

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده مکانیک

گروه طراحی جامدات

شبیه‌سازی عددی قابلیت جذب انرژی نانولوله کربنی

تحت ضربه بالستیک

دانشجو: محمد فرهادیان

اساتید راهنما:

دکتر محمود شریعتی

دکتر حمیدرضا ایپک‌چی

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

بهمن ماه ۱۳۹۲

دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده : مکانیک

گروه : طراحی جامدات

پایان نامه کارشناسی ارشد آقای محمد فرهادیان

تحت عنوان: شبیه‌سازی عددی قابلیت جذب انرژی نانولوله کربنی تحت ضربه بالستیک

در تاریخ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد

مورد ارزیابی و با درجه مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	اساتید مشاور	امضاء	اساتید راهنما
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :

امضاء	نمایندة تحصیلات تکمیلی	امضاء	اساتید داور
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :

تقدیم به پدر و مادر دلسوز و مهربانم که زحماتشان با هیچ واژه ای قابل قدردانی نیست.

شایسته است از زحمات بی دریغ و راهنمایی‌های ارزشمند استاد گرامی جناب آقای پروفسور محمود شریعتی در راستای انجام این پروژه تشکر و قدردانی نمایم. همچنین از تمامی عزیزانی که در این راستا بنده را یاری نمودند، بویژه آقای مهندس پروانه و خانم دکتر فرهادیان تشکر می‌نمایم.

تعهد نامه

اینجانب محمد فرهادیان دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته مهندسی مکانیک گرایش طراحی کاربردی دانشکده مکانیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه شبیه‌سازی عددی قابلیت جذب انرژی نانولوله کربنی تحت ضربه بالستیک تحت راهنمایی دکتر محمود شریعتی متعهد می‌شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می‌گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است

تاریخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.

چکیده

نانولوله کربنی را می‌توان شگفت‌انگیزترین ماده نانوساختار کشف‌شده تاکنون دانست. ویژگی‌های منحصر به فردی نظیر استحکام بالا، وزن سبک و قابلیت جذب انرژی بالا باعث شده این ماده به تازگی مورد توجه دانشمندان در ساخت جلیقه‌های ضدگلوله قرار گیرد. در این پایان‌نامه از مدلی ساختاری در محیط نرم‌افزار آباکوس برای تحلیل رفتار مکانیکی نانولوله کربنی تحت ضربه بالستیک استفاده شده است. در این مدل ساختاری از رابط‌های غیرخطی برای مدل کردن برهمکنش‌های پیوندی کشش و پیچش و همچنین از المان فنر غیرخطی محوری برای مدل کردن برهمکنش پیوندی تغییر زاویه استفاده شده است. از مزیت‌های این روش، اجرا شدن آن در فضای CAE نرم‌افزار آباکوس می‌باشد. این امر باعث می‌شود که برای تحلیل رفتار مکانیکی نانولوله‌های کربنی تحت شرایط مختلف مرزی و بارگذاری نیاز به برنامه‌نویسی نداشته باشیم و هر قابلیت‌هایی که نرم‌افزار در تحلیل مسائل مکانیکی داشته باشد را بتوان بر روی نانولوله اعمال کرد. در این پایان‌نامه فرایند ضربه توسط جسم صلبی با جرم مشخص به عنوان گلوله، شبیه‌سازی شده است. تأثیر پارامترهای گوناگونی مانند هندسه، نوع و شرایط مرزی نانولوله کربنی، محل اصابت گلوله به نانولوله کربنی و زاویه برخورد آن در رفتار مکانیکی نانولوله کربنی مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین تأثیر عیوب مختلف در نانولوله کربنی در میزان جذب انرژی آن تحت ضربه بررسی شده است. در انتها با توجه به اینکه در بررسی پارامترهای مذکور، گلوله از لحاظ هندسی با توجه به مطالعات گذشته طراحی شده، با تغییر هندسه گلوله رفتار نانولوله تحت ضربه بررسی شده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که در نانولوله کربنی دو سر ثابت انرژی جذب شده زمانی که گلوله به وسط نانولوله کربنی اصابت می‌کند بیشینه می‌شود؛ در حالی که در حالت یک سرگیردار در ارتفاع نسبی $z=0.6$ این مقدار بیشینه می‌گردد. با افزایش زاویه گلوله نسبت به افق جذب انرژی نانولوله کربنی کاهش می‌یابد. در نانولوله کربنی معیوب، میزان جذب انرژی کاهش یافته که این کاهش در عیب استون-والز بیشتر از عیوب تهی جای می‌باشد.

کلمات کلیدی: نانولوله کربنی، مدل مکانیک ساختاری، آباکوس، ضربه، انرژی

لیست مقالات مستخرج از پایان نامه

شریعتی محمود، فرهادیان محمد و ایپکچی حمیدرضا، "شبیه‌سازی عددی قابلیت جذب انرژی نانولوله کربنی تحت ضربه بالستیک" مجله مهندسی مکانیک مدرس، (ارسال جهت داوری).

فهرست مطالب

۱	فصل ۱: مقدمه
۷	فصل ۲: مروری بر مطالعات پیشین
۸	۱-۲ مقدمه
۹	۲-۲ مطالعات پیشین
۹	۱-۲-۲ پروانه و همکاران (۲۰۰۹)
۱۰	۲-۲-۲ پروانه و شریعتی (۲۰۱۰)
۱۱	۳-۲-۲ خلیلی و حق‌بین (۲۰۱۲)
۱۲	۴-۲-۲ ژانگ و میلواگنام (۲۰۰۶)
۱۳	۵-۲-۲ ژانگ و میلواگنام (۲۰۰۷)
۱۵	فصل ۳: نانولوله کربنی
۱۶	۱-۳ مقدمه
۱۶	۲-۳ کشف نانولوله کربنی
۱۷	۳-۳ ساختار نانولوله کربنی
۲۰	۴-۳ برهمکنش‌ها و پتانسیل‌های موجود در نانولوله کربنی
۲۱	۱-۴-۳ برهمکنش کشش پیوند
۲۲	۲-۴-۳ برهمکنش خمش زاویه‌ای پیوند (تغییر زاویه)
۲۳	۳-۴-۳ برهمکنش پیچش دوسطحی
۲۳	۴-۴-۳ برهمکنش پیچش خارج صفحه‌ای
۲۴	۵-۴-۳ برهمکنش واندروالس

- ۲۵ ۶-۴-۳ برهمکنش الکترواستاتیک
- ۲۶ ۵-۳ ویژگی‌های نانولوله کربنی
- ۲۷ ۶-۳ مدل‌سازی نانولوله کربنی
- ۲۷ ۱-۶-۳ مقدمه
- ۲۸ ۲-۶-۳ مدل‌سازی مولکولی
- ۲۹ ۱-۲-۶-۳ روش دینامیک مولکولی
- ۳۰ ۲-۲-۶-۳ روش‌های پایه
- ۳۱ ۳-۶-۳ مدل‌سازی پیوسته
- ۳۱ ۴-۶-۳ مدل‌سازی مکانیک ساختاری
- ۳۲ ۱-۴-۶-۳ مدل اودگارد
- ۳۳ ۲-۴-۶-۳ مدل لی و چو
- ۳۴ ۳-۴-۶-۳ مدل هو
- ۳۵ ۴-۴-۶-۳ مدل معو و روسی
- ۳۶ ۵-۴-۶-۳ مدل ساختاری جدید

فصل ۴: رفتار مکانیکی نانولوله کربنی تحت ضربه

- ۴۳ ۱-۴ مقدمه
- ۴۵ ۲-۴ شبیه‌سازی ضربه روی نانولوله کربنی
- ۵۰ ۱-۲-۴ بررسی صحت مدل و شبیه‌سازی
- ۶۰ ۲-۲-۴ زاویه گلوله
- ۶۶ ۳-۲-۴ قطر نانولوله کربنی

۴-۲-۴ طول نانولوله کربنی ۶۹

۴-۲-۵ نوع نانولوله کربنی ۷۲

۴-۲-۶ تأثیر عیوب بر روی رفتار مکانیکی نانولوله کربنی تحت ضربه ۷۶

۴-۲-۷ هندسه گلوله ۸۴

۴-۲-۸ بررسی تأثیر خطای مدل‌سازی در تحقیق حاضر ۸۹

۹۱ **فصل ۵: نتیجه‌گیری و پیشنهادات**

۵-۱ نتیجه‌گیری ۹۲

۵-۲ پیشنهادات ۹۳

۹۴ **مراجع**

فهرست اشکال

- شکل (۱-۲): مدول یانگ نانولوله کربنی تک‌جداره به عنوان تابعی از نسبت ظاهری نانولوله..... ۱۰
- شکل (۲-۲): نانوکامپوزیت شبیه‌سازی شده در آباکوس، شامل نانولوله و ماتریس..... ۱۱
- شکل (۳-۲): مدل اولیه نانولوله کربنی (الف): دو سر گیردار و (ب): یک سر گیردار..... ۱۲
- شکل (۴-۲): ارتباط میان جذب انرژی و ارتفاع نسبی محل برخورد گلوله در نانولوله کربنی یک سر گیردار به قطر ۰٫۷۵ نانومتر..... ۱۳
- شکل (۵-۲): انرژی جذب شده نرماله شده توسط نانولوله کربنی با سه قطر مختلف بر حسب ارتفاع نسبی محل برخورد گلوله..... ۱۴
- شکل (۶-۲): نمودار ویژگی‌های مختلف گلوله بر حسب زمان ۱: سرعت گلوله ۲: جابجایی گلوله و نانولوله ۳: جابجایی گلوله برای نانولوله کربنی به قطر ۱/۴۱ نانومتر..... ۱۴
- شکل (۱-۳): نمایی از ساختار اتمی C₆₀..... ۱۷
- شکل (۲-۳): مکانیزم ساخت نانولوله کربنی..... ۱۸
- شکل (۳-۳): سه نوع ساختار مختلف نانولوله کربنی..... ۱۹
- شکل (۴-۳): برهمکنش کشش پیوند در اتم‌های کربن..... ۲۱
- شکل (۵-۳): برهمکنش خمش زاویه‌ای در اتم‌های کربن..... ۲۲
- شکل (۶-۳): برهمکنش پیچش دو سطحی در اتم‌های کربن..... ۲۳
- شکل (۷-۳): برهمکنش پیچش خارج صفحه‌ای در اتم‌های کربن..... ۲۴
- شکل (۸-۳): برهمکنش واندروالس در اتم‌های کربن..... ۲۴
- شکل (۹-۳): پیوند کربن-کربن: (الف) مدل فیزیکی، (ب) مدل FE کشش پیوند، (ج) مدل FE خمش پیوند..... ۳۵
- شکل (۱۰-۳): پارامترهای مربوط به یک سلول واحد شش ضلعی..... ۳۸
- شکل (۱۱-۳): نحوه قرار گرفتن دستگاه مختصات محلی بر روی مرکز اتم‌های کربن..... ۴۰
- شکل (۱۲-۳): المان‌های فنر و رابط متناظر با برهمکنش اتم‌های کربن..... ۴۱
- شکل (۱۳-۳): تصویر یک نانولوله کربنی زیگزاگ در فضای CAE نرم‌افزار آباکوس..... ۴۱
- شکل (۱-۴): قطعه صلب طراحی شده به عنوان گلوله..... ۴۶
- شکل (۲-۴): مونتاز گلوله در کنار نانولوله کربنی با طول ۵/۱۸ نانومتر در دو نما..... ۴۶

- شکل (۳-۴): المان بندی اتم کربن..... ۴۸
- شکل (۴-۴): پارامترهای مختلف موقعیت گلوله قبل از برخورد..... ۵۱
- شکل (۵-۴): موقعیت‌های مختلف گلوله در ارتفاع‌های نسبی متفاوت قبل از برخورد..... ۵۱
- شکل (۶-۴): نمودار انرژی بر حسب زمان در حالت برخورد گلوله به نانولوله کربنی در ارتفاع نسبی $Z=0.5$ ۵۳
- شکل (۷-۴): منحنی انرژی جذب شده نرماله شده بر حسب ارتفاع نسبی (الف) تحقیق حاضر
(ب) ژانگ و میلواگانام..... ۵۴
- شکل (۸-۴): نمودار سرعت- زمان گلوله در موقعیت‌های مختلف..... ۵۵
- شکل (۹-۴): حداکثر تغییر شکل متناظر با کانتور جابجایی نانولوله کربنی دو سرگیردار در لحظه صفر شدن سرعت
گلوله برای ارتفاع‌های نسبی متفاوت گلوله (الف) $Z=0.3$ (ب) $Z=0.4$ (ج) $Z=0.5$ ۵۶
- شکل (۱۰-۴): منحنی انرژی جذب شده نرماله شده بر حسب ارتفاع نسبی (الف) تحقیق حاضر
(ب) ژانگ و میلواگانام..... ۵۸
- شکل (۱۱-۴): حداکثر تغییر شکل متناظر با کانتور جابجایی نانولوله کربنی یک سرگیردار در لحظه صفر شدن
سرعت گلوله برای ارتفاع‌های نسبی متفاوت گلوله (الف) $Z=0.3$ (ب) $Z=0.4$ (ج) $Z=0.5$ (د) $Z=0.6$ ۵۹
- شکل (۱۲-۴): حداکثر جابجایی نانولوله کربنی، (الف) یک سرگیردار، (ب) دو سرگیردار، در ارتفاع نسبی 0.5
برای گلوله..... ۶۰
- شکل (۱۳-۴): مسیر برخورد گلوله زاویه دار و افقی به نانولوله کربنی..... ۶۱
- شکل (۱۴-۴): منحنی تغییرات انرژی جذب شده نرماله شده توسط نانولوله کربنی بر حسب زاویه گلوله..... ۶۲
- شکل (۱۵-۴): حداکثر تغییر شکل متناظر با کانتور جابجایی نانولوله کربنی دو سرگیردار در لحظه صفر شدن
سرعت گلوله برای زوایای متفاوت گلوله (الف) $\theta=0$ (ب) $\theta=15$ (ج) $\theta=30$ (د) $\theta=45$ (ه) $\theta=60$ ۶۴
- شکل (۱۶-۴): سیر حرکتی گلوله با زاویه 15 درجه نسبت به افق برای نانولوله کربنی دو سرگیردار، (الف) قبل از
برخورد، (ب) لحظه 0.005 نانوثانیه، (ج) لحظه 0.01048 نانوثانیه، (د) لحظه 0.015 نانوثانیه، (ه) لحظه 0.02
نانوثانیه..... ۶۵
- شکل (۱۷-۴): حداکثر تغییر شکل متناظر با کانتور جابجایی نانولوله کربنی دوسرگیردار در لحظه صفر شدن
سرعت گلوله برای سه قطر مختلف (الف) $D=0.95$ nm (ب) $D=1.257$ nm (ج) $D=1.725$ nm..... ۶۷
- شکل (۱۸-۴): منحنی انرژی جذب شده نرماله شده نانولوله کربنی با قطرهای مختلف..... ۶۸

- شکل (۱۹-۴): منحنی مقدار انرژی جذب شده نرماله شده نانولوله کربنی بر حسب طول‌های مختلف..... ۷۰
- شکل (۲۰-۴): حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی دو سرگردار به طول (الف) ۵.۱۸nm (ب) ۶.۲۴۸nm (ج)..... ۷۱
- شکل (۲۱-۴): نمودار انرژی جذب شده نرماله شده برای نانولوله کربنی آرمچیر و زیگزاگ در ارتفاع‌های نسبی متفاوت گلوله..... ۷۳
- شکل (۲۲-۴): حداکثر تغییر شکل متناظر با کانتور جابجایی نانولوله کربنی آرمچیر دو سرگردار در لحظه صفر شدن سرعت گلوله برای ارتفاع‌های نسبی متفاوت گلوله، (الف) $Z=0.3$ (ب) $Z=0.4$ (ج) $Z=0.5$ ۷۴
- شکل (۲۳-۴): حداکثر تغییر شکل متناظر با کانتور جابجایی نانولوله کربنی (الف) آرمچیر (ب) زیگزاگ در ارتفاع نسبی $Z=0.5$ ۷۵
- شکل (۲۴-۴): حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی آرمچیر، (الف) دوسرگردار، (ب) یک سرگردار..... ۷۶
- شکل (۲۵-۴): نقص از نوع استون- والز در نانولوله کربنی آرمچیر..... ۷۷
- شکل (۲۶-۴): نقص از نوع تهی‌جای در نانولوله کربنی زیگزاگ..... ۷۷
- شکل (۲۷-۴): حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی معیوب از نوع تک تهی‌جای..... ۷۸
- شکل (۲۸-۴): حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی دوسرگردار معیوب (الف) تک تهی‌جای (۱)، (ب) تک تهی‌جای (۲)، (ج) دو تهی‌جای (۱)، (د) دو تهی‌جای (۲)..... ۸۱
- شکل (۲۹-۴): حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی معیوب (الف) استون- والز (۱) ، (ب) استون- والز (۲)..... ۸۲
- شکل (۳۰-۴): حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی یک سرگردار معیوب از نوع استون- والز، (الف) اصابت گلوله روی عیب، (ب) اصابت گلوله سمت مخالف عیب..... ۸۳
- شکل (۳۱-۴): (الف) ابعاد هندسی گلوله، (ب) مونتاژ گلوله در کنار نانولوله کربنی با طول ۷/۳۱۳ نانومتر..... ۸۴
- شکل (۳۲-۴): منحنی انرژی جذب شده نرماله شده بر حسب ارتفاع نسبی برای دو گلوله مختلف..... ۸۵
- شکل (۳۳-۴): حداکثر تغییر شکل متناظر با کانتور جابجایی نانولوله کربنی دو سرگردار در لحظه صفر شدن سرعت گلوله برای ارتفاع‌های نسبی متفاوت گلوله استوانه‌ای، (الف) $Z=0.3$ (ب) $Z=0.4$ (ج) $Z=0.5$ ۸۶
- شکل (۳۴-۴): گلوله مونتاژ شده در کنار نانولوله کربنی زیگزاگ به طول ۷/۳۱۳ در حالت عدم درگیری تمام عرض نانولوله کربنی در دو نما..... ۸۷
- شکل (۳۵-۴): حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی در لحظه صفر شدن سرعت گلوله..... ۸۸
- شکل (۳۶-۱): ابعاد سلول واحد شش ضلعی قبل از برخورد ۹۱

فهرست جداول

- جدول (۱-۳): پارامترهای ساختارهای مختلف نانولوله کربنی..... ۲۰
- جدول (۲-۳): ثابت‌های معادلات برهمکنش در نانولوله‌های کربنی..... ۳۹
- جدول (۱-۴): شرایط اولیه نانولوله کربنی و گلوله..... ۴۹
- جدول (۲-۴): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی زیگزاگ دو سرگیردار در موقعیت‌های مختلف گلوله..... ۵۲
- جدول (۳-۴): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی زیگزاگ یک سر گیردار در موقعیت‌های مختلف گلوله..... ۵۸
- جدول (۴-۴): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی دو سر گیردار در زاویه‌های مختلف برخورد گلوله..... ۶۲
- جدول (۵-۴): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی زیگزاگ دو سرگیردار با قطرهای مختلف..... ۶۶
- جدول (۶-۴): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی دو سرگیردار با طول‌های مختلف..... ۶۹
- جدول (۷-۴): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی آرمچیر دو سرگیردار در موقعیت‌های مختلف گلوله..... ۷۲
- جدول (۸-۴): انرژی جذب شده بوسیله نانولوله کربنی آرمچیر و زیگزاگ در ارتفاع نسبی ۰/۵ برای گلوله..... ۷۵
- جدول (۹-۴): انرژی جذب شده نانولوله کربنی زیگزاگ دو سرگیردار با انواع عیوب..... ۷۹
- جدول (۱۰-۴): حداکثر انرژی جذب شده بوسیله نانولوله کربنی یک سر گیردار با عیب استون- والز..... ۸۳
- جدول (۱۱-۴): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی زیگزاگ دو سرگیردار تحت ضربه توسط گلوله استوانه‌ای..... ۸۵
- جدول (۱۲-۴): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی زیگزاگ دو سرگیردار با موقعیتی متفاوت برای گلوله..... ۸۸

فصل ۱

مقدمه

انسان همواره به دنبال محافظت از خود در برابر آسیب‌های احتمالی ناشی از ضربه در میدان‌های جنگ بوده است. از این رو از هزاران سال پیش زره به تن کرده است. در قرن پنجم پیش از میلاد در ایران و یونان برای ساخت زره از ۱۴ لایه کتان استفاده می‌شده است. ۷۰۰ سال پس از میلاد نوعی زره بدون آستین شامل صفحه‌های فولادی یا آهنی که روی نوارهای چرمی چفت می‌شد در چین و کره ساخته شد که سبکی و انعطاف‌پذیری ویژه‌ای داشت. با پیشرفت سلاح و روی کار آمدن سلاح گرم توجه صنعتگران به تولید زره‌هایی جلب شد که به کمک صفحه‌های فولادی ضخیم‌تر و صفحه‌های سنگین اضافی بتوانند از بدن انسان در مقابل گلوله محافظت کنند. این کار باعث سنگینی زره شده و استفاده از آن برای شخص تن‌کننده طاقت‌فرسا می‌گردد. مهندسين در دهه ۱۹۶۰ یک جلیقه مقاوم در برابر گلوله و مناسب را ساختند که برخلاف زره‌های سنتی بسیار راحت بود. جلیقه‌های ضد گلوله سبک از فلز ساخته نشده بود بلکه از بافت‌های فیبری که قابل دوخت بر روی جلیقه و دیگر لباس‌های سبک می‌باشد، ساخته شده‌اند. در سال ۱۹۶۵ شرکت داپونت^۱ الیافی با نام تجاری کولار^۲ (از خانواده آرامید) تولید و از آن پارچه تولید کرد. در ابتدا کولار در صنعت لاستیک سازی و سپس در تولیدات گوناگونی مثل طناب و واشر و قسمت‌های مختلف هواپیما و قایق استفاده گردید. در سال ۱۹۷۱ الیاف کولار به عنوان جایگزین الیاف نایلون در جلیقه‌های ضد گلوله معرفی شد. در حال حاضر این الیاف یکی از مهم‌ترین الیاف مورد استفاده در تولید این نوع پوشاک می‌باشد [۱].

جلیقه‌های ضد گلوله امروزی، به دو نوع تقسیم می‌شود:

- جلیقه‌های ضد گلوله سخت
- جلیقه‌های ضد گلوله نرم

^۱ Du pont

^۲ Kevlar

جلیقه‌های ضد گلوله سخت از صفحه‌های فلزی و یا سرامیکی ضخیم ساخته می‌شوند و به اندازه کافی برای انحراف گلوله و سایر سلاح‌ها مقاوم‌اند. مواد بکار رفته در این جلیقه‌ها، گلوله‌ها را با همان نیرویی که به داخل در حال وارد شدن است به خارج هل می‌دهند. به این ترتیب جلیقه غیرقابل نفوذ خواهد بود. جلیقه‌های ضد گلوله سخت حفاظت بیشتری را نسبت به جلیقه‌های ضد گلوله نرم ایجاد می‌کنند ولی طاقت‌فرسا تر هستند. افسرهای پلیس و کارکنان نظامی این نوع از لوازم حفاظتی را در هنگامی که میزان خطر احتمالی بالا باشد به تن می‌کنند؛ ولی برای استفاده‌های روزمره عموماً از جلیقه‌های ضد گلوله نرم که می‌توان به صورت ژاکت یا تی‌شرت معمولی به تن کرد، استفاده می‌کنند. روش کار این جلیقه‌ها بسیار ساده است. در درون این جلیقه‌ها یک ماده ضد گلوله قرار دارد که در حقیقت یک توری بسیار قوی است. برای درک چگونگی عملکرد آن، تور دروازه فوتبال را در نظر بگیرید که در پشت دروازه بسته شده است. وقتی که توپ به دروازه شوت می‌شود، دارای انرژی زیادی است و در هنگام اصابت به تور، در یک نقطه مشخص تور را به عقب هل می‌دهد. هر رشته از یک سمت تیرک به سمت دیگر امتداد دارد و نیروی وارد آمده در آن نقطه مشخص را به سر تا سر تور پخش می‌کند. این نیرو به دلیل به هم بافته بودن رشته‌ها پخش می‌شود و به این طریق، همه قسمت‌های تور انرژی وارده از سوی توپ را جذب می‌کنند و فرقی نمی‌کند که گلوله به کدام قسمت از تور اصابت کرده باشد.

اگر یک تکه از ماده ضد گلوله را زیر میکروسکوپ قرار دهیم، همین ساختار را مشاهده خواهد شد. رشته‌های بلندی از الیاف که به هم تنیده شده‌اند تا یک ساختار توری شکل متراکم را تشکیل دهند. حال با توجه به اینکه یک گلوله بسیار سریع تر از توپ حرکت می‌کند، بنابراین این توری باید از مواد محکم تری ساخته شود. معروف‌ترین ماده‌ای که در ساخت جلیقه‌های ضد گلوله به کار می‌رود، الیافی به نام کولار است [۲]؛ الیافی سبک‌وزن که ۵ برابر مقاوم تر از یک تکه فولاد، در همان وزن است. زمانی که این ماده به صورت یک تور متراکم در می‌آید، می‌تواند نیروی زیادی را جذب کند. به منظور جلوگیری از رسیدن گلوله به سطح بدن، جلیقه ضد گلوله باید برخلاف ضربه مستقیمی که گلوله وارد

می‌کند، عمل کند. به تازگی استفاده از الیافی تار عنکبوت در تولید جلیقه‌ها متداول شده است. استحکام این رشته حدود ۲۰ مرتبه بالاتر از فولاد است [۳].

در هر حال دو عامل مهم در جلیقه‌های ضدگلوله، قابلیت جذب انرژی و سبکی آنها می‌باشد. این رو استفاده از موادی که دارای این خواص هستند برای دفع یا منحرف کردن گلوله مهم می‌باشد. جلیقه‌هایی که تاکنون ساخته شده است ممکن است از مرگ جلوگیری کند اما همچنان باعث کبودی و آسیب‌دیدگی اندام‌های حیاتی بدن می‌شوند. از همین رو پژوهش برای رسیدن به بهترین ماده جهت استفاده در جلیقه ضدگلوله همچنان ادامه دارد. آخرین پژوهش‌های صورت گرفته در این زمینه نشان می‌دهد که رشته‌هایی از جنس نانولوله کربنی^۱ حتی از ابریشم عنکبوت نیز مقاوم‌تر هستند. نانولوله‌های کربنی به دلیل استحکام بالا، وزن کم و ظرفیت جذب انرژی بالا بهترین مواد جهت ساخت وسایل ضد ضربه به ویژه جلیقه‌های ضدگلوله هستند.

نانولوله‌های کربنی به دلیل خواص فوق‌العاده مکانیکی و الکتریکی از سال ۱۹۹۱ که توسط ایجیما^۲ کشف شده‌اند [۴]؛ در کانون توجه محققان در سرتاسر جهان قرار گرفته‌اند و کارهای بسیار وسیعی در حوزه‌های مختلف در مورد این مواد صورت گرفته است. پس از کشف نانولوله‌های کربنی محققین به انجام آزمایش بر روی این ساختار روی آورده‌اند؛ اما صرف هزینه‌های بسیار زیاد برای انجام این آزمایش‌ها محققان را بر آن داشت تا با استفاده از روش‌های مختلف کامپیوتری به شبیه‌سازی رفتارهای مختلف این ماده بپردازند. از مهم‌ترین این روش‌ها می‌توان به روش‌های آبینیشیو^۳ و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی^۴ اشاره کرد. البته لازم به ذکر است که روش دینامیک مولکولی دارای دقت بسیار بالایی است؛ اما استفاده از آن نیاز به وقت و هزینه‌های زیادی دارد و بکارگیری آن برای همه مقدور نیست. این امر سبب شد تا محققین همچنان به دنبال روشی جامع و مطمئن باشند تا به وسیله آن بتوان نانولوله‌های کربنی را تحت بارگذاری‌ها و شرایط مرزی مختلف مورد بررسی قرارداد.

^۱ Carbon Nano Tube (CNT)

^۲ Ijima

^۳ Ab-initio

^۴ Molecular Dynamic (MD)

از این رو در سال ۲۰۰۲ استفاده از خصوصیات ساختاری برای مدل‌سازی نانو ساختارها پیشنهاد شد [۵]. در طی سال‌های گذشته مدل‌های مکانیک ساختاری تکامل یافته است؛ اما در تمامی مدل‌هایی که تاکنون ارائه شده است کاستی‌ها و معایبی وجود دارد. در این پروژه با استفاده از مدل مکانیک ساختاری رفتار نانولوله تحت ضربه بالستیک بررسی شده و پارامترهای مهم در جذب انرژی مورد مطالعه قرار می‌گیرد [۶].

بر این اساس در فصل‌های بعد ابتدا مروری بر کارهای انجام‌شده در زمینه شبیه‌سازی نانولوله‌ها و پدیده ضربه روی این مواد صورت گرفته، سپس مقدمه‌ای از نانولوله کربنی و شیوه‌های مدل‌سازی آن‌ها گفته شده و در ادامه به معرفی مدل استفاده شده در این پایان‌نامه و چگونگی ایجاد آن در نرم‌افزار آباکوس^۱ پرداخته شده است. در انتها نیز رفتار نانولوله کربنی تحت ضربه بررسی و نتایج حاصل از آن با نتایج حاصل از مدل‌های معتبر دیگر مقایسه شده است.

^۱ Abaqus

فصل ۲

مروری بر مطالعات پیشین

۲-۱ مقدمه

با توجه به پیشرفت تکنولوژی و صنعت، بشر همواره به دنبال موادی بوده که نسبت به مواد موجود دارای ویژگی‌ها و کیفیت برتری باشند. یکی از این مواد نانولوله‌های کربنی می‌باشد که در سال‌های گذشته استفاده از آن به دلیل ویژگی‌های منحصر به فردی نظیر استحکام بالا، وزن سبک و قابلیت جذب انرژی بالا، افزایش یافته است [۷]. ویژگی‌های یادشده از مهم‌ترین عوامل در ساخت تجهیزات ضدضربه از جمله جلیقه‌های ضد گلوله هستند. از این رو محققان به انجام آزمایش بر روی این ساختار روی آورده‌اند. اما مشکلات موجود در کارهای تجربی مانند صرف هزینه‌های مالی بسیار زیاد، محققان را بر آن داشته تا با استفاده از روش‌های مختلف کامپیوتری به مدل‌سازی و شبیه‌سازی رفتارهای مختلف این ماده بپردازند. روش‌های مختلف کامپیوتری برای شبیه‌سازی نانولوله‌ها پیشنهاد شده است که مهم‌ترین آن‌ها روش دینامیک مولکولی و مکانیک ساختاری می‌باشد. روش دینامیک مولکولی روش بسیار دقیقی است اما به دلیل حجم محاسبات بسیار بالا، این روش معمولاً به سیستم‌های کوچک محدود می‌شود. روشی که در سال‌های اخیر مورد استفاده قرار گرفته، روش مکانیک ساختاری می‌باشد. در این سال‌ها روش‌های مختلفی برای شبیه‌سازی مکانیک ساختاری نانولوله کربنی ارائه شده که هر کدام دارای عیب و کاستی بوده‌اند. مهم‌ترین عیب همه مدل‌های گذشته محدودیت آن‌ها در پوشش تمام مسائل مکانیکی است. در این پایان‌نامه از یک مدل ساختاری برای شبیه‌سازی رفتار نانولوله‌های کربنی تحت ضربه استفاده شده است [۶]. انواع روش‌های مدل‌سازی در فصل ۳ بررسی شده است.

در ادامه ابتدا به معرفی کارهای صورت گرفته بر روی نانولوله‌ها با استفاده از این مدل می‌پردازیم؛ سپس کارهای انجام شده در زمینه ضربه روی نانولوله کربنی به روش‌های دیگر معرفی می‌گردد. و در فصل‌های آینده به موضوع اصلی این پایان‌نامه، یعنی بررسی قابلیت جذب انرژی نانولوله کربنی تحت ضربه به شیوه مکانیک ساختاری و با استفاده از مدل معرفی شده، پرداخته می‌شود.

