

مدلسازی و شبیه سازی قطعات در ابعاد نانو به روش مدلسازی مولکولی

علی کفاش هوشیار^۱، نگین بریانی نظافت^۲ و سعید دانشمند^۳
Hoshiar@Qzviniau.ac.ir

چکیده

امروزه با گسترش دانش نانو شاهد ورود این علم به بخش‌های مختلف علوم مهندسی هستیم. بدلیل لزوم مدلسازی مولکولی اولیه در فرآیندهای ساخت در ابعاد نانو شاهد گسترش این نوع مدلسازی ها و ایجاد نرم افزارهایی بر این پایه می باشیم. مدلسازی در ابعاد اتمی در این مقاله با دو هدف اصلی مورد توجه قرار گرفته است که عبارتند از: ۱- بررسی‌های ساختاری قطعات در ابعاد نانو- ماکرو ۲- شبیه سازی‌های حرکتی بر پایه دینامیک مولکولی. در این مقاله اصول و مبانی هر دو روش مورد بررسی قرار گرفته و با کمک نرم افزار مت لب^۴ الگوریتمی جهت مدلسازی ساختاری و شبیه سازی دینامیکی قطعات در ابعاد نانو ارائه شده است. در ابتدا قطعات در فرم های مکعب و استوانه با توجه به شبکه کریستالی آنها در ابعاد اتمی شبیه سازی شده است، تأثیرات حرارتی در دماهای متفاوت به کمک این شبیه سازی مورد بررسی قرار می گیرد. در بخش دوم مدلی بر پایه شبیه سازی دینامیکی مولکولی در حالت دو بعدی به منظور مدلسازی نوک پروب میکروسکوپ نیروی اتمی ایجاد شده است. و به کمک این مدل تاثیر نیرو بر تغییر شکل پروب میکروسکوپ نیروی اتمی شبیه سازی شده است.

کلیدواژه:

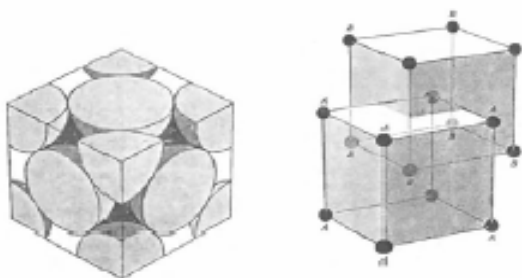
نانو- مت لب- مدلسازی مولکولی- اثرات دمایی- میکروسکوب نیروی اتمی

۱- عضو هیات علمی دانشکده مهندسی صنایع و مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد قزوین

۲- دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات تهران

۳- دانشجوی دکتری مهندسی مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد علوم و تحقیقات

برای مکعب با وجوه مرکز دار (۳) $4r = \sqrt{2}a_0$
 با مشخص شدن ثابت شبکه مدلسازی هندسه، در سه حالت مورد
 بررسی قرار می گیرد .



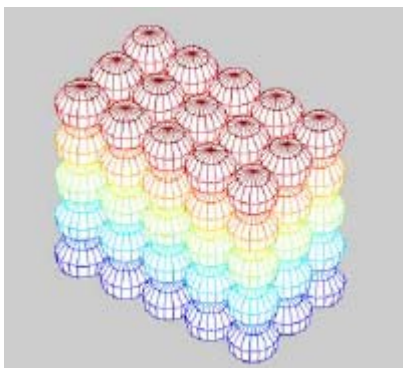
شکل (۲): مدل اتمی مکعب مرکز دار و مکعب با وجوه مرکز دار

۳- شبکه مکعب ساده

با توجه به رابطه (۱) ثابت شبکه دو برابر شعاع در نظر گرفته می
 شود و مدلسازی مطابق مرا حل زیر صورت می پذیرد .
 در حقیقت اولین مرحله برنامه نویسی آخرین مرحله نمایش نرم
 افزار است. در این مرحله یک کره به صورت پارامتریکی ایجاد می
 کنیم. این عمل با کمک یک برنامه و استفاده از فرمول کره صورت
 می گیرد. با تغییر مختصات کره می توانیم مدل را ایجاد کنیم پس
 در قسمت های بعدی در حقیقت تنها مراکز اتم ها را به دست
 آورده و با کمک این قسمت مدل را به مدل اتمی تبدیل می کنیم .

۴- بدست آوردن مرکز اتم ها

با توجه به این نکته که ما از دو شکل مختلف استفاده نموده ایم،
 باید از دو الگوریتم مختلف نیز جهت ایجاد و به دست آوردن
 مرکز آنها استفاده نماییم. برای ایجاد مکعب اتمی آن را به دو قسمت
 یکی دیواره و دیگری صفحات بالا و پایین تقسیم می کنیم و در انتها
 در برنامه اصلی این دو قسمت را به هم وصل می کنیم تا شکل نهایی
 ایجاد شود (شکل ۳).



شکل (۳): مدل اتمی مکعب

۱- مقدمه

در مباحث ساخت در ابعاد نانو دو روش وجود دارد روش بالا به
 پایین و روش پایین به بالا در استفاده از این دو روش در بعضی از
 موارد نیازمند به ایجاد یک مدل CAD از سیستم می شویم که به
 منظور مدلسازی قطعات در ابعاد نانو کاربرد دارد [۱]. مدل CAD به
 دو منظور مورد استفاده قرار گرفته است.

۱- در مدل هندسی اتم ها در صفر درجه کلون شبیه سازی
 می شوند و سپس می توانیم نوع اتم دلخواه را انتخاب کرده و مطابق
 آن انتخاب به قطعه خواص را نسبت دهیم ساختارهایی که در ابعاد
 نانو ایجاد می شوند لزوماً در صفر درجه کلون نیستند و می بایست
 آنها را در درجه حرارت های مختلف بررسی و مدل سازی کنیم [۲].
 ۲- با مشخص شدن هندسه نقاط می توانیم با کمک مدلسازی
 ریاضی حاکم بر دینامیک حرکت ذرات مدل حرکتی آنها را بدست
 آوریم.

