

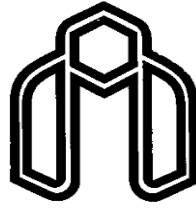
Abstract

In the present thesis, firstly the buckling and vibrational behavior of defective single-walled carbon nanotubes under axial, torsional and bending loads has been investigated using the ABAQUS software. Further, the influence of various vacancy and stone-wales defects on the critical buckling load, related displacement, torsional and bending moment and related angle has been studied. Then, after proposing a new model by adding van der Waals force, identical analyses have been performed for the perfect and defective double-walled carbon nanotubes. In this section, the buckling behavior of DWCNTs under axial, torsional and bending loadings and the effect of van der Waals force, number and position of defects on these CNTs were obtained.

The necessity of getting special experimental conditions and also time consuming of atomic simulations were the major motivation for proposing this new structural mechanics model, which contains the proper accuracy and short runtime, and it does not have the limitations of previous methods. Actually, the present model is a combination of other structural models which can remove the most of their errors.

In order to model the axial and torsional interactions, the nonlinear connectors and for angle variation and van der Waals interactions, the nonlinear springs were used. Then, the obtained results were compared to the continuum model results and it can be shown that the buckling behavior of CNTs have many similarities to the buckling behavior of cylindrical shells (with a wall thickness of 0.066 nm and Young's modulus of 5.5 TPa). Finally, the results of the present model were compared to some of the reliable molecular, structural and continuum models. It can be concluded that the present model has high accuracy and low time and also it has capabilities that the existing structural models do not have.

Keywords: Structural mechanics, Carbon nanotubes, Defects, Axial loading, Bending and torsional moment



Shahrood University of Technology
Faculty of Mechanical Engineering

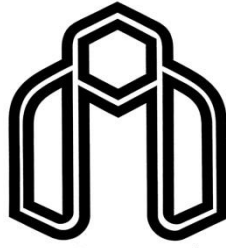
**Modeling and Numerical Analysis for
Buckling Behavior of Defected Double-Walled
Carbon Nanotubes under Axial, Bending and
Torsional Loadings**

Hamid Torabi

**Supervisor:
Dr. M. Shariati**

July 2011

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده مهندسی مکانیک

گروه طراحی جامدات

مدلسازی و تحلیل عددی رفتار کمانش نانولوله های دو جداره کربنی معیوب تحت بارگذاری محوری، خمشی و پیچشی

حمید ترابی

استاد راهنما :

دکتر محمود شریعتی

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

تیرماه ۱۳۹۰

دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده مکانیک
گروه طراحی جامدات

پایان نامه کارشناسی ارشد آقای حمید ترابی

تحت عنوان:

مدلسازی و تحلیل عددی رفتار کمانش نانولوله های دو جداره کربنی معیوب تحت بارگذاری
محوری، خمشی و پیچشی

در تاریخ ۱۳۹۰/۴/۲۰ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد ارزیابی و با درجه
..... مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	اساتید مشاور	امضاء	اساتید راهنما
			دکتر محمود شریعتی

امضاء	نماینده تحصیلات تکمیلی	امضاء	اساتید داور
	دکتر گردویی		دکتر حمیدرضا ایپک چی
			دکتر هادی قادری

تقدیم به:

او که در حضور گرمش زبان از کلام قاصر است، به اسطوره صبر و مقاومت، به او که یاریگرم در تمام سفتی‌ها بود.

مادر عزیزم

و او که وجودش موجب مباحثات، به دیار ابد رفتنش سبب اندوه، و روحش در همه حال موجب تسلی خاطر می‌گردد.

پدر عزیزم، مرحوم مهندس غلامحسین ترابی

تشر و قدردانی:

نگارنده بر خود می‌داند که از زحمات بی‌دریغ، تلاش‌های بی‌وقفه و راهنمایی‌های ارزشمند استاد گرامی جناب آقای دکتر محمد شریعتی در راستای انجام این پروژه در طول دو سال گذشته تشکر و قدردانی نماید.

همچنین با سپاس فراوان از همسر مهربان و عزیزم که همواره حامی و مشوق من بوده است.

حمید ترابی

دانشجوی کارشناسی ارشد گروه جامدات،

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی شاهرود،

تیرماه ۱۳۹۰.

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

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

تابستان ۱۳۹۰

چکیده

در پایان نامه پیش‌رو در ابتدا رفتار کمانشی و ارتعاشاتی نانولوله‌های کربنی تک جداره معیوب تحت بارهای محوری فشاری، ممان پیچشی و خمشی و شرایط مرزی مختلف با استفاده از نرم‌افزار المان محدود ABAQUS مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین تأثیر انواع عیوب تهی‌جای و استون-والس بر بار بحرانی کمانش، جابه‌جایی متناظر آن، ممان پیچشی و خمشی کمانش و زاویه پیچش و خمش متناظر آن مورد مطالعه قرار گرفته است. در ادامه پس از پیشنهاد مدلی جدید با افزودن نیروی واندروالس، آنالیزهای مشابه بر روی نانولوله‌های دوجداره سالم و معیوب نیز انجام گردیده است. در این بخش رفتار کمانشی نانولوله‌های کربنی دوجداره تحت بارگذاری محوری، پیچشی و خمشی و تأثیر نیروی واندروالس، تعداد و موقعیت عیوب بر روی آن‌ها مورد تحلیل قرار گرفته است. بعلاوه با افزودن نیروی غیرخطی واندروالس خواص مکانیکی این نوع نانولوله‌ها بدست آمده است. ضرورت فراهم آوردن شرایط خاص آزمایشگاهی و نیز زمان بر بودن شبیه‌سازی‌های اتمی عامل و محرک اصلی جهت ارائه‌ی این مدل ساختاری جدید می‌باشد؛ که علاوه بر داشتن دقت مناسب و زمان اجرای کوتاه، محدودیت‌های روش‌های پیشین را ندارد. در حقیقت مدل ارائه شده ترکیبی از مدل‌های ساختاری دیگر می‌باشد که تا حد زیادی عیوب آنها را از بین برده است. به منظور مدل کردن برهم‌کنش‌های کششی و پیچشی، اتصال دهنده‌های غیر خطی، جهت مدل کردن برهم‌کنش‌های زاویه‌ای و واندروالس، فنر غیر خطی مورد استفاده قرار گرفته است. در ادامه نتایج بدست آمده با نتایج حاصل از مدل پیوسته مقایسه شده است و می‌توان نشان داد که رفتارهای کمانشی نانولوله‌های کربنی شباهت زیادی با رفتارهای کمانشی پوسته‌های استوانه‌ای (با ضخامت 0.066 nm و مدول یانگ $5/5 \text{ TPa}$) دارد. در پایان نیز نتایج بدست آمده با برخی از نتایج حاصل از مدل‌های مولکولی، ساختاری و پیوسته معتبر مقایسه شده است. از مقایسه‌های انجام گرفته می‌توان نتیجه گرفت مدل ساختاری ارائه شده دارای دقت بالا، زمان و هزینه کم اجرا می‌باشد و علاوه بر آن دارای قابلیت‌هایی می‌باشد که مدل‌های ساختاری گذشته فاقد آن می‌باشد.

کلمات کلیدی: مکانیک ساختاری، نانولوله‌های کربنی، عیوب، بارگذاری محوری، ممان پیچشی و خمشی

لیست مقالات مستخرج از پایان نامه

- 1- V. Parvaneh, M. Shariati, **H. Torabi**, Frequency analysis of perfect and defective SWCNTs. Computational Materials Science, (2011), 50(7), 2051-2056.
- 2- V. Parvaneh, M. Shariati, **H. Torabi**, A. M. Majd Sabeti, Influence of boundary conditions and defects on the buckling behavior of SWCNTs via a structural mechanics approach. Journal of Nanomaterials, (2011), 297902, (6 pages).
- 3- V. Parvaneh, M. Shariati, A. M. Majd Sabeti, **H. Torabi**, Torsional buckling behavior of SWCNTs using a molecular structural mechanics approach considering vacancy defects. Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures, (2011), (Accepted).
- 4- V. Parvaneh, M. Shariati, **H. Torabi**, Bending buckling behavior of perfect and defective single-walled carbon nanotubes via a structural mechanics model. Journal of Acta Mechanica, (2011), (Accepted).
- 5- **H. Torabi**, M. Shariati, Buckling behavior of perfect and defective DWCNTs via a structural mechanics approach. Materials Research bulletin, (2011), (Submitted).
- 6- **H. Torabi**, M. Shariati, A. Lashkari Zadeh, Torsional and bending buckling of DWCNTs via a structural mechanics approach. Materials Research bulletin, (2011), (Submitted).
- 7- A. Lashkari Zadeh, M. Shariati, **H. Torabi**, Buckling analysis of carbon nanotube bundles under axial compressive, bending and torsional loadings via a structural mechanics model. Physics Letter A, (2011), (Submitted).
- 8- V. Parvaneh, M. Shariati, **H. Torabi**, Vibration Analysis of Single-Walled Carbon Using a Structural Mechanics Approach. International Conference on Nanotechnology, (2010), Ottawa, Ontario, Canada.
- 9- V. Parvaneh, M. Shariati, **H. Torabi**, Torsional and Bending Buckling Behavior of Perfect and Defective Single-Walled Carbon Nanotubes. 3rd Conference on Nanostructures (NS2010), (2010), Kish Island, Iran.
- 10- A. Lashkari Zadeh, M. Shariati, **H. Torabi**, Buckling analysis of carbon nanotube bundles via a structural mechanics model. 19th Annual Conference on Mechanical Engineering (ISME), May (2011), Birjand, Iran.

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

.....	چکیده	أ
.....	فهرست شکل ها	و
.....	فهرست جدول ها	ی
.....	فهرست علائم و نشانه ها	ک
.....	مقدمه	۱

فصل ۱- مروری بر روابط موجود و مطالعات پیشین

.....	مقدمه	۴
.....	۱-۱ ساختار نانوله های کربنی	۴
.....	۲-۱ کشف نانولوله	۵
.....	۳-۱ انواع نانولوله های کربنی	۶
.....	۱-۳-۱ نانولوله کربنی تک جداره (SWNT)	۷
.....	۲-۳-۱ نانولوله کربنی چند جداره (MWNT)	۸
.....	۴-۱ ویژگی های نانولوله های کربنی	۱۰
.....	۱-۴-۱ قطر نانولوله های کربنی	۱۱
.....	۵-۱ نواقص نانولوله های کربنی	۱۲
.....	۶-۱ مدل های نانولوله های کربنی	۱۲
.....	۱-۶-۱ مدل های پیوسته	۱۴
.....	۲-۶-۱ مدل های مولکولی	۱۹
.....	۱-۲-۶-۱ مکانیک کوانتومی	۲۱
.....	۲-۲-۶-۱ مکانیک مولکولی	۲۳
.....	۳-۲-۶-۱ شبیه سازی های مولکولی و نتایج	۲۹
.....	۳-۶-۱ مدل سازی به روش مکانیک ساختاری	۳۲
.....	۱-۳-۶-۱ وابستگی مکانیک ساختاری و مکانیک مولکولی	۳۳
.....	۲-۳-۶-۱ کارهای انجام شده در زمینه مکانیک ساختاری	۳۶
.....	۷-۱ آزمایش های تجربی و نتایج	۴۱

فصل ۲- مدلسازی نانولوله های کربنی

.....	مقدمه	۴۵
.....	۱-۲ نرم افزار ABAQUS	۴۵

۴۶Buckle تحلیل ۱-۱-۲
۴۷Frequency تحلیل ۲-۱-۲
۴۷Static, Riks آنالیز ۳-۱-۲
۴۷شبيه سازی نانولوله‌های کربنی سالم ۲-۲
۴۷نانولوله های کربنی تک جداره ۱-۲-۲
۴۸مرحله ایجاد اتم‌های کربن به صورت کره‌های تو خالی ۱-۱-۲-۲
۴۸مرحله‌ی تعیین خواص مکانیکی ۲-۱-۲-۲
۴۸مونتاز اتم‌های کربن ۳-۱-۲-۲
۴۹اعمال برهم کنش‌های بین اتمی ۴-۱-۲-۲
۵۲بار گذاری و شرایط مرزی ۵-۱-۲-۲
۵۲المان بندی اتم‌های مونتاز شده ۶-۱-۲-۲
۵۳بخش حل مسئله ۷-۱-۲-۲
۵۴نانولوله های کربنی دو جداره ۲-۲-۲
۵۴مدل سازی نانولوله تک جداره داخلی و خارجی ۱-۲-۲-۲
۵۴اعمال نیروی واندوالس ۲-۲-۲-۲
۵۷بخش حل مسئله ۳-۲-۲-۲
۵۷شبيه‌سازی نانولوله‌های کربنی معيوب ۳-۲
۶۰نانولوله های تک جداره ۱-۳-۲
۶۰نانولوله های دو جداره ۲-۳-۲
۶۲شبيه سازی پوسته‌های استوانه‌ای سالم (مدل پیوسته) ۴-۲
۶۲شبيه‌سازی پوسته‌های استوانه‌ای معيوب (مدل پیوسته) ۵-۲
۶۳مقایسه نانولوله های کربنی تک و دو جداره ۶-۲

فصل ۳- ارائه نتایج

۶۶مقدمه
۶۶تحلیل نانولوله های تک جداره ۱-۳
۶۷تاثیر شرایط مرزی بر روی کمانش محوری ۱-۱-۳
۶۷کمانش محوری نانولوله های تک جداره سالم ۱-۱-۱-۳
۶۹کمانش محوری نانولوله های تک جداره معيوب ۲-۱-۱-۳
۷۲کمانش نانولوله‌های کربنی تحت گشتاور پیچشی ۲-۱-۳
۷۲کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی سالم ۱-۲-۱-۳

۲-۲-۱-۳	کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی معیوب.....	۷۴
۳-۱-۳	کمانش نانولوله‌های کربنی تحت ممان خمشی.....	۷۸
۴-۱-۳	تحلیل فرکانسی نانولوله های سالم و معیوب.....	۸۲
۲-۳	تحلیل نانولوله های دو جداره.....	۸۵
۱-۲-۳	تعیین مدول الاستیسیته نانولوله دوجداره.....	۸۵
۲-۲-۳	کمانش نانولوله‌های کربنی دو جداره تحت نیروی محوری.....	۸۷
۳-۲-۳	کمانش نانولوله‌های کربنی تحت گشتاور پیچشی.....	۹۰
۴-۲-۳	کمانش نانولوله‌های کربنی تحت ممان و بار خمشی.....	۹۳

فصل ۴- مقایسه و نتیجه گیری

	مقدمه.....	۹۹
۱-۴	نانولوله های تک جداره.....	۹۹
۱-۱-۴	مقایسه نتایج حاصل از تاثیر شرایط مرزی بر روی کمانش محوری.....	۹۹
۲-۱-۴	مقایسه‌ی نتایج حاصل از کمانش تحت ممان پیچشی.....	۱۰۳
۳-۱-۴	مقایسه نتایج حاصل از کمانش تحت ممان خمشی.....	۱۰۸
۴-۱-۴	نتایج حاصل از تحلیل فرکانسی نانولوله های سالم و معیوب.....	۱۱۲
۲-۴	نانولوله های دو جداره.....	۱۱۴
۱-۲-۴	مقایسه نتایج حاصل از کمانش محوری.....	۱۱۴
۲-۲-۴	مقایسه نتایج حاصل از کمانش پیچشی.....	۱۱۷
۳-۲-۴	مقایسه نتایج حاصل از کمانش خمشی.....	۱۱۹
۳-۴	نتیجه گیری.....	۱۲۱
۴-۴	پیشنهادها و ادامه کار.....	۱۲۶
	فهرست مراجع.....	۱۲۷

فهرست شکل ها

صفحه

عنوان

- شکل (۱-۱) (الف) مولکولهای فلورین ها، (ب) SWNTs باساختارهای متفاوت ۴
- شکل (۲-۱) کاشف نانولوله های کربنی سومیو ایجیما (۱۹۹۱) ۵
- شکل (۳-۱) انواع نانولوله ها از نظر تعداد جداره ۶
- شکل (۴-۱) ساختار پیوند شش ضلعی پایه برای یک لایه گرافیت ۷
- شکل (۵-۱) مکانیزم ساخت نانولوله کربن ۷
- شکل (۶-۱) ساختار گسترده ی انواع نانولوله ی کربنی ۸
- شکل (۷-۱) (الف) نانولوله کربن چند جداره ی منفرد. (ب) نانولوله کربن تک جداره (ج) نوک ساختار یک نانولوله کربن چند جداره انتهایی بسته. (د) یک نانولوله کربن چند جداره ۹
- شکل (۸-۱) نانولوله کربنی چند جداره ۱۰
- شکل (۹-۱) شمای یک ساختار پیوسته معادل مقایسه شده با مدل مولکولی ۱۶
- شکل (۱۰-۱) شماتیک مراحل مدل سازی پیوسته معادل ۱۹
- شکل (۱۱-۱) متغیرهای معمول مکانیک مولکولی ۲۴
- شکل (۱۲-۱) مقایسه عبارات کشش پیوند به ازای چهار پتانسیل مکانیک مولکولی ۲۷
- شکل (۱۳-۱) مقیاس طولی و زمانی روش های متنوع شبیه سازی مادی ۲۹
- شکل (۱۴-۱) مدل هایی از عیوب در نانولوله های تک و چند جداره معیوب ۳۲
- شکل (۱۵-۱) کمانش پیچشی نانولوله دوجداره ۳۲
- شکل (۱۶-۱) معادل سازی مکانیک ساختاری و مکانیک مولکولی برای برهم کنشهای کووالانس و غیر کووالانسی بین اتم های کربن ۳۴
- شکل (۱۷-۱) خرپای میله ای برای شبیه سازی نیروی واندروالس ۳۶
- شکل (۱۸-۱) شکل مد کمانشی در اثر اعمال بار فشاری به انتهای آزاد ۳۸
- شکل (۱۹-۱) نمایی از ساختمان المان تیر به عنوان پیوند C-C ۴۰
- شکل (۲۰-۱) شبیه سازی برهم کنش های واندروالس بین جداره های نانولوله های کربنی ۴۰
- شکل (۱-۲) نانولوله های مونتاژ شده از نوع زیگ-زاگ ۴۹
- شکل (۲-۲) نانولوله های مونتاژ شده از نوع آرمچیر ۴۹
- شکل (۳-۲) نحوه ی قرار گرفتن دستگاه مختصات محلی بر روی مرکز اتم های کربن ۵۰
- شکل (۴-۲) نحوه ی قرار گرفتن فنرهای خمشی بین اتم های کربن ۵۰
- شکل (۵-۲) نحوه ی قرار گرفتن اتصالات بین اتم های کربن ۵۱
- شکل (۶-۲) مجموع فنرهای خمشی و اتصالات بین اتم های کربن ۵۱
- شکل (۷-۲) نتایج حاصل از کمانش نمونه ای از نانولوله ها، (الف) نما از بالا، (ب) نمای عمودی ۵۳
- شکل (۸-۲) نحوه مدل سازی نانولوله دو جداره (الف) نانولوله داخلی (ب) نانولوله خارجی (ج) نانولوله دو جداره ۵۴
- شکل (۹-۲) نمودار نیروی لنارد- جونز بر حسب فاصله بین اتمی ۵۵
- شکل (۱۰-۲) نانولوله دوجداره رسم شده در نرم افزار MATLAB ۵۶
- شکل (۱۱-۲) نانولوله دوجداره همراه با نیروی واندروالس ۵۶
- شکل (۱۲-۲) نتایج حاصل از کمانش نمونه ای از نانولوله های دوجداره با طول ۵,۱۶۵ نانومتر تحت بار فشاری ۵۷

- شکل (۱۳-۲) انواع عیوب تهی‌جای در نظر گرفته شده در تحلیل‌ها..... ۵۸
- شکل (۱۴-۲) انواع عیوب استون- والس در نظر گرفته شده در تحلیل‌ها..... ۵۹
- شکل (۱۵-۲) مقایسه عیوب استون- والس و هیبرید ایجاد شده..... ۵۹
- شکل (۱۶-۲) عیوب تهی‌جای بکار رفته در نانولوله‌های دو جداره معیوب..... ۶۱
- شکل (۱۷-۲) پوسته‌های دارای گشودگی، (الف): متناظر با زیگ-زاگ، (ب): متناظر با آرمچیر..... ۶۳
- شکل (۱۸-۲) شرایط مرزی در تحلیل کمانش محوری: (الف) دو سر گیردار، (ب) دو سر ساده و (ج) یک سر آزاد..... ۶۷
- شکل (۲-۳) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰)..... ۶۸
- شکل (۳-۳) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های آرمچیر (۷،۷)..... ۶۹
- شکل (۴-۳) تاثیر عیب ترکیبی بر روی مدهای کمانشی نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰) برای طول‌های مختلف..... ۷۰
- شکل (۵-۳) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ (۱۲،۰)..... ۷۱
- شکل (۶-۳) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های معیوب آرمچیر..... ۷۱
- شکل (۷-۳) نمودار گشتاور پیچشی بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰)..... ۷۲
- شکل (۸-۳) نمودار زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰)..... ۷۳
- شکل (۹-۳) شکل مد ناشی از کمانش نانولوله کربنی زیگ-زاگ (۱۲،۰)..... ۷۳
- شکل (۱۰-۳) نمودار گشتاور پیچشی بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های آرمچیر (۷،۷)..... ۷۴
- شکل (۱۱-۳) نمودار زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های آرمچیر (۷،۷)..... ۷۴
- شکل (۱۲-۳) نمودار گشتاور پیچشی بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ (۱۲،۰)..... ۷۵
- شکل (۱۳-۳) نمودار گشتاور پیچشی بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری نانولوله‌های معیوب آرمچیر (۷،۷)..... ۷۵
- شکل (۱۴-۳) شکل مدهای ناشی از کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی معیوب زیگ-زاگ (۱۲،۰) در طول‌های متفاوت..... ۷۶
- شکل (۱۵-۳) شکل مدهای ناشی از کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی معیوب آرمچیر (۷،۷) در طول‌های متفاوت..... ۷۷
- شکل (۱۶-۳) شماتیک موقعیت عیوب (A, B, C) و نحوه اعمال ممان خمشی به مدل..... ۷۸
- شکل (۱۷-۳) انحنای بحرانی کمانش خمشی بر حسب قطر نانولوله برای طول ۲۴ نانومتر..... ۷۹
- شکل (۱۸-۳) شکل کمانشی نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰) تحت ممان خمشی در طول‌های متفاوت..... ۷۹
- شکل (۱۹-۳) شکل کمانشی در خمش نانولوله‌های زیگ-زاگ معیوب با عیوب مختلف تهی‌جای و استون- والس در وسط..... ۸۰
- شکل (۲۰-۳) ممان کمانش خمشی نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰) با عیب تهی‌جای منفرد در موقعیت‌های مختلف..... ۸۱
- شکل (۲۱-۳) شکل کمانشی نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰) با عیب تهی‌جای منفرد در موقعیت‌های مختلف..... ۸۱
- شکل (۲۲-۳) شکل مد‌های تحلیل ارتعاشی نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰): (الف) سالم و (ب) معیوب..... ۸۳
- شکل (۲۳-۳) انتقال فرکانس پایه نانولوله زیگ-زاگ (۱۲،۰) با طول‌های مختلف نسبت به موقعیت عیب تهی‌جای تحت شرایط مرزی (الف) دو سر گیردار و (ب) یک سر آزاد..... ۸۴
- شکل (۲۴-۳) تاثیر عیوب بر انتقال فرکانس پایه نانولوله با نسبت‌های ظاهری مختلف تحت شرایط مرزی دو سر گیردار..... ۸۵
- شکل (۲۵-۳) (الف) شرایط مرزی و بارگذاری مدل ساختاری DWCNT و (ب) تغییر شکل یافته نانولوله دوجداره آرمچیر @7,7(12,12) با طول ۴/۰۵۸ نانومتر تحت کشش..... ۸۶
- شکل (۲۶-۳) بار بحرانی کمانش محوری بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله دوجداره آرمچیر..... ۸۸
- شکل (۲۷-۳) شکل مد سی نهم کمانش محوری برای نانولوله دوجداره آرمچیر با طول ۰,۹۸۳ نانومتر..... ۸۸

- شکل (۲۸-۳) کرنش بحرانی کمانش محوری بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله دوجداره آرمچیر ۸۹
- شکل (۲۹-۳) تاثیر عیوب تهی جای بر مد کمانش محوری نانولوله دوجداره آرمچیر با طول ۰,۹۸۳ نانومتر ۹۰
- شکل (۳۰-۳) گشتاور پیچشی بحرانی کمانش نانولوله‌های کربنی دو جداره آرمچیر بر حسب نسبت ظاهری ۹۱
- شکل (۳۱-۳) نمودار زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های دوجداره آرمچیر ۹۱
- شکل (۳۲-۳) شکل مدهای ناشی از کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی آرمچیر در طول‌های متفاوت ۹۲
- شکل (۳۳-۳) شکل مدهای ناشی از کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی دوجداره معیوب آرمچیر با طول ۰,۹۸۳ نانومتر ۹۲
- شکل (۳۴-۳) نمودار ممان خمشی بحرانی بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله دوجداره آرمچیر ۹۴
- شکل (۳۵-۳) نمودار زاویه‌ی خمش بحرانی بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله دوجداره آرمچیر ۹۴
- شکل (۳۶-۳) شکل مدهای ناشی از کمانش خمشی نانولوله‌های کربنی دو جداره در طول‌های متفاوت ۹۵
- شکل (۳۷-۳) شکل مدهای ناشی از کمانش خمشی نانولوله‌های کربنی معیوب آرمچیر با طول ۰,۹۸۳ نانومتر تحت ممان خمشی ۹۵
- شکل (۳۸-۳) نحوه اعمال بار خمشی در تحلیل کمانشی نانولوله‌های دوجداره آرمچیر ۹۶
- شکل (۳۹-۳) نمودار بار بحرانی خمش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های دوجداره آرمچیر ۹۷
- شکل (۴۰-۳) شکل مدهای ناشی از کمانش خمشی نانولوله‌های کربنی دوجداره تحت بار خمشی در طول‌های متفاوت ۹۷
- شکل (۱-۴) مقایسه نتایج مدل ارائه شده با مدل پیوسته برای بار کمانش بحرانی تحت شرایط مرزی: الف) دو سر گیردار، ب) دو سر ساده و ج) یک سر آزاد ۱۰۰
- شکل (۲-۴) نمودار بار بحرانی بی بعد شده کمانش و مقایسه بین مد کمانشی مدل حاضر و مدل پیوسته برای شرایط مرزی: الف) دو سر گیردار، ب) دو سر ساده و ج) یک سر آزاد ۱۰۱
- شکل (۳-۴) مقایسه بار بحرانی کمانش به ازای عیوب مختلف: الف) زیگ-زاگ، ب) آرمچیر ۱۰۲
- شکل (۴-۴) نمودارهای ممان پیچشی بحرانی بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های کربنی زیگ-زاگ و آرمچیر ۱۰۳
- شکل (۵-۴) نمودارهای زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های کربنی زیگ-زاگ و آرمچیر ۱۰۴
- شکل (۶-۴) نمودارهای ممان پیچشی بحرانی بر حسب نسبت ظاهری ۱۰۴
- شکل (۷-۴) نمودارهای زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت ظاهری ۱۰۵
- شکل (۸-۴) نمودار ضریب ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ ۱۰۶
- شکل (۹-۴) نمودار ضریب ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های معیوب آرمچیر ۱۰۶
- شکل (۱۰-۴) نمودار ضریب ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ ۱۰۷
- شکل (۱۱-۴) نمودار ضریب ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های معیوب آرمچیر ۱۰۷
- شکل (۱۲-۴) شکل مدهای کمانشی بدست آمده، تحت ممان پیچشی الف) مدل حاضر و ب) مدل پیوسته ۱۰۸
- شکل (۱۳-۴) مقایسه نتایج حاضر با نتایج مدل‌های معتبر موجود برای طول ۲۴ نانومتر (تاثیر قطر نانولوله بر روی انحنای بحرانی کمانش خمشی) ۱۰۸
- شکل (۱۴-۴) ممان بحرانی کمانش خمشی بر حسب نسبت ظاهری نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲ و ۰) سالم و معیوب ۱۰۹
- شکل (۱۵-۴) ممان بحرانی کمانش خمشی بر حسب نسبت ظاهری نانولوله‌های آرمچیر (۷ و ۷) سالم و معیوب ۱۱۰

- شکل (۴-۱۶) انحنای بحرانی کمانش خمشی بر حسب نسبت ظاهری نانولوله های زیگ-زاگ (۱۲۰ و ۱۲۰) سالم و معیوب
 ۱۱۰.....
- شکل (۴-۱۷) انحنای بحرانی کمانش خمشی بر حسب نسبت ظاهری نانولوله های آرمچیر (۷ و ۷) سالم و معیوب ۱۱۱
- شکل (۴-۱۸) مقایسه نتایج مدل ساختاری و نتایج مدل ساختاری تیر برای نانولوله های زیگ-زاگ (۱۲۰ و ۱۲۰) با شرایط
 مرزی الف) دو سر گیردار و ب) یک سر آزاد (تاثیر نسبت ظاهری بر روی فرکانس طبیعی)..... ۱۱۲
- شکل (۴-۱۹) نمودار فرکانس طبیعی برای نسبت های ظاهری مختلف نانولوله های زیگ-زاگ (۱۲۰ و ۱۲۰) سالم و معیوب
 با شرایط مرزی الف) دو سر گیردار و ب) یک سر آزاد..... ۱۱۴
- شکل (۴-۲۰) نمودار بار بحرانی کمانش محوری بر حسب طول نانولوله های تک و دوجداره..... ۱۱۵
- شکل (۴-۲۱) نمودار کرنش بحرانی بر حسب طول نانولوله های تک و دوجداره..... ۱۱۶
- شکل (۴-۲۲) نمودار گشتاور پیچشی بحرانی کمانش بر حسب طول نانولوله های تک و دوجداره..... ۱۱۸
- شکل (۴-۲۳) نمودار زاویه پیچش بحرانی کمانش بر حسب طول نانولوله های تک و دوجداره..... ۱۱۸
- شکل (۴-۲۴) نمودار ممان خمشی بحرانی کمانش بر حسب طول نانولوله های تک و دوجداره..... ۱۲۰
- شکل (۴-۲۵) نمودار ممان خمشی بحرانی کمانش بر حسب طول نانولوله های تک و دوجداره..... ۱۲۰

فهرست جدول ها

عنوان	صفحه
جدول (۱-۱) نحوه‌ی بدست آوردن قطر نانولوله با توجه به اندیس‌های آن ها	۱۱
جدول (۲-۱) خواص موادی نتیجه شده برای نانولوله از شبیه سازی های مولکولی	۳۰
جدول (۳-۱) مقایسه نتایج بدست آمده از مدل دینامیکی و پوسته پیوسته	۳۲
جدول (۴-۱) خواص مادی نتیجه شده برای نانولوله از آزمایش های تجربی مکانیکی	۴۲
جدول (۱-۲) پارامترهای به کار رفته برای مدل سازی برهم کنش های بین اتمی در نانولوله تک جداره	۵۲
جدول (۲-۲) پارامترهای به کار رفته در معادله لنارد- جونز (رابطه (۱-۲۱))	۵۵
جدول (۳-۲) مشخصات نانولوله های تک و دو جداره آرمچیر ساخته شده در نرم افزار آباکوس	۶۴
جدول (۱-۳) پارامترهای هندسی مدل ساختاری برای محاسبه مدول الاستیسیته	۸۷
جدول (۱-۴) فرکانس های طبیعی (GHz) حاصل از مدل حاضر و مدل MD	۱۱۳
جدول (۲-۴) بار بحرانی کمانش محوری نانولوله های دو جداره سالم و معیوب با طول های مختلف	۱۱۷
جدول (۳-۴) گشتاور پیچشی بحرانی کمانش نانولوله های دو جداره سالم و معیوب با طول های مختلف	۱۱۹
جدول (۴-۴) ممان خمشی بحرانی کمانش نانولوله های دو جداره سالم و معیوب با طول های مختلف	۱۲۱

فهرست علائم و نشانه‌ها

عنوان	علامت اختصاری
نانومتر	nm
آنگستروم	Å
نانولوله کربنی	CNT
نانولوله کربنی تک جداره	$SWCNT$
نانولوله کربنی دو جداره	$DWCNT$
نانولوله کربنی چند جداره	$MWCNT$
مدول کشسانی	E
مدول برشی	G
ضریب پواسون	ν
ضخامت نانولوله	t
طول نانولوله	L
قطر نانولوله	d
شعاع نانولوله	r
نسبت ظاهری	$\frac{L}{d}$
مدل المان محدود	FEM
دینامیک مولکولی	MD
مکانیک مولکولی	MM
کوانتوم مولکولی	QM
نیروی واندروالس	vdW
فرکانس پایه	f

مقدمه

نانولوله های کربنی به دلیل خواص بسیار فوق العاده مکانیکی و الکتریکی از سال ۱۹۹۱ که توسط ایجیما^۱ [۱] کشف شده اند، در کانون توجه محققان در سرتاسر جهان قرار گرفته اند و کارهای بسیار وسیعی در حوزه های مختلف در مورد این مواد صورت گرفته است.

