

## شبیه‌سازی دینامیک مولکولی گذار فاز نانولوله‌های بورنیتريد تک‌جداره

جمال داودی و رقيه يوسفی

گروه فیزیک، دانشگاه زنجان، زنجان

پست الکترونیکی: Jdavoodi@znu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۴/۵/۲۹؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۵/۱۱/۱۳)

### چکیده

هدف از این کار پژوهشی مطالعه فرآیند ذوب نانولوله‌های بورنیتريد با سه نوع ساختار زیگزاگ، دسته‌صندلی و پیچشی و بررسی تأثیر شعاع این سه نوع نانولوله بر نقطه ذوب آنها می‌باشد. برای انجام این پژوهش از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بر اساس پتانسیل شبه ترسلف در هنگرد هم‌دما-هم فشار (NPT) استفاده شده است. دما و فشار دستگاه به ترتیب با استفاده از ترموستات نوز-هوفر و باروستات برنسن کنترل شده و شرایط مرزی دوره‌ای نیز در امتداد محور نانولوله اعمال شده است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که دمای ذوب نانولوله بورنیتريد به شعاع نانولوله‌ها وابستگی غیرخطی داشته و با افزایش شعاع، افزایش می‌یابد البته این وابستگی دمای ذوب به شعاع برای سه نوع نانولوله زیگزاگ، دسته‌صندلی و پیچشی متفاوت بوده و برای هر نوع ساختار نانولوله یک تابع برای بیان وابستگی دمای ذوب به شعاع ارائه شده است. همچنین نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد دمای ذوب نانولوله‌ها در شعاع‌های بزرگ به یک مقدار ثابت میل می‌کنند.

واژه‌های کلیدی: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، دمای ذوب، نانولوله بورنیتريد، پتانسیل شبه ترسلف

### ۱. مقدمه

یانگ بالا است و خواص الکترونی بسیار متفاوتی با نانولوله‌های کربنی دارد. پایداری این نانولوله اولین بار با روش شبیه‌سازی رایانه‌ای پیش بینی شده که بعداً نانولوله چند جداره بورنیتريد توسط چوپرا و همکارانش در سال ۱۹۹۵ سنتز شد [۶ و ۷]. مطالعات تجربی، نظری و شبیه‌سازی فراوانی از خواص مکانیکی و ترمودینامیکی ترکیب بورنیتريد انجام شده است [۸-۱۰] اما اطلاعات کمی از خواص گرمای و مکانیکی نانولوله‌های بور-نیتريد موجود است. از جمله تحقیقاتی که در خصوص نانولوله‌های بورنیتريد انجام شده است می‌توان به محاسبه خواص کشسانی شامل مدول یانگ و مدول برشی

نانولوله‌های بورنیتريد به دلیل داشتن ساختار و خواص الکترونیکی منحصر به فردشان توجه زیادی را در صنعت الکترونیک و علوم زیستی به خود جلب کرده اند [۱ و ۲]. این نانولوله‌ها دارای گاف نواری ثابت در حدود  $5 \text{ eV}$  می‌باشند [۳]. که در مقایسه با نانولوله‌های کربنی پایدارتر بوده و به دلیل داشتن گاف نواری بزرگ در مقایسه با نانولوله‌های کربنی به عنوان عایق الکتریکی عالی استفاده می‌شوند [۴ و ۵]. این نانولوله عایق الکتریکی بسیار عالی و در محیط‌هایی با دمای بالا دارای مقاومت خوب و از نظر خواص مکانیکی دارای مدول

اساس کار شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انتخاب پتانسیل برهم‌کنشی مناسب بین ذرات است و هر چه این پتانسیل به پتانسیل واقعی بین ذرات نزدیک‌تر باشد نتایج حاصل از آن دقیق‌تر است [۱۹ و ۲۰]. در این شبیه‌سازی از پتانسیل برهم‌کنشی شبه ترسلف [۲۱] استفاده کردیم.

