مدل‌سازی و شبیه‌سازی رفتار کمانشی نانو سیم‌های سیلیسیم <۱۰۰> و <۱۱۱> با استفاده از روش مکانیک ساختاری

سید امین یاسینی[۱،*]، محمود شریعتی[۲]

اطلاعات مقاله

دریافت مقاله: ۱۳۹۴/۰۲/۳۰
پذیرش مقاله: ۱۳۹۴/۰۴/۰۷

واژگان کلیدی:
نانو سیم سیلیسیم،
مدول یانگ،
بار بحرانی کمانشی،
مکانیک ساختاری.

چکیده

در این مقاله با استفاده از روش مکانیک ساختاری و نرم افزار ABAQUS نانو سیم‌های سیلیسیم <۱۰۰> و <۱۱۱> مدل‌سازی و تحلیل شده است. میدان‌های نیروی بکار گرفته شده جهت مدل‌سازی در این مطالعه، میدان نیروی DREIDING است. در این تحلیل بار بحرانی کمانشی برای ضخامت‌های ۱ تا ۴ نانومتر با طول‌های ۰/۵ تا ۲۰ نانومتر محاسبه شده است. نتایج نشان می‌دهد بار بحرانی کمانشی در نسبت های طول به ضخامت نانوسیم، کمتر از ۱۰ از رابطه اولر منحرف می‌شود. در یک ضخامت و طول یکسان، بیشینه مقدار بار بحرانی کمانشی به نانوسیم <۱۱۱> تعلق دارد. نتایج حاصل از این روش در مقایسه با روش دینامیک مولکولی با سرعت بیشتر محاسبه می‌شود و مطابقت مطلوبی با آن دارد.

۱- مقدمه

با بررسی و جستجوی ساده در مورد اهمیت و کاربردهای نانو سیم سیلیسیم در دهه اخیر، مشخص می‌شود توجه محققین در حوزه نانو به این نانو سیم رشد بسزایی داشته است. خواص منحصر به فرد سیلیسیم سبب شده است تا از این ماده در ساخت نانو ابزارها، سنسورها، مدارات مجتمع، سلول‌ها خورشیدی و غیره استفاده شود. بدون شک می‌توان نانو سیم سیلسیم را یکی از کلیدی‌ترین مواد در حوزه نانو دانست. با پیشرفت در حوزه نانو و انتقال سیستم‌های میکروالکترومکانیک به سمت نانوالکترومکانیک، محاسبه خواص مکانیکی این نانو سیم امروزه بیش از پیش احساس می‌شود[۱و۲]. مطالعات آزمایشگاهی و شبیه سازی انجام شده بر روی نانو سیم سیلیسیم نشان می‌دهد، این نانو سیم در ابعاد بسیار کوچک خواص مکانیکی متفاوتی از خود نشان می‌دهد [۳-۶].

لی و رود [۷ و ۸] با استفاده از روش اصول اولیه[۲]، تغییرات مدول یانگ برای نانو سیم سیلیسیم رشد یافته در جهت <۱۰۰> را بررسی کردند. نانو سیم‌های مورد مطالعه آنها دارای ضخامت بین ۰/۵ تا ۴ نانومتر می‌شد. گزارش آنها نشان می‌دهد که با افزایش ضخامت در طول ثابت، مدول یانگ تا ضخامت ۲/۵ نانومتر روند افزایشی سریعی دارد و بعد از آن بطور ملایم به مقدار مدول یانگ گزارش شده حالت توده ماده میل می‌کند. فرمانچوک [۹و۱۰] و همکاران نیز با روش دینامیک مولکولی مدول یانگ و ضریب پواسون نانو سیم سیلیسیم <۱۰۰> را بررسی کردند. از مطالعات مبتنی بر روش‌های تجربی می‌توان به تحقیقات طبیب آذر و همکاران [۱۱] اشاره کرد. مطالعات آنها با

*. پست الکترونیک نویسنده مسئول: yasini_s.amin@yahoo.com
۱. دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مکانیک، دانشگاه صنعتی شاهرود
۲. استاد، دانشکده مکانیک، دانشگاه صنعتی شاهرود

