بسم الله الرحمن الرحيم

دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

دانشکده مهندسی هوافضا

پایان نامه کارشناسی ارشد

بررسی و آنالیز ترک در صفحات با ابعاد نانو بر مبنای روش اجزای محدود بسط‌یافته

استاد راهنما:

دکتر سعید ایرانی

گردآورنده:

امیراحمد حسیبی طاهری

گرایش:

سازه های هوایی

زمستان ۸۸

تقدیم به پدر و مادر عزیزم

با تشکر از استاد عالیقدرم دکتر سعید ایرانی که همواره از راهنمایی و تجارب ارزشمندشان بهرمند بوده و هستم.

با تشکر از دوست و همکار عزیزم آقای علی مهندسیان که به ثمر نشستن این کار جز با کمک ایشان امکان نداشت.

همچنین در اینجا جا دارد از همکاری صمیمانه آقای مهندس محمد جواد عبدالحسینی و آقای مهندس امین آقایی تشکر کنم که ایشان در نتیجه دادن این پایان نامه سهمی انکار ناپذیر داشتند.

چکیده:

نانو بعنوان رویکردی نوین در علم امروز ، یک فناوری به شدت میان رشته ای بوده که در علوم مختلف از محیط زیست و زمین شناسی تا مهندسی مکانیک و هوافضا کاربرد دارد. در سالهای اخیر با توجه به جایگاه فناوری نانو در سند جامع علمی کشور ، تحقیقات در این زمینه رشد روزافزونی داشته است.

توسعه مدلهای جدید عددی برای توصیف پدیده ها در مقیاس نانو همواره از دغدغه های محققین در این زمینه بوده است. از طرفی استفاده از مدل مکانیک محیط پیوسته کلاسیک بدلیل ضعف این روش در بیان پدیده ها در مقیاس ریز کارایی لازم را ندارد و از طرفی دیگر شبیه سازی های انجام شده توسط مدلهای مولکولی بسیار پر هزینه می باشد. از این رو در چند سال اخیر با استفاده از مدلهای چند مقیاسی و با تبادل اطلاعات بین دو یا چند مقیاس ، روشهای در مقیاس مختلف با یکدیگر مرتبط می شود و به صورت همزمان از چند مقیاس استفاده می گردد.

در این پایان نامه به بررسی و مدل کردن ترک ها در شبکه های اتمی با استفاده از یک روش چند مقیاسی ابداعی بر مبنای قاعده کوشی-بورن پرداخته می شود. در روش چند مقیاسی ارائه شده برای مدل کردن ترک از روش اجزای محدود بسط یافته که خود بعنوان یک روش نوپا برای مدلسازی ناپیوستگی ها در مواد بدون شبکه بندی مجدد است استفاده گردیده است. استفاده از این مدل ارائه شده در این پایان نامه هزینه های محاسباتی را به شدت کاهش می دهد.

کلیدواژه ها:

مدل چند مقیاسی، روش اجزای محدود بسط یافته، پتانسیل بین اتمی ، قاعده کوشی- بورن ، آنالیز ترک

