



Semnan University



Research Article

# Molecular Dynamics Investigation of the Mechanical Properties of Germanium Reinforced with Iron Nanoparticles at Different Speeds

Majid Samadiyan<sup>a</sup>, Masoud Ajri<sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup> Department of Mechanical Engineering, University of Mohaghegh Ardabili, Ardabil, Iran

## PAPER INFO

### Paper history:

Received: 2023-11-25

Revised: 2024-04-16

Accepted: 2024-05-14

### Keywords:

Reinforced germanium;  
Iron nanoparticles;  
Mechanical properties;  
Molecular dynamics.

## ABSTRACT

Considering the wide application of germanium in nano devices and its high density compared to silicon and the possibility of its dislocation and diffusion in grain boundaries, improving its properties is of great importance. In this study, with the help of large-scale molecular dynamics method, improving the mechanical properties of germanium by passing spherical iron particles on it has been studied. In this simulation, the interatomic forces for germanium are defined as TERSOFF and for iron as EAM and the interactions between them are defined with the LJ potential. After balancing the system in the NPT ring and moving the iron nanoparticle at different speeds, a tensile test was performed with a strain rate of 0.01 1/ps. The results show that the van der Waals interaction between germanium and iron particles has been established. These interactions made the bonds between the atoms of germanium stronger, and the Young's modulus and ultimate stress of germanium reached 119 and 24 GPa, which were 10 and 9% better than pure germanium, respectively. Furthermore, by increasing the speed of iron nanoparticles up to the speed of 0.005 Angstroms per picosecond, the atomic attraction increases and this phenomenon causes more mechanical strength in the basic structure.

DOI: <https://doi.org/10.22075/jme.2024.32444.2568>

© 2024 Published by Semnan University Press.

This is an open access article under the CC-BY 4.0 license. (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)

\* Corresponding author.

E-mail address: [m.ajri@uma.ac.ir](mailto:m.ajri@uma.ac.ir)

### How to cite this article:

Samadiyan, M., & Ajri, M. (2024). Molecular dynamics investigation of the mechanical properties of germanium reinforced with iron nanoparticles at different speeds. *Journal of Modeling in Engineering*, 22(79), 109-119. doi: 10.22075/jme.2024.32444.2568

# بررسی دینامیک مولکولی خواص مکانیکی ژرمانیوم تقویت شده با نانوذره آهن در سرعت های مختلف

مجید صمدیان<sup>۱</sup>، مسعود اجری<sup>۱\*</sup>

اطلاعات مقاله	چکیده
دریافت مقاله: ۱۴۰۲/۰۹/۰۴	با توجه به کاربرد وسیع ژرمانیوم در دستگاه های نانو و چگالی بالای آن نسبت به سیلیکون و احتمال دررفتگی و انتشار آن در مرز دانه ها، بهبود خواص آن از اهمیت بالایی برخوردار است. در این مطالعه به کمک روش دینامیک مولکولی در مقیاس بزرگ، بهبود خواص مکانیکی ژرمانیوم با استفاده از عبور ذرات کروی شکل آهن بر روی آن مورد مطالعه قرار گرفته است. در این شبیه سازی نیروهای بین اتمی برای ژرمانیوم به صورت Tersoff و آهن به صورت EAM و اندرکنش های بین آن ها با پتانسیل LJ تعریف شده است. پس از متعادل سازی سیستم در هنگرد NPT و حرکت نانوذره آهن با سرعت های متفاوت تست کشش با نرخ کرنش 0.01 1/ps انجام شده است. نتایج نشان می دهند که برهمکنش و اندروالس بین ژرمانیوم و ذرات آهن ایجاد شده است. این برهمکنش ها باعث محکم تر شدن پیوندهای بین اتمی ژرمانیوم شده و مدول یانگ و تنش حد نهایی ژرمانیوم به ۱۱۹ و ۲۴ گیگا پاسکال رسیده که به ترتیب ۱۰ و ۹ درصد نسبت به ژرمانیوم خالص بهبود داشته است. همچنین با افزایش سرعت نانو ذرات آهن تا سرعت ۰.۰۰۵ آنگستروم بر پیکوثانیه جاذبه اتمی بیشتر شده و این پدیده باعث استحکام مکانیکی بیشتر در ساختار پایه می شود.
بازنگری مقاله: ۱۴۰۳/۰۱/۲۸	
پذیرش مقاله: ۱۴۰۳/۰۲/۲۵	
<b>واژگان کلیدی:</b> ژرمانیوم تقویت شده، نانوذره آهن، خواص مکانیکی، دینامیک مولکولی.	

DOI: <https://doi.org/10.22075/jme.2024.32444.2568>

© 2024 Published by Semnan University Press.

This is an open access article under the CC-BY 4.0 license. (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)

## ۱- مقدمه

تولید کرد. کامپوزیت ها داری وزن و مقاومت بالا در برابر خوردگی، خواص عایقی حرارتی خوب، استحکام بالا هستند [۲-۴]. کامپوزیت های نانومقیاس موضوع تحقیقات فعال در سال های اخیر بوده است. خواص مکانیکی و حرارتی نانو مواد و نانو کامپوزیت ها را می توان با روش های آزمایشگاهی و شبیه سازی دینامیک مولکولی (MD) محاسبه نمود [۵-۹]. برای مثال در مطالعه برونو فاریا در سال ۲۰۲۰ با قراردادن نانولوله کربنی در داخل فلزاتی مثل آهن و تیتانیوم و با استفاده از روش دینامیک مولکولی

بهبود خواص مکانیکی و حرارتی با هزینه کمتر دو عوامل کلیدی برای مواد مورد استفاده در صنایع است. بنابراین دانشمندان و متخصصان علم و مواد همواره در تلاش هستند تا با خواص مواد موجود را بهبود بخشند و یا مواد جدیدتری تولید کنند. کامپوزیت ها مواد جدیدی نیستند، این مواد از اتصال مکانیکی دو یا چند جزء به یکدیگر تشکیل شده اند [۱]. مهم ترین خواص مواد کامپوزیتی این است که می توان خواص آن ها را بر اساس نیاز، کنترل و

<sup>2</sup> Molecular Dynamics

\* پست الکترونیک نویسنده مسئول: m.ajri@uma.ac.ir

۱. مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه محقق اردبیلی، اردبیل، ایران

استناد به این مقاله:

صمدیان، مجید، و اجری، مسعود. (۱۴۰۳). بررسی دینامیک مولکولی خواص مکانیکی ژرمانیوم تقویت شده با نانوذره آهن در سرعت های مختلف. مدل سازی در مهندسی، ۲۲(۷۹)، ۱۰۹-۱۱۹. doi: 10.22075/jme.2024.32444.2568

مقاومت و مکانیسم تغییر شکل نانو کامپوزیت حاصل مورد بررسی قرار گرفته است [۱۰]. در پژوهش دیگر که توسط جون هوا در سال ۲۰۱۷ بر روی نانو کامپوزیت گرافن انجام شد با استفاده از روش دینامیک مولکولی خواص مکانیکی تحت تست کشش بررسی شد [۱۱].

