دانشکده فنی

پایان نامه کارشناسی ارشد

توسعه روش‌های محاسباتی برای تحلیل رفتار غیر خطی نانوسازه‌ها بر اساس مکانیک محیط پیوسته تعمیم یافته

از

وحید محمدی

استاد راهنما

دکتر رضا انصاری خلخالی

اسفنـــد ۱۳۹۲

بسم الله الرحمن الرحيم

دانشکده فنی
گروه مهندسی مکانیک
گرایش طراحی کاربردی

توسعه روش‌های محاسباتی برای تحلیل رفتار غیر خطی نانوسازه‌ها بر اساس مکانیک محیط پیوسته تعمیم یافته

از

وحید محمدی

استاد راهنما

دکتر رضا انصاری خلخالی

اسفنـد ۱۳۹۲

تقدیم به خانواده ام

و تمام کسانی که دوستشان دارم...

با تشکر از استاد راهنمای گرانقدرم

جناب آقای دکتر رضا انصاری

فهرست

فصل ۱ پیشگفتار ۱

۱-۱ مروری بر تئوری های مکانیک محیط های پیوسته تعمیم یافته ۴

۱-۱-۱ تئوری های غیر موضعی الاستیسیته ۶

۱-۱-۲ تئوری های تنش سطحی ۸

۱-۲ نوآوری های تحقیق ۱۲

۱-۳ ساختار تحقیق ۱۳

فصل ۲ نگاهی به تکنیک های محاسباتی ۱۵

۲-۱ روش های حل معادلات غیر خطی ۱۶

۲-۱-۱ روش نیوتن ۱۶

۲-۱-۲ روش برویدن ۱۸

۲-۱-۳ روش تعقیب مسیر ۱۹

۲-۲ مختصری بر تئوری ماتریس ها ۲۴

۲-۳ عملگر مشتق گیر ۲۶

۲-۴ عملگر انتگرال گیر ۲۸

۲-۵ روش های گسسته سازی ۳۰

۲-۵-۱ روش PDQ ۳۰

۲-۵-۲ عملگر انتگرال گیر با استفاده از سری تیلور ۳۳

۲-۶ شبکه های متناوب ۳۵

۲-۷ روش های کاهش ابعاد مسئله ۳۷

۲-۷-۱ گلرکین عددی ۳۸

۲-۷-۲ روش توازن هارمونیکی ۴۱

فصل ۳ تئوری ها و معادلات حاکم مکانیک محیط های پیوسته در مقیاس نانو ۴۲

۳-۱ تئوری الاستیسیته تنش سطحی ۴۳

۳-۱-۱ نانوتیر اویلر ۴۴

۳-۱-۲ نانوتیر برشی مرتبه اول ۴۷

۳-۱-۳ نانو ورق مستطیلی بر اساس تئوری کیرشهف ۵۰

۳-۱-۴ نانو ورق مستطیلی بر اساس تئوری برشی مرتبه اول ۵۴

۳-۱-۵ نانو ورق دایره ای متقارن بر اساس تئوری برشی مرتبه اول ۵۸

۳-۲ تئوری الاستیسیته غیر موضعی ۶۱

۳-۲-۱ نانولوله تک دیواره بر اساس مدل تیر تیموشنکو ۶۳

۳-۲-۲ نانولوله بر اساس مدل تیر اویلر-برنولی ۶۵

فصل ٤ استراتژی حل ٦٧

۴-۱ حالت کلی معادلات حاکم بر نانوسازه ها ۶۸

۴-۲ گسسته سازی معادلات حرکت ۶۹

۴-۲-۱ متقارن محوری: نانو ورق دایره ای ۶۹
۴-۲-۲ دو بعدی: نانو ورق مستطیلی همراه با تنش سطحی ۷۴
۴-۳ تحلیل های خطی ۷۶
۴-۳-۱ خمش ۷۷
۴-۳-۲ ناپایداری کششی سازه ۷۸
۴-۳-۳ ارتعاشات آزاد ۸۱
۴-۳-۴ کمانش ۸۲
۴-۳-۵ مسائل مقدار ویژه از دیدگاه پارامتری ۸۳
۴-۴ تحلیل های غیر خطی ۸۴
۴-۴-۱ پس کمانش ۸۴
۴-۴-۲ ارتعاشات غیر خطی ۹۰
۴-۴-۳ کمانش دینامیکی غیر خطی ۹۹
فصل ۵ اجزاء محدود ۱۰۲
۵-۱ معادلات ساختاری ۱۰۳
۵-۲ اصل همیلتون ۱۰۴
۵-۳ میدان جابجایی و کرنش ۱۰۵
۵-۴ گسسته سازی و فرمول کردن اجزاء محدود ۱۰۷
۵-۵ جنبه های محاسباتی روش اجزاء محدود ۱۱۱
۵-۵-۱ درون یابی ۱۱۱
۵-۵-۲ انتگرال گیری در المان مرجع ۱۱۷
۵-۵-۳ فرمول کلی برای ماتریس سفتی هندسی ۱۱۸
فصل ٦ نتایج و بحث ۱۲۰
۶-۱ خمش، کمانش و ارتعاشات آزاد نانو ورق حلقه ای متقارن محوری ۱۲۱
۶-۲ ناپایداری کششی نانو ورق مستطیلی (پولین) ۱۲۸
۶-۳ ارتعاشات غیر خطی نانو تیر ۱۳۳
۶-۴ ارتعاشات غیر خطی نانولوله تک دیواره ۱۳۸
۶-۵ پس کمانش نانو لوله تک دیواره در محیط های گرمایی مختلف ۱۴۱
۶-۶ خمش و ارتعاشات نانو ورق به کمک اجزاء محدود ۱۴۶
۶-۷ کمانش، پس کمانش و ارتعاشات تحت آن در نانو فیلم ها ۱۵۱
فصل ۷ جمع بندی و پیشنهادات ۱۵۸
۷-۱ جمع بندی ۱۵۹
۷-۲ پیشنهادات ۱۶۱
مراجع ۱٦۲
پیوست ها ۱٦٦
پیوست الف: ماتریس های اجزاء محدود برای نانو فیلم ۱۶۶
پیوست ب: حل تحلیلی دقیق ارتعاشات آزاد نانو ورق ۱۶۷