در این مقاله موارد زیر مورد بررسی قرار می گیرد:

۱- مدل سازی یک قطعه در ابعاد نانو با توجه به ساختار اتمی آن
 ۲- تغییر مدل ساخته شده بر اساس درجه حرارت ۳- مدلسازی
 دینامیک ملکولی نوک پروب میکروسکوپ نیروی اتمی (شکل ۱) .



شکل (۱): الگوریتم عملکرد برنامه

۲- مدلسازی هندسه شبکه کریستالی

طبق تعریف به نظم اتمی تکرار شونده شبکه کریستالی می گویند .
 در این مقاله قصد داریم در بخش مدلسازی هندسه سه شبکه
 کریستالی مکعب ساده ، مکعب مرکز دار، مکعب با وجوه مرکز دار را
 مورد بررسی قرار دهیم (شکل ۲). بمنظور مدلسازی این سه شبکه
 باید ثابت شبکه در آنها مشخص شود که با کمک روابط زیر مقدار
 ثابت شبکه برای هر یک از شبکه ها بدست می آید [۳].

$$2r = a_0 \quad (1) \quad \text{برای مکعب ساده}$$

$$4r = \sqrt{3}a_0 \quad (2) \quad \text{برای مکعب مرکز دار}$$

۵- شبکه مکعب مرکز دار

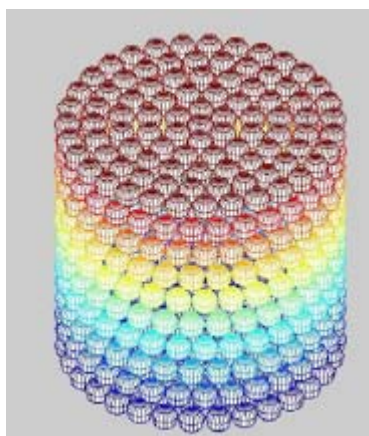
برای این شبکه مطابق رابطه ۲ ثابت شبکه بدست می آید، با تغییر ثابت شبکه مدل اتمی تغییر می کند. در این حالت اتم ها در سطح خارجی کاملاً به هم چسبیده نبوده و مطابق ضریب شبکه فاصله دارند. در شبیه سازی از نمایش اتم های مرکزی صرف نظر شده است (شکل ۶).



شکل (۶): مدل اتمی مکعب مرکز دار

۶- شبکه مکعب با وجوه مرکز دار

برای این شبکه مطابق رابطه ۳ ثابت شبکه بدست می آید، با اعمال این ثابت و در نظر گرفتن اتم های وجوه شبکه مدل اتمی ایجاد می شود. در این مدل اتم ها در لایه های مختلف روی هم نبوده و مطابق شبکه کریستالی تغییر می کنند (شکل ۷).



شکل (۷): مدل اتمی مکعب مرکز دار

۷- مقایسه مدل های اتمی

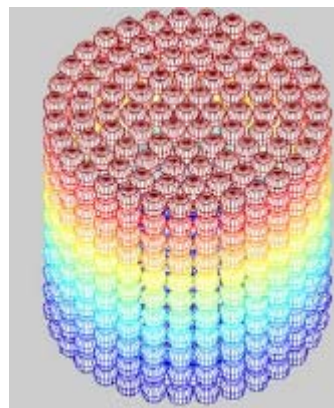
با مقایسه شکل (۳) و (۶) می توان به تفاوت دو مدل مکعب ساده و مکعب مرکز دار پی برد. در مکعب ساده بین اتم ها فاصله ای وجود ندارد در حالی که در مکعب مرکز دار متناسب با ثابت شبکه بین اتم ها فاصله وجود دارد. با مقایسه شکل (۵) و (۷) می توان به تفاوت

ایجاد یک استوانه اتمی به کمک دو الگوریتم صورت می گیرد یک الگوریتم دیواره جانبی استوانه را ایجاد می کند و الگوریتم دیگر صفحات بالا و پایین را می سازد تا به این ترتیب شکل کامل گردد. برای این منظور شعاع خارجی استوانه مورد استفاده قرار می گیرد. شعاع خارجی را به قسمت های مساوی تقسیم می کنیم و اتم ها را روی هم قرار می دهیم تا یک ستون از شکل ایجاد شود. سپس این ستون ها در فاصله هایی که قبلاً روی استوانه ایجاد کرده بودیم قرار می گیرد و شکل کامل می شود (شکل ۴).



شکل (۴): مدل اتمی دیواره استوانه

در این قسمت عملیات به این صورت انجام می شود که ابتدا خارجی ترین شعاع انتخاب می شود و اتمها با توجه به قطر آنها روی آن قرار می گیرند. سپس روی قطر به سمت داخل و به اندازه قطر اتم حرکت کرده و در یک شعاع جدید عملیات قبل را تکرار می کنیم و همین عملیات را تا رسیدن به مرکز شعاع ادامه می دهیم. بدین ترتیب صفحات بالا و پایین استوانه در حالت اتمی ایجاد می شود. با وصل کردن این صفحات بالا و پایین به دیواره استوانه شکل کامل می گردد و استوانه به مدل اتمی آن تبدیل می گردد (شکل ۵).



شکل (۵): مدل اتمی استوانه

بررسی های دینامیک ملکولی از اهمیت بالایی برخوردار می باشد (شکل ۹).

جدول (۱): جدول مشخصات فیزیکی قطعه

جنس	ضریب انبساط حرارتی $\frac{1}{\rho\alpha}$	$T_0(k^\circ)$	$T_1(k^\circ)$	$T_2(k^\circ)$
طلا	$14.2 * 10^{-6}$	0	273	1337

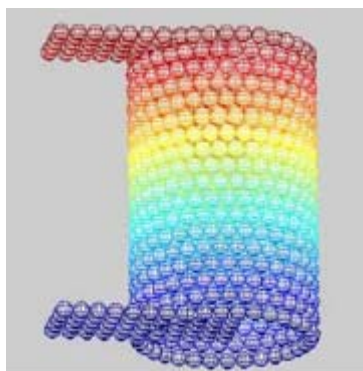
جدول (۲): مشخصات هندسی قطعه

جنس	شبهه کریستالی	ارتفاع استوانه (نانو متر)	شعاع استوانه (نانو متر)	شعاع اتمی (نانو متر)
طلا	Fcc	۱۰	۳	۰.۲۹۲۲



شکل (۹): مدل یک استوانه در ابعاد نانو و در دمای 1337^k

با توجه به تواناییهای مدلسازی نرم افزار با ترکیب طرح های پیش فرض موجود در نرم افزار می توانیم مدل های دلخواهی را جهت بررسی های سازه ای ارایه دهیم (شکل ۱۰).