پس از کشف نانولوله های کربنی محققین به انجام آزمایش بر روی این ساختار روی آوردند؛ اما صرف هزینه های مالی بسیار زیاد برای انجام این آزمایش ها، محققین را بر آن داشت تا با استفاده از روش های مختلف کامپیوتری به شبیه سازی رفتارهای این ماده بپردازند. از مهمترین این روش ها می توان به روش های پایه (ab-initio) ، شبیه سازی دینامیک مولکولی (MD) و روش Tight binding (ترکیبی از دو روش قبل) اشاره کرد. که البته در میان آنها روش ab-initio دقیق ترین روش می باشد. در تمامی مدل هایی که تاکنون ارائه شده است، کاستی ها و معایبی وجود دارد. این امر سبب شده تا محققین همچنان به دنبال روشی جامع و مطمئن باشند تا به وسیله ی آن بتوان نانولوله های کربنی را تحت بارگذاری ها و شرایط مرزی مختلف مورد بررسی قرار داد. البته باید اشاره کرد که روش دینامیک مولکولی از روش هایی می باشد که دارای قابلیت های بسیاری است؛ اما استفاده از آن نیاز به وقت و هزینه ی زیادی دارد و بکارگیری آن برای همه مقدر نمی باشد.

با توجه به توضیحات اشاره شده، در این پروژه به دنبال ساخت مدلی بوده ایم که علاوه بر داشتن قابلیت های گوناگون، عیوب مدل های گذشته را نیز برطرف نماید. در نهایت با مطالعات بسیار و بررسی مدل های گوناگون موفق به ارائه ی مدلی شدیم که با استفاده از روش مکانیک ساختاری ایجاد گردید و می توان به وسیله ی آن خواص مکانیکی نانولوله های کربنی دو جداره سالم و معیوب نظیر مدول الاستیسیته، مدول برشی، بار کمانش و کرنش بحرانی تحت بار گذاری ها (بار محوری، پیچشی و خمشی) و شرایط مرزی مختلف را مورد بررسی قرار داد.

^۱ Iijima

بر این اساس در فصل‌های پیش رو ابتدا مروری بر تحقیقات انجام شده در سال‌های گذشته صورت گرفته و تئوری‌های موجود در زمینه‌ی نانولوله‌های کربنی مرور شده است. در فصل دوم تئوری‌های مورد استفاده در ایجاد مدل ارائه شده و چگونگی شبیه‌سازی آن در نرم‌افزار آباکوس^۱ [۲] به صورت مختصر بیان شده است. در فصل سوم تحلیل نانولوله‌های کربنی تک جداره و دوجداره مورد نظر، تحت بارگذاری‌ها و شرایط مرزی مختلف مورد بررسی قرار گرفته‌اند. در فصل چهارم نیز مقایسه‌ای میان نتایج حاصل از مدل ساختاری ارائه شده با نتایج حاصل از مدل‌های معتبر دیگر نیز به عمل آمده است و نتیجه‌گیری‌های نهائی حاصل شده است.

^۱ ABAQUS

فصل اول

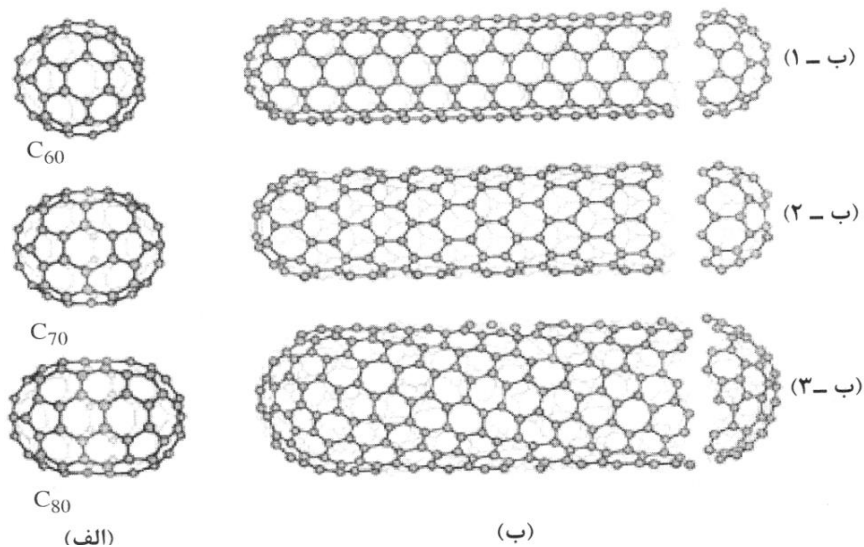
مروری بر روابط موجود و مطالعات پیشین

فصل ۱- مقدمه

عصر حاضر را شاید بتوان عصر کربن نام نهاد؛ زیرا این ماده کاربرد وسیعی در صنایع مختلف پیدا کرده است. در این بین، نانولوله های کربن^۱ و فلورن ها^۲، توجه دانشمندان را بیش از دیگر شکل های کربن به خود جلب کرده اند.

۱-۱ ساختار نانوله های کربنی

نانولوله عضوی از خانواده فلورین هاست، که باکیبال را نیز شامل می شود. فلورین خوشه بزرگی از اتم های کربن در قالب یک قفس بسته می باشد و از ویژگی های منحصر بفردی برخوردارند (شکل (۱-۱)).



شکل (۱-۱) (الف) مولکولهای فلورین ها، (ب) SWNTs با ساختارهای متفاوت. تفاوت در ساختار به راحتی در سر باز لوله ها نشان داده شده است. (ب-۱) ساختار آرمچیر^۳، (ب-۲) ساختار زیگزاگ^۴، (ب-۳) ساختار چیرال^۵ [۳]

¹ Carbon Nanotube (CNT)

² Fullerene

³ Armchair

⁴ Zigzag

⁵ Chiral

۲-۱ کشف نانولوله

در سال ۲۰۰۶ مارک مونتیوکس^۱ و ولادیمیر کوزنشف^۲ در مقاله ای به بیان مبدأ و منشأ جالب، و اغلب تحریف شده ی نانولوله ها پرداخته اند [۳]. اغلب مقالات معروف و علمی، کشف لوله های نانومتری توخالی کربنی را به سومیو ایجیما^۳ از NEC در سال ۱۹۹۱ نسبت می دهند (شکل (۲-۱)).



شکل (۲-۱) کاشف نانولوله های کربنی سومیو ایجیما (۱۹۹۱)

قبل از اولین تولید مصنوعی و یافتن فلورین های کوچکتر C_{60} و C_{70} این باور وجود داشت که این مولکول های کروی بزرگ عموماً ناپایدار هستند؛ اما محاسبات چند دانشمند روسی [۴ و ۵] نشان داد که مولکول C_{60} در حالت گازی پایدار بوده و شکاف باند بزرگی دارد. مشابه اغلب کشفیات بزرگ علمی دیگر، فلورین ها نیز به طور تصادفی کشف شدند. در سال ۱۹۸۵ کروتو و اسمالی [۶] با نتایج عجیبی در طیف جرمی کربن تبخیر یافته روبرو شدند. در پی این حادثه فلورین ها کشف شدند و پایداری آنها در حالت گازی اثبات گشت. اولین مشاهدات فلورین ها در طیف نگاری جرمی غیر منتظره بود [۶]، و اولین روش تولید انبوه توسط کرچمر^۴ و هافمن^۵ برای سال ها، قبل از پی بردن به آنکه این روش، فلورین تولید می کند، استفاده می شده است [۷].

جستجو برای دیگر فلورین ها نیز آغاز شد و در سال ۱۹۹۱ نانولوله های کربنی توسط ایجیما و همکارانش کشف شدند [۱]. کشف نانولوله های کربنی توسط ایجیما در ماده حل نشدنی لوله های

¹ Marc Monthieux

² Vladimir Kuznetsov

³ Sumio Iijima

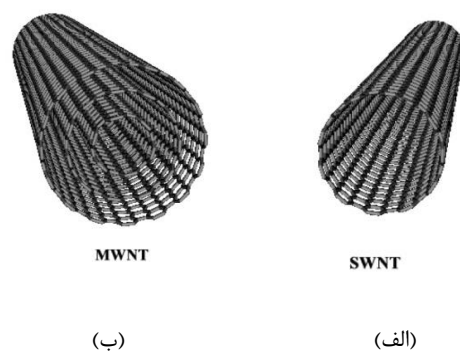
⁴ Kratchmer

⁵ Huffman

گرافیتی سوخته شده در دوده حاصله از تخلیه ی قوس الکتریکی دو میله ی کربنی، سرچشمه ی مهمه امروزی در مورد نانولوله ی کربنی است. این یک کشف اتفاقی دیگر در ارتباط با فلورین ها بود؛ هر چند برای تولید فلورین های Buckminster، روش تخلیه ی قوس الکتریکی به خوبی شناخته شده بود [۷]. از آن پس محققین زیادی در سراسر جهان به مطالعه این نانولوله ها مشغولند. به نظر می رسد، بجاست که بگوییم نانولوله ها به طرز غیر متقربه ای کشف شده اند. لیکن در یک مقاله که توسط ابرلین^۱، اندو^۲ و کویاما^۳ در سال ۱۹۷۶ چاپ شد، فیبرهای توخالی کربنی در ابعاد نانومتری به روش رشد بخار، به وضوح نشان داده شده بودند [۸]. همچنین در سال ۱۹۸۷، در آمریکا یک اختراع به نام جرج تنت^۴ برای تولید "فیبرهای مجزای استوانه ای کربن"^۵ با قطری بین ۳/۵ تا ۷۰ نانومتر و طولی حدود ۱۰۲ برابر قطر آن ثبت شد [۹]. اخیراً، اغلب، اعتبار کشف نانولوله های کربنی را به اندو نسبت می دهند و اعتبار شفاف سازی ساختار نانولوله ها به ایجیما داده می شود.

۳-۱ انواع نانولوله های کربنی

نانولوله ها در دو دسته ی اصلی وجود دارند: نانولوله های تک جداره^۶ (SWNTs) و نانولوله های چند جداره^۷ (MWNTs) (شکل (۳-۱)).



شکل (۳-۱) انواع نانولوله ها از نظر تعداد جداره، (الف): تک جداره، (ب): چند جداره [۱۰].

¹ Oberlin

² Endo

³ Koyama

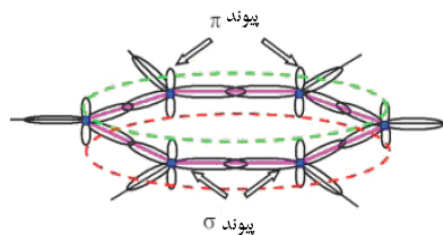
⁴ George Tennet

⁵ Cylindrical discrete carbon fibrils

⁶ Single-Walled Nanotubes (SWNTs)

⁷ Multi-Walled Nanotubes (MWNTs)

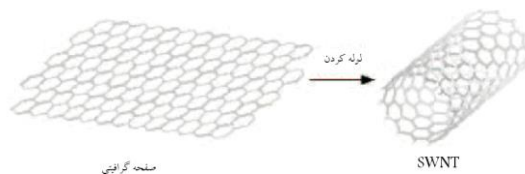
نانولوله‌ها تماماً از پیوند sp^2 تشکیل شده‌اند، مشابه گرافیت (شکل (۴-۱)). این ساختار پیوند، از پیوند sp^3 که در الماس وجود دارد قوی‌تر است، و استحکام منحصر به فردی به این مولکول‌ها می‌دهد. نانولوله‌ها معمولاً تحت نیروهای اندروالس^۱ به شکل ریسمان به هم می‌چسبند. تحت فشار زیاد، نانولوله‌ها می‌توانند با هم متصل شوند و این امکان به وجود می‌آید که بتوان سیم‌های به طول نامحدود و بسیار مستحکمی را تولید کرد [۱۰].



شکل (۴-۱) ساختار پیوند شش ضلعی پایه برای یک لایه گرافیت؛ هسته‌های کربن به شکل دایره‌های توپر، پیوندهای پای خارج از صفحه به شکل خط چین و پیوندهای سیگما به صورت خط پیوسته، نشان داده شده‌اند [۱۰].

۱-۳-۱ نانولوله کربنی تک جداره (SWNT)

یک نانولوله تک جداره از دو قسمت بدنه و درپوش با خواص متفاوت فیزیکی و شیمیایی تشکیل شده است. ساختار درپوش، نشأت گرفته و مشابه یک فلورین کوچکتر همچون C_{60} می‌باشد. از قضیه اویلر اثبات می‌شود، برای بدست آوردن یک ساختار قفسی شکل بسته از پنج ضلعی‌ها، به دوازده پنج ضلعی نیاز است [۱۱]. قسمت دیگر تشکیل دهنده ی SWNT، بدنه ی استوانه ای شکل آن می‌باشد که از یک صفحه ی گرافیکی با اندازه ی معلوم که در جهت مشخصی پیچیده شده باشد، به دست می‌آید (شکل (۵-۱)). از آنجایی که می‌بایستی حاصل، یک تقارن استوانه ای باشد، برای بدست آوردن یک استوانه ی بسته فقط می‌توان صفحات را در جهات خاصی پیچاند (شکل (۶-۱)).

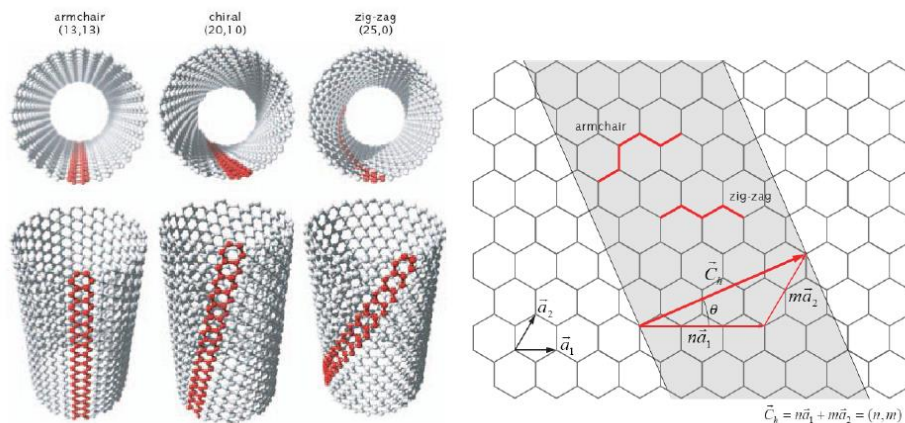


شکل (۵-۱) مکانیزم ساخت نانولوله کربن [۱۱]

^۱ Van der Waals

نانولوله های تک جداره نیز بر حسب آرایش اتم های کربنی مقطع لوله به سه دسته مهم آرمچیر و

چیرال که دارای خاصیت فلزی هستند و زیگزآگ که خاصیت نیمه رسانایی دارد، تقسیم می شوند.



شکل (۶-۱) ساختار گسترده ی انواع نانولوله ی کربنی [۱۲].

دو اتم از گرافین انتخاب می شوند، یکی به عنوان مبدأ در نظر گرفته می شود و صفحه پیچانده می شود تا اتم دوم روی اتم مبدأ منطبق گردد. برداری که از اتم مبدأ به جهت اتم دیگر اشاره می کند، بردار چیرال^۱ نامیده می شود $(Ch = n \cdot a_1 + m \cdot a_2)$. و طول آن برابر محیط نانولوله می باشد. بدیهی است که محور نانولوله عمود بر بردار چیرال می باشد. a_1 و a_2 بردارهای پایه^۲ شبکه گرافیت در فضای حقیقی می باشند. نانولوله های با بردارهای چیرال متفاوت، دارای خواص متفاوتی می باشند، نظیر هدایت الکتریکی و استقامت مکانیکی متفاوت. تمامی ساختارهای ممکن SWNTs از بردارهای چیرالی که در محدوده نشان داده شده با شکل (۶-۱) قرار می گیرند، ایجاد می شوند، که n و m اعداد صحیح بوده و $m \leq n$ بیشتر SWNTs قطری نزدیک به ۱ nm دارند و طول آنها چندین هزار برابر بزرگتر از قطر آن ها است. SWNTs با طول چند سانتیمتر هم ساخته شده اند [۱۳].

۱-۳-۲ نانولوله کربنی چند جداره (MWNT)

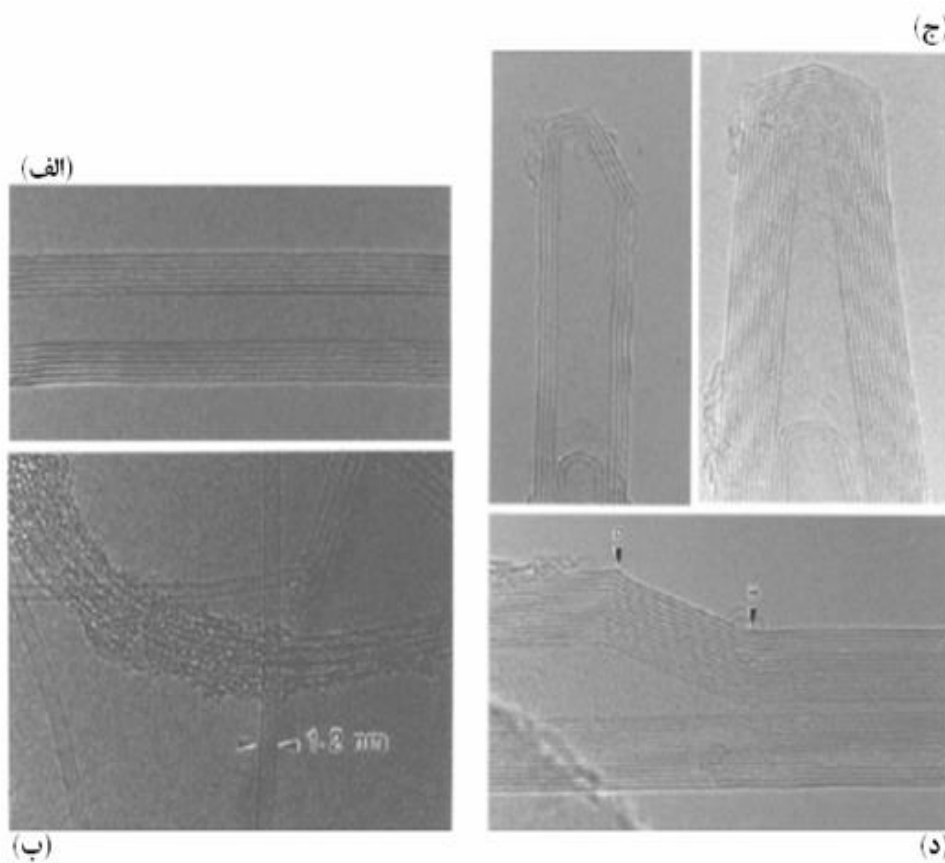
نانولوله های چند جداره از چند استوانه کربنی هم محور ایجاد می شوند. نانولوله های چند جداره را می توان به صورت دسته ای از نانولوله های هم مرکز با قطرهای متفاوت در نظر گرفت. طول و قطر

^۱ Chiral vector

^۲ Unit vector

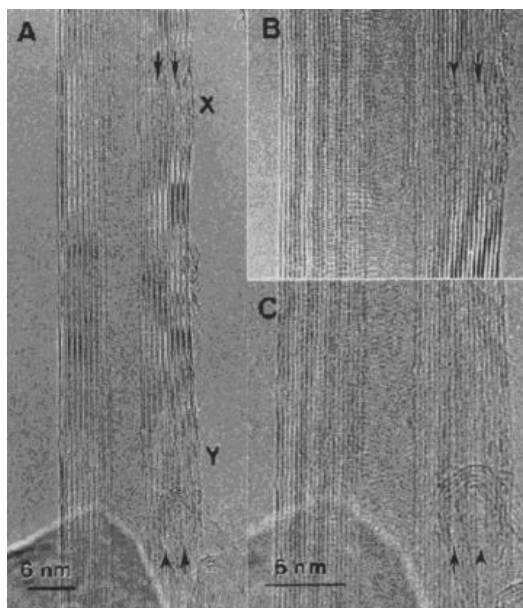
این ساختارها در مقایسه با نانولوله های تک جداره بسیار متفاوت بوده که در نتیجه، خواص آن ها نیز بسیار متفاوت می باشد.

اولین نانولوله ای که کشف شد [۱۴]، نانولوله کربن چند جداره بود (که در شکل (۷-۱) و شکل (۸-۱) نشان داده شده است). در این نانولوله ها فاصله بین لایه ها در حدود 0.34 نانومتر [۱۴ و ۱۵] می باشد که بسیار نزدیک به فاصله بین لایه ای در صفحات گرافیتی، یعنی 0.335 نانومتر است. به هر حال کیانگ و همکارانش^۱ [۱۶] نشان دادند که فاصله بین لایه ای برای یک نانولوله کربنی چند-جداره می تواند بین 0.342 تا 0.375 نانومتر باشد که این امر به قطر و تعداد لایه های متداخل تشکیل دهنده نانولوله کربن چند جداره بستگی دارد.



شکل (۷-۱) (الف) نانولوله کربن چند جداره ی منفرد. (ب) نانولوله کربن تک جداره و همچنین گروه هایی از چنین لوله هایی که با کربن آمورف پوشیده شده است. (ج) نوک ساختار یک نانولوله کربن چند جداره انتهایی بسته. (د) یک نانولوله کربن چند جداره که تغییرات هندسی ناشی از وجود حلقه های پنج ضلعی و هفت ضلعی را در داخل ساختار نشان می دهد [۱۴].

¹ Kiang et al.



شکل (۸-۱) نانولوله کربنی چند جداره. فاصله های بین لایه ای که بصورت غیر عادی بزرگ هستند با فلش نشان داده شده است [۱۴].

آزمایشات ژائو^۱ [۱۵]، امیلینکس^۲ [۱۷] و همچنین لاورین و همکارانش^۳ به ساختار پیچشی متناوب، برای برخی از نانولوله های کربن چند جداره اشاره کرده اند. تحلیل های انرژی که توسط لاورین [۱۸] و همکارانش انجام شد، به تشکیل یک لوله که ممکن بود بعدها تبدیل به یک ساختار نانولوله کربنی چند جداره پایدار با استوانه های تو در تو گردد، اشاره دارد.

۴-۱ ویژگی های نانولوله های کربنی

خواص الکترونیکی، مولکولی و ساختاری نانولوله ها تا حد زیادی از ساختار تقریباً یک بعدی آن ها ناشی می شود. در اینجا به مهم ترین خواص نانولوله های کربنی و علت مولکولی آنها اشاره می کنیم.

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

۲- حالت رسانا و نیمه رسانایی آن ها با توجه شکل هندسی شان

۳- قدرت رسانایی گرمایی خیلی بالا

۴- سطح جداره صاف با قدرت تفکیک بالا

¹ Zhou et al.

² Amelinex

³ Lavin et al.

۵- بروز خواص الکتریکی و مکانیکی منحصر به فرد در طول آن ها

۶- مدول یانگ بالا

۷- گسیل و جذب نور و ضریب تحرک الکتریسیته بسیار بالا

۸- خاصیت مغناطیسی و ممان مغناطیسی بسیار بزرگ

۹- چگالی سطحی بسیار بالا

۱۰- قابلیت ذخیره سازی، داشتن خاصیت ابررسانایی و تولید ولتاژ

۱۱- استحکام و مقاومت کششی بالا

میزان افزایش نیروی گرمایی و مقاومت نانولوله‌ها با ریشه سوم جرم اتم‌ها و مولکول‌ها متناسب است. همچنین حرارت دادن موجب افزایش استحکام نانولوله شده و مقاومت کششی آن را شش برابر می‌کند و هدایت آن نیز افزایش می‌یابد [۱۸].

در سال ۲۰۰۰، مقاومت کششی یک MWNT برابر ۶۳ GPa اندازه گیری شد [۱۹]. به عنوان مقایسه، ضریب کشسانی یک فولاد پرکربن برابر ۲۰۸ GPa است؛ حال آن که یک CNT ضریب کشسانی بسیار بالایی، در حدود ۱ TPa دارد. با در نظر گرفتن اینکه نانولوله های کربنی چگالی وزنی پایینی در حدود $1/3-1/4 \text{ g/cm}^3$ دارند، استحکام ویژه ی آن ها در میان تمامی مواد شناخته شده، بهترین است.

۱-۴-۱ قطر نانولوله‌های کربنی

در اینجا یادآور می‌شویم که قطر نانولوله‌ها را می‌توان با توجه به جدول (۱-۱) بدست آورد [۲۰].

جدول (۱-۱) نحوه ی بدست آوردن قطر نانولوله با توجه به اندیس‌های آن ها [۲۰]

Type of nanotube	Chiral indices (m,n)	Chiral angle θ	D_{NT} , Tube diameter
Zigzag	(m, 0)	0	$\frac{a_0 m}{\pi}$
Armchair	(m, m)	30°	$\frac{\sqrt{3} a_0 m}{\pi}$
Chiral	(m, n); $m \neq n \neq 0$	$0 < \theta < 30^\circ$	$\frac{a_0 \sqrt{(m^2 + mn + n^2)}}{\pi}$

۱-۵ نواقص نانولوله های کربنی

مشابه هر ماده ی دیگری، وجود نواقص بر خواص ماده تأثیرگذار است. نواقص می توانند در قالب جاهای خالی اتمی بروز نمایند. سطوح بالای چنین نواقصی می تواند مقاومت کششی نانولوله را تا ۸۵٪ کاهش دهد [۲۱]. نوع شناخته شده دیگری از نواقص که در نانولوله ها اتفاق می افتد، نواقص استون- والس^۱ هستند که با تغییر آرایش پیوندهای بین اتم های یک جفت پنج ضلعی و هفت ضلعی ایجاد می کند. به خاطر ساختار تقریباً یک بعدی CNTs، مقاومت کششی لوله به ضعیفترین قسمت آن بستگی دارد، مشابه یک زنجیر که ضعف در یک حلقه، مقاومت کل زنجیر را می کاهد.

خواص الکتریکی لوله نیز از حضور نواقص متأثر می شود. یک اثر متداول، کاهش هدایت در قسمت معیوب لوله می باشد. بعضی از نواقص در لوله های آرمیچر که فلزی هستند باعث می شود که ناحیه اطراف نقص مثل نیمه هادی عمل کند. گذشته از این، جاهای خالی تک اتمی سبب ایجاد خواص مغناطیسی می گردد.

خواص حرارتی لوله ها هم به شدت به نواقص حساس است. چنین نواقصی باعث پراکندگی فونونی^۲ می گردند که نرخ آسایش^۳ فونون ها^۴ را افزایش می دهد. این امر منجر به کاهش طول آزاد متوسط^۵ و در نتیجه، کاهش هدایت حرارتی نانولوله می گردد.

۱-۶ مدل های نانولوله های کربنی

نانولوله ها دسته ای از مواد هستند که جزء زمینه جدید و گسترده مدل سازی چند مقیاسی قرار می گیرند. مدل سازی چند مقیاسی روشی است برای مدل کردن مواد، سیستم ها یا رویدادهایی که از لحاظ مقیاس زمان و طول از درجات اهمیت^۶ بسیار متفاوتی هستند. اغلب، این اختلاف زیاد مقیاس

¹ Stone Wales

² Phononic

³ Relaxation rate

⁴ Phonons

⁵ Mean free path

⁶ Order of magnitude

نیاز به تکنیک های مدل سازی مختلفی برای دستیابی به سطوح مختلف پدیده دارد که می بایست تطبیق داده شوند. نانولوله ها مولکول های منفرد یا هم محور، با ابعاد در حد آنگستروم هستند که پاسخ های مادی مهمی در این سطح گسسته رخ می دهد. هرچند، بسیاری از استفاده های آن ها نظیر، مواد کامپوزیت با الیاف نانولوله ای، نیاز به سطح پیش بینی و رفتاری در مقیاس ماکرو دارند، که از لحاظ درجه بزرگی، ده برابر متفاوت هستند. بنابراین، روش هایی می بایست مورد استفاده قرار گیرند که بتوانند فاصله میان مدل ها و مقیاس های اندازه را پوشش دهند [۲۲].

روش های مختلف مدلسازی برای نانولوله ها به ترتیب مقیاس از کوچک به بزرگ عبارتند از:

۱- شبیه سازی مولکولی (اتمی)^۱

۲- شبیه سازی دانه درشت^۲

۳- مکانیک پیوسته^۳

۴- کامپوزیت میکرو مکانیک^۴

۵- مکانیک ساختاری در مقیاس عناصر سازنده^۵

در این مطالعه بر روی نانولوله ها تمرکز می شود و نه موارد کاربرد آن ها، بنابراین، در این جا تنها به مدل های مناسب برای نانولوله ها شامل: مدل سازی مولکولی، ساختاری و محیط پیوسته اشاره خواهد شد. مدل های پیوسته معمولاً بر پایه مدل های رایج مهندسی نظیر تیرها، پوسته ها و غشاء ها استوارند. آن ها با نانولوله ها به عنوان مواد پیوسته با هندسه معین و خصوصیات مادی معمول نظیر مدول یانگ برخورد می کنند. در مقابل، مدل های مولکولی هر اتم را بصورت مجزا در نظر می گیرند و برهمکنش های بین اتم ها را بصورت ریاضی تعریف می کنند. اغلب، مدل های مولکولی به مدل های پیوسته کاهیده می شوند، که در نتیجه می توان نتایج را با مدل های پیوسته دیگر و مواد دیگر

¹ Molecular (atomistic) simulations

² Coarse grain simulations

³ Continuum mechanics

⁴ Composite micro-mechanics

⁵ Component level structural mechanics

بصورت مستقیم مقایسه نمود. علاوه بر دو مدل ذکر شده، به مدل ساختاری به عنوان رابطی بین مدل مولکولی و مدل پیوسته اشاره خواهد شد.

۱-۶-۱ مدل های پیوسته

بر اساس کار یاکوبسون^۱ [۲۳] با شبیه سازی های اتمی نانولوله ها، او یکی از اولین نتایج را در زمینه نانومکانیک ارائه کرده است، (قوانین مکانیک پیوسته به طور حیرت آوری قوی هستند و اجازه می دهند که بتوان آن ها را برای موارد گسسته در حد چند اتم در قطر نیز اعمال کرد). این نظریه به محققان بعدی اجازه داد که از مکانیک پیوسته بتوانند با اطمینان بیشتری برای طبقه بندی خصوصیات مادی نانولوله های کربنی استفاده نمایند. انتخاب های عددی برای مدل پیوسته میسر است و شامل مدل های تیر، پوسته و غشاء می باشند. انتخاب های مورد نظر برای تحلیل بطور موثر، به هندسه، فرضیات تغییر شکل و قوانین ساختاری کاهش می یابند.

نانولوله ممکن است یک جسم توپر^۲، استوانه توخالی^۳ یا استوانه های تودر تو^۴ (برای نانولوله های چند جداره) در نظر گرفته شود. یک استوانه توپر اغلب برای مدل سازی نانولوله ها به عنوان الیاف درون مواد کامپوزیتی بکار می رود. بصورت رایج تر یک استوانه توخالی برای هر جداره انتخاب می شود. ضخامت هر جداره به طور معمول، حالت ایده آل فاصله بین لایه های گرافیت و نانولوله برابر 3.4 \AA در نظر گرفته می شود. معمولاً، جداره بصورت کاملاً متصل فرض می شوند. این فرض اجازه می دهد که نانولوله های چند جداره را با یک استوانه توخالی بدون درز و فاصله مدل کرد. بنابر این ضخامت جداره نانولوله برابر است با، $t = 3.4 \text{ \AA}$ ، که t کل ضخامت نانولوله و n برابر تعداد جداره های نانولوله کربنی است. به طور نمونه، این هندسه استوانه ای با فرضیه همسانگردی همراه می شود و مدلی استاندارد را در مقالات نتیجه می دهد. این مدلی است که اغلب، به ازای آن مقدار نقل قول

¹ Yakobson

² Solid

³ Hollow cylinder

⁴ Nested cylinders

شده $1\ TPa$ برای مدول یانگ بدست می آید. معمولاً، این مدل به عنوان یک مدل تیر یا ستون آنالیز می شود. فرض اتصال و پیوند کامل به این معنا است که، هر جداره از نانولوله کربنی چند جداره می-تواند بصورت محوری یا پیچشی، زمانی که جداره خارجی در معرض بار قرار می گیرد، درگیر شود. این می تواند به عنوان یک منبع خطا باشد؛ چون جداره های مجزای نانولوله های کربنی چند جداره نشان داده اند که دارای شرایط لغزش آزاد^۱ یا نزدیک به آن هستند [۲۴].

