

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده مکانیک

مدل سازی و شبیه سازی نانولوله های کربنی به منظور پیش بینی خواص مکانیکی آن

دانشجو : ولی پروانه

استاد راهنما :

محمود شریعتی

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

تیر ۸۸

دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده :

گروه :

پایان نامه کارشناسی ارشد (رساله دکتری) آقای / خانم
تحت عنوان:

در تاریخ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد
(رساله دکتری) 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	نماینده 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 دو شمع فروزان زندگی‌ام

پدر و مادر عزیزم

شایسته است از زحمات خالصانه استاد محترم جناب آقای دکتر محمود شریعتی که در طول تحقیق و تدوین پایان نامه اینجانب را حمایت و راهنمایی کردند، قدردانی و تشکر نمایم. همچنین از تمامی دوستانی که در این راه به بنده یاری رساندند، بویژه آقای مهندس امیر مجد ثابتی قدردانی خود را ابراز می‌دارم.

دانشجو تأیید می نماید که مطالب مندرج در این پایان نامه (رساله) نتیجه تحقیقات خودش می باشد و در صورت استفاده از نتایج دیگران مرجع آن را ذکر نموده است.

کلیه حقوق مادی مترتب از نتایج مطالعات ، آزمایشات و نوآوری ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه (رساله) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد .

تیر ۸۸

چکیده

نانولوله کربنی را می‌توان شگفت‌انگیزترین ماده نانو ساختار کشف شده تاکنون دانست. روش‌های مکانیک ملکولی، از جمله دقیق‌ترین روش‌های شبیه‌سازی نانولوله‌های کربنی در حال حاضر محسوب می‌شوند. اما یک مشکل اساسی این روش‌ها، زمان بسیار زیاد تحلیل آن‌ها می‌باشد. اگرچه مدل‌های پیوسته زمان کمتری برای تحلیل نیاز دارند، اما به علت عدم دربرگیری ساختارهای اتمی در شبیه‌سازی، دارای دقت پایینی هستند. بنابراین برای حل این مشکل، مدل‌های ساختاری ارائه گردیدند. در مدل‌های ساختاری از المان‌های پیوسته برای مدل‌سازی برهمکنش‌های بین اتمی در نانولوله‌های کربنی استفاده می‌گردد. در مدل‌های ساختاری ارائه شده تاکنون، از المان‌های مختلفی همانند میله، تیر و فنر برای مدل کردن برهمکنش‌های بین اتمی استفاده شده است. البته این مدل‌ها، به دلیل فرض‌های ساده‌سازی اعمال شده در آن‌ها، اغلب دارای دقت پایینی هستند و همچنین برای حل حوزه خاصی از مسائل کاربرد دارند.

در این پایان‌نامه سعی شده است که مدلی ارائه گردد تا علاوه بر دقت و سرعت بالا، حوزه وسیعی از مسائل را نیز در برگیرد. مدل ارائه شده در این پایان‌نامه، کامل‌ترین مدل ساختاری ارائه شده تاکنون می‌باشد که در محیط نرم افزار ABAQUS اجرا می‌گردد. 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. در این مدل، رفتار نانولوله مدل شده از دقت بهتری برخوردار بوده و از مزیت‌های آن، اجرا شدن آن در فضای CAE نرم‌افزار ABAQUS می‌باشد. این امر باعث می‌شود که برای بررسی نانولوله‌های کربنی تحت شرایط مختلف مرزی و بارگذاری نیاز به برنامه‌نویسی نداشته باشیم و هر قابلیت‌هایی که نرم افزار ABAQUS در تحلیل مسائل مکانیکی داشته باشد را بتوان بر روی نانولوله اعمال کرد.

از این مدل ساختاری برای پیش‌بینی خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی استفاده شده است. در قسمت اول مدول یانگ، مدول برشی، ضریب پواسون و استحکام نهایی نانولوله‌های کربنی تک دیواره

بدست آمده‌اند و تاثیر انواع عیوب تهی‌جای بر روی این پارامترها مورد بررسی قرار گرفته‌اند. نتایج نشان می‌دهند که عیوب تهی‌جای تاثیر بسیار کمی بر روی مدول یانگ و تاثیر بیشتری بر روی استحکام نهایی دارند. در ادامه به تحلیل کمانش نانولوله‌های کربنی تحت فشار محوری پرداخته شده است. بارها و کرنش‌های بحرانی کمانش و همچنین مُدهای کمانش نانولوله‌های کربنی زیگزاگ و آرمچیر برای نسبت‌های ظاهری مختلف بدست آمده‌اند. تاثیر انواع عیوب تهی‌جای بر روی بارها و کرنش‌های بحرانی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهند که عیوب تهی‌جای باعث به تعویق افتادن مُد اوپلر خواهد شد و نقطه بحرانی برای وجود عیب در یک نانولوله در مرکز آن می‌باشد. مقایسه نتایج مدل ساختاری حاضر با نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی دینامیک ملکولی بیانگر دقت بالای مدل می‌باشد.

لیست مقالات مستخرج از پایان نامه

Parvaneh V, Shariati M, Majd Sabeti A.M. (2009) “*Investigation of vacancy defects effects on the buckling behavior of SWCNTs via a structural mechanics approach*”, European Journal of Mechanics A/Solids., 28, pp.1072-1078.

فهرست مطالب

فصل اول: از جهان ماکرو تا جهان نانو

مقدمه.....	۲
۱-۱-۱ مرزهای ابعادی.....	۲
۱-۱-۱-۱ جهان ماکرو.....	۳
۱-۱-۱-۱-۱ روش‌های حل مسئله در جهان ماکرو.....	۵
۱-۱-۲ جهان مسو.....	۱۰
۱-۱-۳ جهان میکرو.....	۱۲
۱-۱-۴ جهان نانو.....	۱۶

فصل دوم: نانولوله‌های کربنی

مقدمه.....	۲۳
۱-۲ اوربیتال‌های کربن حالت پایه.....	۲۳
۱-۱-۲ اوربیتال مرکب sp^3 کربن.....	۲۳
۲-۱-۲ پیوند کوالانسی sp^3 کربن.....	۲۴
۳-۱-۲ اوربیتال سه وجهی sp^2	۲۶
۴-۱-۲ پیوند کوالانسی sp^2 کربن.....	۲۹
۱-۴-۱-۲ گرافیت.....	۳۰
۲-۲ نانولوله‌های کربنی.....	۳۱
۱-۲-۲ وضعیت پیوندها در نانولوله‌های کربنی.....	۳۱
۲-۲-۲ ساختار نانولوله‌های کربنی.....	۳۱
۳-۲-۲ برهمکنش‌ها و پتانسیل‌های موجود در نانولوله‌های کربنی.....	۳۲

۳۲	برهمکنش کشش پیوند.....
۳۳	برهمکنش خمش زاویه‌ای پیوند (تغییر زاویه).....
۳۴	برهمکنش پیچش دوسطحی.....
۳۴	برهمکنش پیچش خارج صفحه‌ای.....
۳۵	برهمکنش واندروالس.....
۳۵	برهمکنش الکترواستاتیک.....
۳۶	پتانسیل ترسوف-برنر.....
۳۶	مقایسه پتانسیل‌های مورس و ترسوف-برنر.....

فصل سوم: مدل‌سازی نانولوله‌های کربنی

۴۰	مقدمه.....
۴۰	۱-۳ روش‌های بر پایه شبیه‌سازی و قابلیت ارتجاعی کریستال.....
۴۹	۱-۱-۳ روش دینامیک ملکولی آب‌نیشیو.....
۵۱	۲-۱-۳ روش دینامیک ملکولی MD.....
۵۱	۱-۲-۱-۳ مقداردهی اولیه.....
۵۳	۲-۲-۱-۳ محاسبه نیروها.....
۵۳	۳-۲-۱-۳ انتگرال‌گیری از معادلات حرکت.....
۵۴	۲-۳ روش‌های بر پایه مکانیک پیوسته.....
۵۵	۱-۲-۳ مدل تحلیلی و پیوسته کالامکارو.....
۵۹	۱-۱-۲-۳ رفتار مجانبی پوسته شبکه لوله‌ای با ساختار پرئودیک.....
۶۲	۳-۳ روش‌های المان محدود (FEM).....

فصل چهارم: روش‌های مکانیک ساختاری

۶۴	مقدمه.....
۶۵	۱-۴ مدل‌های مکانیک ساختاری.....

۶۵.....	۱-۱-۴ مدل اودگارد.....
۶۸.....	۲-۱-۴ مدل لی و چو.....
۷۰.....	۳-۱-۴ مدل هو.....
۹۲.....	۴-۱-۴ مدل کالامکارو.....
۹۳.....	۵-۱-۴ مدل معو و روسی.....
۹۴.....	۶-۱-۴ مدل ناتسوکی.....

فصل پنجم: مدل ساختاری جدید

۱۰۱.....	مقدمه.....
۱۰۱.....	۱-۵ نرم افزار ABAQUS.....
۱۰۴.....	۲-۵ برهمکنش در حوزه interaction.....
۱۰۴.....	۱-۲-۵ پتانسیل‌های ملکولی.....
۱۰۵.....	۲-۲-۵ المان‌های برهمکنش.....
۱۰۷.....	۳-۵ مدول یانگ و مدول برشی نانولوله‌های کربنی.....
۱۰۷.....	۱-۳-۵ مدول یانگ.....
۱۱۳.....	۲-۳-۵ مدول برشی.....
۱۱۴.....	۳-۳-۵ ضریب پواسون.....
۱۱۵.....	۴-۳-۵ استحکام نهایی.....
۱۱۶.....	۴-۵ تاثیر عیوب تهی‌جای بر روی خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی.....
۱۱۷.....	۱-۴-۵ تاثیر عیوب بر روی مدول یانگ.....
۱۱۸.....	۲-۴-۵ تاثیر عیوب بر روی استحکام نهایی.....
۱۱۹.....	۵-۵ کمانش نانولوله‌های کربنی تک دیواره.....
۱۲۰.....	۱-۵-۵ کمانش نانولوله‌های کربنی تک دیواره سالم.....
۱۲۴.....	۲-۵-۵ کمانش نانولوله‌های کربنی تک دیواره معیوب.....

نتیجه‌گیری، پیشنهادات و کارهای آینده.....	۱۳۱
مراجع.....	۱۳۳

فهرست اشکال و جداول

فصل اول: از جهان ماکرو تا جهان نانو

شکل (۱-۱): مرزهای ابعادی از جهان ماکرو تا جهان نانو.....	۳
شکل (۲-۱): المان کرنش ثابت مثلثی(الف) و پیوستگی جابجایی‌ها(ب).....	۶
شکل (۳-۱): مدل چندمقیاسی ترک شامل مدل مسو(اطراف ترک) و مدل ماکرو(دورتر از ترک).....	۱۱
شکل (۴-۱): طرحواره‌هایی از تیر و میله با سطح مقطع‌های دایره‌ای.....	۱۴
شکل (۵-۱): طرحواره ای از (الف)فلوروئن (ب)نانولوله کربنی.....	۱۹

فصل دوم: نانولوله‌های کربنی

شکل (۱-۲): طرح کلی نمایش اوربیتال های S و P.....	۲۳
شکل (۲-۲): پیوندزنی sp^3 اوربیتال‌های کربن(قسمت‌های هاشورخورده الکترون‌های ظرفیت و پیکان‌ها جهت اسپین الکترون را نشان می دهند).....	۲۴
شکل (۳-۲): طرح کلی یک اوربیتال sp^3	۲۵

- شکل (۲-۴): پیوند اوربیتال مرکب sp^3 (پیوند سیگما) به همراه پیوند کوالانسی..... ۲۵
- شکل (۲-۵): نمایش سه بعدی پیوند کوالانسی sp^3 (ساختار الماس)..... ۲۶
- جدول ۱-۲: انرژی و طول پیوندهای کربن..... ۲۷
- شکل (۲-۶): پیوندزنی sp^2 اوربیتالهای کربن..... ۲۸
- شکل (۲-۷): برش دوسطحی اوربیتال مرکب sp^2 از اتمهای کربن..... ۲۸
- شکل (۲-۸): ساختار سه بعدی گرافیت..... ۲۹
- شکل (۲-۹): طرح کلی پیوندهای سیگما و پای در پیوندزنی sp^2 ۳۰
- شکل (۲-۱۰): تشکیل نانولوله کربنی (الف) توسط لوله کردن یک گرافن (ب)..... ۳۲
- شکل (۲-۱۱): طرحواره‌ای از یک نانولوله دو دیواره (الف) تصویر از یک نانولوله ده دیواره توسط *SEM* (ب)..... ۳۳
- شکل (۲-۱۲): سه نوع ساختار مختلف نانولوله‌های کربنی..... ۳۴
- جدول ۲-۲: پارامترهای ساختارهای مختلف نانولوله‌های کربنی..... ۳۴
- شکل (۲-۱۳): چند نمونه از شاخص‌های مختلف برای تشکیل نانولوله‌های کربنی..... ۳۵
- شکل (۲-۱۴): انواع برهمکنش‌های موجود در نانولوله کربنی..... ۲۸
- شکل (۲-۱۵): مقایسه پتانسیل‌های کشش پیوند مورس و هارمونیک..... ۳۰
- شکل (۲-۱۶): مقایسه پتانسیل‌های تغییر زاویه پیوند مورس و هارمونیک..... ۳۱
- شکل (۲-۱۷): مقایسه پتانسیل‌های پیچش دوسطحی پیوند مورس و هارمونیک..... ۳۳
- شکل (۲-۱۸): نمودار پتانسیل واندروالس..... ۳۴
- جدول (۲-۳): پارامترهای پتانسیل ترسوف-برنر..... ۳۷
- شکل (۲-۱۹): مقایسه پتانسیل‌های مورس و ترسوف-برنر..... ۳۷

فصل سوم: مدل‌سازی نانولوله‌های کربنی

- شکل (۳-۱): حلقه شش وجهی نانولوله کربنی تک دیواره..... ۵۶
- شکل (۳-۲): سلول واحد لایه استوانه‌ای ناهمگن..... ۵۷
- شکل (۳-۳): تناوب سلول SWCNT، (الف) آرمچیر (ب) زیگزاگ..... ۶۰

فصل چهارم: روش‌های مکانیک ساختاری

- شکل (۴-۱): المان‌های حجم معرف برای (الف) مدل شیمیایی (ب) مدل خرپا (ج) مدل پیوسته..... ۶۶
- شکل (۴-۲): طرحواره‌ای از معادل‌سازی تغییر زاویه پیوند با تغییر طول میله *b* در خرپا..... ۶۷
- شکل (۴-۳): معادل‌سازی مکانیک ملکولی و مکانیک ساختاری برای برهمکنش‌های پیوندی و غیرپیوندی میان اتم‌های کربن (الف) مدل مکانیک ملکولی (ب) مدل مکانیک ساختاری..... ۸۹
- شکل (۴-۴): یک تغییرشکل دلخواه برای سلول واحد شش ضلعی..... ۹۰
- شکل (۴-۵): مدل‌سازی نیروهای واندروالس بین اتم‌های کربن بر روی دو دیواره مجزا..... ۹۱
- شکل (۴-۶): مدل المان محدود برای نانولوله دو دیواره..... ۹۳
- شکل (۴-۷): پیوند کربن-کربن (الف) مدل فیزیکی (ب) مدل FE کشش پیوند (ج) مدل FE خمش پیوند..... ۹۴
- شکل (۴-۸): المان یک مدل ساختاری قاب..... ۹۵
- شکل (۴-۹): تحلیل تغییر شکل محوری و جابه‌جایی زاویه‌ای یک خرپای زیگزاگ..... ۹۶
- شکل (۴-۱۰): تحلیل تغییر شکل محوری و جابه‌جایی زاویه‌ای یک خرپای آرمچیر..... ۹۷

شکل (۴-۱۱): تحلیل تغییر شکل برشی برای یک خرپا..... ۹۸

فصل پنجم: مدل ساختاری جدید

- شکل (۵-۱): تصویر یک نانولوله کربنی زیگزاگ در فضای CAE نرم افزار ABAQUS..... ۱۰۳
- شکل (۵-۲): (الف) یک سلول واحد شش ضلعی (ب) محل قرارگیری مختصات‌های موضعی بر روی رابطها..... ۱۰۵
- شکل (۵-۳): المان‌های فنر و رابط متناظر با برهمکنش اتم‌های کربن..... ۱۰۶
- جدول ۵-۱: نتایج تجربی بدست آمده برای مدول یانگ نانولوله های کربنی..... ۱۰۸
- جدول ۵-۲: نتایج شبیه‌سازی عددی بدست آمده برای مدول یانگ نانولوله‌های کربنی..... ۱۰۹
- شکل (۵-۴): سطح مقطع معادل نانولوله کربنی شکل (۵-۴): سطح مقطع معادل نانولوله کربنی..... ۱۱۰
- شکل (۵-۵): (الف) تصویر نانولوله کربنی زیگزاگ (ب) تصویر نانولوله کربنی آرمچیر (ج) تصویر تغییر شکل یافته نانولوله کربنی زیگزاگ تحت کشش محوری (د) تصویر تغییر شکل یافته نانولوله کربنی آرمچیر تحت کشش محوری..... ۱۱۱
- شکل (۵-۶): نمودار مدول یانگ نانولوله کربنی بر اساس نسبت ظاهری (L/d)..... ۱۱۲
- شکل (۵-۷): مقایسه نمودارهای مدول یانگ بر حسب قطر نانولوله کربنی..... ۱۱۲
- شکل (۵-۸): تصویر تغییر شکل یافته نانولوله کربنی تحت پیچش (الف) زیگزاگ (ب) آرمچیر..... ۱۱۳
- شکل (۵-۹): نمودار مدول برشی نانولوله کربنی بر اساس نسبت ظاهری (L/d)..... ۱۱۴
- شکل (۵-۱۰): مقایسه نمودارهای مدول برشی بر حسب قطر نانولوله کربنی..... ۱۱۴
- شکل (۵-۱۱): منحنی ضریب پواسون بر حسب قطر نانولوله..... ۱۱۵
- شکل (۵-۱۲): منحنی تنش- کرنش نانولوله های (۰, ۱۲) و (۷, ۷)..... ۱۱۶
- شکل (۵-۱۳): عیوب تهی جای اعمال شده در تحلیل..... ۱۱۷
- شکل (۵-۱۴): تاثیر انواع عیوب تهی جای بر روی مدول یانگ نانولوله زیگزاگ..... ۱۱۸
- شکل (۵-۱۵): تاثیر انواع عیوب تهی جای بر روی مدول یانگ نانولوله آرمچیر..... ۱۱۸
- شکل (۵-۱۶): تاثیر عیب دو تهی جای بر روی استحکام نهایی نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر..... ۱۱۹
- شکل (۵-۱۷): بارهای بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری نانولوله‌های (۰, ۱۲) و (۷, ۷)..... ۱۲۱
- شکل (۵-۱۸): کرنش‌های بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری نانولوله‌های (۰, ۱۲) و (۷, ۷)..... ۱۲۱
- شکل (۵-۱۹): مدهای کمانشی نانولوله (۰, ۱۲) تحت بار فشاری محوری برای طول‌های مختلف..... ۱۲۳
- شکل (۵-۲۰): منحنی زمان اجرا بر حسب تعداد اتم‌های کربن..... ۱۲۴
- شکل (۵-۲۱): بارهای بحرانی کمانش برای نانولوله‌های معیوب (الف) زیگزاگ (ب) آرمچیر..... ۱۲۵
- شکل (۵-۲۲): (الف) منحنی بارهای بحرانی کمانش (ب) و کرنش‌های بحرانی..... ۱۲۶
- شکل (۵-۲۳): مدهای کمانش متناظر با کانتورهای جابه‌جایی نانولوله‌های با عیب تک تهی جای و دو عیب تک تهی- جای روبروی هم برای (الف) زیگزاگ (۴/۱۱۸ نانومتر) و (ب) آرمچیر (۴/۰۵۳ نانومتر)..... ۱۲۷
- شکل (۵-۲۴): گشودگی اعمال شده در مدل پیوسته (الف) گشودگی متناظر با عیب تک تهی جای در نانولوله آرمچیر (ب) گشودگی متناظر با عیب تک تهی جای در نانولوله زیگزاگ..... ۱۲۸
- شکل (۵-۲۵): منحنی بارهای بحرانی کمانش نرماله شده و مقایسه مد کمانش مدل ساختاری و مدل پیوسته..... ۱۲۸
- شکل (۵-۲۶): بارهای بحرانی کمانش برای عیوب تک تهی جای در موقعیت‌های مختلف در طول نانولوله زیگزاگ..... ۱۲۹
- شکل (۵-۲۷): مدهای کمانش نانولوله زیگزاگ با عیب تک تهی جای در (الف) $L_0 = 0.9L$ (ب) $L_0 = 0.5L$ ۱۳۰
- جدول ۵-۱: ثابت‌های معادلات برهمکنش در نانولوله‌های کربنی..... ۱۳۰

فصل اول:

از جهان ماکرو تا جهان نانو

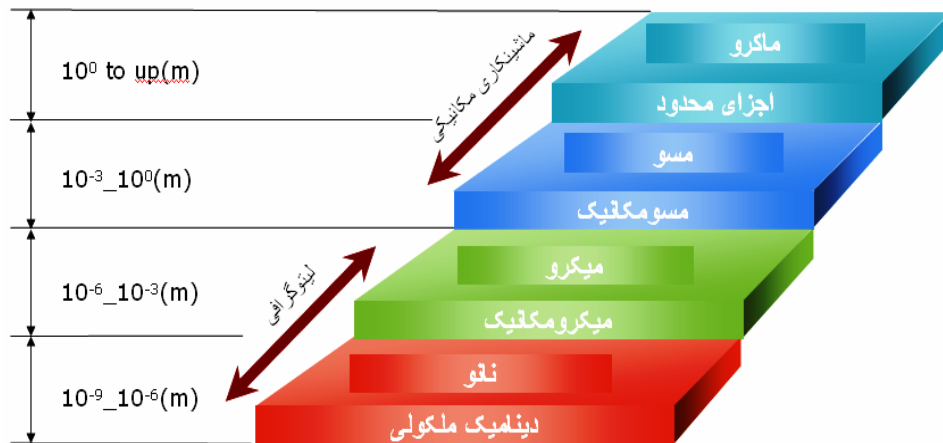
مقدمه

آنچه که ما بطور روزمره با آن سروکار داریم و به چشم می‌بینیم، به عنوان جهان ماکرو شناخته می‌شود. از زمان‌های بسیار دور، انسان برای رفع نیازهای خود به دنبال کشف این جهان بوده و تا به امروز موفقیت‌های شگرفی در این زمینه کسب کرده است. در واقع این، پارامتر زمان بوده است که حقایق را برای انسان آشکار کرده است و تکامل علوم همیشه در گرو گذشت زمان بوده است. با گذشت زمان انسان‌ها متوجه شدند که برای رسیدن به نتایج مطلوب‌تر نیازمند اندازه‌گیری و دقت بالا هستند و این دقت را در کوچکتر کردن ابعاد اجسام یافتند. یکی از دلایل حرکت علم از جهان ماکرو به سمت جهان نانو همین موضوع می‌باشد. شاید از دلایل دیگر آن، افزایش جمعیت و نیاز به امکانات کوچکتر برای زندگی باشد. البته نمی‌توان علاقه بشریت به کشف مسائل حل نشده را نیز نادیده گرفت. در این فصل در نظر داریم مرزهای ابعادی از ماکرو به سمت نانو و اصول حاکم در هر یک از این مرزها را بررسی کنیم.

۱-۱ مرزهای ابعادی

به طور کلی مرزهای ابعادی را می‌توان مطابق شکل (۱-۱) دسته‌بندی کرد [۱]. همانگونه که در شکل (۱-۱) مشاهده می‌کنید، یک روش متداول برای شبیه‌سازی در هر یک از این ابعاد ارائه گردیده است که در ادامه بیشتر به آن‌ها خواهیم پرداخت. برای هر یک از این ابعاد، از روشهای خاص خود برای مدلسازی و شبیه‌سازی استفاده می‌گردد. روش‌های ساخت نیز با تغییر مقیاس، تغییر می‌کنند. با وجود اینکه فقط دو روش ساخت برای چهار مقیاس ارائه گردیده است؛ اما در عمل، این روش‌ها نیز با تغییر مقیاس تغییر خواهند کرد. به عنوان مثال روش ماشینکاری در جهان ماکرو با جهان مسو و یا روش لیتوگرافی در جهان میکرو با جهان نانو متفاوت می‌باشد.

می‌بینیم که امکان دسترسی به جهان نانو، بدون عبور از جهان‌های ماقبل امکانپذیر نبوده است. از این رو برای شناخت بیشتر جهان نانو، نیاز به شناخت از جهان‌های پیشین داریم. بنابراین در این قسمت به بررسی اصول حاکم در هر یک از این جهان‌ها می‌پردازیم.



شکل (۱-۱): مرزهای ابعادی از جهان ماکرو تا جهان نانو [۱]

۲-۱-۱ جهان ماکرو

بیشترین زمان بشر تاکنون، صرف کشف اصول حاکم در جهان ماکرو گشته است. طول، جرم و زمان، از جمله پارامترهای پایه برای بررسی سایر پدیده‌های فیزیکی می‌باشند که با ترکیب این سه پارامتر، تعریف‌های دیگری مانند: جابجایی (تغییرات طول)، سرعت (جابجایی در واحد زمان)، شتاب (سرعت در واحد زمان)، نیرو (حاصلضرب جرم در شتاب) بدست آمده‌اند.

چون این اصول برای حل مسائل روزمره بکار گرفته می‌شوند، بنابراین باید شامل معادلات نسبتاً ساده باشند و نیز برای مسائل مختلف دارای عمومیت باشند. این اصول از روش‌های مختلفی به دست آمده‌اند که در تمام این روش‌ها، از واحدهای بزرگتر از اتم (شامل تعداد بسیاری اتم) استفاده گردیده است؛ یعنی از اثر برهمکنش میان اتم‌ها چشم‌پوشی شده و برای سادگی، اثر میان این واحدها بررسی می‌-

شود. در این فرض، سیستم واقعی ذرات را با یک توزیع پیوسته از ماده معادل می‌کنیم. به طور کلی فرضیات جهان ماکرو، بر پیوستگی اجسام استوار است.

در این پایان‌نامه، بیشتر سعی بر بررسی اصول مکانیکی مواد در مقیاس نانو می‌باشد؛ بنابراین فقط به روابطی که در این حوزه قرار می‌گیرد، پرداخته خواهد شد.

سه اصل اساسی فیزیک محیط‌های پیوسته: اصل بقای جرم، اصل اندازه حرکت خطی و اصل ممان اندازه حرکت می‌باشد. که نتایج هر یک از این اصول به ترتیب در معادلات (۱-۱) تا (۳-۱) آمده است [۲].

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + v_i \frac{\partial\rho}{\partial x_i} = \frac{\partial\rho}{\partial t} + \bar{v} \cdot \nabla \bar{\rho} \quad (1-1)$$

$$\frac{\partial T_{ij}}{\partial x_j} + \rho B_i = \rho a_i \quad (2-1)$$

$$T_{12} = T_{21}, T_{13} = T_{31}, T_{23} = T_{32} \quad (3-1)$$

که به ترتیب، ρ چگالی ذره، t زمان حرکت ذره، x مکان ذره، v حجم ذره، T تانسور تنش، B نیروی حجمی بر واحد جرم و a شتاب ذره می‌باشد.

مفهوم اصل بقای جرم که به عنوان معادله پیوستگی هم شناخته می‌شود، به آن معنی است که ممکن است حجمی از ماده در ضمن حرکتش دچار تغییر شود؛ اما مجموع جرم آن بدون تغییر باقی می‌ماند. اصل اندازه حرکت خطی باید برای هر محیط پیوسته در حال حرکت جامد یا سیال ارضاء شود که به عنوان معادلات حرکت کوشی^۱ شناخته می‌شوند؛ در صورت حذف شتاب، این معادلات تبدیل به معادلات تعادل خواهند شد. مفهوم این اصل برگرفته از قانون دوم نیوتن می‌باشد.

اصل ممان اندازه حرکت، یکی از اصول مهم در مکانیک پیوسته محسوب می‌شود که از آن برای نشان دادن تقارن تانسور تنش در حوزه مکانیک استفاده می‌شود. این اصل خود برگرفته از اصل اندازه حرکت خطی می‌باشد.

¹ Cauchy motion equations

۱-۱-۱-۱ روش‌های حل مسئله در جهان ماکرو

الف- روش‌های تحلیلی

از جمله روش‌های متداول برای محاسبه اثر بارهای اعمال شده بر روی اجسام الاستیک، نظریه الاستیسیته می‌باشد که مبتنی بر قوانین تعادل می‌باشد. در مسائل سه بعدی در الاستیسیته، با پانزده مجهول روبرو هستیم که شامل شش مؤلفه تنش، شش مؤلفه کرنش و سه مؤلفه تغییر مکان می‌باشد. این معادلات اغلب بسیار پیچیده می‌باشند و با اینکه بهترین و کامل‌ترین روش حل مسائل، روش تحلیلی می‌باشد، ناگزیریم از روش‌های دیگری برای حل مسائل سود ببریم. یکی از معروف‌ترین روشها که امروزه کاربرد زیادی دارند، روش‌های عددی می‌باشند. در این قسمت بر روی روش المان محدود که کاربرد فراوانی در حل مسائل جامدات دارد، بحث خواهیم کرد.

ب- روش‌های عددی

روش المان محدود از دهه ۱۹۵۰ آغاز و با گسترش کامپیوترهای عددی رو به توسعه گذاشت. این روش را می‌توان ترکیبی از روش تقریبی ریتز^۲ و اصل تغییرات که در مکانیک محیط‌های پیوسته به کار می‌رود، تصور نمود. به کمک این روش می‌توان تنش‌ها و کرنش‌های ایجاد شده در یک سازه مهندسی را بسادگی و دقت بسیار خوبی پیش‌بینی کرد. در این روش، جسم پیوسته به تعداد محدودی المان تقسیم می‌شود که این المانها نه تنها در گره‌هایشان به یکدیگر متصلند؛ بلکه در امتداد مرزهای داخلی نیز با یکدیگر در تماسند. بنابراین علاوه بر ارضاء شرایط تعادل و سازگاری در گره‌ها بایستی این شرایط در مرز المانها نیز برقرار باشد.

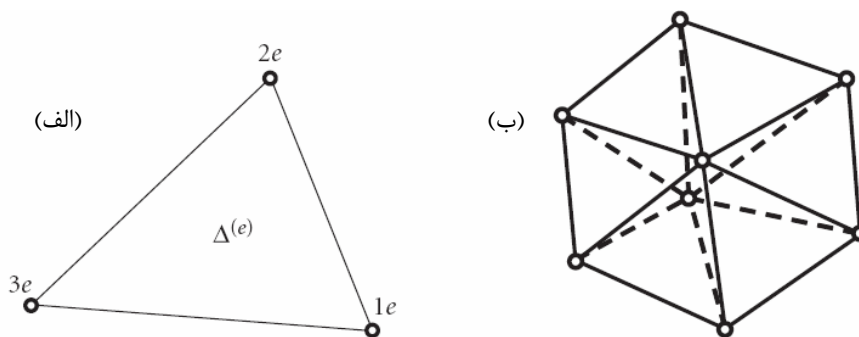
یک المان مثلثی کرنش ثابت را مطابق شکل (۱-۲) در نظر بگیرید. می‌خواهیم معادلات پایه المان محدود را برای مسائل الاستوستاتیک صفحه به دست آوریم. جابجایی المان مثلثی را می‌توان با استفاده از متغیرهای مختصات (x,y) ، به صورت خطی بیان کرد [۳]:

² Ritze

$$u = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 y \quad (۴-۱)$$

$$v = \beta_0 + \beta_1 x + \beta_2 y \quad (۵-۱)$$

توابع درونیاب بالا، خطوط مستقیم که دو نقطه از المان را به طور دلخواه به هم متصل کرده است را



شکل (۲-۱): المان کرنش ثابت مثلثی (الف) و پیوستگی جابجایی‌ها (ب)

به خطوط مستقیم بعد از تغییر شکل تبدیل می‌کنند. از آنجایی که مرزهای میان المان‌های مجاور، خطوط مستقیم می‌باشند، بنابراین میان مرزهای المان‌ها ناسازگاری رخ نمی‌دهد و جابجایی‌ها در حوزه تحلیل پیوسته باقی می‌مانند. برای المان مثلثی نام که شامل سه گره $(1_e, 2_e, 3_e)$ می‌باشد، به ترتیب مختصات $(x_{1e}, y_{1e}), (x_{2e}, y_{2e})$ و (x_{3e}, y_{3e}) ، جابجایی‌های گره‌ای $(u_{1e}, v_{1e}), (u_{2e}, v_{2e})$ و (u_{3e}, v_{3e}) و ضرایب $\beta_3, \beta_1, \beta_0, \alpha_2, \alpha_1, \alpha_0$ می‌باشند که با استفاده از روابط زیر به دست می‌آیند:

$$\begin{Bmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{Bmatrix} = \begin{pmatrix} a_{1e} & a_{2e} & a_{3e} \\ b_{1e} & b_{2e} & b_{3e} \\ c_{1e} & c_{2e} & c_{3e} \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} u_{1e} \\ u_{2e} \\ u_{3e} \end{Bmatrix} \quad (۶-۱)$$

$$\begin{Bmatrix} \beta_0 \\ \beta_1 \\ \beta_2 \end{Bmatrix} = \begin{pmatrix} a_{1e} & a_{2e} & a_{3e} \\ b_{1e} & b_{2e} & b_{3e} \\ c_{1e} & c_{2e} & c_{3e} \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} v_{1e} \\ v_{2e} \\ v_{3e} \end{Bmatrix} \quad (۷-۱)$$

بطوریکه

$$\begin{cases} a_{1e} = \frac{1}{2\Delta^{(e)}}(x_{2e}y_{3e} - x_{3e}y_{2e}) \\ b_{1e} = \frac{1}{2\Delta^{(e)}}(y_{2e} - y_{3e}) \\ c_{1e} = \frac{1}{2\Delta^{(e)}}(x_{3e} - x_{2e}) \end{cases} \quad (8-1)$$

$$\begin{cases} a_{2e} = \frac{1}{2\Delta^{(e)}}(x_{3e}y_{1e} - x_{1e}y_{3e}) \\ b_{2e} = \frac{1}{2\Delta^{(e)}}(y_{3e} - y_{1e}) \\ c_{2e} = \frac{1}{2\Delta^{(e)}}(x_{1e} - x_{3e}) \end{cases} \quad (9-1)$$

$$\begin{cases} a_{3e} = \frac{1}{2\Delta^{(e)}}(x_{1e}y_{2e} - x_{2e}y_{1e}) \\ b_{3e} = \frac{1}{2\Delta^{(e)}}(y_{1e} - y_{2e}) \\ c_{3e} = \frac{1}{2\Delta^{(e)}}(x_{2e} - x_{1e}) \end{cases} \quad (10-1)$$

اعداد زیرنویس e در معادلات بالا، اعداد نقاط گره‌ای المان هستند که بیانگر گره eام المان می‌باشند و باید به صورت پادساعتگرد شماره‌گذاری شوند. این سه عدد فقط برای المان eام بکار می‌روند. اعداد گره‌ای دیگر، اعداد گره‌ای سراسری نامیده می‌شوند که در طول کل المان‌های جسم الاستیک شماره‌گذاری می‌شوند. نماد $\Delta^{(e)}$ ، مساحت المان eام را نشان می‌دهد که آن را می‌توان با استفاده از مختصات گره‌های المان به دست آورد:

$$\Delta^{(e)} = \frac{1}{2}[(x_{1e} - x_{3e})(y_{2e} - y_{3e}) - (y_{3e} - y_{1e})(x_{3e} - x_{2e})] = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & x_{1e} & y_{1e} \\ 1 & x_{2e} & y_{2e} \\ 1 & x_{3e} & y_{3e} \end{bmatrix} \quad (11-1)$$

می‌توان مؤلفه‌های بردار جابجایی $[u, v]$ را توسط بردارهای جابجایی گره‌ای $[u_{1e}, v_{1e}]$ ، $[u_{2e}, v_{2e}]$ و $[u_{3e}, v_{3e}]$ به دست آورد:

$$u = (a_{1e} + b_{1e}x + c_{1e}y)u_{1e} + (a_{2e} + b_{2e}x + c_{2e}y)u_{2e} + (a_{3e} + b_{3e}x + c_{3e}y)u_{3e} \quad (12-1)$$

$$v = (a_{1e} + b_{1e}x + c_{1e}y)v_{1e} + (a_{2e} + b_{2e}x + c_{2e}y)v_{2e} + (a_{3e} + b_{3e}x + c_{3e}y)v_{3e} \quad (13-1)$$

نمایش ماتریسی معادلات بالا به صورت زیر می‌باشد:

$$\begin{Bmatrix} u \\ v \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} N_{1e}^{(e)} & 0 & N_{2e}^{(e)} & 0 & N_{3e}^{(e)} & 0 \\ 0 & N_{2e}^{(e)} & 0 & N_{2e}^{(e)} & 0 & N_{3e}^{(e)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_{1e} \\ v_{1e} \\ u_{2e} \\ v_{2e} \\ u_{3e} \\ v_{3e} \end{Bmatrix} = [N]\{\delta\}^{(e)} \quad (14-1)$$

بطوریکه

$$\begin{cases} N_{1e}^{(e)} = a_{1e} + b_{1e}x + c_{1e}y \\ N_{2e}^{(e)} = a_{2e} + b_{2e}x + c_{2e}y \\ N_{3e}^{(e)} = a_{3e} + b_{3e}x + c_{3e}y \end{cases} \quad (15-1)$$

فرمول‌های معادله (۱۶-۱)، توابع درونیاب یا توابع حالت المان مثلثی کرنش ثابت را نشان می‌دهند. حال با استفاده از جایجایی‌های بدست آمده از معادلات (۱۳-۱) و (۱۴-۱) و جایگذاری در معادلات زیر می‌توان کرنش‌های متناظر با هر جایجایی را بدست آورد.

$$\begin{cases} \varepsilon_x = \frac{\partial u}{\partial x} \\ \varepsilon_y = \frac{\partial v}{\partial y} \\ \gamma_{xy} = \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \end{cases} \quad (16-1)$$

$$\{\varepsilon\} = \begin{Bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \gamma_{xy} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial u}{\partial x} \\ \frac{\partial v}{\partial y} \\ \frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_{1e}^{(e)}}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_{2e}^{(e)}}{\partial x} & 0 & \frac{\partial N_{3e}^{(e)}}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_{1e}^{(e)}}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_{2e}^{(e)}}{\partial y} & 0 & \frac{\partial N_{3e}^{(e)}}{\partial y} \\ \frac{\partial N_{1e}^{(e)}}{\partial x} & \frac{\partial N_{1e}^{(e)}}{\partial y} & \frac{\partial N_{2e}^{(e)}}{\partial x} & \frac{\partial N_{2e}^{(e)}}{\partial y} & \frac{\partial N_{3e}^{(e)}}{\partial x} & \frac{\partial N_{3e}^{(e)}}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_{1e} \\ v_{1e} \\ u_{2e} \\ v_{2e} \\ u_{3e} \\ v_{3e} \end{Bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} b_{1e} & 0 & b_{2e} & 0 & b_{3e} & 0 \\ 0 & c_{1e} & 0 & c_{2e} & 0 & c_{3e} \\ c_{1e} & b_{1e} & c_{2e} & b_{2e} & c_{3e} & b_{3e} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_{1e} \\ v_{1e} \\ u_{2e} \\ v_{2e} \\ u_{3e} \\ v_{3e} \end{Bmatrix} = [B]\{\delta\}^{(e)} \quad (17-1)$$

ماتریس $[B]$ ، رابطه میان بردار جابجایی گره‌ای $\{\delta\}^{(e)}$ و بردار کرنش المان $\{\varepsilon\}$ را برقرار می‌کند. این ماتریس را ماتریس کرنش-جابجایی می‌نامند که تمام مولفه‌های آن از مختصات گره‌های المان بدست می‌آیند. آنچه مسلم است برای رسیدن به جواب دقیق در المان محدود باید از المان‌های کوچکتری استفاده کرد تا پیوستگی میان جابجایی‌ها حفظ شود.