### ۲.۱. پتانسیل شبه ترسلف

در شبیه‌سازی‌ها انتخاب پتانسیل مناسب بسیار حائز اهمیت است. پتانسیل ترسلف توانایی توصیف حالات مختلف تشکیل ساختار، انرژی هم‌دوسی اتم را داشته و کاربرد گسترده در مدل‌سازی ساختارهای کربنی، سیلیکونی، و بور نیتريد را دارد. پتانسیل شبه ترسلف برای استفاده در سامانه‌های کوالانسی چند جزئی توسعه یافته است. این پتانسیل، همبستگی‌های دوجسمی و چند جسمی را به شیوه‌ای مؤثر در یک مدل توصیف کرده و مستقل از دما می‌باشد. شکل تابعی این پتانسیل به صورت زیر است:

$$\phi_T = \frac{1}{\gamma} \sum_{i \neq j} \phi_{ij}, \quad (1)$$

$$\phi_{ij} = f_c(r_{ij}) [f_R(r_{ij}) + b_{ij} f_A(r_{ij})], \quad (2)$$

$f_R(r_{ij})$  و  $f_A(r_{ij})$  به ترتیب پتانسیل جفتی دافعه و جاذبه هستند که با روابط زیر محاسبه می‌شوند.

$$f_R(r_{ij}) = \frac{D}{S-1} \exp(-\beta\sqrt{\gamma}S(r-r_c)), \quad (3)$$

$$f_A(r_{ij}) = \frac{SD}{S-1} \exp(-\beta\sqrt{\gamma}S(r-r_c)), \quad (4)$$

$D$  ثابت از جنس انرژی،  $r_c$  طول باند،  $S$  و  $\beta$  ثابت‌های پتانسیل هستند.

$f_c(r_{ij})$  تابع قطع بوده و پارامترهای  $R$  و  $D$  به گونه‌ای انتخاب می‌شوند تا لایه همسایه‌های اول در نظر گرفته شوند:

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1 \\ \frac{1}{\gamma} + \frac{1}{\gamma} \cos[\pi(r_{ij} - R_{ij}) / (S_{ij} - R_{ij})] \\ 0 \end{cases} \quad (5)$$

$$r_{ij} < R - D$$

$$R - D \leq r_{ij} \leq R + D$$

$$r_{ij} > R + D$$

نانولوله‌های تک‌جداره زیگزاگ و دسته‌صندلی با استفاده از پتانسیل ترسلف-برنر اشاره کرد [۱۱]. یان و همکارانش خواص گرمایی نانولوله تک‌جداره بورنیتريد شامل ظرفیت گرمایی و رسانندگی گرمایی را محاسبه کرده و نشان دادند که رسانندگی گرمایی به شعاع نانولوله بستگی داشته و در دمای پایین کوانتیده است [۱۲]. در یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی دیگر وان‌ها موون و همکارانش انرژی تشکیل نقص در نانولوله بورنیتريد را با استفاده از پتانسیل شبه ترسلف بررسی کردند [۱۳]. همین پژوهشگران در یک مقاله دیگر که به کار ما نزدیک است با استفاده از پتانسیل شبه ترسلف و با روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ساختار و خواص گرمایی نانولوله‌های دسته‌صندلی و زیگزاگ را بررسی و نقطه ذوب آنها را محاسبه کردند [۱۴]. ولی در هیچ کدام از کارهای انجام شده نقطه ذوب سه نوع نانولوله دسته‌صندلی، زیگزاگ و پیچشی محاسبه و با هم مقایسه نشده است همچنین تابعی که بیان‌کننده نحوه تغییرات دمای ذوب سه نوع نانولوله با شعاع آن باشد ارائه نشده است.

یکی از پدیده‌های مهم در علوم نانو فرآیند ذوب و انجماد است که مطالعه این پدیده‌ها در مقیاس نانو با توجه به محدودیت‌های تجهیزات آزمایشگاهی بسیار مشکل است. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یکی از ابزارهای قوی برای به دست آوردن ویژگی‌های گرمایی مواد و مطالعه فرآیند ذوب و انجماد می‌باشد [۱۵-۱۸]. لذا در این کار پژوهشی از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی [۱۹ و ۲۰] برای مطالعه دقیق فرآیند ذوب انواع نانولوله‌های بورنیتريد استفاده کرده و در آخر رابطه‌ای ارائه دادیم که وابستگی دمای ذوب نانولوله به شعاع آن را بیان می‌کند.

