تأثیر ترک بر فرکانس‌های طبیعی نانو تیرها به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و روش اجزا محدود

سید سجاد موسوی‌نژاد سوق**1**، فرامرز آشنای قاسمی**2**\*، میرمسعود سیدفخرآبادی **3**

1- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجائی، تهران

2- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه تربیت دبیر شهید رجائی، تهران

3- استادیار، مهندسی مکانیک،پردیس دانشکده فنی، دانشگاه تهران، تهران

\* تهران، صندوق پستی 16785-136، f.a.ghasemi@sru.ac.ir

چکیده

هدف این پژوهش بررسی تأثیر ترک بر فرکانس‌های طبیعی نانو تیر تک کریستال آهن با ساختار کریستالی BCC با استفاده از دو روش شبیهسازی دینامیک مولکولی و اجزا محدود می‌باشد. به‌منظور نیل به این هدف ترک‌های مرزی با موقعیت و عمق متفاوت بر روی نانو تیر تک کریستال آهن با اندازه توسط روش دینامیک مولکولی شبیه سازی شدهاند و همچنین شرایط مرزی دو سرگیردار را برای تیرها در نظر گرفته ایم. به منظور محاسبه نیروهای بین اتمی پتانسیل مستغرق اتمی EAM انتخاب شده است. برای جابجایی اولیه، منطقه وسط نانوتیرها را در دو شبیه سازی جداگانه در جهت های x و y تحریک کرده ایم. فرکانس های طبیعی بر اساس تاریخچه زمانی جابجایی اتمهای پوسته بیرونی نانوتیر با اعمال تبدیل فوریه سریع استخراج شده است. همچنین به کمک این تبدیل برروی تاریخچه زمانی جابجایی همه‌ی اتم های پوسته بیرونی نانوتیر، شکل مود های نانوتیررا به منظور مقایسه با شکل مود های استخراج شده از اجزا محدود بدست آورده ایم. طبق مطالعه انجام شده داده های روش دینامیک مولکولی و شبیه سازی اجزا محدود برای نانوتیرهای ترک دار به طور قابل توجه ای با هم موافق هستند. همچنین فرکانس های مختلف در ساختار به علت وجود ترک، نسبت به حالت بدون ترک تا حدود 25٪ کاهش را از خود نشان می دهند.

**کلی**د‌واژگ**ان**

نانو تیر، دینامیک مولکولی، ارتعاشات آزاد، ترک

Effect of cracks on the natural frequencies of nanowires using molecular dynamics simulation and finite element method

Sajad Mousavi Nejad Souq**1**, Faramarz Ashenai Ghasem**i1\***, Mir Masoud Seyyed Fakhrabad**i2**

1- Faculty of Mechanical Engineering, Shahid Rajaee Teacher Training University, Tehran, Iran

2- School of Mechanical Engineering, College of Engineering, University of Tehran, Tehran, Iran

\* P.O.B. 16785-136 Tehran, Iran, [f.a.ghasemi@sru.ac.ir](mailto:f.a.ghasemi@sru.ac.ir)

Abstract

The aim of this study is to investigate the effect of cracks on the natural frequencies of a single-crystal Fe nanobeam with BCC crystal structure using two methods of molecular dynamics simulation and finite element. In order to achieve this goal, edge cracks with different positions and depths on the single-crystal iron nanobeam with dimensions of have been simulated by the molecular dynamics method and we have also considered the clamped-clamped boundary conditions for the beam. To calculate the interatomic forces, the embedded atomic potential of the EAM was selected. Also, for the initial displacement, we excited the nanobeams in two separate simulations in the x and y directions. Natural frequencies are derived based on the displacement time history of outer shell atoms of the nanobeam by applying fast Fourier transform. Also, with the aid of this transform on all outer shell atoms, the mode shapes of nanobeam have been obtained to compare with the mode shapes from the finite element method. The data from the molecular dynamics simulation and finite element method for cracked nanobeams are significantly in agreement with each other. The simulations show a maximum 25% difference between the natural frequencies of the cracked and non-cracked beams.