فهرست مطالب

فصل اول ۱

مقدمه ۱

۱-۱ قرن ۲۱، قرن نانوتکنولوژی ۲

۱-۲ مدل های متداول برای بررسی پدیده های فیزیکی ۳

۱-۳ ضرورت ایجاد مدل های چند مقیاسی ۶

۱-۴ روش اجزای محدود بسط یافته ۸

۱-۵ سیمای کلی پایان نامه ۸

۱-۶ ترتیب فصول پایان نامه ۹

فصل دوم ۱۱

مقدمه ای بر مکانیک محیط های پیوسته کلاسیک ۱۱

۲-۱ تغییر شکل در مکانیک محیط های پیوسته ۱۲

۲-۲ اندازه گیری کرنش ۱۳

۲-۳ اندازه گیری تنش ۱۵

۲-۴ معادلات رفتاری ۱۷

۲-۴-۱ تنش و کرنش های مزدوج وتانسور الاستیک مرتبط: ۱۸

۲-۶ رابطهٔ میان تابع چگالی انرژی کرنشی و تانسورهای الاستیک ۲۱

۲-۶-۱ رابطهٔ میان تنش اول پایولا-کیرشف و گرادیان تغییر شکل: ۲۱

۲-۶-۲ رابطهٔ میان تنش دوم پایولا-کیرشف و کرنش گرین: ۲۲

۲-۷ خلاصه فصل: ۲۳

فصل سوم ۲۴
شبکه های اتمی ۲۴
۳-۱ قاعده کوشی- بورن ۲۵
۳-۱-۱ مقدمه ای بر قاعدهٔ کوشی-بورن ۲۵
۳-۱-۲ تعریف قاعدهٔ کوشی-بورن ۲۹
۳-۲ مدل فوق الاستیسیته ۳۱
۳-۳ پتانسیل های بین اتمی ۳۲
۳-۳-۱ فرم کلی پتانسیل های جفتیو پتانسیل های بس ذره ای ۳۳
۳-۳-۲ میدان های خارجی ۳۵
۳-۳-۳ برهم کنش های ۲ جفتی کوتاه برد و بلند برد ۳۶
۳-۳-۳-۱ برهم کنش های دور برد کولنی ۳۶
۳-۳-۳-۲ برهم کنش های کوتاه برد ۳۷
۳-۳-۳-۳ پتانسیل کره سخت ۳۷
۳-۳-۳-۴ پتانسیل چاه مربعی ۳۸
۳-۳-۳-۵ پتانسیل کره های نرم ۳۹
۳-۳-۳-۶ پتانسیل لنارد-جونز [۲۹] ۳۹
۳-۳-۳-۷ پتانسیل مورس ۴۱
۳-۳-۳-۸ محدودیت های توابع پتانسیل جفتی ۴۴
۳-۳-۳-۹ برهم کنش های بس ذره ای ۴۵
۳-۳-۳-۱۰ پتانسیل های اتم تعبیه شده (EAM) ۴۵
۳-۳-۳-۱۱ پتانسیل فینیس-سینکلر ۴۷
۳-۳-۳-۱۲ پتانسیل ساتن-چن ۴۸

۳-۳-۴ جایگاه اولیهٔ اتم ها ۵۰
۳-۵ خلاصه فصل: ۵۲
فصل چهارم ۵۴
روش اجزای محدود بسط یافته ۵۴
۴-۱ مدل اجزای محدود و کاربرد های آن ۵۵
۴-۱-۱ ضعف مدل اجزای محدود ۵۵
۴-۲ مدل اجزای محدود بسط یافته ۵۷
۴-۲-۱ تقسیم بندی واحد ۵۷
۴-۲-۲ ارائه یک مثال برای معرفی اجزای محدود بسط یافته ۵۹
۴-۲-۳ تاریخچه: ۶۱
۴-۳ اصول روش اجزای محدود بسط یافته ۶۵
۴-۳-۱ انتقال توابع غنی کننده ۶۷
۴-۴ اجزای محدود بسط یافته و تحلیل مساله ۶۸
۴-۴-۱ تابع تراز ۶۸
۴-۴-۲ فرایند کوپل کردن تابع تراز با XFEM ۷۴
۴-۴-۳ انتخاب توابع غنی سازی ۷۵
۴-۴-۴ چگونگی به روز شدن توابع LSM ۷۸
۴-۵ اعمال روش اجزاء محدود بسط یافته ۸۱
۴-۵-۱ توابع شکل ۸۱
۴-۵-۲ تقریب میدان جابجایی ۸۲
۴-۵-۳ محاسبه کرنش ها ۸۳
۴-۵-۴ ماتریس سختی [۷۳] ۸۵