با جایگذاری معادله (۱۷-۱) در معادلات تنش صفحه‌ای هوک (۱۸-۱)، می‌توان به راحتی روابط تنش را نیز به دست آورد.

$$\begin{cases} \sigma_x = \frac{E}{1-\nu^2}(\varepsilon_x + \nu\varepsilon_y) \\ \sigma_y = \frac{E}{1-\nu^2}(\varepsilon_y + \nu\varepsilon_x) \\ \tau_{xy} = G\gamma_{xy} = \frac{E}{2(1+\nu)}\gamma_{xy} \end{cases} \quad (18-1)$$

$$\{\sigma\} = \begin{Bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \tau_{xy} \end{Bmatrix} = \frac{E'}{1-\nu'^2} \begin{bmatrix} 1 & \nu & 0 \\ \nu & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1-\nu}{2} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \gamma_{xy} \end{Bmatrix} = [D^e]\{\varepsilon\} = [D^e][B]\{\delta\}^e \quad (19-1)$$

ماتریس $[D^e]$ ، ماتریس تنش-کرنش نامیده می‌شود که رابطه میان تنش‌ها و کرنش‌ها را برقرار می‌سازد. این ماتریس برای اجسام الاستیک کاربرد دارد؛ در حالتی که سیستم دارای کرنش اولیه است، مانند کرنش‌های پلاستیک یا کرنش‌های گرمایی، بجای $\{\varepsilon\}$ ، $\{\varepsilon - \varepsilon_0\}$ بکار می‌رود.

اینک نیاز به یک ماتریس سختی است تا بتوان ارتباط میان نیروها و جابجایی‌ها را بدست آورد. در ابتدا $\{P\}^{(e)}$ را به عنوان نیروهای گره‌ای معادل و $\{F\}^{(e)}$ را به عنوان نیروهای وارد به جسم تعریف می‌کنیم.

$$\{F\}^{(e)T} = [F_x, F_y] \quad (20-1)$$

$$\{P\}^{(e)} = [X_{1e}, Y_{1e}, X_{2e}, Y_{2e}, X_{3e}, Y_{3e}] \quad (21-1)$$

در روابط بالا، $\{F\}$ یک بردار ستونی و $\{P\}$ یک بردار سطری را نشان می‌دهند. بالانویس T، علامت ترانپوز یک ماتریس یا بردار می‌باشد.

با استفاده از قانون کار مجازی برای ارضای شرایط مرزی و تعادل، می‌توان نیروهای اعمال شده به

گره‌های المان را به صورت زیر نوشت:

$$\{P\}^{(e)} = [K^{(e)}]\{\delta\}^{(e)} + \{F_{\varepsilon_0}\}^{(e)} + \{F_F\}^{(e)} \quad (22-1)$$

بطوریکه

$$[K^{(e)}] \equiv \iint_D [B]^T [D^e] [B] t \, dx dy = \Delta^{(e)} [B]^T [D^e] [B] t \quad (23-1)$$

$$\{F_{\varepsilon_0}\}^{(e)} \equiv - \iint_D [B]^T [D^e] \{\varepsilon_0\} t \, dx dy \quad (24-1)$$

$$\{F_F\}^{(e)} \equiv - \iint_D [N]^T \{F\}^{(e)} t \, dx dy \quad (25-1)$$

معادله (۲۳-۱)، معادله سختی المان و معادله (۲۴-۱) ماتریس سختی المان نامیده می‌شوند. از آنجایی

که ماتریس‌های $[B]$ و $[D^e]$ در طول المان ثابت می‌باشند، بنابراین می‌توانند از انتگرال خارج شده و

بسادگی به صورت معادله (۱-۲۴) نوشته شوند. نیروهای $\{F_{\varepsilon 0}\}^{(e)}$ و $\{F_F\}^{(e)}$ بترتیب نیروهای ناشی از کرنش‌های اولیه و نیروهای جسمی می‌باشند.

به کمک نرم افزارهای تحلیلی مانند ANSYS و ABAQUS که خود از روش‌های المان محدود استفاده می‌کنند، می‌توان مسائل را سریعتر و با دقت بالاتری تحلیل نمود.

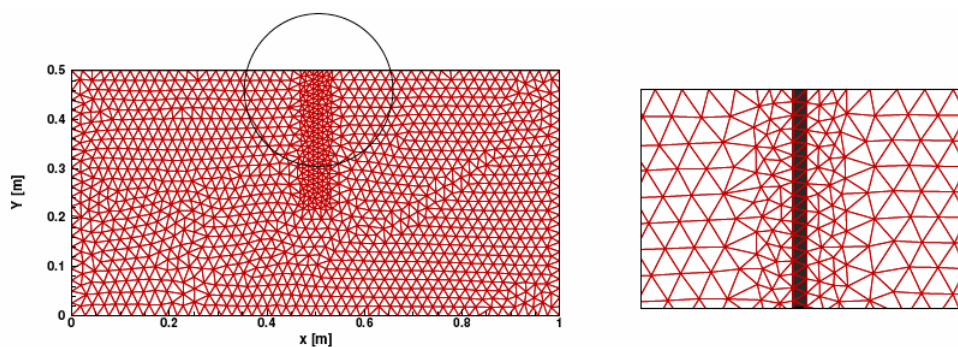
۱-۱-۲ جهان مسو^۳

کلمه مسو از نام یونانی آن به معنای میان دو چیز گرفته شده است [۴]. طبق شکل (۱-۱)، با حرکت از سمت جهان ماکرو به سمت پایین، به جهان مسو خواهیم رسید که برخی روابط و معادلات حاکم در ماکرومقیاس برای اینگونه مسائل به خوبی پاسخگو نیستند. از جمله این مسائل می‌توان به فصل مشترک میان جامد و سیال، انتقال گرما و حرکت جسم حل شونده اشاره کرد. اما یکی از مسائل مهم در مکانیک مسو، مسئله ترک در اجسام می‌باشد. ترک را می‌توان توسط روش‌های مکانیک پیوسته در جهان ماکرو و با در نظر گرفتن یک شکاف تحلیل کرد. اما این نتایج از دقت کافی برخوردار نخواهند بود. در روش‌های عددی معمولاً با کوچکتر کردن المان‌های تشکیل دهنده جسم پیوسته می‌توان به جواب مطلوب رسید. اما چون این کوچک سازی منجر به صرف زمان بیشتری برای حل مسئله خواهد شد، معمولاً از روش چند مقیاسی^۴ استفاده می‌کنند. به عنوان مثال برای حل مسئله ترک شکل (۱-۳)، اطراف ترک را با المان‌های ریزتر و منظم‌تری نسبت به نواحی دور از ترک تقسیم‌بندی می‌کنند؛ یعنی به طور همزمان از روش ماکرومقیاس و مسومقیاس استفاده می‌گردد.

به طور کلی دو روش اساسی برای شبیه‌سازی عددی ترک وجود دارد: ۱- در نظر گرفتن ترک به صورت یک ناپیوستگی میان المان‌های مجاور هم، ۲- در نظر گرفتن ترک به صورت شکاف بر روی [۴]

³ Meso

⁴ Multiscale



شکل (۳-۱): مدل چندمقیاسی ترک شامل مدل مسو(اطراف ترک) و مدل ماکرو(دورتر از ترک) [۴]

یک المان کامل. این دیدگاه‌ها را نیز می‌توان به دو دسته تقسیم کرد: ۱- بکارگیری انواع مدل‌های خاص در FEM، ۲- اعمال خصوصیات ماده‌ای خاص برای ناحیه ترک. همه این روش‌ها در حوزه مکانیک شکست قرار می‌گیرند که اندکی متفاوت از مکانیک پیوسته می‌باشد. در مکانیک شکست، از پارامترهای جدیدی استفاده می‌شود که برگرفته از مفاهیم مکانیک پیوسته است. دلیل اینکه برخی از محققان به وجود چنین جهانی اعتقاد ندارند؛ همین است که آن‌ها این این حیطه از مرزهای ابعادی را در حوزه‌های ماکرو و میکرو قرار داده و تحلیل مسائل در این جهان را توسط روش‌های این دو جهان انجام می‌دهند. بدیهی است که نتایج بدست آمده یا دارای دقت پایین و یا نیازمند زمان زیادی برای تحلیل خواهند بود. اما با توجه به اینکه با پیشرفت علم و نیاز به دقت بالا و زمان اندک برای مدلسازی و شبیه سازی ضروری به نظر می‌رسد، بنابراین وجود چنین جهانی الزامی است.

۳-۱-۱ جهان میکرو^۵

⁵ Micro

با کوچکتر شدن اجسام و در نتیجه کوچکتر شدن پارامترهای فیزیکی مربوط به آنها، نیاز به دقت بالاتری برای حل مسائل خواهیم داشت. در این جهان نیز چون هنوز به ابعاد اتم نرسیده‌ایم، بنابراین می‌توانیم با تغییراندکی در فرضیات خود، از اصول مربوط به جهان ماکرو استفاده کنیم. البته باید به این نکته نیز توجه کرد که تمام پارامترها با حرکت از سمت جهان ماکرو به سمت جهان میکرو، به یک اندازه تغییر نمی‌کنند؛ بنابراین اثرات کوچک‌سازی باید برای تمام پارامترهای مورد نیاز جهت طراحی در نظر گرفته شوند. این موضوع یکی از مسائل مهم در جهان میکرو می‌باشد.

برای ارزیابی یک اثر بر روی یک سیستم به علت کاهش اندازه، ابتدا لازم است که در هندسه سیستم نظر کرده و چارچوبی را برای انجام آن ارزیابی تعریف کنیم. در مباحث این قسمت، یک مقیاس‌بندی همسان از سیستم (تمام ابعاد به طور مساوی کوچک می‌شوند) در نظر گرفته شده است. بعد طول X_0 می‌تواند با یک بعد کوچکتر X_s و توسط یک ضریب مقیاس S ، مقیاس‌بندی شود، به طوری که $0 < S \leq 1$ باشد. همان طور که در معادلات (۱-۲۶) تا (۱-۲۸) مشاهده می‌شود، هندسه طول، مساحت و حجم توسط ضریب مقیاس S ، مقیاس‌بندی شده‌اند.

$$X_s = SX_0 \quad (۱-۲۶)$$

$$A_s = X_s Y_s = S^2 X_0 Y_0 = S^2 A_0 \quad (۱-۲۷)$$

$$V_s = X_s Y_s Z_s = S^3 X_0 Y_0 Z_0 = S^3 V_0 \quad (۱-۲۸)$$

اگر همه مقیاس‌بندی‌ها به صورت خطی باشند (S^0)، اثر کوچک‌سازی، تأثیری بر روی پیش‌بینی‌های ناشی از جهان ماکرو نخواهد داشت. با افزایش درجه کوچک‌سازی، اهمیت نسبی یک پدیده تغییر می‌کند و یا حتی ممکن است به پدیده‌های فیزیکی جدید منتهی شود.

جرم یک جسم، رابطه مستقیمی با حجم آن دارد. بنابراین هنگامیکه اندازه جسم، هزار برابر کاهش می‌یابد (یعنی $S = 10^{-3}$)، حجم و جرم به اندازه 10^{-9} کاهش می‌یابند؛ جرم، یک متغیر بسیار مهم در پدیده‌ها و محاسبات مهندسی به شمار می‌رود.

نسبت‌های هندسی مختلف از جمله نسبت سطح به حجم، در خیلی از زمینه‌های مهندسی بخصوص در دینامیک سیالات و انتقال گرما مهم هستند. نسبت سطح به حجم با معکوس S مقیاس‌بندی می‌شود (معادله ۱-۲۹). بنابراین با کاهش مقیاس سیستم‌ها به مقیاس میکرو، نسبت سطح به حجم سیستم‌ها افزایش می‌یابد، که این موضوع اشاره دارد به اینکه اثرات فیزیکی وابسته به نسبت سطح به حجم، با پیش‌بینی‌های اکتشافی از جهان ماکرو مغایر خواهد بود.

$$A_s/V_s = 1/S(A_0/V_0) \quad (29-1)$$

برای یک سیستم مکانیکی، دو پارامتر اصلی تعریف می‌شود: ۱- جرم، ۲- سفتی^۶. جرم یک جسم همسان، حاصلضرب چگالی در حجم است. بنابراین جرم همانند حجم، با S^3 مقیاس‌بندی می‌شود. همان‌گونه که در معادله (۱-۳۰) مشاهده می‌شود، با کاهش مقیاس سیستم به اندازه S ، مقیاس حجم و جرم با نرخ بیشتری کاهش می‌یابند.

$$M_s = \rho S^3 V_0 = S^3 M_0 \quad (30-1)$$

سفتی یک سیستم مکانیکی، یک کمیت اساسی است که قابلیت تغییرشکل کلی یک سیستم مکانیکی را در برابر نیروی اعمالی، تعریف می‌کند. سفتی K ، معادل نسبت نیروی اعمالی به یک عضو مکانیکی به تغییر مکان ناشی از آن است. سفتی یک اتصال مکانیکی می‌تواند شامل ترکیبی از سفتی‌های تیرها و میله‌ها باشد. شکل (۱-۴) طرحواره‌هایی از تیر و میله با سطح مقطع‌های دایره‌ای را نشان می‌دهد. تیر، عضوی است که در مقابل تغییر مکان ناشی از خمش عرضی مقاومت می‌کند در حالیکه میله، عضوی است

⁶ Stiffness

که در مقابل تغییر مکان محوری مقاومت می‌کند. معادلات (۳۱-۱) و (۳۲-۱) به ترتیب نسبت سفتی را برای یک تیر و میله با سطح مقطع‌های دایره‌ای نشان می‌دهند. نسبت‌های سفتی توسط خصوصیات ماده، E (مدول یانگ)، A (مساحت سطح مقطع) و I (گشتاور لختی سطح) بیان می‌شوند.

$$K_{\text{خمشی}} \propto \frac{EI}{L^3} \propto \frac{EW t^3}{L^3} \propto S \quad (31-1)$$

$$K_{\text{محوری}} \propto \frac{EI}{L} \propto \frac{EW t}{L} \propto S \quad (32-1)$$

میله یکسرگیردار با سطح مقطع دایره‌ای، تحت بارگذاری محوری



تیر یکسرگیردار با سطح مقطع دایره‌ای، تحت بارگذاری عرضی



تیر یکسرگیردار با سطح مقطع دایره‌ای، تحت بارگذاری پیچشی



شکل (۴-۱): طرحواره‌هایی از تیر و میله با سطح مقطع‌های دایره‌ای

در این معادلات I و A توسط تعاریف هندسی و پارامترهای مقیاس‌بندی، جایگذاری شده‌اند. این معادلات نشان می‌دهند که سفتی مکانیکی، نسبت به مقیاس‌بندی سیستم، به صورت خطی کاهش می‌یابد؛ اینک می‌خواهیم برای تیری که تحت پیچش قرار گرفته است، مقیاس‌بندی را انجام دهیم. نسبت سفتی برای چنین تیری به صورت زیر بیان می‌گردد.

$$K_{\text{پیچشی}} = \frac{GJ}{L} \quad (33-1)$$

G مدول برشی، L طول تیر و J گشتاور لختی قطبی است که به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$J = \frac{\pi d^4}{32} \quad (34-1)$$

بنابراین با بیان نسبت سفتی پیچشی به صورت ابعاد هندسی، خواهیم داشت:

$$K_{\text{پیچشی}} \propto \frac{d^4}{L} \quad (35-1)$$

با استفاده از پارامتر مقیاس بندی برای تعیین اثر آن بر روی سفتی، خواهیم داشت:

$$K_{\text{پیچشی}} \propto \frac{(Sd_0)^4}{SL_0} \propto S^3 \quad (36-1)$$

با توجه به معادله (36-1) می توان مشاهده کرد که برخلاف سفتی خمشی و محوری که با S مقیاس بندی می شوند، سفتی پیچشی به صورت S^3 مقیاس بندی می شود.

جرم و سفتی، کمیت های اساسی یک سیستم مکانیکی می باشند؛ اما مقادیر دقیق این کمیتها برای مقایسه سیستم های مکانیکی با یکدیگر، خیلی حیاتی نیستند. فرکانس طبیعی، پارامتری است که نیروهای اینرسی و الاستیک را برای تعریف مستقیم فرکانس نوسان یک سیستم مکانیکی، به هم ارتباط می دهد. این فرکانس نوسان، میزانی از سفتی نسبی یک سیستم مکانیکی است و در طراحی فیلترها و نوسان سازهای مکانیکی با آن مواجه می شویم.

فرکانس طبیعی یک سیستم مکانیکی انتقالی با یک درجه آزادی، به صورت ریشه دوم سفتی بر جرم (معادله 37-1) تعریف می شود.

$$f_n = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} \propto \sqrt{\frac{k}{m}} \propto \sqrt{\frac{S}{S^3}} \propto \frac{1}{S} \quad (37-1)$$

همان طور که مشاهده می شود، پارامترهای مقیاس بندی نیز که برای جرم و سفتی قبلاً بدست آمده بودند، جایگذاری شده اند. بنابراین هنگامی که مقیاس سیستم به اندازه S کاهش می یابد، فرکانس طبیعی بصورت $\frac{1}{S}$ مقیاس بندی می گردد. این به آن معنی است که فرکانس طبیعی با کاهش مقیاس، افزایش می یابد. این اثر به علت آن است که با کاهش اندازه، سفتی کمتر از جرم کاهش می یابد. در نتیجه متوجه

خواهیم شد که وسایل میکرومقیاس در شوک‌های مکانیکی و محیط‌های ارتعاشی، خیلی نیرومندتر (سفت-تر) از همتاهای ماکرومقیاسشان هستند. سنسورهای لخت درجهان میکرو می‌توانند در محیط‌های شوک تا ده هزار برابر شتاب جاذبه، سالم باقی بمانند.

۴-۱-۱ جهان نانو^۷

همزمان با سخنرانی پروفسور فاینمن^۸ فیزیکدان برنده جایزه نوبل در سال ۱۹۵۹ تحت عنوان "آن پایین فضای خالی بسیاری وجود دارد"، نگاه‌ها به سمت جهان نانو معطوف شد [۶]. هرچند او از قوانینی که در این جهان ممکن بود حاکم باشد بی‌اطلاع بود، اما روشهایی را برای دستیابی به این جهان ارائه کرد. او اعتقاد داشت که با رسیدن به این جهان می‌توانیم با دستکاری در اتم‌ها و ملکول‌ها، به مواد جدیدی با قابلیت‌های منحصر به فرد برسیم. گذشت زمان اعتبار سخن فاینمن را به اثبات رساند. او حتی در آن زمان دو جایزه ۱۰۰۰ دلاری نیز در نظر گرفت که اولی برای کسی بود که بتواند موتوری با ابعاد مکعبی ۰/۴ میلیمتری بسازد که قادر به کار کردن باشد و دومی برای کسی که بتواند صفحه‌ای از کتاب را تا ۲۵۰۰۰ برابر کوچکتر کند. یکسال بعد از سخنرانی فاینمن، اولین جایزه اعطا شد؛ اما اعطای جایزه دوم ۲۶ سال به طول انجامید.

در سال ۱۹۸۱ بود که اولین انقلاب بزرگ در نانو تکنولوژی صورت گرفت. میکروسکوپ تونلی روبشی (STM) توسط محققان IBM اختراع گردید که قادر به تصویربرداری در ابعاد نانومتری بود. این اختراع برنده جایزه نوبل ۱۹۸۶ فیزیک شد. چند سال بعد همین محققان IBM توانستند میکروسکوپ دیگری را با عنوان میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) عرضه کنند که قادر به تصویربرداری از اتم‌های منفرد سطح بود و همچنین به علت داشتن نوک هرمی شکل در ابعاد نانومتر قادر به جابجا کردن اتمها نیز بود.

⁷ Nano

⁸ Feynman

در همان زمان یک گروه تحقیقاتی از دانشگاه رایس^۹ به رهبری اسمالی^{۱۰} موفق به کشف ملکول جدیدی به نام فلورون^{۱۱} شدند که دارای خصوصیات منحصر به فردی بود (شکل (۵-۱) الف)). این ملکول از ۶۰ اتم کربن تشکیل یافته است که به شکل کاملاً متقارن تشکیل ساختاری توپ مانند را می‌دهد.

ابعاد این ملکول تقریباً یک نانومتر می‌باشد که ضمن توانایی عبور گرما و الکتروسیسته از خود، محکمتر از فولاد و سبکتر از پلاستیک نیز می‌باشد. جایزه نوبل شیمی در سال ۱۹۸۶ برای این کشف اعطا شد.

هنگامی که نیل آرمسترانگ به ماه قدم گذاشت، بیان کرد که این گام کوچکی برای انسان و یک جهش بزرگ برای بشریت است. نانو می‌تواند جهش بزرگ دیگری برای بشریت باشد؛ اما با یک گام بسیار کوچک در مقایسه با آنچه که نیل آرمسترانگ اندازه منظومه شمسی را در نظر گرفته بود. علم نانو به صورت ساده، مطالعه اصول کلی ملکول‌ها و ساختارهایی می‌باشد که حداقل در یک بعد دارای طول تقریبی ۱ تا ۱۰۰ نانومتر می‌باشند. این ساختارها را به عنوان نانو ساختارها می‌شناسیم. نانوتکنولوژی در واقع کاربرد این نانو ساختارها در وسایل نانومقیاس می‌باشد.

چیزهای کوچکتر از یک نانومتر فقط می‌تواند یک اتم سرگردان یا یک ملکول کوچک شناور در فضا به عنوان یک لکه رقیق کوچک از بخار باشد. بنابراین نانو ساختارها چیزهایی نیستند که تا به حال وجود داشته و به طور تصادفی موفق به ساخت آن‌ها شده‌ایم، بلکه چیزهایی هستند که قادر به ساخت آن‌ها هستیم.

در نانومقیاس، بیشتر خصوصیات اساسی مواد و ماشین‌ها به اندازه‌شان وابسته هستند که در سایر مقیاس‌ها اینگونه نیست. به عنوان مثال، یک سیم نانومقیاس یا اجزای مداري لزوماً از قانون اهم پیروی نمی‌کنند. درست است که قانون اهم به جریان، ولتاژ و مقاومت مربوط است؛ اما مفهوم اصلی آن به الکترون‌های شناور در طول یک سیم بستگی دارد. اگر یک سیم فقط به پهنای یک اتم باشد، آنگاه الکترون‌ها نیازمند

⁹ Rice

¹⁰ Smalley

¹¹ Fullerene

پیمودن سیم به صورت تک به تک هستند. این ارتباط اندازه با خصوصیات اساسی فیزیکی، شیمیایی و الکتریکی، کلید اصلی علم نانو می‌باشد.

یک تعریف مختصر و خوب از علم نانو و نانوتکنولوژی که خصوصیات خاص نانومقیاس را در بر می‌گیرد، از سند ملی علوم بنیادی که توسط مایک راکو^{۱۲} در سال ۲۰۰۱ منتشر شده است:

یک نانومتر (یک میلیاردیم متر) یک نقطه جادویی در مقیاس ابعادی می‌باشد. نانوساختارها پیوندگاه کوچکترین وسایل ساخته شده بدست بشر و بزرگترین ملکول‌های زنده اشیا می‌باشند.

اندازه‌ای که از نظر کاربردی بسیار شگفت‌انگیز می‌باشد، از ۱۰۰ نانومتر پایین‌تر می‌باشد. زیرا در این بازه است که مواد می‌توانند خصوصیات منحصر به فردی را نسبت به همان مواد در اندازه بزرگتر از خود نشان دهند. دو دلیل اصلی برای این رفتار وجود دارد: یکی افزایش نسبت سطح و دیگری حکمفرما شدن اثرات کوانتوم. به عنوان مثال، یک ذره به اندازه ۳۰ نانومتر، ۵٪ از اتم‌هایش در سطح است، در اندازه ۱۰ نانومتر، ۲۰٪ و در اندازه ۳ نانومتر، ۵۰٪ اتم‌ها در سطح هستند. با کوچکتر شدن، اثرات کشش سطحی نیز مهم می‌شوند که بر روی خواص فیزیکی و شیمیایی اثر می‌گذارند. این اثرات می‌توانند کنترل اتم‌ها یا ملکول‌های مجزا را به شدت مشکل سازد.

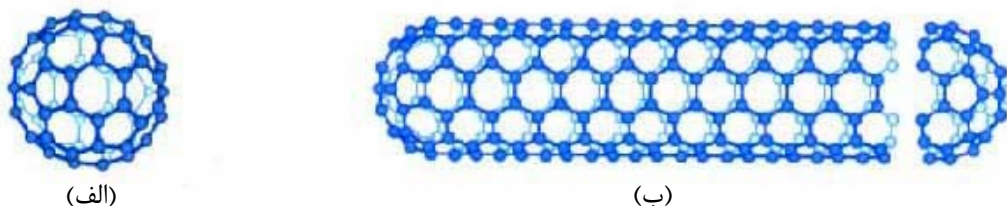
در سال ۱۹۹۱ یک محقق ژاپنی با نام ایجیما^{۱۳} در طی یکی از آزمایشات خود به طور کاملاً تصادفی نانولوله‌های کربنی را کشف نمود. نانولوله‌های کربنی دارای ساختاری شبیه فلورون هستند که کشیده شده و به صورت لوله درآمده‌اند (شکل (۱-۵) (ب)). این نانولوله‌ها، یک ششم فولاد وزن و صد برابر آن استحکام دارند. بحث مفصل در مورد نانولوله‌های کربنی را به فصول بعدی موقوف می‌کنیم.

با کشف نانولوله‌های کربنی، زمینه علمی برای محققان فراهم شد که به بررسی خواص این نانولوله‌ها به روشهای تئوری نیز پردازند. این نیاز با بکارگیری مداوم نانولوله‌های کربنی در وسایل مختلف بیشتر

¹² Mike Roco

¹³ Iijima

احساس شد. با توجه به اینکه برخلاف حالت پیوسته، برهمکنش‌های اتمی در تحلیل مواد در ابعاد نانو باید در نظر گرفته شوند؛ بنابراین مدل‌سازی در جهان نانو دارای پیچیدگی بیشتر و نیازمند وقت و هزینه بیشتری است.



شکل (۱-۵): طرحواره ای از (الف) فلورون (ب) نانولوله کربنی

۱-۱-۴ روش‌های مدل‌سازی در جهان نانو

روش‌های مختلفی برای مدل‌سازی و شبیه‌سازی در جهان نانو وجود دارد. سه روش عمده برای مدل‌سازی مولکولی وجود دارد:

روش‌های پایه (آب‌نیشیو^{۱۴}): این روش، دقیق‌ترین روش تحلیلی است که مبتنی بر تئوری اصول پایه‌ای چگالی عملکرد می‌باشد. این روش شامل حل معادلات شرودینگر برای هر الکترون در میدان پتانسیل حاصل از الکترون‌های دیگر و هسته می‌باشد. سه شاخه اصلی در این روش وجود دارد که عبارتند از: محاسبات نقطه تکین: شامل تعیین و محاسبه انرژی و توابع موج برای یک هندسه خاص.

بهینه‌سازی هندسی: از این روش برای تعیین انرژی و توابع موج برای یک هندسه اولیه و هندسه‌های متعاقب آن که دارای کمترین سطوح انرژی می‌باشند، استفاده می‌گردد.

محاسبات فرکانس: این روش برای پیش‌بینی شدت پرتو مادون قرمز و رامان برای یک سیستم مولکولی بکار برده می‌شود.

مونت کارلو^{۱۵} (MC): این روش خود به چهار دسته تقسیم می‌شود:

¹⁴ Ab initio

روش کلاسیک مونت کارلو: این روش شامل تشکیل نمونه‌هایی از روی توزیع احتمال، برای بدست آوردن خواص ترمودینامیکی یا ساختارهای با کمترین میزان انرژی می‌باشند.

روش کوانتوم مونت کارلو: از حرکت به صورت تصادفی برای محاسبه انرژی‌های مکانیک کوانتوم و توابع موج برای حل مسائل ساختارهای الکترونی استفاده می‌گردد که اغلب از معادلات شرودینگر به عنوان نقطه شروع استفاده می‌نماید.

مونت کارلو حجمی: در این روش از تولید اعداد تصادفی برای تعیین حجم هر اتم و یا تحلیل‌های هندسی استفاده می‌گردد.

مونت کارلو سینتیک: این روش از شبیه‌سازی فرایند با استفاده از پارامترهای مقیاس‌گذاری جهت رسیدن به مقیاس‌های زمانی بهره می‌گیرد.

دینامیک مولکولی (MD): این روش بهترین روش برای محاسبه خواص مکانیکی و همچنین خواص توده ای از ماده نانومتری می‌باشد. مدلسازی حرکت یک اتم یا ملکول را می‌توان با حل توابع موج ذرات زیر اتمی (معادله (۱-۳۸)) با دقت بسیار بالایی بدست آورد.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + U(x, y, z)\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z) \quad (38-1)$$

اما روش مکانیک کوانتوم (QM) نیاز به برنامه‌نویسی بسیار پیچیده و در نتیجه توان محاسباتی بالا دارد. به جای استفاده از مکانیک کوانتوم ما می‌توانیم از مکانیک کلاسیک نیوتن استفاده کنیم. این روش بسیار ساده‌تر از روش مکانیک کوانتوم خواهد بود، و بنابراین دقت نیز متعاقبا کاهش خواهد یافت. برای حل این مشکل، از روش شبیه‌سازی دینامیک ملکولی سود می‌بریم که در آن اعداد بدست آمده از معادلات کوانتوم را به عنوان ثابت در معادلات کلاسیک خود استفاده می‌کنیم. این روش اولین بار در سال ۱۹۳۶ و

¹⁵ Monte carlo

در حوزه شیمی توسط آیرینگ^{۱۶} بکار گرفته شد. و بعدها در سال ۱۹۵۳ برای اولین بار در حوزه مکانیک آماری توسط تِلر^{۱۷} استفاده گردید.

جزئیات بیشتر روش‌های متداول بالا در فصل سوم به طور کامل مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

فصل دوم:

نانولوله‌های کربنی

¹⁶ Eyring

¹⁷ Teller

مقدمه

کربن یکی از معروفترین و کارآمدترین عناصر در ساخت ترکیبات مختلف است. کلمه کربن از کلمه لاتین به نام "کربو"^{۱۸} گرفته شده است که رومی‌ها آن را زغال چوب می‌نامند [۷]. 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)، یکی از بهترین جذب‌کننده‌های گاز (زغال فعال شده) و یکی از بهترین موانع گاز هلیوم (کربن شبه شیشه‌ای) بدست می‌آیند.

توانایی یک عنصر در ترکیب با اتم‌هایش برای ایجاد آلوتروپ، 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 به صورت گسترده تغییر کنند. به عنوان نمونه، الماس یکی از سخت‌ترین مواد شناخته شده و گرافیت یکی از نرم‌ترین آن‌ها می‌باشد. الماس در طیف مرئی، شفاف درحالیکه گرافیت غیرشفاف است؛ الماس یک عایق الکتریکی درحالیکه گرافیت یک هادی الکتریکی می‌باشد.

¹⁸ Carbo

از آلوتروپ‌هایی که اخیراً به این آلوتروپ‌ها اضافی شده‌اند، فلوروئن و نانولوله‌های کربنی می‌باشند. در حالت پیوندزنی sp^2 ^{۱۹} کربن، ساختارهای دوبعدی ایجاد می‌شود. یکی از ساختارهای بسیار معروف از این نوع پیوندزنی کربنی، گرافیت می‌باشد. از دیگر آلوتروپ‌های شناخته شده، الماس است که دارای پیوندزنی sp^3 می‌باشد. صفحات دوبعدی حاصل از پیوندزنی sp^2 می‌توانند به راحتی پیچیده شوند و شکل لوله‌ای به خود بگیرند.

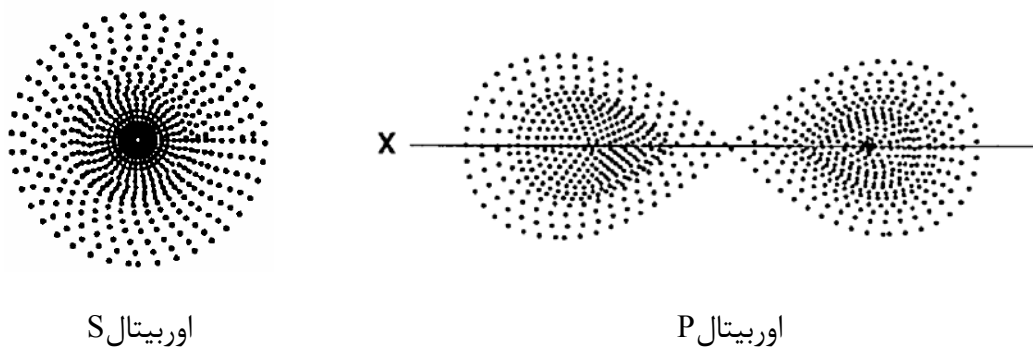
۱-۲ اوربیتال‌های کربن حالت پایه

اوربیتال‌های کربن در حالت پایه را می‌توان به طور گرافیکی به صورت شکل (۱-۲) تصور کرد. محاسبات تابع موج، اوربیتال S را به صورت یک گره با لکه‌های تیره یا لبه فازی که مشخصه همه اوربیتال‌ها می‌باشد، معرفی می‌کند. چون این اوربیتال به صورت گره است، بنابراین مستقل از جهت‌گیری می‌باشد. اوربیتال ۲P را می‌توان به صورت یک دمبل کشیده شده که حول محورش متقارن و وابسته به جهت‌گیری است، معرفی کرد.

۱-۱-۲ اوربیتال مرکب sp^3 کربن

برای توجیه تقارن چهاروجهی ساختارهایی مانند الماس و متان، ساختار اتم کربن باید به جای دو الکترون ظرفیت با چهار الکترون ظرفیت در تعادل قرار گیرد؛ بطوری که هر کدام در اوربیتال مجزا و اسپین آزاد از الکترون‌های دیگر باشند. این تعادل ناشی از تشکیل اوربیتال‌های اتمی مرکب است که در آن، چیدمان الکترون‌های لایه

¹⁹ Hybridization



شکل (۱-۲): طرح کلی نمایش اوربیتال های S و P [۸]

L اتم در حالت پایه اصلاح شده است. به طوریکه همانند شکل (۲-۲)، یکی از الکترون های ۲S به اوربیتال بالاتر ۲P ارتقاء می یابد.

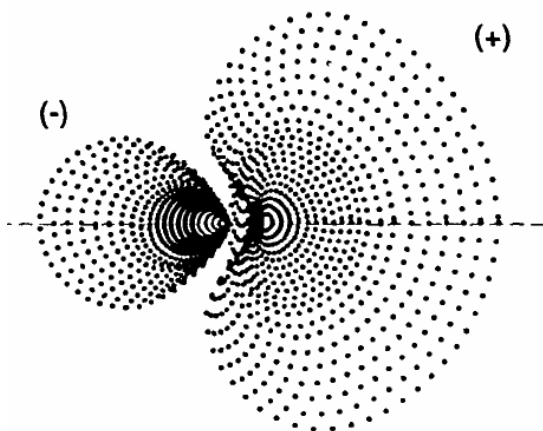
k shell Electrons	L shell Electrons			
1s	2s	2p _x	2p _y	2p _z
↑ ↓	↑ ↓	↓	↓	
Sp³ Hybridization ↓				
1s	2sp ³	2sp ³	2sp ³	2sp ³
↑ ↓	↑ ↓	↓	↓	↓

شکل (۲-۲): پیوندزنی sp³ اوربیتال های کربن (قسمت های هاشورخورده الکترون های ظرفیت و پیکان ها جهت اسپین الکترون را نشان می دهند) [۸]

این اوربیتال‌های جدید را اوربیتال‌های مرکب می‌نامند؛ زیرا ترکیبی از اوربیتال‌های $2S$ و $2P$ هستند. این اوربیتال‌ها را به علت تشکیل یافتن از یک اوربیتال S و دو اوربیتال P ، به صورت sp^3 نامگذاری می‌کنند. همان‌گونه که در شکل (۳-۲) مشاهده می‌شود، اوربیتال sp^3 ، یک اوربیتال نامتقارن است؛ به طوری که حجم بیشتر آن در یک سمت اوربیتال متمرکز شده است.

۲-۱-۲ پیوند کوالانسی sp^3 کربن

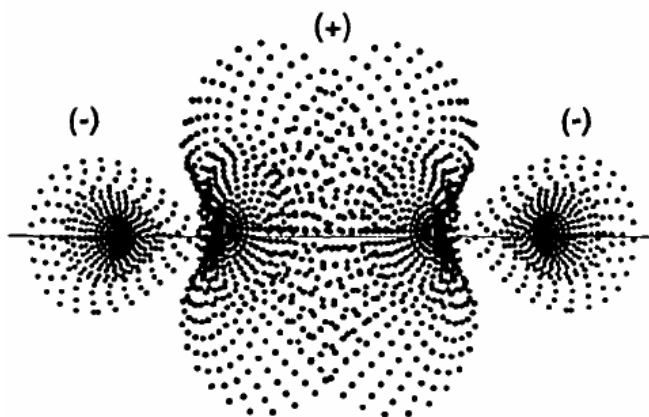
همان‌گونه که قبلاً ذکر شد، پیوندهای کربن به صورت کوالانسی هستند و در این حالت از پیوند sp^3 اتم‌ها یک جفت الکترون به اشتراک می‌گذارند. چهار الکترون ظرفیت sp^3 از اتم کربن مرکب به همراه بخش



شکل (۳-۲): طرح کلی یک اوربیتال sp^3 [۸]

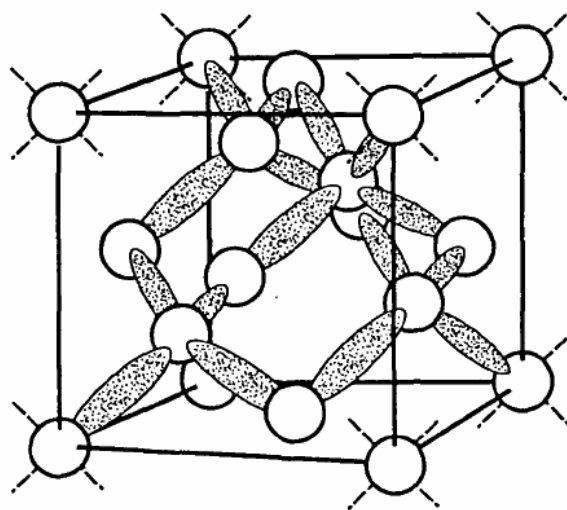
کوچکی از اتم، منجر به پیوندهای کوالانسی قوی می‌گردد. عدم تقارن شدید اوربیتال sp^3 باعث یک همپوشانی قابل توجه و یک پیوند محکم در هنگام ترکیب اتم با اوربیتال sp^3 از اتم دیگر می‌گردد. تمرکز این الکترون‌های پیوندی میان هسته، دافعه هسته‌ها را کاهش داده و جاذبه میان آن‌ها را افزایش می‌دهد.

این تشکیل پیوند در شکل (۲-۴) نشان داده شده است. به طور قراردادی، این پیوند را پیوند سیگما (σ) می‌نامند.



