

الله الرحمن الرحيم



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده مهندسی مکانیک و مکاترونیک

پایان نامه کارشناسی ارشد مهندسی طراحی کاربردی

**بررسی ارتعاشات آزاد نانولوله‌های کربنی با قطر متفاوت  
متصل به هم به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی**

نگارنده:

**دانیال درویشی کاریزی**

استاد راهنما:

**دکتر امیر جلالی**

بهمن ۱۳۹۶

شماره:

تاریخ:

باسمه تعالی



مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم شماره (۳) صورتجلسه نهایی دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

با نام و یاد خداوند متعال، ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد آقای **دانیال درویشی کاریزی** با شماره دانشجویی **۹۲۰۶۲۵۴** رشته **مکانیک** گرایش **طراحی کاربردی** تحت عنوان: **بررسی ارتعاشات آزاد نانولوله‌های کربنی با قطر متفاوت متصل به هم به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی** که در تاریخ **۱۳۹۶/۱۱/۸** با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار گردید به شرح ذیل اعلام می‌گردد:

<input type="checkbox"/> مردود	<input checked="" type="checkbox"/> قبول (با امتیاز <b>۱۶.۴۲</b> درجه .....)
<input type="checkbox"/> عملی	<input checked="" type="checkbox"/> نظری: نوع تحقیق:

عضو هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنمای اول	دکتر امیر جلالی	استادیار	
۴- نماینده تحصیلات تکمیلی	دکتر هادی پروز	استادیار	
۵- استاد ممتحن اول	دکتر سیده‌هادی قادری	استادیار	
۶- استاد ممتحن دوم	دکتر اردشیر کرمی محمدی	دانشیار	

نام و نام خانوادگی رئیس دانشکده:

تاریخ و امضاء و مهر دانشکده:

تبصره: در صورتی که کسی مردود شود حداکثر یکبار دیگر (در مدت مجاز تحصیل) می‌تواند از پایان نامه خود دفاع نماید (دفاع

مجدد نباید زودتر از ۴ ماه برگزار شود).



سپاس خدای را که سخنوران، دستودن او بانند و شمارندگان، شمردن نعمت های او ندانند و کوشندگان،

حق او را گزاردن نتوانند.

تقدیم به

مقدس ترین واژه مادر لغت نامه دلم

مادر مهربانم، که زندگیم را دیون مهر و عطفوت اومی دانم

پدرم، مهربانی مشفق، بردبار و حامی

همسرم، نشانه لطف الهی در زندگیم

خواهرانم، همراهان همیشگی و پشتوانه های زندگیم

## پاسکزاری

من شکر من از کسی که در تمام طول زندگی و تحصیل مواظبم بود و کلم کرد. آنچه امروز دارم مدیون لطف او هستم. من می خواهم شکر کنم از زحمات استاد من جناب دکتر امیر جلالی که به من اجازه دادند زیر نظر ایشان کار کنم، مباحثه های علمی ما همیشه برای من لذت بخش بود و در خاطر من باقی می ماند. این تحقیق بیچ گاه بدون فداکاری ها و زحمات پدر و مادر و همسر و خواهران و دوستانم به سرانجام نمی رسید و من شکر من از خانواده ام که محیطی آرام را برای من فراهم کردند تا بتوانم دوره ارشد خود را به اتمام برسانم.

## تعهد نامه

اینجانب دانیال درویشی کاریزی دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته مهندسی مکانیک، گرایش طراحی کاربردی دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه بررسی ارتعاشات آزاد نانولوله‌های کربنی با قطر متفاوت متصل به هم به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تحت راهنمایی آقای دکتر امیر جلالی متعهد می‌شوم.

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

### تاریخ

### امضای دانشجو

### مالکیت نتایج و حق نشر

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

## چکیده

در این پایان‌نامه ارتعاشات آزاد نانولوله‌های هتروجانکشن کربنی با شرایط مرزی مختلف در طول-های متفاوت مورد بررسی قرار گرفته است. این کار با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بر مبنای تابع انرژی پتانسیل لنارد-جونز انجام شده است. این نانولوله‌های خاص از دو نانولوله‌ی با کایرالیته‌ی متفاوت تشکیل شده‌اند که عیوب جفتی پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی نقش قابل توجهی را در ناحیه‌ی اتصال بازی می‌کنند. این نانولوله‌های خاص به‌خاطر ویژگی‌های برجسته‌شان خیلی مهم هستند. در این پژوهش فرکانس طبیعی اول این نانولوله‌ها به‌دست آمدند و با روش اجزای محدود مقایسه شدند. علاوه بر این، فرکانس محاسبه شده‌ی هتروجانکشن‌ها با فرکانس نانولوله‌های همگن سازنده‌ی آنها مقایسه شدند. مشاهده شد که فرکانس طبیعی اول هتروجانکشن‌ها در حالتی که انتهای قطور آنها ثابت باشد بیشتر از فرکانس نانولوله‌های سازنده‌ی آنها با همان طول و در حالتی که انتهای باریک آنها ثابت باشد کمتر از فرکانس نانولوله‌های سازنده‌ی آنها با همان طول است. فرکانس این نانولوله‌ها با افزایش طول کاهش می‌یابد و با افزایش قطر نانولوله‌های سازنده‌ی آن، فرکانس افزایش می‌یابد.

در این پایان‌نامه اتصالات هم‌محور نیز مورد بررسی قرار گرفتند و با نوع رایج‌شان که ناهم‌محور هستند مقایسه شدند. دیده شد که هم‌محور شدن آنها باعث افزایش فرکانس طبیعی در آنها می‌شود. همچنین تأثیر دما بر فرکانس طبیعی برای یک اتصال خاص، مورد مطالعه قرار گرفت و مشاهده شد که افزایش دما فقط در شرایط مرزی یک‌سرگردار که اتم‌های انتهای قطور آن ثابت شده‌اند باعث افزایش فرکانس طبیعی می‌شود و در سایر حالت‌ها نظم خاصی مشاهده نشد. همچنین در این تحقیق تأثیر عیب حفره در ناحیه‌ی اتصال، بر فرکانس طبیعی اول مورد بررسی قرار گرفت.

**واژگان کلیدی:** شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، نانولوله‌های کربنی، اتصالات هتروجانکشن، ارتعاشات آزاد، فرکانس طبیعی

## فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل ۱- مقدمه و پیشینه‌ی پژوهش .....	۱
۱-۱- نانو فناوری و نانو ساختارها .....	۲
۲-۱- کربن و انواع ساختارهای کربنی .....	۳
۳-۱- کشف نانولوله‌ها .....	۶
۴-۱- انواع نانولوله‌های کربنی .....	۹
۵-۱- کاربردهای نانولوله‌ها .....	۱۱
۱-۵-۱- رزونانورها .....	۱۲
۲-۵-۱- به‌عنوان تقویت‌کننده در کامپوزیت‌ها .....	۱۲
۳-۵-۱- استفاده از نانولوله‌های تک‌دیواره در صنعت الکترونیک .....	۱۲
۴-۵-۱- ساختار تو خالی نانولوله و کاربرد به‌عنوان ذخیره‌کننده و پیل سوختی .....	۱۳
۵-۵-۱- ساخت نانوماشین‌ها با استفاده از نانولوله‌های کربنی .....	۱۴
۶-۵-۱- مصارف پزشکی .....	۱۴
۶-۱- ویژگی‌های نانولوله‌ها .....	۱۵
۱-۶-۱- استحکام .....	۱۵
۲-۶-۱- خواص حرکتی .....	۱۵
۳-۶-۱- خواص الکتریکی .....	۱۶
۴-۶-۱- عیوب .....	۱۷
۵-۶-۱- تولید طبیعی و اتفاقی .....	۱۹
۶-۶-۱- استحکام و الاستیسیته .....	۱۹
۷-۶-۱- هدایت حرارتی نانولوله‌های کربنی .....	۱۹
۷-۱- روش‌های شبیه‌سازی .....	۲۰
۱-۷-۱- مدل تیر الاستیک .....	۲۱
۲-۷-۱- پوسته‌ی الاستیک .....	۲۱
۳-۷-۱- روش اجزای محدود <i>FEM</i> .....	۲۱
۴-۷-۱- مکانیک مولکولی .....	۲۲
۵-۷-۱- روش مونت کارلو .....	۲۳
۶-۷-۱- روش دینامیک مولکولی .....	۲۴



۲۵	۸-۱- پیشینه‌ی ارتعاشات نانولوله‌های کربنی
۳۰	۹-۱- نوآوری
۳۱	<b>فصل ۲- مفاهیم پایه‌ای در ساختار نانولوله‌ها و تابع پتانسیل</b>
۳۲	۱-۲- روش محاسباتی مشخصات نانولوله‌های کربنی
۳۶	۲-۲- ساخت نانولوله‌های هتروجانکشن کربنی
۳۹	۳-۲- نیرو در دینامیک مولکولی
۴۰	۱-۳-۲- نیروهای بین اتمی
۴۱	۲-۳-۲- پتانسیل‌های جفتی
۴۱	۳-۳-۲- اندرکنش کولمبی بلند برد
۴۲	۴-۳-۲- اندرکنش‌های کوتاه برد
۴۳	۵-۳-۲- شعاع برش
۴۴	۶-۳-۲- پتانسیل‌های چندتایی
۴۵	۷-۳-۲- پتانسیل بین مولکولی تطبیقی
۴۹	<b>فصل ۳- روش حل مسأله‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی</b>
۵۰	۱-۳- دینامیک مولکولی به‌عنوان روش برگزیده
۵۰	۲-۳- شبیه‌سازی رایانه‌ای و دینامیک مولکولی
۵۲	۳-۳- روند حل مسأله
۵۳	۱-۳-۳- بخش آغازین و قالب‌بندی
۵۴	۲-۳-۳- تعریف ساختار اتمی و مولکولی سیستم
۵۵	۳-۳-۳- تنظیمات اصلی برنامه و پیکربندی
۵۶	۴-۳-۳- اجرای شبیه‌سازی
۵۹	<b>فصل ۴- ارتعاشات نانولوله‌های کربنی هتروجانکشن</b>
۶۰	۱-۴- مقدمه
۶۰	۲-۴- تعیین تعداد گام زمانی
۶۱	۳-۴- اعتبار سنجی راه‌حل
۶۲	۴-۴- مقایسه‌ی دو روش دینامیک مولکولی و اجزای محدود
۶۳	۵-۴- ارتعاشات نانولوله‌های هتروجانکشن کربنی یک‌سرگیردار
۶۵	۶-۴- ارتعاشات نانولوله‌های هتروجانکشن کربنی و نانولوله‌های سازنده‌ی آنها
۶۸	۷-۴- ارتعاشات نانولوله‌های هتروجانکشن با شرایط مرزی دوسرگیردار
۶۹	۸-۴- ارتعاشات نانولوله‌های هتروجانکشن کربنی هم‌محور

۷۱	۹-۴- تأثیر تغییر طول یک سمت هتروجانکشن بر فرکانس طبیعی
۷۳	۱۰-۴- تأثیر قطر بر فرکانس طبیعی
۷۴	۱۱-۴- تأثیر دما در فرکانس طبیعی هتروجانکشن‌ها
۷۶	۱۲-۴- ارتعاشات هتروجانکشن با اختلاف قطر زیاد نانولوله‌های سازنده آنها
۷۷	۱۳-۴- بررسی ارتعاشات هتروجانکشن با عیب حفره
۸۱	<b>فصل ۵- جمع‌بندی و پیشنهادها</b>
۸۲	۱-۵- جمع‌بندی
۸۴	۲-۵- پیشنهادها
۸۵	<b>فهرست منابع</b>

## فهرست شکل‌ها

عنوان	صفحه
شکل ۱-۱- انواع ساختارهای کربنی.....	۴
شکل ۲-۱- تصویر گرفته شده <i>TEM</i> که فلورن‌هایی کپسول‌شده را به صورت نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره <i>SWCNTs</i> نشان می‌دهد [۷].....	۷
شکل ۳-۱- تصویر <i>TEM</i> از نانولوله‌ی کربنی دو دیواره که فاصله‌ی دو دیواره در عکس <i>TEM</i> ، ۰/۳۶ نانومتر می‌باشد [۷].....	۷
شکل ۴-۱- تصویر <i>TEM</i> گرفته شده از نانوپپاد [۷].....	۸
شکل ۵-۱- نانولوله‌ی دوجداره‌ی کربنی با کایرالیته‌ی های (۳،۳) و (۷،۷) و طول ۱،۵ نانومتر و ۲۶۰ اتم.....	۹
شکل ۶-۱- نانولوله‌ی (۱۰،۰) دارای انحنا، ۴۸۰ اتم و طول ۵ نانومتر.....	۱۰
شکل ۷-۱- نانولوله‌ی ساده (سمت راست) و نانولوله‌ی با دو درجه پیچش در هر آنگستروم (سمت چپ) با کایرالیته یکسان (۵،۵).....	۱۰
شکل ۸-۱- نانولوله‌ی یک‌سر بسته با کایرالیته (۱۰،۰) و طول ۲،۵ نانومتر و تعداد ۲۵۰ اتم.....	۱۰
شکل ۹-۱- نانولوله‌ی تشکیل شده از دو نانولوله‌ی با کایرالیته متفاوت (۱۲،۰) و (۱۶،۰) با تعداد ۷۸۴ اتم.....	۱۱
شکل ۱۰-۱- کاربرد نانولوله‌ها در صنعت الکترونیک به عنوان ترانزیستور [۱۳].....	۱۳
شکل ۱۱-۱- استفاده از نانولوله‌ها به عنوان چرخ‌دنده [۱۵].....	۱۴
شکل ۱۲-۱- عیب استون‌والز در شبکه‌ی شش ضلعی گرافیت [۲۲].....	۱۸
شکل ۱-۲- انواع نانولوله: (الف) ورق گرافیتی (ب) نانولوله زیگزاگ (۱۲،۰) (ج) نانولوله آرم‌چیر (۶،۶) (د) نانولوله کایرال (۱۰،۲).....	۳۲
شکل ۲-۲- شبکه‌ی شش گوشه‌ای اتم‌های کربن.....	۳۳
شکل ۳-۲- انواع نانولوله‌ها، (الف) نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۰،۰)، (ب) نانولوله‌ی آرم‌چیر (۵،۵) و (ج) نانولوله‌ی دست سان (۷،۴).....	۳۶
شکل ۴-۲- ناحیه‌ی اتصال نانولوله‌ی هتروجانکشن ناهم‌محور که از نانولوله‌های همگن (۵،۵) و (۱۰،۱۰) تشکیل شده است.....	۳۷
شکل ۵-۲- نمای داخلی هتروجانکشن ناهم‌محور (۱۰،۱۰)-(۵،۵).....	۳۷
شکل ۶-۲- ناحیه‌ی اتصال نانولوله‌ی هتروجانکشن هم‌محور که از نانولوله‌های همگن (۵،۵) و (۱۰،۱۰) تشکیل شده است.....	۳۸
شکل ۷-۲- نمای داخلی هتروجانکشن هم‌محور (۱۰،۱۰)-(۵،۵).....	۳۹
شکل ۸-۲- نمودار نیرو و پتانسیل لنارد-جونز بر حسب فاصله‌ی بین اتمی $r$ با استفاده از نرم‌افزار متلب.....	۴۳
شکل ۹-۲- تصویر شماتیک اتم‌های $z$ و $k$ و پیوندها و زاویه‌ی پیوند مربوطه.....	۴۵
شکل ۱-۴- نمودارهای طیف دامنه برای نانولوله‌ی هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) با ۱۳۲۰ اتم، یک‌سرگیردار با الف	

- ۱۰۰۰۰، ۱-ب-۳۰۰۰۰، ج-۵۰۰۰۰ و د-۷۰۰۰۰ گام زمانی ..... ۶۱
- شکل ۲-۴- جهات بردارهای مختصات کارتیزین (هتروجانکشن (۵،۵)-(۳،۳) با ۳۷۶ اتم) ..... ۶۱
- شکل ۳-۴- مقایسه‌ی نتایج شبیه‌سازی نانولوله‌ی (۵،۵)، در این پژوهش و دوآن و همکاران [۷۰] که هر دو به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی می‌باشد..... ۶۲
- شکل ۴-۴- فرکانس طبیعی‌های اول نانولوله‌های هتروجانکشن کربنی یک‌سرگردار با کایرالیته‌های مختلف به دو روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و اجزای محدود [۴۶] ..... ۶۳
- شکل ۵-۴- نانولوله‌ی هتروجانکشن (۵،۵)-(۳،۳) یک‌سرگردار به طول ۸،۷۳۸ نانومتر و تعداد ۵۶۸ اتم..... ۶۴
- شکل ۶-۴- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۵،۵)-(۳،۳) با شرایط مرزی یک‌سرگردار با طول‌های متفاوت ..... ۶۴
- شکل ۷-۴- نانولوله‌ی هتروجانکشن (۱۲،۰)-(۹،۰) یک‌سرگردار به طول ۸،۶۳۹ نانومتر و تعداد ۸۶۱ اتم..... ۶۵
- شکل ۸-۴- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۲،۰)-(۹،۰) با شرایط مرزی یک‌سرگردار با طول‌های متفاوت ..... ۶۵
- شکل ۹-۴- هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) و نانولوله‌های همگن سازنده‌ی آن با طول ۱۵ نانومتر و یک‌سرگردار ..... ۶۶
- شکل ۱۰-۴- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) و نانولوله‌های سازنده‌ی آنها با طول مساوی و شرایط مرزی انتهای قطور ثابت ..... ۶۶
- شکل ۱۱-۴- فرکانس نانولوله‌های سازنده‌ی هتروجانکشن‌های مقایسه‌شده به دو روش دینامیک مولکولی و اجزای محدود ..... ۶۷
- شکل ۱۲-۴- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) و نانولوله‌های سازنده‌ی آنها با طول مساوی و شرایط مرزی انتهای باریک ثابت ..... ۶۷
- شکل ۱۳-۴- هتروجانکشن (۵،۵)-(۳،۳) به طول و ۵،۷۳۸ نانومتر و تعداد ۳۷۶ اتم در دو شرایط مرزی یک‌سرگردار و دوسرگردار ..... ۶۸
- شکل ۱۴-۴- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۵،۵)-(۳،۳) در دو حالت یک‌سرگردار و دوسرگردار ..... ۶۸
- شکل ۱۵-۴- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) در دو حالت یک‌سرگردار و دوسرگردار ..... ۶۹
- شکل ۱۶-۴- هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) هم‌محور و ناهم‌محور با شرایط مرزی یک‌سرگردار با تعداد ۶۰۰ اتم..... ۷۰
- شکل ۱۷-۴- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) در دو حالت هم‌محور و ناهم‌محور که انتهای قطور آنها ثابت است. .... ۷۰
- شکل ۱۸-۴- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) در دو حالت هم‌محور و ناهم‌محور که انتهای باریک آنها ثابت است. .... ۷۱
- شکل ۱۹-۴- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) که طول نانولوله‌ی باریک سازنده‌ی آن ثابت است و طول نانولوله‌ی قطور سازنده متغیر است..... ۷۲
- شکل ۲۰-۴- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) که طول نانولوله‌ی قطور سازنده‌ی آن ثابت است و طول نانولوله‌ی باریک سازنده متغیر است..... ۷۳

- شکل ۴-۲۱- تأثیر قطر نانولوله‌های سازنده‌ی هتروجانکشن در فرکانس طبیعی آنها..... ۷۴
- شکل ۴-۲۲- فرکانس طبیعی اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) با شرایط مرزی یک‌سرگیردار(انتهای قطور ثابت) در دو دمای ۰،۱ و ۳۰۰ کلوین ..... ۷۵
- شکل ۴-۲۳- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) با شرایط مرزی یک‌سرگیردار(انتهای باریک ثابت) در دو دمای ۰،۱ و ۳۰۰ کلوین ..... ۷۵
- شکل ۴-۲۴- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) با شرایط مرزی دوسرگیردار در دو دمای ۰،۱ و ۳۰۰ کلوین ..... ۷۶
- شکل ۴-۲۵- هتروجانکشن‌های (۵،۵)-(۳،۳)، (۷،۷)-(۵،۵) و (۷،۷)-(۳،۳) با طول یکسان ۷،۷۳۸ نانومتر و شرایط مرزی یک‌سرگیردار به تعداد اتم‌های به ترتیب ۵۰۴، ۷۵۶ و ۶۹۰..... ۷۷
- شکل ۴-۲۶- فرکانس طبیعی هتروجانکشن‌های (۵،۵)-(۳،۳)، (۷،۷)-(۵،۵) و (۷،۷)-(۳،۳) یک‌سرگیردار (انتهای قطور ثابت) ..... ۷۷
- شکل ۴-۲۷- تأثیر تعداد عیب حفره بر فرکانس طبیعی(عیوب حفره قسمت بالایی هتروجانکشن می‌باشند)..... ۷۸
- شکل ۴-۲۸- تأثیر تعداد عیب حفره بر فرکانس طبیعی(عیوب حفره قسمت زیرین هتروجانکشن می‌باشند) ..... ۷۹
- شکل ۴-۲۹- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) با عیوب حفره در ناحیه‌ی اتصال دو نانولوله‌ی ساده ..... ۷۹

## فهرست کلمات کوتاه شده

<i>CNT</i>	Carbon Nano Tubes
<i>FFT</i>	Fast Fourier Transform
<i>LAMMPS</i>	Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator
<i>MD</i>	Molecular Dynamics
<i>VMD</i>	Visual Molecular Dynamics

## فهرست علامت‌های به‌کاررفته

$a$	طول بردار پایه‌ی شبکه
$\vec{a}_1, \vec{a}_2$	بردارهای پایه‌ی شبکه گرافیت
$a_{c-c}$	طول پیوند کربن-کربن
$B_{ij}, b_{ij}$	تابع مرتبه‌ی پیوند
$\vec{C}_h$	بردار کایرال (دست‌سانی)
$d_t$	قطر نانولوله‌ی کربنی تک‌جداره
$E$	مدول یانگ جزء قاب فضایی، پتانسیل بین مولکولی تطبیقی
$E_{ij}^{LJ}$	جمله‌ی نماینده‌ی برهم‌کنش واندروالس در تابع پتانسیل
$E_{ij}^{REBO}$	جمله‌ی شامل مرتبه‌ی پیوند در تابع پتانسیل
$E_{kijl}^{tors}$	جمله‌ی نماینده‌ی برهم‌کنش پیچشی در تابع پتانسیل
$f$	تابع مشتق‌پذیر دلخواه
$\vec{f}_i^{ext}$	برآیند نیروهای خارجی
$F_c$	نیروی کولمبی
$F_{LJ}$	نیروی لنارد-جونز
$ij, ik$	پیوندهای اتم $i$ با اتم‌های $j$ و $k$
$i, j, k, l$	شماره‌ی اتم‌ها یا ذرات
$\vec{K}$	ماتریس سفتی نانولوله
$\vec{K}^e$	ماتریس سفتی جزء قاب فضایی
$k_r, k_\theta, k_\tau$	ثابت‌های نیرو
$L$	طول بردار کایرال
$L/d$	نسبت منظری نانولوله‌ی کربنی
$m$	جرم اتم کربن
$m_i$	جرم اتم $i$
$N$	شمار ذرات بی‌بعد
$(n, m)$	شاخص‌های کایرال (دست‌سانی)
$r$	طول پیوند
$\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N$	بردارهای مکان ذرات بی‌بعد
$\ddot{\vec{r}}_i$	بردار شتاب اتم $i$
$\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k$	بردارهای مکان اتم‌های $i, j$ و $k$
$r_{ij}$	فاصله‌ی دو اتم $i$ و $j$
$\vec{r}_{ij}$	بردار متصل‌کننده‌ی اتم $i$ به اتم $j$
$R_{cut}$	شعاع برش
$\vec{u}$	بردار تغییر مکان

$U$	انرژی پتانسیل
$V_1$	پتانسیل خارجی
$V_2$	پتانسیل جفتی
$V_3$	پتانسیل سه ذره‌ای
$V_A, V_{ij}^A$	برهم کنش جاذبه‌ی دوبه‌دو
$V_c$	پتانسیل کولمبی
$V_{ij}^{LJ}$	پتانسیل لنارد-جونز
$V_m$	پتانسیل $m$ -ذره‌ای
$V_N$	پتانسیل $N$ -ذره‌ای
$V_R, V_{ij}^R$	برهم کنش دافعه‌ی دوبه‌دو
$V^{tors}$	پتانسیل پیچشی
$V_{tr}(r)$	پتانسیل بریده شده
$\vec{x}$	بردار مختصات اتم‌های متحرک
$\vec{x}_e$	بردار مختصات اتم‌های متحرک در موقعیت تعادل
$\epsilon_0$	ضریب گذردهی الکتریکی خلأ
$\epsilon_{ij}, \sigma_{ij}$	پارامترهای پتانسیل لنارد-جونز
$\theta$	زاویه‌ی کایرال
$\theta_{ijk}$	زاویه‌ی میان پیوندهای $ik$ و $ij$



فصل ۱-

# مقدمه و پیشینه‌ی

# پژوهش

## تاریخچه‌ای از نانوفناوری و کاربردهای مرتبط با آن

### ۱-۱- نانوفناوری و نانو ساختارها

امروزه نانوفناوری به‌عنوان یکی از کارآمدترین مباحث علمی مطرح است که دربردارنده‌ی علوم متفاوت همچون فیزیک، شیمی و بیولوژی می‌باشد. در طول دو دهه‌ی اخیر، علم و نانوفناوری شاهد پیشرفتی شگرف در تحقق هدف بشر برای پی‌بردن به رازهای طبیعت در ابعاد مولکولی و اتمی بوده‌است. نانوفناوری محدوده‌ای از نانوفناوری می‌باشد که در این محدوده، انسان قادر است انواع ترکیبات، آلیاژها، وسایل و ابزارها و به‌طور کلی سیستم‌ها و سازه‌های گوناگون را در مقیاس اتمی و مولکولی و در ابعاد نانومتری<sup>۱</sup> طراحی کرده و به مرحله‌ی ساخت برساند. روش ساخت در اکثر موارد، به‌صورت جابه‌جا نمودن اتم‌ها و مولکول‌ها و قرار دادن آنها در موقعیت‌های مناسب است. محدوده‌ی ابعادی مورد بحث در نانوفناوری عبارت است از ابعادی بین ۱ تا ۱۰۰ نانومتر که این محدوده بخش زیادی از محدوده‌ی ابعادی علوم مختلف را تشکیل می‌دهد [۱]. همچنین، می‌توان نانوفناوری را بر اساس اجزای تشکیل‌دهنده‌ی این نام‌گذاری، یعنی نانو و نانوفناوری تعریف کرد. نانوفناوری در کل به معنی ساخت ابزارهای کاربردی در اندازه‌های یک‌میلیاردم متر می‌باشد. به‌طور خلاصه، نانوفناوری شامل دستکاری مواد در حوزه‌ی اتم‌ها بوده که با قراردادن اتم‌ها در جای خود، اجازه می‌دهد تا موادی سبک‌تر، محکم‌تر، ارزان‌تر، تمیزتر و با دقت ابعادی بالاتر ساخته شوند.

به‌عبارت دیگر نانوفناوری شکل جدیدی از ساخت مواد به‌وسیله‌ی کنترل و دستکاری واحدهای ساختمانی آنها در مقیاس نانو می‌باشد. نانوفناوری تولید کارآمد مواد و دستگاه‌ها با کنترل ماده در مقیاس طولی نانومتر و بهره‌برداری از خواص و پدیده‌های نوظهوری است که در مقیاس نانو توسعه یافته‌اند.

نکته‌ی مهمی که می‌بایست مورد توجه قرار گیرد این است که آنچه باعث ظهور نانوفناوری شده، نسبت سطح به حجم بالای نانو مواد است. در مقیاس نانو، مواد شروع به تغییر رفتاری می‌کنند و رفتار سطوح بر رفتار توده‌ای ماده غلبه می‌کند و برخی خواص و روابط فیزیکی که برای مواد معمولی کاربرد

---

<sup>۱</sup> Nanometer

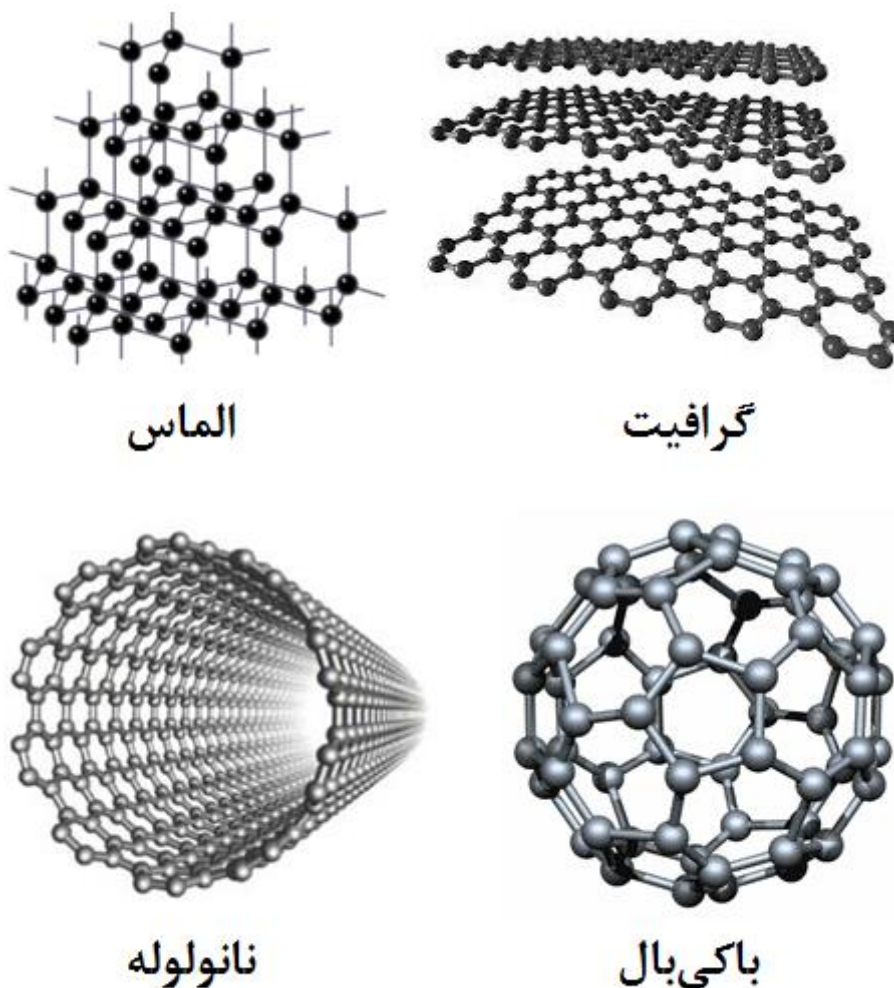
دارند، نقض می‌شوند. به‌عنوان مثال خواص مکانیکی همانند سفتی خیره‌کننده و مقاومت کششی و خواص حرارتی و الکترونیکی فوق‌العاده در این مقیاس به‌طور کلی متفاوت از خواص حتی در مقیاس میکرو خواهد بود.

موادی که در سطح نانو در این نانو فناوری به کار می‌رود را، نانو مواد می‌گویند. ماده‌ی نانو ساختار، به هر ماده‌ای که حداقل یکی از ابعاد آن در مقیاس نانومتری (زیر ۱۰۰ نانومتر) باشد، اطلاق می‌شود. این تعریف به وضوح انواع بسیار زیادی از ساختارها، اعم از ساخته‌ی دست بشر یا طبیعت را شامل می‌شود. منظور از یک ماده‌ی نانو ساختار، جامدی است که در سراسر بدنه‌ی آن انتظام اتمی، کریستال‌های تشکیل‌دهنده و ترکیب شیمیایی در مقیاس چند نانومتری گسترده شده باشند. در حقیقت این مواد متشکل از کریستال‌ها یا دانه‌های نانومتری هستند که هر کدام از آنها ممکن است از لحاظ ساختار اتمی، جهت کریستالوگرافی یا ترکیب شیمیایی با یکدیگر متفاوت باشند. همه‌ی مواد از جمله فلزات، نیمه‌هادی‌ها، شیشه‌ها، سرامیک‌ها و پلیمرها در ابعاد نانو می‌توانند وجود داشته باشند. همچنین محدوده‌ی فناوری نانو می‌تواند به صورت ذرات بی‌شکل (آمورف)، کریستالی، آلی، غیرآلی و یا به صورت منفرد، مجتمع، پودر، کلوئیدی، سوسپانسیونی یا امولسیونی باشد. یکی از عناصری که در نانو فناوری بسیار مورد توجه بوده، کربن می‌باشد. ساختارهای کربنی بخش عظیمی از تحقیقات اخیر را به خود اختصاص داده‌اند؛ لذا در ادامه به بررسی انواع ساختارهای کربنی پرداخته می‌شود.

## ۱-۲- کربن و انواع ساختارهای کربنی

کربن از مهم‌ترین عناصر موجود در طبیعت است و کاربردهای متعدد آن در زندگی بشر، به خوبی این نکته را تأیید می‌کند. به‌عنوان مثال فولاد - که یکی از اصلی‌ترین آلیاژهای مهندسی است - از انحلال حدود دو درصد کربن در آهن حاصل می‌شود؛ انواع مختلف فولاد را می‌توان با تغییر درصد کربن (به‌میزان تنها چند صدم درصد) به‌دست آورد. «شیمی آلی» نیز علمی است که به بررسی ترکیبات حاوی «کربن» و «هیدروژن» می‌پردازد و مهندسی پلیمر هم تنها براساس عنصر کربن پایه‌گذاری شده‌است. از آغاز قرن بیستم تا اواسط آن، کشف و کاربرد ایزوتوپ‌های کربن بسیار قابل توجه بوده‌است. ایزوتوپ یا دگرشکل‌های کربن، در طبیعت به چهار صورت مختلف یافت می‌شود که همه‌ی این چهار فرم جامد هستند و در ساختار آنها اتم‌های کربن به‌صورت کاملاً منظم در کنار یکدیگر قرار

گرفته‌اند. این ساختارها عبارتند از گرافیت، الماس، باکی‌بال‌ها<sup>۱</sup> و نانولوله‌ها(شکل ۱-۱)[۲].



شکل ۱-۱- انواع ساختارهای کربنی

گرافیت یکی از مهم‌ترین ساختارهای کربن در طبیعت است و از قرارگرفتن شش اتم کربن در کنار یکدیگر به وجود آمده است. این اتم‌های کربن به‌گونه‌ای با یکدیگر ترکیب شده‌اند که یک شش ضلعی<sup>۲</sup> منتظم را پدید می‌آورند و از مجموع آنها، صفحه‌ای به‌دست می‌آید که به‌عنوان یک «لایه‌ی گرافیت» در نظر گرفته می‌شود. اتم‌های کربن با پیوندهای کووالانسی- که پیوندی قوی و محکم

<sup>۱</sup> Bucky-Ball

<sup>۲</sup> Hexagonal

است- به یکدیگر متصل شده‌اند. لازم به ذکر است که اتم‌های کربن به کار رفته در یک لایه گرافیت نمی‌توانند با کربنی خارج از این لایه پیوند کووالانسی بدهند. بنابراین یک لایه‌ی گرافیت از طریق پیوندهای واندروالس - که پیوندهایی ضعیف هستند- به لایه‌ی زیرین متصل می‌شود. این مساله باعث می‌شود که صفحه‌های گرافیت به راحتی روی یکدیگر بلغزند. به همین دلیل از این ترکیب در «روغن کاری» و «روان کاری» استفاده می‌شود. علت نرمی سطوحی که با مداد روی آنها نوشته شده- است نیز همین نکته است.