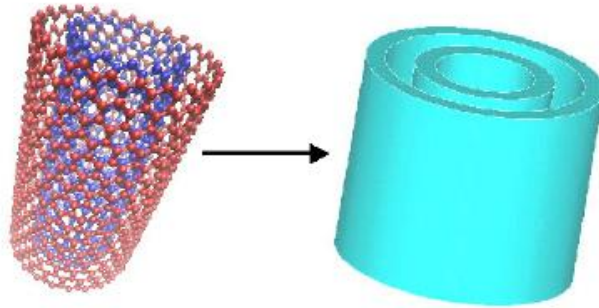
یک مدل رایج دیگر، توسط یاکوبسون و همکارانش [۲۳] ارائه شد، که در آن از ضخامت پیوند پای برای تعیین ضخامت یک اتم کربن و در نتیجه ضخامت جداره استفاده شده است. این ضخامت برابر $0.66\ \text{\AA}$ می باشد، که فاصله ای را بین جداره های نانولوله کربنی چند جداره باقی گذاشته و یک مدل استوانه ای هم مرکز تو در تو را نتیجه می دهد. شمایی از مدل استوانه هم مرکز در شکل (۱-۹) نشان داده شده است. آن ها ادعا کرده اند که این ضخامت بهتر می تواند سفتی موضعی خمشی نانولوله را توصیف کند. آن ها برای اثبات این فرضیه، کمانش محوری جداره پوسته ای پیش بینی شده توسط این ضخامت را با شبیه سازی های مکانیک مولکولی مقایسه کردند. با این ضخامت کاهش یافته شده، مدول یانگ تا $0.5\ TPa$ ~ به منظور یکسان نگه داشتن سفتی برای دو مدل، افزایش می یابد.

رایج ترین فرضیات مادی برای نانولوله ها شامل ایزوتروپیک و الاستیک خطی بودن این مواد می-شود. مقداری وابستگی جهتی هم به دلیل ساختار حلقه ای شش وجهی و هم کرنش پسماند^۲ توسط رول شدن ساختار لایه ای گرافیت، احتمال القا شدن را در نانولوله دارد. این فرضیات را تنها توسط شبیه سازی های مولکولی می توان بررسی نمود. این فرض که پاسخ های مکانیکی لوله مستقل از نحوه چیدمان اتم ها در شبکه نانولوله است، مشخص می سازد که سفتی جداره مستقل از جهت نانولوله است. در مقابل، جهت شعاعی به طور واضح با صفحه استوانه ای متفاوت است؛ چون از ساختار پیوندی گرافیت تبعیت نمی کند. مفهوم کرنش و تنش شعاعی برای نانولوله های تک جداره موجود نمی باشد. هرچند، برای نانولوله های چند جداره فاصله جدایش بین جداره ها ممکن است تغییر کند

¹ Free slip condition

² Residual strain

که در نتیجه تغییر کرنش شعاعی را سبب می شود. در این موارد، مقاومت در برابر کرنش تنها توسط نیروهای واندروالس^۱ تامین می شود که باعث می شود سفتی متفاوت باشد.



شکل (۹-۱) شمای یک ساختار پیوسته معادل (راست) مقایسه شده با مدل مولکولی [۲۳]

فرضیات در مورد تشکیل نانولوله ها نوع مدل پیوسته را مشخص می کند. برای مثال، فرضیه ای که در آن صفحه مقاطع عرضی در خمش همچنان صفحه باقی می ماند، مدل تیر اویلر-برنولی^۲ را تشکیل می دهد. مدل های تیر و پوسته معمول ترین مدل های مورد استفاده هستند. هرچند، مدل های دیگری نیز مورد مطالعه قرار گرفته اند که در ادامه بطور خلاصه ذکر خواهند شد. بعضی از آن ها مدل های تیر و پوسته را به صورت مستقیم پذیرفته اند در حالیکه برخی دیگر از مدل هایی پرکاربرد با جزئیات بیشتر استفاده کرده اند. بیشتر این مدل های اجزاء محدود^۳ (FE)، برای مدل های پیچیده که حرکت جداره های نانولوله چند جداره را در نظر می گیرند یا مواد کامپوزیتی، توسعه یافته اند. برای نانولوله های چند جداره، زمانی که یک مدل برای جداره ها تعریف می شود، یک مدل نیز باید برای برهم کنش میان جداره ها تعیین گردد. برای تیرها، این مدل یک حرکت ساده یکنواخت^۴ است که معنای ارتباط کاملاً صلب بین جداره ها را می دهد. مدل های دیگر اجازه حرکت آزادانه را به جداره ها می دهند. مستقیم ترین معادل سازی برای نیروی واندروالس اعمال فشار می باشد. رو^۵ چنین نگرشی را برای مطالعه تاثیر نیروی واندروالس در پاسخ کمانشی یک نانولوله دوجداره بکار برد [۲۵]. او جداره ها را به صورت پوسته با سفتی خمشی زیر مدل کرد.

¹ Van der Waals forces

² Euler-Bernoulli beam model

³ Finite element models

⁴ Simply uniform motion

⁵ Ru

$$D(h) = \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)} \quad (1-1)$$

در رابطه (1-1)، h ضخامت جداره و ν ضریب پواسون است. رو بر همکنش جداره های پوسته ای را توسط فشار p مدل کرد. فشار بین جداره ها از رابطه (2-1)، تبعیت می کند.

$$p_i R_i = p_j R_j \quad (2-1)$$

در رابطه (2-1)، R شعاع جداره و اندیس های i و j شماره جداره را مشخص می کند. آنالیز رو پیش بینی می کند که کرنش بحرانی برای کمانش یک نانولوله تک جداره با افزودن یک جداره درونی کاهش می یابد. او شکل های کمانشی و فشار ناشی از نیروی واندروالس را بدست نیاورد.

پانتانو و همکارانش¹ چنین روشی را برای مدل سازی یک نانولوله چند جداره بکار بردند [27 و 26]. جداره ها به صورت پوسته های نازک مدل و بر همکنش های بین جداره ها به صورت فشار در نظر گرفته شدند. این فشار به صورت تابعی از فاصله جدایی بین جداره ها تعریف شده است. آن ها این تابع را در قالب مدل اجزاء محدود با استفاده از نرم افزار آباکوس انجام دادند. آن ها سپس اعتبار این مدل را برای نانولوله های تک و چند جداره با مقایسه نتایج المان محدود و شبیه سازی مکانیک مولکولی و نتایج تجربی در خمش و بارهای فشاری اعتبار سنجی کردند. نتایج آن ها تطابق خوبی برای انرژی های کرنشی، کرنش کمانشی محلی و مدهای پیچشی² در نانولوله های تک جداره در خمش داشت. در کامپوزیت های تقویت شده با نانولوله، نانولوله ممکن است مجبور به تغییرشکلی با انحنای زیاد توسط پلیمر شود که منجر به مد کمانشی به صورت موج دار³ شود. این حالت تغییر شکل شکل به صورت تجربی در تصاویر میکروسکوپ انتقال الکترونی⁴ (TEM) دیده می شود [28]. تعداد و طول موج ها، موج تابعی از بار (انحنا) و تعداد جداره هاست. این رویداد مهمی برای مشاهده بر-همکنش جداره هاست. با استفاده از تصاویر TEM، پانتانو و همکارانش توانستند رفتار پیچشی برای یک نانولوله با همان تعداد جداره (و قطرهایش) با انحناهای خمشی یکسان پیش بینی کنند.

¹ Pantano

² Kinking modes

³ Rippling

⁴ Transmission electron microscope

آرويو و بلیشکو^۱ نیز یک مدل اجزاء محدود برای نانولوله های چند جداره ارائه کردند [۲۹]. علاوه بر استفاده از تئوری پوسته نازک، آن های یک مدل جداره غشایی توسعه دادند، که به صورت مستقیم از پتانسیل ترشف- برنر^۲ با استفاده از الاستیک عمومی کریستال ها و قانون بهبود یافته کوشی- برن^۳ بدست می آید. مدل نتیجه شده، هایپرلاستیک بوده و به انحنای سطح و جهت شبکه کریستالی بستگی دارد. آن ها نیروهای واندروالس را با قرار دادن معادله لنارد- جنز^۴ در فرمولاسیون کد المان محدود خود مدل کردند. آن ها توانستند کمانش محلی، اثرات پیچشی و موجی را با بکار گیری مش ریز برای بارهای مختلف ایجاد کنند که بسیار نزدیک به شبیه سازی مولکولی بوده است.

دیگران از روش اجزاء محدود بسیار متفاوتی استفاده کرده اند که به موجب آن متغیر های مکانیک مولکولی^۵ (MM) با المان های خرپا جایگزین شده اند. در این دیدگاه، طول پیوند با یک المان خرپا با سفتی ای که از پتانسیل کششی پیوند MM بدست می آید، تعیین می گردد. باقی عبارت های انرژی مانند زاویه پیوند و نیروی واندروالس نیز با خرپاهایی با سفتی های مختلف جایگزین می شوند. این روش ها به طور خاص معادلات مکانیک مولکولی را خطی می سازند و در قالب چارچوب اجزاء محدود قرار می دهند. بر پایه پتانسیل های تغییر شکل پیوند و نیروهای واندروالس، لی و چو^۶ یک مدل خرپا برای نانولوله دوجداره بوجود آوردند [۳۰]. در حالی که تنها جداره خارجی تحت بارگذاری قرار داشت، آن ها دریافتند که نیروی کم و ناچیزی به جداره داخلی منتقل می شود. کار آن ها مشابهت های زیادی با مکانیک مولکولی دارد و نتایج آن ها در قالب مدل استاندارد پیوسته ارائه شده است. این روش ها بیشتر تحت عنوان شبیه سازی ساختاری شناخته شده و توضیحات بیشتر در این زمینه در قسمت مدل های ساختاری آورده شده است.

¹ Arroyo and Belytschko

² Tersoff- Brenner potential

³ Cauchy- Born rule

⁴ Lennard- Jones equation

⁵ Molecular mechanics

⁶ Li and Chou

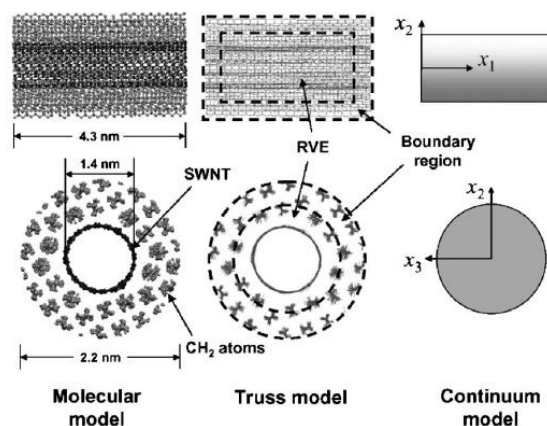
کامپوزیت های پایه پلیمری با الیاف نانولوله ای، استحکام بیشتری را نسبت به کامپوزیت های تقویت شده با الیاف کربن دارند. ادگار و همکارانش^۱ [۳۱] رفتار مکانیکی این کامپوزیت ها را با استفاده از مدل سازی چند مقیاسی مرتبه ای^۲، بر پایه تکنیک های پیوسته معادل (EC)^۳ بررسی کردند. روش EC، از سه گام ذیل تشکیل شده است:

۱- انتخاب المان نمایشگر حجم^۴ (RVE) مناسب برای ماده نانو ساختاری.

۲- تشکیل یک مدل محیط پیوسته معادل.

۳- برابر قرار دادن انرژی کل در مدل های مولکولی و معادل محیط پیوسته، با بارگذاری یکسان.

مراحل این مدل سازی در شکل (۱-۱۰) نمایش داده شده است.



شکل (۱-۱۰) شماتیک مراحل مدل سازی پیوسته معادل [۳۱]

۲-۶-۱ مدل های مولکولی

در این روش، سیستم به عنوان یک سیستم گسسته از اتمها در نظر گرفته خواهد شد. سپس اندرکنش های بین مولکولی با استفاده از یکی از مدل های پتانسیل برای سیستم مورد نظر مدل می-شوند. با استفاده از محاسبات عددی، انرژی سیستم محاسبه شده، سپس انرژی کل سیستم در مراحل بعدی برای محاسبه خواص مکانیکی نانولوله کربنی بکار برده می شوند. به دلیل محدودیت-

¹ Odegard et al.

² Multiscale hierarchial modeling

³ Equivalent continuum modeling

⁴ Representative volume element

های جاری در مورد آزمایش های مکانیکی در مقیاس نانو، شبیه سازی های مولکولی به ابزاری مهم برای مطالعه مکانیک نانولوله ها مبدل گشته اند. آن ها می توانند به دو صورت مورد استفاده قرار گیرند.

۱- جایگزینی برای آزمایش های تجربی و استخراج داده های مورد استفاده در مدل های پیوسته

۲- استفاده مستقیم برای پیش بینی پاسخ های مکانیکی تحت شرایط بارگذاری خاص

اخیراً آزمایش های که به روش تجربی امکان پذیر نبوده اند، نظیر آزمایش پیچش، به راحتی توسط شبیه سازی مولکولی انجام گرفته اند. این شبیه سازی ها تنها به شرایط مرزی مناسب نیاز دارند. تجربه های جدید دارای نقص دقت و تفکیک پذیری پایین هستند که بوسیله شبیه سازی مولکولی قابل برطرف شدن است. هرچند، این نکته باید ذکر شود که شبیه سازی های مولکولی تنها تخمین هستند. آن ها بر پایه بسیاری از فرضیات و ساده سازی ها منطبق هستند. تمام نتیجه گیری های بدست آمده از شبیه سازی های مولکولی با شناخت از این موضوع بایستی مورد بررسی قرار گیرند. این بدان معناست که مدل های مولکولی بایستی به عنوان ابزاری برای فهم نانولوله ها مورد استفاده قرار گیرند و زمانی که داده های تجربی موجود است، این داده ها ترجیح داده می شود.

انواع اصلی شبیه سازی های مولکولی به دو گروه عمده زیر تقسیم می شود:

۱- مکانیک کوانتومی^۱ (QM)

۲- مکانیک مولکولی^۲ (MM)

تفاوت اصلی بین این دو گروه آن است که مدل های مکانیک مولکولی از روی مشاهده و تجربه بدست می آیند؛ در صورتی که مدل های مکانیک کوانتومی از اصول اولیه استخراج می شوند. به طور معمول نتایج QM دقیق تر از MM در نظر گرفته می شوند. هرچند، مدل های QM از لحاظ حجم عملیات کامپیوتری گران تر از MM هستند. بنابراین، مدل های QM به سیستم های کوچک تر، کمتر از ۱۰۰ اتم، که مطالعات مکانیک کوانتومی نانولوله را محدود می کند، اختصاص داده می شود.

¹ Quantum mechanics

² Molecular mechanics

۱-۲-۶-۱ مکانیک کوانتومی

همانطور که پیش تر ذکر گردید، مدل های QM بر پایه اصول اولیه استوار هستند. نقطه آغازین برای مکانیک مولکولی معادله موج شرودینگر^۱ است. این معادله، یک معادله مرتبه دوم مقدار ویژه بوده و به صورت دقیق برای یک سیستم مولکولی قابل حل نمی باشد. برای سادگی مسئله (کاهش درجات آزادی)، تخمین برن-اپنهایمر^۲ به کار می رود. بر اساس این تخمین جرم الکترون و در نتیجه مومنتوم یک مرتبه پایین تر از هسته های سنگین هستند. این سبب جدایی معادلات هسته و الکترون می شود. بنابراین، الکترون ها قادر خواهند بود به سرعت نسبت به جایگاه هسته ها عکس العمل نشان دهند. برخی از روش های متداول برای حل های مکانیک کوانتومی به قرار زیر است:

۱- اوربیتال های مولکولی^۳

۲- روشهای پایه^۴

۳- روش نیمه تجربی^۵

۴- تئوری دانسیته تابعی^۶

نکات متعددی را می توان در هر مورد ذکر کرد. روش اوربیتال مولکولی معمولاً برای سیستم های پیچیده مورد استفاده قرار نمی گیرند و برای سیستم های دارای پیوند پای مانند حلقه های کربن مورد مطالعه قرار می گیرد [۳۲].

روشهای پایه (Ab-initio)

روش های پایه، جزء سخت ترین روش هاست و بیشتر بر پایه اصول اولیه است. مشخصات مادی نتیجه شده از اندرکنش های کوانتوم مکانیکی با حل معادله شرودینگر، توصیف می شوند.

¹ Schrodinger wave equation

² Born- Oppenheimer approximation (BO)

³ Molecular orbitals

⁴ Ab- initio

⁵ Semi- empirical

⁶ Density functional theory (DFT)

حل مسئله کلی^۱ اولین بار توسط هوانبر، کن و شام^۲ ارائه شد، که به موجب آن الکترون ها به وسیله الکترون های موثر با همان دانسیته کلی که در پتانسیل تولید شده با الکترون ها و هسته یون- های دیگر حرکت می کنند، جایگزین می شوند [۳۳ و ۳۴]. در یک سیستم با N الکترون، دانسیته کلی به صورت مجموع اوربیتال های ψ_i بیان می شود.

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(r)|^2 \quad (3-1)$$

که در آن ψ_i ، حل های معادلات کن- شام^۳ هستند.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{eff} \right] \psi_i(r) = \epsilon_i \psi_i(r) \quad (4-1)$$

در رابطه (۴-۱)، V_{eff} ، پتانسیل موثر مربوط به کولمب^۴ می باشد.

هرچند تئوری HKS، معمولاً تئوری دانسیته تابعی نامیده می شود؛ ولی الگوریتم تعیین این تابعیت را تامین نمی کند. راه حل از تخمین دانسیته محلی^۵ می آید که در آن فرض می شود تابعیت تنها به دانسیته محلی الکترون بستگی دارد [۳۴]. تئوری دانسیته تابعی روش محبوبي در میان دانشمندان مواد است. این روش تابع موج را به طور کامل محاسبه نمی کند و در عوض دانسیته الکترون را بدست می آورد. LDA تخمین دقیقی برای سیستم هایی است که دانسیته آن ها به کندی تغییر می کند، مانند بسیاری از فلزات. هرچند، دارای محدودیت هایی خارج از منطقه تعادل و همچنین برای دانسیته های غیر یکنواخت می باشد. تخمین گرادیان تعمیم یافته^۶ [۳۵ و ۳۶]، اصلاحاتی را بر روی LDA انجام می دهد. توسعه الگوریتم های کارا روش DFT را به روشی اصلی برای محاسبه خصوصیات همچون ساختار پیوند، انرژی های چسبنده^۷ و جذب شیمیایی^۸ تبدیل کرده است. هرچند روش DFT، زمانی که اتم ها اجازه حرکت دارند، مانند پروسه بهینه سازی هندسی

¹ Full many-body problem

² Hohenberg, Kohn and Sham (HKS)

³ Kohn- Sham equations

⁴ Coulomb

⁵ Local density approximation (LDA)

⁶ Generalized gradient approximation (GGA)

⁷ Cohesive energies

⁸ Chemisorption

مولکول، ناکارا خواهد بود. کار و پارینلو^۱ [۳۷] روشی را بر پایه DFT ارائه کردند که امکان شبیه سازی دینامیک کوانتوم مولکولی Ab-initio را فراهم می سازد.

روش های نیمه تجربی، برخی از انتگرال ها و عبارات معادله شرودینگر را ساده می سازند و بسته به میزان کالیبراسیون، قابلیت انجام محاسبات با دقتی به اندازه روش Ab-initio را دارا هستند. برای مطالعه بیشتر مکانیک کوانتومی می توان به کتاب شبیه سازی های مولکولی لیچ^۲ مراجعه کرد [۳۸]. یکی از مزیت های عمده روش QM توانایی آن در مدل سازی تغییرات شیمیایی، مخصوصاً جدایش پیوند است. ترویا^۳ به این نتیجه رسید که MM به طور مناسب شکست نانولوله را پیش بینی نمی کند [۳۹]. او عیب استون- والس^۴ و شکست پیوند را با دو مدل نیمه تجربی و دو مدل MM بررسی کرد. او نشان داد که مدل های MM به طور نادرستی باز شدن پیوندها، در عیب استون- والس را تحت کرنش محوری، نسبت به مدل های تئوری پیچیده QM پیش بینی می کنند. همچنین نتیجه گرفت این پتانسیل MM، مدول الاستیک پایینی ($\sim 0.82 \text{ TPa}$) را پیش بینی می کند.

۱-۶-۲-۲ مکانیک مولکولی

مکانیک مولکولی روشی برای مدل سازی پیوندهای اتمی و نیروهای موجود در مولکول ها و بین آن هاست. این روش برای محدوده وسیعی از مسائل از دینامیک DNA تا گسترش ترک در فلزات مورد استفاده قرار می گیرد. MM از تخمین برن- اپنهايمر برای کاهش برهم کنش های اتمی تا موارد بین هسته ها استفاده می کند. هر اتم با همسایه های پیوندی و غیر پیوندی اش توسط تابع انرژی پتانسیل در ارتباط می باشد. در عمومی ترین حالت، پتانسیل جفت به جفت^۵، هر بر هم کنش با عبارت جداگانه ای ارائه می شود. معمولاً، این عبارات چند جمله ای و توابع مثلثاتی اند، هرچند،

¹ Car and Parinello

² Leach

³ Troya

⁴ Stone- Wales defect

⁵ Pair- wise potential

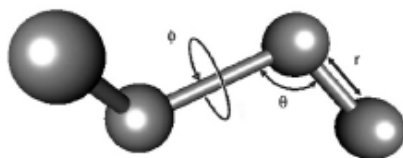
عبارات نمایی نیز مورد استفاده قرار می گیرند. این بر هم کنش های پیچیده تر به طور ویژه برای مسائل حالت خاص کاربرد دارند. در این جا به سه نمونه از این پتانسیل ها اشاره خواهیم کرد.

۱- پتانسیل MM3

۲- پتانسیل ترشف- برنر^۱ (TB)

پتانسیل MM3 یک پتانسیل عمومی هیدروکربن است؛ در حالی که، TB به طور خاص به ساختارهای الماس و گرافیت اختصاص دارد. متغیرها در پتانسیل های دو به دو، در شکل (۱-۱۱) مشخص شده اند. برای کسب توضیحات بیشتر در این زمینه می توان به کتاب لیچ مراجعه کرد [۳۸].

پتانسیل MM3، یک پتانسیل دو به دو نوع دو^۲ با گسترش های مرتبه بالا و عبارات عرضی است [۴۰]. این پتانسیل یک پتانسیل عمومی است، که صدها نوع اتم را شامل شده، به دلیل ماهیت مرتبه بالایش به عنوان یک پتانسیل دقیق شناخته می شود. برای مثال، گسترش مرتبه چهار عبارت کشش پیوند، محدوده دقت را تا مرتبه بالاتر کرنش های پیوندی افزایش می دهد. این پتانسیل به اطلاعات ارتباط پیشین پیوند نیاز دارد و نمی تواند استحکام و شکست پیوند را مدل کند. از MM3 اصولاً برای مطالعه مسائل بیوشیمیایی شامل DNA و پروتئین ها استفاده می شود. این روش، مدلی مناسب برای مطالعه نانولوله ها به دلیل شباهت پیوندهای sp^2 در ساختار شش وجهی گرافیتی نانولوله های کربن و ساختار شش وجهی پروتئین ها، می باشد.



شکل (۱-۱۱) متغیرهای معمول مکانیک مولکولی [۴۰]

پتانسیل MM3 در روابط (۱-۵) آورده شده است [۴۰]. این روابط شامل عبارات اولیه برای کشش- خمش (U_s)، زاویه- زاویه (U_θ) و پیوند خارج صفحه ای (U_ϕ) است. متغیرهای مستقل در

¹ Tersoff- Brenner Potential

² Class II

شکل (۱۱-۱)، r ، θ و ϕ هستند. زیر نویس 0، نشان می دهد که متغیر در حالت بدون تنش و تعادل قرار دارد. انرژی کلی یک جسم برابر با مجموع پتانسیل تمام اتم های آن جسم می باشد (در رابطه (۵-۱) اندیس های i و k محدوده اتم ها و اندیس j محدوده اتم های پیوندی را مشخص می کند).

$$\begin{aligned}
 U &= \sum_i \sum_j (U_s + U_\theta + U_\phi + U_{s\theta} + U_{\phi s} + U_{\theta\theta'}) + \sum_i \sum_k U_{vdw} \\
 U_s &= 71.94 K_s (r - r_0)^2 * \left[1 - 2.55 (r - r_0) + \left(\frac{7}{12}\right) 2.55 (r - r_0)^2 \right] \\
 U_\theta &= 0.02191 K_\theta \\
 &\quad * [1 - (\theta - \theta_0) + 5.6(10^{-5})(\theta - \theta_0)^2 - 7(10^{-7})(\theta - \theta_0)^3 \\
 &\quad + 9(10^{-10})(\theta - \theta_0)^4] \\
 U_\phi &= (V_1/2)(1 + \cos\phi) + (V_2/2)(1 + \cos 2\phi) + (V_3/2)(1 + \cos 3\phi) \\
 U_{vdw} &= \varepsilon \{-2.25(r_v/r)^6 + 1.84(10^5) \exp[-12(r/r_v)]\} \\
 U_{s\theta} &= 2.5141 K_{s\theta} [(r - r_0) + (r' - r_0')](\theta - \theta_0) \\
 U_{\phi s} &= 11.995 (K_{\phi s}/2)(r - r_0)(1 + \cos 3\phi) \\
 U_{\theta\theta'} &= -0.021914 K_{\theta\theta'} (\theta - \theta_0)(\theta' - \theta_0') \tag{۵-۱}
 \end{aligned}$$

مقادیر ثابت r_0 ، θ_0 ، K_s ، K_θ ، V_1 ، V_2 ، V_3 ، ε ، r_v ، $K_{s\theta}$ ، $K_{\phi s}$ و $K_{\theta\theta'}$ توسط پاندر^۱ ارائه

شده است [۴۱]. یکی از ابزار مورد استفاده برای مدل سازی نانولوله ها با پتانسیل MM3 بوسیله مکانیک مولکولی، بسته مدل سازی مولکولی تینکر^۲ است.

پتانسیل TB یک پتانسیل تجربی است که به طور خاص برای الماس و ساختارهای گرافیتی طراحی شده است [۴۲]. استحکام پیوند تابع پتانسیل دو به دویی است از جدایش اتمی، زاویه و تعداد پیوندها (همسایه ها). فرم اصلی پتانسیل TB در رابطه (۶-۱) آورده شده است.

$$\begin{aligned}
 U &= \sum_i \sum_{j(>i)} V_R(r_{ij}) - B_{ij} V_A(r_{ij}) \\
 V_R(r_{ij}) &= f_{ij}(r_{ij}) D_{ij}^e / (S_{ij} - a) e^{-\sqrt{2S_{ij}} \beta_{ij} (r_{ij} R_{ij}^e)} \\
 V_A(r_{ij}) &= f_{ij}(r_{ij}) D_{ij}^e S_{ij} / (S_{ij} - 1) e^{-\sqrt{2S_{ij}} \beta_{ij} (r_{ij} R_{ij}^e)} \\
 \beta_{ij} &= \left[1 + \sum_{k(\neq i,j)} G_i(\theta_{ijk}) f_{ik}(r_{ik}) e^{\alpha_{ijk} [(r_{ij} - R_{ij}^e) - (r_{ik} - R_{ik}^e)]} \right]^{-\delta_i} \\
 G_i(\theta_{ijk}) &= a_0 \left\{ 1 + c_0^2/d_0^2 - c_0^2 / [d_0^2 + (1 + \cos \theta_{ijk})^2] \right\} \tag{۶-۱}
 \end{aligned}$$

¹ Ponder

² Tinker molecular modeling package

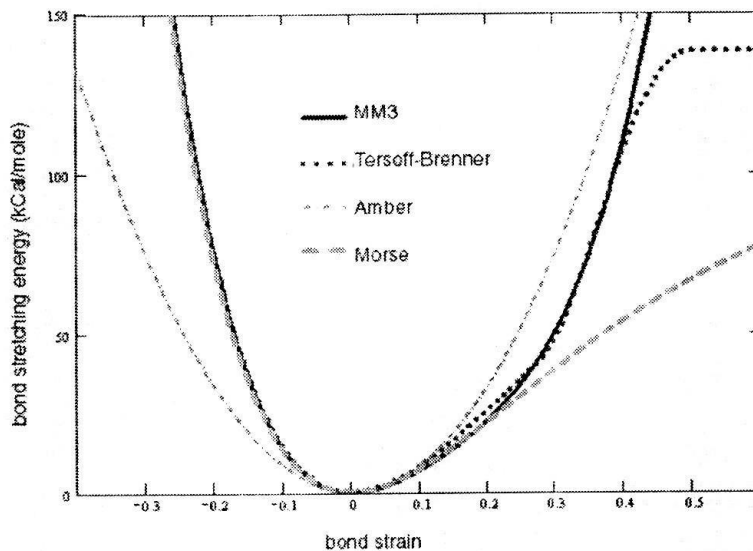
در رابطه (۶-۱)، r فاصله بین اتم ها، V_A و V_R به ترتیب عبارات دافعه و جاذبه و B_{ij} مرتبه پیوند است. θ_{ijk} زاویه بین خطوطی است که اتم های i و j ، و k را به هم متصل می کند. $G(\theta)$ ، تابع انرژی زاویه ای پیوند است. توابع $f_{ij}(r_{ij})$ و $f_{ik}(r_{ik})$ توابع انقطاعی^۱ هستند که به صورت خطی در یک محدوده کم از ۱ به صفر کاهش می یابند تا قطع محدوده گسترده اندرکنش های اتمی را هموار کند. تمامی کمیت های دیگر ثابت هستند و از مرجع [۴۲] می توان آن ها را بدست آورد. علاوه بر استفاده از تابع چندجمله ای برای تعریف استحکام پیوند، در نسل اول پتانسیل TB [۴۲] از توابع نمایی مشابه پتانسیل مورس^۲ استفاده می شده است. در نسل دوم پتانسیل TB [۴۲] عبارات نمایی جاذبه و دافعه برای فواصل تعادلی، ثوابت انرژی و نیرویی مناسب، تصحیح شده است. تعداد همسایه ها در یک فاصله تعیین شده، تعداد پیوندها را برای یک اتم (B_{ij}) مشخص می کند. تعداد پیوندها، مرتبه پیوند، استحکام پیوند را در پتانسیل پیوند دو به دو معین می سازد. بنابراین، جدایش پیوند و توزیع مجدد (مانند عیب استون- والس (۷-۵-۵-۷)) نیز با این پتانسیل قابل ارزیابی است.

عبارات کشش پیوند دو پتانسیل توصیف شده در بالا در شکل (۱-۱۲) با پتانسیل های آمبر^۳ [۴۳] و مورس [۴۲ و ۴۴] برای پیوند های sp^2 مقایسه شده اند [۴۵]. پتانسیل آمبر یک پتانسیل ساده دو به دو است که برای ساختارهای بزرگ مولکولی به کار می رود. تابع مورس یک تابع نمایی است که، یک رابطه کرنش پیوندی بسیار دقیق ارائه می کند. در این مقایسه، این پتانسیل به عنوان دقیق ترین پاسخ مد نظر قرار می گیرد. در ابتدا باید این نکته را ذکر کرد که رابطه سهموی بسیار با سه رابطه دیگر اختلاف دارد و محدوده دقت آن در محل های بسیار نزدیک به حالت تعادل، شاید در حدود $\pm 2\%$ کرنش است. باقی سه نمودار نسبت به حالت تعادل متقارن بوده و در فشار، مستقیم تر از کشش هستند. بنابراین، رفتار مکانیکی نانولوله غیر خطی خواهد بود. پتانسیل های MM3 و TB در حدود $\pm 10\%$ کرنش دقیق هستند.

¹ Cutoff functions

² Morse potential

³ Amber potential



شکل (۱۲-۱) مقایسه عبارات کشش پیوند به ازای چهار پتانسیل مکانیک مولکولی [۴۵]

پتانسیل های MM سطح انرژی یک سیستم مولکولی را برای یک سازه داده شده تعیین می کنند. ساختار مولکولی به صورت جایگاه اتم های یک مولکول تعریف می شود. در مقابل، یک سیستم به صورت حالت کلی شبیه سازی شامل، تمامی مولکول ها، جایگاهشان، شرایط مرزی و سرعت هایشان تعریف می شود. به طور کلی باید انرژی پتانسیل هر ساختار ورودی در حالت اولیه را به منظور کم نمودن مشکلات تماس یا کرنش بالا، مینیمم ساخت. اغلب استفاده از تکنیک هایی مانند مونت- کارلو و دینامیک مولکولی^۱ که سطح گسترده تری از انرژی را پوشش می دهند در کانون توجه است.

