

تحلیل رفتار مکانیکی - حرارتی نانوسیم طلا به روش دینامیک مولکولی

محمد طهماسبی پور*^۱، ریحانه احمدی^۲، مهرزاد مدرس^۳

۱- استادیار، دانشکده علوم و فنون نوین، دانشگاه تهران، تهران، ایران

۲- کارشناس ارشد، آزمایشگاه میکرو نانو ساخت، دانشکده علوم و فنون نوین، دانشگاه تهران، تهران، ایران

۳- دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده علوم و فنون نوین، دانشگاه تهران، تهران، ایران

* مسئول مکاتبات: tahmasebipour@ut.ac.ir

(تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۰۲/۲۵ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۷/۰۸/۰۶)

چکیده: با رشد و توسعه فزاینده علم و فناوری نانو، کاربرد نانو سنسورها، سیستم‌های نانو الکترومکانیکی، سیستم‌های نانوالکترونیکی و وسایل نانو فتونیک رو به افزایش است. نانوسیم‌ها به عنوان یکی از اجزاء کلیدی این سیستم‌ها نقش قابل توجهی در عملکرد درست آنها دارند. بنابراین شناخت رفتار مکانیکی - حرارتی نانوسیم‌ها از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است. با توجه به مشکلات اجتناب‌ناپذیر در انجام آزمایش‌های تجربی بر روی نانوسیم‌ها، از جمله نیاز به تجهیزات بسیار دقیق و پیشرفته و همچنین هزینه و زمان زیاد مورد نیاز برای انجام این آزمایش‌ها، تعدادی از پژوهشگران به مدل‌سازی و شبیه‌سازی رفتار نانوسیم‌ها پرداخته‌اند. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یکی از بهترین روش‌های شناخت خواص نانوسیم‌ها می‌باشد که در اغلب شبیه‌سازی‌های نانو مقیاس از این روش استفاده می‌شود. با استفاده از روش‌های شبیه‌سازی و مدل‌سازی می‌توان خواص نانوسیم‌ها را با صرف هزینه اندک و زمان بسیار کوتاهی، در مقیاسه با روش‌های تجربی، به انجام رساند. در این مقاله، با هدف شناخت رفتار مکانیکی - حرارتی نانوسیم طلا، تاثیر دما (۳۰۰، ۴۵۰، ۶۰۰ و ۷۰۰ درجه کلوین) و نرخ کرنش (۱/s 2×10^8 و ۱/s 2×10^{10}) بر خواص مکانیکی نانوسیم از جمله منحنی تنش - کرنش، کرنش، تنش تسلیم، تنش در لحظه شکست و میزان ازدیاد طول نانوسیم با قطر و طول به ترتیب ۳ و ۶ نانومتر به روش دینامیک مولکولی با استفاده از روش اتم جایگزین شده (پتانسیل EAM) بررسی شده است. در این مطالعه مشاهده شد که در نرخ کرنش‌های ۱/s 2×10^8 ، ۱/s 2×10^9 و ۱/s 2×10^{10} تنش تسلیم بترتیب از ۳، ۴ و ۵ گیگاپاسکال در دمای محیط (۳۰۰ درجه کلوین) به ۲، ۲/۲ و ۴ گیگاپاسکال در دمای ۷۵۰ درجه کلوین کاهش می‌یابد و تنش لحظه شکست نانوسیم بترتیب در محدوده ۰/۱۷ تا ۰/۳۱، ۰/۳۱ تا ۰/۳۴ و ۰/۳۳ تا ۰/۴۲ گیگاپاسکال قرار دارد.

واژه‌های کلیدی:

نانوسیم، دینامیک مولکولی، منحنی تنش - کرنش، کرنش، تنش شکست، ازدیاد طول.

۱- مقدمه

رسانایی الکتریکی می‌باشد. با اعمال اختلاف پتانسیل الکتریکی به دو انتهای این نانو ساختارها و در امتداد طولی آنها انتقال بار الکتریکی اتفاق می‌افتد. ساخت سیم‌هایی در ابعاد نانومتری هم از جهت تکنولوژیکی و هم از جهت علمی بسیار مورد توجه

نانوسیم‌های فلزی به ساختارهای فلزی نانومتری گفته می‌شود که در یک بعد (جهت طولی) بزرگتر و در دو بعد دیگر بسیار کوچک باشند. بنابراین نسبت طول به قطر نانوسیم‌ها بسیار بالا می‌باشد ($L \gg D$). یک خصوصیت اساسی از این نانو ساختارها،

خود نشان می‌دهد [۱۴]. سببستین به همراه گنگ - چن میزان رسانایی حرارتی نانو سیم‌های سیلیکونی را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند. نتایج حاصل از بررسی آنها نشان داد که میزان هدایت حرارتی در نانو سیم‌های با سطح مقطع مربعی به اندازه دو برابر کمتر از میزان هدایت حرارتی در کریستال سیلیکون حجمی در دماهای بین ۲۰۰ الی ۵۰۰ درجه کلون می‌باشد [۱۵]. برای نانوسیم نیکل، ستوده و همکارانش فهمیدند که استحکام تسلیم و مدول یانگ در حالت فشاری پایین تر از حالت کششی است [۱۶].

در سال ۲۰۰۵ میلادی، لینگ میائو و همکارانش مشخصات ساختاری و ترمودینامیکی نانوسیم‌های تکی و دسته‌ای از جنس پالادیوم را در دماهای مختلف مورد بررسی قرار دادند. آنها با در نظر گرفتن پارامترهای ترمودینامیکی، ساختاری و دینامیکی به این نتیجه رسیدند که دمای نقطه ذوب نانوسیم به صورت تکی (۱۲۰۰ درجه کلون) به دلیل بالا بودن محدوده دمای ذوب سطحی در این نانو سیم، بیشتر از دمای نقطه ذوب نانوسیم‌ها به صورت دسته‌ای (۱۰۹۰ درجه کلون) می‌باشد [۱۷]. وو و همکارانش در سال ۲۰۰۶ میلادی، از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از روش اتم جایگزین شده (Embedded Atom Method, EAM) برای بررسی خواص مکانیکی (مدول یانگ، تنش تسلیم و میزان انحراف) در نانوسیم‌های به شکل مکعب مستطیل از جنس مس استفاده کردند. نتایج شبیه‌سازی آنها نشان داد که اتم‌های سطحی در مقیاس نانو نقش مهمی در رفتار مکانیکی نانوسیم ایفا می‌کنند [۱۸]. EAM یک پتانسیل چند جسمی است که معمولاً برای سیستم‌های فلزی استفاده می‌شود. در این پتانسیل فرض می‌شود که هر اتم در ابر الکترونی ایجاد شده به وسیله اتم‌های همسایه جاسازی شده است. مقدار انرژی لازم برای وارد کردن یک اتم به ابر الکترونی دارای یک چگالی معین، تابع جاسازی نامیده می‌شود. کوه و همکارانش به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، تغییرات خواص مکانیکی نانو سیم‌های پلاتینیوم با قطر ۱٫۴ نانومتر را با اعمال کشش در راستای محور [001] مورد تحلیل قرار دادند [۱۹]. بین ما و همکارانش در سال ۲۰۱۶، رفتار تنش- کرنش و