### ۲. جزئیات شبیه‌سازی

برای مطالعه فرآیند ذوب نانولوله تک‌جداره، سه نوع نانولوله بورنیتريد زیگزاگ، دسته‌صندلی و پیچشی<sup>۱</sup> با شعاع‌ها و زاویه‌های پیچشی مختلف را در نظر گرفته و با روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی فرآیند گذار فاز را مطالعه می‌کنیم.

جدول ۱. پارامترهای پتانسیل شبه ترسلف بورنیتريد [۲۱].

D. $[\text{Å}]$	r. $[\text{Å}]$	$[\text{Å}^{-1}]\lambda$	h	d	c	r. $[\text{Å}]$	D. $[\text{eV}]$	$\beta[\text{Å}^{-1}]$	s	$\gamma$	N
۰٫۱	۲٫۰	۱٫۹۹۲۵	-۰٫۵۴۱	۱۳٫۳۸	۱۰۹۲٫۹۲	۱٫۲۳	۶٫۳۶	۲٫۰۴۳	۱٫۰۷۶۹	۰٫۰۰۰۰۱۱	۰٫۳۶۴۱

برای تنظیم فشار دستگاه از باروستات برنسن استفاده می شود [۲۴]. این باروستات با تغییر حجم نانولوله فشار سیستم را کنترل می کند و در هر گام زمانی با ضرب کردن مختصات ذرات و ابعاد نانولوله به ضریب  $\mu$  حجم آن را تغییر داده و فشار را کنترل می کند

$$L \rightarrow \mu L$$

$$\mu = \left[ 1 - \frac{\delta t}{\tau_p} (P - P_0) \right]^{\frac{1}{3}} \quad (13)$$

$\delta t$  گام زمانی شبیه سازی و  $\tau_p$  پارامتر جفت شدگی که انتخاب صحیح آن در بهینه کردن زمان اجرای برنامه مؤثر است.  $P_0$  فشار مورد نظر دستگاه و  $P$  فشار کل لحظه ای دستگاه می باشد. همچنین در این شبیه سازی از ترموستات نوز- هوفر برای کنترل دمای دستگاه استفاده شده است [۲۵ و ۲۶].

برای ساختارهایی با ابعاد نانومقیاس رابطه متداول نقطه ذوب نانوساختار بر حسب قطر آن به صورت زیر می باشد [۲۷]:

$$T_m = T_{mb} \left( 1 - \frac{\beta}{zd} \right) \quad (14)$$

$T_{mb}$  نقطه ذوب در مقیاس بزرگ و ۳ و ۱٫۵ و ۱ به ترتیب برای نانوذرات، نانوسیم و نانوفیلم است.  $d$  قطر نانوذره یا نانولوله می باشد که در برخی موارد، نشان دهنده ضخامت نانوفیلم است.  $\beta$  کمیتی است که برای مواد مختلف و نانو ساختارهای مختلف متفاوت بوده و یکی از اهداف ما نیز محاسبه این کمیت می باشد. این کمیت را از شیب نمودار دمای ذوب بر حسب شعاع به دست می آوریم.

برای مشاهده گذار فاز از جامد به مایع منحنی تغییرات انرژی همدوسی و ضریب لیندمان را بر حسب دمای دستگاه رسم کردیم این دو کمیت هنگام گذار فاز یک تغییر ناگهانی داشته و نقطه ذوب را مشخص می کنند که در بخش نتایج منحنی های مربوطه ارائه خواهد شد.