[۲] Ab initio

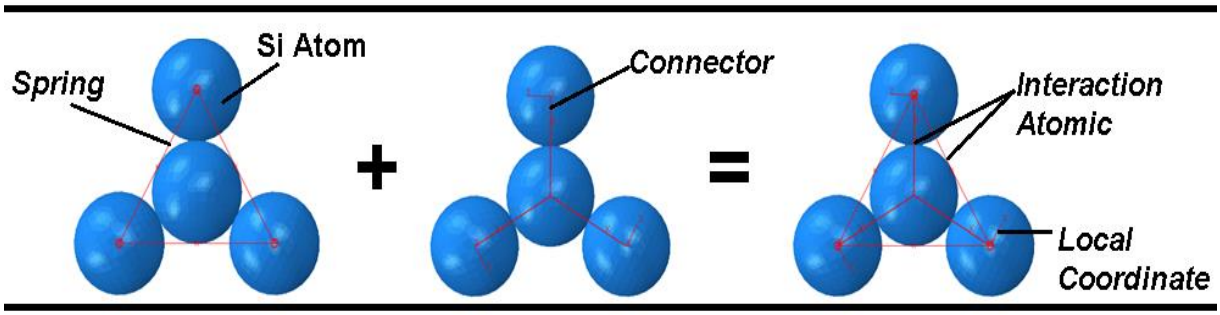
استفاده از AFM و بیشتر در محدوده یک صد تا دویست نانومتر می‌باشد. آنها مقدار مدول یانگ برای نانو سیم رشد یافته در جهت کریستالی را برای دو قطر ۱۴۰ تا ۲۰۰ نانو-متر با شرایط مرزی دو انتها ثابت و یک انتها ثابت بین ۹۳GPa تا ۲۵۰ گزارش کردند. از مطالعات مشابه می‌توان به مقاله هیسن و همکاران [۴] شاره کرد. آنها با محاسبه باربحرانی کمانشی و با استفاده از رابطه اولر برای طول‌های بلند در محدوده میکرومتر، مقدار مدول یانگ این نانو سیم را برابر ۱۵۰-۲۰۰GPa محاسبه کردند؛ آنها سطح مقطع نانو سیم را دایره ای با قطر ۲۰ نانومتر فرض نمودند. جینگ و همکاران [۱۲ و ۱۳] با استفاده از مدل‌سازی دینامک مولکولی مدول یانگ نانو سیم سیلیسیم <۱۱۰> و همچنین بار بحرانی کمانشی نانو سیم‌های سیلیسیم <۱۰۰>، <۱۱۰>، <۱۱۱> و <۱۱۲> به ضخامت حدود ۴ نانومتر با طولی بین ۱۵ تا ۳۵ نانومتر را بررسی کردند. مطالعه آنها نشان می‌دهد بار کمانشی با افزایش طول نانو سیم روند کاهشی دارد. از دیگر مطالعات می‌توان به ما و همکاران [۱۴ و ۱۵] و همچنین لیو و همکاران [۱۵] اشاره کرد. روش مکانیک ساختاری یک روش نسبتا جدید است که تقریبا از سال ۲۰۰۲ برای نانو لوله‌های کربنی به کار گرفته شد و از جمله می‌توان به تحقیقات پروانه و شریعتی [۱۶-۲۰] اشاره نمود.

اکثر مطالعات انجام شده بر روی این نانو سیم، به بررسی رفتار نانوسیم سیلیسیم، تحت بار کششی می‌پردازد و به رفتار کمانشی نانو سیم کمتر توجه شده است. در این تحقیق با بکارگیری روش مکانیک ساختاری برای نانو سیم سیلیسیم و مدل‌سازی در نرم‌افزار ABAQUS به تحلیل نانو سیم سیلیسیم رشد یافته در جهت‌های <۱۰۰> و<۱۱۱> برای ضخامت های بین ۱ تا ۴ نانومتر با طول‌های متفاوت بین ۰/۴ تا ۲۰ نانومتر با حداکثر ۲۰۲۸ اتم سلیسیم پرداخته شده است. با این روش مدل‌سازی بیشترین زمان تحلیل با CPU دو هسته ای ۲/۳ گیگا هرتزی و ۲ گیگ رم، تنها نیازمند ۴۰ دقیقه زمان است. نتایج این مطالعه جهت ساخت نانو ابزارهایی مانند نانو سنسورها مورد استفاده قرار می‌گیرد.

در ادامه در بخش ۲ روش مدل‌سازی معرفی می‌شود. بخش ۳ به نتایج شبیه سازی می‌پردازد و نتیجه گیری این مطالعه در بخش ۴ بیان شده است.

۲- روش مدل‌سازی

در روش مکانیک ساختاری نیروی بین اتمی با استفاده از المان‌های مکانیکی همچون تیر، فنر، خرپا و غیره مدل-سازی می‌شود. خواص مکانیکی این المان‌ها با استفاده از روابط پتانسیل گزارش شده از میدان‌های نیرو، همچون میدان نیروی DRIDING محاسبه می‌شود[۲۱]. دراینجا با استفاده از المان‌های موجود در نرم افزار ABAQUS، چون کانکتور و فنر، برهم کنش‌های بین اتمی نانوسیم سیلیسیم شبیه سازی شده است. شکل ۱ نمونه ای از این المان ها در مدل سازی را نشان می‌دهد.



شکل ۱- مدل ساختاری در نرم افزار ABAQUS

روابط (۱) تا (۶) انرژی پتانسیل مولکولی مربوط به، میدان نیروی DREIDING را معرفی می‌کند.

$$E = E_{val} + E_{nb} \quad (۱)$$

جمله اول در تابع انرژی پتانسیل نشان دهنده مجموع انرژی‌های پیوند بین مولکولی است و جمله دوم نشان دهنده انرژی‌های غیر پیوندی است. بدلیل کوچک بودن اثر انرژی پتانسیل غیر پیوندی نسبت به پیوندی، در مدل‌سازی نانو سیم سیلیسیم از آن صرف نظر شده است.

$$E_{val} = E_B + E_A + E_T + E_I \quad (۲)$$

انرژی پتانسیل پیوند بین مولکولی شامل انرژی‌های پیوند (E_B)، زاویه پیوند (E_A)، زاویه دوسطحی پیچش (E_T)، پیچش خارج صفحه (E_I) است.