همچنین با استفاده از روش دینامیک مولکولی مکانیسم های تغییر شکل و شکست در نانو کامپوزیت های آلومینیوم-سیلیکونی نیز بررسی شده است [۱۲]. در مطالعات دیگری با استفاده از روش دینامیک مولکولی اثرات نسبت ابعاد و سوراخ بر روی پاسخ کمانش صفحه نانو کامپوزیت آلومینیوم-گرافن بررسی شده است. در این تحقیق، صفحه نانو کامپوزیت آلومینیوم گرافن با استفاده از نرم افزار LAMMPS ساخته و شبیه سازی شده است. نتایج این مطالعه نشان می دهند که استحکام کمانش صفحه نانو کامپوزیت مربعی آلومینیوم گرافن به دلیل سوراخ شدن به شدت کاهش می یابد [۱۳]. علاوه بر این تخمین خواص مکانیکی نانولوله های سیلیکونی و ژرمانیوم با کمک این روش انجام شده است و در این مطالعه ابعاد دما و تأثیر فضای خالی مورد بررسی قرار گرفته است [۱۴]. بررسی خواص نانو کامپوزیت ها توسط روش دینامیک مولکولی نشان می دهد که این مواد استحکام فزاینده ای از خود نشان می دهند.

نانو کامپوزیت های سیلیکون و ژرمانیوم موادی هستند که با موفقیت در ترانزیستورهای دوقطبی ناهمگون به عنوان نیمه هادی بکار گرفته شده اند. در مطالعه حبیب رحمان در سال ۲۰۲۰ نشان داده شده است که آلیاژ این دو عنصر خواص بهتری را نسبت به حالت خالص هر کدام نشان می دهند [۱۵]. از سیلیکون و ژرمانیوم به عنوان نیمه هادی در دستگاه های نانو الکتریکی پیشرفته استفاده می شود. با توجه به اینکه ذخایر ژرمانیوم محدود است و تولید ژرمانیوم گران تر از سیلیکون است از این رو از ژرمانیوم به صورت لایه نازک در صنعت استفاده می شود. از آنجایی که ژرمانیوم در تماس نزدیک با سیلیکون یا اکسید سیلیکون استفاده می شود، مقایسه هر دو نیمه هادی نامبرده شده با خواص مربوطه اهمیت دارد. از بسیاری جهات سیلیکون و ژرمانیوم بسیار شبیه به هم رفتار می کنند، به خصوص زمانی که خواص آن ها را در دماهای نرمال با توجه به دمای مذاب مقایسه می کنیم. البته قابل ذکر است که از نظر تابع پتانسیل در دینامیک مولکولی برای توجیه رفتار اتمی آن ها شبیه به

هم عمل می کنند. مقدار زیادی از این عنصر را در منابع زغال سنگ می توان یافت. از نظر ساختاری، ژرمانیوم دارای رنگ سفید خاکستری و سخت است و ساختاری شبیه به الماس بلوری دارد [۱۶]. ژرمانیوم به دلیل تأثیرپذیری بالا از انرژی و حرارت نسبت به برخی عناصر دیگر بهتر عمل می کند و همین باعث شده تا در ساخت لوازم نیمه هادی بسیار پر کاربرد به صورت گسترده استفاده شود. ژرمانیوم برخلاف اکثر نیمه هادی ها دارای شکاف نور کوچکی است که امکان واکنش به مادون قرمز را به وجود می آورد، بنابراین ژرمانیوم در طیف نماهای مادون قرمز و تجهیزات مربوط دیداری که نیازمند یابنده اشعه مادون قرمز است مورد استفاده قرار می گیرد. در حال حاضر کاربردهای بیشتری برای مواد نیمه هادی معرفی شده است. از جمله این کاربردها می توان به سیستم های مربوط به فیبر نوری، سلول های خورشیدی، نور مادون قرمز و دیودهای منتشرکننده نور را نام برد [۱۷-۱۹]. همچنین این ساختار در مدارهایی که در دمای بالا کار می کنند و در مدارهای یکپارچه و ریز تراشه های پرسرعت بسیار مورد استفاده قرار می گیرند. مدارهای الکتریکی که از این آلیاژ در آن ها استفاده شده بسیار سریع تر از مدارهایی هستند که سیلیکون خالص دارند. این نوع از مدارها و تراشه ها عملکرد بهتری داشته اند و در عین اینکه عملکرد آن ها بهتر است هزینه کمتری را نسبت به تراشه های سیلیسیمی دارد. ژرمانیوم نسبت به دما حساس است به همین جهت در دماسنج های مقاومت ژرمانیومی در زیر دمای ۰.۰۱ کلوین نیز کاربرد دارد. اقدامات احتیاطی مورد نیاز برای استفاده مطمئن از این دماسنج ها مورد بحث قرار گرفته است. مشکل اصلی دماسنج های این محدوده دمایی این است که به علت اینکه حساسیت دمایی بسیار بالاست، عموماً از طرف گرمای محیط این دقت از بین می رود که با روش های ساخت و طراحی نوین و استفاده از نانوسیم های ژرمانیومی این مشکل حل شده است [۲۰]. در مطالعه اخیر در سال ۲۰۲۱ یانگ و همکاران با استفاده از روش MD بیان داشتند که عبور نانو ذرات آهن با سرعت مشخص از روی سطح بلوک سیلیکونی می تواند باعث افزایش مدول یانگ و تنش حد نهایی سیلیکون خالص گردد [۲۱].

با توجه به اینکه پس از سیلیکون، ژرمانیوم به طور گسترده ای در دستگاه های نانو الکتریکی و نیمه هادی ها استفاده می شود و با توجه به چگالی تقریباً دو برابری آن