شکل (۱۰): مدل ترکیبی با استفاده از امکانات نرم افزار

دو مدل مکعب ساده و مکعب با وجوه مرکز دار پی برد در مکعب ساده اتم ها در لایه های مختلف روی هم قرار دارند ولی در مدل مکعب با وجوه مرکز دار اتم ها در لایه های مختلف نسبت به هم یکی در میان جا به جا شده اند.

۸- تحلیل های سازه ای

با گسترش روش های ساخت در ابعاد نانو نیاز به بررسی و شبیه سازی رفتار قطعات در ابعاد نانو افزایش یافت، امروزه نرم افزارهای تجاری گوناگونی به شبیه سازی اینگونه قطعات پرداخته اند. در نمونه ای که در شکل (۸) آورده شده است مدل CAD قطعه و مدل اتمی آن در دمای صفر کلوین و مدل اتمی تغییر شکل یافته در دمای محیط آورده شده است [۲].



شکل (۸): مدل CAD یک قطعه در ابعاد نانو

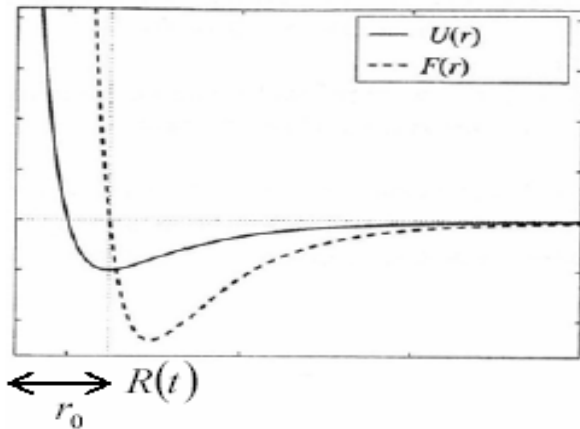
۹- تاثیرات دمایی

مدل ابتدایی در دمای صفر کلوین مدل شده است، بمنظور بررسی تغییر شکل حاصل از تغییر دما قصد داریم توانایی تغییر مدل متناسب با دما را در مدل ایجاد کنیم. به این منظور از رابطه کلاسیک انبساط حرارتی استفاده می کنیم.

$$\Delta L = \alpha' L \Delta T \quad (۴)$$

با وارد نمودن رابطه ۴، متناسب با دما در قطعه تغییر شکل ایجاد می شود. برای اعمال این تغییر شکل ضریبی از فاصله را متناسب با افزایش فاصله هر بعد به آن اضافه می کنیم تا در نهایت شکل به صورت کاملاً یکسان حرکت کند و فاصله های آن تغییر نماید. نکته مهم در این عملیات این است که اضافه شدن فاصله ها باید متناسب با هر یک از ابعاد باشد در غیر این صورت باعث خطا می گردد. در این قسمت بعنوان یک نمونه کاربردی استوانه ای در ابعاد نانو و از جنس طلا که در فرآیند چاپ در ابعاد نانو کاربرد دارد را در دما های مختلف مدل می نمایم.

با وارد نمودن مقادیر ارایه شده در نرم افزار در سه دمای مختلف سه مدل CAD متفاوت بدست می آید. مقدار حداکثر تغییر فاصله در این ساختار در دمای 1337^k درجه کلوین برابر ۱۹. نانو متر یعنی کمتر از قطر یک اتم طلا می باشد. ولی همین میزان تغییر فاصله در



شکل (۱۱): تابع انرژی پتانسیل و نیرو بر اساس فاصله

رابطه ای که بمنظور مدلسازی انرژی پتانسیل ارائه شده و در شبیه سازی دینامیک ملکولی مورد توجه است [۷]. بصورت زیر تعریف می شود.

$$U(r_{ij}) = D \left(\exp[-2\alpha(r_{ij} - r_0)] - 2\exp[-\alpha(r_{ij} - r_0)] \right) \quad (7)$$

که در این رابطه D, α, r_0 انرژی چسبندگی مدول الاستیسیته و فاصله اتمی می باشند که برای هر ذره متناسب با جنس آن تعریف می شوند. به این ترتیب با معادله نشان داده شده می توانیم انرژی پتانسیل در ابعاد اتمی را بیان نماییم.

حال با مشخص شدن انرژی پتانسیل، به مدلسازی انرژی جنبشی حاکم بر سیستم ذرات می پردازیم.

$$T = \int Fdr = \int m\ddot{r}dr = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 \quad (8)$$

حال اگر این معادله را برای سیستم ذرات بیان نماییم معادله زیر بدست می آید.

$$T = \sum_{i=1}^N \frac{m_i \dot{r}_i^2}{2} \quad (9)$$

$$\dot{r}_i^2 = \dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2 + \dot{z}_i^2 \quad (10)$$

۱۲- دینامیک نیوتنی

یکی از روشهای اصلی که مدلسازی ملکولی بر پایه آن گسترش یافته است دینامیک نیوتنی می باشد. که در این مقاله بر این اساس شبیه سازی صورت گرفته است. طبق تعریف دینامیک نیوتنی داریم [۷].

$$m_i \ddot{r}_i = -\nabla_i U + F \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (11)$$

