



شبیه‌سازی دینامیک مولکولی رفتار شکست ساختارهای دو بعدی سیلیکون ژرمانیوم: اثر نقص هندسی و رشد ترک

سید احمد محمودزاده حسینی^۱، علی دادرسی^{۲*}، ولی پروانه^۳، فریبرز فروهنده^۳

^۱ دانشجوی دکتری، گروه مهندسی مکانیک، واحد شاهرود، دانشگاه آزاد اسلامی، شاهرود، ایران.

^۲ دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه حکیم سبزواری، سبزوار، ایران.

^۳ استادیار، گروه مهندسی مکانیک، واحد شاهرود، دانشگاه آزاد اسلامی، شاهرود، ایران.

مقاله مستقل، تاریخ دریافت: ۱۴۰۵/۰۲/۱۹؛ تاریخ بازنگری: ۱۴۰۵/۰۴/۲۰؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۵/۰۵/۲۹

چکیده

در این مقاله، به منظور دستیابی به درک دقیق‌تری از رفتار مکانیکی نانوساختارهای سیلیکون ژرمانیوم، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از نرم افزار لمپس مورد استفاده قرار گرفت. در همین راستا، خواص مکانیکی نانوصفحات سیلیکون ژرمانیوم در بازه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین و در حضور نقص‌های بیضوی و ترک‌های منشعب مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج نشان داد که این نانوصفحات در راستای آرمچیر از استحکام بیشتری نسبت به زیگزاگ برخوردارند و افزایش دما موجب کاهش پیوسته‌ی خواص مکانیکی می‌شود. همچنین، مشخص شد که افزایش شعاع نقص هندسی باعث افت مدول یانگ و تنش شکست شده و رشد ترک منشعب از نقص بیضوی تاثیر قابل توجهی بر کاهش چقرمگی و انرژی شکست دارد. در نهایت، مقادیر خواص مکانیکی به کمک الگوریتم ازدحام ذرات بهینه‌سازی شد. این نتایج نظری تصویر مفیدی از اثر نقص‌های هندسی بر رفتار مکانیکی نانوصفحات سیلیکون ژرمانیوم را تشکیل می‌دهد که می‌تواند برای مهندسی نقص مواد دو بعدی مفید باشد.

کلمات کلیدی: دینامیک مولکولی؛ خواص مکانیکی؛ چقرمگی شکست؛ سیلیکون ژرمانیوم؛ بهینه‌سازی.

Molecular Dynamics Simulation of Fracture Behavior of Two-Dimensional Silicon Germanium Structures: The Effect of Geometrical Defects and Crack Growth

Seyed Ahmad Mahmoodzade Hoseyni¹, Ali Dadrasi^{2,*}, Vali Parvaneh³, Fariborz Forouhandeh³

¹ PhD. Student, Department of Mechanical Engineering, Sha.C., Islamic Azad university, Shahrood, Iran.

² Assoc. Prof., Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Hakim Sabzevari University, Sabzevar, Iran.

³ Assist. Prof., Department of Mechanical Engineering, Sha.C., Islamic Azad university, Shahrood, Iran.

Abstract

In this study, molecular dynamics simulations were performed using the LAMMPS software to obtain a more precise understanding of the mechanical behavior of silicon-germanium (SiGe) nanostructures. Accordingly, the mechanical properties of SiGe nanosheets were investigated over the temperature range of 100–900 K and in the presence of elliptical defects and their associated branched cracks. The results showed that these nanosheets exhibit higher strength in the armchair direction compared to the zigzag direction, and that increasing temperature leads to a continuous reduction in mechanical properties. It was also found that enlarging the radius of the geometrical defect decreases Young's modulus and failure stress, while the extension of the branched crack originating from the elliptical defect has a significant effect on reducing fracture toughness and energy. Finally, the mechanical properties were optimized using the particle swarm optimization algorithm. These theoretical findings provide valuable insight into the influence of geometrical defects on the mechanical behavior of SiGe nanosheets and can be useful for defect engineering in two-dimensional materials.

Keywords: Molecular dynamics; Mechanical properties; Fracture toughness; Silicon germanium; Optimization.

۱- مقدمه

ویژگی‌های حرارتی، مکانیکی و الکتریکی ساختارهای دو بعدی که بر پایه‌ی کربن استوار هستند، سبب شده است که این ساختارها بخشی جدایی ناپذیر از فناوری و علم قرار بگیرند و نظر بسیاری از محققین را در موضوع‌های مختلف نظری، شبیه‌سازی و عملی به خود جلب نمایند [۱-۳]. از آنجایی که اتم کربن به عنوان یکی از سخت‌ترین مواد معرفی شده است، از این رو، گرافن را یک نماینده‌ی مناسب در طیف گسترده‌ای از کاربردها همچون سیستم‌های نانوالکترومکانیکی [۴]، نانوالکتریک [۵] و نانوکامپوزیت [۶] مورد استفاده قرار می‌دهند [۷]. ساختار گرافن با شکل ظاهری شش ضلعی-لانه زنبوری از ویژگی‌های مختلفی همچون استحکام مکانیکی بالا [۸]، هدایت حرارتی مناسب [۹]، خواص الکترونیکی و جذب قابل قبول برخوردار می‌باشد. با توجه به این که فاصله باند این ساختار صفر می‌باشد و نمی‌توان از آن به عنوان ابرخازن یا ترانزیستور در مدارهای الکتریکی استفاده کرد، اصلاح ساختار با جایگزینی اتم‌های دیگر که دارای فاصله باند بزرگ‌تری هستند، موجب می‌شود تا خواص مختلف آن را افزایش دهد. در همین راستا، نانومواد کربنی و غیر کربنی مختلف مانند سیلیسیم، کاربید سیلیکون، برلیوم اکساید، ژرمانیوم، نیتريد بور و کاربید بور در مطالعات علمی متعدد، هم از نظر تئوری و هم از نظر تجربی مورد توجه قرار گرفته است.

با توجه به همسایگی کربن و اتم‌های سیلیکون و ژرمانیوم در جدول تناوبی که همسان بودن الکترون‌ها را به همراه دارد، این دو می‌توانند جایگزین مناسبی برای اتم کربن در ساختار گرافن باشند. از نانورق‌های سیلیکونی به طور گسترده‌ای در زمینه‌های الکتریکی و پزشکی استفاده می‌شود [۱۰-۱۳]. از نانوساختار سیلیکون ژرمانیوم نیمه هادی در مطالعات نظری اخیر استفاده شده است. در تحقیقات قبلی، ویژگی‌های نانولوله‌های سیلیکون ژرمانیوم نیز بررسی شده است. اما با توجه به ویژگی‌های نانورق سیلیکون ژرمانیوم، نیاز به مطالعه‌ی بیشتری بر این ساختار دوبعدی احساس می‌شود. باید در نظر داشت که نانورق‌ها مانند سایر مواد به صورت تک کریستالی کامل و بدون نقص یافت نمی‌شوند. بنابراین، با در نظر گرفتن عیوب ساختاری در نانوساختارها، می‌توان مسیر مناسبی برای استفاده از این مواد در مقیاس بزرگ و دستیابی

به اهداف صنعتی را تعبیه کرد. از جمله عیوب ساختاری می‌توان به ترک، نقص‌های هندسی با اشکال مختلف و مرزخانه‌ها اشاره کرد که به عنوان عیوب توپولوژیکی معرفی می‌شوند و تاثیر نامطلوبی بر خواص نانوصفحات دارند [۱۴-۱۶]. محققان با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی خواص مختلف نانوساختارهای دو بعدی پرداخته‌اند. سینگ و همکاران [۱۷] به بررسی نقص‌های پنج ضلعی و هفت ضلعی و ترک در ساختار ترکیبی گرافن-نیتريد بور پرداختند. نتایج آنها نشان داد که حضور نقص‌های هندسی یک عامل اثرگذار بر خواص مکانیکی می‌باشد؛ به طوری که مقادیر چقرمگی شکست و تنش شکست به ترتیب ۱۵ و ۱۴ درصد کاهش یافت. مطالعات شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بر ساختار MoS_2 نشان داد که نقص‌های جای خالی تاثیر بسزایی بر رشد ترک داشتند و باعث انحراف ترک، انشعاب و حتی افزایش چقرمگی شکست در شرایط خاص شده‌اند [۱۸]. این تحقیق نشان داد که اثرات نقص در مواد دو بعدی بسیار غیر بدیهی هستند و به شدت به نوع نقص، چگالی و جهت شبکه وابسته‌اند. رحمان و همکاران [۱۹] مقاومت مکانیکی ساختار سیلیکون ژرمانیوم را به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار دادند. نتایج آنها نشان داد که ایجاد نقص‌های جای خالی منجر به کاهش ۲۰ تا ۴۰ درصد کرنش شکست می‌شود. این مشاهدات بر اهمیت درک فرآیند شکست کنترل شده توسط نقص در مواد دو بعدی تاکید می‌کند و به طور مستقیم انگیزه‌ی بررسی حاضر در مورد نقص‌های هندسی در نانوصفحات سیلیکون ژرمانیوم را ایجاد می‌سازد. در مطالعه‌ی ای دیگر، خواص مکانیکی ساختار نیتريد بور با تغییرات طول ترک بررسی شد [۲۰]. مقدار کرنش شکست برای ساختار با طول ترک ۱۰۰ آنگستروم نزدیک به ۰/۰۸ گزارش شد که در مقایسه با ساختار بدون ترک، ۱۵۱ درصد کاهش یافت. بررسی نانوصفحات نیتريد بور بوسیله‌ی چن و همکاران صورت پذیرفت [۲۱]. نتایج آنها نشان داد که حذف اتم‌ها در اطراف ترک به عنوان نقطه‌ی آغازین رشد ترک در ساختارها می‌باشد که سبب تغییر مسیر رشد ترک می‌شود. نتایج آنها بیانگر آن بود که حتی نقص‌های کوچک نیز می‌تواند رشد ترک را تغییر جهت داده و مقاومت کلی شکست نانورق را کاهش دهد. این رفتار، نقش حیاتی هندسه‌ی نقص در کنترل تکامل ترک را برجسته می‌نماید. بررسی ساختار کاربید سیلیسیم توسط مولایی و

توصیف شده است [۲۵]. در این پتانسیل، رابطه‌ی بین انرژی و جابجایی اتم‌ها نسبت به یکدیگر با معادله‌ی (۱) بیان می‌شود:

$$U_{ij} = f_c(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})] \quad (1)$$