شکل (۲-۴): پیوند اوربیتال مرکب sp^3 (پیوند سیگما) به همراه پیوند کوالانسی [۸]

شکل (۲-۵)، ساختار چهاروجهی از اتم کربن پیوند زده شده با چهار اتم دیگر را نشان می‌دهد. این ساختار، اساس کریستال الماس می‌باشد. زوایای میان پیوندهای کوالانسی در این حالت $109^\circ 28'$ می‌باشد که یک مقدار متوسط است و به طور مداوم در اثر ارتعاشات گرمایی تغییر می‌کند. انرژی پیوند سیگما و طول پیوند، بسته به نوع اتمی که به کربن اضافه می‌شود، متغیر است. جدول ۱-۲، انرژی پیوند و طول پیوند جفت‌های کربن را نشان می‌دهد. انرژی پیوند در واقع انرژی موردنیاز برای شکستن یک مول پیوند می‌باشد. همین مقدار انرژی یکسان نیز هنگام تشکیل پیوند آزاد می‌گردد.



شکل (۵-۲): نمایش سه بعدی پیوند کوالانسی sp^3 (ساختار الماس) [۸]

۳-۱-۲ اوربیتال سه وجهی sp^2

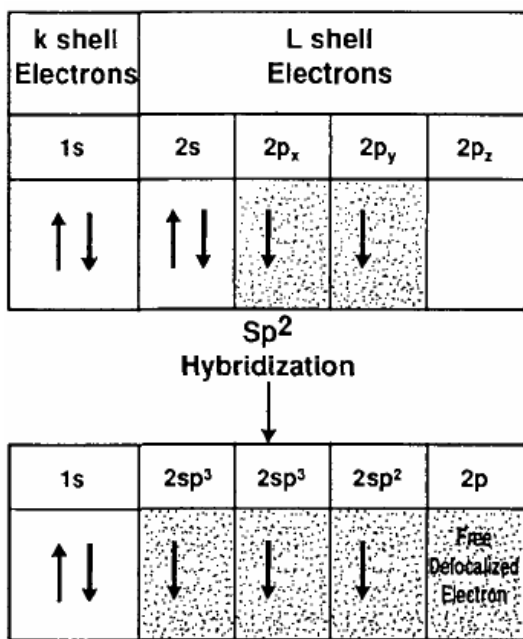
علاوه بر اوربیتال‌های چهارگوش sp^3 ، دو اوربیتال دیگر نیز وجود دارند که ساختمان الکترونیکی آلوتروپ-های کربن را کامل می‌کنند (sp^2 و sp). در حالیکه اوربیتال sp^3 اساس ساختارهای الماس و آلیفاتیک^{۲۰} می‌باشد، اوربیتال sp^2 اساس ساختارهای گرافیت و آروماتیک^{۲۱} است. مکانیزم پیوندزنی sp^2 اندکی متفاوت از پیوندزنی sp^3 است. چیدمان الکترون‌های لایه L اتم، در حالت پایه اصلاح شده است؛ به طوریکه همانند شکل (۶-۲)، یکی از الکترون‌های $2s$ به اوربیتال بالاتر $2p$ ارتقاء می‌یابد و یک اوربیتال P به صورت آزاد باقی می‌ماند. این اوربیتال‌های مرکب جدید را اوربیتال sp^2 می‌نامند. همانگونه که در شکل (۷-۲) مشاهده می‌شود، این سه اوربیتال یکسان sp^2 در یک صفحه و در دورترین حالت ممکن یعنی زاویه 120° درجه نسبت به یکدیگر قرار دارند.

²⁰ Aliphatic

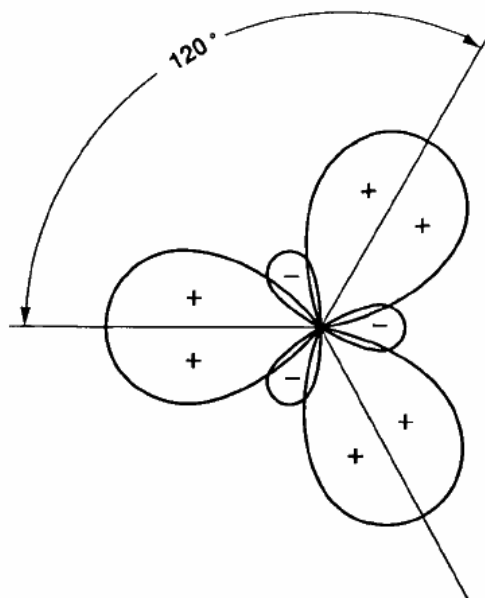
²¹ Aromatic

جدول ۲-۱: انرژی و طول پیوندهای کربن [۸]

نوع پیوند	نوع اوربیتال	انرژی پیوند		طول پیوند (نانومتر)
		<i>KJ/mole</i>	<i>Kcal/mole</i>	
$C - C$	sp^3	۳۷۰	۸۸	۰/۱۵۴
$C = C$	sp^2	۶۸۰	۱۶۲	۰/۱۳
$C \equiv C$	sp	۸۹۰	۲۱۳	۰/۱۲
$C - H$	sp^3	۴۳۵	۱۰۴	۰/۱۰۹
$C - Cl$	sp^3	۳۴۰	۸۱	۰/۱۱۸
$C - N$	sp^3	۳۰۵	۷۳	۰/۱۱۵
$C - O$	sp^3	۳۶۰	۸۶	۰/۱۱۴



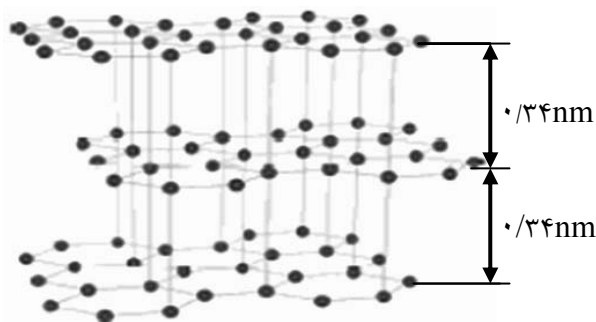
شکل (۲-۶): پیوندزنی sp^2 اوربیتال‌های کربن [۸]



شکل (۲-۷): برش دوسطحی اوربیتال مرکب sp^2 از اتم‌های کربن [۸]

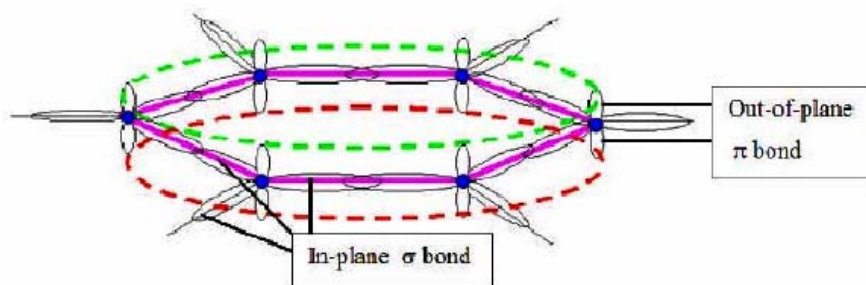
۴-۱-۲ پیوند کوالانسی sp^2 کربن

همانند پیوند sp^3 ، پیوند sp^2 نیز کوالانسی است. این پیوند به علت سه الکترون ظرفیت sp^2 و نیز اندازه کوچک اتم، یک پیوند قوی می‌باشد. همپوشانی میان اوربیتال‌های sp^2 همانند sp^3 می‌باشد؛ با این تفاوت که طول پیوند کوتاهتر و انرژی پیوند بالاتر است (جدول ۲-۱). همانند اوربیتال sp^3 ، اوربیتال sp^2 نیز وابسته به جهت‌گیری بوده و پیوند ناشی از آن، پیوند سیگما نامیده می‌شود. هر اتم کربن پیوندزنی شده توسط اوربیتال sp^2 با سه اتم کربن پیوندزنی sp^2 برای تشکیل یک سری ساختارهای شش وجهی ترکیب می‌شود که همه آن‌ها بر روی صفحات موازی یکدیگر قرار دارند (شکل ۲-۸).



شکل (۲-۸): ساختار سه بعدی گرافیت [۷]

همانگونه که در شکل (۲-۹) مشاهده می‌شود، چهارمین والانس که الکترون غیرمستقر آزاد است، به صورت عمود بر صفحه پیوندهای سیگما قرار می‌گیرد. برخلاف اوربیتال سیگما، این اوربیتال غیرمتقارن است و به طور قراردادی آن را اوربیتال پای (π) می‌نامند. در یک ساختار sp^2 مانند گرافیت، الکترون‌های غیرمستقر می‌توانند به راحتی از یک طرف صفحه پیوندهای سیگما به طرف دیگر آن حرکت کنند؛ اما نمی‌توانند از یک لایه به لایه دیگر جابجا شوند. بنابراین گرافیت ناهمسانگرد است. ساختار گرافیت در ادامه بیشتر مورد بررسی قرار خواهد گرفت.



شکل (۲-۹): طرح کلی پیوندهای سیگما و پای در پیوندزنی sp^2 [۸]

۱-۴-۱-۲ گرافیت

گرافیت یکی از آلوتروپ‌های کربن می‌باشد که اولین بار توسط گاتلاب ورنر^{۲۲} در سال ۱۷۸۹ به علت کاربرد آن در مداد، از نام یونانی‌اش گرفته شده است [۸]. برخلاف الماس (دیگر آلوتروپ کربن)، گرافیت هادی الکتریسیته و یک شبه فلز می‌باشد که می‌تواند به عنوان الکتروود در لامپ‌های قوسی مورد استفاده قرار گیرد. با وجود اینکه تاکنون کاربردهای مختلف زیادی از گرافیت بدست آمده است اما همه آن‌ها در یک مورد مشترک هستند: همه آن‌ها از پیوندهای sp^2 تشکیل یافته‌اند.

همانگونه که در شکل (۲-۸) مشاهده گردید، ساختار گرافیت از یک سری صفحات موازی که توسط پیوندهای پای با یکدیگر مرتبط هستند، تشکیل یافته است. دواپر توپر کوچکی که در شکل مشاهده می‌شود، اندازه واقعی اتم‌های کربن نمی‌باشد و بدیهی است که هر اتم کربن با اتم مجاور خود دارای همپوشانی است. پیوندهای سیگما دارای طول پیوند کوتاه (0.142 نانومتر) و استحکام بالا (524 KJ/mol) می‌باشند. الکترون‌های ظرفیت چهارم با سایر الکترون‌های غیرمستقر از لایه مجاور توسط پیوند بسیار ضعیفتر و اندروالس (7 KJ/mol) جفت می‌شوند. فاصله میان صفحات لایه‌ای در گرافیت نسبتاً زیاد و معادل 0.34 نانومتر است. این فاصله بیشتر از دو برابر فاصله میان دو اتم در یک صفحه و در حدود دو برابر شعاع واندروالس اتم کربن می‌باشد.

۲-۲ نانولوله‌های کربنی

۱-۲-۲ وضعیت پیوندها در نانولوله‌های کربنی

مکانیزم پیوندها در نانولوله‌های کربنی بسیار شبیه گرافن^{۲۳} می‌باشد. عدد اتمی کربن ۶ است و از نقطه نظر فیزیک اتمی، ساختار الکترونیکی این اتم $1s^2 2s^2 2p^2$ می‌باشد. کوچکترین ساختار واحد تشکیل‌دهنده یک نانولوله کربنی، حلقه‌ای متشکل از شش اتم کربن می‌باشد. در این فرآیند، یک اوربیتال S و دو

²² Gottlob Werner

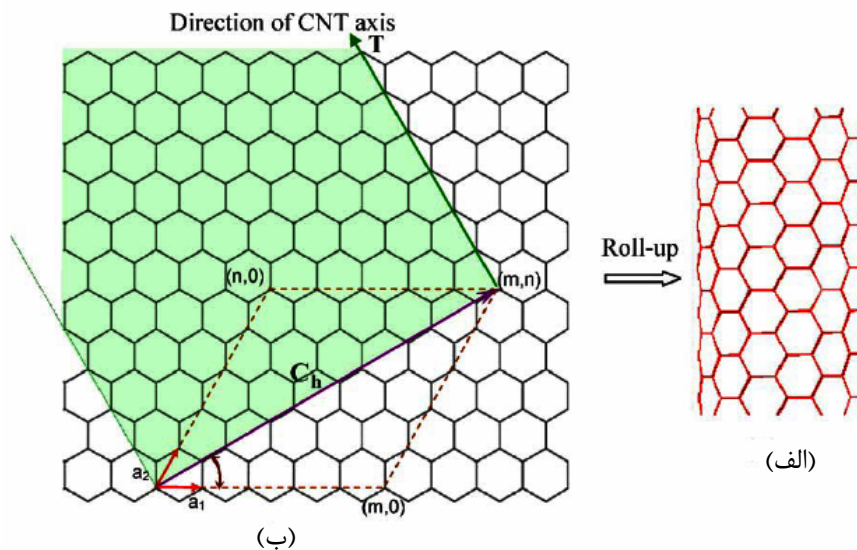
²³ Graphene

اوربیتال P با یکدیگر ترکیب می‌شوند تا سه اوربیتال ترکیبی sp^2 که نسبت به هم زاویه 120° درجه دارند را در یک صفحه ایجاد کنند. این پیوند داخل صفحه‌ای را پیوند سیگما می‌نامند. این پیوند کوالانسی قوی، علت اصلی سختی و استحکام بالای نانولوله‌های کربنی می‌باشد. اینک یک اوربیتال P که عمود بر صفحه سیگما است، باقی می‌ماند. این پیوند که اصولاً در برهمکنش‌های بین لایه‌ای شرکت می‌کند، به عنوان پیوند پای (π) شناخته می‌شود. این پیوند خارج صفحه‌ای با پیوند پای لایه‌های مجاور برهمکنش می‌کند. این پیوندهای غیر مستقر بسیار ضعیف می‌باشند و بیشتر در بررسی خصوصیات خارج صفحه‌ای مانند سفتی خمشی دیواره نانولوله مهم می‌شوند.

۲-۲-۲ ساختار نانولوله‌های کربنی

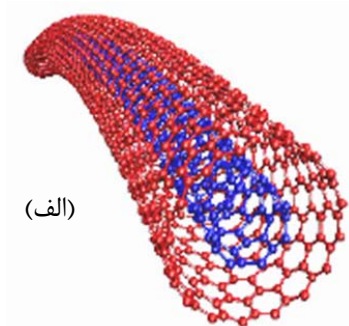
نوع ساختار الکترونیکی نانولوله‌های کربنی در علم مواد منحصر به فرد می‌باشد؛ به طوریکه یک تغییر کوچک در ساختار لوله تعیین می‌کند که آیا آن فلزی است یا نیمه هادی. رسانایی در نانولوله‌های تک دیواره، تابع ساختار الکترونیکی ناشی از ترکیب شاخص‌های m و n می‌باشد؛ اما در نانولوله‌های چند دیواره این موضوع کمی پیچیده خواهد شد. به این علت که رسانایی در نانولوله‌های چند دیواره توسط چندین لایه صورت می‌گیرد.

معمولاً برای مدل‌سازی و درک بهتر از ساختار نانولوله‌های کربنی، فرض می‌کنند که این نانولوله‌ها از پیچیده شدن یک گرافن تشکیل یافته‌اند (شکل ۲-۹). در واقع نانولوله‌ها در زمان تشکیل به صورت لوله‌ای بوجود می‌آیند و همانطور که در شکل مشاهده می‌شود، توسط یک سرپوش نیمکره شبه فلورون بسته شده‌اند.

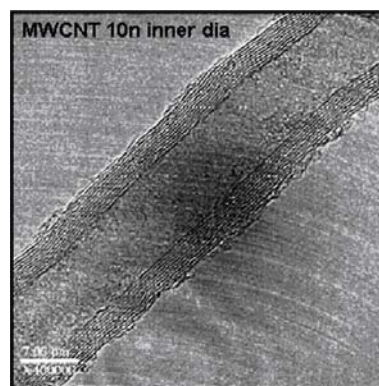


شکل (۲-۱۰): تشکیل نانولوله کربنی (الف) توسط لوله کردن یک گرافن (ب) [۸]

اگر نانولوله از یک لایه گرافن لوله شده تشکیل یافته باشد، به آن نانولوله تک دیواره و اگر از چند لایه گرافن لوله شده هم‌مرکز تشکیل یافته باشد، به آن نانولوله چند دیواره اطلاق می‌گردد (شکل (۲-۱۰)). فاصله میان نانولوله‌ها در یک دسته نانولوله یا فاصله میان دیواره‌های یک نانولوله تک دیواره تقریباً معادل 0.34 نانومتر یعنی 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.



(ب)



شکل (۲-۱۱): طرحواره‌ای از یک نانولوله دو دیواره (الف) تصویر از یک نانولوله ده دیواره توسط SEM (ب) [۹]

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 (۲-۱۱) 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^{۲۴} معروف است، بیان می‌شود. این بردار می‌تواند به صورت یک ترکیب خطی از بردارهای انتقال واحد در شبکه شش وجهی تعریف شود [۹]:

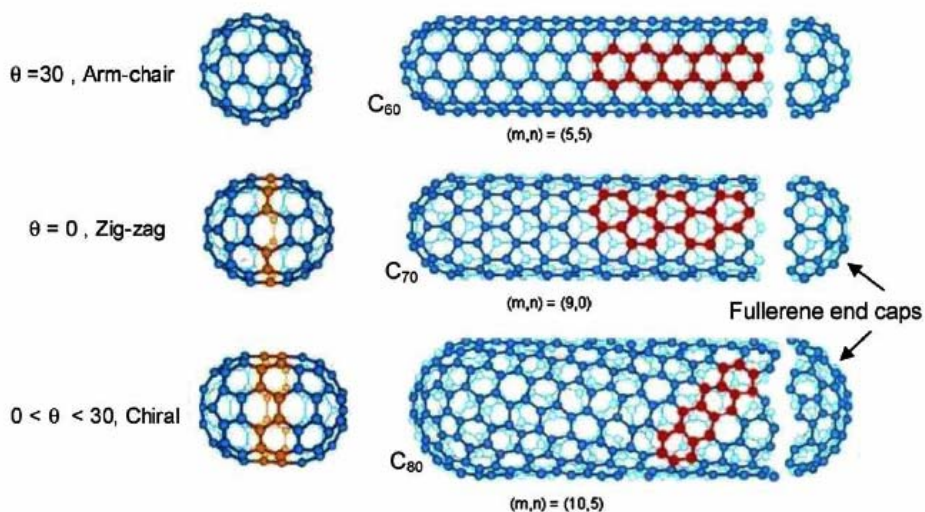
$$C_h = ma_1 + na_2 \quad (۱-۲)$$

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:

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

جدول ۲-۲ پارامترهای مربوط به ساختارهای مختلف نانولوله‌های کربنی را نشان می‌دهد.



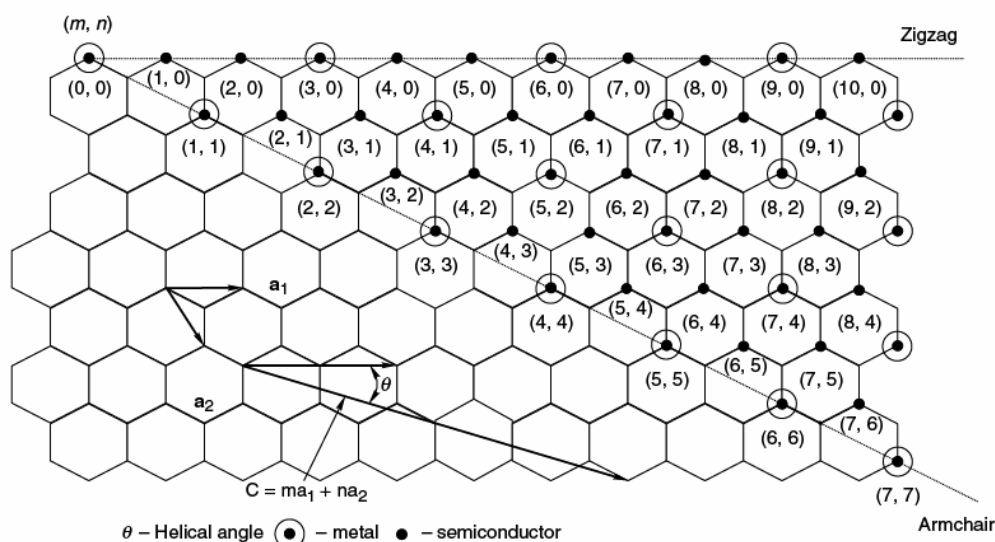
²⁴ Chiral

شکل (۲-۱۲): سه نوع ساختار مختلف نانولوله‌های کربنی [۹]

برای درک بیشتر نانولوله‌های با ساختار و ابعاد مختلف و همچنین نام‌گذاری آن‌ها، در شکل (۲-۱۲) برخی از نانولوله‌ها که با شاخص‌های مختلف می‌توانند ایجاد شوند، نشان داده است.

جدول ۲-۲: پارامترهای ساختارهای مختلف نانولوله‌های کربنی [۹]

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)	$0 < \theta < 30$	$\frac{a_0 \sqrt{m^2 + mn + n^2}}{\pi}$



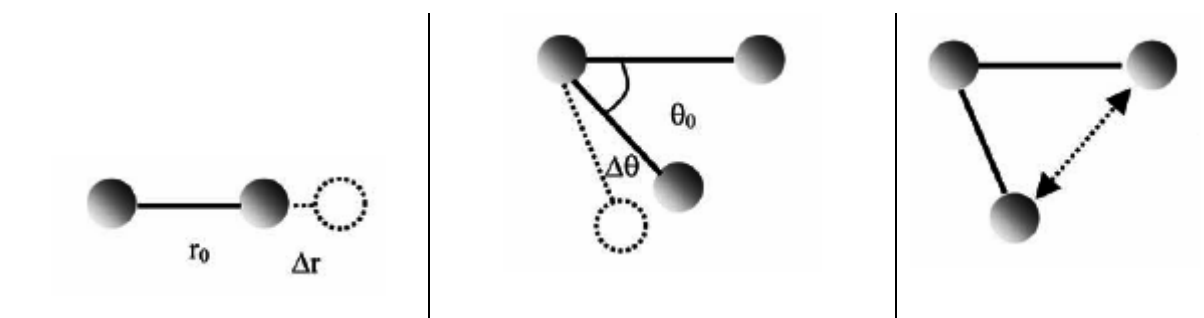
شکل (۲-۱۳): چند نمونه از شاخص‌های مختلف برای تشکیل نانولوله‌های کربنی [۷]

۳-۲-۲ برهمکنش‌ها و پتانسیل‌های موجود در نانولوله‌های کربنی

از نقطه نظر مکانیک ملکولی، یک نانولوله کربنی را می‌توان به صورت یک ملکول بزرگ شامل اتم‌های کربن در نظر گرفت و هسته‌های اتمی می‌توانند به عنوان نقاط در ماده باشند. حرکت این اتم‌ها با یک میدان نیرویی که ناشی از برهمکنش هسته-الکترون و برهمکنش هسته-هسته است، مرتبط می‌باشد [۱۰]. معمولاً میدان نیرو به صورت یک انرژی پتانسیل فضایی در نظر گرفته می‌شود. این انرژی پتانسیل فقط وابسته به حرکت نسبی هسته‌های اتمی تشکیل دهنده ملکول می‌باشد. به طور کلی انرژی پتانسیل فضایی کل را به صورت زیر بیان می‌کنند [۱۴].

$$U_{total} = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum U_\phi + \sum U_\omega + \sum U_{vdw} + \sum U_{el} \quad (3-2)$$

که در آن U_r ، ناشی از برهمکنش کشش پیوند^{۲۵}، U_θ ناشی از برهمکنش خمش زاویه‌ای پیوند^{۲۶}، U_ϕ ناشی از برهمکنش پیچش دوسطحی پیوند^{۲۷}، U_ω ناشی از برهمکنش پیچش خارج صفحه‌ای^{۲۸}، U_{vdw} ناشی از برهمکنش واندروالس^{۲۹} و U_{el} ناشی از برهمکنش الکترواستاتیک^{۳۰} بین اتم‌ها می‌باشد. چهار پتانسیل اول مربوط به برهمکنش‌های پیوندی در اتم می‌شوند و پتانسیل‌های واندروالس و الکترواستاتیک مربوط به برهمکنش‌های غیر پیوندی هستند (شکل (۳-۲)).



²⁵ Stretching bond

²⁶ Bending bond

²⁷ Dihedral angle torsion

²⁸ Out-of-plane torsion

²⁹ Van der waals

³⁰ Electrostatic

کشش	خمش	واندروالس
پیچش	پیچش خارج صفحه‌ای	الکترواستاتیک

شکل (۲-۱۴): انواع برهمکنش‌های موجود در نانولوله کربنی

نشریات بسیار زیادی در زمینه مکانیک ملکولی وجود دارند که روشهای دستیابی به توابع هر یک از پتانسیل‌های فوق را ارائه کرده‌اند [۱۱-۱۳]. از اینرو بسته به نوع ماده و شرایط بارگذاری در نظر گرفته شده، توابع پتانسیل مختلفی به کار می‌رود. معمولا به دلیل آنکه برهمکنش‌های واندروالس و الکترواستاتیک در مقابل سایر برهمکنش‌ها ضعیف‌تر می‌باشند، برای سیستم‌های کوالانسی از دو پتانسیل واندروالس و الکترواستاتیک صرف‌نظر می‌گردد. در ادامه به بررسی هر یک پتانسیل‌های فوق به صورت جداگانه می‌پردازیم.

۱-۳-۲-۲ برهمکنش کشش پیوند

این برهمکنش یک برهمکنش پیوندی می‌باشد که از دور و نزدیک شدن دو اتم در راستای پیوند ناشی می‌شود. این برهمکنش، قوی‌ترین برهمکنش در سیستم‌های کوالانسی محسوب می‌شود. پتانسیل‌های مختلفی در نشریات گوناگون برای این پتانسیل ارائه گردیده است. یکی از پتانسیل‌های بسیار معروف که اخیراً به علت سادگی و دقت قابل قبول آن مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته است، پتانسیل مورس^{۳۱} اصلاح شده می‌باشد [۱۴]:

$$U_r = D_e \{ [1 - e^{-\beta(r-r_0)}]^2 - 1 \} \quad (۴-۲)$$

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:

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

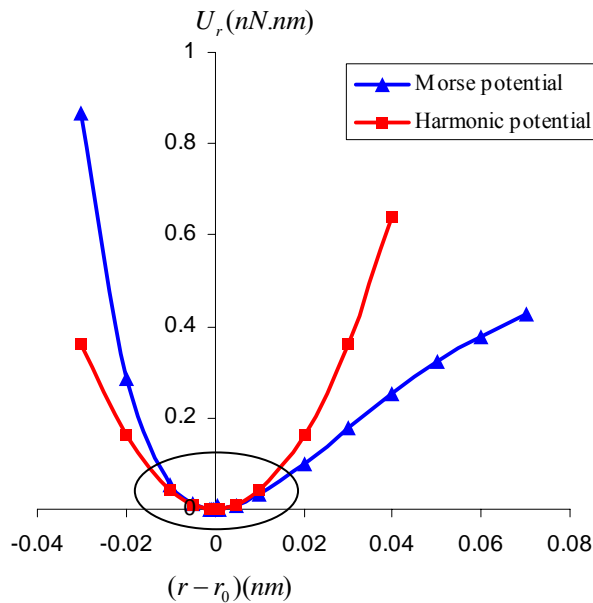
پارامترهای فوق برای یک انرژی تفکیک ۱۲۴ Kcal/mol می‌باشند.

همانگونه که در شکل (۱۴-۲) مشاهده می‌شود، در جابجایی‌های کوچک می‌توان رفتار کشش پیوند را خطی فرض نمود و از پتانسیل هارمونیک زیر استفاده کرد:

$$U_r = \frac{1}{2} k_r (r - r_0)^2, k_r = 800 \text{ nN.nm} \quad (۵-۲)$$

حوزه‌ای که می‌توان با تقریب خوبی، از پتانسیل هارمونیک به جای پتانسیل مورس استفاده کرد، در شکل (۱۴-۲) توسط بیضی نشان داده شده است. معمولاً چون برای بدست آوردن پارامترهایی همچون مدول یانگ، مدول برشی و ضریب پواسون نیاز به کشش زیاد نانولوله نمی‌باشد، می‌توان از پتانسیل هارمونیک استفاده نمود.

³¹ Morse



شکل (۲-۱۵): مقایسه پتانسیل‌های کشش پیوند مورس و هارمونیک

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

این برهمکنش یک برهمکنش پیوندی می‌باشد که از تغییر زاویه میان دو پیوند ناشی می‌شود. مقدار این برهمکنش از برهمکنش کششی کمتر می‌باشد؛ اما نقش بسیار مهمی را در پایداری ساختار ملکولی لوله‌ای ایفا می‌کند. معروف‌ترین پتانسیل به کار گرفته شده برای این برهمکنش، پتانسیل مورس اصلاح شده می‌باشد (معادله (۲-۶)). 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.

$$U_{\theta} = \frac{1}{2}k_{\theta}(\theta - \theta_0)^2 [1 + k_{sextic}(\theta - \theta_0)^4] \quad (۲-۶)$$

همانگونه که در شکل (۲-۱۵) مشاهده می‌شود، در جابجایی‌های کوچک می‌توان رفتار خمش پیوند را خطی فرض نمود و از پتانسیل هارمونیک زیر استفاده کرد:

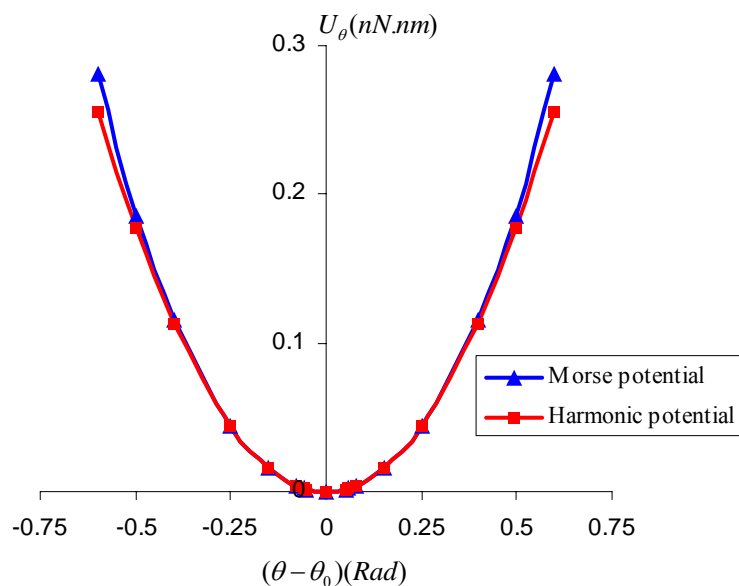
$$U_{\theta} = \frac{1}{2}k_{\theta}(\theta - \theta_0)^2, \quad k_{\theta} = 100 \text{ nN.nm.rad}^{-2} \quad (۲-۷)$$

که در آن θ_0 ، زاویه ی 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:

$$r_0 = 0.139nm \quad k_\theta = 0.9nN.nm / Rad^{-2} \quad k_{sextic} = 0.754Rad^{-4}$$

$$r_0 = 0.142nm \quad k_\theta = 1.42nN.nm / Rad^{-2} \quad k_{sextic} = 0.754Rad^{-4}$$

همانگونه که در شکل مشاهده می‌شود، پتانسیل هارمونیک برای تغییر زاویه پیوند دارای تطابق بهتری نسبت به پتانسیل هارمونیک برای کشش پیوند است. بنابراین می‌توان از این پتانسیل با اطمینان به جای پتانسیل مورس استفاده کرد.



شکل (۲-۱۶): مقایسه پتانسیل‌های تغییر زاویه پیوند مورس و هارمونیک

۳-۳-۲-۲ برهمکنش پیچش دوسطحی

این برهمکنش یک برهمکنش پیوندی می‌باشد که از چرخش زاویه‌ای دو اتم نسبت به هم حول محور پیوند ایجاد می‌شود. مقدار این برهمکنش از برهمکنش‌های کششی و خمشی ضعیف‌تر می‌باشد. یکی از

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

توابعی که بسیار برای برهمکنش پیچشی به کار می‌رود، یک نوع پتانسیل پیچشی متناوب است که به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$(۸-۲)$$

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

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

همانگونه که در شکل (۲-۱۶) مشاهده می‌کنید، در جابجایی‌های کوچک می‌توان رفتار پیچش پیوند را خطی فرض نمود و از پتانسیل هارمونیک زیر استفاده کرد:

$$U_\phi = \frac{1}{2}k_\phi(\phi - \phi_0)^2, k_\phi = 1nN.nm.rad^{-2} \quad (۹-۲)$$

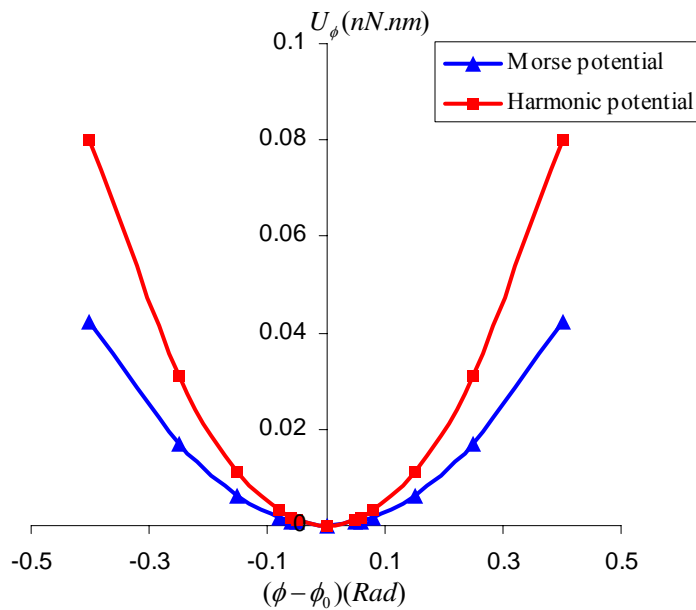
۲-۲-۳-۴ برهمکنش پیچش خارج صفحه‌ای

این برهمکنش، یک برهمکنش پیوندی می‌باشد که از چرخش یک پیوند حول صفحه تشکیل دهنده سه اتم مجاور ناشی می‌شود. این برهمکنش فقط تحت شرایط خاص بارگذاری در نظر گرفته می‌شود. تابع پیشنهاد شده برای پتانسیل مزبور به صورت زیر است:

$$U_\omega = \frac{1}{2}k_\omega [1 + \cos(n\omega - \omega_0)] \quad (۱۰-۲)$$

که در آن ω_0 ، زاویه اولیه (تعادل) میان سه پیوند C-C در دو سطح و ω ، زاویه ثانویه میان دو سطح می‌باشد. مقدار زاویه تعادل در نانولوله‌های کربنی 180° درجه می‌باشد. سایر پارامترهای تابع فوق به صورت زیر است:

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



شکل (۱۷-۲): مقایسه پتانسیل‌های پیچش دوسطحی پیوند مورس و هارمونیک

همانند شکل (۱۶-۲)، در جابجایی‌های کوچک می‌توان رفتار پیچش پیوند را خطی فرض نمود و از پتانسیل هارمونیک زیر استفاده کرد:

$$U_{\omega} = \frac{1}{2} k_{\omega} (\omega - \omega_0)^2, \quad k_{\omega} = 1 \text{ nN.nm.rad}^{-2} \quad (11-2)$$

۵-۳-۲-۲ برهمکنش واندروالس

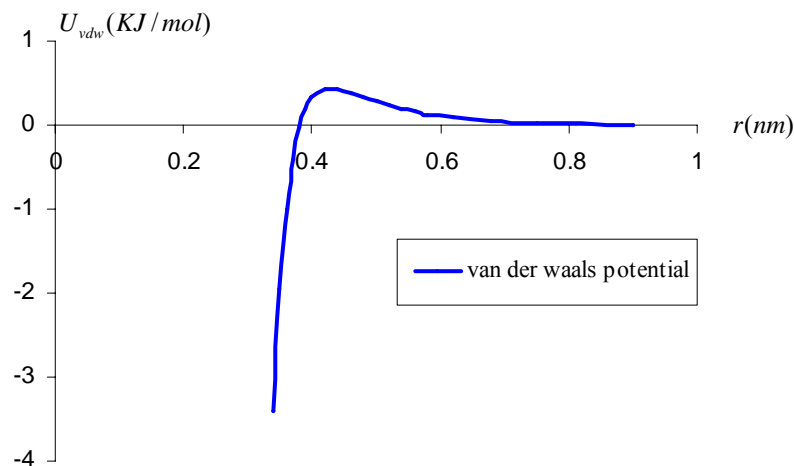
این برهمکنش، یک برهمکنش غیرپیوندی می‌باشد. این برهمکنش نسبت به برهمکنش‌های پیوندی بسیار ضعیف است و فقط در نانولوله‌های چند دیواره مهم می‌باشد. برهمکنش میان دیواره‌های نانولوله‌های

چند دیواره از نوع واندروالس می‌باشد. فرم کلی تابع پتانسیل واندروالس به صورت زیر می‌باشد:

$$U_{vdw} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (12-2)$$

که در آن r ، فاصله میان دو اتم می‌باشد. سایر پارامترهای پتانسیل لنارد-جونز^{۳۲} به صورت زیر می‌باشند.

$$\varepsilon = 0.4396, \sigma = 0.341 \text{ nm}$$



شکل (۲-۱۸): نمودار پتانسیل واندروالس

چون پتانسیل واندروالس یک پتانسیل پیوندی نیست، بنابراین می‌تواند بر روی همه ذراتی که در حوزه این نیرو قرار می‌گیرند، اثر کند. یکی از دلایلی که در شبیه‌سازی‌ها اغلب از این پتانسیل صرف‌نظر می‌شود، مشکلات اعمال این پتانسیل در شبیه‌سازی می‌باشد.

۲-۳-۲-۶ برهمکنش الکترواستاتیک

این برهمکنش، یک برهمکنش غیرپیوندی می‌باشد. این برهمکنش نسبت به برهمکنش‌های پیوندی بسیار ضعیف است و حتی در مسائلی که برهمکنش واندروالس را در نظر می‌گیرند، از این برهمکنش صرف‌نظر می‌کنند. فرم کلی تابع پتانسیل الکترواستاتیک به صورت زیر می‌باشد:

$$U_{el} = \frac{Kq_i q_j}{r_{ij}^2} \quad (۲-۱۳)$$

³² Lenard Jonze

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

۴-۲-۲ پتانسیل ترسوف-برنر^{۳۳}

ترسوف و برنر، تابع پتانسیل زیر را برای برهمکنش کربن پیشنهاد کردند [۱۵]:

$$V(r_{ij}) = V_R(r_{ij}) - B_{ij}V_A(r_{ij}) \quad (۱۴-۲)$$

به طوریکه r_{ij} ، فاصله میان اتم‌های i و j ، V_R و V_A به ترتیب عبارتهای دافعه و جاذبه میان دو اتم می‌باشند که به صورت زیر بیان می‌شوند:

$$V_R(r) = \frac{D^{(e)}}{S-1} e^{-\sqrt{2S}\beta(r-r^{(e)})} f_c(r_{ij}) \quad (۱۵-۲)$$

$$V_A(r) = \frac{SD^{(e)}}{S-1} e^{-\sqrt{2/S}\beta(r-r^{(e)})} f_c(r_{ij}) \quad (۱۶-۲)$$

پارامترهای $D^{(e)}$ ، S ، β و $R^{(e)}$ از خصوصیات فیزیکی شناخته شده کربن، گرافیت و الماس بدست می‌آیند که در جدول (۳-۲) ارائه گردیده است. تابع f_c یک تابع قطع برای محدود کردن بازه پتانسیل می‌باشد:

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1 & r < R^{(1)} \\ \frac{1}{2} \left\{ 1 + \cos \left[\frac{\pi(r - R^{(1)})}{R^{(2)} - R^{(1)}} \right] \right\} & R^{(2)} < r < R^{(2)} \\ 0 & r > R^{(2)} \end{cases} \quad (۱۷-۲)$$

³³ Tersof-Brenner

این تابع یک تابع پیوسته است که دارای قطع میان $R^{(e)} = 0.2nm$ و $R^{(e)} = 0.17nm$ و فقط برای دربرگیری اولین لایه ی مجاور کربن می باشد. پارامتر B_{ij} ، یک اتصال چند جسمی میان پیوند اتم i به اتم j و محیط موضعی اتم i می باشد که به صورت زیر بیان می شود:

$$B_{ij} = \left[1 + \sum_{k(\neq i, j)} G(\theta_{ijk}) f_c(r_{ik}) \right]^{-\delta} \quad (18-2)$$

r_{ik} ، فاصله میان اتم های i و k ، θ_{ijk} زاویه میان پیوندهای i - j و i - k می باشد و تابع G به صورت زیر تعریف می شود:

$$G(\theta) = a_0 \left[1 + \frac{c_0^2}{d_0^2} - \frac{c_0^2}{d_0^2 + (1 + \cos(\theta))^2} \right] \quad (19-2)$$

برنر برای اتم های i و j که دارای محیطهای موضعی مختلف می باشند، ضریب B_{ij} را به صورت زیر پیشنهاد کرد:

$$\bar{B}_{ij} = (B_{ij} + B_{ji}) / 2 \quad (20-2)$$

پارامترهای پتانسیل برنر توسط تطبیق انرژی پیوندی و ثابت های شبکه گرافیت، الماس، ساختارهای مکعبی ساده و مکعبی با مراکز وجوه پر برای کربن خالص و همچنین انرژی تشکیل یک تهی جای در الماس و گرافیت تعیین شده است. در واقع برنر دو مجموعه پارامتر را ارائه کرده است که در جدول (۲-۳) آمده است.