۱۰- دینامیک ملکولی

تمام مطالب ارائه شده در قسمت های قبل پیش زمینه ای بمنظور ورود به بحث مدلسازی دینامیکی ملکولی می باشد. در این مدل سازی با مشخص شدن هندسه به کمک روابط مکانیکی حاکم بر سیستم ذرات مدلی ریاضی از دینامیک ذرات را بدست می آوریم. دینامیک ملکولی یک روش شبیه سازی با استفاده از اتم ها و ملکولها می باشد این مدل سازی بر اساس قوانین شناخته شده مکانیک صورت می پذیرد. کاربرد این شبیه سازی در تحلیل های حرکتی مانند پروب های میکروسکوپ نیروی اتمی و نانو ماشین ها بوده و دلیل استفاده از این شبیه سازی پیچیده بودن حل تحلیلی و بکار بردن حل عددی به کمک این روش می باشد که شبیه سازی را امکان پذیر می نماید [۴]. روش دینامیک ملکولی روشی برای شبیه سازی کامپیوتری بر اساس حل معادلات حرکت نیوتن، لاکرانژ^۱ و اصل همیلتون^۲ و سایر روش های شناخته شده فیزیکی، مکانیکی در مدل های اتمی می باشد. از این روش بمنظور بدست آوردن اطلاعاتی درباره تعادل و خصوصیات دینامیکی و فیزیکی استفاده می شود.

۱۱- مدل سازی دینامیک ذرات

حال جهت بدست آوردن معادلات حرکت حاکم بر سیستم به تعریف معادلات پتانسیل حاکم بر ذرات می پردازیم. همانطور که می دانیم انرژی پتانسیل از رابطه زیر بدست می آید [۵].

$$F_i = -\frac{\delta u}{\delta r_i} = -\left(\frac{\delta}{\delta x_i} + \frac{\delta}{\delta y_i} + \frac{\delta}{\delta z_i} \right) u = -\nabla_i u \quad (5)$$

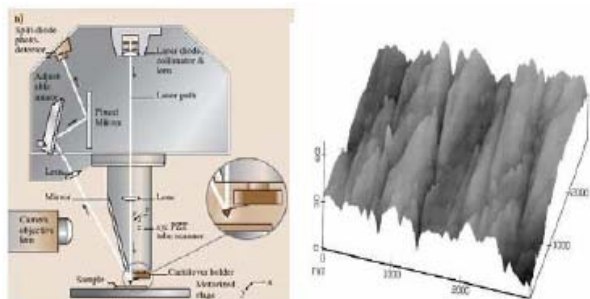
$$i = 1, 2, \dots, N$$

نیروی پتانسیل وارد بر ذرات متناسب با نیرو های بین اتمی آنها تعریف می شوند که رابطه انرژی پتانسیل و نیرو در شکل زیر بر اساس فاصله بیان شده است. همانطور که در نمودار نیز مشخص شده است زمانی که انرژی پتانسیل حداقل میزان خود را دارد نیروی حاصل از آن مساوی صفر بوده و این بدین معنی است که در آن نقطه ذره در تعادل است. و فاصله آن تغییر نمی کند (شکل ۱۱).

ابتدایی ترین مدل ارائه شده برای تابع پتانسیل فوق بصورت رابطه ۶ می باشد.

$$u_{ij} = \begin{cases} = \infty & \text{for } r_{ij} < r_0 \\ = 0 & \text{for } r_{ij} \geq r_0 \end{cases} \quad (6)$$

مدل توپوگرافی سطح را با دقت نانو ارایه دهد، به موازات این کاربرد در کاربردهای بسیار متنوع دیگری نیز از این میکروسکوپ ها استفاده می شود (شکل ۱۳). فرض ارایه شده در این میکروسکوپ ها بر این اصل استوار است که در نوک پروب میکروسکوپ نیروی اتمی یک اتم قرار دارد این فرض بدلیل مشکلات ساخت عملی نشده است و این امر لزوم مدلسازی نوک پروب میکروسکوپ نیروی اتمی را جهت بهینه تر شدن دقت محاسبات و همچنین پیشبینی از کار افتادگی این پروب ها ممکن می کند [۹].



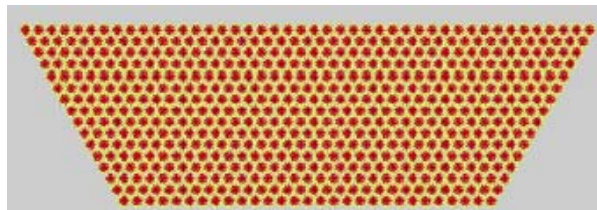
شکل (۱۳): میکروسکوپ نیروی اتمی

۱۴-۲- هندسه

با توجه به تئوری های ارایه شده و استفاده از دینامیک ملکولی می توان نوک پروب میکروسکوپ نیروی اتمی را جهت پیش بینی تغییر فرم نوک آن در اثر نیروی کوالانسی مدل نماییم. برای این منظور ابتدا هندسه حاکم بر پروب را بدست می آوریم. حال اگر اطلاعات جدول (۳) را در مدل اتمی وارد نماییم، مدل هندسی در ابعاد اتمی حاصل می گردد (شکل ۱۴).

جدول (۳): مشخصات هندسی پروب

جنس	طول میکرو متر	عرض میکرو متر	ارتفاع پروب میکرو متر	شعاع نوک پروب نانومتر
Si	225	48	12	۲۰



شکل (۱۴): مدل اتمی

مدل ارایه شده طبق محاسبه نرم افزار از ۲۰۶۹۶۹۲۷۹ اتم تشکیل شده است حل این مدل بصورت کامل به دلیل زمان بر بودن و

در رابطه فوق F_i بیان کننده نیروهای ناپایستار و یا نیروهای خارجی وارد بر سیستم است، و $-\nabla_i U$ نیز بیان کننده نیروهای پایستار وارد بر سیستم است. در بیان نیروهای ناپایستار وارد بر این سیستم F_i را می توان بصورت مجموع دو نیرو که در زیر آمده است مورد بررسی قرار داد.