می‌باشد. زیرا در ابعاد نانومتری خواص غیر معمولی از خود بروز می‌دهند [۳-۱].

با توجه به مشکلات اجتناب‌ناپذیر در انجام آزمایش‌های تجربی بر روی نانوسیم‌ها، از جمله نیاز به تجهیزات بسیار دقیق و پیشرفته و همچنین هزینه و زمان زیاد مورد نیاز برای انجام این آزمایش‌ها، تعدادی از پژوهشگران به مدل‌سازی و شبیه‌سازی رفتار نانوسیم‌ها پرداخته‌اند. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یکی از بهترین روش‌های شناخت خواص نانوسیم‌ها می‌باشد که در اغلب شبیه‌سازی‌های نانو مقیاس از این روش استفاده می‌شود.

به وسیله مطالعات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، برخی پدیده‌های جدید کشف و یا تایید شده‌اند. بعنوان مثال سختی و استحکام تسلیم پلی‌کریستالین‌ها با ریزش اندازه دانه‌ها افزایش می‌یابد [۴]. شبیه‌سازی انتقال فازها در نانوسیم طلا [۵] و نانوسیم $AINi$ [۶]، اثر حافظه شکلی در نانوسیم طلا [۷]، و همچنین شبیه‌سازی صفحات گرافنی، رفتار مولکول پلی‌متیل متاکریلیت (PMMA)، نانوکامپوزیت گرافن-PMMA و فرآیند ذوب آلیاژ منظم و نامنظم آلیاژ Ag-Au [۸-۱۱] توسط برخی از محققین گزارش شده است. بنابراین شبیه‌سازی به روش دینامیک مولکولی، نقش مهمی در مطالعه خواص نانو مواد دارد. در مطالعه خواص و رفتار نانوسیم‌ها، فاکتورهایی شامل مکانیزم تغییر شکل، خواص مکانیکی، شکست کششی و اثر سطح توجه پژوهشگران را به خود جلب کرده است. جی و پارک فهمیدند که نانوسیم مس زیر بار کششی با سطح مقطع غیر مربعی گرایش به تغییر فرم از طریق پیچش دارد [۱۲]. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انجام شده بر روی نانوسیم مس با طول بلند به وسیله وو و همکارانش انجام شد و رفتار آن با نانوسیم کوتاه مقایسه شد. مشخص شد که نانوسیم کوتاه بصورت انعطاف پذیر و نرم پاره می‌شود، در حالیکه نانوسیم بلند یک شکست ناگهانی و یک برش شدید موضعی از خود نشان می‌دهد [۱۳]. بررسی خواص فشاری نانوسیم یک جنبه دیگری است که توسط پژوهشگران مورد تحقیق قرار گرفته است. محققان مشاهده کردند که نانوسیم نیکل با ساختار چند پوسته ماریچی، استحکام تسلیم بیشتری از حالت ماکروسکوپی جامد از

صورت معادله (۱) بیان می‌کند.

$$a_i(t) = \frac{d^2 r_i(t)}{dt^2} = \frac{F_i(t)}{m_i} \quad (1)$$

که در معادله بالا $F_i(t)$ ، m_i ، $r_i(t)$ و $a_i(t)$ به ترتیب نیرو، جرم، موقعیت فضایی و شتاب ذره i ام را نشان می‌دهند. $F_i(t)$ از طریق مشتق منفی تابع پتانسیل U نسبت به تابع مکان ذره i به صورت معادله (۲) بدست آید.

$$F_i(t) = - \frac{\partial U}{\partial r_i(t)} \quad (2)$$

در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، انتخاب تابع پتانسیل اتمی بسیار مهم است. پتانسیل EAM توسط زو و همکارانش با هدف توصیف بهتر مشخصات مکانیکی و فیزیکی با استفاده از ثابت شبکه، ثابت الاستیک، انرژی چسبندگی و انرژی تشکیل جای خالی اصلاح شد. این پتانسیل اصلاح شده با موفقیت برای شبیه‌سازی رفتار مکانیکی سیستم‌های چند لایه استفاده شده است و پاسخ‌های بهتری نسبت به پتانسیل اصلاح نشده را حاصل نموده است [۲۰، ۲۵]. تابع پتانسیل اصلاح شده مذکور که به صورت معادله (۳) بیان می‌شود در این تحقیق استفاده شد [۲۶، ۲۷].

$$U = \sum_i \left[\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r_{ij}) + F(\rho) \right] \quad (3)$$

در این معادله، $\phi_{ij}(r_{ij})$ پتانسیل نشان دهنده اثر متقابل اتم‌های i ام و j ام در فاصله r_{ij} از یکدیگر را نشان می‌دهد. $F(\rho)$ عبارت اصلاحی مربوط به انرژی قرار گرفتن اتم i در چگالی الکترونی $\rho(r_{ij})$ است.

وقتی که ماده‌ای تحت بارگذاری کششی در جهت x قرار می‌گیرد، در تابع پتانسیل EAM، تنش کششی اتمی متناظر با آن در جهت x با σ_i^{xx} نشان داده می‌شود که توسط معادله (۴) بدست می‌آید [۲۸].

