سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:
بررسی رفتار کششی نانوصفحه فسفرین بدون عیب و نقص دار به کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی

محل انتشار:
دومین کنفرانس مکانیک،مهندسی برق و کامپیوتر (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

نویسنده:
هومن اسفندیاری - *دانشجوی دکتری مهندسی مکانیک دانشگاه یاسوج*

خلاصه مقاله:
در سال های اخیر نانوصفحات فسفرین به دلیل داشتن خواص فیزیکی مناسب، بسیار مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته اند. مطالعه بر روی رفتار کششی و مقاومت این نانو ساختار به عنوان یک ماده جدید از اهمیت بالایی برخوردار است. بنابراین در این پژوهش، رفتار کششی نانوصفحات فسفرین در دو جهت زیگزاگ و آرمچیر به روش دینامیک مولکولی شبیه سازی شده اند. جهت انجام این شبیه سازی از تابع پتانسیل استیلین گر وبر اصلاح شده استفاده شده است. پس از تائید نتایج، به بررسی اثرات کایرالیتی بر روی مقاومت کششی نانوصفحه های فسفرین پرداخته شده است. نتایج نشان می دهند که نانوصفحه فسفرین در جهت زیگزاگ مقاومت کششی بالاتری نسبت به جهت آرمچیر دارد. از آنجایی که اتم های ماده فسفرین دارای چین و چروک ذاتی هستند، شکل شکست این ماده با ماده کربن بسیار متفاوت است. در گام بعد به عنوان اولین تحقیق در این زمینه، اثرات حفره تک اتمی بر روی رفتار کششی نانوصفحه فسفرین مورد مطالعه قرار گرفته است. بر اساس نتایج مشاهده می شود که با عدم وجود یک اتم در ساختار نانوصفحه فسفرین، مقاومت کششی نهایی و کرنش نهایی به ترتیب 25 درصد و 29 درصد افت پیدامی کنند. همچنین میزان نرخ کرنش یکی از عوامل بسیار مهم و تاثیر گذار بر روی خواص مکانیکی مواد نانو می باشد که در این تحقیق به اثرات آن بر روی رفتار کششی نانوصفحه فسفرین پرداخته شده است.مشاهدات نشان می دهند که با افزایش نرخ کرنش، تنش نهایی افزایش و کرنش نهایی کاهش پیدا می کنند.

کلمات کلیدی:
نانوصفحه فسفرین، دینامیک مولکولی، رفتار کششی، اثرات نقص، اثرات نرخ کرنش.

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/1114245