دینامیک مولکولی

MD، بسطی از MM است که در آن اتم ها نیز دارای مومنتوم هستند. بنابراین، هر اتم دارای یک سرعت مفروض می باشد و شتاب ذرات از پتانسیل های انرژی بدست می آیند. دینامیک مولکولی محدوده وسیعی از ساختارها را همچنان که سیستم حرکت میکند و دچار لرزش می شود، در برمی-گیرد. در حالت کلی، شبیه سازی های دینامیک مولکولی تمایل دارند انرژی پتانسیل سیستم را در مقایسه با حالت اولیه آن پوشش دهند. در این روش، انرژی کل به صورت تابعی از موقعیت اتمی محاسبه می شود و در انرژی پتانسیل $U(r_1, r_2, \dots, r_N)$ ، اتم ها به عنوان ذرات کلاسیک بر روی

^۱ Molecular dynamics (MD)

سطح BO در نظر گرفته می شوند. حرکت کوانتوم مولکولی که از معادله شرودینگر حاصل می شود، با معادله نیوتن در مکانیک کلاسیک جایگزین می شود.

$$F_i = m_i a_i \quad (7-1)$$

در رابطه (7-1)، m_i جرم اتم i ام و F_i نیروی عمل کننده بر روی این اتم را نشان می دهد که با توجه به انرژی پتانسیل بین اتمی از معادلات روش MD محاسبه می شوند [46].

$$F_i = -\nabla_i U \quad (8-1)$$

برای پیاده سازی کاربردی روش دینامیک مولکولی دو جنبه ابتدایی وجود دارد.

۱- انتگرال گیری عددی از معادلات حرکت بر روی شرایط مرزی و قیود سیستم

۲- انتخاب پتانسیل بین اتمی

برای یک سیستم تک جزئی، انرژی پتانسیل را می توان به صورت بسط ذیل نوشت.

$$U(R_i) = \frac{1}{2!} \sum_{i \neq j} U_2(R_{ij}) + \frac{1}{3!} \sum_{i \neq j \neq k} U_3(R_{ij}, R_{ik}, R_{jk}) + \dots \quad (9-1)$$

$R_{ij} = R_i - R_j$ ، فاصله بین اتمی، U_2 اندرکنش های بین دو به دوی اتم ها و U_3 موقعیت اتم-

های سه تایی را مشخص می کند. انتخاب پتانسیل با توجه به نوع پیوند، دقت مورد نظر، انتقال پذیری

و منبع محاسباتی تعیین می گردد [46].

این روش بهترین روش برای محاسبه خواص مکانیکی و همچنین خواص توده ای از ماده نانومتری می

باشد. در این روش یک پیکره بندی اولیه برای سیستم در نظر گرفته می شود، سپس پیکره-بندی

سیستم برای مراحل بعدی با استفاده از توابع پتانسیلی که اندرکنش بین اتم ها را نشان می-دهند و

همچنین اعمال فرمول همیلتون و لاگرانژ برای هر اتم، محاسبه می گردد.

معادله لاگرانژ:

$$L(q, \dot{q}) \equiv K(q, \dot{q}) - U(q)$$

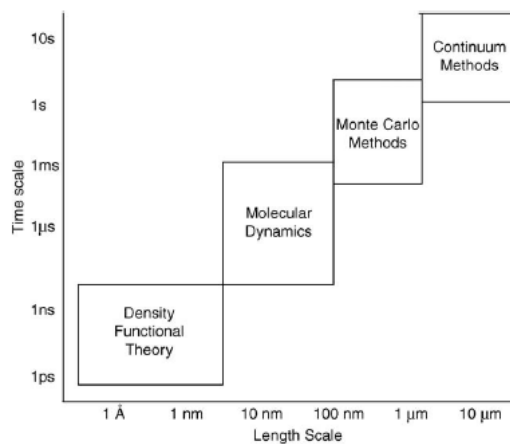
$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, \dots, N \quad (10-1)$$

معادله همیلتون:

$$H(q, p) = [L(q, \dot{q}) - \sum p_j \dot{p}_j] = K + U$$

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} , \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (11-1)$$

در شکل (۱۳-۱)، حوزه خاص کاربرد (از لحاظ مقیاس طولی و زمانی) روش‌های ذکر شده در بالا را می‌توان مشاهده کرد. برای توضیحات کامل‌تر در مورد تکنیک‌های مینیمم‌سازی و دینامیک مولکولی می‌توان به کتاب لیچ مراجعه کرد [۳۸].



شکل (۱۳-۱) مقیاس طولی و زمانی روش‌های متنوع شبیه‌سازی مادی [۳۸]

۱-۶-۲-۳ شبیه‌سازی‌های مولکولی و نتایج

یک دسته از نتایج شبیه‌سازی در جدول (۲-۱) ذکر گردیده است. نتایج از شبیه‌سازی‌های MM و QM نتیجه شده‌اند. بر خلاف داده‌های تجربی، این پیش‌بینی‌ها دارای پراکندگی اندک و یا بدون پراکندگی هستند. اگر به مدول به عنوان سفتی نانولوله، که سطح نانولوله را به حساب می‌آورد، نگاه شود آن‌ها بیشتر یک مقدار واحد (مطابق با مدول استاندارد 1 TPa) را پوشش می‌دهد. وابستگی مدول که ذکر شده است، با تغییر اندک مدول در طبیعت بسیار اندک می‌باشد. به طور خاص وابستگی شعاعی (r) به قطر نانولوله‌ها وابستگی مارپیچی^۱ به اختلاف اندک از مقدار آورده شده محدود می‌باشد. در جدول (۲-۱) بایستی توجه ویژه به کارهایی شود که به مطالعه‌ای فراتر از پیش

^۱ Helical trend

بینی مدول یانگ پرداخته اند. یاکوبسون و همکارانش [۲۳] و کرنول و ویلی [۴۸] از پتانسیل TB برای مطالعه رفتار کمانشی نانولوله های تک جداره استفاده کرده اند.

جدول (۲-۱) خواص موادی نتیجه شده برای نانولوله از شبیه سازی های مولکولی [۴۵]

نام محقق	سال	مدول یانگ (TPa)	ضخامت Å	ν	پتانسیل/ روش	تابعیت مدول**	
رابرتسون و همکارانش ^۱ [۴۷]	۱۹۹۲	۱,۰۶	۳,۴	۰,۱۹	تابع دانسیته محلی و TB	$1/r^2$	
یاکوبسون و همکارانش ^۲ [۲۳]	۱۹۹۵	۵,۵	۰,۶۶		ماریج	TB	
یاکوبسون و همکارانش [۲۳]	۱۹۹۶	۱,۰۷	۳,۴		TB		
کرنول و همکارانش ^۳ [۴۸]	۱۹۹۷	۱	۳,۴		TB	$1/r^2$	
هالیسیوگلو ^۴ [۴۹]	۱۹۹۷	۰,۵	۶,۸		شعاعی	TB	
لو ^۵ (MWNT) [۵۰]	۱۹۹۷	۱,۱۱	۳,۴		تعداد جداره	نیروی عمومی ^۶	
لو (SWNT) [۵۰]	۱۹۹۷	۰,۹۷	۳,۴		نیروی عمومی		
هرناندز و همکارانش ^۷ [۵۱]	۱۹۹۸	*۱,۲۴	۳,۴		تئوری تابع دانسیته محلی (QM)		
یائو ^۸ [۵۲]	۱۹۹۸	۱	۳,۴		نیروی عمومی اتصال محکم ^۹		$1/r^2$
اوزاکی و همکارانش ^{۱۰} [۵۳]	۲۰۰۰	۰,۹۸	۳,۴		(QM) O		
ترویا و همکارانش ^{۱۱} [۳۹]	۲۰۰۳	۱,۱۶	۳,۴		(QM) PM3		

¹ Robertson et al.

² Yakobson et al.

³ Cornwell et al.

⁴ Halicioglu

⁵ Lu

⁶ Universal force

⁷ Hernandez et al.

⁸ Yao

⁹ Tight binding

¹⁰ Ozaki et al.

¹¹ Troya et al.

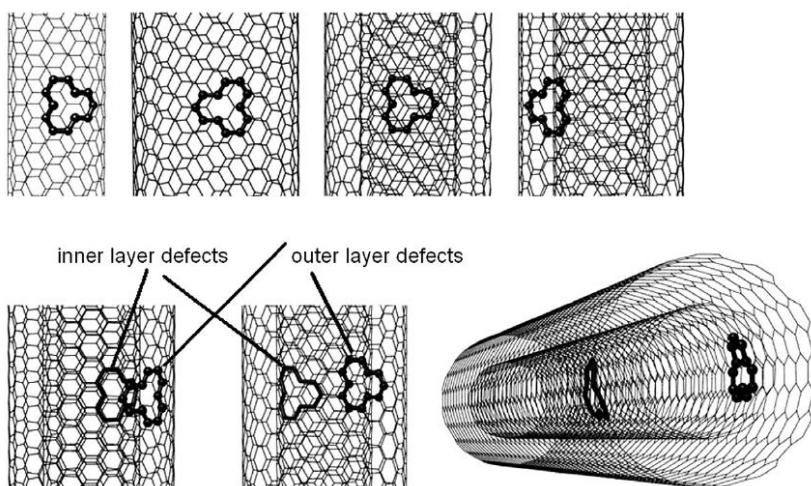
	(QM) MSINDO Hartree-Fock		۳,۴	۱,۴	۲۰۰۳	ترویا و همکارانش [۳۹] †
ماریچ	باند الکترونیکی ^۲ (QM)	۰,۱۱	۳,۴	۱,۰۹	۲۰۰۰	ون لیر و همکارانش ^۱ [۵۴]
	تئوری		۰,۷۱	۵,۱	۲۰۰۰	ژائو و همکارانش ^۳ [۵۵]
1/r ²	(QM) LDF	۰,۳۲	۳,۴	۰,۷۶	۲۰۰۱	ژائو [۵۵]
	مورس بهبود یافته	۰,۲۹	۳,۴	۰,۹۴	۲۰۰۲	بلیشکو و همکارانش ^۴ [۵۶]

* در حقیقت صفحه ای با مدول پایه ای $TPa - nm$ ۰,۴۲ را محاسبه کرده است.

** بسیاری از تابعیت ها در طبیعت کوچک هستند.

† بر روی رفتار غیرخطی (کمانش و شکست) تمرکز شده است.

زین و همکارانش^۵ [۵۷] کمانش نانولوله های تک و دوجداره معیوب تحت نیروی فشاری را با استفاده از دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار دادند (مطابق شکل (۱-۱۴)) و نتایج را با داده های نانولوله های سالم مقایسه کردند. آن ها نشان دادند که عیب تک تپی جای ظرفیت تحمل بار نانولوله-های دو جداره را به مقدار قابل توجهی کاهش می دهد. در صورتی که این عیب تاثیر کمی بر روی مدول موثر الاستیک دارد. همچنین، دانسیته عیوب و موقعیت نسبی آن ها نقش بسیار مهمی در کمانش نانولوله های دوجداره بازی می کند.



¹ Van Lier et al.

² Electronic band

³ Zhou et al.

⁴ Belytschko et al.

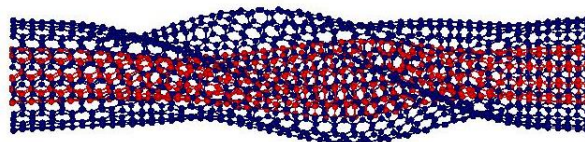
⁵ Xin et al.

شکل (۱۴-۱) مدل هایی از عیوب در نانولوله های تک و چند جداره معیوب [۵۷]

سونگ^۱ کمانش پیچشی نانولوله های دوجداره را با استفاده از مدل پوسته پیوسته^۲ دو استوانه ای^۳ مورد مطالعه قرار داد [۵۸]. همچنین با در نظر گرفتن نیروی واندروالس، گشتاور پیچشی بحرانی برای نانولوله هایی با قطر متفاوت بدست آمده با نتایج شبیه سازی دینامیکی مورد مقایسه قرار گرفت (جدول (۳-۱)).

جدول (۳-۱) مقایسه نتایج بدست آمده از مدل دینامیکی و پوسته پیوسته [۵۷]

Cases	d_1 $\times 10^{-10} m$	d_2 $\times 10^{-10} m$	L $\times 10^{-10} m$	Critical Torque $\times 10^{-17} Nm$ (from MD)	Critical Torque $\times 10^{-17} Nm$ (from CS)	%age Error
1	5.3245	12.1274	40.6701	3.6652	3.3125	9.624
2	6.6868	13.4807	40.6105	4.9993	4.2340	15.309
3	8.0469	14.8320	40.5992	5.2577	5.3500	1.754
4	9.4064	16.1880	40.5869	6.1395	6.5113	6.056
5	10.7652	17.539	40.5760	6.8807	7.5236	9.343



شکل (۱۵-۱) کمانش پیچشی نانولوله دوجداره [۵۷]

۳-۶-۱ مدل سازی به روش مکانیک ساختاری^۴

در مقیاس نانو، تئوری های مکانیک پیوسته به حد نهای خود رسیده و در بسیاری از موارد اخیر نانومکانیک دقت استفاده از این تئوری ها زیر سؤال رفته بود. بنابراین، دست یابی به تئوری ای یکپارچه و کلی در حوزه نانومکانیک که بتواند این شکاف را پوشش دهد، مورد نیاز بود که زمینه ساز ایجاد روشی به نام مکانیک ساختاری توسط لی و چو شد [۳۰]. اساس این نگرش آن است که نانولوله

¹ Soong

² Continuum shell (CS)

³ Double -cylindrical

⁴ Structural mechanics modeling

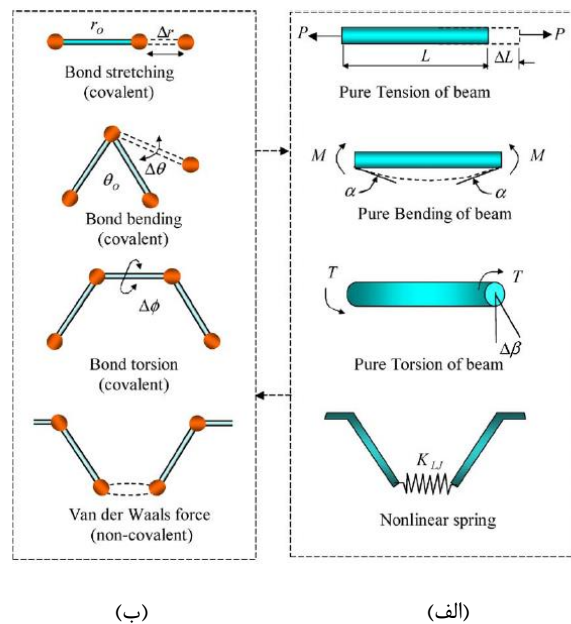
های کربنی را می توان به عنوان ساختارهای فریم مانند و پیوندهای اولیه بین اتم های همسایه را به عنوان تیر در نظر گرفت. در این نگرش اتم ها به صورت مفصل این تیرها عمل می کنند. ایجاد رابطه- ای بین مکانیک ساختاری و مولکولی برای بدست آوردن خصوصیات مکانیکی این تیرها لازم است.

۱-۳-۶-۱ وابستگی مکانیک ساختاری و مکانیک مولکولی

در مقیاس مولکولی، اندرکنش بین اتم های کربن می تواند با استفاده از یک میدان نیرویی مربوط به برهم کنش های هسته- هسته و الکترون- هسته توصیف شود [۵۹]. اگر از اندرکنش های الکترواستاتیکی صرف نظر شود، انرژی پتانسیل کل مربوط به استقرار اتم ها در فضا (U_{total})، از مجموع انرژی های والانس (یا پیوندی) و غیر پیوندی [۶۰] به صورت ذیل بدست می آید.

$$U_{total} = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum U_\phi + \sum U_{vdw} \quad (12-1)$$

در شکل (۱-۱۶) انواع برهم کنش های میان اتمی در مقیاس مولکولی نمایش داده شده است. توابع پتانسیلی هارمونیک و غیر هارمونیک متعددی برای توصیف برهم کنش های میان اتمی اتم های کربن ارائه شده است [۴۲، ۶۰-۶۲]. گلین^۱ [۶۳] پیشنهاد کرد که تغییرشکل های ساده تخمین های هارمونیک برای توصیف انرژی پتانسیل میدان های نیرویی کافی است.



^۱ - Gelin

شکل (۱۶-۱) معادل سازی مکانیک ساختاری و مکانیک مولکولی برای برهم کنشهای کووالانس و غیر کووالانسی بین اتم های کربن. (الف) مدل مکانیک مولکولی (ب) مدل مکانیک ساختاری [۵۹]

فرض کنید برهم کنش های کووالانس بین اتم های کربن را می توان با توابع ساده هارمونیک توصیف کرد. در نتیجه، انرژی های پتانسیل ارتعاشی مربوط به پیوندهای کووالانسی با معادلات (۱۳-۱) تا (۱۵-۱) بدست می آیند.

$$U_r = \frac{1}{2}k_r(r - r_0)^2 = \frac{1}{2}k_r(\Delta r)^2 \quad \text{انرژی کششی پیوند} \quad (۱۳-۱)$$

$$U_\theta = \frac{1}{2}k_\theta(\theta - \theta_0)^2 = \frac{1}{2}k_\theta(\Delta\theta)^2 \quad \text{انرژی خمشی پیوند} \quad (۱۴-۱)$$

$$U_\phi = \frac{1}{2}k_\phi(\phi - \phi_0)^2 = \frac{1}{2}k_\phi(\Delta\phi)^2 \quad \text{انرژی پیچشی کل} \quad (۱۵-۱)$$

در این جا، r_0 و θ_0 به ترتیب معرف فاصله اولیه میان اتمی و زاویه اولیه پیوند و r و θ معرف فاصله و زاویه تغییر یافته هستند. در نتیجه، Δr ، $\Delta\theta$ و $\Delta\phi$ به ترتیب به تغییر طول پیوند، زاویه پیوند و زاویه دوسطحی^۱ مربوط می شوند. عبارات k_r ، k_θ و k_ϕ ثوابت نیرویی مربوط به کشش، خمش و پیچش می باشند. برهم کنش های غیر کووالانسی مانند نیروهای واندروالس به وسیله پتانسیل لنارد-جونز [۶۴ و ۶۵] تعریف می شود.

$$V_{LJ} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (۱۶-۱)$$

در رابطه (۱۶-۱)، عبارات σ (nm) و ε (kJ/mol) به عنوان پارامترهای لنارد-جونز تعریف می-شوند. آن ها خصوصیات مادی هستند و طبیعت و استحکام پیوند را مشخص می کنند. عبارت r نیز به فاصله بین ذرات متقابل مربوط می شود.

به دلیل طبیعت میدان های نیرویی بین دو اتم، می توان با آن ها به صورت نیروی عمل کننده بین دو گره (یا نقطه مادی) که توسط المان های ساختاری تیر یا فنر جدا شده اند، برخورد کرد. بنابراین، شبکه نانولوله های کربنی را به عنوان یک شبکه سه بعدی شش وجهی از المان های تیر (کووالانس) و فنر (غیر کووالانس) می توان تصور کرد. برای تعیین ثوابت نیرویی که به برهم کنش-

¹ Dihedral angle

های کووالانسی مربوط می شوند، بایستی ارتباط بین انرژی های پتانسیل پیوندهای منفرد را با مدل تیر مربوطه برقرار ساخت [۳۰].

المان های تیر در نظر گرفته شده برای پیوند های ایزوتروپیک، با طول L ، مقطع عرضی A و ممان اینرسی I فرض می شوند. انرژی کرنشی تحت بار محوری خالص p (کشش خالص)، با رابطه (۱۷-۱) بیان می شود [۳۰].

$$U_p = \int_0^L \frac{p^2}{2EA} dL = \frac{EA}{2L} (\Delta L)^2 \quad (17-1)$$

انرژی کرنشی تیر تحت ممان خمشی M ، با رابطه (۱۸-۱) بیان می شود.

$$U_M = \int_0^L \frac{M^2}{2EI} dL = \frac{EI}{2L} (2\alpha)^2 \quad (18-1)$$

به طور مشابه، انرژی کرنشی تیر تحت پیچش خالص T ، با رابطه (۱۹-۱) بیان می شود.

$$U_T = \int_0^L \frac{T^2}{2GJ} dL = \frac{GJ}{2L} (\Delta\beta)^2 \quad (19-1)$$

در معادلات فوق، عبارات ΔL ، α و $\Delta\beta$ به ترتیب بیانگر تغییر شکل محوری، زاویه خمش و زاویه پیچش هستند. معادلات (۱۳-۱) تا (۱۵-۱) و (۱۷-۱) تا (۱۹-۱) کمیت های یکسان را در دو سیستم مختلف (مولکولی و ساختاری) بیان می کنند که با محاسبه آن ها می توان ارتباط بین دو سیستم را بدست آورد. همچنین با فرض آن که عبارات Δr ، $\Delta\theta$ و $\Delta\phi$ معادل های ΔL ، α و $\Delta\beta$ در مکانیک ساختاری باشند، می توان سفتی کششی، سفتی خمشی عرضی و سفتی پیچشی را در مدل ساختاری با ثوابت k_r ، k_θ و k_ϕ از مکانیک مولکولی تعیین کرد [۳۰].

$$\frac{EA}{L} = k_r, \quad \frac{EI}{L} = k_\theta, \quad \frac{GJ}{L} = k_\phi \quad (20-1)$$

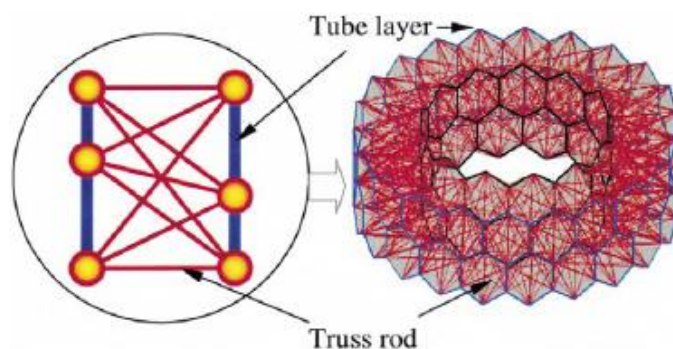
در سیستم ساختاری، نیروهای واندروالس مربوط به برهم کنش های غیرکووالانسی به صورت المان های فنر فرض می شوند. نیروی عمل کننده بر روی چنین المان فنی با مشتق گیری از رابطه (۱۶-۱) به صورت رابطه (۲۱-۱) نتیجه می شود.

$$F_{LJ} = \frac{dV(r)}{dr} = 4 \frac{\epsilon}{r} \left[-12 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^{13} + 6 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^7 \right] \quad (21-1)$$

به طور خلاصه، پارامترهای معادلات (۲۰-۱) و (۲۱-۱) برای مدل سازی رفتار مولکولی در مدل ساختاری به کار می روند. در مورد نانولوله های تک جداره، پارامترهای معادله (۲۰-۱) برای توصیف مدل ساختاری (با المان های تیر) کافی است. ولی برای نانولوله های چند جداره، نیروی واندروالس بین لوله های هم مرکز نیز باید با توجه به رابطه (۲۱-۱) در نظر گرفته شود.

۱-۶-۳-۲ کارهای انجام شده در زمینه مکانیک ساختاری

مطالعه بر روی رفتار مکانیکی نانولوله های کربنی اولین بار توسط لی و چو [۳۰] انجام گرفت. در این کار، پیوندی میان مکانیک مولکولی و مکانیک ساختاری شکل گرفت. مشکلی که در این روش وجود داشت، سفتی ای بود که در بدست آوردن ثوابت نیرویی مانند نیروهای واندروالس وجود داشت. آن ها مشکلات نانولوله های تک و چندجداره را با استفاده از روش المان محدود حل کردند. مدل ساخته شده آن ها برای شبیه سازی نیروی واندروالس در شکل (۱۷-۱) نشان داده شده است.



شکل (۱۷-۱) خریای میله ای برای شبیه سازی نیروی واندروالس [۳۰]

آریو و بلیشکو [۶۶ و ۲۹] مکانیک تغییر شکل نانولوله های تک و چند جداره را بررسی کردند. آن ها یک روش سیستماتیک با استفاده از الاستیک کریستالی و اصل کوشی- برن برای ایجاد پیوند بین توصیف اتمی از لایه های کریستالی و مکانیک محیط پیوسته ارائه دادند. آن ها نشان دادند که روش المان محدود با محاسبات اتمی در دمای تغییر شکل صفر تطابق خوبی دارد.

ونگ و همکارانش^۱ [۶۷] اثر نیروی واندروالس را بر روی آنالیز نانولوله های دوجداره مورد مطالعه قرار دادند. آن ها دریافتند که ضرایب برهم کنش واندروالس به فاصله بین لوله ها و شعاع آن ها بستگی دارد.

ونگ و همکارانش [۶۸] همچنین به ارائه‌ی مدلی با استفاده از تئوری‌های مکانیک پیوسته پرداختند و با استفاده از آن کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی را مورد مطالعه قرار دادند. آن ها به منظور نمایش قابلیت این مدل نتایج خود را برای نسبت‌های طولی متفاوت بدست آوردند و آن ها را با نتایج حاصل از مدل دینامیک مولکولی مقایسه نمودند. آنها با استفاده از دو مدل دونل و کرم^۲ به ارائه‌ی مدل پیوسته پرداختند که به ترتیب برای هر کدام تنش بحرانی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\tau_{S1} = \frac{Eh^2}{(1-v^2)L^2} \left(4.6 + \sqrt{7.8 + 1.67 \left(\sqrt{1-v^2} \frac{L^2}{dh} \right)^{\frac{3}{2}}} \right) \quad (22-1)$$

$$\tau_{S2} = \frac{4.39Eh^2}{(1-v^2)L^2} \sqrt{1 + 0.0257(1-v^2)^{\frac{3}{4}} \left(\frac{2L^2}{dh} \right)^{\frac{3}{2}}} \quad (23-1)$$

زوایای پیچش متناظر نیز به صورت زیر نشان داده می‌شود :

$$\varphi_{S2} = \frac{17.56h^2}{(1-v)dL} \sqrt{1 + 0.0257(1-v^2)^{\frac{3}{4}} \left(\frac{2L^2}{dh} \right)^{\frac{3}{2}}} \quad (24-1)$$

$$\varphi_{S1} = \frac{4h^2}{(1-v)dL} \left(4.6 + \sqrt{7.8 + 1.67 \left(\sqrt{1-v^2} \frac{L^2}{dh} \right)^{\frac{3}{2}}} \right) \quad (25-1)$$

سیرس و باترا^۳ [۶۹] بر روی کمانش نانولوله های چندجداره تحت فشار محوری بوسیله شبیه سازی مکانیک مولکولی کار کردند و نتایج را با آنالیز مشابه معادل مکانیک محیط پیوسته با استفاده از تئوری کمانش اویلر^۴ و روش المان محدود مقایسه کردند. آن ها دریافتند که نانولوله های چندجداره با نسبت طول به قطر بالا به صورت ستون و با نسبت طول به عرض پایین به صورت

¹ Wang et al.

² Kromm

³ Sears and Batra

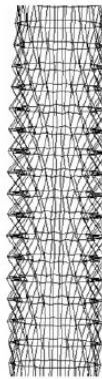
⁴ Euler buckling theory

پوسته ای کمانش می کنند. همچنین آن ها از مدل المان محدودی که نیروی واندروالس را با المان-های خربایی که گره های لوله های مجاور را به یکدیگر متصل می کرد، استفاده کردند.

آرويو و آرياس^۱ [۷۰] نانولوله چندجداره ضخيمي را به صورت تير با انرژي انحنای غيرمحدب بر پایه مشاهدات تجربی در مقیاس های اتمی بزرگ مدل کردند. این مدل ها حالات تنش مرکب از خمش هموار و مقاطع موج دار را به خوبی نشان می دهند. آن ها همچنین نتیجه گرفتند که مدل سازی نانولوله های چندجداره با تیر الاستیک خطی تخمین ضعیفی را در پی خواهد داشت.

آرياس و آرويو [۷۱] پاسخ های الاستیک غيرخطی نانولوله های چند جداره در پیچش و خمش را مدل کردند. آن ها دریافتند که رفتار مکانیکی نانولوله های چندجداره به صورت قابل ملاحظه ای به اندازه بستگی دارد.

راجاسکاران و چیترا^۲ [۷۲] نیز رفتار کمانشی و ارتعاشی نانولوله های چند جداره را مورد بررسی قرار دادند. آن ها از یک مدل المان محدود که برای محاسبه نیروی واندروالس از نرم افزار MATLAB بهره می گیرد، استفاده کردند. مدل المان محدود آن ها در شکل (۱-۱۸) نمایش داده شده است.



شکل (۱-۱۸) شکل مد کمانشی در اثر اعمال بار فشاری به انتهای آزاد [۷۲]

هو و همکارانش^۳ به بررسی کمانش نانولوله های کربنی با استفاده از روش های عددی پرداختند [۷۳]. آنها برای نشان دادن این رفتار از مدل تیر معادل استفاده کردند. در حقیقت آن ها در

¹ Arroyo and Arias

² Rajasekaran and Chitra

³ Hu et al.

این مدل، پتانسیل‌های مکانیکی و مولکولی موجود در پیوند کووالانسی بین اتم‌های C-C را به شکل انرژی کرنشی معادل در یک تیر مجازی سه بعدی بین دو اتم کربن در نظر گرفتند و سپس پارامترهای سفتی معادل در تیر را از ثابت‌های نیرویی در تئوری مکانیک مولکولی بدست آوردند. آنها همچنین برای مدل کردن نانولوله‌های کربنی چند جداره از المان‌های جدید میله‌ای که خود پیشنهاد کرده بودند، برای در نظر گرفتن تأثیرات بر هم کنش‌های واندروالس استفاده نمودند. در نهایت آنها رفتار کمانسی نانولوله‌ها را به وسیله‌ی این دو المان تیر و میله و با استفاده از روش المان محدود بدست آوردند. آنها نتایج خود را با نتایج حاصل از دینامیک مولکولی مقایسه نمودند که تطابق خوبی بین آنها وجود داشت.

آن‌ها انرژی پتانسیل کل را به شکل زیر در نظر گرفتند:

$$E_{\text{pot}} = \underbrace{\sum_{\text{bonds}} V_s + \sum_{\text{angles}} V_a + \sum_{\text{dihedrals}} V_t}_{\text{bonded interactions}} + \underbrace{\sum_{\text{atoms}} V_v + \sum_{\text{atoms}} V_e}_{\text{non-bonded interactions}} \quad (26-1)$$

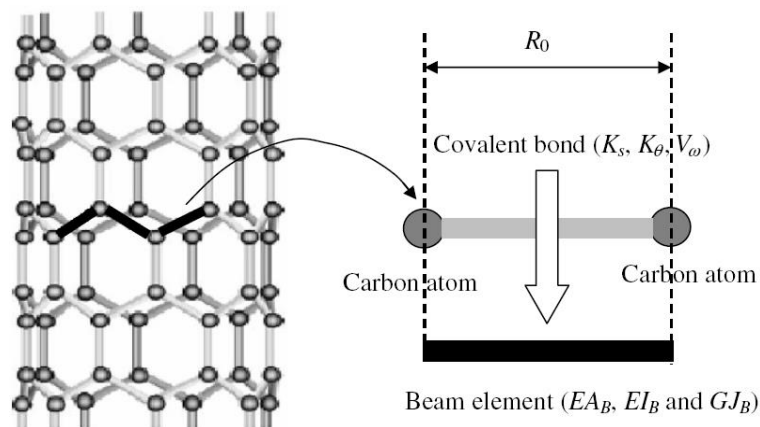
که در آن V_s ، V_a و V_t به ترتیب انرژی‌های مربوط به کشش بین اتمی، خمشی بین اتمی، پیچش دو سطحی و پیچش خارج از صفحه می‌باشد و V_v و V_e بر هم‌کنش‌های واندروالس و الکترواستاتیک بین اتم‌ها می‌باشند. در شکل (۱-۱۹) نمایی از ساختمان المان تیر برای پیوند C-C نشان داده شده است. در این شکل، EA سفتی کششی، EI سفتی خمشی و GI سفتی پیچشی می‌باشد که به صورت‌های زیر معادل می‌شوند.

$$EA_B = K_s R_0 \quad (27-1)$$

$$EI_B = \frac{K_s R_0^3 (K_s R_0^2 + 3K_\theta)}{36(K_s R_0^2 - K_\theta)} \quad (28-1)$$

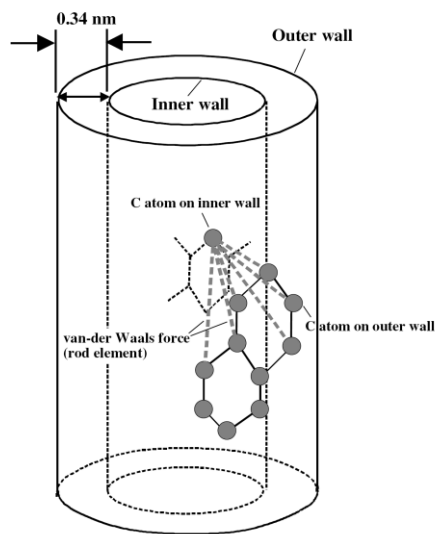
$$GJ_B = 2V_\omega R_0 \quad (29-1)$$

که در آن R_0 فاصله‌ی پیوند C-C در حال تعادل 0.142 ، K_s ثابت نیرویی در کشش پیوند، K_θ ثابت نیرویی در خمش زاویه‌ای و V_ω ثابت پیچشی می‌باشد. مدول یانگ بدست آمده از نتایج آن‌ها 1.06TPa و نسبت پواسون 0.225 است.