تابع $f_R(r_{ij})$ پتانسیل دافعه‌ی بین دو ذره را بیان می‌کند، یعنی برهمکنش هسته-هسته و $f_A(r_{ij})$ پتانسیل جذب ناشی از الکترون‌های ظرفیت را نشان می‌دهد. $f_c(r_{ij})$ تابع قطع می‌باشد که برهمکنش را در یک فاصله‌ی محدود به صفر می‌رساند. r_{ij} نیز فاصله‌ی بین اتم i و اتم j می‌باشد. همچنین، b_{ij} بیانگر یک اصطلاح استحکام پیوند است که به محیط اتمی محلی اطراف یک پیوند خاص بستگی دارد و تابعی کاهشی از بازآرایی اتم‌ها است. b_{ij} شامل تمام اثرات بالقوه چند ذره است. توابع موجود در این پتانسیل‌ها با معادله‌ی (۲) بیان می‌شود:

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1 & r_{ij} < R_{ij} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left[\frac{\pi(r_{ij} - R_{ij})}{S_{ij} - R_{ij}} \right] & R_{ij} \leq r_{ij} \leq S_{ij} \\ 0 & r_{ij} > S_{ij} \end{cases}$$

$$f_A(r_{ij}) = -B_{ij} e^{-\mu_{ij} r_{ij}}$$

$$f_R(r_{ij}) = -A_{ij} e^{-\lambda_{ij} r_{ij}}$$

$$b_{ij} = X_{ij} (1 + B_i^{n_i} \xi_{ij}^{n_i})^{-\frac{1}{2n_i}}$$

$$\xi_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik}) \omega_{ik} g(\theta_{ijk})$$

$$g(\theta_{ijk}) = 1 + \frac{C_i^2}{d_i^2} - \frac{C_i^2}{d_i^2 + (h_i + \cos \theta_{ijk})^2}$$

$$\omega_{ik} = e^{\left[\frac{\mu_{ik}^3}{2} (r_{ij} - r_{ik})^3 \right]}$$

$$\lambda_{ij} = \frac{(\lambda_i + \lambda_j)}{2}, \quad \mu_{ij} = \frac{(\mu_i + \mu_j)}{2} \quad (2)$$

$$A_{ij} = \sqrt{A_i A_j}, \quad B_{ij} = \sqrt{B_i B_j}$$

$$R_{ij} = \sqrt{R_i R_j}, \quad S_{ij} = \sqrt{S_i S_j}$$

شاخص‌های i و j اتم‌های موجود در پیوند ijk را مشخص می‌کنند. r_{ij} و r_{ik} به ترتیب طول پیوندهای ij و ik را نشان می‌دهد که θ_{ijk} زاویه‌ی بین آنها است. این

همکاران [۲۲] در حضور نقص‌های دایره‌ای صورت گرفت. نتایج آنها نشان داد که افزایش شعاع نقص دایره‌ای سبب می‌شود تا خواص مکانیکی به طور چشمگیری کاهش یابد.

اگرچه تحقیقات گسترده‌ای بر نانو ساختارها به ویژه ساختار دوبعدی سیلیکون ژرمانیوم صورت گرفته است، اما چندین سوال در مورد رفتار مکانیکی این ساختار در شرایط مختلف برای نظریه پردازان بی پاسخ مانده است. برای این منظور، در این مطالعه، مقایسه‌ی خواص مکانیکی نانوصفحات سیلیکون ژرمانیوم با بهره‌گیری از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از نظر عیوب هندسی و به عنوان تابعی از دما بررسی می‌شود. چگونگی رفتار مکانیکی نانوساختار سیلیکون ژرمانیوم با نقص‌های هندسی ایجاد شده و همچنین، اثر ترک منشعب شده از نقص‌های هندسی مطالعه خواهد شد. از همین رو، مدول یانگ، تنش شکست، چقرمگی و انرژی شکست نانوصفحات سیلیکون ژرمانیوم با دو چیدمان مختلف در دو راستای آرمچیر و زیگزگ مورد آزمایش قرار خواهد گرفت. در مرحله‌ی بعدی، اثر نقص بیضوی با مساحت‌های مختلف مطالعه خواهد شد. همچنین، ترک منشعب شده از نقص هندسی به عنوان عامل اثرگذار بر خواص مکانیکی مورد مطالعه قرار خواهد گرفت. در نهایت، خواص مکانیکی چقرمگی شکست و انرژی شکست نانوساختارها مورد تجزیه و تحلیل قرار خواهد گرفت. در قسمت پایانی نیز به بررسی بهینه‌سازی خواص مکانیکی بر پایه‌ی روش الگوریتم ازدحام ذرات پرداخته خواهد شد. الگوی تکاملی رشد ترک در ایجاد نانوساختارهای مهندسی و دستیابی به نقاط بهینه از مقادیر مکانیکی به طراحی دستگاه-های الکترونیکی آینده کمک می‌کند.

۲- روش محاسبات

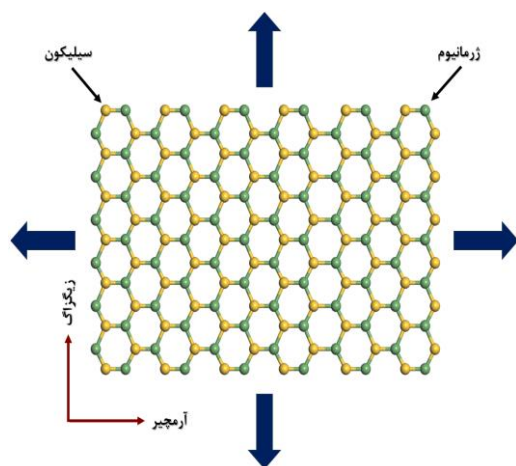
در این مطالعه، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی با استفاده از شبیه‌سازی موازی جرمی اتمی/مولکولی در مقیاس بزرگ (لمپس^۱) انجام شده است [۲۳]. همچنین، برای تجسم و نظارت بر خروجی‌های مورد بررسی و موقعیت‌یابی اتم‌ها از نرم افزار اویتو^۲ استفاده شده است [۲۴]. فعل و انفعالات بین اتم-های سیلیکون و ژرمانیوم با استفاده از پتانسیل ترسوف^۳

³ Tersoff

¹ LAMMPS

² Ovito

متعدد بر روی مواد دو بعدی، نرخ‌های کرنش را در محدوده‌ی 10^{-1} تا 10^1 ps⁻¹ به کار می‌برند که پاسخ الاستیک و رفتار شکست را به طور قابل اعتمادی ثبت می‌کند. در نهایت، نمودار تنش-کرنش برای بررسی خواص مکانیکی ساختارهای مورد بررسی با استفاده از اطلاعات بدست آمده ترسیم شده است.



شکل ۱- شماتیک ساختار دو بعدی سیلیکون ژرمانیوم که اتم‌های سیلیکون و ژرمانیوم در همسایگی هم قرار گرفته‌اند.

لمپس، المان تنش، مختصات اتمی، انرژی پتانسیل و ابعاد جعبه شبیه‌سازی را در هر گام زمانی خروجی می‌دهد. تنش مهندسی از المان تنش محاسبه شده است، در حالی که کرنش از تغییر نسبی طول جعبه به دست آمده است. انرژی کرنش از تغییرات انرژی پتانسیل استخراج می‌شود. این خروجی‌ها برای ساخت منحنی‌های تنش-کرنش و تعیین مدول یانگ، تنش شکست و کرنش شکست استفاده شده‌اند.

۳- اعتبارسنجی مدل

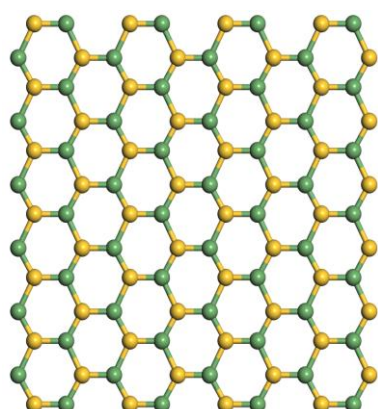
برای اعتبارسنجی رویکرد صورت گرفته در مطالعه‌ی حاضر، یک نانوصفحه‌ی سیلیکون ژرمانیوم تحت بارگذاری کششی قرار گرفت. شکل ۲ مقایسه‌ی نتایج بدست آمده با نتایج ارایه شده در مرجع [۲۶] را به نمایش گذاشته است. همانطور که مشخص است، تطابق قابل قبولی برای هر دو راستای بارگذاری آرمچر و زیگزاگ قابل مشاهده می‌باشد که نشان دهنده‌ی اعتبارسنجی مورد اطمینان از این مدل می‌باشد.

ضرایب با توجه به ضرایب ارایه شده در بالا استفاده شده است. A و B پیش فاکتورهای عبارات دافعه و جاذبه، μ و λ ثابت‌های واپاشی که سرعت کاهش نیروهای دافعه/جاذبه را با فاصله کنترل می‌کنند، n توان کنترل کننده‌ی حساسیت مرتبه‌ی پیوند، C ، d و h المان‌های تعریف کننده‌ی تابع زاویه‌ای، R و S شعاع‌های قطع داخلی و خارجی، β ضریب مقیاس بندی در عبارت مرتبه پیوند و X ضریب مقیاس بندی وابسته می‌باشند. برخی المان‌های پتانسیل ترسوف مربوط به اتم‌های سیلیکون و ژرمانیوم در جدول ۱ ارایه شده است.