روابط مربوط به هر یک از پتانسیل ها طبق این میدان نیرو برابر است با:

$$E_B(R) = D_e\left[e^{-(\alpha nR - R_e)} - 1\right]^2 \quad (۳)$$

$$E_A(\theta) = \frac{1}{2C_{ij}}\,[\cos(\theta) - \cos(\theta_0)]^2 \quad (۴)$$

$$E_T(\varphi) = 1/2V_{ij}\{1 - \cos[n_{jk}(\varphi - \varphi_0)]\} \quad (۵)$$

$$E_I(\psi) = 1/2K_{inv}[\psi - \psi_0]^2 \quad (۶)$$

در این روابط R فاصله بین دو اتم(طول پیوند)، θ زاویه پیوند بین اتم‌ها، φ زاویه پیچش پیوند اتم‌ها و ψ زاویه پیچش خارج صفحه است. همچنین R_e، θ_0 و D_e و غیره پارامترهای ثابت هستند که با توجه به نوع اتم و نوع پیوند مقدار آن مشخص می‌شود.

طبق میدان نیروی DREIDING برای جابجایی‌های کوچک می‌توان بجای روابط (۳) تا (۶) از پتانسیل‌های هارمونیک شده استفاده کرد[۲۱]. در مدل‌سازی نانو سیم سیلیسیم با نرم افزار ABAQUS گشتاور ناشی از تغییر زاویه پیوندی با یک فنر خطی و برای سایر میدان‌های نیرو از المان کانکتور با خواص مکانیکی مناسب تعریف شده، استفاده می‌شود. خواص این المان‌ها بر اساس نیرو و جابجایی‌ها است. اگر از روابط انرژی پتانسیل نسبت به جابجایی، دیفرانسیل گیری شود، تغییرات نیرو و گشتاور بر حسب جابجایی مطابق روابط (۷) تا (۱۰) بدست می‌آید. در این مطالعه بدلیل یکسان بودن اتم‌های سیلیسیم ضرایب مورد استفاده در تمامی اتم‌ها یکسان و در جدول ۱ این ضرایب ثابت برای اتم Si ذکر شده است.

$$F(R - R_e)_{Harmonic} = \left(\frac{\partial E_{val}}{\partial R}\right)_{Harmonic} = K_b[R - R_e] \quad (۷)$$

$$M_{T_{Harmonic}} = \left(\frac{\partial E_{val}}{\partial \varphi}\right)_{Harmonic} = K_T[\varphi - \varphi_0] \quad (۸)$$

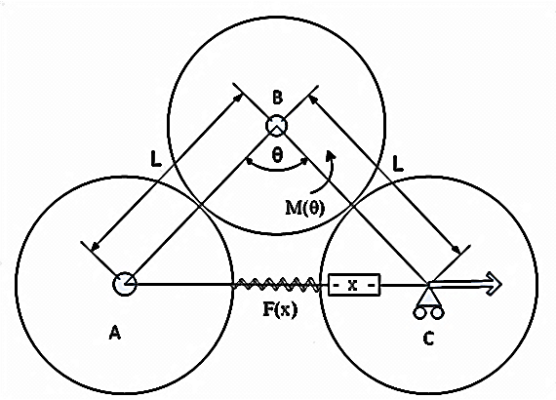
$$M_{A_{Harmonic}} = \left(\frac{\partial E_{val}}{\partial \theta}\right)_{Harmonic} = K_a[\theta - \theta_0] \quad (۹)$$

$$M_{I_{Harmonic}} = \left(\frac{\partial E_{val}}{\partial \psi}\right)_{Harmonic} = K_I[\psi - \psi_0] \quad (۱۰)$$

شکل (۲) فنر خطی معادل گشتاور پیچشی در B را نشان می‌دهد. براساس این شکل، θ تابعی از x (تغییر طول فنر) است، بنابراین طبق رابطه (۴)، برای فنر معادل برحسب x، می توان یک رابطه هارمونیک بدست آورده شود، لذا می-توان نوشت:

$$\left(\frac{d^2E_A}{dx^2}\right)_{x=x0} = k_a \quad (۱۱)$$

$$x = 2L\sin(\theta/2) \quad (۱۲)$$



شکل ۲- شماتیکی از فنر خطی معادل گشتاور پیچشی در B

k_a ضریب سفتی فنر خطی است. برطبق میدان نیروی دریدینگ:

$$C_{ij} = k_a/(\sin(\theta_0))^2 \quad (۱۳)$$

باتوجه به روابط (۱۲)، (۱۳)و جای‌گذاری در (۴) رابطه فنر خطی هارمونیک شده برابر است با:

$$F(x) = \left(\frac{3k_a}{l^2}\right)x \quad (۱۴)$$

برای تغییرات کوچک x، نیروی غیر خطی فنر $\left(\frac{\partial E_{val}}{\partial \theta}\right)$ و حالت هارمونیک شده آن (رابطه ۱۴) در شکل ۳ ترسیم شده است.