۴-۵-۵ انتگرال گیری عددی ۸۵
۴-۶ در نظر گرفتن تغییر شکل های بزرگ ۸۷
۴-۶-۱ تغییر شکل های بزرگ در روش اجزای محدود ۸۷
۴-۶-۲ تغییر شکل های بزرگ در روش اجزای محدود بسط یافته ۹۱
۴-۷ خلاصه فصل: ۹۳
فصل پنجم ۹۴
مدل چند مقیاسی ارائه شده ۹۴
۵-۱ روشهای چند مقیاسی ۹۵
۵-۲ مدل اجزای محدود بسط یافته معادل شبکه بلوری ۹۷
۵-۳ الگوریتم روش چندمقیاسی ارائه شده ۹۹
۵-۴ مثال: ۱۰۰
۵-۴-۱ بررسی اعتبار روش چند مقیاسی ارائه شده با استفاده از حل دقیق ۱۰۰
۵-۴-۲ بکارگیری روش چندمقیاسی جدید در حالت بهینه (تاثیر ضریب شبکه) ۱۰۳
۵-۴-۳ تاثیر طول ترک در ماکزیمم تنش های حاصل در مقایسه با حالت الاستیک ۱۰۵
۵-۵ خلاصه فصل: ۱۱۱
فصل ششم ۱۱۲
خلاصه و نتیجه گیری ۱۱۲

فهرست شکلها

شکل ۳ ـ ۱: قاعدهٔ کشی-بورن فرض می کند که اگر نقطه ای مادی در محیط پیوسته تحت گرادیان تغییر شکل F قرار گیرد، شبکه تشکیل دهنده آن کریستال متعاقباً همان تغییر شکل را به خود خواهد رفت. ۳۰

شکل ۳ ـ ۲ نمایش بردارمختصه های فضایی و زاویه بین باند ها ۳۲

شکل ۳ ـ ۳: شکل کلی یک تابع پتانسیل بین اتمی همراه با ترم های دافع و جاذب آن ۳۴

شکل ۳ ـ ۴: شکل چاه در حالت ۱ بعدی برای شیب ای مختلف دیواره چاه ۳۵

شکل ۳ ـ ۵: (الف) پتانسیل کره سخت. (ب) پتانسیل چاه مربعی با فرض $\boldsymbol{\sigma 2 = 2\sigma 1 = 2\sigma}$ ۳۸

شکل ۳ ـ ۶: انرژی ذخیره شده و نیروی بین اتمی در پتانسیل لنارد-جونز ۴۰

شکل ۳ ـ ۷: انرژی ذخیره شده ونیروی بین اتمی در پتانسیل مورس..... ۴۳

شکل ۳ ـ ۸: (الف) نحوهٔ قرار گیری اتم ها در شبکهٔ FCC ، (ب) نحوهٔ قرارگیری اتم ها در شبکهٔ BCC ۵۱

شکل ۴ _ ۱ : مسایل دارای مرز داخلی (الف)شبکه بندی اجزا محدود با شبکه تطبیق یافته(ب)شبکه یکنواخت که گره های مشخص شده درجات آزادی اضافی دارند ۵۹

شکل ۴ _ ۲: عبور ترک از میان المان ۶۰

شکل ۴ _ ۳ مرز ناپیوستگی [۴۷] ۶۹

شکل ۴ _ ۴: نمایش ترک [۴۷]..... ۷۲

شکل ۴ _ ۵: غنی سازی ترک در مدل X-FEM [۴۷]..... ۷۵

شکل ۴ _ ۶ : به روز شدن توابع تراز [۴۷]..... ۷۹

شکل ۴ _ ۷: دیاگرام XFEM ۸۰

شکل ۵ـ ۱ : مدل اجزای محدود بسط یافته معادل شبکه بلوری ۹۷

شکل ۵ـ ۲ : مش بندی ترک در مدل ارائه شده ۱۰۱

شکل ۵ـ ۳ : نمودار تنش در راستای X در نرم افزار ارائه شده و مقایسه آن با نمودار تنش در دینامیک مولکولی MASS ۱۰۲