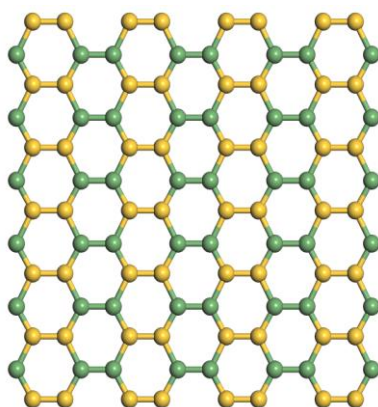
جدول ۱- المان‌های پتانسیل ترسوف برای پیوندهای

بین اتمی ساختار سیلیکون ژرمانیوم				
المان	Si-Si-Si	Si-Ge-Si	Si-Ge-Ge	Ge-Ge-Ge
A(eV)	۱۸۳۰/۸	۰	۱۷۹۵/۱	۱۷۶۰/۱
B'(eV)	۴۷۱/۱۸	۰	۴۵۰/۳۹	۴۳۰
$\lambda'(\text{\AA}^{-1})$	۲/۴۷۹۹	۰	۲/۴۶۲۵	۲/۴۴۵۱
β	$1/1 \text{ e}^{-6}$	۰	$1/1 \text{ e}^{-6}$	$5/17 \text{ e}^{-6}$
γ	۱	۱	۱	۱
$\cos\theta$	-۰/۵۹۸۲۵	-۰/۵۹۸۲	-۰/۵۹۸۲	-۰/۳۵

ساختار شش ضلعی-لانه زنبوری سیلیکون ژرمانیوم در شکل ۱ نشان داده شده است که در آن، هر اتم سیلیکون و ژرمانیوم به صورت منظم کنار هم قرار گرفته‌اند. همچنین، دو جهت بارگذاری آرمچر و زیگزاگ به ترتیب بیانگر جهت‌های X و Y می‌باشد. اندازه‌ی ساختار 100×100 آنگستروم مربع با تعداد ۱۴۷۲ اتم در نظر گرفته شده است که بررسی خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش شکست، چقرمگی و انرژی شکست ساختارهای سیلیکون ژرمانیوم را در شرایط مختلف به همراه دارد. شبیه‌سازی در حالت تعادل انجام شده است. در تمام موارد شبیه‌سازی، ابتدا با اعمال الگوریتم Nose-Hoover در دما و فشار ثابت و با استفاده از گام زمانی 0.01 پیکوثانیه، سیستم برای مدت زمان 50 پیکوثانیه به حالت تعادل رسیده است. سیستم مورد بررسی تحت بارگذاری کششی با نرخ کرنش 0.1 ps^{-1} قرار گرفته است و شرایط مرزی تناوبی در جهت داخل صفحه اعمال شده است. اگرچه این نرخ بالاتر از مقادیر تجربی است، اما، چنین نرخ‌های کرنش بالایی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به دلیل مقیاس زمانی ذاتی پیکوثانیه‌ای حرکت اتمی و هزینه‌ی محاسباتی در شبیه‌سازی‌های طولانی، استاندارد هستند. مطالعات دینامیک مولکولی



(الف)

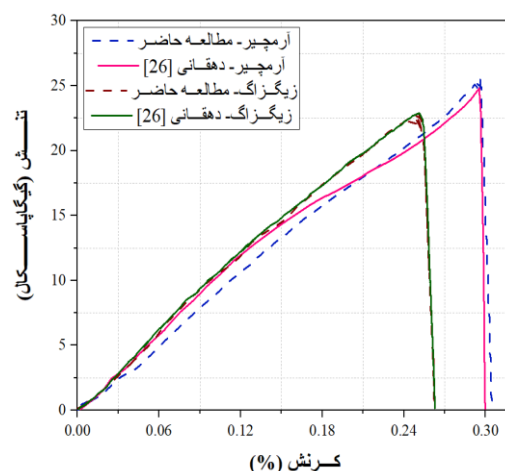


(ب)

شکل ۳- الف) نانوساختار سیلیکون ژرمانیوم با چیدمان ۱، ب) نانوساختار سیلیکون ژرمانیوم با چیدمان ۲.

۴-۲- بررسی منحنی‌های تنش-کرنش

شکل ۴ نشان دهنده نمودارهای تنش-کرنش برای نانوصفات سیلیکون ژرمانیوم برای دو چیدمان متفاوت می-باشد که در دو راستای آرمچیر و زیگزآگ بررسی شده است. همانطور که قابل مشاهده است، افزایش دما از ۱۰۰ به ۹۰۰ کلون به عنوان یک عامل اثرگذار بر این موارد ارایه شده است. از سویی دیگر، تحت کشش قرار گرفتن ساختارهای سیلیکون ژرمانیوم در راستای آرمچیر مقاومت بیشتری را نسبت به کشش در راستای زیگزآگ از خود نشان داده است. در این شکل، شکست نهایی نانوصفات به عنوان نقطه‌ای مطابق با حداکثر تنش بر روی منحنی‌های تنش-کرنش تعریف شده است که پس از افت شدید تنش رخ می‌دهد. تنش نهایی، نشان



شکل ۲- مقایسه منحنی‌های تنش-کرنش نانوصفات سیلیکون ژرمانیوم برای دو راستای آرمچیر و زیگزآگ با مرجع [۲۶].

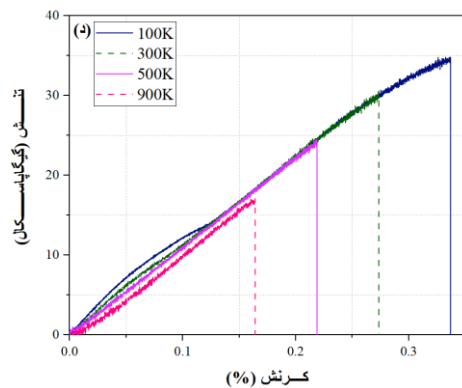
۴- نتایج و بحث

۴-۱- خواص مکانیکی ساختار سیلیکون ژرمانیوم به عنوان تابعی از دما

برای بررسی اثر تغییرات دما از ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلون، رفتار شکست نانوصفات سیلیکون ژرمانیوم در دو راستای آرمچیر و زیگزآگ و برای دو چیدمان مختلف آن (شکل ۳) مورد مطالعه قرار گرفت. تمام نمونه‌ها تحت بارگذاری کششی تک محوری قرار گرفتند و منحنی‌های تنش-کرنش به همراه نتایج خواص مکانیکی مدول یانگ و تنش شکست آنها گزارش شد. شایان ذکر است که برای دستیابی به نقاط منحنی تنش-کرنش، از معادله‌ی (۳) استفاده شده است [۲۷]:

$$\sigma = \frac{\partial U}{\partial \varepsilon} = D \varepsilon^2 + E \varepsilon + C \quad (3)$$

که در آن، σ تنش مهندسی حاصل از بارگذاری، ε کرنش کششی تک محوری اعمال شده، U انرژی پتانسیل تمام ورق در طول تغییر شکل، C جمله‌ی ثابت در برازش چند جمله‌ای که نشان دهنده‌ی حالت تنش اولیه‌ی نانوصفحه در کرنش صفر، E مدول یانگ که از عبارت مرتبه اول برازش تنش-کرنش به دست می‌آید، و D ثابت الاستیک غیرخطی که نحوه‌ی تغییر سختی با کرنش را توصیف می‌نماید.

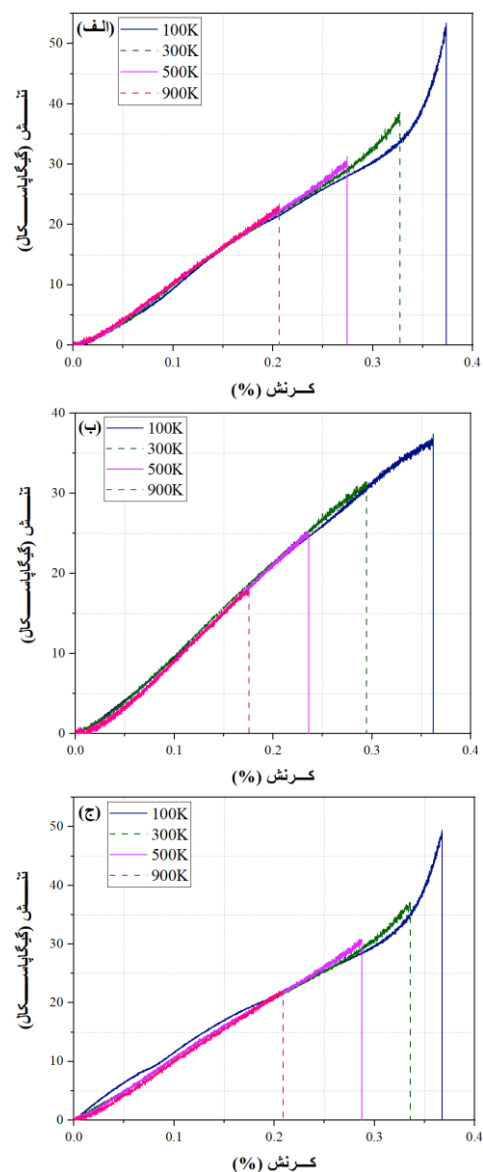


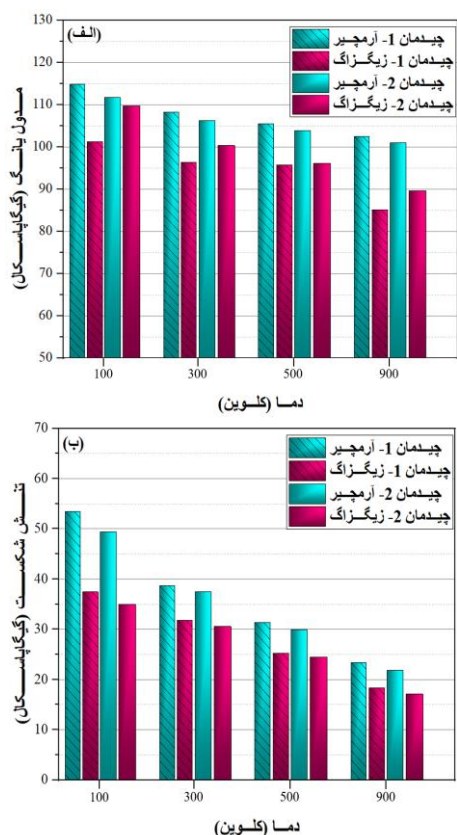
شکل ۴- تغییرات تنش- کرنش ساختار سیلیکون ژرمانیوم: الف) چیدمان ۱- راستای آرمچیر، ب) چیدمان ۱- راستای زیگزاگ، ج) چیدمان ۲- راستای آرمچیر، د) چیدمان ۲- راستای زیگزاگ.