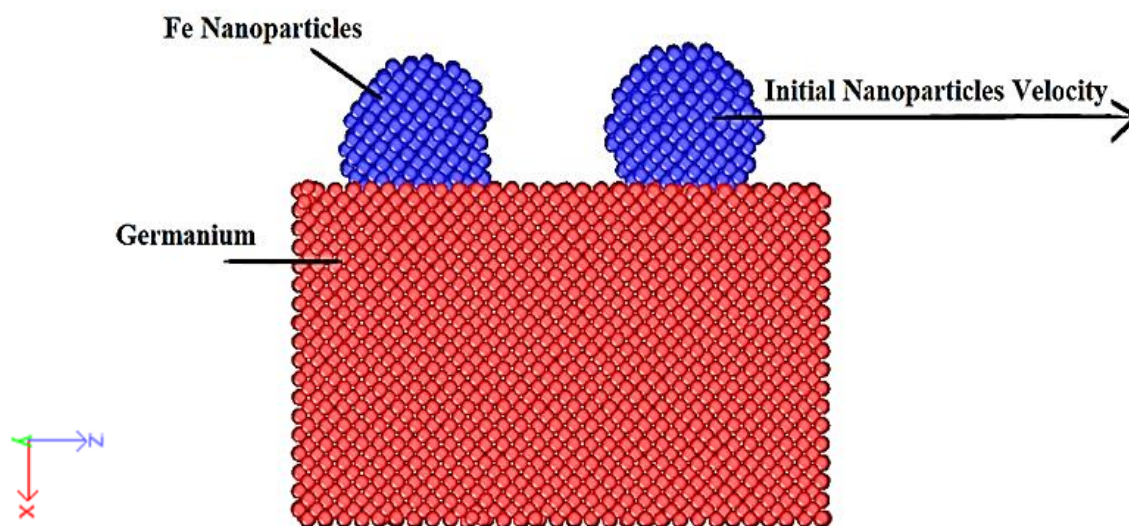
مقاومت و مکانیسم تغییر شکل نانو کامپوزیت حاصل مورد بررسی قرار گرفته است [۱۰]. در پژوهش دیگر که توسط جون هوا در سال ۲۰۱۷ بر روی نانو کامپوزیت گرافن انجام شد با استفاده از روش دینامیک مولکولی خواص مکانیکی تحت تست کشش بررسی شد [۱۱].

همچنین با استفاده از روش دینامیک مولکولی مکانیسم های تغییر شکل و شکست در نانو کامپوزیت های آلومینیوم-سیلیکونی نیز بررسی شده است [۱۲]. در مطالعات دیگری با استفاده از روش دینامیک مولکولی اثرات نسبت ابعاد و سوراخ بر روی پاسخ کمانش صفحه نانو کامپوزیت آلومینیوم-گرافن بررسی شده است. در این تحقیق، صفحه نانو کامپوزیت آلومینیوم گرافن با استفاده از نرم افزار LAMMPS ساخته و شبیه سازی شده است. نتایج این مطالعه نشان می دهند که استحکام کمانش صفحه نانو کامپوزیت مربعی آلومینیوم گرافن به دلیل سوراخ شدن به شدت کاهش می یابد [۱۳]. علاوه بر این تخمین خواص مکانیکی نانولوله های سیلیکونی و ژرمانیوم با کمک این روش انجام شده است و در این مطالعه ابعاد دما و تأثیر فضای خالی مورد بررسی قرار گرفته است [۱۴]. بررسی خواص نانو کامپوزیت ها توسط روش دینامیک مولکولی نشان می دهد که این مواد استحکام فزاینده ای از خود نشان می دهند.

نانو کامپوزیت های سیلیکون و ژرمانیوم موادی هستند که با موفقیت در ترانزیستورهای دوقطبی ناهمگون به عنوان نیمه هادی بکار گرفته شده اند. در مطالعه حبیب رحمان در سال ۲۰۲۰ نشان داده شده است که آلیاژ این دو عنصر خواص بهتری را نسبت به حالت خالص هر کدام نشان می دهند [۱۵]. از سیلیکون و ژرمانیوم به عنوان نیمه هادی در دستگاه های نانو الکتریکی پیشرفته استفاده می شود. با توجه به اینکه ذخایر ژرمانیوم محدود است و تولید ژرمانیوم گران تر از سیلیکون است از این رو از ژرمانیوم به صورت لایه نازک در صنعت استفاده می شود. از آنجایی که ژرمانیوم در تماس نزدیک با سیلیکون یا اکسید سیلیکون استفاده می شود، مقایسه هر دو نیمه هادی نامبرده شده با خواص مربوطه اهمیت دارد. از بسیاری جهات سیلیکون و ژرمانیوم بسیار شبیه به هم رفتار می کنند، به خصوص زمانی که خواص آن ها را در دماهای نرمال با توجه به دمای مذاب مقایسه می کنیم. البته قابل ذکر است که از نظر تابع پتانسیل در دینامیک مولکولی برای توجیه رفتار اتمی آن ها شبیه به

نانو ذرات آهن کروی شکل با سرعت مشخص بررسی شده است و رفتار مکانیکی آن شامل نمودارهای تنش-کرنش و مدول یانگ به دست آمده است (شکل ۱). این روش برای اولین بار روی ژرمانیوم مورد بررسی قرار می‌گیرد به همین علت نانو ساختار اتمی شرح داده شده با استفاده از شبیه سازی موازی اتمی-مولکولی در مقیاس بزرگ (LAMMPS) شبیه سازی شده است [۲۲-۲۴].

نسبت به سیلیکون و از طرفی استحکام مکانیکی پایین تر آن، منجر به مشکلات مربوط به نابعایی در هنگام کشیدن کریستال و تاب برداشتن می‌شود. علاوه بر این احتمال دررفتگی و انتشار از مرز دانه‌های آن نیز به دلیل چگالی زیاد آن نیز زیادتر است [۱۱]. بنابراین بررسی رفتار مکانیکی و بهبود خواص آن از اهمیت بالایی نسبت به سیلیکون برخوردار است. در این مطالعه اثر این مکانیسم بهبود بر روی بلوک ژرمانیومی با حرکت دادن

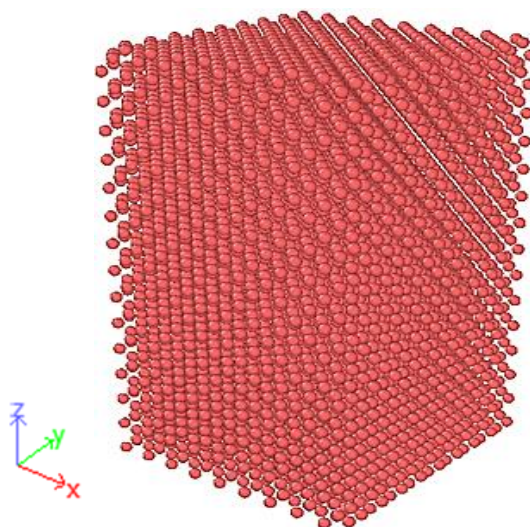


شکل ۱- مدل بلوک ژرمانیومی با نانو ذرات کروی آهن بر روی آن

اتم های ژرمانیوم خالص مورد مطالعه را نشان می‌دهد. پس از ایجاد ساختار دما و فشار اولیه آن در  $T=300\text{K}$  و  $P=1\text{bar}$  تنظیم شده است. جابجایی اتم‌ها در الگوریتم MD توسط قوانین نیوتون محاسبه می‌شوند و نیروی‌های بین‌اتمی نیز با توابع پتانسیل محاسبه می‌شوند.

