند.
- ۹- بیشترین بار کمانشی بحرانی در یک نسبت مساوی از (L/a) به ترتیب مربوط به <۱۰۰>،

- ۱۰ بیشینه جابجایی عرضی انتهای نانو سیم با افزایش ضخامت در هر نانو سیم کاهش مییابد و
   به رابطه ذکر شده در مقاومت مصالح برای تیرهای یکسر گیردار می گراید.
- ۱۱- بیشترین جابجایی عرضی در یک ضخامت و طول ثابت به ترتیب مربوط به نانو سیمهای
   ۱۱- (۱۱۱> و ۱۱۱> است.
- ۱۲ در تحلیل نانو سیم منفرد در دسته نانو سیمها، بدلیل اثر نیروهای غیر پیوندی در حجم و سطح نانو سیمها، جابجایی طولی در کشش محوری، زاویه پیچشی در پیچش و جابجایی عرضی در خمش، با کاهش روبرو است و با افزایش بار بحرانی کمانشی در کمانش مواجه می- شود.
- ۱۳- در تحلیل خمشی نانو سیم منفرد در دسته نانو سیمها، منطقه ای به نام منطقه جهش مشاهده می شود. این محدوده معمولا بین ضخامت های ۱ تا ۲ نانو متر برای طول های بلندتر از ۱ یا ۲ نانومتر است.
- ۱۴ منطقه جهش در نانو سیم <۱۱۰> مشاهده نشد، علت آن ساختار هندسی و فاصله بین نانو
   سیمها در حالت گروهی است.
- ۱۵ در تحلیل دسته نانوسیم سه تایی با توجه به رفتار نانو سیم منفرد انتظار می رود بدلیل
   افزایش ضخامت رفتار دسته نانو سیم سه تایی، به خواص توده ماده گرایش پیدا کند. ولی
   نتایج نشان می دهد بطور کلی این رفتار برای ضخامت های بزرگتر از ۴–۳ نانو متر رخ می دهد.
- ۱۶ علت انحراف نتایج در حالت دسته نانو سیم نسبت به حالت منفرد اثر پتانسیل غیر پیوندی
   لنارد-جونز است.
- ۱۷- در حالت تحلیلهای کشش ساده، خمش، پیچش، کمانش بیشترین جابجایی طولی، جابجایی عرضی، عرضی، تغییرات زاویه پیچش و بار بحرانی کمانشی به ترتیب برای دسته نانو سیمهای </

۱۸- در حالت تحلیلهای کشش ساده، خمش، پیچش، کمانش کمترین جابجایی طولی، جابجایی عرضی، تغییرات زاویه پیچش و بار بحرانی کمانشی به ترتیب برای دسته نانو سیمهای
 <</li>
 <</li>
 <</li>
 <</li>

### ۲-۲ پیشنهادات

- ۱- تحلیل خواص مکانیکی دیگر نانو سیمهای سیلیسیم مانند خواص حرارتی، سختی و کرنش پلاستیک و غیره
  ۲- انجام تحلیل با ضخامت های بزرگتر و طول های بلندتر مخصوصا در حالت تحلیل گروهی
  ۳- انجام تحلیل در حالت گروهی با تعداد بیشتری از نانو سیمها و چیدمان متفاوت نسبت به هم
  ۴- انجام تحلیل در حالت گروهی با نانو سیمهای سیلیسیم متفاوت
  ۹- انجام تحلیل در حالت گروهی با نانو سیمهای سیلیسیم متفاوت معاوت
  ۹- انجام تحلیل در حالت گروهی با تعداد بیشتری از نانو سیمها و چیدمان متفاوت نسبت به هم
  ۶- انجام تحلیل در حالت گروهی با نانو سیمهای سیلیسیم متفاوت
  ۹- انجام تحلیل در حالت گروهی با نانو سیمهای سیلیسیم متفاوت
  ۸- انجام تحلیل در حالت گروهی با نانو سیمهای سیلیسیم متفاوت
  ۸- انجام تحلیل در حالت گروهی با نانو سیمهای سیلیسیم متفاوت
  ۸- انجام تحلیل در حالت گروهی با نانو سیمهای سیلیسیم متفاوت
  ۸- انجام تحلیل در حالت گروهی با نانو سیمهای سیلیسیم متفاوت
  ۸- انجام تحلیل در حالت گروهی با نانو سیمهای سیلیسیم متفاوت
  ۸- انجام تحلیل در حالت گروهی با نانو سیمهای سیلیسیم متفاوت
  ۸- بررسی خواص نانو سیم سیلیسیم حاله
  ۸- بررسی اثر هیدروژن در سطح نانو سیم سیلیسیم در حالت دسته نانو سیم و منفرد، بر خواص مکانیکی آن
  - ۷- بررسی اثر نیرو های غیر پیوندی در نظر گرفته نشده در خواص مکانیکی این نانو سیم

