علوم کاربردی در مهندسی
دوره ۷، شماره ۳، پاییز ۱۴۰۰
صفحات ۶۲- ۴۵

Online ISSN: ٢٤٧٦-٤٥٠٧
Print ISSN: ٢٥٣٨-٢٠٥٥
www.irijournals.com

بررسی ارتعاشات نانوتیرهای فلزی با استفاده از پتانسیل های EAM به روش دینامیک مولکولی

محمد حمید آزادی

دانش‌آموخته کارشناسی ارشد، دانشگاه صنعتی اصفهان، ایران

چکیده

یکی از روش‌های مهم برای تحقیقات نانومکانیک محاسباتی مطالعه‌ی اثرات سطح بر روی رفتار مواد در مقیاس نانواست. یکی از عامل‌های مهم و اثرگذار که با نسبت مساحت به حجم نانوساختارها افزایش می‌یابد اثر سطح می‌باشد که بدین منظور مدل‌های پیوسته‌ای برای در نظر گرفتن این اثر به دلیل دقت بالا و هزینه محاسباتی در مقیاس ماکرو ارائه شده‌است اما این مدل‌ها در پیش‌بینی خواص مکانیکی سیستم‌های نانو از دقت کافی برخوردار نیستند. در این پژوهش با کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و با استفاده از پتانسیل‌های EAM به آنالیزی بر روی اثرات سطح و ارتعاشی نانوتیرهای فلزی FCC برای شرایط مرزی مختلف ارائه پرداخته شده‌است. با وجود این که این شبیه‌سازی‌ها زمان‌بر و هزینه‌بر هستند،اما امروزه یکی از روش‌های متداول برای پیش بینی خصوصیات ذرات به علت دقت بالا و کاربرد زیاد در علوم نانو هستند. در این بررسی یک مدل هسته-پوسته به همراه تئوری‌های پیوسته تیر اصلاح شده‌است به صورتی که بتواند پارامترهای مربوط به اثرات سطح شامل الاستیسیته ، تنش و چگالی سطح را پیش‌بینی نماید. بدین منظور از نتایج دینامیک مولکولی و الگوریتم ژنتیک استفاده شده است که نتایج حاکی از آن‌است که مدل‌های پیوسته اصلاح شده به نتایج دینامیک مولکولی شباهت بسیار زیادی دارند به صورتی که می‌توان از آن‌ها بدون نیاز به شبیه‌سازی دوباره برای تخمین فرکانس نانوتیرهای فلزی استفاده کرد.

واژه‌های کلیدی: نانوتیر، دینامیک مولکولی، رفتارارتعاشی، پتانسیل های EAM، مدل های کانتینیومی

علوم کاربردی در مهندسی

دوره ۷، شماره ۳، پاییز ۱۴۰۰، صفحات ۶۲- ۴۵