شبیه‌سازی اتمی و محیط پیوسته روی خاصیت کششی یک فلز تک کریستال دارای سوراخ در ابعاد نانومتر

مهدی رضائی فریمانی[1]، حمید اختراعی طوسی[2]
Mahdi_rezaei2@yahoo.com

چکیده

در این پژوهش، شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی و اجزاء محدود برای پیشبینی خواص مکانیکی فلز تک کریستال نقره دارای سوراخ در ابعاد نانومتر انجام شده است. در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، روش انتقال لایه‌ای از سه بعد به دو بعد و در شبیه‌سازی اجزاء متناهی، مدل تنش صفحه‌ای بکار رفته‌اند. توسط این شبیه‌سازی‌ها، کاهش در مدول الاستیک ناشی از وجود سوراخ‌ها، شکل سوراخ‌ها و ترتیب قرارگیری سوراخ‌های چندتایی مطالعه گردیده است. روند کاهش مدول الاستیسیته در شبیه‌سازی به روش اجزاء متناهی مشابه این روند در شبیه‌سازی به روش دینامیک مولکولی است؛ اما برای داشتن نتایج دقیق، انجام شبیه‌سازی اتمی لازم است.

کلیدواژه:

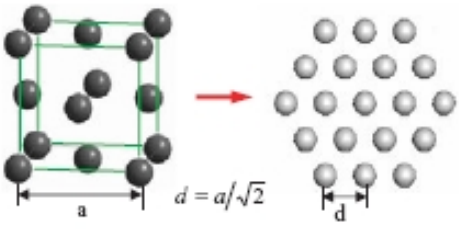
روش دینامیک مولکولی - روش اجزاء متناهی - پتانسیل فینیس و سینکلر - انتقال لایه‌ای

1- دانشجوی کارشناسی ارشد مکانیک دانشگاه فردوسی مشهد
2- استادیار گروه مهندسی مکانیک دانشگاه فردوسی مشهد

1- مقدمه

طراحی مواد جدید، زمینه جذابی از تحقیق و توسعه را شامل می‌شود. برای طراحی مناسب، ساختار و خواص مادی باید پیشبینی شوند. این پیشبینی از طریق روش‌های تئوری و شبیه‌سازی کامپیوتری صورت می‌گیرد. بدین منظور باید آگاهی عمیقی از خواص ماده بویژه در مقیاس ریز حتی در سطح اتمی داشت. در مکانیک محیط پیوسته، روش اجزاء متناهی به طور گسترده‌ای برای مدل کردن مسائل مکانیک جامدات مورد استفاده قرار می‌گیرد. روش اجزاء متناهی بعد از چندین دهه رشد هم اکنون به دوران بلوغ خود رسیده است و می‌تواند مسائل متعددی از مقیاس ریز تا درشت را حل نماید؛ با این حال به خاطر فرض پیوسته بودن ماده در تئوری مربوط به روش اجزاء متناهی، این روش برای حل مسائل در مقیاس اتمی قابل اتکا نیست. در مقیاس نانومتر، پدیده‌ها و اثراتی بوجود می‌آیند که کاملاً متفاوت با آنها در مقیاس ماکرو هستند. این تفاوتها هم از جنبه کوچک بودن مقیاس اندازه و هم کوچک بودن مقیاس زمان در سطح اتمی ناشی می‌شوند. روش دینامیک مولکولی (Dynamics Molecular) یکی از رو به توسعه‌ترین روش‌ها در مطالعه رفتار مکانیکی سازه‌ها و مواد در مقیاس نانومتر است[1]. روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با در نظر گرفتن حرکات اتمی، قادر به شبیه‌سازی مکانیزم‌های فیزیکی نانوساختارها می‌باشد. دینامیک مولکولی عمومی، سه بعدی است که آن هم ناشی از طبیعت سه بعدی مواد می‌باشد. یکی از اشکالات روش دینامیک مولکولی سه بعدی، بالا بودن هزینه‌های محاسباتی آن است زیرا پایه این روش به انتگرالگیری زمانی روی معادلات حرکتی ذراتی استوار است که همگی یا حداقل بخشی از این ذرات، در حال اثر متقابل بر هم هستند. با وجود این اثرات متقابل، باید مسیر حرکت ذرات را در هر لحظه بتوان ردیابی و مشخص کرد؛ برای این منظور ناچار به استفاده از مقیاس زمانی بسیار کوچکی در حدود فمتوثانیه (10^{-12}s) هستیم. با وجود سوپرکامپیوترهای امروزی و بکارگیری موازی تعداد زیادی واحد پردازشگر مرکزی (CPU)، سیستمی متشکل از ملیاردها اتم قابل شبیه‌سازی با این روش است اما همچنان مقیاس زمانی از حد نانوثانیه کوچکتر نشده است [2]. دقیقاً مانند مدلهای دو بعدی از قبیل مسائل تنش صفحه‌ای، کرنش صفحه‌ای و متقارن صفحه‌ای در مکانیک محیط پیوسته، دینامیک مولکولی دو بعدی در بدست آوردن مدلی برای مسائل سه بعدی در مقیاس اتمی بکار می‌رود. در واقع هرچند دینامیک مولکولی دو بعدی، مدلی ساده شده است اما در فهم مکانیزم فیزیکی سیستم با حجم محاسباتی بسیار کمتری نسبت به مدل سه بعدی بسیار مفید است [3-5].