- Stollwerck G., Reber S. and Haßler C., (2001), "Crystalline Silicon Thin-Film Solar Cells on Silicon Nitride Ceramic Substrates", Adv. Mater., Vol. 13, Issue 23, pp. 1820-1824.
- [2] Mayer T. M., Elam J. W., George S. M., Kotula P. G. and Goeke R. S., (2003), "Atomic-layer deposition of wear-resistant coatings for microelectromechanical devices", Appl. Phys. Lett., Vol. 82, Issue 17, pp. 2883-2886.
- [3] Lin Y. C., Lu K. C., Wu W.W., Bai J. W., Chen L. J., Tu K. N. and Huang Y., (2008), "Single Crystalline PtSi Nanowires, PtSi/Si/PtSi Nanowire Heterostructures, and Nanodevices", Nano Lett., Vol. 8, pp. 913–918
- [4] Chen H. T., Hsieh S. I., Lin C. J. and King Y. C., (2006), "Degradation Dependent on Channel Width in Sequential Lateral Solidified Poly-Si Thin FilmTransistors", IEEE Electron Device, 27, pp. 272- 274.

[۵] منصور عابدینی، (۱۳۷۷)، **''شیمی توصیفی عنصرها''**، چاپ پنجم، انتشارات فاطمی، تهران،ص۸۱.

- [6] www.wilkipadia.com
- [7] W. Han, S. Fan, Q. Li and Y. Hu, (1997), "Synthesis of Gallium Nitride Nanorods Through a Carbon Nanotube-Confined Reaction", Science, Vol. 277, pp. 1287-1289.
- [8] C.R. Martin, 1994, "Nanomaterials: A Membrane-Based Synthetic Approach", Science, Vol. 266, pp. 1961-1966.
- [9] Dai H., Wong E.W., Lu Y.Z., Fan S. and Lieber C.M., (1995), "Synthesis and characterization of carbide nanorods", Nature, Vol. 375, pp. 769-772.
- [10] Wagner R.S. and Ellis W.C., (1964), "Vapor- Liquid- Solid Mechanism Of Single Crystal Growth", Appl. Phys. Lett., Vol. 4, 89-92.
- [11] Morales A.M. and Lieber C.M., (1998), "A Laser Ablation Method for the Synthesis of Crystalline Semiconductor Nanowires", Science, Vol. 279, pp. 208-2011.
- [12] Yu D., Bai Z., Ding Y., Hang Q., Zhang H., Wang J., Zou Y., Qian W., Xiong G. and Feng H.S., (1998), "Nanoscale silicon wires synthesized using simple physical evaporation", Appl. Phys. Lett., Vol. 72, pp. 3458-3461.