فهرست جدول ها

جدول ۲-۱ | توابع قید مهم در روش های تعقیب مسیر ۲۱
جدول ۲-۲ | نمایش انواع ضرب و جمع تنسوری ۲۵
جدول ۲-۳ | روابط و اتحادهای مهم در جبر ماتریس ها ۲۶
جدول ۳-۱ | پارامترهای موجود در تئوری تنش سطحی ۴۴
جدول ۳-۲ | معادلات شرایط تکیه گاهی ساده و گیردار برای نانو ورق مستطیلی کیرشهف ۵۳
جدول ۳-۳ | معادلات شرایط مرزی برای تکیه گاه های مختلف در نانو ورق مستطیلی میندلین ۵۷
جدول ۶-۱ | خواص و ثابت های ماده و سطح مربوطه ۱۲۱
جدول ۶-۲ | همگرایی فرکانس اساسی برای تعداد نقاط مختلف شبکه بندی ۱۲۲
جدول ۶-۳ | همگرایی بار بحرانی کمانش برای تعداد نقاط مختلف شبکه بندی ۱۲۲
جدول ۶-۴ | سه فرکانس طبیعی اول نانو ورق حلقه ای ۱۲۳
جدول ۶-۵ | سه بار بحرانی کمانش اول نانو ورق حلقه ای ۱۲۳
جدول ۶-۶ | فرکانس طبیغی نانو تیر با ضخامت های مختلف بدست آمده توسط مدل کلاسیک و غیر کلاسیک ۱۳۴
جدول ۶-۷ | مقایسه فرکانس طبیعی بدست آمده از حل دقیق و تحلیل اجزاء محدود نانو ورق مستطیلی ۱۴۷
جدول ۶-۸ | چهار بار بحرانی کمانش نانو فیلم برای شرایط تکیه گاهی مختلف ۱۵۲

فهرست شکل‌ها

شکل ۲-۱ | نقاط بحرانی در مسیر حل معادلات تعادل یک سازه ۲۱
شکل ۲-۲ | تصویر نمادین روش طول کمان در فضای پارامتری دو بعدی ۲۲
شکل ۲-۳ | نقاط نمونه در گسسته سازی متناوب ۳۶
شکل ۲-۴ | تابع متناوب $sinc$ برای $n = 8$ ۳۶
شکل ۳-۱ | شکل نمادین نانوتیر با سطح مقطع مستطیلی با در نظر گرفتن تنش سطحی ۴۴
شکل ۳-۲ | شکل نمادین نانو ورق مستطیلی با در نظر گرفتن تنش سطحی ۵۱
شکل ۳-۳ | شکل نمادین نانو ورق متقارن دایره ای با در نظر گرفتن تنش سطح ۵۸
شکل ۳-۴ | تصویر نمادین سطح مقطع نانولوله تک دیواره به همراه بارگذاری عرضی ۶۴
شکل ۴-۱ | شبکه بندی ورق دایره ای و حلقوی ۷۰
شکل ۴-۲ | روش جایگذاری شرایط مرزی در معادلات ۷۳
شکل ۴-۳ | شکل نمادین یک خازن الکترو استاتیکی با صفحات الکترود متقارن ۷۹
شکل ۴-۴ | شکل نمادین برای ورق مستطیلی تحت تاثیر بار الکترو استاتیکی ۸۰
شکل ۴-۵ | نمونه نمودار شاخه ای پس کمانش و تاثیر نقص در آن ۸۵
شکل ۴-۶ | شبه کد برای حل پس کمانش به کمک روش تعمیم یافته مسئله مقادیر ویژه ۸۷
شکل ۴-۷ | الگوریتم حل پس کمانش و ارتعاشات تحت آن به کمک روش تعمیم یافته مسئله مقادیر ویژه ۸۸
شکل ۴-۸ | الگوریتم اصلاح شده طول کمان برای حل پس کمانش و ارتعاشات تحت آن ۸۹
شکل ۴-۹ | شکل نمادین پاسخ فرکانسی ارتعاشات آزاد و واداشته سازه ی غیر خطی ۹۱
شکل ۴-۱۰ | شبه کد برای بدست آوردن پاسخ زمانی ارتعاشات سیستم ۹۴
شکل ۴-۱۱ | الگوریتم تابع پرتابی برای یافتن پاسخ فرکانسی ۹۷
شکل ۵-۱ | نحوه مش بندی و مدل سازی اجزاء محدود نانو ورق همراه با تنش های سطحی آن ۱۰۶
شکل ۵-۲ | نگاشت ایزوپارامتریک از دستگاه مرجع المان به دستگاه مختصات اولیه ۱۱۱
شکل ۵-۳ | نمونه ای از المان های ۸ نقطه ای زیرپارامتریک و ایزوپارامتریک درون یابی شده بر اساس چند جمله ای لاگرانژ ۱۱۱
شکل ۵-۴ | نمونه توابع پیوسته از مرتبه صفر (چپ) و اول (راست) ۱۱۲
شکل ۵-۵ | المان مثلثی C^1 به همراه درجات آزادی آن، تعریف شده در دستگاه مختصات بی بعد مساحتی ۱۱۵
شکل ۶-۱ | تغییرات نسبت خیز نانو ورق با تغییر ضخامت آن برای شرایط مرزی مختلف و R_2/h های مختلف ۱۲۴
شکل ۶-۲ | تغییرات نسبت بار بحرانی کمانش نانو ورق با تغییر ضخامت آن برای شرایط مرزی مختلف و R_2/h های مختلف ۱۲۴
شکل ۶-۳ | تغییرات نسبت فرکانس طبیعی نانو ورق با تغییر ضخامت آن برای شرایط مرزی مختلف و R_2/h های مختلف ۱۲۵
شکل ۶-۴ | تاثیر ثوابت لامه سطح بر روی خمش، بار بحرانی کمانش و فرکانس طبیعی نانو ورق دایره ای با شرایط مرزی مختلف ۱۲۶
شکل ۶-۵ | تاثیر تنش پسماند سطحی τ^s بر روی خمش، بار بحرانی کمانش و فرکانس طبیعی نانو ورق دایره ای با شرایط مرزی مختلف ۱۲۷.
شکل ۶-۶ | تاثیر مقدار چگالی سطحی ρ^s بر روی فرکانس طبیعی نانو ورق دایره ای ۱۲۷
شکل ۶-۷ | تاثیر تنش پسماند (راست) و ثوابت الاستیک سطح (چپ) بر روی شکل خیز نانو ورق با ابعاد و شرایط تکیه گاهی مختلف در بارگذاری ثابت ۱۲۸
شکل ۶-۸ | مقایسه خیز ورق مدل شده با نتایج تجربی در تحت نیروی الکترو استاتیکی در ولتاژ های مختلف ۱۲۹
شکل ۶-۹ | تاثیر ضخامت نانو ورق بر ولتاژ بی بعد بحرانی پولین ۱۳۰
شکل ۶-۱۰ | تاثیر ضخامت نانو ورق بر فشار هیدرو استاتیک بی بعد بحرانی پولین ۱۳۰