با کمک فشار ناشی از موج ضربه‌ی انفجار، گرافیت به الماس تبدیل می‌شود. در الماس هر اتم کربن با چهار اتم دیگر پیوند کووالانسی برقرار کرده‌است. این دگرشکل، به سبب وجود پیوند قوی کووالانسی کربن-کربن جزء سخت‌ترین مواد موجود در طبیعت با سختی ۱۰ در مقیاس مورس محسوب می‌شود. همین ساختار باعث ایجاد خواص شگفت‌انگیزی در الماس گردیده‌است که از آن جمله می‌توان به هدایت گرمایی چند برابر مس و دمای ذوب حدود ۳۰۰۰ درجه‌ی سانتی‌گراد اشاره کرد.

با نخستین مشاهده‌ی باکی‌بال‌ها در سال ۱۹۸۵ به‌عنوان دگرشکلی جدید، پژوهش را درباره‌ی کربن به پیش راندند. باکی‌بال‌ها ساختارهای کربنی گلوله‌ای شکل و توخالی هستند که معروف‌ترین آنها C60 یا فولرن<sup>۱</sup> است. C60 ساختاری شبیه به توپ فوتبال دارد. اتم‌های کربن در آن با پیوند کووالانسی به صورت پنج ضلعی و شش ضلعی به هم متصل شده‌اند. در واقع این کره از ۳۲ قسمت که ۲۰ تای آن شش ضلعی و ۱۲ تای آن پنج‌ضلعی است تشکیل شده‌است. باکی‌بال‌ها به‌خاطر خصوصیات شیمیایی و شکل توخالی و قفس مانند خود کاربردهای بسیاری دارند. باکی‌بال‌ها بی‌نهایت پایدار هستند و می‌توانند فشارها و دماهای بسیار بالا را تحمل کنند. اتم‌های کربن باکی‌بال‌ها می‌توانند با اتم‌ها و مولکول‌ها واکنش دهند بدون آنکه پایداری و ساختمان کروی آنان دچار تغییر یا عیب شود.

از مهم‌ترین و پرکاربردترین ایزوتروپ‌ها، نانولوله‌های کربنی می‌باشند که دارای خواص و ویژگی‌های منحصربه‌فردی هستند. آنها علاوه‌بر اینکه استحکام بسیار بالایی دارند، از انعطاف و

---

<sup>۱</sup> Fullerene

پیچش پذیری خوبی نیز برخوردارند. نانولوله‌های کربنی مولکول‌هایی استوانه‌ای شکل با انتهای باز یا بسته می‌باشند. ساختار نانولوله‌ها مانند صفحه‌ای از گرافیت است که رول شده باشد. نانوساختارها از سفت‌ترین و با استحکام‌ترین الیافی هستند که تاکنون شناخته و تولید شده‌اند؛ استحکام کششی و مدول یانگ آنها در بهترین حالت می‌توانند به ترتیب، ۶۳ و ۱۰۰۰ گیگاپاسکال باشد که این خواص، از مقادیر متناظر برای فولاد بسیار بزرگ‌ترند. به‌خاطر این ویژگی‌ها و چگالی پایین‌شان، در سازه‌ها کاربرد دارند [۳]. از آنجا که موضوع تحقیق حاضر در مورد این دگرشکل کربن می‌باشد، در ادامه به چگونگی کشف آن پرداخته می‌شود.

### ۱-۳- کشف نانولوله‌ها

در سال ۲۰۰۶ مارک مونتیوکس<sup>۱</sup> و ولادیمیر کوزنشف<sup>۲</sup> در مقاله‌ای در ژورنال کربن به بیان مبدأ و منشأ جالب، و اغلب تحریف‌شده‌ی نانولوله‌ها پرداختند [۴]. اغلب مقالات معروف و علمی، کشف لوله‌های نانومتری توخالی کربنی را به سومیو ایجیما<sup>۳</sup> از NEC در سال ۱۹۹۱ نسبت می‌دهند [۵]. ولی تاریخ لوله‌های نانومتری کربن گرافیتی به گذشته‌ای دورتر در سال ۱۹۵۲ بر می‌گردد. در آن سال رادشکوویچ<sup>۴</sup> و لوکیانوویچ<sup>۵</sup> تصاویر واضحی از لوله‌های ۵۰ نانومتری کربنی را در مجله‌ی روسی «شیمی فیزیکی» به چاپ رساندند [۶]. ممکن است نانولوله‌های کربنی حتی قبل از آن سال هم ساخته شده بودند ولی تا زمان اختراع TEM<sup>۶</sup> یا میکروسکوپ الکترونی عبوری امکان مشاهده‌ی مستقیم این ساختارها فراهم نبوده است (شکل‌های ۱-۲ تا ۱-۴).

---

<sup>۱</sup> Marc Monthioux

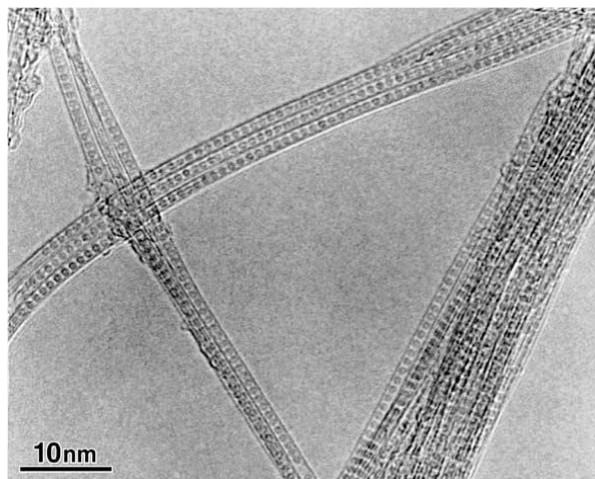
<sup>۲</sup> Vladimir Kuznetsov

<sup>۳</sup> Sumio Ijima

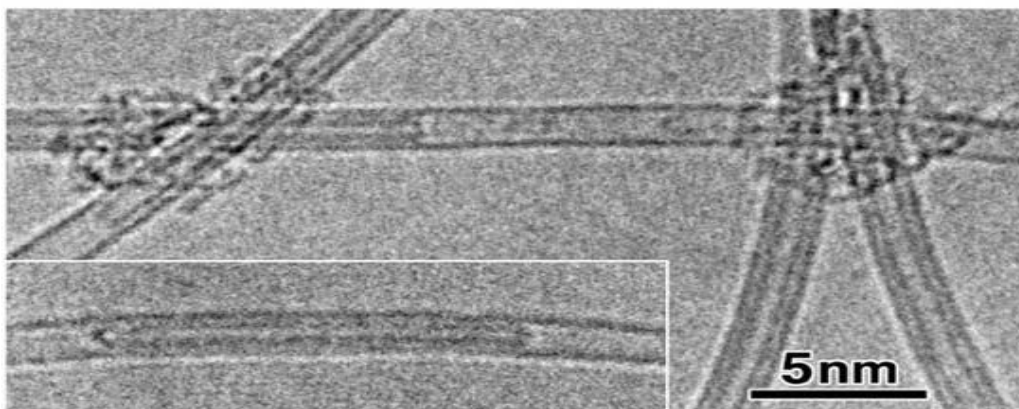
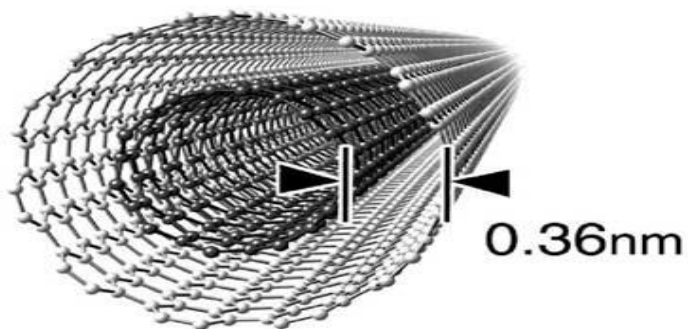
<sup>۴</sup> Radushkevich

<sup>۵</sup> Lukyanovich

<sup>۶</sup> نوعی میکروسکوپ الکترونی است که در آن پرتویی از الکترون‌ها از یک نمونه‌ی فوق‌العاده نازک عبور می‌کنند و در اثر تعامل الکترون‌های عبوری با نمونه تصویر تشکیل می‌شود.

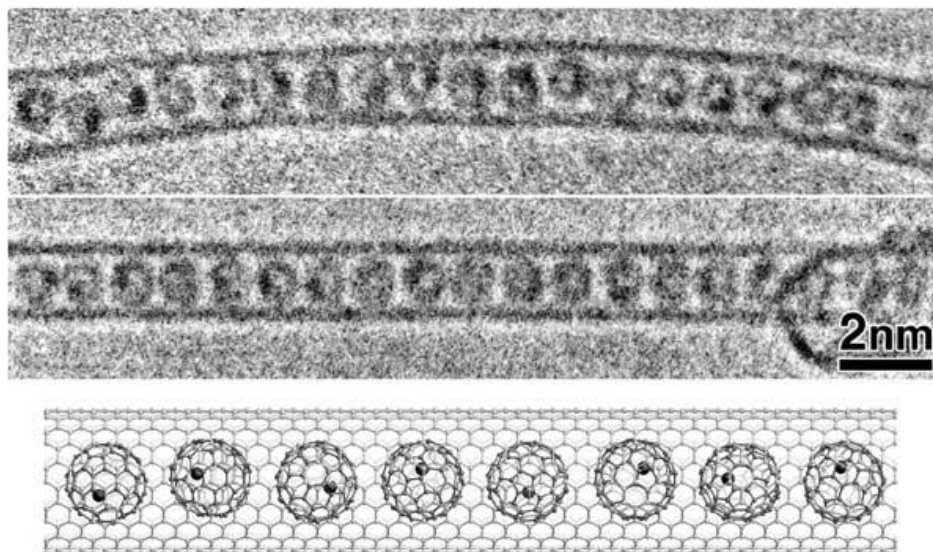


شکل ۱-۲- تصویر گرفته شده *TEM* که فلورن‌هایی کپسول شده را به صورت نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره (SWCNTs)<sup>۱</sup> نشان می‌دهد [۷].



شکل ۱-۳- تصویر *TEM* از نانولوله‌ی کربنی دو دیواره که فاصله‌ی دو دیواره در عکس *TEM*،  $0.36$  نانومتر می‌باشد [۷].

<sup>۱</sup> Single-Walled Carbon Nano Tubes



شکل ۴-۱ تصویر TEM گرفته شده از نانوپپاد<sup>۱</sup> [۷]

به نظر می‌رسد، درست است که گفته‌شود نانولوله‌ها به طرز غیرمترقبه‌ای کشف شده‌اند. ولیکن در یک مقاله که توسط ابرلین<sup>۲</sup>، اندو<sup>۳</sup> و کویاما<sup>۴</sup> [۸] در سال ۱۹۷۶ چاپ شد، فیبرهای توخالی کربنی در ابعاد نانومتری به روش رشد بخار، به وضوح نشان داده شده بودند. یک منظر از ساختار نانولوله‌های کربنی، ساختار یک بعدی و درون تهی آنها است. ساختار یک بعدی آنها بسیار مورد توجه فیزیکدان‌ها است، زیرا امکان آزمایش‌ها در فیزیک کوانتوم یک بعدی را برای آنها فراهم می‌سازد. ساختار درون تهی آنها هم بسیار مورد توجه شیمیدان‌ها است، زیرا امکان دربرگیری مولکول‌ها، واکنش در فضای محصور، و رهاسازی کنترل‌شده‌ی مولکول‌ها، برای مصارفی همچون رساندن دارو به بدن را ایجاد می‌کند.

<sup>۱</sup> Nano Peapods

<sup>۲</sup> Oberlin

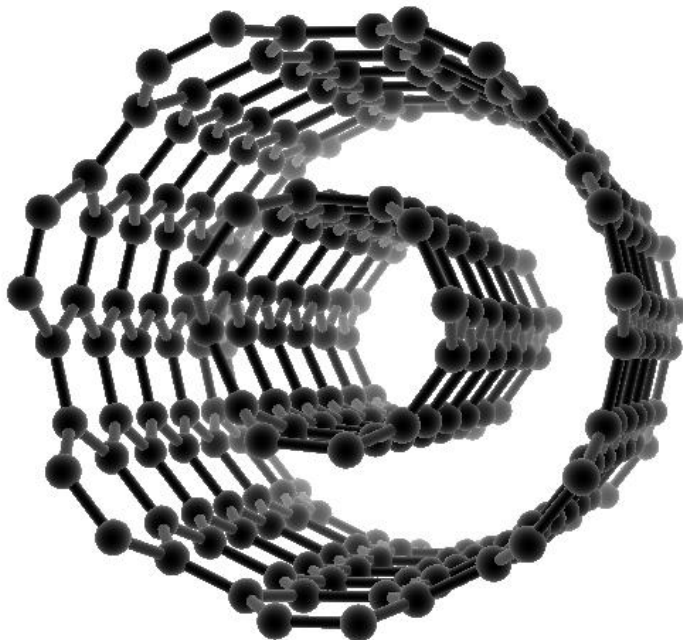
<sup>۳</sup> Endo

<sup>۴</sup> Koyama



## ۴-۱- انواع نانولوله‌های کربنی

همان‌طور که گفته شد، ساختار نانولوله‌های کربنی از رول کردن صفحه‌های گرافیتی بوجود می‌آید. صفحه‌های گرافیتی از شش ضلعی‌های منتظم تشکیل شده‌است. بسته به جهت رول کردن صفحه‌های گرافیتی، به‌طور کلی سه نوع نانولوله ایجاد می‌شود؛ نانولوله‌های آرم‌چیر<sup>۱</sup>، زیگزاگ<sup>۲</sup> و نامتقارن یا دست‌سان<sup>۳</sup>. اگر تعداد لایه‌های گرافیت رول‌شونده بیشتر باشد، تعداد لایه‌های نانولوله‌ی تشکیل‌شده نیز بیشتر می‌شود؛ از این‌رو به دو دسته‌ی تک‌لایه و چندلایه تقسیم می‌شوند. شکل ۱-۵ یک نانولوله‌ی دولایه‌ی با کایرالیته‌ی های (۳،۳) و (۷،۷) را نشان می‌دهد.



شکل ۱-۵- نانولوله‌ی دوجداره‌ی کربنی با کایرالیته‌ی های (۳،۳) و (۷،۷) و طول ۱،۵ نانومتر و ۲۶۰ اتم

نانولوله‌هایی که در طبیعت یافت و یا ساخته می‌شوند به‌صورت ایده‌آل ذکر شده در بالا نیستند. برخی از آنها دارای انحنا (شکل ۱-۶)، برخی پیچش (شکل ۱-۷) و برخی دارای عیوبی می‌باشند که در

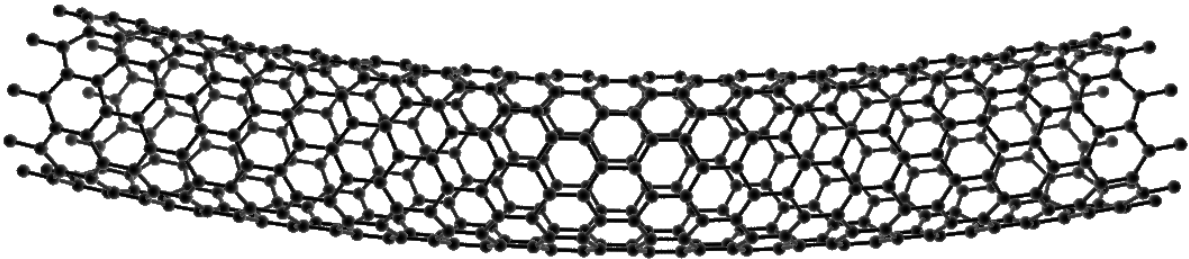
---

<sup>۱</sup> Armchair Nanotubes

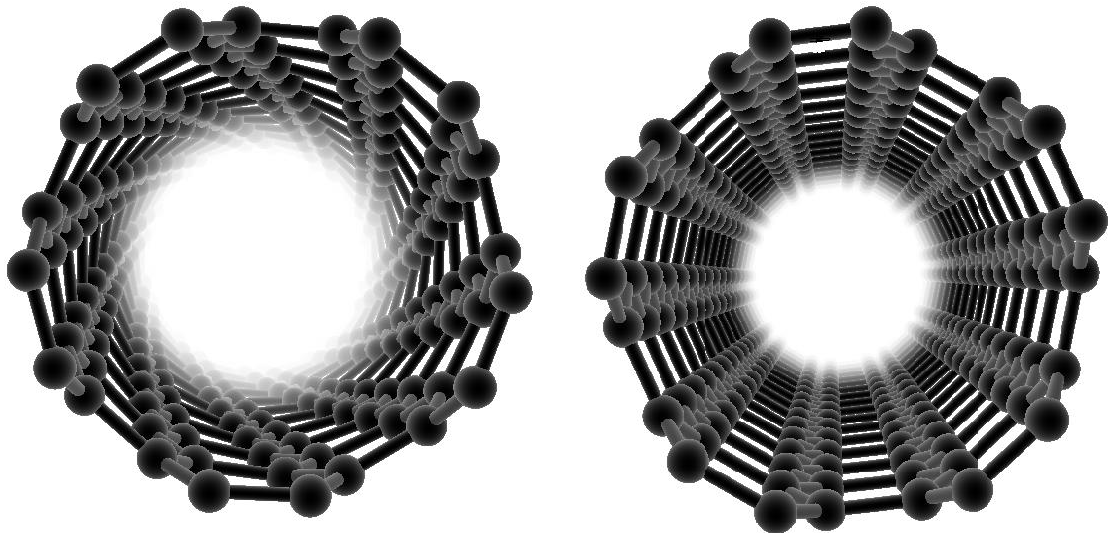
<sup>۲</sup> Zigzag Nanotubes

<sup>۳</sup> Chiral Nanotubes

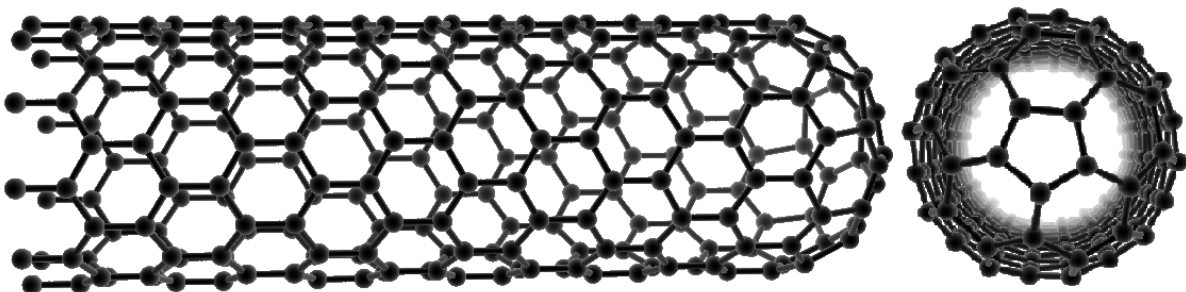
ادامه بحث عیوب ذکر خواهد شد. نوعی از نانولوله‌ها یک سر آنها یا دوسرشان بسته می‌باشد(شکل ۸-۱).



شکل ۱-۶- نانولوله‌ی (۱۰،۰) دارای انحنا، ۴۸۰ اتم و طول ۵ نانومتر

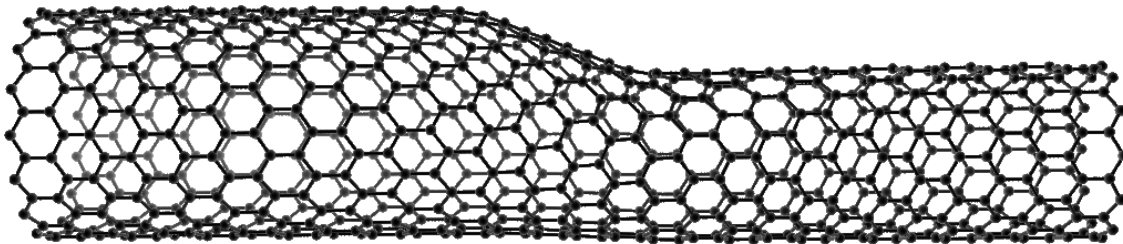


شکل ۱-۷- نانولوله‌ی ساده (سمت راست) و نانولوله‌ی با دو درجه پیچش در هر آنگستروم (سمت چپ) با کایرالیته یکسان (۵،۵)



شکل ۱-۸- نانولوله‌ی یک‌سر بسته با کایرالیته (۱۰،۰) و طول ۲،۵ نانومتر و تعداد ۲۵۰ اتم

یک نوع خاص از نانولوله‌ها وجود دارند که از دو نانولوله‌ی با کایرالیته‌ی متفاوت تشکیل شده‌اند (شکل ۹-۱). جهت تشکیل این نانولوله‌ها عیوبی لازم است که در مورد این ساختارها و کایرالیته‌ی نانولوله‌ها در فصل دوم بحث خواهد شد.



شکل ۹-۱- نانولوله‌ی تشکیل شده از دو نانولوله‌ی با کایرالیته‌ی متفاوت (۱۲،۰) و (۱۶،۰) با تعداد

۷۸۴ اتم

خواص مکانیکی و الکتریکی خارق‌العاده‌ی نانوسازه‌های کربنی مانند نانولوله‌ها و صفحه‌های گرافن باعث شده‌است تا در نانوفناوری مدرن مورد استفاده قرار گیرند. به تبع این کاربردها، مطالعات گسترده‌ی آزمایشگاهی و نظری برای بررسی خواص مکانیکی در سال‌های اخیر صورت گرفته‌است. از این‌رو، دانش در مورد رفتار ارتعاش نانو ساختارها از اهمیت زیادی برای رشته‌های مهندسی و بسیاری از دستگاه‌های پزشکی در سیستم‌های نانو الکترومکانیکی از جمله نوسانگرها، ساعت‌ها و دستگاه‌های حسگر برخوردار است. در ادامه به بررسی کاربردهای فراوان ارتعاشات نانولوله‌ها پرداخته شده‌است.

## ۵-۱- کاربردهای نانولوله‌ها

کشف نانولوله‌های کربنی موجب شده‌است که فعالیت‌های تحقیقاتی گسترده‌ای در علوم به بحث نانو ساختارهای کربنی و کاربردهای آنها اختصاص یابد. دلیل عمده‌ی این مسأله تکامل ساختاری مورد انتظار آنها، اندازه‌ی کوچک، چگالی کم، سختی بالا، استحکام بالا (استحکام کششی خارجی‌ترین جداره‌ی یک نانولوله کربنی چنددیواره تقریباً ۱۰۰ برابر بیشتر از آلومینیوم است) و خواص عالی الکتریکی آنها است. در نتیجه نانولوله‌های کربنی ممکن است به‌طور گسترده در تقویت مواد، صفحه نمایش مسطح با انتشار میدانی، حسگرهای شیمیایی، دارو رسانی و علم نانو الکترونیک کاربرد یابند. از

کاربردهایشان که بحث ارتعاشات در آنها اهمیت پیدا می‌کند می‌توان به استفاده از آنها به‌عنوان نانوحسگر، حمل جریان برق، انتقال جریان از جمله در انتقال خون به‌عنوان رگ‌های خونی، انتقال دارو، هدایت حرارتی، محور حمل چرخنده‌های در مقیاس نانو، ذخیره‌کننده و پیل سوختی نام برد. در این موارد با قرار گرفتن نانولوله‌ها در محیط کاربردی خود نیاز به بررسی ارتعاشات و تعیین فرکانس طبیعی اهمیت پیدا می‌کند، که در ادامه به این کاربردهای نانولوله‌های کربنی اشاره خواهد شد.

### ۱-۵-۱- رزوناتورها

به سبب خواص شگفت‌انگیز نانولوله‌ها، از قبیل استحکام بالا، رسانایی گرمایی بالا و فرکانس طبیعی بالا، از نانولوله‌ها می‌توان در رزوناتورها، سنسورها، پراب‌ها و دیگر تجهیزات از این‌دست بهره برد. یکی از مهم‌ترین قسمت‌های سیستم‌های انتقال امواج رزوناتورها می‌باشد [۹]. نتایج نشان می‌دهد که اگر اندازه‌ی رزوناتور کاهش یابد، فرکانس رزونانس آن افزایش می‌یابد و همچنین باعث کاهش مصرف انرژی آن می‌شود. افزایش مقدار فرکانس رزونانس در سنسورها باعث افزایش حساسیت آن می‌شود [۱۰]. وجود رزوناتورهای با فرکانس بالاتر در ارتباطات وایرلس به معنی امکان ساخت فیلترها، اسیلاتورها و میکسرهای با فرکانس بالاتر می‌باشد.

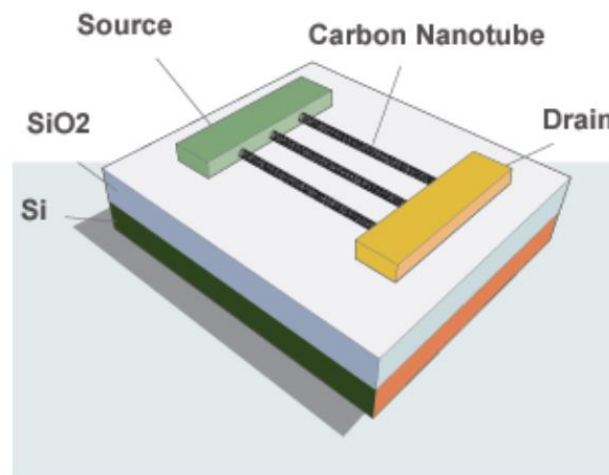
### ۱-۵-۲- به‌عنوان تقویت‌کننده در کامپوزیت‌ها

نانولوله‌ها یکی از مستحکم‌ترین مواد به‌شمار می‌روند. این موضوع، کاربرد نانولوله‌های کربنی را به عنوان ماده‌ی پرکننده در تولید نانوکامپوزیت‌ها به خوبی روشن می‌سازد. کامپوزیت‌های با پایه‌ی نانولوله‌ی کربنی دارای نسبت استحکام به وزن بالا هستند و مصارف گسترده‌ای را در صنعت خواهند داشت [۱۱].

### ۱-۵-۳- استفاده از نانولوله‌های تک‌دیواره در صنعت الکترونیک

نانولوله‌ها به میزان قابل توجهی سخت و قوی بوده و هادی جریان الکتروسیسته و گرما می‌باشند. این

خواص سبب استفاده از این مواد در صنعت الکترونیک شده است. نانولوله‌های کربنی سیم‌های مولکولی بزرگی هستند که الکترون می‌تواند آزادانه در آن حرکت کند و رفتار آنها پیچیده است. در این راستا رفتار نانولوله‌های چنددیواره بسیار پیچیده‌تر از تک‌دیواره است، زیرا لایه‌های کناری روی یکدیگر تأثیر می‌گذارند. مدل‌سازی چنین اثراتی از موضوعات تحقیقاتی در حال حاضر می‌باشد. محققان امیدوارند که ابعاد سیم‌ها یا قطعات را از طریق جایگزینی با نانولوله به حدود نانومتر یا کمتر برسانند. این قطعات در کنار مدارات الکترونیکی می‌توانند خیلی سریع‌تر و با توان کمتر از مدارات کنونی کار کنند. لامپ‌های تولیدشده با نانولوله‌های کربنی هزینه‌ی تولید کمتری دارند. به علاوه عمر طولانی‌تر و ثبات رنگ بیشتر نسبت به لامپ‌های معمولی، از مزایای دیگر این لامپ‌ها است [۱۲].



شکل ۱-۱۰-۱- کاربرد نانولوله‌ها در صنعت الکترونیک به‌عنوان ترانزیستور [۱۳]

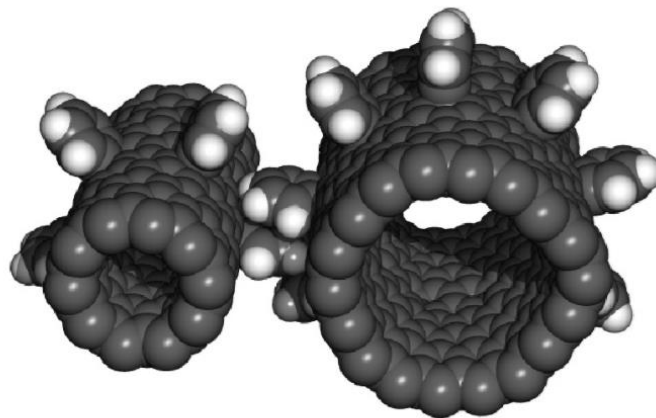
#### ۱-۵-۴- ساختار تو خالی نانولوله و کاربرد به‌عنوان ذخیره‌کننده و پیل سوختی

نانولوله‌ها، ساختارهای کربنی توخالی هستند. بنابراین، امکان قرار دادن مواد خارجی در داخل آنها وجود دارد. به طور مثال، با قرار دادن فلزات درون نانولوله‌ها می‌توان خواص الکتریکی این مواد را بهبود بخشید. تحقیقات نشان داده است که نانولوله‌های باز، مثل یک نی توخالی عمل می‌کنند. این نی‌های مولکولی می‌توانند به‌وسیله‌ی عمل موئینگی و تحت شرایط خاص، برخی عناصر را به درون خود بکشند. همچنین نانولوله‌های کربنی برای ذخیره نمودن سوخت‌های آلکانی و هیدروژن و ایجاد پیل‌های سوختی نیز مورد بررسی قرار گرفته‌اند. ذخیره‌ی هیدروژن در داخل نانولوله‌های کربنی تک-

دیواره امکان‌پذیر است. ظرفیت جذب هیدروژن نانولوله‌های تک‌دیواره‌ی ساخته‌شده حدود ۳ تا ۵ درصد وزنی نانولوله‌هاست. بنابراین در مقایسه با دیگر انواع ذخیره‌سازهای هیدروژن نظیر سیستم هیدروژن مایع، هیدروژن فشرده، هیدریدهای فلزی و سوپرکربن اکتیو، سیستم نانولوله‌ای کربنی و خصوصاً نانولوله‌های تک‌دیواره، بهترین انتخاب برای اهداف مورد نظر بوده و می‌تواند به‌عنوان سیستمی سبک، فشرده، نسبتاً ارزان، ایمن و با قابلیت استفاده‌ی مجدد در ذخیره‌سازی هیدروژن مورد استفاده قرار گیرد [۱۴].

### ۱-۵-۵- ساخت نانوماشین‌ها با استفاده از نانولوله‌های کربنی

نانولوله‌های کربنی همچین برای استفاده در ساخت نانوماشین‌ها پیشنهاد شده‌اند. نانولوله‌ها به‌طور مناسبی با ساختارهای مختلف جانشین شده‌اند که می‌توانند به‌عنوان محورها در نانو ماشین‌ها عمل کنند. ممکن است، نانولوله‌های مختلف با همدیگر تشکیل چرخ‌دنده دهند تا حرکت چرخشی مختلفی را انتقال دهند (شکل ۱-۱۱). این امر از طریق ساختن دنده‌های چرخ‌دنده (استخلاف‌ها) بر روی نانولوله‌ها می‌تواند انجام شود [۱۴].



شکل ۱-۱۱- استفاده از نانولوله‌ها به عنوان چرخ‌دنده [۱۵]

### ۱-۵-۶- مصارف پزشکی

نانولوله‌های کربنی در دارورسانی نیز به کار می‌روند. کپسول‌هایی که می‌توانند بافت‌های مریض

بدن را شناسایی کنند و دقیقاً دارو را در آن محل قرار دهند. آنها می توانند بدون هیچ جراحی در محل‌هایی که دارو مورد نیاز است کشت گردیده، به آهستگی دارو را در طول درمان آزاد سازند [۱۶].

### ۱-۶- ویژگی‌های نانولوله‌ها

شناخت ویژگی‌های نانولوله‌ها، دید وسیع‌تری نسبت به کاربردهای آینده‌شان می‌دهد. کاربرد بیشتر این نانوساختارها نیاز به بررسی ارتعاشات آنها را جدی‌تر می‌کند. در اینجا به مهمترین خواص و رفتار مکانیکی نانولوله‌های کربنی و علت مولکولی آنها اشاره می‌شود.

#### ۱-۶-۱- استحکام

نانولوله‌های کربنی یکی از محکم‌ترین موادی هستند که تا حال برای انسان شناخته شده‌است، هم از بعد مقاومت کششی، و هم از بعد ضریب کشسانی. این استحکام برگرفته از پیوندهای کووالانسی  $SP^2$  بین اتم‌های کربن می‌باشد. ضریب یانگ نانولوله‌های کربنی در راستای محورشان بسیار زیاد است. نانولوله‌ها در کل به خاطر طول بسیار زیادشان از قابلیت انعطاف‌پذیری بالایی برخوردارند. در نتیجه، این ترکیبات برای کاربرد در مواد مرکبی که به خواص ناهمگون نیاز دارند بسیار مناسب هستند.

#### ۱-۶-۲- خواص حرکتی

نانولوله‌های کربنی چنددیواره که نانولوله‌های هم‌محوری هستند که دقیقاً داخل یکدیگر قرار گرفته‌اند دارای خاصیت برجسته‌ای هستند. بدین نحو که یک نانولوله در یک هسته‌ی مرکزی می‌تواند درون لوله‌ی بیرونی بدون هیچ اصطکاکی بلغزد و به این ترتیب یک یاتاقان خطی و یا چرخشی ایده‌آل اتمی را به وجود می‌آورد [۱۷]. جاگذاری دقیق اتم‌ها برای ساخت ماشین‌های مفید یکی از اولین مثال‌های واقعی نانوفناوری مولکولی است. و هم‌اکنون برای ساخت کوچکترین موتور چرخشی جهان و یک نانو رئوستات مورد استفاده قرار گرفته‌است. در کاربردهای آینده دورنماهای جالبی همچون نوسان‌سازهای مکانیکی گیگاهرتزی به چشم می‌خورد.

### ۱-۶-۳- خواص الکتريکی

علاقه‌مندی قابل توجهی نسبت به قابلیت هدایت الکتريکی نانولوله‌ها وجود داشته‌است. باور کلی بر این است که نانولوله‌های با ترکیبات ویژه‌ای از  $n$  و  $m$ <sup>۱</sup>، هادی می‌باشند و از این رو فلزی هستند. شان داده شده‌است که هدایت تابعی از قطر نانولوله می‌باشد. فرانک<sup>۲</sup> و پنچارال<sup>۳</sup> [۱۸] به دقت الیاف نانولوله-ی چنددیواره را با سطحی از جیوه تماس دادند. هدایت نانولوله‌های چنددیواره، از طریق افزایش‌هایی به صورت نانولوله‌های اضافی که در تماس با سطح جیوه قرار دارد ترقی ناگهانی پیدا می‌کند. این هدایت کوانتایی شده در همه‌ی ابعاد نانولوله‌ها و همچنین در نانوسیم‌های فلزی مشاهده شده‌است. بعضی از انواع نانولوله‌ها از نوع آرم‌چیر به نظر می‌رسد که هدایت بهتری را نسبت به نانولوله‌های فلزی از خود نشان می‌دهند. علاوه بر آن، واکنش‌های بین‌دیواره‌ای مربوط به نانولوله‌های چنددیواره، معلوم شده‌است که جریان را در سرتاسر لوله‌های منفرد در عرض ساختار به طور غیریکنواخت، دوباره پخش می‌کنند.