- [13] Wu Y., Cui Y., Huynh L., Barrelet C.J., Bell D.C. and Lieber C.M., (2004), "Controlled Growth and Structures of Molecular-Scale Silicon Nanowires", Nano.Lett., Vol. 4, pp. 433-436.
- [14] Zhaohu Zhong, Chen Yang, Charles M. Lieber., (2008), "Silicon Nanowires and Nanowire Heterostructures", pp 197-210, "Nanosilicon", KUMAR.V, Elsevier Ltd, Chennai, India
- [15] Wu Y. and Yang P., (2001), "Direct Observation of Vapor-Liquid-Solid Nanowire Growth", JACS, Vol. 123, pp. 3165-3170.
- [16] A. P. Levitt., (2007), "Whisker technology", Wiley, New York.
- [17] Cui Y., Lincoln J. L., Mark S. G., Wang J., and Charles M. L., "Diametercontrolled synthesis of single-crystal silicon nanowires", Appl. Phys. Lett., Vol. 78, pp. 15-18.
- [18] Wang C. X., Hirano M. and Hosono H., (2006), "Origin of Diameter-Dependent Growth Direction of Silicon Nanowires", Nano Lett., Vol. 6, pp. 7-10.
- [19] Schmidt V., Senz S. and Go1sele U., (2005), "Diameter-Dependent Growth Direction of Epitaxial Silicon Nanowires", Nano Lett., Vol. 5, pp. 5-10.
- [20] Morral A. F., Arbiol J., Prades J. D., Cirera A. and Morante J. R., (2007), "Synthesis of Silicon Nanowires withWurtzite Crystalline Structure by Using Standard Chemical Vapor Deposition", Adv. Mater., Vol. 19, pp. 1347–1351.
- [21] Teoa B. K., Huangb S. P., Zhangb R.Q. and Li W.K., (2009), "Theoretical calculations of structures and properties of one-dimensional siliconbasednanomaterials: Particularities and peculiarities of silicon and siliconcontaining nanowires and nanotubes", Coordination Chemistry Reviews, Vol. 253, pp. 2935–2958.
- [22] Lu A. J., Zhang R. Q., and Lee S. T., (2008), "Tunable electronic band structures of hydrogen-terminated <112> silicon nanowires" Appl. Phys. Lett, Vol. 92, pp. 203109-203112.
- [23] Lee B. and Rudd R. E., (2007a), "First principles study of the Young's modulus of Si <001> nanowires", Phys. Rev. B, Vol. 75, pp. 195328-195332.
- [24] Lee B. and Rudd R. E., (2007b), "First-principles calculation of mechanical properties of Si <001> nanowires and comparison to nanomechanical theory", Phys. Rev. B, Vol. 75, pp. 041305-041308.
- [25] Leu P. W., Svizhenko A. and Cho K., (2008), "Ab initio calculations of the mechanical and electronic properties of strained Si nanowires", Phys. Rev. B, Vol. 77, pp. 235305-235308.
- [26] Ma L., Wang J., Zhao J. and Wang G., (2008), "Anisotropy in stability and Young's modulus of hydrogenated silicon nanowires", Chem. Phys. Lett., Vol. 452, pp. 183-187.
- [27] Tabib-Azar M., Nassirou M., Wang R., Sharma S., Ka-mins T. I., Islam M. S. and Williams R. S., (2005), "Mechanical properties of self- welded silicon nanobridges", Appl. Phys. Lett., Vol. 87, pp. 102-113.
- [28] Hsin C. L., Mai W., Gu Y., Gao Y., Huang C.T., Liu Y., Chen L.J. and Wang Z.L.,
  (2008), "Direct Observation of Vapor- Liquid- Solid Nanowire Growth", Adv.
  Mater., Vol. 20, pp. 3919-3922.
- [29] Hoffmann S., Utke I., Moser B., Michler J., Christiansen S. H., Schmidt V., Senz S., Werner P., Go U., Ballif C., (2006), "Measurement of the Bending Strength of Vapor-Liquid-Solid Grown Silicon Nanowires", Nano Lett., Vol. 6, pp. 622-625.
- [30] Justo J. F., Menezes R. D. and Assali L.V.C., (2007), "Stability and plasticity of silicon nanowires: The role of wire perimeter", Phys.Rev. B., Vol. 75, pp. 045303-045306.
- [31] Menon M., Srivastava D., Ponomareva I. and Chernozatonskii L.A., (2004), "Nanomechanics of silicon nanowires", Phys. Rev. B., Vol. 70, pp. 125313-125316.
- [32] Stillinger F. H. and Weber T. A., (1985), "Computer simulation of local order in condensed phases of silicon", Phys.Rev.B, Vol. 31, pp. 5262-5266.
- [33] Justo J. F., Bazant M. Z., Kaxiras E., Bulatov V.V. and Yip S., (1998), "Interatomic potential for silicon defects and disordered phases", Phys. Rev. B., Vol. 58, pp. 2539-2542.
- [34] Kizuka T., Takatani Y., Asaka K. and Yoshizaki R., (2005), "Measurements of the atomistic mechanics of single crystalline silicon wires of nanometer width", Phys. Rev. B, Vol. 72, pp. 035333-035339.
- [35] Tang C.Y., Zhang L.C. and Mylvaganam K, (2007), "The mechanical properties of a silicon nanowire under uniaxial tension and Compression", 5th Australasian Congress on Applied Mechanics, ACAM, Brisbane, Australia.
- [36] Emmanuel N. K., Shanawer N., Dimitrios A. Z., Aristides D. Z., (2012),
  "Theoretical study of the elasticity of ultra-thin finite silicon nanowires. I. Semiempirical model considerations", J.MEE, Vol. 90, pp. 88–91
- [37] Moura C. S., Amaral L., (2005), "Nuclear Instruments and Methods in Molecular dynamics simulation of silicon nanostructures", Physics Research B, Vol. 228, pp. 37–40.