Keywords

Nanobeam, Free vibration, Molecular Dynamics, Crack

1. مقدمه

نانوتیرها به علت خواص مکانیکی و حرارتی منحصربه‌فرد خود از جمله ساختارهای بسیار پرکاربرد در سیستمهای میکرو و نانوالکترومکانیکی می‌باشند. از جمله کاربردهای آنها می‌توان به سنسورهای تنش، نیرو، سیستم‌های تولید فرکانس بالا [1,2] و نانو سوئیچ‌ها [3] اشاره کرد.

مطالعات بسیاری به‌منظور بررسی ویژگی‌های ارتعاشی نانو تیرها به‌صورت آزمایشگاهی، تئوری و عددی انجام شده است. در بخش تئوری و عددی روش‌های مکانیک کوانتومی، دینامیک مولکولی، اجزا محدود و مکانیک محیطهای پیوسته به‌منظور پیش‌بینی خواص مکانیکی و ارتعاشی نانوتیرها مورد استفاده بسیاری از محققین قرار گرفتهاند [4-8]. پور ابراهیمی و همکاران [4] یک مدل پیوسته-اتمی به منظور مطالعه رفتار ارتعاشی نانوتیرهای نیکل ، مس و طلا ارایه دادند. همچنین گاجوسکا و همکاران [5] با کمک دینامیک مولکولی به تخمین استحکام موضعی در نانوتیرهای مسی اقدام کردهاند. پیشکاری و همکاران[8] نیز به بررسی ارتعاشی نانو رزوناتورهای سیلیکونی پرداختهاند. در مقاله مذکور، الاستیسیته سطح و همچنین تاثیرات اندازه از جمله مواردی بوده است که پیشکاری و همکاران مورد تحقیق قرار دادهاند. از طرف دیگر، رفتار نانوتیرهای ترکدار و بدون ترک با کمک روشهای تحلیلی یا عددی توسط نویسندگان بسیاری مورد توجه قرار گرفتهاند[9-13]. به عنوان مثال، ردی [9] تئوری غیرمحلی را برای بررسی خمش، کمانش و ارتعاشات تیرها ارائه داده است. وانگ و همکاران نیز به بررسی ارتعاشی تیرهای تیموشنکو با تئوری غیر محلی مبادرت کرده‌اند[10]. همچنین بهرا و همکاران ارتعاشات آزاد تیرهای تیموشنکو و اویلر را بررسی کردهاند[11]. وو و همکاران نیز روش همبستگی متعامد را به منظور بررسی تیرهای غیرمحلی تیموشنکو مورد استفاده قرار داده اند[12]. مطالعات بسیاری نشان داده که وجود ترک در ساختار میتواند باعث کاهش مقدار فرکانسهای طبیعی سیستم شود [13-17].

در بسیاری از مطالعات، مشخصات ارتعاشی تیرها توسط روش اجزا محدود بررسی شدهاند و تغییرات در مقادیر فرکانسی را به موقعیت و عمق ترک مرتبط می‌کنند [18-22]. همچنین برخی از مطالعات بر اساس تغییر در فرکانسهای طبیعی به علت وجود ترک به یافتن موقعیت ترک، اندازه ترک و یا پیشبینی رفتارهای ارتعاشی نانوتیرها پرداختهاند [23-25]. در اکثر تحقیقات نانوتیرها بصورت یک بعدی (تئوریهای تیموشنکو و اویلر-برنولی) مدل شدهاند و ترک را با یک فنر پیچشی در موقعیت ترک مدل کردهاند [26,27,29-31]. همچنین تحقیقات محدودی نیز به منظور افزایش دقت به مدل کردن ترک با دو فنر پیچشی و خطی اقدام کرده اند [28-33].