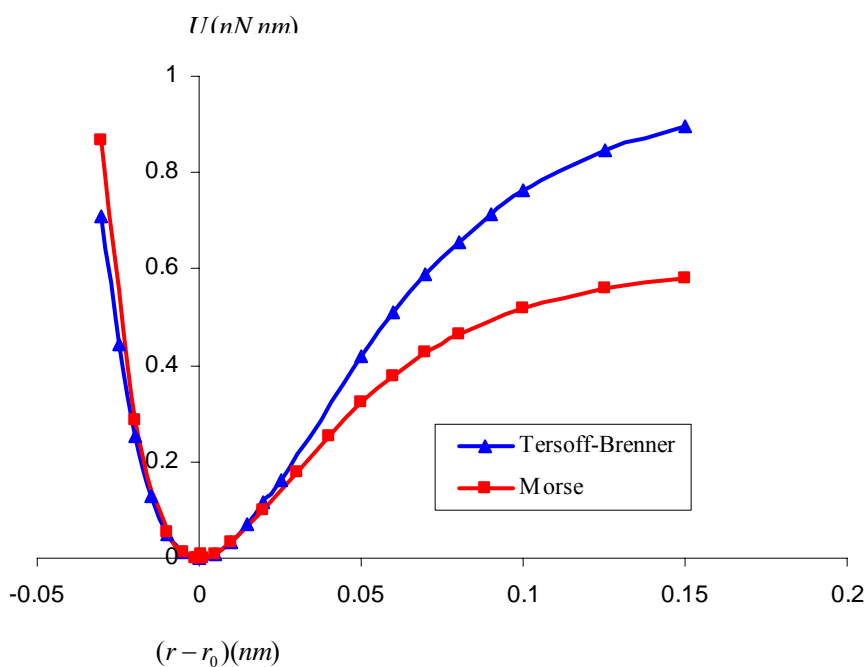
۲-۲-۴-۱ مقایسه پتانسیل های مورس و ترسوف-برنر

پتانسیل های مورس و ترسوف-برنر هر دو از پتانسیل هایی هستند که در مقالات مختلف بسیار مورد استفاده قرار گرفته اند. در سال های اخیر، بکارگیری پتانسیل مورس بیشتر متداول گشته است. شاید یکی از دلایل آن، کاربرد ساده آن در مسائل باشد. اما آنچه مسلم است، پتانسیل ترسوف-برنر بسیار

دقیق‌تر از پتانسیل مورس است و به همین نسبت کاربرد آن مشکل‌تر خواهد بود. در شکل (۲-۱۹)، مقایسه نموداری پتانسیل‌های مورس و ترسوف-برنر نشان داده شده است.

جدول (۲-۳): پارامترهای پتانسیل ترسوف-برنر [۱۵]

$D^{(e)}(eV)$	S	$\beta(nm^{-1})$	$R^{(e)}(nm)$	δ	a_0	c_0	d_0
۶/۳۲۵	۱/۲۵	۱۵	۰/۱۳۱۵	۰/۸۰۴۶۹	۰/۰۱۱۳۰۴	۱۹	۲/۵
۶/۰۰۰	۱/۲۲	۲۱	۰/۱۳۹۰	۰/۵۰۰۰۰	۰/۰۰۰۲۰۸۱۳	۳۳۰	۳/۵



شکل (۲-۱۹): مقایسه پتانسیل‌های مورس و ترسوف-برنر

پتانسیل پیش بینی شده توسط ترسوف-برنر بیشتر از پتانسیل پیش بینی شده توسط مورس در کشش پیوندهای بالا است. برای جابه‌جایی‌های کوچک، نتایج این دو پتانسیل یکسان می‌باشد. در این پایان‌نامه

از پتانسیل مورس برای برهمکنش های کشش و خمش پیوند استفاده شده است. جزئیات بیشتر در فصول بعدی به طور مفصل بحث خواهد شد.

فصل سوم

مدل سازی نانولوله های کربنی

مقدمه

امروزه مدل‌سازی و شبیه‌سازی یکی از ابزارهای مهم اجرای طرح محسوب می‌شود. این مدل‌سازی در حوزه نانو که انجام کارهای تجربی در آن بسیار مشکل و فرصت خطا در آن محدود است، بیشتر ضروری به نظر می‌رسد. به موازات کارهای تجربی صورت گرفته بر روی نانولوله‌های کربنی، کارهای تئوری و روش‌های عددی نیز در این راستا انجام شده است. کارهای اساسی برای مدل‌سازی و شبیه‌سازی از سال ۱۹۹۶ ارائه گردیده‌اند. به طور کلی این روش‌ها را می‌توان به سه گروه دسته بندی کرد: ۱- روش‌های بر پایه شبیه‌سازی و قابلیت ارتجاعی کریستال. ۲- روش‌های بر پایه تئوری مکانیک پیوسته. ۳- روش‌های بر پایه المان محدود (FEM).

در این فصل، هر یک از روش‌های فوق به طور مفصل بررسی می‌گردند.

۱-۳ روش‌های بر پایه شبیه‌سازی و قابلیت ارتجاعی کریستال

به نظر می‌رسد که اولین تلاش صورت گرفته جهت یافتن ثابت‌های الاستیک بر اساس انرژی پتانسیل یک سیستم کریستال، توسط بُرن^{۳۴} و هیوانگ^{۳۵} در سال ۱۹۵۴ صورت گرفته باشد [۱۶]. در سال‌های ۱۹۶۶ تا ۱۹۶۸، عدم سازگاری در شرایط در نظر گرفته شده توسط برن-هیوانگ به وسیله کیتینگ^{۳۶} اثبات گردید [۱۷]. مارتین^{۳۷} در سال ۱۹۷۵، ثابت‌های الاستیک را برای یک سیستم کریستال با چگالی انرژی به

³⁴ Born

³⁵ Huang

³⁶ Keating

³⁷ Martin

صورت مجموع برهمکنش‌های چندعضوی بدست آورد [۱۸]. در شبیه‌سازی دینامیک ملکولی نانولوله‌ها، چندین روش بکار می‌رود. اساساً می‌توان این روش‌ها را به دو روش اصلی تقسیم کرد: ۱- روش‌های پایه موسوم به آب‌نیشیو و روش‌های دینامیک ملکولی (MD). عموماً روش اول بسیار دقیق‌تر از روش دوم می‌باشد. روش دیگری نیز موسوم به روش دینامیک ملکولی اتصال مقید^{۳۸} اخیراً مورد استفاده قرار می‌گیرد که در واقع ترکیبی از روش‌های آب‌نیشیو و دینامیک ملکولی می‌باشند.

۳-۱-۱ روش دینامیک ملکولی آب‌نیشیو

قبل از اینکه بتوان روش شبیه‌سازی دینامیک ملکولی را اعمال کرد، باید به توابع پتانسیل مربوطه دسترسی داشت. روابط ریاضی این توابع پتانسیل برای نانولوله‌های کربنی در فصل قبل مورد بررسی قرار گرفت. اگر چه روش‌های دینامیک ملکولی کلاسیک بر اساس پتانسیل‌های از پیش تعریف شده 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 دینامیک ملکولی آب‌نیشیو 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 آب‌نیشیو مورد استفاده قرار می‌گیرند، اولویت از ایجاد توابع انرژی پتانسیل تقریبی، به انتخاب طرح‌های تقریبی برای محاسبه معادلات

³⁸ Tight Binding

شرودینگر^{۳۹} چندعضوی تغییر می‌کند. مزیت روش‌های آیینیشیو این است که دستورهای پیش‌بینی نشده زیادی قبل از شروع شبیه‌سازی مجاز به اجرا در طول مسیر شبیه‌سازی هستند. در این قسمت سعی شده است تا مباحث مربوط به این روش در سطحی ارائه گردند که دربرگیرنده مباحث مختلف در زمینه‌های مکانیک کوانتوم، تئوری فیزیک، تئوری شیمی و یا حتی علم مواد باشد [۱۹-۲۲].

در مکانیک کوانتوم غیرنسبیتی، سطوح انرژی سیستم از N هسته اتم قرار گرفته در موقعیت‌های

$$\{R_I\} \equiv \{R_1, R_2, \dots, R_N\} \quad (۱-۳)$$

با گشتاورهای

$$\{P_I\} \equiv \{P_1, P_2, \dots, P_N\} \quad (۲-۳)$$

و الکترون‌های N_e قرار گرفته در موقعیت‌های

$$\{r_i\} \equiv \{r_1, r_2, \dots, r_{N_e}\} \quad (۳-۳)$$

با گشتاورهای

$$\{p_i\} \equiv \{p_1, p_2, \dots, p_{N_e}\} \quad (۴-۳)$$

و متغیرهای اسپین

$$\{s_i\} \equiv \{s_1, s_2, \dots, s_{N_e}\} \quad (۵-۳)$$

بدست آمده از معادلات مستقل از زمان شرودینگر

$$H\Psi(\{x_i\}, \{R_I\}) = E\Psi(\{x_i\}, \{R_I\}) \quad (۶-۳)$$

به طوریکه

$$\{x_i\} \equiv (\{r_i\}, \{s_i\}) \quad (۷-۳)$$

همیلتونین^{۴۰} متناظر کل به صورت زیر بیان می‌گردد:

³⁹ Schrodinger

⁴⁰ Hamiltonian

$$\begin{aligned}
H^{tot} &= \sum_{I=1}^N \frac{P_I^2}{2M_I} + \sum_{i=1}^{N_e} \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} + \sum_{I>J} \frac{Z_I Z_J e^2}{|R_I - R_J|} - \sum_{i,I} \frac{Z_I e^2}{|R_I - r_i|} \\
&= K_N + K_e + H_I^{ee}(\{r_i\}) + H_I^{NN}(\{R_I\}) + H_I^{eN}(\{r_i\}, \{R_I\})
\end{aligned} \tag{۸-۳}$$

که m و M_I به ترتیب جرم الکترون و جرم هسته I می‌باشند. $Z_I e$ بار روی هسته I و $K_N, K_e, H_I^{ee}, H_I^{NN}, H_I^{eN}$ به ترتیب عملگرهای نماینده انرژی جنبشی هسته‌ای، انرژی جنبشی الکترون، برهمکنش الکترون-الکترون، برهمکنش هسته-هسته و برهمکنش هسته-الکترون می‌باشند. بنابراین معادله شرودینگر را می‌توان به صورت زیر نمایش داد:

$$[K_N + K_e + H_I^{ee}(\{r_i\}) + H_I^{NN}(\{R_I\}) + H_I^{eN}(\{r_i\}, \{R_I\})] \Psi(\{x_i\}, \{R_I\}) = E \Psi(\{x_i\}, \{R_I\}) \tag{۹-۳}$$

حتی برای ملکول‌های ساده نیز، حل دقیق معادله بالا غیرممکن است. بنابراین از تقریب بُرن-آپنهاইمر^{۴۱} (BOA) برای بدست آوردن حل تقریبی استفاده می‌گردد. BOA، بر پایه جداسازی حرکت‌های سریع و آرام موجود در سیستم قرار دارد؛ یعنی جداسازی حرکت الکترون‌ها و هسته‌ها. علت این اختلاف به علت تفاوتی است که میان جرم هسته‌ها و الکترون‌ها وجود دارد. برای اعمال طرح BOA، توابع موج کل به صورت حاصلضرب زیر بیان می‌گردند:

$$\Psi(\{x_i\}, \{R_I\}) = \phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\}) \phi^{nuc}(\{R_I\}) \tag{۱۰-۳}$$

که $\phi^{nuc}(\{R_I\})$ تابع موج هسته‌ای و $\phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\})$ تابع موج الکترونی می‌باشند.

با اعمال K_N بر روی معادله بالا خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}
K_N \phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\}) \phi^{nuc}(\{R_I\}) &= \frac{\hbar^2}{2} \left(\sum_{I=1}^N \frac{1}{M_I} [\phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\}) \nabla_I^2 \phi^{nuc}(\{R_I\}) \right. \\
&\quad \left. + \phi^{nuc}(\{R_I\}) \nabla_I^2 \phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\}) + 2 \nabla_I \phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\}) \cdot \nabla_I \phi^{nuc}(\{R_I\}) \right]
\end{aligned} \tag{۱۱-۳}$$

⁴¹ Born-Oppenheimer

به دلیل اینکه تابع موج هسته‌ای بسیار موضعی‌تر از تابع موج الکترونی است؛ بنابراین هنگام استفاده از BOA می‌توان از عبارت $\nabla_i \phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\})$ صرف‌نظر نمود. بنابراین با جایگزینی معادله (۳-۱۰) در معادله (۳-۹) خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} & [K_e + H_I^{ee}(\{r_i\}) + H_I^{eN}(\{r_i\}, \{R_I\})] \phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\}) \phi^{nuc}(\{R_I\}) + \phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\}) K_N \phi^{nuc}(\{R_I\}) \\ & + H_I^{NN}(\{R_I\}) \phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\}) \phi^{nuc}(\{R_I\}) = E \phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\}) \phi^{nuc}(\{R_I\}) \end{aligned} \quad (12-3)$$

با تقسیم طرفین معادله بر عبارت $\phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\}) \phi^{nuc}(\{R_I\})$ خواهیم داشت:

$$\frac{[K_e + H_I^{ee}(\{r_i\}) + H_I^{eN}(\{r_i\}, \{R_I\})] \phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\})}{\phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\})} = E - \frac{[K_N + H_I^{NN}(\{R_I\})] \phi^{nuc}(\{R_I\})}{\phi^{nuc}(\{R_I\})} \quad (13-3)$$

طرف راست معادله بالا تابعی از $\{R_I\}$ می‌باشد، بنابراین:

$$\frac{[K_e + H_I^{ee}(\{r_i\}) + H_I^{eN}(\{r_i\}, \{R_I\})] \phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\})}{\phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\})} = f(\{R_I\}) \quad (14-3)$$

و سپس

$$[K_e + H_I^{ee}(\{r_i\}) + H_I^{eN}(\{r_i\}, \{R_I\})] \phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\}) = f(\{R_I\}) \phi^{el}(\{x_i\}, \{R_I\}) \quad (15-3)$$

این معادله یک معادله مقدار ویژه است که می‌توان به صورت زیر در نظر گرفت:

$$H^{el}(\{R_I\}) = [K_e + H_I^{ee}(\{r_i\}) + H_I^{eN}(\{r_i\}, \{R_I\})] \quad (16-3)$$

متناظر با هر حلی از معادله (۳-۱۶)، یک معادله مقدار ویژه هسته‌ای وابسته وجود دارد:

$$[K_e + H_I^{ee}(\{r_i\}) + f_n(\{R_I\})] \phi^{nuc}(\{R_I\}) = E \phi^{nuc}(\{R_I\}) \quad (17-3)$$

علاوه بر این، دینامیک هسته‌ای بر روی سطح الکترونیکی که توسط مقدار ویژه $f_n(\{R_I\})$ معادله مقدار ویژه الکترونیکی ایجاد می‌گردد، مشخص می‌شود. دینامیک هسته‌ای از معادله وابسته به زمان شرودینگر پیروی می‌کند:

$$\left[K_e + H_I^{ee}(\{r_i\}) + f_n(\{R_I\}) \right] \phi^{nuc}(\{R_I\}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi^{nuc}(\{R_I\}, t) \quad (18-3)$$

که $\phi^{nuc}(\{R_I\}, t)$ تابع موج هسته‌ای وابسته به زمان می‌باشد. مفهوم معادله (18-3) این است که الکترون‌ها سریعاً به حرکت هسته‌ها واکنش نشان می‌دهند و بنابراین برای هر وضعیت $\{R_I\}$ هسته، فقط کافیست که یک مجموعه از مقادیر ویژه و توابع ویژه بدست آیند. تک تک این مقادیر ویژه، یک مجموعه از سطوح پتانسیل غیرکوپل را بر روی توابع موج هسته‌ای ایجاد می‌کنند. این سطوح غیرکوپل می‌توانند به علت به شمار آوردن اثرات غیرآدیاباتیکی، کوپل شوند. این نوع پاسخ الکترون‌ها به حرکت هسته‌ها، موضوع اصلی BOA می‌باشد.

با چشم‌پوشی از اثرات غیرآدیاباتیکی که سطوح پتانسیل را به هم کوپل می‌کند، و با اتخاذ تقریب آدیاباتیکی در جائیکه تابع موج الکترونی خودش را با حرکت هسته‌ای به طور شبه استاتیکی سازگار می‌کند، حرکت را می‌توان فقط روی سطح الکترونیکی حالت پایه در نظر گرفت. در این حالت داریم:

$$\left[K_e + H_I^{ee}(\{r_i\}) + H_I^{eN}(\{r_i\}, \{R_I\}) \right] \phi_0^{el}(\{x_i\}, \{R_I\}) = f_0(\{R_I\}) \phi_0^{el}(\{x_i\}, \{R_I\})$$

$$\left[K_e + H_I^{ee}(\{r_i\}) + f_0(\{R_I\}) \right] \phi^{nuc}(\{R_I\}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi^{nuc}(\{R_I\}, t) \quad (19-3)$$

با چشم‌پوشی از اثرات کوانتوم در توصیف دینامیک هسته‌ای، یک نمایش نیمه کلاسیک WKB برای $\phi^{nuc}(\{R_I\}, t)$ می‌توان اتخاذ نمود؛ و با صرف‌نظر از عبارتهای درگیر \hbar ، معادله همیلتون-ژاکوبی^{۴۲} کلاسیک به صورت همیلتونین هسته‌ای کلاسیک بدست می‌آید:

$$H^{nuc}(\{P_I\}, \{R_I\}) = \sum_I \frac{P_I^2}{2M_I} + H_I^{NN}(\{R_I\}) + f_n(\{R_I\}) \quad (20-3)$$

معادله کلاسیک برای حرکت هسته‌ها بر روی سطح حالت پایه توسط انرژی زیر بیان می‌گردد:

$$E_0(\{R_I\}) = f_0(\{R_I\}) + H_I^{NN}(\{R_I\}) \quad (21-3)$$

که به صورت زیر داده می‌شود:

⁴² Hamilton-Jacobi

$$M_I \ddot{R}_I = -\nabla_I E_0(\{R_I\}) \quad (22-3)$$

این معادله نشان می‌دهد که دافعه هسته-هسته، بعلاوه مقدار ویژه مشتق شده $f_0(\{R_I\})$ ، در نیروها سهم دارند. بنابراین داریم:

$$\nabla_I f_0(\{R_I\}) = \left\langle \phi_0^{el}(\{R_I\}) \left| \nabla_I H^{el}(\{R_I\}) \right| \phi_0^{el}(\{R_I\}) \right\rangle \quad (23-3)$$

برای محاسبه مقدار ویژه انرژی حالت پایه $f_0(\{R_I\})$ ، معادله مقدار ویژه الکترونی (۳-۱۹) باید حل شود. اما به طور کلی یک حل دقیق برای این معادله وجود ندارد و باید یک طرح تقریب‌زنی اتخاذ گردد. یکی از این طرح‌ها، استفاده از تئوری تابع چگالی (DFT) بر اساس تئوری هاهنبرگ-کوهن^{۴۳} می‌باشد. این تئوری یک تئوری دقیق می‌باشد که در سال ۱۹۶۰ برای محاسبه حالت پایه یک سیستم چند الکترونی تنظیم گردیده است. در این تئوری، نظریه اصلی این است که چگالی الکترون $n(\{r_i\})$ و فرمول‌بندی برای توابع چگالی ایجاد می‌گردد. تقریب‌زنی دقیق این توابع مورد نیاز می‌باشد و یک تقریب‌زنی از این توابع باصطلاح تقریب چگالی موضعی (LDA) نامیده می‌شود که در آن خصوصیات یک برهمکنش غیرهمگن سیستم چند الکترونی با خصوصیات یک گاز الکترونی همگن مرتبط هستند.

بر طبق DFT، انرژی حالت پایه کل $f_0(\{R_I\})$ الکترون‌های متناظر با یک موقعیت هسته‌ها $\{R_I\}$ توسط مینیموم کردن یک تابع معین که انرژی کوهن-شم^{۴۴} E^{KS} نامیده می‌شود:

$$f_0(\{R_I\}) = \min \left\{ \left\langle \phi_0^{el}(\{R_I\}) \left| H^{el} \right| \phi_0^{el}(\{R_I\}) \right\rangle \right\} = \min E^{KS}[\{\psi_i\}] \quad (24-3)$$

که ψ_i اوربیتال‌های کوهن-شم می‌باشد، $E^{KS}[\{\psi_i\}]$ تابع انرژی کوهن-شم می‌باشد.

$$E^{KS}[\{\psi_i\}] = K_S[\{\psi_i\}] + \int dr H_I^{ext}(r)n(r) + \frac{1}{2} \int dr H_I^{Har} n(r) + E_{xc}[n] + E_{ions}(\{R_I\}) \quad (25-3)$$

⁴³ Hohenberg-Kohn

⁴⁴ Kohn-Sham

I به یک موقعیت منفرد اشاره دارد و ψ_i یک مجموعه از حالت‌های ذره منفرد اشغال شده مضاعف را تشکیل می‌دهد:

$$\psi_i(r), i=1,2,\dots,\frac{N_e}{2} \quad (26-3)$$

و هر اوربیتال شامل یک الکترون با اسپین بالا و یک الکترون با اسپین پایین می‌باشد و

$$H_I^{Har}(r) = \int dr' \frac{n(r')}{|r-r'|} \quad (27-3)$$

که پتانسیل هارتری⁴⁵ می‌باشد و با چگالی بار توسط معادله پواسون⁴⁶ متناسب است. برحسب اوربیتال‌های کوهن-شم، چگالی بار به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$n(r) = \sum_i^{occ} O_i |\psi_i(R)|^2 \quad (28-3)$$

اولین عبارت معادله (3-25)، انرژی جنبشی کوانتوم یک سیستم برهمکنش مرجع را نمایش می‌دهد که به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$K_S[\{\psi_i\}] = \sum_i^{occ} O_i \left\langle \psi_i \left| -\frac{1}{2} \nabla^2 \right| \psi_i \right\rangle \quad (29-3)$$

و عبارت دوم نشان دهنده برهمکنش چگالی الکترونی با یک پتانسیل خارجی ثابت از قبیل پتانسیل ناشی از هسته‌های کلاسیک در جائیکه الکترون‌ها حرکت می‌کنند. سومین عبارت، انرژی الکترواستاتیک چگالی الکترونی بدست آمده از پتانسیل هارتری می‌باشد. چهارمین عبارت، تابع مبادله-همبستگی و در نهایت عبارت آخر، انرژی برهمکنش بارهای هسته‌ای عادی می‌باشد.

تابع انرژی کوهن-شم (3-25)، توسط تغییرات برای یک تعداد ثابت از الکترون‌ها نسبت به مجموعه اوربیتال‌های کوهن-شم شرایط تعامدی را ارضاء می‌کند:

$$\langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (30-3)$$

⁴⁵ Hartree

⁴⁶ Poisson

که منجر به معادلات کوهن-شم خواهد شد:

$$\left\{ -\frac{1}{2}\nabla^2 + H_I^{ext}(r) + H_I^{Har}(r) + H_I^{xc}[n](r) \right\} \psi_i(r) = \sum_j \Lambda_{ij} \psi_j(r) \quad (31-3)$$

یا

$$\left\{ -\frac{1}{2}\nabla^2 + H_I^{KS}(r) \right\} \psi_i(r) = \sum_j \Lambda_{ij} \psi_j(r) \quad (32-3)$$

یا

$$H_{eff}^{KS} \psi_i(r) = \sum_j \Lambda_{ij} \psi_j(r) \quad (33-3)$$

به طوریکه

$$H_I^{xc}[n](r) = \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n(r)} \quad (34-3)$$

که پتانسیل مبادله-همبستگی می‌باشد و Λ_{ij} یک مجموعه از ضرایب لاگرانژ می‌باشد. معادلات کوهن-شم تک الکترونی هستند و می‌توانند به صورت عبارت‌های یک همیلتونین مؤثر تک الکترونی H_{eff}^{KS} به همراه H_I^{KS} نماینده پتانسیل موضعی بیان می‌گردند. همیلتونین تک الکترونی مؤثر به علت حضور پتانسیل مبادله-همبستگی، اثرات چند الکترونی را در بر می‌گیرد. در LDA، تابع انرژی مبادله-همبستگی برهمکنش غیرهمگن سیستم الکترون به صورت زیر تقریب زده می‌شود:

$$H_I^{xc}[n](r) \approx \int dr e_{xc}(n(r)) n(r) \quad (35-3)$$

که $e_{xc}(n(r))$ یک تابع چگالی عمومی است که بیانگر انرژی مبادله-همبستگی هر الکترون از یک گاز الکترونی همگن با چگالی موضعی $n(r)$ می‌باشد. در تقریب گرادیان تعمیمی (GGA)، $E_{xc}(n)$ به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$E_{xc}^{GGA}[n] = \int dr n(r) e_{xc}^{GGA}(n(r); \nabla n(r)) \quad (36-3)$$

یعنی یک وابستگی تابعی میان چگالی و گرادیانش در یک نقطه فضای داده شده وجود دارد.

تحت LDA، پتانسیل مبادله-همبستگی به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$E_I^{xc}[n](r) = e_{xc}(n(r)) + n(r) \left. \frac{\partial e_{xc}(n)}{\partial n} \right|_{n=n(r)} \quad ۷۳$$

(۳۷-۳)

شکل‌های استاندارد معادلات کوهن-شم به صورت زیر بیان می‌گردند:

$$H_{eff}^{KS} \psi_i(r) = e_i^{KS} \psi_i(R) \quad (۳۸-۳)$$

حل خودسازگار برای این مسائل، پتانسیل کوهن-شم همچنین چگالی و اوربیتال‌های متناظر با الکترون-های حالت پایه را فراهم می‌کند.

مینیموم سازی تابع انرژی کوهن-شم برای هر موقعیت هسته‌ای اجرا می‌گردد. بنابراین اگر معادله هسته-ای (۳-۲۵) در یک شبیه‌سازی MD ایجاد گردد، مینیموم‌سازی باید برای هر مرحله MD اجرا شود و نیروها توسط استفاده از اوربیتال‌ها بدست آیند.

۳-۱-۲ روش دینامیک ملکولی MD

شبیه‌سازی دینامیک ملکولی 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 ملکول‌های سبک و یا حرکت ارتعاشی با فرکانس‌های بالا کمی این تقریب نگران کننده خواهد بود.

شبیه‌سازی دینامیک ملکولی 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 بدست می‌آورند. در شبیه‌سازی دینامیک ملکولی نیز دقیقاً از این دیدگاه پیروی می‌شود. ابتدا یک نمونه آماده شده و سپس یک سیستم مدل شامل N ذره انتخاب می‌گردد و معادلات حرکت نیوتن را برای سیستم تا

زمانیکه 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.

برای اندازه‌گیری مقادیر قابل مشاهده در یک شبیه‌سازی دینامیک ملکولی، در ابتدا ما باید قادر باشیم این مقادیر را به صورت توابعی از موقعیت و گشتاور ذرات در سیستم بیان کنیم. به عنوان مثال، یک تعریف مناسب از دما در یک سیستم چندعضوی (کلاسیکی)، اصل همبخشی انرژی را روی همه درجات آزادی بکار می‌برد که با نسبت درجه دوم همیلتونین سیستم وارد می‌شود. بنابراین، برای انرژی جنبشی متوسط هر درجه آزادی خواهیم داشت [۲۲]:

$$\left\langle \frac{1}{2} m v_a^2 \right\rangle = \frac{1}{2} k_B T \quad (3-39)$$

در یک شبیه‌سازی، از این معادله به عنوان یک تعریف کاربردی از دما استفاده خواهد گردید. در عمل باید انرژی جنبشی کل سیستم را با تقسیم آن بر تعداد درجه آزادی N_f (که برای یک سیستم با N ذره و گشتاور کل ثابت به صورت $3N-3$ خواهد بود) اندازه‌گیری نمود. چون انرژی جنبشی کل سیستم در نوسان است، بنابراین دمای لحظه‌ای بکار می‌رود:

$$T(t) = \sum_{i=1}^N \frac{m_i v_i^2(t)}{k_B N_f} \quad (3-40)$$

برای درک بیشتر شبیه‌سازی دینامیک ملکولی، یک برنامه ساده را در نظر می‌گیریم که به صورت زیر عمل می‌کند:

۱- خواندن پارامترهایی که شرایط اجرا را تعیین می‌کنند (مانند دمای اولیه، تعداد ذرات و گام زمانی)

۲- مقداردهی اولیه به سیستم (یعنی انتخاب موقعیت‌ها و سرعت‌های اولیه)

۳- محاسبه نیروها روی همه ذرات

۴- انتگرال گیری از معادلات حرکت نیوتن. این مرحله و مرحله قبل، هسته اصلی شبیه سازی را تشکیل می دهند. این دو مرحله تا زمانی تکرار می شوند که سیر تکاملی سیستم برای طول زمانی دلخواه محاسبه گردد.

۵- بعد از تکمیل حلقه مرکزی، مقادیر متوسط مورد اندازه گیری محاسبه می شود و شبیه سازی به اتمام می رسد.

در ادامه هر یک از مراحل فوق مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

۳-۱-۲-۱ مقداردهی اولیه

برای شروع شبیه سازی، برای هر یک از ذرات سیستم، موقعیتها و سرعت های اولیه اختصاص می یابد. موقعیت ذرات باید سازگار با ساختاری باشد که قصد شبیه سازی آن را داریم. در هر پدیده ای، ذرات نباید بگونه ای تغییر مکان یابند که باعث یک همپوشانی محسوس هسته های ملکولی یا اتمی گردد. برای دستیابی به این موقعیت، ذرات باید بر روی یک شبکه مکعبی قرار گیرند.

برای سادگی در شروع شبیه سازی، از یک شبکه مکعبی ساده استفاده می گردد. با فرض اینکه مقادیر چگالی و دمای اولیه طوری انتخاب شده اند که شبکه مکعبی از نظر مکانیکی ناپایدار باشد. در ابتدا هر ذره در محل شبکه اش قرار می گردد و به هر ذره مقدار سرعتی نسبت داده می شود که از یک توزیع یکنواخت در فاصله $0/5$ - تا $0/5$ بدست آمده اند. سپس همه این سرعت های اولیه را بگونه ای تغییر می دهیم که گشتاور کل صفر باقی بماند و سرعت های منتهی را برای تناسب انرژی جنبشی متوسط با مقدار دلخواه مقیاس بندی می کنیم.

۳-۱-۲-۲ محاسبه نیروها

قسمتی که در همه روش‌های شبیه‌سازی دینامیک ملکولی بیشترین زمان را به خود اختصاص می‌دهد، محاسبه نیروهای اعمالی به هر ذره می‌باشد. اگر یک مدل سیستم را با برهمکنش‌های زوجی در نظر بگیریم، تنها سهم نیروهایی لحاظ می‌گردند که بر ذره i در اثر نزدیکترین تصویر مجاورش اعمال می‌گردد. اگر بخواهیم تنها برهمکنش میان یک ذره و نزدیکترین ذره دیگر را لحاظ کنیم، برای یک سیستم با N ذره باید فواصل $N \times (N+1)/2$ زوج را محاسبه کنیم.

این موضوع نشان می‌دهد که اگر از روش میانبری استفاده نشود، زمان مورد نیاز برای محاسبه نیروها از درجه N^2 خواهد بود. روش‌های کارآمدی برای افزایش سرعت محاسبات نیروها وجود دارند که این درجه زمانی را از N^2 به N تبدیل خواهد کرد.

در ابتدا فاصله جاری میان دو زوج ذره i و j در مسیرهای x, y, z محاسبه می‌گردد. همانند حالت مونت-کارلو ما نیاز به یک شرایط مرزی پرئودیک داریم. در اینجا یک شعاع قطع r_c به اندازه نصف قطر باکس پرئودیک مورد استفاده قرار می‌گیرد. در این حالت می‌توانیم محاسبات برهمکنش بین لایه‌ای میان i و j را به برهمکنش میان i و نزدیکترین تصویر پرئودیک j محدود کنیم.

اگر قطر پرئودیک را با box مشخص کنیم و یک شرایط مرزی پرئودیک مکعبی ساده را در نظر بگیریم، فاصله در هر مسیری میان i و نزدیکترین تصویر پرئودیک j باید همیشه کمتر از $box/2$ باشد. یک راه ساده برای محاسبه فاصله میان i و نزدیکترین تصویر پرئودیک j ، استفاده از نزدیکترین تابع صحیح می‌باشد. این تابع به سادگی یک عدد حقیقی را به نزدیکترین عدد صحیح گرد می‌کند. برای شروع، فاصله X میان i و نزدیکترین تصویر پرئودیک j به صورت زیر بیان می‌گردد.

$$x(r) = x(r) - box \times \text{nin}(x(r)/box) \quad (41-3)$$

بنابراین با محاسبه همه مؤلفه‌های کارتیزین r_{ij} ، می‌توان r_{ij}^2 را محاسبه نمود. سپس باید بررسی شود که آیا r_{ij}^2 کمتر از r_c^2 است یا خیر. اگر کمتر نباشد، سریعاً مقدار دیگری برای j در نظر گرفته می‌شود. در

صورتی که کمتر باشد، باید نیروی میان این دو ذره محاسبه گردد. با مشتق‌گیری از تابع پتانسیل انرژی تعریف شده می‌توان نیروی میان دو ذره را در سه مسیر بدست آورد.

۳-۲-۱-۳ انتگرال‌گیری از معادلات حرکت

اکنون که همه نیروهای اعمالی به ذرات محاسبه گردید، می‌توان از معادلات حرکت نیوتن انتگرال‌گیری نمود. الگوریتم‌های مختلفی برای این کار ارائه شده‌اند. یکی از معروف‌ترین و ساده‌ترین این الگوریتم‌ها، الگوریتم ورلت^{۴۷} می‌باشد.

برای دست یافتن به این الگوریتم، از بسط تیلور^{۴۸} مختصات یک ذره حول زمان t شروع می‌کنیم:

$$r(t + \Delta t) = r(t) + v(t)\Delta t + \frac{f(t)}{2m}\Delta t^2 + \frac{\Delta t^3}{3!}\ddot{r} + O(\Delta t^4) \quad (۴۲-۳)$$

به طور مشابه

$$r(t - \Delta t) = r(t) - v(t)\Delta t + \frac{f(t)}{2m}\Delta t^2 - \frac{\Delta t^3}{3!}\ddot{r} + O(\Delta t^4) \quad (۴۳-۳)$$

با جمع دو طرف این دو معادله داریم:

$$r(t + \Delta t) + r(t - \Delta t) = 2r(t) + \frac{f(t)}{m}\Delta t^2 + O(\Delta t^4) \quad (۴۴-۳)$$

و یا

$$r(t + \Delta t) \approx 2r(t) - r(t - \Delta t) + \frac{f(t)}{m}\Delta t^2 \quad (۴۵-۳)$$

تخمین موقعیت جدید شامل خطایی از درجه Δt^4 است که Δt گام زمانی در شبیه‌سازی می‌باشد.

الگوریتم ورلت از پارامتر سرعت برای تعیین موقعیت‌های جدید استفاده نمی‌کند. اما می‌توان سرعت را با دانش خط سیر محاسبه نمود:

^{۴۷} Verlet

^{۴۸} Teylor

$$r(t+\Delta t)+r(t-\Delta t)=2v(t)\Delta t+O(\Delta t^3) \quad (46-3)$$

یا

$$v(t)=\frac{r(t+\Delta t)+r(t-\Delta t)}{2\Delta t}+O(\Delta t^2) \quad (47-3)$$

اکنون که توانستیم موقعیت جدید را بدست آوریم، می‌توانیم موقعیت در زمان را رها کنیم. موقعیت‌های حاضر، موقعیت‌های قدیم می‌شوند و موقعیت‌های جدید، موقعیت‌های حاضر می‌شوند. بعد از هر گام زمانی، دما و انرژی پتانسیل کل محاسبه می‌گردد. به این نکته باید توجه کرد که انرژی کل باید ثابت باقی بماند.