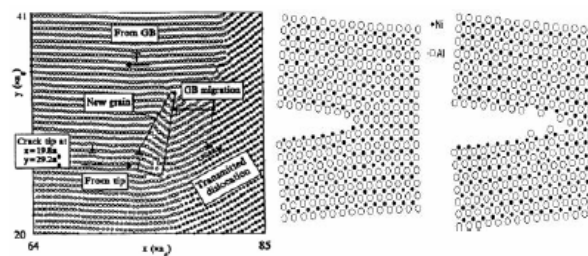
این نیروها ناشی از مدل دمینگ وارد بر سیستم $F_i^s = -m_i \gamma_i \dot{r}_i$ که در آن γ_i ثابت دمینگ می باشد. نیروهای ناشی از تاثیرات حرارتی با کمک رابطه $R(t)$ مدلسازی می شوند.

که در نهایت با اضافه شدن این دو نیرو معادله نهایی بصورت زیر بیان می شود.

$$m_i \ddot{r}_i = -\nabla_i U - m_i \gamma_i \dot{r}_i + R_i(t) \quad (12)$$

۱۳- نتایج و کاربرد ها

مدلسازی دینامیک ملکولی در موارد متعددی از شبیه سازیهای میکرو نانو مانند شبیه سازی رشد ترک در ابعاد نانو به کمک روش اجزا محدود، مدلسازی نابجاییها در میکرو استراکچر [۸] مورد توجه قرار گرفته است. با توجه به اهمیت بسیار بالای میکروسکوپ های نیروی اتمی در مسایل مرتبط با نانو مکانیک و لزوم شناخت کافی نسبت به مکانیزم تغییرات در سطح پروب این میکروسکوپ ها بدلیل تاثیر این تغییرات بر کیفیت و دقت اسکن صورت گرفته از سطح و پیش بینی عمر مفید این پروب ها، روش شبیه سازی دینامیک ملکولی در این مقاله مورد استفاده قرار گرفته است (شکل ۱۲).



شکل (۱۲): مدلسازی رشد ترک و میکرو استراکچر

۱۴- شبیه سازی پروب میکروسکوپ نیروی اتمی به

روش دینامیک ملکولی

۱۴-۱- میکروسکوپ نیروی اتمی

میکروسکوپ نیروی اتمی که بصورت گسترده در نانوتکنولوژی مورد استفاده قرار گرفته است بر پایه این فرض ساخته شده است که با استفاده از تغییرات نیروی کوالانسی بین اتمهای سطح و پروب میکروسکوپ نیروی اتمی که حاصل از توپوگرافی سطح می باشد،

دسته دوم:

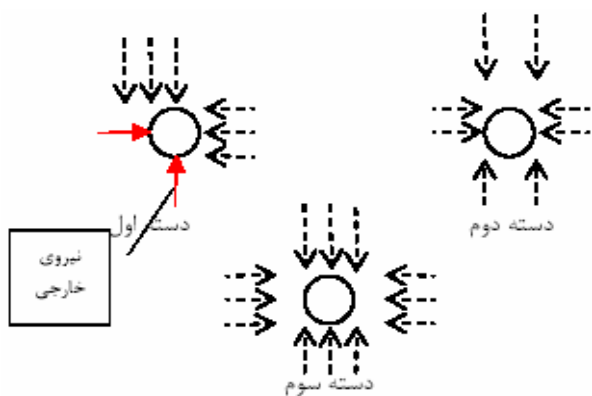
$$\sum m\ddot{x} = -f_{x1} - f_{x2} - f_{x3} - f_{x4} \quad (19)$$

$$\sum m\ddot{y} = -f_{y1} - f_{y2} - f_{y3} - f_{y4} \quad (20)$$

دسته سوم:

$$\sum m\ddot{x} = -f_{x1} - f_{x2} - f_{x3} - f_{x4} - f_{x5} - f_{x6} \quad (21)$$

$$\sum m\ddot{y} = -f_{y1} - f_{y2} - f_{y3} - f_{y4} - f_{y5} - f_{y6} \quad (22)$$



شکل (۱۶): دیاگرام آزاد ذرات

در انتها تمام معادلات در قالب یک سیستم کوپل شده از معادلات دیفرانسیل بدست می آیند. که حل این معادلات به ازای شرایط مرزی مشخص شده می تواند با توجه به نیرو تغییر مکان اتم های پروب میکروسکوپ اتمی را بیان نماید. برای هر اتم چهار معادله زیر صادق است.

$$\frac{dy_1}{dt} = y_2 \quad (23)$$

$$\frac{dy_2}{dt} = \frac{1}{M}(F_y - \sum f) \quad (24)$$

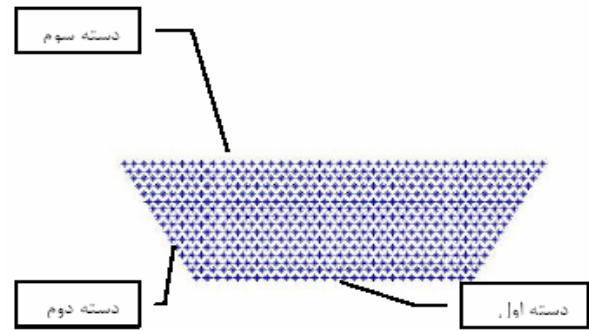
$$\frac{dy_3}{dt} = y_4 \quad (25)$$

$$\frac{dy_4}{dt} = \frac{1}{M}(F_x - \sum f) \quad (26)$$

۱۴-۴- روش حل معادلات حرکت

برای حل این دستگاه معادلات با توجه به مکان اولیه اتم ها و صفر فرض نمودن سرعت اولیه پروب مقادیر اولیه مشخص می گردد. معادلات از نوع مقدار اولیه بوده و برای حل از روش رانگ کوتاه مرتبه ۴ استفاده می شود.

امکانات سخت افزاری امکان پذیر نمی باشد زیرا این مدل در انتها به دستگاه معادلات دیفرانسیلی با دو برابر تعداد اتم ها منجر می شود. بنابراین ارتفاع مدل ارایه شده را ۱۰ نانو متر فرض کرده و با توجه به ابعاد اتم سیلیسیم و شبکه آن مدل زیر ارایه می شود (شکل ۱۵).