$b_{ij}$  نشان دهنده نوعی وابستگی است که می تواند نیروی جاذبه را نسبت به نیروی دافعه تقویت یا تضعیف کند. و شکل تابعی آن به صورت زیر است:

$$b_{ij} = (1 + \gamma_{ij}^{n_i})^{-1/(2n_i)} \quad (6)$$

$$\gamma_{ij} = \sum_{k \neq i, j} f_c(r_{ik}) w_{ijk} g(\cos \theta_{ijk}), \quad (7)$$

$$g(\cos \theta_{ijk}) = 1 + \frac{c_i^\gamma}{d_i^\gamma} - \frac{c_i^\gamma}{d_i^\gamma + (h_i + \cos \theta_{ijk})^\gamma}, \quad (8)$$

$$w_{ijk} = \exp[\lambda^\gamma (r_{ij} - r_{ik})^\gamma], \quad (9)$$

$$\cos \theta_{ijk} = \frac{r_{ij} \cdot r_{ik}}{r_{ij} r_{ik}}, \quad (10)$$

$x_{ij}$  عدد هم آرابی اتم،  $\theta_{ijk}$  زاویه پیوندی بین بردار  $r_{ij}$  و  $r_{ik}$  است. پارامتر  $d_i$  تعیین کننده شدت وابستگی به زاویه و  $C_i$  قدرت اثر زاویه ای را بیان می کند. یازده پارامتر یک اندیسی مانند  $n_i$  فقط به نوع اتم بستگی دارند و پارامترهای دو اندیسی دیگر مانند  $x_{ij}$  برای هر جفت گونه اتمی تعریف می شوند. پارامترهای شبه ترسلف برای بورنیتريد در جدول ۱ زیر آمده است.

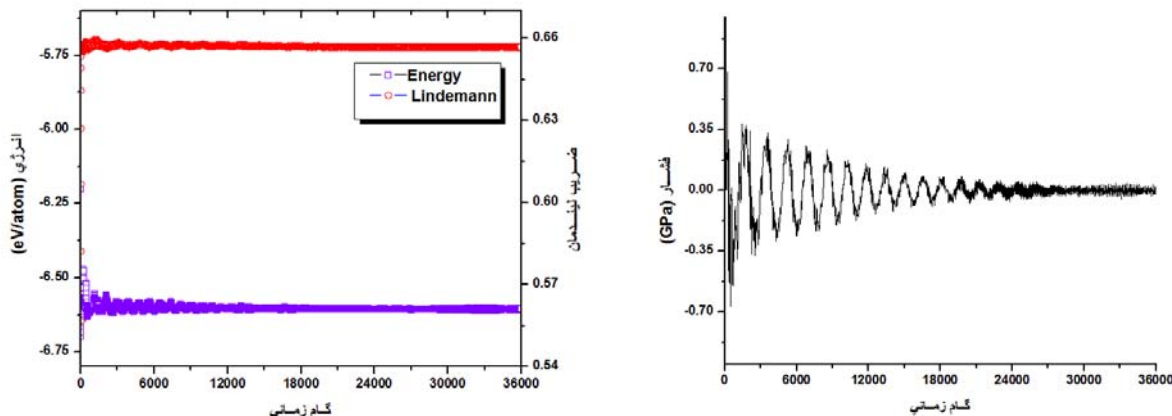
## ۲.۲. تنظیم دما و فشار

این شبیه سازی دینامیک مولکولی در هنگرد دما و فشار ثابت انجام شده است حجم نانولوله تک دیواره بورنیتريد با استفاده از حجم یاخته اصلی و یگنرسایتس تک تک اتم ها با معادله زیر محاسبه می شود [۲۲ و ۲۳]:

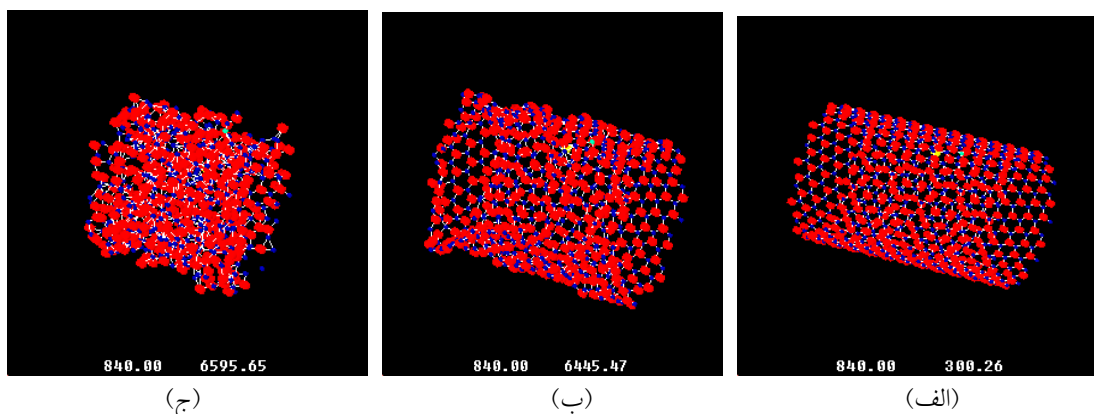
$$V_i = \gamma_i \frac{4\pi}{3N_i} \sum_{j \neq i}^N \left( \frac{r_{ij}}{2} \right)^3, \quad (11)$$

$N_i$  تعداد همسایه های اول اتم  $i$  ام و مقدار  $\gamma_i$  ۱٫۳۳ می باشد. بنابراین حجم نانولوله را می توان با جمع بستن حجم تک تک اتم ها به صورت زیر محاسبه کرد:

$$V = \frac{1}{N_i} \sum_{i=1}^N V_i, \quad (12)$$



شکل ۱. نمودار تعادلی فشار بر حسب گام زمانی برای نانولوله شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار تعادلی انرژی همدوسی و ضریب لیندمان بر حسب گام زمانی برای نانولوله (۰ و ۱۴).



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمایی از مراحل ذوب نانولوله پیچشی (۱۰ و ۲۰) با ۸۴۰ ذره، (الف) در دمای ۳۰۰/۲۶ کلوین، (ب) در دمای ۶۴۴۵/۴۷ کلوین، (ج) در دمای ۶۵۹۵/۶۵ کلوین.

دستگاه می‌دهیم که بعد از به تعادل رسیدن دستگاه، توزیع ماکسولی خواهند داشت. نانولوله‌های بورنیتريد طی ۳۶۰۰۰ گام زمانی که هر گام زمانی ۰٫۱ فمتوثانیه است در دمای مورد نظر به تعادل می‌رسند. کمیت‌های فیزیکی از جمله انرژی همدوسی، فشار و ضریب لیندمان حول مقادیر ثابت نوسان می‌کنند که نشان دهنده تعادل دستگاه است. به عنوان نمونه همان طوری که در شکل ۱ و ۲ دیده می‌شود فشار، انرژی همدوسی و ضریب لیندمان برای نانولوله (۰ و ۱۴) در دمای ۳۰۰ کلوین حول مقدار ثابت نوسان می‌کند که نشان دهنده تعادل دستگاه است.

پس از تعادل، دمای دستگاه را به تدریج با گام دمایی ۰٫۱ کلوین افزایش می‌دهیم تا نانولوله مطابق شکل ۳ ذوب شود.

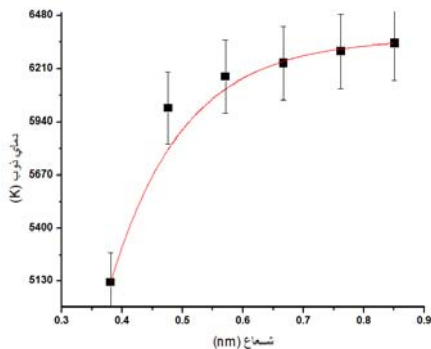
یکی از کمیت‌های فیزیکی که می‌توان با استفاده از آن تغییر فاز جامد به مایع را مشاهده کرد، ضریب لیندمان [۲۸] است. شکل تابعی این ضریب به صورت زیر می‌باشد:

$$\delta_i = \frac{1}{N(N-1)} \sum_{i \neq j}^N \sqrt{\frac{r_{ijT}^2 - r_{ijT}^2}{r_{ijT}^2}}, \quad (15)$$

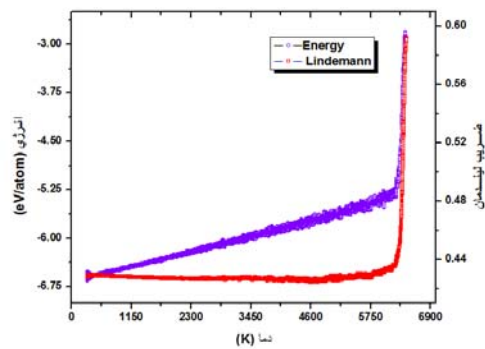
که در این رابطه  $r_{ij}$  فاصله بین ذره  $i$  و  $j$ ، تعداد ذرات و  $\langle \dots \rangle_T$  نشان دهنده میانگین گیری زمانی می‌باشد.