۲-۲ مطالعات پیشین

۱-۲-۲ پروانه و همکاران (۲۰۰۹)

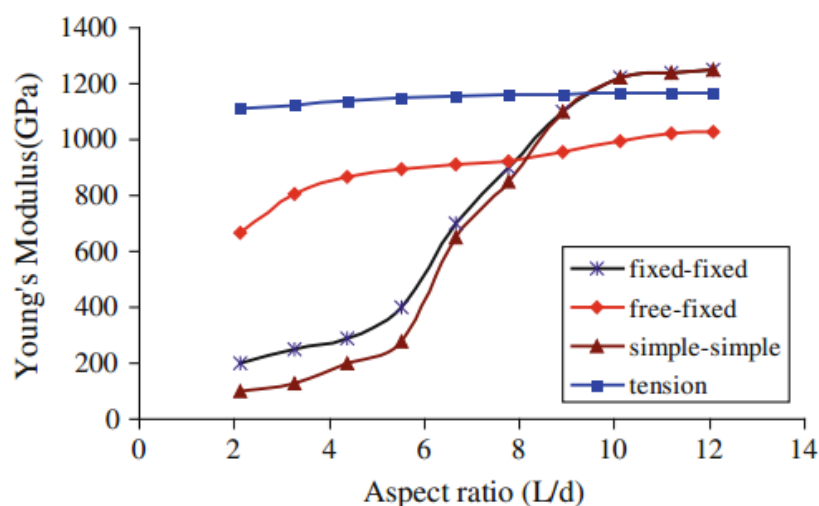
در سال ۲۰۰۹ پروانه و همکاران در مقاله‌ای ضمن معرفی مدل ساختاری جدید برای شبیه‌سازی نانولوله کربنی، به بررسی رفتار کمانشی این ساختار تحت بار محوری فشاری پرداختند [۸]. ضرورت ایجاد شرایط آزمایشگاهی مطلوب و گرانی تست‌ها در کارهای تجربی از یک سو و صرف وقت زیاد در روش دینامیک مولکولی از سوی دیگر آن‌ها را بر این داشت تا با ارائه یک مدل ساختاری جدید به بررسی نانولوله‌های کربنی بپردازند. آن‌ها در این مقاله تأثیر انواع مختلف عیوب در موقعیت‌های مختلف را بر بارها و کرنش‌های کمانش انواع نانولوله‌های کربنی با طول و قطر مختلف بررسی نمودند. آن‌ها برای مدل‌سازی نانولوله کربنی از یک رابط و فنر غیرخطی برای شبیه‌سازی پیوند میان اتم‌های کربن استفاده نمودند. در واقع این مدل ترکیبی از مدل‌های مکانیک ساختاری گذشته می‌باشد. با توجه به اینکه از این مدل در پایان‌نامه حاضر استفاده شده است؛ در فصل بعد به تفصیل در مورد این مدل توضیح داده خواهد شد. مقایسه کار آن‌ها با مدل‌های دینامیک مولکولی نشان‌دهنده سازگاری خوبی بین مدل جدید ارائه شده با مدل‌های دینامیک مولکولی می‌باشد. نتیجه کار آن‌ها نشان داد:

- ۱- عیوب تهی‌جای باعث به تأخیر افتادن مد کمانش اوپلر می‌گردند.
- ۲- یک عیب دو تهی‌جای، بیشتر از دو عیب تک تهی‌جای باعث کاهش در بار بحرانی کمانش خواهد شد.
- ۳- موقعیت عیوب تهی‌جای در طول نانولوله، تأثیر بسیاری در بار بحرانی کمانش دارد؛ به طوری که محل بحرانی برای وجود عیب، در مرکز نانولوله می‌باشد.

۲-۲-۲ پروانه و شریعتی (۲۰۱۰)

پروانه و شریعتی در ادامه کار خود در سال ۲۰۰۹ به بررسی خواص مکانیکی نانولوله کربنی پرداختند. آن‌ها با توجه به پراکندگی نتایج تجربی در زمینه پیش‌بینی مدول یانگ نانولوله کربنی، در سال ۲۰۱۰ در مقاله‌ای به بررسی تأثیر انواع بارگذاری و عیوب بر مدول یانگ نانولوله کربنی تک‌جداره با استفاده از مدل ساختاری پرداختند [۹]. در تمامی روش‌های آزمایشگاهی باید از نانولوله کربنی به قدر کافی بزرگ استفاده شود. همچنین روش‌های مختلفی برای به دست آوردن مدول یانگ نانولوله کربنی وجود دارد. آن‌ها در این بررسی مدول یانگ انواع مختلف نانولوله کربنی با طول‌ها و اقطار مختلف را با روش‌های گوناگون به دست آوردند (شکل (۲-۱)) و دریافتند که:

- ۱- بهترین روش برای پیش‌بینی مدول یانگ نانولوله کربنی استفاده از تست پیچش می‌باشد.
- ۲- عیوب مختلف تأثیر چندانی بر مدول یانگ نانولوله کربنی بزرگ ندارد. البته این تأثیر اندک در نانولوله کوچک بیشتر نمایان می‌باشد.
- ۳- نانولوله‌های آرمچیر^۱ در مقابل عیوب نسبت به نوع زیگزاگ^۲ آن حساس‌ترند.



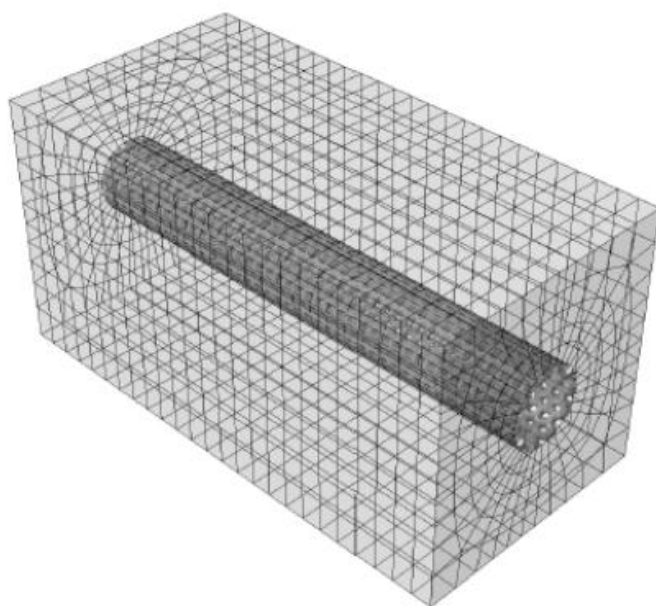
شکل (۲-۱): مدول یانگ نانولوله کربنی تک‌جداره به عنوان تابعی از نسبت ظاهری نانولوله [۹]

^۱ Armchair

^۲ Zigzag

۲-۲-۳ خلیلی و حق‌بین (۲۰۱۲)

در سال ۲۰۱۲ خلیلی و حق‌بین با ارائه مقاله‌ای به بررسی پارامترهای طراحی نانوکامپوزیت تقویت‌شده با نانولوله کربنی تحت بار ضربه‌ای پرداختند [۱۰]. در این مقاله تأثیر قطر و نوع نانولوله کربنی بر رفتار ضربه‌ای نانوکامپوزیت تقویت‌شده با این نانولوله‌ها بررسی شده است. نانولوله کربنی بوسیله المان‌های تیر در فضای قاب‌مانند با روش المان محدود (FEM) شبیه‌سازی شده است (شکل (۲-۲)). برای شبیه‌سازی از نرم‌افزار آباکوس استفاده شده است.



شکل (۲-۲): نانوکامپوزیت شبیه‌سازی شده در آباکوس، شامل نانولوله و ماتریس [۱۰]

آنها نتایج حاصل از این شبیه‌سازی را این‌گونه بیان نمودند:

نانولوله‌های کربنی با قطر کوچک‌تر، استحکام بهتری در برابر بار ضربه‌ای به نانوکامپوزیت می‌دهند.

رفتار ضربه‌ای نانوکامپوزیت به نوع نانولوله کربنی وابسته نیست.

بهترین راه برای بهبود خواص نانوکامپوزیت تحت بار ضربه‌ای استفاده از نانولوله آرمچیر کوچکتر در

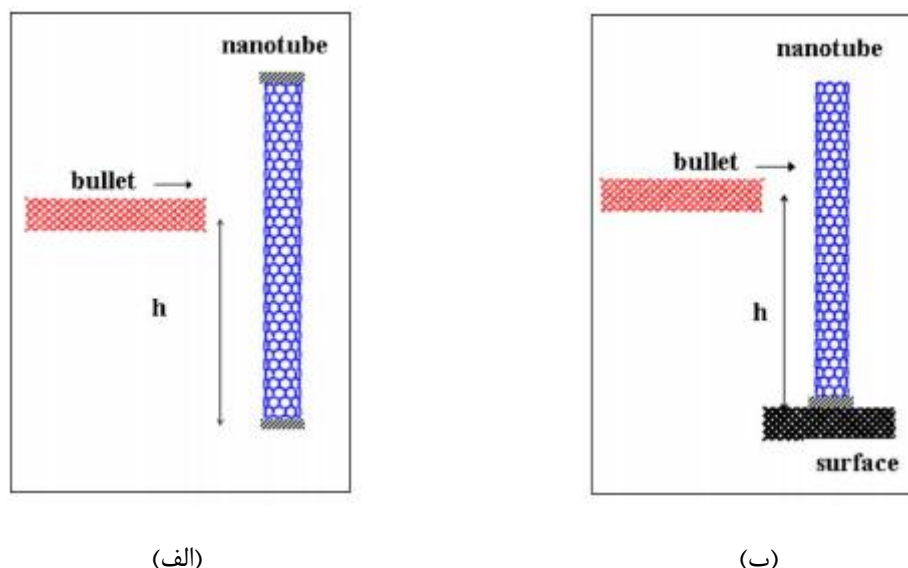
حجم ماتریس بزرگ‌تر می‌باشد. بنابراین بهتر است در طراحی نانوکامپوزیت تحت بار ضربه‌ای به جای

نوع روی اندازه نانولوله کربنی متمرکز شد.

۲-۲-۴ ژانگ و میلوآگنام (۲۰۰۶)

ژانگ و میلوآگنام در سال ۲۰۰۶ طی مقاله‌ای قابلیت جذب انرژی نانولوله‌های کربنی را به شیوه دینامیک مولکولی و با استفاده از پتانسیل سه بعدی ترسوف - برنر^۱، مورد بررسی قرار دادند [۱۱]. آن‌ها در مقاله خود یک قطعه الماس با ابعاد $۰.۷nm^3 \times ۳.۵۶ \times ۳.۵۶$ را به عنوان گلوله در نظر گرفتند به طوری که عرض این گلوله از عرض بزرگ‌ترین نانولوله بعد از برخورد و تغییر شکل بیشتر می‌باشد. آن‌ها ارتباط میان شعاع نانولوله، مکان نسبی برخورد گلوله و سرعت گلوله با میزان جذب انرژی توسط نانولوله کربنی تک جداره را بررسی نمودند. در کار آن‌ها گلوله با سرعت ثابت در بازه ۱۰۰ تا ۱۵۰۰ متر بر ثانیه و از یک فاصله مشخص نسبت به محور مرکزی نانولوله و عمود بر این محور به آن برخورد می‌کند. نانولوله مورد استفاده در کار آن‌ها شامل سه نمونه نانولوله کربنی زیگزاگ با قطرهای ۰٫۷۵ ، ۱٫۴۱ و ۲٫۱۱۴ نانومتر و طول‌های مختلف می‌باشد.

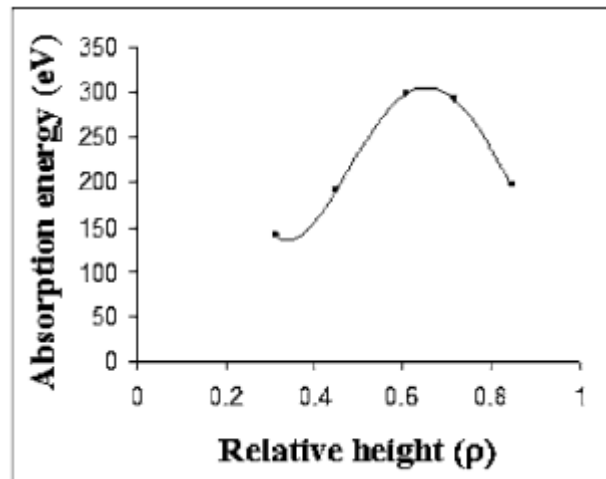
شرایط مرزی برای نانولوله به دو صورت یک سر گیردار و دو سر گیردار در نظر گرفته شد (شکل (۲-۳)). از اتلاف گرما در طی فرایند ضربه نیز صرف نظر شده است.



شکل (۲-۳): مدل اولیه نانولوله کربنی (الف): دو سر گیردار و (ب): یک سر گیردار [۱۱].

^۱ Tersoff-Brenner

آن‌ها مشاهده نمودند که وقتی گلوله به وسط نانولوله کربنی دو سر گیردار برخورد می‌کند؛ میزان جذب انرژی ماکزیمم می‌شود. درحالی‌که میزان جذب انرژی نانولوله یک سر گیردار هنگامی بیشینه است که گلوله در ارتفاع نسبی ۰.۶ نسبت به سر ثابت به نانولوله کربنی برخورد می‌کند (شکل (۲-۴)). قطر نانولوله نیز در محل بیشینه شدن حداکثر انرژی جذب‌شده تأثیری ندارد.

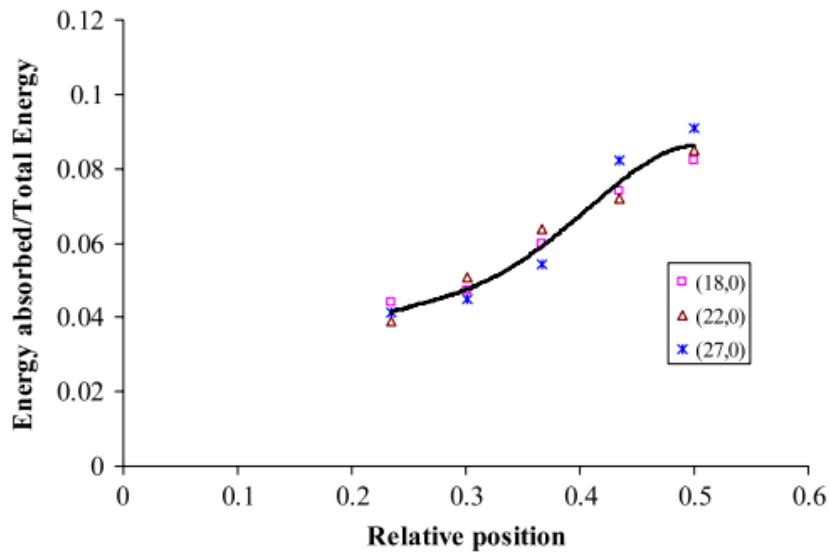


شکل (۲-۴): ارتباط میان جذب انرژی و ارتفاع نسبی محل برخورد گلوله در نانولوله کربنی یک سر گیردار به قطر ۰.۷۵ نانومتر [۱۱]

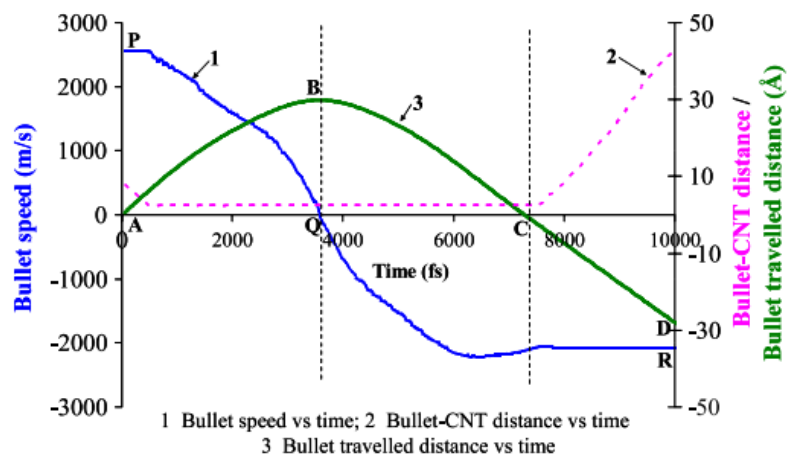
۲-۲-۵ ژانگ و میلواگانام (۲۰۰۷)

ژانگ و میلواگانام در ادامه کار خود در سال ۲۰۰۶ به بررسی ظرفیت مقاومت نانولوله کربنی در برابر ضربه پرداختند [۱۲]. آن‌ها در این کار به منظور نشان دادن تقریبی شرایط نانولوله‌ها در کامپوزیتها فقط از نانولوله کربنی دو سر گیردار استفاده نمودند. علت این امر این است که آن‌ها بر این عقیده بودند که در مصارف صنعتی از نانولوله‌ها، این مواد به شکل دو سر ثابت در کامپوزیتها استفاده می‌شوند. همچنین بازه سرعت را به ۱۰۰۰ تا ۳۵۰۰ متر بر ثانیه افزایش دادند. پارامترهایی نظیر مکان برخورد و سرعت گلوله را بررسی نمودند. و مشاهده نمودند که جذب انرژی در وسط نانولوله کربنی ماکزیمم شده و این امر مستقل از قطر نانولوله کربنی می‌باشد (شکل (۲-۵)). با افزایش قطر نانولوله قابلیت جذب انرژی بیشتر شده یعنی نانولوله‌های با قطر بزرگ‌تر در برابر سرعت‌های

بزرگ تری از گلوله مقاومت می کنند. همچنین آن ها دریافتند که وقتی گلوله در ارتفاع نسبی مختلف به نانولوله برخورد می کند، فرآیند برگشت گلوله در یک زمان تقریباً مشابه شروع می شود؛ اما افزایش و کاهش سرعت در موقعیت های مختلف متفاوت است که این امر ناشی از وابستگی تغییر شکل نانولوله به ارتفاع نسبی محل برخورد گلوله می باشد. در نهایت نیز گلوله به یک سرعت ثابت رسیده که این سرعت از سرعت اولیه گلوله کمتر است (شکل (۲-۶)).



شکل (۲-۵): انرژی جذب شده نرماله شده توسط نانولوله کربنی با سه قطر مختلف بر حسب ارتفاع نسبی محل برخورد گلوله [۱۲]



شکل (۲-۶): نمودار ویژگی های مختلف گلوله بر حسب زمان ۱: سرعت گلوله ۲: جابجایی گلوله و نانولوله ۳: جابجایی گلوله برای نانولوله کربنی به قطر ۱/۴۱ نانومتر [۱۲]

فصل ۳

نانولوله کربنی

۳-۱ مقدمه

کربن یکی از معروفترین و کارآمدترین عناصر در ساخت ترکیبات مختلف است. کلمه کربن از کلمه لاتین به معنای " کربو"^۱ گرفته شده است که رومی‌ها آن را زغال چوب می‌نامند [۱۳]. البته در دنیای مدرن، آن فراتر از یک زغال چوب می‌باشد. از کربن، فیبرهای با استحکام بالا، یکی از بهترین روان‌کننده‌ها (گرافیت)، سخت‌ترین کریستال‌ها و مواد (الماس)، محصولات غیربلورین (کربن شبه شیشه‌ای) و ... به دست می‌آیند. توانایی یک عنصر در ترکیب با اتم‌هایش مختص کربن نمی‌باشد. اما این عنصر در تعداد و تنوع آلوتروپ‌ها منحصر به فرد می‌باشد. این عنصر بیشترین تعداد آلوتروپ را در میان عناصر دیگر دارا می‌باشد. خصوصیات آلوتروپ‌های مختلف کربن می‌توانند بطور گسترده تغییر کنند. به عنوان مثال، الماس یکی از سخت‌ترین مواد شناخته‌شده و گرافیت یکی از نرم‌ترین آن‌ها می‌باشد. الماس یک عایق الکتریکی در حالیکه گرافیت یک هادی الکتریکی می‌باشد. در این میان نانولوله‌های کربن و فلورین‌ها، توجه دانشمندان را بیشتر از دیگر شکل‌های کربن به خود جلب کرده‌اند. اگرچه مدت زمان زیادی از کشف نانولوله‌های کربن و فلورین نمی‌گذرد؛ اما تحقیقات وسیعی در زمینه شناسایی، ساخت و بکارگیری آن‌ها در صنایع مختلف انجام شده و پیشرفت‌های زیادی نیز در این رابطه صورت گرفته است.

۳-۲ کشف نانولوله کربنی

تاریخ لوله‌های نانومتری کربن گرافیتی به گذشته‌ای دور در سال ۱۹۵۲ برمی‌گردد. در آن سال رادشکوویچ^۲ و لوکیانویچ^۳ تصاویر واضحی از لوله‌های ۵۰ نانومتری کربن را در مجله روسی "شیمی فیزیک"^۴ به چاپ رساندند. با این وجود اغلب مقالات معروف و علمی، کشف ساختار اتمی C₆₀

^۱ Carbo

^۲ Radushkevich

^۳ Lukyanovich

^۴ Russian journal of physical chemistry

(شکل (۳-۱)) را سرآغاز این تحول جدید در علم نانو می‌دانند. در سال ۱۹۹۰ مقاله‌ای توسط دونالد هافمن^۱ از دانشگاه آریزونا و ولف گانگ^۲ کراشمربینی بر کشف ساختار جدیدی از کربن که دارای ۶۰ اتم کربن است، در نشریه نیچر^۳ به چاپ رسید. ساختاری که تا قبل از آن تنها به صورت تئوری پیش-بینی شده بود.



شکل (۳-۱): نمایی از ساختار اتمی C₆₀

این امر سبب باز شدن دریچه‌ای جدید به علم نانو گردید به طوری که در سال ۱۹۹۱ ساختار شگفت‌انگیز دیگری از اتم‌های کربن به نام نانولوله کربنی توسط ایجیما^۴ کشف شد و توجه بسیاری از محققان و دانشمندان را به خود معطوف نمود. خواص منحصر به فرد مکانیکی و الکتریکی این ساختار برای محققین بسیار جالب و قابل توجه بود.

۳-۳ ساختار نانولوله کربنی

مکانیزم پیوندها در نانولوله‌های کربنی بسیار شبیه گرافن^۴ می‌باشد. عدد اتمی کربن ۶ است و از نقطه نظر فیزیک اتمی، ساختار الکترونیکی این اتم $1s^2 2s^2 2p^2$ می‌باشد. نانولوله‌ها تماماً از پیوند sp^2 تشکیل شده‌اند مانند گرافیت. این ساختار پیوند از پیوند sp^3 که در الماس وجود دارد قوی‌تر است و استحکام منحصر به فردی به این مولکول‌ها می‌دهد. کوچک‌ترین ساختار واحد تشکیل دهنده یک

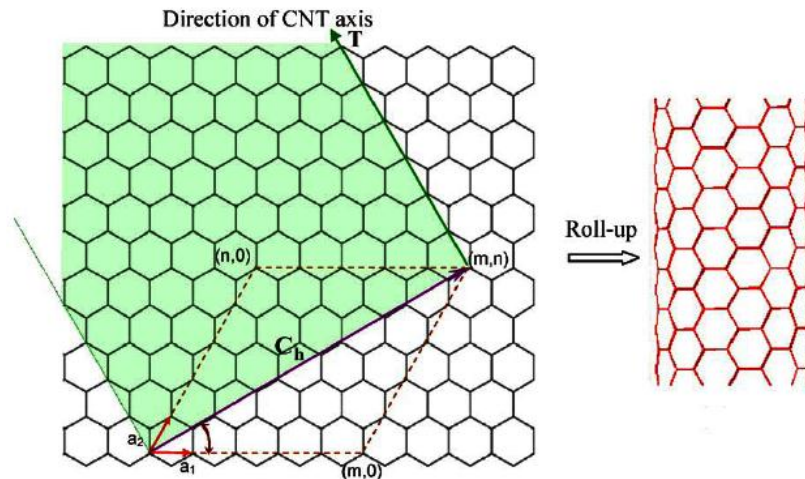
^۱ Donald Huffman

^۲ Wolfgang Kratschmer

^۳ Nature

^۴ Graphene

نانولوله کربنی حلقه‌ای متشکل از شش اتم کربن است. معمولاً برای مدل‌سازی و درک بهتر از ساختار نانولوله‌های کربنی، فرض می‌کنند که این نانولوله‌ها از پیچیده شدن یک گرافن تشکیل یافته‌اند (شکل (۳-۲)). در واقع نانولوله‌ها در زمان تشکیل به صورت لوله‌ای بوجود می‌آیند و توسط یک سرپوش نیمکره شبه فلورون بستن شده‌اند.



شکل (۳-۲): مکانیزم ساخت نانولوله کربنی [۱۴]

اگر نانولوله از یک لایه گرافن لوله شده تشکیل یافته باشد، به آن نانولوله تک‌دیواره و اگر از چند لایه گرافن لوله شده هم‌مرکز تشکیل یافته باشد، به آن نانولوله چنددیواره اطلاق می‌گردد. طول و قطر این ساختارها در مقایسه با نانولوله‌های تک‌دیواره بسیار متفاوت بوده که در نتیجه، خواص آن‌ها نیز بسیار متفاوت می‌باشد. همچنین در این نانولوله‌ها فاصله بین لایه‌ها در حدود 0.34 نانومتر معادل فاصله بین لایه‌ای گرافیت می‌باشد. در یک صفحه گرافن، اتم‌های کربن به صورت ساختارهای شش‌گوش در کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند، به طوریکه هر اتم با سه اتم دیگر مجاور است. حالت‌های مختلف زیادی برای لوله کردن یک گرافن وجود دارد. جهت چرخش این لایه گرافن، نوع ساختار نانولوله‌های کربنی را به وجود می‌آورد. همان‌گونه که در شکل (۳-۳) مشاهده می‌شود، سه نوع ساختار متفاوت از پیچیده شدن لایه گرافن ایجاد می‌گردد.

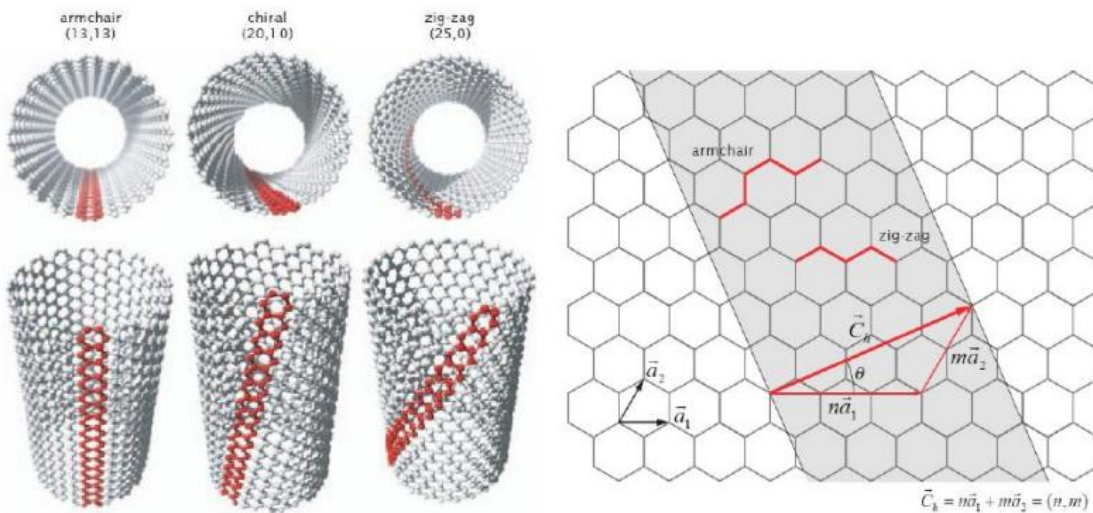
جهت چرخش توسط یک بردار که به نام بردار چرخش یا بردار چیرال^۱ معروف است، بیان می‌شود. این بردار می‌تواند به صورت یک ترکیب خطی از بردارهای انتقال واحد در شبکه شش وجهی تعریف شود [۱۵]:

$$C_h = ma_1 + na_2 \quad (۱-۳)$$

که m و n اعداد صحیح هستند و a_1 و a_2 بردارهای شبکه شش وجهی گرافیت می‌باشند. زاویه بین a_1 و a_2 زاویه چیرال نامیده می‌شود که از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$\theta = \sin^{-1} \left[\frac{\sqrt{3}m}{4\sqrt{m^2 + mn + n^2}} \right] \quad (۲-۳)$$

نانولوله‌ها با بردارهای چیرال متفاوت، دارای خواص متفاوتی می‌باشند نظیر هدایت الکتریکی و استقامت مکانیکی متفاوت. جدول (۱-۳) پارامترهای مربوط به ساختارهای مختلف نانولوله‌های کربنی نظیر قطر و زاویه چیرال نانولوله‌ها را نشان می‌دهد.



شکل (۳-۳): سه نوع ساختار مختلف نانولوله کربنی [۱۶]

^۱ Chiral

جدول (۳-۱): پارامترهای ساختارهای مختلف نانولوله کربنی [۱۵]

نوع نانولوله	شاخص‌های چیرال (m,n)	زاویه چیرال (θ)	قطر نانولوله (D_{NT})
زیگزاگ	(m, 0)	0	$\frac{a_0 m}{\pi}$
آرمچیر	(m,m)	30	$\frac{\sqrt{3} a_0 m}{\pi}$
چیرال	(m,n)	$30 > \theta > 0$	$\frac{a_0 \sqrt{m^2 + mn + n^2}}{\pi}$

۳-۴ برهمکنش‌ها و پتانسیل‌های موجود در نانولوله کربنی

به طور کلی انرژی پتانسیل موجود بین اتم‌های کربن را به صورت زیر بیان می‌کنند [۱۷]:

$$U_{total} = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum U_\phi + \sum U_\omega + \sum U_{vdw} + \sum U_{el} \quad (3-3)$$

که در آن U_r ، ناشی از برهمکنش کشش پیوند^۱، U_θ ناشی از برهمکنش خمش زاویه‌ای پیوند^۲، U_ϕ ناشی از برهمکنش پیچش دوسطحی پیوند^۳، U_ω ناشی از برهمکنش پیچش خارج صفحه‌ای^۴، U_{vdw} ناشی از برهمکنش واندروالس^۵ و U_{el} ناشی از برهمکنش الکترواستاتیک^۶ بین اتم‌ها می‌باشد. چهار پتانسیل اول مربوط به برهمکنش‌های پیوندی در اتم می‌شوند و پتانسیل‌های واندروالس و الکترواستاتیک مربوط به برهمکنش‌های غیرپیوندی هستند.

نشریات بسیار زیادی در زمینه مکانیک مولکولی وجود دارند که روش‌های دستیابی به توابع هر یک از پتانسیل‌های فوق را ارائه کرده‌اند [۱۸-۲۰]. از این رو بسته به نوع ماده و شرایط بارگذاری در نظر گرفته شده، توابع پتانسیل مختلفی بکار می‌رود. معمولاً به دلیل آنکه برهمکنش‌های واندروالس و

^۱ Stretching bond

^۲ Bending bond

^۳ Dihedral angle torsion

^۴ Out-of-plane torsion

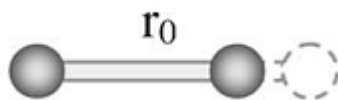
^۵ Van der waals

^۶ Electrostatic

الکترواستاتیک در مقابل سایر برهمکنش‌ها ضعیف‌تر می‌باشند، برای سیستم‌های کووالانسی از دو پتانسیل واندروالس و الکترواستاتیک صرف‌نظر می‌گردد. در ادامه به بررسی هر یک از پتانسیل‌های فوق بصورت جداگانه می‌پردازیم.

۳-۴-۱ برهمکنش کشش پیوند

این برهمکنش یک برهمکنش پیوندی می‌باشد که از دور و نزدیک شدن دو اتم در راستای پیوند ناشی می‌شود. (شکل (۳-۴)) این برهمکنش قوی‌ترین برهمکنش در سیستم‌های کووالانسی محسوب می‌شود.



شکل (۳-۴): برهمکنش کشش پیوند در اتم‌های کربن

پتانسیل‌های مختلفی در نشریات گوناگون برای این برهمکنش ارائه گردیده است. یکی از پتانسیل‌های بسیار معروف که اخیراً به علت سادگی و دقت قابل‌قبول آن مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته است، پتانسیل مورس^۱ اصلاح شده می‌باشد [۱۷]:

$$U_r = D_e \left\{ \left[1 - e^{-\beta(r-r_0)} \right]^2 - 1 \right\} \quad (۳-۴)$$

که در آن r_0 ، طول اولیه (تعادل) پیوند C-C در نانولوله‌های کربنی و r ، طول ثانویه (کشیده یا فشرده) پیوند می‌باشد. طول تعادل پیوند در مقالات مختلف از ۰/۱۳۹ نانومتر تا ۰/۱۴۲ نانومتر تغییر می‌کند. سایر پارامترهای پتانسیل مورس، به صورت زیر است:

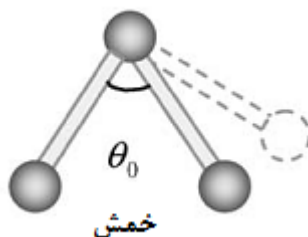
$$\beta = 26.25 \text{ nm}^{-1} \quad D_e = 0.6031 \text{ nN.nm}$$

^۱ Morse

۳-۴-۲ برهمکنش خمش زاویه‌ای پیوند (تغییر زاویه)

این برهمکنش یک برهمکنش پیوندی می‌باشد که از تغییر زاویه در دو پیوند مجاور یکدیگر ایجاد

می‌شود. (شکل (۵-۳))



شکل (۵-۳): برهمکنش خمش زاویه‌ای در اتم‌های کربن

مقدار این برهمکنش از برهمکنش کششی کمتر می‌باشد؛ اما نقش بسیار مهمی را در پایداری ساختار مولکولی لوله‌ای ایفا می‌کند. معروف‌ترین پتانسیل به کار گرفته شده برای این برهمکنش، پتانسیل مورس اصلاح شده می‌باشد (معادله (۵-۳)). یکی از تفاوت‌های پتانسیل مورس و پتانسیل مورس اصلاح شده، همین عبارت پتانسیل برای برهمکنش خمش می‌باشد که در پتانسیل مورس عادی، در نظر گرفته نشده است.