هرچند کاربرد تکنیکهای مکانیک کوانتوم (Quantum Mechanics) به سرعت توسعه پیدا کرده است اما هنوز هم استفاده از پتانسیل‌های تجربی در مدل کردن مواد در سطح اتمی لازم است. تاکنون پتانسیل‌های داخل اتمی متنوعی در شبیه‌سازی به روش دینامیک مولکولی معرفی شده و بکار رفته‌اند؛ این پتانسیل‌ها شامل پتانسیل لنارد- جونز [6]، پتانسیل اتم جای داده شده [7و8] و پتانسیل فینیس- سینکلر [9و10] می باشند.



شکل(1): انتقال لایه ای کریستال از سه بُعد به دو بُعد

در این مقاله، اثر سوراخ در مقیاس نانومتر روی رفتار کششی الاستیک یک فلز تک-کریستال توسط روش دینامیک مولکولی مطالعه شده است. برای مقایسه نتایجِ حل اتمی با دیدگاه محیط پیوسته، شبیه‌سازی اجزاء متناهی نیز انجام شده است. فلز نقره (Ag) به عنوان یک فلز تک-کریستال در شبیه‌سازی کامپیوتری استفاده شده است. سوراخ‌ها به شکلهای دایره‌ای و بیضوی هستند و اثر ترتیب قرارگیری سوراخ‌های چندتایی نیز بررسی شده است.

2- مدل کردن و شبیه‌سازی

در شبیه سازی دینامیک مولکولی دو بعدی، یک مدل لایه‌ای اتمی مثلثی به نمایندگی از Ag سه بعدی با ساختار مکعبی با اتم در مرکز وجوه (fcc) استفاده شده که در شکل (1) مشاهده می‌شود.

پتانسیل فینیس- سینکلر به عنوان پتانسیل داخل اتمی به کار می‌رود. این پتانسیل برای پیشبینی خواص محدوده‌ای از فلزات fcc کاملاً مناسب است [11]، شکل آن ساده و از لحاظ محاسباتی هزینه زیادی ندارد.

پتانسیل فینیس- سینکلر به شکل زیر است:

$$U = \frac{1}{2}\sum_{i,j:i\neq j}^{N} V_1(r_{ij}) + \sum_{i=1}^{N} V_2(n_i) \qquad (1)$$

که در آن $V_1(r_{ij})$ پتانسیل مزدوج (two-body)، $V_2(n_i)$ پتانسیل چند جسمی (many-body) و N تعداد اتمهای سیستم می‌باشند. $V_2(n_i)$ به چگالی ابر الکترونی n_i اطراف اتم i به صورت زیر وابسته است:

$$V_2(n_i) = -A\sqrt{n_i} \qquad (2)$$

A پارامتر تنظیمی و n_i چگالی ابر الکترونی اطراف اتم iاُم به صورت زیر است:

$$n_i = \sum_{i:i\neq j}^{N_g} \Phi(r_{ij}) \quad (3)$$

N_g تعداد اتمهای همسایه اتم i و تابع $\Phi(r_{ij})$ به صورت زیر است:

$$\Phi(r_{ij}) = \begin{cases} (rij-d)^2 & , r_{ij} \le d \\ 0 & , r_{ij} > d \end{cases} \quad (4)$$

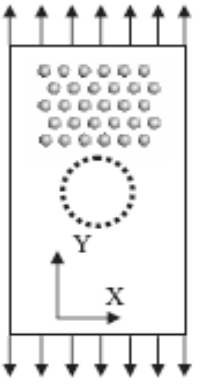
r_{ij} فاصله بین دو اتم i و j است و d پارامتر تنظیمی می‌باشد. در رابطه (1)، پتانسیل مزدوج به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$V_1(r_{ij}) = \begin{cases} (r_{ij}-c)^2 \times (c_0 + c_1 r_{ij} + c_2 r_{ij}^2) & , r_{ij} \le c \\ 0 & , r_{ij} > c \end{cases} \quad (5)$$