شکل (۱۹-۱) نمایی از ساختمان المان تیر به عنوان پیوند C-C [۷۳]

در ادامه آنها بر هم کنش‌های واندروالس را بین جداره‌های نانولوله‌ها شبیه‌سازی کردند که در شکل (۲۰-۱) نمایش داده شده است. قابل ذکر است که آنها از پتانسیل لِنارد-جونز برای مدل خود استفاده کردند.



شکل (۲۰-۱) شبیه‌سازی بر هم کنش‌های واندروالس بین جداره‌های نانولوله‌های کربنی [۷۳]

اگرچه مدل ارائه شده توسط آنها مدلی جدید بود؛ اما در سالهای بعد با ارائه‌ی مدل‌های تکمیل شده‌ی دینامیک مولکولی، نتایج آنها دیگر مورد تأیید قرار نگرفت و قابل استفاده نبود. عیب اصلی مدل آنها تعریف تغییرات زاویه‌ای با استفاده از خمش تیر بود که با واقعیت تفاوت اساسی داشت.

۷-۱ آزمایش های تجربی و نتایج

آزمایش های تجربی مکانیکی به طور گسترده هم بر روی نانولوله های مجزا و هم مواد کامپوزیتی با الیاف نانولوله انجام شده است. آزمایش های انجام شده بر روی نانولوله های مجزا بیشتر بر روی خواص ساده مکانیکی در مقیاس نانو متمرکز شده است. بسیاری از آزمایش های مکانیکی ساده و تجاری در مقیاس ماکرو به سختی در مقیاس نانو قابل انجام و اندازه گیری می باشند. با وجود این مشکلات، آزمایش های زیادی با موفقیت بر روی نانولوله های تک و چند جداره انجام گرفته است. در این روش بیشتر تمایل به انجام آزمایش های خمشی، مخصوصاً تیر یکسرگیردار [۷۴] و خمش سه نقطه ای^۱ [۷۵ و ۷۶] می باشد. هرچند، آزمایش های کشش موفق نیز انجام شده است [۲۴ و ۷۷] و یکی از اولین آزمایش های انجام گرفته، آزمایش ارتعاشی بوده است [۷۸]. آزمایش های متعدد و نتایج آن ها در جدول (۴-۱) آورده شده است. برای بررسی کارهای تجربی بیشتر در زمینه نانولوله ها بهتر است به اطلاعات گردآوری شده توسط کیان^۲ و همکارانش مراجعه شود [۷۹].

چندین نکته را می توان در مورد جدول (۴-۱) ذکر کرد. اولین نکته این که تمامی نتایج به صورت مدل پیوسته استاندارد (خطی، ایزوتروپیک و $t = 3.4 \text{ \AA}$) هستند. این امر به دلیل آن که ساده-ترین و رایج ترین روش است، قابل درک می باشد. مدل های دیگر به طور خاص فقط با توجه به شبیه سازی های مولکولی مورد بحث قرار می گیرند. ثانیاً، نتایج دارای پراکندگی زیادی هستند که به دلیل محدودیت های دستکاری در مقیاس نانو می باشد. به این نکته نیز باید توجه داشت که کیفیت نانولوله های استفاده شده در آزمایش های تجربی، می تواند بر روی نتایج و پراکندگی آن ها تاثیر بگذارد. متداول ترین وسیله اندازه گیری، میکروسکوپ نیروی اتمی^۳ می باشد که برای اعمال بارها به نانولوله، در آزمایش های خمش و کشش مورد استفاده قرار می گیرد.

¹ 3-point bending test

² Qian et al.

³ Atomic force microscope (AFM)

جدول (۴-۱) خواص مادی نتیجه شده برای نانولوله از آزمایش های تجربی مکانیکی [۴۵].

نام محقق	سال	مدول یانگ متوسط (TPa)	نوع آزمایش	نوع نانولوله
تریسی و همکارانش ^۱ [78]	۱۹۹۶	۱,۸	ارتعاشات گرمایی	نانولوله چند جداره
وانگ و همکارانش ^۲ [74]	۱۹۹۷	۱,۲۸	تیر یکسرگیردار	نانولوله چند جداره
کریشنان و همکارانش ^۳ [۸۰]	۱۹۹۸	۱,۳	ارتعاشات گرمایی	نانولوله تک جداره
سالوات و همکارانش ^۴ [75]	۱۹۹۹	۰,۸۱	سه نقطه خمشی	دسته نانولوله ها ^۵
سالوات و همکارانش [75]	۱۹۹۹	۱,۲۸	سه نقطه خمشی	نانولوله چند جداره
تامبلر و همکارانش ^۶ [76]	۲۰۰۰	۱,۲	سه نقطه خمشی	نانولوله تک جداره
کوپر و یانگ ^۷ [۸۱]	۲۰۰۰	۰,۷۸ - ۲,۳۴	طیف نمایی رامان	نانولوله تک جداره
یو و همکارانش ^۸ [24]	۲۰۰۰	۰,۲۷ - ۰,۹۵	کشش	نانولوله چند جداره
لوری و همکارانش ^۹ [۸۲]	۱۹۹۸	۲,۸ - ۳,۶	طیف نمایی رامان	نانولوله تک جداره
لوری و همکارانش [82]	۱۹۹۸	۱,۷ - ۲,۴	طیف نمایی رامان	نانولوله چند جداره
یو و همکارانش [77]	۲۰۰۰	۰,۳۲ - ۱,۳۴	کشش	رشته ها ^{۱۰}
پانچارال و همکارانش ^{۱۱} [۸۳]	۱۹۹۹	~1	ارتعاشات الکتریکی	نانولوله چند جداره

همان طور که پیش تر در ابتدای این فصل ذکر گردید؛ مقدار متداول پذیرفته شده برای مدول یانگ برای نانولوله های تک جداره در حد 1 TPa است. با توجه به این معیار، بیشتر آزمایش ها این مدول را در محدوده پراکندگی خود بدست آورده اند. تنها داده های کوپر و یانگ مقدار بیشتری را پیش بینی کرده اند [۸۱]. نتایج آن ها دارای اختلاف است، به این دلیل که آن ها از طیف نمایی

¹ Treacy et al.

² Wong et al.

³ Krishnan et al.

⁴ Salvetat et al.

⁵ Bundles

⁶ Tombler et al.

⁷ Cooper and young

⁸ Yu et al.

⁹ Lourie et al

¹⁰ Ropes

¹¹ Poncharal et al.

رامان بر روی یک ماده کامپوزیتی با الیاف نانو برای بدست آوردن مدول یانگ استفاده کرده اند. آن ها این نتایج را این چنین تفسیر کردند که نتایج آن ها، برای یک جهت ایده آل تصادفی الیاف می باشد که مدول را زیاد افزایش نمی دهد. این نکته مشخص است که آزمایش های تجربی نمی توانند دیگر خواص مادی نانولوله های کربنی، نظیر مدول برشی و ضریب پواسون را تعیین کنند. این امر پیش بینی سایر ثوابت الاستیک را به شبیه سازی های اتمی واگذار می نماید.

با دقت در مقالات ارائه شده، مشاهده می شود مدل هایی که نتایج قابل قبول و مطمئنی از خود نشان می دهند؛ اکثراً مربوط به روش دینامیک مولکولی می باشند که روشی پیچیده، زمان بر و پرهزینه می باشد. به جز مدل ارائه شده توسط ونگ [۶۸] باقی مدل ها نتایج چندان خوبی از خود نشان نمی دهند؛ که البته مدل ونگ در حین سادگی دارای پیچیدگی هایی نیز می باشد. با توجه به این مطالب در این پروژه مدلی ارائه شده است که در حین سادگی دارای دقت و قابلیت های بالایی می باشد. در این مدل سعی شده است که از تمامی پتانسیل های مهم و تأثیرگذار بر رفتار کمانشی نانولوله ها استفاده شود تا مدل جامع و قابل قبولی را ارائه کرده باشیم. از جمله قابلیت ها و فواید این مدل می توان به موارد زیر اشاره کرد:

۱- در نظر گرفتن تمامی پتانسیل های تأثیرگذار بر رفتار کمانشی نانولوله های کربنی که مدل های ساختاری قبلی آنها را در نظر نگرفته اند.

۲- مدلسازی دقیق نیروی غیرخطی و اندروالس و امکان تغییر فاصله اثرگذاری این نیرو.

۳- این مدل را می توان برای انواع آرایش ها، طول ها و قطرهای بزرگتر نیز گسترش داد.

۴- می توان به راحتی شرایط مرزی و بارگذاری را تغییر داده و مسأله را برای هر حالت حل نمود.

۵- با استفاده از این مدل می توان انواع آنالیزها نظیر تحلیل کمانشی و فرکانسی را انجام داد.

۶- با استفاده از این مدل می توان به راحتی انواع عیوب مورد نظر را در نانولوله ایجاد نمود و

مسأله را با در نظر گرفتن این عیوب حل کرد.

در فصل های بعدی به توصیف مدل و نتایج حاصل از آن پرداخته شده است.

فصل دوم

مدل سازی نانولوله های

کربنی

فصل ۲- مقدمه

در این فصل ابتدا به صورت مختصر به معرفی بخش‌های مورد استفاده از نرم‌افزار اجزای محدود ABAQUS پرداخته و سپس نحوه‌ی مدل‌سازی نانولوله‌های کربنی تک جداره [۸۴ و ۸۵] و چندجداره سالم و معیوب را در این نرم‌افزار مورد بحث و بررسی قرار می‌دهیم.

۲-۱- نرم‌افزار ABAQUS

نرم‌افزار ABAQUS یک مجموعه از برنامه‌های مدل‌سازی بسیار توانمند می‌باشد که مبتنی بر روش اجزاء محدود بوده و قابلیت حل مسائل مختلف از یک تحلیل خطی ساده تا پیچیده‌ترین مدل‌سازی-های غیر خطی را دارا می‌باشد. این نرم‌افزار دارای مجموعه المان‌های بسیار گسترده‌ای است که هر نوع هندسه‌ای را می‌تواند به صورت مجازی توسط المان‌ها مدل می‌کند. همچنین این نرم‌افزار دارای انواع مواد مهندسی از جمله فلزات، لاستیک‌ها، پلیمرها، کامپوزیت‌ها، بتن‌ها و ... می‌باشد.

ABAQUS/CAE محیط اصلی و گرافیکی این نرم‌افزار می‌باشد که در آن قابلیت‌های متنوعی جهت مدل‌سازی، حل مدل و نیز مشاهده نتایج در دسترس قرار گرفته است. این محیط به بخش‌های ده‌گانه‌ای تقسیم شده است که در هر یک از این بخش‌ها می‌توان فرآیندهای خاصی را بر روی مدل انجام داد. در این نرم‌افزار قابلیت وجود دارد که با استفاده از آن می‌توان یک فایل ورودی^۱ را از طریق بازخوانی کل مدل ایجاد کرده و سپس در صورت نیاز تغییراتی را که در محیط CAE امکان پذیر نمی‌باشد، بر روی این فایل اعمال نمود. با استفاده از این قابلیت می‌توان داده‌های مورد نیاز برای فنر غیر خطی را که در محیط CAE نمی‌توان تعریف نمود، در این فایل وارد کرده و مسئله را بعد از

^۱ Input file

اعمال تغییرات مورد نیاز حل کرد. از این قابلیت به طور گسترده در مدل سازی نیروی واندروالس بین جداره های نانولوله های چند جداره استفاده شده است.

۲-۱-۱ تحلیل Buckle

به منظور رسیدن به نتایج مورد نظر باید از فرآیند حل Buckle در نرم افزار ABAQUS استفاده کرد. این فرآیند حل، یک تحلیل خطی مقدار ویژه است و برای بدست آوردن مقادیر ویژه ی کمانش برای سازه های الاستیک و سفت^۱ مورد استفاده قرار می گیرد. به عبارت دیگر بار بحرانی، تغییر شکل های بحرانی و نیز شکل مدهای کمانش را بدست می دهد. یک مثال ساده از سازه های سفت، ستون اوپلر است. در یک مسئله مقدار ویژه، هدف تعیین بارهایی است که در این بارها ماتریس سفتی مدل، تکین شود. بنابراین رابطه ی

$$K^{MN} v^M = 0 \quad (1-2)$$

حل های غیر صفر خواهد داشت. وقتی بار اعمال می شود، K^{MN} ماتریس سفتی است و v^M جابجایی های مخالف صفر هستند. بار های اعمال شده می توانند شامل فشار، نیروهای متمرکز، جابجایی های غیر صفر و یا بار گذاری حرارتی باشند. فرمول بندی مسئله مقدار ویژه به صورت زیر است:

$$(K_0^{MN} + \lambda_i K_{\Delta}^{MN}) v_i^M = 0 \quad (2-2)$$

که در این رابطه، K_0^{MN} ماتریس سفتی مربوط به حالت اولیه و شامل تأثیرات پیش بارها است. K_{Δ}^{MN} ماتریس سفتی دیفرانسیلی بار و تنش اولیه ی ناشی از الگوی بارگذاری افزایشی است. λ_i ها مقادیر ویژه و v_i^m ها شکل مدهای کمانش (بردارهای ویژه) هستند. M و N مربوط به درجات آزادی کل مدل و i مشخص کننده مد کمانش i ام است.

¹ Stiff

۲-۱-۲ تحلیل Frequency

این نوع آنالیز که ماهیتی خطی دارد برای بدست آوردن فرکانس های طبیعی و مدهای ارتعاشی مورد استفاده قرار می گیرد. نرم افزار آباکوس این امکان را به ما می دهد که فرکانس های طبیعی نانولوله های کربنی را به تعداد دلخواه با دقت زیاد به دست آوریم. در این نوع تحلیل نیاز به اعمال بار نمی باشد و تنها با اعمال شرایط مرزی نرم افزار تمامی فرکانس های طبیعی تا تعداد تعریف شده را محاسبه می کند که تمامی شکل مد های^۱ محوری، پیچشی و خمشی را در بر می گیرد. همچنین این قابلیت وجود دارد که با اعمال بار معین شکل های فرکانسی مربوط به همان نوع بارگذاری را تعیین کرد.

۳-۱-۲ آنالیز Static, Riks

در این آنالیز می توان با اعمال بار به سیستم تغییر شکل های بزرگ غیر خطی سیستم را تعیین کرد. در نتیجه از این تحلیل برای بدست آوردن مدول الاستیسیته نانولوله های کربنی استفاده شده است. با اعمال بار کششی واحد و شرایط مرزی مناسب، آزمایش کشش ساده را می توان در نرم افزار مدل کرد و با تعیین نمودار نیرو-جابجایی و رابطه مربوطه مدول الاستیک را محاسبه نمود.

۲-۲ شبیه سازی نانولوله های کربنی سالم

مدل سازی نانولوله های کربنی سالم در نرم افزار آباکوس برای نانولوله های تک جداره و چند جداره به صورت مجزا صورت گرفته است که در ذیل به تفکیک مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

۱-۲-۲ نانولوله های کربنی تک جداره

ایجاد مدل ساختاری برای تحلیل خواص نانولوله های کربنی تک جداره در چندین مرحله انجام می پذیرد که با ذکر جزئیات در ادامه آورده شده است.

^۱ Mode shapes

۲-۱-۲-۱ مرحله ایجاد اتم‌های کربن به صورت کره‌های تو خالی

برای این منظور در بخش Part، بر روی گزینه Create part کلیک کرده و با انتخاب حالت Solid و Discrete Rigid کره‌ای را با قطری برابر با قطر یک اتم کربن ($D=0.357 \text{ nm}$) ایجاد می‌نمائیم. پس از انجام این کار نقطه مرجعی را در مرکز کره در نظر می‌گیریم که در حقیقت نماینده کل کره می‌باشد. قابل ذکر است کره را از این جهت Discrete Rigid انتخاب می‌کنیم که نیازی به تغییر شکل ندارد و صرفاً برای نشان دادن هرچه بهتر ماهیت نانولوله به کار می‌رود.

۲-۱-۲-۲ مرحله‌ی تعیین خواص مکانیکی

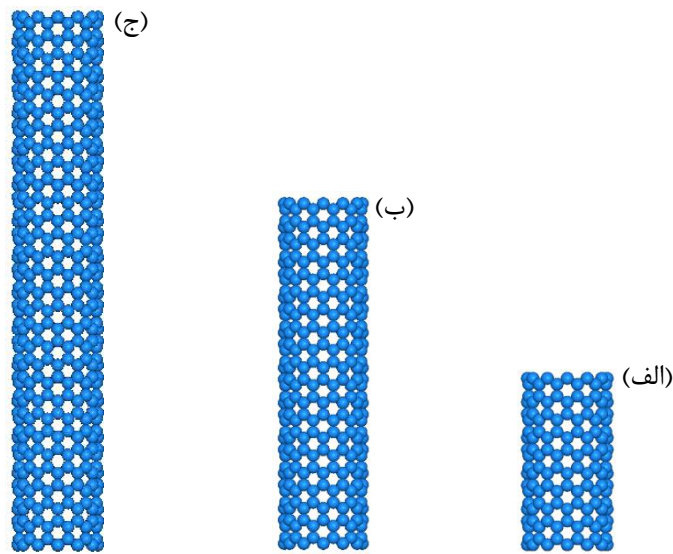
با ورود به بخش Property می‌توان برای ماده خواص مکانیکی مورد نظر را تعریف کرد. در این مدل نیازی به نسبت دادن هیچ گونه خاصیت مکانیکی به ماده نمی‌باشد؛ چرا که این برهم‌کنش‌های بین اتم‌ها است که تعیین کننده رفتار کلی نانولوله می‌باشد. البته در صورت استفاده از مدل در تحلیل‌های دینامیکی می‌توان چگالی جرمی مورد نیاز (مطابق با چگالی جرمی اتم کربن) را برای آن در نقطه مرجع تعریف کرد. که از این قسمت در آنالیز فرکانس طبیعی استفاده شده است.

۲-۱-۲-۳ مونتاژ اتم‌های کربن

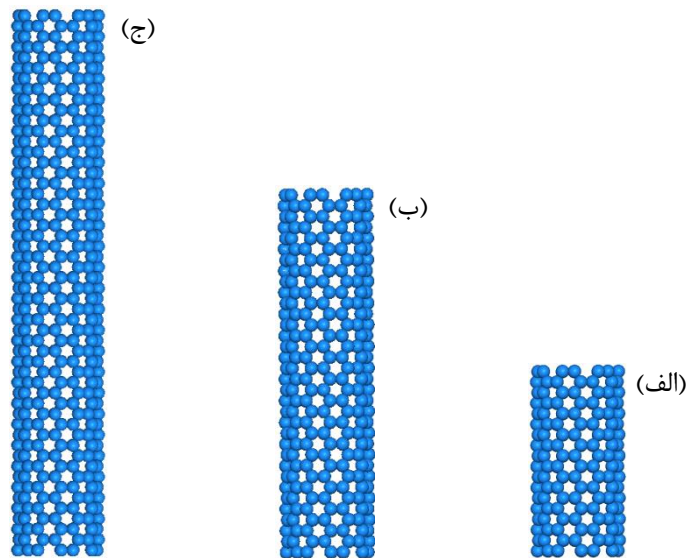
در این مرحله اتم‌های کربن مورد نیاز بر حسب تعداد و نوع چیرالیتی^۱ که می‌تواند آرمیچر و یا زیگ-زاگ باشد در موقعیت‌های مناسب قرار داده می‌شوند و در حقیقت مونتاژ می‌شوند. با توجه به شکل (۱-۲) و شکل (۲-۲) مشاهده می‌شود که نانولوله‌های با طول‌های متفاوت و با چیرالیتی متفاوت را می‌توان مدل نمود.

لازم به ذکر است قطر نانولوله‌ها را می‌توان با استفاده از روابط موجود در جدول (۱-۱) بدست آورد.

^۱ Chirality



شکل (۱-۲) نانولوله‌های مونتاژ شده از نوع زیگ-زاگ، (الف): $L=1/998 \text{ nm}$: (ب): $L=4/118 \text{ nm}$: (ج): $L=6/24 \text{ nm}$



شکل (۲-۲) نانولوله‌های مونتاژ شده از نوع آرمچیر، (الف): $L=2/09 \text{ nm}$: (ب): $L=4/058 \text{ nm}$: (ج): $L=6/272 \text{ nm}$

۴-۱-۲-۲ اعمال برهم کنش‌های بین اتمی

در بخش Interaction می‌توان برهم‌کنش‌های بین اتمی را تعریف نمود و برای این امر باید مطابق

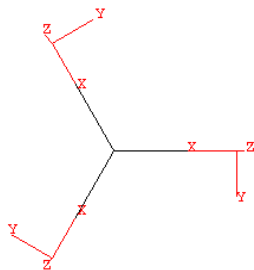
روش زیر عمل کرد.

همانطور که گفته شد در مرکز هر اتم کرن یک نقطه مرجع قرار داده شده است. از این نقاط

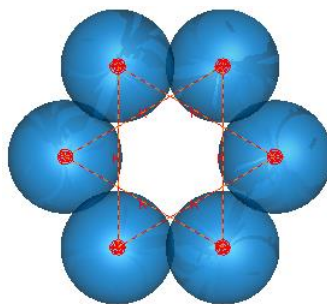
می‌توان برای ایجاد دستگاه مختصات محلی استفاده نمود. قابل ذکر است که در نرم‌افزار آباکوس برای

نسبت دادن برخی از انواع برهم‌کنش‌های بین اتصالات، باید بر روی نقاط ابتدائی و انتهائی اتصال یک

مختصات محلی تعریف نمود. مختصاتی که در این جا تعریف شده است از نوع کارترین می باشد که جهت محور X آن در جهت اتصال بین دو اتم بوده و جهت محور Z آن عمود بر محور مرکزی نانولوله در نظر گرفته شده است (شکل (۳-۲)). در بخش Interaction ابتدا این دستگاه های مختصات محلی را اعمال می نماییم؛ پس از آن فنرهایی را که نقش خمش بین اتمها را ایفا می کنند، مطابق شکل (۴-۲) بین آنها قرار می دهیم. در این حالت فنرها را به صورت الاستیک در نظر می گیریم. لازم به ذکر است که در محیط ABAQUS/CAE امکان ایجاد فنر غیر خطی وجود ندارد؛ لذا برای ایجاد فنر غیر خطی باید ابتدا فایل ورودی هر مدل را استخراج کرده و تغییرات مناسب را روی آن اعمال نمائیم.



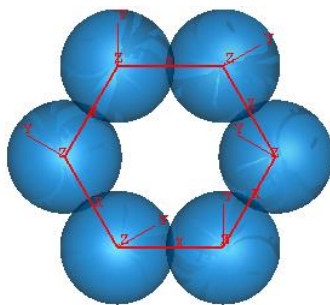
شکل (۳-۲) نحوه ی قرار گرفتن دستگاه مختصات محلی بر روی مرکز اتم های کربن



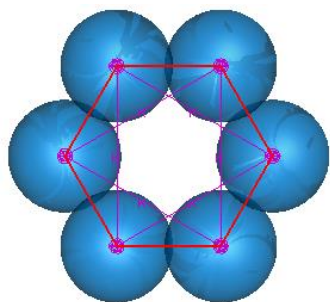
شکل (۴-۲) نحوه ی قرار گرفتن فنرهای خمشی بین اتم های کربن

پس از اعمال فنرها در این بخش باید بین هر یک از اتم های کربن و اتم کربن مجاور آن یک اتصال ایجاد نمود و سپس برای آن اتصال یک رفتار مشخص را تعریف کرد. برای انجام این کار بر روی آیکن Create wire در بخش Interaction کلیک کرده و اتصالات مورد نظر را با انتخاب مرکز اتمها به عنوان نقاط ابتدائی و انتهائی تعریف می نماییم. بعد از آن بر روی گزینه Create connector section کلیک کرده و رفتار مورد نیاز را برای آن تعریف می نماییم. برای اعمال رفتارهای بین اتمی، یعنی

کشش بین اتم‌ها، پیچش زاویه‌ای دو سطحی و پیچش خارج صفحه‌ای، مطابق شکل برروی Basic type کلیک کرده و از قسمت Translational type بر روی Cartesian و از قسمت Rotational type بر روی Rotation کلیک می‌کنیم و ادامه می‌دهیم. سپس در پنجره ظاهر شده برروی گزینه‌ی add کلیک کرده و Elasticity را انتخاب می‌نمائیم. در زیر بخش Nonlinear, Definition را انتخاب کرده و داده‌های مورد نیاز را وارد می‌نمائیم. در شکل (۵-۲) می‌توان این اتصالات را بین اتم‌های کربن مشاهده کرد. بعد از تعریف رفتارهای مورد نیاز برروی آیکن Create connector assignment کلیک کرده و با انتخاب اتصالات مربوطه این رفتارها را به اتصالات نسبت می‌دهیم. در شکل (۶-۲) نیز می‌توان مجموع فنرهای خمشی و اتصالات که در کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند را مشاهده نمود.



شکل (۵-۲) نحوه‌ی قرار گرفتن اتصالات بین اتم‌های کربن



شکل (۶-۲) مجموع فنرهای خمشی و اتصالات بین اتم‌های کربن

در جدول (۱-۲) می‌توان تمامی کمیات مربوط به هر کدام از برهم کنش‌های بین اتمی در شبکه نانولوله‌های تک جداره را مشاهده نمود. این مقادیر برای آرایش‌های زیگ-زاگ و آرمچیر یکسان هستند. لازم به ذکر است که این مقادیر با توجه به پتانسیل مورس که در فصل قبل توضیح داده شد، بدست آمده‌اند.

جدول (۱-۲) پارامترهای به کار رفته برای مدل سازی برهم کنش های بین اتمی در نانولوله تک جداره [۸۶].

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

۵-۱-۲-۲ بار گذاری و شرایط مرزی

در بخش Condition شرایط مرزی و بارگذاری های مورد نیاز را اعمال می نمایم. در این پروژه در تحلیل های مختلف از سه نوع بارگذاری فشاری، پیچشی و خمشی و چهار نوع شرایط مرزی دو سرگیردار^۱، گیردار- آزاد^۲، دو سر ساده^۳ و گیردار- لولا شده^۴ استفاده شده است. برای اعمال هر چه بهتر شرایط مرزی و نیرویی دو صفحه به دو طرف نانولوله ها Tie گردید و بارگذاری ها و شرایط مرزی به مرکز این صفحات اعمال گردید. به این ترتیب نیروها و شرایط مرزی به تمامی اتم های کربن ابتدایی و انتهایی به صورت یکسان اعمال می گردد.

۶-۱-۲-۲ المان بندی اتم های مونتاژ شده

در بخش Mesh می توان اتم های کربن را که به صورت یک کره تعریف شده اند را المان بندی کرد. اگرچه می توان مدل ایجاد شده را بدون المان بندی حل نمایم. در این حالت مدل قابل حل است و مقادیر ویژه ی مربوطه را بدست می دهد؛ ولی شکل مدهایی که از آن بدست می آید، چندان قابل بررسی نمی باشد. دلیل اینکه مدل بدون المان بندی حل می شود، این است که رفتار ماده به برهم کنش های بین اتم ها برمی گردد و نه به خواص مکانیکی خود اتم. حل مدل بدون مش بندی زمان

¹ Fixed-Fixed

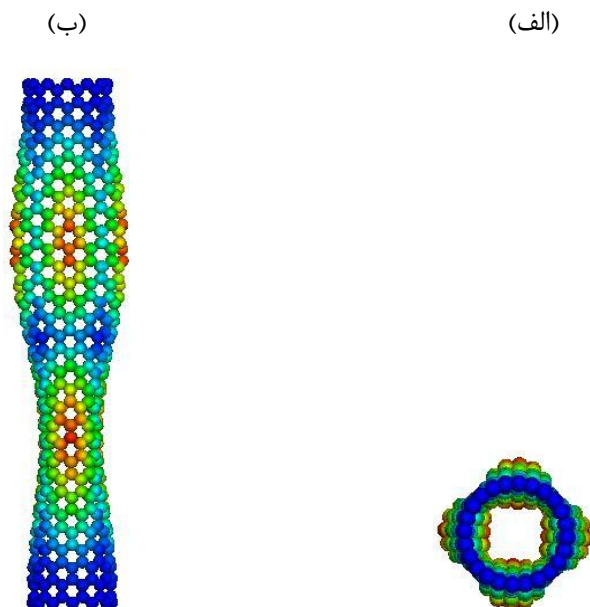
² Fixed- Free

³ Simple-Simple

⁴ Pinned-Fixed

حل مسئله را بسیار کوتاه می‌کند که این کوتاه شدن زمان حل، یکی از قابلیت‌های خاص مدل ارائه شده می‌باشد. در شکل (۷-۲) نمونه‌ای از شکل مدهای ناشی از حل مسئله با المان بندی آورده شده است.

لازم به ذکر است که برای مشاهده هرچه بهتر تغییر شکل‌ها در نرم افزار آباکوس از ضریب مقیاس^۱ ۰,۸۲ استفاده شده است. که در ادامه، تمامی تغییر شکل‌ها با توجه به این ضریب بدست آمده‌اند. همچنین، در تمامی شکل‌هایی که مربوط به تغییر شکل نانولوله‌های تک و دوجداره هستند، کانتور جابجایی نمایش داده شده است.



شکل (۷-۲) نتایج حاصل از کمانش نمونه‌ای از نانولوله‌ها، (الف) نما از بالا، (ب) نمای عمودی

همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود در حالتی که نانولوله‌ها بدون المان بندی حل می‌شوند، تنها فنرهای خمشی و اتصالات در نتایج دیده می‌شود.

۷-۱-۲-۲ بخش حل مسئله

در بخش Job مدل ساخته شده را که پس از اعمال تغییرات مربوط به فتر غیر خطی مجدداً باز خوانی کرده ایم، حل کرده و نتایج مورد نظر را در بخش Visualization مشاهده می‌کنیم.

¹ Scale factor

۲-۲-۲ نانولوله های کربنی دو جداره

برای مدل سازی نانولوله های دوجداره، مراحل مدل سازی برای ایجاد هر یک از لوله ها مشابه بخش (۱-۲-۲) می باشد. بخش اصلی در ایجاد نانولوله دوجداره نحوه اعمال نیروی واندروالس بین اتم ها می باشد. در ادامه به توضیح این مراحل می پردازیم.

۱-۲-۲-۲ مدل سازی نانولوله تک جداره داخلی و خارجی

برای شبیه سازی نانولوله دو جداره با استفاده از مدل ساختاری جدید ابتدا نیاز است که نانولوله های داخلی و خارجی را مطابق مراحل بخش قبل ایجاد نمود. برای ایجاد نانولوله دوجداره می توان هر کدام از نانولوله های داخلی و خارجی را ایجاد و سپس در همان محیط دیگری را شبیه سازی و به آن اضافه کرد (شکل (۸-۲)). این کار برای شبیه سازی نانولوله های چندجداره نیز قابل اجراست. باید به این نکته توجه شود که نانولوله ها هم مرکز باشند و فاصله $0,34$ نانومتر بین نانولوله ها رعایت شود.



شکل (۸-۲) نحوه مدل سازی نانولوله دو جداره (الف) نانولوله داخلی (ب) نانولوله خارجی (ج) نانولوله دو جداره

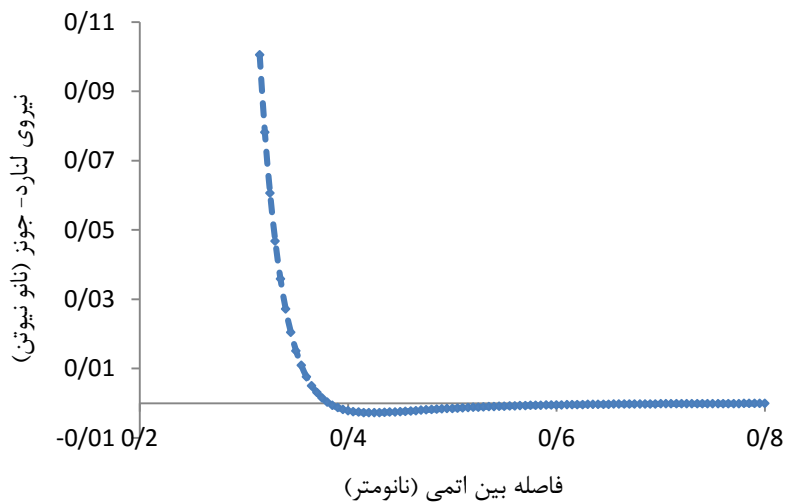
۲-۲-۲-۲ اعمال نیروی واندروالس

پس از شبیه سازی جداره داخلی و خارجی بایستی این دوجداره را توسط نیروی غیر خطی واندروالس به یکدیگر مرتبط ساخت. برای شبیه سازی این نیرو از المان فنر غیرخطی در نرم افزار آباکوس استفاده شده است. همانطور که قبلا ذکر گردید، ایجاد فنر غیرخطی در محیط اصلی شبیه سازی نرم افزار (ABAQUS/CAE) امکان پذیر نمی باشد و بایستی تغییرات را در فایل نوشتاری INP آن اعمال نمود. برای این کار بایستی داده های مربوط به نیروی واندروالس بر حسب فاصله بین

اتمی (رابطه (۲۱-۱)) را وارد فایل نوشتاری مدل نمود. داده های مربوط به نیروی واندروالس با استفاده از رابطه (۲۱-۱) و ثوابت جدول (۲-۲) بدست آمده و در شکل (۹-۲) رسم شده است.