بر اساس دانش ما، تحقیقی برای مطالعه ترک در نانوتیرهای فلزی با روش دینامیک مولکولی وجود ندارد. بنابراین، در این مطالعه، به مقایسه و بررسی موقعیت و عمق ترک در نانو تیرهای آهن و تأثیر ترک بر فرکانس‌های طبیعی را به کمک روش دینامیک مولکولی و روش اجزا محدود سه‌بعدی موردمطالعه قرار داده‌ایم.

1. روش دینامیک مولکولی

در این مطالعه، مشخصات ارتعاشی نانوتیرهای ترک‌دار آهن به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی موردمطالعه قرار خواهند گرفت. برای این منظور در دو جهت x و y به مرکز تیر جابه‌جایی اولیه داده می‌شود و در ادامه اجازه خواهیم داد تیر آزادانه ارتعاش کند. در طی شبیه‌سازی، نیروهای بین اتمی توسط پتانسیل مستغرق اتمی (EAM) محاسبه می‌شوند. در این مطالعه از پتانسیل توسعه داده شده توسط مندلو [34] برای شبیه‌سازی استفاده شده است. نانوتیرهای مورد مطالعه در این پژوهش دارای طول ثابت و سطح مقطع مستطیلی می باشند. شکل 1 نمایش اتمی از ساختار نانوتیرهای مورد مطالعه است. در شکل اتمهای آبی رنگ به عنوان شرایط مرزی، اتمهای زرد رنگ به عنوان محدوده تحریک و اتمهای قرمز رنگ سایر اتمها می باشند.

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| **Fig 1.** Sample nanobeam with definition of different zones | |
| **شکل 1.** نمایش نانوتیر نمونه با تعریف بخش‌های مختلف | |

ترک‌هایی با عمق و موقعیت مختلف برای مطالعه انتخاب شده‌اند. به‌منظور شبیه‌سازی ترک، به‌اندازه یک ثابت شبکه از اتم‌ها حذف شده‌اند (شکل 2). مقدار موقعیت نرمال ترک از 0.1 تا 0.5 و عمق نرمال ترک از 0.1 تا 0.7 با گام‌های 0.1 در نظر گرفته شده‌اند.

|  |
| --- |
|  |
| **Fig 2.** Cracked nanobeam, definition of crack depth and position |
| **شکل 2.** نمایش تیر ترک‌دار، تعریف عمق ترک و موقعیت ترک |

برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، ابتدا ساختار به‌صورت هندسی کمینه انرژی شده است. سپس، نانوتیرها تحت هنگرد NVT و ترموستات نویز - هوور در دمای 1 کلوین متعادل شده‌اند. در این مرحله دو انتهای تیر به‌اندازه 2 ثابت شبکه به‌منظور اعمال شرایط مرزی دوسرگیردار به‌صورت مقید قرار داده شده‌اند. در این بخش هنگرد NVE را به سیستم اعمال کرده‌ایم و محدوده تحریک به‌اندازه 1.5 انگسترم در جهت x و y (هرکدام به‌صورت مجزا در دو شبیه‌سازی) جابه‌جا شده‌اند. در ادامه نمونه به مدت 5ns تحت NVE به تعادل رسانده شده است. در نهایت موقعیت مکانی اتم‌های پوسته بیرونی تیر به‌منظور مطالعات شکل مودها و فرکانس‌های طبیعی ذخیره شده‌اند. گام زمانی مورداستفاده برای حل معادله حرکت در شبیه‌سازی 1fs در نظر گرفته شده است. همه شبیه‌سازی‌ها توسط نرم‌افزار دینامیک مولکولی LAMMPS [35] انجام‌گرفته‌اند همچنین به‌منظور نمایش ساختارهای اتمی از نرم‌افزار OVITO استفاده شده است [36] .

با اعمال تبدیل فوریه سریع بر روی داده‌های ذخیره شده از موقعیت اتم‌های خارجی نانو تیر در طول زمان، موقعیت فرکانس‌های طبیعی استخراج شده‌اند [37].