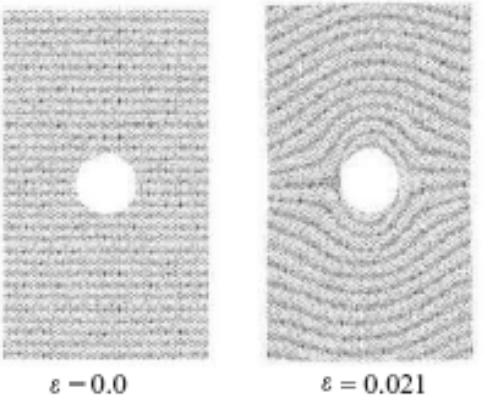
در عمل، c عددی بین دومین و سومین فاصله همسایگی نزدیک به اتم مورد نظر در نظر گرفته می‌شود. c_0، c_1 و c_2 که پارامترهای تنظیمی می باشند از طریق داده‌های آزمایشی بدست می آیند. این پارامترها به همراه پارامترهای A و d برای نقره (Ag) در منبع [12] آمده‌اند. سوراخ‌ها توسط حذف چند اتم بوجود آمده‌اند و سطوح آنها از هرگونه تنش آزاد است. پیکره اولیه قبل از کشش، کاملاً آزاد و بدون تنش است. بارگذاری کششی تنها در یک جهت و به طور یکنواخت روی اتم‌های یک لایه در دو انتها اعمال می‌شود. برای حذف اثر سطح، شرایط مرزی متناوب (Periodic Boundary Conditions) در تمام جهات اعمال می‌گردد. فرض می‌شود که درجه حرارت 0/01 درجه کلوین است. انتگرالگیری زمانی سرعت ورلت (Verlet Velocity) [13] به عنوان الگوریتم جمع زمانی بکار می‌رود و گام زمانی 10 فمتوثانیه درنظر گرفته می‌شود. برای مقایسه با نتایج حاصل از مکانیک محیط پیوسته، شبیه‌سازی اجزاء متناهی توسط نرم افزار NASTRAN بکار گرفته شده است.

3- نتایج و بحث

مدل اتمی دو بعدی در شکل (2) نشان داده شده است. صفحه‌ای مستطیلی را با یک لایه مثلثی درنظر بگیریم که اندازه آن 200d×100d (d ثابت لایه ای مثلثی برابر با 0/2892nm) یا 28/92nm×50/09nm می‌باشد. نیروی کششی به طور یکنواخت روی اتمهای بالا و پایین لایه در جهت Y توزیع شده است. پیکره اتمی قبل و بعد از کشش در شکل (3) مشاهده می‌شود. تأثیر شعاع



شکل(2): مدل اتمی دو بعدی



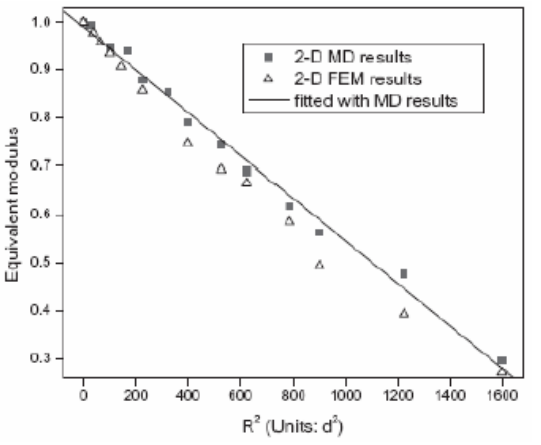
شکل(3): پیکره اتمی قبل و بعد از اعمال کشش

سوراخ روی مدول الاستیک در مدل اتمی دوبعدی مطالعه شده است. دوازده مدل با شعاع سوراخ از d 5 تا 40d شبیه‌سازی شده‌اند. منحنی مدول الاستیسیته- شعاع سوراخ در شکل4 نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که کاهش در مدول به طور تقریباً خطی به مربع شعاع سوراخ بستگی دارد.