جدول (۲-۲) پارامترهای به کار رفته در معادله لنارد- جونز (رابطه (۲۱-۱)) [۸۷].

پارامتر	مقدار
ϵ	3.86×10^{-4} nN.nm
σ	0.34 nm



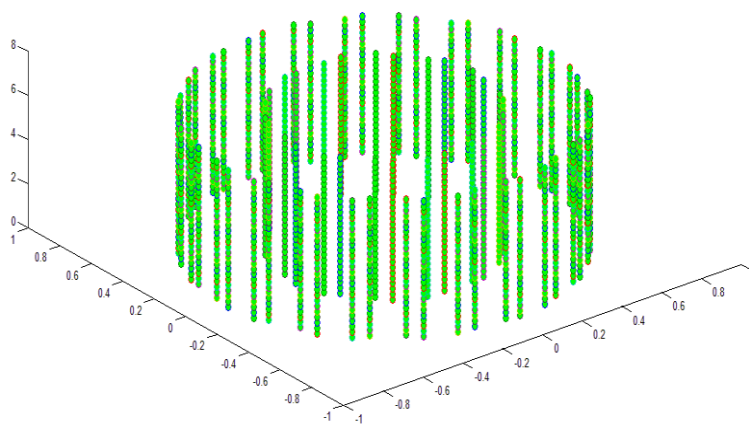
شکل (۹-۲) نمودار نیروی لنارد- جونز بر حسب فاصله بین اتمی

مشکل دیگر در مدل سازی فنر غیر خطی تعداد بالای این فنر می باشد که هر اتم کربن را با این المان باید به تعداد زیادی اتم کربن دیگر در لایه مجاور مرتبط ساخت. این نکته بسیار حائز اهمیت است؛ زیرا عدم رعایت تعداد دقیق این اتصالات منجر به برهم خوردن تقارن مدل و در نهایت نتایج اشتباه خواهد شد. مورد دیگری که ایجاد دستی این المان ها را بسیار پیچیده و زمان گیر می کرد، فاصله کم لایه ها و امکان خطا در محاسبه فاصله مراکز اتم های کربن بود.

برای رفع این مشکلات و تسریع در مدل سازی دقیق و شناور این المان ها از نرم افزار متلب^۱ استفاده شد. بدین گونه که با نوشتن الگوریتمی هندسی و شناور این قابلیت به وجود آمد که به عنوان ورودی طول نانولوله، آرایش نانولوله (زیگ-زاگ یا آرمچیر) و فاصله مورد نظر برای اتصال المان ها از

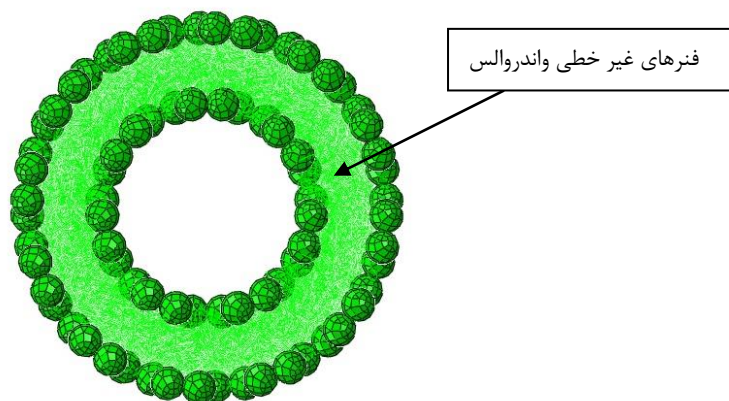
^۱ MATLAB

کاربر گرفته، شکل نانولوله را رسم (مطابق شکل (۲-۱۰))، تمامی المان های فنر ممکن در محدوده مورد تعریف را محاسبه کرده و به شکل قابل افزودن به فایل آباکوس تبدیل می سازد. از ویژگی های این برنامه آن است که می توان محدوده مورد نظر برای اتصال اتم های کربن را تغییر داد و خروجی-های آن را مستقیماً وارد فایل INP آباکوس نمود. در تحلیل های انجام شده، این فاصله برابر ۸،۰ نانومتر در نظر گرفته شده است. علت انتخاب این فاصله به این دلیل است، که در فواصل اتمی بیشتر نیروی واندروالس برابر صفر خواهد بود و تاثیری در نتایج نخواهند داشت.



شکل (۲-۱۰) نانولوله دوجداره رسم شده در نرم افزار MATLAB

پس از اضافه نمودن خروجی برنامه نرم افزار MATLAB و تعریف نمودار غیرخطی نیرو-فاصله اتمی بر اساس رابطه (۱-۲۱) به عنوان مشخصات فنر غیرخطی و اجرای برنامه، اتصالات واندروالس بین جداره ها ایجاد می شود (شکل (۲-۱۱)).

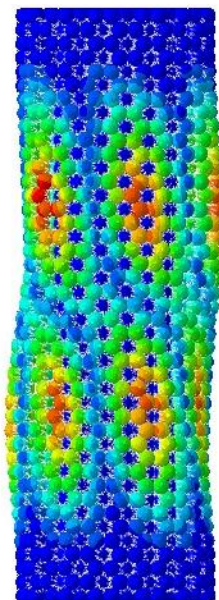


شکل (۲-۱۱) نانولوله دوجداره همراه با نیروی واندروالس

لازم به ذکر است که در این پروژه برای تعیین تاثیر نیروی واندروالس بر روی نتایج تحلیل های مختلف از دو مدل بدون نیروی واندروالس و با نیروی واندروالس استفاده شده است.

۳-۲-۲-۲ بخش حل مسئله

پس از اضافه کردن دو صفحه در ابتدا و انتهای مدل و اعمال شرایط مرزی و بارگذاری مشابه نانولوله های تک جداره برنامه را اجرا کرده و نتایج مورد نظر را مطابق شکل (۲-۱۲) می توان مشاهده نمود.



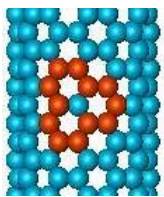
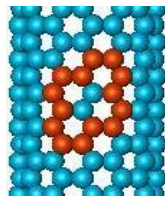
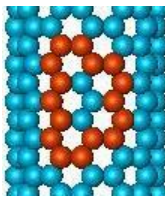
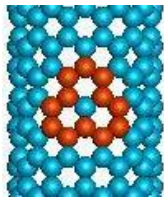
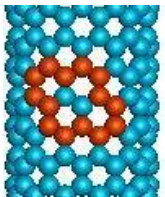
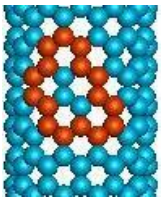
شکل (۲-۱۲) نتایج حاصل از کمانش نمونه ای از نانولوله های دوجداره با طول ۵,۱۶۵ نانومتر تحت بار فشاری

۳-۲ شبیه سازی نانولوله های کربنی معیوب

در این پروژه سه نوع عیب استون- والس، تهی جای و ترکیبی از این دو عیب مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین تاثیر تعداد و موقعیت عیوب تهی جای بر روی بار بحرانی کمانش و فرکانس طبیعی تحلیل گردیده است.

جهت ایجاد عیب تهی جای کافی است که برای اتم کربن مشخص روی نانولوله، برهم کنش های مربوط به این اتم با اتم های اطرافش برداشته شود. در حقیقت برای اتم مورد نظر فنرهای مرتبط با اتم

و اتصالات مرتبط با آن برداشته شده و مسئله را بدون این فنرها و اتصالات حل می‌نمائیم. همان طور که قبلا گفته شده با استفاده از این مدل می‌توان به راحتی عیوب تهی‌جای را در نانولوله ایجاد نمود و این یکی دیگر از قابلیت‌های مهم این مدل می‌باشد. در بررسی‌های انجام گرفته چهار نوع عیب تهی‌جای در نظر گرفته شده است که شامل عیوب تهی‌جای منفرد، تهی‌جای دوگانه، تهی‌جای سه‌گانه و دو تهی‌جای منفرد روبه‌روی هم می‌شود. در شکل (۲-۱۳) می‌توان عیوب مورد نظر را مشاهده کرد.

آرمچیر			زیگ-زاگ		
					
Single vacancy	Double vacancy	Triple vacancy	Single vacancy	Double vacancy	Triple vacancy

شکل (۲-۱۳) انواع عیوب تهی‌جای در نظر گرفته شده در تحلیل‌ها

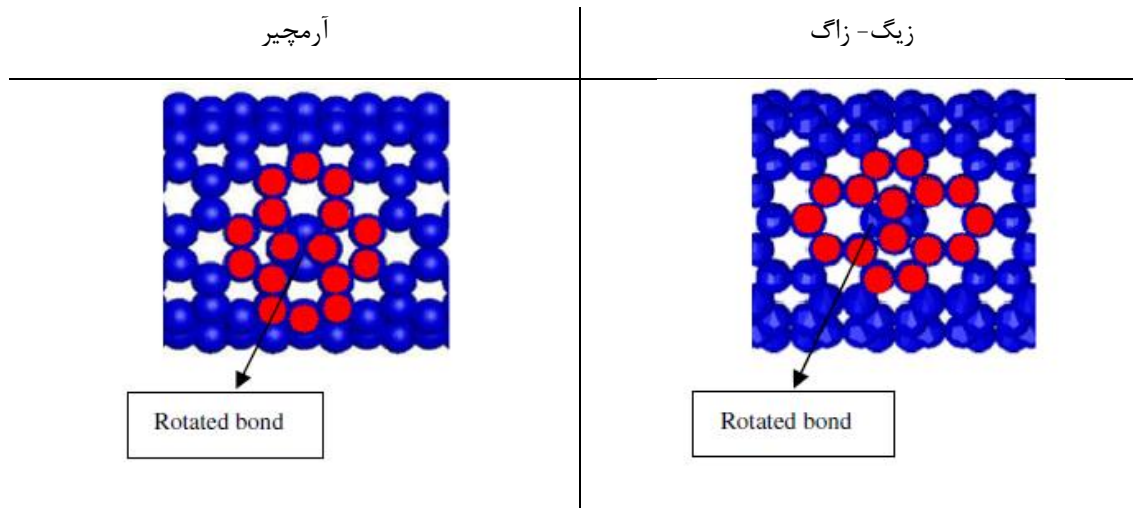
عیوب در مرحله سنتز^۱ تولید می‌شوند که البته می‌توانند بوسیله دستکاری‌های مکانیکی^۲ نیز ایجاد شوند. مرسوم‌ترین عیوب ساختاری عیوب استون-والس هستند [۸۸]. این عیوب در نانولوله‌های کربنی تحت شرایط خاصی ایجاد می‌شوند. در این شرایط نانولوله‌ها شامل ناحیه‌هایی می‌شوند که تعداد اتم‌های کربن در یک حلقه متفاوت از شش است در حالی که تعداد کل اتم‌های کربن استون و والس نشان دادند که یک دو قطبی شامل یک جفت حلقه‌های ۵-۷ می‌توانند با چرخش پیوند کربن-کربن در شبکه شش‌تایی به اندازه ۹۰ درجه ایجاد شوند. همانطور که در شکل (۲-۱۴) مشاهده می‌شود در این چرخش چهار شش‌ضلعی به دو پنج‌ضلعی و دو هفت‌ضلعی تبدیل خواهند شد.

جهت ایجاد عیب استون-والس نیازی به حذف اتم از ساختار مدل نمی‌باشد. تنها بایستی المان‌های spring و connector مرتبط به دو اتم کربن را حذف و پس از چرخاندن اتم‌ها پیوند پیچانده-

¹ Synthesizing process

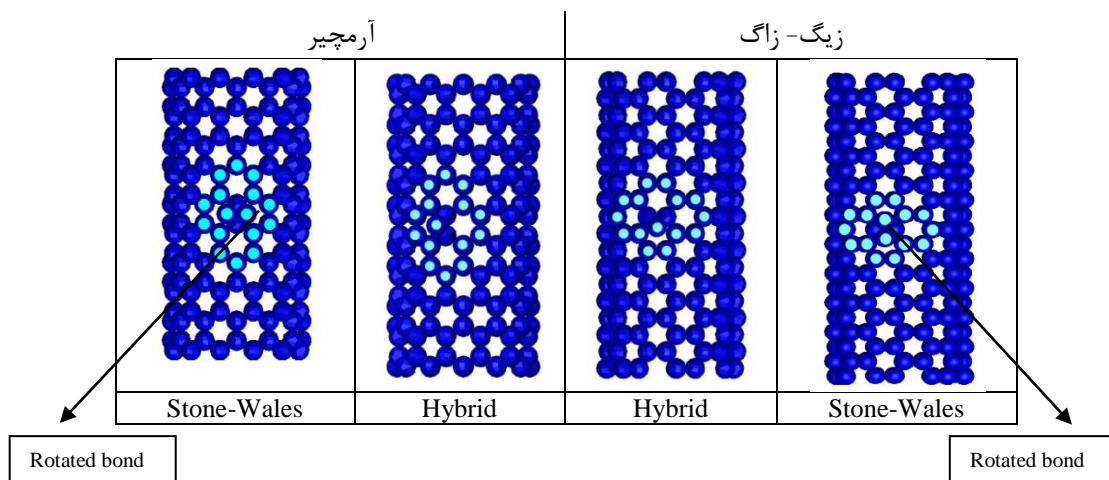
² Mechanical manipulation

شده^۱ در حالت جدید را با المان های مکانیکی مجدد به اتم های مجاور متصل ساخت (شکل (۱۴-۲)). در این حالت همان طور که در شکل نیز مشاهده می شود، طول المان های مکانیکی به کار رفته در مدل ساختاری و زاویه آن ها تغییر خواهد کرد.



شکل (۱۴-۲) انواع عیوب استون- والس در نظر گرفته شده در تحلیل ها

در نهایت برای ایجاد عیب ترکیبی از هر دو عیب تهی جای و استون- والس به طور همزمان استفاده شده است (شکل (۱۵-۲)). به این ترتیب که ابتدا عیوب استون- والس ایجاد می شود و سپس یکی از اتم های شرکت کننده در پیوند پیچانده شده حذف می شوند. در این جا نیز برای حذف اتم بایستی تمامی المان های مرتبط با آن اتم را حذف نمود. شکل (۱۵-۲) هر دو عیب استون- والس و ترکیبی را نشان می دهد که به وضوح می توان آن دو را با یکدیگر مقایسه نمود.



^۱ Rotated bond

در این پروژه نوع عیوب به کار رفته در تحلیل نانولوله های کربنی تک جداره و دو جداره متفاوت بوده است که در ذیل به طور مجزا به آن ها اشاره خواهد شد.

۲-۳-۱ نانولوله های تک جداره

در نانولوله های تک جداره که بخش ابتدایی این پروژه را تشکیل می دهند، انواع عیوب نظیر، استون- والس، تهی جای و ترکیبی مورد تحلیل عددی قرار گرفته است. همچنین تعداد و موقعیت عیوب تهی جای مورد تغییر قرار گرفته است تا تاثیر آن ها بر روی خواص مکانیکی نانولوله های تک جداره معلوم گردد. در مجموع چهار نوع عیب از نظر تعداد و سه نوع عیب از نظر موقعیت در نانولوله های تک جداره آرمچیر و زیگ- زاگ مورد بررسی قرار گرفت.

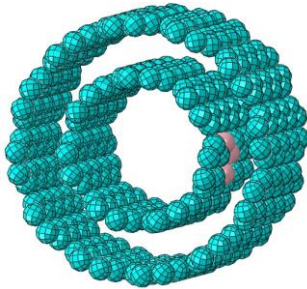
برای عیب استون- والس نیز دو موقعیت متفاوت در تحلیل ها استفاده گردید. در نهایت ترکیبی از هر دو عیب تحت عنوان عیب هیبرید^۱ در مدل ها اعمال گردید و آنالیزهای مختلف بر روی نمونه ها صورت پذیرفت.

۲-۳-۲ نانولوله های دو جداره

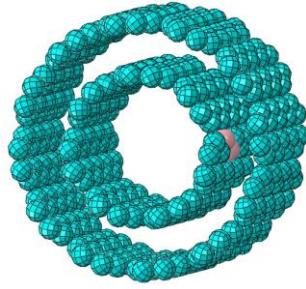
برای نانولوله های دوجداره که بخش اصلی پروژه را در بر می گیرد، تنها از عیب تهی جای استفاده شده است. نانولوله های دوجداره بدلیل حجم بسیار بالای المان های مکانیکی نظیر spring و connector به زمان بسیار زیادتری برای ایجاد و تحلیل نیاز دارند. برای این نانولوله ها نوع عیوب محدود اعمال شده است و بیشتر بر روی تعداد عیوب تمرکز شده است و سه نوع مختلف شامل عیوب در جداره داخلی، عیوب در جداره خارجی و عیوب بر روی هر دو جداره مورد بررسی قرار گرفته است. هر یک از این نوع عیوب شامل سه نوع دیگر تهی جای منفرد، تهی جای دوگانه و تهی جای سه گانه می باشند و در مجموع نه مدل معیوب برای هر طول را تشکیل می دهند (مطابق شکل (۲-۱۶)).

^۱ Hybrid

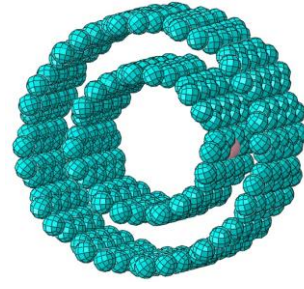
همانطور که مشاهده می شود، عیوب تهی جای منفرد، دوگانه و سه گانه به ترتیب با نمادهای S ، D و T نمایش داده شده است.



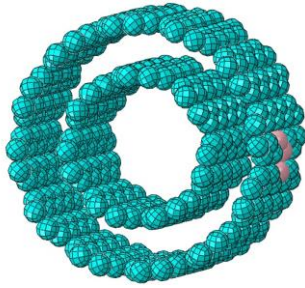
$(7,7)T@(12,12)$



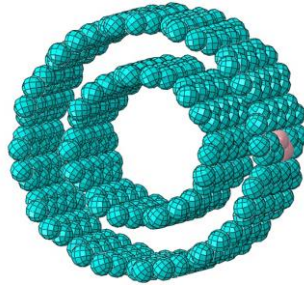
$(7,7)D@(12,12)$



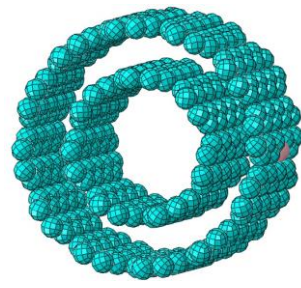
$(7,7)S@(12,12)$



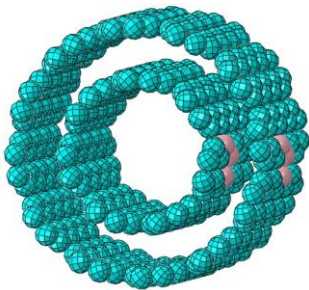
$(7,7)@(12,12)T$



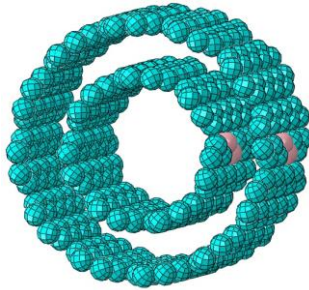
$(7,7)@(12,12)D$



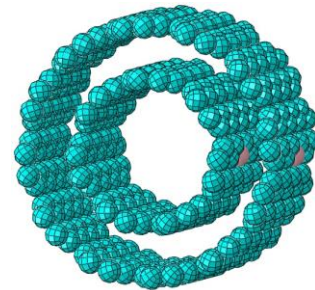
$(7,7)@(12,12)S$



$(7,7)T@(12,12)T$



$(7,7)D@(12,12)D$



$(7,7)S@(12,12)S$

شکل (۲-۱۶) عیوب تهی جای بکار رفته در نانولوله های دو جداره معیوب

در مورد نانولوله های دو جداره هر مدل معیوب در دو مرحله شامل مدل بدون نیروی واندروالس و با نیروی واندروالس مورد بارگذاری قرار گرفته است تا تاثیر نیروی واندروالس نیز بر روی رفتار کمانشی این نانولوله ها تحت بارگذاری محوری، پیچشی و خمشی حاصل گردد.

۴-۲ شبیه سازی پوسته‌های استوانه‌ای سالم (مدل پیوسته)

در تحلیل‌هایی که بر روی نانولوله‌های کربنی انجام می‌گیرد، همانطور که پیشتر توضیح داده شد، یکی از مدل‌هایی که دارای سادگی اجرا و دقت کافی مخصوصاً برای نانولوله‌های بلند می‌باشد، مدل پیوسته است. برای انجام این کار کافی است یک استوانه به صورت پیوسته در نرم‌افزار ایجاد نمود و ضخامت آن را 0.066 nm در نظر گرفت. برای این مدل در بخش Property مدول یانگ $5/5 \text{ TPa}$ را به عنوان خاصیت الاستیک ماده در نظر می‌گیریم.

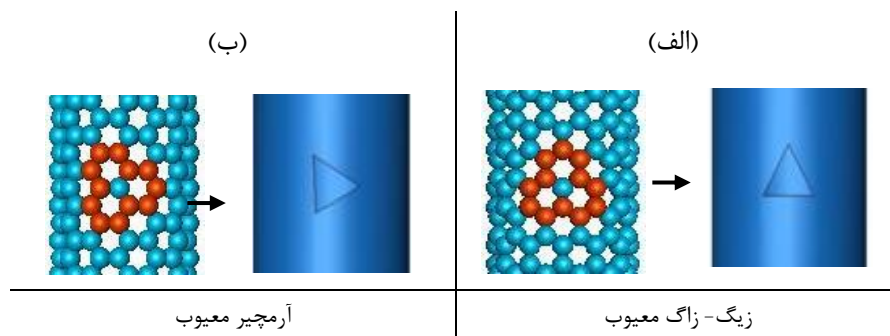
طول و قطر استوانه نیز مطابق با طول نانولوله مورد مقایسه خواهد بود. شرایط مرزی و نوع بارگذاری نیز دقیقاً مانند شرایط مرزی و بارگذاری اعمال شده بر روی نانولوله می‌باشد. در تحلیل‌های مربوط به این استوانه‌ها از المان S8R5 استفاده شده است که یک المان ۸ گرهی با ۵ درجه آزادی در هر گره می‌باشد. لازم به ذکر است که این نوع المان بهترین نوع المان برای تحلیل پوسته‌های نازک در نرم‌افزار آباکوس می‌باشد. یکی از دقیق‌ترین نرم‌افزارهای المان محدود^۱ مخصوصاً در حوزه آنالیز فرکانسی نرم افزار انسیس^۲ می‌باشد. برای ایجاد مدل پیوسته و مقایسه نتایج با مدل ساختاری ارائه شده از این نرم افزار نیز استفاده شده است که نتایج متعاقباً مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

۵-۲ شبیه‌سازی پوسته‌های استوانه‌ای معیوب (مدل پیوسته)

به منظور مقایسه نانولوله‌های کربنی معیوب و مدل پوسته‌ی متناظر آن بر روی استوانه یک گشودگی ایجاد می‌نمائیم. از آنجا که زاویه عیوب در دو نوع نانولوله‌ی آرمیچر و زیگ-زاگ یکی نمی‌باشد؛ لذا برای مدل پیوسته نیز این تفاوت در نظر گرفته شده است که در شکل (۲-۱۷) می‌توان آنها را مشاهده کرد. لازم به ذکر است که مساحت گشودگی در مدل پیوسته، معادل مساحت کاسته شده از سطح جداره‌ی نانولوله‌های کربنی می‌باشد.

¹ Finite element

² ANSYS



شکل (۲-۱۷) پوسته‌های دارای گشودگی ، (الف): متناظر با زیگ-زاگ، (ب): متناظر با آرمچیر

۲-۶ مقایسه نانولوله های کربنی تک و دو جداره

پس از توضیح درباره نحوه مدل سازی نانولوله های تک و دوجداره در این بخش المان های به کار رفته در مدل ساختاری ارائه شده برای هر نوع نانولوله را بطور کمی مورد بررسی قرار می دهیم. همانطور که پیشتر ذکر شد، مدل سازی بر روی نانولوله های تک جداره برای دو نوع آرایش زیگ-زاگ و آرمچیر صورت پذیرفت. برای نانولوله های دوجداره با توجه به حجم بالای المان ها و زمان بالای مدل سازی، شبیه سازی با توجه به آرایش آرمچیر انجام گردید.

به منظور مقایسه، تعداد المان های بکار رفته در نانولوله های تک و دوجداره داده های مربوطه در جدول (۲-۳) آورده شده است. نانولوله دوجداره دارای آرایش (۷و۷)@ (۱۲و۱۲) می باشد که از دو نانولوله تک جداره (۷و۷) و (۱۲و۱۲) با قطرهای ۰,۹۴۷۳۴۴ و ۱,۶۲۹۴ نانومتر تشکیل شده است. همان طور که در این جدول دیده می شود، ۱۲ طول به همراه تعداد ردیف های کربن بکار رفته در هر طول نمایش داده شده است. همچنین می توان تعداد المان های spring و connector بکار رفته در هر مدل را مشاهده نمود. با مقایسه تعداد کل المان های بکار رفته می توان براحتی به این نتیجه رسید که تعداد المان های نانولوله های دوجداره چندین برابر هر یک از نانولوله های تک جداره بکار رفته در آن می باشد.

جدول (۲-۳) مشخصات نانولوله های تک و دو جداره آرمچیر ساخته شده در نرم افزار آباکوس

d_o (nm) قطر خارجی	d_i (nm) قطر داخلی	$A_0 =$ مساحت سطح مقطع 2.75649 (nm ²)	آرمچیر											
			Spring					Connector			تعداد کل المان ها			
		تعداد اتم های کربن			مربوط به زاویه ای ^۱		مربوط به نیروی واندروالس		مربوط به برهم کنش های پیچشی ^۲					
طول نانولوله	تعداد ردیف های کربن	(7,7)	(12,12)	(7,7)@(12,12)	(7,7)	(12,12)	(7,7)@(12,12)	(7,7)	(12,12)	(7,7)@(12,12)	(7,7)	(12,12)	(7,7)@(12,12)	
0.983	9	126	216	342	336	576	912	6080	196	336	532	532	912	7524
2.09	18	252	432	684	700	1200	1900	14036	413	708	1121	1113	1908	17057
3.0744	26	364	624	988	1036	1776	2812	21108	609	1044	1653	1645	2820	25573
4.058	34	476	816	1292	1372	2352	3724	28180	805	1380	2185	2177	3732	34089
5.165	43	602	1032	1634	1764	3024	4788	36136	1029	1764	2793	2793	4788	43717
6.272	52	728	1248	1976	2128	3648	5776	44092	1246	2136	3382	3374	5784	53250
7.255	60	840	1440	2280	2464	4224	6688	53155	1442	2472	3914	3906	6696	63757
8.36	69	966	1656	2622	2856	4896	7752	61128	1666	2856	4522	4522	7752	73402
9.469	78	1092	1872	2964	3220	5520	8740	72065	1883	3228	5111	5103	8748	85916
10.453	86	1204	2064	3268	3556	6096	9652	79456	2079	3564	5643	5635	9660	94751
11.43	94	1316	2256	3572	3892	6672	10564	90419	2275	3900	6175	6167	10572	107158
12.05	99	1386	2376	3762	4116	7056	11172	95229	2401	4116	6517	6517	11172	112918

¹ Angle intractions

² Tortion intractions

فصل سوم

ارائه نتایج

فصل ۳ - مقدمه

در این فصل نتایج حاصل از مدل جدید ساختاری ارائه شده مربوط به نانولوله های تک جداره و دوجداره سالم و معیوب به تفکیک ارائه شده است. همچنین، برای هر نوع از نانولوله های تک و دوجداره نتایج مربوط به بارگذاری ها و شرایط مرزی مختلف بدست آمده است.

۳-۱ تحلیل نانولوله های تک جداره

آنالیز نانولوله های تک جداره از آن جهت دارای اهمیت است که می تواند اطلاعات بیشتر و دیدی وسیعتر در مورد نانولوله های چند جداره در اختیار ما قرار دهد. همانطور که در بسیاری از مقالات علمی به عنوان پیش زمینه و همراه با تحلیل نانولوله های چندجداره آورده شده است.

با مقایسه رفتار نانولوله های تک و چند جداره بیش از پیش می توان به رفتار نانولوله های کربنی پی برد و در حالت هایی خاص که آنالیز رفتار نانولوله های چندجداره بسیار زمان گیر و هزینه بر است می توان از نتایج نانولوله های تک جداره استفاده و با بسط آن ها برای نانولوله های چند جداره به تخمینی اولیه و نسبتاً نزدیک به حالت واقعی دست یافت.

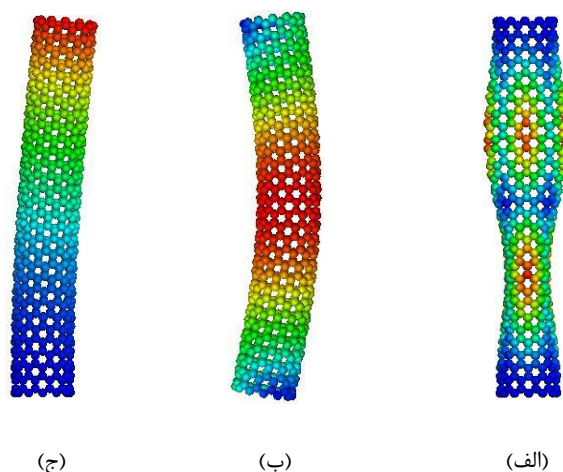
آنالیز نانولوله های تک جداره به دو صورت عمده تحلیل کمانشی و تحلیل ارتعاشاتی صورت گرفته است. آنالیز کمانشی خود تحت بارهای محوری، پیچشی و خمشی برای دو آرایش آرمچیر و زیگ-زاگ انجام گردیده است و نتایج مدل های سالم و معیوب تحت شرایط تکیه گاهی مختلف با هم مقایسه شده اند. در قسمت حل ارتعاشی نیز سعی شده است تاثیر عیوب و شرایط تکیه گاهی بر روی فرکانس های طبیعی سیستم بدست آیند. در ادامه توضیحات هر بخش به تفصیل آورده شده است.

۳-۱-۱ تاثیر شرایط مرزی بر روی کمانش محوری

در این تحلیل اثرات شرایط مرزی و عیوب بر روی رفتار کمانش محوری نانولوله های تک جداره مورد بررسی قرار گرفته است. با توجه به کاربرد نانولوله ها در حوزه های مختلف نظیر سیستم های الکترومکانیکی در مقیاس نانو^۱ که این مواد در معرض بارگذاری ها و شرایط مرزی مختلف هستند، تحقیقی در مورد رفتار کمانشی آن ها بسیار ضروری به نظر می رسد. در این جا بار بحرانی کمانش و اثرات عیوب تهی جای و استون- والس برای آرایش های زیگ-زاگ و آرمچیر با شرایط مرزی و نسبت های ظاهری مختلف تحلیل شده است. همچنین عیب ترکیبی نیز در نظر گرفته شده است.

۳-۱-۱-۱ کمانش محوری نانولوله های تک جداره سالم

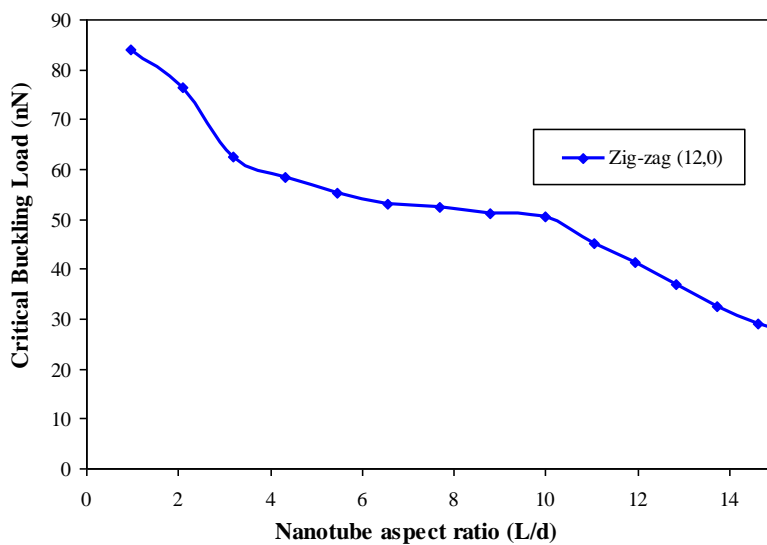
در ابتدا به بررسی کمانش نانولوله های کربنی سالم (بدون عیب) می پردازیم. برای تحلیل کمانش محوری از سه نوع شرط مرزی دو سر گیردار، دو سر ساده و یک سر آزاد مطابق شکل (۳-۱) استفاده شده است. برای شرط مرزی دو سر ساده، دو سر نانولوله لولا (پین) شده اند و می توانند حول محورهای موجود در صفحات دو انتها بچرخند. همانطور که در این شکل دیده می شود، برای نانولوله هایی با طول یکسان مدهای کمانشی متفاوت هستند.