شکل (۱۵): مدل هندسی نانو

۱۴-۳- مدل سازی دینامیکی

در این مدل سازی فرض نمودیم عملیات در خلأ صورت می گیرد و انرژی جنبشی صفر می باشد. جهت مدلسازی دینامیک در ابتدا با کمک رابطه ۵ نیروی پتانسیل که در حالت ساکن وجود دارد را بدست می آوریم.

$$f_x = \frac{\partial U}{\partial x} \quad (13)$$

$$f_x = \left(2\alpha D \times \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right) \times \left(\frac{\exp[-2\alpha(\sqrt{x^2 + y^2} - r_0)] - \exp[-\alpha(\sqrt{x^2 + y^2} - r_0)]}{\exp[-\alpha(\sqrt{x^2 + y^2} - r_0)]} \right) \quad (14)$$

$$f_y = \frac{\partial U}{\partial y} \quad (15)$$

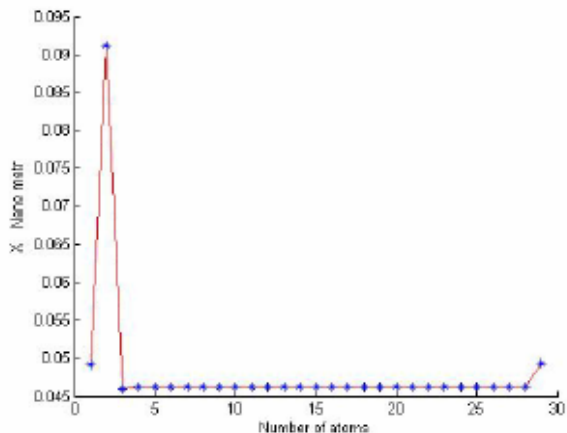
$$f_y = \left(2\alpha D \times \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right) \times \left(\frac{\exp[-2\alpha(\sqrt{x^2 + y^2} - r_0)] - \exp[-\alpha(\sqrt{x^2 + y^2} - r_0)]}{\exp[-\alpha(\sqrt{x^2 + y^2} - r_0)]} \right) \quad (16)$$

با توجه به رابطه ۱۶، ۱۴ و استفاده از مدلسازی دینامیک می توان برای هر ذره در شبکه معادلات تعادل را بیان نماییم. در بررسی معادلات دینامیک حاکم بر سیستم به سه مدل معادله بر خواهیم خورد که در شکل (۱۶) نمایش داده شده است F_x و F_y . نیرو های خارجی می باشند.

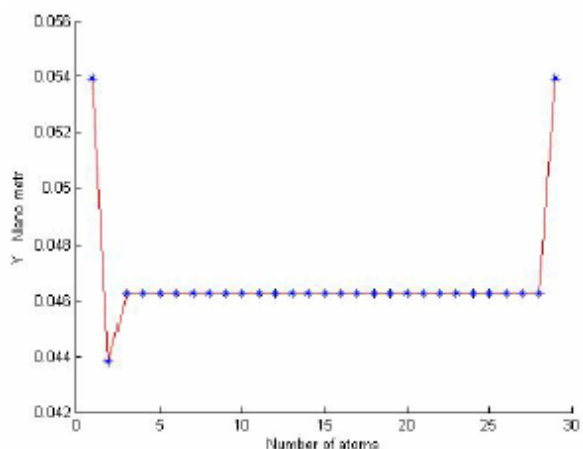
دسته اول:

$$\sum m\ddot{y} = -f_{y1} - f_{y2} - f_{y3} + F_y \quad (17)$$

$$\sum m\ddot{x} = -f_{x1} - f_{x2} - f_{x3} + F_x \quad (18)$$



شکل (۱۸): تغییر مکان سطح اول در راستای X



شکل (۱۹): تغییر مکان سطح اول در راستای Y

برای مشخص شدن اثر تغییرات جابه جایی نسبی، نمودار جابه جایی هر ذره را در سطح دوم رسم می کنیم. همانطور که انتظار داشتیم برای خنثی کردن اثر نیروی سطح اول جابه جاییها در جهت معکوس صورت و مقدار آن در ابتدا بعلا شرایط مرزی از میانگین، بیشتر است و در ادامه به تعادل رسیده در انتها نیز مجدداً بعلا شرایط مرزی تغییر می کند (شکل ۲۰ و ۲۱).

در این قسمت بمنظور مقایسه سطوح مختلف تغییر مکان تمامی اتم های مدل بررسی می شود که همانطور که انتظار داشتیم در لایه اول بیشترین و در لایه های بعدی کمتر می شود. و به سمت صفر میل می کند (شکل ۲۲ و ۲۳).

بمنظور بررسی تاثیر جهت نیرو بر جابه جایی نسبی ذرات نیرو های خارجی را در جهت منفی x و منفی y به اندازه ۱۰ نانو نیوتن وارد می کنیم. همانطور که انتظار داشتیم جهت جابه جایی در اتم های سطح اول منفی شده است.

۱۵- بررسی نتایج مدلسازی

در این مرحله به بررسی نتایج حاصل از حل معادلات می پردازیم. برای این منظور مدلی مطابق داده های جدول (۴)، (۵) ارایه می شود [۸]. در ابتدا کلیه نقاط را در دو حالت قبل و بعد از بارگذاری رسم می کنیم (نمایش دهنده بعد از بارگذاری و ۰ نمایش دهنده قبل از بارگذاری می باشد). همانطور که از شکل (۱۷) مشخص است این دو حالت متفاوت می باشند. در حالت بعد از بارگذاری متناسب با جهت نیرو که در جدول مشخص شده است ذراتی که در تماس با نیرو هستند تغییر مکان می دهند و متناسب با آن سایر ذرات نیز تغییر می کنند. که این حرکت برای ذرات سطح اول کاملاً محسوس بوده و در شکل مشخص است.