قابلیت هدایت الکتريکی و مقاومت الکتريکی رشته‌هایی از نانولوله‌های تک‌دیواره، مستقیماً با استفاده از روشی که در آن چهار الکتروود در بخش‌های مختلف نانولوله قرار گرفته‌است اندازه‌گیری شده‌است. مقاومت این رشته‌های نانولوله‌ی تک‌دیواره در حدود  $10^{-4}$  اهم در سانتی‌متر در  $27$  درجه‌ی سانتی‌گراد بود. این بدان معناست که رشته‌های الیاف کربنی، بالاترین هدایت الکتريکی معلوم شده را دارند. اندازه‌گیری‌ها نشان دادند که چگالی جریان در لوله، بزرگتر از  $10^7 A/cm^2$  می‌باشد. در هر صورت، این مقدار ممکن است که برآورد شده باشد به طوری که نظریات ثابت می‌کنند، نانولوله‌ها می‌توانند چگالی‌های جریان پایدار را به بزرگی  $10^{13} A/cm^2$  تحمل کنند. گزارش شده‌است که نانولوله‌های تک‌دیواره ممکن است نقص‌های ساختاری نیز داشته باشند. اتفاقاً این نوع عیوب یا نقایص این امکان را فراهم می‌سازند که نانولوله‌های تک‌دیواره به صورت ترانزیستورها عمل نمایند. همین‌طور اتصال نانولوله‌ها به یکدیگر ممکن است وسایل ترانزیستورمانندی را پدید آورد. یک نانولوله‌ی تنها با

<sup>۱</sup> در مورد این پارامترها در فصل ۲ توضیح داده خواهد شد.

<sup>۲</sup> Frank

<sup>۳</sup> Poncharal



اتصال طبیعی، یعنی جایی که یک بخش راست و مستقیم به یک بخش کایرال<sup>۱</sup> متصل شده است، به صورت یک دیود یک سوکننده ی یک نیمه ترانزیستور در یک مولکول واحد رفتار می کند. خواص نانولوله های خم شده مورد بررسی قرار گرفته است. نانولوله هایی که معلق مانده و سپس از یک محل یا موقعیت تعادلی منحرف گشته اند، می توانند به صورت فنرها توصیف شوند. قابلیت های هدایت الکتریکی آنها وقتی که تحت تأثیر تنش قرار می گیرند، کاهش می یابد.

به دلیل تقارن و ساختار منحصربه فرد گرافیت، خواص الکتریکی نانولوله به شدت تحت تأثیر ساختار گرافیت است. بسته به بردار کایرال شان، نانولوله های کربنی با یک قطر کم می توانند نیمه هادی و یا فلزی باشند. تفاوت در هدایت الکتریکی به دلیل ساختمان مولکولی آنها می باشد که ساختار باند انرژی متفاوت و در نتیجه شکاف باند متفاوتی را نتیجه می دهد. تفاوت در هدایت الکتریکی را به سادگی می توان از خواص صفحات گرافیتی استخراج نمود. نشان داده شده است که یک نانولوله  $(n, m)$  در صورتی فلزی است که  $n$  با  $m$  برابر یا تفاضل  $n$  و  $m$  مضرب صحیحی از ۳ باشد  $(n - m = 3I)$ . مقاومت این نانولوله ها توسط قوانین مکانیکی تعیین می گردد و اثبات شده که مستقل از طول نانولوله می باشد. انتظار می رود نانولوله های فلزی، چگالی جریانی هزاران برابر بیشتر از فلزاتی نظیر مس و نقره داشته باشند.

#### ۱-۶-۴- عیوب

در اغلب مطالعات نانولوله ها به صورت یک لوله ی کریستالی ایده آل در نظر گرفته می شود. در حالی - که آزمایشات تجربی نشان داده است که در هر ۴ میکرومتر طول نانولوله های کربنی تک لایه، حداقل یک عیب در بهترین شرایط تولید آنها وجود دارد. مشابه هر ماده ی دیگری، وجود عیوب بر خواص ماده تأثیرگذار است. عیوب می توانند در قالب حفره، اتم ناپایدار، ساختار پنج ضلعی<sup>۲</sup>، ساختار هفت-ضلعی<sup>۳</sup>، عیوب استون والز<sup>۴</sup>، دیواره ی ناپیوسته و ... بروز نمایند [۱۹، ۲۰]. طبق مشاهدات انجام شده

---

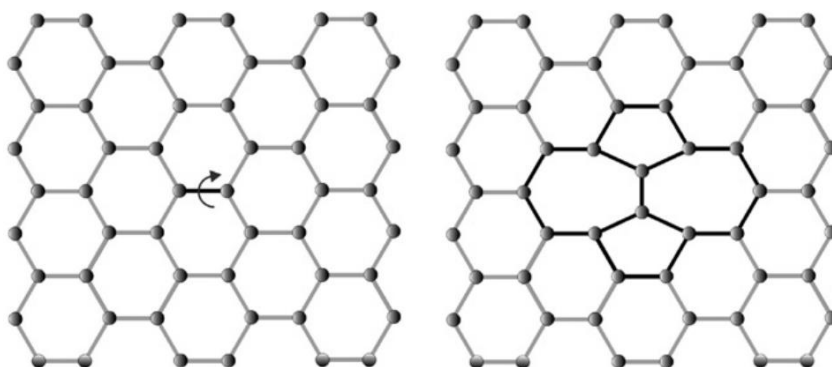
<sup>۱</sup> Chiral

<sup>۲</sup> Pentagon

<sup>۳</sup> Heptagon

<sup>۴</sup> Stone Wales

توسط میکروسکوپ  $STM$  تقریباً ۱۰ درصد نانولوله‌های تک‌دیواره معیوب بوده‌اند [۲۱]. سطوح بالای چنین نواقصی می‌تواند مقاومت کششی نانولوله را تا ۸۵٪ کاهش دهد. در عیوب استون والز با تغییر آرایش پیوندهای بین اتم‌ها، یک جفت پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی ایجاد می‌شود (شکل ۱-۱۲). به خاطر ساختار تقریباً یک بعدی نانولوله‌های کربنی مقاومت کششی لوله به ضعیف‌ترین قسمت آن بستگی دارد، مشابه یک زنجیره که ضعف در یک حلقه مقاومت کل زنجیر را می‌کاهد؛ لذا بررسی عیوب به-خاطر ایده‌آل نبودن نانولوله‌ها اهمیت دارد.



شکل ۱-۱۲- عیب استون والز در شبکه‌ی شش‌ضلعی گرافیت [۲۲]

خواص الکتریکی لوله نیز از حضور عیوب متأثر می‌شود. یک اثر متداول، کاهش هدایت در قسمت معیوب لوله می‌باشد. بعضی از عیوب در لوله‌های آرم‌چیر که فلزی هستند، باعث می‌شود که ناحیه‌ی اطراف عیب مثل نیمه‌هادی عمل کند. گذشته از این، جاهای خالی تک‌اتمی سبب ایجاد خواص مغناطیسی می‌گردد. خواص حرارتی لوله‌ها هم به شدت به عیوب حساس است.

همانطور که بیان شد برخی از این عیوب به‌طور ناخواسته تشکیل می‌شوند و برخی نیز مطلوب ما هستند؛ مانند عیوب سازنده‌ی انتهای بسته‌ی نانولوله‌ها، و یا ایجاد نانولوله‌ی خمیده با جایگزینی عیوب پنج‌ضلعی یا هفت‌ضلعی به‌جای شش‌ضلعی‌ها. همچنین وجود برخی عیوب می‌تواند منجر به ساختارهای متفاوت و جدیدی همچون اتصالات  $T$  و  $Y$  شکل [۲۳]، و هتروجانکشن‌ها<sup>۱</sup> گردد. تحت شرایط خاص، می‌توان این نواقص را به‌گونه‌ی کنترل شده‌ی ایجاد کرد. لذا روش‌های تولید نانولوله‌ها

<sup>۱</sup> Hetero-Junctions

اهمیت پیدا می‌کند.

#### ۱-۶-۵- تولید طبیعی و اتفاقی

فلورن‌ها و نانولوله‌های کربنی لزوماً محصول آزمایشگاه‌های فوق مدرن نیستند؛ آنها به‌طور عادی در جاهایی مثل شعله‌های معمولی، از سوختن متان، اتیلن و بنزین و در دوده‌ی هوا ایجاد می‌شوند. ولیکن نانولوله‌های پدیدآمده در این روش‌های طبیعی، به‌دلیل محیط بسیار کنترل نشده، از لحاظ اندازه و کیفیت بسیار بی‌قاعده هستند و از یکنواختی لازم که در کاربردهای صنعتی و تحقیقات نیاز است برخوردار نیستند.

#### ۱-۶-۶- استحکام و الاستیسیته

نانولوله‌های تک‌دیواره سفت‌تر و سخت‌تر از فولاد می‌باشند و در اثر نیروهای فیزیکی - مکانیکی، در برابر آسیب مقاوم می‌باشند. فشار دادن نوک نانولوله سبب انحنای آن می‌گردد، بدون آنکه نوک آن صدمه ببیند. هنگامی که نیرو برداشته شود، نوک نانولوله به حالت نخستین خود باز می‌گردد. اندازه‌گیری کمی این تأثیرات، در هر صورت بسیار دشوار است و بر روی یک مقدار عددی دقیق نمی‌توان توافق حاصل کرد. دانشمندان هنگام کار کردن با نانولوله‌های چنددیواره‌ی مختلف، متوجه شدند که اندازه‌گیری مدول نانولوله‌های چنددیواره، وابستگی قوی و چندانی به قطر نانولوله‌ها ندارد. در عوض آنها استدلال کردند که مدول نانولوله‌های چنددیواره به مقدار بی‌نظمی در دیواره‌های نانولوله بستگی دارد. می‌توان گفت که اگر نانولوله‌های چنددیواره شکسته شوند، لایه‌های بیرونی، در ابتدا می‌شکنند.

#### ۱-۶-۷- هدایت حرارتی نانولوله‌های کربنی

دانشمندان در بررسی‌های تجربی و آزمایش‌های خود به نتایجی در زمینه‌ی هدایت حرارتی نانولوله‌های کربنی دست یافته‌اند. آنها پیش‌بینی می‌کنند که نانولوله‌های کربنی در دمای اتاق رسانایی حرارتی بالاتری از گرافیت و الماس دارند. دانشمندان در این اندازه‌گیری‌ها، رسانایی حرارتی را برای

دو دسته از نانولوله‌ها به دست آوردند. یک دسته، نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره‌ای بودند که به صورت توده‌ای در کنار هم قرار گرفته بودند و مقدار رسانایی حرارتی مجموعه‌ی آنها به دست آمد. یک دسته نیز نانولوله‌های کربنی چنددیواره بودند که به صورت جدا از هم قرار گرفته بودند. رسانایی حرارتی این دسته از نانولوله‌ها به صورت جداگانه بررسی شد. این دانشمندان مقدار رسانایی حرارتی بیش از  $200 \text{ W/mK}$  را برای توده‌های نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره به دست آوردند. همچنین طبق این بررسی‌ها، مقدار رسانایی حرارتی نانولوله‌های کربنی چنددیواره به صورت جداگانه بیشتر از  $W/mK$   $300$  به دست آمد.

## ۱-۷- روش‌های شبیه‌سازی

برای حل مسأله‌ی ارتعاشات نانولوله‌ها روش‌های مختلفی به کار می‌رود. این روش‌ها به دو دسته‌ی کلی روش‌های محیط پیوسته<sup>۱</sup> و مدل‌سازی در مقیاس اتمی تقسیم‌بندی می‌شود. هنگامی که رفتار مجموعه‌ای را بتوان همگن در نظر گرفت، می‌توان از روش محیط پیوسته استفاده کرد. در این حالت، این مدل می‌تواند تحت تأثیر نیروهای حجمی و سطحی قرار گیرد. در اینجا محیط پیوسته در نظر گرفته شده از قوانین پیوستگی، تعادل و اصل اندازه‌ی حرکت تبعیت می‌نماید. مدل محیط پیوسته، تغییر شکل را به تأثیر نیروهای خارجی که تنش و کرنش داخلی را ایجاد می‌کنند، مرتبط می‌نماید. روش‌های محیط پیوسته بر اساس هندسه تعریف شده‌اند و اصل کار مجازی، در این روش‌ها معتبر در نظر گرفته می‌شود. از روش‌های محیط پیوسته به دو روش پوسته و تیر پرداخته می‌شود.

در روش مدل‌سازی در مقیاس اتمی، سیستم به صورت مجموعه‌ای از اتم‌ها در نظر گرفته می‌شود که با یکدیگر برهم‌کنش دارند. در این روش‌ها، هر اتم به صورت یک جرم نقطه‌ای معادل جرم اتم مورد مطالعه، و برهم‌کنش‌های بین اتمی نیز با نیروی ساده‌ی فنر یا نیروهایی پیچیده‌تر، که بستگی به پتانسیل بین‌اتمی انتخابی دارد، در نظر گرفته می‌شوند. بدیهی است که این روش‌ها به نسبت روش‌های پیوسته دقیق‌تر اند. در ادامه به بررسی این روش‌ها پرداخته می‌شود.

---

<sup>۱</sup> Continuum Model

### ۱-۷-۱- مدل تیر الاستیک

در این روش هر نانولوله‌ی کربنی با یک تیر مدل می‌شود [۲۴]. جهت حل مسأله‌ی ارتعاشات تیر از روابط تئوری اویلر-برنولی [۲۵] و تیموشینکو [۲۶, ۲۷] استفاده می‌شود. پارامترهایی همچون مدول یانگ، ضریب پواسون و ضخامت که در این روابط به کار می‌روند، از روش‌های دیگر به دست آمده و در این مدل وارد می‌شوند. بیشترین کاربرد این مدل‌سازی در بررسی رفتار نانولوله‌های با نسبت طول به قطر زیاد می‌باشد که بارگذاری‌های فشاری و خمشی در آن اعمال می‌شود. همچنین جهت مطالعه‌ی انتشار امواج در نانولوله‌ها از این مدل‌سازی استفاده می‌شود. نتایج رفتار نانولوله‌ها در این حالت‌ها، با نتایج شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی مطابقت خوبی دارد. قابل ذکر است که نانولوله‌های چندلایه در این روش به صورت چند تیر هم‌مرکز مدل می‌شود که با در نظر گرفتن نیروهای بین تیرها این مسأله هم قابل حل می‌باشد.

### ۱-۷-۲- پوسته‌ی الاستیک

در این روش نانولوله‌های کربنی با یک پوسته‌ی استوانه‌ای الاستیک مدل می‌شوند. روابطی که جهت حل در این روش به کار می‌رود، روابط اصلاح‌شده‌ی مکانیک محیط پیوسته برای پوسته‌ها می‌باشد. پارامترها و ضرایب روابط از سایر تکنیک‌ها به دست می‌آید. قابل ذکر است، مدلی که برای فلورن‌ها در این روش به کار می‌رود، پوسته‌های الاستیک کروی شکل می‌باشد.

### ۱-۷-۳- روش اجزای محدود (*FEM*)<sup>۱</sup>

در این روش بعد از مدل کردن سیستم به گره و المان، ماتریس سفتی آن تشکیل می‌شود. نانولوله به عنوان یک سیستم دارای یک تابع انرژی پتانسیل است. تابع پتانسیل بر حسب موقعیت اتم‌ها در دستگاه مختصات دکارتی به صورت غیرخطی نوشته می‌شود. سپس جهت ساده‌سازی سیستم حول موقعیت تعادل خود خطی می‌شود، که در این حالت انرژی پتانسیل آن کمینه است. ماتریس

---

<sup>۱</sup> Finite Element Modeling

سفتی  $\tilde{K}$  از معادله‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\tilde{K} = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial \vec{x} \partial \vec{x}} \right|_{\vec{x}=\vec{x}_e} \quad 1-11$$

که در آن،  $\vec{x}$  برداری است که مؤلفه‌های آن مختصات اتم‌های متحرک‌اند،  $\vec{x}_e$  همان مختصات به-ازای حالت تعادل سیستم را نشان می‌دهند و  $U$  بخشی از انرژی پتانسیل است که تنها به اندرکنش‌های بین اتمی وابسته است. نماد مشتق در این معادله، به معنای دو بار مشتق‌گیری جزئی نسبت به همه‌ی مختصه‌های  $\vec{x}$  (در سه بعد) است. پتانسیل  $U$  می‌تواند همان پتانسیلی باشد که در روش شبیه-سازی دینامیک مولکولی استفاده می‌شود، که در فصل بعد در مورد آن بیان می‌شود. ماتریس جرم نانولوله نیز مشخص است و ماتریسی قطبی می‌باشد که درایه‌های روی قطر اصلی آن برابر جرم اتم کربن (در نانولوله‌های کربنی) است. از این رو می‌توان فرکانس‌های طبیعی و شکل‌های مود متناظر با آنها را در این روش به سادگی تعیین کرد [۲۸].

از این روش به عنوان روشی جایگزین برای حل معادلات دیفرانسیل در مسائل پیوسته تعریف شده است. مراحل روش اجزای محدود عبارتند از:

۱. جایگزینی محیط پیوسته با زیر مجموعه‌های ترکیب‌شده
۲. تعیین یک قانون پایه‌ی مناسب
۳. انتخاب تابع میان‌یابی
۴. گسسته‌سازی مسأله
۵. جایگزینی مقادیر پیوسته با توابع میان‌یاب
۶. ترکیب المان‌ها
۷. ترکیب معادلات کلی سیستم
۸. حل معادلات کلی سیستم
۹. محاسبه‌ی مقادیر معادله‌ی حالت از روی مقادیر حالت

#### ۱-۷-۴- مکانیک مولکولی

در این روش هر پیوند بین دو اتم، نقش تیر و هر اتم نانولوله، نقش مفصل را دارد، که با هم یک قاب فضایی را تشکیل می‌دهند. تیر به‌عنوان جزئی از قاب در هر انتها سه درجه آزادی انتقالی و سه درجه آزادی چرخشی دارد. بدین ترتیب، می‌توان برای جرم‌هایی متمرکز در دو گره‌ی  $i$  و  $j$  تیر، به ازای هر درجه‌ی آزادی یک معادله‌ی تعادل نوشت و ماتریس سفتی این جزء را از دستگاه

$$\tilde{K}^e \vec{u} = \vec{f} \quad 2-11$$

به دست آورد؛ که در آن  $\tilde{K}^e$ ،  $\vec{u}$  و  $\vec{f}$  به ترتیب، ماتریس سفتی جزء، بردار تغییر مکان گره‌ها و بردار نیروی گره‌ها هستند. درایه‌های غیر صفر  $\tilde{K}^e$  به طول تیر، مقاومت کششی، صلابت خمشی و سفتی پیچشی وابسته‌اند. تیر همچون نقش پیوند کربن-کربن در نانولوله را دارد، در نتیجه، طول آن برابر با طول پیوند است و چنانچه مقطع عرضی آن گرد انتخاب شود، سه پارامتر  $EA$ ،  $EI$  و  $GJ$  مجهول خواهند بود. انرژی پتانسیل نانولوله با چشم‌پوشی از برهم‌کنش‌های الکتروستاتیک، از تغییر طول پیوند، خمش، پیچش با تشکیل زاویه‌ی دووجهی، پیچش برون‌صفحه‌ای و برهم‌کنش واندروالس نشأت می‌گیرد. چنانچه جمله‌های انرژی پتانسیل به صورت نظیر به نظیر با جملات انرژی کرنشی تیر مساوی قرار داده شوند، معادله‌های

$$\frac{EA}{L} = k_r, \quad \frac{EI}{L} = k_\theta, \quad \frac{GJ}{L} = k_\tau \quad 3-11$$

برای تعیین پارامترهای سفتی به دست می‌آیند. در معادلات ۳-۱۱،  $L$  طول تیر است و  $k_\theta$ ،  $k_r$  و  $k_\tau$  ثابت‌های نیرو با مقادیری معلوم هستند. سپس می‌توان ماتریس سفتی هر جزء از قاب را محاسبه کرد. ماتریس جرم قاب قطری است و درایه‌های قطر اصلی آن برابر با جرم اتم کربن اند. در نتیجه، مسأله‌ی مقدار ویژه برای ارتعاش نانولوله حل خواهد شد [۲۹].

### ۱-۷-۵- روش مونت کارلو<sup>۱</sup>

روش مونت کارلو یک الگوریتم محاسباتی است که از نمونه‌گیری تصادفی برای محاسبه نتایج استفاده می‌کند. روش‌های مونت کارلو معمولاً برای شبیه‌سازی سیستم‌های فیزیکی، ریاضیاتی و اقتصادی استفاده می‌شوند.

از طرف دیگر روش مونت کارلو یک طبقه از الگوریتم‌های محاسبه‌گر هستند که برای محاسبه نتایج

---

<sup>۱</sup> Monte Carlo Simulation

خود بر نمونه‌گیری‌های تکرار شونده‌ی تصادفی اتکاء می‌کنند. روش‌های مونت کارلو اغلب جهت انجام شبیه‌سازی یک سامانه‌ی ریاضیاتی یا فیزیکی استفاده می‌شوند. به دلیل اتکای آنها بر محاسبات تکراری و اعداد تصادفی یا تصادفی کاذب، روش‌های مونت کارلو اغلب به گونه‌ای تنظیم می‌شوند که توسط رایانه اجرا شوند. گرایش به استفاده از روش‌های مونت کارلو زمانی بیشتر می‌شود که محاسبه‌ی پاسخ دقیق با کمک الگوریتم‌های قطعی ناممکن یا ناموجه باشد.

به دلیل آنکه روش مکانیک مولکولی با تعداد محاسبات، محدود می‌شود، این روش که زنجیر مولکولی را به صورت مدل ساده‌ی فنر-دانه در نظر می‌گیرد، ایجاد شده است. گرچه این روش فاقد جزئیات روش مکانیک مولکولی است، ولی بسیاری از جنبه‌های مهم رفتار شیمیایی سازه را که بر رفتار ماده در مقیاس نانو اثر می‌گذارد، حفظ می‌نماید. در این روش سه مرحله و سه گام اساسی مورد نیاز است:

۱. تعیین درجه‌ی مدل و هندسه‌ی آن
۲. انتخاب شکل پتانسیل بین دانه‌ای و بین زنجیری
۳. بهینه‌سازی پارامتر آزاد به خصوص برای اندرکنش‌های غیر پیوندی

گام‌های اساسی در روش مونت کارلو عبارت‌اند از:

- ✓ تبدیل مسأله‌ی فیزیکی به مدل آماری
- ✓ حل مدل با آزمایش نمونه‌ای عددی
- ✓ تحلیل نتایج با روش‌های آماری

### ۱-۷-۶- روش دینامیک مولکولی

روش دینامیک مولکولی یا  $MD$ <sup>۱</sup> از دقیق‌ترین روش‌های شبیه‌سازی در فیزیک است که برای شبیه‌سازی سیستم‌های پیچیده‌ی چندذره‌ای به کار می‌رود. در این روش مسیرهای حرکت سیستم‌هایی شامل هزاران ذره‌ی برهم‌کنش‌کننده، با استفاده از حل معادلات حرکت تحت شرایط

---

<sup>۱</sup> Molecular Dynamics



مرزی معین و همچنین شرایط اولیه مناسب، به دست می آید. مسأله‌ی ارتعاشات نانولوله‌های کربنی را، که به عنوان مجموعه‌هایی از اتم‌های دارای برهم‌کنش هستند، می‌توان با این روش حل کرد. برهم‌کنش‌های اتمی در نانولوله که نیروهای داخلی سیستم‌اند با یک تابع پتانسیل تعریف می‌شوند. شرایط مرزی نانولوله، با صفر کردن نیروهای وارد به اتم‌های انتهایی نانولوله در طول شبیه‌سازی اعمال می‌شود. شرایط اولیه‌ی سیستم شامل مختصات اتم‌ها که مشخص است و سرعت آنها که از مرحله‌ی قبل در اختیار است و یا به صورت تصادفی وارد می‌شود. در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پیکربندی پی‌درپی سیستم با انتگرال‌گیری از قوانین حرکت نیوتن حاصل می‌شود. نتیجه، یک مسیر است که چگونگی تغییر موقعیت‌ها و سرعت‌های ذرات سیستم با زمان را نشان می‌دهد. با استفاده از مسیرهای دینامیک مولکولی می‌توان خواص ترمودینامیکی و وابسته به زمان را محاسبه کرد. در صورت وجود نیروی خارجی می‌توان آن را در محاسبات اعمال کرد که این نیرو می‌تواند گرانش یا وجود یک میدان الکتریکی یا مغناطیسی باشد. آنچه درباره‌ی دینامیک مولکولی گفته شد، بیان ساده‌ای است که قابلیت‌های آن را برای مطالعه‌ی ارتعاش در نانولوله‌ها نشان می‌دهد.

## ۸-۱- پیشینه‌ی ارتعاشات نانولوله‌های کربنی

مواد بسیار اندکی وجود دارند که همانند نانولوله‌ها مورد بررسی قرار گرفته‌اند. به دلیل همین مطالعات بسیار دقیق که بر روی این سازه‌ها از سال ۱۹۹۱ انجام شده، هم اکنون اطلاعات بسیار ارزشمندی در زمینه‌ی خواص الکترونیکی، مکانیکی، حرارتی، اپتیکی و سایر خواص فیزیکی در اختیار است. در عین حال مقدار بسیار کمی از محصولاتی که شامل نانولوله‌ها می‌باشد در بازار جهانی یافت می‌شود و تنها برخی محصولات تجاری مربوطه در برخی مصارف بسیار خاص مانند میکروسکوپ‌های نیروی اتمی<sup>۱</sup> مورد استفاده قرار می‌گیرند. مهمترین دلیل برای اندک بودن کاربرد نانولوله‌ها در صنعت، قیمت بسیار گران آن می‌باشد؛ به طوری که قیمت یک گرم نانولوله‌ی تک‌جداره در حدود ۱۰۰ دلار می‌باشد که در مقایسه با قیمت ۵۰ دلاری یک گرم طلا قیمت بالایی محسوب می‌شود. با این حال واضح است که

---

<sup>۱</sup> Atomic force microscopy (AFM)

هم‌اکنون نیاز به تحقیقات بسیاری برای افزایش کیفیت تولید نانولوله‌های کربنی با قیمت‌های پایین‌تر احساس می‌شود.

اولین نتایج در مورد خواص مکانیکی فوق‌العاده‌ی نانولوله‌ها در سال ۱۹۹۶ توسط مایکل تریسی<sup>۱</sup> و همکارانش صورت گرفت که در آن از روش اندازه‌گیری این‌سیتو<sup>۲</sup> برای اندازه‌گیری ارتعاشات دمایی نانولوله‌های کربنی چندجداره در یک میکروسکوپ الکترونی انتقالی<sup>۳</sup> استفاده کردند [۳۰]. به دلیل عدم دقت کافی این روش بود که گستره‌ی بزرگی از مقادیر برای مدول یانگ نانولوله‌ها با میانگین ۱,۸ تراپاسکال به دست آمد که متعاقباً با افزایش دقت اندازه‌گیری، مقادیر مدول یانگ به عدد ۱ تراپاسکال همگرا شد و این باعث شد که نانولوله‌های کربنی به عنوان سفت‌ترین ماده که تاکنون شناخته شده است، به شمار آیند؛ بسیار سفت‌تر از بهترین فیبر کربن و حدود ۵ برابر سفت‌تر از فولاد. اما چیزی که نانولوله‌ها را بسیار خاص کرده است علاوه بر سفتی زیاد، سایر خواص مکانیکی منحصر به فرد آن می‌باشد. به عبارت دیگر نانولوله‌ها به عنوان مجموعه‌ای از خواص استثنایی هستند که می‌توان برای ماده در نظر گرفت. استحکام کششی آنها همانطور که توسط گروه رادنی‌روف<sup>۴</sup> اندازه‌گیری شد، در حدود ۶۳ گیگاپاسکال و حدود ۵۰ برابر استحکام فولاد می‌باشد [۳۱]. علاوه بر این نانولوله‌ها توانایی خارق‌العاده‌ای در ترمیم خود دارند، البته زمانی که تغییر شکل‌ها به گونه‌ای هستند که ساختار نانولوله معیوب نشده باشد. لازم به ذکر است که همه‌ی نانولوله‌هایی که تولید می‌شوند دارای چنین خواص خارق‌العاده‌ای نمی‌باشند.

با توجه به کاربرد نانولوله‌ها در تجهیزات نانومکانیکی از قبیل اکچیتورها<sup>۵</sup>، حسگرها، رزوناتورها<sup>۶</sup> و ...، بررسی ارتعاشی نانولوله‌های کربنی از اهمیت بالایی برخوردار است. یکی دیگر از کاربردهای بررسی ارتعاشی نانولوله‌ها به دست آوردن مدول الاستیک آنها به این روش می‌باشد. رزوناتورها از اجزای کلیدی در سیستم‌های انتقال امواج می‌باشند [۳۲]. کاهش اندازه رزوناتور باعث افزایش فرکانس

---

<sup>۱</sup> Michael Treacy

<sup>۲</sup> In-situ

<sup>۳</sup> Transmission electron microscopy(TEM)

<sup>۴</sup> Rodney Rouff

<sup>۵</sup> Actuator

<sup>۶</sup> resonator

رزونانس و کاهش مصرف انرژی آن می‌شود. برای سنسورها افزایش مقدار فرکانس رزونانس به معنی افزایش حساسیت می‌باشد [۱۰].

لگوس و همکارانش [۳۳] اولین شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانولوله‌ها را به‌عنوان نوسانگرهای گیگاهرتزی ارائه کردند و نشان دادند که نانولوله‌ها با فاصله‌ی بین دو لایه‌ی ۳,۴ آنگستروم پایدار هستند و می‌توانند فرکانس‌های بالا در حدود ۳۸ گیگاهرتز تولید کنند. گوا و همکارانش [۳۴] و ژائو و همکارانش [۳۵] با انجام شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به مطالعه‌ی جنبه‌های مختلف از اتلاف انرژی در نوسانگرهای گیگاهرتزی پرداختند. گوا و همکاران [۳۴] نشان دادند که نیروی مقاومت در نانولوله‌های کربنی دوجداره به‌شدت به ترکیب مورفولوژی خود وابسته است. ژائو و همکارانش [۳۵] مکانیسم اتلاف انرژی در نوسانگرهای مبتنی بر نانولوله را مورد مطالعه قرار دادند. آنها یافتند که برای نوسانگرهای با نانولوله‌های بلند، انرژی انتقالی به‌طور عمده از طریق تغییر شکل موجی در نانولوله‌ی بیرونی و تحت ارتعاشات شعاعی منتقل می‌شود. رفتار نوسانی نوسانگر گیگاهرتزی بر اساس نانولوله‌های چندجداره توسط لیو و همکارانش [۳۶] مورد مطالعه قرار گرفت. آنها دریافتند که فرکانس نوسان بستگی به کایرالیته نانولوله‌ها و طول لوله‌ی بیرونی دارد. آنها همچنین دریافتند که سیستم نوسانی را می‌توان با انتخاب پارامترهای مناسب، مانند فاصله‌ی لایه‌ی بین دو لایه از لایه‌های درونی تا بیرونی ترین لایه پایدارتر کرد. در مطالعه‌ی دیگر توسط لگوس و همکارانش [۳۷]، آنها فرکانس نوسان را به بزرگی ۸۷ گیگاهرتز گزارش کردند. علاوه‌بر این، کانگ و همکارانش [۳۸] و ریورا و همکارانش [۳۹] به بررسی جنبه‌های مختلف نانوسانگرهای بر اساس نانولوله‌ها از طریق شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پرداختند. ژانگ و همکارانش [۴۰] به بررسی ارتعاشات جانبی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره از طریق شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای ارزیابی نظریه تیر تیموشینکو در پیش‌بینی فرکانس طبیعی نانولوله‌ها پرداختند. آنها همچنین به بررسی اثرات کرنش فشاری و کششی اولیه بر روی ارتعاشات نانولوله‌های تک‌جداره پرداختند و مشاهده کردند که فرکانس به‌شدت وابسته به کرنش اولیه است. کائو و همکاران [۴۱] با دو روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بسط داده‌شده و مکانیک محیط پیوسته به بررسی ارتعاشات نانولوله‌های تک‌جداره تحت تغییر شکل محوری، پیچش و خمش پرداختند. آنها دریافتند که تغییر فرکانس زمانی که نانولوله در معرض تغییر شکل محوری، کششی یا فشاری است، برجسته‌تر از پیچش یا خمش است. آجری و همکاران [۴۲] ارتعاشات نانولوله‌های کربنی تک‌جداره و دوجداره را تحت یک جاذب فیزیکی زیستی در محیط آبی به روش شبیه‌سازی دینامیک

مولکولی بررسی کردند و نشان دادند که فرکانس طبیعی نانولوله‌های کربنی در یک محیط آبی در مقایسه با خلاء کاهش می‌یابد.

اگرچه در پژوهش‌های گذشته به پیشرفت اساسی و گسترده خواص نانولوله‌های کربنی پرداخته شده است ولی بررسی خواص نانولوله‌های هتروجانکشن کمتر بوده است. نانولوله‌های هتروجانکشن از اتصال دو نانولوله غیرمشابه تشکیل شده‌اند که عیوب جفتی پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی نقش مهمی را در ناحیه اتصال بازی می‌کند. شکل پایه‌ای نانولوله‌های هتروجانکشن وقتی تشکیل می‌شود که یک جفت پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی در شبکه‌ی گرافیت شش‌ضلعی بعد از وصل شدن دو نانولوله با کایرالیتهی متفاوت، وارد شود. این نانولوله‌های خاص به‌خاطر مشخصات ویژه‌شان بسیار مهم هستند. ایمانی ینگجه و همکاران [۴۳] رفتار کمانش و پاسخ‌های مکانیکی  $IMJs$ <sup>۱</sup> که نام دیگر هتروجانکشن‌ها است را، به روش عددی اجزای محدود بررسی کردند و نشان دادند که اولین بار بحرانی کمانش، در محدوده‌ی اندازه‌های آنها در نانولوله‌های سازنده‌شان می‌باشد.

فیلیز<sup>۲</sup> و آیدوگو<sup>۳</sup> [۴۴] ارتعاشات محوری هتروجانکشن را به روش تئوری غیرموضعی (محلی) بررسی کردند. آنها از روابط ساختاری غیرموضعی ارینگن<sup>۴</sup> استفاده کردند و اثر کایرالیتهی، طول و قطر نانولوله‌های کربنی مربوطه را در خواص ارتعاشی مورد مطالعه قرار دادند. فخرآبادی و همکاران [۲۳] به بررسی خواص ارتعاشاتی نانولوله‌های دو و سه اتصال، با شرایط مرزی و هندسه‌های متفاوت به روش مکانیک مولکولی پرداختند و فرکانس‌های طبیعی و شکل مود مرتبط به آنها را مورد بحث قرار دادند. ایمانی ینگجه و همکاران [۴۵] در یک بررسی عددی به مطالعه‌ی رفتار برشی هتروجانکشن‌ها و نانولوله‌های سازنده‌ی آنها پرداختند. آنها با روش اجزای محدود نشان دادند که زاویه‌ی چرخش هتروجانکشن‌ها بین زاویه‌ی چرخش نانولوله‌های سازنده‌ی آنها می‌باشد. همچنین آنها نشان دادند که رفتار برشی هتروجانکشن‌ها با افزایش کایرالیتهی نانولوله‌های سازنده‌ی آنها افزایش می‌یابد. در پژوهشی دیگر، ایمانی ینگجه و همکاران [۴۶] شکل مودها و فرکانس‌های ویژه‌ی نانولوله‌های هتروجانکشن را با روش اجزای محدود مدل‌سازی کردند. آنها نشان دادند که با افزایش کایرالیتهی، مقادیر ویژه‌ی نانولوله-

---

<sup>۱</sup> Intra-Molecular Junctions

<sup>۲</sup> Filiz

<sup>۳</sup> Aydogdu

<sup>۴</sup> Eringen

های هتروجانکشن و نانولوله‌های سازنده‌شان افزایش می‌یابد. لی و همکارش [۴۷] خواص مکانیکی یک نانولوله‌ی هتروجانکشن تک‌دیواره‌ی خاص را به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند. آنها نتایج تغییر دما و کرنش بر روی تنش را در دو حالت هتروجانکشن هم‌محور و ناهم‌محور ارائه کردند.