شکل ۵ـ ۴: نمودار تاثیر ضریب شبکه در میزان خطا..... ۱۰۴

شکل ۵ـ ۵ : مش بندی با طول ترک ۶/۰۶ نانومتر..... ۱۰۶

شکل ۵ـ ۶ : مش بندی یا ترک ۱۱/۸ نانومتری ۱۰۶

شکل ۵ـ ۷: مش ترک با طول ۱۷/۴۶ نانومتری ۱۰۷
شکل ۵ـ ۸: نمودار تنش با ترک ۶/۰۶ نانومتری..... ۱۰۸
شکل ۵ـ ۹: نمودار تنش با ترک ۱۱/۸ نانومتری ۱۰۸
شکل ۵ـ ۱۰: نمودار تنش با ترک ۱۷/۴۶ نانومتری..... ۱۰۹
شکل ۵ـ ۱۱: معادله بدست آمده روی نسبت طول ترک به صفحه..... ۱۱۰

فهرست جداول

جدول۲ـ ۱ : تبدیل تنش های مختلف به یکدیگر ۱۶

جدول۳ـ ۱: متغیرهای پتانسیل لنارد-جونز ۴۱

جدول۳-۲: ضرایب پتانسیل مورس برای برخی از فلزات ۴۳

جدول ۳-۳: ثوابت مورد نیاز برای پتانسیل ساتن-چن..... ۴۹

جدول۴-۱ مثال هایی از انتخاب توابع غنی سازی ۷۷

جدول۵ـ ۱ : مقایسه خطا در برابر ضریب شبکه..... ۱۰۴

جدول۵ـ ۲ : جدول نسبت طول ترک به عرض صفحه و تنش موجود..... ۱۰۹

فهرست علایم و اختصارات

a : فاصلهٔ بین دو اتم در حالت تعادل در پتانسیل ساتن-چن

a_i : شتاب اتم i

$\mathbf{b}$: بردار نیروهای حجمی

BCC : شبکهٔ مکعبی مرکزدار

C : پارامتر ثابت در پتانسیل ساتن-چن

C_{ijkl} : تانسور خواص ماده

$C_{ijkl}^{(1)}$: تانسور خواص ماده اول

$C_{ijkl}^{(2)}$: تانسور خواص ماده دوم

$\mathbf{D}$: تانسور نرخ تغییر شکل

$d\mathbf{x}$: بردار بسیار کوچک مکان در جسم تغییر شکل یافته

$d\mathbf{X}$: بردار بسیار کوچک مکان در جسم تغییر شکل نیافته

$\mathbf{E}$: تانسور کرنش گرین

E_i : انرژی پتانسیل اتم i

E_k : انرژی پتانسیل کل سیستم

$\mathbf{F}$: تانسور گرادیان تغییر شکل

F_i : نیروی وارد بر اتم i

FCC : شبکهٔ مکعبی وجوه-مرکزدار

J : ژاکوبین تغییر شکل

L : تابع لاگرانژی کل سیستم

$\mathbf{L}$: تانسور گرادیان سرعت

m : پارامتر ثابت در پتانسیل ساتن-چن

m_i : جرم اتم i

n : پارامتر ثابت در پتانسیل ساتن-چن

N : تعداد ذرات

$\mathbf{N}$: توابع شکل

p_i : اندازه حرکت مربوط به درجه آزادی iام

$\mathbf{P}$: تانسور تنش اول پایولا-کیرشهف در محیط پیوسته

$\mathbf{r}_i$: بردار موقعیت اتم i

r_{ij} : اندازهٔ فاصلهٔ بین دو اتم i و j

$\mathbf{r}_{ij}$: بردار واصل بین بین دو اتم i و j

$\mathbf{S}$: تانسور تنش دوم پایولا-کیرشهف در محیط پیوسته

$\mathbf{t}$:بردار نیروهای سطحی

T :انرژی جنبشی سیستم

v_{ix} :مؤلفهٔ x سرعت اتم iام

v_{xCOM} :مؤلفهٔ x سرعت مرکز جرم نمونه

R_{xCOM} :مؤلفهٔ x دوران مرکز جرم نمونه

U :تابع پتانسیل نیروهای وارد بر ذرات سیستم

W :انرژی کرنشی بر واحد حجم تغییرشکل یافته

w_0 :انرژی کرنشی بر واحد حجم تغییرشکل نیافته

$\mathbf{W}$:تانسور چرخش

δ_{ij} :دلتای کرونکر

ε :انرژی بین دو اتم در حالت تعادل

σ :فاصلهٔ بین دو اتم در حالت تعادل در پتانسیل لنارد-جونز

$\sigma_i^{\alpha\beta}$:مؤلفهٔ $\alpha\beta$ تانسور تنش اتم iام

$\boldsymbol{\sigma}$:تانسور تنش کوشی در محیط پیوسته