شکل ۶-۱۱ | تاثیر مدول الاستیسیه سطح بر روی ولتاژ بحرانی بی بعد شده پولین در نانو ورق ۱۳۱
شکل ۶-۱۲ | تاثیر مدول الاستیسیته سطح بر روب فشار هیدرو استاتیکی بی بعد شده بحرانی پولین در نانو ورق ۱۳۲
شکل ۶-۱۳ | تاثیر تنش پسماند سطح بر روی ولتاژ بحرانی بی بعد شده پولین در نانو ورق..... ۱۳۲
شکل ۶-۱۴ | تاثیر تنش پسماند سطح بر روی فشار هیدرو استاتیکی بحرانی به بعد شده پولین در نانو ورق ۱۳۲
شکل ۶-۱۵ | تغییرات ولتاژ بی بعد پولین در نانو ورق بر حسب ضخامت آن برای دو نوع ماده مختلف ۱۳۳
شکل ۶-۱۶ | تغییرات فشار هیدرو استاتیکی بی بعد پولین در نانو ورق بر حسب ضخامت آن برای دو نوع ماده مختلف..... ۱۳۳
شکل ۶-۱۷ | مقایسه مدل های کلاسیک و غیر کلاسیک نانو تیر در پیشبینی فرکانس طبیعی آن ۱۳۵
شکل ۶-۱۸ | پاسخ فرکانسی غیر خطی برای نانو تیر با ضخامت و شرایط تکیه گاهی مختلف ۱۳۵
شکل ۶-۱۹ | پاسخ فرکانسی نانوتیر برای نسبت های مختلف طول به ضخامت ۱۳۶
شکل ۶-۲۰ | پاسخ فرکانسی نانو تیر با خواص مختلف سطحی $\lambda^s + 2\mu^s$ ۱۳۷
شکل ۶-۲۱ | پاسخ فرکانسی نانو تیر با خواص مختلف سطحی τ^s ۱۳۷
شکل ۶-۲۲ | پاسخ فرکانسی نانو تیر با خواص مختلف سطحی ρ^s ۱۳۸
شکل ۶-۲۴ | پاسخ فرکانس–دامنه نانولوله تک دیواره با تکیه گاه ساده با استفاده از تعداد توابع پایه در روش گلرکین عددی ۱۳۹
شکل ۶-۲۳ | تاثیر شرایط مرزی بر پاسخ فرکانس–دامنه نانولوله تک دیواره ۱۳۹
شکل ۶-۲۵ | تاثیر پارامتر غیر موضعی بر روی پاسخ فرکانس–دامنه نانولوله تک دیواره ۱۴۰
شکل ۶-۲۶ | تاثیر نسبت هندسی L/d بر روی پاسخ فرکانس–دامنه نانولوله تک دیواره..... ۱۴۱
شکل ۶-۲۷ | تاثیر پارامتر غیر موضعی بر روی مسیر پس کمانش نانو لوله تک دیواره برای شرایط مرزی مختلف ۱۴۲
شکل ۶-۲۸ | تاثیر نسبت طول به قطر بر روی مسیر پس کمانش نانو لوله تک دیواره برای شرایط مرزی مختلف ۱۴۴
شکل ۶-۲۹ | تاثیرات گرمایی بر روی مسیر پس کمانش نانو لوله تک دیواره برای شرایط مرزی مختلف در دو محیط دما بالا و دما پایین . ۱۴۴
شکل ۶-۳۰ | تاثیر پارامتر غیر موضعی بر روی فرکانس های طبیعی نانو لوله تک دیواره کمانش یافته برای شرایط مرزی مختلف ۱۴۵
شکل ۶-۳۱ | تاثیر نسبت طول به قطر بر روی فرکانس های طبیعی نانو لوله تک دیواره کمانش یافته برای شرایط مرزی مختلف..... ۱۴۵
شکل ۶-۳۲ | تاثیرات گرمایی بر روی فرکانس های طبیعی نانو لوله تک دیواره کمانش یافته برای شرایط مرزی مختلف در دو محیط دما بالا و دما پایین ۱۴۶
شکل ۶-۳۳ | مقایسه نسبت فرکانسی بدست آمده از حل اجزاء محدود و حل دقیق ارائه شده توسط لو و همکارانش..... ۱۴۷
شکل ۶-۳۴ | مقایسه نسبت خیز بدست آمده از حل اجزاء محدود و حل دقیق ارائه شده توسط لو و همکارانش ۱۴۷
شکل ۶-۳۵ | تغییرات نسبت خیز نانو ورق به ضخامت آن برای مقادیر مختلف طول به ضخامت ۱۴۸
شکل ۶-۳۶ | تغییرات نسبت فرکانسی نانو ورق به ضخامت آن برای مقادیر مختلف طول به ضخامت ۱۴۹
شکل ۶-۳۷ | تغییرات نسبت خیز نانو ورق به ضخامت آن برای مقادیر مختلف پارامتر های سطحی و شرایط مرزی مختلف..... ۱۴۹
شکل ۶-۳۸ | تغییرات نسبت فرکانسی نانو ورق به ضخامت آن برای مقادیر مختلف پارامتر های سطحی و شرایط مرزی مختلف ۱۵۰
شکل ۶-۳۹ | تغییرات نسبت فرکانسی نانو ورق به ضخامت آن برای مقادیر مختلف ρ^s و شرایط مرزی مختلف ۱۵۰
شکل ۶-۴۰ | مقایسه چهار فرکانس طبیعی اول فیلم دو سر گیردار کمانش یافته با نتایج نایفه و همکارانش ۱۵۱
شکل ۶-۴۱ | مسیر پس کمانش بی بعد شده برای نانو فیلم با ضخامت های مختلف..... ۱۵۳
شکل ۶-۴۲ | تغییرات دو فرکانس طبیعی بی بعد اول نانو فیلم کمانش یافته با افزایش بار بی بعد محوری برای ضخامت های مختلف آن... ۱۵۴
شکل ۶-۴۳ | مسیر پس کمانش بی بعد نانو فیلم برای مقادیر مختلف $\lambda^s + 2\mu^s$ ۱۵۵
شکل ۶-۴۴ | تغییرات فرکانس طبیعی بی بعد اول نانو فیلم کمانش یافته با تغییر بار محوری بی بعد آن برای مقادیر مختلف $\lambda^s + 2\mu^s$ ۱۵۵
شکل ۶-۴۵ | مسیر پس کمانش بی بعد نانو فیلم برای مقادیر مختلف τ^s ۱۵۶
شکل ۶-۴۶ | تغییرات فرکانس طبیعی بی بعد اول نانو فیلم کمانش یافته با تغییر بار محوری بی بعد آن برای مقادیر مختلف τ^s ۱۵۶
شکل ۶-۴۷ | تغییرات فرکانس طبیعی بی بعد اول نانو فیلم کمانش یافته با تغییر بار محوری بی بعد آن برای مقادیر مختلف ρ^s ۱۵۷