### ۳. نتایج شبیه‌سازی

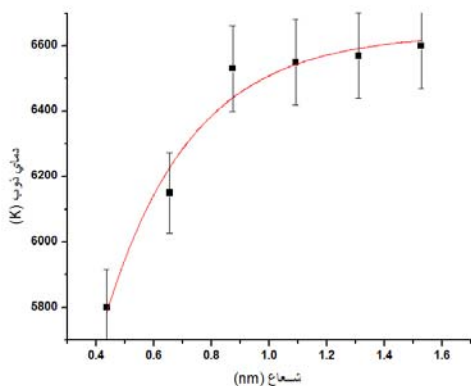
در شبیه‌سازی، ابتدا دمای اولیه دستگاه را ۳۰۰ کلوین در نظر می‌گیریم. سپس به ذرات، سرعت کاتوره‌ای متناسب با دمای



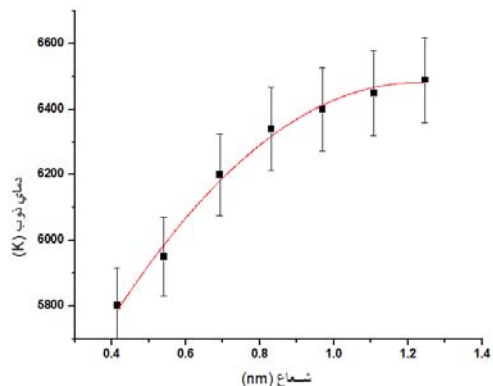
شکل ۵. نمودار دمای ذوب بر حسب شعاع برای نانولوله های زیگزاگ (۰ و ۱۴).



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) نمودار تغییرات انرژی همدوسی و ضریب لیندمان بر حسب دما برای نانولوله زیگزاگ (۰ و ۱۴).

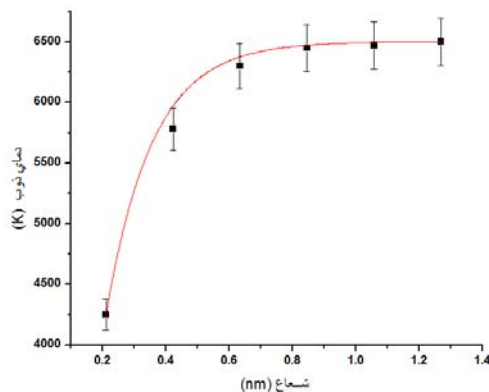


شکل ۷. نمودار دمای ذوب بر حسب شعاع برای نانولوله های پیچشی (n و m) با زاویه ۱۱ درجه.



شکل ۶. نمودار دمای ذوب بر حسب شعاع برای نانولوله های دسته صندلی (n و n).

می کنیم. شکل ۴ تغییرات انرژی و ضریب لیندمان را بر حسب دما برای نانولوله (۰، ۱۴) نشان می دهد. همان طوری که در شکل مذکور مشخص است گذار فاز از جامد به مایع با جهش ناگهانی در نمودار انرژی همدوسی به دلیل گرمای نهان ذوب و ضریب لیندمان به دلیل از بین رفتن ساختار منظم نانولوله و حرکت آزادانه ذرات بر حسب دما که هر دو در دمای یکسانی مشاهده می شود مشخص است. مشابه همین منحنی ها برای نانولوله های زیگزاگ (۰، n)، دسته صندلی (n, n) و پیچشی (n, m) با شعاع های متفاوت که با تغییر n و m به دست می آیند رسم کرده و نقاط ذوب مربوط به هر نوع نانولوله بر حسب شعاع را در یک نمودار مشخص می کنیم (شکل های ۴ تا ۸). سپس با برازش رابطه دمای ذوب نانو ساختارها بر حسب شعاع رابطه (۴) بر نقاط نمودارهای دمای ذوب بر حسب شعاع، متغیر



شکل ۸. نمودار دمای ذوب بر حسب شعاع برای نانولوله های پیچشی (n, n) با زاویه ۱۹ درجه.