۳-۴- بررسی خواص مکانیکی ساختارهای دو بعدی

در این قسمت، خواص مکانیکی مدول یانگ و تنش شکست نانوصفحات سیلیکون ژرمانیوم برای دو چیدمان متفاوت در راستای آرمچیر و زیگزاگ مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت. با توجه به نمودار شکل ۵، مقدار مدول یانگ و تنش شکست با افزایش دما از ۱۰۰ به ۹۰۰ کلوین کاهش یافته است. همچنین، مقادیر خواص مکانیکی در راستای آرمچیر بالاتر از جهت بارگذاری زیگزاگ گزارش شد. در راستای آرمچیر، مقدار مدول یانگ در دمای ۱۰۰ کلوین برای چیدمان ۱ از ۱۱۴/۷۶ گیگاپاسکال به ۱۰۲/۴۴ گیگاپاسکال در دمای ۹۰۰ کلوین کاهش یافت که ۱۰/۷۳ درصد کاهش را نشان می‌دهد. این در حالی است که مقدار این خاصیت مکانیکی برای چیدمان ۲ از ۱۱۱/۶۵ گیگاپاسکال به ۱۰۰/۹۳ گیگاپاسکال (دمای ۱۰۰ به ۹۰۰ کلوین) کاهش یافت. با این حال، مقدار تنش شکست کاهش بیشتری را برای هر دو چیدمان از نانوصفحات تجربه کرد. تنش شکست برای چیدمان ۱ به ترتیب ۵۳/۴۵، ۳۸/۶۷، ۳۱/۳۴ و ۲۳/۳۹ گیگاپاسکال در بازه‌ی دمایی ۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین گزارش شد که ۵۶/۲۳ درصد کاهش را نشان می‌دهد. همچنین، این خاصیت مکانیکی برای چیدمان ۲ و در دمای ۱۰۰ کلوین، ۴۹/۴۱ گیگاپاسکال بدست آمد که با افزایش دما به ۹۰۰ کلوین، مقدار تنش شکست به ۲۱/۸۴ گیگاپاسکال کاهش یافت (۵۹/۷۷ درصد کاهش). فاصله‌ی اتم‌ها با افزایش دما افزایش می‌یابد و این عامل موجب می‌شود تا انرژی متقابل بین اتم‌ها کاهش یابد و کاهش خواص مکانیکی را منجر گردد.

دهنده‌ی شروع رشد ترک ناپایدار و پارگی کامل شبکه‌ی اتمی می‌باشد. با توجه به این که افزایش دما موجب افزایش طول پیوند در اتم‌های سیلیکون و ژرمانیوم می‌گردد، این امر سبب می‌شود تا انرژی اتصال اتم‌ها کاهش یابد و یک عامل اثرگذار بر مقاومت ساختارهای دو بعدی معرفی شود [۲۸-۳۰]. با توجه به نمودارهای تنش-کرنش، ساختارها مقاومت مناسبی را در قسمت خطی از خود نشان می‌دهند و پس از ورود به قسمت غیرخطی و با افزایش کرنش، به نقطه‌ی شکست می‌رسند و تنش به طور ناگهانی کاهش می‌یابد.





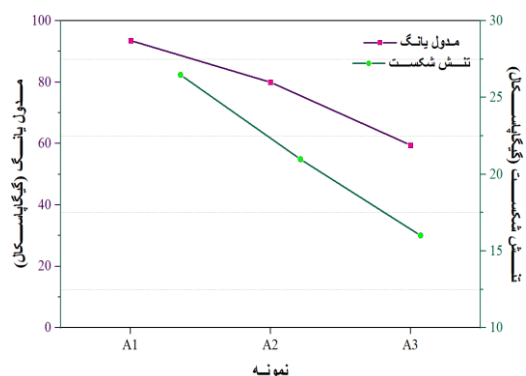
شکل ۵- خواص مکانیکی نانوساختار سیلیکون ژرمانیوم برای دو چیدمان متفاوت، (الف) مدول یانگ، (ب) تنش شکست.

۴-۴- تاثیر نقص هندسی بر رفتار شکست ساختارهای دو بعدی

از آنجایی که نانوصفحات در دنیای واقعی به صورت کاملاً یکپارچه و منظم وجود ندارند و معمولاً ممکن است هر لایه در شرایط مختلف دچار نقص‌های متفاوتی بشود، از همین رو، بررسی نقوص هندسی با اشکال مختلف حائز اهمیت است. به همین منظور، در این بخش، اثر نقص هندسی با شکل بیضی و با اندازه‌های مختلف بر خواص مکانیکی نانوصفحات سیلیکون ژرمانیوم بررسی شده است. شکل ۶ تصویر شماتیک حضور نقص هندسی بر ساختار مورد مطالعه را نشان می‌دهد. نمادهای T_1 و T_2 به ترتیب بیانگر شعاع کوچک و شعاع بزرگ بیضی می‌باشد.

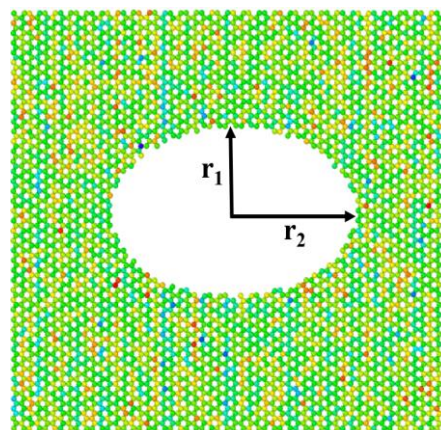
متغیرهایی مانند دما که باعث تغییر فاصله و نیروی بین اتم‌ها می‌شود، می‌تواند به طور قابل توجهی بر خواص مکانیکی اثرگذار باشد. بنابراین، افزایش دما منجر به کاهش اتصال بین اتمی و به دنبال آن، تضعیف پیوند شیمیایی می‌شود که کاهش خواص مکانیکی نظیر مدول یانگ و تنش شکست را به همراه دارد [۳۱-۳۳]. با توجه به شکل ۵، خواص مکانیکی در راستای زیگزآگ نیز روند مشابهی را تجربه کرد. مقدار مدول یانگ برای چیدمان ۱ و ۲ در دمای ۱۰۰ کلوین به ترتیب ۱۰۱/۲۵ و ۹۰۹/۷۱ گیگاپاسکال بدست آمد که با افزایش دما به ۹۰۰ کلوین، به ترتیب ۸۵/۱۱ و ۱۷/۰۷ گیگاپاسکال گزارش شد. همچنین، خاصیت مکانیکی تنش شکست برای چیدمان ۱ به ترتیب ۳۷/۴۱، ۳۱/۷۹، ۲۵/۲۱ و ۱۸/۳۵ گیگاپاسکال (دمای ۱۰۰، ۳۰۰، ۵۰۰ و ۹۰۰ کلوین) ارایه شد. این خاصیت مکانیکی برای چیدمان ۲، از ۳۴/۸۳ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به ۱۷/۰۷ گیگاپاسکال در دمای ۹۰۰ کلوین کاهش یافت که نزدیک به ۶۰ درصد کاهش را نشان می‌دهد. شایان ذکر است که مدول الاستیک در مقیاس اتمی ارتباط مستقیمی با پیوندهای شیمیایی دارد و افزایش دما منجر به تضعیف این پیوندها می‌گردد. یک روند نزولی خواص مکانیکی با افزایش دما برای ساختار نیتريد بور بوسیله‌ی باقری و همکاران گزارش شده است [۳۴]. در مطالعه‌ای دیگر، مولایی و همکاران کاهش ۱۶/۱۹ و ۴۱/۱۳ درصدی مدول یانگ و تنش شکست ساختار کاربید سیلیسیم را با افزایش دما گزارش کرده‌اند [۳۵].

از آنجایی که نتایج مکانیکی نانوصفحات سیلیکون ژرمانیوم برای هر دو چیدمان نزدیک بهم بودند، در ادامه‌ی روند بررسی رفتار شکست این نانوساختارها از چیدمان ۱ بهره گرفته خواهد شد.



شکل ۷- تغییرات خواص مکانیکی مدول یانگ و تنش شکست در حضور نقص هندسی بیضوی با اندازه شعاع-های مختلف.

همانطور که بیان شد، افزایش شعاع‌های کوچک و بزرگ نقص هندسی باعث کاهش خواص مکانیکی مدول یانگ و تنش شکست شد. در نتیجه، مقدار بیشینه‌ی مدول یانگ برای نمونه‌ی A₁ معادل ۹۳/۵۴ گیگاپاسکال گزارش شد. این خاصیت مکانیکی برای نمونه‌های A₂ و A₃ به ترتیب ۷۹/۹۳ و ۵۹/۴۸ گیگاپاسکال بدست آمد که به ترتیب ۱۴/۵۴ و ۳۶/۴۱ درصد کاهش را نسبت به نمونه‌ی A₁ نشان می‌دهد. از سویی دیگر، مقدار تنش شکست برای نمونه‌های مورد بررسی به ترتیب ۲۶/۴۷، ۲۰/۹۷ و ۱۶/۰۱ گیگاپاسکال گزارش شد. این روند کاهشی در مطالعات قبلی نیز قابل مشاهده می‌باشد. ترانگ و همکاران [۳۹] به بررسی خواص مکانیکی نانوصفحات فسفر سیاه در حضور عیوب هندسی پرداختند. نتایج آن‌ها نشان داد که این نقص‌های هندسی اثر چندانی بر خاصیت مکانیکی مدول یانگ ندارد، اما سبب کاهش مقادیر تنش و کرنش شکست به میزان ۵۳ و ۶۹ درصد می‌شود. شیرازی و همکاران [۴۰] به بررسی خواص مکانیکی ساختار شش‌ضلعی نیتريد کربن در حضور نقص دایروی با قطرهای مختلف پرداختند. نتایج آن‌ها نشان داد که افزایش قطر نقص دایروی سبب کاهش استحکام کششی در ساختار می‌شود. فرتاش و همکاران [۴۱] اثر مکان، تعداد و قطر نقص دایروی را بر ساختار ترکیبی کاربید بور - نیتريد کربن مورد مطالعه قرار دادند. نتایج آن‌ها نشان داد که افزایش قطر نقص دایره سبب افزایش غلظت تنش اطراف نقص شود. همچنین، افزایش تعداد نقص دایروی با قطر ثابت موجب کاهش استحکام کششی ساختار ترکیبی کاربید بور - نیتريد کربن می‌گردد. از سویی دیگر، نتایج آن‌ها

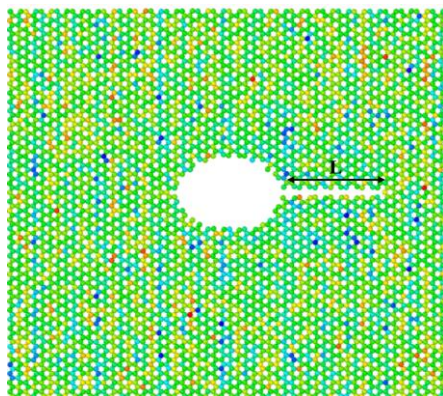


شکل ۶- شماتیک ساختار دو بعدی سیلیکون ژرمانیوم در حضور نقص هندسی. r_1 و r_2 به عنوان شعاع‌های کوچک و بزرگ معرفی شدند.