۲-۳ روش‌های بر پایه مکانیک پیوسته

روش‌های شبیه‌سازی که قبلاً مورد بحث قرار گرفتند، به تعداد اتم‌های از درجه 10^8 و بازه‌های زمانی نانوثانیه 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 انجام شده در این زمینه، توسط ترسوف⁴⁹ در سال ۱۹۹۲ [۲۳]، یاکوبسون⁵⁰ در سال ۱۹۹۶ [۲۴] و رو⁵¹ در سال ۲۰۰۰ [۲۵] انجام شده است. ترسوف به کمک یکسری محاسبات ساده از انرژی فلورونن، نشان داد که می‌توان با استفاده از خصوصیات الاستیک ورقه گرافیت و فلورونن، برای پیش‌بینی انرژی کرنش الاستیک فلورونن‌ها و نانولوله‌های کربنی استفاده کرد. یاکوبسون و رو، یک مدل پیوسته پیوسته بدون در نظر گرفتن کایرالیته⁵² و نیروهای اعمالی به اتم‌ها برای نانولوله‌های

⁴⁹ Tersof

⁵⁰ Yakobson

⁵¹ Ru

⁵² Chairality

کربنی تک دیواره در نظر گرفتند. گاویندجی^{۵۳} در سال ۱۹۹۹ به کمک تئوری تیر اویلر، نانولوله‌های چنددیواره را مدل کرد. آن‌ها نشان دادند که خصوصیات مواد در نانومقیاس، بسیار وابسته به اندازه‌شان می‌باشد [۲۶]. یکی از روش‌های بسیار مهم مکانیک پیوسته توسط ژانگ^{۵۴} و همکارانش در سال ۲۰۰۲ برای پیش‌بینی خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی تک دیواره ارائه گردید [۲۷]. روش آنها بر پایه کاربرد پتانسیل‌های برهمکنش قرار داشت. این روش دارای دو ویژگی است: (۱) کوپلینگ چند عضوی محیط موضعی (۲) فرض یکنواختی تابع چگالی پیوند. در ادامه یکی از مدل‌های تحلیلی و پیوسته که اخیراً در مقالات به چاپ رسیده است به طور مختصر مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

۳-۲-۱ مدل تحلیلی و پیوسته کالامکارو^{۵۵}

تکنیک تحلیلی پیشنهاد شده، فرض می‌کند که نانولوله کربنی تک دیواره می‌تواند به صورت یک پوسته شبکه‌ای لوله‌ای با واحدهای متناوب شش ضلعی مدل شود [۹]. پوسته را دقیقاً می‌توان یک لایه نازک سه بعدی ناهمگن بدون خصوصیات الاستیک در نواحی سوراخ‌ها در نظر گرفت. به علت شکل پرئودیک، نانولوله‌ها را می‌توان با استفاده از روش‌های همگن سازی مجانبی مدل کرد. برطبق این روش دو متغیر فضایی در نظر گرفته می‌شود. یکی برای تعریف واسطه در میکرومقیاس و دیگری برای تغییرات کلی در میدان فیزیکی در ماکرومقیاس. معادلات مشتق جزئی مسئله و ضرایب بدست آمده از توابع پرئودیک به شکل $A(x/\delta) = A(\xi)$ هستند. مسئله مقدار مرزی متناظر با بسط، به صورت مجانبی و به صورت پارامترهای مشخصه کوچک δ رفتار می‌کند، بنابراین آن‌ها را به هر دو متغیر آهسته (ماکروسکوپی) x و متغیر سریع (میکروسکوپی) $\xi = x/\delta$ وابسته می‌کند. برای تحلیل، پیوند کربن-کربن با طول l و پیوند

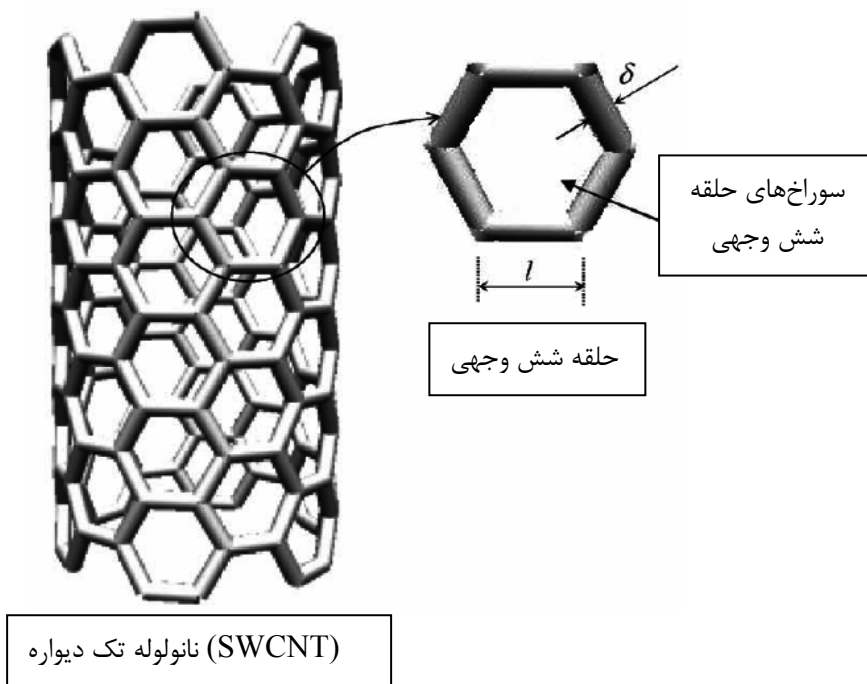
⁵³ Govindjee

⁵⁴ Zhang

⁵⁵ Kalamkarov

میان اتم‌های مجاور در یک حلقه شش ضلعی توسط یک میله مدور به قطر δ نمایش داده می‌شود (شکل ۳-۱).

فرمول‌بندی مورد استفاده در این روش تحلیلی مشابه با فرمول‌بندی در تعیین ضرایب مؤثر برای یک پوسته نازک کامپوزیت با تغییر سریع ضخامت می‌باشد. یک لایه نازک سه بعدی همگن را در نظر بگیرید



شکل (۳-۱): حلقه شش وجهی نانولوله کربنی تک دیواره [۹]

که از تکرار واحدهای کوچک Ω_δ بدست آمده است (شکل ۲-۳). در اینجا α_1, α_2 و γ یک سیستم مختصات متعامد را تعریف می‌کنند که خطوط α_1 و α_2 منطبق بر خطوط انحنای اصلی صفحه میانی لایه و γ محور مختصات عمود بر لایه میانی می‌باشد. فرض شده است که ضخامت لایه و ابعاد مماسی واحدهای ساختار متناوب در مقایسه با ابعاد لایه کامپوزیت کوچک است. این ابعاد کوچک، توسط یک پارامتر بی‌بعد کوچک δ که دو مقیاس ناهمگنی در واسطه و ضخامت لایه را تعریف می‌کند، مشخص می‌شوند. واحد Ω_δ توسط نامساوی‌های زیر تعریف می‌شود:

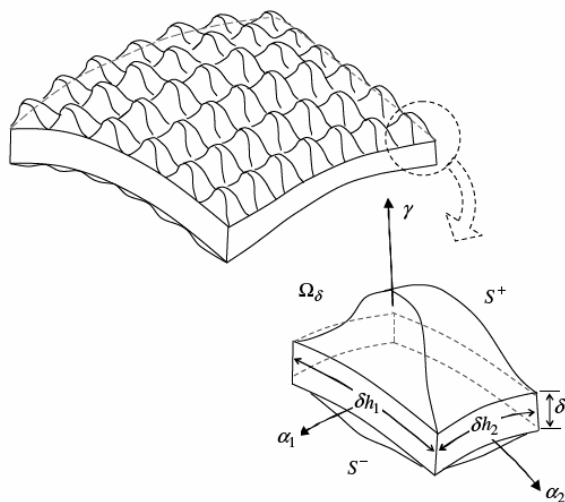
$$-\frac{\delta h_1}{2} < \alpha_1 < \frac{\delta h_1}{2}, \quad -\frac{\delta h_2}{2} < \alpha_2 < \frac{\delta h_2}{2}, \quad \gamma^- < \gamma < \gamma^+$$

(۴۸-۳)

به طوریکه

$$\gamma^{\pm} = \pm \frac{\delta}{2} \pm \delta F^{\pm} \left(\frac{\alpha_1}{\delta h_1}, \frac{\alpha_2}{\delta h_2} \right) \quad (۴۹-۳)$$

که تابع F^{\pm} ، برش عمودی سطوح بالایی (S^+) و پایینی (S^-) لایه را تعریف می‌کند. F^{\pm} به عنوان توابع پریودیک تکه‌ای در متغیرهای α_1 و α_2 با تناوب سلول واحد Ω_{δ} فرض شده‌اند.



شکل (۳-۲): سلول واحد لایه استوانه ای ناهمگن [۹]

حل این مسئله 3D الاستیسیته به صورت عبارتهای بسط مجانبی با توان‌های δ نشان داده شده است. روابط تشکیل دهنده پوسته معادل، به صورت عبارتهای منتجه تنش ($N_{\alpha\beta}$)، منتجه های ممان ($M_{\alpha\beta}$) کرنش‌های میان صفحه‌ای $\varepsilon_{\alpha\beta}$ و انحنای $k_{\alpha\beta}$ بدست می‌آیند:

$$N_{\alpha\beta} = \delta \langle b_{\alpha\beta}^{\lambda\mu} \rangle \varepsilon_{\lambda\mu} + \delta^2 \langle b_{\alpha\beta}^{*\lambda\mu} \rangle k_{\lambda\mu} \quad (۵۰-۳)$$

$$M_{\alpha\beta} = \delta^2 \langle z b_{\alpha\beta}^{\lambda\mu} \rangle \varepsilon_{\lambda\mu} + \delta^3 \langle z b_{\alpha\beta}^{*\lambda\mu} \rangle k_{\lambda\mu} \quad (۵۱-۳)$$

مقادیر $\langle b_{\alpha\beta}^{\lambda\mu} \rangle$ ، $\langle b_{\alpha\beta}^{*\lambda\mu} \rangle$ و $\langle z b_{\alpha\beta}^{\lambda\mu} \rangle$ و $\langle z b_{\alpha\beta}^{*\lambda\mu} \rangle$ ضرایب الاستیک مؤثر پوسته همگن می‌باشند که توسط انتگرال‌گیری بر روی سلول واحد کل Ω_δ بدست می‌آید:

$$\langle f(\xi_1, \xi_2, z) \rangle = \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} f(\xi_1, \xi_2, z) d\xi_1 d\xi_2 dz \quad (52-3)$$

در اینجا، ξ_1 ، ξ_2 و Z متغیرهای ماکروسکوپی هستند که به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\xi_1 = \frac{\alpha_1 A_1}{\delta h_1}, \quad \xi_2 = \frac{\alpha_2 A_2}{\delta h_2}, \quad z = \frac{\gamma}{\delta} \quad (53-3)$$

که $A_1(a_1, a_2)$ و $A_2(a_1, a_2)$ ضرایب اولین معادله درجه دوم لایه میانی و $|\Omega|$ حجم سلول واحد در مختصات ξ_1 ، ξ_2 و Z می‌باشد. قبل از اینکه معادلات (3-50) و (3-51) اعمال شوند، باید توابع موضعی $\langle b_{\alpha\beta}^{\lambda\mu} \rangle$ و $\langle b_{\alpha\beta}^{*\lambda\mu} \rangle$ از مسائل سلول واحد تعیین گردد:

$$\frac{1}{h_\beta} \frac{\partial b_{i\beta}^{\lambda\mu}}{\partial \xi_\beta} + \frac{\partial b_{i3}^{\lambda\mu}}{\partial z} = 0 \quad (54-3)$$

$$\frac{1}{h_\beta} n_\beta^\pm b_{i\beta}^{\lambda\mu} + n_3^\pm b_{i3}^{\lambda\mu} = 0 \quad (55-3)$$

$$\frac{1}{h_\beta} \frac{\partial b_{i\beta}^{*\lambda\mu}}{\partial \xi_\beta} + \frac{\partial b_{i3}^{*\lambda\mu}}{\partial z} = 0 \quad (56-3)$$

$$\frac{1}{h_\beta} n_\beta^\pm b_{i\beta}^{*\lambda\mu} + n_3^\pm b_{i3}^{*\lambda\mu} = 0 \quad (57-3)$$

$n_i^+(n_i^-)$ مولفه‌های بردار نرمال واحد بیرونی (درونی) متناظر با سطح و $z = z^+(z = z^-)$ در سیستم مختصات ξ_1 ، ξ_2 و Z تعریف می‌شوند. معادلات (3-54) و (3-56) با شرایط مرزی (3-55) و (3-57) و شرایط تناوبی در مسیرهای مماسی بر روی حوزه سلول واحد حل می‌شوند که معادلات سلول واحد نامیده می‌شوند.

درواقع توابع موضعی $\langle b_{\alpha\beta}^{\lambda\mu} \rangle$ و $\langle b_{\alpha\beta}^{*\lambda\mu} \rangle$ مستقیماً از روابط (۵۴-۳) و (۵۶-۳) حل نمی‌شوند. بلکه از روابط زیر برای ارتباط میان توابع موضعی با توابع هنوز مجهول $V_n^{lm}(\xi_1, \xi_2, z)$ و $U_n^{lm}(\xi_1, \xi_2, z)$ و ضرایب الاستیک ماده c_{ijkl} استفاده می‌گردد.

$$b_{ij}^{lm} = \frac{1}{h_\beta} c_{ijn\beta} \frac{\partial U_n^{lm}}{\partial \xi_\beta} + c_{ijn3} \frac{\partial U_n^{lm}}{\partial z} + c_{ijlm} \quad (58-3)$$

$$b_{ij}^{*lm} = \frac{1}{h_\beta} c_{ijn\beta} \frac{\partial V_n^{lm}}{\partial \xi_\beta} + c_{ijn3} \frac{\partial V_n^{lm}}{\partial z} + z c_{ijlm} \quad (59-3)$$

این توابع درجهت ξ_i پریودیک هستند (با تناوب نسبی A_i) نه در جهت Z ابتدا معادلات (۵۸-۳) و (۵۹-۳) در معادلات (۵۴-۳) و (۵۷-۳) جایگزین می‌شوند و سپس توابع V_n^{lm} و U_n^{lm} تعیین می‌شوند. این توابع به صورت برگشتی در معادلات (۵۸-۳) و (۵۹-۳) جایگزین می‌شوند تا توابع موضعی $\langle b_{\alpha\beta}^{\lambda\mu} \rangle$ و $\langle b_{\alpha\beta}^{*\lambda\mu} \rangle$ بدست بیایند و در نهایت میانگین‌گیری بر روی حجم سلول واحد مطابق با معادله (۵۲-۳) ضرایب الاستیک مؤثر بدست می‌آیند. باید به این نکته توجه کرد که میان ضرایب الاستیک مؤثر و ضرایب الحاقی A_{ij} ، اتصال B_{ij} و خمشی D_{ij} که در تئوری کامپوزیت چند لایه کلاسیک با آن آشنا هستید، تشابه وجود دارد.

$$\begin{bmatrix} A & B \\ B & D \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \delta \langle b_{11}^{11} \rangle & \delta \langle b_{11}^{22} \rangle & \delta \langle b_{11}^{12} \rangle & \delta^2 \langle z b_{11}^{11} \rangle & \delta^2 \langle z b_{11}^{22} \rangle & \delta^2 \langle z b_{11}^{12} \rangle \\ \delta \langle b_{11}^{22} \rangle & \delta \langle b_{22}^{22} \rangle & \delta \langle b_{22}^{12} \rangle & \delta^2 \langle z b_{11}^{22} \rangle & \delta^2 \langle z b_{22}^{22} \rangle & \delta^2 \langle z b_{22}^{12} \rangle \\ \delta \langle b_{11}^{12} \rangle & \delta \langle b_{22}^{12} \rangle & \delta \langle b_{12}^{12} \rangle & \delta^2 \langle z b_{11}^{12} \rangle & \delta^2 \langle z b_{22}^{12} \rangle & \delta^2 \langle z b_{12}^{12} \rangle \\ \delta^2 \langle b_{11}^{*11} \rangle & \delta^2 \langle b_{11}^{*22} \rangle & \delta^2 \langle b_{11}^{*12} \rangle & \delta^3 \langle z b_{11}^{*11} \rangle & \delta^3 \langle z b_{11}^{*22} \rangle & \delta^3 \langle z b_{11}^{*12} \rangle \\ \delta^2 \langle b_{11}^{*22} \rangle & \delta^2 \langle b_{22}^{*22} \rangle & \delta^2 \langle b_{22}^{*12} \rangle & \delta^3 \langle z b_{11}^{*22} \rangle & \delta^3 \langle z b_{22}^{*22} \rangle & \delta^3 \langle z b_{22}^{*12} \rangle \\ \delta^2 \langle b_{11}^{*12} \rangle & \delta^2 \langle b_{22}^{*12} \rangle & \delta^2 \langle b_{12}^{*12} \rangle & \delta^3 \langle z b_{11}^{*12} \rangle & \delta^3 \langle z b_{22}^{*12} \rangle & \delta^3 \langle z b_{12}^{*12} \rangle \end{bmatrix} \quad (60-3)$$

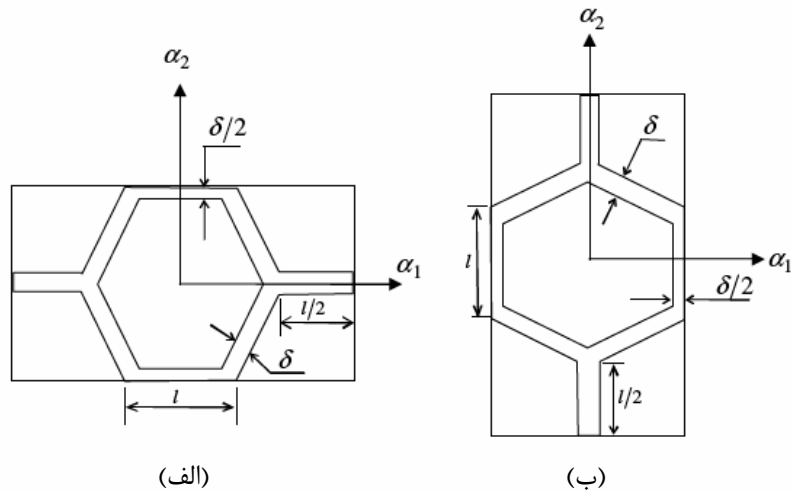
این روش برای تعدادی از صفحات و پوسته‌های هوشمند و کامپوزیتی به کار گرفته شده است؛ اما در اینجا کالامکارو از این روش برای تعیین ثابتهای مهندسی و روابط مربوط به نانولوله‌های کربنی تک دیواره استفاده نموده است.

۳-۲-۱-۱ رفتار مجانبی پوسته شبکه‌ای لوله‌ای با ساختار پرئودیک

همانطور که قبلاً بیان شد، یک نانولوله کربنی تک دیواره به صورت پوسته ناهمگن سه بعدی مدل می‌شود. پوسته نانولوله به صورت کاملاً پرئودیک و عاری از هر گونه عیوب استون-والس^{۵۶} و یا تهی‌جای^{۵۷} می‌باشد. شعاع انحنای پوسته بسیار بزرگتر از ضخامت پوسته در نظر گرفته شده است؛ از عبارتهای با توان‌های بالاتر از $O(\delta^2)$ چشم‌پوشی می‌گردد. ماده تشکیل دهنده نانولوله، همگن است و میله‌های نمایش دهنده پیوند شیمیایی به صورت لوله‌ای هستند. پوسته نانولوله دارای ضخامت δ می‌باشد ($F^+ \equiv F^- \equiv 0$). بعلاوه منطقه فضای خالی در میان پیوندهای کربن-کربن با خصوصیات ماده صفر در نظر گرفته شده است. ضرایب مؤثر این ساختار بر پایه حل معادلات موضعی بر روی هر سلول واحد مجزا تعیین می‌شوند. فرض کنید که سلول واحد شبکه پوسته، از N میله تشکیل یافته است؛ به طوری که میله j ام از ماده همسانگرد با مدول یانگ E_j و ضریب پواسون ν_j شامل یک زاویه φ_j با خط مختصاتی α_1 تشکیل یافته است. معادلات موضعی (۳-۵۴) و (۳-۵۷) را می‌توان برای هر یک از میله‌های سلول واحد به صورت جداگانه به کار برد و سختی مؤثر کل ساختار را می‌توان توسط اصل جمع آثار (شکل (۳-۳)) بدست آورد.

⁵⁶ Stone-Waals

⁵⁷ Vacancy



شکل (۳-۳): تناوب سلول SWCNT. (الف) آرمچیر (ب) زیگزاگ [۹]

باید توجه کرد که با استفاده از این روش، مقداری خطا در مناطق همپوشانی میله‌ها به وجود می‌آید؛ اما این خطا بسیار موضعی است؛ به طوری که اثر قابل توجهی بر روی انتگرال‌گیری روی سلول واحد ندارد. با پیروی از این روش برای نانولوله‌های کربنی، ضرایب مؤثر به راحتی از معادلات (۳-۵۴)، (۳-۵۵)، (۳-۵۸) و (۳-۵۹)، معادله میانگین‌گیری (۳-۵۲) و زاویه φ_j میان المان سلول واحد زام و محور α_1 بدست می‌آیند:

$$\langle b_{\alpha\beta}^{\lambda\mu} \rangle = \sum_{j=1}^N E_j B_j^{\alpha\beta\lambda\mu} \gamma_j \quad (۳-۶۱)$$

$$\langle z b_{\alpha\beta}^{\lambda\mu} \rangle = \langle b_{\alpha\beta}^{*\lambda\mu} \rangle = 0 \quad (۳-۶۲)$$

$$\langle z b_{\alpha\beta}^{*\lambda\mu} \rangle = \sum_{j=1}^N E_j \left(B_j^{\alpha\beta\lambda\mu} + \frac{C_j^{\alpha\beta\lambda\mu}}{1+\nu_j} \right) \gamma_j \quad (۳-۶۳)$$

ضرایب $B_j^{\alpha\beta\lambda\mu}$ و $C_j^{\alpha\beta\lambda\mu}$ به ترکیب شاخص‌های $\alpha\beta\lambda\mu$ وابسته هستند که به صورت زیر بیان می‌شوند:

$$B_j^{1111} = \cos^4 \varphi_j, \quad C_j^{1111} = \cos^2 \varphi_j \sin^2 \varphi_j \quad (۳-۶۴)$$

$$B_j^{2222} = \sin^4 \varphi_j, \quad C_j^{2222} = \cos^2 \varphi_j \sin^2 \varphi_j \quad (۶۵-۳)$$

$$B_j^{1212} = \cos^2 \varphi_j \sin^2 \varphi_j, \quad C_j^{1212} = \frac{1}{4}(\cos^4 \varphi_j + \sin^4 \varphi_j - 2\cos^2 \varphi_j \sin^2 \varphi_j) \quad (۶۶-۳)$$

$$B_j^{1122} = B_j^{2211} = \cos^2 \varphi_j \sin^2 \varphi_j, \quad C_j^{1212} = C_j^{2211} = -\cos^2 \varphi_j \sin^2 \varphi_j \quad (۶۷-۳)$$

$$B_j^{1112} = B_j^{1211} = \cos^3 \varphi_j \sin \varphi_j, \quad C_j^{1112} = C_j^{1211} = \frac{1}{2}(\cos \varphi_j \sin^3 \varphi_j - \cos^3 \varphi_j \sin \varphi_j) \quad (۶۸-۳)$$

$$B_j^{1222} = B_j^{2212} = \cos \varphi_j \sin^3 \varphi_j, \quad C_j^{1222} = C_j^{2212} = \frac{1}{2}(\cos^3 \varphi_j \sin \varphi_j - \cos \varphi_j \sin^3 \varphi_j) \quad (۶۹-۳)$$

لازم است خاطر نشان شود که ضرایب مؤثر $\langle b_{\alpha\beta}^{\lambda\mu} \rangle$ به شکل سطح مقطع میله‌ها وابسته نیستند؛ بلکه فقط به کسر حجمی آنها (مساحت سطح مقطع) وابسته هستند. برعکس، ضرایب مؤثر $\langle b_{\alpha\beta}^{*\lambda\mu} \rangle$ لزوماً به خاطر وابستگی‌شان به مختصات عرضی، به سطح مقطع وابسته هستند. با توجه به شکل (a) (۳-۵)، نتیجه‌های تنش و ممان، به صورت زیر بدست می‌آیند:

$$N_{11} = \delta^2 \frac{E}{l} \frac{\pi}{16\sqrt{3}} (3\varepsilon_{11} + \varepsilon_{22}) \quad (۷۰-۳)$$

$$N_{22} = \delta^2 \frac{E}{l} \frac{\pi}{16\sqrt{3}} (\varepsilon_{11} + 3\varepsilon_{22}) \quad (۷۱-۳)$$

$$N_{12} = \delta^2 \frac{E}{l} \frac{\pi}{16\sqrt{3}} \varepsilon_{12} \quad (۷۲-۳)$$

$$M_{11} = \delta^3 \frac{E}{(1+\nu)l} \frac{\pi\sqrt{3}}{768} [(4+3\nu)k_{11} + \nu k_{22}] \quad (۷۳-۳)$$

$$M_{22} = \delta^3 \frac{E}{(1+\nu)l} \frac{\pi\sqrt{3}}{768} [\nu k_{11} + (4+3\nu)k_{22}] \quad (۷۴-۳)$$

$$M_{12} = \delta^3 \frac{E}{(1+\nu)l} \frac{\pi\sqrt{3}}{768} [(1+\nu)k_{12}] \quad (۷۵-۳)$$

نتایج مربوط به سلول واحد زیگزاگ را می‌توان توسط تغییر در زیرنویس‌های ۱ و ۲ در معادلات بالا به دست آورد.

۳-۳ روش‌های المان محدود (FEM)

کاربرد FEM برای محاسبه خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی در دهه اخیر متداول گردیده است. یکی از روش‌های بسیار مهم که در حیطه روش‌های المان محدود قرار می‌گیرد، روش ساختاری می‌باشد. با توجه به اینکه روش استفاده شده برای مدلسازی نانولوله‌های کربنی در این پایان‌نامه روش ساختاری می‌باشد، انواع این روش‌ها به طور مفصل در فصل بعدی مورد بحث قرار گرفته‌اند.

فصل چهارم

روش‌های مکانیک ساختاری

مقدمه

از زمانیکه 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. به علت اندازه بسیار کوچک نانو مواد، محاسبه خصوصیات مکانیکی از قبیل مدول یانگ،

استحکام کششی و فشاری و همچنین مقاومت کمانشی، بحث‌های زیادی را میان محققان نانو مکانیک در سال‌های اخیر ایجاد کرده است. 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 بدست آمده در بعضی موارد باعث شده است که محققان برای توجیه و تفسیر کارهای تجربی به کارهای محاسباتی رو بیاورند. در میان بسیاری از مواد نانو ساختار، نانولوله‌های کربنی به علت ویژگی‌های منحصر به فرد مکانیکی و الکتریکی خود از توجه بیشتری برخوردار هستند.

در کنار کارهای تجربی صورت گرفته بر روی نانولوله‌های کربنی، تحقیقات نظری زیادی نیز برای مدل سازی این نانولوله‌ها انجام شده است. ۱- روش‌های مکانیک ملکولی: در واقع هر مسئله مرتبط با حرکت-های اتمی و ملکولی را می‌توان با این روش مدل کرد؛ اما به علت حجم محاسباتی بالای آن‌ها، این روش‌ها معمولاً به سیستم‌های کوچک که شامل تعداد کمی از ملکول‌ها و اتم‌ها هستند و پدیده‌های با عمر کوتاه از پیکوثانیه تا نانو ثانیه محدود می‌شوند. ۲- دیدگاه دیگر مدل سازی مکانیک پیوسته می‌باشد که به علت سهولت در به کارگیری و نیاز به زمان کمتری برای تحلیل، محققان زیادی به آن روآورده‌اند. اما مدل‌های بدست آمده از این دیدگاه نمی‌توانند کایرالیته نانولوله‌ها را در نظر بگیرند، بنابراین نیروهای اعمال شده 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 ملکولی زمان صرف می‌کند. در این پایان‌نامه بر روی مدل‌های مکانیکی متمرکز خواهیم گشت. مدل‌های ساختاری در حوزه نانولوله-های 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 انواع مدل‌های ساختاری ارائه گردیده در سال‌های اخیر خواهیم پرداخت و در نهایت کامل‌ترین مدل ساختاری ارائه گردیده تاکنون را که در پایان‌نامه حاضر صورت گرفته است، معرفی خواهیم کرد.

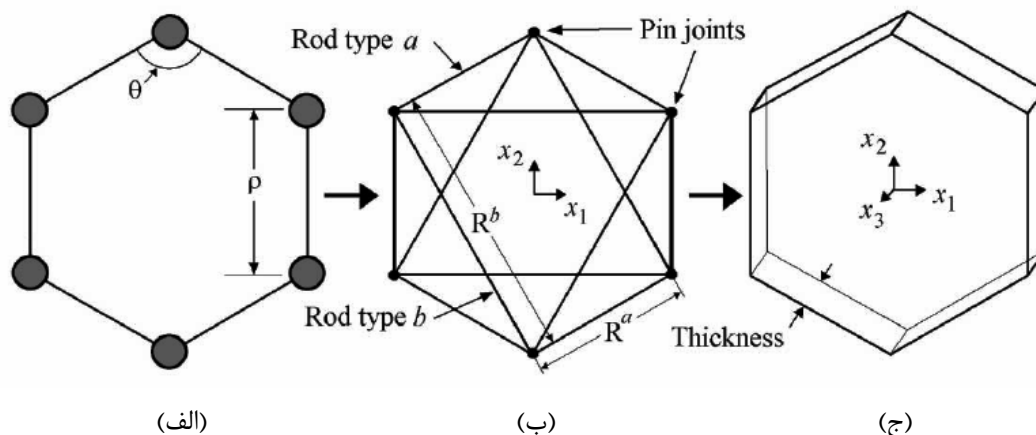
۴-۱ مدل‌های مکانیک ساختاری

۴-۱-۱ مدل اودگارد^{۵۸}

برای اولین بار اودگارد و همکارانش در سال ۲۰۰۲، استفاده از خصوصیات ساختاری را برای مدل‌سازی مواد نانوساختار پیشنهاد کردند [۲۸]. آنها نشان دادند که با معادل قرار دادن انرژی پتانسیل ملکولی یک ماده نانوساختار با انرژی کرنشی یک خرپا و مدل پیوسته معادل، می‌توان خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی را پیش‌بینی 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 سختی خمشی مورد بررسی قرار گرفته است. مدل اودگارد را می‌توان مدل خرپا نیز نامید. در این مدل نانولوله‌های کربنی همانند یک ساختار خرپا در نظر گرفته شده‌اند، به طوریکه اتم‌های کربن به عنوان مفصل‌های ارتباط دهنده این اعضا عمل می‌کنند. چون مدل اودگارد برای نانولوله‌های تحت بار کششی مورد استفاده قرار گرفته است، بنابراین او فقط دو برهمکنش کشش و تغییر زاویه را میان اتم‌های کربن لحاظ کرد و از سایر پتانسیل‌ها صرف‌نظر نمود. برای هر یک از برهمکنش‌ها از دو میله با مدول یانگ و سطح مقطع مختلف استفاده شده است. همانگونه که در شکل (۴-۱) مشاهده می‌شود، از میله a برای مدل کردن برهمکنش کشش پیوند و میله b برای مدل کردن برهمکنش تغییر زاویه میان دو پیوند استفاده شده است. البته با توجه به شکل ساختاری یک نانولوله کربنی، مشاهده می‌شود که اگر نیروی کششی پیوندهای کربن-کربن را توسط یک عضو خرپا مدل کنیم، آنگاه خرپای ایجاد شده نامعین خواهد شد. بنابراین افزودن شش عضو خرپای دیگر به حلقه شش وجهی که در واقع همان قطرهای شش ضلعی هستند، باعث معین شدن خرپا نیز می‌گردد. انرژی کرنشی مکانیکی یک خرپا به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$\Lambda^t \equiv \sum_m \sum_n \frac{A_m^n Y_m^n}{2R_m^n} (r_m^n - R_m^n)^2$$

⁵⁸ Odegard



شکل (۴-۱): المان‌های حجم معرف برای (الف) مدل شیمیایی (ب) مدل خرپا (ج) مدل پیوسته [۲۸]

که در آن A_m^n و Y_m^n به ترتیب مساحت سطح مقطع و مدول یانگ میله m از عضو خرپای n می‌باشند. عبارت $(r_m^n - R_m^n)$ ، کشیدگی میله m از عضو خرپای n می‌باشد، به طوریکه r_m^n و R_m^n به ترتیب طول‌های تغییرشکل یافته و غیر تغییرشکل یافته المان میله می‌باشند.

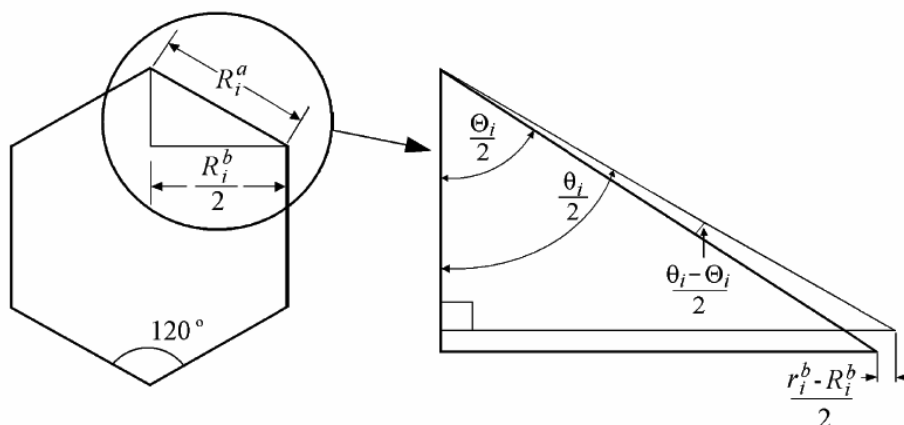
از طرف دیگر همانطور که در فصل دوم توضیح داده شد، انرژی کرنشی کل یک نانولوله کربنی را با صرفنظر از انرژی‌های پتانسیل پیچش، واندروالس و الکترواستاتیک می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$E^s = \sum_m K_m^\rho (\rho_m - \psi_m)^2 + \sum_m K_m^\theta (\theta_m - \Theta_m)^2 \quad (۲-۴)$$

برای نمایش رفتار شیمیایی با مدل خرپا، باید معادلات (۱-۴) و (۲-۴) را معادل یکدیگر قرار داد. یک مشکل اصلی در این معادل‌سازی این است که عبارتهای معادله (۱-۴) متناسب با کشش پیوند می‌باشند؛ در حالیکه عبارتهای معادله (۲-۴) علاوه بر عبارتهای کششی دارای عبارتهای متناسب با تغییر زاویه پیچش پیوند نیز می‌باشد.

اودگارد برای غلبه بر این مشکل، جابه‌جایی‌ها را کوچک فرض کرد. با توجه به شکل (۲-۴) می‌توان تغییر زاویه میان دو پیوند در نانولوله‌های کربنی را بسادگی توسط رابطه زیر، معادل تغییر کشش در میله نوع b در خرپا قرار داد.

$$\theta_m - \Theta_m \approx \frac{2(r_m^b - R_m^b)}{R_m^a} \quad (3-4)$$



شکل (۲-۴): طرحواره ای از معادل‌سازی تغییر زاویه پیوند با تغییر طول میله b در خرپا [۲۸]

با جایگزینی رابطه (۴-۳) در (۴-۲) و معادل‌سازی خواهیم داشت:

$$K_m^\rho = \frac{A_m^a Y_m^a}{2R_m^a} \quad \text{و} \quad K_m^\theta = \frac{R_m^b A_m^b Y_m^b}{24} \quad (4-4)$$

بنابراین مدول یانگ المان میله به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$Y_m^a = \frac{2K_m^\rho R_m^a}{A_m^a} \quad (5-4)$$

$$Y_m^b = \frac{24K_m^\theta}{2R_m^b A_m^b} \quad (6-4)$$

انرژی کرنشی مدل خرپا را می‌توان در نهایت به صورت زیر نوشت:

$$\Lambda^t = \sum_m K_m^\rho (r_m^a - R_m^a)^2 + \sum_m \frac{12K_m^\theta}{(R_m^b)^2} (r_m^b - R_m^b)^2 \quad (7-4)$$

بدین ترتیب اودگارد توانست خواص مکانیکی نانولوله‌های تک دیواره را پیش‌بینی کند.

۴-۱-۲ مدل لی و چو^{۵۹}

لی و چو برای اولین بار در سال ۲۰۰۳ یک دیدگاه مکانیک ساختاری را برای مدل‌سازی تغییرشکل نانولوله‌های کربنی ارائه کردند [۲۹]. اصل اساسی در این مدل در برگیرنده این مفهوم است که نانولوله‌های کربنی در واقع ساختارهای هندسی قاب مانند هستند. در این مدل، پیوند میان اتم‌ها به صورت تیرهای حامل بار عمل می‌کنند؛ درحالی‌که اتم‌ها به عنوان نقاط اتصال دهنده (مفصل) عضوهای تیر، ایفای نقش می‌کنند. با برقراری ارتباط میان مکانیک ساختاری و مکانیک ملکولی می‌توان پارامترهای خصوصیات مقطعی عضوهای تیر را بدست آورد.

تحلیل مکانیک ساختاری، جابه‌جایی‌ها، کرنش‌ها و تنش‌های ساختار را تحت شرایط مرزی مختلف تعیین می‌کند. از میان روش‌های ساختاری مدرن مختلف، روش ماتریس سختی بیشتر از سایر روش‌ها کاربرد دارد. این روش می‌تواند به راحتی برای تحلیل ساختارها با هندسه دلخواه و مسائل استاتیک-الاستیک خطی مانند مسائل کمانش و پلاستیک و همچنین مسائل دینامیکی استفاده شود.

برای ساختارهای قاب فضایی ماکروسکوپیک ساخته شده از مواد مهندسی کاربردی، خصوصیات مواد و پارامترهای مقطعی المان را می‌توان به راحتی از هندبوک‌های مواد و محاسبات براساس ابعاد مقطعی المان به دست آورد. برای نانولوله‌های نانوسکوپیک^{۶۰}، هیچ گونه اطلاعاتی در رابطه با خصوصیات الاستیک و مقطعی پیوندهای کربن-کربن وجود ندارد. بنابراین در این روش از برقراری ارتباط میان شیمی محاسباتی میکروسکوپیک و مکانیک ساختاری ماکروسکوپیک استفاده می‌گردد.

از نقطه نظر مکانیک ملکولی، یک نانولوله کربنی می‌تواند به صورت یک ملکول بزرگ شامل اتم‌های کربن در نظر گرفته شود. هسته‌های اتمی نماینده نقاط مواد هستند. حرکت آن‌ها مرتبط با یک میدان نیرویی

⁵⁹ Li and Chou

⁶⁰ Nanoscopic

است که از برهمکنش الکترون-هسته و برهمکنش هسته-هسته ایجاد گردیده است. معمولاً میدان نیرویی به شکل انرژی پتانسیل استریک⁶¹ بیان می‌گردد. آن فقط به موقعیت نسبی هسته‌های در برگیرنده ملکول وابسته می‌باشد.

در نانولوله‌های کربنی، اتم‌های کربن توسط پیوندهای کووالانسی به شکل یک شش ضلعی بر روی دیواره نانولوله متصل شده‌اند. هنگامی که یک نانولوله تحت بارهای خارجی قرار می‌گیرد، جابه‌جایی تک تک اتم-ها توسط این پیوندها مقید می‌گردد. تغییرشکل کلی نانولوله ناشی از برهمکنش این پیوندها می‌باشد. با در نظر گرفتن پیوندهای کووالانسی به عنوان المان‌های ارتباط دهنده میان اتم‌های کربن، نانولوله می‌تواند به صورت یک ساختار قاب مانند فضایی مدل شود. برای سهولت، سطح مقطع پیوندهای کربن-کربن در حالت ایده‌آل و به صورت دایره فرض شده است. بنابراین می‌توان فرض کرد که $I_x = I_y = I$ و فقط سه پارامتر سختی EA، EI و GJ مورد نیاز هستند.

چون تغییرشکل قاب از تغییر در انرژی‌های کرنش ناشی می‌شود، این سه پارامتر از معادل‌سازی انرژی‌ها بدست می‌آیند. برطبق تئوری مکانیک ساختاری کلاسیک، انرژی کرنش یک تیر یکنواخت با طول L که در معرض نیروی محوری N قرار دارد به صورت زیر بیان می‌شود:

$$U_A = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = \frac{1}{2} \frac{N^2 L}{EA} = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (\Delta L)^2 \quad (8-4)$$

که ΔL تغییرشکل محوری می‌باشد. انرژی کرنشی یک تیر یکنواخت تحت ممان خمشی خالص M به صورت زیر بیان می‌شود:

$$U_M = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = \frac{2EI}{L} \alpha^2 = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (2\alpha)^2 \quad (9-4)$$

که α بیان کننده زاویه چرخش در دو انتهای تیر می‌باشد. انرژی کرنشی یک تیر یکنواخت تحت پیچش خالص T به صورت زیر بیان می‌شود:

$$U_T = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{1}{2} \frac{T^2 L}{GJ} = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\Delta\beta)^2$$

⁶¹ Steric

(۱۰-۴)

که $\Delta\beta$ پیچش نسبی میان دو انتهای تیر است.

همانگونه که در شکل (۳-۴) مشاهده می‌کنید، با معادل‌سازی معادلات و با فرض برابر بودن ΔL با Δr ، 2α و $\Delta\beta$ با $\Delta\phi$ می‌توان به روابط زیر دست یافت.