برای مشاهده فرآیند ذوب علاوه بر پویانمایی نانولوله، منحنی تغییرات انرژی همدوسی و ضریب لیندمان را رسم

جدول ۲. مقادیر  $\beta$  برای زاویه‌های پیچشی متفاوت.

نوع نانولوله	زاویه پیچش $\theta$	$\beta(\text{\AA})$
زیگزاگ	۰	۰٫۱
پیچشی	۱۱	۰٫۰۷
پیچشی	۱۹	۰٫۰۸
دسته صندلی	۳۰	۰٫۰۹

همدوسی نانولوله به ساختار ZnS بورنیتريد نزدیکتر است.

#### ۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بر اساس پتانسیل شبه ترسلف، پایداری گرمایی ساختار بلوری و گذار فاز از جامد به مایع برای سه نوع نانولوله تک‌جداره بورنیتريد زیگزاگ، دسته صندلی و پیچشی با زوایای ۱۱ و ۱۹ درجه با شعاع‌های مختلف بررسی و تابع مربوط به وابستگی نقطه ذوب نانولوله‌ها به شعاع آنها استخراج گردید. با توجه به نتایج عددی به دست آمده مشاهده کردیم که دمای ذوب هر سه نوع نانولوله بورنیتريد با افزایش شعاع بطور غیر خطی افزایش یافته و در شعاع‌های بزرگ‌تر به یک مقدار ثابتی میل می‌کنند. همچنین نتایج شبیه‌سازی نشان داد که نانولوله‌های بور نیتريد همان طور که انتظار می‌رفت دارای مقاومت حرارتی بسیار بالایی می‌باشند همخوانی نتایج حاصل از نتایج این تحقیق با نتایج در دسترس سایر پژوهشگران تأییدی بر روش استفاده شده و مقادیر محاسبه شده است.

$\beta$  را برای زاویه‌های پیچشی مختلف شامل ۰، ۱۱، ۱۹ و ۳۰ درجه از به دست می‌آوریم که مقادیر آن در جدول ۲ آمده است.

از مقایسه نتایج شبیه‌سازی در نمودارهای شکل‌های ۵ تا ۸ مشاهده می‌کنیم که نقطه ذوب همه نوع نانولوله‌های بورنیتريد با افزایش شعاع نانولوله‌ها به طور غیرخطی افزایش می‌یابد و در شعاع‌های بزرگتر به یک مقدار ثابت میل می‌کند که از ویژگی‌های نانوساختارها می‌باشد این افزایش تدریجی دمای ذوب و رسیدن به یک مقدار ثابت در نانولوله‌های دسته صندلی، زیگزاگ و پیچشی یکسان نبوده و این اختلاف خود را در ضریب  $\beta$  نشان می‌دهد. همچنین مقایسه نتایج این تحقیق با کار پژوهشی انجام شده توسط سایر پژوهشگران نشان می‌دهد انرژی همدوسی ۶٫۴۶- الکترون ولت بر اتم و نقطه ذوب ۵۱۳۰ کلوین برای نانولوله دسته صندلی حاصل از نتایج ما توافق خوبی با مقدار ۶٫۴- الکترون ولت بر اتم و ۴۷۵۰ کلوین محاسبه شده توسط وان‌ها و همکارانش دارد [۱]. که تأییدی بر روش شبیه‌سازی و پتانسیل برهم‌کنشی مورد استفاده است. در ضمن مقایسه انرژی همدوسی نانولوله بورنیتريد با دوفاز ZnS و NaCl بورنیتريد در مقیاس بزرگ [۸]، به ترتیب با انرژی همدوسی ۴- و ۶٫۷۵- الکترون ولت بر اتم نشان می‌دهد که انرژی