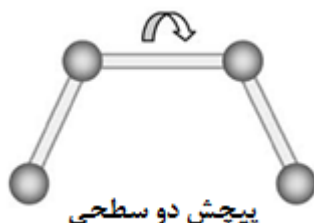
$$U_{\theta} = \frac{1}{2} k_{\theta} (\theta - \theta_0)^2 [1 + k_{sextic} (\theta - \theta_0)^4] \quad (5-3)$$

که در آن θ_0 ، زاویه‌ی اولیه (تعادل) میان دو پیوند C-C در نانولوله‌های کربنی و θ ، زاویه ثانویه میان دو پیوند می‌باشد. مقدار زاویه تعادل میان دو پیوند C-C در نانولوله‌های کربنی ۱۲۰ درجه می‌باشد. سایر پارامترهای پتانسیل مورس، بسته به طول پیوند در نظر گرفته شده به صورت زیر است:

$$\begin{array}{lll} r_0 = 0.139 \text{ nm} & k_{\theta} = 0.9 \text{ nN} \cdot \text{nm} / \text{Rad}^{-2} & k_{sextic} = 0.754 \text{ Rad}^{-4} \\ r_0 = 0.142 \text{ nm} & k_{\theta} = 1.42 \text{ nN} \cdot \text{nm} / \text{Rad}^{-2} & k_{sextic} = 0.754 \text{ Rad}^{-4} \end{array}$$

۳-۴-۳ برهمکنش پیچش دوسطحی

این برهمکنش یک برهمکنش پیوندی می باشد که از چرخش زاویه ای دو اتم نسبت به هم حول محور پیوند ایجاد می شود. مقدار این برهمکنش از برهمکنش های کششی و خمشی ضعیف تر است. (شکل (۶-۳))



شکل (۶-۳): برهمکنش پیچش دوسطحی در اتم های کربن

یکی از توابعی که بسیار برای برهمکنش پیچشی به کار می رود، یک نوع پتانسیل پیچشی متناوب است که به صورت زیر بیان می گردد [۱۸]:

$$U_{\phi} = \frac{1}{2} k_{\phi} [1 + \cos(n\phi - \phi_0)] \quad (6-3)$$

که در آن ϕ_0 ، زاویه اولیه (تعادل) میان سه پیوند C-C در دوسطح و ϕ ، زاویه ثانویه میان دو سطح می باشد. مقدار زاویه تعادل در نانولوله های کربنی 180° درجه می باشد. سایر پارامترهای تابع فوق به صورت زیر است:

$$k_{\phi} = 0.278nN.nm / Rad^{-2} \quad n = 2$$

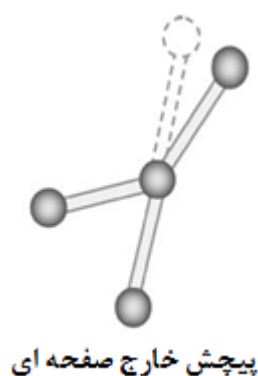
۴-۴-۳ برهمکنش پیچش خارج صفحه ای

این برهمکنش یک برهمکنش پیوندی می باشد که از چرخش یک پیوند حول صفحه تشکیل دهنده سه اتم مجاور ناشی می شود. تابع پیشنهاد شده برای پتانسیل مزبور به صورت زیر است [۱۸]:

$$U_{\omega} = \frac{1}{2} k_{\omega} [1 + \cos(n\omega - \omega_0)] \quad (7-3)$$

که در آن ω_0 ، زاویه اولیه (تعادل) میان سه پیوند C-C در دوسطح و ω ، زاویه ثانویه میان دو سطح می‌باشد. مقدار زاویه تعادل در نانولوله‌های کربنی ۱۸۰ درجه می‌باشد. سایر پارامترهای تابع فوق به صورت زیر است:

$$k_{\omega} = 0.278nN.nm / Rad^{-2}, n = 2$$



شکل (۷-۳): برهمکنش پیچش خارج صفحه‌ای در اتم‌های کربن

۳-۴-۵ برهمکنش واندروالس

این برهمکنش یک برهمکنش غیرپیوندی است. این برهمکنش نسبت به برهمکنش‌های پیوندی بسیار ضعیف است و فقط در نانولوله‌های چند دیواره مهم می‌باشد. برهمکنش میان دیواره‌های نانولوله‌های چنددیواره از نوع واندروالس می‌باشد. (شکل (۸-۳))



شکل (۸-۳): برهمکنش واندروالس در اتم‌های کربن

به منظور تعریف برهمکنش واندروالس روابط مختلفی ارائه شده است که معروفترین آنها

پتانسیل لنارد-جونز^۱ می باشد و به صورت زیر تعریف می شود [۲۱]:

$$U_{vdw} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (۸-۳)$$

که در آن r ، فاصله میان دو اتم می باشد. سایر پارامترهای پتانسیل لنارد-جونز به صورت زیر می باشند [۲۲].

$$\epsilon = 0.4396, \sigma = 0.341nm$$

لازم به ذکر است که از این برهمکنش عموماً جهت مدل کردن نیروهای موجود بین اتم‌های کربن، واقع در دو دیواره جداگانه استفاده می شود و برای اتم‌های واقع در یک دیواره و اتم‌های مجاور یکدیگر از این پتانسیل در مقابل پتانسیل‌های دیگر صرف نظر می شود.

۳-۴-۶ برهمکنش الکترواستاتیک

این برهمکنش یک برهمکنش غیر پیوندی است و بر اثر به وجود آمدن نیروهای الکترواستاتیکی بین الکترون‌های دو اتم مجاور یکدیگر ایجاد می شود. این برهمکنش نسبت به برهمکنش‌های پیوندی بسیار ضعیف است و حتی در مسائلی که برهمکنش واندروالس را در نظر می گیرند از این برهمکنش صرف نظر می کنند. فرم کلی تابع پتانسیل الکترواستاتیک به صورت زیر می باشد:

$$U_{el} = \frac{Kq_i q_j}{r_{ij}^2} \quad (۹-۳)$$

این برهمکنش معمولاً در همه مسائل مکانیکی شامل نانولوله‌های کربنی قابل چشم‌پوشی است و به دلیل اینکه محاسبات مورد نیاز برای آن بسیار سنگین و زمان‌بر است، بنابراین فقط در مسائل خاص شیمی و فیزیک مورد استفاده قرار می گیرد.

^۱ Lenard Jonze

۳-۵ ویژگی های نانولوله کربنی

بعد از کشف نانولوله کربنی دانشمندان دریافتند خواص مکانیکی که برای این ساختارهای جالب پیش‌بینی می‌شود، مانند استحکام و سفتی بالا و چگالی کم می‌تواند این ساختارها را جایگزین بسیاری از مواد در کاربردهای صنعتی نماید. خواص الکترونیکی، مولکولی و ساختاری نانولوله‌ها تا حد زیادی از ساختار تقریباً یک‌بعدی آن‌ها ناشی می‌شود. در زیر تعدادی از خواص مهم نانولوله‌های کربنی آورده شده است.

۱. اندازه بسیار کوچک (قطر کوچک‌تر از ۰.۴ نانومتر)

۲. حالت رسانا و نیمه‌رسانایی آن‌ها بر حسب شکل هندسی‌شان

۳. قدرت رسانایی گرمایی بالا

۴. مدول یانگ بالا

۵. حساس به تغییر کوچک نیروهای اعمال‌شده

۶. چگالی سطحی بسیار بالا

۷. قابلیت ذخیره‌سازی

۸. استحکام و مقاومت کششی بالا

۹. بروز خواص الکتریکی و مکانیکی منحصر به فرد در طول آن‌ها

برای نمونه در سال ۲۰۰۰، مقاومت کششی یک نانولوله چندجداره برابر ۶۳GPa اندازه‌گیری شد [۲۳]. به عنوان مقایسه، مقاومت کششی یک فولاد با درصد کربن بالا برابر ۱.۲GPa است. همچنین نانولوله‌های تک جداره ضریب کشسانی بسیار بالایی دارند، با در نظر گرفتن اینکه نانولوله‌های کربنی چگالی وزنی پایینی دارند ($۱/۴-۱/۳\text{ g/cm}^۳$) استحکام ویژه آن‌ها در میان تمامی مواد شناخته‌شده، بهترین است. خواص ویژه و منحصر به فرد نانولوله‌های کربنی از جمله مدول یانگ بالا و استحکام زیاد از یک طرف و طبیعت کربنی بودن نانولوله‌ها (به خاطر این که کربن ماده‌ای است کم وزن، بسیار

پایدار) از سوی دیگر باعث شده که در دهه گذشته شاهد تحقیقات مهمی در کارایی این ساختار در فرایندهای مکانیکی باشیم. با توجه به خصوصیات ذکرشده نانولوله‌ها بهترین ماده برای ساخت مواد ضدضربه می‌باشد؛ از این رو به تازگی دانشمندان پژوهش‌هایی در زمینه جذب انرژی نانولوله‌ها تحت ضربه انجام داده‌اند.

۳-۶ مدل‌سازی نانولوله کربنی

۳-۶-۱ مقدمه

از زمانی که مدل‌سازی و شبیه‌سازی نانولوله‌های کربنی آغاز شده است، روش‌های مختلف بسیاری برای مدل‌سازی این نانومواد ارائه گردیده‌اند که هر کدام به نوبه خود قادر به حل مسائل در زمینه‌های مختلف مکانیکی هستند. با اینکه کارهای تجربی در زمینه نانو مواد بسیار قابل توجه هستند؛ اما نیاز به شرایط خاص آزمایشگاهی برای این‌گونه کارهای تجربی و اختلاف فاحش میان نتایج به دست آمده در بعضی موارد باعث شده است که محققان برای توجیه و تفسیر کارهای تجربی به کارهای محاسباتی رو بیاورند بطوریکه کارهای اساسی برای مدل‌سازی و شبیه‌سازی از سال ۱۹۹۶ ارائه گردیده‌اند.

در این مطالعه تنها به مدل‌های مناسب برای نانولوله‌ها شامل: مدل‌سازی مولکولی، ساختاری و محیط پیوسته اشاره خواهد شد. مدل‌های پیوسته معمولاً بر پایه مدل‌های رایج مهندسی نظیر تیرها، پوسته‌ها و غشاءها استوارند. آن‌ها با نانولوله‌ها به عنوان مواد پیوسته با هندسه معین و خصوصیات مادی معمول نظیر مدول یانگ برخورد می‌کنند. در مقابل مدل‌های مولکولی هر اتم را به صورت مجزا در نظر می‌گیرند و برهمکنش‌های بین اتم‌ها را بصورت ریاضی تعریف می‌کنند. علاوه بر دو مدل ذکرشده، به مدل ساختاری به عنوان رابطی بین مدل مولکولی و مدل پیوسته اشاره خواهد شد.

۳-۶-۲ مدل سازی مولکولی

در این روش، سیستم به عنوان یک سیستم گسسته از اتم‌ها در نظر گرفته خواهد شد. سپس اندرکنش‌های بین مولکولی با استفاده از یکی از مدل‌های پتانسیل برای سیستم مورد نظر مدل می‌شوند. با استفاده از محاسبات عددی، انرژی سیستم محاسبه شده، سپس انرژی کل سیستم در مراحل بعدی برای محاسبه خواص مکانیکی نانولوله کربن بکار برده می‌شوند. به دلیل محدودیت‌های جاری در مورد تست‌های مکانیکی در مقیاس نانو، شبیه‌سازی‌های مولکولی به ابزاری مهم برای مطالعه مکانیک نانولوله‌ها مبدل گشته‌اند. آن‌ها می‌توانند به دو صورت مورد استفاده قرار گیرند:

۱- جایگزینی برای تست‌های تجربی و استخراج داده‌های مورد استفاده در مدل‌های پیوسته

۲- استفاده مستقیم برای پیش‌بینی پاسخ‌های مکانیکی تحت شرایط بارگذاری خاص

اخیراً تست‌هایی که به روش تجربی امکان‌پذیر نبوده‌اند، نظیر تست پیچش، به راحتی توسط شبیه‌سازی مولکولی انجام گرفته‌اند. این شبیه‌سازی‌ها تنها به شرایط مرزی مناسب نیاز دارند. تجربه‌های جدید دارای دقت و تفکیک‌پذیری پایین هستند که به وسیله شبیه‌سازی مولکولی قابل برطرف شدن است. هر چند، این نکته باید ذکر شود که شبیه‌سازی‌های مولکولی تنها تخمین هستند. آن‌ها بر پایه بسیاری از فرضیات و ساده‌سازی‌ها منطبق هستند. تمام نتیجه‌گیری‌های به دست آمده از شبیه‌سازی‌های مولکولی با شناخت از این موضوع بایستی مورد بررسی قرار گیرند. این بدان معنی است که مدل‌های مولکولی بایستی به عنوان ابزاری برای فهم نانولوله‌ها مورد استفاده قرار گیرند و زمانی که داده‌های فیزیکی تجربی موجود است، این داده‌ها ترجیح داده می‌شود.

انواع اصلی شبیه‌سازی‌های مولکولی که برای تحلیل‌گران موجود است به دو گروه عمده زیر تقسیم

می‌شود:

۱- مکانیک مولکولی^۱

۲- مکانیک کوانتومی^۲

تفاوت اصلی بین این دو گروه آن است که مدل‌های مکانیک مولکولی از روی مشاهده و تجربه به دست می‌آیند؛ در صورتی که مدل‌های مکانیک کوانتومی از اصول اولیه استخراج می‌شوند. به طور معمول نتایج مکانیک کوانتومی دقیق‌تر از مکانیک مولکولی می‌باشد. هر چند مدل‌های مکانیک کوانتومی از لحاظ حجم عملیات کامپیوتری گران‌تر از مکانیک مولکولی هستند. بنابراین، مدل‌های مکانیک کوانتومی به سیستم‌های کوچک‌تر، که مطالعات مکانیک کوانتومی را محدود می‌کند، اختصاص داده می‌شود.

از مهم‌ترین روش‌های مکانیک کوانتومی می‌توان به روش‌های پایه اشاره کرد درحالی‌که مهم‌ترین روش مکانیک مولکولی روش دینامیک مولکولی می‌باشد. در ادامه به توضیح این دو روش معمول در شبیه‌سازی‌ها پرداخته می‌شود.

۳-۶-۲-۱ روش دینامیک مولکولی^۳

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یک تکنیک برای محاسبه خصوصیات انتقال و تعادل در یک سیستم چندعضوی کلاسیک می‌باشد. کلمه کلاسیک به این علت بکار می‌رود که حرکت هسته‌های درون ذرات از قوانین مکانیک کلاسیک پیروی می‌کنند. در این روش از اثرات کوانتوم صرف‌نظر می‌گردد که تقریب خوبی برای بسیاری مسائل به شمار می‌رود اما در مسائلی همچون حرکت‌های چرخشی و انتقالی اتم‌ها و مولکول‌های سبک و یا حرکت ارتعاشی با فرکانس‌های بالا کمی این تقریب نگران‌کننده خواهد بود.

^۱ Molecular mechanics

^۲ Quantum mechanics

^۳ Molecular Dynamics(MD)

شبیه‌سازی دینامیک مولکول از بسیاری جهات شبیه کارهای تجربی می‌باشد. در آنجا برای شروع کار یک نمونه آماده کرده و با اتصال دستگاه‌های اندازه‌گیری، خصوصیات مورد دلخواه را در خلال زمان به دست می‌آورند. در شبیه‌سازی دینامیک مولکول نیز دقیقاً از این دیدگاه پیروی می‌شود. ابتدا یک نمونه آماده‌شده و سپس یک سیستم مدل شامل N ذره انتخاب می‌گردد و معادلات حرکت نیوتن را برای سیستم تا زمانی که خصوصیات سیستم در طول زمان زیاد تغییر نکند، حل می‌کنند. بعد از تعادل، اندازه‌گیری واقعی صورت می‌گیرد. بعضی از اشتباهاتی که در کارهای تجربی رخ می‌دهند، می‌توانند در این کار کامپیوتری نیز رخ دهند.

۳-۶-۲ روش‌های پایه^۱

قبل از اینکه بتوان روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی را اعمال کرد، باید به توابع پتانسیل مربوطه دسترسی داشت. روابط ریاضی این توابع پتانسیل برای نانولوله‌های کربنی در بخش‌های قبل مورد بررسی قرار گرفت. اگر چه روش‌های دینامیک مولکول کلاسیک بر اساس پتانسیل‌های از پیش تعریف‌شده می‌توانند برای مدل‌سازی برخی مواد در حیطه نانو مناسب باشند؛ اما برای حل دقیق، نیاز به اطلاعات بیشتری در مورد پارامترهای توابع پتانسیل می‌باشد. در چنین مسائلی، با پتانسیل‌های ثابت نمی‌توان چارچوب مناسبی برای مطالعه دینامیک سیستم‌ها تعریف نمود.

برای حل این مشکل، روش‌هایی بر پایه مکانیک کوانتوم که مستقل از پتانسیل‌های برهمکنش می‌باشند، گسترش یافته‌اند. این روش‌ها را روش‌های شبیه‌سازی پایه (آبینیشیو) می‌نامند. اساس این روش بر پایه استنتاج نیروهای تحمل شده توسط هسته‌های اتمی در یک نانوسیستم می‌باشد نه بر اساس پتانسیل‌های برهمکنش از پیش تعیین شده. هنگامی که روش‌های آبینیشیو مورد استفاده قرار می‌گیرند، اولویت از ایجاد توابع انرژی پتانسیل تقریبی، به انتخاب طرح‌های تقریبی برای محاسبه معادلات شرودینگر^۲ چندعضوی تغییر می‌کند. مزیت روش‌های آبینیشیو این است که دستورهای

^۱ Ab-initio

^۲ Schrodinger

پیش‌بینی‌نشده زیادی قبل از شروع شبیه‌سازی مجاز به اجرا در طول مسیر شبیه‌سازی هستند.

۳-۶-۳ مدل‌سازی پیوسته

روش‌های شبیه‌سازی که قبلاً مورد بحث قرار گرفتند، به تعداد اتم‌های از درجه 10^8 و بازه‌های زمانی نانو ثانیه محدود شده‌اند. بنابراین شبیه‌سازی سیستم‌های بزرگ‌تر با بازه زمانی طولانی‌تر باید توسط روش‌های مکانیک پیوسته صورت پذیرد. اخیراً کارهای زیادی بر روی مدل‌های پیوسته نانولوله‌های کربنی صورت گرفته است. اولین کارهای انجام‌شده در این زمینه، توسط ترسوف^۱ در سال ۱۹۹۲ [۲۴]، یاکوبسون^۲ در سال ۱۹۹۶ [۲۵] و رو^۳ در سال ۲۰۰۰ [۲۶] انجام شده است. ترسوف به کمک یکسری محاسبات ساده از انرژی فلورون، نشان داد که می‌توان با استفاده از خصوصیات الاستیک ورقه گرافیت و فلورون، پیش‌بینی انرژی کرنش الاستیک فلورون‌ها و نانولوله‌های کربنی را انجام داد. یاکوبسون و رو، یک مدل پیوسته پیوسته بدون در نظر گرفتن کایرالیته^۴ و نیروهای اعمالی به اتم‌ها برای نانولوله‌های کربنی تک دیواره در نظر گرفتند. گاویندجی^۵ در سال ۱۹۹۹ به کمک تئوری تیر اوپلر، نانولوله‌های چنددیواره را مدل کرد. آن‌ها نشان دادند که خصوصیات مواد در نانومقیاس، بسیار وابسته به اندازه‌شان می‌باشد [۲۷]. یکی از روش‌های بسیار مهم مکانیک پیوسته توسط ژانگ^۶ و همکارانش در سال ۲۰۰۲ برای پیش‌بینی خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی تک دیواره ارائه گردید [۲۸]. روش آن‌ها بر پایه کاربرد پتانسیل‌های برهمکنش قرار داشت.

۳-۶-۴ مدل‌سازی مکانیک ساختاری

روش‌های مدل‌سازی گفته‌شده در بخش‌های قبل هر کدام به نوبه خود دارای عیوب و کاستی‌هایی

^۱ Tersof

^۲ Yakobson

^۳ Ru

^۴ Chairality

^۵ Govindjee

^۶ Zhang

هستند: مدل‌سازی مولکولی قادر به حل مسائل مربوط به حرکت‌های اتمی و مولکولی می‌باشد. اما به علت حجم محاسباتی بالای آن، این روش‌ها معمولاً به سیستم‌های کوچک که شامل تعداد کمی از مولکول‌ها و اتم‌ها هستند و پدیده‌های با عمر کوتاه از پیکوثانیه تا نانوثانیه محدود می‌شوند. از سوی دیگر مدل‌سازی مکانیک پیوسته وجود دارد که به علت سهولت در به‌کارگیری و نیاز به زمان کمتری برای تحلیل، محققان زیادی به آن رو آورده‌اند. اما مدل‌های به دست آمده از این دیدگاه نمی‌توانند کایرالیته نانولوله‌ها را در نظر بگیرند، بنابراین نیروهای اعمال‌شده بر روی اتم‌ها را به شمار نمی‌آورند. مدل مکانیک ساختاری علاوه بر نداشتن محدودیت در به شمار آوردن کایرالیته، از نظر زمان تحلیل نیز بسیار کمتر از روش‌هایی مانند دینامیک مولکول زمان صرف می‌کند. در این پایان‌نامه از مدل‌سازی مکانیک ساختاری استفاده خواهد شد. مدل‌های ساختاری در حوزه نانولوله‌های کربنی از سال ۲۰۰۲ آغاز گردیده است، هرچند که به ادعای بیشتر مقالات، اولین مدل ساختاری در سال ۲۰۰۳ ارائه گردیده است. در ادامه به بررسی مهم‌ترین مدل‌های ساختاری ارائه گردیده در سال‌های اخیر پرداخته خواهد شد که در همه آن‌ها محققین به دنبال حل ساده‌ترین مسائل مکانیک یعنی تعیین خواص مکانیکی بوده‌اند. در بعضی از مدل‌ها مسائل دیگر مکانیکی مانند کماتش نانولوله‌ها بررسی شده که در اغلب آن‌ها نتایج به دست آمده با نتایج تجربی یا شبیه‌سازی مولکولی تفاوت فاحشی داشته‌اند که این امر نشان‌دهنده نقص در مدل‌های مربوط می‌باشد. در نهایت یکی از کامل‌ترین مدل‌های ساختاری ارائه گردیده تاکنون که در این پایان‌نامه مورد استفاده قرار گرفته، معرفی خواهد شد و به بررسی شبیه‌سازی ضربه روی این مدل پرداخته می‌شود.

۳-۶-۴-۱ مدل اودگارد^۱

برای اولین بار اودگارد و همکارانش در سال ۲۰۰۲، استفاده از خصوصیات ساختاری را برای مدل‌سازی مواد نانوساختار پیشنهاد کردند [۵]. آن‌ها نشان دادند که با معادل قرار دادن انرژی پتانسیل

^۱ Odegard

مولکولی یک ماده نانو ساختار با انرژی کرنشی یک خرپا و مدل پیوسته معادل، می توان خواص مکانیکی نانولوله های کربنی را پیش بینی کرد. در این مدل، یک المان حجم معرف ساختار شیمیایی گرافن، با یک مدل خرپای معادل جایگزین شده است. دو پارامتر مستقل ضخامت دیواره و سفتی خمشی مورد بررسی قرار گرفته است. مدل اودگارد را می توان مدل خرپا نیز نامید. در این مدل نانولوله های کربنی همانند یک ساختار خرپا در نظر گرفته شده اند، به طوریکه اتم های کربن به عنوان مفصل های ارتباط دهنده این اعضا عمل می کنند. چون مدل اودگارد برای نانولوله های تحت بار کششی مورد استفاده قرار گرفته است، بنابراین او فقط دو برهمکنش کشش و تغییر زاویه را میان اتم های کربن لحاظ کرد و از سایر پتانسیل ها صرف نظر نمود. برای هر یک از برهمکنش ها از دو میله با مدول یانگ و سطح مقطع مختلف استفاده شده است.

۳-۶-۴-۲ مدل لی و چو^۱

لی و چو در سال ۲۰۰۳ یک دیدگاه مکانیک ساختاری را برای مدل سازی تغییر شکل نانولوله های کربنی ارائه کردند [۲۹]. اصل اساسی در این مدل در برگیرنده این مفهوم است که نانولوله های کربنی در واقع ساختارهای هندسی قاب مانند هستند. در این مدل، پیوند میان اتم ها به صورت تیرهای حامل بار عمل می کنند؛ در حالی که اتم ها به عنوان نقاط اتصال دهنده (مفصل) عضوی تیر، ایفای نقش می کنند. با برقراری ارتباط میان مکانیک ساختاری و مکانیک مولکول می توان پارامترهای خصوصیات مقطعی عضوی تیر را به دست آورد.

لی و چو برای پیش بینی مدول یانگ و برشی نانولوله های تک دیواره، از برهمکنش واندروالس صرف نظر نمودند؛ اما در سال ۲۰۰۴ آن ها با اضافه نمودن برهمکنش واندروالس به مدل خود توانستند خواص مکانیکی نانولوله های چند دیواره را نیز پیش بینی کنند.

^۱ Li and Chou

۳-۶-۴-۳ مدل هو^۱

هو و همکارانش در سال ۲۰۰۵، مدلی را ارائه کردند که در آن از المان‌های تیر برای مدل‌سازی برهمکنش‌های پیوندی استفاده شده بود [۳۰]. هو نشان داد که مدل خرپا نمی‌تواند مدل مناسبی نانولوله‌های کربنی باشد. او با محاسبات خود نشان داد که مدل خرپا تنها در صورتی درست است که $3v = 1$ باشد. آن بدین معنی است که مدل خرپای معادل فقط می‌تواند به صورت یک ماده پیوسته همگن با ضریب پواسون $0/33$ در نظر گرفته شود. اما می‌دانیم که ضریب پواسون یک ورقه گرافیت در بازه $0/16$ تا $0/29$ قرار دارد. در واقع هیچ ماده‌ای با چنین توپولوژی نمی‌توان برای این خرپای معادل در نظر گرفت. هو برای غلبه بر این مشکل، یک مدل تیر در نظر گرفت و از تیر تیموشنکو برای مدل‌سازی استفاده نمود.

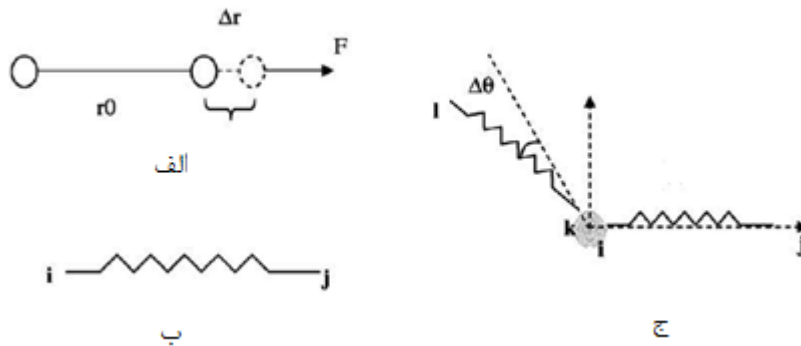
گرچه مدل تیر هو برای پیش‌بینی مدول یانگ و برشی نانولوله‌ها مناسب است؛ اما نتایج به دست آمده از این مدل برای پیش‌بینی بار کمانشی در سال ۲۰۰۷ نشان داد که اختلاف فاحشی میان نتایج او و نتایج دینامیک مولکول وجود دارد [۳۱]. او همچنین در سال ۲۰۰۷ با در نظر گرفتن المان میله برای مدل کردن برهمکنش و اندروالس میان دو دیواره در نانولوله‌های چند دیواره، بار کمانشی را برای این نانولوله‌ها تعیین کرد.

تحقیقات انجام‌شده در زمان حاضر نشان می‌دهد که احتمالاً نمی‌توان با استفاده از مدل تیر، خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی را تحت شرایط مختلف بارگذاری و مرزی به دست آورد. یکی از مسائل بسیار مهم که مدل تیر قادر به توجیه آن نیست، بار کمانش بهینه با افزایش قطر نانولوله است. در مدل تیر با افزایش قطر نانولوله، بار کمانش به طور مداوم افزایش خواهد یافت و شیب این افزایش در ابتدا زیاد و در ادامه کم می‌شود. اما در مدل‌های جدید و دینامیک مولکول [۳۲]، با افزایش قطر نانولوله، بار کمانشی تا یک مقدار بهینه افزایش و سپس کاهش می‌یابد؛ به طوری‌که در یک قطر خاص به یک مقدار بهینه در بار کمانش خواهیم رسید.

^۱ Hu

۳-۶-۴-۴ مدل معو و روسی^۱

معو و روسی در سال ۲۰۰۶ مدلی برای پیش‌بینی استحکام نهایی نانولوله‌های کربنی ارائه نمودند که در آن از المان‌های فنر استفاده شده است [۳۳]. آن‌ها فقط پتانسیل‌های کشش پیوند و تغییر زاویه را در مدل خود اعمال کردند و از سایر پتانسیل‌ها چشم‌پوشی نمودند. همان‌گونه که در شکل (۳-۹) مشاهده می‌شود، آن‌ها از یک فنر غیرخطی محوری برای مدل کردن برهمکنش کشش پیوند و یک فنر غیرخطی پیچشی برای مدل کردن برهمکنش خمش پیوند استفاده نمودند.



شکل (۳-۹): پیوند کربن-کربن: (الف) مدل فیزیکی، (ب) مدل FE کشش پیوند، (ج) مدل FE خمش پیوند

این مدل در نرم‌افزار MATLAB اجرا شده است. از آن جایی که معو و روسی از مدل خود برای بررسی زوال^۲ نانولوله‌ها در کشش استفاده نموده‌اند، بنابراین از پتانسیل پیچش پیوند که در کمانش نانولوله‌های کربنی بسیار مهم می‌باشد، صرف‌نظر کرده‌اند. هرچند نتایج آن‌ها برای تحلیل‌هایی که با کشش نانولوله سر و کار دارند، مناسب است؛ اما مدل آن‌ها قادر به تحلیل مسائل دیگر مکانیکی نظیر کمانش نانولوله‌ها نمی‌باشد.

همان‌طور که مشاهده می‌گردد، همه این مدل‌های ساختاری از فرض ساده‌سازی استفاده نموده‌اند. بنابراین برای حوزه خاصی از مسائل کاربرد دارند و در بعضی موارد دارای نتایج دقیق نیستند. از

^۱ Meo and Rossi

^۲ Failure

این رو محدودیت در پوشش تمام مسائل مکانیکی را می توان مشکل عمده همه این مدل ها دانست. بجز مدل هو و مدل لی و چو که برای تحلیل کمانش مورد استفاده قرار گرفتند، سایر مدل ها صرفاً برای پیش بینی مدول یانگ، مدول برشی و ضریب پواسون مورد استفاده قرار گرفته اند. حتی مقایسه نتایج مدل هو و مدل لی و چو نیز نشان می دهد که مدل های ساختاری آن ها قادر به پیش بینی بار کمانش نمی باشد. در ادامه ابتدا به معرفی کامل ترین مدل ساختاری ارائه گردیده تاکنون می پردازیم. سپس در فصل بعد به شبیه سازی ضربه گلوله روی این مدل پرداخته خواهد شد و در انتها نتایج حاصل از این شبیه سازی با کارهای دیگر صورت گرفته در این زمینه مقایسه خواهد شد.

۳-۶-۴-۵ مدل ساختاری جدید

پروانه در سال ۱۳۸۸ کامل ترین مدل ساختاری را برای نانولوله پیشنهاد کرد و توسط این مدل خواص نانولوله و کمانش آن را مورد بررسی قرارداد [۶]. در این مدل از المان های فنر و رابط برای مدل کردن برهمکنش های میان اتم های کربن استفاده شده است. در ادامه شیوه مدل سازی آورده شده است. نرم افزار مورد استفاده در شبیه سازی این مدل نرم افزار آباکوس می باشد [۳۴].

نرم افزار آباکوس یک مجموعه از برنامه های مدل سازی بسیار توانمند می باشد که مبتنی بر روش اجزا محدود بوده و قابلیت حل مسائل مختلف از یک تحلیل خطی ساده تا پیچیده ترین مدل سازی های غیر خطی را دارا می باشد. این نرم افزار دارای مجموعه المان های بسیار گسترده ای است که هر نوع هندسه ای را می تواند به صورت مجازی توسط المان ها مدل کند. قسمت اصلی این نرم افزار فضای CAE آن است که به کاربر امکان اجرای دستورات توسط آیکون های کمکی و مشاهده گرافیکی نتایج حاصل را می دهد. این فضا به بخش های مختلف تقسیم می شود که فرآیند مدل سازی در طی این بخش ها صورت می پذیرد. در ادامه ایجاد نانولوله کربنی توسط این بخش ها گفته خواهد شد.