فهرست نشانه‌ها

نمادهای ریاضی

درایه ماتریس، پارامتر، عدد	$A_{ij}, \sigma_{12}, \lambda$
بردار (حروف کلف و کج نویس)	$\boldsymbol{U}, \boldsymbol{\sigma}, [\ \ ]$
ماتریس (حروف کلف و معمولی)	$\mathbf{A}, \boldsymbol{\sigma}, [\ \ ]$
ترانهاده ماتریس/بردار	$\mathbf{A}^T, \boldsymbol{U}^T, [\ \ ]^T$
معکوس ماتریس	$\mathbf{A}^{-1}, [\ \ ]^{-1}$
نرم ماتریس/بردار	$\| \ \ \|$
ر. ک. جدول ۲-۱	$\oplus, \otimes, \diamond, \circ, vec(\ \ )$
ماتریس عملگر مشتق گیر مرتبه r یک بعدی روی x	$\boldsymbol{\mathcal{D}}_x^{(r)}$
ماتریس عملگر انتگرال گیر یک بعدی روی x	$\boldsymbol{\mathcal{S}}_x$
ماتریس همانی $(n \times n)$	$\mathbf{I}_n$
فضای برداری n روی مجموعه اعداد حقیقی	$\mathbb{R}^n$
مشتق تابع نسبت به مکان یا راستا	$\partial f(x_i,t)/\partial x_i = f_{,x_i} = f_{,i}$
مشتق تابع نسبت به زمان	$\partial f(x_i,t)/\partial t = \dot{f}, \qquad \partial^2 f(x_i,t)/\partial t^2 = \ddot{f}$
تغییرات فانکشنال	δ

پارامترها، بردار ها و ثوابت مکرر متن

مؤلفه های تنسور تنش	σ_{ij}
مؤلفه های تنسور کرنش	ε_{ij}
ماتریس ژاکوبین	$\mathbf{J}$
ماتریس اینرسی	$\mathbf{m}, \mathbf{M}, \mathbb{M}$
ماتریس سفتی	$\mathbf{k}, \mathbf{K}, \mathbb{K}$
ماتریس سفتی هندسی	$\mathbf{k}_G, \mathbf{K}_G$
بردار سفتی های غیر خطی	$\boldsymbol{r}_{nl}, \boldsymbol{R}_{nl}$
ماتریس سفتی های غیر خطی	$\mathbf{N}_1, \mathbf{N}_2$
پارامترهای مادی (ر.ک. جدول ۳-۱)	$E, E^s, \nu, \nu^s, \rho, \rho^s, \lambda, \lambda^s, k_s, \tau^s$
پارامتر غیر موضعی	$\alpha = (e_0 a)^2$

چکیده

توسعه روش‌های محاسباتی برای تحلیل رفتار غیرخطی نانوسازه‌ها بر اساس مکانیک محیط های پیوسته تعمیم یافته

وحید محمدی

همگام با پیشـرفت های سـریع نانو مکانیک، نیاز به روشـی جامع، کارآمد و قابل اعتماد برای پیش بینی رفتار نانوسـازه های غیر خطی وجود دارد. در حالیکه تعداد بسـیار زیادی تکنیک عددی برای تحلیل نانو سـازه ها در رژیم غیر خطی در دبیره وجود دارد، این تحقیق سعی دارد که مفاهیم بنیادی ریاضیات کاربردی را به نانو مکانیک پیوند دهد. روش های عددی ارائه شده در این رساله دو ویژگی اساسی دارند: اولا تمامی روش های عددی ارائه شده باید بتواند برای هر سازه ای حتی در فضای چند بعدی قابل اعمال باشد؛ و ثانیاً راندمان بالایی داشته باشد. برای این هدف، تئوری ماتریس ها و فرآیند بردار سـازی اسـتفاده شـد. بر همین اسـاس، بسـیاری از روش های عددی قدیمی (ولی کارآمد) دوباره بر اساس تئوری ماتریس ها توسعه یافته و بازنویسی شده اند. همچنین بعضی از روش های دیگری بر پایه ماتریس ها نیز تولید شده اند.