#### مراجع

- W H Moon, and H J Hwang, *Physic E* **23** (2004) 26.
- T H Ferreira, P R O da Silva, R G dos Santos, and E M B de Sousa, *J. Biomaterials and Nanobiotechnology* **2** (2011) 426.
- V Nirmala and P Kolandaivel, *Theochem.* **817** (2007) 137.
- D Golberg, Y Bando, C C Tang, C Y Zhi, *Advanced-Materials* **19** (2007) 2413.
- M Zheng, X Chen, I T Bae, C Ke, C W Park, M Smith, and K Jordan, *Small* **8** (2012) 116.
- W H Moon and H J Hwang, *Nanotechnology* **15** (2004) 431.
- A Rubio, J L Corkill, and M L Cohen, *Phys. Rev. B* **49** (1994) 5081.
- W Sekkaly, B Bouhafsy, H Aouragy, and M Certierz, *J. Phys.: Condens. Matter* **10** (1998) 4975.
- E S Oh, *Met. Mater. Int.* **17** (2011) 21.
- H Koga, Y Nakamura, S Watanabe, and T Yoshida, *Science and Technology of Advanced Materials* **2** (2001) 349.

- Afzal Zadeh, *Iranian Journal of Physics Research* **14**, 2 (2014) 187.
۱۸. م پیوسته، س ستایشی، م واعظزاده و ر افضلزاده، مجله پژوهش فیزیک ایران، ۱۴، ۲ (۱۳۹۳) ۱۸۷.
19. J M Haile, "Molecular Dynamics Simulation", Johan Wiley and Sons, New York (1992).
20. M P Allen and D J Tildesly, "Computer Simulation of Liquids", Oxford Science Publications, Oxford (1996).
21. J Tersoff, *Phys. Rev. B* **39** (1989) 5566.
22. J Zang, O Aldas-Palacios, and F Liu, *Commun. Comput. Phys.* **2** (2007) 451.
23. D Y Sun and X G Gong, *J. Phys.: Condens. Matter.* **14** (2008) L487.
24. H J C Berendsen, J P M Postma, W F Van Gunsteren, A Dinola, and J R Hakk, *J. Chem. Phys.* **81** (1984) 3684.
25. S Nose, *J. Chem. Phys.* **81** (1984) 511.
26. W G Hoover, *Phys. Rev. A* **31** (1985) 1695.
27. K K Nada, S N Sahu, and S N Behera, *Phys. Rev. A* **66** (2002) 013208.
28. S K Nayak, J N Khanan, B K Rao, and P Jena, *Phys. Condens. Matter* **10** (1998) 10853.
11. V Verma, V K Jindal, and K Dharamvir, *Nanotechnology* **18** (2007) 435711.
12. Y Xiao, X H Yan, J X Cao, J W Ding, Y L Mao, and J Xiang, *Physical Review B* **69** (2004) 205415.
13. W H Moon, and H J Hwang, *Physics Letters A* **320** (2004) 446.
14. W H Moon and H J Hwang, *Nanotechnology* **15** (2004) 431.
15. J Davoodi and L Mehri, *Iranian Journal of Physics Research* **10**, 3 (2010) 61.
۱۵. ج داودی و ل مهري، مجله پژوهش فیزیک ایران، ۱۰، ۳ (۱۳۸۹) ۲۳۹.
16. J Davoodi and M Asgarikhah, *Iranian Journal of Physics Research* **11**, 2 (2011) 17.
۱۶. ج داودی و م عسگری خواه، مجله پژوهش فیزیک ایران، ۱۱، ۲ (۱۳۹۰) ۱۶۱.
17. S. M. Huseini and S. M. Amini. *Iranian Journal of Physics Research* **5**, 2 (2001) 277.
۱۷. س م حسیني و س م امینی، مجله پژوهش فیزیک ایران، ۵، ۲ (۱۳۸۰) ۲۷۷.
18. M Peyvasteh, S Setayeshi, M Vaez Zadeh, and R