1. روش اجزا محدود

به‌منظور بررسی و صحتسنجی فرکانس‌های طبیعی استخراج شده از روش دینامیک مولکولی، به دلیل عدم وجود منبع آزمایشگاهی از نرم‌افزار اجزا محدود استفاده شده است. نرم‌افزار اجزا محدود مورداستفاده COMSOL Multiphysics نسخه 5.3 بوده است [38]. در استفاده از اجزا محدود شبیه‌سازی در دو حالت بدون ترک و ترک‌دار انجام‌گرفته است.

1. بحث و نتایج

در این بخش به ارائه داده‌های استخراج شده از روش دینامیک مولکولی و همچنین اجزا محدود می‌پردازیم. در ابتدا شکل مود ها از نرم‌افزار اجزا محدود استخراج می‌شوند و در ادامه این اشکال با داده‌های حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مقایسه می‌شوند.

شکل 3 شکل مودهای تیر بدون ترک را ارائه می‌دهد. در این شکل مودهای 1 ، 4 و 6 در صفحه XZ ، مود های 2، 5، 8 و 9 در صفحه YZ و سایر مودها تغییرشکل سه‌بعدی دارند. شکل مودها و مقادیر فرکانسی متناظر آنها از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی که با روش اجزا محدود همخوانی دارند در شکل 4 ارائه شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود مود های بسیاری هستند که شبیه‌سازی دینامیک مولکولی توانایی ارائه آنها را ندارد. باتوجه ‌به منطقه تحریک انتخاب شده در تیر (مرکز تیر)، و همچنین بر اساس شکل مودهای تصویر شماره 3 که در بسیاری از مودها این محدوده دارای مقدار صفر می‌باشد، چنین مسئله‌ای قابل توجیه است.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 |
| **Fig 3.** The mode shapes of nanobeam from COMSOL Multiphysics | | | | | | | | |
| **شکل 3.** شکل مود های مختلف استخراج شده از نرم‌افزار COMSOL | | | | | | | | |

به‌هرحال، در اینجا سه شکل مود وجود دارد که در تمام شبیه‌سازی‌های انجام شده با دینامیک مولکولی قابل استخراج هستند و در ادامه پژوهش تنها در مورد این سه فرکانس صحبت خواهد شد. در جدول 1 مقادیر فرکانس طبیعی استخراج شده از دینامیک مولکولی و اجزا محدود با هم مقایسه شده‌اند.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  |  |  |  |  |  |
| FEM 9 | MD 3 | FEM 2 | MD 2 | FEM 1 | MD1 |
| **Fig 4**. The Mode shapes from MD simulation and their corresponding modes from FEM | | | | | |
| شکل 4. مقایسه شکل مود های استخراج شده با شکل مود های روش اجزا محدود | | | | | |

همان‌طور که در جدول 1 مشاهده می‌شود، مقادیر فرکانس‌های آزاد مستخرج از روش دینامیک مولکولی و اجزا محدود با دقت بسیار بالایی بر هم دیگر منطبق هستند.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| **جدول 1.** مقایسه مقادیر فرکانس آزاد استخراج شده از اجزا محدود و دینامیک مولکولی | | | |
| **Table 1.** Comparison of free frequency values obtained from FEM and molecular dynamics methods | | | |
| Error (%) | FEM (GHz) | MD (GHz) |  |
| 0.0165 | 18.168 | 18.165 | (1,1) |
| 9.24 | 31.06 | 28.19 | (2,2) |
| 4.40 | 118.8 | 113.57 | (3,9) |