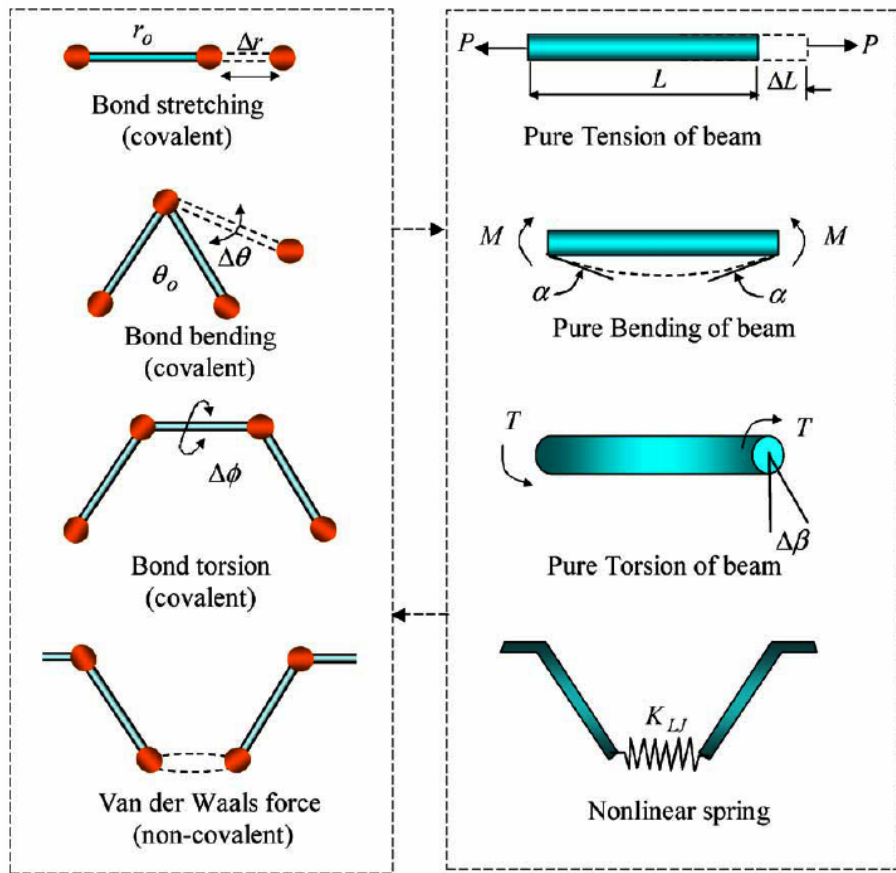
$$\frac{EA}{L} = k_r, \quad \frac{EI}{L} = k_\theta, \quad \frac{GJ}{L} = k_\phi \quad (۱۱-۴)$$

با قرار دادن ثابت‌های نیرو از مکانیک ملکولی می‌توان پارامترهای سختی مقطعی را به دست آورد. لی و چو برای پیش‌بینی مدول یانگ و برشی نانولوله‌های تک دیواره، از برهمکنش واندروالس صرف‌نظر نمودند؛ اما در سال ۲۰۰۴ آن‌ها با اضافه نمودن برهمکنش واندروالس به مدل خود توانستند خواص مکانیکی نانولوله‌های چند دیواره را نیز پیش‌بینی کنند.

۳-۱-۴ مدل هو^{۶۲}

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 برای

⁶² Hu

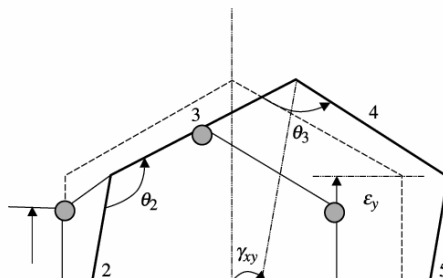


شکل (۴-۳): معادل سازی مکانیک ملکولی و مکانیک ساختاری برای برهمکنش های پیوندی و غیر پیوندی میان اتم های کربن (الف) مدل مکانیک ملکولی (ب) مدل مکانیک ساختاری [۹]

نانولوله های کربنی باشد. او انرژی کرنشی برای حالت تغییر شکل یک شش ضلعی منتظم را در حالت تغییر شکل اختیاری (شکل ۴-۴) به صورت زیر نوشت:

$$\Gamma = \left(\frac{9}{8} RE_1 A_1 + \frac{9\sqrt{3}}{8} RE_2 A_2 \right) \varepsilon_x^2 + \left(\frac{3}{4} RE_1 A_1 + \frac{3\sqrt{3}}{4} RE_2 A_2 \right) \varepsilon_x \varepsilon_y + \left(\frac{9}{8} RE_1 A_1 + \frac{9\sqrt{3}}{8} RE_2 A_2 \right) \varepsilon_y^2 + \left(\frac{3}{8} RE_1 A_1 + \frac{3\sqrt{3}}{8} RE_2 A_2 \right) \gamma_{xy}^2 \quad (12-4)$$

جاییکه $E_1 A_1$ ثابت سختی عضو a و $E_2 A_2$ ثابت سختی عضو b در مدل خرپا می باشد.



شکل (۴-۴): یک تغییرشکل دلخواه برای سلول واحد شش ضلعی [۳۰]

از طرف دیگر با در نظر گرفتن سلول واحد به صورت یک ماده همگن پیوسته، انرژی کرنشی ذخیره

شده در آن در هنگام تغییرشکل به صورت زیر بیان می گردد:

$$U = \left[\frac{E}{1-\nu^2} (\varepsilon_x^2 + \varepsilon_y^2 + 2\nu\varepsilon_x\varepsilon_y) + G(\gamma_{xy}^2) \right] \frac{3\sqrt{3}}{2} R^2 t_s \quad (۱۳-۴)$$

با مقایسه دو طرف معادلات (۴-۱۲) و (۴-۱۳) می توان نوشت:

$$\frac{9}{8} RE_1 A_1 + \frac{9\sqrt{3}}{8} RE_2 A_2 = \frac{3\sqrt{3}}{2} \frac{E}{1-\nu^2} R^2 t \quad (۱۴-۴)$$

$$\frac{3}{4} RE_1 A_1 + \frac{3\sqrt{3}}{4} RE_2 A_2 = 3\sqrt{3} \frac{E\nu}{1-\nu^2} R^2 t \quad (۱۵-۴)$$

$$\frac{3}{8} RE_1 A_1 + \frac{3\sqrt{3}}{8} RE_2 A_2 = \frac{3\sqrt{3}}{2} GR^2 t \quad (۱۶-۴)$$

سه معادله بالا فقط در صورتی ارضاء می شوند که $3\nu = 1$ باشد. آن بدین معنی است که مدل خرپای

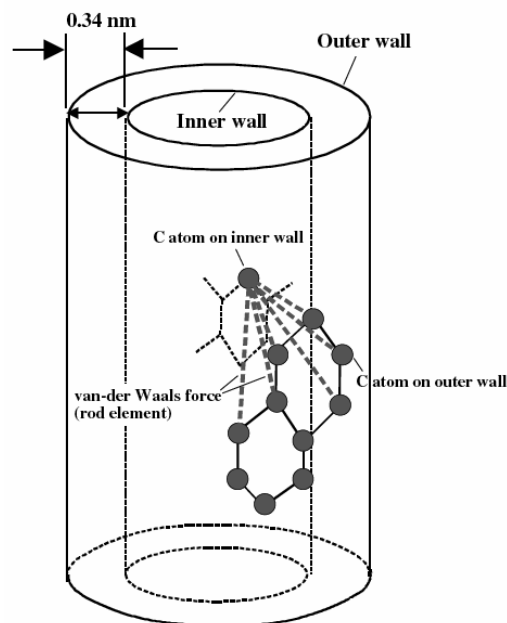
معادل فقط می تواند به صورت یک ماده پیوسته همگن با ضریب پواسون $0/۳۳$ در نظر گرفته شود. اما

می دانیم که ضریب پواسون یک ورقه گرافیت در بازه $0/۱۶$ تا $0/۲۹$ قرار دارد. در واقع هیچ ماده ای با

چنین توپولوژی نمی توان برای این خرپای معادل در نظر گرفت. هو برای غلبه بر این مشکل، یک مدل

تیر در نظر گرفت و از تیر تیموشنکو برای مدل سازی استفاده نمود.

گرچه مدل تیر هو برای پیش بینی مدول یانگ و برشی نانولوله ها مناسب است؛ اما نتایج بدست آمده از این مدل برای پیش‌بینی بار کمانشی در سال ۲۰۰۷ نشان داد که اختلاف فاحشی میان نتایج او و نتایج دینامیک ملکولی وجود دارد [۳۱]. او همچنین در سال ۲۰۰۷ با در نظر گرفتن المان میله برای مدل کردن برهمکنش واندروالس میان دو دیواره در نانولوله‌های چند دیواره، بار کمانشی را برای این نانولوله‌ها تعیین کرد (شکل (۴-۵)).



شکل (۴-۵): مدل‌سازی نیروهای واندروالس بین اتم‌های کربن بر روی دو دیواره مجزا [۳۱]

تحقیقات انجام شده در زمان حاضر نشان می‌دهد که احتمالاً نمی‌توان با استفاده از مدل تیر، خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی را تحت شرایط مختلف بارگذاری و مرزی بدست 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 ملکولی [۵۶]، 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.

۴-۱-۴ مدل کالامکارو

کالامکارو در سال ۲۰۰۶ در کنار مدل پیوسته ناهمگن خود که در فصل گذشته به آن اشاره شد، همانند شکل (۴-۶)، یک مدل ساختاری نیز ارائه کرد که در آن، همانند مدل‌های قبلی از المان تیر برای مدل کردن برهمکنش‌های پیوندی و از یک المان فنر غیرخطی برای مدل کردن برهمکنش غیرپیوندی میان دیواره‌ها در نانولوله‌های چند دیواره استفاده شده است [۹]. او در مدل خود با مشتق-

گیری از تابع پتانسیل واندروالس توانست نیروی ناشی از برهمکنش‌های غیرپیوندی میان اتم‌ها را مدل کند.

$$F_{LJ} = \frac{du_{LJ}}{dr} = 4 \frac{\varepsilon}{r} \left[-12 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} + 6 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (۴-۱۷)$$

البته این نیرو فقط برای مدل‌سازی برهمکنش میان دو دیواره در نانولوله‌های چند دیواره به کار رفته است. مشخصات هندسی و مکانیکی المان‌های در نظر گرفته توسط کالامکارو به صورت زیر می باشد:

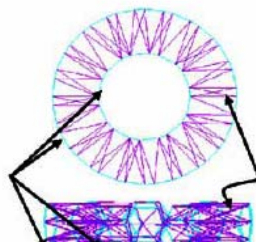
$$d_b = 4 \sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}} \quad (۴-۱۸)$$

$$E = \frac{k_r^2 L}{4\pi k_\theta} \quad (۴-۱۹)$$

$$G = \frac{k_r^2 L k_\phi}{8\pi k_\theta^2} \quad (۴-۲۰)$$

از این مدل فقط برای پیش‌بینی خواص مکانیکی همانند مدول یانگ و مدول برشی استفاده شده است. این مدل نیز همانند مدل‌های ساختاری که قبلاً توضیح داده شده است، قادر به پیش‌بینی بار کمانش نمی باشد.

نمای بالا



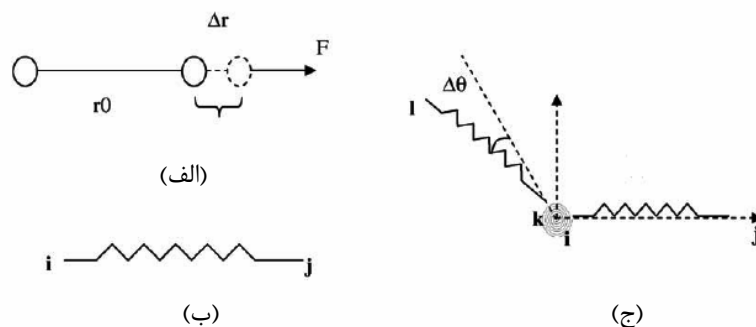
نانولوله‌های هم‌مرکز
تک دیواره

المان فنر غیرخطی
لنارد-جونز

شکل (۴-۶): مدل المان محدود برای نانولوله دو دیواره [۹]

۴-۱-۵ مدل معو و روسی^{۶۳}

معو و روسی در سال ۲۰۰۶ مدلی برای پیش‌بینی استحکام نهایی نانولوله‌های کربنی ارائه نمودند که در آن از المان‌های فنر استفاده شده است [۳۲]. آن‌ها فقط پتانسیل‌های کشش پیوند و تغییر زاویه را در مدل خود اعمال کردند و از سایر پتانسیل‌ها چشم‌پوشی نمودند. همانگونه که در شکل (۴-۷) 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 (۴-۷): پیوند کربن-کربن (الف) مدل فیزیکی (ب) مدل FE کشش پیوند (ج) مدل FE خمش پیوند

⁶³ Meo and Rossi

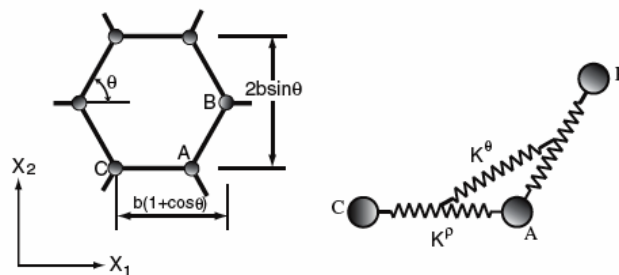
این مدل در نرم افزار MATLAB اجرا شده است. از آن جاییکه معو و روسی از مدل خود برای بررسی زوال^{۶۴} نانولوله‌ها در کشش استفاده نموده‌اند، بنابراین از پتانسیل پیچش پیوند که در کمانش نانولوله-های کربنی بسیار مهم می‌باشد، صرف‌نظر کرده‌اند. هرچند نتایج آن‌ها برای تحلیل‌هایی که با کشش نانولوله سر و کار دارند، مناسب است؛ اما مدل آن‌ها قادر به تحلیل کمانش نانولوله‌ها نمی‌باشد.

۴-۱-۶ مدل ناتسوکی^{۶۵}

ناتسوکی در سال ۲۰۰۳ بر اساس تئوری الاستیک خطی، نیرو و تغییر شکل یک خرپا را همانند شکل (۴-۸) به عنوان مدلی برای نانولوله‌های کربنی بدست آورد [۳۳].

همان گونه که در شکل (۴-۹) مشاهده می‌کنید، تحلیل نیرویی بر روی یک میله در حالت ساختار زیگزاگ

انجام شده است. با در نظر گرفتن نیرو و ممان‌های عمل کننده بر روی المان AB، می‌توان معادلات زیر را



شکل (۴-۸): المان یک مدل ساختاری قاب [۳۳]

نوشت:

⁶⁴ Failure
⁶⁵ Natsuki

$$(۲۱-۴)$$

$$P = \sigma_1 t b \sin \theta$$

$$(۲۲-۴)$$

$$M = M_A + M_B = p b \sin \theta$$

که t ضخامت نانولوله می باشد.

بر اساس تئوری الاستیک، معادلات تعادل برای تغییرات کششی و خمشی خرابا را می توان به صورت

زیر نوشت:

$$p \cos \theta = K^\rho \delta_{AB}^\rho \quad 2p = K^\rho \delta_{AC}^\rho \quad (۲۳-۴)$$

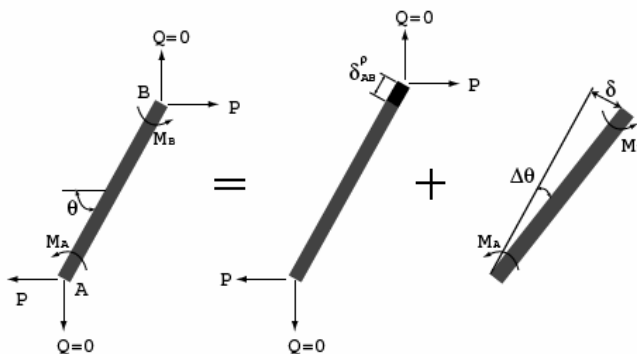
$$j=A,B \text{ و } M_j = K^\theta \Delta\theta + K^\theta (2\Delta\theta) \quad (۲۴-۴)$$

که δ_{AC}^ρ و δ_{AB}^ρ تغییر شکل های میله های خرابا می باشند. هر میله با چهار میله دیگر ارتباط دارد که به زوایای پیوند وابسته است.

در معادله (۴-۴۲)، مقادیر $\Delta\theta$ و $2\Delta\theta$ تغییرات زاویه میان میله AB و نزدیکترین دو میله همسایه

می باشد. یکی از آنها دارای تغییر زاویه ای به اندازه دو برابر $\Delta\theta$ است که به علت تقارن در ساختار

شش ضلعی می باشد.



شکل (۴-۹): تحلیل تغییر شکل محوری و جا به جایی زاویه ای یک خرابای زیگزاگ [۳۳]

کرنش ها در مسیر X_1 و X_2 به ترتیب به صورت زیر تعریف می شوند:

$$\varepsilon_1 = \frac{\delta \sin \theta + \delta_{AB}^\rho \cos \theta + \delta_{AC}^\rho}{b(1 + \cos \theta)}$$

$$(۲۵-۴)$$

$$\varepsilon_2 = \frac{\delta_{AB}^{\rho} \sin \theta - \delta \cos \theta}{b \sin \theta} \quad (۲۶-۴)$$

برای یک نانولوله کربنی تک دیواره با ضخامت موثر D_{na} ، مدول الاستیک نانولوله زیگزآگ به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$E_z = \frac{4D_n t}{D_{na}^2} \left(\frac{\sigma_1}{\varepsilon_1} \right) \quad (۲۷-۴)$$

که σ_1 / ε_1 بیانگر مدول یانگ ورقه گرافیت در مسیر X می‌باشد. با جایگذاری معادلات (۲۱-۴) تا (۲۶-۴) در معادله (۲۷-۴) می‌توان نوشت:

$$E_z = \frac{24D_n(1 + \cos \theta)}{D_{na}^2 \sin \theta} \left[\frac{K^{\theta} K^{\rho}}{b^2 K^{\rho} \sin^2 \theta + 6K^{\theta}(\cos^2 \theta + 2)} \right] \quad (۲۸-۴)$$

نسبت پواسون را می‌توان نسبت میان کرنش جنبی به کرنش محوری دانست:

$$\nu_{12} = -\frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} = \frac{(b^2 K^{\rho} - 6K^{\theta})(1 + \cos \theta) \cos \theta}{b^2 K^{\rho} \sin^2 \theta + 6K^{\theta}(2 + \cos^2 \theta)} \quad (۲۹-۴)$$

با اعمال $\theta = \pi/3$ ، مدول الاستیک و ضریب پواسون به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$E_z = \frac{32\sqrt{3}D_n}{D_{na}^2} \frac{K^{\theta} K^{\rho}}{b^2 K^{\rho} + 18K^{\theta}} \quad (۳۰-۴)$$

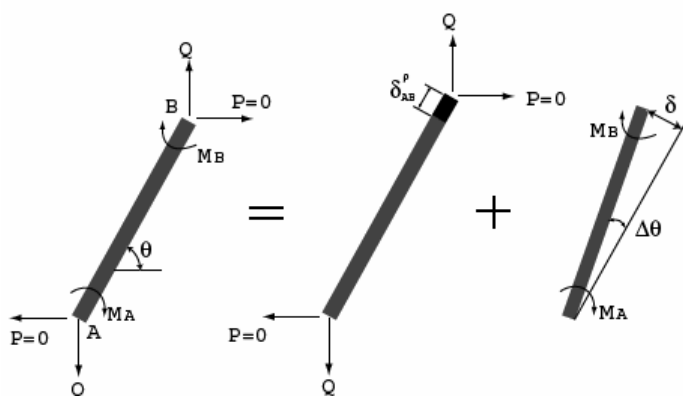
برای یک نانولوله آرمچیر، دیدگاه تحلیل دقیقاً مشابه زیگزآگ می‌باشد. تحلیل نیرو و تغییر شکل یک میله در شکل (۴-۱۰) نشان داده شده است. هنگامی که یک نانولوله در معرض تنش‌های کششی σ_2 قرار می‌گیرد، نیرو و ممان به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$(۳۲-۴)$$

$$Q = \sigma_2 t b (1 + \cos \theta)$$

$$(۳۳-۴)$$

$$M = M_A + M_B = Qb \cos \theta$$



شکل (۴-۱۰): تحلیل تغییر شکل محوری و جابه‌جایی زاویه‌ای یک خرپای آرمچیر [۳۳]

معادلات تعادل پیرامون تغییر زاویه و کشش میله به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$Q \sin \theta = K^\rho \delta_{AB}^\rho \quad (۳۴-۴)$$

$$, j=A,B \quad (۳۵-۴)$$

$$\varepsilon_1 = \frac{\delta_{AB}^\rho \cos \theta - \delta \sin \theta}{b(1 + \cos \theta)} \quad M_j = K^\theta \Delta \theta + K^\theta (2\Delta \theta) \quad (۳۶-۴)$$

$$\varepsilon_2 = \frac{\delta_{AB}^\rho \sin \theta + \delta \cos \theta}{b \sin \theta} \quad (۳۷-۴)$$

مدول الاستیک و ضریب پواسون نانولوله آرمچیر به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$E_a = \frac{24D_n \sin \theta}{D_{na}^2 (1 + \cos \theta)} \left[\frac{K^\theta K^\rho}{b^2 K^\rho \cos^2 \theta + 6K^\theta \sin^2 \theta} \right] \quad (۳۸-۴)$$

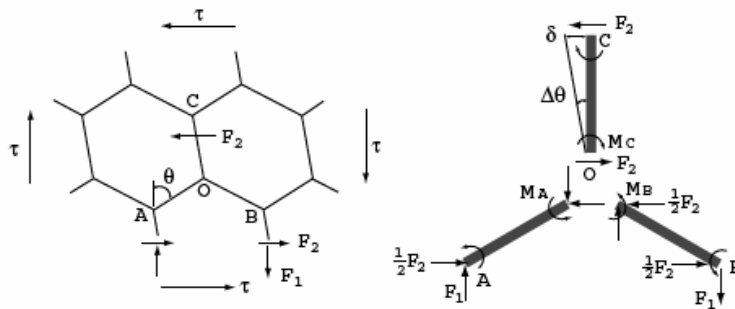
$$v_{12} = -\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} = \frac{(b^2 K^\rho - 6K^\theta) \sin^2 \theta \cos \theta}{b^2 K^\rho \cos^2 \theta + 6K^\theta \sin^2 \theta (1 + \cos \theta)} \quad (۳۹-۴)$$

با اعمال $\theta = \pi/3$ ، مدول الاستیک و ضریب پواسون آرمچیر به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$E_z = \frac{32\sqrt{3}D_n}{D_{na}^2} \frac{K^\theta K^\rho}{b^2 K^\rho + 18K^\theta} \quad (۴۰-۴)$$

$$v_{12} = \frac{b^2 K^\rho - 6K^\theta}{b^2 K^\rho + 18K^\theta} \quad (۴۱-۴)$$

شکل (۴-۱۱)، نیرو و تغییر شکل‌های یک ورقه گرافن غیر پیچیده را نشان می‌دهد که در معرض تنش برشی τ قرار دارد.



شکل (۴-۱۱): تحلیل تغییر شکل برشی برای یک خرپا [۳۳]

نیروی برشی و ممان اعمال شده به میله‌ها را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$F_1 = \tau b t (1 + \cos \theta) \quad (4-42)$$

$$F_2 = \tau (2 b t \sin \theta) \quad (4-43)$$

$$M_2 = F_2 b / 2 \quad (4-44)$$

معادلات تعادل نیرو و ممان را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$F_1 \cos \theta + \frac{1}{2} F_2 \sin \theta = K^p \delta_{AO} \quad (4-45)$$

$$M_C = K^{\theta} (2 \Delta \theta) \quad (4-46)$$

که δ_{AO} تغییر شکل میله AO می‌باشد.

بنابراین می‌توان کرنش برشی را به صورت زیر بدست آورد:

$$\gamma = \frac{\delta + \delta_{AO} \sin \theta}{b(1 + \cos \theta)} + \frac{\delta_{AO} \cos \theta}{b \sin \theta} \quad (4-47)$$

برای یک نانولوله کربنی تک دیواره با قطر موثر D_{na} ، مدول برشی را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

$$G_{z\theta} = \frac{D_{na}^4 - (D_{na} - 2t)^4}{D_{na}^4} \left(\frac{\tau}{\gamma} \right) \quad (4-48)$$

به طوریکه τ/γ معرف تنش برشی ورقه گرافن می باشد.

با جایگذاری معادلات (۴۲-۴) تا (۴۷-۴) در معادله (۴۸-۴) و $\theta = \pi/3$ می توان نوشت:

$$G_{z\theta} = \frac{D_{na}^4 - (D_{na} - 2t)^4}{tD_{na}^4} \left(\frac{2\sqrt{3}K^\theta K^\rho}{b^2 K^\rho + 6K^\theta} \right) \quad (۴۹-۴)$$

همانطور که مشاهده می گردد، همه این مدل های ساختاری از فرض ساده سازی استفاده نموده اند.

بنابراین برای حوزه خاصی از مسائل کاربرد دارند و در بعضی موارد دارای نتایج دقیق نیستند. در فصل

بعد کامل ترین مدل ساختاری را که موضوع اصلی پایان نامه است، ارائه خواهد شد.

فصل پنجم

مدل ساختاری جدید

مقدمه

همه مدل‌های ساختاری که در فصل قبل به آن‌ها پرداخته شد، دارای یک عیب بسیار بزرگ بودند. محدودیت در پوشش تمام مسائل مکانیکی را می‌توان مشکل عمده همه این مدل‌ها دانست. بجز مدل هو و مدل لی و چو که برای تحلیل کمانش مورد استفاده قرار گرفتند، سایر مدل‌ها صرفاً برای پیش-بینی مدول یانگ، مدول برشی و ضریب پواسون مورد استفاده قرار گرفته‌اند. حتی مقایسه نتایج مدل هو و مدل لی و چو نیز نشان می‌دهد که مدل‌های ساختاری آن‌ها قادر به پیش‌بینی بار کمانش نمی‌باشد. در این فصل به ارائه مدل ساختاری جدیدی خواهیم پرداخت که کامل‌ترین مدل ساختاری ارائه گردیده تاکنون می‌باشد. در ابتدا به بررسی ساخت مدل در نرم‌افزار ABAQUS پرداخته و در ادامه به مقایسه نتایج آن با نتایج سایر مدل‌ها خواهیم پرداخت.

۵-۱ نرم افزار ABAQUS

نرم‌افزار مورد استفاده در مدل ساختاری جدید، نرم افزار ABAQUS می‌باشد [۳۴]. قسمت اصلی این نرم‌افزار فضای CAE آن است که به کاربر امکان اجرای دستورات توسط آیکون‌های کمکی و مشاهده گرافیکی نتایج حاصل را می‌دهد. این فضا به حوزه‌های مختلف تقسیم می‌شود که فرآیند مدل‌سازی در طی این حوزه‌ها صورت می‌پذیرد.

حوزه اول، **part** : مربوط به ساخت هسته اولیه مدل می‌باشد. برای ایجاد یک نانولوله کربنی به ایجاد اتم‌های کربن نیاز است. در این مدل، اتم‌های کربن به صورت گره‌های تو خالی در نظر گرفته می‌شوند.

حوزه دوم، **property** : در این حوزه، خصوصیات ماده که در اینجا گره‌های تو خالی هستند، اعمال می‌شوند. با توجه به اینکه مدل مورد استفاده در این پایان‌نامه برای پیش‌بینی خواص مکانیکی تحت بارهای استاتیکی می‌باشد، بنابراین می‌توان از اعمال خصوصیات ماده در این حوزه چشم‌پوشی نمود.

حوزه سوم، assembly : این حوزه 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.

حوزه چهارم، step : نوع تحلیل مورد نیاز، در این حوزه تعیین می‌گردد. تحلیل‌های صورت گرفته در این پایان‌نامه شامل تحلیل‌های استاتیکی می‌باشد. برای پیش‌بینی مدول یانگ و برشی از تحلیل static riks و برای پیش‌بینی بارهای کمانشی از تحلیل buckle استفاده گردیده است.

حوزه پنجم، interaction : هسته اصلی مدل، این حوزه می‌باشد. در این حوزه، المان‌های مختلفی برای ایجاد برهمکنش میان دو قسمت وجود دارد. المان‌های مورد استفاده برای ارتباط میان گره‌های تو خالی در مدل ساختاری جدید، شامل فنر و رابط^{۶۶} هستند. بر روی این حوزه در ادامه به طور مفصل بحث خواهد شد.

حوزه ششم، load : در این حوزه شرایط مرزی و شرایط بارگذاری تعیین می‌شوند. در این مدل، دو صفحه دایروی در دو انتهای نانولوله کربنی قرار داده شده‌اند به طوریکه بارگذاری و شرایط مرزی به نقطه مرکزی این صفحات اعمال می‌گردد.

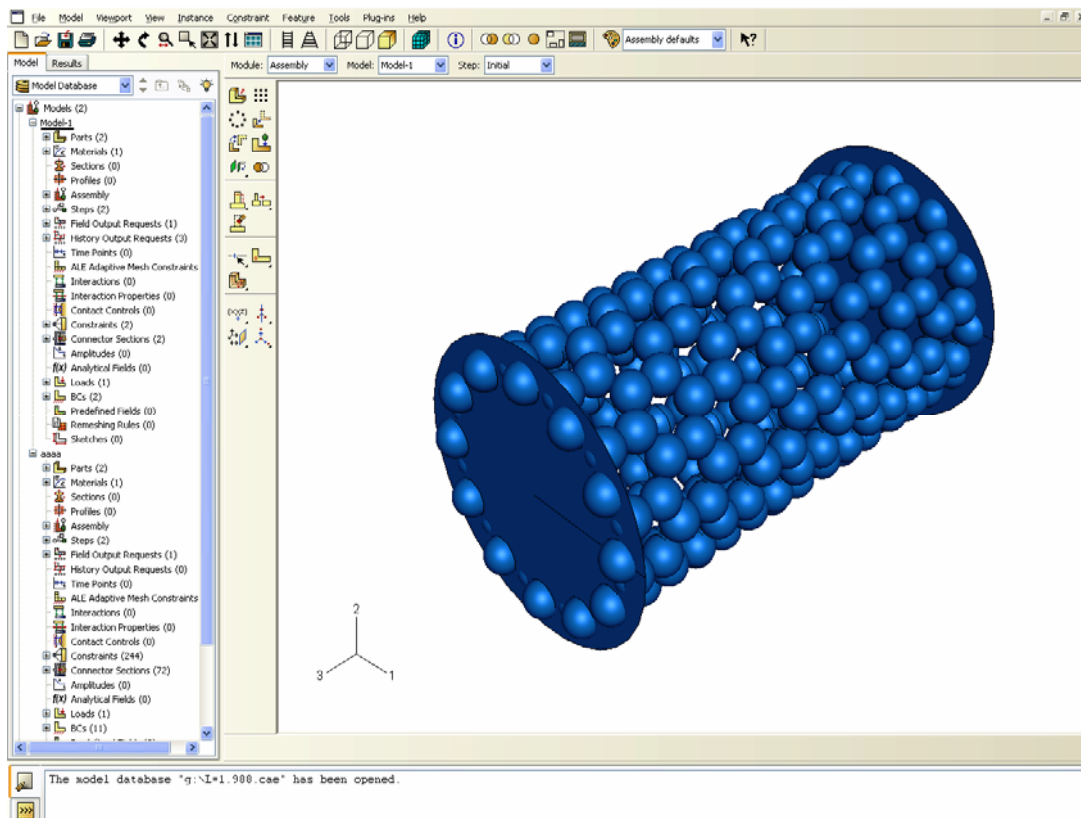
حوزه هفتم، mesh : در این حوزه، المان‌بندی گره‌های تو خالی صورت می‌پذیرد. هرچند که نوع و تعداد المان‌ها تاثیری بر روی نتیجه نهایی نخواهد داشت؛ اما برای مشاهده تصویر تغییر شکل یافته نانولوله کربنی نیازمند المان‌بندی هستیم.

حوزه هشتم، job : در این حوزه، عملیات و محاسبات تحلیل صورت می‌گیرد. زمان تحلیل بستگی به تعداد گره‌های تو خالی یعنی اندازه نانولوله کربنی و همچنین تعداد المان‌ها دارد.

⁶⁶ Connector

حوزه نهم، visualization : نتایج نهایی بدست آمده و نمودارهای حاصل را می توان در این حوزه یافت.

در شکل (۱-۵)، یک مدل کامل از نانولوله کربنی زیگزاگ به همراه صفحات تکیه گاهی در فضای CAE نرم افزار ABAQUS نمایش داده شده است.



شکل (۱-۵) : تصویر یک نانولوله کربنی زیگزاگ در فضای CAE نرم افزار ABAQUS

۲-۵ برهمکنش در حوزه interaction

۱-۲-۵ پتانسیل های ملکولی

در فصل دوم درباره انرژی های پتانسیل موجود در نانولوله های کربنی بحث شد. انرژی پتانسیل کل در نظر گرفته شده برای مدل ساختاری در اینجا به صورت زیر می باشد که در آن از پتانسیل های غیر پیوندی الکترواستاتیک و واندروالس صرف نظر گردیده است [۱۴].

$$u_{total} = u_r + u_\theta + u_\phi + u_\omega \quad (1-5)$$

که در آن

$$u_r = D_e \{ [1 - e^{-\beta(r-r_0)}]^2 - 1 \} \quad (۲-۵)$$

$$u_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 [1 + k_{sexitic} (\theta - \theta_0)^4] \quad (۳-۵)$$

$$u_\phi = \frac{1}{2} k_\phi [1 + \cos(n\phi - \phi_0)] \quad (۴-۵)$$

$$u_\omega = \frac{1}{2} k_\omega [1 + \cos(n\omega - \omega_0)] \quad (۵-۵)$$

همانگونه که در شکل‌های (۲-۵) الف) و (۳-۵) نمایش داده شده است؛ 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:

$$\Delta\theta \approx \frac{2(\Delta R)}{r_0}, r_0 = 0.142nm \quad (۶-۵)$$

بنابراین می‌توان به راحتی معادله (۳-۵) را به صورت زیر نوشت:

$$u_\theta = \frac{2}{r_0^2} k_\theta (R - R_0)^2 [1 + \frac{16}{r_0^4} k_{sexitic} (R - R_0)^4] \quad (۷-۵)$$

نیروی کشش، گشتاور خمشی تغییر زاویه، گشتاور پیچشی دوسطحی و گشتاور پیچشی خارج صفحه‌ای را می‌توان توسط مشتق‌گیری از معادلات (۲-۵)، (۴-۵)، (۵-۵) و (۷-۵) بدست آورد:

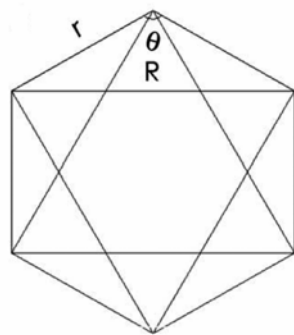
$$F(r - r_0) = 2\beta D_e [1 - e^{-\beta(r-r_0)}] e^{-\beta(r-r_0)} \quad (۸-۵)$$

$$F(R - R_0) = \frac{4}{r_0^2} k_\theta (R - R_0) [1 + \frac{16}{r_0^4} (1 + \frac{4}{r_0^2}) k_{sexitic} (R - R_0)^4] \quad (۹-۵)$$

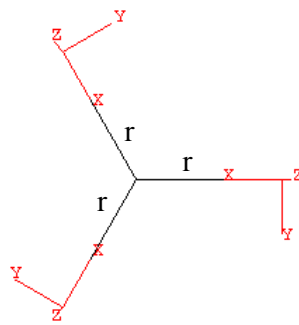
$$T(\phi - \phi_0) = \frac{1}{2} k_\phi n \sin(n\phi - \phi_0) \quad (۱۰-۵)$$

$$T(\omega - \omega_0) = \frac{1}{2} k_\omega n \sin(n\omega - \omega_0) \quad (۱۱-۵)$$

ثابت‌های اعمال شده در معادلات برهمکنش، در جدول ۱-۵ در انتهای فصل آورده شده‌اند [۱۱].



(الف)



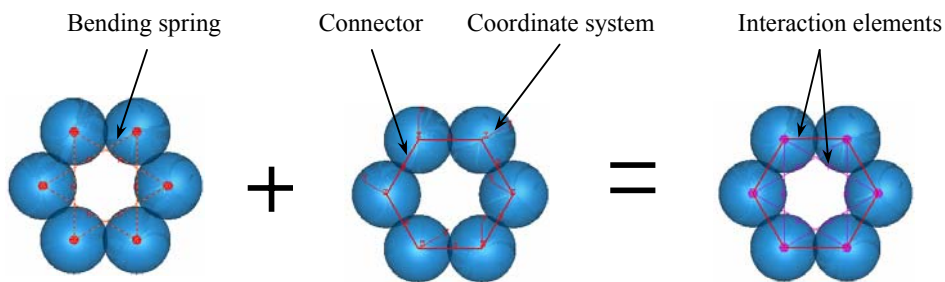
(ب)

شکل (۲-۵): (الف) یک سلول واحد شش ضلعی (ب) محل قرارگیری مختصات‌های موضعی بر روی رابط‌ها

۲-۵-۵ المان‌های برهمکنش

در این مدل ساختاری از المان‌های فنر و رابط برای مدل کردن برهمکنش‌های میان اتم‌های کربن استفاده شده است؛ به طوریکه یک فنر محوری غیر خطی برای مدل کردن برهمکنش تغییر زاویه پیوند و یک رابط غیر خطی برای مدل کردن برهمکنش‌های کشش پیوند و پیچش پیوند بکار رفته است (شکل (۳-۵)).

این المان‌ها به نقاط مرجع^{۶۷} واقع بر مرکز گره‌های تو خالی متصل می‌گردند. بر روی هر یک از این گره‌ها



شکل (۳-۵): المان‌های فنر و رابط متناظر با برهمکنش اتم‌های کربن

⁶⁷ Reference point

یک سیستم مختصات موضعی قرار گرفته است که ترکیبی از سیستم مختصات کارتزین^{۶۸} برای کشش و سیستم مختصات چرخشی^{۶۹} 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 ABAQUS فقط قادر به استفاده از فنر خطی هستیم، بنابراین با اجرای دستور فنر غیر خطی در فایل ورودی^{۷۰} نرم افزار و اعمال رابطه غیر خطی برای $F(\Delta R)$ بر اساس ΔR با استفاده از معادله (۹-۵) می‌توان فنر خمشی را به مدل اعمال کرد. برای اعمال نیروهای کششی و پیچشی به رابطها، می‌توانیم به طور مستقیم سفتی‌های غیر خطی را در سه جهت x، y و z اعمال کنیم. برای سفتی‌های کششی در جهت x، می‌توانیم داده‌های غیر خطی را برای $F(\Delta r)$ بر اساس Δr و توسط معادله (۸-۵) بدست آوریم. برای سفتی‌های پیچشی در جهت x، می‌توان داده‌های غیر خطی را برای $T(\Delta \phi)$ بر اساس $\Delta \phi$ و توسط معادله (۱۰-۵) بدست آورد. و در نهایت برای سفتی‌های پیچشی در جهت y می‌توان داده‌های غیر خطی را برای $T(\Delta \omega)$ بر اساس $\Delta \omega$ و توسط معادله (۱۱-۵) بدست آورد.