در ادامه‌ی بحث روی کارهای انجام‌شده که به طور خاص به رفتار ارتعاشی نانولوله‌ها وابسته است، تمرکز می‌شود: برای مثال، کاربرد نانولوله‌های کربنی در سیستم‌های الکترومکانیکی نانومقیاس (NEMS)<sup>۱</sup>، خواص ارتعاشی را در کنار خواص مکانیکی بسیار بااهمیت می‌سازد [۴۸]. یکی از کاربردهای بالقوه‌ی این اتصالات در سیستم‌های میکرو و نانوجریان می‌باشد. برای مثال، از آنها به‌عنوان رگ‌های خونی و یا سنسورهای جریان در روش‌های اندازه‌گیری نانو به‌کار برده می‌شود. آنها ممکن است کاربردهایی در نانوالکترونیک‌ها و نانومکانیک‌ها شبیه به کاربردشان در نانولوله‌های کربنی همگن داشته باشند. همچنین آنها می‌توانند بلوک‌های سازنده‌ی قطعات نانوالکترونیکی‌ای که به‌طور کامل از کربن ساخته شده‌اند، باشند [۴۴]. از کاربردهای دیگر این نانوساختارهای خاص، استفاده از آنها در دیودهای یک‌سوکننده و سوئیچ‌ها می‌باشد [۴۹]. علاوه‌براین از آنها در انتقال حرارت نانو می‌تواند استفاده شود. آرورا و سندلر [۵۰] از آنها به‌عنوان غربال‌کننده، به علت وجود کاهش قطر در طول آنها گزارش دادند، مثلاً می‌توانند مولکول‌های اکسیژن و نیتروژن را فیلتر کنند. لی و همکارش [۵۱] شکاف نواری ارتعاشات طولی در نانولوله‌های با قطر متفاوت که به صورت دوره‌ای به هم متصل شده‌اند را به روش اجزای محدود تحلیل کردند. آنها تأثیر پارامترهای هندسی همچون طول سلول واحد و قطر اجزای نانولوله‌ها را روی اولین شکاف نواری بررسی کردند. محمدیان و همکاران [۵۲] تأثیر طول ناحیه‌ی اتصال را بر فرکانس طبیعی هتروجانکشن‌ها به روشی مرکب از مکانیک مولکولی و اجزای محدود بررسی کردند.

پر واضح است که بیشتر این کاربردها همچون دیگر پژوهش‌ها در فناوری نانو، بالقوه هستند و ممکن است در آینده‌ای نزدیک استفاده نشوند، اما آنها باید حداقل به‌طور تئوری مطالعه شوند و ایده‌های مرتبط باید توسعه یابند. نانولوله‌های معمولی و اتصالات ممکن است در انتقال مایع استفاده شود

---

<sup>۱</sup> Nano-Scale Electromechanical Systems

و انتقال جریان ممکن است موجب ناپایداری لرزش یا ارتعاش شود [۵۳-۵۵]. از این رو شناسایی رفتارهای ارتعاشی این نانو ساختار بسیار مهم است.

## ۹-۱- نوآوری

در این پژوهش به ارتعاشات نانولوله‌های کربنی هتروجانکشن به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی که تا کنون مورد بررسی قرار نگرفته، پرداخته می‌شود. فرکانس طبیعی اول هتروجانکشن-های هم‌محور که تا به حال مورد بررسی قرار نگرفته، به دست می‌آید و با حالت رایج ناهم‌محور مقایسه می‌شود. ارتعاشات هتروجانکشن‌ها در حالت اختلاف قطر زیاد نانولوله‌های سازنده‌شان نیز مورد مطالعه قرار می‌گیرد. همچنین تأثیر دما بر فرکانس طبیعی اول بررسی می‌شود.

فصل ۲-

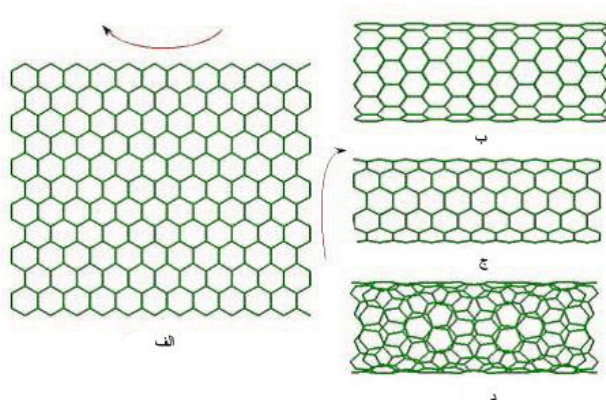
**مفاهیم پایه‌ای در ساختار**

**نانولوله‌ها و تابع پتانسیل**

## ۱-۲- روش محاسباتی مشخصات نانولوله‌های کربنی

برای بررسی علمی پدیده‌ها، یکی از روش‌هایی که در کنار آزمایش تجربی قرار می‌گیرد، روش محاسباتی است که در این روش، دانشمندان در پی کشف روابطی منطقی بین پدیده‌ها و ویژگی‌هایی که مشاهده می‌کنند، هستند. در بخش‌های قبلی ساختار نانولوله‌ها و شکل فیزیکی آنها مورد بررسی قرار گرفت. در این بخش برای درک بهتر ساختار نانولوله‌های کربنی، از نگاه محاسباتی به آنها پرداخته و سعی بر آن است که روابط ریاضی موجود در ساختار این مواد استخراج شود. داده‌ی اولیه مورد نیاز برای انجام این محاسبات فاصله پیوند کربن-کربن است که این مقدار در حالت صفحه‌ای تقریباً ثابت و برابر ۱,۴۲ آنگستروم می‌باشد.

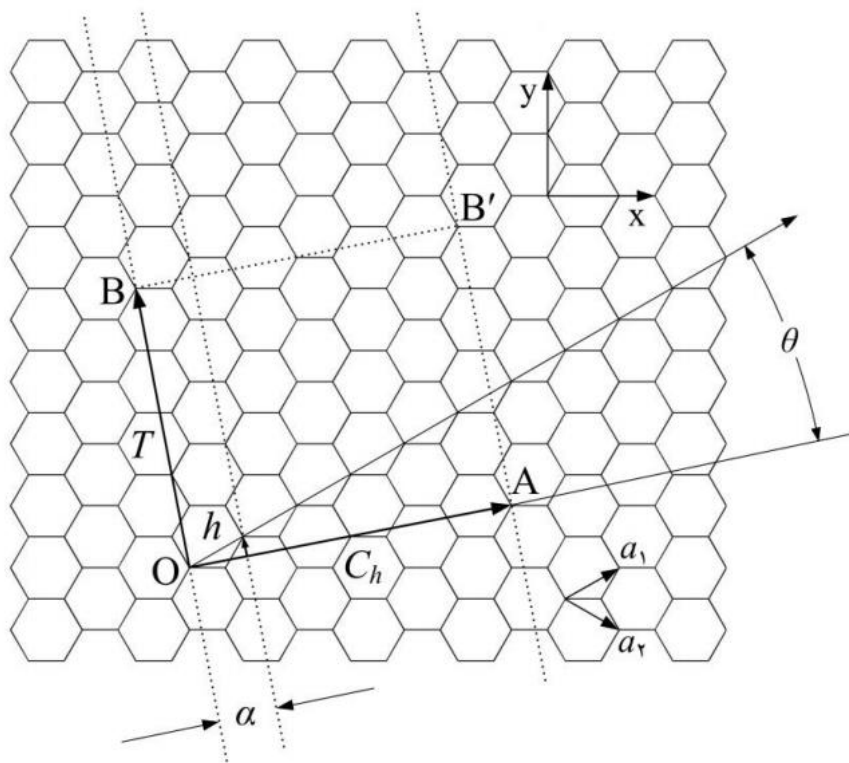
نانولوله‌ی کربنی از یک صفحه‌ی گرافیتی با اندازه‌ی معلوم که در جهت مشخصی پیچیده شده به دست می‌آید. از آنجایی که می‌بایستی حاصل، یک تقارن استوانه‌ای باشد برای به دست آوردن یک استوانه‌ی بسته فقط می‌توان مطابق شکل ۱-۲ صفحات را در جهات خاصی پیچاند.



شکل ۱-۲- انواع نانولوله: (الف) ورق گرافیتی (ب) نانولوله زیگزاگ (۰، ۱۲) (ج) نانولوله آرم‌چیر (۶، ۶) (د) نانولوله کایرال (۲، ۱۰)

دو اتم از گرافیت انتخاب می‌شوند، یکی به عنوان مبدأ در نظر گرفته می‌شود و صفحه پیچانده می‌شود تا اتم دوم روی اتم مبدأ منطبق گردد. برداری که از اتم مبدأ به جهت دیگر اشاره می‌کند بردار کایرال نامیده می‌شود  $(\vec{C}_h = na_1 + ma_2)$ ، و طول آن برابر محیط نانولوله می‌باشد. بدیهی است که محور نانولوله در جهت عمود بر بردار کایرال می‌باشد (شکل ۲-۲).





شکل ۲-۲- شبکه‌ی شش‌گوشه‌ای اتم‌های کربن

نانولوله‌های با بردارهای کایرال متفاوت، دارای خواص متفاوت، نظیر هدایت الکتریکی، استقامت مکانیکی و خواص نوری متفاوت می‌باشند. تمامی ساختارهای ممکن نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره از بردارهای کایرالی که در محدوده‌ی نشان داده شده با شکل ۲-۲ قرار می‌گیرند، ایجاد می‌شوند ( $\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$ ) که  $n$  و  $m$  صحیح بوده و  $n$  همیشه بزرگتر یا مساوی  $m$  می‌باشد. در شکل ۲-۲ مستطیل  $OAB'B$  نماینده‌ی سلول واحد برای یک نانولوله‌ی معین است و بردار  $T$  که عمود بر بردار کایرال و در جهت محور نانولوله است متناسب با طول نانولوله می‌باشد [۵۶]. با دقت در شکل ۲-۲ ملاحظه می‌شود که در تعیین ساختار سلول واحد نانولوله‌ی تک‌جداره طول و جهت بردار  $\vec{C}_h$  نقش اساسی دارند. جهت بردار  $\vec{C}_h$  با زاویه‌ی  $\theta$  که بین بردار  $\vec{C}_h$  و راستای زیگزاگی که با پیکان خارج شده از نقطه‌ی  $O$  مشخص شده است تعریف می‌گردد. زاویه‌ی  $\theta$  که تعیین کننده جهت‌گیری آرایش اتم‌ها در سلول واحد است به ازای مقادیر  $0^\circ \leq \theta \leq 30^\circ$  حاصل می‌شود. با فرض گرد شدن ورق گرافیت،  $\vec{C}_h$  بر پیرامون نانولوله منطبق خواهد شد؛ در نتیجه، قطر نانولوله به صورت تابعی از طول  $\vec{C}_h$  نوشته می‌شود. همانطور که در مرجع [۵۶] نشان داده شده،  $\vec{T}$  که عمود بر  $\vec{C}_h$  است، به طول  $\vec{C}_h$  وابسته است؛ بنابراین  $\vec{T}$  عملاً نقشی در تعیین سلول واحد نخواهد داشت. پس می‌توان نتیجه گرفت

که با تعیین دو پارامتر؛ زاویه  $\theta$  و قطر نانولوله که با نماد  $d_t$  نشان داده می‌شود، معلوم باشند، ساختار سلول واحد به دست می‌آید. در شکل ۲-۲، بردارهای  $\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$  به عنوان بردارهای پایه‌ی شبکه‌ی گرافیت شناخته می‌شوند. در ادامه با توجه به این بردارها، به محاسبه‌ی قطر نانولوله پرداخته می‌شود. طول پیوند کربن-کربن در گرافیت  $a_{c-c} = 1.421 \text{ \AA}$  است؛ از این رو:

$$a_1 = a_2 = a = \sqrt{3}a_{c-c} = 2.46 \text{ \AA}$$

$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right)a, \quad \vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2}\right)a \quad 1-22$$

حال باید مشخص شود که  $\vec{C}_h$  از ترکیب چند انتقال در جهت  $\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$  تشکیل شده است؛ که این تعداد نشان‌دهنده‌ی منطبق شدن نقطه‌ی  $O$  بر نقطه‌ی  $A$  (یا  $B$  بر  $B'$ ) می‌باشد. لذا،

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 = (n, m) \quad 2-22$$

که  $n$  و  $m$  دو عدد صحیح و  $n$  همیشه بزرگتر یا مساوی  $m$  می‌باشد. طول  $\vec{C}_h$  که با نماد  $L$  نشان داده می‌شود از معادله‌ی

$$L = |\vec{C}_h| = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad 3-22$$

محاسبه می‌گردد. از آنجا که  $L$  به اندازه‌ی محیط نانولوله می‌باشد، قطر نانولوله از ضابطه‌ی

$$d_t = \frac{L}{\pi} = \frac{\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}{\pi} a \quad 4-22$$

بر حسب  $m$  و  $n$  به دست آورد. حال زاویه‌ی  $\theta$  به صورت ذیل به دست می‌آید:

$$\sin \theta = \frac{\sqrt{3}m}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}, \quad 0^\circ \leq |\theta| \leq 30^\circ \quad 5-22$$

$$\cos \theta = \frac{2n + m}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \quad 6-22$$

$$\tan \theta = \frac{\sqrt{3}m}{2n + m} \quad ۷-۲۲$$

$$\theta = \tan^{-1} \frac{\sqrt{3}m}{2n + m} \quad ۸-۲۲$$

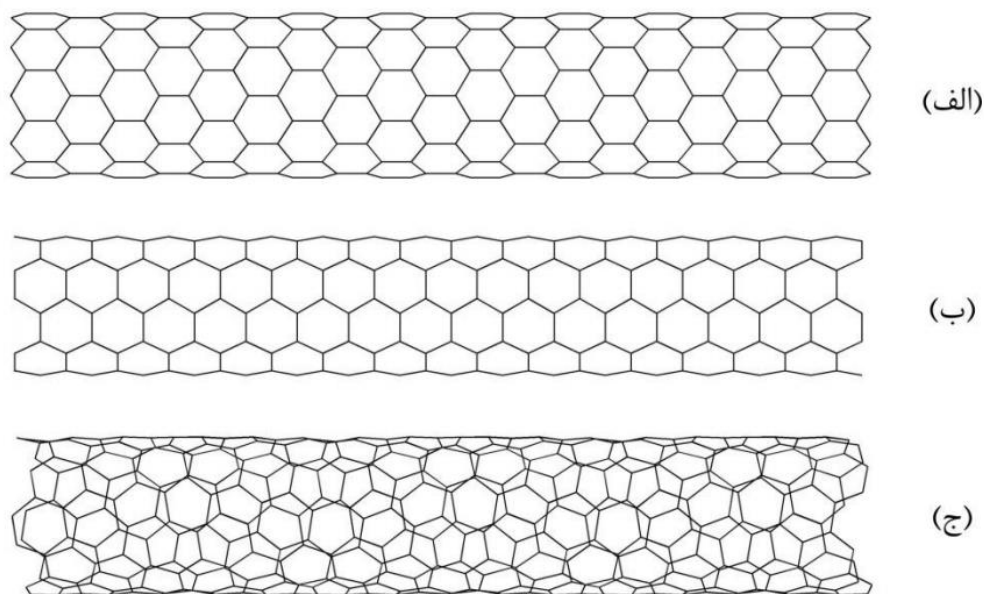
از آنجا که  $\theta$  و  $d_t$  بر حسب زوج  $(n, m)$  نوشته شد؛ می‌توان ساختار سلول واحد نانولوله را با  $(n, m)$  بیان نمود [۵۶, ۵۷].

مطابق شکل ۳-۲ اتم‌ها در ساختار نانولوله‌ی تک‌جداره با توجه به مقادیر  $\theta$  به سه صورت کلی جهت‌گیری می‌شوند؛ اگر  $\theta = 0^\circ$  نانولوله‌ی زیگزاگ، اگر  $\theta = 30^\circ$  نانولوله‌ی آرم‌چیر و اگر  $0^\circ \leq \theta \leq 30^\circ$  به نانولوله‌ی نامتقارن یا دست‌سان مشهور هستند. با توجه به شکل ۳-۲، ظاهر نانولوله‌های ترسیم‌شده، دلیل این نام‌گذاری را آشکار می‌سازد [۵۶].

الگوی قرارگرفتن اتم‌ها در محیط نانولوله‌ی شکل ۳-۲-الف زیگزاگ است و در شکل ۳-۲-ب مشابه صندلی راحتی است. همچنین، نانولوله‌های دست‌سان بر خلاف دوگونه‌ی دیگر و مانند دست، با تصویر خود در آینه یکسان نیستند (شکل ۳-۲-ج). با توجه به معادله‌ی ۸-۲۲، به ازای  $\theta = 0^\circ$ ،  $m = 0$  و چنانچه  $\theta = 30^\circ$ ،  $m$  با  $n$  برابر می‌شود. از این‌رو، نانولوله‌های  $(n, 0)$  و  $(n, n)$  به ترتیب، زیگزاگ و آرم‌چیر هستند. سایر مقادیر  $(n, m)$  نیز نانولوله‌های دست‌سان را مشخص می‌کنند. شایان ذکر است که  $(n, m)$  شاخص‌های دست‌سانی<sup>۱</sup>،  $\theta$  زاویه‌ی دست‌سانی و  $\vec{C}_n$  بردار دست‌سانی نام دارند [۵۶, ۵۸].

---

<sup>۱</sup> Chiral indices



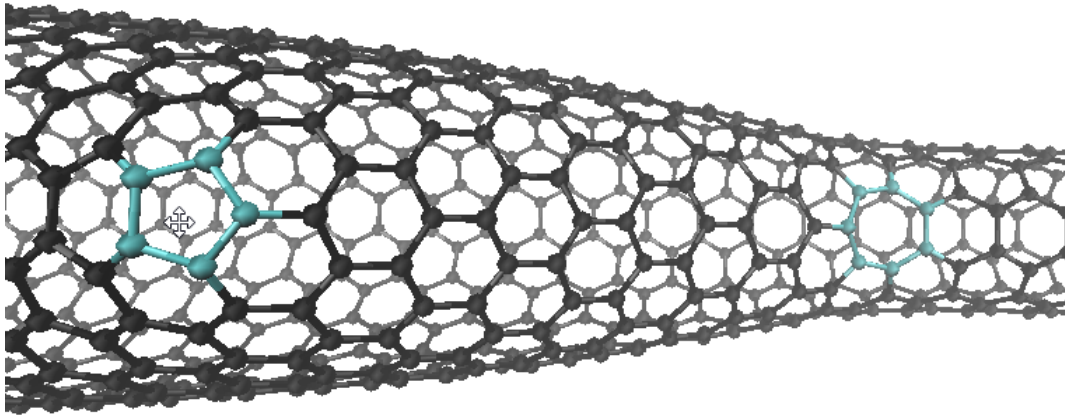
شکل ۲-۳- انواع نانولوله‌ها، (الف) نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۰،۰)، (ب) نانولوله‌ی آرم‌چیر (۵،۵) و (ج) نانولوله‌ی دست‌سان (۷،۴)

## ۲-۲- ساخت نانولوله‌های هتروجانکشن کربنی

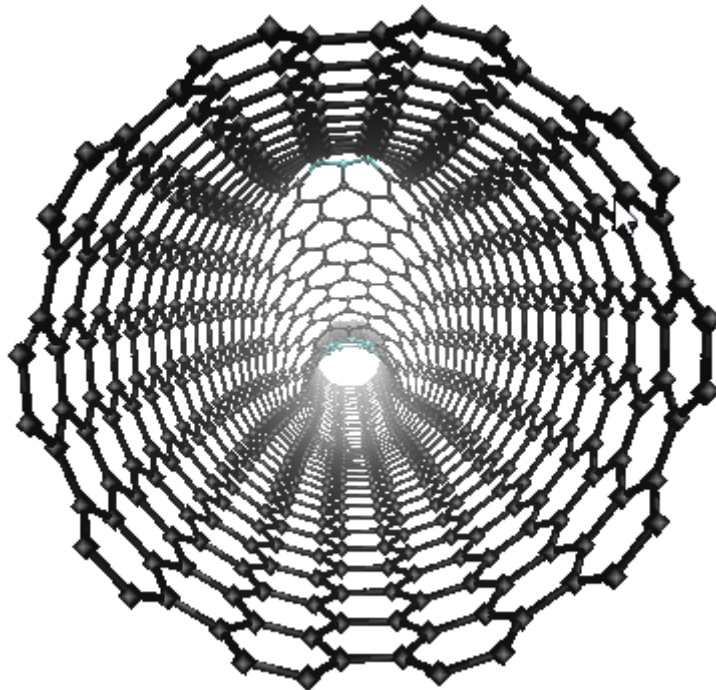
نانولوله‌های هتروجانکشن کربنی از اتصال دو نانولوله‌ی کربنی ساده با کایرالیته‌ی متفاوت به دست می‌آیند. در بخش قبل در مورد نانولوله‌های ساده بیان شد که ساختار آنها از شش ضلعی‌های منتظم تشکیل شده است؛ اما برای اتصال دو نانولوله‌ی متفاوت به هم باید عیوب پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی در ناحیه‌ی اتصال تشکیل داد. اکثر نانولوله‌های هتروجانکشن بررسی شده در مقالات به صورت ناهم‌محور<sup>۱</sup> می‌باشند، به بیان دیگر مرکز محورهای نانولوله‌های سازنده‌ی آنها در یک امتداد نمی‌باشند. در این حالت فقط از یک جفت عیب پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی استفاده می‌شود. پنج‌ضلعی در انتهای ناحیه‌ی اتصال به سمت نانولوله‌ی با قطر بیشتر، و هفت‌ضلعی در انتهای دیگر باید قرار بگیرد. شکل ۲-۴ یک نانولوله‌ی هتروجانکشن کربنی که نانولوله‌های همگن سازنده‌ی آن به صورت ناهم‌محور هستند را نشان می‌دهد. این شکل ناحیه‌ی اتصال دو نانولوله‌ی (۵،۵) و (۱۰،۱۰) را نشان می‌دهد. در شکل جفت عیب پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی با رنگ آبی مشخص شده‌اند. شکل ۲-۵ همان نانولوله را از نمای داخلی

<sup>۱</sup> Bias connections

آن به تصویر کشیده است.

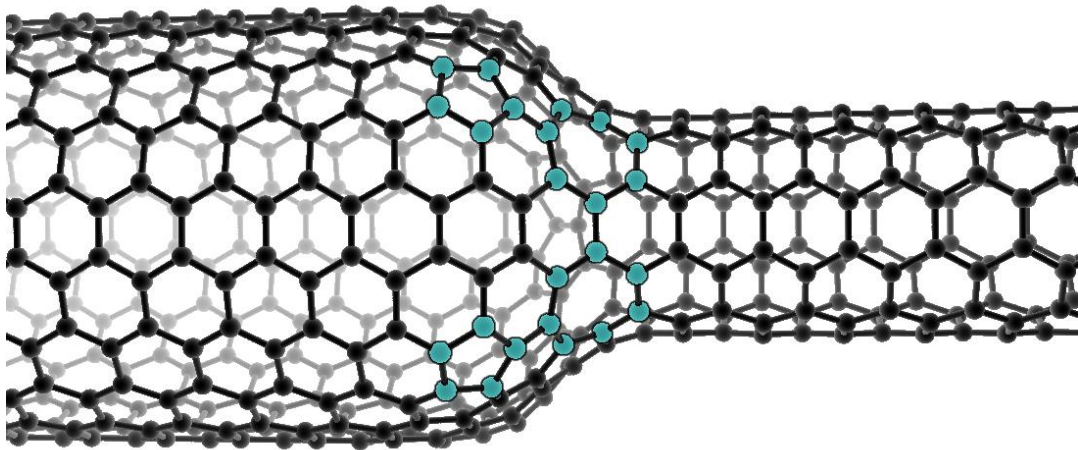


شکل ۲-۴- ناحیه‌ی اتصال نانولوله‌ی هتروجانکشن ناهم‌محور که از نانولوله‌های همگن (۵،۵) و (۱۰،۱۰) تشکیل شده است.



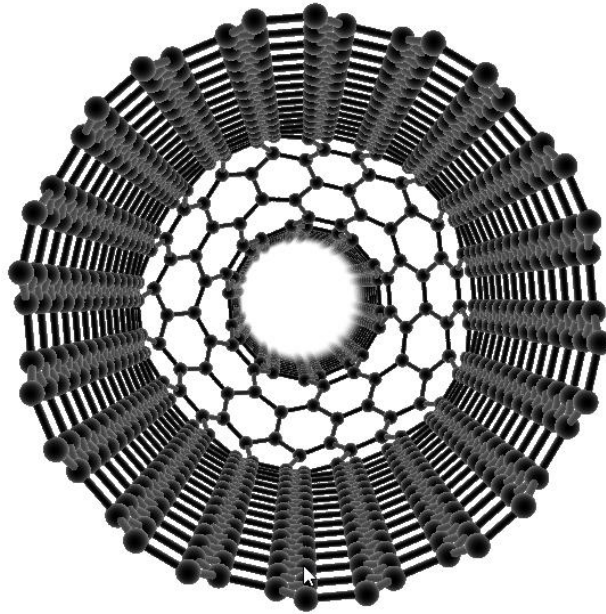
شکل ۲-۵- نمای داخلی هتروجانکشن ناهم‌محور (۱۰،۱۰)-(۵،۵)

در هتروجانکشن‌های هم‌محور<sup>۱</sup> بستگی به کایرالیتهی نانولوله‌ها، تعداد جفت عیوب پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی متفاوت است. در هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) که در این تحقیق مورد بررسی قرار گرفته، از ۵ جفت عیب پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی جهت هم‌محور کردن آن استفاده شده‌است. جهت ساخت هتروجانکشن هم‌محور از نرم‌افزار سامسون کمک گرفته شد. در شکل ۲-۶ ناحیه‌ی اتصال هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) را نشان می‌دهد. دو جفت از عیوب پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی در شکل مشخص است و سه جفت دیگر نیز وجود دارد که قابل رؤیت نیست. همانطور که مشاهده می‌شود، این عیوب باعث کاهش طول ناحیه‌ی اتصال شده و همچنین تقارن سطح مقطع را در پی دارد. شکل ۲-۷ همین هتروجانکشن را از نمای داخلی به تصویر کشیده‌است.



شکل ۲-۶- ناحیه‌ی اتصال نانولوله‌ی هتروجانکشن هم‌محور که از نانولوله‌های همگن (۵،۵) و (۱۰،۱۰) تشکیل شده‌است.

<sup>۱</sup> Coaxial connections



شکل ۲-۷- نمای داخلی هتروجانکشن هم محور (۱۰،۱۰)-(۵،۵)

### ۳-۲- نیرو در دینامیک مولکولی

در ادامه‌ی این فصل ابتدا به نیروهای بین اتمی (اندرکنش‌های پیوندی و غیر پیوندی) و پتانسیل‌های لازم جهت شبیه‌سازی، که گام اول و پایه‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی محسوب می‌گردد، پرداخته می‌شود.

قانون دوم نیوتن در معادله‌ی ۲۲-۹ نشان داده شده‌است.

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = \vec{f}_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad ۹-۲۲$$

اما در نظر داشتن این نکته در مورد این معادله ضروری است که با فرض ثابت بودن انرژی سیستم یا به عبارت دیگر ایزوله بودن آن به دست آمده‌است. در صورتی که سیستم ایزوله نباشد به راحتی می‌-

توان معادله‌ی ۲۲-۹ را با افزودن نیروی خارجی  $\vec{f}_i^{ext}$  اصلاح نمود [۵۹].

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = \vec{f}_i + \vec{f}_i^{ext}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad ۱۰-۲۲$$

به طور کلی معادله‌ی حاکم، (معادله‌ی ۲۲-۱۰) معادله دیفرانسیل عادی از مرتبه دو است. در

سمت راست این معادله، دو جزء نیروی داخلی و خارجی قرار دارد. قابل ذکر است که کلیه مسائل طرح شده در گزارش حاضر، در غیاب نیروهای ناپایستار خارجی اعم از گرانش می‌باشد. در ادامه، توضیحاتی به‌طور مفصل در مورد محاسبه‌ی جزء اول ارائه خواهد شد.

### ۱-۳-۲- نیروهای بین اتمی

طبق معادله‌ی ۱۱-۲۲ نیروی داخلی، گرادیان انرژی پتانسیل در یک سیستم اتمی می‌باشد؛ انرژی پتانسیل در یک سیستم اتمی می‌تواند بسیار پیچیده باشد.

$$\vec{f}_i = -\nabla_i U = -\left(\frac{\partial}{\partial x_1^i} + \frac{\partial}{\partial x_2^i} + \frac{\partial}{\partial x_3^i}\right)U \quad 11-22$$

این انرژی در اصل از روابط مکانیک کوانتوم محاسبه می‌شود ولی چون حل معادلات حاکم بر مکانیک کوانتوم بسیار زمان‌بر می‌باشد، پتانسیل‌های موجود از روابط تجربی در کنار مکانیک کوانتومی استخراج گردیده‌اند. فرم کلی انرژی پتانسیل در یک سیستم اتمی تابعی از موقعیت همه‌ی اتم‌ها می‌باشد، ولی می‌توان آن را به‌طور ساده‌تری به شکل معادله‌ی ۱۲-۲ بسط داد.

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_i V_1(\vec{r}_i) + \sum_{i,j>i} V_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \sum_{i,j>i,k>j} V_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) + \dots \\ + V_N(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_k) \quad 12-2$$

در این معادله  $V_m$ ، پتانسیل  $m$  تایی نام دارد و  $\vec{r}_i$  بردار موقعیت اتم  $i$ ام می‌باشد [۵۹، ۶۰]. جزء اول سمت راست معادله‌ی ۱۲-۲ نماینده‌ی پتانسیل میدان‌های خارجی انرژی همچون گرانش و میدان‌های الکترواستاتیکی و علاوه بر آن سد و چاه‌های پتانسیلی می‌باشد. جزء دوم نشان دهنده‌ی انرژی اندرکنش‌های دوتایی و ترم سوم مربوط به اندرکنش‌های سه‌تایی می‌باشد. تابع  $V_1$  پتانسیل خارجی نیز نامیده می‌شود،  $V_2$  پتانسیل بین اتمی یا جفتی و  $V_m$  برای  $m > 2$  پتانسیل چندتایی نامیده می‌شود. گاهی برای کاهش هزینه محاسباتی فقط از پتانسیل‌های دوتایی استفاده می‌شود و اجزای چندتایی مورد مطالعه قرار نمی‌گیرند. پتانسیل‌های دوتایی و چندتایی در مواد مختلف اشکال مختلفی دارند که در بخش‌های بعدی به آنها پرداخته می‌شود.



## ۲-۳-۲- پتانسیل‌های جفتی

پتانسیل جفتی  $V_2$  در واقع وابستگی  $U$  را به فواصل اتمی بیان می‌دارد. اگر  $\vec{r}_i$  و  $\vec{r}_j$  موقعیت دو اتم دلخواه در سیستم باشد آنگاه می‌توان نوشت:

$$V_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = V_2(r_{ij}), \quad r_{ij} = |\vec{r}_{ij}| = |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \quad ۱۳-۲$$

بنابراین پتانسیل دوتایی را می‌توان به صورت تابعی از فاصله‌ی  $r$  معرفی نمود و به کار برد. این پتانسیل‌ها به دو دسته‌ی بلند برد و کوتاه‌برد تقسیم می‌شوند. پتانسیل‌های معمولاً بلند برد بین اتم-های باردار و پتانسیل‌های کوتاه‌برد بین اتم‌های خنثی وجود دارد.

## ۲-۳-۳- اندرکنش کولمبی بلند برد

بدیهی‌ترین اندرکنش اتمی نیرویی است که اتم‌ها در صورت وجود بار الکتریکی غیرخنثی بر یکدیگر وارد می‌کنند. بنابراین این پدیده در یون‌ها دیده می‌شود. پتانسیل بین دو اتم با وجود بار خنثی نشده  $e_i$  در آنها به صورت معادله‌ی ۱۴-۲ خواهد بود.

$$V_c(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = V_c(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e_i e_j}{r} \quad ۱۴-۲$$

در معادله بالا  $V_c(r)$  پتانسیل کولمبی برای دو بار در فاصله  $r$  می‌باشد.  $\epsilon_0$  ضریب گذردهی الکتریکی خلا است. نیروی بین دو بار  $F_c$ ، نیز با مشتق‌گیری از معادله‌ی ۱۴-۲ محاسبه می‌شود و به صورت معادله‌ی ۱۵-۲ بیان می‌گردد.

$$F_c(r) = -\frac{\partial V}{\partial r} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e_i e_j}{r^2} \frac{\vec{r}_i - \vec{r}_j}{r} \quad ۱۵-۲$$

در پتانسیل کولمبی با توجه به اینکه نیرو و پتانسیل به آرامی کاهش می‌یابند حتی در فواصل بسیار دور هم دارای مقدار خواهند بود. به همین دلیل پتانسیل و نیروی بلند برد نامیده می‌شوند. این مسأله محاسبه‌ی نیروها را مشکل خواهد نمود و روش‌های ویژه‌ای در برخورد با آنها وجود دارد که در ادامه بررسی می‌شود.

## ۲-۳-۴- اندرکنش‌های کوتاه برد

در اتم‌هایی که به لحاظ بار الکتریکی خنثی هستند اندرکنش‌ها با برد بلند وجود نخواهد داشت و در عوض تأثیر متقابل اتم‌ها از طریق دیگری انجام می‌پذیرد. دو نوع نیرو بین دو اتم در این حالت وجود خواهد داشت. نیروهای دافعه‌ی الکترون- الکترون و هسته- هسته و نیروهای جاذبه‌ی هسته- الکترون. در فواصل دورتر نیروهای جاذبه غالب خواهند بود و زمانی که فاصله‌ی اتمی کاهش می‌یابد نیروهای دافعه اثر بیشتری خواهند داشت. این دو نیرو در نقطه‌ای با یکدیگر متعادل خواهند شد که همان فاصله‌ی تعادل اتمی خواهد بود. مدل‌های مختلفی برای بیان پتانسیل‌های جفتی اتم‌ها ارائه گردیده است. جونز در سال ۱۹۲۴ پتانسیلی با مدل معادله‌ی ۲-۱۶ را پیشنهاد نمود.

$$V(r_i, r_j) = V(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad ۱۶-۲$$

$$, \quad r = |r_{ij}| = |r_i - r_j|$$

این مدل اکنون با عنوان لنارد- جونز معروف است و در بسیاری از شبیه‌سازی‌های دینامیک ملکولی از جمله در این پژوهش، برای مدل‌سازی سیستم‌ها در مقیاس نانو مورد استفاده قرار می‌گیرد. در اینجا  $r$  فاصله‌ی دو اتم،  $\sigma$  فاصله‌ای که در آن پتانسیل صفر می‌شود و  $\varepsilon$  انرژی نابجائی نام دارد. مقدار انرژی  $\varepsilon$  کمینه‌ی انرژی دو اتم می‌باشد و در موقعیت تعادل اتمی اتفاق می‌افتد. محل تعادل با مشتق‌گیری از معادله‌ی ۲-۱۶ محاسبه می‌گردد.