- [38] Jing Y., Qingyuan M. and Wei Z., (2009), "Atomistic simulations of the tensile and melting behavior of siliconnanowires", J.Semiconductors, Vol. 30, pp. 062003-062006
- [39] Valavala P.K. and Odegard G.M., (2005), "Modeling Techniques for Determination of Mechanical Properties of Polymer Nanocomposite", Adv.Mater.Sci, Vol. 9, pp. 34-44.
- [40] Chen Y., Li D., Lukes J. R. and Majumdar A., (2005), "Monte Carlo of Silicon Nanowire Thermal Conductivity", Journal of Heat Transfer, Vol. 127, pp. 1129
- [41] Schulz M. J., Kelkar A. D. and Sundaresan M. J., (2006) "Nanoengineering of structural, functional, and smart materials", North Carolina A&T State University, Greensboro, Usa.
- [42] Sears A. T., (2006), Ph.D thesis, "Carbon Nanotube Mechanics: Continuum Mode development from Molecular Mechanics Virtual Experiments", Virginia Polytechnic Institute and State University.
- [43] Allinger N.L., Yuh Y.H. and Lii J.H., (1989), "Molecular Mechanics. The MM3 Force Field for Hydrocarbons", ACS, Vol. 111(23), pp. 8551-8566.
- [44] Ponder J. and Davida W., (2003), "Case Force Fields for Protein Simulation", Adv in Proteiny Chemistry, Vol 66, pp. 27-85
- [45] Hill J. R., Freeman C.M. and Subramanian L. (2000), "Molecular Simulations", Inc., 9685, Scranton Road, San Diego, California. pp. 2121-3752.
- [۴۶] پروانه . و، "مدل سازی و شبیه سازی نانولوله های کربنی یه منظور پیش بینی خواص آن"، پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه صنعتی شاهرود، ۱۳۸۸.
- [47] Mayo S. L., Olafson B.D. and Goddard W.A., (1990), "Dreiding: A Generic Force Field for Molecular Simulations", J. Phys. Chem. 94, pp. 8897-8909.
- [۴۸] فردیناند بی یر و راسل جانسون(۱۳۸۲)، "مقاومت مصالح" ،ترجمه ابراهیم واحدیان ویرایش دوم ، نشر تهران، تهران ص۱۱۳و۴۴۴.
- [49] Ugural A. and Fenster S., (2003), "Advanced mechanics of materials and elasticity", Pearson Education, Usa, 5th ed, pp.133.
- [50] Reddy J.N., (2008), "An Introduction to Continuum Mechanics With Applications", Cambridge University Press, Usa, 1th ed, pp187.
- [51] McSkimin H.J., (1953), "Measurement of Elastic Constants at Low Temperatures by means of Ultrasonic Waves - Data for Silicon and Germanium Single Crystals, and for Fused Silica" J. Appl. Phys., Vol. 24 (8), pp. 988-992.