۳-۵ خواص مکانیکی^{۷۱} نانولوله‌های کربنی

۳-۵-۱ مدول یانگ: یکی از پارامترهای مهم در حوزه مسائل مکانیکی، مدول یانگ می‌باشد. امروزه یافتن مدول یانگ برای یک ورق یا پوسته استوانه‌ای در جهان ماکرو، بسیار ساده است. با تحت کشش قرار دادن یک ورق و یا یک میله با ابعاد هندسی استاندارد و ترسیم نمودار تنش-کرنش مربوطه به راحتی می‌توان مدول یانگ را بدست آورد. اما در جهان نانو، حتی بدست آوردن مدول یانگ که از

⁶⁸ Cartesian coordinate

⁶⁹ Rotation coordinate

⁷⁰ Input File

⁷¹ Shear Modulus

جمله پارامترهای پایه در حوزه مکانیک محسوب می‌گردد، کاری بس دشوار است؛ به طوری که نتایج بدست آمده از کارهای تجربی و شبیه‌سازی‌های صورت گرفته دارای پراکندگی بسیاری می‌باشند. در جدول ۱-۵ نتایج بدست آمده از روش‌های مختلف تجربی برای مدول یانگ ارائه گردیده‌اند. یک سال پس از آنکه ایجیما نانولوله کربنی را کشف کرد، مدول یانگ نانولوله کربنی را در حدود یک ترا پاسکال پیش‌بینی نمود. چند سال پس از آن کارهای تجربی بر روی این نانولوله‌ها افزایش یافت؛ می‌توان شدت کارهای تجربی صورت گرفته را بین سال‌های ۱۹۹۶ تا ۲۰۰۰ دانست. از اواسط سال‌های شکل‌گیری کارهای تجربی، مدل‌سازی و شبیه‌سازی‌های عددی برای پیش‌بینی مدول یانگ نانولوله‌های کربنی رو به افزایش گذاشت. می‌توان شدت کارهای عددی صورت گرفته را بین سال‌های ۲۰۰۰ تا ۲۰۰۶ دانست. در جدول ۲-۵ نتایج بدست آمده از روش‌های مختلف عددی برای مدول یانگ ارائه گردیده‌اند.

جدول ۱-۵: نتایج تجربی بدست آمده برای مدول یانگ نانولوله‌های کربنی

نام	سال	مدول یانگ (گیگا پاسکال)		روش
		SWCNTs	MWCNTs	
Treacy et al [۳۵]	۱۹۹۶	-----	۱۸۰۰	دامنه ارتعاشات گرمایی
Wong et al [۳۶]	۱۹۹۷	۱۲۸۰	۱۱۰۰	خمش تیریک سرگردار
Krishnan [۳۷]	۱۹۹۸	۱۲۵۰	۱۲۷۰	ارتعاشات گرمایی
Lourie et al [۳۸]	۱۹۹۸	۳۲۰۰	۲۱۰۰	طیف نمایی رامان
Salvatat et al [۳۹]	۱۹۹۹	۸۱۰	۱۰۲۰	خمش تیر دوسر ساده
Tombler [۴۰]	۲۰۰۰	۱۲۰۰	-----	خمش تیر دوسر ساده
Yu et al [۴۱]	۲۰۰۰	۷۵۰	۹۰۰	تست کشش

همانگونه که در جداول ۱-۵ و ۲-۵ مشاهده می‌شود، پراکندگی بسیاری در نتایج مشاهده می‌گردد. این پراکندگی در نتایج تجربی بیشتر است. شاید یکی از دلایل آن استفاده از روش‌های مختلف در آزمایش باشد. اختلاف‌های فاحش در نتایج عددی بیشتر مربوط به اندازه ضخامت اعمال شده برای نانولوله می‌باشند. البته در حال حاضر بیشتر محققان اندازه ضخامت ۰/۳۴ نانومتر را ضخامت مؤثر و مدول یانگ ۱۰۷۰ گیگا پاسکال را مدول یانگ قابل قبول نانولوله‌های کربنی می‌دانند.

در این پایان‌نامه، در ابتدا مدول یانگ نانولوله کربنی محاسبه گردیده است. متعارف‌ترین روش برای محاسبه مدول یانگ، روش تست کشش می‌باشد. برای محاسبه خصوصیات مؤثر نانولوله‌های کربنی، نانولوله را به صورت پیوسته در نظر می‌گیرند. بنابراین مدول یانگ به صورت زیر محاسبه می‌گردد:

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{P/A_0}{\Delta L/L_0} \quad (۱۲-۵)$$

جدول ۲-۵: نتایج شبیه‌سازی عددی بدست آمده برای مدول یانگ نانولوله‌های کربنی

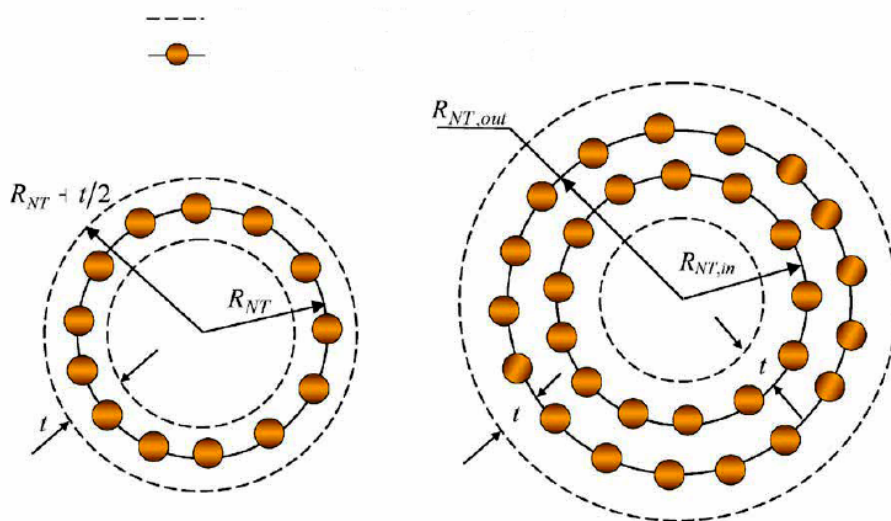
نام	سال	مدول یانگ (GPa)	ضخامت (nm)	روش
Yakobson et al [۲۴]	۱۹۹۶	۵۵۰۰	۰/۰۶۶	ترسوف-برنر
Krishnan et al [۳۷]	۱۹۹۶	۱۰۷۰	۰/۳۴	ترسوف-برنر
Cornwell et al [۴۲]	۱۹۹۷	۱۰۰۰	۰/۳۴	ترسوف-برنر
Lu et al [۴۳]	۱۹۹۸	۹۷۵	۰/۳۴	تابع چگالی عمومی
Yao et al [۴۴]	۱۹۹۸	۱۰۰۰	۰/۳۴	اتصال مقید
Hernandez [۴۵]	۱۹۹۸	۱۲۴۰	۰/۳۴	اتصال مقید
Goze et al [۴۶]	۱۹۹۹	۱۲۷۰	۰/۳۴	اتصال مقید
Van Lier et al [۴۷]	۲۰۰۰	۱۰۹۰	۰/۳۴	مکانیک کوانتوم
Prvlutskyy [۴۸]	۲۰۰۰	۱۱۵۰	۰/۳۴	مورس اصلاح شده
Popov et al [۴۹]	۲۰۰۰	۱۰۰۰	۰/۳۴	تئوری تجربی شبکه

Kudin et al[۵۰]	۲۰۰۱	۱۰۲۹	۰/۰۸۹۴	محاسبات آیینشیو
Belystchko [۱۴]	۲۰۰۲	۹۴۰	۰/۳۴	مورس اصلاح شده
Odegard et al[۲۸]	۲۰۰۲	۱۰۰۸	۰/۶۸	مدل ساختاری خرپا
Troya et al[۵۱]	۲۰۰۳	۱۱۶۰	۰/۳۴	مکانیک کوانتوم
Shintani et al[۵۲]	۲۰۰۳	۱۰۶۰	۰/۳۴	پتانسیل هارمونیک
Li and Chou[۲۹]	۲۰۰۳	۱۰۲۰	۰/۳۴	مدل ساختاری تیر
Xiao et al[۵۳]	۲۰۰۵	۱۱۰۰	۰/۳۴	تحلیلی
Wu et al[۵۴]	۲۰۰۶	۱۰۶۰	۰/۲۸۵	پتانسیل هارمونیک
Kalamkarov[۹]	۲۰۰۶	۱۰۰۰	۰/۶۸	مدل ساختاری
Kalamkarov[۹]	۲۰۰۶	۱۴۴۰	۰/۱۲۹	مدل پیوسته

که P نیروی محوری کل، A_0 مساحت سطح مقطع لوله پیوسته معادل، ΔL تغییر طول متناظر بدست آمده از شبیه‌سازی و L طول اولیه نانولوله می‌باشد. با توجه به شکل (۴-۵)، مساحت سطح مقطع A_0 را می‌توان به صورت زیر نوشت:

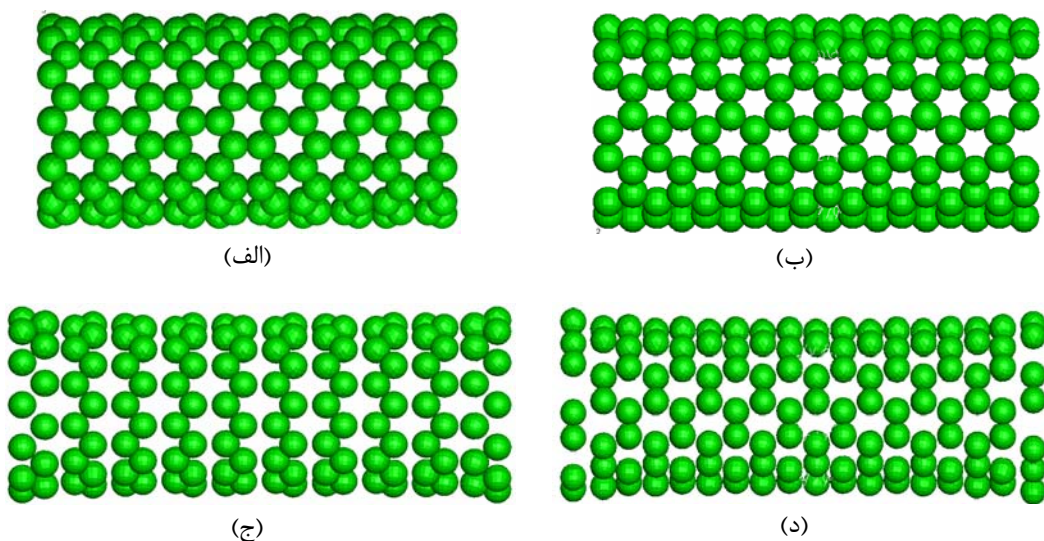
$$A_0 = \pi \left[\left(R_{NT} + \frac{t}{2} \right)^2 - \left(R_{NT} - \frac{t}{2} \right)^2 \right] \quad (۱۳-۵)$$

در آن R_{NT} شعاع مؤثر نانولوله می‌باشد که از جدول ۱-۲ بدست می‌آید.



شکل (۴-۵): سطح مقطع معادل نانولوله کربنی [۹]

شکل (۵-۵)، تصویر تغییر شکل یافته نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر تحت کشش محوری را نشان می‌دهد. با استفاده از مدل معرفی شده، تست کشش برای نانولوله‌های با نسبت‌های ظاهری مختلف انجام شده و نتایج آن در نمودار شکل (۶-۵) آورده شده است. همانگونه که در شکل مشاهده می‌گردد، با افزایش نسبت (L/d) ، برای هر دو ساختار زیگزاگ و آرمچیر مقدار مدول یانگ افزایش می‌یابد؛ به طوری‌که در نسبت‌های ظاهری بیشتر از ۱۰، به یک مقدار ثابت میل می‌کند. همچنین مشاهده می‌شود که اختلاف مقدار مدول یانگ نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر برای نسبت‌های ظاهری پایین‌تر، بیشتر است. این موضوع نشان می‌دهد که تاثیر نوع ساختار برای نسبت‌های ظاهری کوچکتر، بیشتر است. البته باید خاطر نشان کرد که نسبت‌های ظاهری برای قطر خاص ۰/۹۵ نانومتر می‌باشند.

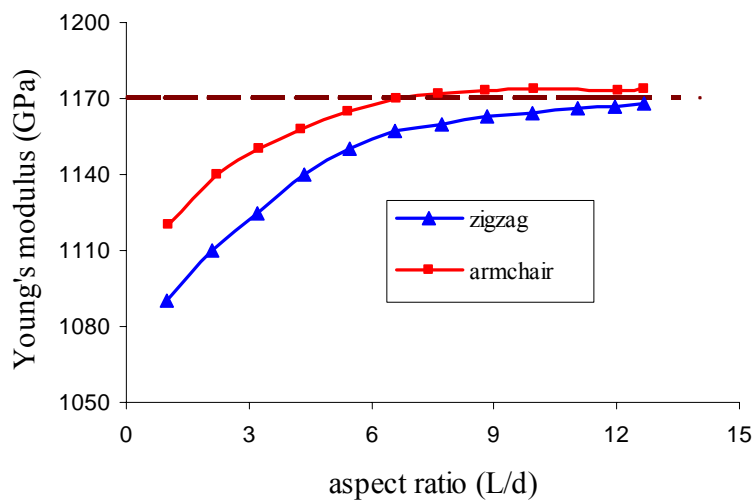


شکل (۵-۵): (الف) تصویر نانولوله کربنی زیگزاگ (ب) تصویر نانولوله کربنی آرمچیر (ج) تصویر تغییر شکل یافته نانولوله کربنی زیگزاگ تحت کشش محوری (د) تصویر تغییر شکل یافته نانولوله کربنی آرمچیر تحت کشش محوری

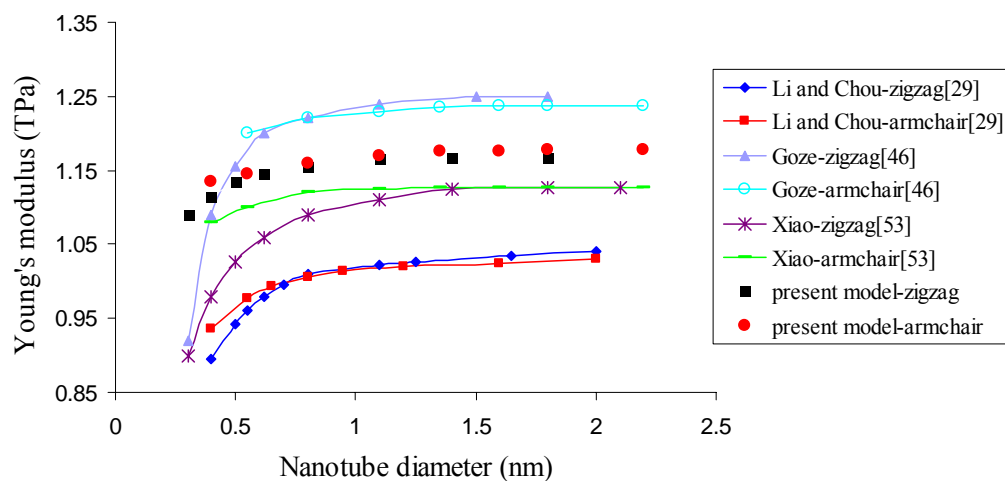
در شکل (۷-۵) مقایسه‌ای میان نتایج دیگران برای قطرهای مختلف صورت گرفته است. این مقایسه نشان می‌دهد که مدل ساختاری جدید دارای نتایج قابل قبولی نسبت به نتایج دقیق ملکولی و سایر مدل‌های ساختاری است.

در شرایط ایده‌آل آزمایشگاهی، علت اصلی پراکندگی در نتایج تجربی را می‌توان اختلاف در روش‌های اعمال شده برای آزمایش و علت اصلی پراکندگی در نتایج عددی را می‌توان اختلاف در پتانسیل‌های در نظر گرفته شده در شبیه‌سازی دانست. حتی پارامترهای معادلات پتانسیل برای یک پتانسیل خاص نیز متفاوت است. همانطور که مشاهده می‌شود، ضخامت‌های مختلفی برای نانولوله در شبیه‌سازی در نظر گرفته شده است. هرچند که این ضخامت‌ها با یکدیگر اختلاف دارند؛ اما آنچه مهم است،

حاصلضرب مدول



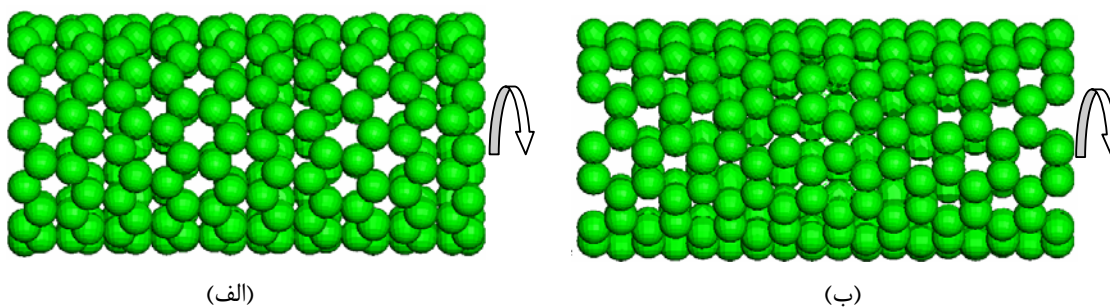
شکل (۵-۶): نمودار مدول یانگ نانولوله کربنی بر اساس نسبت ظاهری (L/d)



شکل (۵-۷): مقایسه نمودارهای مدول یانگ بر حسب قطر نانولوله کربنی

یانگ در ضخامت یعنی سفتی داخل صفحه‌ای می‌باشد. با دقت بیشتر متوجه می‌شویم که سفتی داخل صفحه‌ای تقریباً برای همه نتایج عددی یکسان است.

۵-۳-۲ مدول برشی: در این پایان‌نامه، مدول برشی برای دو نوع نانولوله زیگزاگ و آرمچیر با نسبت‌های ظاهری مختلف بدست آمده است. برای محاسبه مدول برشی از تست پیچش استفاده شده است. شکل (۵-۸)، تصویر تغییر شکل یافته نانولوله کربنی را تحت پیچش نشان می‌دهد.

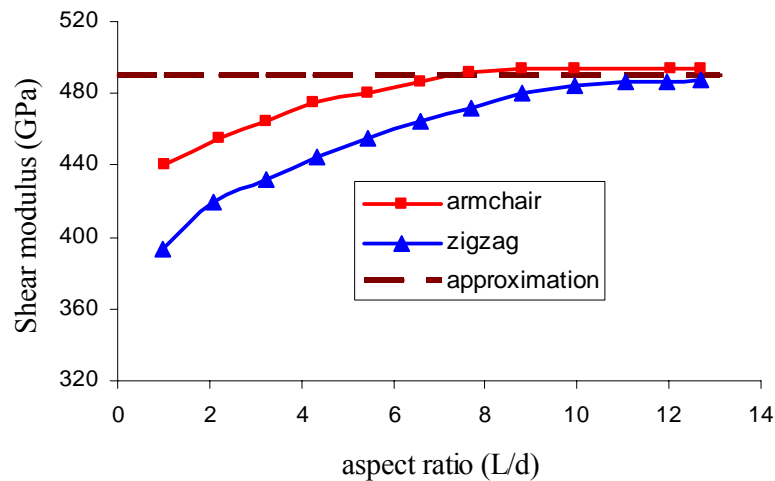


شکل (۵-۸): تصویر تغییر شکل یافته نانولوله کربنی تحت پیچش (الف) زیگزاگ (ب) آرمچیر

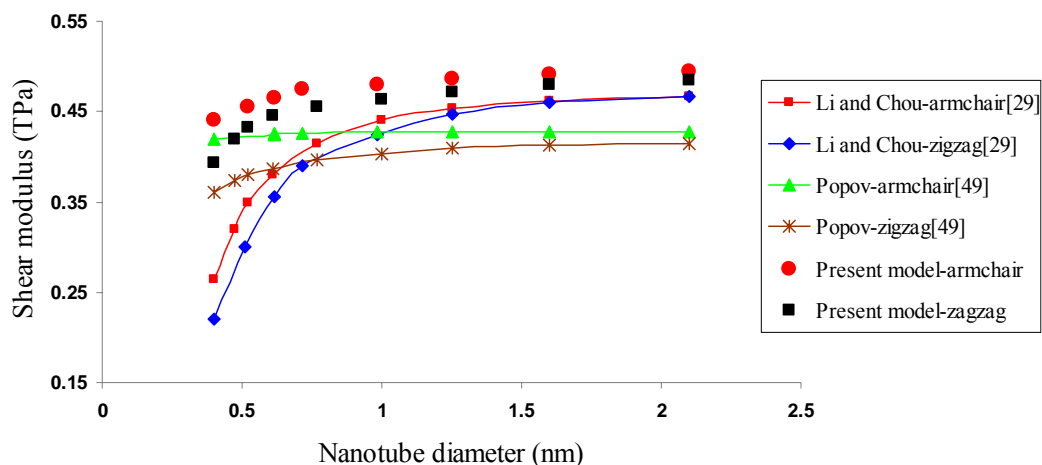
تست پیچش برای نانولوله‌های با نسبت‌های ظاهری مختلف انجام شده و نتایج آن در نمودار شکل (۵-۹) آورده شده است. همانگونه که در شکل مشاهده می‌گردد، همانند مدول یانگ با افزایش نسبت

(L/d) ، برای هر دو ساختار زیگزاگ و آرمچیر مقدار مدول برشی افزایش می‌یابد به طوری که در نسبت‌های ظاهری بیشتر از ۱۰، به یک مقدار ثابت میل می‌کند. همچنین مشاهده می‌شود که اختلاف مقدار مدول برشی نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر برای نسبت‌های ظاهری پایین‌تر، بیشتر است.

در شکل (۵-۱۰) مقایسه‌ای میان نتایج دیگران برای قطرهای مختلف صورت گرفته است. این مقایسه نشان می‌دهد که مدل ساختاری جدید دارای نتایج قابل قبولی نسبت به نتایج دقیق ملکولی و سایر مدل‌های ساختاری است.



شکل (۵-۹): نمودار مدول برشی نانولوله کربنی بر اساس نسبت ظاهری (L/d)



شکل (۵-۱۰): مقایسه نمودارهای مدول برشی بر حسب قطر نانولوله کربنی

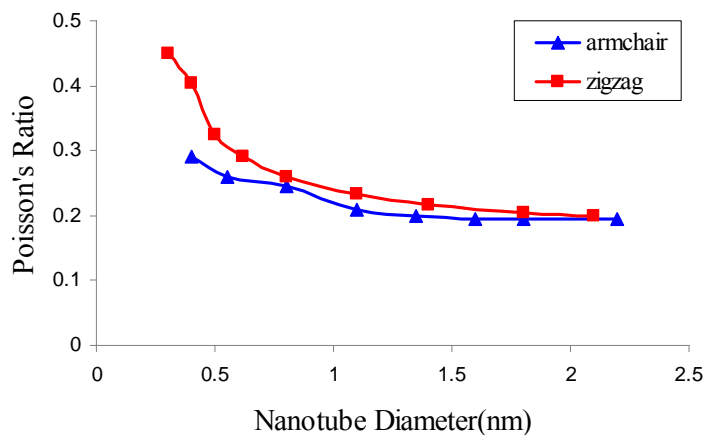
۵-۳-۳ ضریب پواسون: ضریب پواسون در نانولوله‌های کربنی همانند حالت‌های پیوسته از رابطه

زیر محاسبه می‌گردد [۲].

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad (۵-۱۴)$$

در شکل (۵-۱۱)، منحنی ضریب پواسون بر حسب قطر نانولوله برای نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر ارائه

شده است.



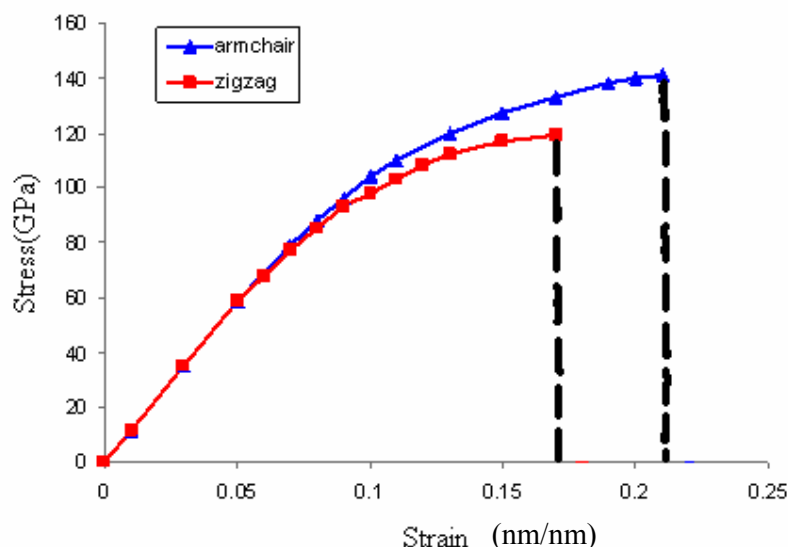
شکل (۵-۱۱): منحنی ضریب پواسون بر حسب قطر نانولوله

مشاهده می‌شود که با افزایش قطر نانولوله، ضریب پواسون کاهش می‌یابد و برای قطرهای بزرگ به یک مقدار ثابت ۰/۱۹۴ می‌رسد. در ضمن ضریب پواسون برای نانولوله زیگزاگ در قطرهای کوچک، بیشتر از نانولوله آرمچیر است.

در ضمن با جاگذاری مدول یانگ و ضریب پواسون در رابطه بالا، مقدار مدول برشی 490 GPa بدست خواهد آمد که معادل مقدار بدست آمده از شبیه‌سازی می‌باشد.

۵-۳-۴ استحکام نهایی: یکی از ویژگی‌های شگفت‌انگیز نانولوله‌های کربنی، استحکام نهایی

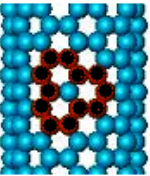
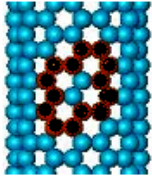
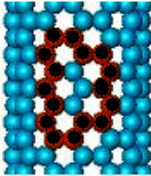
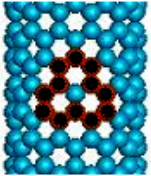
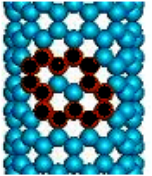
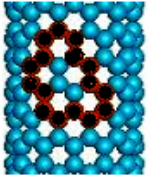
بسیار بالای آنها است. در شکل (۵-۱۲) استحکام نهایی نانولوله‌های کربنی زیگزاگ و آرمچیر توسط مدل ساختاری جدید بدست آمده و با یکدیگر مقایسه شده‌اند. با توجه به شکل، کرنش‌های نهایی برای نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ به ترتیب ۲۲٪ و ۱۸٪ می‌باشد. بنابراین استحکام نهایی آرمچیر از زیگزاگ بیشتر است. دلیل آن را می‌توان در نوع ساختارهای آنها جستجو کرد. در نانولوله زیگزاگ برخی از پیوندهای C-C در جهت محور کشش قرار دارند؛ در حالیکه در نانولوله آرمچیر، این پیوندها در جهت عمود بر محور کشش هستند.



شکل (۵-۱۲): منحنی تنش- کرنش نانولوله های (۷,۷) و (۱۲,۰)

۴-۵ تاثیر عیوب تهی جای بر روی خواص مکانیکی نانولوله های کربنی

به علت محدودیت هایی که در ساخت نانولوله ها وجود دارد، امکان تولید نانولوله های سالم شانس کمتری نسبت به نانولوله های معیوب دارند. با توجه به اینکه عیوب تأثیر زیادی بر روی خواص مکانیکی دارند، بنابراین بررسی عیوب در نانولوله های کربنی یکی از موضوعات مهم قابل بحث می باشد و در دهه گذشته نیز تحقیقات اندکی در این مورد ارائه گردیده است. در یک نانولوله کربنی، امکان تولید انواع عیوب وجود دارد. یکی از عیوب بسیار مهم در نانولوله های کربنی، عیوب تهی جای می باشد. انواع عیوب تهی جای که در تحلیل های این پایان نامه اعمال گردیده اند، در شکل (۵-۱۳) نشان داده شده اند.

Armchair			Zigzag		
					
Single vacancy	Double vacancy	Triple vacancy	Single vacancy	Double vacancy	Triple vacancy

شکل (۵-۱۳): عیوب تهی جای اعمال شده در تحلیل

عیوب شامل تک تهی جای ^{۷۲}، دو تهی جای ^{۷۳} و سه تهی جای ^{۷۴} هستند که در هر یک از آنها به ترتیب یک، دو و سه اتم کربن حذف شده است.

۵-۴-۱ تاثیر عیوب بر روی مدول یانگ

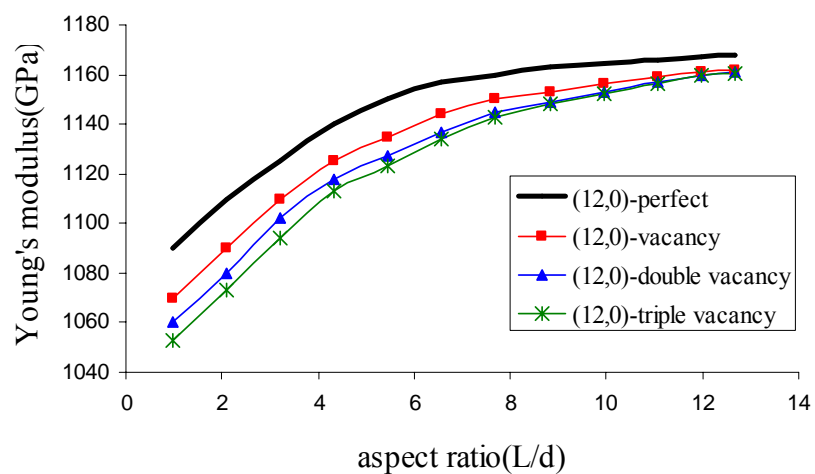
شکل‌های (۵-۱۴) و (۵-۱۵)، تاثیر سه نوع عیب تک تهی جای، دو تهی جای و سه تهی جای را بر روی مدول یانگ نشان می‌دهد.

همانگونه که در شکل مشاهده می‌شود؛ با افزایش نسبت ظاهری نانولوله‌های کربنی، تاثیر عیوب تهی-جای کاسته می‌شود. اما به طور کلی تاثیر این عیوب بر روی مدول یانگ بسیار ناچیز است.

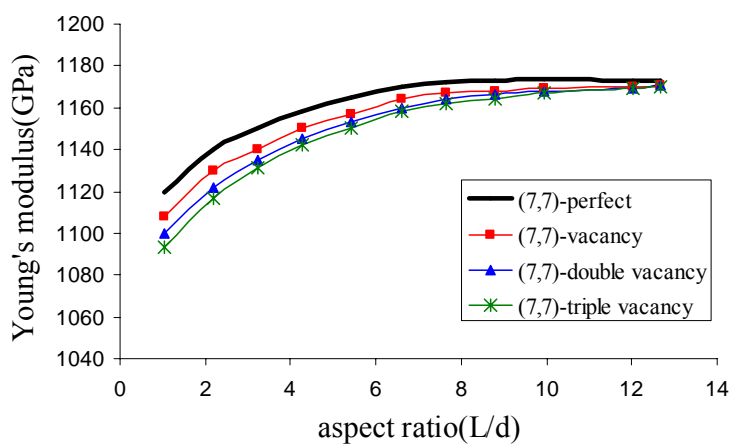
⁷² Single vacancy

⁷³ Double vacancy

⁷⁴ Triple vacancy



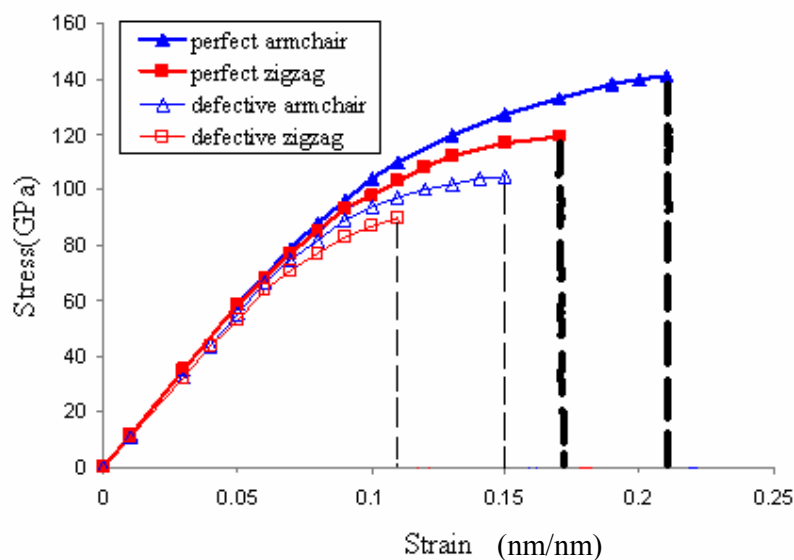
شکل (۵-۱۴): تاثیر انواع عيوب تهی جای بر روی مدول یانگ نانولوله زیگزآگ



شکل (۵-۱۵): تاثیر انواع عيوب تهی جای بر روی مدول یانگ نانولوله آرمچیر

۵-۴-۲ تاثیر عيوب بر روی استحکام نهایی

شکل (۵-۱۶) تاثیر عیب دو تهی جای را بر روی استحکام نهایی نشان می دهد. با توجه به شکل می توان نتیجه گرفت که تاثیر عيوب بر روی استحکام نهایی نانولوله ها بسیار بیشتر از مدول یانگ می باشد.



شکل (۵-۱۶): تاثیر عیب دو تهی جای بر روی استحکام نهایی نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر

۵-۵ کمانش نانولوله‌های کربنی تک دیواره

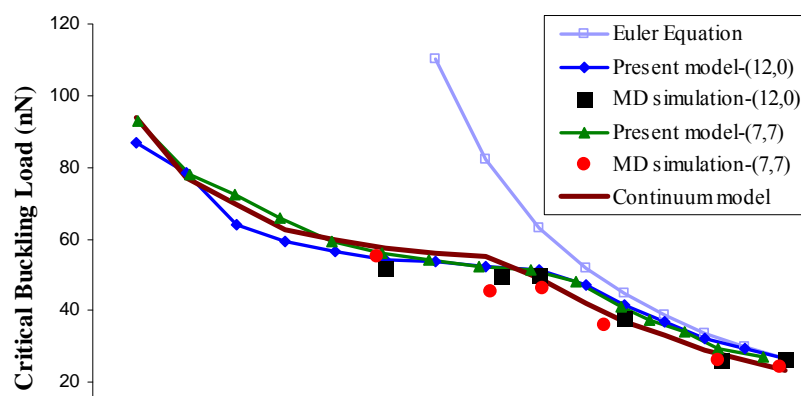
کمانش نانولوله‌های کربنی اولین بار توسط یاکوبسون در سال ۱۹۹۶ مورد بررسی قرار گرفت [۲۴]. او با استفاده از تئوری مکانیک پیوسته و اعمال پتانسیل برنر نتایجی را برای بار بحرانی کمانش بدست آورد. البته نتایج آن‌ها از مقدار بدست آمده از شبیه‌سازی دینامیک ملکولی بسیار بیشتر است. همچنین با استفاده از تئوری اصلاح شده یاکوبسون، نتایج حاصل برای بار بحرانی کمانش در مقایسه با نتایج شبیه‌سازی دینامیک ملکولی کمتر است. در سال ۲۰۰۴، لی و چو با استفاده از مدل ساختاری خود به تحلیل کمانش نانولوله‌های کربنی پرداختند. هرچند مدل آن‌ها نتوانست بار بهینه با افزایش قطر و نیز مدهای کمانش را بدست آورد؛ اما اولین مدل ساختاری است که برای تحلیل کمانش استفاده شده است. هو نیز در سال ۲۰۰۷ با استفاده از مدل ساختاری خود به تحلیل کمانش نانولوله‌های کربنی پرداخت؛ اما نتایج او در مقایسه با نتایج دینامیک ملکولی کاملاً در تناقض است [۳۱]. زین در سال ۲۰۰۷ با استفاده از روش دینامیک ملکولی به بررسی اثرات طول، عیوب تهی‌جای و دما بر روی بار بحرانی کمانش و سختی داخل صفحه ای پرداخت [۵۵]. پتانسیل اعمال شده در شبیه‌سازی

آن‌ها دقیقاً همانند پتانسیل اعمال شده در مدل‌سازی این پایان‌نامه می‌باشد. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که با افزایش گرما و ساخت مجدد پیوندها، تاثیر عیوب بر روی بار و کرنش کمانش بحرانی کاهش می‌یابد؛ به طوری که برای دمای بالاتر از ۹۳۰ درجه سانتیگراد، می‌توان بار بحرانی کمانش نانولوله معیوب را دقیقاً معادل بار بحرانی کمانش نانولوله سالم دانست. ونگ در سال ۲۰۰۸ با استفاده از یک مدل ترکیبی پیوسته-ملکولی، به بررسی بار و کرنش‌های کمانش پرداخت [۵۶]. او به کمک تئوری کمانش پیوسته غیر الاستیک کلاسیک و همچنین استفاده از قوانین دینامیک ملکولی برای یافتن پارامترهای مدل پیوسته توانست نشان دهد که با افزایش قطر نانولوله، بار بحرانی کمانش در ابتدا افزایش و در ادامه کاهش می‌یابد. آن بدین معناست که در یک قطر خاص، دارای یک بار بحرانی کمانش بهینه هستیم. این قطر بهینه برای نانولوله زیگزاگ ۱/۱۷۶ نانومتر و برای نانولوله آرمچیر ۱/۳۵۶ نانومتر می‌باشد. در این قسمت پایان‌نامه به بررسی بارها و کرنش‌های بحرانی کمانش و همچنین تاثیر انواع عیوب تهی‌جای بر روی بارهای بحرانی توسط مدل ساختاری حاضر می‌پردازیم.

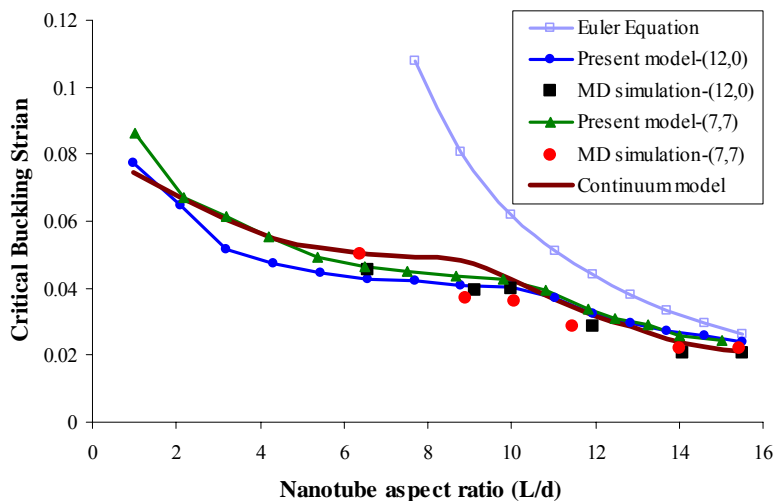
۵-۵-۱ کمانش نانولوله‌های کربنی تک دیواره سالم

با استفاده از مدل ساختاری جدید، بارها و کرنش‌های بحرانی کمانش برای نانولوله‌های کربنی زیگزاگ (۱۲,۰) و آرمچیر (۷,۷) و برای نسبت‌های ظاهری (L/d) مختلف به دست آمده‌اند. شکل (۵-۱۷) و (۵-۱۸) به ترتیب نمودارهای بار و کرنش بحرانی کمانش را بر اساس نسبت‌های ظاهری مختلف نمایش می‌دهد.

همچنین بارها و کرنش‌های بحرانی توسط معادلات اوپلر علاوه بر مدل ساختاری محاسبه گردیده و با نتایج بدست آمده از شبیه‌سازی دینامیک ملکولی زین مقایسه شده‌اند.