همچنین، نانو سازه ها، به خاطر ابعاد کوچک‌شان پدیده های غیر عادی از خود نشان می دهند. بر خلاف مدل های کلا سیک مکانیک محیط های پیو سته، شواهد آزمایشگاهی نشان می دهد که رفتار سازه ها کاملاً به ابعاد آن وابسته می با شد. برای رفع این نقص، تئوری های تعمیم یافته مکانیک محیط های پیوسته ارائه شده است. از مهمترین این تئوری ها، تئوری تنش سطحی گورتین-موردوک و تئوری الاستیسیته غیر موضعی می باشد که نتایج آن نسبت به داده های آزمایشگاهی قابل قبول می با شد. در تحقیق پیش رو، بر اساس این دو تئوری و با در نظر گرفتن کرنش های غیر خطی ون کارمن، معادلات حاکم برای انواع مختلفی از نانوسازه ها بدست آورده شد. از دیگر نوآوری های این رساله، فرمول بندی جدید اجزاء محدود نانو سازه ها می با شد که در آن اثر انرژی های سطحی نیز در نظر گرفته شده است. این فرمول بندی غیر خطی اجزاء محدود جدید، به صورت مستقیم از روی فانکشنال انرژی بدست آورده شد و هم خوانی نتایج آن با حل دقیق تحلیلی بررسی شده است.

این تحقیق تعداد زیادی از تحلیل های سازه های غیر خطی را برای بار گذاری های متنوع و شرایط تکیه گاهی مختلف بررسی می کند. همچنین سعی شده است که تمامی استراتژی های ارائه شده برای حل پدیده های مختلف مستقل از نوع گسسته سازی و جامع باشند. ارتعاشات خطی و غیر خطی، کمانش، پس کمانش و ارتعاشات تحت آن، ناپایداری کششی سازه که در سیستم های نانو/میکرو الکترو مکانیکی کاربرد گسترده ای دارند، از پدید های بررسی شده در این رساله می باشند.

در انتها نیز برای نشـان دادن جامعیت و کارآیی بالای روش های عددی مطرح شـده، نتایج عددی متنوعی ارائه گردید. در این نتایج تاثیر ابعاد سـازه های نانومتری روی رفتار غیر خطی آن ها بررسـی شـده اسـت؛ همچنین تاثیر تنش های سـطحی و پارامتر های مرتبط با آن و همچنین اثرات غیر موضعی بودن تنش، از روی نتایج و نمودار های ارائه شده، مورد بحث قرار گرفته شده است.

واژه‌هاي كليدی: نانوسازه ها، تحلیل اجزاء محدود، ارتعاشات غیر خطی، پس کمانش، ناپایداری کششی سطح، تکنیک های حل عددی

Abstract

DEVELOPMENT OF COMPUTATIONAL TECHNIQUES FOR THE NONLINEAR ANALYSIS OF NANOSTRUCTURES BASED ON GENERALIZED CONTINUUM MECHANICS

Vahid Mohammadi

With the rapid development of nanomechanics, it is necessary to find a general, efficient and reliable method for predicting the nonlinear behavior of nanostructures. Although there are many numerical techniques in the literature for the analysis of structures in the nonlinear regime, the present thesis aims at linking the fundamental concepts of applied mathematics to the nanomechanics. In this thesis, some numerical methods are developed which have two features: first, all of them are developed to be applied to any kind of structure even in *n*-dimensional space; second, they are computational effective. To this end, the matrices theory and vectorization process are used. In this regard, many of the classic (but efficient) numerical methods are developed and reorganized based on the matrix relations. Also, some new matrix-based methods are proposed.

In addition, nanostructures experience some extraordinary phenomena due to their small scales. It is experimentally shown that in contrast to the mechanical behavior of structures at macroscale, the mechanical behavior of micro- and nanostructures is size-dependent. To capture the size effects, the modified continuum mechanics theories are developed. Of these theories, the Gurtin-Murdoch surface stress theory and the Eringen nonlocal theory have the capability to predict the experimental results. In this research, based on these theories and by considering the von Karman hypothesis, the governing equations of different kinds of nanostructures are derived. The other novelty of this thesis is the new finite element (FE) formulation of the nanostructures in which the surface energies are taken into account. This novel nonlinear FE formulation is directly obtained from the energy functional. Moreover, the good agreement of the FE results with the exact results is investigated.

Several nonlinear analyses for various nanostructures with different boundary conditions and subjected to different loading conditions are conducted. All of the presented solution strategies for different phenomena are general and independent of discretization type. Linear and nonlinear free vibrations, buckling, postbuckling, vibrations around the postbuckling configurations and pull-in instability, which are of high importance in nanoelectromechanical systems (NEMS), are studied herein.

At last, to reveal the generality and efficiency of the proposed numerical methods, diverse numerical results are presented. In the numerical results, the effects of dimension of the nanostructures on their nonlinear behavior are investigated. Furthermore, the influences of surface stress and related parameters, and the nonlocal effects on the results are analyzed.

Keywords: Nano-structures, Finite Element Analysis, Nonlinear Vibration, Post-buckling, Pull-in Phenomena, Numerical Techniques, Solution Strategies

فصل۱ پیشگفتار

فناوری نانو با سرعتی باور نکردنی در حال پیشرفت می باشد؛ جرقه ای که در سال **۱۹۵۹** میلادی با سخنرانی یک دانشمند[1] آغاز شده بود، در دو دهه پیش با کشف نانولوله[2] ها [1]، با ابعادی نانومتری (برابر با 10^{-9} متر) و خواص مکانیکی باور نکردنی، شعله ور شد و تا امروز با سرعت در حال پیشروی است. فناوری که به اعتقاد دانشمندان، می تواند فناوری های ساختی و زیرساختی را از دیدگاه انرژی و حفظ منابع بهبودی شگرف دهد و انقلابی در همه حوزه های علوم و مهندسی ایجاد نماید.