## ۲- روش شبیه‌سازی

ژرمانیوم دارای ساختار بلوری مکعبی الماسی است و می‌توان آن را بصورت یک شبکه fcc با دو اتم ژرمانیوم پایه، یکی در  $(0,0,0)$  دیگری در  $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$  در واحدهای لبه مکعب تجسم کرد. شکل (۲) ساختار ایجاد شده از



شکل ۲- نمونه ژرمانیوم خالص

روشی متعارف برای تعادل حرارتی استفاده شده است [۳۰]. همچنین در این شبیه‌سازی از ترموستات Noose Hoover استفاده کرده است [۳۱،۳۲]. این شبیه‌سازی در سه مرحله انجام شده است که در مرحله اول انرژی نانو سیستم به مدت ۱۰۰ پیکوثانیه متعادل‌سازی شده است. در مرحله دوم نانو ذرات آهن با سرعت‌های مشخص از بازه ۰.۰۰۱ تا ۰.۰۰۵ آنگستروم بر پیکوثانیه (A/Ps) از روی سطح ژرمانیوم خالص عبور داده می‌شوند که مدت اجرای این قسمت ۲۰ نانو ثانیه می‌باشد. در سرعت‌های بالاتر از ۰.۰۰۵ ساختار ژرمانیوم ناپایدار می‌شود بنابراین در این مطالعه سرعت حرکت نانوذره آهن به این مقدار محدود شده است. در مرحله سوم تست کشش با نرخ کرنش 1/ps ۰.۰۱ انجام شده و منحنی‌های تنش-کرنش و خواص مکانیکی شامل مدول الاستیسیته محاسبه می‌شوند. گام زمانی در این شبیه‌سازی مانند شبیه‌سازی مشابه که بر روی سیلیکون خالص انجام شده برابر ۱ فمتوثانیه قرار داده شده است [۲۱]. شرایط مرزی به صورت دوره‌ای قرار داده شده است و طول جعبه شبیه‌سازی در جهت X و Y برابر ۵۰ آنگستروم و در جهت Z برابر ۵۰ آنگستروم و در جهت Z برابر ۸۴ آنگستروم تنظیم شده است. نانو سیستم توسط هنگرد NPT در دما و فشار مشخص  $T=300\text{K}$  و  $P=1\text{bar}$  متعادل‌سازی شده است. علاوه بر این، ذرات آهن به صورت کره‌ای شکل با شعاع ۱۲ آنگستروم روی سطح ژرمانیوم قرار داده شده و سپس این ذرات با سرعت‌های تنظیم‌شده روی سطح ژرمانیوم در جهت Z حرکت داده شده‌اند.

### ۳- نتایج و بحث

پایداری نانو ساختار شبیه‌سازی‌شده با محاسبه انرژی پتانسیل و دما برای هر اتم به صورت عددی گزارش شده است شکل (۳) و شکل (۴) تغییرات دما و انرژی برای هر اتم را به‌عنوان تابعی از گام زمانی نشان می‌دهند. از این نمودار می‌توان نتیجه گرفت که دمای ساختار اتمی پس از متعادل‌سازی به دمای تنظیم‌شده ۳۰۰ کلوین رسیده است و انرژی پتانسیل به مقدار حداقل خود در مدت‌زمان ۱۰۰ پیکو ثانیه رسیده است، انرژی پتانسیل برای هر اتم در دمای ۳۰۰ کلوین و فشار یک بار برای ژرمانیوم خالص برابر منفی ۳۷۰۴۳ الکترون ولت رسیده است. این کاهش و متعادل‌سازی انرژی کاهش نوسان اتم‌ها را در طول زمان نتیجه می‌دهد.

در این شبیه‌سازی نیروی‌های بین‌اتمی برای ژرمانیوم به صورت  $s$  و اندرکنش‌های بین آن‌ها با پتانسیل LJ تعریف شده است [۲۷-۲۵].

$$E_{total} = E_{Ge}^{TERSOFF} + E_{Fe}^{EAM} + E_{Ge-Fe}^{LJ} \quad (۱)$$

در پتانسیل TERSOFF فرمول‌بندی به صورت زیر است [۲۸]:

$$E^{TERSOFF} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{i \neq j} V_{ij} \quad (۲)$$

$$V_{ij} = f_c(r_{ij} + \delta) [f_R(r_{ij} + \delta) + b_{ij} f_A(r_{ij} + \delta)] \quad (۳)$$

که در آن  $f_R$  یک رابطه برای پتانسیل‌های دو جسمی و  $f_A$  شامل تعاملات سه جسمی است. که محاسبات بین‌اتمی برای اتم‌های  $i$  و  $j$  و  $k$  در یک فاصله برابر شعاع قطع  $r$  انجام می‌شود.

در ادامه فرمول‌بندی پتانسیل EAM به صورت زیر است:

$$E_i^{EAM} = F_\alpha \left( \sum_{j \neq i} \rho_\beta(r_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij}) \quad (۴)$$

که در آن  $r_{ij}$  فاصله بین اتم‌های  $i$  و  $j$  است،  $\phi$  یک تابع پتانسیل زوجی است،  $\rho$  چگالی بار الکترون اتم  $j$  در محل اتم  $i$  است و  $F$  یک تابع جاسازی است که نشان‌دهنده انرژی موردنیاز برای قرار دادن اتم  $i$  در فضای اوربیتال اتمی است.

$$E^{LJ} = \epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad r < r_c \quad (۵)$$

در رابطه بالا  $\epsilon$  واحد انرژی است،  $\sigma$  فاصله‌ای است که در آن انرژی پتانسیل یک ذره صفر می‌شود و  $r_c$  شعاع قطع است. بنابراین انرژی کل سیستم را می‌توان محاسبه کرد. در این شبیه‌سازی MD از الگوریتم سرعت ورلت استفاده شده است که تکمیل‌کننده معادلات حرکت است. مهم‌ترین معادلات این الگوریتم در رابطه زیر بیان شده است.

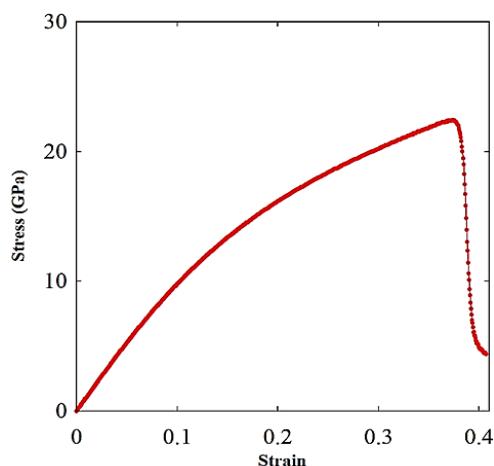
$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t)\Delta t + \frac{1}{2} a_i(t)\Delta t^2 + o(\Delta t^3) \quad (۶)$$

$$v_i(t + \Delta t) = v_i(t) + \frac{a_i(t) + a_i(t + \Delta t)}{2} \Delta t + o(\Delta t^2) \quad (۷)$$