جدول ۱- ضرایب میدان های نیرو DREIDING برای اتم Si

اتم	K_b[1]	K_a[2]	K_T[3]	K_I[4]	R_0[5]	θ_0	φ_0	ψ_0
Si	48.65 E-19	0.6951 E-18	6.59 E-21	0.278 E-18	0.2347	109.47	180	0

۱- ضریب هارمونیک شده انرژی پتانسیل پیوندی(J/nm) ۲- ضریب هارمونیک شده انرژی پتانسیل زاویه پیوندی(J/rad^2) ۳- ضریب هارمونیک شده انرژی پتانسیل پیچشی(J/rad^2) ۴- ضریب هارمونیک شده انرژی پتانسیل پیچشی خارج از صفحه(J/rad^2) ۵- شعاع اتمی(nm)

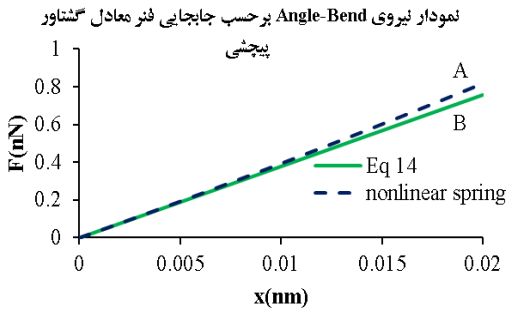
هندسه در نظر گرفته شده برای این نانو سیم طبق مشاهدات آزمایشگاهی و محاسبات انجام شده بر اساس تشکیل پیوند بین مولکولی[۲۲ و ۲۴] در شکل ۴ قابل مشاهده است.

بعد از رشد نانو سیم در جهت مد نظر لایه‌ای اکسید برروی سطح خارجی آن ایجاد می‌شود برای زدودن سطح نانو سیم از اکسید سیلیسیم معمولا از اسید HF استفاده می نمایند؛ این کار سبب ایجاد لایه از هیدروژن در سطح خارجی نانو سیم می‌شود. در این تحقیق بدلیل اثر ناچیز هیدروژن در خواص مکانیکی نسبت به اتم‌های سیلیسیم، از اتم‌های هیدروژن در سطح نانو سیم صرف نظر شده است. برای محاسبه مدول یانگ در ابعاد نانو از روابط تعریف شده الاستیسیته و مقاومت مصالح استفاده شده است [۷-۱۵]. نوع تحلیل و روابط الاستیک مورد استفاده در جدول ۲ بیان شده است. رابطه اولر جهت مقایسه رفتار در حوزه نانو ذکر شده است.

جدول ۲- روابط مکانیکی مورد استفاده

$E = (F/A)/(\Delta l/l)$	کشش[۲۷]
$P_{cr} = (n\pi)^2 EI/(\mu l)^2$	کمانش[۲۷]

F نیرو محوری،A سطح مقطع نانوسیم، Δl تغییرات جابجایی، L طول نانوسیم، E مدول یانگ ، P_{cr} بار بحرانی کمانش ، μ ضریب طول ستون که در اینجا ۰/۵ (شرایط مرزی دو طرف گیردار) است.



شکل ۳- A-منحنی رابطه غیر خطی برای المان فنر مورد استفاده، B- منحنی رابطه (۱۴)

۳- نتایج شبیه‌سازی

۳-۱- شرایط مرزی و فرضیات

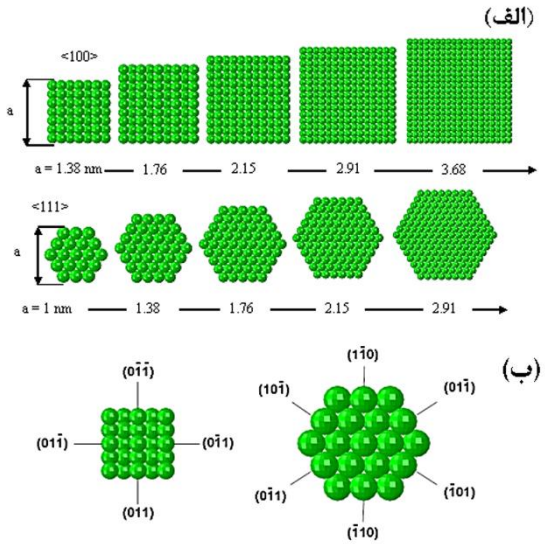
در این تحقیق نانو سیم با ضخامت‌های مختلف بین ۱ تا ۴ نانومتر با طول‌های متفاوت از ۰/۴ تا ۲۰ نانومتر تحت بارگذاری‌های فشاری جهت بدست آوردن بار بحرانی کمانشی و کشش محوری برای محاسبه مدول یانگ قرار می‌گیرد. با داشتن تغییرات طول و ابعاد هندسی طبق روابط جدول ۲ مدول یانگ محاسبه می‌شود. شکل ۴ ضخامت(عرض) نانو سیم‌های مورد تحلیل را نشان می‌دهد. شرایط مرزی برای کشش محوری، همانند تحلیل یک تیر با تکیه‌گاه یکسرگیردار است؛ در حالت تحلیل کمانشی، شرط مرزی یک سرآزاد به شرط گیردار تبدیل می‌شود. در این مدل‌سازی خواص مکانیکی هر اتم صرفا برای هسته آن که بصورت کره فرض شده است، در نظر گرفته شده است. خواص توده‌ای ماده براساس گزارشات ورتمن است[۲۵].

۳-۲- کشش محوری

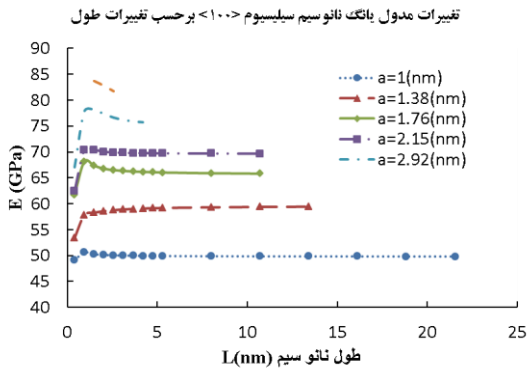
در کشش محوری، نانو سیم با شرایط مرزی ذکر شده تحت بار محوری کششی قرار می‌گیرد. با توجه به روابط بیان شده در جدول ۲ مدول یانگ برای هر نانو سیم محاسبه می‌شود.