نانو مکانیک محاسباتی، به عنوان یکی از حوزه های مهم و چالشی در فناوری نانو مطرح می باشد که به طور همزمان در سه حوزه ریاضیات، علوم کامپیوتر و نانو مکانیک فعالیت دارد. عموماً مکانیک پدیده ها و ساختار هایی در ابعاد نانو، به کمک یک مدل ریاضی بیان می شوند؛ این مدل می تواند از مکانیک کوانتوم به کمک انرژی های بین اتمی و یا از تئوری های مکانیک محیط های پیوسته، بصورت معادلات دیفرانسیل جزئی باشد. سپس در حوزه ی آنالیز عددی، این معادلات به شکلی تبدیل می شوند که برای کامپیوتر مناسب باشند که این مرحله به گسسته سازی موسوم است. در این مرحله با تقریب زدن های توابع بصورت گسسته، معادلات دیفرانسیل به جبری تبدیل می شوند. در نهایت، دستگاه معادلات به کمک یک کد کامپیوتری حل می گردد. در حال حاضر نانو مکانیک محاسباتی با چالش هایی در هر کدام از این حوزه ها مواجه می باشد که به صورت گسترده فعالیت شماری از محققین را به خود اختصاص داده است.

در نیمه دوم سده گذشته، پیشرفت علوم الکترونیک و کامپیوتر و ساخت کامپیوتر های با قدرت پردازشی بالاتر، تاثیر به سزایی در پیشرفت مکانیک محاسباتی گذاشت. سیستم های پیچیده ای که روش های معمول تحلیلی به هیچ عنوان قادر به حل آن نبودند، به طور موفقیت آمیز توسط ابزارهایی که مکانیک محاسباتی آن ها را فراهم نموده بود، حل شدند. بعد از ظهور فناوری نانو و نانو مکانیک، ورود تئوری های دیگری همچون مکانیک کوانتوم و مولکولی به آن، پهنه فعالیت مکانیک محاسباتی را بیش از پیش گسترده تر و مهم تر ساخت. با این حال تا به امروز، محدودیت های ابزارهای پردازشی به عنوان چالشی اساسی در نانو مکانیک محاسباتی مطرح می باشد و محققین این حوزه مجبور به ساده سازی تئوری ها با از دست دادن کمترین دقت هستند.

از دیدگاه مهندسی مکانیک، کلید ورود به حوزه فناوری نانو، شناخت دقیق رفتار مکانیکی مواد، ساختارها و سازه ها در ابعاد نانومتر می باشد. در واقع، ابعاد، منشأ اثرات فیزیکی جدیدی عمدتاً متاثر از غلبه خواص کوانتومی بر خواص کلاسیک می شود که تئوری

---

[1] "*There's Plenty of Room at the Bottom*" , Richard Feynman, 1959

[2] nanotube

های معتبر مکانیک کلاسیک را به چالش می کشد؛ چرا که اساس مکانیک محیط های پیوسته کلاسیک بر پایه فرضیاتی استوار می با شد که با ابعاد اتمی در تناقض آ شکار می با شند. با این و صف، روش ها و تئوری های کلا سیک مهند سی مکانیک که طی دهه ها، توسعه یافته اند، در ابعاد نانومتر معتبر نمی باشند. بر همین اساس، روش های دیگری از جمله مکانیک کوانتومی و شبیه سازی مولکولی برای غلبه کردن بر این مشـــکل مورد اســـتفاده قرار گرفته اند که هر کدام از آنها محدودیت های خاص خود را از نظر زمانی و یا ابعادی دارند. به خاطر در د سترس بودن پتانسیل بین اتمی دقیق برای بسیاری از مواد، شبیه سازی مولکولی کلا سیک برای بررسی رفتار های پیچیده ســـاختارها و مواد در این ابعاد مورد توجه بیشـــتری قرار گرفته اســـت، هر چند این روش نیز محدودیت زیادی دارد. تا به امروز، بررسی نانو مکانیکی یک ساختار با ابعاد چند میکرون، که خود شامل میلیارد ها اتم می شود، برای شبیه سازی مولکولی بسیار سنگین می با شد. همین م شکلات، محققان را به سوی ابداع و یا ا صلاح روش های دیگر به ویژه تئوری های تعمیم یافته مکانیک محیط های پیوسته کشاند. روش هایی که پیش از مطرح شدن در فناوری نانو نیز وجود دا شته اند و در مسائلی چون بررسی رشد ترک، مرز بین دو ماده مختلف و مواد دانه ای کاربرد داشته اند. از مهم ترین این تئوری ها، تئوری های غیر موضعی در الاستیسیته و تئوری الاستیسیته تنش سطحی می باشند که توانسته اند با دقت مناسب با داده های آزمایشگاهی مطابقت داشته باشد [2 و 3].

نانو مکانیک محاســـباتی، در حوزه ریاضـــیات، عموماً با معادلات دیفرانســـیل جزئی، جبر خطی، و تحلیل عددی ســـر و کار دارد. در مکانیک محا سباتی کلا سیک روش های سنتی و محبوب اجزاء محدود، اختلاف محدود و المان مرزی از دیگر روش ها متداول تر می باشـــند که با ورود دنیای نانو به آن، با توجه به اصـــلاحات صـــورت گرفته در تئوری های کلاســـیک، این روش های عددی نیز نیازمند تغییرات و یا ا صلاحاتی می گردند. علاوه بر این، تو سعه و فراگیر شدن زبان های برنامه نویسی سطح بالا[1] و هم چنین تولید زبان های برنامه نویسی بر پایه جبر ماتریسی، باعث دگرگونی هایی در این حوزه شده ا ست. تو سعه روش های کلا سیک به فضاهای چند بعدی، افزایش راندمان محاسباتی با استفاده از عملگر های ماتریسی و الگوریتم های جدید پایه ای و به کمک اصول بنیادین جبر خطی، همگی از چالش هایی است که در این حوزه ادامه دارد.