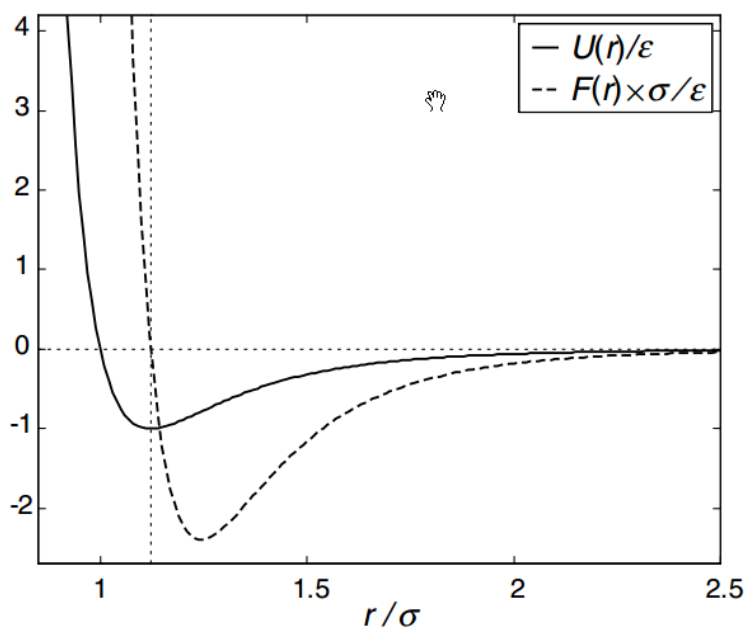
$$V_{LJ}(\rho) = -\varepsilon, \quad \rho = \frac{1}{2\sigma} \quad ۱۷-۲$$

که برای دو اتم کربن،  $\varepsilon_{ij} = 0.00284 \text{ eV}$  و  $\sigma_{ij} = 3.40 \text{ \AA}$  [۶۱]. در معادله‌ی ۲-۱۶ اولین جزء نشان دهنده‌ی نیروی دافعه است که در فواصل کمتر غالب می‌باشد و دومین جزء نیروی جاذبه می‌باشد که در فواصل بیشتری عمل می‌کند. بطور کلی این پتانسیل با توان ششم فاصله کاهش می‌یابد و بسیار سریعتر از پتانسیل کولمبی به صفر متمایل می‌گردد. برای محاسبه‌ی نیرو کافی است مشتق این پتانسیل نسبت به فاصله محاسبه گردد. بدین ترتیب نیروی لنارد- جونز  $F_{LJ}$  به صورت معادله‌ی ۲-۱۸ محاسبه خواهد شد.

$$F_{LJ} = 24\varepsilon \left( \frac{2\sigma^{12}}{r^{13}} - \frac{\sigma^6}{r^7} \right)$$

۱۸-۲

شکل ۸-۲ نمایشگر پتانسیل و نیروی لنارد-جونز می‌باشد. در فاصله‌ی تعادل نیروی بین دو اتم صفر خواهد بود و در فواصل کمتر از آن نیرو مثبت است که طبق قرار داد دفعی انتخاب می‌گردد، و در فواصل بیشتر از فاصله‌ی تعادل نیرو منفی یا جذبی خواهد بود. در فواصل بیشتر از  $2/5$  برابر  $\sigma$  هم نیرو و هم پتانسیل تقریباً صفر خواهند شد [۶۲].



شکل ۸-۲- نمودار نیرو و پتانسیل لنارد-جونز برحسب فاصله‌ی بین اتمی  $r$  با استفاده از نرم‌افزار متلب

### ۲-۳-۵- شعاع برش<sup>۱</sup>

در فرآیند مدل‌سازی یک سیستم  $N$  اتمی اگر تنها نیروی مؤثر حاصل پتانسیل جفتی باشد، آنگاه تعداد محاسبه‌ی نیرو در هر گام زمانی  $\binom{N}{2} = \frac{N(N-1)}{2}$  می‌باشد. محاسبه‌ی نیرو در هر شبیه-سازی زمان‌برترین قسمت می‌باشد. از طرف دیگر پتانسیل‌هایی مانند جونز از فاصله‌ای به بعد تقریباً

<sup>۱</sup> Cut-off Radius

صفر می‌باشند. در نظر گرفتن آنها تأثیر چندانی در نتیجه‌ی شبیه‌سازی نخواهد گذاشت. بنابراین پتانسیل‌های بین اتمی را می‌توان از فاصله‌ای به بعد تصحیح و بی‌اثر نمود. این فاصله شعاع برش  $R_{cut}$  نام دارد.

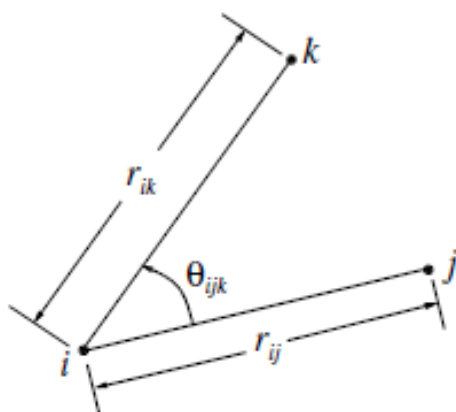
$$V_{tr} = \begin{cases} V(r) & r \leq R_{cut} \\ 0 & r > R_{cut} \end{cases} \quad ۱۹-۲$$

در معادله‌ی ۱۹-۲،  $V_{tr}(r)$  پتانسیل بریده شده می‌باشد. با این تصحیح تعداد محاسبه‌ی نیرو از مرتبه‌ی  $N$  خواهد شد و کاهش چشم‌گیری در حجم محاسبات ایجاد خواهد کرد. شعاع برش خطاهایی را در خواص محاسبه‌شده در شبیه‌سازی ایجاد خواهد نمود که قابل محاسبه و تصحیح هستند [۶۳]. صفر کردن ناگهانی پتانسیل باعث ایجاد ضربه در حین شبیه‌سازی می‌گردد و باعث نوسان در انرژی کل سیستم می‌شود که این اثر را می‌توان به روش‌های گوناگونی از بین برد. یکی از روش‌های معمول استفاده از تابع برش می‌باشد. این تابع همانند یک پوسته برای پتانسیل عمل می‌کند و در محل شعاع قطع مقدار آن به صورت نرم از یک به صفر میل خواهد کرد.

### ۲-۳-۶- پتانسیل‌های چندتایی

پتانسیل‌های چندتایی در معادله‌ی ۱۲-۲ در مدل‌سازی خواص و توپولوژی فضایی مواد بسیار مؤثر هستند. اولین جمله بعد از پتانسیل جفتی پتانسیل سه‌تایی است. پتانسیل سه‌تایی را می‌توان به عنوان معیاری از تأثیر انرژی زاویه‌ی باندهای سه‌تایی در سیستم اتمی دانست. شکل ۲-۹ زاویه‌ی بین سه اتم را در یک سیستم نشان می‌دهد با این فرض می‌توان معادله‌ی ۲۰-۲ را برای پتانسیل سه‌تایی معرفی نمود.

$$V_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) = V_3(\cos \theta_{ijk}), \quad \cos \theta_{ijk} = \frac{\vec{r}_{ij} \cdot \vec{r}_{ik}}{|\vec{r}_{ij}| \cdot |\vec{r}_{ik}|} \quad ۲۰-۲$$



شکل ۲-۹- تصویر شماتیک اتم‌های  $i$ ،  $j$  و  $k$  و پیوندها و زاویه‌ی پیوند مربوطه

پتانسیل سه‌تایی در واقع تأثیرات مربوط به تغییر در شکل مولکول‌ها را نشان می‌دهد [۶۲]، ولی برای مدل‌سازی کامل پتانسیل‌های سه‌تایی هم کفایت نمی‌کند و از مرتبه‌های بالاتری باید استفاده شود. از سوی دیگر به کار بردن پتانسیل‌های مراتب بالاتر از ۲ عملاً در یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی غیرممکن به نظر می‌آید و شبیه‌سازی را بسیار زمان‌بر خواهد کرد. برای فائق آمدن بر این مسأله راه‌حلهایی پیشنهاد شده است که به آنها در این بخش پرداخته می‌شود.

### ۲-۳-۷- پتانسیل بین مولکولی تطبیقی<sup>۱</sup>

در این روش از پتانسیل‌های دوتایی‌ای استفاده می‌شود که با هدف در نظر گرفتن اثرات چندتایی تصحیح شده‌اند. پتانسیل‌های دوتایی در این روش اثرات زاویه‌ای را در خود خواهند داشت و در عین حال اثرات فاصله را نیز که مربوط به پتانسیل‌های دوتایی است در خود حفظ کرده‌اند. مهمترین انواع این پتانسیل‌ها عبارت‌اند از: پتانسیل‌های مربوط به پیوندهای کوالانسی کربن، سیلیکون، ژرمانیوم که توسط ترسف در سال ۱۹۸۶ ارائه شد [۶۳]، همچنین پتانسیلی که برنر در سال ۱۹۹۰ برای کربن و هیدروکربن‌ها ارائه نمود [۶۲].

همانطور که مطرح شد پتانسیل‌های موضعی به صورت پتانسیل‌های دوتایی تعریف می‌شوند که

<sup>1</sup> Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order (AIREBO) Potential

برای اثرات پیچیده‌تر اصلاح شده‌اند. اکثر آنها دارای ساختار زیر هستند:

$$V_{LJ} = V_R(r_{ij}) - B_{ij}V_A(r_{ij}) , \quad r_{ij} = |\vec{r}_{ij}| \quad ۲۱-۲$$

در روابط بالا  $V_R$  پتانسیل جفتی دافع و  $V_A$  پتانسیل جفتی جاذب است.  $B_{ij}$  تابع مرتبه پیوند<sup>۱</sup> نام دارد که برای وارد کردن اثرات چندتایی و تشکیل توپولوژی صحیح فضایی وارد پتانسیل شده‌است. در این پژوهش پتانسیل بین اتمی انتخاب شده برای شبیه‌سازی هتروجانکشن‌های کربنی، یک پتانسیل مرتبه‌ی پیوند [۶۱] با معادله‌ی

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left( E_{ij}^{REBO} + E_{ij}^{LJ} + \sum_{k \neq i, j} \sum_{l \neq i, j, k} E_{kijl}^{tors} \right) \quad ۲۲-۲$$

است که در آن،

$$E_{ij}^{REBO} = V_R(r_{ij}) + b_{ij}V_A(r_{ij}) , \quad ۲۳-۲$$

$$E_{ij}^{LJ} = S(t_r(r_{ij})) S(t_b(b_{ij}^*)) C_{ij} V_{ij}^{LJ}(r_{ij}) + [1 - S(t_r(r_{ij}))] C_{ij} V_{ij}^{LJ}(r_{ij}) , \quad ۲۴-۲$$

$$E_{kijl}^{tors} = w_{ij}(r_{ij}) w_{jk}(r_{jk}) w_{kl}(r_{kl}) V^{tors}(\omega_{ijkl}) \quad ۲۵-۲$$

به دلیل حجیم بودن تشریح این معادلات، از ذکر آنها خودداری شده و فقط به صورت مجمل هر قسمت توضیح داده می‌شود. این معادلات به‌طور مفصل در مرجع شماره [۶۱] بیان شده‌است. معادله‌ی ۲۳-۲ که شامل تابع مرتبه‌ی پیوند  $b_{ij}$  می‌باشد، پیش‌بینی تشکیل و شکستن پیوند شیمیایی را ممکن می‌سازد و بدین ترتیب واکنش‌پذیری سیستم اتمی قابل توصیف است. ترم  $E_{ij}^{LJ}$  متناظر با برهم‌کنش‌های واندروالس اتم‌ها است که معمولاً در فاصله‌های بین مولکولی رخ می‌دهند. این معادله در بخش ۲-۳-۴- توضیح داده‌شد. معادله‌ی ۲-۲۵ جمله‌ای وابسته به زاویه‌ی دووجهی به‌ازای چهار اتم  $i, j, k$  و  $l$  است و با کمک آن، برهم‌کنش‌های پیچشی اتم‌ها توصیف می‌شوند. معادله‌های ۲-۲۴ و ۲-۲۵ به‌گونه‌ای تعیین شده‌اند که در هر گام، مقادیر آنها با توجه به موقعیت نسبی جدید اتم‌ها و

<sup>۱</sup> bond-order

شرایط پیوندها، با وضعیت سیستم هماهنگ می‌شود [۶۱]؛ به همین علت پتانسیل  $E$  را به عنوان پتانسیل بین مولکولی تطبیقی نام‌گذاری کردند.





فصل ۳-

# روش حل مسأله‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

### ۳-۱- دینامیک مولکولی به عنوان روش برگزیده

روش‌های ذکرشده در فصل قبل دارای محدودیت‌هایی برای بررسی نانوساختارها می‌باشند، که به طور مختصر بیان می‌شود. روش‌های پیوسته قادر به نمایش ساختار اتمی نانولوله‌ها نیستند و لذا وجه تمایزی بین نانولوله‌های آرم‌چیر، زیگزاگ و یا دست‌سان نمی‌توان قائل شد، و همچنین امکان بررسی اثر آرایش اتم‌ها بر رفتار ارتعاشی نانولوله‌ها وجود ندارد. دقت نتایج در روش‌های پیوسته به شدت وابسته به مقادیری است که برای پارامترهای هندسی و مکانیکی به کاررفته در معادلات حرکت آن در نظر گرفته می‌شوند [۶۴]. با اینکه روش‌های مکانیک مولکولی و اجزای محدود بسیاری از مشکلات روش‌های پیوسته را با مدل‌سازی در مقیاس اتمی حل کرده‌اند، ولی بررسی اثر دما بر ارتعاشات نانولوله‌ها با کمک هیچ‌یک از آنها امکان‌پذیر نیست. همچنین با چنین روش‌هایی نمی‌توان حرکت نانولوله را با گذشت زمان رصد کرد و تشکیل یا شکستن پیوندهای شیمیایی در ساختار آن قابل پیش‌بینی نیست. در روش دینامیک مولکولی اگر اتمی و در نتیجه پیوندی حذف شود، خللی در شبیه‌سازی ایجاد نمی‌شود؛ چون تابع پتانسیل مورد استفاده در آن به تعداد اتم‌های پیرامون یک اتم و یا تعداد پیوندها وابسته نیست و فقط با محاسبه‌ی فاصله‌ی بین اتم‌های موجود انرژی مورد نظر را محاسبه می‌کند. لذا عیوب حفره و پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی و شکستن پیوند در آن قابل شبیه‌سازی می‌باشد. در ادامه به بیان مفصل این روش و حل مسأله‌ی ارتعاش نانولوله‌ها پرداخته شده‌است.

### ۳-۲- شبیه‌سازی رایانه‌ای و دینامیک مولکولی

علم به مشاهده و درک نیاز دارد و بدون مشاهده، واقعیتی برای درک وجود ندارد. بدون درک، علم فقط ساخت اسناد و مدارک است. پایه‌ی درک، نظریه و زبان علوم نظری، ریاضی است. نظریه بر اساس یک فرضیه شکل می‌گیرد. فرضیه، خود یک حدس هوشمندانه است و برای توصیف و بیان علم مشاهده‌های موجود به کار می‌رود، درحالی‌که نظریه‌ها یا مدل‌های علمی ابزاری هستند که پس از آزمودن فرضیه‌ها و اثبات درستی آنها شکل می‌گیرد، و برای پیشگویی پدیده‌های جدید به کار می‌رود. برخورد انسان با طبیعت همواره از طریق مطالعه‌ی نظری یا تجربی بوده‌است. اما با ورود و رشد چشمگیر رایانه‌ها در چهار دهه‌ی گذشته، امروزه دانشمندان از طریق شبیه‌سازی رایانه‌ای امکان آن را یافته‌اند که فرآیندهای مختلف را از جنبه‌های گوناگون با دقت بیشتری مورد مطالعه قرار دهند و

پاسخ پرسش‌های خود را آسان‌تر بیابند.

در یک شبیه‌سازی رایانه‌ای (مانند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یا مونت کارلو) به حالت‌های سیستم مقدارهای عددی نسبت داده می‌شود. بنابراین، این حالت‌ها (حداقل برای مولکول‌های مورد بررسی) تبدیل به مشاهده‌پذیر می‌شوند. بعد از آنکه به حالت‌ها مقدارهای عددی نسبت داده شد، می‌توان با استفاده از روابط نظری نظریه جنبشی، مقدار مشاهده‌پذیرهایی را که در تجربه قابل دسترس هستند، محاسبه کرد.

شبیه‌سازی رایانه‌ای نقش با ارزشی در فراهم آوردن نتایج دقیق برای برخی مسائل در مکانیک آماری ایفا می‌کنند. مسائلی که ممکن است با روش‌های دیگر قابل حل نباشند و یا فقط بتوان آنها را با روش‌های تقریبی حل کرد. شبیه‌سازی از یک سو ابزاری برای آزمودن نظریه‌ها فراهم می‌کنند و از سویی دیگر می‌توان نتایج حاصل از شبیه‌سازی‌ها را به طور مستقیم با نتایج آزمایش‌های واقعی مقایسه کرد. در قدم اول، این خود آزمونی برای مدل مورد استفاده در یک شبیه‌سازی رایانه‌ای است. سرانجام اگر مدل خوب باشد، محقق می‌کند امیدوار است که به آزمایشگران تجربی دیدگاه‌های تازه‌ای پیشنهاد دهد و به توصیف نتایج جدید کمک کند.

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از بسیاری جهات شباهت بسیار زیادی با آزمایش‌های واقعی دارد. در یک مقایسه‌ی ساده، روند آماده‌سازی نمونه‌ی آزمایش، آماده‌سازی و اتصال دستگاه‌های اندازه‌گیری و در نهایت اندازه‌گیری خاصیت مورد نظر، اساس یک آزمایش واقعی را نشان می‌دهند، که به تبعیت از شرایط محیطی در برخی موارد نیاز به انجام آزمایشات متعدد و برخی محاسبات آماری می‌باشد. این دقیقاً همان فرآیندی است که در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انجام می‌پذیرد. در این تکنیک ابتدا یک مدل شامل  $N$  ذره انتخاب می‌گردد، سپس طبق برهم‌کنش بین ذره‌ای موجود، معادلات حرکت نیوتن تا رسیدن سیستم به حالت تعادلی خود، طی زمان حل شده و پس از آن به اندازه‌گیری خواص مورد نظر پرداخته می‌شود. در حقیقت بسیاری از خطاهای ممکن در اعمال این روش بسیار مشابه با یک آزمایش واقعی می‌باشد؛ مانند عدم مدل‌سازی صحیح، عدم نظر گرفتن زمان مناسب برای اندازه‌گیری و بسیاری از موارد دیگر. یک مسأله‌ی بسیار مهم و مورد توجه در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی این است که در نهایت برای محاسبه‌ی خواص و رفتار مشاهده شده، نیاز به توانایی بیان آنها بر حسب مکان و مومنتوم ذرات تشکیل دهنده‌ی سیستم مورد مطالعه است.

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی سه بخش اساسی را شامل می‌شود:

(۱) اولین و اساسی‌ترین بخش، ایجاد مدلی برای محاسبه‌ی برهم‌کنش بین اجزای تشکیل دهنده-ی یک سیستم مانند اتم، مولکول و ... می‌باشد. در اغلب موارد برای کاهش محاسبات، فرض می‌شود که تعامل ذرات به صورت جفتی<sup>۱</sup> (دوبه دو) می‌باشد، که برای ذراتی که دارای بار جزئی<sup>۲</sup> ثابت می‌باشند صحیح و تا حد بسیار زیادی دقیق می‌باشد.

(۲) قدم بعدی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، انتخاب یک انتگرال‌گیر مناسب برای محاسبه‌ی مسیر حرکت، مکان و سرعت ذرات طی زمان  $t$  و  $t + \delta t$  می‌باشد. در این انتگرال‌گیر که از روش تفاضل محدود استفاده می‌شود، مسیر حرکت ذرات به صورت گسسته در طی گام‌های زمانی مختلف  $\delta t$  محاسبه می‌گردد. انتخاب گام زمانی مناسب از اهمیت فراوانی در پایداری انتگرال‌گیر برخوردار بوده و باید به گونه‌ای انتخاب گردد که هیچگونه انحراف از انرژی سیستم صورت نپذیرد.

(۳) در گام نهایی، یک دسته‌جواب آماری مناسب باید انتخاب گردد تا بدین صورت کمیت‌های ترمودینامیکی مانند فشار، دما، انتالپی یا تعداد ذرات سیستم در طی شبیه‌سازی کنترل گردند.

دقت نتایج شبیه‌سازی‌های انجام‌شده به انتخاب مدل و اعمال درست آن بستگی دارد، که اعتبارسنجی آن نیز با مقایسه‌ی آن با یک سیستم واقعی صورت می‌پذیرد و در صورت داشتن اختلاف، مدل مورد استفاده باید تصحیح گردد.

در ادامه به روند حل مسأله‌ی ارتعاشات دینامیک مولکولی به همان صورتی که در این پژوهش مورد استفاده قرار گرفته، پرداخته می‌شود.

### ۳-۳- روند حل مسأله

در این تحقیق، برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نانولوله‌ها از نرم‌افزار لمپس<sup>۳</sup> (*LAMMPS*) استفاده شده است. لمپس که مخفف شبیه‌ساز موازی سیستم‌های مقیاس بزرگ اتمی/مولکولی است،

---

<sup>۱</sup> Pair-wise

<sup>۲</sup> Partial charge

<sup>۳</sup> Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator

یک کد شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌باشد که به‌وسیله‌ی آن می‌توان اثرات کلی مواد را در فازهای مختلف مایع، جامد و گاز بررسی کرد. این کد در آزمایشگاه ملی سانديا<sup>۱</sup> تولید شده است [۶۵] و یک کد منبع باز<sup>۲</sup> است.

این کد به‌وسیله تعریف دقیق مختصات و نوع اتم‌ها و مولکول‌ها و پارامترهای لازم در تعریف میدان‌های نیرویی مورد استفاده، به حل و انتگرال‌گیری معادلات حرکت نیوتن برای سیستم مورد نظر از اتم‌ها، مولکول‌ها و یا ذرات ماکروسکوپی می‌پردازد. دستورات ورودی نرم‌افزار در فایل‌های متنی نوشته می‌شود، سپس از طریق فراخوانی فایل اجرایی نرم‌افزار، کد ورودی اجرا می‌شود. همواره یک-سری دستورات اصلی باید در هر شبیه‌سازی توسط کاربر وارد شود. در صورتی که این دستورات وارد نشده باشد، دستورات پیش‌فرض آن در لمپس در نظر گرفته می‌شود. در حالت کلی کد لمپس شامل چهار بخش اساسی است:

- بخش آغازین و قالب‌بندی
  - تعریف ساختار اتمی و مولکولی سیستم
  - تنظیمات اصلی برنامه و پیکربندی
  - اجرای شبیه‌سازی
- که در ادامه به بررسی این بخش‌ها پرداخته می‌شود.

### ۳-۱-۳- بخش آغازین و قالب‌بندی

در این بخش، پارامترهایی تنظیم می‌شود که نیاز است قبل از تعریف اتم‌ها و مولکول‌ها یا خواندن فایل‌های ورودی برای سیستم تعریف شده باشند. پارامترهای مربوط به شبیه‌سازی مانند واحدها، ابعاد، تعداد هسته‌های شبیه‌سازی، شرایط مرزی محیط شبیه‌سازی و نوع میدان نیرویی تعریف می‌شوند. واحدها در لمپس به‌صورت گروهی از واحدهای مشخص انتخاب می‌شوند. دستور استفاده شده به صورت

---

<sup>۱</sup> Sandia National Laboratories

<sup>۲</sup> Open source

*units metal*

می‌باشد، که بعضی واحدهای در دسته واحد انتخابی *metal*، به صورت زیر می‌باشد:

*mass = grams/mole*

*distance = Angstroms*

*time = picoseconds*

*energy = eV*

*velocity = Angstroms/picosecond*

*force = eV/Angstrom*

*torque = eV*

*temperature = Kelvin*

ابعاد شبیه‌سازی مورد استفاده که سه بعد می‌باشد، با دستور زیر تعیین می‌شود:

*dimension 3*

در ادامه تابع پتانسیلی که برای محاسبه‌ی برهم‌کنش‌ها از آن استفاده می‌شود، تعیین می‌شود:

*pair\_style airebo 3.0 1 1*

که در این دستور تابع پتانسیل *airebo* که در معادله‌ی ۲-۲۲ توضیح داده شد، انتخاب می‌گردد. عدد ۳ فاکتور تعیین شعاع برش است. دو عدد ۱ که در ادامه آمده‌است، تعیین می‌کند که ترم‌های پتانسیل لنارد-جونز و پیچش در معادله‌ی ۲-۲۲ محاسبه شوند یا خیر. شعاع برش در مقالات بین ۱،۷ تا ۱۲،۶ آنگستروم گزارش شده است که بسته به محیطی که نانولوله در آن قرار دارد متغیر است [۶۶، ۶۷]، ولی در اکثر موارد پیرامون ۲ آنگستروم می‌باشد. در این پژوهش جهت دقت بیشتر مقدار ۳ آنگستروم انتخاب شده‌است.

در دستور زیر کلیه‌ی ثوابت به کار رفته در پتانسیل معادله‌ی ۲-۲۲ که در یک فایل داده می‌باشد، جهت محاسبه‌ی پتانسیل به کد لمپس وارد می‌شود.

*pair\_coeff \*\* CH.airebo C C*

### ۳-۳-۲- تعریف ساختار اتمی و مولکولی سیستم

یکی از روش‌های تعریف اتم‌ها و مولکول‌ها خواندن مختصات آنها از یک فایل داده و شروع مجدد با استفاده از دستور *read\_data* می‌باشد. ساختار اتمی نانولوله‌ها که از معادله‌های ۱-۲۲ تا ۸-۲۲ به دست می‌آید، در یک فایل متنی، در قالب استاندارد لمپس، به برنامه داده می‌شود. در این فایل تعداد و جرم اتم‌ها، مختصات سه‌بعدی آنها و متمایز کردن اتم‌هایی که قرار است به عنوان شرایط

مرزی، ثابت فرض شوند، تعریف می‌شود. جهت متمایز کردن اتم‌های ثابت و درآوردن به قالب مورد نظر، از نرم‌افزار متلب<sup>۱</sup> که توانایی تغییرات در فایل‌های متنی را دارا است، استفاده شد. دو نوع اتم کربن با جرم یکسان با دستورات زیر تعریف می‌شود:

2 atom types

Masses

1 12

2 12

### ۳-۳-۳- تنظیمات اصلی برنامه و پیکربندی

پس از اینکه مختصات اتم‌ها مشخص شد، به تعیین تنظیمات اصلی برنامه که بسته به نوع شبیه‌سازی بسیار متنوع است، پرداخته می‌شود؛ از این قبیل تنظیمات می‌توان به تعیین مقادیر پارامترهای میدان نیروی<sup>۲</sup> انتخابی مانند پارامترهای تعریف پیوند، زوایای بین پیوندی، دیهدرال‌ها<sup>۳</sup>، گام زمانی، دسته‌بندی اتم‌ها در صورت نیاز، تعیین دسته‌جواب ترمودینامیکی بر اساس اعمال الگوریتم‌های مشخص، محاسبه‌ی پارامترهای مورد نیاز و تنظیم پارامترهای خروجی اشاره کرد. با دستورات زیر اتم‌های کربنی که با عدد ۲ در قسمت قبل مشخص شدند، در گروه *fixed* و سایر اتم‌ها در گروه *free* قرار می‌گیرند:

group fixed type 2

group free subtract all fixed

سپس نیروهای وارد به اتم‌های *fixed* در هر سه جهت، صفر می‌شوند:

fix fixedBoundary fixed setforce 0 0 0

اندازه‌ی گام زمانی بر اساس واحد زمانی تعریف شده توسط *unit* با دستور زیر تعیین می‌شود:

timestep 0.001

از طرفی چون واحد زمان پیکوثانیه تعریف شده بود، گام زمانی مقدار ۰,۰۰۱ پیکوثانیه می‌باشد.

به کمک دستور *compute* می‌توان مقادیر مورد نیاز مانند انرژی پتانسیل سیستم، دما، انرژی

---

<sup>۱</sup> Matlab

<sup>۲</sup> Force\_field

<sup>۳</sup> Dihedral

جنبشی، مرکز جرم و ... را محاسبه و ذخیره نمود. مانند دستور زیر که مختصات مرکز جرم نانولوله با آن به دست آمد:

```
compute cenofmass all com
```

با استفاده از دستور زیر اطلاعات ترمودینامیکی سیستم نمایش داده می شود. با دستور زیر مقادیر مورد نیاز همانند دما و مرکز جرم در هر گام زمانی در صفحه ی خروجی چاپ می شود.

```
thermo 1
```

و در نهایت با دستور نهایی این قسمت، کمیت های انتخابی در گام های زمانی داده شده بر روی یک یا چند فایل ذخیره می گردد. در دستور زیر مختصات اتم ها در یک فایل با پسوند *lammps* در هر ۱۰۰ گام زمانی ذخیره می گردد:

```
dump min all atom 100 min${numatom}.lammpstrj
```

### ۳-۳-۴- اجرای شبیه سازی

در قسمت پایانی شبیه سازی که مربوط به اجرای برنامه می باشد، از دو نوع دستور استفاده می شود. دستور *minimize* برای کمینه کردن انرژی سیستم است، که در صورت نیاز ابتدا اجرا می شود. در این مرحله موقعیت تعادل سیستم که مترادف با صفر بودن نیروهای داخلی است، با کمینه ساختن مقدار *E* حاصل می شود:

```
Minimize 0.0 1.0e - 12 10000 100000000
```

که این دستور سیستم را تا تعداد ۱۰۰۰۰ تکرار به سمت کاهش انرژی آن اجرا می کند، مگر اینکه تکران انرژی به ۰٫۱ و یا تکران نیروی به  $10^{-12}$  برسد.

برنامه ی با دستور *run* اجرا می شود و خروجی ها به صورت فایل های متنی در دسترس قرار می گیرند:

```
run 500000
```

جهت نمایش خروجی لمپس، همچون مختصات اتم ها بعد از تعادل سیستم و نحوه ی ارتعاش سیستم در طول اجرای برنامه از نرم افزار <sup>۱</sup>*VMD* استفاده می شود. *VMD* یک نرم افزار گرافیکی می -

---

<sup>۱</sup> Visual Molecular Dynamics



باشد که برای اشکال زدایی، تصحیح پیکربندی سیستم و نمایش گرافیکی نتایج حاصل از نرم افزار لمپس کاربرد دارد.

برای شبیه‌سازی ارتعاشات نانولوله‌ها، ابتدا سیستم به حالت تعادل می‌رسد، سپس به اتم‌ها سرعت اولیه‌ی تصادفی داده می‌شود و اتم‌ها آزادانه روی شکل مود اول خود ارتعاش می‌کنند [۶۹, ۶۸, ۴۲]. مختصات مرکز جرم نانولوله طی ارتعاش با گام‌های زمانی برابر، ثبت می‌شود و با استفاده از تبدیل سریع فوریه<sup>۱</sup> در نرم‌افزار متلب، فرکانس طبیعی اول نانولوله به دست می‌آید [۴۰].

جهت ساخت نانولوله‌های هتروجانکشن کربنی هم‌محور که در فصل اول توضیح داده شد، نرم‌افزار سامسون<sup>۲</sup> مورد استفاده قرار گرفت. در این نرم‌افزار با انتخاب اتم مورد نظر و ایجاد و حذف پیوند، امکان ساخت نانوساختارها و تغییرات در آنها وجود دارد. در این نرم‌افزار یک تابع پتانسیل انتخاب می‌شود و با تعیین گام زمانی، در هر لحظه نانوساختار به حالت تعادل رسانده می‌شود. همچنین امکان ساخت عیوب پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی وجود دارد که ایجاد نانولوله‌ی هتروجانکشن هم‌محور را ممکن می‌سازد.

---

<sup>۱</sup> Fast Fourier Transform (FFT)

<sup>۲</sup> SAMSON



فصل ۴-

**ارتعاشات نانولوله‌های**

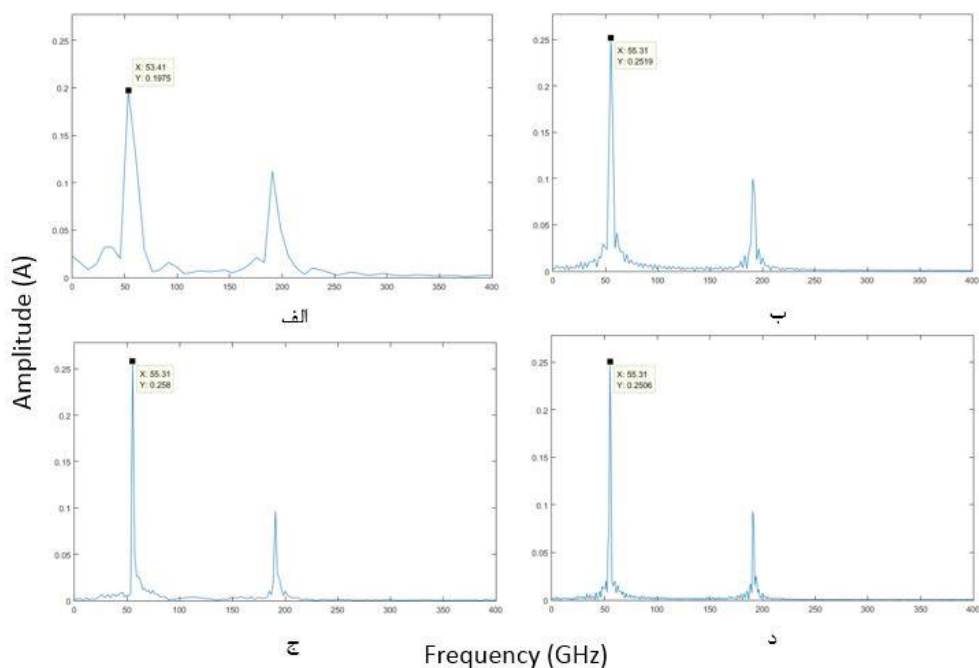
**کربنی هتروجانکشن**

در این فصل ابتدا، تعداد گام زمانی مورد نیاز که جهت شبیه‌سازی‌های این پژوهش استفاده شده، مورد بررسی قرار می‌گیرد. بعد به مقایسه‌ی روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انجام‌شده در این پژوهش با روش اجزای محدود که توسط ایمانی ینگجه و همکاران [۴۶] انجام شده، پرداخته می‌شود. سپس علل اختلاف موجود در فرکانس طبیعی‌های اول، بین دو روش مورد بررسی قرار می‌گیرد. در بخش بعدی نتایج بررسی ارتعاشات نانولوله‌های هتروجانکشن کربنی که از اتصال دو نانولوله‌ی کربنی آرم‌چیر (۵،۵) و (۱۰،۱۰) تشکیل شده، ارائه می‌شود، و با فرکانس‌های دو نانولوله‌ی سازنده‌ی آنها که با طول هتروجانکشن برابر است، مورد تحلیل قرار می‌گیرد. این بررسی‌ها در دو شرایط مرزی یک-سرگیردار و دوسرگیردار می‌باشند. در ادامه تأثیر عیوب پنج‌ضلعی و هفت ضلعی که تعداد آنها در هتروجانکشن‌های هم‌محور بیشتر می‌شود و مقایسه‌ی دو نانولوله‌ی هم‌محور و ناهم‌محور مورد بررسی قرار می‌گیرد. بعد از آن فرکانس طبیعی ارتعاشات هتروجانکشن در دو دمای ۰،۱ درجه کلوین و ۳۰۰ درجه کلوین مقایسه می‌شود. در نهایت تأثیر تعداد عیب حفره که به‌طور یکنواخت در هتروجانکشن پخش شده‌اند، در فرکانس طبیعی بررسی می‌شود.