جدول (۴): مشخصات هندسی مدل

جنس	ارتفاع نانو متر	شعاع نوک پروب نانو متر	نیروی خارجی نانو نیوتن	جرم اتمی amu نیوتن	شعاع اتمی نانو متر
si	10	20	10	10	0.341

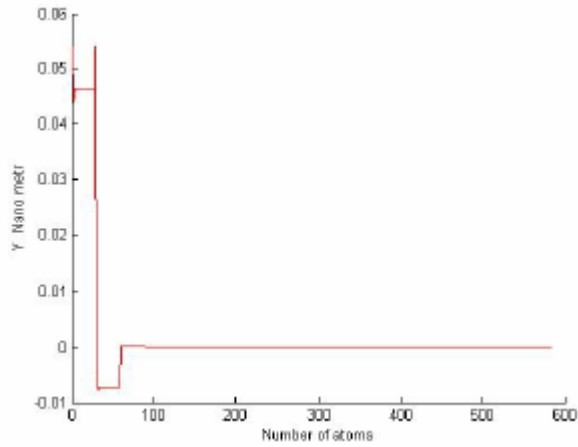
جدول (۵): ضرایب معادله نیروی پتانسیل

	D(kcal/mol)	α
Si-Si	0.2956	11.7139

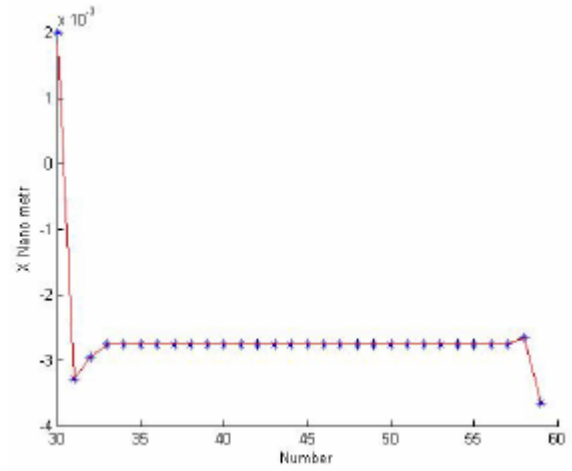


شکل (۱۷): تغییر مکان بعد و قبل از بارگذاری

برای بررسی میزان این تغییر شکل ها و مقایسه تحلیلی نتایج، اتم های سطوح مختلف را در نمودارهای جداگانه رسم می کنیم. در شبیه سازی اتم های سطح اول، اتم اول تحت شرایط مرزی متفاوتی است و با سه اتم در مجاورت است. همین امر باعث می شود تغییر مکان متفاوتی در آن ایجاد شود که این تغییر مکان با تاثیر به روی اتم بعدی باعث می شود این اتم نیز تغییر مکان متفاوتی نسبت به اتم های دیگر این سطح داشته باشد. تغییر مکان های نسبی در این مرحله به حالت تعادل می رسد. در اتم انتهایی بعلا متفاوت بودن شرایط مرزی مجدداً تغییر مکان نسبی افزایش شدید خواهد داشت (شکل ۱۸ و ۱۹).

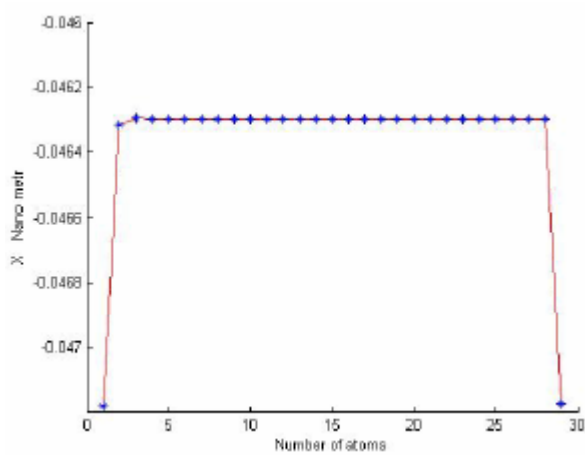


شکل (۲۳): تغییر مکان اتم ها در راستای Y

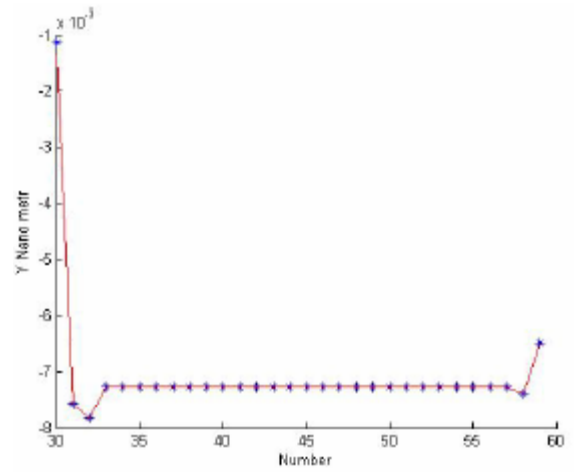


شکل (۲۰): تغییر مکان سطح دوم در راستای X

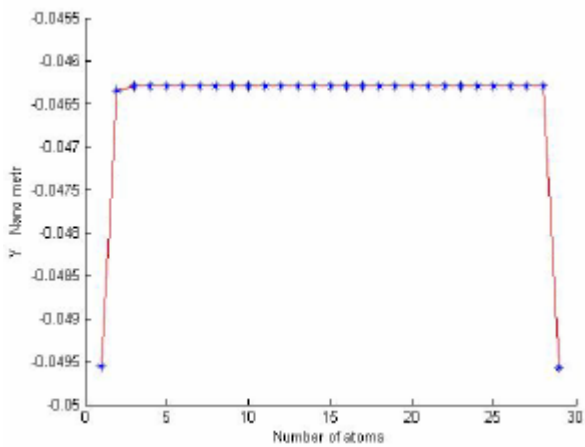
میزان میانگین این جابه جایی متناسب با حالت قبل ولی در جهت منفی می باشد. در ابتدا و انتها بدلیل شرایط مرزی متفاوت شاهد جابه جایی بزرگتری خواهیم بود (شکل ۲۴ و ۲۵).