جدول ۲ اندازه‌های مختلف نقص هندسی را ارائه می‌کند. همچنین، تغییرات خواص مکانیکی مدول یانگ و تنش شکست به عنوان تابعی از تغییرات اندازه‌ی نقص هندسی در شکل ۷ نشان داده شده است. رفتار شکست نانوصفحات سیلیکون ژرمانیوم نشان می‌دهد که افزایش r_1 و r_2 به عنوان یک عامل اثرگذار بر خواص مکانیکی ایفای نقش می‌کند. از آنجایی که برهمکنش بین اتم‌هایی که در اطراف نقص‌های هندسی قرار دارند، ضعیف‌تر از اتم‌هایی است که داخل نواحی قرار دارند، این امر به عنوان دلیل اصلی گرا دیان تنش در ساختارهای دو بعدی بیان می‌شود. در نتیجه، تمرکز تنش در مجاورت محیط نقص‌های هندسی افزایش می‌یابد و کاهش خواص مکانیکی را به همراه دارد [۳۶-۳۸].

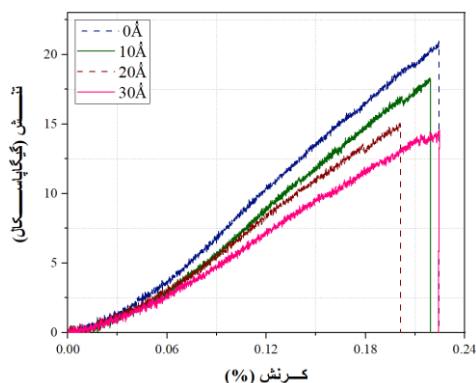
جدول ۲- اندازه‌ی نقص هندسی بیضوی بر پایه‌ی شعاع کوچک و بزرگ

نمونه	شعاع کوچک (Å)	شعاع بزرگ (Å)
A ₁	۳	۸
A ₂	۸	۱۳
A ₃	۱۷	۲۴



شکل ۸- شماتیک ساختار دو بعدی سیلیکون ژرمانیوم در حضور نقص هندسی به همراه ترک منشعب شده از آن. L به عنوان طول ترک معرفی شد.

منحنی تنش-کرنش برای اندازه‌های مختلف طول ترک در نمودار شکل ۹ نشان داده شده است. همان طور که مشخص است، افزایش طول ترک منشعب شده از نقص هندسی موجب کاهش استحکام ساختار شده است، به طوری که مقدار تنش از $20/97$ گیگاپاسکال برای ساختار بدون نقص به $14/59$ گیگاپاسکال برای ساختار با طول ترک 30° آنگستروم کاهش یافته است. همانطور که در قسمت قبل نیز بدان اشاره شد، افزایش تمرکز تنش در اطراف نقص‌های هندسی به عنوان یک عامل اثرگذار بر خواص مکانیکی عمل می‌کنند که موجب کاهش مقاومت مکانیکی نانوصفحات دوبعدی می‌گردد.



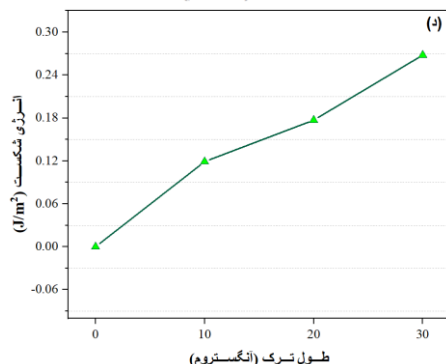
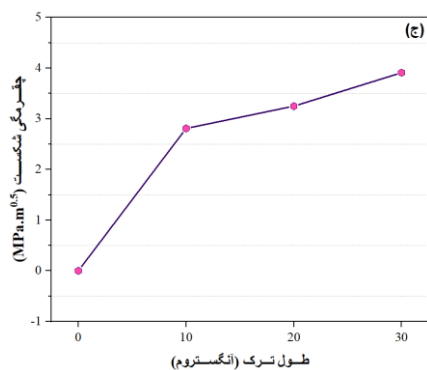
شکل ۹- تغییرات تنش-کرنش ساختار سیلیکون ژرمانیوم در حضور ترک منشعب از نقص هندسی.

نشان داد که حضور نقص‌های هندسی در ساختار کاربید بور اثر بیشتری بر خواص مکانیکی می‌گذارد. در مطالعه‌ای دیگر، عینعلی‌پور و همکاران به بررسی ساختار ترکیبی گرافن - نیتريد بور پرداختند [۴۲]. آنها حضور نقص‌های دایره‌ای را به عنوان یک عامل اثرگذار بر خواص مکانیکی معرفی کردند. بررسی افزایش تعداد نقص در این تحقیق نشان داد که مدول یانگ و تنش شکست ساختار ترکیبی گرافن - نیتريد بور کاهش می‌یابد. این نکته قابل توجه است که حذف تعداد زیادی از اتم‌ها در یک ساختار موجب می‌شود که پیوند بین اتم‌ها تضعیف شود و کاهش مقاومت ساختار را به همراه داشته باشد. از سویی دیگر، نقص‌های هندسی شبکه‌ی یکنواخت ساختارها را مختل کرده و مقاومت در برابر تغییر شکل را تضعیف می‌کند. این نقص‌های هندسی به عنوان متمرکزکننده‌های تنش عمل می‌کنند که در آنها احتمال شروع شکست بیشتر است. علاوه بر این، تشدید تنش در اطراف نقص‌های هندسی راندمان انتقال بار در سراسر ساختار را کاهش می‌دهد که کاهش مقاومت نانوصفحات را به همراه دارد [۴۳].

۴-۵- تاثیر ترک منشعب شده از نقص هندسی بر

رفتار شکست ساختارهای دو بعدی

در این بخش، اثر ترک منشعب شده از نقص هندسی بیضوی بر خواص مکانیکی مدول یانگ، تنش شکست، چقرمگی و انرژی شکست نانوساختارهای سیلیکون ژرمانیوم بررسی شد. طول‌های ترک 10° ، 20° و 30° آنگستروم برای نمونه‌ی A2 مورد مطالعه قرار گرفت. شکل ۸ تصویر شماتیک حضور نقص هندسی به همراه ترک منشعب شده از آن را بر ساختار مورد مطالعه نشان می‌دهد. نماد L بیانگر طول ترک منشعب شده می‌باشد.



شکل ۱۰- تغییرات (الف) مدول یانگ، (ب) تنش شکست، (ج) چقرمگی شکست، (د) انرژی شکست برای ساختار با نقص هندسی و ترک منشعب شده.

با توجه به مکانیک شکست الاستیک خطی، چقرمگی شکست برای ترک منشعب شده از نقص بیضوی را می‌توان به کمک معادله‌ی (۴) بدست آورد:

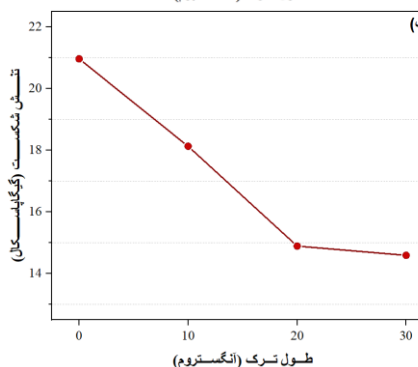
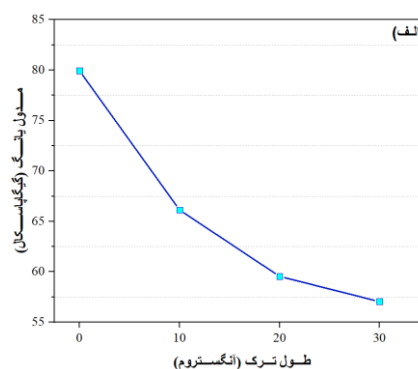
$$K_{IC} = K_t \sigma \sqrt{\pi \Delta a_F}$$

$$K_t = 2 \left(\frac{a_N}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}}$$

(۴)

که در آن σ تنش شکست، Δa_F طول ترک منشعب شده از نوک بیضی، a_N شعاع بزرگ بیضی و ρ شعاع انحنای نوک بیضی است. تنش شکست به عنوان حداکثر تنش بر روی منحنی‌های تنش-کرنش، بلافاصله قبل از افت شدید تنش مرتبط با رشد ناپایدار ترک مورد استفاده قرار می‌گیرد. این تنش، بیشینه‌ی مقدار تنش قابل تحمل در نانوصفحات سیلیکون ژرمانیوم می‌باشد. همچنین، Δa_F بیانگر طول ترک موثر اندازه‌گیری شده از نوک نقص بیضی، پس از تعادل

همان طور که در شکل ۱۰ نشان داده شده است، مدول یانگ و تنش شکست با افزایش طول ترک منشعب شده از نقص هندسی بیضوی کاهش یافت. نمودار نتایج به وضوح نشان می‌دهد که هم مدول یانگ و هم تنش شکست با افزایش طول ترک کاهش می‌یابد. مقادیر مدول یانگ از $79/93$ گیگاپاسکال برای ساختار بدون نقص به $66/13$ ، $59/54$ و $57/04$ گیگاپاسکال کاهش یافت که به ترتیب در معرض طول‌های ترک 10 ، 20 و 30 آنگستروم قرار گرفتند (معادل $17/26$ ، $25/51$ و $28/63$ درصد کاهش در مقابل ساختار بدون نقص). رفتار مشابهی برای خاصیت مکانیکی تنش شکست مشاهده شد. به طوری که مقادیر این خاصیت مکانیکی نسبت به ساختار بدون ترک ($20/97$ گیگاپاسکال) به ترتیب $13/54$ ، $28/99$ و $30/42$ درصد کاهش یافت. بزرگ شدن طول ترک باعث حذف اتم‌های بیشتری در ساختار می‌شود که این امر سبب افزایش فواصل بین اتمی و در نتیجه، کاهش مقاومت مکانیکی ساختار می‌شود [۴۴]. روند مشابهی توسط زاهدی و همکاران گزارش شده است که در آن، افزایش طول ترک به عنوان یک عامل اثرگذار بر خواص مکانیکی ساختار کاربید بور معرفی شده است [۴۵]. در تحقیق دیگری، تنش شکست ساختار کاربید بور با افزایش طول ترک کاهش یافت [۴۶].



دارند و بنابراین، سرعت آزاد شدن انرژی بالاتری دارند. این افزایش سرعت آزادسازی انرژی منجر به افزایش چقرمگی شکست می‌شود، زیرا مقاومت ماده به رشد ترک کاهش می‌یابد. چقرمگی شکست بالاتر رشد ترک را ساده‌تر می‌کند و باعث کاهش خواص مکانیکی می‌شود. این رابطه برای درک مکانیک شکست نانوصفحات و پیش‌بینی رفتار آن‌ها تحت شرایط بارگذاری مختلف ضروری است [۴۷-۴۹].