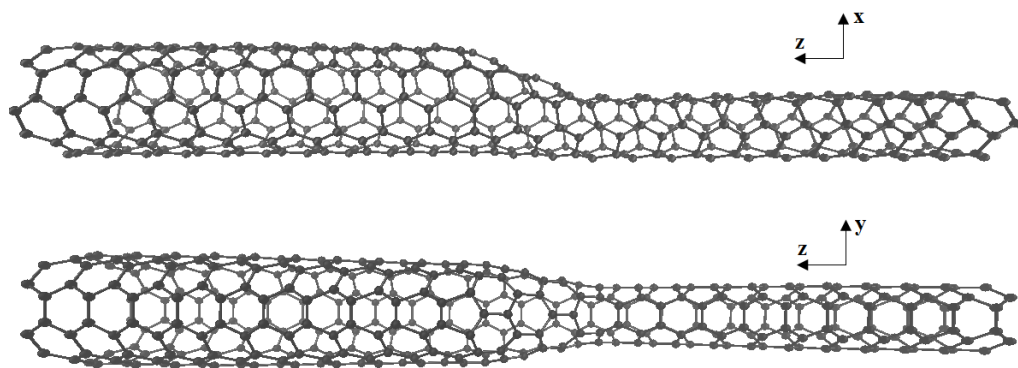
#### ۴-۲- تعیین تعداد گام زمانی

انتخاب تعداد گام زمانی در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به‌دلیل رابطه‌ی مستقیم آن در ایجاد تعادل بین دقت و زمان شبیه‌سازی از اهمیت بسیار بالایی برخوردار است. تعداد گام زمانی مورد نیاز، به نتایج حاصل از تبدیل سریع فوریه بستگی دارد. لذا نتایج حاصل از تعداد گام‌های زمانی مختلف برای هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) با ۱۳۲۰ اتم با شرایط مرزی یک‌سرگیردار بررسی شدند و در شکل ۴-۱ نشان داده شده‌اند. شکل ۴-۱-الف که با ۱۰۰۰۰۰ گام زمانی شبیه‌سازی شده، مقدار فرکانس ۵۳،۴۱ گیگاهرتز با دامنه ۰،۱۹۷۵ آنگستروم و در شکل‌های ۴-۱-ب، ج و د با ۳۰۰۰۰۰، ۵۰۰۰۰۰ و ۷۰۰۰۰۰ گام زمانی، مقدار فرکانس ۵۵،۳۱ با دامنه‌های به‌ترتیب ۰،۲۵۱۹، ۰،۲۵۶ و ۰،۲۵۰۶ آنگستروم به‌دست آمد. همانطور که مشاهده می‌شود مقدار فرکانس از ۳۰۰۰۰۰ به بالا تغییری داشته و فقط دامنه‌ی آن متغیر بوده است. لذا در این پژوهش از مقدار متوسط ۵۰۰۰۰۰ جهت شبیه‌سازی استفاده شده‌است. قابل ذکر است که کلیه‌ی فرکانس‌های محاسبه شده در این

پژوهش در جهت  $y$  می‌باشند، که در شکل ۲-۴ جهات بردارهای مختصات کارتیزین نشان داده شده- است.



شکل ۴-۱- نمودارهای طیف دامنه برای نانولوله‌ی هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) با ۱۳۲۰ اتم، یک‌سرگیردار با الف) ۱۰۰۰۰۰، ب)-۳۰۰۰۰۰، ج) ۵۰۰۰۰۰ و د) ۷۰۰۰۰۰ گام زمانی

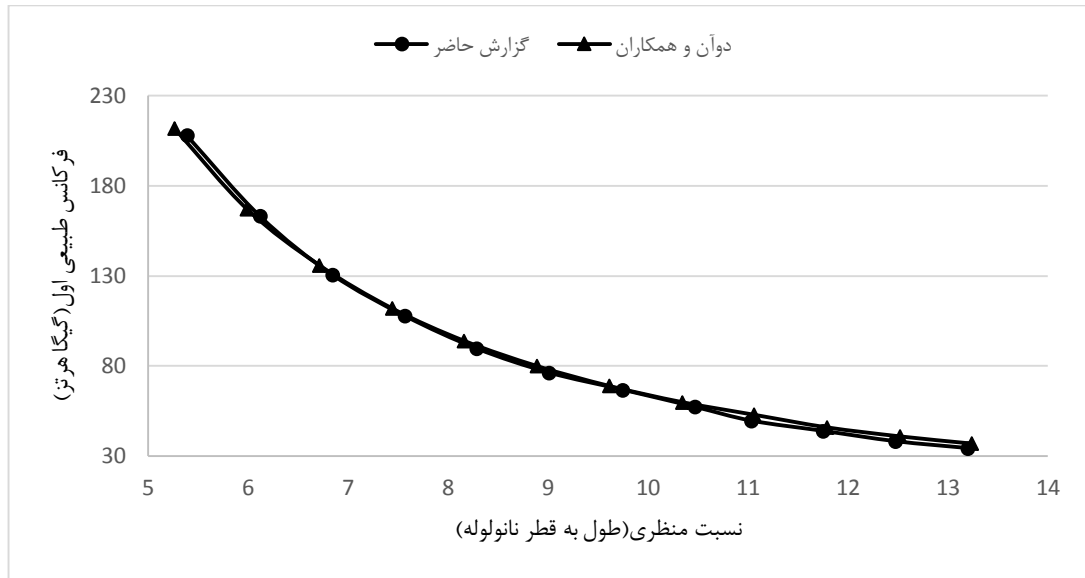


شکل ۴-۲- جهات بردارهای مختصات کارتیزین (هتروجانکشن (۵،۵)-(۳،۳) با ۳۷۶ اتم)

### ۳-۴- اعتبار سنجی راه‌حل

جهت اطمینان از درستی روند حل مسأله‌ی ارتعاشات، فرکانس طبیعی‌های نانولوله‌ی ساده‌ی

(۵،۵) با طول‌های مختلف که در این پژوهش به دست آمده‌اند با نتایج دوآن و همکاران [۷۰] که به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بوده، مقایسه شدند. نتایج در شکل ۳-۴ ارائه شده‌است. بعد از محاسبه‌ی خطا و درصد نسبی آن، مقدار میانگین خطای نسبی ۲،۲۹ درصد به دست آمد؛ که این خطا به دلیل تفاوت در تابع پتانسیل انتخابی است.

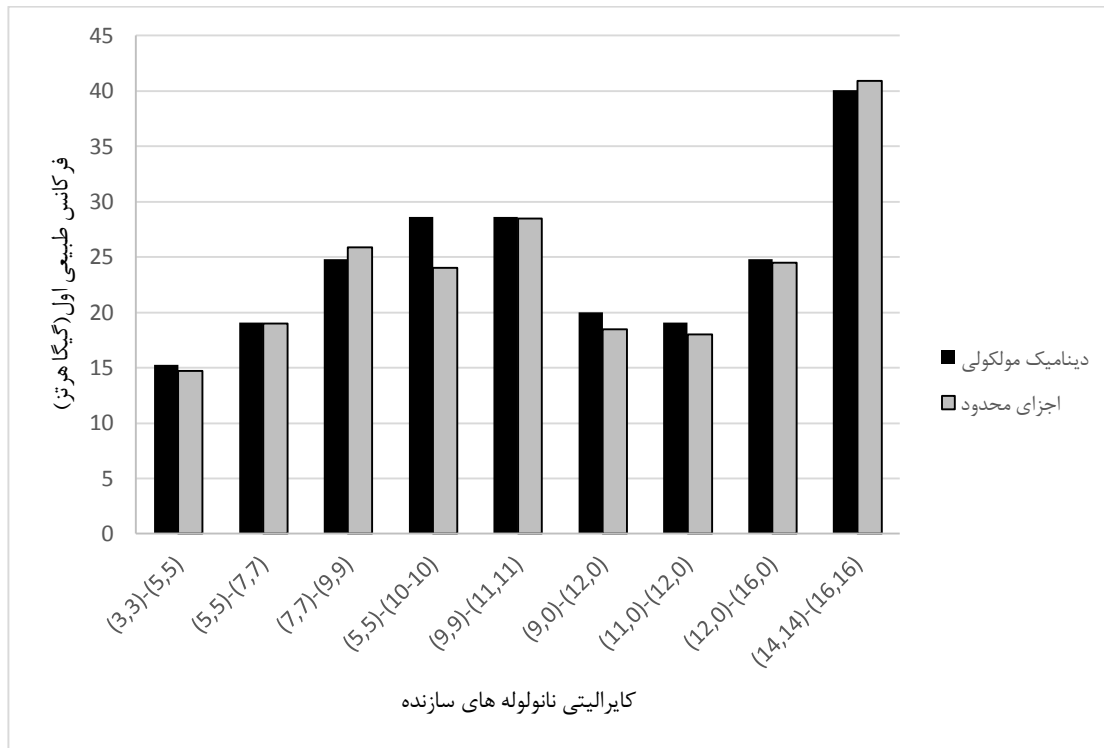


شکل ۳-۴- مقایسه‌ی نتایج شبیه‌سازی نانولوله‌ی (۵،۵)، در این پژوهش و دوآن و همکاران [۷۰] که هر دو به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌باشد.

#### ۴-۴- مقایسه‌ی دو روش دینامیک مولکولی و اجزای محدود

همانطور که در فصل پیشینه‌ی پژوهش ذکر شد، ایمانی ینگجه و همکاران [۴۶] ارتعاشات نانولوله‌های کربنی هتروجانکشن را به روش عددی اجزای محدود مورد بررسی قرار دادند. شکل ۴-۴ فرکانس طبیعی‌های اول نانولوله‌های کربنی هتروجانکشن با کایرالیته‌های مختلف نانولوله‌های سازنده‌ی آنها از نوع زیگزاگ و آرم‌چیر، که اتم‌های انتهای با قطر بیشتر، ثابت شده‌اند را، به دو روش دینامیک مولکولی و اجزای محدود نشان می‌دهد. با محاسبه‌ی خطای نسبی دو روش دینامیک مولکولی و اجزای محدود، نتیجه می‌شود که روش اجزای محدود، به اندازه‌ی ۷،۴۵ درصد خطا دارد. علت خطا تفاوت تابع پتانسیل مورد استفاده در دو روش می‌باشد. در روش اجزای محدود [۴۶] تابع پتانسیلی به کار

رفته که مجموعی از پتانسیل‌های کشش، خمش، پیچش دیهدرال و پیچش خارج از صفحه<sup>۱</sup> است. درحالی‌که در این پژوهش از پتانسیل بین مولکولی تطبیقی که در فصل دوم به آن پرداخته شد استفاده شده‌است. همچنین تفاوت‌های دیگر دو روش مانند در نظر گرفتن دما در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌تواند عامل این خطا باشد.



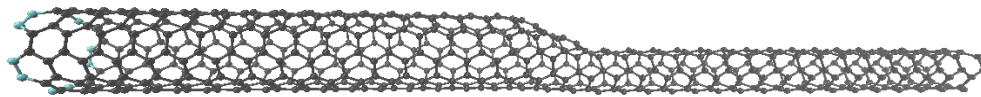
شکل ۴-۴- فرکانس طبیعی‌های اول نانولوله‌های هتروجانکشن کربنی یک‌سرگردار با کایرالیته‌های مختلف به دو روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و اجزای محدود [۴۶]

#### ۴-۵- ارتعاشات نانولوله‌های هتروجانکشن کربنی یک‌سرگردار

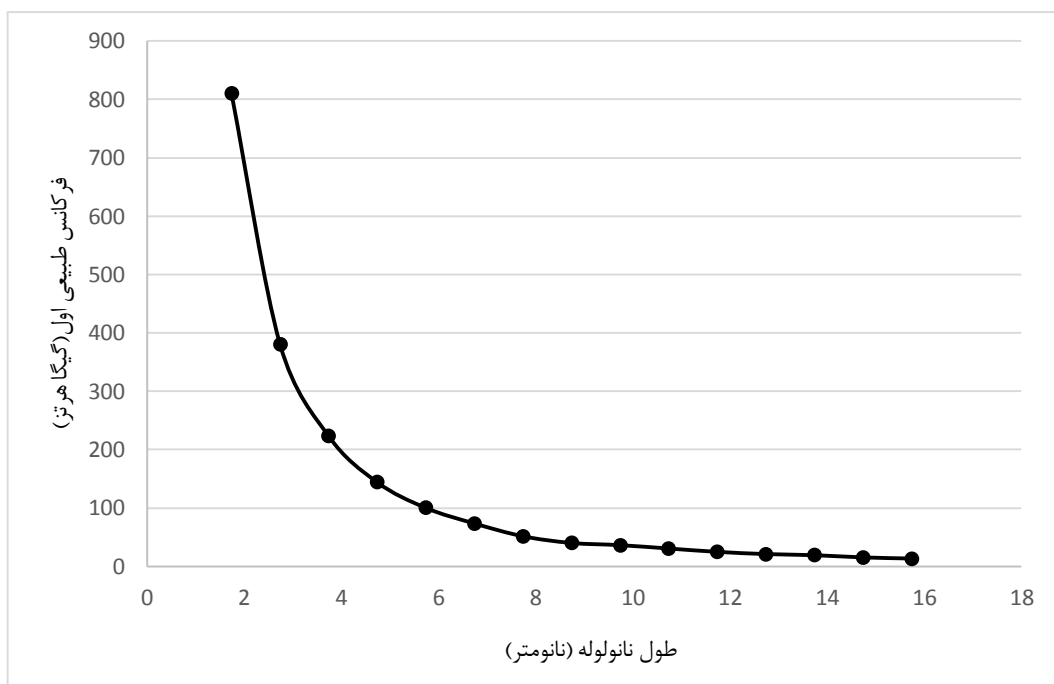
در اینجا به‌عنوان نمونه، نتیجه‌ی شبیه‌سازی ارتعاشات دو هتروجانکشن با شرایط مرزی یک-سرگردار با کایرالیته‌های آرم‌چیر و زیگزاگ ارائه می‌شود. شکل ۴-۵ نانولوله‌ی هتروجانکشن (۵,۵)-(۳,۳) با طول ۸,۷۳۸ نانومتر که از ۵۶۸ اتم تشکیل شده است را نشان می‌دهد. نانولوله‌های سازنده از

<sup>۱</sup> Improper (out-of-plane) torsion

نوع آرمچیر هستند و شرایط مرزی در نظر گرفته شده، یک سرگردار است، بدین منظور که اتم‌های انتهای قطور آن یعنی (۵،۵)، ثابت فرض شده‌اند که در شکل با رنگ دیگری مشخص است. شکل ۴-۶ فرکانس طبیعی‌های اول آن را نشان می‌دهد. فرکانس طبیعی در طول‌های متفاوت بررسی شده‌اند. قابل ذکر است که طول دو نانولوله‌ی تشکیل‌دهنده‌ی هتروجانکشن در تمام شبیه‌سازی‌های این گزارش مساوی می‌باشد و طول کل هتروجانکشن از جمع این دو طول و طول ناحیه‌ی اتصال حاصل می‌شود. کوچکترین طول نانولوله‌های سازنده ۰،۵ نانومتر و بزرگ‌ترین‌شان ۷،۵ نانومتر در نظر گرفته شده‌است.



شکل ۴-۵- نانولوله‌ی هتروجانکشن (۵،۵)-(۳،۳) یک سرگردار به طول ۸،۷۳۸ نانومتر و تعداد ۵۶۸ اتم

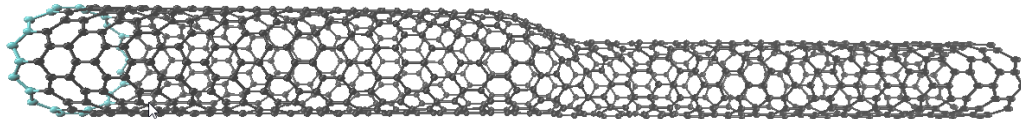


شکل ۴-۶- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۵،۵)-(۳،۳) با شرایط مرزی یک سرگردار با طول‌های متفاوت

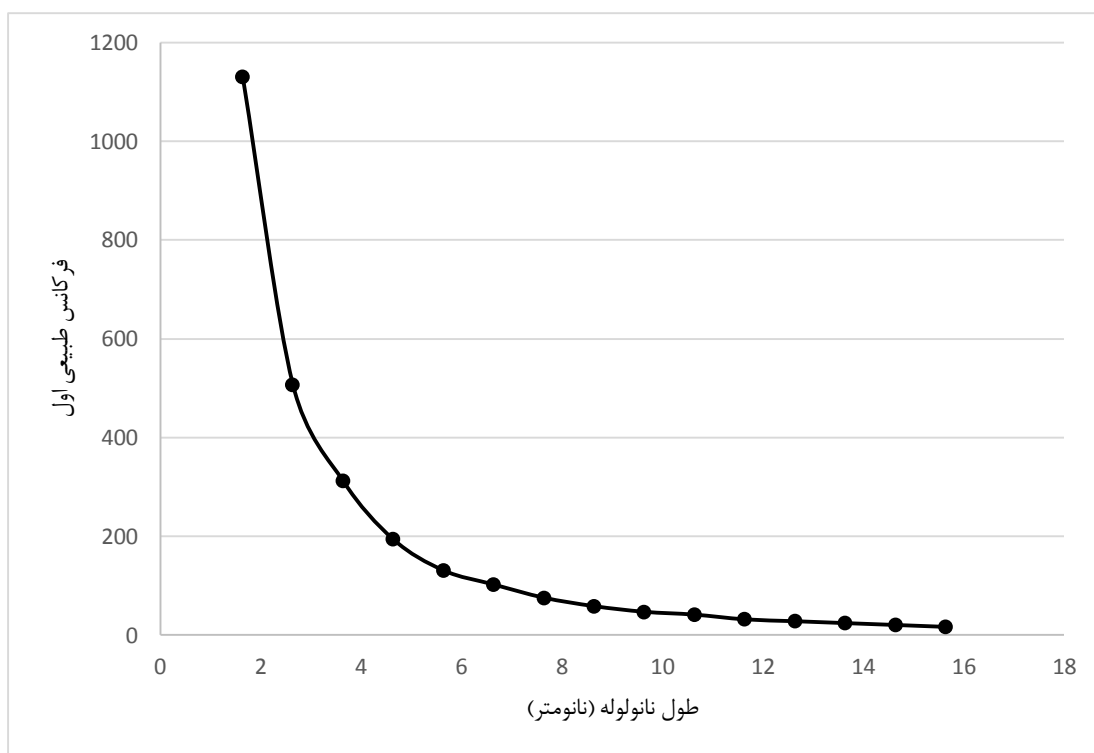
شکل ۴-۷- نانولوله‌ی هتروجانکشن (۱۲،۰)-(۹،۰) با طول ۸،۶۳۹ نانومتر که از ۸۶۱ اتم تشکیل شده است را نشان می‌دهد. نانولوله‌های سازنده از نوع زیگزاگ هستند و شرایط مرزی در نظر گرفته شده، یک سرگردار است، بدین منظور که اتم‌های انتهای قطور آن یعنی (۱۲،۰)، ثابت فرض شده‌اند.



شکل ۴-۸ فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۹۰،۰)-(۱۲۰،۰) با طول‌های متفاوت را نشان می‌دهد. با توجه به دو شکل ۴-۶ و شکل ۴-۸ مشخص است که فرکانس طبیعی نانولوله‌های هتروجانکشن، مانند دیگر اجسام، همچون تیر و پوسته، با افزایش طول، کاهش می‌یابد.



شکل ۴-۷- نانولوله‌ی هتروجانکشن (۹۰،۰)-(۱۲۰،۰) یک‌سرگردار به طول ۸,۶۳۹ نانومتر و تعداد ۸۶۱ اتم

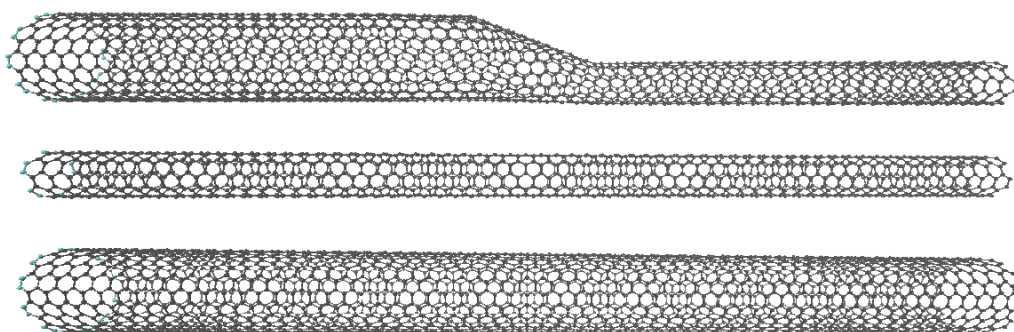


شکل ۴-۸- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۹۰،۰)-(۱۲۰،۰) با شرایط مرزی یک‌سرگردار با طول‌های متفاوت

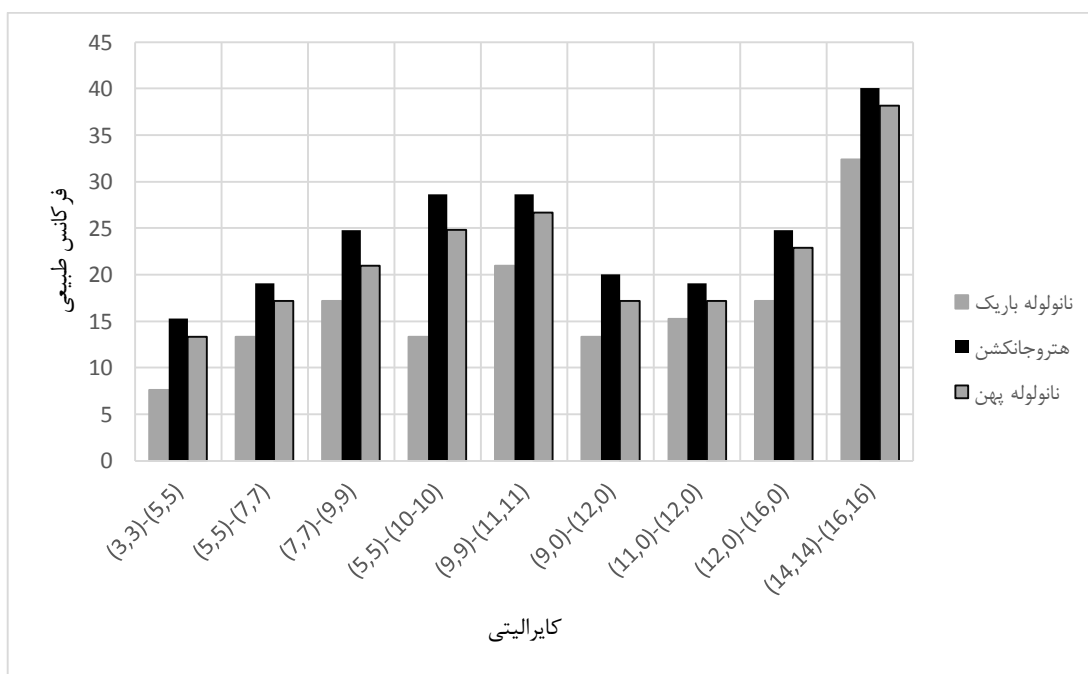
#### ۴-۶- ارتعاشات نانولوله‌های هتروجانکشن کربنی و نانولوله‌های سازنده‌ی آنها

در این بخش نتایج مربوط به ارتعاشات نانولوله‌های هتروجانکشن کربنی با نانولوله‌های سازنده (۵،۵) و (۱۰،۱۰) که به صورت ناهم‌محور به هم متصل شده‌اند، ارائه می‌شود. شرایط مرزی اعمال شده یک‌سرگردار می‌باشد؛ که اتم‌های انتهای با قطر بیشتر که نانولوله‌ی (۱۰،۱۰) می‌باشد، ثابت فرض شده‌اند (شکل ۴-۹). همچنین فرکانس نانولوله‌های سازنده‌ی هر هتروجانکشن نیز محاسبه شده‌است.

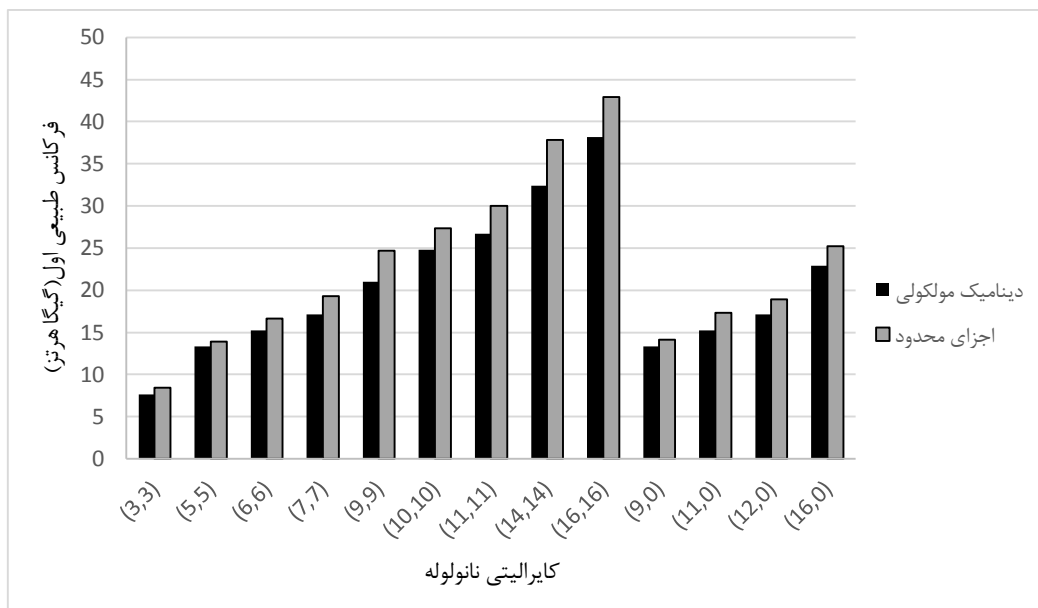
طول نانولوله‌ها ۱۵ نانومتر می‌باشد. در شکل ۴-۱۰ نتایج در کنار هم قرار داده شده‌است، تا مقایسه‌ی بهتری صورت گیرد. بر خلاف نتایج ایمانی ینگجه [۴۶] که در ۶۶ درصد نتایج آنها، مقدار فرکانس هتروجانکشن بین فرکانس نانولوله‌های سازنده‌ی آنها بود، در این پژوهش فرکانس هتروجانکشن بیشتر از نانولوله‌های سازنده است. اختلاف اصلی به تفاوت فرکانس نانولوله‌های سازنده برمی‌گردد، که در شکل ۴-۱۱ فرکانس به دو روش نشان داده شده‌است. میانگین خطای نسبی آنها در دو روش ۹,۹۹ درصد می‌باشد.



شکل ۴-۹- هتروجانکشن (۱۰,۱۰)-(۵,۵) و نانولوله‌های همگن سازنده‌ی آن با طول ۱۵ نانومتر و یک‌سرگردار

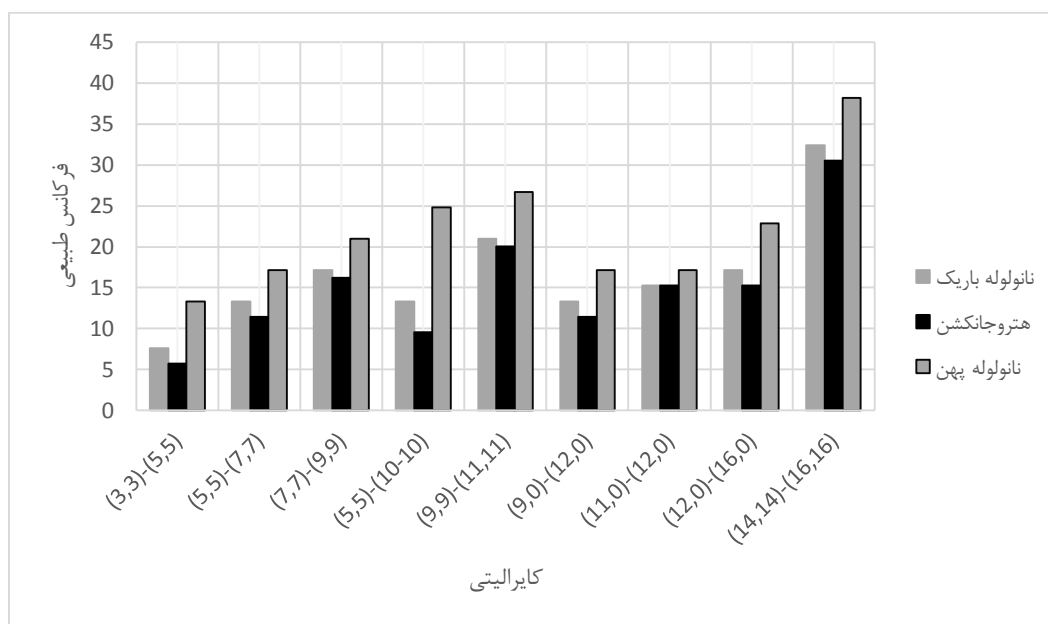


شکل ۴-۱۰- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰,۱۰)-(۵,۵) و نانولوله‌های سازنده‌ی آنها با طول مساوی و شرایط مرزی انتهای قطور ثابت



شکل ۴-۱۱- فرکانس نانولوله‌های سازندهی هتروجانکشن‌های مقایسه‌شده به دو روش دینامیک مولکولی و اجزای محدود

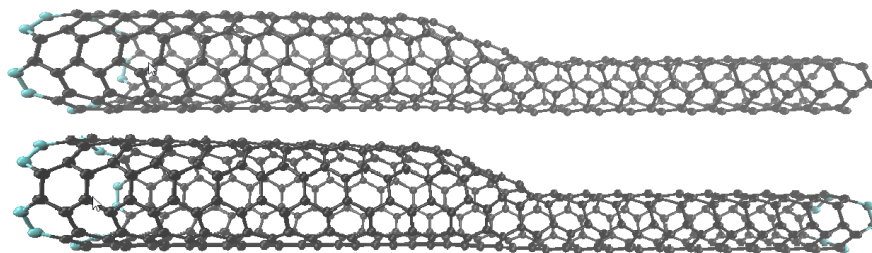
در شکل ۴-۱۲ فرکانس طبیعی اول هتروجانکشن  $(10,10)$ - $(5,5)$  که اتم‌های انتهایی باریک آن ثابت شده‌اند، به همراه نانولوله‌های سازندهی آنها ترسیم شده است. با توجه به شکل مشاهده می‌شود که فرکانس هتروجانکشن، از فرکانس نانولوله‌های سازندهی آنها که با طول هتروجانکشن یکسان است، کمتر می‌باشد.



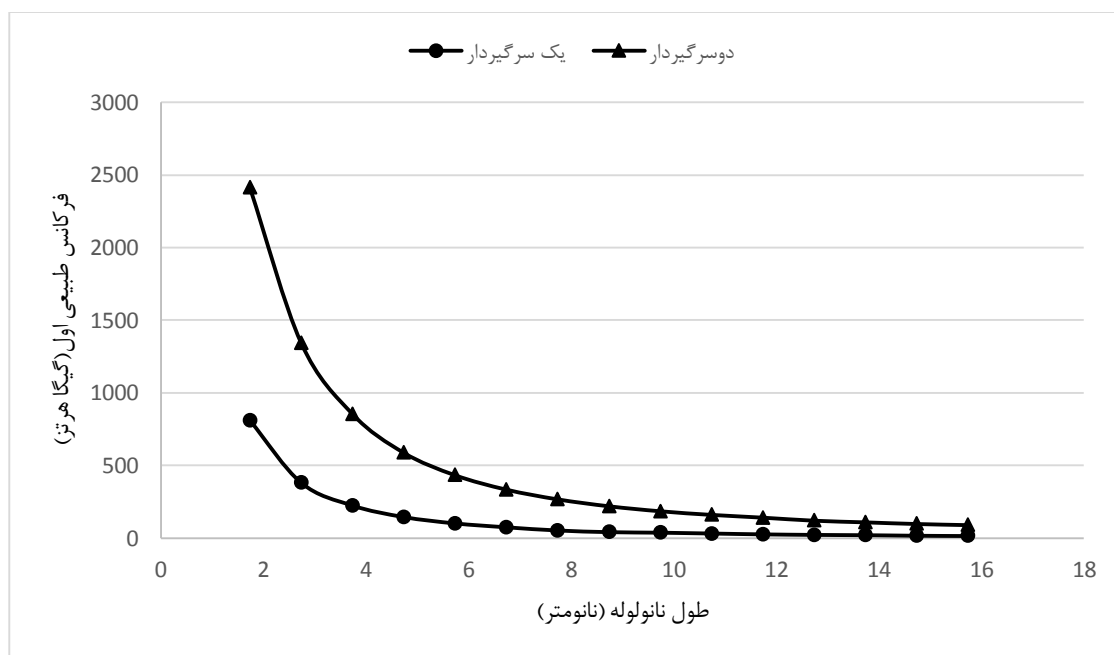
شکل ۴-۱۲- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن  $(10,10)$ - $(5,5)$  و نانولوله‌های سازندهی آنها با طول مساوی و شرایط مرزی انتهایی باریک ثابت

#### ۷-۴- ارتعاشات نانولوله‌های هتروجانکشن با شرایط مرزی دوسرگیردار

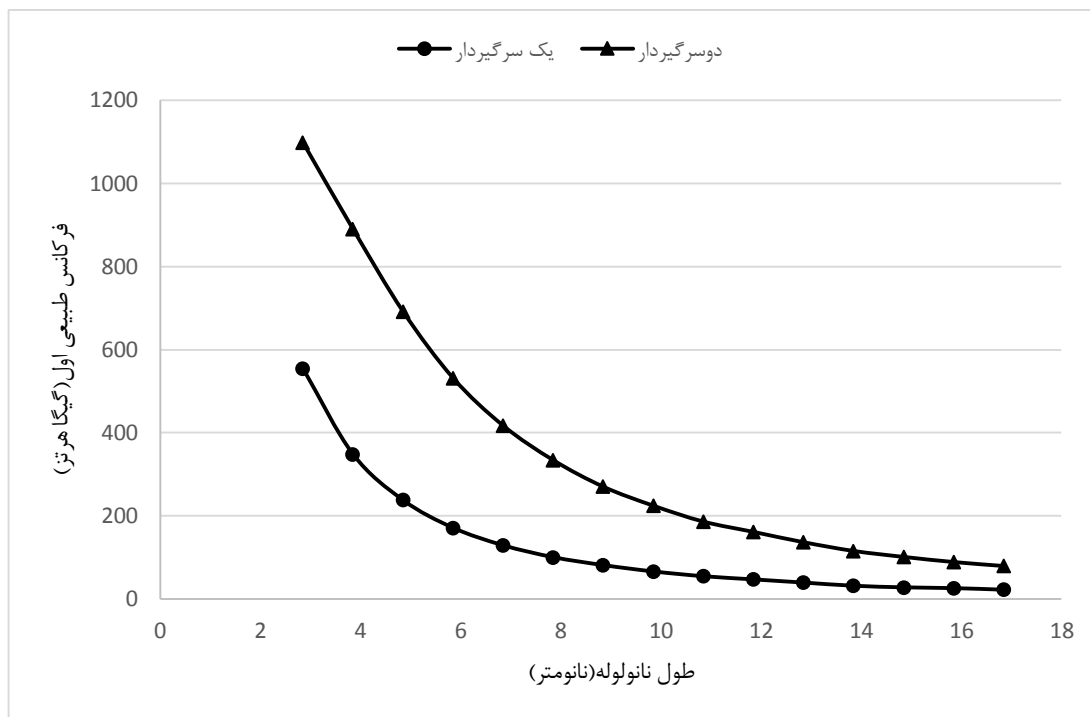
در ارتعاشات دوسرگیردار، اتم‌های انتهایی هر دو سمت هتروجانکشن ثابت می‌شوند. در این بخش دو هتروجانکشن  $(۵,۵)-(۳,۳)$  و  $(۱۰,۱۰)-(۵,۵)$  مورد بررسی قرار گرفتند. شکل ۴-۱۳ ساختار هتروجانکشن  $(۵,۵)-(۳,۳)$  را در دو شرایط مرزی یک‌سرگیردار و دوسرگیردار به طول ۵,۷۳۸ نانومتر و تعداد اتم ۳۷۶ را نمایش می‌دهد. نتایج این شبیه‌سازی برای هتروجانکشن‌ها در شکل ۴-۱۴ و شکل ۴-۱۵ ارائه شده‌است. در این شکل‌ها هتروجانکشن‌های یک‌سرگیردار هم، جهت مقایسه‌ی بهتر آورده شده‌است. همانطور که انتظار می‌رفت، در هر دو هتروجانکشن، فرکانس دوسرگیردار بیشتر از یک‌سرگیردار می‌باشد.