افقی که فناوری نانو برای آینده تکنولوژی تر سیم کرده، باعث جذب و سرمایه گذاری بسیاری از ک شور ها در این حوزه شده ا ست. کشور عزیزمان، ایران نیز همگام با کشور های پیشرفته دنیا، در این عرصه قدم نهاد و هم اکنون جایگاه عالی هفتم جهان را در سال ۱۳۹۲

[1] high-level programming language

به خود اختصـاص داده اسـت. در این حوزه، نانو مکانیک و توسـعه ابزارهای محاسـباتی برای تحلیل در ابعاد نانومتر، می تواند منجر به توسعه تمام شاخه های مرتبط با این فناوری گردد.

۱-۱ مروری بر تئوری های مکانیک محیط های پیوسته تعمیم یافته

نانوسازه و یا مواد نانو مقیاس، موادی هستند که ابعاد آن ها فراتر از مقیاس نانومتر (بین ۱ تا ۱۰۰ نانومتر) نباشد. مهم ترین نانوسازه ها، نانو تکه[1]ها، نانو سـیم[2] ها، نانو فیلم[3] ها، نانولوله ها، نانوتیر[4] ها و نانو ورق[5] ها می باشـند. در واقع آنها از لحاظ ابعادی سـازه هایی بین ابعاد اتمی/مولکولی و میکرو می باشـند. با سـر هم کردن این المان ها، می توان نانو کامپوزیت ها، دسـتگاه های نانو و یا سـازه های نانو با کارکرد مورد نیاز تولید کرد. از مهم ترین حوزه های فناوری نانو، نانو مکانیک می باشد که هدف آن بررسی مکانیکی رفتار مواد و سازه ها در ابعاد نانومتر می باشد.

از آنجا که رفتار مواد در مقیاس نانو تفاوت آشـکاری با رفتار در مقیاس معمول دارد، روش های متنوع و جدیدی برای مطالعه رفتار مکانیکی آن ها در این مقیاس ابداع شـده اند که هر یک دارای مزایا و معایب خاص خود می باشـد. برای مثال روش های شـبیه سـازی اتمی/مولکولی می توانند با مدل کردن نیرو های بین اتمی/مولکولی، تک تک آن ها را در حین تغییر شـکل ماده مورد مطالعه قرار می دهند. اگر چه این روش می تواند تمامی جزئیات پدیده ها و پاسـخ گویی ماده را در اختیار محققین قرار دهد، اما با محدودیت های خاص خود مواجه می باشـد. این محدودیت ها، محدودیت های زمانی و ابعادی می باشـند. با توجه به بررسـی همه اتم ها در این روش، مقیاس زمانی از مرتبه فمتو ثانیه (10^{-15} ثانیه) و مقیاس طولی از مرتبه آنگسـتروم (10^{-10} متر) نمی تواند تجاوز کند. در نتیجه تنها می توان سـاختار هایی بسـیار کوچک را برای زمانی بسـیار کوچک مورد مطالعه قرار گیرند. با توجه به توان محاسـباتی کنونی، تنها می توان سیستم هایی در حدود میکرومتر (چند میلیارد اتم) و در بازه زمانی حدود میلی ثانیه مورد مطالعه قرار گیرد. هم چنین این روش خود نیاز

[1] nanoparticle

[2] nanowire

[3] nanofilm

[4] nanobeam

[5] nanoplate

به اطلاعات پتانسیل انرژی بین اتمی برای ماده مورد نظر دارد که خود به نوعی می تواند دقت مسئله و راحتی استفاده از آن را با چالش هایی مواجه می کند.

روش سنتی و استاندارد مطالعه رفتار اجسام، روش های مبتنی بر تئوری مکانیک محیط های پیوسته می باشد. مکانیک محیط های پیوسته کلاسیک، برای بیان حرکت و تغییر شکل یک محیط های پیوسته، تنها به دانستن موقعیت نقاط به صورت تابعی از زمان نیاز دارد. از قوانین بقای جرم و بقای مومنتوم خطی، به ترتیب برای تعیین مقادیر لحظه ای جرم و بردار موقعیت استفاده می کند و در نهایت به کمک قانون بقای مومنتوم زاویه ای تقارن تنسور تنش را حفظ می کند. با این حال این تئوری از فرضیات و ساده سازی هایی استفاده می کند که آن را در تحلیل محیط های پیوسته در ابعاد کوچک ناکارآمد می کند.

از فرضیات اساسی تئوری کلاسیک مکانیک محیط های پیوسته اصل کنش موضعی[1] می باشد. بر طبق این اصل قوانین بقاء برای هر ذره مادی از جسم و همچنین حالت آن، تنها به همسایگی کوچکی در اطراف آن بستگی دارد. از نتایج این فرض حذف برهم کنش داخل-اتمی[2] می باشد که برای مواد در ابعاد ماکرو نتایج خوبی را ارائه می دهد؛ اما در ابعاد کوچک و نزدیک اتمی، با توجه طول ساختاری جسم و پارامتر ساختاری بار، این تئوری ها نتایج قابل قبولی را ارائه نمی دهد. در این حالت اخیر، می توان گفت که پاسخ تک تک ذرات تشکیل دهنده جسم، رفتار کل جسم را شکل می‌دهند و اصل کنش موضعی در آن برقرار نمی باشد.