شکل (۳-۱) شرایط مرزی در تحلیل کمانش محوری: (الف) دو سر گیردار، (ب) دو سر ساده و (ج) یک سر آزاد

^۱ Nanoelectromechanical systems (NEMS)

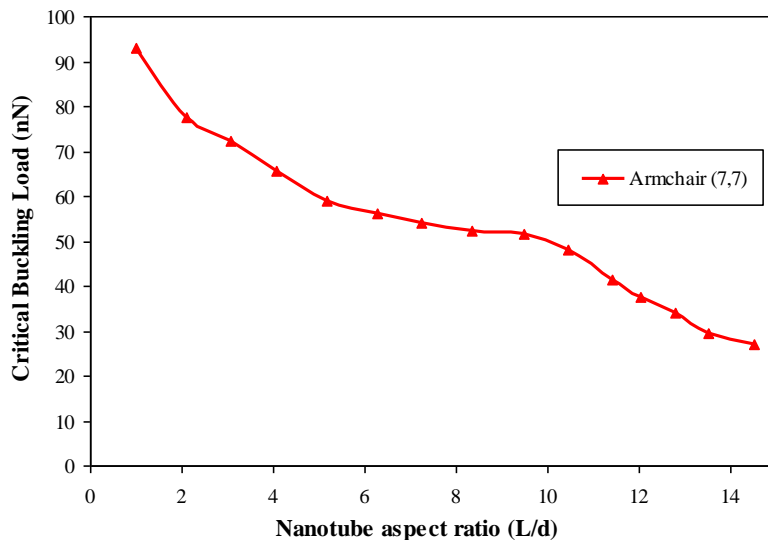
در شکل (۲-۳) نمودار بار بحرانی کمانش برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰) برای شرط مرزی دو سر گیردار آورده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، با افزایش طول نانولوله‌ها از میزان بار بحرانی کمانش کاسته می‌شود. با توجه به شکل می‌توان دید که در نسبت ظاهری برابر با ۳ و ۱۰ شیب‌های نمودار تغییر می‌کند که این امر به دلیل تغییر در شکل مدهای کمانش اتفاق می‌افتد. همانطور که مشاهده می‌شود، در طول‌های کوتاه نانولوله‌های کربنی دچار کمانش پوسته‌ای شده و با افزایش طول به سمت کمانش اویلر پیش می‌روند.



شکل (۲-۳) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰)

در ادامه نمودار بار بحرانی کمانش برای نانولوله‌های آرمچیر (۷،۷) برای شرایط مرزی دو سر گیردار در شکل (۳-۳) آورده شده است. به طور کلی می‌توان گفت روند تغییرات بار بحرانی مشابه با روند تغییرات در نانولوله‌های زیگ-زاگ است. تفاوت اساسی در کمانش نانولوله‌های کربنی آرمچیر و زیگ-زاگ در شکل مدهای آنها می‌باشد. هنگامی که نانولوله‌های آرمچیر دچار کمانش می‌شوند، جداره‌ی آنها دچار پیچیدگی می‌گردد که این رفتار در نانولوله‌های زیگ-زاگ وجود ندارد. مشخص است که تفاوت در شکل مدهای آنها به دلیل تفاوت در ساختار جداره‌های آنها می‌باشد. البته باید اشاره کرد که از نظر تعداد موج‌های ایجاد شده بر روی جداره، رفتار نانولوله‌های آرمچیر مانند

نانولوله‌های زیگ-زاگ است. به طور کلی با توجه به شکل مدهای بدست آمده می‌توان گفت که رفتار نانولوله‌های زیگ-زاگ به پوسته‌های استوانه‌ای پیوسته نزدیک‌تر است.

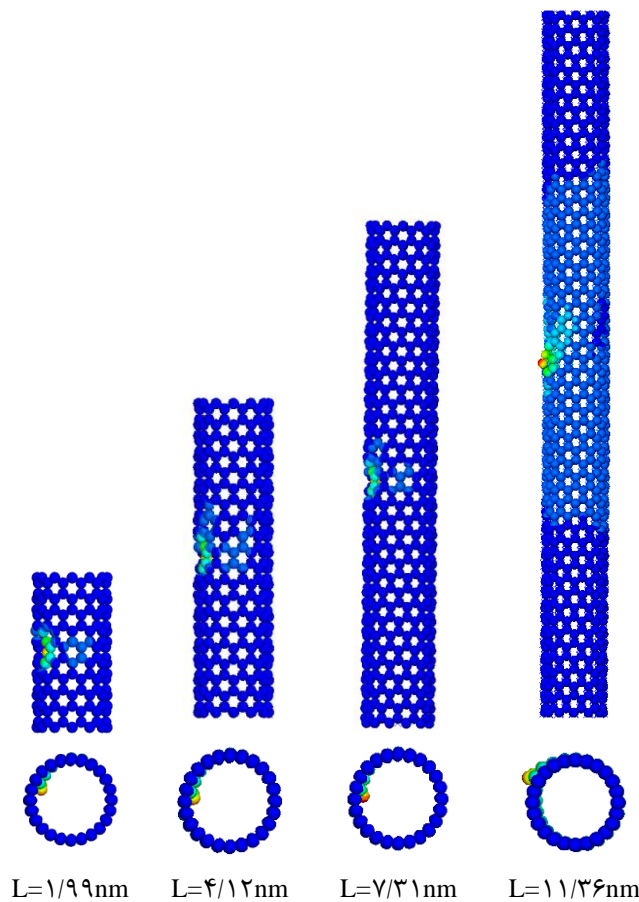


شکل (۳-۳) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های آرمچیر (۷،۷)

۳-۱-۱-۲ کمانش محوری نانولوله های تک جداره معیوب

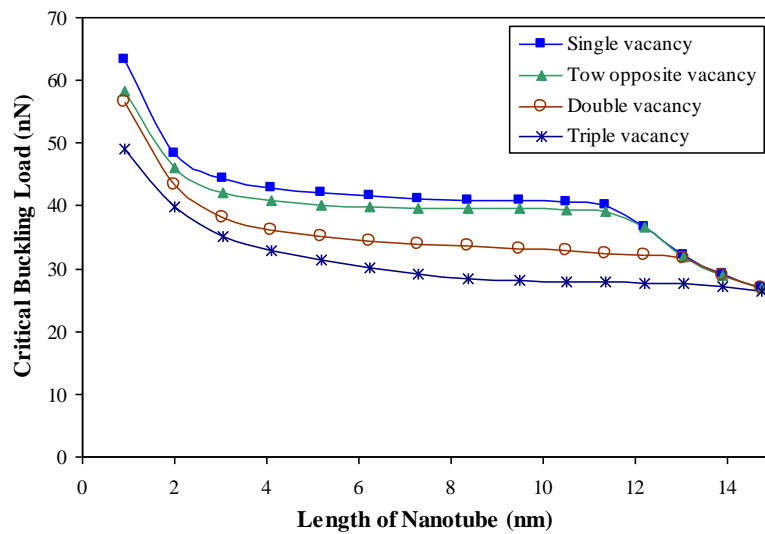
عیوب تهی جای از حذف اتم کربن در نانولوله حاصل می‌شوند. عیوب بوجود آمده در این بخش شامل تهی جای منفرد (حذف یک اتم کربن) و دو عیب مقابل تهی جای منفرد (حذف دو اتم کربن) هستند. تمامی عیوب در قسمت میانی نانولوله‌ها قرار دارند.

بر خلاف عیوب تهی جای که در آن پیوندها حذف می‌شوند، در عیوب استون- والس پیوندهای کربن می‌چرخند. عیوب استون- والس نیز به دو صورت منفرد و دو عیب مقابل منظور گردیده است. در نهایت اثرات عیب ترکیبی مطابق شکل (۲-۱۵) در نانولوله‌ها ایجاد گردید. شکل‌های کمانشی نانولوله‌های معیوب با این عیب در وسط در شکل (۳-۴) نشان داده شده‌اند. شکل‌های عیوب ترکیبی و تهی جای تقریباً یکسان هستند.



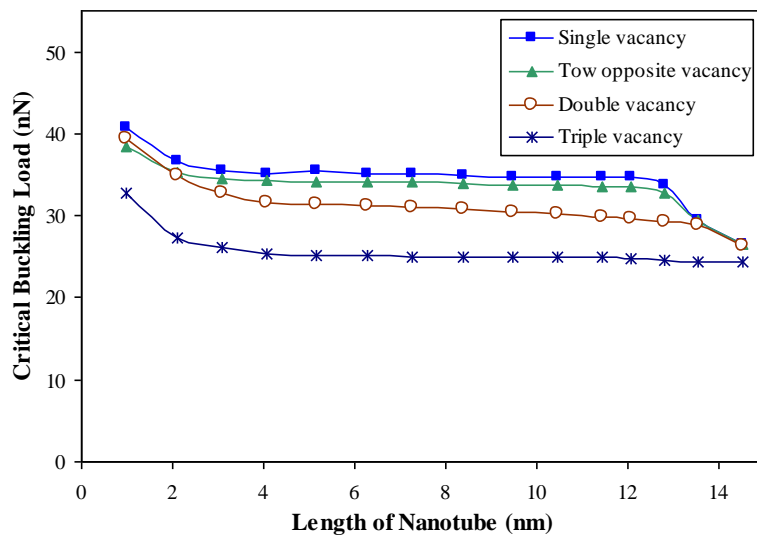
شکل (۳-۴) تاثیر عیب ترکیبی بر روی مدهای کمانشی نانولوله های زیگ-زاگ (۱۲،۰) برای طول های مختلف

در این بخش کمانش نانولوله های کربنی معیوب را مورد بررسی قرار می دهیم. در شکل (۳-۵) نتایج حاصل از کمانش نانولوله های معیوب زیگ-زاگ (۱۲،۰) برای نسبت های طولی مختلف با شرط مرزی دو سر گیردار آورده شده است. به طور کلی این عیوب تأثیرات قابل ملاحظه ای بر بار کمانش می گذارند و می توان دید که با تغییر عیب از حالت منفرد به سه گانه از بار بحرانی کمانش کاسته می گردد و مشاهده می شود که در طول های بلند نمودارهای آن ها به یکدیگر رسیده و بر روی یک خط پیش می روند. این امر بدان معناست که تمامی عیوب در طول های بلند (برای نانولوله های زیگ-زاگ (۱۲،۰)، در طول های بیشتر از ۱۱/۳۶) تأثیر خود را از دست می دهند و می توان از وجود عیب در نانولوله صرف نظر نمود.



شکل (۳-۵) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ (۱۲،۰)

در شکل (۳-۶) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های معیوب آرمچیر (۷ و ۷) با شرط مرزی دو سر گیردار آورده شده است. مشاهده می‌شود که در اینجا نیز روند تغییرات برای نانولوله‌های معیوب آرمچیر مانند نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ می‌باشد؛ با این تفاوت که کمانش کلی برای نانولوله‌های آرمچیر دیرتر اتفاق می‌افتد.



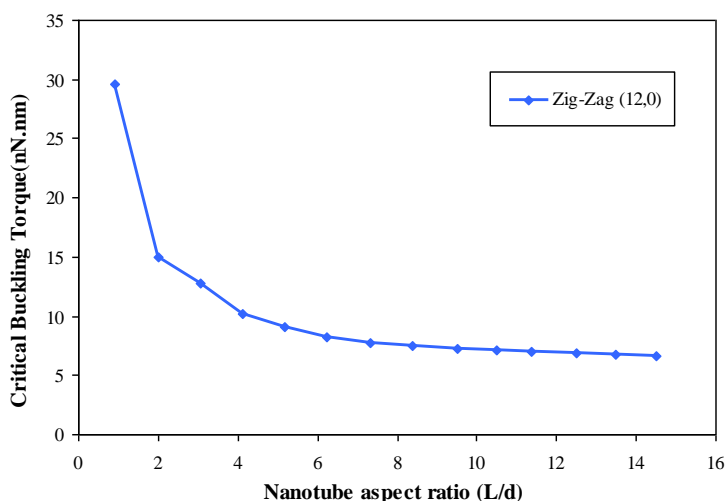
شکل (۳-۶) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های معیوب آرمچیر

۲-۱-۳ کمانش نانولوله‌های کربنی تحت گشتاور پیچشی

در این قسمت علاوه بر آنکه ممان پیچشی بحرانی در نمودارها آورده شده است، زاویه‌ی پیچش بحرانی متناظر با آن نیز مورد بررسی قرار گرفته است.

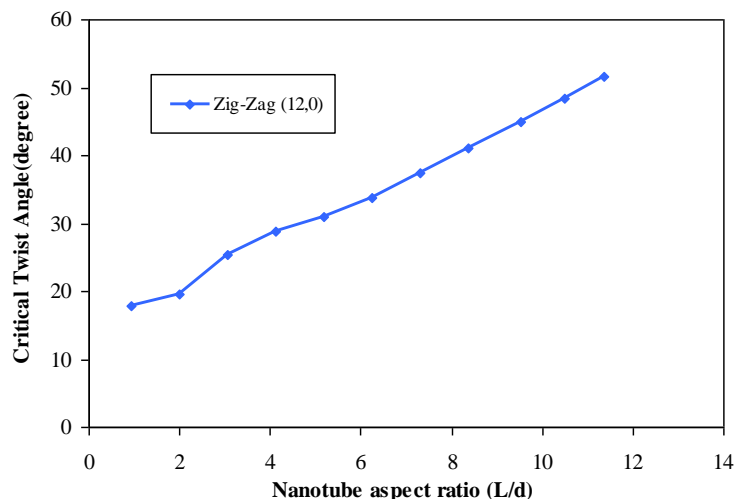
۱-۲-۱-۳ کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی سالم

در شکل (۷-۳) نمودار گشتاور پیچشی بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری^۱ $\frac{L}{d}$ برای نانولوله زیگ-زاگ (۱۲،۰) نشان داده شده است. همانطور که دیده می‌شود با افزایش طول نانولوله از میزان ممان بحرانی کاسته می‌شود که این میزان کاهش در طول‌های کوتاه محسوس‌تر می‌باشد. با افزایش طول نانولوله‌ها تغییر در مقدار گشتاور پیچشی بحرانی به مقدار زیادی کاهش می‌یابد؛ به نحوی که نمودار تقریباً به خط راست تبدیل می‌شوند. در شکل (۸-۳) نیز نمودار زاویه‌ی پیچش بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای این نانولوله‌ها آورده شده است. با توجه به شکل می‌توان دید که با افزایش طول نانولوله، زاویه‌ی پیچش نیز افزایش می‌یابد. شکل مد کمانش پیچشی این مدل در شکل (۹-۳) آورده شده است.

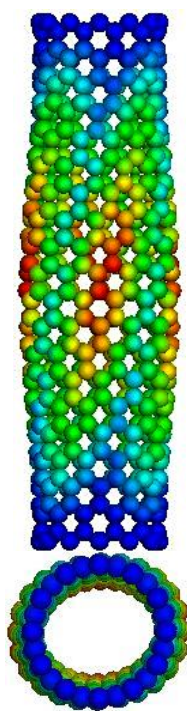


شکل (۷-۳) نمودار گشتاور پیچشی بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰)

^۱ Aspect ratio



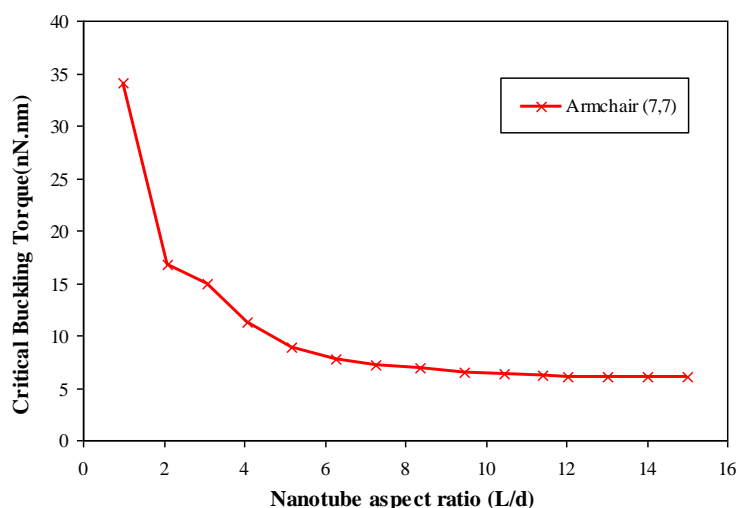
شکل (۸-۳) نمودار زاویه‌ی پیش‌بحرانی بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰)



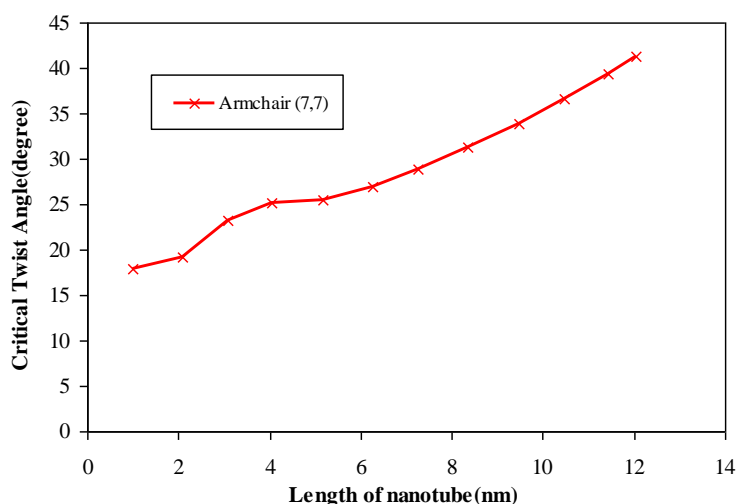
$$L=4/118\text{nm}, D=0/95\text{nm}$$

شکل (۹-۳) شکل مد ناشی از کمانش نانولوله کربنی زیگ-زاگ (۱۲،۰)

شکل (۱۰-۳) و شکل (۱۱-۳) نیز نمودارهای مربوط به کمانش پیش‌بحرانی نانولوله‌های کربنی آرمچیر را نشان می‌دهند. همانطور که مشاهده می‌شود، روند تغییرات در این نانولوله‌ها مشابه تغییرات در نانولوله‌های زیگ-زاگ می‌باشد.



شکل (۱۰-۳) نمودار گشتاور پیچشی بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های آرمچیر (۷،۷)

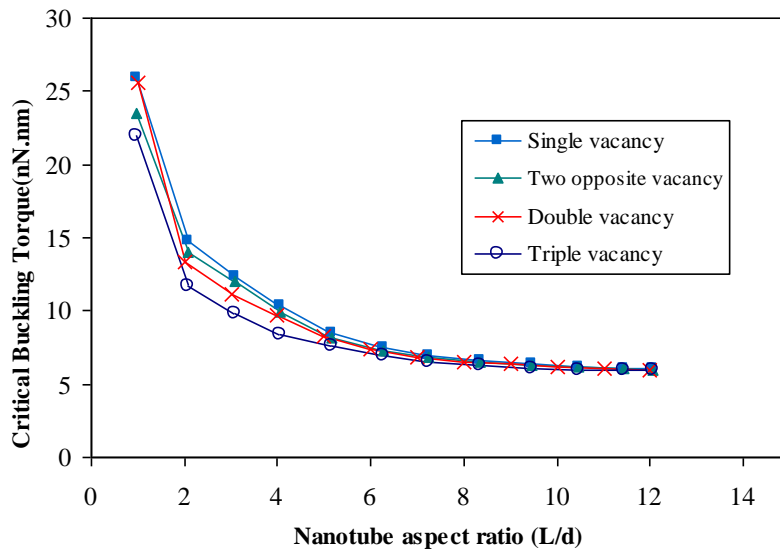


شکل (۱۱-۳) نمودار زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های آرمچیر (۷،۷)

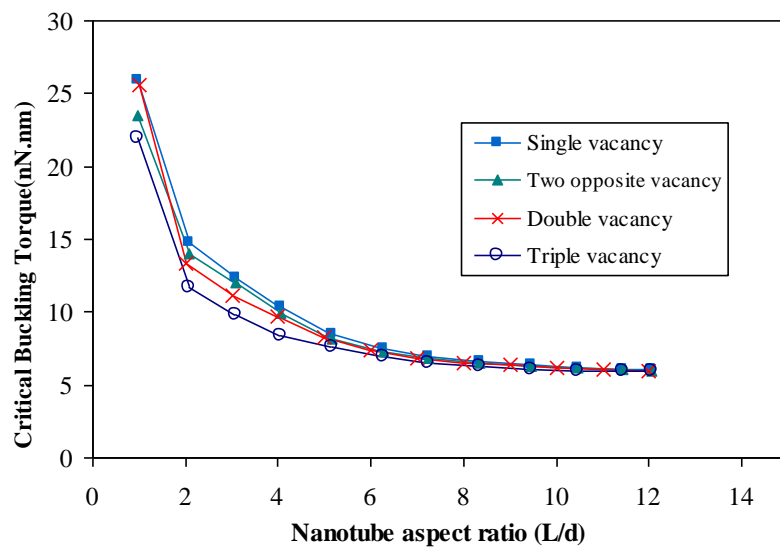
۲-۲-۱-۳ کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی معیوب

در این بخش کمانش نانولوله‌های کربنی معیوب را تحت بار پیچشی مورد بررسی قرار می‌دهیم. همانطور که مشاهده می‌شود در شکل (۱۲-۳) و شکل (۱۳-۳) نمودارهای گشتاور پیچشی بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ و آرمچیر آورده شده است. با توجه به شکل‌ها می‌توان دید که عیب تهی‌جای سه گانه بیشترین تأثیر را بر گشتاور پیچشی بحرانی می‌گذارد و با تغییر نوع عیب از تهی‌جای سه گانه به تهی‌جای منفرد بر مقدار گشتاور پیچشی افزوده

می‌شود که البته این افزایش گشتاور پیچشی در طول‌های کوتاه محسوس‌تر است. با افزایش طول، مقادیر گشتاور پیچشی بحرانی به یکدیگر نزدیک شده و به سمت یک مقدار میل می‌کنند.



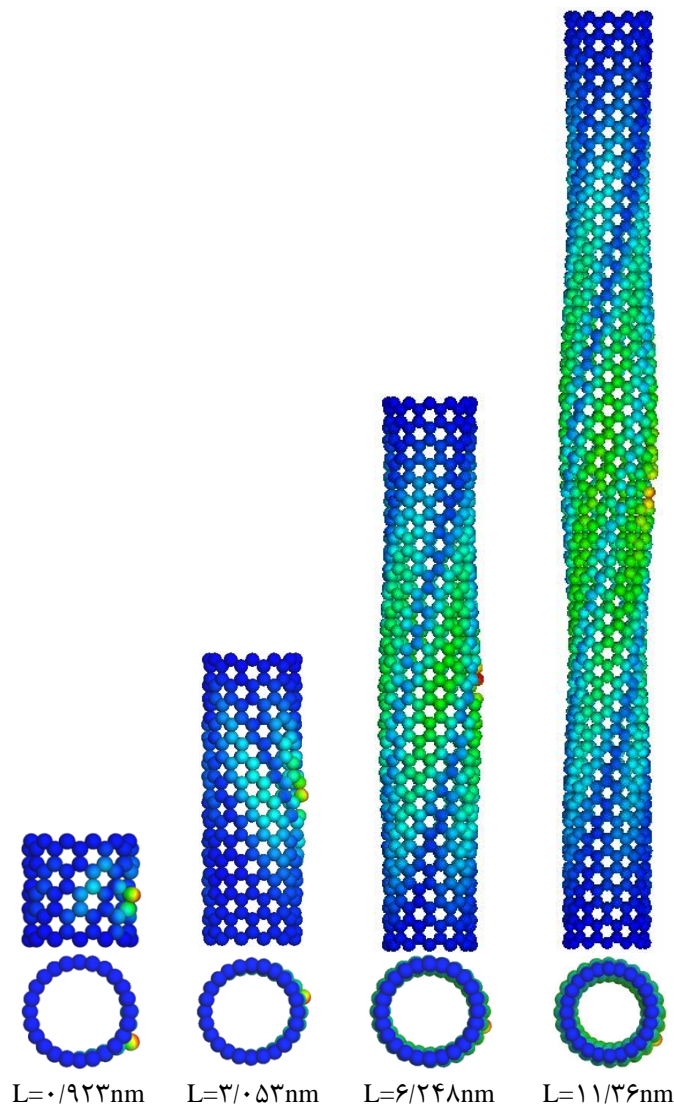
شکل (۱۲-۳) نمودار گشتاور پیچشی بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ (۱۲،۰)



شکل (۱۳-۳) نمودار گشتاور پیچشی بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری نانولوله‌های معیوب آرمچیر (۷،۷)

در شکل (۱۴-۳) شکل مدهای کمانش پیچشی برای طول‌های متفاوت نانولوله‌های معیوب زیگ-

زاگ نشان داده شده است. عیب موجود در این نانولوله‌ها از نوع تهی‌جای منفرد می‌باشد.



شکل (۱۴-۳) شکل مدهای ناشی از کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی معیوب زیگ-زاگ (۱۲،۰) در طول‌های متفاوت

در شکل (۱۴-۳) مشاهده می‌شود که در طول‌های کوتاه کمانش بیشتر به صورت محلی و در

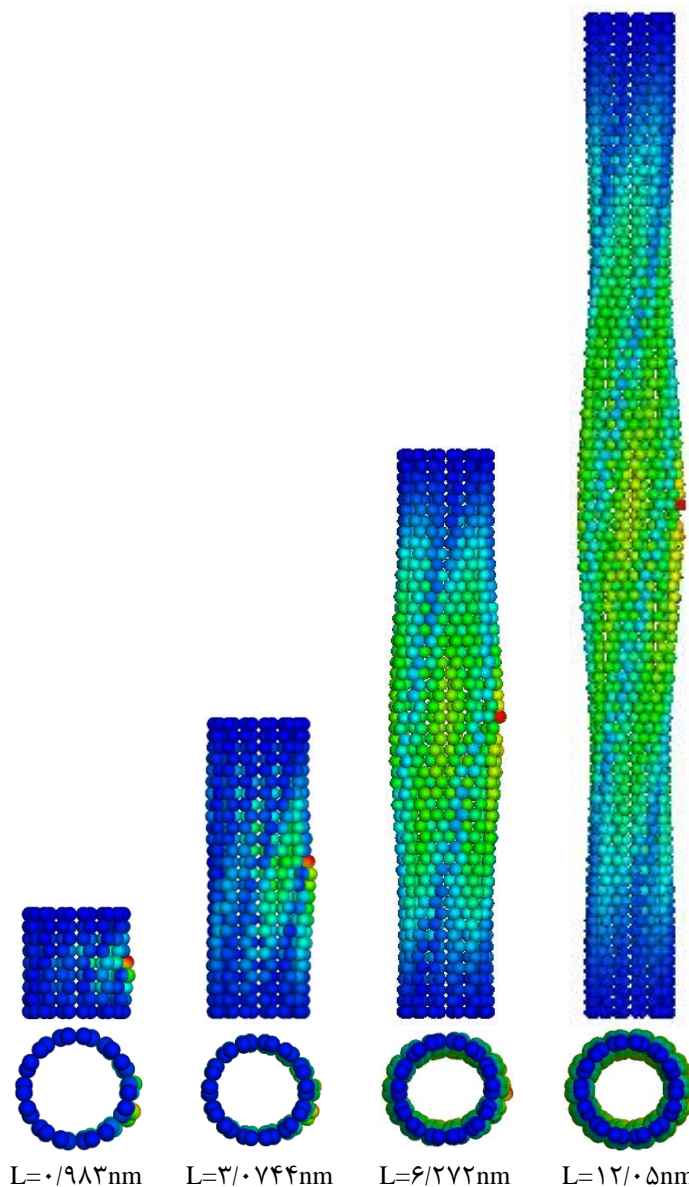
اطراف عیب اتفاق می‌افتد و با افزایش طول نانولوله مد کمانش به سمت کمانش کلی پیش می‌رود که

خود را به صورت پیچش در طول نانولوله نشان می‌دهد؛ البته با توجه به شکل مدهای بدست آمده

می‌توان نتیجه گرفت که در تمامی طول‌ها، هر دو مد کمانش یعنی محلی و کلی اتفاق می‌افتد و با

افزایش طول از اثرات وجود عیب در نانولوله کاسته شده و شکل مدها به صورت کلی پدیدار می‌شوند.

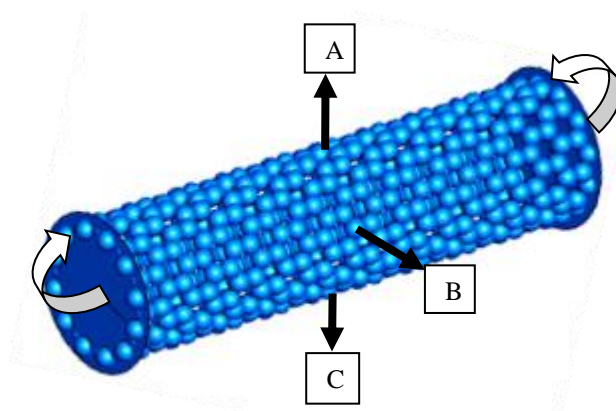
در شکل (۱۵-۳) نیز شکل مدهای کمانش پیچشی برای طول‌های متفاوت از نانولوله‌های معیوب آرمچیر آورده شده است.



شکل (۱۵-۳) شکل مدهای ناشی از کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی معیوب آرمچیر (۷,۷) در طول‌های متفاوت مشاهده می‌گردد که در این جا نیز روند تغییرات مانند نانولوله‌های زیگ-زاگ می‌باشد؛ به این صورت که در طول‌های کوتاه، کمانش بیشتر به طور محلی و در اطراف عیب اتفاق می‌افتد و با افزایش طول نانولوله، مد کمانش به سمت کمانش کلی پیش می‌رود و خود را به صورت پیچش در طول نانولوله نشان می‌دهد.

۳-۱-۳ کمانش نانولوله‌های کربنی تحت ممان خمشی

در این بخش با استفاده از مدل ساختاری تحلیلی بر روی رفتار کمانش خمشی نانولوله های تک-جداره سالم و معیوب انجام گردید. تاثیر انواع مختلف عیوب (تهی جای و استون- والس) در موقعیت-های مختلف بر روی کمانش خمشی بحرانی و انحنای نانولوله های زیگ-زاگ (۱۲۰) و آرمچیر (۷۷) با نسبت های طول به قطر (نسبت ظاهری) متفاوت نیز مورد بررسی قرار گرفته است. موقعیت عیوب در طول نانولوله و حول محیط آن در نظر گرفته شده اند. برای اعمال ممان خمشی ابتدا دو صفحه انتهایی نانولوله ثابت گردید و ممان به مراکز این دو صفحه اعمال شد (شکل (۳-۱۶)).

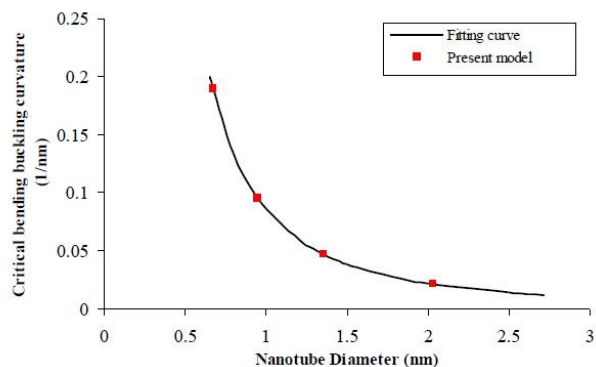


شکل (۳-۱۶) شماتیک موقعیت عیوب (A,B,C) و نحوه اعمال ممان خمشی به مدل.