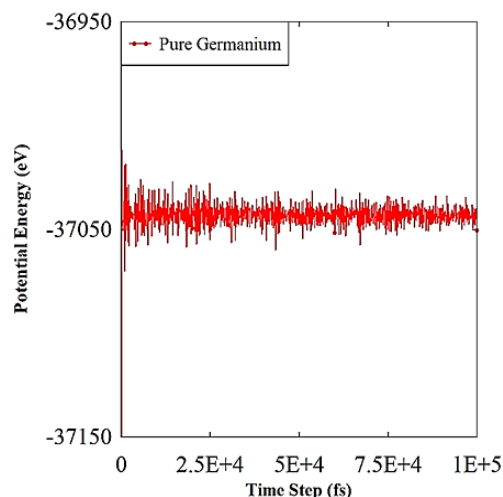
که در آن  $r_i(t + \Delta t)$  و  $v_i(t + \Delta t)$  مختصات و سرعت اتم‌ها هستند و  $r_i(t)$  مقدار اولیه این کمیت‌های فیزیکی را نشان می‌دهد. از لحاظ تئوری، گروه‌های مختلفی برای ایجاد شرایط اولیه در شبیه‌سازی‌های MD استفاده می‌شوند [۲۹]. با بررسی مطالعات قبلی، در این تحقیق از

شکل (۵) نمودار انرژی پتانسیل نانو ساختار ژرمانیوم را در حضور ذره آهن نشان می دهد. دیده می شود که انرژی پتانسیل پس از ۵۰۰۰۰ گام زمانی همگرا شده است. همچنین همان طور که دیده می شود مقدار انرژی پتانسیل نسبت به شکل (۳) که برای ژرمانیوم خالص به دست آمده است کاهش می یابد و به مقدار منفی ۴۰۸۰۰ الکترون ولت می رسد. این کاهش انرژی پتانسیل باعث محکم تر شدن پیوندهای بین اتمی ژرمانیوم می شود و در نتیجه می تواند باعث بهبود خواص مکانیکی ژرمانیوم خالص شود.

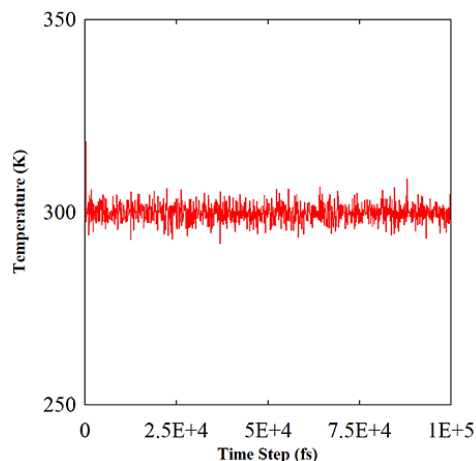
برای مقایسه نتایج و مشاهده اثر وجود ذره آهن در مرحله اول یک بلوک ژرمانیومی خالص پس از رسیدن به فاز تعادل با هنگرد NPT در  $T=300\text{K}$  و  $P=1\text{bar}$  مورد تست کشش انجام گرفته است. سپس منحنی تنش-کرنش آن در شکل (۶) آورده شده است. با استفاده از معیار ۲٪ کرنش می توان مدول یانگ را محاسبه نمود. با استفاده از این روش مدول یانگ ۱۰۸ گیگا پاسکال به دست می آید که مطابقت خوبی با مطالعات پیشین که این پارامتر را بین ۱۰۳ تا ۱۱۰ گیگا پاسکال محاسبه کرده اند دارد. تنش حد نهایی نیز ۲۲ گیگا پاسکال به دست آمده که در مطالعات پیشین در محدوده ۲۰ تا ۲۲ گیگا پاسکال به دست آمده است [۱۵، ۳۳-۳۵]. مراحل تست کشش بر روی ژرمانیوم خالص در گام های زمانی مختلف در شکل (۷) نشان داده شده است. همان طور که دیده می شود با افزایش گام زمانی مقطع کشش باریک تر می گردد.



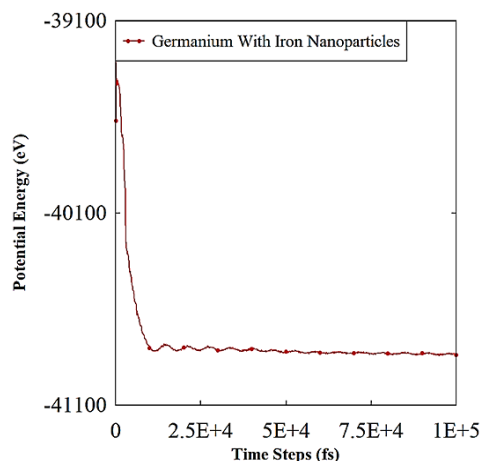
شکل ۶- نمودار تنش-کرنش نمونه خالص ژرمانیوم



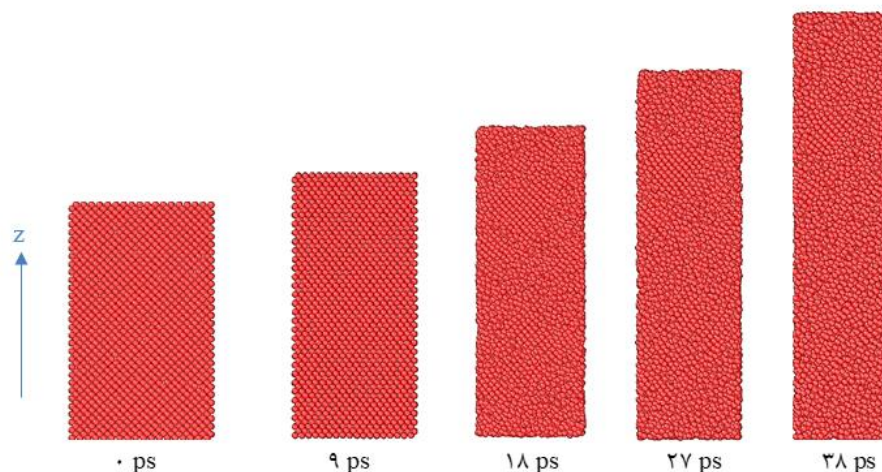
شکل ۳- انرژی پتانسیل برحسب گام زمانی برای ژرمانیوم خالص



شکل ۴- نمودار دما برحسب گام زمانی برحسب فمتوثانیه



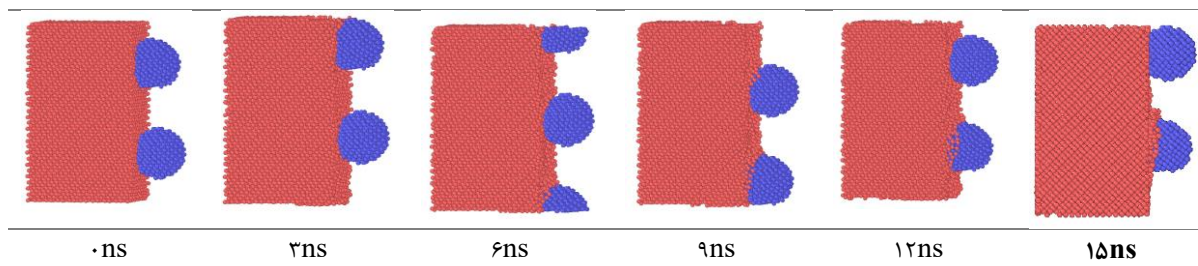
شکل ۵- انرژی پتانسیل برحسب گام زمانی برای ژرمانیوم بهبود یافته