الف - نانو سیم <۱۰۰>

با بررسی نتایج حاصله از مقدار مدول یانگ برحسب طول نانو سیم مشخص می‌شود برای هر ضخامت از هرنانو سیم، مدول یانگ منحصر به فرد است(شکل ۵).



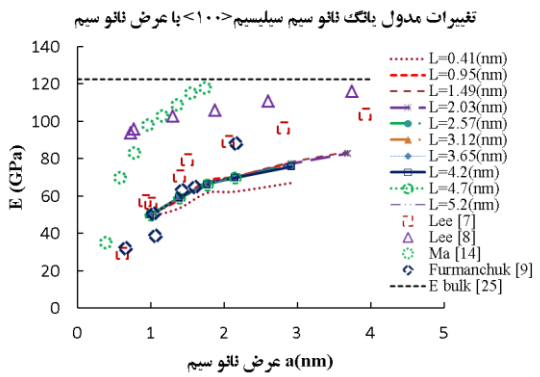
شکل ۴- (الف) ضخامت مختلف نانو سیم‌های سیلیسیم <۱۰۰> و <۱۱۱> تحلیل شده برحسب نانومتر. (ب)جهات کریستالوگرافی سطوح نانو سیم سیلیسیم<۱۰۰> و <۱۱۱>



شکل ۵- تغییرات مدول یانگ نانو سیم<۱۰۰> برحسب افزایش طول

در شکل ۶ تغییرات مدول یانگ بر حسب تغییرات ضخامت ترسیم شده است. شیب صعودی ابتدای نمودارها بر اثر کوچک بودن طول نانو سیم نسبت به ضخامت (عرض نانو سیم) است؛ در واقع نانو سیم در این وضعیت به عنوان یک صفحه است. در محاسبات با توجه به رابطه ذکر شده در جدول ۲، عملا مخرج کسر بسیار کوچک می‌شود. لذا مدول یانگ مقداری بزرگ و از مقدار حقیقی خود منحرف می‌شود. با افزایش طول مشاهده می‌شود مدول الاستیسیته با ضخامت‌های گوناگون روند افزایشی و در ضخامت‌های ۷-۱۰ نانومتر به مدول توده‌ای ماده سیلیسیم همگرا می‌شود. تفاوت مقدار مدول یانگ گزارش شده در مراجع [۷] و [۱۴] اختلاف در مقدار مساحت در نظر گرفته شده برای سطح مقطع نانوسیم<۱۰۰> دارد. علاوه بر این، فورمانچوک [۹] علت اختلاف را در دمای نانو سیم مورد تحلیل نیز بیان می‌کند. در این مرجع طول اولیه نانو سیم‌ها برابر ۲/۲ و ۲/۳ نانومتر و همچنین اثر پوشش هیدروژن‌های روی سطح نیز در نظر گرفته شده است. نتایج تحقیق حاضر با نتایج این مرجع مطابقت مطلوبی دارد. فورمانچوک [۹] همانند لی [۸] به بررسی دو هندسه متفاوت از این نوع نانو سیم می‌پردازد. ضخامت‌های(عرض) (۰/۶۶۲، ۱/۰۴۱ و ۱/۴۳۵ نانومتر) همانند هندسه نشان داده شده برای نانو سیم<۱۰۰> در شکل ۴ است.

آزمایشات تجربی که تمام این مراجع به آن استناد کرده‌اند مقدار مدول یانگ را برای ضخامت‌های کمتر از ۱۰ نانومتر ۲±۱۸GPa گزارش می‌کند[۲۶]. البته قابل توجه است زدودن اکسید از سطح نانو سیم بسیار مهم و سخت است، لذا احتمال خطا در نتایج تجربی بالا است.

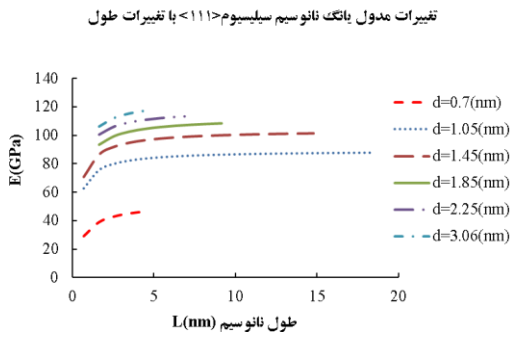


شکل ۶- رفتار مدول یانگ نانو سیم سیلیسیم<۱۰۰> برحسب عرض(ضخامت)

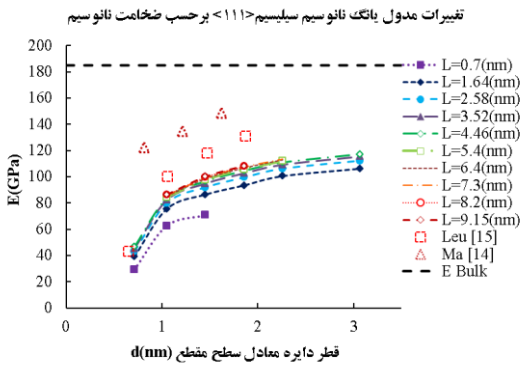
ب- نانو سیم <۱۱۱>

شبیه سازی آزمایش کشش ساده، بر روی نانو سیم سیلیسیم <۱۱۱> نشان می‌دهد که این نانو سیم نیز، در طول‌های بسیار کوتاه با افزایش طول، با روند سریع افزایش مقدار مدول یانگ روبرو است و سپس تغییرات ثابت می-شود. نمودار مدول یانگ برحسب طول و برحسب قطر معادل سطح به ترتیب در شکل‌های ۷ و ۸ شکل ۷مشاهده می‌شود.