تغییر شکل در ساختار نانو سیم‌های تک کریستالی از جنس تنگستن را در دماهای مختلف با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند. آنها به کمک روش دینامیک مولکولی، تاثیر دما بر روی خواص مکانیکی و نحوه ایجاد شکست در نانو سیم‌های تنگستن را مورد بررسی قرار دادند. نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها نشان داد که مدول الاستیک، استحکام کشش و کرنش در مرحله انتقال فاز با افزایش دما کاهش می‌یابد [۲۰]. مطالعه تاثیر نرخ کرنش از محدوده $10^8 s^{-1}$ تا $10^{11} s^{-1}$ بر روی رفتار مکانیکی نانوسیم‌های تک کریستالی تیتانیوم با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به روش پتانسیل فینس-سینکدر در سال ۲۰۱۷ توسط لی-چان و همکارانش ارائه شد [۲۱].

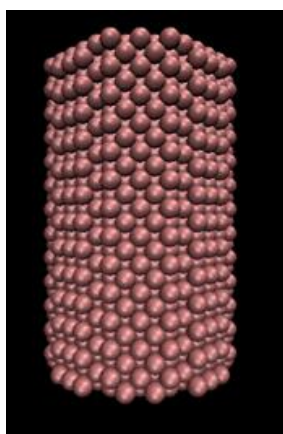
در پژوهش‌های پیشین رفتار مکانیکی نانوسیم طلا به روش دینامیک مولکولی بررسی شده است. اما براساس مرور پیشینه پژوهش، مشخص شد که تاکنون رفتار مکانیکی - حرارتی نانوسیم طلا مورد مطالعه قرار نگرفته است. با توجه به این که در کاربردهای عملی نانوسیم در معرض همزمان بارهای مکانیکی و حرارت قرار می‌گیرد، مطالعه تاثیر دما بر خواص مکانیکی نانوسیم از اهمیت بالایی برخوردار است. در این مقاله، تاثیر همزمان دما و نرخ کرنش بر خواص مکانیکی نانوسیم طلا، از جمله منحنی تنش-کرنش، تنش تسلیم، تنش در لحظه شکست و ازدیاد طول نانوسیم، به روش دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار گرفته است.

۲- مواد و روش انجام تحقیق

در سال‌های اخیر، بررسی خواص مکانیکی نانوسیم‌ها به وسیله شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به روش‌های اتم جایگزین شده (EAM) [۲۲]، تئوری محیط موثر (Effective Medium Theory) [۲۳] و همچنین روش تئوری تابع چگالی (Density Functional Theory) [۲۴] انجام شده است. پتانسیل استفاده شده در این تحقیق، پتانسیل EAM می‌باشد.

روش دینامیک مولکولی، موقعیت فضایی ذره را به منظور توصیف رفتار مکانیکی آن با استفاده از قانون دوم نیوتن به

فوق با استفاده از نرم افزار لمپس تحلیل شده است. محورهای مختصات X, Y, Z به ترتیب جهات شبکه $[100]$ ، $[010]$ و $[001]$ را نشان می دهند. نسبت طول به قطر نانوسیم ۲ در نظر گرفته شده است به این دلیل که از پدیده جابجاشدگی دینامیکی در نرخ کرنش آهسته، که در نسبت های بزرگتر از ۵ اتفاق می افتد [۳۰] و همچنین از تشکیل دو گلوئی متقارن ستونی که در نسبت های کمتر از ۱ اتفاق می افتد، جلوگیری کند [۳۱]. نانوسیم شبیه سازی شده در شکل (۱) نمایش داده شده است، تعداد اتم های موجود در نانوسیم مذکور ۲۵۵۰ اتم می باشد.



شکل (۱): فرم اتمی شبیه سازی شده نانوسیم طلا

نرخ کرنش های استفاده شده در این مقاله، $1/s \times 10^8$ ، $1/s \times 10^9$ و $1/s \times 10^{10}$ و دماهای بکار گرفته شده ۳۰۰، ۴۵۰ و ۶۰۰ درجه کلونین می باشند. دمای اولیه، دمای محیط و دمای نهایی، حدود نصف دمای ذوب طلا ($T_M = 1337.58K$) در نظر گرفته شده است. در تغییر فرم آمورف، تغییر شکل از طریق لغزش صفحات اتمی بر روی یکدیگر انجام می شود. در حالیکه در تغییر فرم کریستالی، تغییر شکل از طریق حرکت مرزدانه ها و نابجایی ها صورت می گیرد. در نرخ کرنش های کمتر از $1/s$ (10^9) تغییر فرم به صورت کریستالی و در نرخ کرنش های بالاتر از $1/s$ (10^{10}) تغییر فرم بصورت آمورف می باشد [۳۰، ۳۱]. در محدوده کرنش بینابین، تغییر فرم حالتی بین کریستالی و آمورف دارد. بنابراین نرخ کرنش های اعمال شده، به ترتیب در محدوده تغییر فرم کریستالی، بین کریستالی و آمورف و در محدوده تغییر

$$\sigma_i^{xx} = \frac{-m_i v_i^x v_i^x}{\Omega_i} + \frac{1}{2\Omega_i} \sum_{i \neq j} \frac{\partial \phi}{\partial r_{ij}} \frac{r_{ij}^x r_{ij}^x}{r_{ij}} + \frac{1}{2\Omega_i} \sum_{i \neq j} \left(\frac{\partial F}{\partial \rho_i} + \frac{\partial F}{\partial \rho_j} \right) \frac{\partial f}{\partial r_{ij}} \frac{r_{ij}^x r_{ij}^x}{r_{ij}} \quad (۴)$$

در معادله (۴)، Ω_i و m_i به ترتیب حجم و جرم اتم i ام و v_i^x سرعت اتم i ام در جهت x را نشان می دهد. همچنین، ϕ ، F ، ρ و f پارامترهای تابع پتانسیل EAM هستند که توسط دوپاما و کورگ بدست آمدند [۲۹]. کرنش کششی در جهت x به صورت ϵ_{xx} در معادله (۵) نشان داده شده است.

$$\epsilon_{xx} = \frac{L_x - L_{x_0}}{L_{x_0}} \quad (۵)$$

که در آن L_x و L_{x_0} طول اولیه و طول نهایی در جهت x می باشند.