$\boldsymbol{\tau}$:تانسور تنش کیرشهف در محیط پیوسته

$\boldsymbol{\tau}^{\nabla c}$:نرخ عینی تنش کیرشهف در محیط پیوسته

ρ_i :چگالی ابر الکترونی اتم i در پتانسیل ساتن-چن

$\rho(X)$:چگالی احتمالاتی متغیر X

Δt :گام های زمانی

Ω_i :حجم رسیده به اتم i

Ω :دامنه مورد نظر برای فضای تقریب

Ω^0 :جسم تغییر شکل نیافته (در انتگرال گیری)

ϵ_0 :ضریب نفوذ پذیری در خلا

E :میزان بارالکتریکی موجود در ذره

V^{HS} :پتانسیل کره سخت

V^{SW} :پتانسیل چاه مربعی

V^{SS} :پتانسیل کره های نرم

V^{LJ} :پتانسیل لنارد-جونز

V^{M} :پتانسیل مورس

U^{FS} :انرژی پتانسیل فینیس-سینکلر

U^{SC} :انرژی پتانسیل ساتن-چن

ϕ_i :زیرمجموعه ای از تقسیم بندی واحدی

μ_i :مجموعه ای از توابع

Ψ_{i} :توابع غنی کننده

A_{Ji} :مجهولات مربوط به $f_{\mathrm{J}}(\mathrm{x})$

$f_{\mathrm{J}}(\mathrm{x})$: J امین تابع از تقسیم بندی واحد

N_{I} : تابع شکل گره I

S^{enr} : مجموعه گره های غنی شده

$u_i(x_k)$: جابجایی در راستای i گره K

U_{Ki} : جابجایی واقعی گره K

LSM : روش تابع تراز

$\phi(x), \psi$: توابع تراز

$\gamma(t)$: مرز محرک

$\vec{n}$: بردار نرمال بر مرز

$B_l(r, \theta)$: تابع غنی کننده در نوک ترک

$(\Psi(\mathrm{x}, \mathrm{t}))$: تابع غنی کننده هویساید

a_k : مجهولات مربوط به توابع غنی کننده

b_j : مجهولات مربوط به توابع غنی کننده

θ : زاویه مماس بر نوک ترک

$K_{\mathrm{I}}, \mathrm{K}_{\mathrm{II}}$: ضرایب چقرمگی

$N^{\mathrm{e}}_{\mathrm{std}}$: ماتریس توابع شکلی استاندارد المان محدود

$N^{\mathrm{e}}_{\mathrm{enr}}$: ماتریس توابع شکلی غنی شده المان محدود

$\varepsilon(x)$: کرنش

ε_L : کرنش خطی

ε_{NL} : کرنش غیرخطی

B : اپراتور گرادیان برای محاسبه کرنش

B^e_{std} : ماتریس گرادیان برای محاسبه کرنش در حالت استاندارد المان محدود

B^e_{enr} : ماتریس گرادیان برای محاسبه کرنش در حالت غنی شده المان محدود

K_{mat} : ماتریس سختی مماسی ماده

K_{geo} : ماتریس سختی هندسی

$\overline{K}$: ماتریس سختی کل

D_S^{ep} : تانسور خواص ماده

M_S : ماتریس تنش مربوط به ماتریس سختی هندسی

G : ماتریس مشتقات کارتزینی توابع شکل

A_{θ} : اپراتور ماتریس مشتقات جابجایی در حالت غیرخطی

$\boldsymbol{\theta}$: گرادیان جابجایی در حالت غیرخطی

$\boldsymbol{\eta}$: ضریب شبکه

فصل اول

مقدمه

۱-۱ قرن ۲۱، قرن نانوتکنولوژی

نیاز به ساخت قطعات بسیار ریز در صنایع مختلف از جمله هوا فضا، الکترونیک، صنعت خودرو و صنایع نظامی باعث رشد فزاینده تحقیقات در زمینه نانوتکنولوژی شده است. از طرفی پیگیری مکانیزم های در ابعاد کوچک، چه زنده و چه غیر زنده، این امر را تشدید کرده است. بکار گیری مصالح پیشرفته و سیستم های طراحی تیلور[1] منجر به تولید قطعاتی در ابعاد ملکولها تا قطعات در ابعاد هواپیما شده است. در زیر به چند مورد از دست یافته های نانوفن آوری اشاره می شود [۱]:

۱) مقاوم سازی مواد و مصالح

۲) ساخت حسگرهای شیمیایی مدرن

۳) نانو الکترونیک[2]

۴) تولید مواد با استفاده از DNA به عنوان اجزای اولیهٔ سازندهٔ مواد

۵) کاهش اصطکاک در سطوح تماس برای بالا بردن عمر قطعات وکاهش هزینه های تعمیر و نگهداری ماشین آلات

[1] Tailor design systems
[2] Micro and Nano Electromachine systems

۶) کنترل و تسریع فرآیند جذب دارو از طریق خون

۷) کنترل سیستم های زنده و کمک به فرآیند تشخیص های طبی

۸) کاهش وزن ماهواره ها و بدین ترتیب افزایش مدت باقیماندن در مدار دور زمین

۹) تولید الیاف جذب کننده انرژی تشعشعات هسته ای

وجود ترک در اجسام همیشه موجب نگرانی برای طول عمر سیستم می‌باشد، هر چند مساله ترک در گذشته با روش المان محدود بسط‌یافته مدل شده و جوابهای قابل قبول بدست آمده است، اما وجود ترک در ابعاد مولکولی را نمی توان با روشهای المان محدود محیط پیوسته مدل کرد و بایستی خواص ترک از جمله تنش و تانسور خواص ماده را در ابعاد نانو بدست آورده شود که روش اینکار در ادامه توضیح داده خواهد شد. در سازه های هوافضایی وجود ترک های بسیار ریز می‌تواند سبب ایجاد مشکلات زیادی گردد، بسیاری از این نانوترک ها را می‌توان هدایت کرد و در مسیری قرار داد که بتوان با وجود آن ، کارائی سیستم ادامه داشته باشد. بررسی مساله نانوترک ها موضوع اصلی این پایان نامه با استفاده از روش المان محدود بسط یافته است.

۱-۲ مدل های متداول برای بررسی پدیده های فیزیکی

برای بررسی پدیده های طبیعی می توان از مدل های ریاضی بهره جست. در حقیقت، هدف مدل های ریاضی ارائهٔ تصویری ساده شده از علل موجود برای به وقوع پیوستن پدیده های فیزیکی می باشد. بنابراین، با پیچیده شدن سیستم های مورد بررسی مدل های پیشرفته تری نیاز هستند تا ماهیت بغرنج رویدادها را به تصویر بکشند. مدل های موجود در جامعهٔ علاقمندان به مسایل محاسباتی بر پایهٔ دو مدل اساسی مکانیک

کلاسیک نیوتونی و مکانیک کوآنتوم استوار هستند. در زیر سیمای عمومی این دو مدل، از مقیاس ماکرو[۳] به مقیاس نانو[۴] و مقیاس زیر-اتمی[۵]، بررسی می شود.

در مدل های مبتنی بر مکانیک کلاسیک نیوتونی، معادلات حرکت نیوتون بر جابجایی اجزای مختلف ماده حاکم می باشند. با توجه به دقت مناسب این مدل در بررسی پدیده های موجود در طبیعت، روش های مبتنی بر این مدل از محبوبیت خاصی برخوردار هستند. با توجه به کاربرد این روش برای بررسی پدیده های موجود در مقیاس های مختلف، انواع متفاوتی از مدل ها ارائه شده اند، که عبارتند از:

۱- مکانیک محیط های پیوسته [۶] [۲]؛

۲- دینامیک نابجایی ها[۷] [۳]؛

۳- روش های ملکولی[۸] [۴].