در شکل 5 مقایسه‌ مقادیر فرکانس اول تیر ترک‌دار با دو روش دینامیک مولکولی و اجزا محدود ارائه شده است. در این تصویر مقادیر به‌صورت نرمال استفاده شده است (مقدار فرکانس اول با ترک بروی مقدار فرکانس اول بدون ترک). همان‌طور که می‌توان انتظار داشت در هر موقعیت ترک با افزایش عمق ترک کاهش فرکانس بیشتر شده است. به‌گونه‌ای که ماکزیمم کاهش فرکانس به ازای هر موقعیت ترک در عمق 0.7 می‌باشد. از طرفی کاهش در مقدار فرکانس‌ها به‌صورت خطی نیست و طبق شکل 5.ب فرکانس‌ها در موقعیت عمق 0.1 یک کاهش ناگهانی را از خود نشان می‌دهند. طبق داده‌های شبیه‌سازی اجزا محدود، ترک در موقعیت‌های 0.2 و 0.3 یک رفتار تقریباً ثابت را از خود نشان می‌دهند درصورتی‌که چنین رفتاری را نمی‌توان از داده‌های شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استنتاج کرد.

|  |
| --- |
|  |
| a |
|  |
| b |
| **Fig 5.** Comparison of the mode 1 frequencies of cracked nanobeam between a. MD and b. FEM |
| شکل 5. مقایسه مقادیر مود اول تیر ترک‌دار الف) دینامیک مولکولی ب) اجزا محدود |

شکل 6 و شکل 7 مقایسه تغییرات در مقادیر فرکانس طبیعی مودهای دوم و سوم (مود های دوم و نهم اجزا محدود) را ارائه می‌کنند. در شکل 6 روند نمودارها برای اجزا محدود و دینامیک مولکولی همخوانی بسیار خوبی باهم دیگر دارند. حداکثر درصد کاهش مقدار فرکانس طبیعی برای تیر با ترک در موقعیت 0.5 عمق 0.7 می‌باشد که برای روش دینامیک مولکولی و اجزا محدود به ترتیب 24% و 20% به‌دست‌آمده است. هرچند در اینجا به‌ازای ترک‌هایی که در موقعیت 0.3 و 0.4 هستند، داده‌های اجزا محدود کاهش بیشتری را برای ترک‌ها در موقعیت 0.3 ارائه می‌دهد ولی دردادههای دینامیک مولکولی تا عمق 0.5 عموماً هر دو کاهش هم‌اندازه گزارش شده است و در ادامه نیز کاهش بیشتری را برای ترک در موقعیت 0.4 شاهد هستیم.

|  |
| --- |
|  |
| a |
|  |
| b |
| **Fig 6.** Comparison of the mode 2 frequencies of cracked nanobeam between a. MD and b. FEM |
| **شکل 6**. مقایسه مقادیر مود دوم تیر ترک‌دار الف) دینامیک مولکولی ب) اجزا محدود |

برای فرکانس سوم، شکل 7 همخوانی بسیار بالایی را در رفتار هر دو روش اجزا محدود و دینامیک مولکولی از خود نشان می‌دهد. همان‌طور که به‌وضوح قابل‌مشاهده است ترک‌ها در موقعیت 0.2 تا عمق حدود 0.2 بر روی فرکانس سوم تأثیر چندانی ندارند و این مسئله را می‌توان دردادههای استخراج شده از هر دو روش مشاهده کرد. همچنین ترتیب بیشترین درصد کاهش مقدار فرکانس طبیعی نسبت به حالت بدون ترک در یک عمق ثابت در مود سوم به ترتیب از 0.2 ، 0.3 ، 0.1 و 0.4 و 0.5 می‌باشد.

|  |
| --- |
|  |
| a |
|  |
| b |
| **Fig 7.** Comparison of the mode 3 frequencies of cracked nanobeam between a. MD and b. FEM |
| **شکل 7.** مقایسه مقادیر مود سوم تیر ترک‌دار الف) دینامیک مولکولی ب) اجزا محدود |

1. نتایج

مطابق شبیه‌سازی‌ها و مقایسه‌هایی که در بخش ۴ انجام شده است می‌توان به موارد زیر به‌عنوان نتایج این پژوهش اشاره کرد:

1. در روش دینامیک مولکولی با روش تحریک تکجهته نمی‌توان همه شکل مود های یک ساختار را استخراج کرد.
2. در تیر دوسرگیردار، وجود ترک در مرکز تیر باعث بیشترین تغییر در مقادیر فرکانس طبیعی می‌شود.
3. برای ترک در موقعیت 0.2 طول تیر، کمترین مقدار تغییر در فرکانس طبیعی مشاهده می‌شود.
4. افزایش عمق ترک در مقایسه با موقعیت ترک تأثیر بسیار بیشتری در تغییر مقادیر فرکانسی دارد.
5. منابع

[1] A. Husain, J. Hone, H. W. C. Postma, X. Huang, T. Drake, M. Barbic, A. Scherer, and M. Roukes, *Applied Physics*. Lett. 83, 1240 (2003)

[2] M. Li, T. S. Mayer, J. A. Sioss, C. D. Keating, and R. B. Bhiladvala, *Nano Letter*. 7, 3281 (2007).

[3] M. Liao, S. Hishita, E. Watanabe, S. Koizumi and Y. Koide, *Advanced Material*., 2010, 22, 5393-5397.

[4] Pourkermani, A. G., Azizi, B., & Pishkenari, H. N. (2020). Vibrational analysis of Ag, Cu and Ni nanobeams using a hybrid continuum-atomistic model. *International Journal of Mechanical Sciences*, 165, 105208.

[5] Gajewska KK, Ma´zdziarz M. Atomistic and mean-field estimates of effective stiffness tensor of nanocrystalline copper*. Int J Eng Sci* 2018;129:47–62.

[6] Yang X, Sun Y, Wang F, Zhao J. Surface effects on the initial dislocation of Ag

nanowires. Comput Mater Sci 2015;106:23–8.

[7] Ahadi A, Melin S. Size dependence of the Poisson’s ratio in single-crystal FCC copper nanobeams. *Comput Mater Sci* 2016;111:322–7.

[8] Pishkenari HN, Afsharmanesh B, Akbari Ehsan. Surface elasticity and size effect on the vibrational behavior of silicon nano resonators. *Curr Appl Phys* 2015;15:1389–96.

[9] Reddy, J., Nonlocal theories for bending, buckling and vibration of beams. *International Journal of Engineering Science*, 2007. 45(2-8): p. 288-307.

[10] Wang, C. M., Y. Y. Zhang, and X. Q. He, Vibration of nonlocal Timoshenko beams. Nanotechnology, 2007. 18(10): p. 105401.

[11] Behera, L. and S. Chakraverty, Free vibration of Euler and Timoshenko nanobeams using boundary characteristic orthogonal polynomials*. Applied Nanoscience*, 2014. 4(3): p.347-358.

[12] Wu, L.-Y., et al., Vibrations of nonlocal Timoshenko beams using orthogonal collocation method*. Procedia Engineering*, 2011. 14: p. 2394-2402.

[13] Eltaher, M., A. E. Alshorbagy, and F. Mahmoud, Vibration analysis of Euler–Bernoulli nanobeams by using finite element method. *Applied Mathematical Modelling*, 2013. 37(7): p.4787-4797.

[14] Beni, Y. T., A. Jafaria, and H. Razavi, Size effect on free transverse vibration of cracked nano-beams using couple stress theory. International *Journal of EngineeringTransactions B: Applications*, 2014. 28(2): p. 296-304.

[15] Hasheminejad, S. M., et al., Free transverse vibrations of cracked nanobeams with surface effects*. Thin Solid Films*, 2011. 519(8): p. 2477-2482.

[16] Loghmani, M. and M. R. Hairi Yazdi, An analytical method for free vibration of multi cracked and stepped nonlocal nanobeams based on wave approach*. Results in Physics*, 2018. 11: p. 166-181.