شکل ۴-۱۳- هتروجانکشن  $(۵,۵)-(۳,۳)$  به طول ۵,۷۳۸ نانومتر و تعداد اتم ۳۷۶ در دو شرایط مرزی یک‌سرگیردار و دوسرگیردار



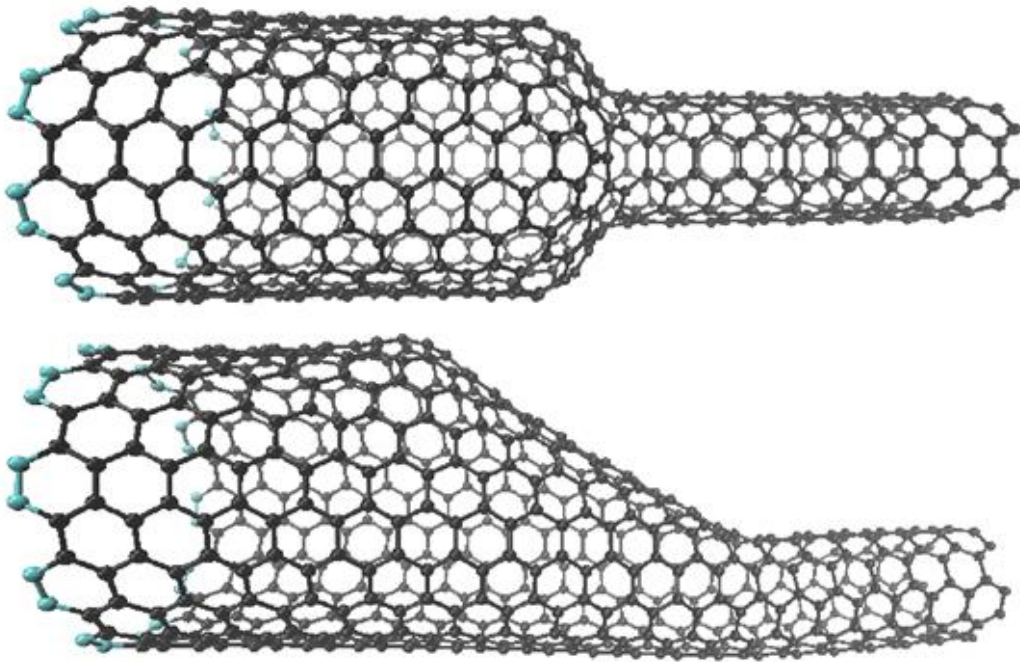
شکل ۴-۱۴- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن  $(۵,۵)-(۳,۳)$  در دو حالت یک‌سرگیردار و دوسرگیردار



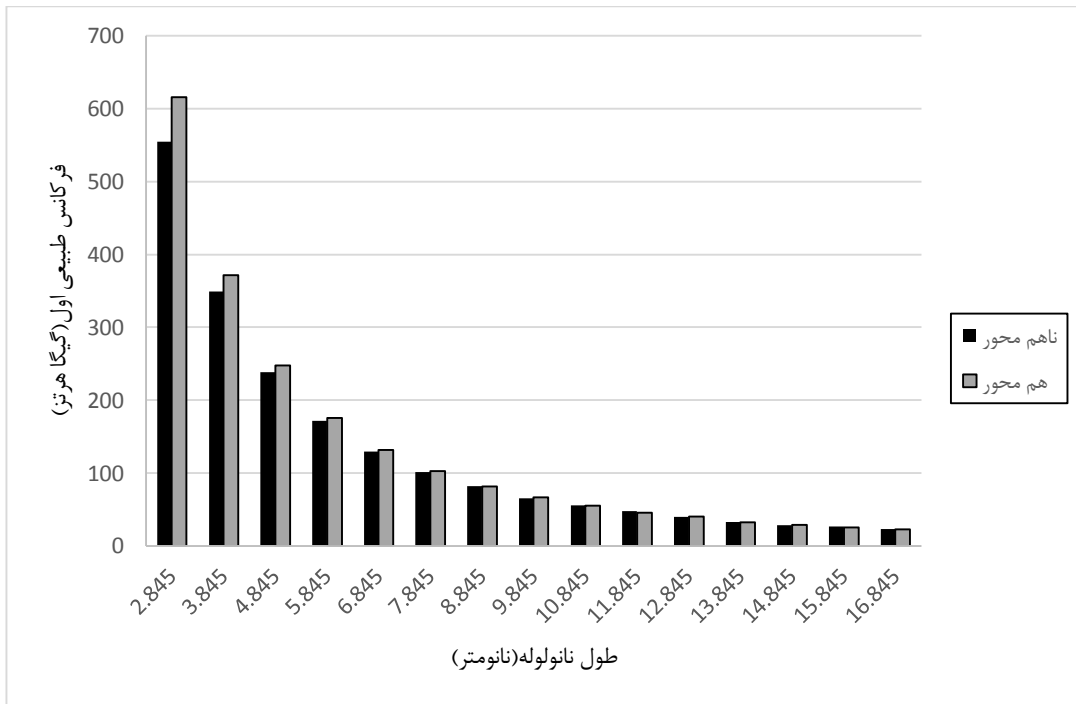
شکل ۴-۱۵- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن  $(10, 10)$ - $(5, 5)$  در دو حالت یک‌سرگیردار و دوسرگیردار

#### ۸-۴- ارتعاشات نانولوله‌های هتروجانکشن کربنی هم‌محور

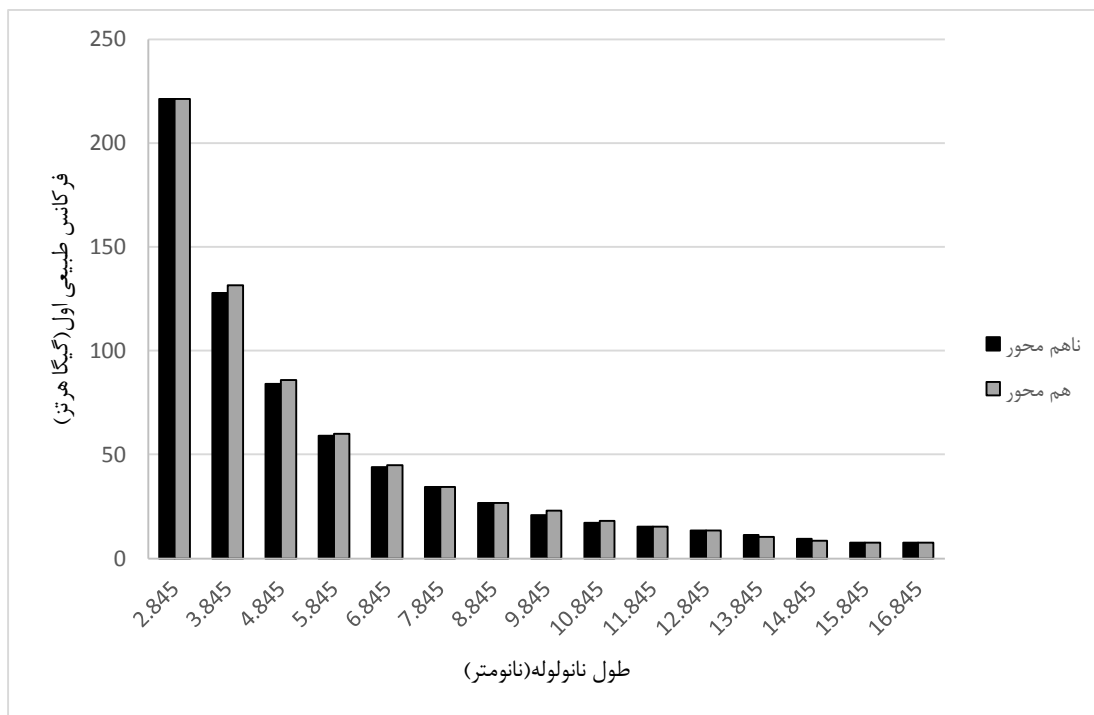
در مورد هتروجانکشن‌های هم‌محور در فصل ۲ توضیح داده شد. گفته شد که جهت ساخت این نانولوله‌ها از عیوب جفتی پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی بیشتری استفاده می‌شود. هتروجانکشن هم‌محوری که در این بخش مورد بررسی قرار می‌گیرد، از نانولوله‌های  $(5, 5)$  و  $(10, 10)$  ساخته شده است. شکل ۴-۱۶ این دو هتروجانکشن را به صورت یک‌سرگیردار و تعداد ۶۰۰ اتم نشان می‌دهد. در شکل ۴-۱۷ فرکانس طبیعی‌های آنها  $(5, 5)$ - $(10, 10)$  در دو حالت هم‌محور و ناهم‌محور، که انتهای قطور آنها ثابت است، مورد بررسی قرار گرفته است. و در شکل ۴-۱۸ نتایج شبیه‌سازی همان هتروجانکشن که انتهای باریک آن ثابت شده است.



شکل ۴-۱۶- هتروجانکشن  $(10,10)$ - $(5,5)$  هم‌محور و ناهم‌محور با شرایط مرزی یک‌سرگیردار با تعداد ۶۰۰ اتم



شکل ۴-۱۷- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن  $(10,10)$ - $(5,5)$  در دو حالت هم‌محور و ناهم‌محور که انتهای قطور آنها ثابت است.



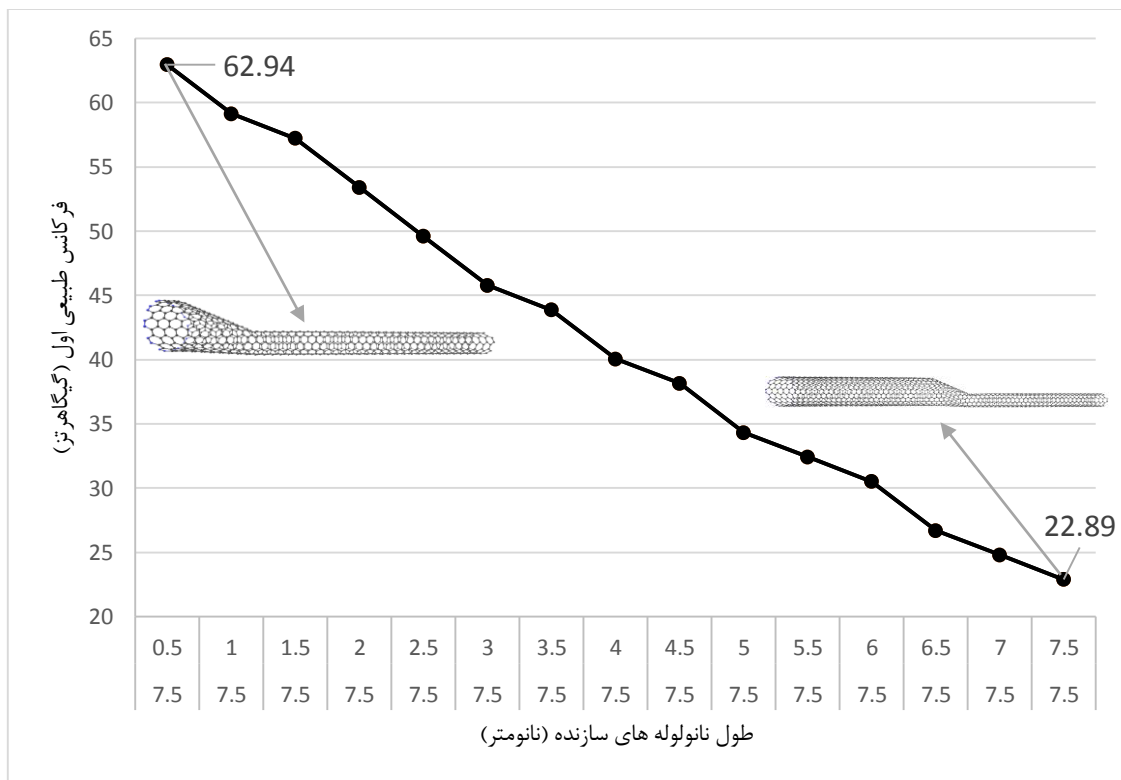
شکل ۴-۱۸- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) در دو حالت هم‌محور و ناهم‌محور که انتهای باریک آنها ثابت است.

با دقت در نمودارها مشخص است در اکثر موارد فرکانس هتروجانکشن هم‌محور از ناهم‌محور بیشتر است. همانطور که در فصل یک در مورد هتروجانکشن‌های هم‌محور و ناهم‌محور گفته شد، هتروجانکشن هم‌محور ۴ جفت عیب پنج‌ضلعی- هفت‌ضلعی از ناهم‌محور بیشتر دارد، که می‌توان نتیجه گرفت که این افزایش عیوب، و همچنین متقارن بودن آن باعث افزایش فرکانس طبیعی شده- است.

#### ۴-۹- تأثیر تغییر طول یک سمت هتروجانکشن بر فرکانس طبیعی

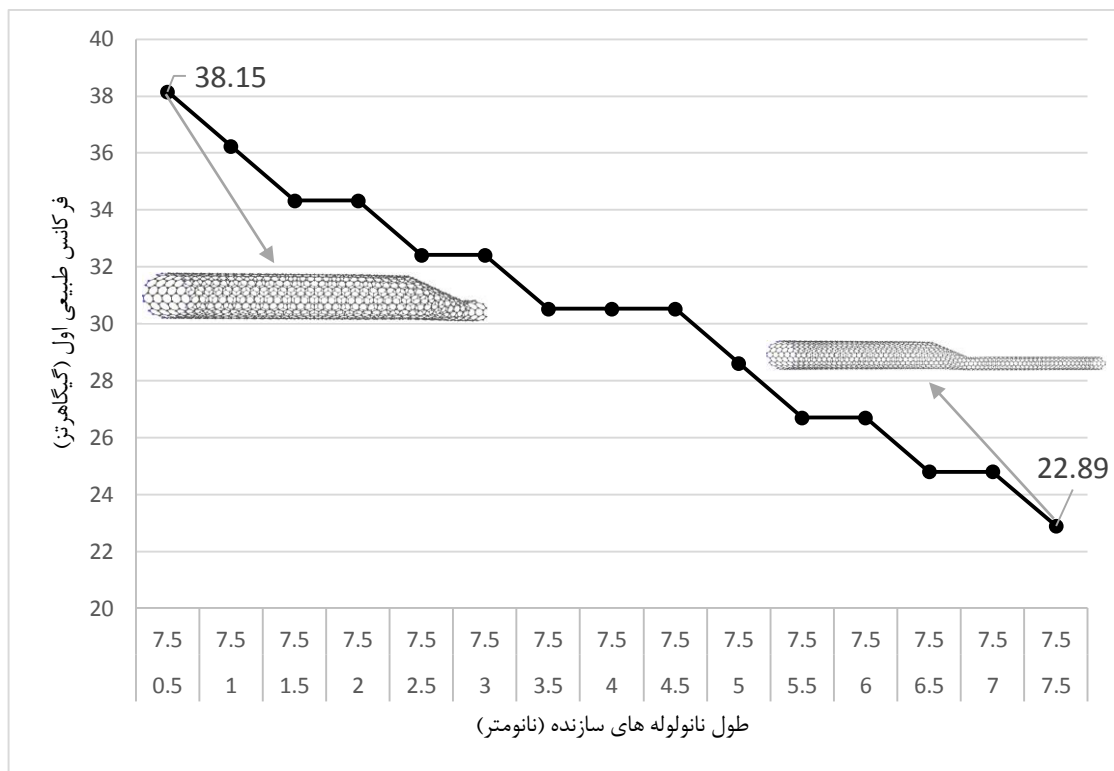
در این بخش از پژوهش فرکانس هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) با شرایط مرزی یک- سرگیردار(انتهای قطور ثابت) که طول یک سمت آن ثابت و طول سمت دیگر متغیر است مورد بررسی قرار می‌گیرد. شکل ۴-۱۹ فرکانس طبیعی‌های اول این هتروجانکشن را در حالتی که طول نانولوله‌ی باریک سازنده‌ی آن ثابت می‌باشد و طول نانولوله‌ی قطور سازنده از ۰،۵ نانومتر تا ۷،۵ نانومتر افزایش می‌یابد را نشان می‌دهد. و شکل ۴-۲۰ فرکانس طبیعی‌های اول این هتروجانکشن را در حالتی که

طول نانولوله‌ی قطور سازنده‌ی آن ثابت می‌باشد و طول نانولوله‌ی باریک سازنده از ۰,۵ نانومتر تا ۷,۵ نانومتر افزایش می‌یابد را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود تغییر طول قسمت قطور آن تأثیر بیشتری بر مقدار فرکانس طبیعی اول دارد. با توجه به شکل ۴-۱۹ افزایش طول قسمت قطور در حالتی که انتهای قطور ثابت است، به اندازه‌ی ۷ نانومتر مقدار ۴۰,۰۵ گیگاهرتز کاهش فرکانس طبیعی را در پی داشته‌است، درحالی‌که همین افزایش طول در قسمت باریک، فرکانس را ۱۵,۲۶ گیگاهرتز کاهش داده‌است (شکل ۴-۲۰).



شکل ۴-۱۹- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰,۱۰)-(۵,۵) که طول نانولوله‌ی باریک سازنده‌ی آن ثابت است و طول نانولوله‌ی قطور سازنده متغیر است.

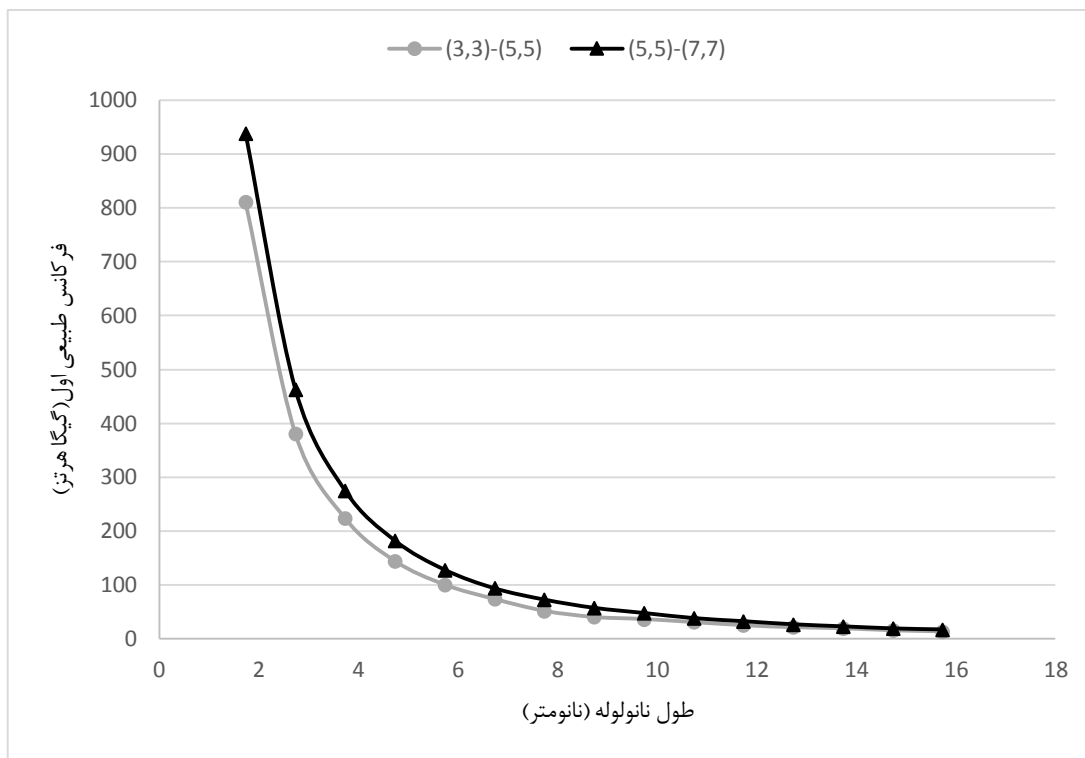




شکل ۴-۲۰- فرکانس طبیعی های اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) که طول نانولوله ی قطور سازنده ی آن ثابت است و طول نانولوله ی باریک سازنده متغیر است.

#### ۱۰-۴- تأثیر قطر بر فرکانس طبیعی

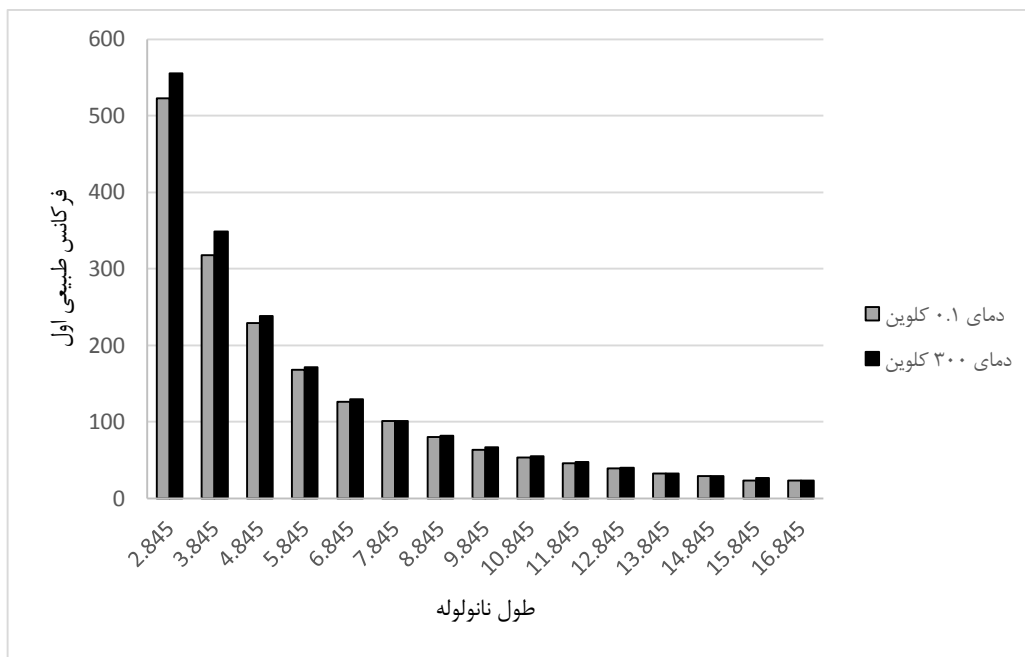
در این بخش ارتعاشات چند نمونه از هتروجانکشن های از نوع آرمچیر با شرایط مرزی یک-سرگیردار که قطر آنها به طور یکنواخت افزایش می یابد، مورد بررسی قرار می گیرد. هتروجانکشن های مورد نظر، با نانولوله های سازنده ی از نوع آرمچیر، و کایرالیته ی آنها (۵،۵)-(۳،۳)، (۷،۷)-(۵،۵) می باشد. نانولوله های سازنده ای که در این قسمت استفاده شده اند، (۳،۳)، (۵،۵) و (۷،۷)، به ترتیب با قطر ۰،۴۰۷، ۰،۶۷۸ و ۰،۹۴۹ می باشند. از آنجایی که قطر آنها دارای یک روند افزایشی ثابتی است، هتروجانکشن های ذکر شده نیز، دارای اختلاف قطر یکسان هستند. اختلاف قطر یکسان و از طرفی آرمچیر بودن همه ی آنها، باعث می شود که طول ناحیه ی اتصال، در همه ی آنها یکسان باشد. لذا می توان مقایسه ی بهتری بین این هتروجانکشن ها داشت. این نتایج در شکل ۴-۲۱ نشان داده شده است. مشاهده می شود که با افزایش قطر نانولوله های سازنده با کایرالیته ی یکسان، فرکانس طبیعی افزایش می یابد.



شکل ۴-۲۱- تأثیر قطر نانولوله‌های سازنده‌ی هتروجانکشن در فرکانس طبیعی آنها

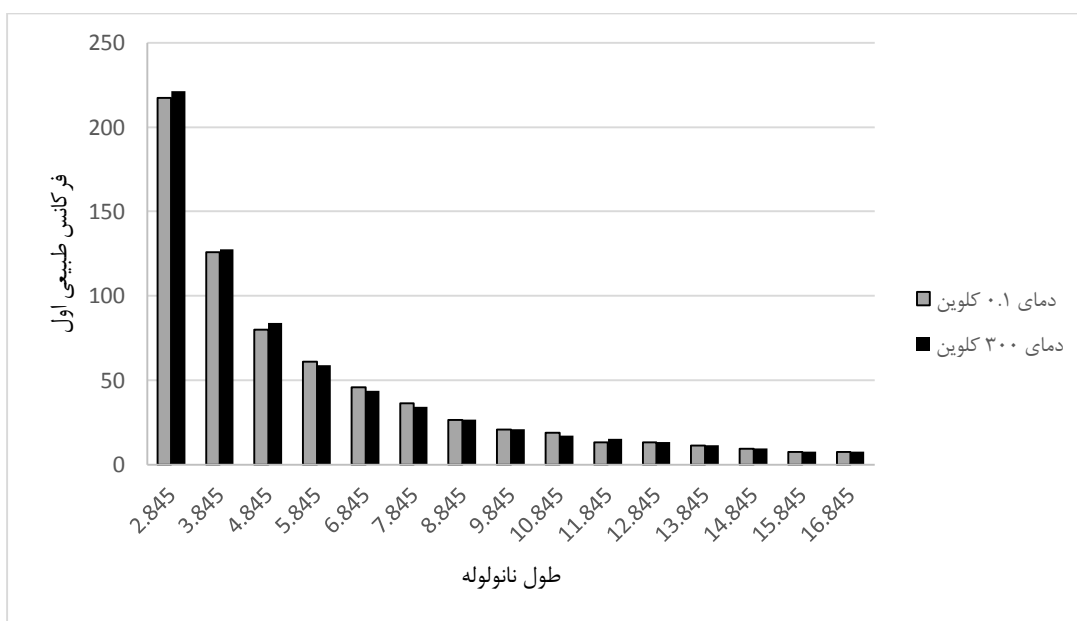
#### ۴-۱۱- تأثیر دما در فرکانس طبیعی هتروجانکشن‌ها

همانطور که قبلاً گفته شد، یکی از ویژگی‌های روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی که آن را از سایر روش‌های در مقیاس اتم متمایز می‌کند، تعیین دمای سیستم می‌باشد. جهت کنترل دمای سیستم حین ارتعاش از دماپا استفاده می‌شود، که اجازه‌ی تعیین دمای دلخواه را می‌دهد. در این بخش ارتعاشات هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) با طول‌های مختلف و شرایط مرزی یک‌سرگیردار و دوسرگیردار در دو دمای ۳۰۰ و ۰٫۱ کلوین شبیه‌سازی شد؛ یعنی در دو دمای اتاق و پایین‌ترین دمای موجود. برای کد لمپس امکان تنظیم دماپا روی صفر کلوین وجود ندارد؛ به این علت که اگر قرار است اتم‌ها طی اجرای برنامه نوسان داشته‌باشند، پس دمای آنها نمی‌تواند صفر باشد. نتایج این شبیه‌سازی با شرایط مرزی یک‌سرگیردار که اتم‌های انتهای قطور آن ثابت شده‌اند، در شکل ۴-۲۲ ترسیم شده- است. با دقت در شکل ۴-۲۲ مشاهده می‌شود که فرکانس طبیعی این هتروجانکشن در طول‌های مختلف، در دمای ۳۰۰ کلوین بیشتر از همان فرکانس طبیعی‌ها در دمای ۰٫۱ کلوین می‌باشد.

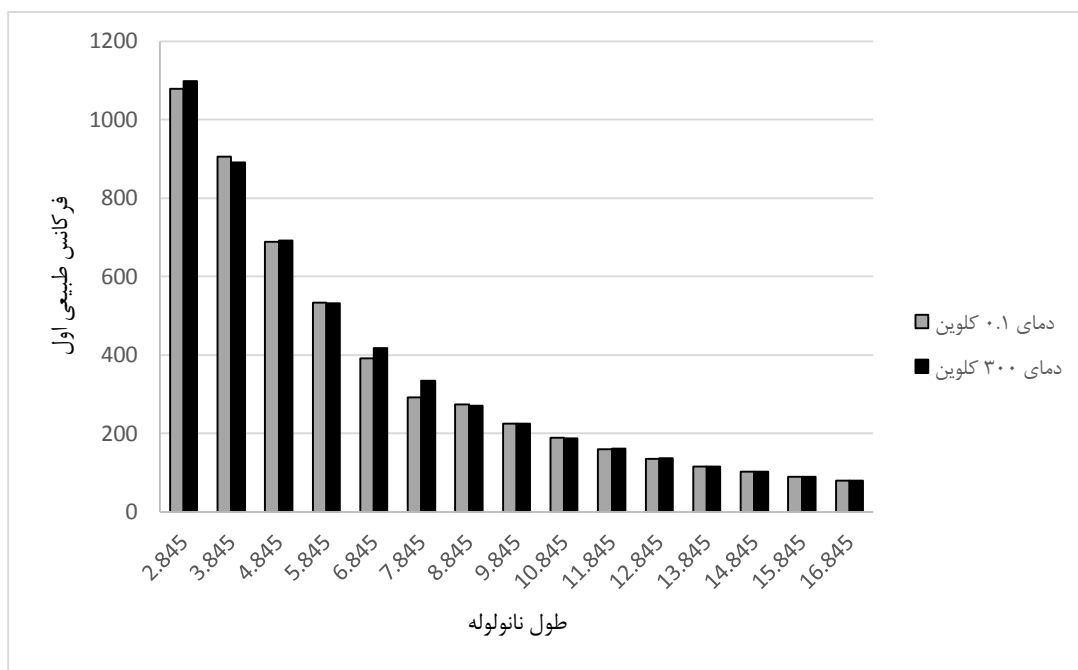


شکل ۴-۲۲- فرکانس طبیعی اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) با شرایط مرزی یک سرگیردار(انتهای قطور ثابت) در دو دمای ۰،۱ و ۳۰۰ کلوین

فرکانس طبیعی‌های این هتروجانکشن با شرایط مرزی یک سرگیردار که اتم‌های انتهایی باریک آن ثابت شده‌اند، در شکل ۴-۲۳، و شرایط مرزی دوسرگیردار در شکل ۴-۲۳ نمایش داده شده‌اند. با توجه به این دو شکل، هیچ نظم خاصی بین فرکانس‌ها در دو دمای ۰ و ۳۰۰ کلوین مشاهده نمی‌شود.



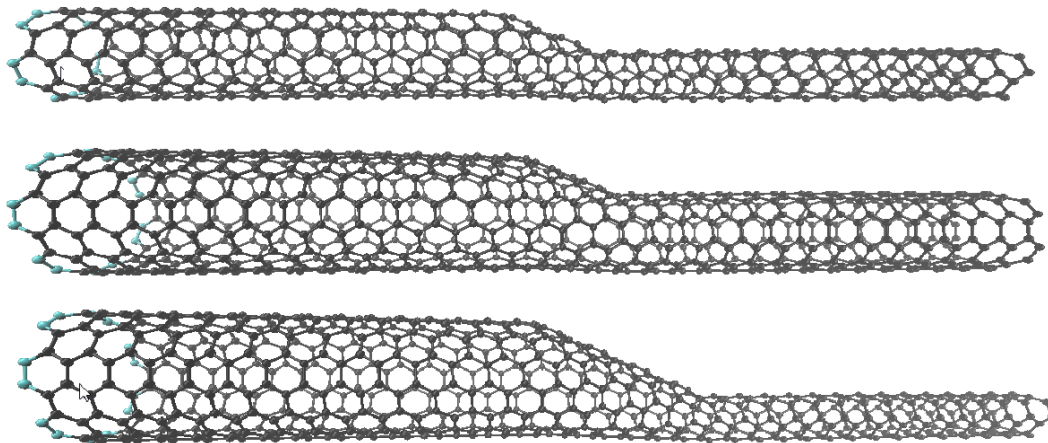
شکل ۴-۲۳- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) با شرایط مرزی یک سرگیردار(انتهای باریک ثابت) در دو دمای ۰،۱ و ۳۰۰ کلوین



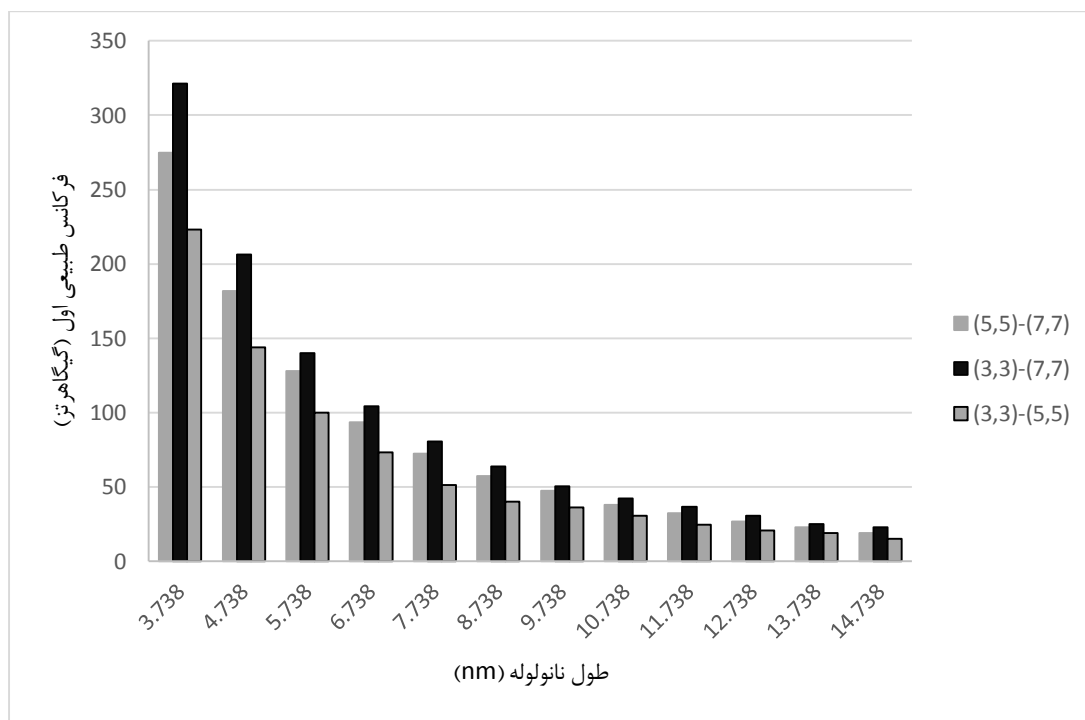
شکل ۴-۲۴- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)–(۵،۵) با شرایط مرزی دوسرگیردار در دو دمای ۰،۱ و ۳۰۰ کلوین

#### ۴-۱۲- ارتعاشات هتروجانکشن با اختلاف قطر زیاد نانولوله‌های سازندهی آنها

اختلاف قطر نانولوله‌های سازندهی هتروجانکشن‌های (۵،۵)–(۳،۳) و (۷،۷)–(۵،۵)، ۰،۲۷۱ نانومتر است؛ که در بخش ۴-۱۰- فرکانس‌های مربوطه ارائه شد. در این بخش نتیجهی شبیه‌سازی ارتعاشات نانولولهی هتروجانکشن (۷،۷)–(۳،۳) که اختلاف قطر دو نانولولهی سازندهی آن ۰،۵۴۲ نانومتر می‌باشد، مورد بررسی قرار می‌گیرد. این اختلاف قطر دوبرابر مقدار آن، در هتروجانکشن‌های ذکرشده می‌باشد. لذا فرکانس طبیعی‌های اول هر سه هتروجانکشن یک‌جا آورده می‌شود، که مقایسهی بهتری صورت پذیرد. ساختار نانولوله‌ها در شکل ۴-۲۵ و نتایج شبیه‌سازی در شکل ۴-۲۶ ترسیم شده‌است. شرایط مرزی به‌صورت یک‌سرگیردار در نظر گرفته شده و فرکانس‌ها در طول‌های مختلف محاسبه شده‌است. با توجه به شکل، فرکانس طبیعی هتروجانکشن (۷،۷)–(۳،۳)، بیشتر از فرکانس طبیعی هتروجانکشن‌های (۵،۵)–(۳،۳) و (۷،۷)–(۵،۵) می‌باشد.