در بررسی پدیده های موجود در مقیاس ماکرو، می توان ماده را یکپارچه فرض کرد. بدین وسیله با نوشتن معادلات تعادل نیوتون برای یک المان حجمی از جسم و انتگرال گیری بر روی کل جسم می توان معادلات حاکم بر جسم را بدست آورد. علیرغم کاربرد فراوان این مدل در بررسی پدیده ها در مقیاس های بزرگ مدل محیط پیوستهٔ کلاسیک در بیان دسته ای از پدیده ها که ناشی از ساختار اتمی جسم می باشند، ناتوان است.

از آنجا که کریستال های تشکیل دهندهٔ مواد در طبیعت دارای نابجایی هستند، نحوهٔ تشکیل نابجای ها و حرکت آنها در مواد بلوری قابل توجه محققین مختلف بوده است. علاوه بر این، اهمیت نابجایی ها به عنوان منشأ ایجاد پلاستیسیته در مواد، لزوم تحقیقات در بارهٔ آنها را پررنگ تر کرده است. مدل دینامیک نابجایی ها نتیجهٔ سال ها تلاش پیگیر محققین در این زمینه بوده است. مدل فوق الذکر، برای بررسی دریایی از نابجایی ها

[3] Macro scale
[4] Nano scale
[5] Sub-atomic scale
[6] Continuum Mechanics
[7] Dislocation Dynamics
[8] Molecular methods

در مقیاس میکرو بسیار مفید است، اما با ریزتر شدن اندازهٔ ماده تا مقیاس نانو، این توصیف بازهم توانایی خود را از دست می دهد.

در مدل های ملکولی، تمام اتم ها تک تک مدل می شوند و رابطهٔ میان آنها توسط پتانسیل های بین اتمی بیان می گردد. این مدل ها برای بررسی ساختارهای بسیار ریز در ابعاد نانومتری بسیار توانا هستند. این مدل ها به دو دستهٔ احتمالاتی[۹] و تعیینی[۱۰] تقسیم می شوند. روش مونت-کارلو[۱۱] [۵] از دستهٔ روش های احتمالاتی است. در این روش معادلهٔ حرکت حل نمی شود بلکه رابطهٔ انرژی با مکان احنمالی اتم ها بررسی می شوند. روش های تعیینی که در آنها معادلات حرکت بطور مستقیم حل می شوند دارای انواع متفاوتی هستند که از میان آن ها روش های استاتیک ملکولی[۱۲] [۱] و دینامیک ملکولی[۱۳] [۶] بیشتر مورد استفاده قرار می گیرند. از آنجا که در مقیاس نانو، اثرات حرارتی نقش بسیار مهمی در رفتار مواد بازی می کنند، روش دینامیک ملکولی بیشتر مورد استفاده قرار گرفته است. در حقیقت پرهیز از تشکیل ماتریس سختی توسط روش دینامیک ملکولی و همچنین توانایی این روش در شبیه سازی پدیده های شبه استاتیکی محبوبیت آن را دو چندان کرده است.

در مدل های مبتنی بر مکانیک کوآنتوم، حضور موجودات ریزتر از اتم ها مانند الکترون، پروتون و نوترون ها لحاظ می شوند. در حقیقت نیروی متوسط بین اتمی تابعی از وضعیت و خصوصیات اجسام زیر اتمی می باشد. معادلهٔ اساسی در این مکانیک کوآنتوم معادلهٔ موج شرودینگر[۱۴] است که حل این معادلهٔ دیفرانسیل به یک مساله با مقادیر ویژه تبدیل می شود. با یافتن جواب معادلهٔ فوق تابع چگالی احتمال حضور الکترون در اطراف هستهٔ اتم قابل حصول می باشد. لذا حل معادلهٔ شرودینگر اطلاعات ذی قیمتی در بارهٔ ساختار الکترونیکی، رسانایی، مقاومت الکتریکی، مشخصات هندسی پیوندهای بین اتمی و انرژی موجود در ساختارهای

[9] Stochastic
[10] Deterministic
[11] Monte-Carlo method
[12] Molecular Statics
[13] Molecular Dynamics
[14] Shrodinger wave equation