بخش اول مربوط به ساخت هسته اولیه مدل می باشد. برای ایجاد نانولوله کربنی به ایجاد اتم های کربن نیاز است. این کار در بخش part نرم افزار از طریق ایجاد کره های توخالی صلب به عنوان اتم

کربن امکان‌پذیر است. شعاع کره برابر شعاع اتم‌های کربن یعنی 0.077 نانومتر می‌باشد. علاوه بر اتم‌ها دو صفحه صلب دایروی به منظور اعمال شرایط تکیه‌گاهی طراحی شده است.

بخش دوم در ارتباط با خصوصیات ماده می‌باشد. در این بخش که در نرم‌افزار با *property* شناخته می‌شود خصوصیات مربوط به ماده مورد استفاده در شبیه‌سازی آورده می‌شود. با توجه به اینکه مدل مورد استفاده در این پایان‌نامه از قسمت‌های صلب تشکیل شده نیازی به تعریف ماده در این قسمت نیست. تنها باید جرم اتم کربن را در نقطه مرکزی اتم تعریف کنیم. جرم اتم کربن برابر است با:

$$m = 1.9943 \times 10^{-26} \text{ kg}$$

بخش سوم *assembly* است که برای ترکیب و ساخت نهایی هندسه مدل می‌باشد. با استفاده از قابلیت‌های این حوزه در چرخش و انتقال، گره‌های تو خالی را بر اساس ساختار هندسی نانولوله کربنی ترکیب می‌کنیم. ساختارهای ایجاد شده در این پایان‌نامه، زیگزاگ و آرمچیر هستند. دو صفحه صلب نیز در دو انتهای نانولوله کربنی قرار می‌گیرند.

آخرین بخش برای تکمیل مدل بخش *interaction* می‌باشد. در واقع هسته اصلی مدل این بخش است. در این بخش، المان‌های مختلفی برای ایجاد برهمکنش میان دو قسمت وجود دارد. برای اعمال برهمکنش بین اتم‌ها ابتدا باید پتانسیل‌های موجود بین اتمی را به دست آوریم.

در بخش ۳-۴ درباره انرژی‌های پتانسیل موجود در نانولوله‌های کربنی بحث شد. انرژی پتانسیل کل در نظر گرفته شده برای مدل ساختاری در اینجا به صورت زیر می‌باشد که در آن از پتانسیل‌های غیر پیوندی الکترواستاتیک و واندروالس صرف نظر گردیده است [۱۷].

$$u_{total} = u_r + u_\theta + u_\phi + u_\omega \quad (10-3)$$

که در آن

$$u_r = D_e \{ [1 - e^{-\beta(r-r_0)}]^2 - 1 \} \quad (11-3)$$

$$u_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 [1 + k_{sextic} (\theta - \theta_0)^4] \quad (12-3)$$

$$u_\phi = \frac{1}{2} k_\phi [1 + \cos(n\phi - \phi_0)] \quad (13-3)$$

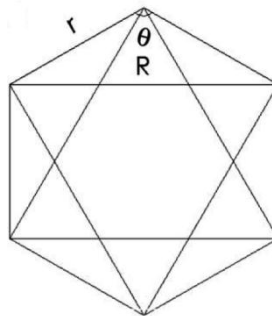
$$u_\omega = \frac{1}{2} k_\omega [1 + \cos(n\omega - \omega_0)] \quad (14-3)$$

در این مدل از یک فنر محوری برای مدل کردن تغییر زاویه پیوند استفاده شده است. رابطه میان

تغییر زاویه پیوند و تغییر طول متناظر در فنر محوری به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$\Delta\theta \approx \frac{2(\Delta R)}{r_0}, r_0 = 0.142nm \quad (15-3)$$

که در آن θ زاویه بین دو پیوند کشش، r طول پیوند کشش و R طول فنر محوری می‌باشد.



شکل (۱۰-۳): پارامترهای مربوط به یک سلول واحد شش ضلعی

لازم به ذکر است که علاوه بر تغییر شکل فنر با تغییر زاویه پیوند، در اثر کشیدگی یا فشردگی دو پیوند متناظر با فنر محوری، مقداری تغییر شکل در این فنر ایجاد می‌گردد. این تغییر شکل اضافی در مسائلی که نانولوله دچار تغییر شکل‌های خیلی بزرگ شده یعنی مسأله وارد محیط پلاستیک می‌گردد و بحث شکست پیوند مطرح می‌شود، مهم می‌باشد. که در تحقیق حاضر مسأله ضربه و تغییر شکل نانولوله در ناحیه الاستیک رخ می‌دهد. با این وجود در انتهای فصل ۴ تأثیر این خطای مدل‌سازی در تحقیق حاضر بررسی شده است.

با توجه به معادله (۱۵-۳) می‌توان معادله (۱۲-۳) را به صورت زیر نوشت:

$$u_{\theta} = \frac{2}{r_0^2} k_{\theta} (R - R_0)^2 \left[1 + \frac{16}{r_0^4} k_{sextic} (R - R_0)^4 \right] \quad (16-3)$$

نیروی کشش، گشتاور خمشی تغییر زاویه، گشتاور پیچشی دوسطحی و گشتاور پیچشی خارج صفحه‌ای را می‌توان توسط مشتق‌گیری از معادلات (۱۱-۳)، (۱۳-۳)، (۱۴-۳) و (۱۶-۳) به دست آورد:

$$F(r - r_0) = 2\beta D_e \left[1 - e^{-\beta(r-r_0)} \right] e^{-\beta(r-r_0)} \quad (17-3)$$

$$F(R - R_0) = \frac{4}{r_0^2} k_{\theta} (R - R_0) \left[1 + \frac{48}{r_0^4} k_{sextic} (R - R_0)^4 \right] \quad (18-3)$$

$$T(\phi - \phi_0) = \frac{1}{2} k_{\phi} n \sin(n\phi - \phi_0) \quad (19-3)$$

$$T(\omega - \omega_0) = \frac{1}{2} k_{\omega} n \sin(n\omega - \omega_0) \quad (20-3)$$

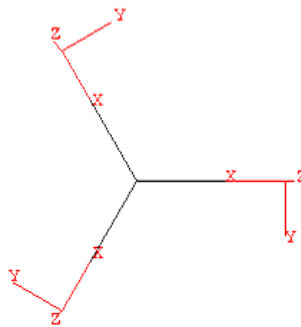
ثابت‌های اعمال‌شده در معادلات برهمکنش در جدول (۲-۳) آورده شده است:

جدول (۲-۳): ثابت‌های معادلات برهمکنش در نانولوله‌های کربنی

اندرکنش‌ها	پارامترها
u_r	$D_e = 0.6031 nN.nm, \beta = 26.25 nm^{-1}, r_0 = 0.142 nm$
u_{θ}	$k_{\theta} = 1.42 nN.nm / Rad^{-2}, k_{sextic} = 0.754 Rad^{-4}, \theta_0 = 120^{\circ}$
u_{ϕ}	$k_{\phi} = 0.278 nN.nm / Rad^{-2}, n = 2, \phi_0 = 180^{\circ}$
u_{ω}	$k_{\omega} = 0.278 nN.nm / Rad^{-2}, n = 2, \omega_0 = 180^{\circ}$

در این مدل ساختاری از المان‌های فنر و رابط برای مدل کردن برهمکنش‌های میان اتم‌های کربن استفاده شده است؛ به طوری که یک فنر محوری غیرخطی برای مدل کردن برهمکنش تغییر زاویه پیوند و یک رابط غیرخطی برای مدل کردن برهمکنش‌های کشش پیوند و پیچش پیوند بکار رفته

است (شکل (۳-۱۲)). این المان‌ها به نقاط مرجع^۱ واقع بر مرکز گره‌های تو خالی متصل می‌گردند. بر روی هر یک از این گره‌ها یک سیستم مختصات محلی قرار گرفته است که ترکیبی از سیستم مختصات کارتزین^۲ برای کشش و سیستم مختصات چرخشی^۳ برای پیچش می‌باشند. جهت x سیستم مختصات در جهت رابط و جهت z آن در جهت عمود بر محور مرکزی نانولوله و به سمت مرکز می‌باشد. به دلیل آنکه در فضای CAE نرم‌افزار آباکوس فقط قادر به استفاده از فنر خطی هستیم، بنابراین با اجرای دستور فنر غیرخطی در فایل ورودی^۴ نرم‌افزار و اعمال رابطه غیرخطی برای $F(\Delta R)$ بر اساس ΔR با استفاده از معادله (۳-۱۸) می‌توان فنر خمشی را به مدل اعمال کرد. برای اعمال نیروهای کششی و پیچشی به رابط‌ها، می‌توان به طور مستقیم سفتی‌های غیرخطی را در سه جهت x ، y و z اعمال کرد. برای سفتی‌های کششی در جهت x ، می‌توانیم داده‌های غیرخطی را برای $F(\Delta r)$ بر اساس Δr و توسط معادله (۳-۱۷) به دست آوریم. برای سفتی‌های پیچشی در جهت x ، می‌توان داده‌های غیرخطی را برای $T(\Delta \phi)$ بر اساس $\Delta \phi$ و توسط معادله (۳-۱۹) به دست آورد. و در نهایت برای سفتی‌های پیچشی در جهت y می‌توان داده‌های غیرخطی را برای $T(\Delta \omega)$ بر اساس $\Delta \omega$ و توسط معادله (۳-۲۰) محاسبه کرد.



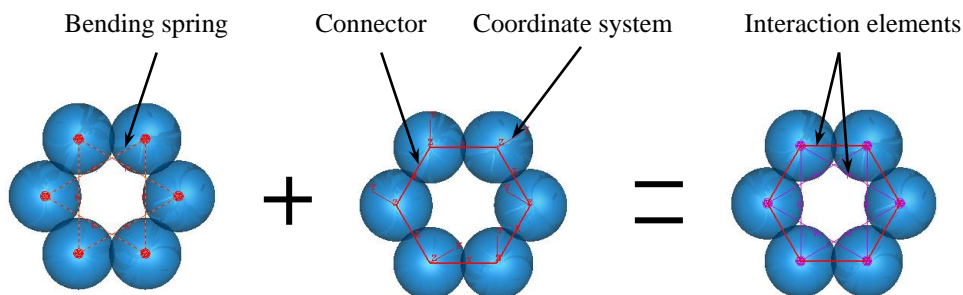
شکل (۳-۱۱): نحوه قرار گرفتن دستگاه مختصات محلی بر روی مرکز اتم‌های کربن

^۱ Reference point

^۲ Cartesian coordinate

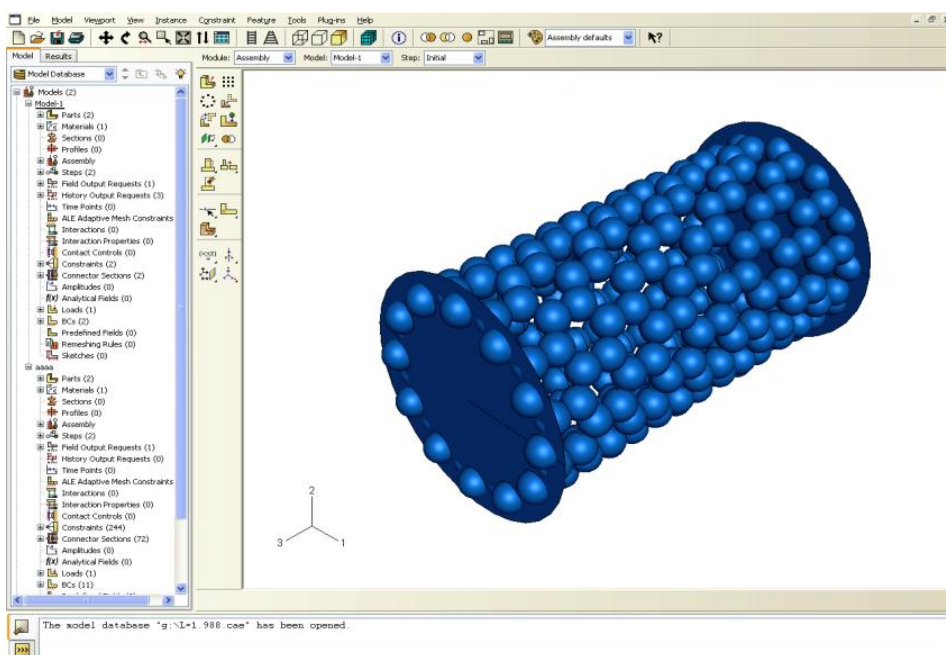
^۳ Rotation coordinate

^۴ Input File



شکل (۳-۱۲): المان‌های فنر و رابط متناظر با برهمکنش اتم‌های کربن

در شکل (۳-۱۳)، یک مدل کامل از نانولوله کربنی زیگزاگ به همراه صفحات تکیه‌گاهی در فضای CAE نرم‌افزار ABAQUS نمایش داده شده است. در فصل بعد رفتار مکانیکی این مدل از نانولوله کربنی تحت ضربه گلوله بررسی خواهد شد.



شکل (۳-۱۳): تصویر یک نانولوله کربنی زیگزاگ در فضای CAE نرم‌افزار آباکوس

فصل ۴

رفتار مکانیکی نانولوله کربنی

تحت ضربه

۴-۱ مقدمه

با توجه به رشد سریع علم و تکنولوژی در دنیای امروز، تحقیق و پژوهش در عرصه‌های مختلف (صنعتی و غیر صنعتی) امری ضروری و اجتناب‌ناپذیر بوده و می‌تواند رهگشای مناسبی برای فردای بهتر باشد. از جمله مسائلی که اخیراً مورد توجه بسیار واقع شده، مسأله برخورد و آثار ناشی از آن می‌باشد. امروزه با توجه به پیشرفت علوم و تکنولوژی اهمیت پدیده برخورد بیش از پیش مورد توجه قرار گرفته است و در موضوعات نظامی و غیر نظامی از قبیل آنچه در زیر فهرست شده نیز از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است.

۱- تخریب سازه‌های بتونی؛

۲- حفاظت سفینه‌های فضایی؛

۳- طراحی بدنه کشتی‌ها؛

۴- طراحی و ساخت زره‌های انفرادی و جمعی؛

۵- ایمن‌سازی مراکز حساس.

از جمله کاربردهای خاص پدیده برخورد، کاربرد نظامی آن است؛ که طراحی و ساخت زره‌های شخصی و زره‌های خودروهای نظامی است. برای کاهش وزن کلی ادوات زرهی پیشرفت‌های امروزی در جهت‌ی بوده که وزن زره تا حد امکان سبک انتخاب گردد به شرط آنکه حفاظت زرهی آن در حد بالایی حفظ شود. با توجه به اهمیت به‌کارگیری این نوع زره‌ها در نیروهای رزمی، باید مطالعات و تحقیقات جامعی را در زمینه طراحی بهتر و پیشرفت وسایل فعلی موجود، انجام داد.

تئوری کلاسیک ضربه که به استریومکانیک^۱ معروف است، بر اساس قانون ضربه و اندازه حرکت برای اجسام صلب استوار است. با استفاده از این تئوری می‌توان سرعت‌های ابتدایی و انتهایی اجسام و ضربه خطی یا زاویه‌ای اعمالی را مورد بررسی قرار داد اما نمی‌توان نیروها، تنش‌ها و تغییر شکل‌ها را بررسی نمود. در برخورد کاملاً الاستیک دو جسم، قانون بقای انرژی مکانیکی همراه با بقای اندازه حرکت خطی یا زاویه‌ای جهت تعیین سرعت‌های نهایی اجسام برخورد کننده بکار گرفته می‌شود و در صورتی که برخورد منجر به تغییر شکل دائمی شود، رابطه ضریب بازگشت (e) که توصیف کننده درجه پلاستیکی برخورد بوده و عبارتست از نسبت مولفه‌های سرعت نسبی نهایی به سرعت نسبی ابتدایی دو جسم برخورد کننده در امتداد عمود بر سطوح تماس، بجای قانون بقای انرژی مکانیکی مورد استفاده قرار می‌گیرد. مقادیر $e=1$ و $e=0$ به ترتیب به مفهوم ایده‌آل برخوردهای کاملاً الاستیک و کاملاً پلاستیک دلالت دارند. خصوصیات اصطکاکی سطوح تماس در تئوری کلاسیک ضربه بوسیله ضریب اصطکاک دینامیکی (f) منظور می‌گردد که در برخورد دو سطح کاملاً صیقلی این ضریب صفر می‌باشد [۳۵].

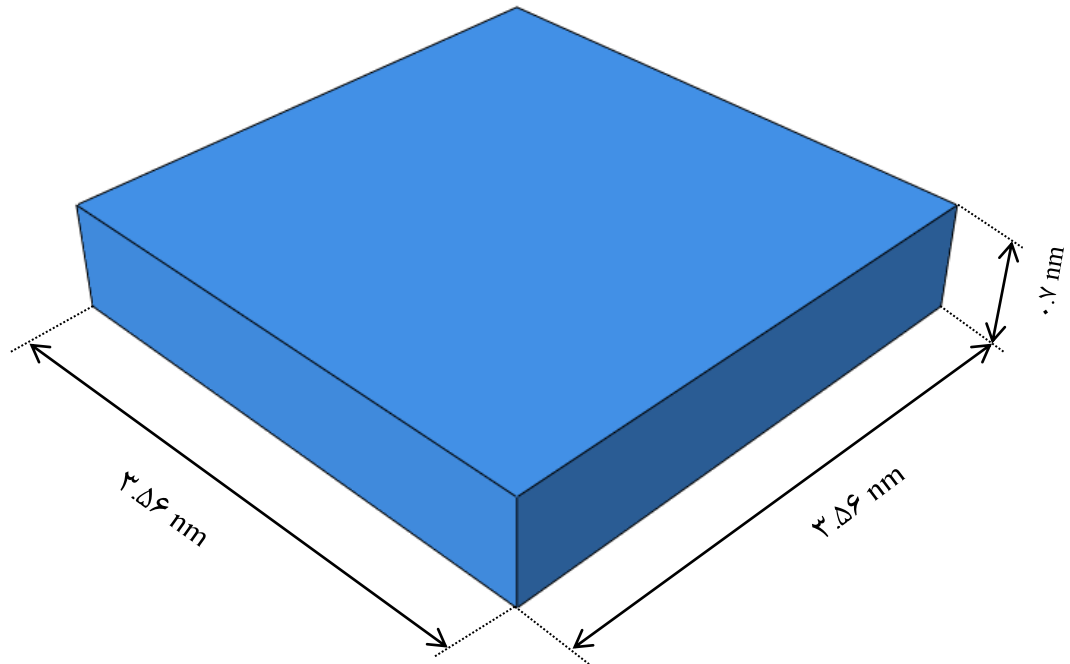
در این فصل سعی شده است با نگاهی به جدیدترین کاربردهای موجود، یعنی استفاده از نانولوله کربنی در ساخت مواد ضدضربه، به بررسی رفتار مکانیکی نانولوله‌های کربنی تحت ضربه پرداخته شود. برای این منظور ابتدا به شیوه شبیه‌سازی گلوله و پدیده برخورد و روش محاسبه مقدار انرژی جذب شده می‌پردازیم.

۲-۴ شبیه‌سازی ضربه روی نانولوله کربنی

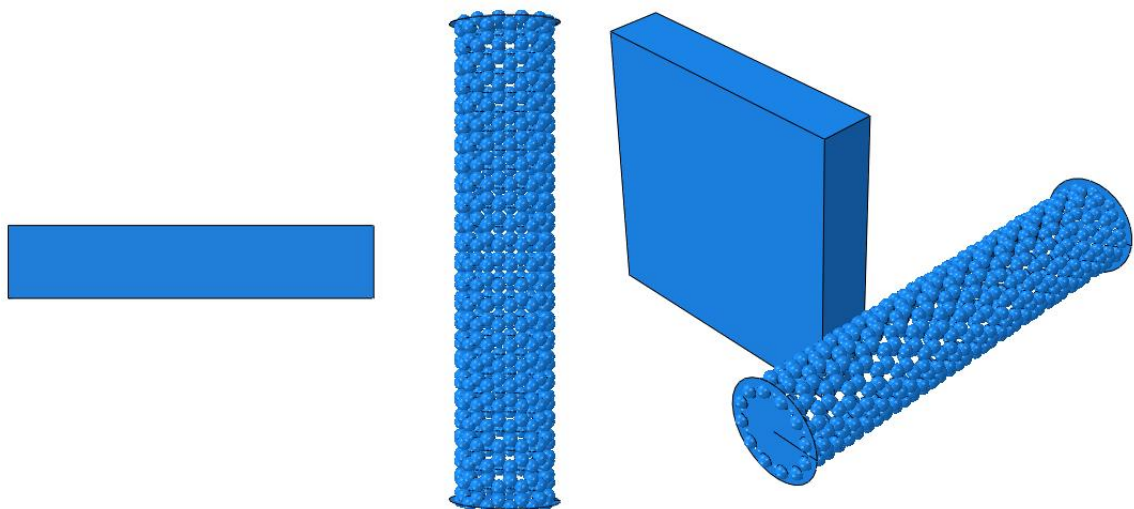
در فصل قبل شیوه شبیه‌سازی نانولوله کربنی در نرم‌افزار آباکوس به شیوه مکانیک ساختاری گفته شد. برای شبیه‌سازی ضربه ابتدا باید گلوله‌ای طراحی شده و در کنار نانولوله کربنی مونتاژ شود. یک قطعه صلب با ابعاد $(0.7 \times 3.56 \times 3.56 \text{ nm})^3$ به عنوان گلوله در محیط part طراحی شده

^۱ Stereomechanics

سپس در بخش property به آن جرم داده می‌شود. لازم به ذکر است که ابعاد گلوله به گونه‌ای انتخاب شده که عرض آن از عرض بزرگ‌ترین نانولوله کربنی مسطح شده بعد از برخورد بیشتر باشد؛ همچنین جرم گلوله $m = 3.8 \times 10^{-23} \text{ kg}$ در نظر گرفته شده است [۱۲]. بعد از طراحی گلوله وارد بخش assembly شده و گلوله را در موقعیت مورد نظر نسبت به نانولوله کربنی قرار می‌دهیم.



شکل (۱-۴): قطعه صلب طراحی شده به عنوان گلوله



شکل (۲-۴): مونتاژ گلوله در کنار نانولوله کربنی با طول ۵/۱۸ نانومتر در دو نما

در مرحله بعد وارد بخش step شده؛ در این بخش نوع تحلیل مورد نیاز تعیین می‌گردد. برای شبیه-

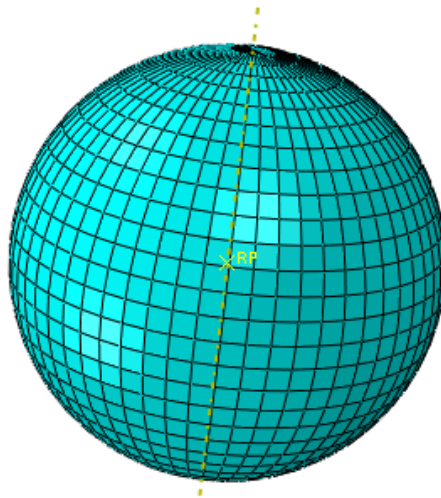
سازی پدیده برخورد نیاز به حلگر دینامیکی داریم. برای این منظور از تحلیل dynamic explicit استفاده شده است. در قسمت‌های مختلف این بخش تنظیمات مربوط به تحلیل انجام می‌شود. از مهم‌ترین این تنظیمات زمان انجام فرایند می‌باشد. زمان حل در تمامی حالت‌هایی که بررسی می‌شود به گونه‌ای انتخاب شده که علاوه بر یکسان بودن، فرایند را به طور کامل پوشش دهد. از این رو زمان $t=0.01$ ns انتخاب شده و ثبت می‌شود.

در بخش interaction خصوصیات مربوط به برخورد سطوح با یکدیگر تعریف می‌شود. که در این بخش خصوصیات تماسی^۱ را از نوع contact انتخاب می‌کنیم. گزینه‌های زیادی برای این ویژگی وجود دارد که با در نظر گرفتن فرض برخورد صیقلی و ناچیز بودن اصطکاک در این شبیه‌سازی از خصوصیت Normal Behavior استفاده شده است. علت این انتخاب این است که همه سطوح موجود در شبیه‌سازی صلب هستند و قادر به نفوذ در یکدیگر نمی‌باشند. این ویژگی بصورت General برای تمامی سطوحی که در طی فرایند برخورد با یکدیگر تماس دارند تعریف شده است.

در بخش load شرایط مرزی و شرایط بارگذاری تعیین می‌شوند. در این مدل شرایط مرزی را با توجه به پارامتر مورد تحلیل در نقطه مرکزی دو صفحه صلب اعمال می‌کنیم (یک سر گیردار و دو سر گیردار بودن نانولوله کربنی). برای تعریف حرکت گلوله یک سرعت اولیه و ثابت برای آن در نظر گرفته می‌شود. در تمامی حالات بررسی شده گلوله با سرعت ثابت به نانولوله برخورد می‌کند.

بعد از انجام تمام مراحل بالا به بخش Mesh می‌رسیم. در این حوزه المان‌بندی اجزای تعریف شده صورت می‌پذیرد. هرچند که نوع و تعداد المان‌ها با توجه به صلب بودن تمامی اجزا تأثیری بر روی نتیجه نهایی نخواهد داشت؛ اما برای مشاهده تصویر تغییر شکل یافته نانولوله کربنی نیازمند المان‌بندی هستیم. برای اتم کربن از المان‌بندی Sweep استفاده شده به گونه‌ای که المان R3D4 در المان بندی قرار گرفته است. برای گلوله نیز از المان C3D8R استفاده شده است.

^۱ Contact Property



شکل (۳-۴): المان بندی اتم کربن

پس از مش بندی وارد بخش Job می شویم؛ در این بخش عملیات و محاسبات تحلیل صورت می گیرد. زمان تحلیل به اندازه نانولوله کربنی (تعداد کره های توخالی) و تعداد المان ها بستگی دارد. پس از تحلیل می توان نتیجه نهایی و نمودارهای لازم را در بخش Visualization به دست آورد. در این پایان نامه تأثیر پارامترهای مختلفی نظیر ارتفاع نسبی محل برخورد گلوله، زاویه گلوله، هندسه نانولوله کربنی شامل طول و قطر آن و شرایط مرزی نانولوله در مدت زمان ۰.۰۱ نانوثانیه بر روی رفتار مکانیکی نانولوله کربنی تحت ضربه و میزان جذب انرژی ناشی از آن مطالعه و نتایج حاصل از آن با نتایج سایر مقالات مقایسه شده است. لازم به ذکر است که در این فرایند از ائتلاف انرژی گرمایی صرف نظر شده است. در ادامه ابتدا به بررسی صحت مدل و شبیه سازی پرداخته شده سپس هر یک از پارامترهای ذکر شده به طور جداگانه مطالعه می شود. یک سری شرایط اولیه طبق جدول (۴-۱) برای نانولوله و گلوله در نظر گرفته شده است که در بررسی تأثیر هر یک از پارامترهای فوق با توجه به نوع پارامتر این شرایط نیز تغییر می کنند.

جدول (۱-۴): شرایط اولیه نانولوله کربنی و گلوله

هندسه نانولوله کربنی	نوع نانولوله	زیگزاگ تک جداره - سالم
	قطر نانولوله	۰٫۹۴ نانومتر
	طول نانولوله	۷٫۳۱۳ نانومتر
شرط مرزی نانولوله کربنی	شرایط مرزی نانولوله	دو سر ثابت
وضعیت گلوله	سرعت اولیه گلوله	۲۵۰۰ متر بر ثانیه
	فاصله گلوله از محور مرکزی نانولوله	۱٫۵ نانومتر
	زاویه گلوله نسبت به افق	۰ درجه

سرعت گلوله به گونه‌ای انتخاب شده است که نانولوله وارد ناحیه تغییر شکل پلاستیک نگردد و دچار شکست نیز نشود. وقتی گلوله به نانولوله کربنی اصابت می‌کند، سرعتش صفر شده و پس از آن فرایند برگشت گلوله شروع می‌شود. مقدار انرژی جذب شده بوسیله نانولوله کربنی از طریق تفاضل انرژی جنبشی گلوله قبل از برخورد و بعد از آن در لحظه جدایش گلوله از نانولوله محاسبه می‌شود. سرعت گلوله قبل از برخورد خطی است. پس از برخورد و صفر شدن سرعت گلوله، در مرحله برگشت در لحظه جدایش نیز دارای سرعتی خطی می‌باشد. انرژی جنبشی گلوله قبل و بعد از برخورد و میزان جذب انرژی به شیوه زیر محاسبه می‌شود:

$$E_{abs} = E_i - E_f = \frac{1}{2} m v_1^2 - \frac{1}{2} m v_2^2 \quad (1-4)$$

که در آن E_i انرژی جنبشی گلوله قبل از برخورد، E_f انرژی جنبشی گلوله بعد از برخورد (در لحظه جدایی گلوله از نانولوله)، v_1 سرعت اولیه گلوله، v_2 سرعت گلوله در لحظه جدایش و m جرم گلوله می‌باشد. طبق فرمول (۱-۴) داریم:

$$E_i = \frac{1}{4} (3.8 \times 10^{-23}) (250.0^2) = 118.75 \times 10^{-18} \text{ j}$$

یا بر حسب واحد الکترون - ولت (ev) :

$$1 \text{ ev} = 1.6 \times 10^{-19} \text{ j}$$

$$E_i = 742.1875 \text{ ev}$$

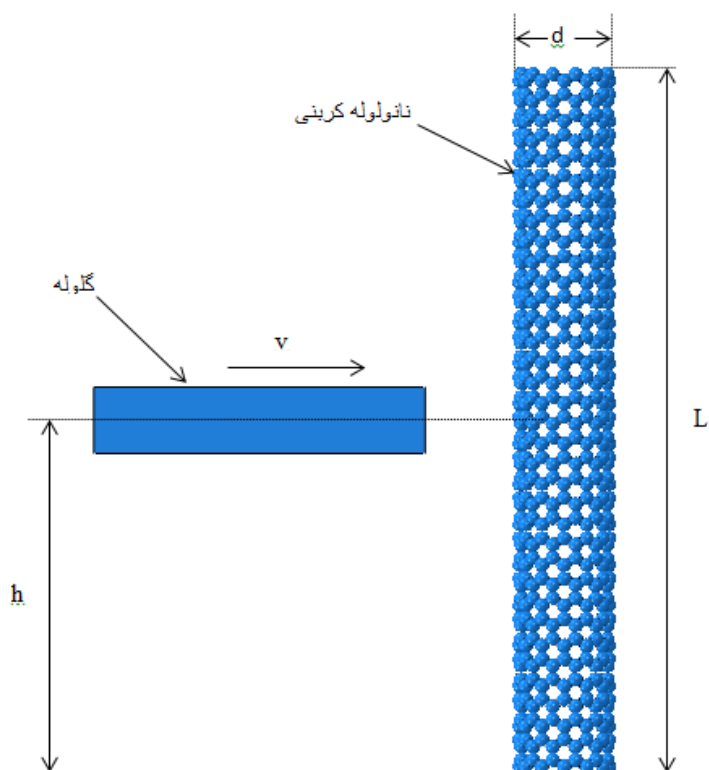
برای محاسبه E_f ، باید سرعت گلوله را در لحظه جدایش از نانولوله (t_1) بدست آورده و روند محاسبه E_i تکرار شود. با این روش میزان جذب انرژی نانولوله کربنی در حالت‌های مختلف بدست می‌آید.

۴-۲-۱ بررسی صحت مدل و شبیه‌سازی

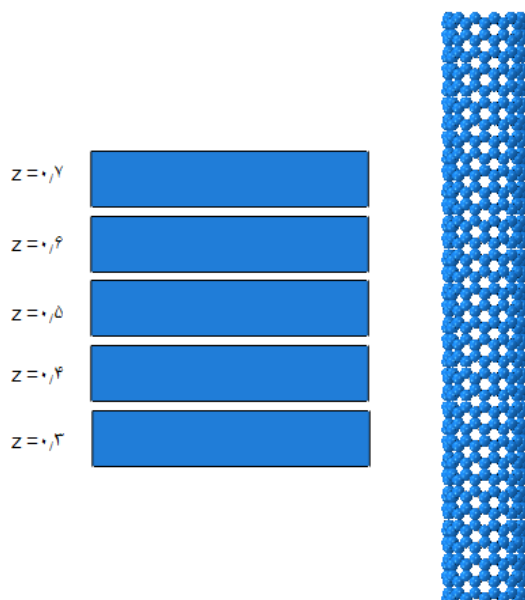
برای بررسی صحت مدل و شبیه‌سازی، به مطالعه تأثیر پارامتر موقعیت مکانی گلوله در رفتار ضربه‌ای دو نمونه نانولوله با شرایط مرزی مختلف پرداخته می‌شود. یکی از پارامترهای مهم در بحث ضربه و میزان جذب انرژی، محل اصابت گلوله می‌باشد. ارتفاع نسبی محل برخورد گلوله این‌گونه تعریف می‌شود:

$$z = h/L \quad (2-4)$$

که در آن h فاصله مرکز گلوله تا تکیه‌گاه ثابت و L طول نانولوله کربنی می‌باشد.