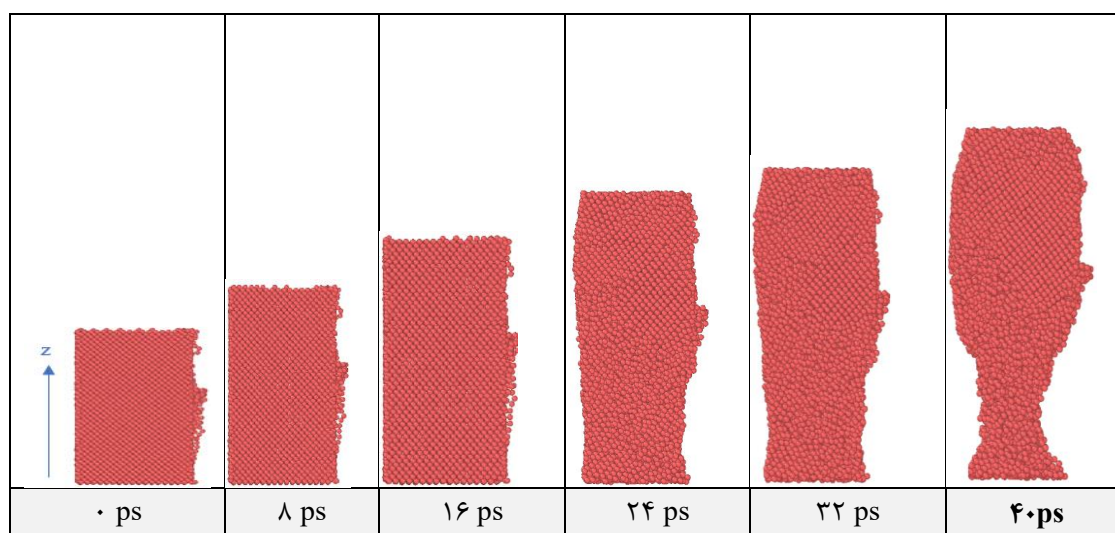
شکل ۷- تست کشش نمونه خالص ژرمانیوم (محور Z جهت تست کشش)

مختلف را مشاهده کرد. سپس تست کشش در جهت Z روی نمونه های ژرمانیوم انجام گرفته است. شکل (۹) فرم تغییر شکل نانو ساختار را نشان می دهد. همان طور که دیده می شود با افزایش زمان بارگذاری مقطع کشش باریک تر می شود تا گسیختگی رخ دهد.

در ادامه برای یک بلوک ژرمانیومی دیگر نانو ذرات آهن بر روی آن قرار داده شده است و پس از متعادل سازی این نانو ذرات سرعت های مختلف از  $0.001$  تا  $0.005$  A/Ps بر روی ژرمانیوم حرکت داده شده است. در شکل (۸) می توان حرکت نانو ذرات آهن روی سطح ژرمانیوم را در زمان های



شکل ۸- عبور نانو ذرات آهن از روی ساختار ژرمانیوم



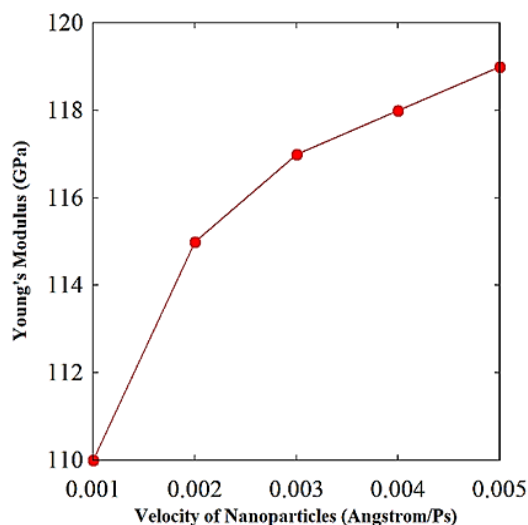
شکل ۹- تغییر شکل ژرمانیوم پس از حرکت نانو تارت در تست کشش (تست کشش در جهت Z)

حرکت دادن نانو ذرات آهن روی ژرمانیوم خالص تنش حد نهایی آن افزایش پیدا می کند (در مقایسه با شکل ۶) و این نشان دهنده این است که پیوندهای بین اتمی ژرمانیوم

شکل (۱۰) نمودار تنش- کرنش نمونه های ژرمانیوم را پس از حرکت نانو ذره آهن با سرعت های مختلف نشان می دهد. نتایج شبیه سازی دینامیک مولکولی نشان می دهد که با

سطح ژرمانیوم بیشتر می شود باعث می شود که اندرکنش های بین نانو ذرات و ژرمانیوم خالص بهتر انجام گیرد و در نتیجه خواص مکانیکی بهبود می یابد. البته اگر سرعت از مقدار  $0.005 \text{ A/ps}$  عبور کند باعث فروپاشی این ساختار می شود و زمان کافی برای اثربخشی کاهش انرژی پتانسیل ژرمانیوم خالص وجود ندارد.

این شبیه سازی نشان می دهد که برهمکنش های اتمی بین ساختار پایه و نانو ذرات آهن در ناحیه مشترک تأثیر مهمی بر یکپارچگی ساختار تقویت شده دارد. در نانو ذرات آهن، اتم های خنثی وجود دارند و از نظر ساختار اتمی FCC هستند. بنابراین برهمکنش و اندروالس بین نمونه ژرمانیوم و آهن ایجاد شده است. افزایش سرعت نانو ذرات آهن باعث ایجاد جاذبه اتمی بین نانو ذرات شده و این پدیده باعث استحکام مکانیکی بیشتر در ساختار پایه می شود. بنابراین افزایش سرعت نانو ذرات آهن برهمکنش های بین اتمی ژرمانیوم و آهن را بهینه می کند. در نهایت می توان نتیجه گرفت که استفاده از حرکت نانو ذرات آهن می توان خواص ژرمانیوم به طور مؤثری را بهبود می بخشد.