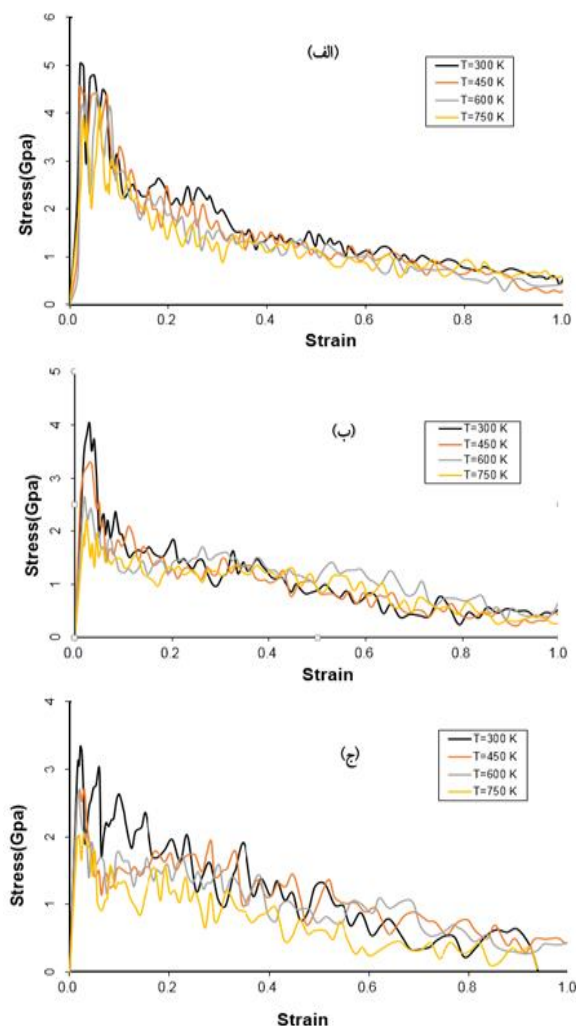
دما در مرحله اولیه و قبل از اعمال کشش به نانوسیم اعمال می شود و مدت زمان کوتاهی در حد چند صد پیکوثانیه فرصت داده می شود که اتم های نانوسیم به حالت تعادل برسند. اثر دما در این مرحله بصورت تغییر در انرژی جنبشی اتم ها ظاهر می شود. بر اساس تئوری ترمودینامیک آماری رابطه بین انرژی جنبشی کل اتم ها (E_k) و دما (T) بصورت رابطه (۶) است [۳۰].

$$E_k = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i v_i^2 = \frac{3}{2} NKT \quad (۶)$$

در رابطه (۶)، N تعداد کل اتم ها، m جرم اتم، v سرعت اتم و K ثابت بولتزمن است.

در این مقاله، با هدف بررسی رفتار مکانیکی - حرارتی یک نانوسیم طلا با ساختار FCC، ثابت شبکه 4.0651 و به ترتیب با قطر و طول 3 و 6 نانومتر، به روش دینامیک مولکولی، معادلات

افزایش انرژی جنبش اتم ها و در نتیجه افزایش فاصله اتم ها از یکدیگر و سست شدن پیوندهای بین اتمی و در نتیجه کاهش مدول یانگ می شود (کاهش مدول یانگ با افزایش دما برای نانوسیم تنگستی نیز توسط مرجع ۲۰ گزارش شده است). در حالیکه نرخ کرنش تاثیر قابل توجه و معنی داری نداشته است. اما در نرخ کرنش های بالا، افزایش دما تاثیر معنی داری بر مدول یانگ ندارد. به این دلیل که در این شرایط عامل تعیین کننده نرخ کرنش است و دما فرصتی برای تاثیر بر مدول یانگ ندارد. در حالیکه نرخ کرنش بالا باعث کاهش مدول یانگ نسبت به نرخ کرنش های پائین و متوسط شده است.



شکل (۲): نمودار تنش-کرنش نانوسیم طلا با بالا نرخ کرنش های: (الف):

۲×۱۰^{-۸} 1/s، (ب): ۲×۱۰^{-۹} 1/s و (ج): ۲×۱۰^{-۱۰} 1/s

فرم آمورف انتخاب شده‌اند.

۳- نتایج و بحث

۳-۱- منحنی تنش-کرنش

نمودار تنش-کرنش حاصل از این شبیه‌سازی در شکل (۲) نمایش داده شده است. در شکل‌های (۲-الف، ب و ج) مشاهده می‌شود که تنش در محدوده کرنش صفر تا ۰٫۰۴، بصورت کاملاً خطی افزایش یافته، در محدوده کرنش ۰٫۰۴ تا ۰٫۰۶، به یک مقدار ماکزیمم رسیده و سپس با افزایش بیشتر کرنش، تنش تا لحظه شکست کاهش یافته است. علاوه بر آن دیده می‌شود که با افزایش دما، منحنی تنش-کرنش به سمت پایین منتقل شده است. دلیل آن، جابجایی آسان‌تر صفحات اتمی و مرزخانه‌ها و در نتیجه کاهش استحکام ماده در اثر افزایش دما می‌باشد. این رفتار کاملاً مطابق با رفتار کششی فلزات FCC می‌باشد که در مرجع ۲۰ نیز مورد تایید قرار گرفته است. همچنین ملاحظه می‌شود که افزایش نرخ کرنش باعث شده است که نانوسیم‌ها در تنش‌های بالاتری تسلیم شوند. معادله (۶) [۳۲] درستی این تحلیل را ثابت می‌کند.

$$\sigma = C \epsilon^m \quad (7)$$

C ضریب ثابت، ϵ نرخ کرنش و m کمیتی برای حساسیت تنش در قبال سرعت کشش می‌باشد.

بر اساس نمودار مذکور می‌توان گفت که رفتار ترمومکانیکی نانوسیم طلا، حاصل تعامل بین دو پارامتر نرخ کرنش و دما می‌باشد. در نرخ کرنش‌های پایین شکل (۲-الف) اثر پارامتر دما مشخص‌تر می‌باشد، به همین دلیل در این شکل همپوشانی نمودارهای مربوط به دماهای مختلف نسبت به شکل‌های (۲-الف و ب) کمتر است.