۴-۶- بهینه‌سازی خواص مکانیکی

برای تعیین خواص مکانیکی بهینه‌ی نانوصفحات سیلیکون ژرمانیوم، از الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذرات به دلیل کارایی آن در هدایت فضاهای حل پیچیده و چند بعدی، استفاده شد. الگوریتم ازدحام ذرات به عنوان یک روش هوشمند و اکتشافی برای حل مسائل بهینه‌سازی در علوم مهندسی استفاده می‌شود که یک روش مقرون به صرفه نیز می‌باشد. این روش، یک روش اکتشافی مبتنی بر جمعیت است که به طور گسترده در بهینه‌سازی مهندسی مورد استفاده قرار می‌گیرد، که در آن، هر ذره یک راه حل کاندید را نشان می‌دهد و به طور تکراری موقعیت خود را بر اساس بهترین حالت شناخته شده‌ی خود و بهترین راه‌حل شناسایی شده توسط گروه به روزرسانی می‌کند. از طریق این مکانیسم جستجوی مشارکتی، الگوریتم به طور موثر به سمت بهینه‌ی سراسری همگرا می‌شود و در عین حال، مقرون به صرفه بودن محاسبات را حفظ می‌کند. در این مطالعه، الگوریتم ازدحام ذرات به طور خاص سودمند بود، زیرا از نیاز به اطلاعات گرادیان جلوگیری می‌کند و حتی زمانی که چشم‌انداز هدف غیرخطی یا نامنظم است، به طور قابل اعتمادی عمل می‌کند. رفتار جمعی ازدحام، شناسایی سریع راه‌حلهایی با کیفیت بالا را ممکن می‌سازد و این روش را برای بهینه‌سازی پاسخ‌های مکانیکی مشتق شده از شبیه‌سازی های دینامیک مولکولی بسیار مناسب می‌کند. این الگوریتم مجموعه‌ای از ذرات را شبیه‌سازی می‌کند که هر کدام یک راه حل بالقوه را نشان می‌دهد. هر ذره موقعیت خود را بر اساس موقعیت شناخته شده‌ی خود و بهترین موقعیت شناخته شده که توسط گروه کشف می‌شود، با استفاده از به روزرسانی اطلاعات اولیه تنظیم می‌کند. به روزرسانی سرعت توسط معادله‌ی (۶) کنترل می‌شود:

حرارتی و قبل از بارگذاری مکانیکی است. از آنجایی که رشد ترک قبل از شکست در شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی مواد شکننده دو بعدی رخ نمی‌دهد، طول ترک متعادل به عنوان طول مشخصه در معادله‌ی (۴) استفاده شده است. نتایج بدست آمده برای انرژی شکست نیز از معادله‌ی (۵) استخراج شد:

$$G_{IC} = \frac{K_{IC}^2}{E} \quad (5)$$

شکل ۱۰ نتایج بدست آمده از روابط بالا را برای چقرمگی شکست و انرژی شکست نشان می‌دهد. رابطه‌ی مستقیم این دو خاصیت مکانیکی با افزایش طول ترک نشان می‌دهد که چقرمگی شکست و انرژی شکست با افزایش طول ترک افزایش می‌یابند. از منظر فیزیکی، ترک‌های بزرگتر دارای سطوح سطح بیشتری هستند که در معرض تنش قرار دارند و آنها را برای رشد بیشتر مستعد می‌سازد. افزایش طول ترک، تمرکز تنش را در نوک ترک تقویت می‌کند و رشد ترک را در مواد آسان‌تر می‌سازد. مقدار انرژی شکست از $2/81 \text{ MPa.m}^{0.5}$ برای طول ترک 10 آنگستروم به $3/25 \text{ MPa.m}^{0.5}$ و $3/91$ به ترتیب برای طول‌های ترک 20 و 30 آنگستروم افزایش یافت که $15/65$ و $39/14$ درصد افزایش را نشان می‌دهد. از سویی دیگر، این روند افزایشی برای انرژی شکست نیز قابل مشاهده بود. به طوری که انرژی شکست برای ترک منشعب شده از نقص هندسی بیضوی تقریباً 125 درصد (طول ترک 30 آنگستروم نسبت به 10 آنگستروم) افزایش یافت. این مقادیر به ترتیب J/m^2 $0/119$ ، $0/177$ و $0/268$ برای طول‌های ترک 10 ، 20 و 30 آنگستروم گزارش شد. با افزایش طول ترک در نانوصفحات، غلظت تنش در نوک ترک بیشتر می‌شود. به این دلیل است که ترک‌های بزرگ‌تر یک گرادیان تنش بزرگ‌تر ایجاد می‌کنند که منجر به تنش‌های موضعی بالاتر در نوک ترک می‌شود. چقرمگی شکست این غلظت تنش را پیش‌بینی می‌کند و با افزایش طول ترک، شدت چقرمگی شکست نیز به دلیل افزایش غلظت تنش افزایش می‌یابد. این رابطه در درک رفتار شکست نانوصفحات و پیش‌بینی شکست آن‌ها تحت بارگذاری مکانیکی بسیار مهم است. همچنین، با افزایش طول ترک در نانوساختارهای دو بعدی، نرخ رهایش انرژی نیز افزایش می‌یابد. نرخ رهایش انرژی معیاری از انرژی موجود برای رشد ترک در واحد سطح ترک است. ترک‌های طولانی‌تر سطح بزرگ‌تری

$$\vec{v}_i(t+1) = w\vec{v}_i(t) + c_1 r_1 (\vec{p}_i - \vec{x}_i(t)) + c_2 r_2 (\vec{g} - \vec{x}_i(t)) \quad (6)$$

که در آن، W عامل کنترل حرکت است که تاثیر سرعت قبلی را کنترل می‌کند، C_1 و C_2 ثابت‌های شتاب هستند که نرخ یادگیری مولفه‌های شناختی و اجتماعی را تعیین می‌کند، r_1 و r_2 اعداد تصادفی هستند که به طور یکنواخت در (۰ و ۱) توزیع می‌شوند. همچنین، بازایی موقعیت با استفاده از معادله-

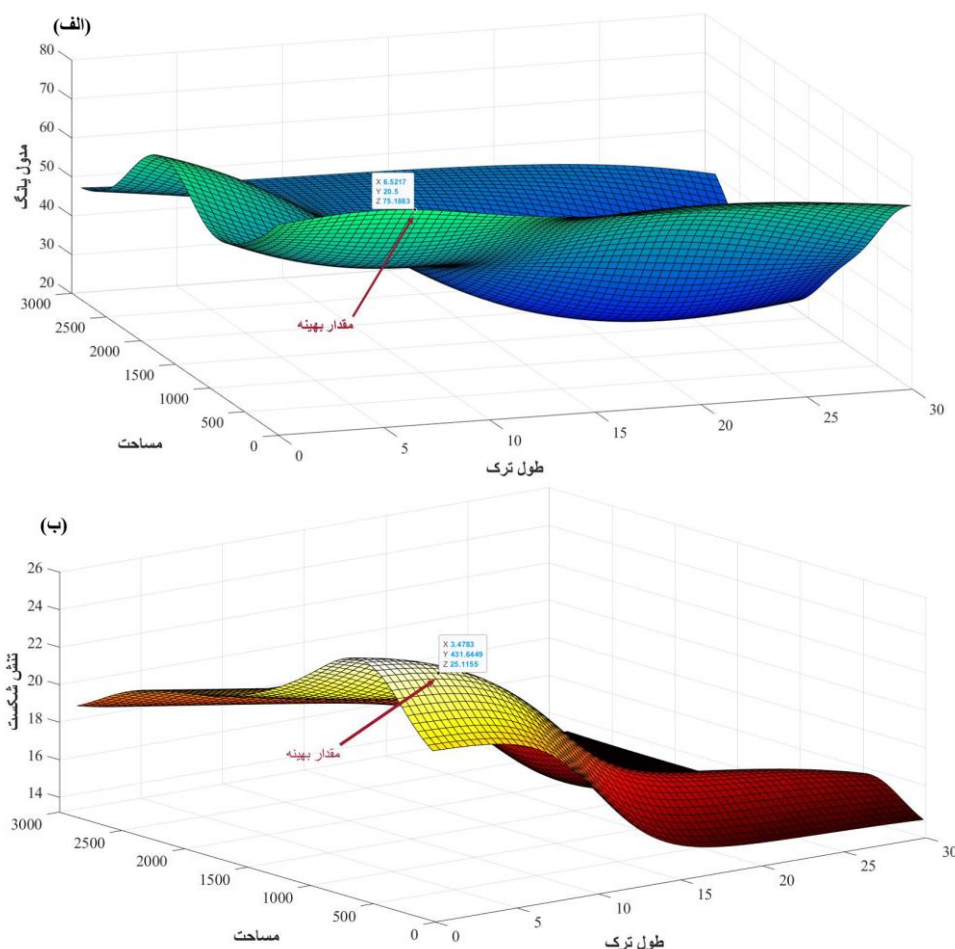
ی (۷) انجام می‌پذیرد که سرعت $\vec{v}_i$ و X_i واحدهای ثابتی دارند که اعتبار ابعادی معادلات را تضمین می‌نماید:

$$\vec{x}_i(t+1) = \vec{x}_i(t) + \vec{v}_i(t+1) \quad (7)$$

پارامترهای طول ترک و مساحت نقص هندسی به عنوان متغیرهای ورودی برای ارزیابی و بهینه‌سازی خواص مکانیکی نانوصفحات سیلیکون ژرمانیوم استفاده شدند. به طور خاص، از این ورودی‌ها برای بررسی مقادیر بهینه‌ی مدول یانگ و تنش شکست استفاده شد که این امکان را فراهم می‌سازد تا ویژگی‌های دقیق‌تر پاسخ ماده به عیوب ساختاری را مشخص کند. شکل ۱۱ نشان دهنده‌ی نمودار سه بعدی تغییرات مدول یانگ و تنش شکست بر اساس دو متغیر مساحت نقص هندسی و طول ترک منشعب شده از آن می‌باشد. مقدار بهینه‌ی گزارش شده برای مدول یانگ با اندازه‌ی ۲۰/۵ آنگستروم به عنوان مساحت نقص هندسی و طول ترک منشعب شده به اندازه‌ی ۶/۵۲ آنگستروم، برابر با ۷۵/۱۸ گیگاپاسکال می‌باشد. از سویی دیگر، مقدار بهینه‌ی خاصیت مکانیکی تنش شکست برابر با ۲۵/۱۱ گیگاپاسکال متناظر با طول ترک ۳/۴۷ آنگستروم و مساحت نقص هندسی ۴۳۱/۶۴ آنگستروم گزارش شد. شایان ذکر است از آنجایی که نقص‌ها ذاتاً عملکرد مکانیکی را کاهش می‌دهند، مقادیر بهینه‌ی گزارش شده نشان دهنده‌ی هندسه‌ی نقص با کمترین آسیب هستند، نه خواصی که از ساختار اولیه فراتر روند. مدلسازی رسانایی حرارتی نانوسیال‌ها به روش الگوریتم ازدحام ذرات توسط راعی [۵۰] صورت پذیرفت. نتایج این مطالعه نشان داد که این روش می‌تواند رسانایی حرارت نانوسیال‌ها را به طور دقیق پیش‌بینی نماید. الگوریتم ازدحام ذرات همبستگی قوی با داده‌های شبیه‌سازی ارایه داد و فرمولاسیون نانوسیال پیش‌بینی شده نشان از عملکرد مناسب