به ازای ضخامت‌های کمتر از ۱ نانومتر، نانو سیم در محدوده نانو سیم‌های فوق باریک قرار می‌گیرد. تفاوت آشکار در مدول یانگ این بازه، در شکل ۷ و شکل ۸ کاملا مشهود است.



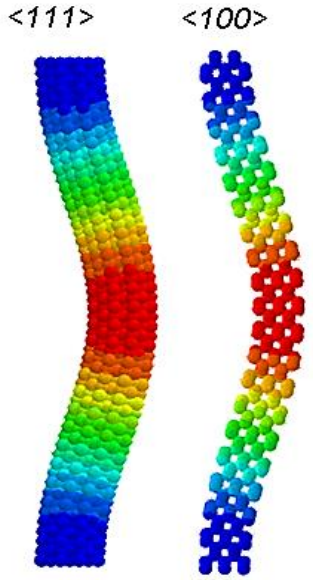
شکل ۷- تغییرات مدول یانگ نانو سیم <۱۱۱> برحسب طول نانو سیم



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

۳-۳- کمانش

هدف از تحلیل کمانشی بررسی محدوده‌ای از نسبت طول نانو سیم به ضخامت آن است که در این محدوده، رفتار کمانشی مطابق رابطه اولر نمی‌باشد. شکل ۹ نمونه‌ای از رفتار کمانشی نانو سیم های <۱۱۱> و <۱۰۰> مدل سازی شده در نرم افزار ABAQUS را نشان می دهد.



شکل ۹- نمونه ای از کمانش نانو سیم مدل سازی شده در ABAQUS برای نانو سیم های <۱۱۱> و <۱۱۰>

الف- نانو سیم <۱۰۰>

شکل ۱۰ رفتار کمانشی نانو سیم <۱۰۰> را به تصویر می-کشد. در شکل روند تغییر بار بحرانی برحسب نسبت طول به عرض (L/a) نشان داده شده است. 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 ۲ بیان گردید. برای استفاده از این رابطه مقدار مدول یانگ مطابق مقدار مدول توده‌ای ماده [۲۵] برابر ۱۲۲/۵ GPa در نظر گرفته شده است. با بررسی نمودار به این موضوع پی برده می‌شود که برای طول‌های کوتاه، با افزایش ضخامت، بار کمانشی از رابطه اولر منحرف می‌شود (سیم فوق نازک و کوتاه) و اگر رفتار کمانشی 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 می‌گردد.

نتایج حاصل از تحلیل در این نمودار نشان می‌دهد، زمانی که نسبت طول به عرض بزرگ می‌شود، نتایج به رابطه اولر میل می‌کند. این می‌تواند به خاطر کاهش اثر اتم‌های سطحی و افزایش اتم‌ها در حجم باشد که این حالت همان رفتار حالت توده‌ای ماده است. علاوه بر این در نسبت‌های کمتر از ۱۰ رفتار کمانشی نانو سیم، از آنچه که محاسبات نشان می‌دهد منحرف می‌شود. بهتر است مطالعات تحلیل کمانشی نانو سیم، معطوف به این ابعاد شود.

نتایج ذکر شده از مرجع [۱۳] در شکل ۱۰ برای ضخامت ۴/۰۶ نانومتر با طول‌های ۱۶ تا ۳۲ نانومتر است. البته هندسه نانو سیم مورد نظر با هندسه در نظر گرفته شده در این تحقیق متفاوت است. وجوه این نانو سیم از صفحات (۱۰۰) و (۱۱۰) تشکیل شده است، در حالی که وجوه نانو سیم <۱۰۰> در این مطالعه همگی دارای صفحات (۱۱۰) است(شکل ۴). بطور مشابه با رسم نمودار اولر برای نتایج این مرجع مشاهده می‌شود نمودار در نسبت‌های L/a کوچکتر از ۱۰ از رابطه اولر منحرف می‌شود که این رفتار در نتایج بدست آمده در تحقیق حاضر نیز دیده می‌شود.

ب- نانو سیم <۱۱۱>

در شکل ۱۱ بار بحرانی کمانشی بر حسب نسبت ضخامت (a) به طول نانوسیم (L)، برای نانو سیم <۱۱۱> رسم شده است. انحراف از رابطه اولر برای نسبت‌های کمتر از ۱۰ کاملا واضح است. مقدار مدول یانگ برای حالت توده‌ای ماده در رابطه اولر ۱۸۵ گیگاپاسکال در نظر گرفته می‌شود[۲۵]. بدلیل حجم بالای محاسبات برای ضخامت‌های بزرگ، نمودارها، برای محدوده‌ای از نسبتهای 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 آنها، تابعی به فرم رابطه (۱۵) بدست می‌آید.

$$F(x) = a * e^{b(x)} \qquad (۱۵)$$

در رابطه مذکور x(nm) طول نانو سیم است و F(nN) بار-بحرانی کمانشی برای ضخامت مورد مطالعه است. a و b ثابت‌هایی است که از برازش بدست می‌آید. مقادیر a و b برای ضخامت ۲/۹۱ نانومتر به ترتیب ۳۳۷ و ۰/۱۰۹- بدست می‌آید و این مقادیر برای ضخامت ۴/۰۶ نانومتر بهترتیب ۶۹۲ و ۰/۰۹- محاسبه می‌شود(شکل ۱۲). در نرم‌افزار ABAQUS نتایج کمانش از روش اختلالات خطی[۱] بدست می‌آید و مقدار بار بحرانی کمانشی مربوط به یک مسئله مقدار ویژه است.