با توجه به نمودارهای تنش-کرنش نمایش داده شده در شکل (۲)، مشاهده می‌شود که در نرخ کرنش‌های پائین و متوسط، افزایش دما باعث شده است که شیب ناحیه الاستیک اندکی کاهش یابد. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که افزایش دمای نانوسیم طلا باعث کاهش مدول یانگ می‌شود. افزایش دما باعث

۲-۳- تنش تسلیم

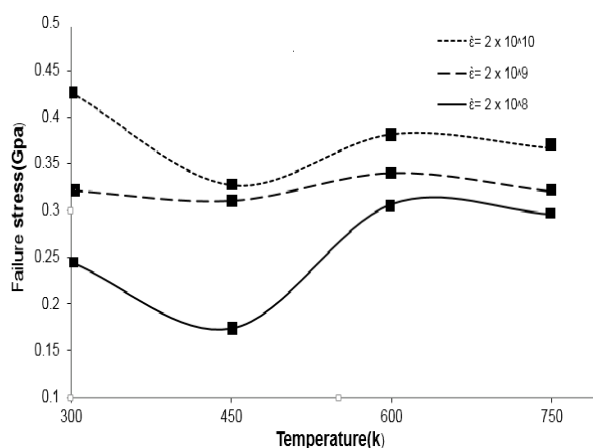
در شکل (۳)، نمودار تغییرات تنش تسلیم نانوسیم‌های شبیه‌سازی شده بر حسب دما برای نرخ کرنش‌های مختلف نمایش داده شده است. با توجه به شکل دیده می‌شود که تنش تسلیم با افزایش دما کاهش یافته است. دلیل آن جابجایی آسان‌تر صفحات اتمی و مرزخانه‌ها و در نتیجه کاهش استحکام ماده در اثر افزایش دما می‌باشد (کاهش تنش تسلیم با افزایش دما برای نانوسیم تنگستنی نیز توسط مرجع ۲۰ گزارش شده است). همچنین اثر نرخ کرنش بر تنش تسلیم در شکل مذکور نمایش داده شده است. با توجه به شکل مشاهده می‌شود که در نرخ کرنش بالا با افزایش دما تنش تسلیم کاهش پیدا کرده است. در نرخ کرنش مذکور، تغییر فرم حالت آمورف دارد و از طریق لغزش صفحات اتمی روی یکدیگر اتفاق می‌افتد. بنابراین با سست‌تر شدن پیوندهای اتمی در اثر افزایش دما، لغزش صفحات اتمی راحت‌تر و تنش تسلیم کاهش یافته است.

نمودارهای تنش تسلیم بر حسب دما در نرخ کرنش‌های مختلف، تفاوت در مکانیزم تغییر فرم آن‌ها به صورت‌های آمورف، آمورف - کریستالی و کریستالی می‌باشد.

همواره در یک دمای ثابت با افزایش نرخ کرنش مقدار تنش تسلیم نانوسیم افزایش می‌یابد، که این نتیجه با معادله کلاسیک تنش بر حسب نرخ کرنش (معادله (۵)) مطابقت دارد. مشاهده می‌شود که در نرخ کرنش‌های $1/s \times 10^8$ ، $1/s \times 10^9$ و $1/s \times 10^{10}$ تنش تسلیم بترتیب از ۳، ۴ و ۵ گیگاپاسکال در دمای محیط (۳۰۰ درجه کلونین) به ۲، ۲٫۲ و ۴ گیگاپاسکال در دمای ۷۵۰ درجه کلونین کاهش یافته است. بنابر این نرخ کرنش فرآیند کشش نانوسیم طلا، نسبت به دما، نقش تعیین‌کننده تری در تنش تسلیم نانوسیم دارد.

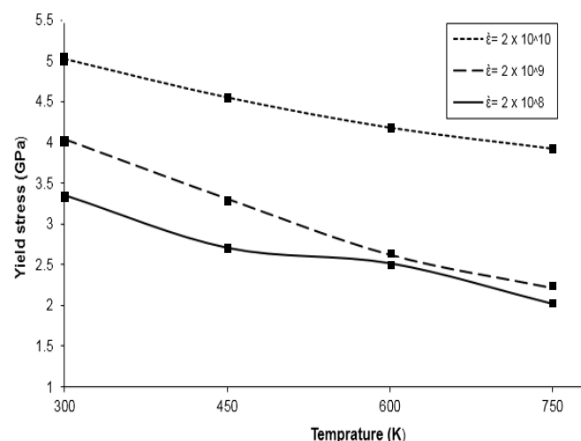
۳-۳- تنش در لحظه شکست

تغییرات تنش در لحظه شکست نانوسیم‌ها در شکل (۴) نمایش داده شده است.



شکل (۴): تنش در لحظه شکست نانوسیم طلا بر حسب دما برای نرخ کرنش‌های مختلف

مشاهده می‌شود که با افزایش دما تا حدود ۴۵۰ درجه کلونین، تنش مذکور کاهش و در محدوده دمایی ۴۵۰ تا ۶۰۰ درجه کلونین، تنش مذکور افزایش پیدا کرده است. پس از آن با افزایش بیشتر دما تنش لحظه شکست تقریباً ثابت باقی می‌ماند. با افزایش



شکل (۳): تنش تسلیم نانوسیم طلا بر حسب دما در نرخ کرنش‌های مختلف

در نرخ کرنش‌های $1/s \times 10^8$ و $1/s \times 10^9$ که به ترتیب تغییر فرم حالت کریستالی - آمورف و کریستالی دارد، نیز افزایش دما باعث کاهش تقریباً یکنواخت تنش تسلیم شده است. زیرا با افزایش دما لغزش صفحات اتمی بر روی یکدیگر (در تغییر فرم آمورف) و حرکت مرزخانه‌ها و نابجایی‌ها (در تغییر فرم کریستالی) آسانتر می‌شود. علت متفاوت بودن روند تغییرات

بنابراین با افزایش دما تا ۶۰۰ درجه کلوین چون مرزخانه‌ها و نایجایی‌ها به آسانی حرکت می‌کنند، ازدیاد طول افزایش یافته است ولی در دمای ۷۵۰ درجه کلوین چون نانوسیم استحکام خود را از دست داده است، ازدیاد طول کاهش یافته است.

