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

عنوان مقاله:
بررسی رفتار کششی نانولوله فسفرین آرمچیر به کمک شبیه سازی دینامیک مولکولی

محل انتشار:
دومین کنفرانس بین المللی مطالعات میان رشته ای نانو فناوری (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 13

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

خلاصه مقاله:
در سال های اخیر نانولوله های فسفرین به دلیل داشتن خواص مکانیکی، حرارتی و الکترونیمناسب، بسیار مورد توجه محققان قرار گرفته اند. مطالعه بر روی رفتار کششی و مقاومت این نانوساختار به عنوان یک ماده جدید از اهمیت بالایی برخوردار است. بنابراین در این تحقیق، رفتارکششی نانولوله های فسفرین در جهت آرمچیر به روش دینامیک مولکولی، شبیه سازی شده اند.جهت انجام این شبیه سازی از تابع پتانسیل استیلینگر- وبر اصلاح شده استفاده شده است. در این پژوهش برای نخستین بار جهت تائید شبیه سازی روش دینامیک مولکولی با روش دقیق DFTB مقایسه شده است. پس از تائید نتایج، به بررسی اثرات قطر بر روی مقاومت کششی نانولوله هایفسفرین آرمچیر پرداخته ایم. نتایج نشان می دهند که با بیشتر شدن اندازه قطر، مقاومت کششینانولوله ها افزایش پیدا می کنند. از آنجایی که اتم های ماده فسفرین دارای چروک ذاتی هستند،شکل شکست این ماده با ماده کربن بسیار متفاوت است. در گام بعد به عنوان اولین تحقیق در اینزمینه، اثرات حفره تک اتمی بر روی رفتار کششی نانولوله فسفرین آرمچیر مورد مطالعه قرار گرفتهاست. بر اساس نتایج مشاهده می شود که با عدم وجود یک اتم در ساختار نانولوله فسفرین، مقاومت کششی نهایی و کرنش نهایی به ترتیب 13 درصد و 8/5 درصد افت پیدا می کنند. همچنین میزان نرخ کرنش یکی از عوامل بسیار مهم و تاثیر گذار بر روی خواص مکانیکی مواد نانو می باشد که در اینتحقیق به اثرات آن بر روی رفتار کششی نانولوله فسفرین آرمچیر پرداخته شده است. مشاهداتنشان می دهند که با افزایش نرخ کرنش، تنش نهایی افزایش و کرنش نهایی کاهش پیدا می کنند.

کلمات کلیدی:
نانولوله فسفرین آرمچیر، دینامیک مولکولی، مقاومت کششی، اثرات نقص، اثرات نرخ کرنش

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/1115799