[17] Abd Elkhalek, M., Osman, T., & Matbuly, M. S. (2019). Vibrations Analysis of Cracked Nanobeams Using Quadrature Technique. *Engineering Mathematics*, 3(1), 19.

[18] Biswal, A. R., Roy, T., Behera, R. K., Pradhan, S. K., & Parida, P. K. (2016). Finite element based vibration analysis of a nonprismatic Timoshenko beam with transverse open crack. *Procedia Engineering*, 144, 226-233.

[19] Nguyen, K. V. (2014). Mode shapes analysis of a cracked beam and its application for crack detection. *Journal of Sound and Vibration*, 333(3), 848-872.

[20] Orhan, S. (2007). Analysis of free and forced vibration of a cracked cantilever beam*. Ndt & E International*, 40(6), 443-450.

[21] Zeng, J., Ma, H., Zhang, W., & Wen, B. (2017). Dynamic characteristic analysis of cracked cantilever beams under different crack types*. Engineering Failure Analysis*, 74, 80-94.

[22] Zheng, D. Y., & Kessissoglou, N. J. (2004). Free vibration analysis of a cracked beam by finite element method. *Journal of Sound and vibration*, 273(3), 457-475.

[23] K.H. Barad, D.S. Sharma, V. Vyas, Procedia Eng. 51 (2013) 770–775.

[24] Barad, K. H., Sharma, D. S., & Vyas, V. (2013). Crack detection in cantilever beam by frequency based method. *procedia engineering*, 51, 770-775.

[25] Khalkar, V., & Ramachandran, S. (2017). Vibration analysis of a cantilever beam for oblique cracks. *ARPN J. Eng. Appl. Sci*., 12(4), 1144-1151.

[26] M. Behzad, A. Meghdari, A. Ebrahimi, Int. J. Eng. Trans. B Appl. 18 (4) (2005) 649–654.

[27] Chondros, T. G., Dimarogonas, A. D., & Yao, J. (1998). A continuous cracked beam vibration theory. Journal of sound and vibration, 215(1), 17-34.

[28] Loya, J. A., Rubio, L., & Fernández-Sáez, J. (2006). Natural frequencies for bending vibrations of Timoshenko cracked beams. *Journal of Sound and Vibration*, 290(3-5), 640-653.

[29] Swamidas, A. S. J., Yang, X., & Seshadri, R. (2004). Identification of cracking in beam structures using Timoshenko and Euler formulations*. Journal of Engineering Mechanics*, 130(11), 1297-1308.

[30] Khaji, N., Shafiei, M., & Jalalpour, M. (2009). Closed-form solutions for crack detection problem of Timoshenko beams with various boundary conditions*. International Journal of Mechanical Sciences*, 51(9-10), 667-681.

[31] A.Ç Batihan, S.K. Fevzi*, Int. J. Struct. Stab. Dyn*. 16 (05) (2016) 1550006.

[32] E. Viola, L. Nobile, L. Federici*, J. Eng. Mech*. 128 (2) (2002) 220–230.

[33] T. Yokoyama, M.C. Chen, Eng. *Fract. Mech*. 59 (3) (1998) 403–409.

[34] Mendelev, M. I., Han, S., Srolovitz, D. J., Ackland, G. J., Sun, D. Y., & Asta, M. (2003). Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron. *Philosophical magazine,* 83(35), 3977-3994.

[35] Plimpton, S. (1995). Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics*. Journal of computational physics*, 117(1), 1-19.

[36] Stukowski, A. (2009). Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO–the Open Visualization Tool*. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18(1), 015012.

[37] Narjabadifam, A., Vakili-Tahami, F., Zehsaz, M., & Seyyed Fakhrabadi, M. M. (2015). Three-dimensional modal analysis of carbon nanocones using molecular dynamics simulation. *Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics: Materials, Processing, Measurement, and Phenomena*, *33*(5), 051805.

[38] COMSOL, A. (2018). Comsol multiphysics reference manual, version 5.3. *COMSOL AB*.