شکل ۴-۲۵- هتروجانکشن‌های (۵،۵)-(۷،۷)، (۳،۳)-(۵،۵)، (۳،۳)-(۷،۷) و (۵،۵)-(۷،۷) با طول یکسان ۷،۷۳۸ نانومتر و شرایط مرزی یک‌سرگیردار به تعداد اتم‌های به ترتیب ۵۰۴، ۷۵۶ و ۶۹۰

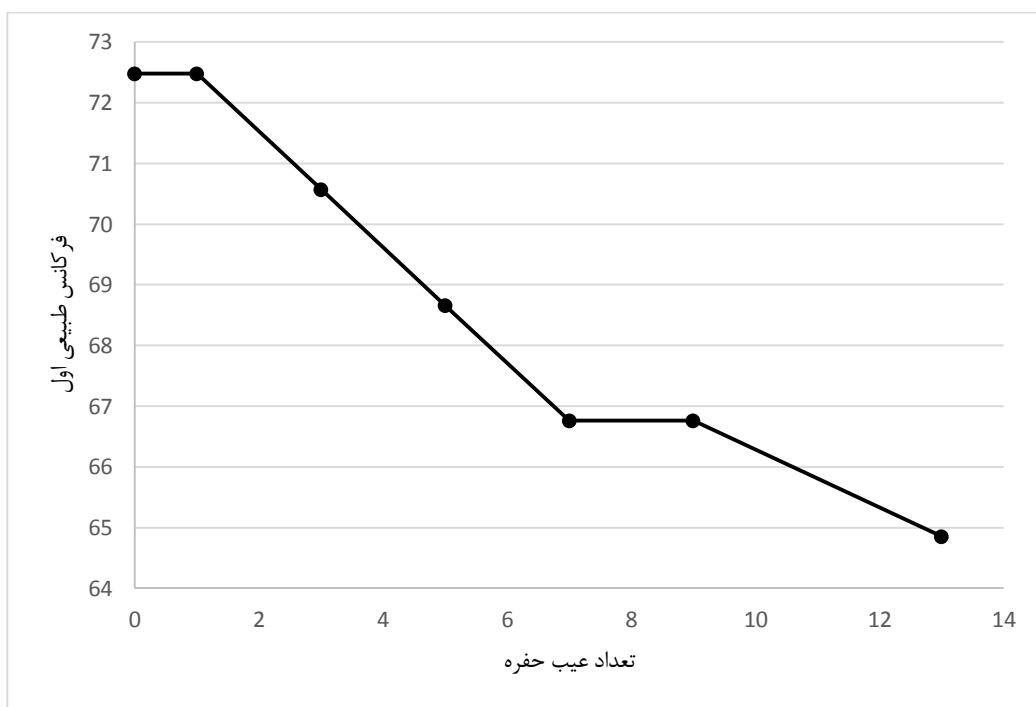


شکل ۴-۲۶- فرکانس طبیعی هتروجانکشن‌های (۵،۵)-(۷،۷)، (۳،۳)-(۵،۵)، (۳،۳)-(۷،۷) یک‌سرگیردار (انتهای قطور ثابت)

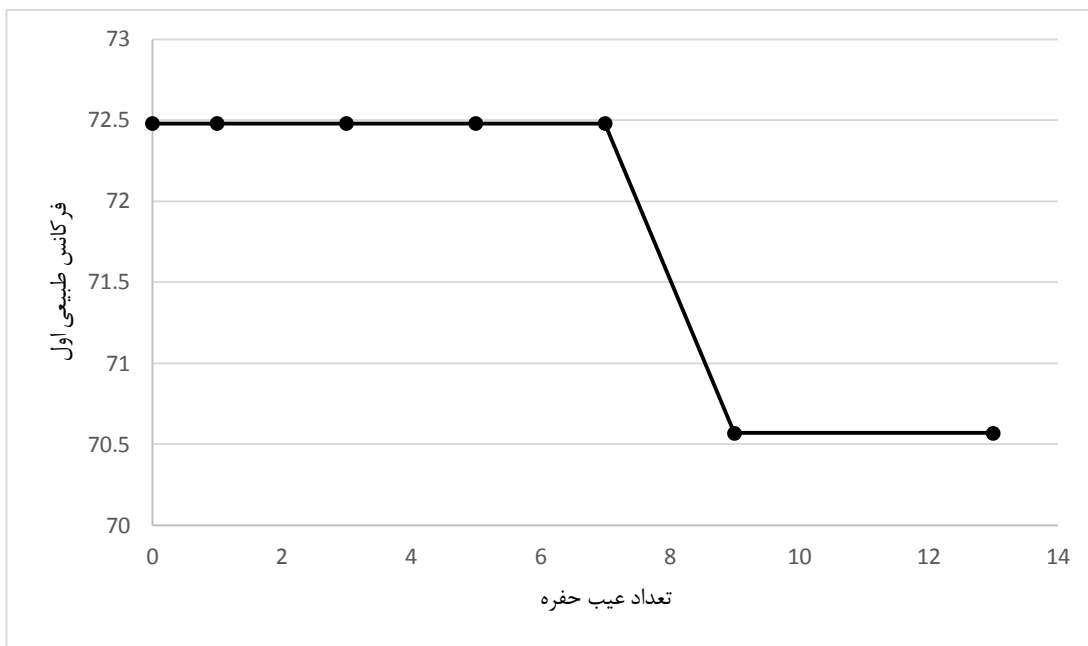
#### ۴-۱۳- بررسی ارتعاشات هتروجانکشن با عیب حفره

در این بخش به شبیه‌سازی ارتعاشات هتروجانکشن (۵،۵)-(۳،۳) با عیب حفره پرداخته می‌شود.

طول هتروجانکشن مورد بررسی ۶,۷۳۸ نانومتر که از ۴۴۰ اتم تشکیل شده است. شرایط مرزی یک-سرگردار است که اتمهای انتهای قطور ثابت فرض شده اند. ابتدا تأثیر تک‌عیب حفره در طول آن بررسی شد که تغییر در فرکانس طبیعی مشاهده نشد و فقط دامنه‌ی فرکانس متغیر بود که البته نظم خاصی نداشت؛ لذا ارتعاشات در حالتی بررسی می‌شود که تعداد محدودی عیب حفره به‌طور یکنواخت در طول هتروجانکشن پخش شده‌اند. وجود این حفره‌ها در دو حالتی که در قسمت بالایی و زیرین هتروجانکشن باشند بررسی شده و نتایج به ترتیب در شکل ۴-۲۷ و شکل ۴-۲۸ نشان داده شده‌اند. این شکل فرکانس را بر اساس تعداد عیوب حفره نشان می‌دهد. فرکانس طبیعی ایده‌آل این نانولوله‌ی خاص ۷۲,۴۸ گیگاهرتز می‌باشد. با توجه به شکل، مشاهده می‌شود که افزایش تعداد عیوب به‌طور کلی باعث کاهش فرکانس طبیعی می‌شود.

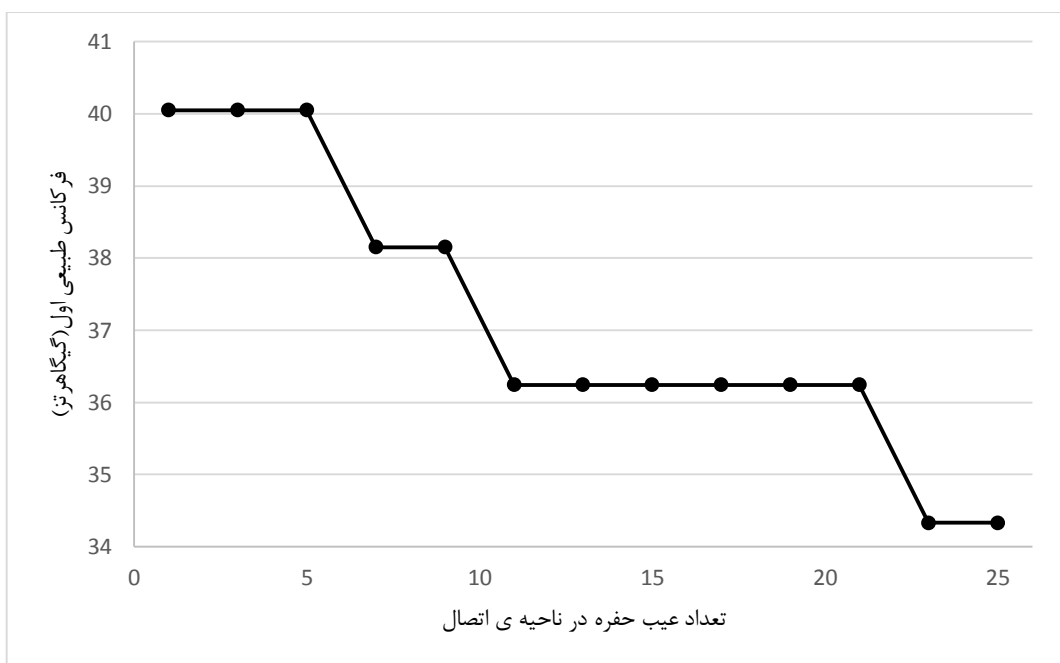


شکل ۴-۲۷- تأثیر تعداد عیب حفره بر فرکانس طبیعی (عیوب حفره قسمت بالایی هتروجانکشن می‌باشند)



شکل ۴-۲۸- تأثیر تعداد عیب حفره بر فرکانس طبیعی (عیوب حفره قسمت زیرین هتروجانکشن می‌باشند)

شکل ۴-۲۹ ارتعاشات هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) که دارای عیوب حفره در ناحیه‌ی اتصال دو نانولوله‌ی سازنده می‌باشد را نشان می‌دهد.



شکل ۴-۲۹- فرکانس طبیعی‌های اول هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) با عیوب حفره در ناحیه‌ی اتصال دو نانولوله‌ی ساده





فصل ۵-

# جمع بندی و پیشنهادها

## ۵-۱- جمع بندی

کربن به خاطر نقش مهمی که در پیوندهای مولوکولهای بنیادی در زندگی ما دارد، و به خاطر طبیعت منحصر بفرد پیوند کربن-کربن، بسیار مورد توجه قرار می گیرد. این طبیعت متمایز در پیوند کربن-کربن، به آن اجازه می دهد تا ساختارهای جالبی از جمله نانولوله های کربنی، که شاید بتوان گفت که از هر نانوساختار دیگری پتانسیل کاربردی بیشتری دارد، را می دهد. خواص مکانیکی و رفتار شگفت انگیز نانولوله های کربنی باعث جذب روز افزون جامعه مهندسی مکانیک به سمت خود می شود.

در این پایان نامه ارتعاشات نانولوله های کربنی هتروجانکشن با شرایط مرزی مختلف و طول های متفاوت با کیرالیتی های آرم چیر و زیگزاگ بررسی شدند. شرایط مرزی به کار رفته یک سرگیردار و دوسرگیردار بودند. شرایط مرزی یک سرگیردار نیز در دو حالت متفاوت که یک بار اتم های انتهای قطور نانولوله و یک بار اتم های انتهای باریک نانولوله ثابت فرض شدند، مورد بررسی قرار گرفتند. ابتدا شبیه سازی هایی برای یک هتروجانکشن با شرایط یکسان و تعداد گام زمانی متفاوت انجام شد، تا تعداد گام زمانی مناسب جهت تعیین فرکانس محاسبه شود، که تعداد ۵۰۰۰۰۰ گام انتخاب شد. جهت اعتبارسنجی راه حل نتایج فرکانس طبیعی نانولوله ی ساده ی (۵،۵) در این پژوهش با نتایج دو آن و همکاران [۷۰] که به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی بود مقایسه شد و میانگین خطای نسبی ۲،۲۹ درصد محاسبه شد. سپس نتایج هتروجانکشن به روش شبیه سازی دینامیک مولکولی با روش عددی اجزای محدود [۴۶] مقایسه شد که میانگین درصد خطای روش اجزای محدود ۷،۴۵ درصد بود. با شبیه سازی ارتعاشات هتروجانکشن با نانولوله های همگن آرم چیر تشکیل دهنده ی (۵،۵) و (۳،۳) با طول های مختلف در بازه ی ۱،۷۳۸ تا ۱۵،۷۳۸ نانومتر و شرایط مرزی یک سرگیردار نشان داده شد که افزایش طول باعث کاهش فرکانس طبیعی می شود. محدوده ی فرکانس طبیعی بین ۱۳ تا ۸۱۰ گیگاهرتز متغیر بود که در شکل ۴-۶ نشان داده شد. این نتایج برای هتروجانکشن با نانولوله های زیگزاگ نیز صحت دارد. در بخش ۴-۶ ارتعاشات هتروجانکشن (۱۰،۱۰)-(۵،۵) با طول ۱۵ نانومتر و نانولوله های سازنده ی آن یعنی (۵،۵) و (۱۰،۱۰) مورد بررسی قرار گرفتند و با یکدیگر مقایسه شدند. نتایج نشان داد که اگر نانولوله های هتروجانکشن از انتهای با انتهای قطور ثابت شود، فرکانس های آنها بیشتر از نانولوله های همگن سازنده شان با همان طول ۱۵ نانومتر می شود. و اگر انتهای با انتهای باریک ثابت شود، فرکانس های آنها کمتر از فرکانس های نانولوله های سازنده شان می شود. در بخش ۴-

۶ ارتعاشات هتروجانکشن با شرایط مرزی دوسرگیردار بررسی شدند و با حالت یک‌سرگیردار مقایسه شدند و همانطور که انتظار می‌رفت، دیده شد که فرکانس‌ها در حالت دوسرگیردار بیشتر از یک-سرگیردار می‌باشد. در بخش ۴-۷ ارتعاشات هتروجانکشن‌های هم‌محور و ناهم‌محور با کایرالیتهی (۱۰،۱۰)-(۵،۵) و طول‌های یکسان (در بازه‌ی طولی متفاوت) و شرایط مرزی یک‌سرگیردار انتها قطور ثابت و انتها باریک ثابت، با یکدیگر مقایسه شدند و نتایج نشان داد که فرکانس طبیعی هم‌محور در ۹۳ درصد موارد بیشتر از ناهم‌محور بود. در بخش بعدی هتروجانکشن‌های با قطر متفاوت مورد بررسی قرار گرفتند. هتروجانکشن‌های انتخابی با کایرالیتهی‌های (۵،۵)-(۳،۳) و (۷،۷)-(۵،۵) بودند و مشاهده شد که فرکانس‌های (۷،۷)-(۵،۵) بیشتر بودند، لذا می‌توان نتیجه گرفت که در هتروجانکشن‌های از یک نوع (در اینجا آرم‌چیر) افزایش قطر باعث افزایش فرکانس می‌شود. در بخش ۴-۹ تأثیر دما بر فرکانس طبیعی بررسی شد و دیده شد افزایش دما در حالتی که انتهای قطور هتروجانکشن ثابت است، باعث افزایش فرکانس می‌شود. ولی در شرایط مرزی دیگر (انتهای باریک ثابت و دوسرگیردار) نظم خاصی مشاهده نشد. قابل ذکر است که دماهای مورد آزمایش ۰،۱ و ۳۰۰ کلوین بودند. در بخش ۴-۱۰ هتروجانکشن‌های با اختلاف قطر زیاد بررسی شدند. در این بخش هتروجانکشن‌های (۵،۵)-(۳،۳)، (۷،۷)-(۵،۵) و (۷،۷)-(۳،۳) مورد شبیه‌سازی قرار گرفتند. اختلاف قطر در (۳،۳)-(۵،۵) و (۷،۷)-(۵،۵)، ۰،۲۷۱ نانومتر، و در (۳،۳)-(۷،۷)، ۰،۵۴۲ نانومتر می‌باشد. نشان داده شد که فرکانس-های (۷،۷)-(۳،۳) بیشتر از فرکانس‌های (۵،۵)-(۳،۳) و (۷،۷)-(۵،۵) می‌باشد. و در بخش آخر عیوب حفره بررسی شدند. در یک هتروجانکشن خاص، با افزایش تعداد حفره‌ها که به‌طور یکنواخت در طول آن پخش شده‌اند، باعث کاهش فرکانس طبیعی می‌شود. همچنین اگر عیوب در ناحیه‌ی اتصال باشد با افزایش تعداد آن فرکانس طبیعی کاهش می‌یابد.

## ۵-۲- پیشنهادها

در این پژوهش ارتعاشات هتروجانکشن‌های کربنی در حالت‌های هم‌محور و ناهم‌محور با شرایط مرزی مختلف و طول‌های متفاوت مورد بررسی قرار گرفت. همچنین به تأثیر دما و عیب حفره بر روی فرکانس طبیعی پرداخته شد. برای پژوهش‌های آینده موارد زیر پیشنهاد می‌شود.

- بررسی ارتعاشات هتروجانکشن‌های دوجداره که از یک نوع کایرالیته با قطرهای متفاوت تشکیل شده‌اند؛ مانند هتروجانکشن دوجداره‌ی تشکیل شده از (۵،۵)-(۳،۳) و (۷،۷)-(۵،۵).
- بررسی ارتعاشات هتروجانکشن‌ها در حالت خمیده و یا کشیده‌شده در راستای طول همچنین به صورت پیچیده‌شده در راستای طول
- محاسبه‌ی فرکانس هتروجانکشن‌ها در حالت یک‌سر بسته
- بررسی فرکانس‌های هتروجانکشن در یک محیط آبی یا در یک میدان مغناطیسی یا الکتریکی
- بررسی نانولوله‌های دارای انشعاب (Y و T شکل)

## فهرست منابع

- [1] G. M. Whitesides, "Nanoscience, nanotechnology, and chemistry," *Small*, vol. 1, no. 2, pp. 172-179, 2005.
- [2] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and P. C. Eklund, *Science of fullerenes and carbon nanotubes: their properties and applications*. Elsevier, 1996.
- [3] P. J. F. Harris, *Carbon nanotube science: synthesis, properties and applications*. Cambridge University Press, 2009.
- [4] M. Monthieux and V. L. Kuznetsov, "Who should be given the credit for the discovery of carbon nanotubes?," *Carbon*, vol. 44, no. 9, pp. 1621-1623, 2006.
- [5] S. Iijima, "Helical microtubules of graphitic carbon," *nature*, vol. 354, no. 6348, p. 56, 1991.
- [6] L. Radushkevich and V. Lukyanovich, "O strukture ugleroda, obrazujucesja pri termiceskom razlozenii okisi ugleroda na zeleznom kontakte," *Zurn Fisic Chim*, vol. 26, no. 1, pp. 88-95, 1952.
- [7] W. Li, J. Wen, M. Sennett, and Z. Ren, "Clean double-walled carbon nanotubes synthesized by CVD," *Chemical Physics Letters*, vol. 368, no. 3-4, pp. 299-306, 2003.
- [8] A. Oberlin, M. Endo, and T. Koyama, "Filamentous growth of carbon through benzene decomposition," *Journal of crystal growth*, vol. 32, no. 3, pp. 335-349, 1976.
- [9] J. Hector, *Introduction to microelectromechanical (MEM) microwave systems*. Artech House on Demand, 1999.
- [10] C. Li and T.-W. Chou, "Single-walled carbon nanotubes as ultrahigh frequency nanomechanical resonators," *Physical review B*, vol. 68, no. 7, p. 073405, 2003.
- [11] P. M. Ajayan and O. Z. Zhou, "Applications of carbon nanotubes," in *Carbon nanotubes*: Springer, 2001, pp. 391-425.
- [12] R. H. Baughman, A. A. Zakhidov, and W. A. De Heer, "Carbon nanotubes--the route toward applications," *science*, vol. 297, no. 5582, pp. 787-792, 2002.
- [13] K. Narasimhamurthy and R. Paily, "High-performance local back gate thin-film field-effect transistors using sorted carbon nanotubes on an amino-silane treated hafnium oxide surface," *Semiconductor Science and Technology*, vol. 26, no. 7, p. 075002, 2011.
- [14] M. Meyyappan, *Carbon nanotubes: science and applications*. CRC press, 2004.
- [15] J. Han, A. Globus, R. Jaffe, and G. Deardorff, "Molecular dynamics simulations of carbon nanotube-based gears," *Nanotechnology*, vol. 8, no. 3, p. 95, 1997.
- [16] A. Bianco, K. Kostarelos, and M. Prato, "Applications of carbon nanotubes in drug delivery," *Current opinion in chemical biology*, vol. 9, no. 6, pp. 674-679, 2005.
- [17] B. Bourlon, D. C. Glattli, C. Miko, L. Forró, and A. Bachtold, "Carbon nanotube based bearing for rotational motions," *Nano Letters*, vol. 4, no. 4, pp. 709-712, 2004.
- [18] S. Frank, P. Poncharal, Z. Wang, and W. A. De Heer, "Carbon nanotube quantum resistors," *Science*, vol. 280, no. 5370, pp. 1744-1746, 1998.
- [19] J.-C. Charlier, "Defects in carbon nanotubes," *Accounts of chemical research*, vol. 35, no. 12, pp. 1063-1069, 2002.
- [20] E. Saether, "Transverse mechanical properties of carbon nanotube crystals. Part II: sensitivity to lattice distortions," *Composites science and technology*, vol. 63, no. 11, pp. 1551-1559, 2003.

- [21] M. Ouyang, J.-L. Huang, C. L. Cheung, and C. M. Lieber, "Atomically resolved single-walled carbon nanotube intramolecular junctions," *Science*, vol. 291, no. 5501, pp. 97-100, 2001.
- [22] K. Tserpes and P. Papanikos, "The effect of Stone–Wales defect on the tensile behavior and fracture of single-walled carbon nanotubes," *Composite Structures*, vol. 79, no. 4, pp. 581-589, 2007.
- [23] M. M. S. Fakhrabadi, A. Amini, and A. Rastgoo, "Vibrational properties of two and three junctioned carbon nanotubes," *Computational Materials Science*, vol. 65, pp. 411-425, 2012.
- [24] R. Chowdhury, S. Adhikari, and J. Mitchell, "Vibrating carbon nanotube based bio-sensors," *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 42, no. 2, pp. 104-109, 2009.
- [25] T. Natsuki, Q.-Q. Ni, and M. Endo, "Analysis of the vibration characteristics of double-walled carbon nanotubes," *Carbon*, vol. 46, no. 12, pp. 1570-1573, 2008.
- [26] J. Yoon, C. Ru, and A. Mioduchowski, "Terahertz vibration of short carbon nanotubes modeled as Timoshenko beams," *Transactions of the ASME-E-Journal of Applied Mechanics*, vol. 72, no. 1, pp. 10-17, 2005.
- [27] C. Wang, V. Tan, and Y. Zhang, "Timoshenko beam model for vibration analysis of multi-walled carbon nanotubes," *Journal of Sound and Vibration*, vol. 294, no. 4, pp. 1060-1072, 2006.
- [28] B. Liu, Y. Huang, H. Jiang, S. Qu, and K. Hwang, "The atomic-scale finite element method," *Computer methods in applied mechanics and engineering*, vol. 193, no. 17, pp. 1849-1864, 2004.
- [29] W. L. Jorgensen, D. S. Maxwell, and J. Tirado-Rives, "Development and testing of the OPLS all-atom force field on conformational energetics and properties of organic liquids," *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 118, no. 45, pp. 11225-11236, 1996.
- [30] S. Tracey, A. Palermo, J. P. H. Vazquez, and R. M. Lambert, "In Situ Electrochemical Promotion by Sodium of the Selective Hydrogenation of Acetylene over Platinum," *Journal of Catalysis*, vol. 179, no. 1, pp. 231-240, 1998.
- [31] R. S. Ruoff and D. C. Lorents, "Mechanical and thermal properties of carbon nanotubes," *carbon*, vol. 33, no. 7, pp. 925-930, 1995.
- [32] J. Héctor, *Introduction to microelectromechanical microwave systems*. Artech House, 2004.
- [33] S. Legoas, V. Coluci, S. Braga, P. Coura, S. Dantas, and D. Galvao, "Molecular-dynamics simulations of carbon nanotubes as gigahertz oscillators," *Physical review letters*, vol. 90, no. 5, p. 055504, 2003.
- [34] W. Guo, Y. Guo, H. Gao, Q. Zheng, and W. Zhong, "Energy dissipation in gigahertz oscillators from multiwalled carbon nanotubes," *Physical Review Letters*, vol. 91, no. 12, p. 125501, 2003.
- [35] Y. Zhao, C.-C. Ma, G. Chen, and Q. Jiang, "Energy dissipation mechanisms in carbon nanotube oscillators," *Physical review letters*, vol. 91, no. 17, p. 175504, 2003.
- [36] P. Liu, Y. Zhang, and C. Lu, "Oscillatory behavior of gigahertz oscillators based on multiwalled carbon nanotubes," *Journal of applied physics*, vol. 98, no. 1, p. 014301, 2005.
- [37] S. Legoas, V. Coluci, S. Braga, P. Coura, S. Dantas, and D. Galvao, "Gigahertz nanomechanical oscillators based on carbon nanotubes," *Nanotechnology*, vol. 15, no. 4, p. S184, 2004.

- [38] J. W. Kang and H. J. Hwang, "Operating frequency in a triple-called carbon-nanotube oscillator," *Journal of the Korean Physical Society*, vol. 49, no. 4, pp. 1488-1492, 2006.
- [39] J. L. Rivera, C. McCabe, and P. T. Cummings, "The oscillatory damped behaviour of incommensurate double-walled carbon nanotubes," *Nanotechnology*, vol. 16, no. 2, p. 186, 2004.
- [40] Y. Zhang, C. Wang, and V. Tan, "Assessment of Timoshenko beam models for vibrational behavior of single-walled carbon nanotubes using molecular dynamics," *Adv. Appl. Math. Mech*, vol. 1, no. 1, pp. 89-106, 2009.
- [41] G. Cao, X. Chen, and J. W. Kysar, "Strain sensing of carbon nanotubes: Numerical analysis of the vibrational frequency of deformed single-wall carbon nanotubes," *Physical Review B*, vol. 72, no. 19, p. 195412, 2005.
- [42] S. Ajori, R. Ansari, and M. Darvizeh, "On the vibrational behavior of single- and double-walled carbon nanotubes under the physical adsorption of biomolecules in the aqueous environment: a molecular dynamics study," *Journal of molecular modeling*, vol. 22, no. 3, p. 62, 2016.
- [43] S. I. Yengejeh, M. A. Zadeh, and A. Öchsner, "On the buckling behavior of connected carbon nanotubes with parallel longitudinal axes," *Applied Physics A*, vol. 115, no. 4, pp. 1335-1344, 2014.
- [44] S. Filiz and M. Aydogdu, "Axial vibration of carbon nanotube heterojunctions using nonlocal elasticity," *Computational Materials Science*, vol. 49, no. 3, pp. 619-627, 2010.
- [45] S. I. Yengejeh, M. Akbarzade, and A. Öchsner, "Numerical characterization of the shear behavior of hetero-junction carbon nanotubes," in *Journal of Nano Research*, 2014, vol. 26, pp. 143-151: Trans Tech Publ.
- [46] S. I. Yengejeh, M. A. Zadeh, and A. Öchsner, "Numerical modeling of eigenmodes and eigenfrequencies of hetero-junction carbon nanotubes with pentagon-heptagon pair defects," *Computational Materials Science*, vol. 92, pp. 76-83, 2014.
- [47] W.-J. Lee and W.-S. Su, "Investigation into the mechanical properties of single-walled carbon nanotube heterojunctions," *Physical Chemistry Chemical Physics*, vol. 15, no. 27, pp. 11579-11585, 2013.
- [48] V. Parvaneh, M. Shariati, and H. Torabi, "Frequency analysis of perfect and defective SWCNTs," *Computational Materials Science*, vol. 50, no. 7, pp. 2051-2056, 2011.
- [49] Z. Yao, H. W. C. Postma, L. Balents, and C. Dekker, "Carbon nanotube intramolecular junctions," *Nature*, vol. 402, no. 6759, pp. 273-276, 1999.
- [50] G. Arora and S. I. Sandler, "Nanoporous carbon membranes for separation of nitrogen and oxygen: Insight from molecular simulations," *Fluid Phase Equilibria*, vol. 259, no. 1, pp. 3-8, 2007.
- [51] J. Li and H. Shen, "Analysis of longitudinal vibration band gaps in periodic carbon nanotube intramolecular junctions using finite element method," *AIP Advances*, vol. 5, no. 12, p. 127107, 2015.
- [52] M. Mohammadian, M. H. Abolbashari, and S. M. Hosseini, "The effects of connecting region length on the natural frequencies of straight and non-straight hetero-junction carbon nanotubes," *Computational Materials Science*, vol. 122, pp. 11-21, 2016.
- [53] J. Yoon, C. Ru, and A. Mioduchowski, "Flow-induced flutter instability of cantilever carbon nanotubes," *International Journal of Solids and Structures*,

- vol. 43, no. 11, pp. 3337-3349, 2006.
- [54] L. Wang and Q. Ni, "A reappraisal of the computational modelling of carbon nanotubes conveying viscous fluid," *Mechanics Research Communications*, vol. 36, no. 7, pp. 833-837, 2009.
- [55] T.-P. Chang and M.-F. Liu, "Flow-induced instability of double-walled carbon nanotubes based on nonlocal elasticity theory," *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, vol. 43, no. 8, pp. 1419-1426, 2011.
- [56] M. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and R. Saito, "Physics of carbon nanotubes," *Carbon*, vol. 33, no. 7, pp. 883-891, 1995.
- [57] C. White, D. Robertson, and J. Mintmire, "Helical and rotational symmetries of nanoscale graphitic tubules," *Physical Review B*, vol. 47, no. 9, p. 5485, 1993.
- [58] H. Rafii-Tabar, *Computational physics of carbon nanotubes*. Cambridge University Press, 2008.
- [59] W. K. Liu, E. Karpov, S. Zhang, and H. Park, "An introduction to computational nanomechanics and materials," *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 193, no. 17, pp. 1529-1578, 2004.
- [60] F. H. Stillinger and T. A. Weber, "Computer simulation of local order in condensed phases of silicon," *Physical review B*, vol. 31, no. 8, p. 5262, 1985.
- [61] S. J. Stuart, A. B. Tutein, and J. A. Harrison, "A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions," *The Journal of chemical physics*, vol. 112, no. 14, pp. 6472-6486, 2000.
- [62] D. W. Brenner, "Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films," *Physical Review B*, vol. 42, no. 15, p. 9458, 1990.
- [63] A. K. Rappé, C. J. Casewit, K. Colwell, W. Goddard Iii, and W. Skiff, "UFF, a full periodic table force field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations," *Journal of the American chemical society*, vol. 114, no. 25, pp. 10024-10035, 1992.
- [64] S. Arghavan, "Vibration of carbon nano-structures," Ph.D. dissertation, Dept. of Mechanical and Materials Engineering, University of Western Ontario, 2012.
- [65] S. PLIMPTON, "LAMMPS: molecular dynamics simulator. h ttp," *lammmps.sandia.gov*, 2011.
- [66] J. H. Walther, R. Jaffe, T. Halicioglu, and P. Koumoutsakos, "Carbon nanotubes in water: structural characteristics and energetics," *The Journal of Physical Chemistry B*, vol. 105, no. 41, pp. 9980-9987, 2001.
- [67] M. Sammalkorpi, A. Krasheninnikov, A. Kuronen, K. Nordlund, and K. Kaski, "Mechanical properties of carbon nanotubes with vacancies and related defects," *Physical Review B*, vol. 70, no. 24, p. 245416, 2004.
- [68] S. Ajori and R. Ansari, "Vibrational characteristics of diethyltoluenediamines (DETDA) functionalized carbon nanotubes using molecular dynamics simulations," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 459, pp. 58-61, 2015.
- [69] S. Ajori, R. Ansari, and M. Darvizeh, "Vibration characteristics of single-and double-walled carbon nanotubes functionalized with amide and amine groups," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 462, pp. 8-14, 2015.
- [70] W. Duan, C. Wang, and Y. Zhang, "Calibration of nonlocal scaling effect parameter for free vibration of carbon nanotubes by molecular dynamics," *Journal of applied physics*, vol. 101, no. 2, p. 024305, 2007.



## Abstract

In This study, free vibrations of hetero-junction CNTs were investigated under various boundary conditions at different lengths. This was accomplished by use of molecular dynamics simulations, based on the Lennard-Jones potential energy functions. Hetero-junction CNTs are constructed of two different tubes where pentagon–heptagon pair defects play a significant role in the transition region. These particular CNTs are considerably important based on their outstanding characteristics. In this study, natural frequencies of these hetero-junction CNTs were obtained and compared with the corresponding ones which were calculated from a finite element model. In addition, the computational results of hetero-junctions were obtained and also compared with their constituent homogeneous CNTs. It has been shown that the natural frequency of straight hetero-junction CNTs was greater the one of their constituent CNTs with the same length where the wider tube had a clamped boundary condition. But, for the case where thinner tube was clamped, the natural frequency was lower than their constructive nanotubes with the same length. The frequency of Hetero-junction CNTs was decreased as the length was increased. Furthermore, increasing the nanotube diameters was caused increasing the frequency of hetero-junction CNTs.

In this research, the coaxial junctions were also examined and compared with their common type. It was seen that this configuration would lead to increasing their natural frequency. Also, for a typical joint, the effect of temperature on the natural frequency was studied and it was observed that increasing temperature resulted in increasing the natural frequency, only where the wider tube was clamped. Finally, in this study, the effect of the cavity defect in the region of junction on the natural frequency was investigated and some important results were obtained.

**Keywords:** Carbon nanotubes, Hetero-junction (Intramolecular), Molecular Dynamics (MD) simulation, Free vibration, Natural frequency.





**Shahrood University of Technology**  
**Faculty of Mechanical and Mechatronics Engineering**

**Sc. Thesis in Applied Mechanics Engineering**

**Free Vibration Analysis of Heterojunction Carbon  
Nanotubes Using Molecular Dynamics Simulation**

By

**Danyal Darvishi Karizi**

Supervised by

**Dr. Amir Jalali**

January 2018