جدول (۱): مقدار ازدیاد طول نانوسیم طلا (Å) بر حسب نرخ کرنش (1/s) در دماهای مختلف

نرخ کرنش (1/s)	دما (°K)		
	۲×۱۰ ^۸	۲×۱۰ ^۹	۲×۱۰ ^{۱۰}
۳۰۰	۵۵,۹۳	۱۰۶,۱۵	۷۹,۷۳
۴۵۰	۹۸,۷	۱۶۶,۹۴	۷۵,۵۹
۶۰۰	۱۷۰,۵۸	۹۲,۱۸	۶۷,۱۷
۷۵۰	۵۵,۵۹	۱۶۹,۰۵	۱۰۱,۲۳

در نرخ کرنش‌های بالا بدلیل سرعت بالای کشش، افزایش دما تا بنابراین مشاهده شد که در نرخ کرنش‌های پایین، پارامتر غالب در تعیین مقدار ازدیاد طول نانوسیم دما می‌باشد و در نرخ کرنش‌های متوسط، پارامترهای دما و نرخ کرنش بصورت ترکیبی موثر می‌باشند. در حالیکه، در نرخ کرنش‌های بالا پارامتر غالب در تعیین مقدار ازدیاد طول نانوسیم، نرخ کرنش می‌باشد. شکل (۵) نمایش اتمی نانوسیم را در لحظه شکست نشان می‌دهد.

دما تا ۴۵۰ درجه کلوین ماده نرم‌تر شده و برای ایجاد نرخ کرنش ثابت به نیروی کمتری نیاز می‌باشد. بنابراین تنش در لحظه شکست کاهش می‌یابد. در محدوده دمایی ۴۵۰ تا ۶۰۰ درجه کلوین به دلیل بیشتر نرم شدن ماده، سطح مقطع نانوسیم کاهش قابل توجهی پیدا می‌کند که این امر باعث افزایش تنش لحظه شکست می‌شود (در این محدوده دمایی تاثیر افزایش دما بر کاهش سطح مقطع بیش از اثر آن بر کاهش نیرو می‌باشد). پس از آن با افزایش دما و نرم شدن بیش از حد ماده، تنش لحظه شکست ثابت باقی می‌ماند و نانوسیم خیلی سریع دچار شکست می‌شود.

صرف نظر از دمای فرآیند کشش نانوسیم طلا، تنش لحظه شکست نانوسیم با نرخ کرنش‌های 1/s، ۲×۱۰^۸ 1/s و ۲×۱۰^۹ 1/s و ۲×۱۰^{۱۰} بترتیب در محدوده ۰/۱۷ تا ۰/۳۱، ۰/۳۱ تا ۰/۳۴ و ۰/۳۳ تا ۰/۴۲ گیگاپاسکال قرار دارد. بنابراین نرخ کرنش فرآیند کشش نانوسیم، نقش مهم تری نسبت به دما در تعیین تنش لحظه شکست نانوسیم دارد و با افزایش نرخ کرنش مقدار تنش لحظه شکست افزایش می‌یابد. در نرخ کرنش‌های بالاتر، مقدار نیروی اعمال شده به دو سر نانوسیم بیشتر و در نتیجه تنش لحظه شکست بیشتر است.

۴-۳- ازدیاد طول

جدول (۱) مقدار ازدیاد طول نانوسیم طلا بر حسب دما و نرخ کرنش و شکل (۵) فرم اتمی نانوسیم در لحظه شکست را نشان می‌دهد. را نشان می‌دهد. ۶۰۰ درجه کلوین فرصت اثرگذاری بر ازدیاد طول را نداشته است. ولی با افزایش بیشتر دما تا ۷۵۰ درجه کلوین بدلیل نرم شدن بیش از اندازه نانوسیم و حرکت راحت‌تر صفحات اتمی بروی یکدیگر، مقدار ازدیاد طول افزایش پیدا کرده است. در نرخ کرنش متوسط روند ازدیاد طول به اینصورت می‌باشد که تا دمای ۴۵۰ درجه کلوین افزایش دما باعث افزایش طول شده است. با افزایش دما تا ۶۰۰ درجه کلوین بدلیل اینکه سرعت کشش همچنان بالاست و نانوسیم استحکام خود را از دست داده است ازدیاد طول آن کاهش می‌یابد. در نرخ کرنش پایین، دما فرصت کافی برای اثرگذاری را پیدا کرده است.

۴- نتیجه گیری

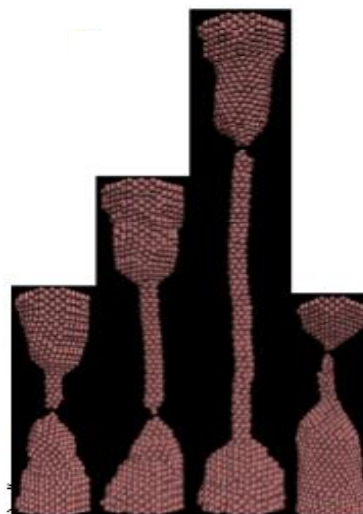
با هدف شناخت رفتار مکانیکی- حرارتی نانوسیم طلا، تاثیر دما (۳۰۰، ۴۵۰، ۶۰۰ و ۷۰۰ درجه کلوین) و نرخ کرنش ($2 \times 10^{-8} 1/s$ ، $2 \times 10^{-9} 1/s$ و $2 \times 10^{-10} 1/s$) بر خواص مکانیکی نانوسیم از جمله منحنی تنش- کرنش، تنش تسلیم، تنش در لحظه شکست و میزان ازدیاد طول نانوسیم به روش دینامیک مولکولی بررسی شد و نتایج زیر بدست آمد:

۱- با توجه به منحنی تنش-کرنش بدست آمده، مشاهده شد که در محدوده کرنش صفر تا 0.04 تنش متناسب با کرنش بصورت خطی افزایش یافته و در محدوده 0.04 تا 0.06 به یک مقدار ماکزیمم می رسد. سپس با افزایش بیشتر نرخ کرنش، تنش تا لحظه شکست کاهش می یابد. این رفتار کاملاً مطابق با رفتار کششی فلزات FCC می باشد.