شکل (۴-۴): پارامترهای مختلف موقعیت گلوله قبل از برخورد



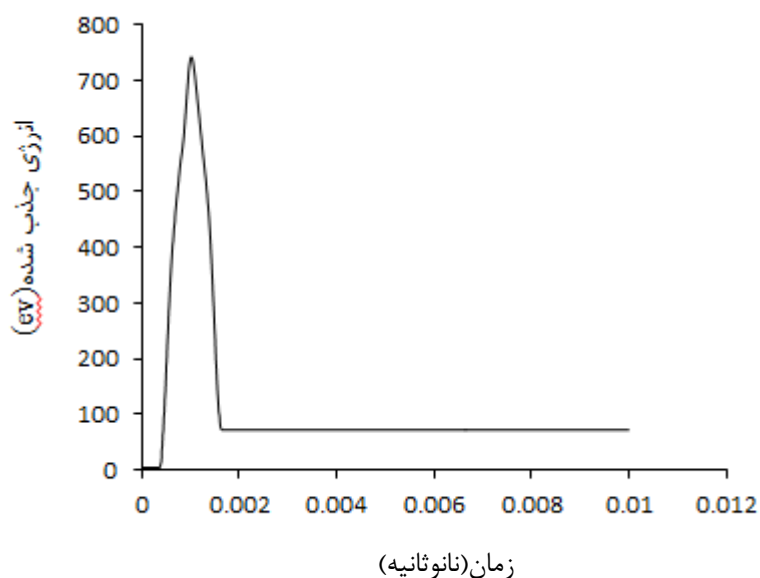
شکل (۵-۴): موقعیت‌های مختلف گلوله در ارتفاع‌های نسبی متفاوت قبل از برخورد

همان طور که از شکل (۴-۵) مشخص است این پارامتر در ۵ موقعیت مختلف گلوله برای دو نمونه نانولوله کربنی با شرایط مختلف مرزی بررسی شده است. در ابتدا به بررسی انرژی جذب شده در نانولوله کربنی دو سر ثابت پرداخته می‌شود. که نتایج حاصل از آن در جدول (۴-۲) آورده شده است. همان طور که از جدول (۴-۲) مشخص است؛ مقدار انرژی جذب شده هنگامی که گلوله به وسط نانولوله کربنی دو سر ثابت برخورد می‌کند، بیشینه می‌شود و هرچه به سمت دو تکیه‌گاه نزدیک می‌شویم، به دلیل افزایش سفتی نانولوله، مقدار جذب انرژی کاهش می‌یابد. در شکل (۴-۶) نمودار انرژی بر حسب زمان در ارتفاع نسبی $Z=0.5$ رسم شده است.

جدول (۴-۲): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی زیگزاگ دو سرگیردار در موقعیت‌های مختلف گلوله

ارتفاع نسبی (Z)	(t_1) لحظه جدایش گلوله از نانولوله کربنی (ns)	سرعت گلوله در لحظه t_1 (m/s)	انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی (eV)	انرژی جذب شده انرژی جنبشی گلوله
۰٫۳	۰٫۰۰۱۳۴۶	-۱۹۸۵٫۰۹	۲۷۴٫۲۴۳	۰٫۳۶۹۵
۰٫۴	۰٫۰۰۱۳۶۱	-۱۷۴۲٫۳۴	۳۸۱٫۶۹۲	۰٫۵۱۴۲
۰٫۵	۰٫۰۰۱۳۶۶	-۱۴۷۵٫۹۴	۴۸۳٫۸۳۲	۰٫۶۵۱۹
۰٫۶	۰٫۰۰۱۳۶۱	-۱۷۴۲٫۳۴	۳۸۱٫۶۹۲	۰٫۵۱۴۲
۰٫۷	۰٫۰۰۱۳۴۶	-۱۹۸۵٫۰۹	۲۷۴٫۲۴۳	۰٫۳۶۹۵

در شکل (۴-۶) مشخص است که انرژی نانولوله کربنی قبل از برخورد صفر بوده و از لحظه برخورد شروع به جذب انرژی گلوله می‌کند. در لحظه‌ای که سرعت گلوله صفر می‌شود، نانولوله کربنی تمام انرژی گلوله را جذب کرده و از این لحظه به بعد فرایند برگشت گلوله شروع می‌شود.

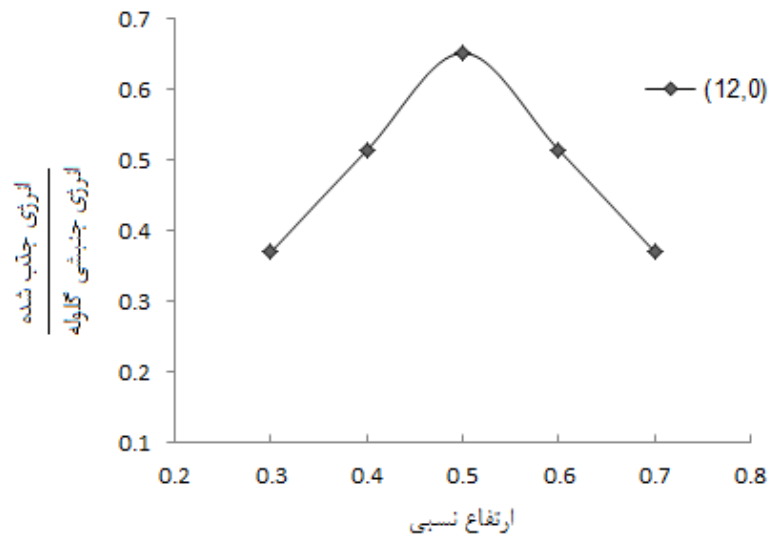


شکل (۴-۶): نمودار انرژی بر حسب زمان در حالت برخورد گلوله به نانولوله کربنی در ارتفاع نسبی $Z=0.5$

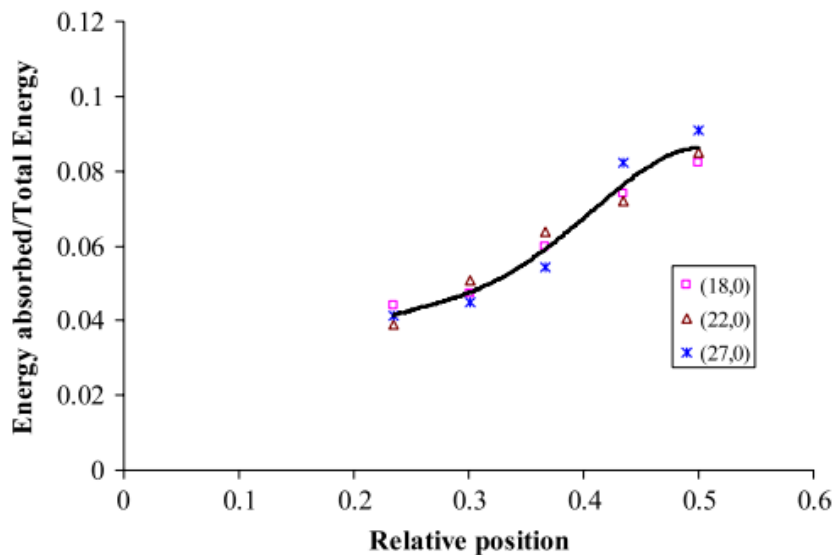
در شکل (۴-۷) تغییرات انرژی جذب شده با ارتفاع نسبی آورده شده است. همچنین نمودار انرژی بر حسب موقعیت گلوله در کار ژانگ نیز آورده شده که این تحقیق روی نانولوله‌های زیگزاگ به قطر ۱٫۴۱، ۱٫۷۲ و ۲٫۱ نانومتر انجام شده است.

همان طور که در شکل (۴-۷) مشاهده می‌شود؛ حداکثر جذب انرژی در ارتفاع نسبی ۰٫۵ رخ داده که در کار ژانگ نیز در همین موقعیت از گلوله جذب انرژی بیشینه شده است. لازم به ذکر است که در کار ژانگ و میلیوانام با توجه به استفاده از روش دینامیک مولکولی، نانولوله کربنی دارای انرژی اولیه (قبل از برخورد) می‌باشد که برای نرماله کردن انرژی جذب شده از این مقدار استفاده شده است. اما در تحقیق حاضر نانولوله دارای انرژی اولیه نیست از این رو برای نرماله کردن انرژی جذب شده از انرژی جنبشی گلوله قبل از برخورد استفاده شده است. همانطور که گفته شد، گلوله با سرعت ثابت ۲۵۰۰ متر بر ثانیه حرکت کرده و به نانولوله کربنی برخورد می‌کند. مطابق شکل (۴-۸) از لحظه برخورد، سرعت گلوله کاهش یافته و به صفر می‌رسد. سپس فرایند برگشت گلوله پس از برخورد شروع می‌شود؛ یعنی سرعت گلوله پس از صفر شدن زیاد گشته و در جهت مخالف پرتاب می‌شود. در

شکل (۹-۴) حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی در موقعیت‌های مختلف اصابت گلوله نشان داده شده است. در شکل (۹-۴) مقطعی از گلوله مشاهده می‌شود و به دلیل تقارن در موقعیت گلوله، فقط سه نمونه متفاوت نشان داده شده است. مطابق شکل (۹-۴) وقتی که سرعت گلوله صفر می‌گردد، بیش‌ترین میزان تغییر شکل نانولوله کربنی رخ می‌دهد.



(الف)

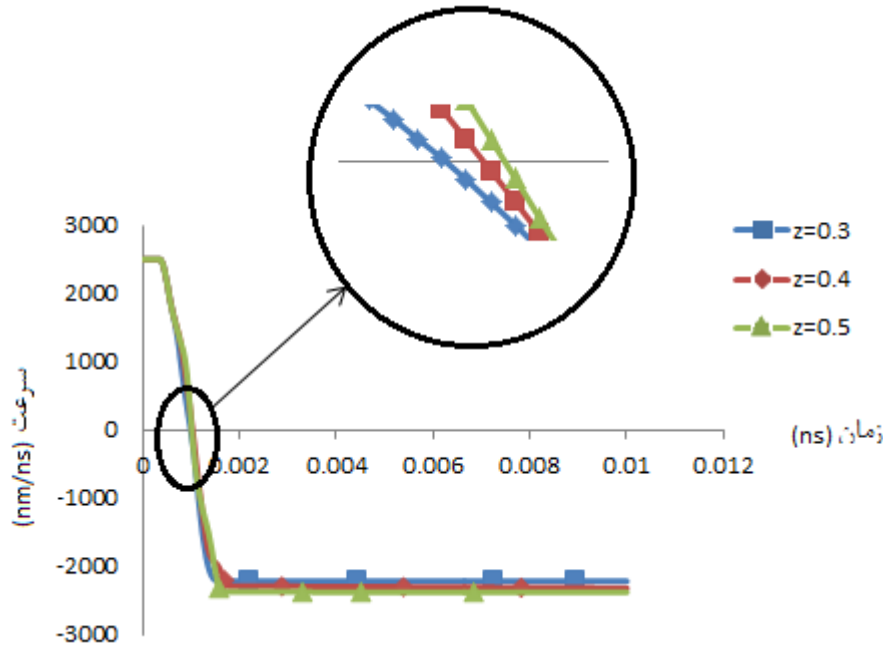


(ب)

شکل (۷-۴): منحنی انرژی جذب شده نرماله شده بر حسب ارتفاع نسبی (الف) تحقیق حاضر (ب) ژانگ و

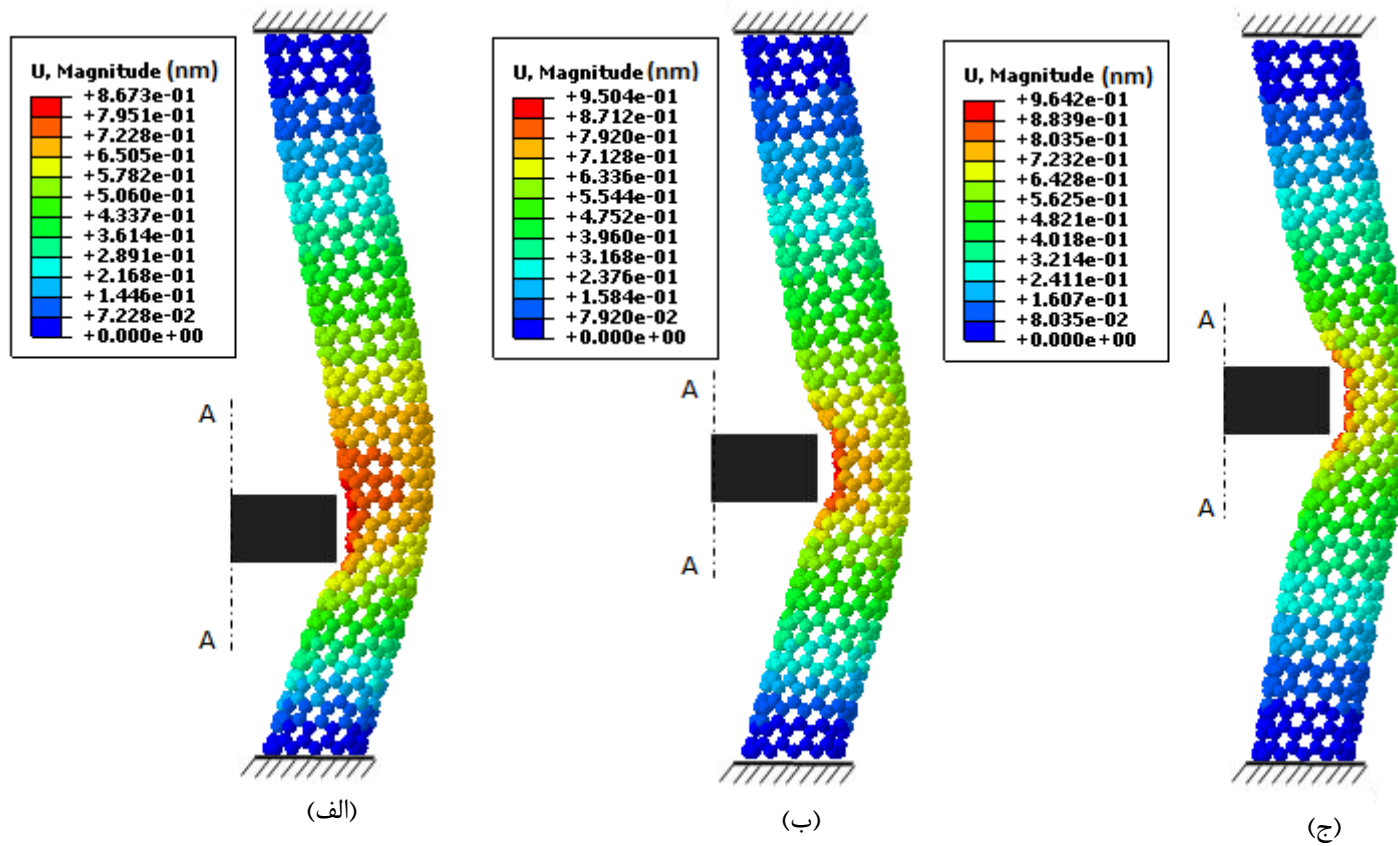
میلواگانام [۱۲]

در شکل (۸-۴) نمودار سرعت- زمان گلوله برای سه موقعیت متفاوت از آن در فرایند برخورد به نانولوله کربنی دو سر ثابت نشان داده شده است.



شکل (۸-۴): نمودار سرعت- زمان گلوله در موقعیت‌های مختلف

از جدول (۲-۴) و شکل (۸-۴) مشاهده می‌گردد که زمان صفر شده سرعت گلوله یا به عبارت دیگر زمان شروع فرایند برگشت گلوله در موقعیت‌های مختلف متفاوت است. زمان صفر شدن سرعت گلوله وقتی که به وسط نانولوله کربنی اصابت می‌کند، به دلیل جذب انرژی بیشتر و تغییر شکل بزرگتر در آن قسمت (شکل (۹-۴))، بیشتر از بقیه حالات است. وقتی گلوله به وسط نانولوله کربنی برخورد می‌کند، به دلیل تغییر شکل بزرگتر در آن قسمت انرژی بیشتری در نانولوله ذخیره شده و در فرایند برگشت انرژی بیشتری به گلوله داده می‌شود؛ بنابراین در این موقعیت باید سرعت نهایی گلوله نسبت به بقیه حالات بیشتر باشد (شکل (۸-۴)).



شکل (۹-۴): حداکثر تغییر شکل متناظر با کانتور جابجایی نانولوله کربنی دو سر گیردار در لحظه صفر شدن سرعت گلوله برای ارتفاع‌های نسبی متفاوت گلوله
 (الف) $z=0.3$ (ب) $z=0.4$ (ج) $z=0.5$

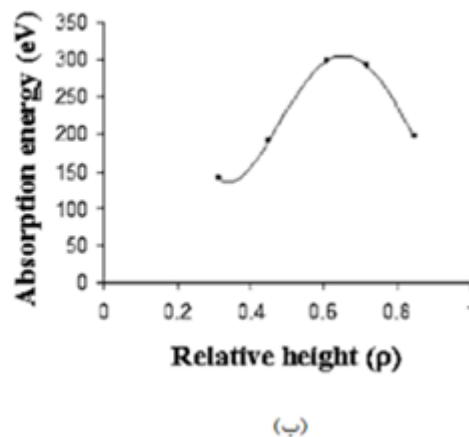
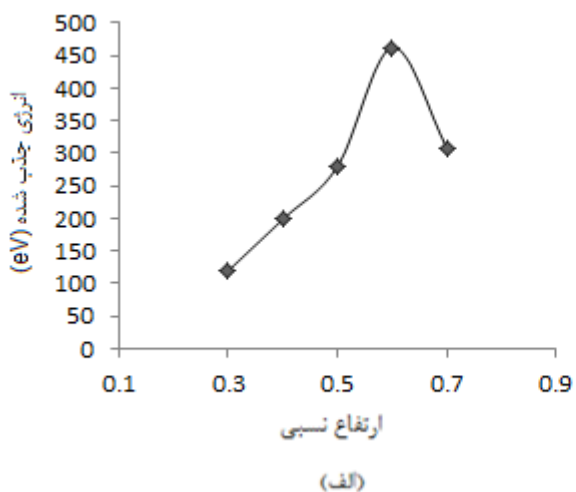
در ادامه با تغییر شرط مرزی نانولوله از دو سر ثابت به یک سر ثابت پارامتر موقعیت گلوله مجدداً بررسی می‌گردد. تمام شرایط مانند حالت دو سر ثابت می‌باشد. فقط نانولوله یک سر ثابت شده است و گلوله نیز در همان موقعیت‌های قبلی به نانولوله اصابت می‌کند. در جدول (۳-۴) جذب انرژی آورده شده است.

از جدول (۳-۴) مشاهده می‌گردد که انرژی جذب شده وقتی که گلوله در ارتفاع نسبی $z=0.6$ به نانولوله کربنی اصابت می‌کند؛ بیشینه است؛ در حالی که در حالت دو سر ثابت در موقعیت $z=0.5$ به مقدار بیشینه خود می‌رسد. همچنین سرعت برگشت گلوله وقتی در $z=0.6$ به نانولوله اصابت می‌کند از مقدار اولیه قبل از برخورد بیشتر شده است. در شکل (۴-۱۰) نمودار انرژی جذب شده نرماله شده بر حسب ارتفاع نسبی محل برخورد گلوله برای تحقیق حاضر و کار انجام شده توسط ژانگ آورده شده است. البته نمودار کار ژانگ برای نانولوله به قطر 0.75 نانومتر می‌باشد. که در تحقیق حاضر از نانولوله به قطر 0.95 نانومتر استفاده شده است. با توجه به جدول (۳-۴) و شکل (۴-۱۱) مشاهده می‌شود که میزان شکم‌دهی نانولوله در ارتفاع نسبی $z=0.6$ برای گلوله، حداکثر شده است؛ زیرا در برخورد گلوله به نانولوله در این موقعیت، بیشترین تغییر شکل در نانولوله رخ داده و از این رو بیشترین جذب انرژی توسط نانولوله اتفاق می‌افتد.

وقتی گلوله در ارتفاع نسبی کم به نانولوله یک سر ثابت برخورد می‌کند؛ اولین تغییر شکل در نانولوله کربنی به واسطه کمانش در نزدیکی تکیه‌گاه ایجاد می‌شود. تا زمانی که گلوله از نانولوله جدا گردد فرایند مسطح شدن ادامه پیدا می‌کند و انرژی در طول نانولوله جریان یافته و باعث حرکت سر آزاد نانولوله می‌شود اما هنگامی که گلوله در ارتفاع نسبی زیاد به نانولوله برخورد می‌کند، در ابتدای برخورد، کمانش در نزدیکی پایه رخ نمی‌دهد؛ زیرا انرژی اولیه منتقل شده به نانولوله در ابتدا باعث تغییر شکل و حرکت سر آزاد نانولوله می‌شود.

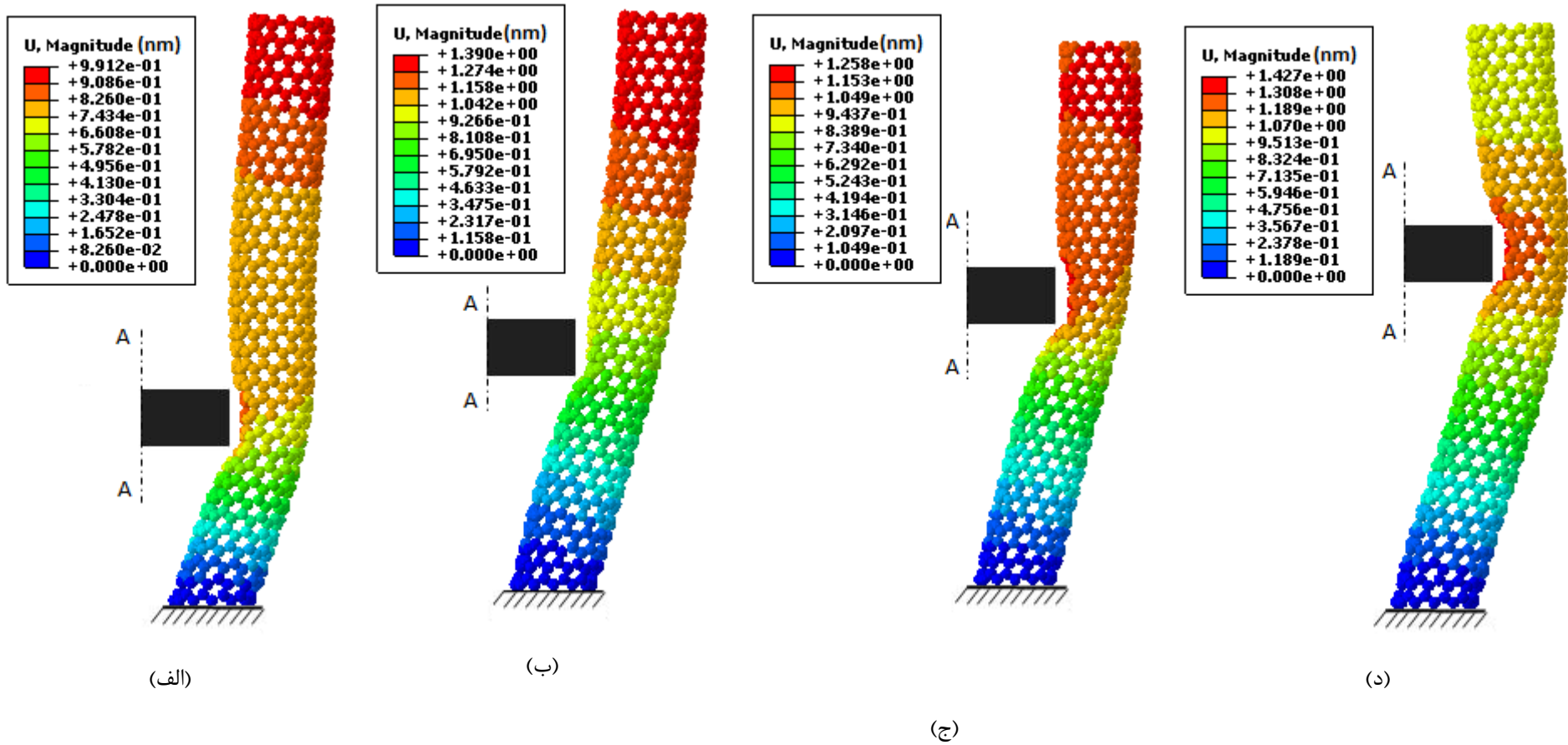
جدول (۳-۴): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی زیگزاگ یک سر گیردار در موقعیت‌های مختلف گلوله

ارتفاع نسبی (Z)	(t_1) لحظه جدایش گلوله از نانولوله کربنی (ns)	سرعت گلوله در لحظه t_1 (m/s)	انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی (eV)	انرژی جذب شده انرژی جنبشی گلوله
۰٫۳	۰٫۰۰۱۳۶۵	-۲۲۸۹٫۴	۱۱۹٫۷۷	۰٫۱۶۱۳
۰٫۴	۰٫۰۰۱۶۲	-۲۱۳۸٫۸۹	۱۹۸٫۹۲	۰٫۲۶۸
۰٫۵	۰٫۰۰۱۸۳۵	-۱۹۷۲٫۴۳	۲۸۰٫۱۹۲	۰٫۳۷۷۵
۰٫۶	۰٫۰۰۱۸۴۴	-۱۵۳۵٫۵	۴۶۲٫۲۰	۰٫۶۲۲۷
۰٫۷	۰٫۰۰۱۷۶۵	-۱۹۱۱٫۸	۳۰۸٫۱۵۸	۰٫۴۱۵



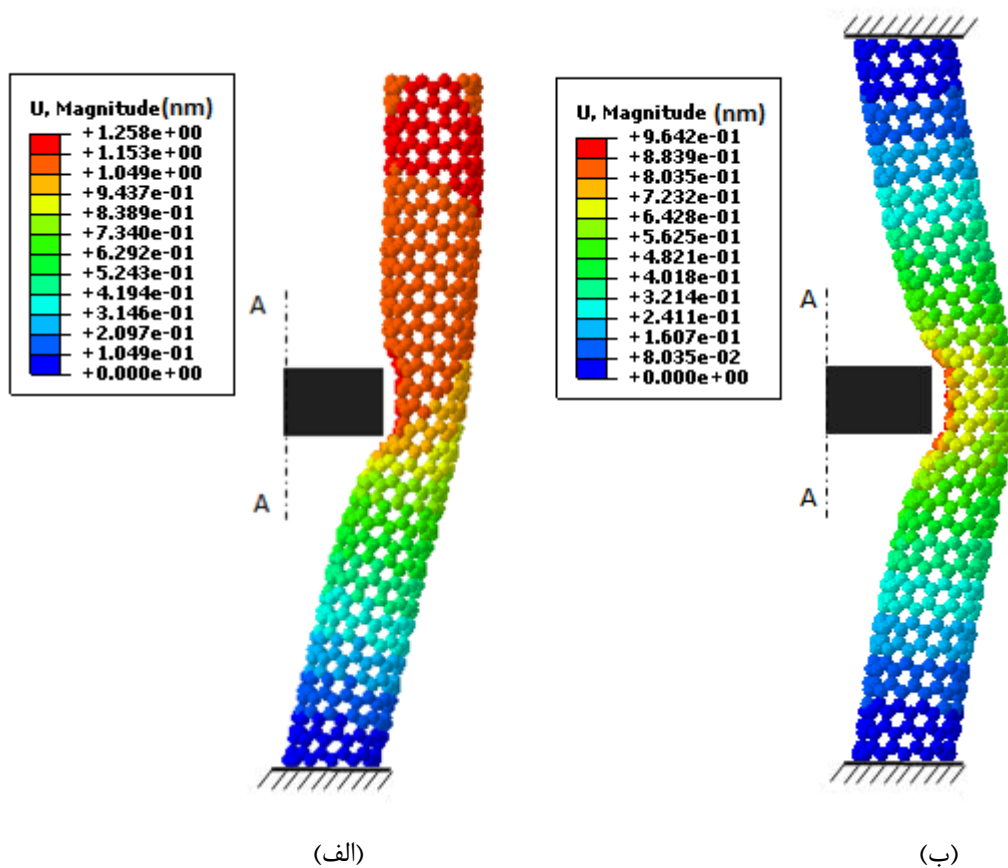
شکل (۳-۴): منحنی انرژی جذب شده نرماله شده بر حسب ارتفاع نسبی (الف) تحقیق حاضر (ب) ژانگ و

میلاوگانام [۱۱]



شکل (۴-۱۱): حداکثر تغییر شکل متناظر با کانتور جابجایی نانولوله کربنی یک سرگیردار در لحظه صفر شدن سرعت گلوله برای ارتفاع‌های نسبی متفاوت گلوله

(الف) $z=0.3$ (ب) $z=0.4$ (ج) $z=0.5$ (د) $z=0.6$



شکل (۴-۱۲) : حداکثر جابجایی نانولوله کربنی، (الف) یک سرگیردار، (ب) دو سرگیردار، در ارتفاع نسبی ۰/۵ برای گلوله

در قسمت قبل پارامترهای مورد مطالعه با کارهایی که توسط ژانگ انجام شده - مقالاتی که در فصل دوم توضیح داده شد- مقایسه گشته و به نوعی صحت مدل و درستی شبیه‌سازی اثبات گردید. در ادامه به بررسی پارامترهای دیگری می‌پردازیم که در تحقیقات گذشته نیامده و لذا برای اولین بار در این زمینه انجام می‌شود.

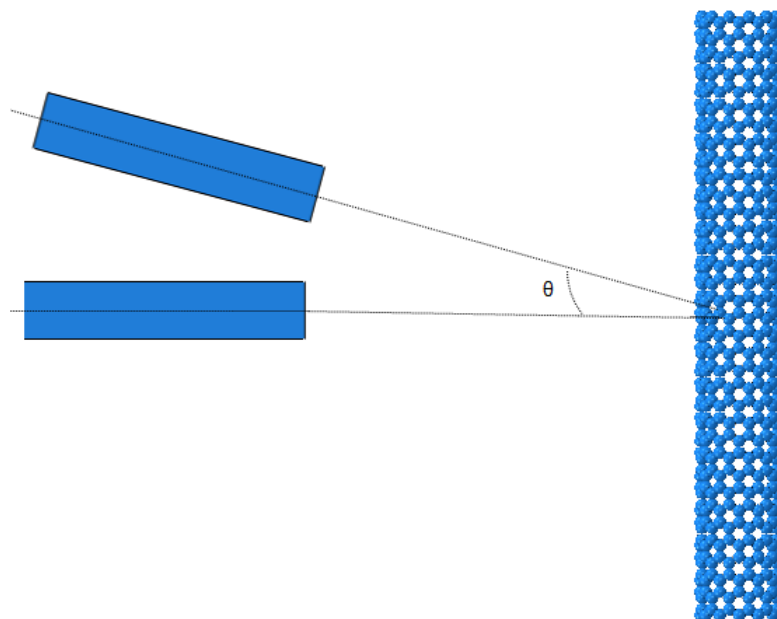
۴-۲-۲ زاویه گلوله

یکی از پارامترهای مهم در تحلیل رفتار مواد مختلف تحت ضربه، بررسی زاویه برخورد گلوله به هدف می‌باشد. می‌توان گفت در حالت واقعی نیز در اغلب موارد گلوله به طور غیرمستقیم و زاویه‌دار به هدف برخورد می‌کند. در این قسمت سعی شده رفتار مکانیکی و قابلیت جذب انرژی نانولوله کربنی

تحت زوایای مختلف برخورد گلوله مطالعه شود. تمامی شرایط مانند جدول (۴-۱) می باشد، فقط زاویه گلوله نسبت به افق دچار تغییر شده است.

در تحقیق انجام شده گلوله زاویه دار به محدوده‌ای از نانولوله برخورد می کند که گلوله افقی نیز به همان ناحیه اصابت می کند. در واقع سعی شده است که محل اصابت گلوله به نانولوله ثابت باشد. در شکل (۴-۱۳) گلوله به صورت زاویه دار و افقی نشان داده شده است. همان طور که از شکل مشخص است، گلوله در محدوده وسط نانولوله به آن برخورد می کند.

با توجه به جدول (۴-۴) مشاهده می شود هرچه زاویه گلوله نسبت به افق بیشتر می گردد، میزان جذب انرژی نانولوله کربنی کمتر می شود. مخصوصاً در زاویه ۶۰ درجه مقدار جذب انرژی فوق العاده کاهش می یابد. این امر به دلیل سطح تماس گلوله با اتم‌های کربن می باشد. وقتی گلوله به صورت افقی به نانولوله برخورد می کند، سطح تماس گلوله با نانولوله بیشتر از بقیه حالات است. هر چه گلوله با زاویه بیشتری نسبت به افق به نانولوله برخورد می کند، سطح تماس و در پی آن میزان تغییر شکل نانولوله کربنی کمتر می شود بنابراین میزان جذب انرژی کاهش می یابد (شکل (۴-۱۴)).