از ساده سازی های دیگری که در مکانیک کلاسیک محیط های پیوسته در نظر گرفته می شود، صرف نظر کردن از انرژی های آزاد سطح می باشد؛ مفهومی که نخستین بار توسط گیبس[3] [4] مطرح گردید. در واقع برای مسائلی که در ابعاد نانومتر مطرح می شوند، نسبت سطح به حجم بزرگ می باشد و در نتیجه اثرات انرژی سطح نمی تواند نادیده گرفته شوند. اثرات سطح آزاد (یا میانی) به راحتی در ابعاد اتمی قابل رویت بوده و به صورت مفصل توسط محققین بسیاری گزارش شده است [4-6]. در واقع تفاوت موضعی محیطی، در نزدیکی سطح، باعث می شود که وضعیت تعادل اتم های آن ناحیه نسبت به لایه های اتمی داخلی تر متفاوت شود. در نتیجه، انرژی این اتم ها، با اتم های بالک[4] متفاوت خواهد بود. این انرژی اضافی که مربوط به اتم های سطح می شود را انرژی آزاد سطح می نامند. همچنین، خواص ماده، که به وضعیت قرار گیری اتم ها و انرژی آن ها حساس می باشد، تحت تاثیر انرژی آزاد سطح می باشد. برای

---

[1] principle of local action

[2] inter-atomic interactions

[3] J. Willard Gibbs

[4] bulk

یک المان مادی که در آن تعداد اتم های نزدیک به سطح در مقابل تعداد کل اتم های ماده کم می باشد (مثلا در ابعاد ماکرو)، اثر انرژی های سطحی قابل چشم پوشی بوده و معمولاً در نظر گرفته نمی شود؛ ابعادی که در آن ها مدل های مبتنی بر مکانیک محیط های پیوسته کلاسیک کاملاً مناسب می باشد.

با توجه به ضعف تئوری کلاسیک محیط های پیوسته در پیش بینی پاسخ سازه در ابعاد کوچک، ارائه تئوری های تعمیم یافته محیط های پیوسته[1] ضروری به نظر می رسد. تئوری های تعمیم یافته مختلفی مثل تئوری های ریزساختاری یا قطبی[2] ، تئوری مرتبه بالای گرادیانی[3] تنش و کرنش با دامنه عملکرد مختلف ابعادی توسط محققین بزرگ علم مکانیک معرفی شده اند. اما در این تحقیق با توجه به بررسی ساختار های با ابعاد نانومتر و با توجه به ضعف های مطرح شده تئوری کلاسیک محیط های پیوسته، دو تئوری تعمیم یافته مطرح می شود؛ تئوری غیر موضعی الاستیسیته و تئوری الاستیسیته تنش سطحی که در ادامه به تاریخچه دبیره این دو پرداخته می شود.

۱-۱-۱ تئوری های غیر موضعی الاستیسیته

تئوری مکانیک محیط های پیوسته غیر موضعی[4] به صورت رسمی، برای اولین بار توسط ارینگن[5] و ادیلن[6] [7] برای الاستیسیته غیر موضعی مطرح شد. در این تئوری رابطه ساختاری ماده که در تئوری های کلاسیک به صورت موضعی بود، به کل دامنه جسم گسترش می یابد. در واقع در این تئوری، برای بدست آوردن مقدار میدان تنش در یک نقطه، باید از میدان کرنش در تمامی نقاط مورد استفاده قرار گیرد. بر همین اساس، روابط به صورت انتگرالی-دیفرانسیلی روی دامنه جسم بوده و طول مشخصه نیز به صورت یک پارامتر ماده، وارد معادلات می شود. گسترش و بازنگری این تئوری تا سال ۱۹۷۶ در کتاب مکانیک محیط های پیوسته ارینگن [8] موجود است. پس از آن نیز این تئوری توسط خود ارینگن [9 و 10] و دیگران در حال گسترش و تکامل است.

---

[1] generalized continuum theories

[2] micro-structural (polar) theories

[3] higher order Gradients theories

[4] non-local continuum mechanics theory

[5] A. Cemal Eringen

[6] D. G. B. Edelen

این تئوری در مسائل با مقیاس میکرو و نانو متر توجه بسیاری را در بین محققین حوزه فناوری نانو به خود معطوف کرده است. محققین بسیاری از این تئوری ها در حل مسائل گوناگون در این حوزه برای نزدیک تر کردن مدل های ارائه شده به نتایج آزمایشگاهی استفاده کرده اند.

پدیسون[۱] و همکارانش [11] نشان دادند این تئوری قادر است با دقت مناسب رفتار مکانیکی نانوسازه ها را پیش بینی کند. همچنین آن ها مدل تیر اویلر- برنولی را با در نظر گرفتن الاستیسیته غیر موضعی بدست آوردند و مشکلات شرایط مرزی آن مورد بحث قرار دادند و چندین نوع حل بسته[۲] ارائه کردند و تلاش نمودند بهترین بازه تاثیرات غیر موضعی را برای نانوعملگرها[۳] تعیین کنند. در همان سال، کمانش محوری نانولوله های چند لایه کربنی بر اساس مدل غیر موضعی تیر توسط سوداک[۴] [12] ارائه شد. چن[۵] و همکارانش [13] نشان داد که نتایج روش غیر موضعی سازگاری خوبی با نتایج دینامیک مولکولی دارد. سپس ونگ[۶] [14] از معادلات الاستیسیته غیر موضعی ساختاری برای مطالعه ارتعاشات و کمانش نانولوله های کربن با کمک گرفتن از تئوری های تیر و پوسته استفاده کرد.

ردی[۷] [15] با استفاده از روابط ترکیب شده ی دیفرانسیل غیر موضعی ارینگن، تئوری های تیر مختلف موجود شامل اویلر برنولی، تیموشنکو، ردی و لوینسون را فرمول بندی کرد. سپس معادلات حرکت تئوری های غیر موضعی را بدست آورد و حل های تحلیلی مربوط به کمانش، خمش و ارتعاشات را انجام داد و اثر رفتار غیر موضعی را روی تغییر شکل ها، بارهای کمانش و فرکانس های طبیعی بررسی کرد.

کی[۸] و همکارانش [16] ارتعاشات آزاد غیر خطی نانولوله های دو دیواره قرار گرفته در بستر الاستیک را بر اساس تئوری الاستیسیته غیر موضعی ارینگن و کرنش های غیر خطی ون کارمن[۹] بررسی کردند. معادلات دیفرانسیل و شرایط مرزی با استفاده از اصل همیلتون

---

1 J. Peddieson
2 closed form solution
3 nano actuator
4 L.J. Sudak
5 Y. Chen
6 Q. Wang
7 J. N. Reddy
8 L. L. Ke
9 von Karman