شکل (۱۷-۵): بارهای بحرانی کمانش برحسب نسبت ظاهری نانولوله‌های (۱۲,۰) و (۷,۷)



شکل (۱۸-۵): کرنش‌های بحرانی کمانش برحسب نسبت ظاهری نانولوله‌های (۱۲,۰) و (۷,۷)

$$P_{cr} = \frac{\pi^2 EI}{(\mu L)^2} \quad (15-5)$$

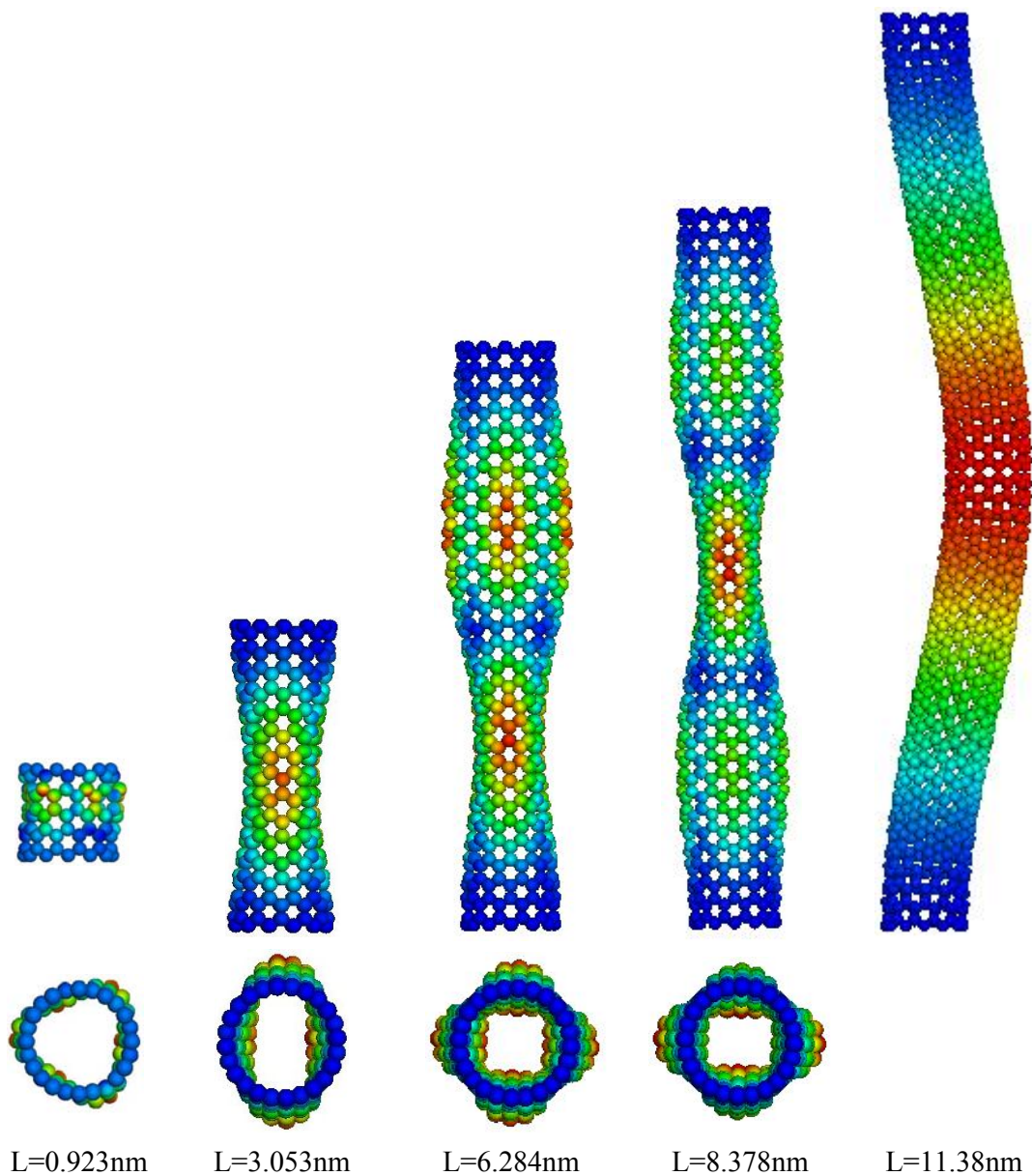
$$\varepsilon_{cr} = \frac{\pi d}{2rt(\mu L)^2} \quad (16-5)$$

که در آن L, E, I, μ, r و t به ترتیب طول نانولوله، ممان اینرسی سطح مقطع، مدول یانگ، ضریب طول، شعاع سطح مقطع (۰/۴۷۵ نانومتر) و ضخامت دیواره مؤثر نانولوله کربنی تک دیواره می‌باشد. مدول یانگ معادل ۱/۱۷TPa در نظر گرفته شده است که از مدل ساختاری بدست آمده است. مقدار ضریب طول به علت گیر دار بودن دو سر نانولوله، ۰/۵ در نظر گرفته شده است.

با افزایش نسبت ظاهری نانولوله، به ترتیب مدهای کمانش پوسته و اوپلر رخ می‌دهد. هنگامی که مد کمانشی اوپلر رخ می‌دهد (نسبت ظاهری ۱۰ به بالا)، بارهای بحرانی کمانش از مد اوپلر پیروی می‌کنند. اما کرنش‌های بحرانی از نسبت ظاهری ۱۴ به بالا از این مد پیروی می‌کنند. بنابراین می‌توانیم بارهای بحرانی کمانش را بسادگی برای نانولوله‌های به اندازه کافی بلند از معادله اوپلر محاسبه کنیم. در ضمن در شکل‌های (۱۷-۵) و (۱۸-۵) نتایج حاضر با نتایج به دست آمده از یک مدل پیوسته ساده مقایسه گردیده‌اند. مقدار ضخامت مؤثر نانولوله معادل $0/066$ نانومتر در نظر گرفته شده است. این مقدار، نتایج شگفت‌انگیزی را برای کرنش‌های بحرانی دارد؛ اما برای پیش‌بینی بارهای بحرانی مناسب نمی‌باشد، زیرا مساحت سطح مقطع یک نانولوله را فقط می‌توان به صورت $A = p d t$ بیان نمود که در آن $t = 0/34$ در نظر گرفته شده است. اما با استفاده از ضخامت مؤثر $0/34$ نانومتر قادر به مدل کردن کمانش نانولوله‌ها نیستیم؛ زیرا مد کمانش اوپلر بسیار زود رخ خواهد داد و در نتیجه بار بحرانی کمانش به سرعت افت خواهد کرد. مقدار $0/066$ نانومتر برای ضخامت مؤثر تنها مقداری است که برای قطر خاص $0/95$ نانومتر همزمان بار و مد کمانش را با دقت پیش‌بینی می‌کند. البته این دقت برای نانولوله‌های بلندتر بیشتر از نانولوله‌های کوتاه‌تر است.

مدهای کمانش مطابق با کانتورهای جابه‌جایی برای طول‌های مختلف از نانولوله زیگزاگ در شکل (۵-۱۹)

نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش طول نانولوله، مد کمانش پوسته به مد کمانش اوپلر تبدیل می‌گردد.

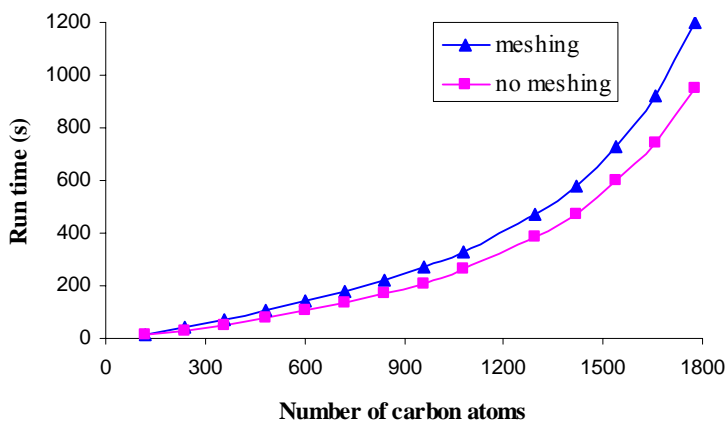


شکل (۵-۱۹): مدهای کمانشی نانولوله (۱۲,۰) تحت بار فشاری محوری برای طول‌های مختلف

زمان اجرای مدل در نرم افزار ABAQUS بسیار کوتاه است. البته اگر علاوه بر بار بحرانی کمانش نیاز به مدهای کمانش نیز داشته باشیم، باید گره‌های توخالی (اتم‌های کربن) را مشخص کنیم تا قادر به مشاهده مدهای کمانش باشیم. بدیهی است که این عمل، نیازمند زمان بیشتری خواهد بود اما در

مجموع این زمان‌ها بسیار کمتر از زمان مورد نیاز برای اجرای یک برنامه کاملاً ملکولی می-باشد (شکل (۵-۲۰)).

با این وجود برای مدل کردن نانولوله‌های بزرگ، باید با استفاده از برنامه‌نویسی در فایل ورودی نرم-افزار زمان ایجاد مدل را کوتاه کرد.

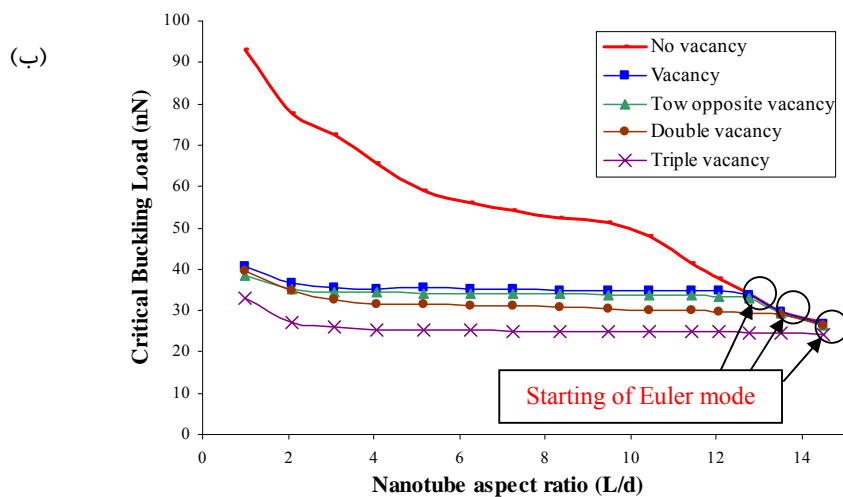
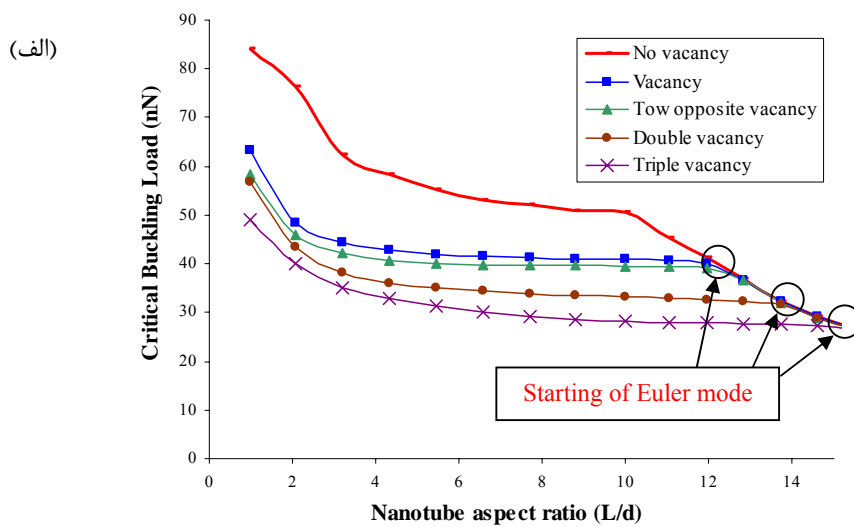


شکل (۵-۲۰): منحنی زمان اجرا بر حسب تعداد اتم‌های کربن

۵-۵-۲ کمانش نانولوله‌های کربنی تک دیواره معیوب

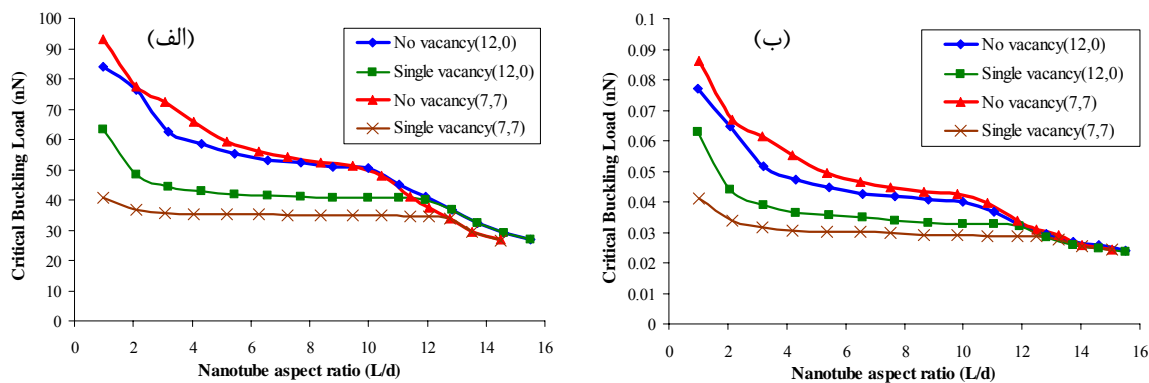
در این قسمت تاثیر عیوب تهی‌جای بر روی بارها و کرنش‌های کمانش بررسی شده است. انواع عیوب تهی‌جای که در تحلیل اعمال گردیده اند در شکل (۵-۱۳) نشان داده شده اند. منحنی بارهای بحرانی کمانش بر اساس نسبت‌های ظاهری مختلف رسم شده است (شکل (۵-۲۱)).

آنچه مسلم است عیوب سه تهی‌جای بیشتر از دو عیب تهی‌جای دیگر باعث کاهش بار بحرانی می-شوند. همانگونه که در شکل (۵-۲۱) مشاهده می‌شود، عیوب تهی‌جای هنگامی که مد کمانش اوپلر رخ می‌دهد، تاثیری بر روی بار کمانش نخواهند داشت. البته باید دقت کرد که در نانولوله‌های معیوب، مد کمانش اوپلر دیرتر رخ خواهد داد و این دیرکرد برای عیوب سه تهی‌جای از سایر عیوب بیشتر است.



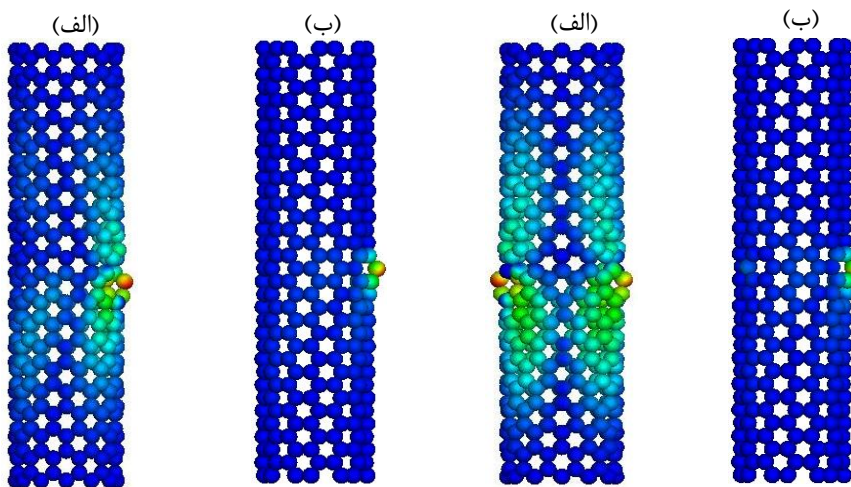
شکل (۵-۲۱): بارهای بحرانی کمانش برای نانولوله‌های معیوب (الف) زیگزاگ (ب) آرمچیر

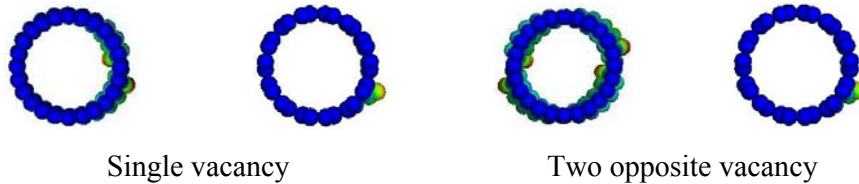
برای نانولوله با عیب تک تهی‌جای، مد اوپلر در نسبت ظاهری ۱۲ و برای نانولوله‌های با عیوب دو و سه تهی‌جای به ترتیب در نسبت‌های ظاهری ۱۴ و ۱۵ رخ می‌دهد. مقایسه بار و کرنش‌های بحرانی نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر نشان می‌دهد که نانولوله‌های آرمچیر بیشتر از نانولوله‌های زیگزاگ به عیوب حساسند (شکل (۵-۵)).



شکل (۵-۲۲): (الف) منحنی بارهای بحرانی کمانش (ب) و کرنش‌های بحرانی

علاوه بر این، مقایسه‌ای میان مدهای کمانش برای یک عیب تک تهی‌جای و دو عیب تک تهی‌جای روبروی هم در نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر انجام گرفته است. مدهای کمانش نانولوله آرمچیر معیوب با مدهای کمانش نانولوله زیگزاگ معیوب متفاوت هستند. علت اصلی آن تفاوت در جهت‌گیری عیب تهی‌جای در این دو نوع ساختار می‌باشد (شکل (۵-۲۳)). علت دیگر آن را می‌توان جهت‌گیری کلی پیوندهای C-C نانولوله زیگزاگ دانست که در جهت بارگذاری قرار دارند. بنابراین توزیع بار بر روی اتم‌های کربن به ترتیب برای نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر، در جهت محوری و عرضی یکنواخت است.





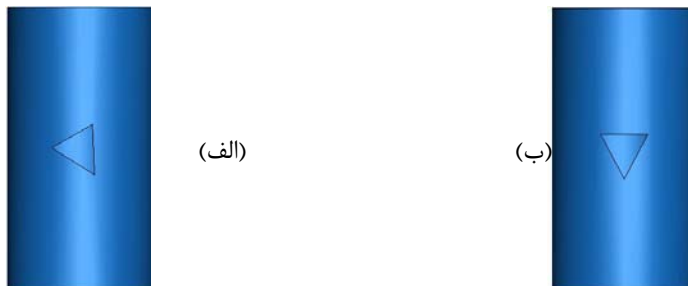
شکل (۵-۲۳): مدهای کمانش متناظر با کانتورهای جابه‌جایی نانولوله‌های با عیب تک تهی‌جای و دو عیب تک تهی‌جای روبروی هم برای (الف) زیگزاگ (۴/۱۱۸ نانومتر) و (ب) آرمچیر (۴/۰۵۳ نانومتر)

در ادامه مقایسه‌ای میان عیوب تک تهی‌جای در نانولوله‌ها و گشودگی‌ها در پوسته‌های استوانه‌ای انجام شده است. مساحت این گشودگی دقیقاً معادل مساحت عیب تهی‌جای می‌باشد و برای دقت بیشتر، جهت‌گیری گشودگی نیز دقیقاً مشابه جهت‌گیری عیب تهی‌جای در نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر در نظر گرفته شده است (شکل (۵-۲۴)).

برای بی بعد کردن بار کمانش، از یک ضریب بار کمانش (k) که به صورت زیر تعریف می‌شود، استفاده شده است:

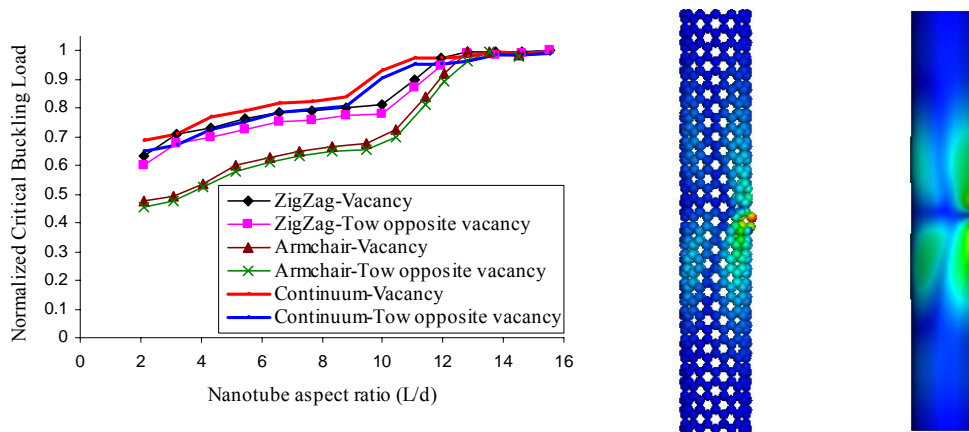
$$= \frac{P_d}{P_p} \quad (۵-۱۷)$$

که در آن P_p بار بحرانی کمانش یک نانولوله معیوب و P_d بار بحرانی کمانش یک نانولوله سالم می‌باشد.



شکل (۵-۲۴): گشودگی اعمال شده در مدل پیوسته (الف) گشودگی متناظر با عیب تک تهی‌جای در نانولوله آرمچیر (ب) گشودگی متناظر با عیب تک تهی‌جای در نانولوله زیگزاگ

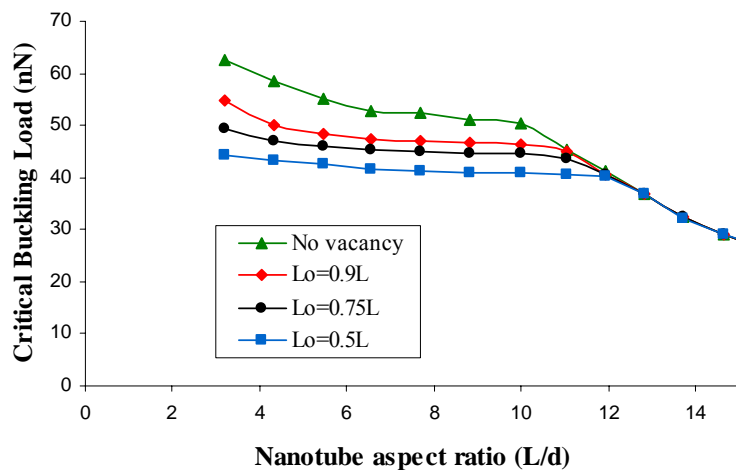
نتایجی که در شکل (۲۵-۵) نمایش داده شده‌اند، برای یک عیب تک تپی جای در وسط نانولوله می-باشند.



شکل (۲۵-۵): منحنی بارهای بحرانی کمانش نرماله شده و مقایسه مد کمانش مدل ساختاری و مدل پیوسته

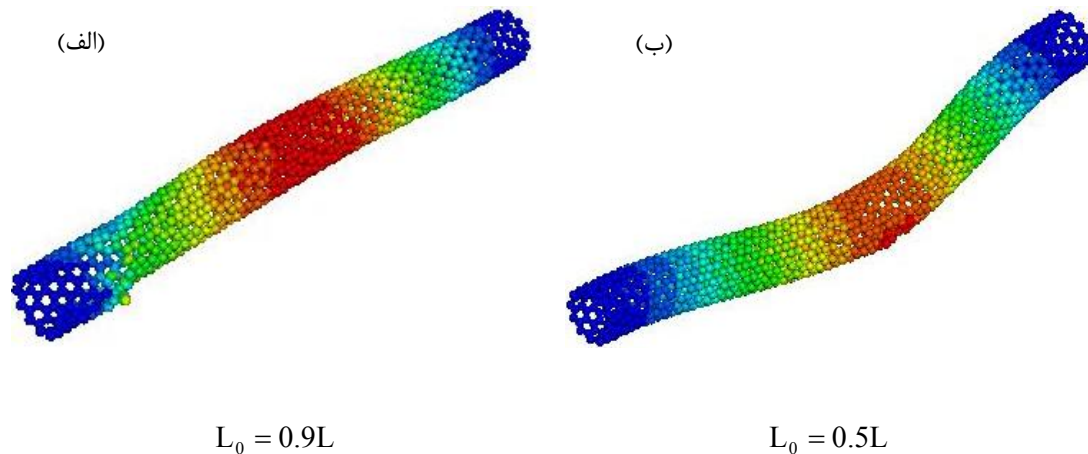
همچنین شکل نشان می‌دهد که مدهای کمانش مدل ساختاری بسیار نزدیک به مدهای کمانش مدل پیوسته است. البته باید دقت کرد که این نتایج بسیار نزدیک به نانولوله زیگزاگ هستند تا نانولوله آرمچیر.

شکل (۲۶-۵)، منحنی بار کمانش برحسب جابجایی عیوب در طول نانولوله برای نسبت‌های ظاهری مختلف نشان می‌دهد.



شکل (۵-۲۶): بارهای بحرانی کمانش برای عیوب تک تهی جای در موقعیت‌های مختلف در طول نانولوله زیگزاگ

محل عیب تهی جای در موقعیت‌های $L_0 = 0.9L$ ، $L_0 = 0.75L$ و $L_0 = 0.5L$ (که L_0 فاصله عیب از محل اعمال بار و L طول نانولوله است) می‌باشد. نتایج نشان می‌دهند که با جابه‌جایی عیب از مرکز نانولوله به سمت نقطه اعمال بار، کاهش بار بحرانی کمانش کمتر خواهد شد. بنابراین نقطه بحرانی برای وجود عیب تهی جای در نانولوله‌ها در مرکز آن می‌باشد. مدهای کمانش نانولوله زیگزاگ معیوب ($L_0 = 0.9L$ و $L_0 = 0.5L$) در شکل (۵-۲۷) نشان داده شده‌اند. این مقایسه نشان می‌دهد که برای نانولوله با عیب در $L_0 = 0.5L$ ، کمانش کلی رخ می‌دهد در حالیکه برای نانولوله با عیب در $L_0 = 0.9L$ ، هر دو کمانش کلی و موضعی رخ می‌دهد. این علت اختلاف میان بارهای بحرانی کمانش برای نانولوله‌های با عیوب در $L_0 = 0.5L$ و $L_0 = 0.9L$ می‌باشد.



شکل (۵-۲۷): مدهای کمانش نانولوله زیگزاگ با یک عیب تک تهی جای در $L_0 = 0.9L$ (الف) و $L_0 = 0.5L$ (ب)

جدول ۵-۱: ثابت‌های معادلات برهمکنش در نانولوله‌های کربنی

interaction	Parameters
u_r	$r_0 = 0.142nm$, $\beta = 26.25nm^{-1}$, $D_e = 0.6031nN.nm$
u_θ	$\theta_0 = 120^\circ$, $k_{sexitic} = 0.754Rad^{-4}$, $k_\theta = 1.42nN.nm / Rad^{-2}$
u_ϕ	$\phi_0 = 180^\circ$, $n = 2$, $k_\phi = 0.278nN.nm / Rad^{-2}$
u_ω	$\omega_0 = 180^\circ$, $n = 2$, $k_\omega = 0.278nN.nm / Rad^{-2}$

نتیجه گیری، پیشنهادات و کارهای آینده

- ۱- با افزایش قطر نانولوله‌های کربنی، مدول یانگ افزایش خواهد یافت تا به یک مقدار ثابت برسد.
- ۲- مدول یانگ نانولوله آرمچیر اندکی از نانولوله زیگزاگ برای قطرهای کوچک، بیشتر است که نشان می‌دهد، مدول یانگ و مدول برشی نانولوله‌های کوچک وابسته به نوع ساختار هستند.
- ۳- تاثیر عیوب تهی‌جای بر روی مدول یانگ نانولوله‌های کربنی بسیار اندک و بر روی استحکام نهایی آن‌ها معنی‌دار است.
- ۴- می‌توانیم برای پیش‌بینی بارها و کرنش‌های بحرانی کمانش نانولوله‌های به اندازه کافی بلند از معادلات اوپلر استفاده کنیم.

- ۵- عیوب تهی‌جای تاثیر معنی‌داری بر روی بارها و کرنش‌های بحرانی در مدهای کمانش پیوسته دارند.
- ۶- عیوب تهی‌جای باعث به تاخیر افتادن مد کمانش اوپلر می‌گردند.
- ۷- یک عیب دو تهی‌جای، بیشتر از دو عیب تک تهی‌جای باعث کاهش در بار بحرانی کمانش خواهد شد.
- ۸- موقعیت عیوب تهی‌جای در طول نانولوله، تاثیر بسیاری در بار بحرانی کمانش دارند؛ به طوریکه محل بحرانی برای وجود عیب، در مرکز نانولوله می‌باشد.
- ۹- احتمالاً بتوان از مدل‌های پیوسته ساده برای پیش‌بینی بار و کرنش بحرانی کمانش در حالت‌های خاص استفاده نمود.
- ۱۰- نتایج مدل ساختاری جدید بسیار نزدیک به نتایج شبیه‌سازی دینامیک ملکولی است و قادر به حل مسائل گسترده‌ای در حوزه مکانیک می‌باشد.
- ۱۱- می‌توان با برنامه‌نویسی در فایل ورودی ABAQUS، این مدل را برای نانولوله‌های بزرگتر نیز استفاده کرد.
- ۱۲- از این مدل می‌توان برای مدل‌سازی کامپوزیت‌هایی که از نانولوله‌های کربنی به عنوان ذرات افزاینده به زمینه استفاده می‌کنند، استفاده کرد.
- ۱۳- مدل‌سازی نانولوله‌های چند دیواره و نیز دسته نانولوله‌های کربنی را می‌توان به کمک این مدل انجام داد.

مراجع

- [۱] Nakano A, Bachlechner M.E. (2001) "*Multiscale simulation of nanosystems*" J. of. Computing in Science and Engineering., 3, pp 56
- [۲] Liu I. (2002), "*Continuum Mechanics*", Vol. 2, University press, UK. 1, pp.76-88.
- [۳] Stolarski T, Nakasone Y, Yoshimoto S. (2006), "*Engineering analysis with ANSYS software*", Vol. 2, University press, Japan. 1, pp.33-41.
- [۴] Quilici S, Cailletaud G. (1999) "*FE simulation of macro-, meso- and micro-scales in polycrystalline plasticity*" J. of. Computational mater., 16, pp 383-390.
- [۵] لطفی ب، پروانه و، (۱۳۸۶) " اصول طراحی سیستم‌های میکروالکترومکانیک (MEMS) و نانوالکترومکانیکی (NEMS)" جلد اول، چاپ دوم، انتشارات سخن گستر، مشهد، ص ۱۴.
- [۶] Forbes. (2002) "*an Insider's Guide to the World of Nanotechnology*", Wolfe Nanotech Report., 1, pp 9.
- [۷] Hugh O.P. (2004) "*Handbook of Carbon, Graphite, Diamond and Fullerenes*", Vol. 1, Consultant and Sandia National Laboratories, New Mexico, pp. 12-36.
- [۸] Mantell C. L. (1968) "*Carbon and Graphite Handbook*", Interscience, New York, pp. 132-141.
- [۹] 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., 43, pp 6832–6854.
- [۱۰] Machida K. (1999) "*Principles of Molecular Mechanics*", Kodansha and John Wiley & Sons Co-publication, Tokyo, pp 321.
- [۱۱] 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. 117, pp 5179–5197.
- [۱۲] Mayo S.L, Olafson B.D, Goddard W.A. (1990) "*Dreiding—a generic force-field for molecular simulations*", Journal of Physical Chemistry., 94, pp 8897–8909.
- [۱۳] 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., 114, pp 10024–10035.

- [١٤] Belytschko T, Xiao S.P, Schatz G.C, Ruoff R.S. (2002) “*Atomistic simulations of nanotube fracture*”, Physical Review B., 65, pp 235–430.
- [١٥] Brenner D.W. (1990) “*Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films*” Physical Review B., 42, pp 9458.
- [١٦] Born M, Huang K. (1954) “*Dynamical Theory of Crystal Lattices*”, Oxford University Press., Oxford, UK, pp 33.
- [١٧] Keating P.N. (1966) “*Theory of 3rd order elastic constants of diamond-like crystals*”, Phys. Rev., 149, 2, pp 674–679.
- [١٨] Martin J.W. (1975) “*Many-body forces in metals and Brugger elastic constants*”, J. Phys., 8, 18, pp 2837–2857.
- [١٩] Tuckerman M. E. (2002) “*in Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems: From Theory to Algorithms*”, University Press, Oxford, pp 299.
- [٢٠] Parr R.G, Yang W. (1989) “*Density Functional Theory of Atoms and Molecules*”, University Press, Oxford, pp 231-265.
- [٢١] Hutter J. (2002) “*Introduction to ab Initio Molecular Dynamics*”, University press, Zürich, pp 120-129.
- [٢٢] Marx D. (2006) “*in Computational Nano-science: Do it Yourself*”, NIC Series., vol. 31, pp 195.
- [٢٣] Tersoff J. (1992) “*Energies of fullerenes*”, Phys. Rev. B., 46, pp 15546–15549.
- [٢٤] Yakobson B.I, Brabec C.J, Bernholc J. (1996) “*Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear range*”, Phys. Rev. Lett., 76, 14, pp 2511–2514.
- [٢٥] Ru C.Q. (2000) “*Effective bending stiffness of carbon nanotubes*”, Phys. Rev. B., 62, pp 9973–9976.
- [٢٦] Govindjee S, Sackman J.L. (1999) “*On the use of continuum mechanics to estimate the properties of nanotubes*”, Solid State Commun., 110, pp 227–230.
- [٢٧] 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., 69, pp 454–458.
- [٢٨] Odegard G.M, Gates, T.S, Nicholson L.M, Wise K.E. (2002) “*Equivalent-continuum modeling with application to carbon nanotubes*”, Composites Science and Technology., 62, pp 1869–1880.
- [٢٩] Li C.Y, Chou T.S. (2003) “*A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes*”, International Journal of Solids and Structures., 40, pp 2487–2499.

- [۳۰] Hu N, Fukunaga H, Lu C, Kameyama M, Yan B. (2005) “*Prediction of elastic properties of carbon nanotube-reinforced composites*”, *Mathematical and Physical Sciences.*, 461, pp 1685–1710.
- [۳۱] Hu N, Nunoya K, Pan D, Okabe T, Fukunaga H. (2007) “*Prediction of buckling characteristics of carbon nanotubes*”, *International Journal of solids and structures.*, 44, pp 6535-6550.
- [۳۲] Meo M, Rossi M. (2006), “*Tensile failure prediction of single wall carbon nanotube*”, *Engineering Fracture Mechanics.*, 73, pp 2589-2599.
- [۳۳] Natsuki T, Tantrakarn K, Endo M. (2004) “*Prediction of elastic properties for single-walled carbon nanotubes*”, *Carbon.*, 42, pp 39–45.
- [۳۴] ABAQUS user’s manual, (2006), version 6.6.1.
- [۳۵] Treacy M.M.J, Ebbesen T.W, Gibson J.M. (1996) “*Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes*”, *Nature.*, 381, pp, 678-680.
- [۳۶] Wong E.W, Sheehan P.E, Lieber C.M. (1997) “*Nanobeam Mechanics: Elasticity, Strength and Toughness of Nanorods and Nanotubes*”, *Science.*, 277, pp 1971-1974.
- [۳۷] Krishnan A, Dujardin E, Ebbesen T.W, Yianilos P.N, Treacy M.M.J. (1998) “*Young's modulus of single-walled carbon nanotubes*”, *Physical Review B.*, 58, 20, pp 14013-14019.
- [۳۸] Lourie O, Wagner H. (1998) “*Evaluation of Young's modulus of carbon nanotubes by micro-raman spectroscopy*”, *Journal of Materials Research.*, 13, 9, pp 1471-1524.
- [۳۹] Salvétat J, Bonard J, Thomson N.H, Kulik A.J, Forro L, Benoit W, Zuppiroli L. (1999) “*Mechanical properties of carbon nanotubes*”, *Applied Physics A.*, 69, pp 255-260.
- [۴۰] Tomblor T.W, Zhou C, Alexseyev L, Kong J, Dai H, Liu L, Jayanthi C.S, Tang M, Wu S. (2000) “*Reversible electromechanical characteristics of carbon nanotubes under local-probe manipulation*”, *Nature.*, 405, pp 769-772.
- [۴۱] Yu M, Files B, Arepalli S, Ruoff R. (2000) “*Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties*”, *Physical Review Letters.*, 84, 24, pp 5552-5555.
- [۴۲] Cornwell C.F, Wille L.T. (1997) “*Elastic properties of single-walled carbon nanotubes in compression*”, *Solid State Communications.*, 101, 8, pp 555-558.

- [٤٣] Lu J.P. (1998) “*Elastic properites of carbon nanotubes and nanoropes*”, Physical Review Letters., 79, 7, pp 1297-1300.
- [٤٤] Yao N, Lordi V. (1998) “*Young's modulus of single-walled carbon nanotubes*”, Journal of Applied Physics., 84, 4, pp 1939-1943.
- [٤٥] Hernandez E, Goze C, Bernier P, Rubio A. (1998) “*Elastic Properties of C and BxCyNz Composite Nanotubes*”, Physical Review Letters., 80, 20, pp 4502-4505.
- [٤٦] Goze C, Vaccarini L, Henrard L, Bernier P, Hernandez E, Rubio A. (1999) “*Elastic and mechanical properties of carbon nanotubes*”, Synthetic Metals., 103, pp 2500–2501.
- [٤٧] Lier G.V, Alsenoy C.V, Doren V.V, Geerlings P. (2000) “*Ab initio study of the elastic properties of single-walled carbon nanotubes and grapheme*”, Chemical Physics Letters., 326, pp 181-185.
- [٤٨] Prvlutskyy S. (2000) “*prediction of mechanical properties of carbon nanotubes*”, composite B., 23, pp 1234-1242.
- [٤٩] Popov V.N, Van Doren V.E, Balkanski M. (2000) “*Elastic properties of single-walled carbon nanotubes*”, Physical Review B., 61, pp 3078–3084.
- [٥٠] Kudin K.N, Scuseria G.E, Yakobson B.I. (2001) “*C2F, BN and C nanoshell elasticity from ab initio computations*”, Physical Review B., 64, pp 235406.
- [٥١] Troya D, Mielke S.L, Schatz G.C. (2003) “*Carbon nanotube fracture – differences between quantum mechanical mechanisms and those of empirical potentials*”, Chemical Physics Letters., 382, pp 133-141.
- [٥٢] Shintani T, Sorraft A. (2003) “*Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes*”, Composites: Part B., 36, pp 256-264.
- [٥٣] Xiao J.R, Gama B.A, Gillespie J.W. (2005) “*An analytical molecular structural mechanics model for the mechanical properties of carbon nanotubes*”, International Journal of Solids and Structures., 42, pp 3075–3092.
- [٥٤] Huang Y, Wu J, Hwang K.C. (2006) “*Thickness of graphene and singlewall carbon nanotubes*”, Phys Rev B., 74, 24, pp 245413–245419.
- [٥٥] Xin H, Han Q, Yao X.H. (2007) “*Buckling and axially compressive properties of perfect and defective single-walled carbon nanotubes*”, Carbon., 45, pp 2486-2495.
- [٥٦] Wang Q, Liew K.M, Duan W.H. (2008) “*Modeling of the mechanical instability of carbon nanotubes*”, Carbon., 46, pp 285-290.

Abstract

This thesis exhibits a new structural model for prediction of the mechanical properties of carbon nanotubes. In addition to, the influence of various vacancy defects on the critical buckling loads and strains in carbon nanotubes under axial compression is investigated via a new structural model in ABAQUS software. The necessity of desirable conditions and expensive tests for experimental methods, in addition to the time expenditure required for atomic simulations, are the motivation for this work,

which, in addition to yielding accurate results, avoids the obstacles of the previous methods. In fact, this model is a combination of other structural models designed to eliminate the deficiencies inherent in individual approaches. Because the present model is constructed in the CAE space of ABAQUS, there is no need to program for different loading and boundary conditions. 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. A Morse potential is employed for stretching and bending potentials, and a periodic type of bond torsion is used for torsion interactions. The effect of different types of vacancy defects at various locations on the mechanical properties and the critical buckling loads and strains is studied for zigzag and armchair nanotubes with various aspect ratios (Length/Diameter). Comparison of our results with those of buckling of shells with cutouts indicates that vacancy defects in the carbon nanotubes can most likely be modeled as cutouts of the shells. Finally, results of the present structural model are compared with those from molecular dynamics (MD) simulation and show good agreement between our model and the MD model.