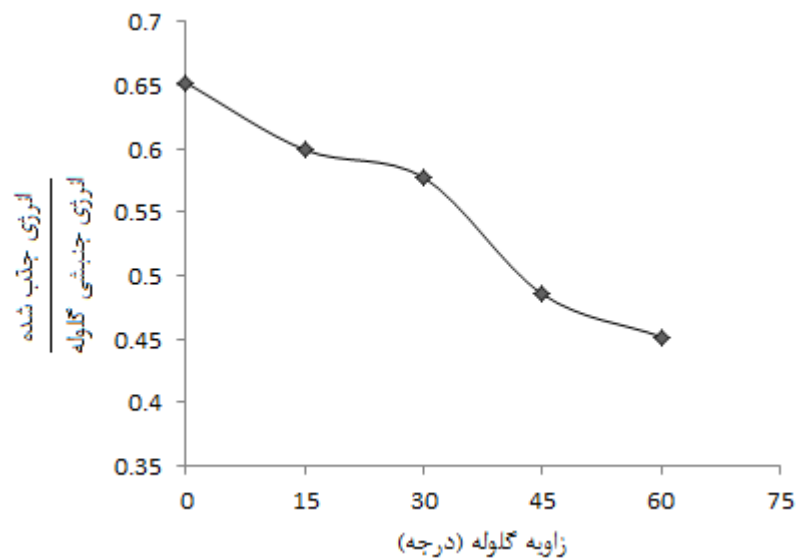


شکل (۴-۱۳): مسیر برخورد گلوله زاویه دار و افقی به نانولوله کربنی

در جدول (۴-۴) مقدار جذب انرژی در زوایای مختلف برخورد گلوله آورده شده است.

جدول (۴-۴): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی دو سر گیردار در زاویه‌های مختلف برخورد گلوله

زاویه گلوله (θ) (درجه)	(t_1) لحظه جدایش گلوله از نانولوله کربنی (ns)	سرعت گلوله در لحظه t_1 (m/s)	انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی (eV)	انرژی جذب شده انرژی جنبشی گلوله
۰	۰,۰۰۱۳۶۶	-۱۴۷۵,۹۴	۴۸۳,۸۳۲	۰,۶۵۱۹
۱۵	۰,۰۰۱۳۹۹	-۱۵۸۱,۳	۴۴۵,۲۵	۰,۵۹۹
۳۰	۰,۰۰۱۵۵۲	-۱۶۲۴,۱۲	۴۲۸,۹۲	۰,۵۷۷
۴۵	۰,۰۰۱۷۳۵	-۱۷۹۳,۵۴	۳۶۰,۲۰	۰,۴۸۵۳
۶۰	۰,۰۰۱۸۶	-۱۸۵۱,۳۲	۳۳۵,۱۸	۰,۴۵۱۶

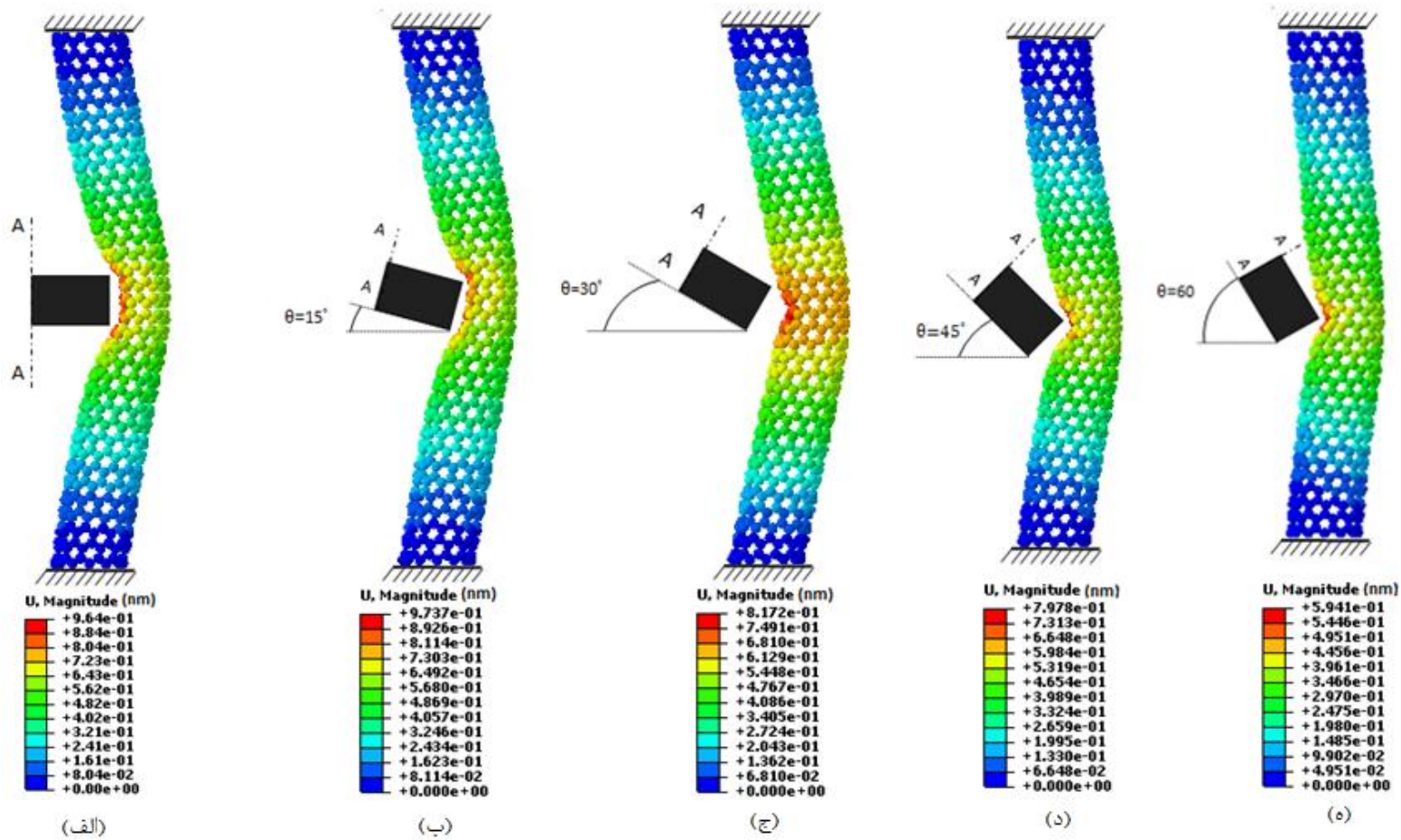


شکل (۴-۱۴): منحنی تغییرات انرژی جذب شده نرماله شده توسط نانولوله کربنی بر حسب زاویه گلوله

در شکل (۴-۱۵) میزان تغییر شکل نانولوله کربنی بر حسب کانتور جابجایی در زوایای مختلف گلوله آورده شده است.

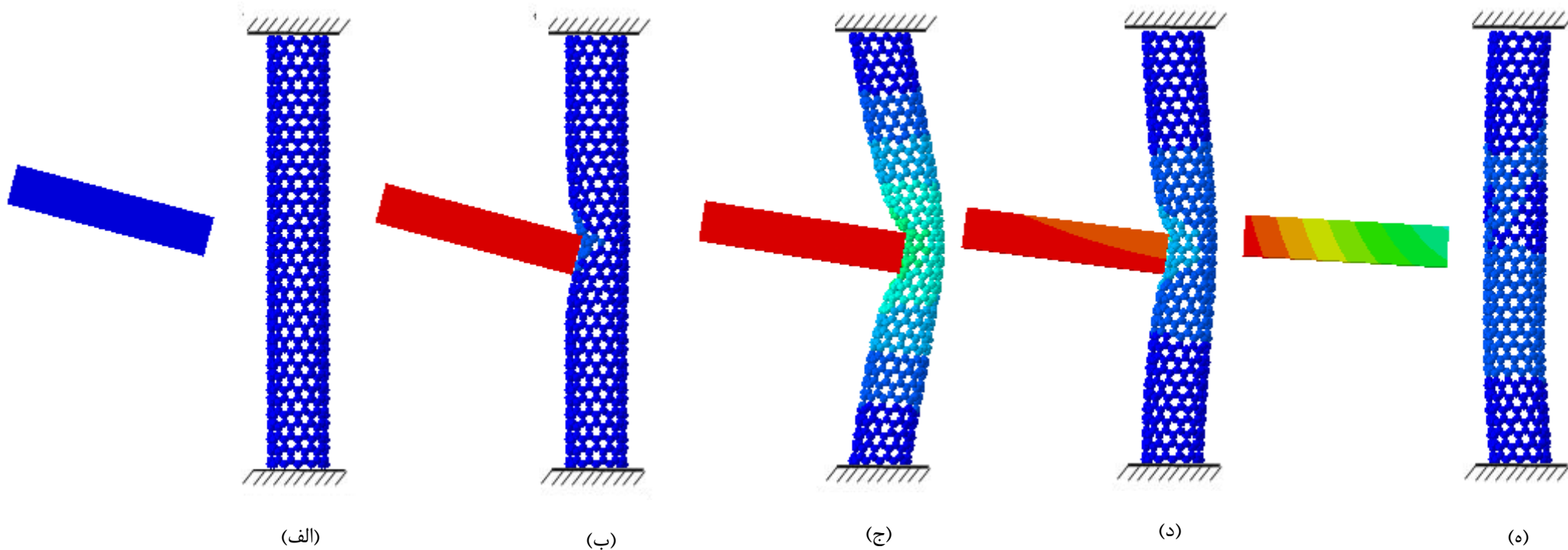
از شکل (۴-۱۵) می‌توان دریافت که در هر زاویه‌ای که جذب انرژی بیشتر باشد؛ میزان تغییر شکل نیز زیادتر است. در شکل‌های (ب) تا (ه) حداکثر جابجایی نانولوله در محلی پایین‌تر از محل اصابت اولیه گلوله می‌باشد؛ زیرا وقتی که گلوله با زاویه‌ای نسبت به افق به نانولوله کربنی اصابت می‌کند، ابتدا یک تغییر شکل کوچک در آن ایجاد نموده سپس در محلی پایین‌تر از مکان اصابت به طور کامل انرژی خود را از دست داده و سرعتش به صفر می‌رسد. در این مرحله، زاویه گلوله نسبت به افق تغییر یافته و با زاویه‌ای متفاوت نسبت به وضعیت ابتدایی وارد مرحله برگشت می‌شود. در شکل (۴-۱۶) سیر حرکتی گلوله و تغییر شکل نانولوله نشان داده شده است.

از قابلیت‌های مدل مورد استفاده این است که می‌توان به راحتی نانولوله را با هر اندازه‌ای ایجاد کرد. از این جهت در ادامه به بررسی تأثیر طول و قطر بر جذب انرژی نانولوله پرداخته می‌شود.



شکل (۴-۱۵): حداکثر تغییر شکل متناظر با کانتور جابجایی نانولوله کربنی دو سرگیردار در لحظه صفر شدن سرعت گلوله برای زوایای متفاوت گلوله

(الف) $\theta=0^\circ$ (ب) $\theta=15^\circ$ (ج) $\theta=30^\circ$ (د) $\theta=45^\circ$ (هـ) $\theta=60^\circ$



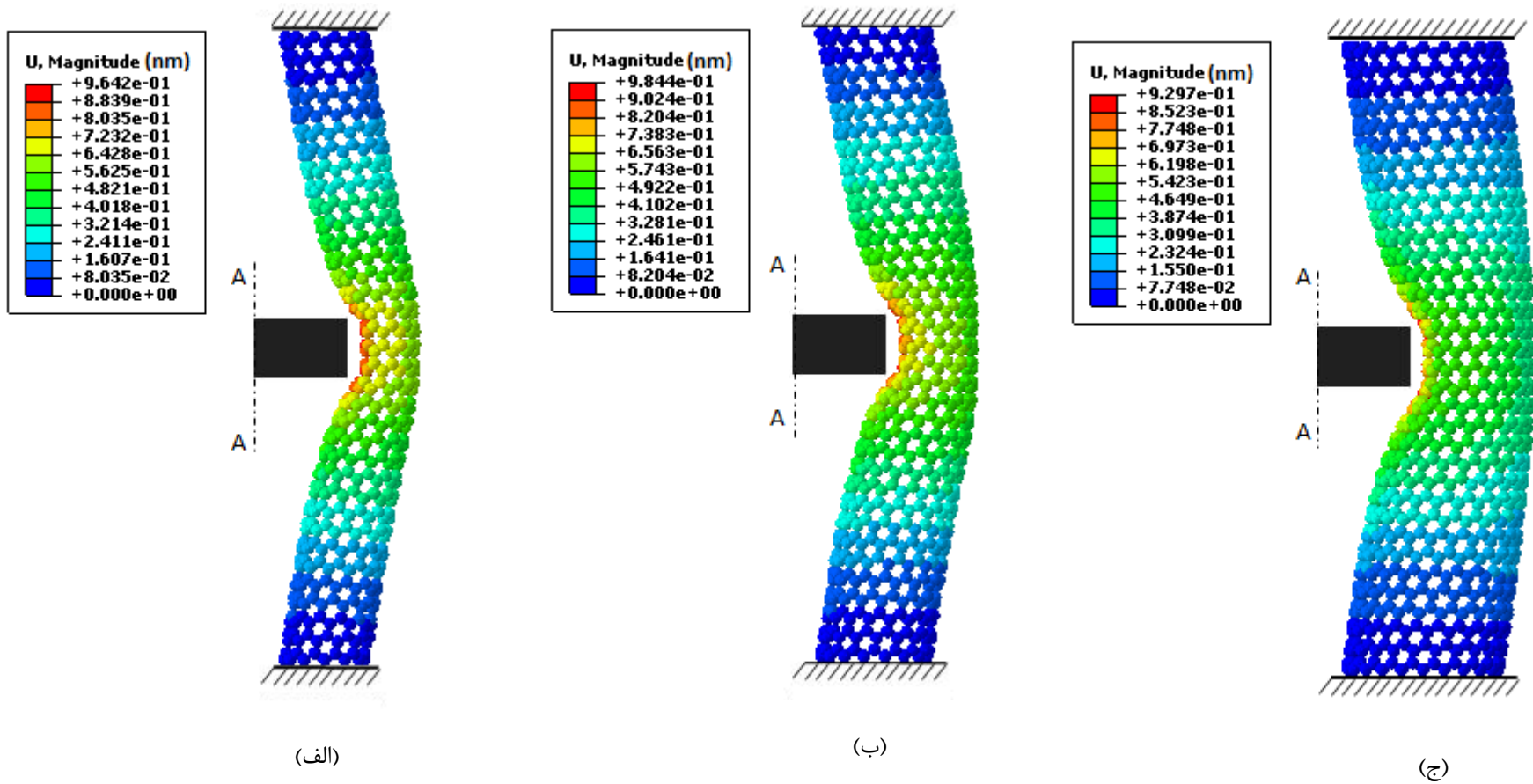
شکل (۴-۱۶): سیر حرکتی گلوله با زاویه ۱۵ درجه نسبت به افق برای نانولوله دو سرگیردار، (الف) قبل از برخورد، (ب) لحظه ۰/۰۰۰۵ نانوثانیه، (ج) لحظه ۰/۰۰۱۰۴۸ نانوثانیه، (د) لحظه ۰/۰۰۱۵ نانوثانیه، (ه) لحظه ۰/۰۰۲ نانوثانیه

۴-۲-۳ قطر نانولوله کربنی

معیار هزینه در مصارف صنعتی و فاکتور زمان در تحلیل‌های کامپیوتری از جمله پارامترهای مهم برای پژوهشگران به حساب می‌آیند. از این رو آن‌ها همیشه به دنبال راهی برای حداکثر صرفه‌جویی در این زمینه بوده‌اند. یکی از عوامل مهم در این صرفه‌جویی انتخاب اندازه ماده در تحلیل‌ها می‌باشد که باید سعی شود از بهترین اندازه با بیش‌ترین کارایی در تست‌ها و شبیه‌سازی‌ها استفاده گردد. از عوامل مهم در این زمینه می‌توان به قطر نانولوله کربنی و طول آن اشاره کرد. در این بخش اثر قطر نانولوله و در بخش آینده تأثیر طول نانولوله بررسی می‌شود. برای بررسی اثر قطر، از سه نمونه نانولوله کربنی با طول یکسان به قطرهای ۰٫۹۴، ۱٫۲۵۷ و ۱٫۷۲۵ نانومتر استفاده شده است. گلوله نیز در وسط نانولوله به آن برخورد می‌کند. شرایط دیگر طبق جدول (۴-۱) می‌باشد. مقدار جذب انرژی در جدول (۴-۵) آورده شده است. در شکل (۴-۱۷) نیز ماکزیمم تغییر شکل نانولوله در لحظه صفر شدن سرعت گلوله آورده شده است.

جدول (۴-۵): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی زیگزاگ دو سرگیردار با قطرهای مختلف

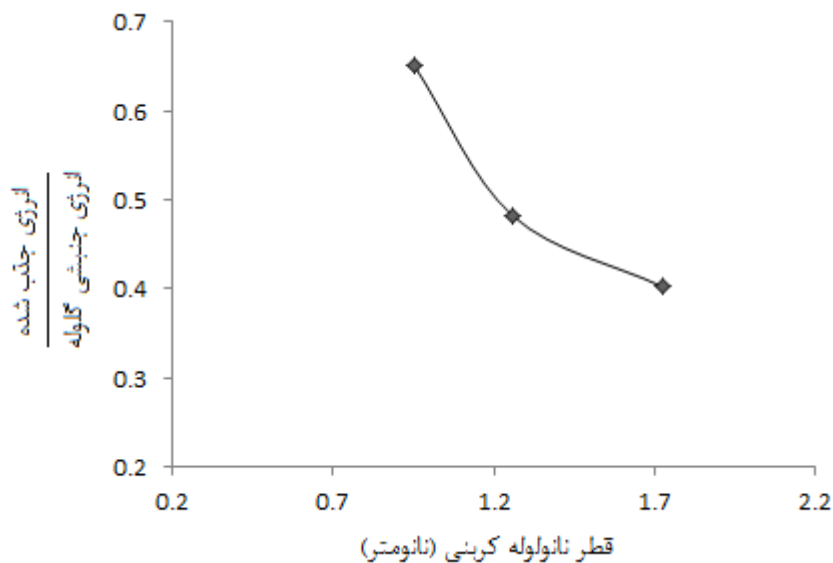
قطر (mm)	(t_1) لحظه جدایش گلوله از نانولوله کربنی (ns)	سرعت گلوله در لحظه t_1 (m/s)	انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی (eV)	انرژی جذب شده انرژی جنبشی گلوله
۰٫۹۴	۰٫۰۰۱۳۶۶	-۱۴۷۵٫۹۴	۴۸۳٫۸۳۲	۰٫۶۵۱۹
۱٫۲۵۷	۰٫۰۰۱۳۴	-۱۷۱۹٫۱۱	۳۹۱٫۲۴	۰٫۵۲۷۱
۱٫۷۲۵	۰٫۰۰۱۲۷۳	-۱۹۳۳٫۵۷	۲۹۸٫۲۱۷	۰٫۴۰۱۸



شکل (۴-۱۷): حداکثر تغییر شکل متناظر با کانتور جابجایی نانولوله کربنی دو سرگیردار در لحظه صفر شدن سرعت گلوله برای سه قطر مختلف

(الف) $D=0.95$ nm ، (ب) $D=1.257$ nm ، (ج) $D=1.725$ nm

با نگاهی به جدول (۴-۵) و شکل (۴-۱۷) می‌توان دریافت که با افزایش قطر نانولوله کربنی، میزان جذب انرژی آن در مقابل گلوله‌ای با اندازه و سرعت یکسان مقداری کاهش می‌یابد. البته با افزایش قطر نانولوله، مقدار کاهش انرژی جذب شده کمتر می‌گردد و در نهایت مقدار جذب انرژی به اندازه ثابتی خواهد رسید (شکل (۴-۱۸)).



شکل (۴-۱۸): منحنی انرژی جذب شده نرماله شده نانولوله کربنی با قطرهای مختلف

با افزایش قطر نانولوله کربنی میزان جذب انرژی کاهش می‌یابد؛ در واقع نانولوله کربنی با قطرهای بزرگتر توانایی مقاومت در برابر گلوله با سرعت‌های بیشتری را دارا می‌باشند. البته این کاهش از یک محدوده‌ای از قطر از بین می‌رود. یعنی از یک قطر مشخص بالاتر، افزایش قطر تأثیری در جذب انرژی نانولوله کربنی ندارد.

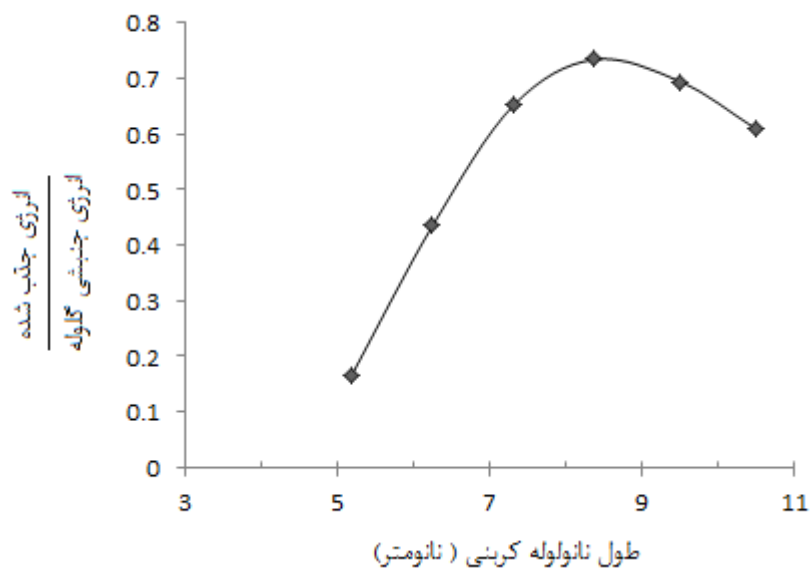
۴-۲-۴ طول نانولوله کربنی

در ادامه بررسی تأثیر اندازه نانولوله در میزان جذب انرژی گلوله، ۵ طول مختلف از نانولوله کربنی با قطر یکسان تحت ضربه شبیه‌سازی می‌شود. باید توجه شود که معیار در این قسمت به دست آوردن طول بهینه است؛ یعنی صرفاً برای صرفه‌جویی در زمان و هزینه نمی‌توان از طول کوچک‌تر استفاده کرد. بلکه باید بهترین طول را به دست آورده و از آن استفاده شود. در جدول (۴-۶) میزان جذب انرژی ۵ طول مختلف از نانولوله کربنی به همراه سرعت برگشت گلوله در لحظه t_1 آورده شده است.

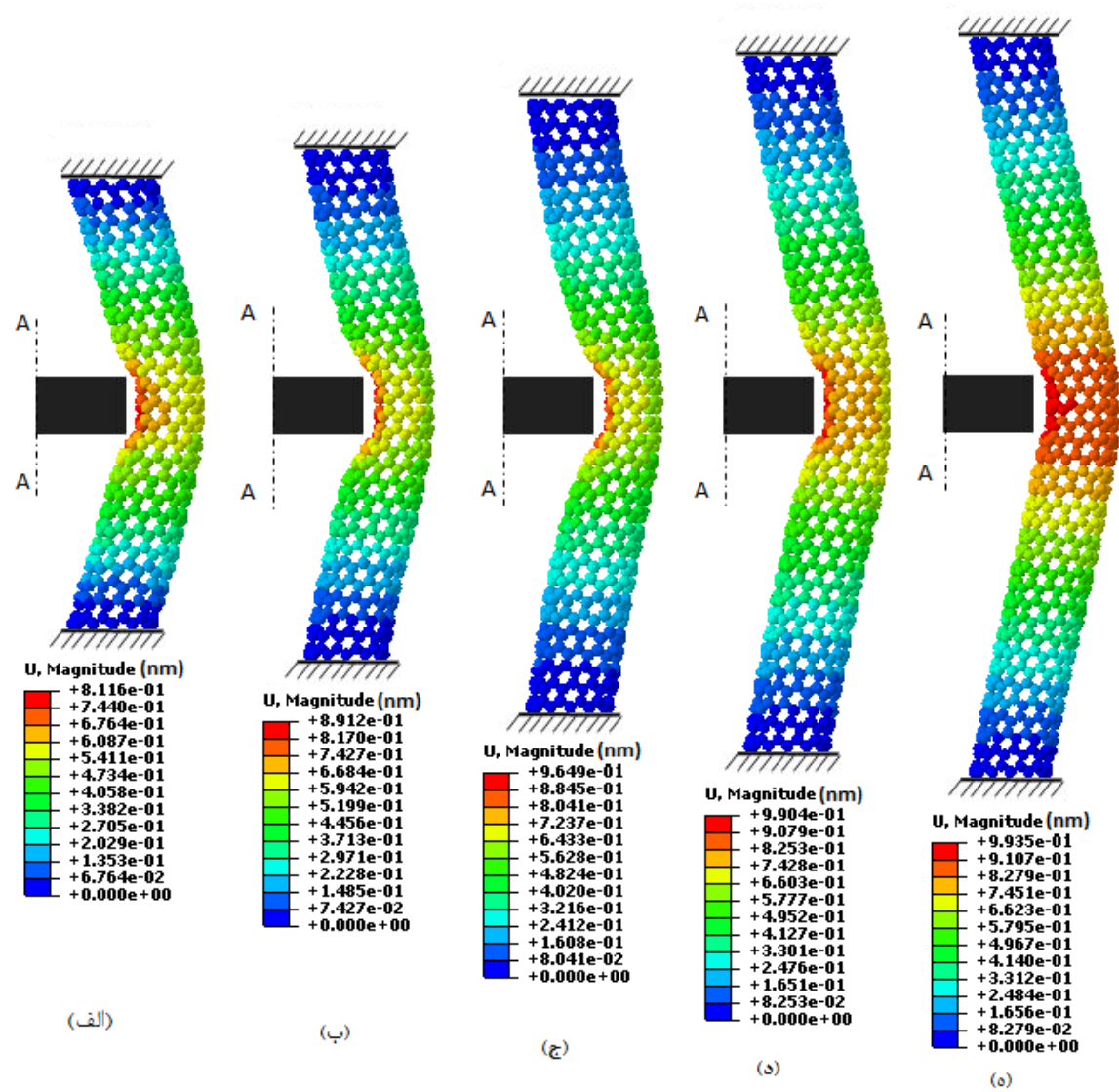
جدول (۴-۶): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی دو سرگردار با طول‌های مختلف

طول نانولوله کربنی (nm)	(t_1) لحظه جدایش گلوله از نانولوله کربنی (ms)	سرعت گلوله در لحظه t_1 (m/s)	انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی (ev)	$\frac{\text{انرژی جذب شده}}{\text{انرژی جنبشی گلوله}}$
۵,۱۸	۰,۰۰۱۲۷۶	-۲۲۸۵,۲۱	۱۲۲,۰۵	۰,۱۶۴۴
۶,۲۴۸	۰,۰۰۱۳۱۶	-۱۸۷۹,۰۳	۳۲۲,۹۱	۰,۴۳۵
۷,۳۱۳	۰,۰۰۱۳۶۶	-۱۴۷۵,۹۵	۴۸۳,۸۳۲	۰,۶۵۱۹
۸,۳۷۸	۰,۰۰۱۴۶	-۱۲۸۸,۲۱	۵۴۵,۱۲۳	۰,۷۳۴۴
۹,۵۱۴	۰,۰۰۱۴۱۴	-۱۳۸۱,۳	۵۱۵,۶۱۳	۰,۶۹۴
۱۰,۵۰۸	۰,۰۰۱۳۴۲	-۱۵۶۲,۵	۴۵۲,۲۷	۰,۶۰۹

از جدول (۴-۶) و شکل (۴-۱۹) مشخص می‌شود که طول نانومتر دارای بیشترین جذب انرژی می‌باشد و هر چه طول‌های بزرگ‌تر یا کوچک‌تر از این مقادیر انتخاب شوند؛ میزان جذب انرژی کاهش می‌یابد.



شکل (۴-۱۹): منحنی مقدار انرژی جذب شده نرماله شده نانولوله کربنی برحسب طول‌های مختلف



شکل (۴-۲۰): حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی دوسرگیردار به طول (الف) ۵.۱۸nm (ب) ۶.۲۴۸nm (ج) ۷.۳۱۳nm (د) ۸.۳۷۸nm (ه) ۹.۵۱۴nm، در لحظه صفر شدن سرعت گلوله

۴-۲-۵ نوع نانولوله کربنی

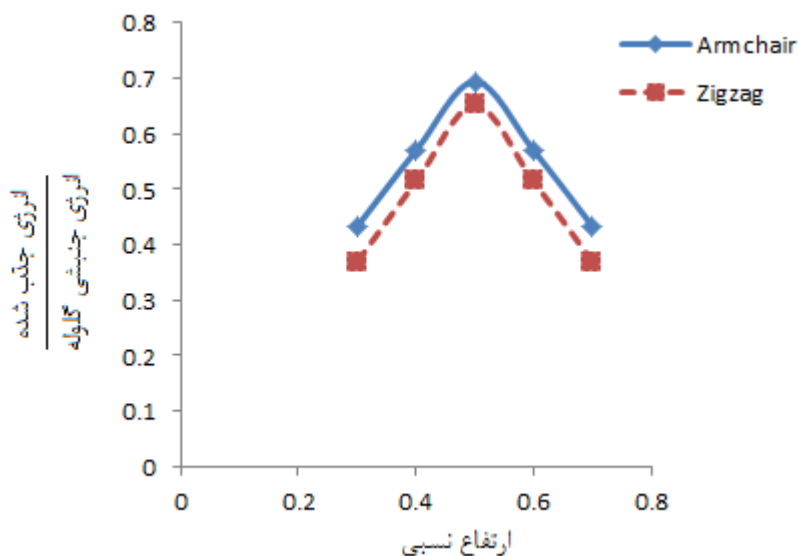
همان طور که در فصل قبل گفته شد، نانولوله‌های کربنی از پیچیده شدن یک صفحه گرافن ساخته می‌شوند. حالت‌های مختلف زیادی برای لوله کردن یک گرافن وجود دارد. جهت چرخش این لایه گرافن، نوع ساختار نانولوله‌های کربنی را به وجود می‌آورد. دو نوع از این ساختار به نام‌های زیگزاگ و آرمچیر هستند که در فصل قبل به صورت تفصیلی گفته شد. در تمامی بررسی‌هایی که تاکنون بر روی جذب انرژی نانولوله‌های کربنی تحت ضربه صورت گرفت از نانولوله کربنی زیگزاگ استفاده شد که در ادامه نوع نانولوله به آرمچیر تغییر می‌کند.

تمامی شرایط مانند جدول (۴-۱) است؛ فقط نوع نانولوله به آرمچیر تغییر کرده است. البته به دلیل تغییر نوع نانولوله، طول و قطر آن نیز نسبت به نوع زیگزاگ تغییرات اندکی داشته که از طول ۷٫۲۵۵ و قطر ۰٫۹۵ در این تحقیق استفاده شده است. در جدول (۴-۷) تأثیر موقعیت گلوله بر میزان جذب انرژی نانولوله کربنی آورده شده است.