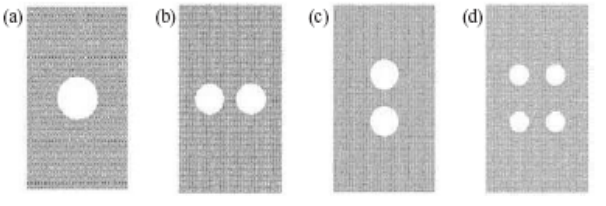
برای مقایسه، مدل‌های تنش صفحه‌ای دو بعدی با همان اندازه‌ها با استفاده از روش اجزاء متناهی شبیه‌سازی شده‌اند.

منحنی مدول الاستیک- شعاع سوراخ در نمودار شکل(4) رسم شده است. مشاهده می‌شود که نتایج حاصل از مکانیک محیط پیوسته به طور زیادی شبیه به نتایج حاصل از حل اتمی هستند و البته اختلاف هم بین این دو دیده می‌شود.

روش اجزاء متناهی، مدول کمتری را نسبت به روش دینامیک مولکولی پیشبینی کرده است؛ بنابراین برای بعضی از مسائل مکانیک در مقیاس نانومتر، حل مکانیک محیط پیوسته می‌تواند راهنمایی در درک آنچه واقعاً وجود دارد باشد و برای داشتن نتایج دقیقتر، شبیه‌سازی در مقیاس اتمی ضروری می‌شود.



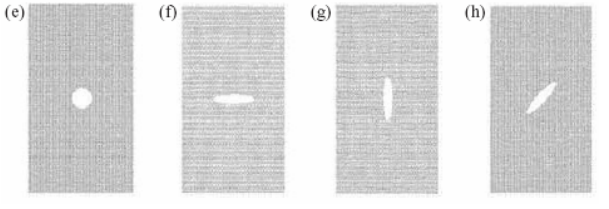
شکل(4): تغییر مدول الاستیک با شعاع سوراخ. تحلیلهای دینامیک مولکولی دو بعدی و اجزاء متناهی- تنش صفحه ای



شکل(5): مدلهای مختلف ترتیب قرارگیری سوراخها

جدول(1): مدول الاستیک برای مدلهای a,b,c,d

مدل	a	b	c	d
نتایج دینامیک مولکولی	0/791	0/779	0/855	0/832
نتایج اجزاء محدود	0/787	0/760	0/831	0/802



شکل(6)- مدل سوراخهای بیضوی

جدول(2) الاستیک مدلهای e,f,g,h

مدل	a	b	c	d
نتایج دینامیک مولکولی	0/953	0/843	0/985	0/917
نتایج اجزاء محدود	0/936	0/830	0/965	0/901

توزیع سوراخها نیز می‌تواند روی مدول الاستیسیته اثر بگذارد. چهار مدل که دارای سوراخهایی با سطح برابر هستند در شکل(5) نشان داده شده‌اند. شعاع سوراخ در مدل (a) برابر با 20d و در مدلهای (b) و (c) برابر با 14/14d می‌باشد. در مدل (c) دو سوراخ در راستای کشش و در مدل (b) در جهت عمود بر این راستا نسبت به هم قرار داده شده‌اند. شعاع سوراخها در مدل (d) برابر با 10d است. مدول الاستیسیته منتجه برای این چهار مدل در جدول (1) آورده شده است. مدل (b) نسبت به (c) کاهش بیشتری را در مدول نتیجه داده است؛ چیزی که از ابتدا هم مشخص بود زیرا سطح مقاوم در برابر نیروی کششی اعمالی، در آن کوچکتر از مورد (c) می‌باشد. با مقایسه مدل‌های (a) و (b) همین دلیل باعث می‌شود که مدل (b) کاهش بیشتری را نسبت به مدل (a) داشته باشد. با مقایسه مدل‌های (a) و (d) دیده می‌شود که گرچه مساحت کلی و جهت قرارگیری سوراخها یکسانند اما مدول (a) کمتر از مدول (d) بدست آمده است که از آن استنباط می‌شود که یک سوراخ بزرگ نسبت به چند سوراخ با مساحت کلی مساوی، موجب کاهش بیشتری در مدول الاستیک می‌شود. حال سوراخهای بیضوی شکل را در نظر می‌گیریم. همانطور که در شکل(6) دیده می‌شود، چهار مدل، سطح سوراخ یکسانی دارند. شعاع سوراخ دایره‌ای 9/54d است و طول قطر بزرگ و کوچک به ترتیب 20d و 4/5d برای مدلهای (f)، (g) و (h) هستند. مدول الاستیک منتجه برای هر مدل در جدول لیست شده‌اند. مشاهده می‌شود که سوراخهای بیضوی هم اندازه با جهات مختلفِ قرارگیری، تأثیر کاملاً متفاوتی برروی مدول الاستیک دارند. مدول الاستیسیته در مدل (f) کوچکتر از (e) است در حالیکه مدول (g) بزرگتر از (e) می‌باشد؛ این دو توسط مقدار سطح مقاوم در برابر نیروی کششی توجیح می‌شوند. وجود یک سوراخ بیضوی، مدول الاستیک را اساساً در جهت قطر کوچک کاهش می‌دهد. برای مدل (h) انتظار داریم که مدول در جهات X و Y به طریقی مشابه کاهش داشته باشد. با مقایسه مدلهای (h) با (e) مشاهده می‌شود که مدول (h) کوچکتر است. در واقع می‌توان نتیجه گرفت که سوراخ بیضوی، مدول را نسبت به سوراخ دایره‌ای با همان سطح بیشتر کاهش می‌دهد.