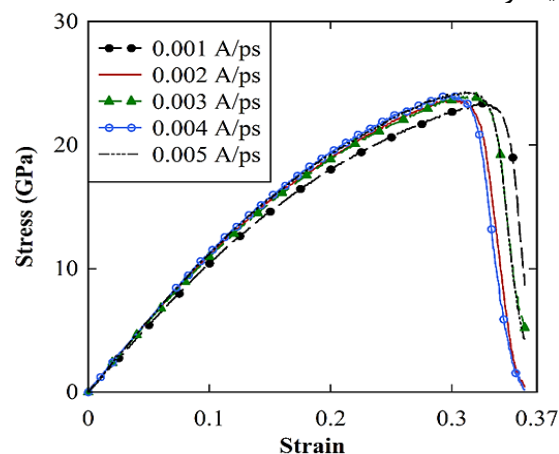


شکل ۱۱- مدول یانگ برحسب سرعت نانوذره آهن

جدول ۱- مدول یانگ و تنش حد نهایی نانو ساختار ژرمانیوم در سرعت های مختلف حرکت نانوذره آهن

Velocity (A/ps)	Young's modulus (GPa)	Ultimate Stress (GPa)
0.001	110	23
0.002	115	23
0.003	117	24
0.004	118	24
0.005	119	24

محکم تر شده است. با در نظر گرفتن معیار کرنش  $2\%$  مدول یانگ ساختار ژرمانیوم بهبود یافته را می توان با ساختار ژرمانیوم خالص مقایسه کرد. به عنوان مثال در برای سرعت حرکت  $0.005$  مدول یانگ به مقدار  $119$  گیگا پاسکال رسیده است که این عدد بهبود حدود  $10\%$  درصدی در مدول یانگ را نسبت به ژرمانیوم خالص نشان می دهد. همچنین تنش حد نهایی نیز به مقدار  $24$  گیگا پاسکال رسیده است که حدود  $9\%$  درصد نسبت به ژرمانیوم خالص افزایش پیدا کرده است.



شکل ۱۰- نمودار تنش- کرنش بلوک ژرمانیومی پس از بهبود خواص در سرعت های مختلف حرکت نانوذره آهن

در شکل (۱۰) دیده می شود که سرعت حرکت نانو ذرات آهن پارامتر تأثیرگذاری بر منحنی های تنش-کرنش و خواص مکانیکی می باشد. به طور دقیق تر با افزایش سرعت نانو ذرات آهن از  $0.001$  به  $0.005$  مدول یانگ بلوک ژرمانیومی از  $110$  به  $119$  گیگا پاسکال رسیده است و تنش حد نهایی از  $23$  به  $24$  گیگا پاسکال افزایش پیدا کرده است (جدول-۱). بنابراین می توان نتیجه گرفت که هرچه قدر سرعت حرکت از  $0.001 \text{ A/ps}$  به  $0.005 \text{ A/ps}$  نزدیک می شود مدول یانگ و تنش حد نهایی نیز بیشتر می گردد. از لحاظ ساختاری هر چه سرعت عبور نانو ذرات آهن از روی



## ۴- نتیجه گیری

رفتار نمونه ژرمانیومی خالص و سازه‌های تقویت‌شده توسط افزودن نانو ذرات آهن به ساختار اولیه با استفاده از روش MD مورد بررسی قرار گرفت و تعدادی از نتایج شبیه‌سازی به شرح زیر به دست آمد:

۱. انرژی پتانسیل تعیین شده با TERSOFF EAM, LJ یک تابع کارآمد در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ساختار تقویت‌شده ژرمانیوم آهن است.
۲. از نظر عددی مدول یانگ نمونه ژرمانیوم با افزودن نانو ذرات آهن به مقدار ۱۱۹ گیگا پاسکال و تنش حد نهایی با ۲۴ گیگا پاسکال می‌رسد.
۳. به دلیل وجود اندرکنش‌های بین نانو ذرات آهن و ژرمانیوم مقدار انرژی ساختار از منفی ۳۷۰۴۳ به منفی ۴۰۸۰۰ الکترون ولت رسیده و حدود ۱۰

درصد کاهش داشته است. و این عامل باعث می‌شود که ساختار محکم‌تر شود و در نتیجه مدول یانگ و تنش حد نهایی به ترتیب ۱۰ و ۹ درصد بهبود داشته باشد.

۴. طبق بررسی‌های انجام‌شده هر چه سرعت نانو ذره از بازه ۰.۰۰۱ تا ۰.۰۰۵ بیشتر باشد مدول یانگ نیز بیشتر است، به طوری که در سرعت‌های ۰.۰۰۱، ۰.۰۰۲، ۰.۰۰۳، ۰.۰۰۴ و ۰.۰۰۵ آنگستروم بر پیکوتانیه مدول یانگ به ترتیب ۱۱۰، ۱۱۵، ۱۱۷، ۱۱۸ و ۱۱۹ گیگا پاسکال رسیده است. لازم به ذکر است اگر سرعت از ۰.۰۰۵ بیشتر باشد سیستم پایداری خود را از دست می‌دهد.

## مراجع

- [1] M.G. Bader. "Handbook of Composite Reinforcements." *International Materials Reviews* 39, no. 3 (1994): 123-124.
- [2] Y. Orooji, E. Ghasali, M. Moradi, M.R. Derakhshandeh, M. Alizadeh, M. Shahedi Asl, and T. Ebadzadeh. "Preparation of Mullite-Tib2-Cnts Hybrid Composite through Spark Plasma Sintering." *Ceramics International* 45, no. 13 (2019): 16288-16296.
- [3] H. Karimi-Maleh, M.L. Yola, N. Atar, Y. Orooji, F. Karimi, P.S. Kumar, J. Rouhi, and M. Baghayeri. "A Novel Detection Method for Organophosphorus Insecticide Fenamiphos: Molecularly Imprinted Electrochemical Sensor Based on Core-Shell Co3o4@ Mof-74 Nanocomposite." *Journal of Colloid and Interface Science* 592 (2021): 174-185.
- [4] M.H. Esfe, S. Alidoust, S. Esfandeh, D. Toghraie, H. Hatami, M.H. Kamyab, and E. Mohammadnejad Ardeshtari. "Theoretical-Experimental Study of Factors Affecting the Thermal Conductivity of Swcnt-Cuo (25: 75)/Water Nanofluid and Challenging Comparison with Cuo Nanofluids/Water." *Arabian Journal of Chemistry* 16, no. 5 (2023): 104689.
- [5] H. Xiao-Peng, and H. Xiu-Lan. "Molecular Dynamics Simulation of Thermal Conductivity in Si-Ge Nanocomposites." *Chinese Physics Letters* 25, no. 8 (2008): 2973.
- [6] M.A. Hemmatpour Khotbesara, M. Ajri, and M. Samadiyan. "Mechanical Properties Analysis of a Monolayer Biphenylene at Different Temperatures." *Journal of Modeling in Engineering* (2023) (in Persian).
- [7] M. Samadian, M. Ajri, A. Azizi, and M.A. Hemmatpour-Khotbesara. "Investigating the Pinhole Effect on the Mechanical Properties of Biphenylene." *Applied Physics A* 129, no. 12 (2023): 826.
- [8] A. Karimdoost Yasuri, M. Izadi, and H. Hatami. "Numerical Study of Natural Convection in a Square Enclosure Filled by Nanofluid with a Baffle in the Presence of Magnetic Field." *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering* 38, no. 5 (2019): 209-220.
- [9] M.H. Esfe, S.N. Hosseini Tamrabad, H. Hatami, S. Alidoust, and D. Toghraie. "Using the Rsm to Evaluate the Rheological Behavior of Sio2 (60%)-Mwcnt (40%)/Sae40 Oil Hybrid Nanofluid and Investigating the Effect of Different Parameters on the Viscosity." *Tribology International* 184 (2023): 108479.
- [10] B. Faria, C. Guarda, N. Silvestre, and J.N. Canongia Lopes. "Cnt-Reinforced Iron and Titanium Nanocomposites: Strength and Deformation Mechanisms." *Composites Part B: Engineering* 187 (2020): 107836.
- [11] J. Hua, Z. Duan, C. Song, and Q. Liu. "Molecular Dynamics Study on the Tensile Properties of Graphene/Cu Nanocomposite." *International Journal of Computational Materials Science and Engineering* 6, no. 03 (2017): 1750021.