این روش بهینه‌سازی داشت. کومار و همکاران [۵۱] به ساخت آزمایشگاهی الیاف کامپوزیت هیبریدی پرداختند. آنها پرکننده‌های الیاف شیشه و اپوکسی را به عنوان پارامترهای ورودی به الگوریتم ازدحام ذرات انتخاب کردند. نتایج آنها انطباق قابل قبولی را برای استحکام کششی و کرنش ارایه کرد. همچنین، دادرسی و همکاران [۵۲] به کمک این روش به مدلسازی خواص چقرمگی شکست و انرژی شکست پرداختند. محتوای نانوذرات سیلیکا به عنوان المان ورودی مدلسازی برگزیده شد. نتایج آنها نشان داد که الگوریتم ازدحام ذرات دارای کمترین میانگین خطا در ارایه‌ی نتایج می‌باشد.

الگوریتم ازدحام ذرات برای توانایی اثبات شده‌ی خود در کنترل وظایف بهینه‌سازی غیرخطی و چند بعدی، به ویژه در سیستم‌های پیچیده‌ی مواد مانند ساختارهای سیلیکون ژرمانیوم انتخاب شد. این الگوریتم به عنوان یک روند قابل انعطاف در بررسی فضا‌های جستجوی نامنظم شکل داده شده توسط نقص‌های هندسی مانند طول ترک و نقص هندسی، بدون محدودیت‌های روش‌های مبتنی بر گرادیان، برتری دارد. کاربرد الگوریتم ازدحام ذرات در این تحقیق با استفاده‌ی موفقیت آمیز از آن در حوزه‌های مختلف علم مواد، از جمله پیش‌بینی مقادیر بهینه‌ی خواص مکانیکی، پشتیبانی می‌شود. توانایی الگوریتم در هدایت فضا‌های جستجوی پیچیده و با ابعاد بالا بدون نیاز به اطلاعات گرادیان، آن را به ویژه برای مدلسازی تغییرات ناشی از عیب در خواص مکانیکی مناسب می‌سازد. در تحلیل صورت گرفته در این مطالعه، معرفی طول ترک و مساحت نقص هندسی به عنوان متغیرهای ورودی به ما اجازه داد تا پاسخ‌های مکانیکی بهینه را شناسایی کنیم. حساسیت مشاهده شده‌ی مدول یانگ و تنش شکست به طول ترک و نقص هندسی با تحقیقات قبلی در مکانیک نقص سازگار است که در آن، پارامترهای هندسی به شدت بر توزیع تنش و پاسخ ماده تاثیر می‌گذارند [۵۳-۵۵]. این یافته‌ها حاکی از وجود رابطه غیرخطی بین هندسه‌ی نقص‌ها و عملکرد مکانیکی نانوساختار دو بعدی سیلیکون ژرمانیوم دارد که موجب تقویت اطلاعات الگوریتم ازدحام ذرات در شناسایی ریزساختاری حاکم بر سختی و خاصیت ارتجاعی شکست می‌باشد.



شکل ۱۱- نمودارهای سه بعدی: الف) مدول یانگ، ب) تنش شکست به ازای تغییرات مساحت نقص هندسی و اندازه‌ی طول ترک.

۵- جمع‌بندی

در مقاله‌ی حاضر، خواص مکانیکی و رفتار شکست نانورق‌های سیلیکون ژرمانیوم به عنوان تابعی از دما و نقص‌های هندسی بررسی شدند. با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ترک‌های منشعب شده از سوراخ بیضوی مدل‌سازی شد. با اعمال پتانسیل مناسب و همچنین شرایط مرزی، همه‌ی نمونه‌ها تحت بارگذاری کششی تک محوری قرار گرفتند تا خواص مکانیکی آنها آشکار شود. در ابتدا، تغییرات خواص مکانیکی مدول یانگ و تنش شکست نانوصفحات بدون نقص با دو چیدمان متفاوت در دماهای مختلف (۱۰۰ تا ۹۰۰ کلوین) بررسی شد. مشخص شد که خواص مکانیکی ساختارهای سیلیکون ژرمانیوم با افزایش دما کاهش می‌یابد. به طور خاص،

مدول یانگ و تنش شکست برای چیدمان ۱ در جهت آرمچیر از ۱۱۴/۷۶ و ۵۳/۴۵ گیگاپاسکال در دمای ۱۰۰ کلوین به ۱۰۲/۴۴ و ۲۳/۳۹ گیگاپاسکال در دمای ۹۰۰ کلوین، به ترتیب ۱۰/۷۳ و ۵۶/۲۳ درصد، کاهش یافت. افزایش شعاع سوراخ بیضوی سبب کاهش خواص مکانیکی شد. این کاهش تا ۳۷ درصد رسید و نشان داد که افزایش شعاع در این نقص هندسی یک عامل اثرگذار بر خواص مکانیکی می‌باشد. همچنین، بررسی ترک منشعب شده از سوراخ‌ها نشان داد که افزایش طول ترک را می‌توان به عنوان المان موثر معرفی کرد. برای طول ترک ۱۰ آنگستروم، مدول یانگ و تنش شکست نانوصفحات سیلیکون ژرمانیوم به ترتیب ۶۶/۱۳ و ۱۳/۵۴ گیگاپاسکال گزارش شد. از سویی دیگر، تغییرات چقرمگی

- [8] Qin C, Su Y, Yang J, Wang X, Chen B, Ouyang Q, Zhang D (2021) Microstructural characteristics and mechanical behavior of SiC (CNT)/Al multiphase interfacial micro zones via molecular dynamics simulations. *Comp Part B* 2(13): 108996.
- [9] Liu Y, Pan Y, Lin L, Qi X, Yao J (2021) Mechanical properties and thickness-determined fracture mode of hexagonal boron nitride nanosheets under nanoindentation simulations. *Comput Mater Sci* 11(01): 110047.
- [10] Lee S, Esfandiari A, Rajabpour A (2021) Mechanical behaviors of titanium nitride and carbide MXenes: A molecular dynamics study. *Appl Surf Sci* 11(09): 150633.
- [۱۱] نوخندان م، دادرسی ع، فروهنده ف، پروانه و (۲۰۲۵) تحلیل محاسباتی پیشرفته در مورد رفتار پلی کریستال نیتريد بور: رویکرد دینامیک مولکولی و سطح پاسخ. مهندسی مکانیک مدرس ۲۵(۰۴): ۱۹۱-۲۰۲.
- [12] Ahangari M, Fereidoon A, Hamed A (2022) Interlayer interaction and mechanical properties in multi-layer graphene, Boron-Nitride, Aluminum-Nitride and Gallium-Nitride graphene-like structure: A quantum mechanical DFT study. *Superlat Microstruct* 27(01): 117845.
- [13] Zhao S, Xue J (2013) Mechanical properties of hybrid graphene and hexagonal boron nitride sheets as revealed by molecular dynamic simulations. *J Phys D: Appl Phys* 15(11): 135303.
- [۱۴] بینقی م، دادرسی ع، تقی‌زاده م (۲۰۲۵) بررسی اثر نقص هندسی و حذف اتم در ساختار ترکیبی گرافن- نیتريد کربن به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی. علوم کاربردی و محاسباتی در مکانیک ۳۷(۰۶): ۱۱۵-۱۳۲.
- [15] Hamed A, Ahangari M, Salmankhani A, Fataliyan M (2025) Density functional theory study of adsorption properties of non-carbon, carbon and functionalized graphene surfaces towards the zinc and lead atoms. *Phys E: Low-dimens Syst Nanostruct* 21(01): 275-285.
- [16] Cong Z, Lee S (2022) Study of mechanical behavior of BNNT-reinforced aluminum composites using molecular dynamics simulations. *Comp Struct* 11(09): 80-86.
- [17] Singh J, Kumar R (2023) Effect of the interface on mechanical and fracture properties of lateral graphene/hexagonal boron-nitride heterostructure: A molecular dynamics study. *Diamond Related Mater* 21(02): 110001.
- [18] Zhang W, Li S, Yang Q, Lin J (2024) Molecular dynamics investigation of crack propagation in monolayer MoS₂ with vacancy defects. *Comput Mater Sci* 19(07): 137-145.
- [19] Rahman P, Moon J, Chidambaram D (2024) Fracture behavior of silicene and germanene

شکست و انرژی شکست نانوساختارهای مورد بررسی به عنوان تابعی از طول ترک مورد بررسی قرار گرفت. رفتار افزایشی مشاهده شده در این خواص مکانیکی با افزایش طول ترک را می‌توان به بیشتر شدن طول پیوند سیلیکون ژرمانیوم نسبت داد که مقاومت نانوصفحه را در برابر رشد ترک تضعیف می‌کند. در نهایت، برای شناسایی عملکرد مکانیکی بهینه‌ی نانوصفحات سیلیکون ژرمانیوم از الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذرات استفاده شد که شامل طول ترک و مساحت نقص هندسی به عنوان پارامترهای ورودی بود و مقدار بهینه‌ی مدول ینگ برابر با ۷۵/۱۸ گیگاپاسکال با طول ترک ۶/۵۲ آنگستروم و ۲۰/۵ آنگستروم به عنوان مساحت نقص هندسی معرفی شد. اعتقاد بر این است که این رویکرد را می‌توان به سایر نانوصفحات شش ضلعی به عنوان کارت شناسایی منحصر به فرد شکست در نانوساختارهای دوبعدی تعمیم داد.