4- نتیجه‌گیری

هدف این پژوهش، پیشبینی خواص مکانیکی مواد در مقیاس نانومتر است. کاهش در بعضی از خواص، بدلیل وجود نوعی از عیوب در ماده ناشی می‌شود. در این مقاله، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی دو بعدی و شبیه‌سازی اجزاء متناهی روی مدل تنش صفحه ای انجام و تأثیر وجود سوراخ با مقیاس نانومتر روی مدول الاستیک یک

فلز تک کریستال مطالعه شده است. وجود سوراخ باعث کاهش در مدول الاستیک مواد تک کریستال می‌شود. کاهش در مدول ماده با وجود سوراخ دایره ای تقریباً به طور خطی با مربع شعاع سوراخ متناسب است. یک سوراخ بزرگ نسبت به چند سوراخ کوچکتر با همان مساحت کلی ناحیه تهی، کاهش بیشتری را در مدول الاستیک باعث می‌شود. سوراخ‌های بیضوی نسبت به سوراخ‌های دایره ای کاهش بیشتری را در مدول الاستیک موجب می‌شوند. برای مواد با سوراخ بیضوی، مدول الاستیک در جهت عمود بر قطر بزرگ نسبت به جهت عمود بر قطر کوچک کاهش بیشتری دارد.

برای برخی از مسائل مکانیک در مقیاس نانومتر، حل مکانیک محیط پیوسته می‌تواند نتایجی بدست دهد که راهنمای ما بسوی حل واقعی مسئله باشد. برای داشتن پاسخ واقعی‌تر در این نوع از مسائل، بکارگیری روش‌های شبیه‌سازی در مقیاس اتمی -که نمونه ای از آن روش دینامیک مولکولی است- ضروری است

5- مراجع

[1] Rafii-Tabar H, “Modeling the nano-scale phenomena in condensed matter physics via computer-based numerical simulation”, Phys. Rep. 225- 239, 2000.

[2] Vashishta P, Kalia RK and akano A, “Multimillion atom molecular dynamics simulations of nanostructures on parallel computers”, J.Nanoparticle Res. 5, 119-135, 2003.

[3] Hua L, Rafii-Tabar H and Cross M, “Molecular dynamics simulation of fracture using an N-body potential”, Phil. Mag. Lett., 217-237, 1997.

[4] Rafii-Tabar H, Hua L and Cross M, “A multi-scale atomisticcontinuum modelling of crack propagation in a two-dimensional macroscopic plate”, J. Phys.: Condens. Matter, 102-117, 1998.

[5] Perez D and Lewis L J, “Molecular-dynamics study of ablation of solids under femtosecond laser pulses”, Phys. Rev. B 67, 184-192, 2003.

[6] Paskin A and Gohar A, “Computer simulation of crack propagation”, Phys. Rev. Lett., 440-454, 1980.

[7] Daw M S and Bakes M I, “Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals”, Phys. Rev.B29, 364-373, 1984.

[8] Baskes M I, “Modified embedded atom potentials for cubic materials and impurities”, Phys. Rev. B 46, 227-235, 1992.

[9] Finnis M W and Sinclair J E, “A simple empirical N-body potential for transition metals”, Phil. Mag., 150-164, 1984.

[10] Sutton A P and Chen J, “Longrange Finnis–Sinclair potentials”, Phil. Mag. Lett., 161-173, 1990.

[11] Sutton A P and Chen J, “Longrange Finnis–Sinclair potentials”, Phil. Mag. Lett., 186-195, 1990.

[12] Doyama M and Kogure Y, “Embedded atom potentials in fcc and bcc metals”, Comp. Mater. Sci., 214-228, 1999.

[13] Allen M P and Tildesley D J, “Computer Simulation of Liquids”, Oxford: Clarendon, 1987.