- [12] D.K. Ward, W.A. Curtin, and Y. Qi. "Mechanical Behavior of Aluminum–Silicon Nanocomposites: A Molecular Dynamics Study." *Acta Materialia* 54, no. 17 (2006): 4441-4451.
- [13] A.K. Srivastava, M.K. Dikshit, V.K. Pathak, and L. Khurana. "A Molecular Dynamics Study of the Buckling Behaviour of Graphene-Reinforced Aluminum Nanocomposite Plate." *Materials Physics and Mechanics* 42 (2019): 234-241.
- [14] A. Dadrasi, A.R. Albooyeh, and A.H. Mashhadzadeh. "Mechanical Properties of Silicon-Germanium Nanotubes: A Molecular Dynamics Study." *Applied Surface Science* 498 (2019): 143867.
- [15] M.H. Rahman, E.H. Chowdhury, and M. Mahbubul Islam. "Understanding Mechanical Properties and Failure Mechanism of Germanium–Silicon Alloy at Nanoscale." *Journal of Nanoparticle Research* 22 (2020): 1-12.
- [16] J.M. Escalante. "Non-Linear Behavior of Germanium Electronic Band Structure under High Strain." *Computational Materials Science* 152 (2018): 223-227.
- [17] G. Maggioni, F. Sgarbossa, E. Napolitani, W. Raniero, V. Boldrini, S.M. Carturan, D.R. Napoli, and D.D. Salvador. "Diffusion Doping of Germanium by Sputtered Antimony Sources." *Materials Science in Semiconductor Processing* 75 (2018): 118-123.
- [18] D. Dideban, A. Ketabi, M. Vali, A.H. Bayani, and H. Heidari. "Tuning the Analog and Digital Performance of Germanene Nanoribbon Field Effect Transistors with Engineering the Width and Geometry of Source, Channel and Drain Region in the Ballistic Regime." *Materials Science in Semiconductor Processing* 80 (2018): 18-23.
- [19] M.H. Esfe, S. Alidoust, S.N. Hosseini Tamrabad, D. Toghraie, and H. Hatami. "Thermal Conductivity of Mwcnt-Tio2/Water-Eg Hybrid Nanofluids: Calculating the Price Performance Factor (Ppf) Using Statistical and Experimental Methods (Rsm)." *Case Studies in Thermal Engineering* 48 (2023): 103094.
- [20] E.P. Roth, J.R. Matey, A.C. Anderson, and D.A. Johns. "Application of Germanium Resistance Thermometers Below 0.1 K." *Review of Scientific Instruments* 49, no. 6 (1978): 813-816.
- [21] M. Pirmoradian, D. Toghraie, and R. Sabetvand. "Molecular Dynamics Study of the Mechanical Properties of Reinforced Silicon Structure with Iron Nanoparticles." *Computational Materials Science* 199 (2021): 110749.
- [22] H.M. Aktulga, J.C. Fogarty, S.A. Pandit, and A.Y. Grama. "Parallel Reactive Molecular Dynamics: Numerical Methods and Algorithmic Techniques." *Parallel Computing* 38, no. 4-5 (2012): 245-259.
- [23] S. Plimpton. "Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics." *Journal of Computational Physics* 117, no. 1 (1995): 1-19.
- [24] S.J. Plimpton, and A.P. Thompson. "Computational Aspects of Many-Body Potentials." *MRS Bulletin* 37, no. 5 (2012): 513-521.
- [25] J. Tersoff. "Modeling Solid-State Chemistry: Interatomic Potentials for Multicomponent Systems." *Physical Review B* 39, no. 8 (1989): 5566.
- [26] A.K. Rappé, C.J. Casewit, K.S. Colwell, W.A. Goddard III, and W.M. Skiff. "Uff, a Full Periodic Table Force Field for Molecular Mechanics and Molecular Dynamics Simulations." *Journal of the American Chemical Society* 114, no. 25 (1992): 10024-10035.
- [27] A. Arkundato, Z. Su'ud, M. Abdullah, and W. Sutrisno. "Molecular Dynamic Simulation on Iron Corrosion-Reduction in High Temperature Molten Lead-Bismuth Eutectic." *Turkish Journal of Physics* 37, no. 1 (2013): 132-144.
- [28] J. Tersoff. "New Empirical Approach for the Structure and Energy of Covalent Systems." *Physical Review B* 37, no. 12 (1988): 6991.
- [29] E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner. "Geometric Numerical Integration Illustrated by the Störmer–Verlet Method." *Acta Numerica* 12 (2003): 399-450.
- [30] G.H. Bryan. "Elementary Principles in Statistical Mechanics." *Nature Publishing Group UK London*, 1902.
- [31] S. Nosé. "A Unified Formulation of the Constant Temperature Molecular Dynamics Methods." *The Journal of Chemical Physics* 81, no. 1 (1984): 511-519.
- [32] W.G. Hoover. "Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions." *Physical Review A* 31, no. 3 (1985): 1695.
- [33] J. Vanhellefont, and E. Simoen. "Brother Silicon, Sister Germanium." *Journal of the Electrochemical Society* 154, no. 7 (2007): H572.

- [34] X. Wu, J.S. Kulkarni, G. Collins, N. Petkov, D. Almecija, J.J. Boland, D. Erts, and J.D. Holmes. "Synthesis and Electrical and Mechanical Properties of Silicon and Germanium Nanowires." *Chemistry of Materials* 20, no. 19 (2008): 5954-5967.
- [35] R. Komanduri, N. Chandrasekaran, and L.M. Raff. "Molecular Dynamic Simulations of Uniaxial Tension at Nanoscale of Semiconductor Materials for Micro-Electro-Mechanical Systems (Mems) Applications." *Materials Science and Engineering: A* 340, no. 1-2 (2003): 58-67.