نتایج ذکر شده از مرجع [۱۳] برای ضخامت ۳/۸۸ نانومتر می‌باشد که با توجه به هندسه آن، معادل ضخامت ۴/۰۶ نانومتر در این مطالعه است. آنها مقدار مدول یانگ برای این ضخامت را ۱۰۷ گیگا پاسکال گزارش می‌کنند.

نتایج حاصل از مطالعه حال حاضر، نشان می‌دهد در نسبت-های L/a (طول به ضخامت) کمتر از ۱۰ مقادیر بار بحرانی از رابطه اولر منحرف می‌شود. در این نسبت‌ها مقادیر مدول یانگ وابسته به ضخامت است.

در شکل ۱۲ 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 این محدوده از نمودار باربحرانی کمانشی، ممکن است با تاخیر رخ دهد؛ این رفتار بدلیل کاهش نسبت طول به ضخامت نانو سیم یک رفتار طبیعی است و انتظار چنین افزایشی می‌رود.

در شکل ۱۳ با توجه به مقدار مدول یانگ بدست آمده برای ضخامت ۴/۰۶ نانومتر و رابطه اولر مقدار بار بحرانی کمانشی برحسب نسبت (L/a) رسم شده است. مقدار ممان دوم سطح برای ضخامت ۴/۰۶ نانومتر $0/56\ nm^4$ و برای ضخامت ۳/۸۶ نانومتر، $0/5\ nm^4$ محاسبه شده است. طبق نتایج شبیه سازی قسمت "۳-۲-ب"، مقدار مدول یانگ

[۱] Linear Perturbation

برای ضخامت ۴/۰۶ نانومتر ۱۳۰ گیگا پاسکال پیش‌بینی می‌شود.

همان طور که در شکل ۱۳ مشاهده می‌شود با مقایسه رفتار محاسبه شده توسط رابطه اولر و تابع برازش شده بر نتایج تحلیل، انحراف از رابطه اولر با بکار بردن مدول یانگ مخصوص ضخامت ۴/۰۶ نانومتر، بازهم مشاهده می‌شود، ولی میزان این انحراف ناچیز است. به عبارت دیگر رابطه اولر برای محدوده نسبت طول به عرض کمتر از ۱۰ با ضخامت های کمتر از ۱۰ نانومتر برای این نانو سیم برقرار نمی باشد.

۴- نتیجه‌گیری

نتایج حاصل از این تحقیق را بطور خلاصه می‌توان به شرح زیر بیان کرد:

بیشینه مقدار مدول یانگ در یک ضخامت و طول یکسان بین دو نانو سیم سیلسیم <۱۰۰> و<۱۱۱> به نانو سیم <۱۱۱> تعلق دارد. مقدار مدول یانگ در محدوده ضخامت‌های بزرگ‌تر از ۷-۱۰ نانومتر به مقدار مدول یانگ در حالت توده ای ماده می‌گراید. مقدار مدول یانگ در محدوده ضخامت‌های کمتر از ۱۰ نانومتر برای هر ضخامت از نانو سیم سیلیسیم منحصر به فرد است.

بار بحرانی کمانشی در نسبت‌های طول به ضخامت کمتر از ۱۰، از رابطه اولر منحرف می‌شود. در یک ضخامت ثابت با افزایش طول نانو سیم رفتار کمانشی نانو سیم به رابطه اولر می‌گراید و در یک طول ثابت با افزایش ضخامت نانو سیم رفتار کمانشی از رابطه اولر منحرف می‌شود. در یک نسبت یکسان از طول به ضخامت، بیشترین باربحرانی کمانشی متعلق به نانو سیم سیلیسیم<۱۱۱> است.

۵- مراجع

[1] Y. C. Lin., K. C. Lu., W. W. Wu., J. W. Bai, L. J. Chen., K. N. Tu., Y.Huang.,(2008) “Single Crystalline PtSi Nanowires, PtSi/Si/PtSi Nanowir Heterostructures and Nanodevices”, Nano Lett., 8, 913

[2] H. T. Chen., S. I. Hsieh., C. J. Lin., Y. C. King., (2006) “Degradation Dependent on Channel Width in Sequential Lateral Solidified Poly-Si Thin FilmTransistors”, IEEE Electron Device, 27 ,272 – 274

[3] A.D. Zdetsis, E.N. Koukaras, C.S. Garoufalis, (2008) “Novel effects in finite-length silicon nanowires”, Phys. Stat. Sol. (a)205, 2625–2629, 2008.