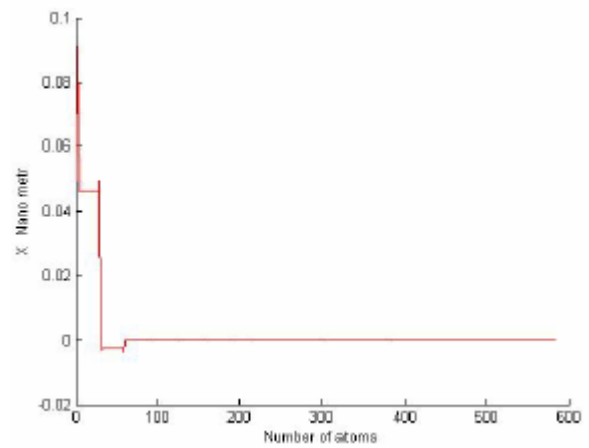
شکل (۲۴): تغییر مکان سطح اول در راستای X



شکل (۲۱): تغییر مکان سطح دوم در راستای Y



شکل (۲۵): تغییر مکان سطح اول در راستای Y



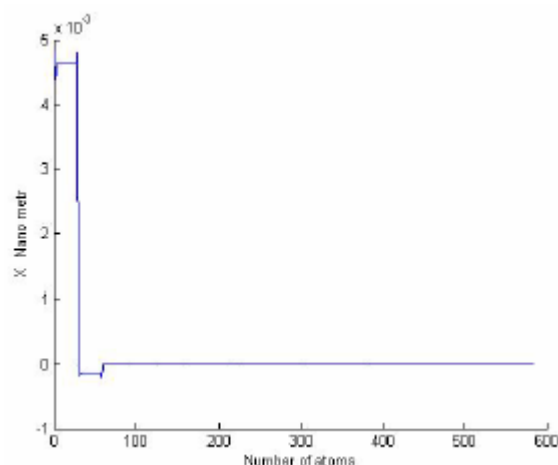
شکل (۲۲): تغییر مکان اتم ها در راستای X

r_{ij}	فاصله نسبی اتم ها، n m
r_o	فاصله تعادل اتم ها، n m
T	دما، K
u	انرژی پتانسیل، J
x	فاصله در راستای محور x، n m
y	فاصله در راستای محور y، n m
z	فاصله در راستای محور Z، n m
α	مدول الاستیسیته اتمی،
α'	ضریب انبساط حرارتی، 1/K
γ	ضریب دمپینگ، kg/

۱۸- مراجع

- [1] Ming Chieh Cheng ,Yun Liang Hsueh , Hsung Yu Chen, Cheng Kuo Sung, "Length Effect on Formation of Metallic Patterns by Nanoimprinting Molecular Dynamics Simulation", International Conference on Advanced Manufacture, Taipei Taiwan, Vol. 505-507 (2), 2005, pp. 133-138.
- [2] Michael Rieth, "Nano-Engineering in Science and Technology: An Introduction to the World of Nano-Design", World Scientific Pub Co Inc, 2003.
- [3] Ashcroft, Mermin, "solid state physics", Holt, Rinehart, and Winston, New York, 1976.
- [4] D. C. Rapaport, "the art of molecular dynamics simulation second edition", Cambridge University Press, 2004.
- [5] Wing Kam Liu, Eduard G.Karpov Harold S.Park, "Nano Mechanical and Materials", Wiley, 2005.
- [6] Jin-Ray Hsu , Chin-Chung Hsiao, Cheng-Kuo Sung, Chaug-Liang Hsu, "Thermo-mechanical Effect on Nanostructure Formation using Atomic Force Microscopy" , International Conference on Advanced Manufacture Taipei Taiwan, Vol. 505-507 (2), 2005, pp. 151-156.
- [7] Alan Hichliffe, "Modelling Molecular Structures", John Wiley & Sons, 2000.
- [8] Dierk Raabe, "Computational Materials Science", Wiley-VCH, 1998.

در این قسمت شبیه سازی را با نیروی ۱ نانو نیوتن انجام می دهیم. مشاهده می شود تغییر مکان بشدت کاهش یافته است ولی روند کلی تغییر مکان ها متناسب با حالت قبل می باشد(شکل ۲۶).



شکل (۲۶): تغییر مکان اتم ها در راستای X

۱۶- نتیجه گیری

در این مقاله به بحث مدلسازی ملکولی پرداخته و نرم افزاری بر این پایه ایجاد نمودیم. با استفاده از مدلسازی ملکولی و وارد نمودن روابط مرسوم دینامیک، پروب میکروسکوپ نیروی اتمی را در ابعاد نانومتری با فرض اینکه عملیات در خلأ صورت پذیرد و در نتیجه انرژی جنبشی صفر باشد، مدل نمودیم و با شبیه سازی رفتار این میکروسکوپ تحت بارگذاری های مختلف، تغییر مکان های نسبی پروب میکروسکوپ نیروی اتمی را شبیه سازی نمودیم. این شبیه سازی در بسیاری از کار برد های این میکروسکوپ، مانند نانو رباتیک، نانو چاب، و کاربردهای تصویر برداری می تواند مورد استفاده قرار گیرد. به کمک روش دینامیک ملکولی می توانیم تصویری از آنچه در دنیای نانو اتفاق می افتد را مدل نماییم و به پیش بینی رفتار مواد بپردازیم.

۱۷- فهرست علائم

a_0	ثابت شبکه، n m
D	انرژی چسبندگی اتمی، kcal/mol
F_i	نیروی ناپایستار، n N
f_i	نیروی پتانسیل، n N
L	طول، n m
M	جرم اتمی، amu
r	فاصله اتم ها، n m

- [9] Bharat Bhushan, Springer "Handbook of Nanotechnology", Springer; 2004.
- [10] Ersan Demiralp, Tahir Cagin, William A. Goddard, "Morse Stretch Potential Charge Equilibrium Force Field for Ceramics Application to the Quartz-Stishovite Phase Transition and to Silica Glass", Physical review letters, Vol. 82, No. 8, 1999, pp. 1708-1711.