جدول (۴-۷): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی آرمچیر دو سرگیردار در موقعیت‌های مختلف گلوله

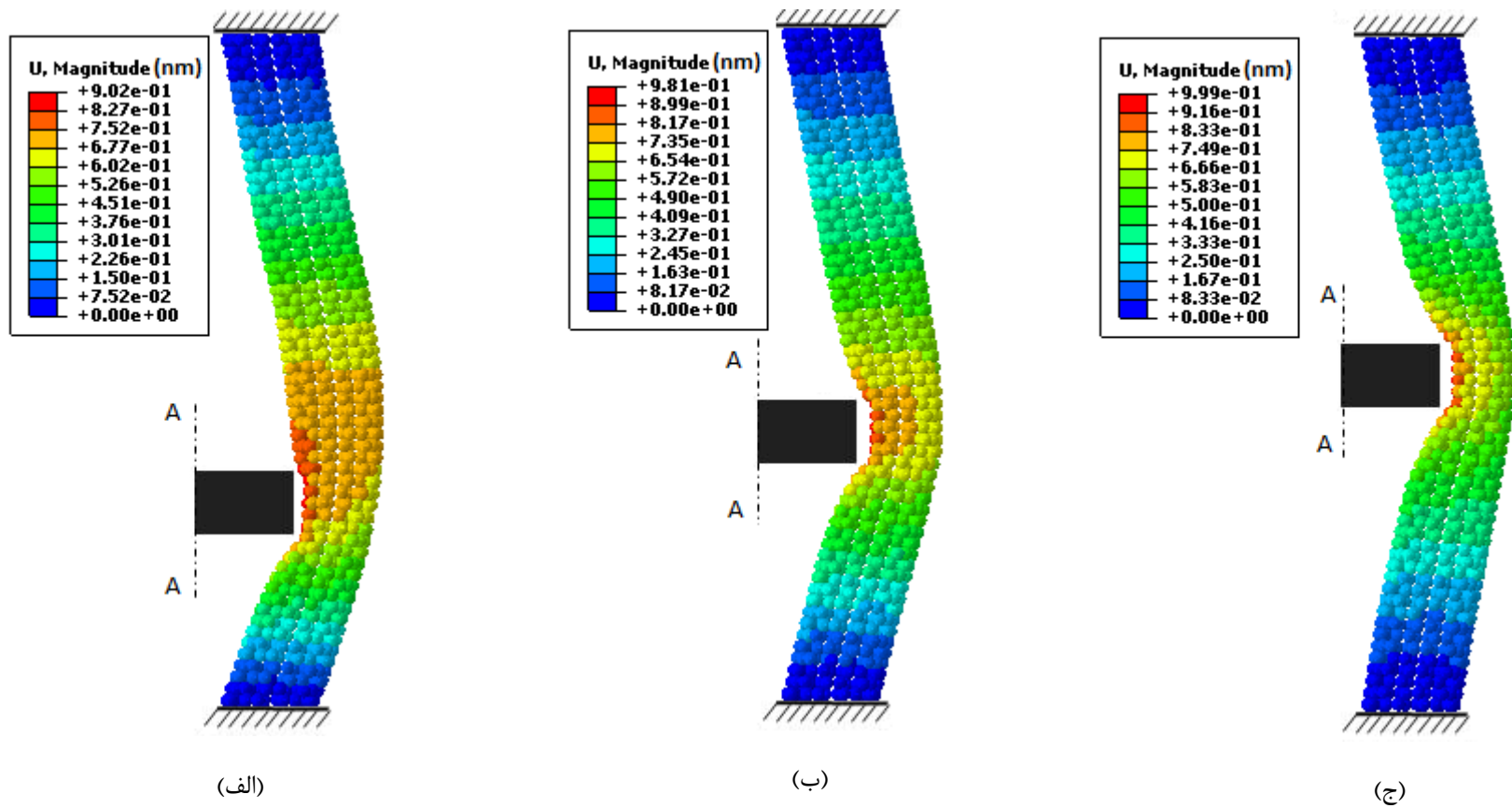
ارتفاع نسبی (Z)	(t_1) لحظه جدایش گلوله از نانولوله کربنی (ns)	سرعت گلوله در لحظه t_1 (m/s)	انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی (eV)	انرژی جذب شده انرژی جنبشی گلوله
۰٫۳	۰٫۰۰۱۳۵۱	-۱۸۸۱٫۷۲	۳۲۱٫۷۰۹	۰٫۴۳۳۴
۰٫۴	۰٫۰۰۱۳۹۶	-۱۶۳۸٫۸۸	۴۲۳٫۲۳	۰٫۵۷
۰٫۵	۰٫۰۰۱۴۰۷	-۱۳۸۱٫۲۵	۵۱۵٫۶۱۳	۰٫۶۹۴
۰٫۶	۰٫۰۰۱۳۹۶	-۱۶۳۸٫۸۸	۴۲۳٫۲۳	۰٫۵۷
۰٫۷	۰٫۰۰۱۳۵۱	-۱۸۸۱٫۷۲	۳۲۱٫۷۰۹	۰٫۴۳۳۴

از جدول (۷-۴) مشاهده می‌شود که در نمونه‌های آرمچیر نیز انرژی جذب شده در وسط نانولوله بیشینه می‌شود. همچنین هر چه به تکیه‌گاه نزدیک می‌شویم، این مقدار کاهش می‌یابد. در شکل (۲۱-۴) نمودار انرژی جذب شده برای دو حالت آرمچیر و زیگزاگ آورده شده است که نشان می‌دهد، تغییر ساختار نانولوله کربنی از زیگزاگ به آرمچیر باعث افزایش جذب انرژی می‌شود. در شکل (۲۲-۴) نیز تغییر شکل نانولوله کربنی آرمچیر نشان داده شده است. البته به دلیل تقارن فقط سه موقعیت متفاوت از گلوله نشان داده شده است.



شکل (۲۱-۴): نمودار انرژی جذب شده نرماله شده برای نانولوله کربنی آرمچیر و زیگزاگ در ارتفاع‌های نسبی متفاوت گلوله

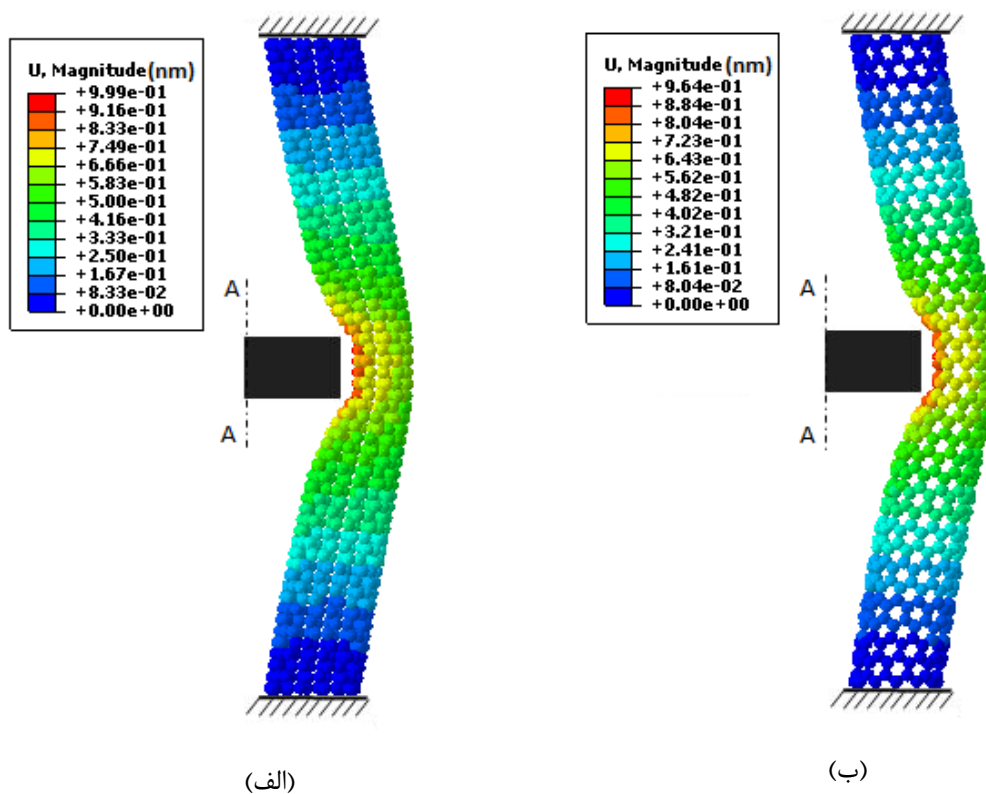
در شکل (۲۳-۴) حداکثر جابجایی نانولوله کربنی زیگزاگ و آرمچیر هنگامی گلوله به وسط آن اصابت می‌کند؛ مقایسه شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، میزان تغییر شکل نانولوله آرمچیر بیشتر از نوع زیگزاگ می‌باشد. این بدان معنی است که نوع آرمچیر انرژی بیشتری نسبت به نوع زیگزاگ جذب می‌کند که این موضوع از داده‌های جدول (۸-۴) نیز مشخص است.



الف) $z=0.3$

شکل (۴-۲۲): حداکثر تغییر شکل متناظر با کانتور جابجایی نانولوله کربنی آرمچیر دو سرگیردار در لحظه صفر شدن سرعت گلوله برای ارتفاع‌های نسبی متفاوت گلوله

ب) $z=0.4$ ج) $z=0.5$

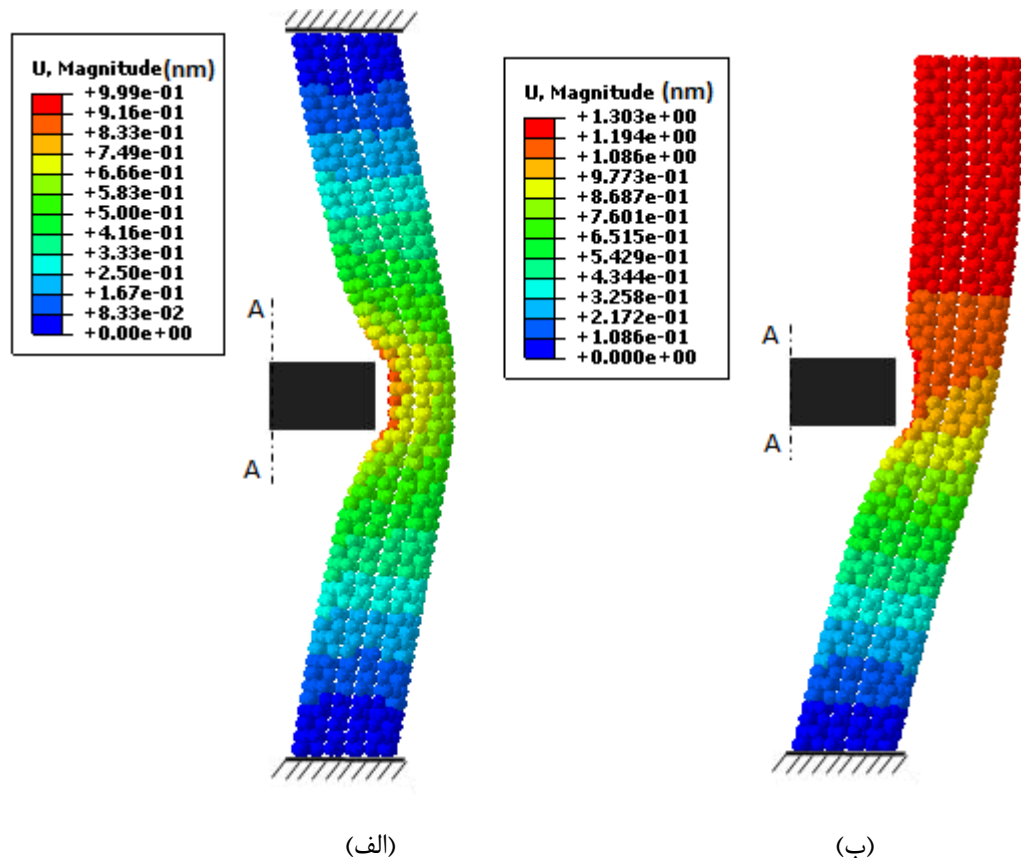


شکل (۴-۲۳): حداکثر تغییر شکل متناظر با کانتور جابجایی نانولوله کربنی (الف) آرمچیر (ب) زیگزاگ در ارتفاع نسبی $z=0.5$

جهت مقایسه شرایط مرزی نانولوله کربنی آرمچیر به بررسی قابلیت جذب انرژی نوع یک سر گیردار آن هنگامی که گلوله به وسط نانولوله برخورد می کند می پردازیم. در جدول (۴-۸) مقدار جذب انرژی نانولوله کربنی با شرایط مرزی مختلف در ارتفاع نسبی 0.5 برای گلوله آورده شده است. در شکل (۴-۲۴) حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی معیوب با شرایط مرزی مختلف در زمان صفر شدن سرعت گلوله آورده شده است.

جدول (۴-۸): انرژی جذب شده بوسیله نانولوله کربنی آرمچیر و زیگزاگ در ارتفاع نسبی 0.5 برای گلوله

محل اصابت گلوله	انرژی جذب شده توسط نانولوله آرمچیر (eV)		انرژی جذب شده توسط نانولوله زیگزاگ (eV)	
	یک سر گیردار	دوسر گیردار	یک سر گیردار	دوسر گیردار
$z=0.5$	۳۹۱/۰۶۱	۵۱۵/۶۱۳	۲۸۰/۱۹۲	۴۸۳/۸۳۲



شکل (۴-۲۴): حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی آرمچیر، (الف) دوسرگیردار، (ب) یک سرگیردار

۴-۲-۶ تأثیر عیوب بر روی رفتار مکانیکی نانولوله کربنی تحت ضربه

به علت محدودیت‌هایی که در ساخت نانولوله‌ها وجود دارد، امکان تولید نانولوله‌های سالم شانس کمتری نسبت به نانولوله‌های معیوب دارند. وجود نقص در ساختار نانولوله‌های کربنی می‌تواند به دو دسته عمده عیوب استون- والز^۱ و تهی‌جای^۲ تقسیم شود. دسته اول این نقص‌ها به ساختار کریستالوگرافی نانولوله ارتباط دارد که باعث ایجاد تغییرات در خواص مکانیکی نانولوله می‌گردد [۹]. این نوع نقص اولین بار توسط آنتونی استون^۳ و دیوید والز^۴ در سال ۱۹۸۶ کشف گردید [۳۶]. نقص استون- والز از چرخش ۹۰ درجه دو اتم کربن حول نقطه مرکزی پیوند بین آن دو ایجاد می‌شود (شکل (۴-۲۵)). در اثر چرخش اتم‌ها، چهار حلقه شش‌تایی کربنی تبدیل به دو حلقه پنج‌تایی و دو

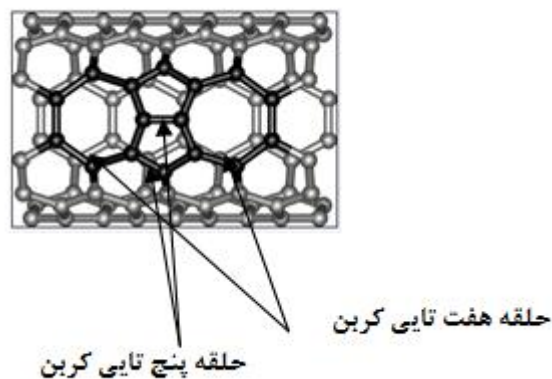
^۱ Stone-walls

^۲ Vacancy

^۳ Anthony Stone

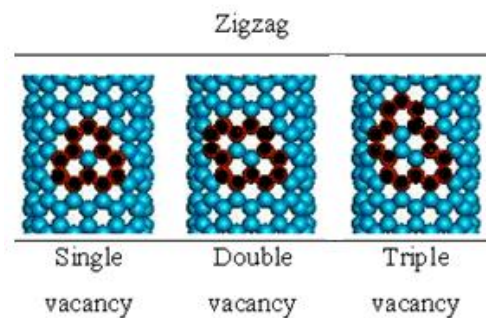
^۴ David Wales

حلقه هفت تایی می گردد.



شکل (۴-۲۵): نقص از نوع استون- والز در نانولوله کربنی آرمچیر

در عیوب نوع دوم ، با حذف یک، دو و سه اتم کربن از ساختار نانولوله، به ترتیب سه، چهار و پنج حلقه شش تایی کربن دچار نقص شده و یک فضای خالی بینابین این حلقه های شش تایی ایجاد می شود که آن نقص را به ترتیب تک تهی جای^۱، دو تهی جای^۲ و سه تهی جای^۳ می نامند (شکل (۴-۲۶)).



شکل (۴-۲۶): نقص از نوع تهی جای در نانولوله کربنی زیگزاگ

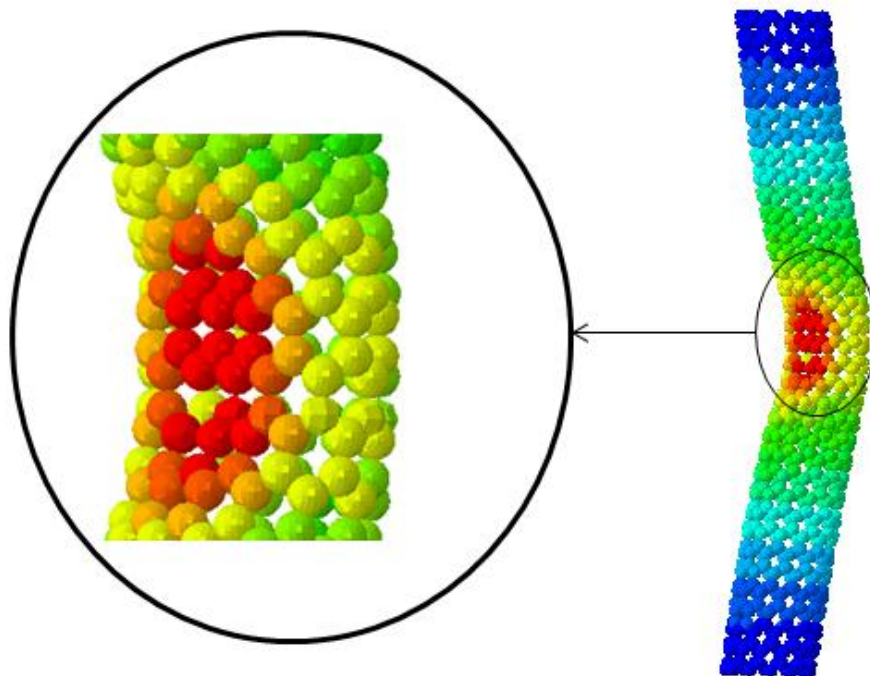
در این قسمت به بررسی اثر این عیوب بر میزان جذب انرژی نانولوله کربنی تحت ضربه پرداخته

^۱ Single vacancy

^۲ Double vacancy

^۳ Triple vacancy

می‌شود. عیوب گفته‌شده در وسط نانولوله کربنی زیگزاگ دو سر ثابت به طول $7/313$ نانومتر و قطر $0/94$ نانومتر ایجاد شده است. در این بررسی برای هر کدام از عیوب گفته شده یک‌بار گلوله به محل عیب در نانولوله کربنی برخورد کرده و بار دیگر به سمت مقابل آن اصابت می‌کند. در جدول (۴-۹) میزان جذب انرژی نانولوله کربنی معیوب آورده شده است. در شکل (۴-۲۷) نمایی از حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی معیوب از نوع تک تپی جای در غیاب گلوله و در لحظه صفر شدن سرعت گلوله آورده شده است.



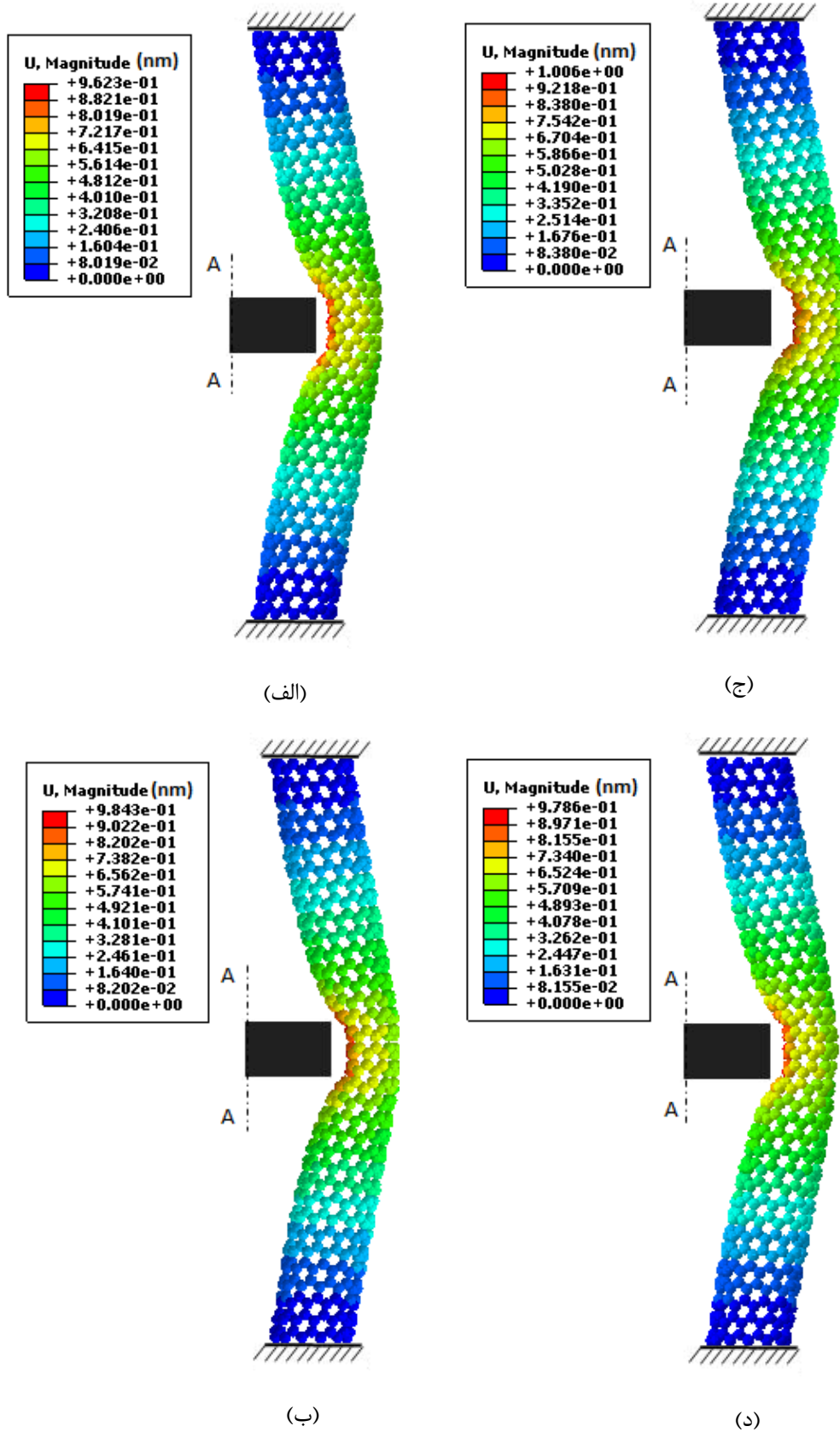
شکل (۴-۲۷): حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی معیوب از نوع تک تپی ج

جدول (۴-۹): انرژی جذب شده بوسیله نانولوله کربنی زیگزاگ دو سرگیردار با انواع عیوب

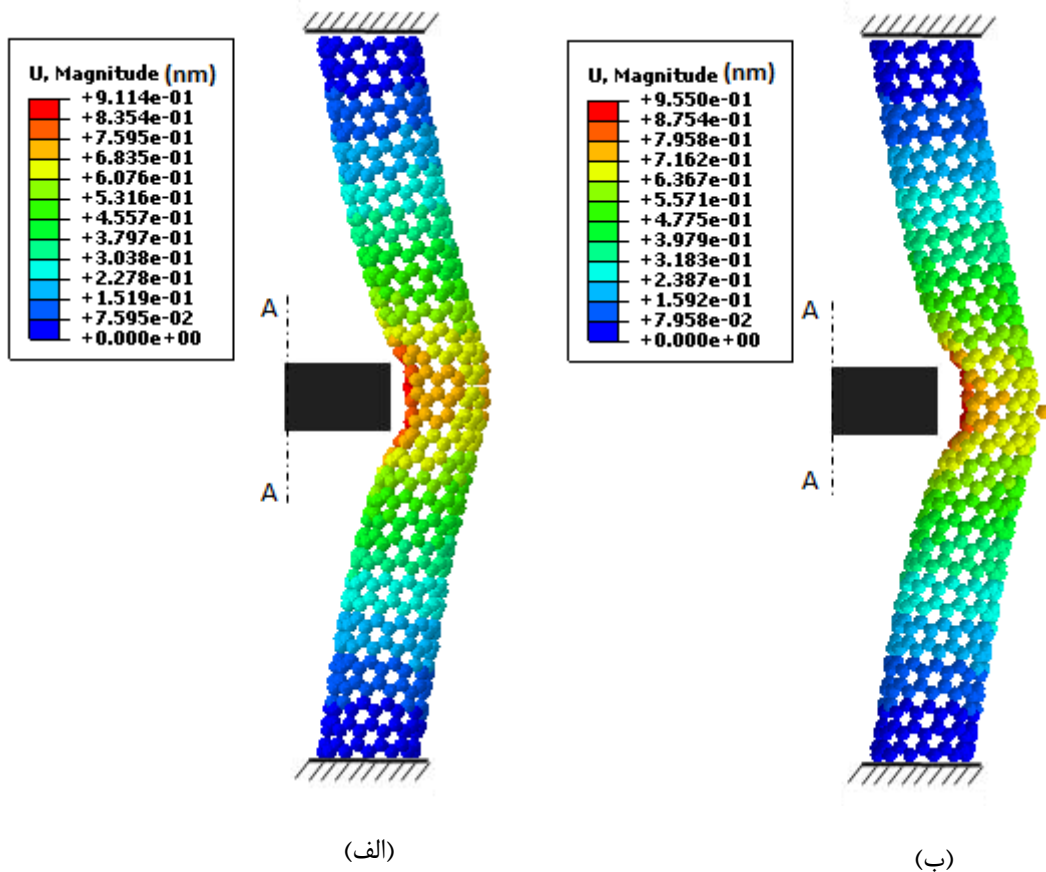
محل اصابت گلوله در ارتفاع نسبی (z=۰.۵)	نوع عیب	(t _۱)	سرعت گلوله در لحظه t _۱ (m/s)	انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی (ev)	انرژی جذب شده انرژی جنبشی گلوله	
		لحظه جدایش گلوله از نانولوله کربنی (ns)				
(۱) روی عیب	تهی جای	تک تهی جای	۰,۰۰۱۳۸۶	-۱۵۶۵,۶۲	۴۵۱,۱۱۱	۰,۶۰۷
		دو تهی جای	۰,۰۰۱۴۱۴	-۱۵۸۹,۶۹	۴۴۲,۰۹۲	۰,۵۹۵
		سه تهی جای	۰,۰۰۱۴۱۶	-۱۵۹۵,۴۳	۴۳۹,۹۲	۰,۵۹۲
	استون- والز	۰,۰۰۱۳۳۶	-۱۶۲۴,۹۴	۴۲۸,۶۳۶	۰,۵۷۶۶	
(۲) سمت مقابل عیب	تهی جای	تک تهی جای	۰,۰۰۱۳۹۲	-۱۵۴۷,۰۹	۴۵۷,۹۶	۰,۶۱۷
		دو تهی جای	۰,۰۰۱۳۹۵	-۱۵۵۶,۸۴	۴۵۴,۳۶۷	۰,۶۱۲۱
		سه تهی جای	۰,۰۰۱۳۹۵	-۱۵۶۸,۱۱	۴۵۰,۱۸۱	۰,۶۰۶۵
	استون- والز	۰,۰۰۱۳۷۵	-۱۶۰۴,۱۳	۴۳۶,۶۱۶	۰,۵۸۸۲	

همان طور که از جدول (۴-۹) مشاهده می‌شود، به دلیل از بین رفتن یا تغییر در بعضی از پیوندهای اتمی، نانولوله معیوب انرژی کمتری نسبت به نوع سالم آن جذب می‌کند. وقتی گلوله در سمت مقابل عیوب به نانولوله برخورد می‌کند مقدار جذب انرژی نانولوله نسبت به زمانی که گلوله روی عیوب اصابت می‌کند، بیشتر است. در نانولوله کربنی با عیب تهی‌جای و در هر دو حالت برخورد گلوله به نانولوله، هرچه تعداد اتم بیشتری حذف شوند نانولوله کربنی انرژی کمتری جذب می‌کند یعنی عیب سه تهی‌جای کمتر از عیوب دو تهی‌جای و تک تهی‌جای انرژی جذب می‌کند. همچنین نانولوله کربنی با عیب استون- والز در هر دو حالت برخورد گلوله، انرژی کمتری نسبت به نوع تهی‌جای جذب می‌کند.

در شکل (۴-۲۸) ماکزیمم تغییر شکل نانولوله کربنی با عیوب مختلف آورده شده است. همان طور که از شکل پیداست تغییر شکل نانولوله با انواع عیب تهی‌جای در اثر برخورد گلوله تفاوتی زیادی با نوع سالم آن ندارد؛ اما در شکل (۴-۲۹) نانولوله با عیب استون والز تغییر شکلی متفاوت با نوع سالم آن پیدا کرده است.



شکل (۴-۲۸): حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی دوسرگیردار معیوب (الف) تک تهی جای (۱)، (ب) تک تهی جای (۲)، (ج) دو تهی جای (۱)، (د) دو تهی جای (۲)

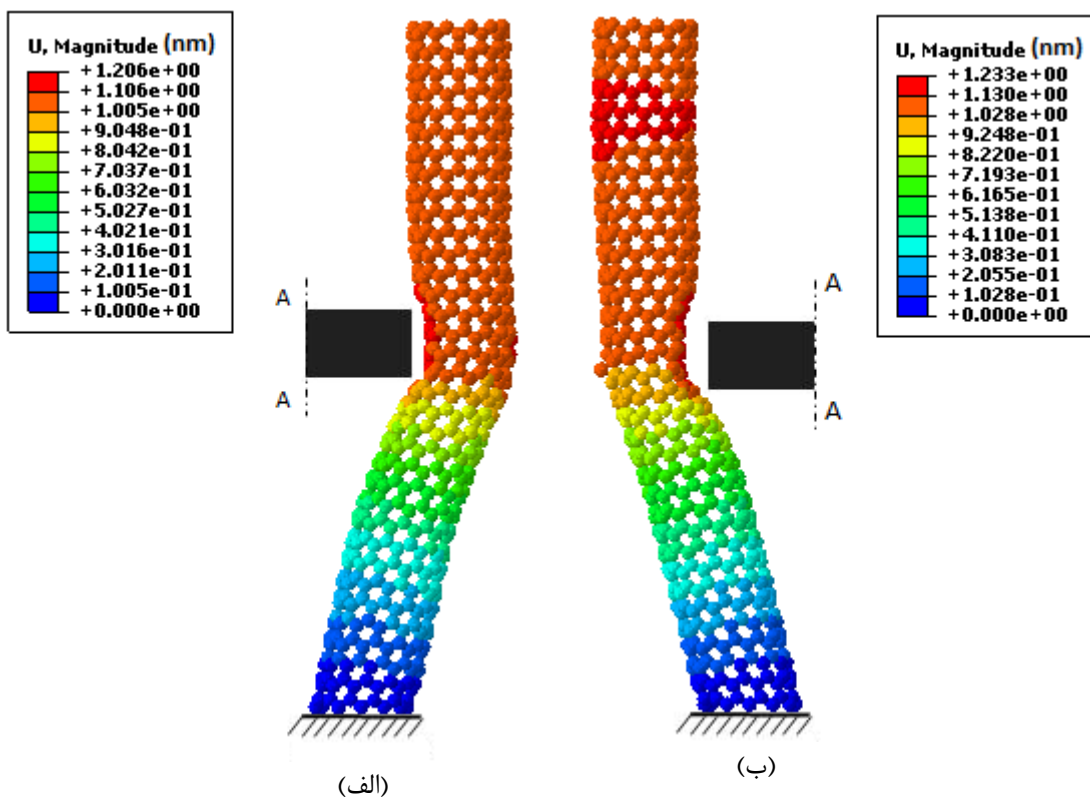


شکل (۴-۲۹): حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی معیوب (الف) استون- والز (۱) ، (ب) استون- والز (۲)

در ادامه این قسمت نانولوله کربنی یک سر گیردار با عیب استون- والز آورده شده که گلوله مثل حالت نانولوله دو سر گیردار در دو محل به آن اصابت می‌کند. در جدول (۴-۱۰) انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی یک سر گیردار آورده شده است. در شکل (۴-۳۰) نیز حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی یک سر گیردار معیوب در لحظه صفر شدن سرعت گلوله آورده شده است. از جدول (۴-۱۰) مشاهده می‌شود که همانطور که در حالت دو سرگیردار جذب انرژی نانولوله هنگامی که گلوله به سمت مقابل برخورد می‌کند بیشتر از حالتی است که گلوله روی عیب اصابت می‌کند؛ در نانولوله یک سرگیردار نیز همین روند وجود دارد. در بخش‌های گذشته بررسی شد که نانولوله کربنی دو سرگیردار و سالم بیشتر از نوع یک سرگیردار آن انرژی جذب می‌کند. در حالتی که از نانولوله کربنی معیوب استفاده می‌شود نیز این اتفاق رخ می‌دهد.