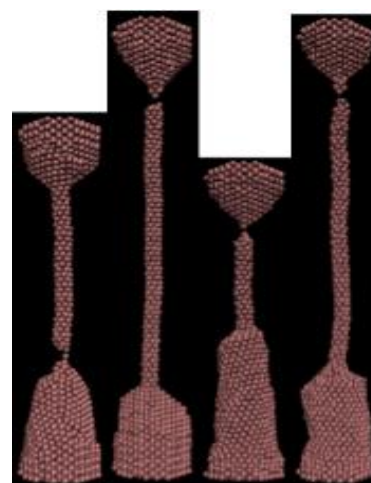
۲- مشاهده شد که در نرخ کرنش های $2 \times 10^{-8} 1/s$ ، $2 \times 10^{-9} 1/s$ و $2 \times 10^{-10} 1/s$ تنش تسلیم بترتیب از $3/3$ ، 4 و 5 گیگاپاسکال در دمای محیط (۳۰۰ درجه کلوین) به 2 ، $2/2$ و 4 گیگاپاسکال در دمای 750 درجه کلوین کاهش یافته است. بنابراین نرخ کرنش فرآیند کشش نانوسیم طلا، نسبت به دما، نقش تعیین کننده تری در تنش تسلیم نانوسیم دارد و در یک دمای ثابت، با افزایش نرخ کرنش مقدار تنش تسلیم نانوسیم افزایش می یابد. این نتیجه با معادله کلاسیک تنش بر حسب نرخ کرنش مطابقت کامل دارد.

۳- صرف نظر از دمای فرآیند کشش نانوسیم طلا، تنش لحظه شکست نانوسیم با نرخ کرنش های $2 \times 10^{-8} 1/s$ ، $2 \times 10^{-9} 1/s$ و $2 \times 10^{-10} 1/s$ بترتیب در محدوده 0.17 تا 0.31 ، 0.31 تا 0.34 و 0.33 تا 0.42 گیگاپاسکال قرار دارد. بنابراین نرخ کرنش فرآیند کشش نانوسیم، نقش مهمتری نسبت به دما در تعیین تنش لحظه شکست نانوسیم دارد و با افزایش نرخ کرنش مقدار تنش لحظه شکست افزایش می یابد. در نرخ کرنش های بالاتر، مقدار نیروی اعمال شده به دو سر نانوسیم بیشتر و در نتیجه تنش لحظه شکست بیشتر است.

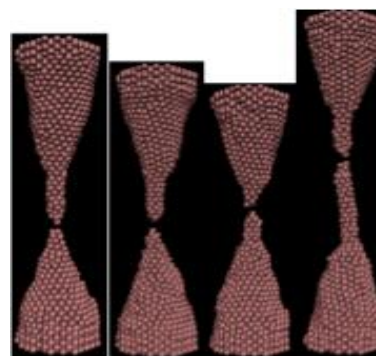
۴- مشاهده شد که در نرخ کرنش های پایین پارامتر غالب در تعیین مقدار ازدیاد طول نانوسیم دما می باشد و در نرخ کرنش های



(الف)



(ب)



(ج)

شکل (۵): نمایش اتمی لحظه شکست نانوسیم طلا: (الف): $2 \times 10^{-8} 1/s$ ، (ب): $2 \times 10^{-9} 1/s$ و (ج): $2 \times 10^{-10} 1/s$ (دما از چپ به راست ۳۰۰، ۴۵۰ و ۶۰۰ کلوین)

580-583, 2014.

[۱۱] ل. مهری و ج. داودی، "شبه سازی دینامیک مولکولی ذوب آلیاژ منظم و نامنظم Ag-Au"، فصلنامه علمی - پژوهشی فرآیندهای نوین در مهندسی مواد، دوره ۳، شماره ۲، ۱۸-۱۱، تابستان، ۱۳۸۸.

[12] C. Ji & H. S. Park, "The coupled effects of geometry and surface orientation on the mechanical properties of metal nanowires", *Nanotechnology*, Vol. 18, pp. 305704, 2007.

[13] Z. Wu, Y. W. Zhang, M. H. Jhon, H. Gao & D. J. Srolovitz, "Nanowire failure: Long= brittle and short= ductile", *Nano Letters*, Vol. 12, pp. 910-914, 2012.

[14] B. Wang, D. Shi, J. Jia, G. Wang, X. Chen & J. Zhao, "Elastic and plastic deformations of nickel nanowires under uniaxial compression", *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, Vol. 30, pp. 45-50, 2005.

[15] S. G. Volz & G. Chen, "Molecular dynamics simulation of thermal conductivity of silicon nanowires", *Applied Physics Letters*, Vol. 75, pp. 2056-2058, 1999.

[16] Setoodeh, H. Attariani & M. Khosrownejad, "Nickel nanowires under uniaxial loads: A molecular dynamics simulation study", *Computational Materials Science*, Vol. 44, pp. 378-384, 2008.

[17] L. Miao, V. R. Bhethanabotla & B. Joseph, "Melting of Pd clusters and nanowires: a comparison study using molecular dynamics simulation", *Physical Review B*, Vol. 72, pp. 134109, 2005.

[18] H. A. Wu, "Molecular dynamics study on mechanics of metal nanowire", *Mechanics Research Communications*, Vol. 33, pp. 9-16, 2006.

[19] S. J. A. Koh, H. P. Lee, C. Lu & Q. H. Cheng, "Molecular dynamics simulation of a solid platinum nanowire under uniaxial tensile strain: Temperature and strain-rate effects", *Physical Review B*, Vol. 72, pp. 085414, 2005.

[20] B. Ma, Q. Rao & Y. He, "Molecular dynamics simulation of temperature effect on tensile mechanical properties of single crystal tungsten nanowire", *Computational Materials Science*, Vol. 117, pp. 40-44, 2016.

متوسط، پارامترهای دما و نرخ کرنش بصورت ترکیبی موثر می‌باشند. در حالیکه، در نرخ کرنش های بالا پارامتر غالب در تعیین مقدار ازدیاد طول نانوسیم، نرخ کرنش می‌باشد.

۵- مراجع

[1] N. A. Melosh, A. Boukai, F. Diana, B. Gerardot, A. Badolato, P. M. Petroff & J. R. Heath, "Ultra-high-density nanowire lattices and circuits", *Science*, Vol. 300, pp. 112-115, 2003.

[2] H. Yan, S. H. Park, G. Finkelstein, J. H. Reif & T. H. LaBean, "DNA-templated self-assembly of protein arrays and highly conductive nanowires", *science*, Vol. 301, pp. 1882-1884, 2003.

[3] Y. Xi, C. Hu, C. Zheng, H. Zhang, R. Yang & Y. Tian, "Optical switches based on CdS single nanowire", *Materials Research Bulletin*, Vol. 45, pp. 1476-1480, 2010.

[4] E. O. Hall, "The deformation and ageing of mild steel: III discussion of results", *Proceedings of the Physical Society, Section B*, Vol. 64, pp. 747, 1951.