مراجع

- [1] Ajori S, Eftekhari A (2022) Mechanical properties and fracture analysis of defective penta-graphene under temperature variation: Insight from molecular dynamics. *Diamond & Related Mater* 12(9): 108956.
- [۲] بینقی م، رهنما س، دادرسی ع (۲۰۲۴) تحلیل رفتار شکست پلی کریستال نیتريد کربن به روش‌های الگوریتم ژنتیک و دینامیک مولکولی. علوم کاربردی و محاسباتی در دینامیک ۳۵(۱۱): ۴۶-۲۹.
- [3] Sadeghzadeh S, Ghosvandi M, Mahmoudi J (2023) Influence of Stone-Wales defects on the mechanical properties of graphene-like polyaniline (PANI) C3N nanosheets. *Diamond & Related Mater* 11(01): 11-18.
- [4] Peng Q, Huang Z, Zhang Y, Hu Z (2024) Effect of Strain Rate, Temperature, Vacancy, and Microcracks on Mechanical Properties of 8-16-4 Graphyne. *Nanomater* 24(11): 556.
- [5] Shishir M, Raja M, Tabarraei A (2021) Investigation of fracture and mechanical properties of monolayer C3N using molecular dynamic simulations. *Mech Mater* 11(03): 103895.
- [6] Sadeghzadeh S (2023) Effects of vacancies and divacancies on the failure of C3N nanosheets. *Diamond & Related Mater* 12(01): 257-265.
- [7] Singh J, Kumar R (2023) Effect of the interface on mechanical and fracture properties of lateral graphene/hexagonal boron-nitride heterostructure: A molecular dynamics study. *Diamond & Related Mater* 21(11): 110001.

- graphene nano-ribbons. *Comput Mater Sci* 21(08): 142-180.
- [33] Ahangari M, Hamed A, Dadrasi A, Mallahi A (2022) Effect of various defects on mechanical and electronic properties of zinc oxide graphene-like structure: A DFT study. *Vacuum* 11(02): 26-34.
- [34] Jam A, Jam N, Izadifar M, Rabczuk T (2022) Molecular dynamics study on the crack propagation in carbon doped polycrystalline boron-nitride nanosheets. *Comput Mater Sci* 13(07): 111066.
- [35] Molaei F, Dehghani M, Salmankhani A, Fooladpanjeh S, Sajadi S, Safa M, Abida O, Habibzdeh S, Mashhadzadeh A, Saeb M (2021) Applying molecular dynamics simulation to take the fracture fingerprint of polycrystalline SiC nanosheets. *Comput Mater Sci* 12(06): 110770.
- [36] Dadrasi A, Fooladpanjeh S, Eshkalak K, Saeb M (2024) Crack pathway analysis in graphene-like BC3 nanosheets: Towards a deeper understanding. *J Mol Graph Model* 21(02): 107980.
- [۳۷] قادری ه (۲۰۱۵) مدل مکانیک مولکولی ساختاری اصلاح شده و تعمیم یافته برای تعیین خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی. نشریه علمی مکانیک سازه‌ها و شاره‌ها ۰۴(۰۴): ۸۵-۷۵.
- بررسی اثر نقص هندسی و حذف اتم در ساختار ترکیبی گرافن-نیتريد کربن به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی. علوم کاربردی و محاسباتی در مکانیک ۳۷(۰۶): ۱۱۵-۱۳۲.
- [38] Sadeghzadeh S, Badrinezhad L, Eshkalak K (2024) Mechanical properties of C3N-BN hybrid nanosheets: Insights from molecular dynamics simulations. *Diamond & Related Mater* 1(06): 111323.
- [39] Nguyen D, Le M, Nguyen V, Bui T (2020) Effects of various defects on the mechanical properties of black phosphorene. *Superlat Microstruct* 11(05): 11-19.
- [40] Shirazi A, Abadi R, Alajlan N, Rabczuk T (2022) Mechanical responses of pristine and defective C3N nanosheets studied by molecular dynamics simulations. *Comput Mater Sci* 22(01): 316-321.
- [41] Mayelifartash A, Abdol M, Sadeghzadeh S (2023) Mechanical properties of intrinsic and defective hybrid polyaniline (C3N) -BC3 nanosheets in the armchair and zigzag configurations: a molecular dynamics study. *Appl Phys A* 1(12): 125043.
- [42] Eshkalak K, Sadeghzadeh S, Jalaly M (2021) Mechanical properties of defective hybrid graphene-boron nitride nanosheets: A molecular dynamics study. *Comput Mater Sci* 11(08): 170-181.
- [43] Ghasemi H, Rutledge J, Yazdani H (2020) Mechanical properties of defective cyanoethyl (2D polyaniline – C3N): A comparative molecular dynamics study versus graphene and hexagonal heterostructures under tensile loading: MD simulation. *App Surf Sci* 651(12): 132331.
- [20] Jam A, Jam N, Izadifar M, Rabczuk T (2022) Molecular dynamics study on the crack propagation in carbon doped polycrystalline boron-nitride nanosheets. *Comput Mater Sci* 25(02): 111066.
- [21] Chen R, Wu L, Zhao K (2025) Crack propagation mechanisms in defective monolayer h- BN: Insights from molecular dynamics simulations. *Compout Mater Sci* 235(11): 265-272.
- [22] Molaei F, Dehghani M, Salmankhani A, Fooladpanjeh S, Sajadi S, Safa M, Abida O, Habibzdeh S, Mashhadzadeh S, Saeb M (2021) Applying molecular dynamics simulation to take the fracture fingerprint of polycrystalline SiC nanosheets. *Comput Mater Sci* 15(03): 110770.
- [23] Plimpton S (1993) Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *J Comput Phys* 11(02): 12-19.
- [24] Tersoff J (1988) Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems. *Phys Rev B* 21(05): 21-30.
- [25] Ni Z, Bu H, Zou M, Yi H, Chen Y (2010) Anisotropic mechanical properties of graphene sheets from molecular dynamics. *Phys B* 21(01): 1301-1306.
- [26] Dehghani M, Safa M, Yousefi F, Karami Z, Hamed A, Saeb M (2024) Fracture mechanics of SiGe-nanosheets using molecular dynamics study: mechanics of monocrystalline versus polycrystalline structure. *Eng Fract Mech* 11(05): 113428.
- [27] Dadrasi A, Fooladpanjeh S, Albooyeh A, Salmankhani A, Saeb M (2024) A theoretical insight into the fracture behavior of the edge-cracked polycrystalline BC3 nanosheets. *Comput Mater Sci* 11(02): 110345.
- [28] Shirazi A (2024) Molecular dynamics investigation of mechanical properties of single-layer phagraphene. *Eng Struct Civil Eng* 11(07): 124985.
- [۲۹] آل‌بویه ع، دادرسی ع، رضوی کیا م (۲۰۲۲) بررسی تاثیر عیوب هندسی و تغییرات دما بر رفتار شکست ساختار مونوکریستال کاربرد بور به روش دینامیک مولکولی. نشریه علوم کاربردی و محاسباتی در مکانیک ۳۴(۰۱): ۳۷-۴۸.
- [30] Bagheri B, Zarghami M, Zarrintaj P, Saeb M (2021) Fracture fingerprint of polycrystalline C3N nanosheets: Theoretical basis. *J Mol Graph Model* 1(12): 107899.
- [31] Nguyen D, Le M, Nguyen V, Bui T (2023) Effects of various defects on the mechanical properties of black phosphorene. *Superlat and Microstruct* 21(06): 11-19.
- [32] Fu Y, Ragab T, Basaran C (2025) The effect of Stone-Wales defects on the mechanical behavior of

- [50] Raei M (2023) Modeling and Optimization of Thermal Conductivity of Stabilized γ -Al₂O₃/Water Nanofluid Using Response Surface Methodology (RSM). *J Chem Petrol Eng* 7(13): 21-27.
- [51] Kumar A, Kumar J, Juneja D (2022) Optimization of process parameters and mechanical properties of hybrid fibre reinforced by epoxy resin by response surface methodology (RSM). *Int J Res Eng Innovat* 11(15): 2122-2128.
- [52] Dadrasi A, Fooladpanjeh S, Alavi S (2023) Interactions between HA/GO/epoxy resin nanocomposites: optimization, modeling and mechanical performance using central composite design and genetic algorithm. *J Braz Soci Mech Sci Eng* 1(09): 41-50.
- [53] Gad A (2022) Particle Swarm Optimization Algorithm and Its Applications: A Systematic Review. *Arch Comput Meth Eng* 21(09): 2531–2561.
- [54] Dadrasi A, Farzi A, Shariati M, Fooladpanjeh S, Parvaneh V (2020) Experimental study and optimization of fracture properties of epoxy-based nano-composites: Effect of using nano-silica by GEP, RSM, DTM and PSO. *Eng Fract Mech* 16(03): 107047.
- [55] Lenartowicz A, Przychodzki M, Guminiak M, Garbowski T (2021) Optimal Placement of Viscoelastic Vibration Dampers for Kirchhoff Plates Based on PSO Method. *Mater* 1(12): 661621.
- boron nitride. *Phys E: Low-dimens Syst Nanostruct* 9(11): 114085.
- [44] Zahedi R, Shirazi A, Alimouri P, Alajlan T, Rabczuk T (2021) Mechanical properties of graphene-like BC₃; a molecular dynamics study. *Comput Mater Sci* 11(04): 1-10.
- [45] Shirazi A, Abadi R, Izadifar M, Alajlan N, Rabczuk T (2022) Mechanical responses of pristine and defective C₃N nanosheets studied by molecular dynamics simulations. *Comput Mater Sci* 21(05): 316-321.
- [۴۶] دادرسی ع (۲۰۲۱) مطالعه رفتار تنش-کرنش ساختار پلی کریستال کاربید بور دارای ترک، در حضور متوقف کننده ترک و در شرایط دمایی مختلف، به روش دینامیک مولکولی. نشریه علمی مکانیک سازه‌ها و شاره‌ها ۱۱(۵): ۹۵-۱۰۵.
- [47] Bagheri B, Zarghami M, Salmankhani A, Zarrintaj P, Saeb M (2020) Correlation between surface topological defects and fracture mechanism of γ -graphyne-like boron nitride nanosheets. *Comput Mater Sci* 17(03): 118748.
- [48] L Fan, Yao W (2020) Effects of vacancy defects on the mechanical properties of graphene/hexagonal BN superlattice nanoribbons. *New Carbon Mater* 21(09): 165-175.
- [49] Dadrasi A, Albooyeh A, Fooladpanjeh S, Shad M, Beynaghi M (2023) RSM and ANN modeling of the energy absorption behavior of steel thin-walled columns: a multi-objective optimization using the genetic algorithm. *J Braz Soci Mech Sci Eng* 9(11): 44-51.