- [52] Yaws C.L., Dickens L.L., Lutwak R. and George Hsu, (1981), "Semiconductor Industry Silicon: Physical and Thermodynamic Properties", Solid State Technol., Jan.
- [53] Wortman J.J. and Evans R.A., (1965), "Young's Modulus, Shear Modulus, and Poisson's Ratio in Silicon and Germanium", J. Appl. Phys., Vol. 36, pp. 153-156.
- [54] Yuhang J., Qingyuan M., (2009), "Molecular dynamics simulation on the buckling behavior of silicon nanowires under uniaxial compression, Computational", Materials Science 45, pp. 321–326.
- [55] Han X., Zheng K., Zhang Y. F., Zhang X., Zhang Z. and Wang Z. L., (2007), "Low-Temperature In Situ Large-Strain Plasticity of Silicon Nanowires", Adv. Mater. Vol. 19, pp. 2112-2116.
- [56] Li X., Ono T., Wang Y. and Esashi M., (2003), "Ultrathin single-crystallinesilicon cantilever resonators: Fabrication technology and significant specimen size effect on Young's modulus", Appl. Phys. Lett., Vol. 83, pp. 3081-3085.
- [57] Furmanchuk A., Isayev O., Dinadayalane T.C. and Leszczynski J., (2011), "Molecular Dynamics Simulations of Tensile Tests on Si<001>Nanowires", J. Phys. Chem. C, Vol. 115, pp. 12283–12292.
- [58] Furmanchuk A., Isayev O., Dinadayalane T.C., Leszczynska D., Leszczynsk J., (2012), "Mechanical properties of silicon nanowires", Computational Chemistry, DOI: 10.1002/wcms.1108.

## Abstract

In this research, Si<100>, <110> and <111> nanowires with different lengths between 0.5 to 20 nm and thicknesses between 1 to 4 nm, are investigated by using structural mechanics approach and numerical method by ABAQUS software. DREIDING is used for force field. Mechanical properties such as Young's module, shear modulus, Poisson's ratio are calculated. B.C is fix-free. The results of this study show that Young's module and shear modulus for all Si nanowires tendency toward Silicon bulk elastic properties in 7-10 nm thickness. Three structures of silicon nanowire such as <100>, <110> and <111> are modeled that <110> and <100> had the maximum and minimum Young's modulus, respectively, howover maximum shear modulus and minimum is for <100> and <110> respectively.

Analysis results show that bundle nanowires in a certain range of thickness of nanowires is generally in the range of 4-3 nm, have a different behavior than the single mode. For example, the buckling analysis, Increase the critical load can be seen. Moreover, this method in comparison of other than methods such as molecular dynamics has higher analyzing speed and suitable accuracy.

**Keywords**: Si Bundle NWs, Young's module, Buckling, Bending, Structural mechanics approach



Shahrood University of Technology Department of Mechanical Engineering

## Modeling and Simulation of Silicon Bundle Nanowires for Prediction of their Mechanical Properties

Thesis Submitted in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Master of Science (M.Sc) In Mechanical Engineering, Applied Design

Seyyed Amin Yasini

Supervisor:

## Dr. Mahmoud Shariati

Date: Summer 2012