[5] J. Diao, K. Gall & M. L. Dunn, "Surface-stress-induced phase transformation in metal nanowires", *Nature Materials*, Vol. 2, pp. 656, 2003.

[6] H. S. Park, "Stress-induced martensitic phase transformation in intermetallic nickel aluminum nanowires", *Nano Letters*, Vol. 6, pp. 958-962, 2006.

[7] H. S. Park, K. Gall & J. A. Zimmerman, "Shape memory and pseudoelasticity in metal nanowires", *Physical Review Letters*, Vol. 95, pp. 255504, 2005.

[8] M. Tahmasebipour & H. Khezerlou, "Molecular Dynamic Simulation of the Graphene Nano-Plates", *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*, Vol. 9, pp. 635-639, 2014.

[9] H. Khezerlou & M. Tahmasebipour, "Poly Methyl Methacrylate (PMMA) Behavior Analysis Using Molecular Dynamics Simulation Method", *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*, Vol. 9, pp. 675-677, 2014.

[10] H. Khezerlou & M. Tahmasebipour, "Molecular dynamic simulation of graphene-poly methyl methacrylate nano-composite", *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*, Vol. 9, pp.

- outlayer atoms”, *Applied Physics A*, Vol. 81, pp. 1527-1531, 2005.
- [32] R. Liang, A. S. Khan, “A critical review of experimental results and constitutive models for BCC and FCC metals over a wide range of strain rates and temperatures”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 15, pp. 963–980, 1999.
- [21] L. Chang, C. Y. Zhou, L. L. Wen, J. Li & X. H. He, “Molecular dynamics study of strain rate effects on tensile behavior of single crystal titanium nanowire”, *Computational Materials Science*, Vol. 128, pp. 348-358, 2017.
- [22] H. Liang, M. Upmanyu & H. Huang, “Size-dependent elasticity of nanowires: nonlinear effects”, *Physical Review B*, Vol. 71, pp. 241403, 2005.
- [23] M. R. Sørensen, M. Brandbyge & K. W. Jacobsen, “Mechanical deformation of atomic-scale metallic contacts: structure and mechanisms”, *Physical Review B*, Vol. 57, pp. 3283, 1998.
- [24] Nakamura, M. Brandbyge, L. B. Hansen & K. W. Jacobsen, “Density functional simulation of a breaking nanowire”, *Physical Review Letters*, Vol. 82, pp. 1538, 1999.
- [25] X. W. Zhou, R. A. Johnson & H. N. G. Wadley, “Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers”, *Physical Review B*, Vol. 69, pp. 144113, 2004.
- [26] X. W. Zhou & H. N. G. Wadley, “Atomistic simulation of the vapor deposition of Ni/Cu/Ni multilayers: Incident adatom angle effects”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 87, pp. 553-563, 2000.
- [27] X. W. Zhou, H. N. G. Wadley, R. A. Johnson, D. J. Larson, N. Tabat, A. Cerezo, A. K. Petford-Long, G. D. W. Smith, P. H. Clifton, R. L. Martens & T. F. Kelly, “Atomic scale structure of sputtered metal multilayers”, *Acta Materialia*, Vol. 49, pp. 4005-4015, 2001.
- [28] H. A. Wu, “Molecular dynamics study of the mechanics of metal nanowires at finite temperature”, *European Journal of Mechanics-A/Solids*, Vol. 25, pp. 370-377, 2006.
- [29] M. Doyama & Y. Kogure, “Embedded atom potentials in fcc and bcc metals”, *Computational Materials Science*, Vol. 14, pp. 80-83, 1999.
- [30] F. Kassubek, C. A. Stafford, H. Grabert & R. E. Goldstein, “Quantum suppression of the Rayleigh instability in nanowires”, *Nonlinearity*, Vol. 14, pp. 167, 2001.
- [31] F. Sato, A. S. Moreira, P. Z. Coura, S. O. Dantas, S. B. Legoas, D. Ugarte & D. S. Galvao, “Computer simulations of gold nanowire formation: the role of

Analysis of thermo-mechanical behavior of gold nanowire by using molecular dynamics method

Mohammad Tahmasebipour^{*1}, Reihaneh Ahmadi², Mehrzad Modarres³

1- Assistant Professor, Faculty of New Sciences and Technologies, University of Tehran, Tehran, Iran

2- M.Sc., Micro/Nanofabrication Laboratory, Faculty of New Sciences and Technologies, University of Tehran, Tehran, Iran

3- M.Sc. Student, Faculty of New Sciences and Technologies, University of Tehran, Tehran, Iran

*Corresponding author: tahmasebipour@ut.ac.ir

Abstract

With the increasing growth and development of Nano science and nanotechnology, applications of the Nano-sensors, Nano-electro-mechanical systems, Nano-electric systems and Nano-photonic devices is rising day-by-day. Nanowires, as one of the key components of these systems, play a significant role in their proper function. Therefore, recognition of the thermo-mechanical behavior of nanowires has a particular importance. Due to the inevitable problems in conducting empirical experiments on nanowires, including the need for highly precise and advanced equipment, as well as the high cost and time needed to carry out these experiments, a number of researchers have simulated the behavior of nanowires. Molecular dynamics simulation is one of the best methods for recognizing the properties of nanowires, which is used in most nano-scale simulations. By using simulation and modeling methods, nanowires properties can be studied at a very low cost and short time, in comparison with experimental methods. In this paper, the effect of temperature (300, 450, 600 and 700 °K) and strain rate (2×10^8 , 2×10^9 and 2×10^{10} 1/s) on the mechanical properties of a gold nanowire (with diameter and length of 3 and 6 nanometers, respectively) such as stress-strain curve, yield stress, stress at failure moment, and the magnitude of nanowire elongation by molecular dynamics using embedded atom method (EAM) have been investigated to determine the thermo-mechanical behavior of the gold nanowire.

Keywords: Nano-Wire, Molecular Dynamics, Stress-Strain Curve, Failure Stress, Elongation.

Journal homepage: ma.iaumajlesi.ac.ir

Please cite this article using:

Mohammad Tahmasebipour, Reihaneh Ahmadi, Mehrzad Modarres, Analysis of thermo-mechanical behavior of gold nanowire by using molecular dynamics method, in Persian, New Process in Material Engineering, 2019, 13(1), 91-101.