جدول (۴-۱۰): حداکثر انرژی جذب شده بوسیله نانولوله کربنی یک سر گیردار با عیب استون- والز

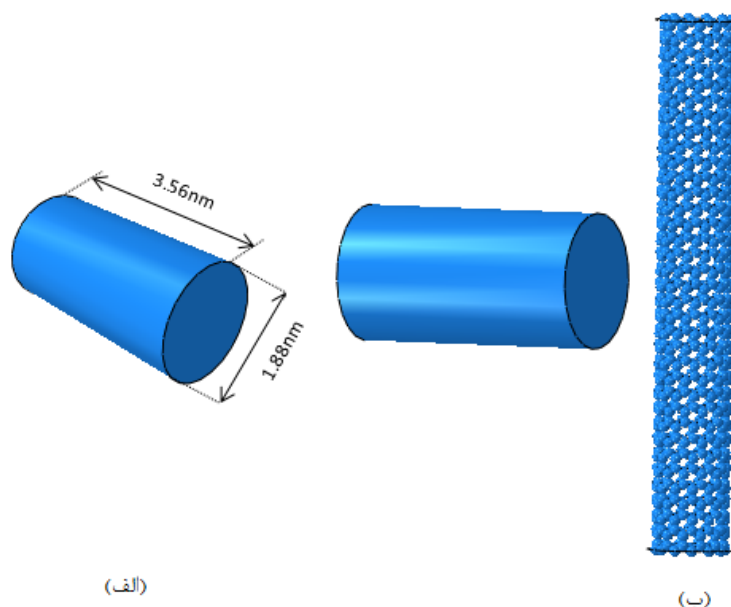
محل اصابت گلوله در وسط نانولوله کربنی یک سر گیردار	(t_1) لحظه جدایش گلوله (ns)	سرعت گلوله در لحظه t_1 (m/s)	انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی (ev)	$\frac{\text{انرژی جذب شده}}{\text{انرژی جنبشی گلوله}}$
روی عیب	۰,۰۰۱۸۲۵	-۱۶۷۸,۵۷	۴۰۷,۵۹۷	۰,۵۴۹
سمت مقابل عیب	۰,۰۰۱۸۸۴	-۱۶۵۹,۳۲۸	۴۱۵,۲۲۴	۰,۵۶



شکل (۴-۳۰): حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی یک سر گیردار معیوب از نوع استون- والز، (الف) اصابت گلوله روی عیب، (ب) اصابت گلوله سمت مخالف عیب

۷-۲-۴ هندسه گلوله

در قسمت‌های قبل به دلیل تطابق شبیه‌سازی با مطالعات دیگران از گلوله مکعبی استفاده شد اما از آنجایی که معمولاً گلوله‌ها را به شکل استوانه‌ای می‌سازند؛ در این قسمت شبیه‌سازی برخورد توسط یک گلوله استوانه‌ای شکل انجام می‌گیرد. جرم این گلوله مانند جرم گلوله مکعبی است. تمامی شرایط مانند جدول (۱-۴) می‌باشد. همچنین مانند قسمت ۴-۲-۱ پارامتر موقعیت مکانی گلوله مورد مطالعه قرار می‌گیرد. در شکل (۴-۳۱) ابعاد گلوله به همراه گلوله مونتاژ شده در کنار نانولوله کربنی آورده شده است.

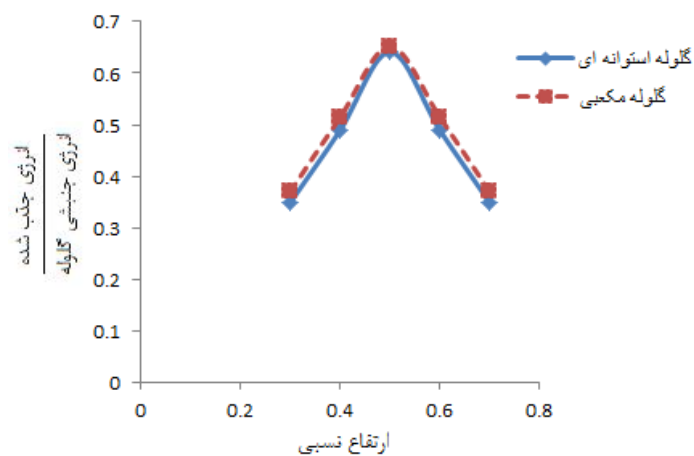


شکل (۴-۳۱): (الف) ابعاد هندسی گلوله، (ب) مونتاژ گلوله در کنار نانولوله کربنی با طول ۷۳۱۳ نانومتر

در جدول (۴-۱۱) انرژی جذب شده در موقعیت‌های مختلف گلوله آورده شده است. همان طور که از جدول (۴-۱۱) مشخص است؛ مقدار جذب انرژی هنگامی که گلوله به وسط نانولوله کربنی برخورد می‌کند، بیشینه می‌شود و هرچه به سمت دو تکیه‌گاه نزدیک می‌شویم، مقدار جذب انرژی کاهش می‌یابد. در شکل (۴-۳۲) نیز تغییرات انرژی جذب شده با ارتفاع نسبی آورده شده است. همانطور که مشخص است با تغییر هندسه گلوله روند افزایش و کاهش انرژی جذب شده نانولوله مانند حالتی است که با گلوله مکعبی برخورد صورت گرفته است.

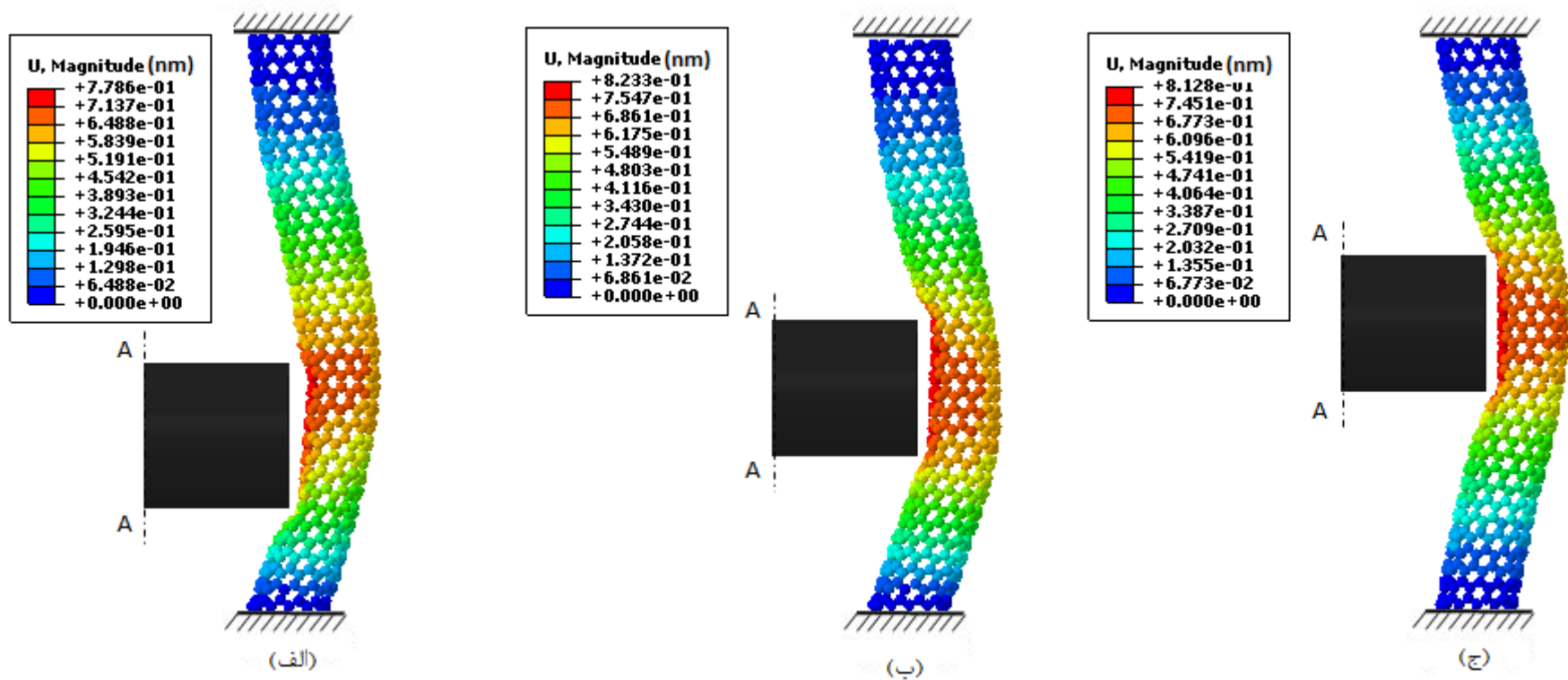
جدول (۴-۱۱): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی زیگزاگ دو سرگیردار تحت ضربه توسط گلوله استوانه‌ای

ارتفاع نسبی (Z)	(t_1) لحظه جدایش گلوله از نانولوله کربنی (ms)	سرعت گلوله در لحظه t_1 (m/s)	انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی (ev)	$\frac{\text{انرژی جذب شده}}{\text{انرژی جنبشی گلوله}}$
۰٫۳	۰٫۰۰۱۲۸	-۲۰۱۷٫۹۸	۲۵۸٫۶	۰٫۳۴۸۴
۰٫۴	۰٫۰۰۱۳۳	-۱۷۸۶٫۵۵	۳۶۳٫۱۶۲	۰٫۴۸۹
۰٫۵	۰٫۰۰۱۴۶۵	-۱۴۹۷٫۴۷	۴۷۵٫۹	۰٫۶۴۱۲
۰٫۶	۰٫۰۰۱۳۳	-۱۷۸۶٫۵۵	۳۶۳٫۱۶۲	۰٫۴۸۹
۰٫۷	۰٫۰۰۱۲۸	-۲۰۱۷٫۹۸	۲۵۸٫۶	۰٫۳۴۸۴



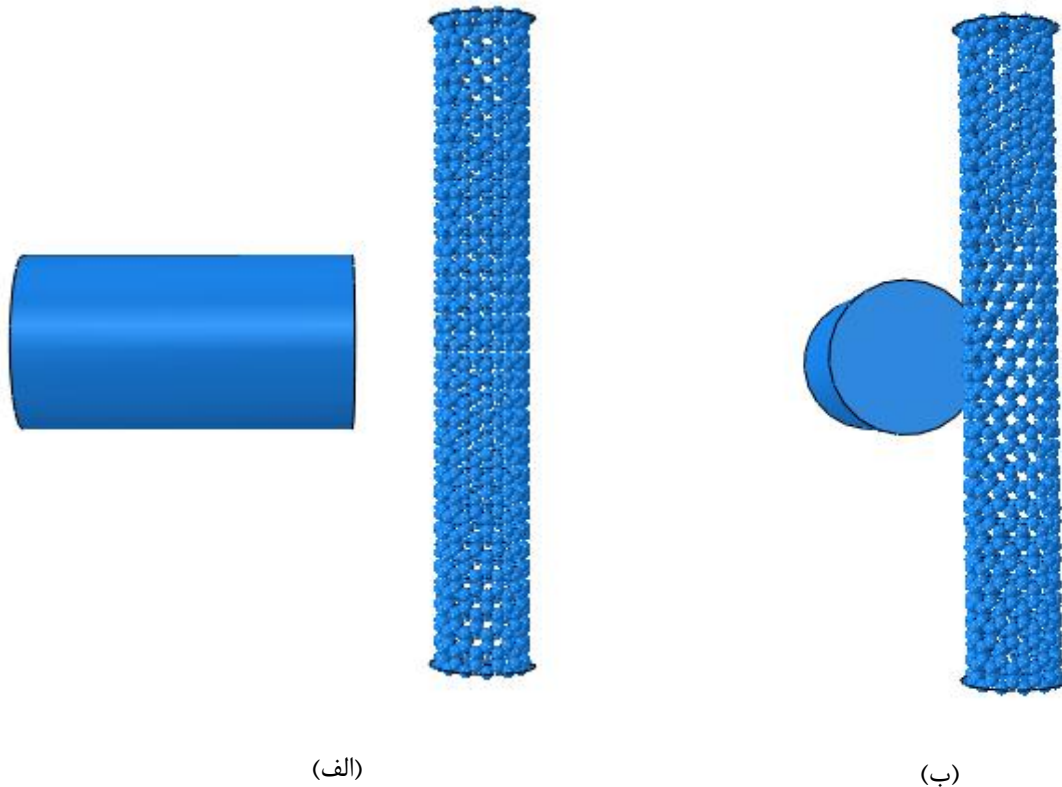
شکل (۴-۳۲): منحنی انرژی جذب شده نرماله شده بر حسب ارتفاع نسبی برای دو گلوله مختلف

در شکل (۴-۳۳) حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی در لحظه صفر شدن سرعت گلوله و در سه موقعیت مختلف از آن آورده شده است.



شکل (۴-۳۳): حداکثر تغییر شکل متناظر با کانتور جابجایی نانولوله کربنی دو سر گیردار در لحظه صفر شدن سرعت گلوله برای ارتفاع‌های نسبی متفاوت گلوله
 (الف) $z=0.3$ (ب) $z=0.4$ (ج) $z=0.5$

در تمامی شبیه‌سازی‌های صورت گرفته با هر دو نوع گلوله استوانه‌ای و مکعبی، گلوله در موقعیتی قرار داشت که در هنگام برخورد مقطع آن تمامی عرض نانولوله را در برمی‌گرفت. در این قسمت گلوله استوانه‌ای با حفظ فاصله از محور مرکزی نانولوله در موقعیتی قرار گرفته که سطح مقطع گلوله به کمتر از نصف عرض نانولوله برخورد می‌کند (شکل (۴-۳۴))



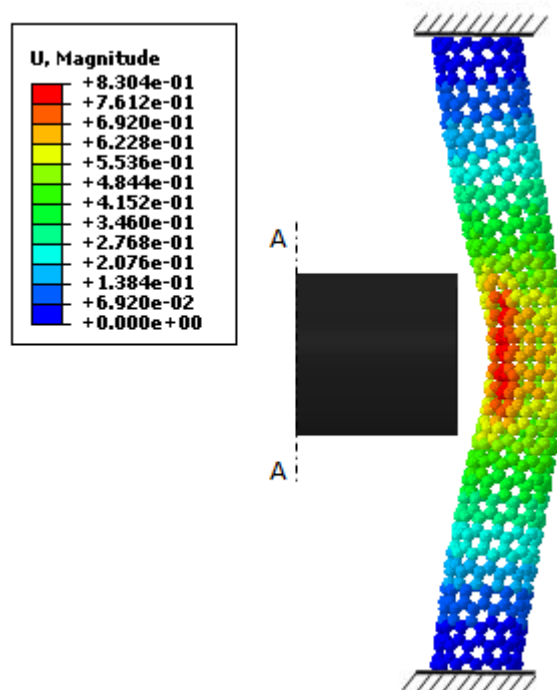
شکل (۴-۳۴): گلوله مونتاژ شده در کنار نانولوله کربنی زیگزاگ به طول $7/313$ در حالت عدم در برگیری تمام عرض نانولوله کربنی در دو نما

تمام شرایط برخورد مانند قسمت ۴-۲-۸ است که از گلوله استوانه‌ای استفاده شد. مقدار انرژی جذب شده برای حالت ذکر شده در جدول (۴-۱۲) آورده شده است. وقتی گلوله به وسط نانولوله برخورد می‌کند مثل حالت‌های گذشته با تغییر شکل در نانولوله سرعتش به صفر رسیده که در این لحظه تمام انرژی گلوله به نانولوله منتقل می‌شود. سپس فرایند برگشت شروع می‌شود که در این مرحله با توجه به موقعیت جدید گلوله، مسیر برگشت آن متفاوت با قبل است. در حالتی که گلوله تمام عرض نانولوله را در برمی‌گیرد، گلوله تقریباً در مسیر رفت برمی‌گردد؛ اما در این حالت گلوله پس

از برخورد با زاویه‌ای متفاوت از زاویه اولیه برمی‌گردد. شکل (۴-۳۵) حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی در لحظه صفر شدن سرعت گلوله را نشان می‌دهد.

جدول (۴-۱۲): انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی زیگزاگ دو سرگیردار با موقعیتی متفاوت از گلوله

موقعیت گلوله در ارتفاع نسبی ($z=0.5$)	(t_1) لحظه جدایش گلوله از نانولوله کربنی (ns)	سرعت گلوله در لحظه t_1 (m/s)	انرژی جذب شده توسط نانولوله کربنی (ev)	$\frac{\text{انرژی جذب شده}}{\text{انرژی جنبشی گلوله}}$
عدم در برگیری تمام عرض نانولوله	۰٫۰۰۱۳۷۳	-۱۵۴۳٫۲۹	۴۵۹٫۳۵۵	۰٫۶۱۸

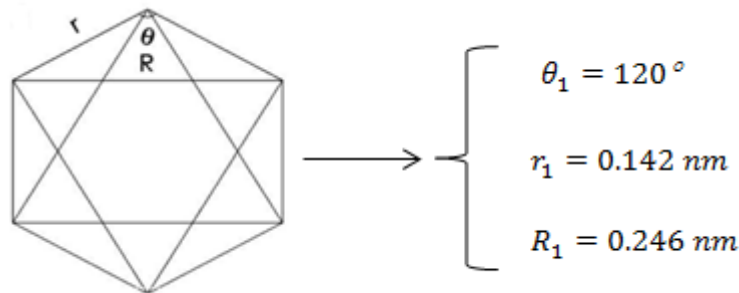


شکل (۴-۳۵): حداکثر تغییر شکل نانولوله کربنی در لحظه صفر شدن سرعت گلوله

همانطور که از جدول (۴-۱۲) و شکل (۴-۳۵) مشاهده می‌شود؛ به دلیل کاهش سطح برخورد گلوله با نانولوله کربنی میزان تغییر شکل نانولوله و در نتیجه انرژی جذب شده بوسیله آن نسبت به حالتی که مقطع گلوله تمام عرض نانولوله کربنی را در بر می‌گیرد، کاهش یافته است.

۴-۲-۸ بررسی تأثیر خطای مدل‌سازی در تحقیق حاضر

در انتها با توجه به مبحث مطرح شده در قسمت ۳-۶-۴-۵ مربوط به مدل ساختاری جدید، تأثیر تغییر شکل ناشی از تغییر طول پیوند در میزان تغییر شکل فنر محوری بررسی می‌شود. با توجه به اینکه این پژوهش در ناحیه الاستیک اتفاق افتاده است میزان کشیدگی یا فشردگی فنر به مقدار بیشینه خود نرسیده و کمتر از آن می‌باشد. بدترین حالت زمانی اتفاق می‌افتد که هر دو پیوند دچار کشیدگی یا فشردگی شوند البته مقدار این کشیدگی یا فشردگی در دو پیوند الزاماً یکسان نیست. انتظار می‌رود که این حالت در محدوده‌ای از نانولوله رخ دهد که بیشترین تغییر شکل را دارد؛ یعنی در محدوده اصابت گلوله به نانولوله کربنی. مقادیر متناظر یک سلول واحد شش ضلعی قبل از برخورد به صورت زیر است:



شکل (۴-۳۶): ابعاد سلول واحد شش ضلعی قبل از برخورد

با بررسی‌های صورت گرفته در نانولوله زیگزاگ دو سر ثابت با قطر ۰.۹۴ نانومتر و طول ۷.۳۱۳ نانومتر در حالی که گلوله به وسط آن اصابت می‌کند ($E_{abs} = 483.832 \text{ eV}$)، در محدوده بیشترین تغییر شکل نانولوله، بدترین حالت که شامل کشیدگی در هر دو پیوند کربن-کربن می‌باشد؛ بدست آمده که مقدار تغییر زاویه ایجاد شده در این حالت برابر است با

$$\Delta\theta = 19.62^\circ = 0.3424 \text{ rad}$$

با توجه به معادله (۳-۱۵) انتظار این است که طول ثانویه فتر محوری و تغییر شکل فتر محوری متناظر با تغییر زاویه رخ داده، برابر با مقدار زیر باشد:

$$\Delta R^{\Delta\theta} = \frac{r \times \Delta\theta}{\rho} = \frac{0.142 \times 0.3424}{2} = 0.0243 \text{ nm}$$

$$R_r^{\Delta\theta} = 0.27 \text{ nm}$$

اما با اندازه‌گیری‌های صورت گرفته در این سلول، طول ثانویه فتر محوری در این حالت برابر است با:

$$R_r = 0.281 \text{ nm}$$

با محاسبه درصد خطا برای تغییر شکل فتر داریم:

$$\% = \frac{0.281 - 0.27}{0.27} \times 100 = 4.06 \%$$

این درصد خطا در تغییر شکل فتر ایجاد شده و در بدترین حالت می‌باشد که تأثیر آن در بحث جذب انرژی بسیار ناچیز است. برای این منظور با تغییر در مدل و با افزایش و کاهش بسیار زیاد در سختی فتر محوری، ناچیز بودن اثر تغییر شکل آن مشاهده می‌شود:

$$\text{افزایش سختی به مقدار بسیار زیاد} \longrightarrow E_{\text{abs}} = 472.24 \text{ eV} \longrightarrow \% = 2.39 \%$$

$$\text{کاهش سختی به مقدار بسیار زیاد} \longrightarrow E_{\text{abs}} = 495.61 \text{ eV} \longrightarrow \% = 2.44 \%$$

از محاسبات بالا نتیجه می‌شود که تغییر در تغییر شکل فتر محوری تأثیر چندانی در بحث جذب انرژی نانولوله کربنی تحت ضربه ندارد.

فصل ۵

نتیجه‌گیری و پیشنهادات

۵-۱ نتیجه گیری

با توجه به مباحث مطرح شده در این پایان نامه نتایج مهمی در زمینه جذب انرژی نانولوله کربنی طی فرایند ضربه بالستیک به دست آمد که در زیر به آن‌ها اشاره شده است:

۱- انرژی جذب شده در نانولوله کربنی دو سرگیردار هنگامی که گلوله به وسط آن برخورد می کند بیشینه می شود. در حالی که در نمونه یک سر گیردار این مقدار در ارتفاع نسبی $Z=0.6$ برای گلوله بیشینه می گردد.

۲- از لحظه برخورد گلوله به نانولوله کربنی با تغییر شکل نانولوله سرعت گلوله کاهش یافته و به صفر می رسد. از این لحظه به بعد فرایند برگشت گلوله شروع شده که در نهایت گلوله به یک سرعت ثابت و کمتر از مقدار اولیه قبل از برخورد می رسد.

۳- نانولوله کربنی با قطر بزرگ تر در برابر گلوله با سرعت های بیشتر مقاوم تر است.

۴- هرچه زاویه برخورد گلوله نسبت به افق بیشتر شود، میزان جذب انرژی نانولوله کربنی کاهش می یابد.

۵- بهترین طول نانولوله کربنی برای فرایند برخورد در محدوده ۸ نانومتر قرار می گیرد. زیرا در این محدوده بیشترین جذب انرژی رخ می دهد.

۶- طی فرایند برخورد، نانولوله کربنی آرمچیر بیشتر از نوع زیگزاگ آن انرژی جذب می کند.

۷- در نانولوله کربنی معیوب با توجه به تغییر در ساختار آن، مقدار انرژی جذب شده طی فرایند ضربه نسبت به نوع سالم آن کمتر است. کاهش انرژی جذب شده هنگامی که گلوله در محل عیب به نانولوله اصابت می کند بیشتر از زمانی است که گلوله در سمت مقابل عیوب به آن برخورد می کند.

۸- هنگامی که گلوله به نانولوله کربنی معیوب اصابت می کند، نانولوله با عیب استون- والرز نسبت به انواع عیوب تهی جای دچار تغییر شکل بیشتری شده و انرژی کمتری جذب می کند.

۹- با تغییر در هندسه گلوله روند افزایشی یا کاهشی انرژی جذب شده تغییری نمی‌کند.

۲-۵ پیشنهادات

۱- می‌توان به جای یک نانولوله کربنی از دسته نانولوله در کنار هم برای بررسی رفتار مکانیکی تحت ضربه استفاده نمود.

۲- با اعمال تغییراتی در مدل و افزودن پارامتر دما می‌توان ضربه را با در نظر گرفتن اتلاف گرمای ناشی از آن انجام داد.

۳- می‌توان با استفاده از این مدل نانولوله کربنی را در زمینه نانوکامپوزیت بکار برده و فرایند ضربه را روی آن انجام داد.

۴- با توجه به اینکه در کارهای تجربی شرایط مرزی یک سرگیردار و دو سرگیردار به طور مطلق وجود ندارد، می‌توان نانولوله کربنی را به فنر متصل کرده سپس به مطالعه ضربه روی آن پرداخته شود.

۵- می‌توان از نانولوله چندجداره استفاده نمود.

مراجع

[۱] www.iran-eng.com

[۲] Ashcroft J, Daniels D.J and Hart S.V. (۲۰۰۱) ” *Selection and Application Guide to Personal Body Armor*” The National Institute of Justice’s National Law Enforcement and Corrections Technology Center, pp. ۱.

[۳] www.rutex.ir.

[۴] Iijima S. (۱۹۹۱). “*Helical microtubes of graphitic carbon*” Nature, Vol. ۳۵۴, pp. ۵۶-۵۸.

[۵] Odegard G.M, Gates, T.S, Nicholson L.M, Wise K.E. (۲۰۰۲) “*Equivalent-continuum modeling with application to carbon nanotubes*”, Composites Science and Technology., Vol. ۶۲, pp. ۱۸۶۹-۱۸۸۰.

[۶] پروانه و، ۱۳۸۸، پایان‌نامه کارشناسی ارشد، "مدل‌سازی و شبیه‌سازی نانولوله‌های کربنی به منظور پیش‌بینی خواص مکانیکی آن"، دانشکده مکانیک، دانشگاه صنعتی شاهرود.

[۷] Ajayan P M ۱۹۹۹ Chem. Rev. ۹۹ ۱۷۸۷.

[۸] Parvaneh V, Shariati M, Majd Sabeti A.M. (۲۰۰۹) “*Investigation of vacancy defects effects on the buckling behavior of SWCNTs via a structural mechanics approach*”, European Journal of Mechanics A/Solids, Vol. ۲۸, pp. ۱۰۷۲-۱۰۷۸.

[۹] Parvaneh V, Shariati M. (۲۰۱۰) “*Effect of defects and loading on prediction of Young’s modulus of SWCNTs*”, Acta Mech, Vol. ۲۱۶, pp. ۲۸۱-۲۸۹.

[۱۰] Khalili S.M.R, Haghbin A. (۲۰۱۲) “*Investigation on Design Parameters of Single-walled Carbon nanotube Reinforced Nanocomposites under Impact Loads*”, Composite Structures.

[۱۱] Zhang L.C, Mylvaganam K. (۲۰۰۶) “*Energy absorption capacity of carbon*

nanotubes under ballistic impact”, Applied Physics letters, Vol. 89, No. 123127, pp. 1-

3

[12] Zhang L.C, Mylvaganam K. (2007) “*Ballistic resistance capacity of carbon nanotubes*”, Nanotechnology, Vol. 18, No. 475701, pp. 1-4.

[13] Hugh O.P. (2004) “*Handbook of Carbon, Graphite, Diamond and Fullerenes*”, Vol. 1, Consultant and Sandia National Laboratories, New Mexico, pp. 12-36.

[14] Mantell C. L. (1968) “*Carbon and Graphite Handbook*”, Interscience, New York, pp. 132-141.

[15] Kalamkarov A.L, Georgiades A.V, Rokkam S.K, Veedu V.P, Ghasemi-Nejhad M.N. (2006) “*Analytical and numerical techniques to predict carbon nanotubes properties*”, International Journal of Solids and Structures, Vol. 43, pp. 6832-6854.

[16] Kroto H.W, Heath J.R, O'Brien S.C, Curl, R.F, Smalley R.E, (1985) “*C₆₀: Buckminsterfullerene*”, Nature, Vol. 318, No. 6042, pp. 162-163

[17] Belytschko T, Xiao S.P, Schatz G.C, Ruoff R.S (2002) “*Atomistic simulations of nanotube fracture*”, Physical Review B, Vol. 65, pp. 235-430.

[18] Cornell W.D, Cieplak P, Bayly C.I (1995) “*A second generation force-field for the simulation of proteins, nucleic-acids, and organic-molecules*”, Journal of American Chemical Society, Vol. 117, pp. 5179-5197.

[19] Mayo S.L, Olafson B.D, Goddard W.A (1990) “*Dreiding—a generic force-field for molecular simulations*”, Journal of Physical Chemistry, Vol. 94, pp. 8897-8909.

[20] Rappe A.K, Casewit C.J, Colwell K.S (1992) “*A full periodic-table force-field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations*”, Journal of American

Chemical Society, Vol. 114, pp. 10024-10035.

[21] Li C.Y. and Chou T.W, (2003) "Elastic moduli of multi-walled carbon nanotubes and the effect of van der Waals forces", *Compos. Sci. Technol*, Vol. 63, pp. 1517-1524.

[22] Li C.Y, Chou T.W, (2004). "Modeling of elastic buckling of carbon nanotubes by molecular structural mechanics approach" *Mech. Mater*, Vol.36, pp. 1047-55.

[23] Min-Feng Yu, Oleg Lourie, Mark J. Dyer, Katerina Moloni, Thomas F. Kelly, Rodney S. Ruoff, (2000) "Strength and Breaking Mechanism of Multiwalled Carbon Nanotubes Under Tensile Load", *Science*, Vol. 287. No. 5453, pp. 637-640.

[24] Tersoff J. (1992) "*Energies of fullerenes*", *Phys. Rev. B.*, Vol. 46, pp. 15546-15549.

[25] Yakobson B.I, Brabec C.J, Bernholc J. (1996) "*Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear range*", *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 76, No.14, pp. 2511-2514.

[26] Ru C.Q. (2000) "*Effective bending stiffness of carbon nanotubes*", *Phys. Rev. B.*, Vol. 62, pp. 9973-9976.

[27] Govindjee S, Sackman J.L. (1999) "*On the use of continuum mechanics to estimate the properties of nanotubes*", *Solid State Commun.*, Vol. 110, pp. 227-230.

[28] Zhang P, Huang Y, Gao H, Hwang K.C. (2002) "*Fracture nucleation in single-wall carbon nanotubes under tension: a continuum analysis incorporating interatomic potentials*", *J. Appl. Mech.*, Vol. 69, pp. 454-458.

[29] Li C.Y, Chou T.S. (2003) "*A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes*", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 40, pp. 2487-

۲۴۹۹.

[۳۰] Hu N, Fukunaga H, Lu C, Kameyama M, Yan B. (۲۰۰۵) "*Prediction of elastic properties of carbon nanotube-reinforced composites*", Mathematical and Physical Sciences., Vol. ۴۶۱, pp. ۱۶۸۵-۱۷۱۰.

[۳۱] Hu N, Nunoya K, Pan D, Okabe T, Fukunaga H. (۲۰۰۷) "*Prediction of buckling characteristics of carbon nanotubes*", International Journal of solids and structures., Vol. ۴۴, pp. ۶۵۳۵-۶۵۵۰.

[۳۲] Wang Q, Liew K.M, Duan W.H. (۲۰۰۸) "*Modeling of the mechanical instability of carbon nanotubes*", Carbon, Vol. ۴۶, pp. ۲۸۵-۲۹۰.

[۳۳] Meo M, Rossi M. (۲۰۰۶), "*Tensile failure prediction of single wall carbon nanotube*", Engineering Fracture Mechanics., Vol. ۷۳, pp. ۲۵۸۹-۲۵۹۹.

[۳۴] ABAQUS user's manual, (۲۰۱۱), version ۶.۱۱.۳.

[۳۵] محمود شاکری، ابوالفضل درویزه، ۱۳۷۶، "مقدمه‌ای بر مکانیک ضربه"، جلد اول، چاپ اول، انتشارات دانشگاه گیلان.

[۳۶] Stone A. J, Wales D. J. (۱۹۸۶). "*Theoretical studies of icosahedral C₆₀ and some related structures*", Chemical Physics Letters, Vol. ۱۲۸, pp. ۵۰۱-۵۰۳.

Abstract

Carbon nanotube is more amazing nanostructured materials as ever discovered. Unique properties such as high strength, light weight and excellent energy absorption capability makes this material just be of interest to scientists in making bullet proof vests. In this thesis, the structural model in ABAQUS software is used to analyze the mechanical behavior of carbon nanotube under ballistic impact. In this structural model a nonlinear connector is considered for modeling of stretching and torsional interactions, and a nonlinear spring is used for modeling of the angle variation interactions. The present model is constructed in the CAE environment of ABAQUS, So there is no need to programing for different loading and boundary conditions. Every feature of the software in the analysis of mechanical problems has to be imposed on carbon nanotube. In thi thesis impact is simulated by rigid body with specific mass as bullet. The effect of various parameters such as geometry, boundary conditions and type of carbon nanotube, the collision place and collision angle of bullet into the carbon nanotube has been studied on the mechanical behavior of carbon nanotube. The influence of different defects in the carbon nanotube has been investigated on it's energy absorption under impact too. Finally, given that at review of the mentioned parameters, geometry of bullet designed according to previous studies, by changing the geometry of the bullet, carbon nanotube behavior is investigated under impact.

The results show that in the case where the nanotube was fixed at both ends absorbed energy when the bullet hit the middle of the carbon nanotube is maximum whereas in the case where one end was fixed at the relative height $z = 0.5$ this value is maximum.

The energy absorption of carbon nanotube decreases with the increase in bullet angle to the horizontal axis. In defective carbon nanotube; absorbed energy reduced that this decreasing in the Stone - Wales defect is more than vacancy defects.

KEYWORDS: carbon nanotube, structural mechanics model, ABAQUS, impact, energy



Shahrood University of Technology

Faculty mechanic engineer

**Numerical simulation of energy absorption
capability of carbon nanotube under ballistic
impact**

Mohammad Farhadian

Supervisors:

Dr. Mahmood Shariati

Dr. Hamidreza Ipakchi

Date: February 2014