[4] C.L. Hsin, W. Mai, Y. Gu, Y. Gao, C.T. Huang, Y. Liu, L.J. Chen, Z.L. Wang, (2009) “Elastic Properties and Buckling of Silicon Nanowires” Adv.Mater. 20 3919–3923

[5] Mousumi Upadhyay Kahaly and Umesh V. Waghmare., (2007) “Size dependence of thermal properties of armchair carbon nanotubes: A first-principles study”, Appl. Phys. Lett. 91 203112–203112-3

[6] Y.S. Sohn, J. Park, G. Yoon, J. Song, S.W. Jee, J.H. Lee, S. Na, T. Kwon, K. Eom., (2010) “Mechanical Properties of Silicon Nanowires”, Nano. Res. Lett., 5, 211–216

[7] Lee, B., and R. E. Rudd, (2007) "First principles study of the Young's modulus of Si <001> nanowires", Phys. Rev. B 75, 195328

[8] Lee, B., and R. E. Rudd, (2007) “"First-principles calculation of mechanical properties of Si <001> nanowires and comparison to nanomechanical theory ”, Phys. Rev. B 75, 041305 R

[9] Al'ona Furmanchuk, Olexandr Isayev, Tandabany C. Dinadayalane, and Jerzy Leszczynski, Car_Parrinello, (2011) “ Molecular Dynamics Simulations of Tensile Tests on Si<001>Nanowires ”, J. Phys. Chem. C 115, 12283–12292

[10] Al'ona Furmanchuk, Olexandr Isayev, Tandabany C. Dinadayalane, Danuta Leszczynska, Jerzy Leszczynsk, (2012) “Mechanical properties of silicon nanowires, Computational Chemistry” , DOI: 10.1002/wcms.1108

[11] Tabib-Azar, M., M. Nassirou, R. Wang, S. Sharma, T. I. Ka-mins, M. S. Islam, and R. S. Williams, (2005) "Mechanical properties of self-welded silicon nanobridges" ,Appl. Phys. Lett. 87, 113102.

[12] Jing Yuhang, Meng Qingyuan, and Zhao Wei, 2009,"Atomistic simulations of the tensile and melting behavior of siliconnanowires", Semiconductors, 30

[13] Jing Yuhang, Meng Qingyuan,2009, "Molecular dynamics simulation on the buckling behavior of silicon nanowires under uniaxial compression, Computational", Materials Science 45 ,321–326

[14] Ma, L., J. Wang, J. Zhao, and G. Wang, “Anisotropy in stability and Young’s modulus of hydrogenated silicon nanowires ”, Chem. Phys. Lett. 452, 183, 2008

[15] Leu, P. W., A. Svizhenko, and K. Cho, “Ab initio calculations of the mechanical and electronic properties of strained Si nanowires ” , Phys. Rev. B, 77, 235305, 2008.

[16] V. Parvaneh, M. Shariati, “ Effect of defects and loading on prediction of Young’s modulus of SWCNTs ”, Acta Mech. 216 , 281–289, 2011

[17] V. Parvaneh, M. Shariati, A.M. Majd Sabeti, H. Torabi, “Influence of Boundary Conditions and Defects on the Buckling Behavior of SWCNTs via a Structural Mechanics Approach”, J. Nanomater., 297902, 2011

[18] V. Parvaneh, M. Shariati, H. Torabi, “Frequency analysis of perfect and defective SWCNTs ”, Comp. Mater.Sci 50 2051–2056, 2011

[19] Vali Parvaneh, Mahmoud Shariati, Amir Masood Majd Sabeti, “Investigation of vacancy defects effects on the buckling behavior of SWCNTs via a structural mechanics approach”, European Journal of Mechanics A/Solids 28,1072–1078, 2009

[20] Vali Parvaneh, Mahmoud Shariati, Hamid Torabi & Amir Masood Majd Sabeti, “Torsional Buckling Behavior of SWCNTs Using a Molecular Structural Mechanics Approach Considering Vacancy Defects”, Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, 20:8, 709-720, 2012

[21] Stephen L. Mayo, Barry D. Olafson, and William A. Goddard III**,** “DREIDING: A Generic Force Field for Molecular Simulations”, J. Phys. Chem. 94, 8897-8909, 1990.

[22] A. J. Lu., R. Q. Zhang,a_ and S. T. Lee, “Tunable electronic band structures of hydrogen-terminated <112> silicon nanowires”, Appl. Phys. Lett, 92, 203109, 2008

[23] Boon K. Teo,Shu-Ping Huang, R.Q. Zhang, Wai-Kee Li., “Theoretical calculations of structures and properties of one-dimensional silicon-based nanomaterials: Particularities and peculiarities of silicon and silicon-containing nanowires and nanotubes”, Coordination Chemistry Reviews 253, 2935–2958, 2009

[24] J.G. Collins, W.J. Giardini, A.J. Leistner, M.J. Kenny, “The influence of Young's modulus on roundness in silicon sphere fabrication Avogadro constant” IEEE Trans.Instrum. Meas., 46, 572, 1997

[25] J. J. Wortman and R. A. Evans, “Young's Modulus, Shear Modulus, and Poisson's Ratio in Silicon and GermaniumJ ”, Appl. Phys. 36, 153, 1965.

[26] Kizuka, T., Y. Takatani, K. Asaka, and R. Yoshizaki, “Measurements of the atomistic mechanics of single crystalline silicon wires of nanometer width”, Phys. Rev. B 72, 035333, 2005

[27] Beer, Ferdinand P; and Johnston, E.Russell; “Mechanics of Material ”, Mc Graw-Hill, 2nd ed, 1915