در شکل (۳-۱۷) انحنای بحرانی کمانش خمشی با استفاده از مدل ساختاری حاضر بر حسب قطر نانولوله برای طول ۲۴ نانومتر رسم شده است. همانطور که مشاهده می شود با افزایش قطر، انحنای بحرانی کمانش خمشی کاهش می یابد. خط تیره خط هموارسازی^۱ می باشد که از رابطه (۳-۱) تبعیت می کند. مقدار a برابر $۰,۰۸۵۷۴$ نانومتر می باشد.

$$K_{cr} = a/d^2 \quad (۳-۱)$$

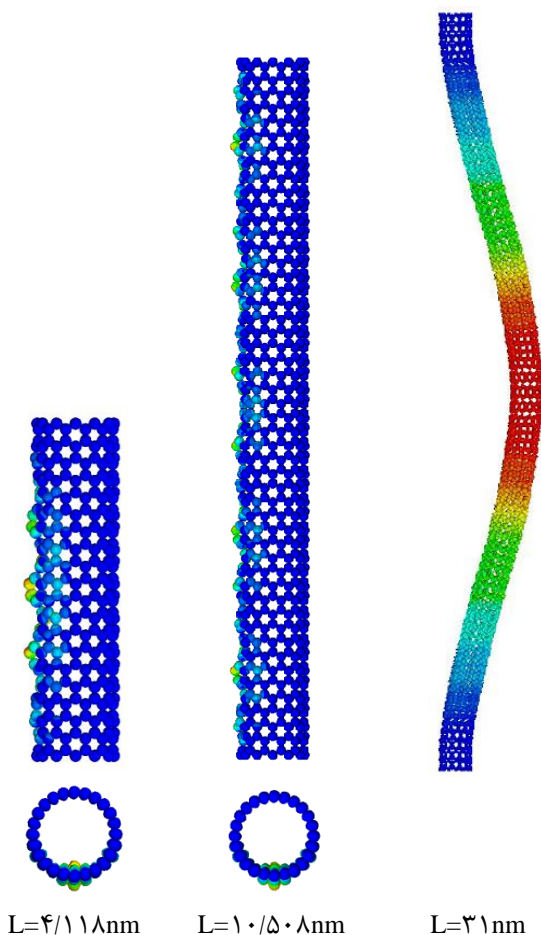
^۱ Fitting line



شکل (۱۷-۳) انحنای بحرانی کمانش خمشی بر حسب قطر نانولوله برای طول ۲۴ نانومتر

شکل های کمانشی برای نانولوله های زیگ-زاگ سالم به ازای طول های مختلف در شکل

(۱۸-۳) نمایش داده شده است.



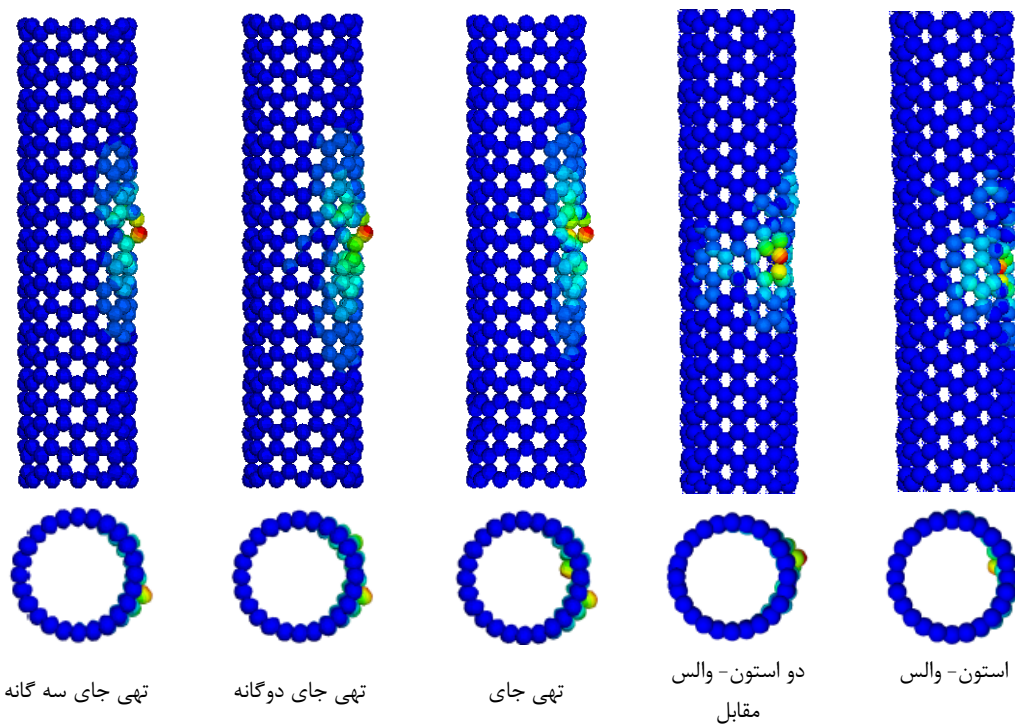
شکل (۱۸-۳) شکل کمانشی نانولوله های زیگ-زاگ (۱۲۰) تحت ممان خمشی در طول های متفاوت

با افزایش نسبت ظاهری مد پوسته به مد اویلر تبدیل می شود. به علاوه شکل های کمانشی

نانولوله های آرمچیر معیوب با عیب استون-والس (موقعیت B) برای دو طول مختلف مقایسه شده اند.

این عیوب مد کمانشی را برای طول ۵,۱۶۵ نانومتر به بالا تغییر می دهند. این طول برای نانولوله های زیگ-زاگ بزرگتر از نانولوله های آرمچیر است. این بدان معناست که نانولوله های زیگ-زاگ مقاومت بیشتری نسبت به عیوب از خود نشان می دهند. شکل های کمانشی نانولوله های زیگ-زاگ و آرمچیر سالم شبیه یکدیگرند. هرچند، هنگامی که معیوب می شوند، متفاوت خواهند شد.

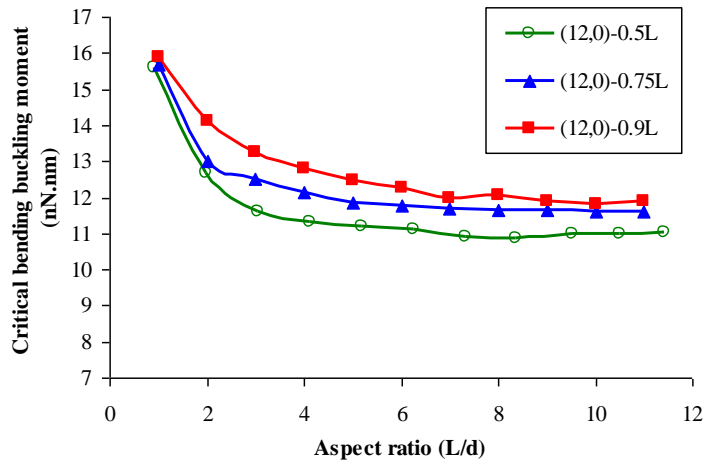
همچنین شکل های کمانشی عیوب تهی جای و استون-والس در وسط نانولوله ها در شکل (۱۹-۳) نمایش داده شده اند. می توان به این نتیجه رسید که با کاهش سطح عیب تهی جای، توزیع بار بر روی اتم های کربن یکنواخت تر می شود.



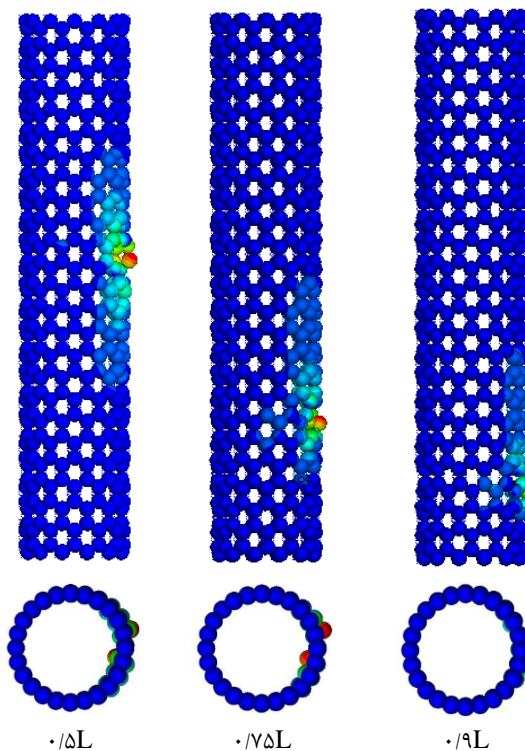
شکل (۱۹-۳) شکل کمانشی در خمش نانولوله های زیگ-زاگ معیوب با عیوب مختلف تهی جای و استون-والس در وسط ($L=4.118 \text{ nm}$).

شکل (۲۰-۳) نمودارهای ممان بحرانی کمانش خمشی نسبت به جابجایی عیوب در طول نانولوله را برای نسبت های ظاهری مختلف نشان می دهد. موقعیت عیوب تهی جای منفرد برابر ۰,۵، ۰,۷۵ و ۰,۹ طول نانولوله از محل اعمال بار در نظر گرفته شده اند. زمانی که عیب در وسط نانولوله قرار دارد، ظرفیت کمانش استوانه ای نانولوله تقریباً معادل است با سطح باری که در آن اولین مد کمانش محلی

رخ می دهد. هنگامی که عیب به محل اعمال بار نزدیک تر می شود، انتقالی بین اولین مد کمانش پوسته به مدهای بالاتر کمانش پوسته رخ می دهد که ظرفیت کمانشی نانولوله را افزایش می دهد.



شکل (۲۰-۳) ممان کمانش خمشی نانولوله های زیگ-زاگ (۱۲ و ۰) با عیب تهی جای منفرد در موقعیت های مختلف شکل های کمانشی نانولوله های معیوب با عیب تهی جای منفرد در موقعیت های مختلف در شکل (۲۱-۳) با یکدیگر مقایسه شده اند. هنگامی که عیب در وسط نانولوله قرار دارد، کانتور جابجایی به صورت یکنواخت در نواحی نزدیک عیب پراکنده می شود.



شکل (۲۱-۳) شکل کمانشی نانولوله های زیگ-زاگ (۱۲ و ۰) با عیب تهی جای منفرد در موقعیت های مختلف.

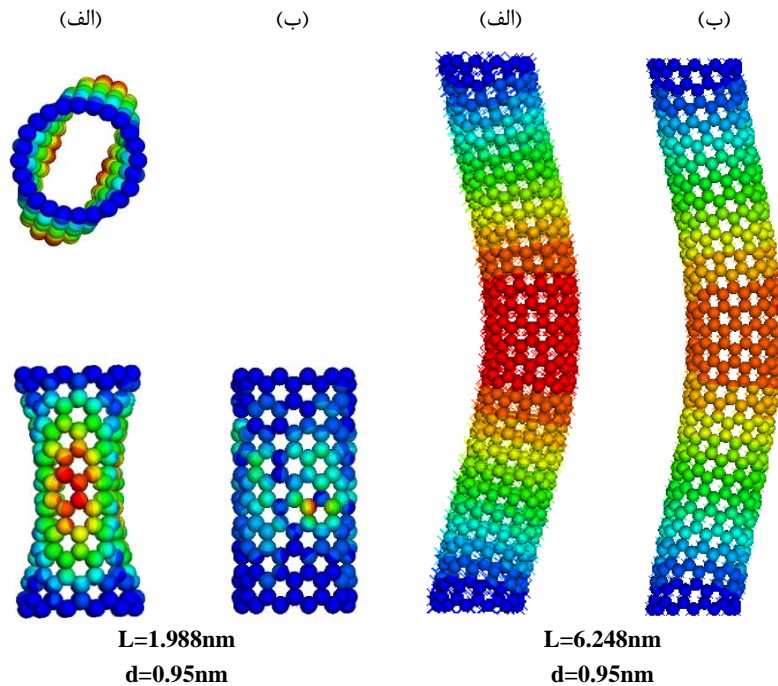
۳-۱-۴ تحلیل فرکانسی نانولوله های سالم و معیوب

در این قسمت فرکانس طبیعی نانولوله های تک جداره تحت شرایط مرزی دو سر گیردار و یک سر آزاد مورد تحلیل قرار گرفته است. فرکانس های طبیعی برای نسبت های ظاهری مختلف توسط مدل حاضر پیش بینی شده است. همچنین، اثر عیوب مختلف تهی جای و استون- والس بر روی فرکانس طبیعی نانولوله های زیگ-زاگ و آرمچیر بررسی شده است. در نهایت نتایج مدل ساختاری حاضر با نتایج سایر روش های عددی مقایسه شده است.

برای در نظر گرفتن اثرات اینرسی جرم هر اتم کربن به صورت یک جرم نقطه ای (1.9943×10^{-26} Kg) در محل مرکز اتم ها در نظر گرفته شده است. از جرم الکترون ها، کانکتورها و فنرها صرف نظر شده است و اتم ها به صورت جرم های متمرکز در محل اتصالات مدل عمل می کنند. مدل حاضر مدلی خوب برای تحقیق در مورد اثرات عیوب بر روی فرکانس های طبیعی می باشد. انواع عیوب تهی جای و استون- والس به کار رفته در نانولوله های معیوب به ترتیب در شکل (۲-۱۳) و شکل (۲-۱۴) مشاهده می شود.

هنگامی که مد پوسته اتفاق می افتد، شکل مد های ارتعاشی به صورت کامل از عیوب تاثیر می پذیرند. بر عکس آن چه فرض می شود، با افزایش عیب، اثرپذیری اندکی افزایش می یابد. به نظر می رسد که در ناحیه فرکانس ارتعاشی کوچکترین تغییر در ساختار ماده در مد های محلی باعث تغییر بزرگی در فرکانس طبیعی خواهد شد. همچنین، چیرالیتی نانولوله اثر زیادی در فرکانس طبیعی نخواهد داشت.

شکل مد ها بر اساس کانتور جابجایی برای دو طول سالم و معیوب با شرط مرزی دو سر گیردار در شکل (۳-۲۲) آورده شده است. با افزایش طول نانولوله، مد پوسته به مد اوایلر تبدیل می شود. تفاوت بین شکل مد های پوسته نانولوله های سالم و معیوب تفاوت بین فرکانس های طبیعی در نسبت های ظاهری کوچک را تصدیق می کند.



شکل (۲۲-۳) شکل مد های تحلیل ارتعاشی نانولوله های زیگ-زاگ (۱۲ و ۰): الف) سالم و ب) معیوب

نرخ کاهش فرکانس طبیعی برای نسبت های ظاهری کوچک تر به علت افزایش نسبت ظاهری و قطر بیشتر است. این مسئله نشان می دهد که اثر قطر بر روی فرکانس های طبیعی برای نسبت های ظاهری کوچک تر بیشتر می باشد. این امر باعث دسترسی به فرکانس های متنوعی می شود که برای سیستم های NEMS مفید هستند. به این نکته بایستی توجه کرد که فرکانس های طبیعی از شکل مد ها و موقعیت عیوب تاثیر می پذیرند. انتقال فرکانس^۱ (Δf) با توجه به رابطه (۲-۳) بدست می آید.

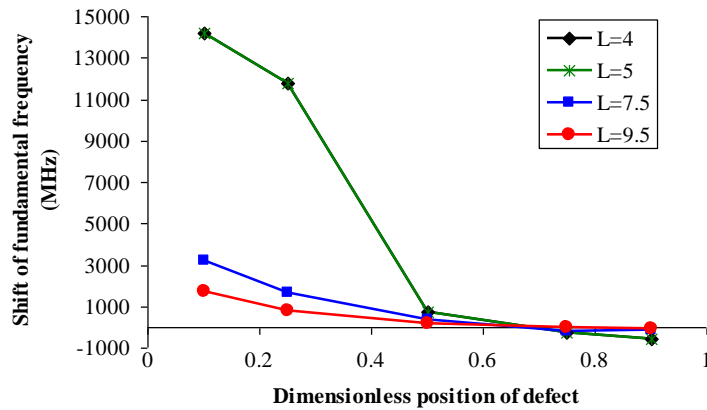
$$\Delta f = f_{per} - f_{def} \quad (۲-۳)$$

که در آن f_{per} و f_{def} به ترتیب فرکانس های پایه نانولوله های سالم و معیوب را نشان می دهد.

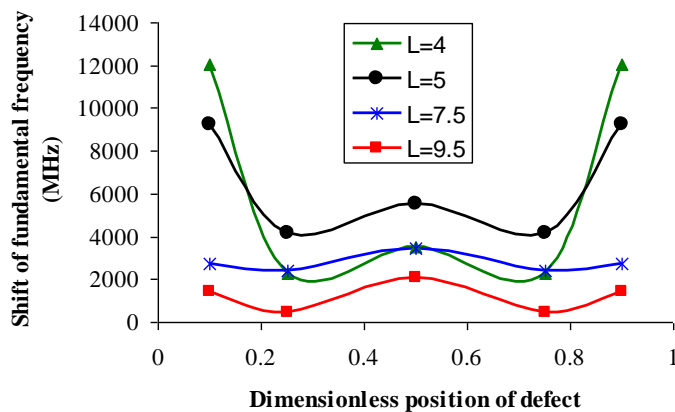
شکل (۲۳-۳) نمودار انتقال فرکانس پایه نسبت به جابجایی عیب در طول نانولوله را برای دو شرط مرزی نشان می دهد. موقعیت عیب تهی جای منفرد در $0.1L, 0.25L, 0.5L, 0.75L$ قرار دارد که L طول نانولوله است. نتایج نشان می دهد که با جابجایی عیب به سمت انتهای آزاد، کاهش انتقال فرکانس پایه کمتر می شود. بنابراین نقطه بحرانی برای حضور عیب در نزدیکی انتهای آزاد زمانی که

^۱ Frequency shift

مد پوسته اتفاق می افتد می باشد. هرچند نقطه بحرانی زمانی که مد اوپلر رخ می دهد در وسط نانولوله می باشد.



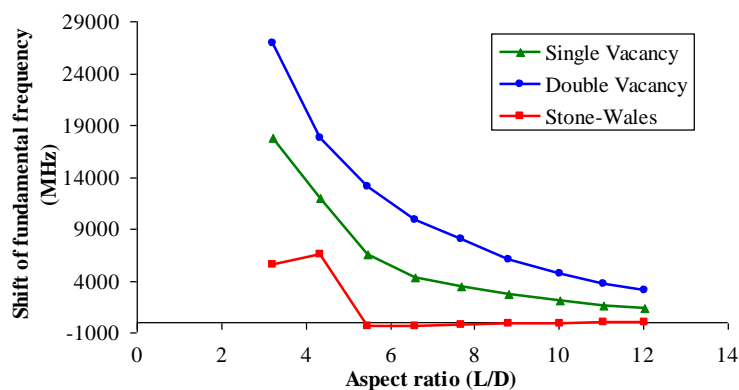
(الف)



(ب)

شکل (۳-۲۳) انتقال فرکانس پایه نانولوله زیگ-زاگ (۱۲۰) با طول های مختلف نسبت به موقعیت عیب تهی جای تحت شرایط مرزی الف) دو سر گیردار و ب) یک سر آزاد

شکل (۳-۲۴) انتقال فرکانس پایه نانولوله (۱۲۰) را برای عیوب تهی جای و استون- والس به ازای نسبت های ظاهری مختلف نشان می دهد. عیوب تهی جای منفرد برای نانولوله های (۱۲۰) نسبت به عیوب تهی جای دوگانه برتر هستند؛ زیرا سطح مورد تاثیر کوچک تری دارند. اما زمانی که مد اوپلر اتفاق می افتد، فرکانس نانولوله های معیوب با عیب استون- والس بیشتر از نانولوله های سالم می باشند. انتقال فرکانس با افزایش نسبت ظاهری کاهش می یابد.



شکل (۳-۲۴) تاثیر عیوب بر انتقال فرکانس پایه نانولوله با نسبت های ظاهری مختلف تحت شرایط مرزی دو سر گیردار

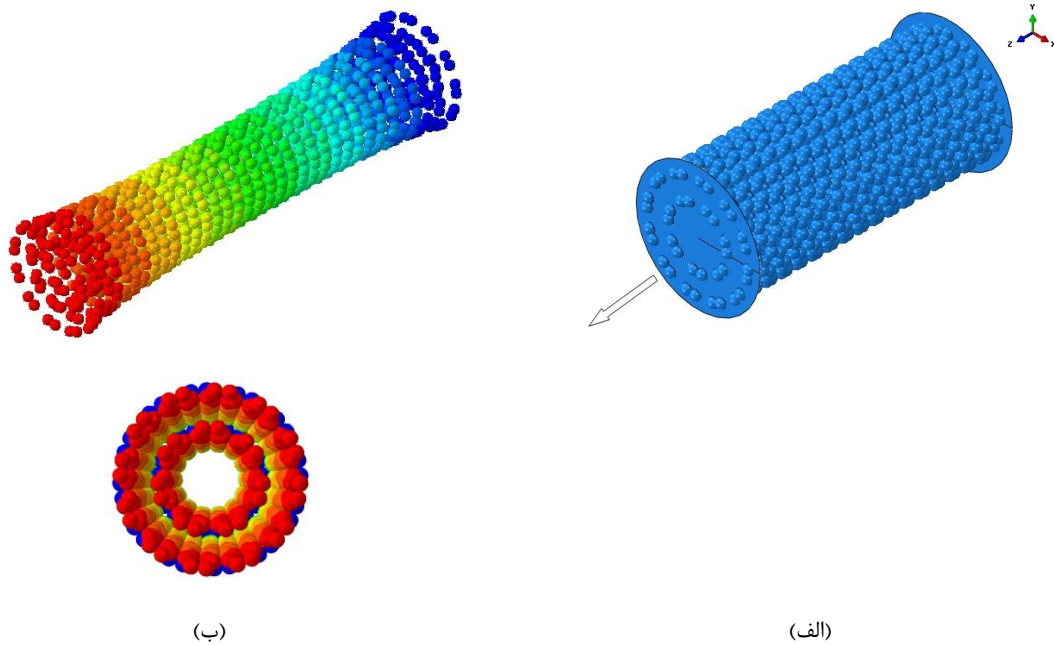
۲-۳ تحلیل نانولوله های دو جداره

در این بخش به تحلیل رفتار مکانیکی نانولوله های دوجداره تحت بارگذاری ها و شرایط مرزی مختلف خواهیم پرداخت. در تمامی آنالیزها از آرایش آرمچیر (12,12)@(7,7) استفاده شده است. در نتیجه از نانولوله تک جداره استفاده شده در بخش های قبلی به عنوان جداره داخلی نانولوله دوجداره استفاده شده است. علت استفاده از این ساختار این بود که نانولوله آرمچیر (۱۲ و ۱۲) نزدیکترین چیدمان بعد از نانولوله (۷ و ۷) است که اختلاف شعاع آن ها با یکدیگر ۰,۳۴ نانومتر است. این فاصله، فاصله استاندارد بین صفحات گرافیت است [۸۹] و در اغلب تحلیل ها به عنوان فاصله بین جداره ها لحاظ می شود. به دلیل جلوگیری از طولانی شدن بحث از ذکر نتایج مشابه با نانولوله های تک جداره خودداری شده است.

۱-۲-۳ تعیین مدول الاستیسیته نانولوله دوجداره

آزمایش کشش یکی از روش های معتبر و معروف برای پیش بینی مدول الاستیسیته مواد می باشد. برای یافتن مدول یانگ پوسته دایروی در مقیاس ماکرو، معمولاً یک بخش استاندارد از ماده را انتخاب می کنیم و آزمایش کشش را به جای پوسته دایروی انجام می دهیم. هرچند نمی توانیم این روش را برای موادی در مقیاس نانو نظیر نانولوله های کربنی انجام دهیم. بنابراین، در آزمایش کشش

نانولوله کربن نانولوله را از دو انتها می کشیم. در اینجا ما دو صفحه در انتهای نانولوله ثابت کرده و بار تک محوره در راستای محور نانولوله دوجداره به مراکز صفحات وارد می کنیم (شکل (۳-۲۵)).



شکل (۳-۲۵) الف) شرایط مرزی و بارگذاری مدل ساختاری DWCNT و ب) تغییر شکل یافته نانولوله دوجداره آرمچیر (7,7)@(12,12) با طول ۴/۰۵۸ نانومتر تحت کشش

همانطور که در شکل (۳-۲۵) مشاهده می شود، بار واحد در راستای محور نانولوله (راستای Z) وارد می شود. در قسمت شکل (۳-۲۵) می توان تغییر شکل یافته نانولوله دوجداره آرمچیر را مشاهده نمود. همانطور که در مقطع شکل مشاهده می شود دو جداره هم زمان و به یک صورت تغییر شکل داده اند که به علت حضور نیروی واندروالس است که فاصله بین دوجداره را تنظیم می کند.

در این بخش ما از تعریف اصلی مدول یانگ استفاده کرده و تغییر شکل نانولوله تحت بار محوری کششی را شبیه سازی کرده ایم. بنابراین مدول یانگ با استفاده از رابطه (۳-۳) بدست خواهد آمد.

$$Y = \frac{P/A_0}{\Delta L/L} \quad (3-3)$$

که در آن P معرف نیروی کل عمل کننده بر روی اتم های انتهای نانولوله می باشد. همچنین L و ΔL به ترتیب طول اولیه نانولوله و تغییر طول نانولوله تحت نیروی هستند. A_0 نیز مساحت سطح مقطع نانولوله دو جداره است که از رابطه (۳-۴) بدست خواهد آمد.

$$A_0 = \frac{\pi}{4} [(d_o + 0.34)^2 - (d_i - 0.34)^2] \text{ nm}^2 \quad (4-3)$$

که در آن و d_o و d_i به ترتیب قطر خارجی و داخلی نانولوله بر حسب نانومتر هستند.

پارامترهای استفاده شده در روابط (۳-۳) و (۴-۳) مربوط به مدل ساختاری حاضر در جدول (۱-۳) آورده شده اند. با توجه به این مقادیر، مدول الاستیسیته 1.24 TPa حاصل شد که مشابه کار لی و چو [۳۰] مقداری از مدول یانگ جداره داخلی بیشتر است. مدول یانگ بدست آمده با نتایج مراجع [۷۴-۷۶] (جدول (۴-۱)) سازگاری بسیار خوبی دارد. این اولین گام در اعتبار سنجی مدل جدید ارائه شده در این پایان نامه بوسیله سایر نتایج معتبر می باشد.

جدول (۱-۳) پارامترهای هندسی مدل ساختاری برای محاسبه مدول الاستیسیته

$d_i(\text{nm})$	$d_o(\text{nm})$	$A_0(\text{nm}^2)$	$L(\text{nm})$
0.947344	1.6294	2.75649	4.058

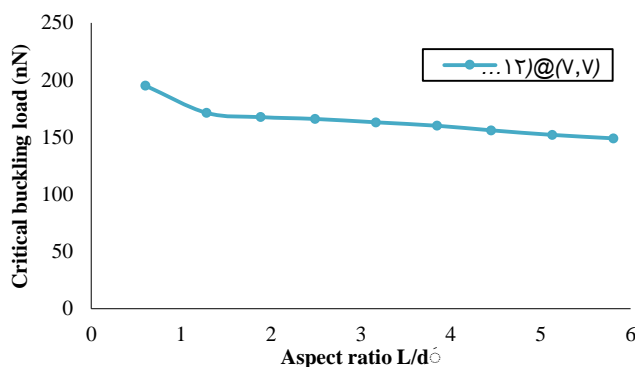
در ادامه مدول یانگ برای چند نمونه نانولوله دوجداره معیوب با عیوب تهی جای منفرد نیز بدست آمد. نتایج نشان می دهد این عیوب مدول الاستیسیته را به میزان کمی کاهش می دهند. بنابراین تعداد کمی عیب، مدول الاستیک نانولوله های کربنی را به میزان کمی مورد آسیب قرار می دهند و این بدان علت است که دانسیته اتم های حذف شده از مدل به نسبت کم می باشند. این نتایج با کار ژین و همکارانش [۵۷] مطابقت دارد. آن ها میزان کاهش مدول الاستیسیته را ۱,۵٪ برای عیب تهی جای منفرد (چه در دیواره داخلی و چه در دیواره خارجی) بدست آوردند.

۲-۲-۳ کمانش نانولوله های کربنی دو جداره تحت نیروی محوری

برای تحلیل کمانش محوری مشابه نانولوله های تک جداره به انتهای نانولوله دوجداره نیروی فشاری واحد در راستای محور نانولوله ها اعمال می کنیم.

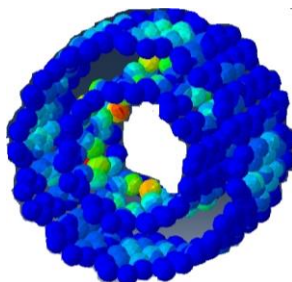
در شکل (۳-۲۶) بار بحرانی کمانش محوری بر حسب نسبت های ظاهری مختلف برای نانولوله دوجداره آرمچیر تحت شرایط مرزی دو سرگیردار رسم شده است. همانطور که دیده می شود، با افزایش نسبت ظاهری (افزایش طول نانولوله) از بار بحرانی کمانش کاسته می شود. مشاهده می شود

با افزایش نسبت ظاهری میزان کاهش بار بحرانی نیز کم شده به خط صاف میل می کند و نشان دهنده این امر است که نانولوله های دوجداره با طول کوچک تر نسبت به بار کمانش محوری حساس تر هستند. با توجه به نسبت های ظاهری کوچک مدل ها، مد پوسته اتفاق می افتد که می توان شکل کمانشی را برای طول ۵ نانومتر در شکل (۲-۱۲) مشاهده نمود. با توجه به افزایش قطر در مقایسه با نانولوله تک جداره آرمچیر (۷۷)، برای رسیدن به مد اوپلر نیاز به طول های بزرگتری داریم.



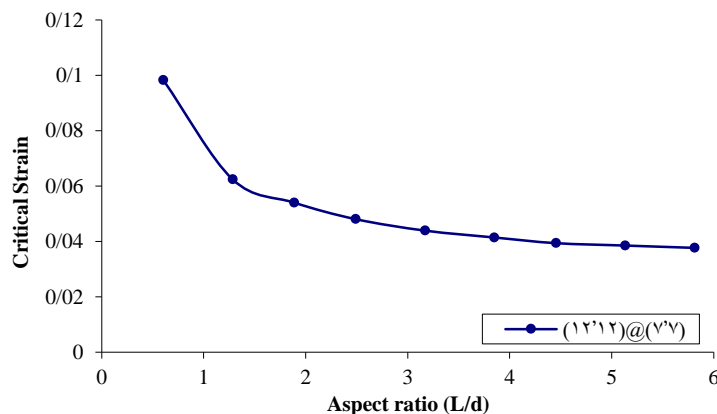
شکل (۳-۲۶) بار بحرانی کمانش محوری بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله دوجداره آرمچیر

با مشاهده رفتار کمانشی نانولوله های دوجداره می توان دریافت که ابتدا نانولوله خارجی دچار کمانش می شود و در مد های بالا امکان کمانش هم زمان دو جداره به وجود می آید. این نتیجه که با توجه به مدل حاضر به دست آمده است، با نتایج سیرس و باترا [۶۹] و وانگ و همکارانش [۹۰] هم خوانی دارد و می توان از آن به عنوان دلیلی دیگر در معتبر بودن مدل حاضر یاد برد. آن ها نشان دادند که کمانش همزمان لوله ها به ازای کرنش زیاد و در مدهای کمانشی بالا امکان پذیر است. در شکل (۳-۲۷) مد سی و نهم نانولوله دوجداره با طول ۰,۹۸۳ آورده شده است. همان طور که مشاهده می شود هر دو دیواره نانولوله دوجداره به طور همزمان کمانش کرده اند.



شکل (۳-۲۷) شکل مد سی و نهم کمانش محوری برای نانولوله دوجداره آرمچیر با طول ۰,۹۸۳ نانومتر

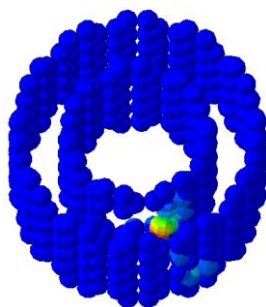
در شکل (۳-۲۸) کرنش بحرانی بر حسب نسبت های ظاهری برای نانولوله دوجداره آرمچیر تحت شرایط مرزی دو سرگیردار رسم شده است. روند تغییرات کرنش نیز مشابه بار بحرانی می باشد و با افزایش نسبت ظاهری کاهش می یابد و نرخ کاهش نیز با افزایش نسبت ظاهری کم می شود.



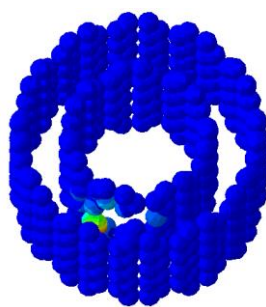
شکل (۳-۲۸) کرنش بحرانی کمانش محوری بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله دوجداره آرمچیر

پس از تحلیل نانولوله های دوجداره سالم، نانولوله های معیوب با عیوب تهی جای مختلف مطابق شکل (۲-۱۶) مورد تحلیل کمانشی تحت بار محوری قرار گرفت که شکل مد های کمانشی مربوط به طول ۰,۹۸۳ نانومتر در شکل (۳-۲۹) آورده شده است.

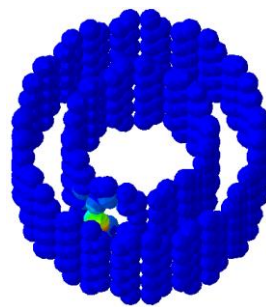
در مورد شکل (۳-۲۹) به چندین نکته می توان اشاره کرد. اول این که نانولوله های معیوب از محل عیوب کمانش می کنند. دوم اینکه عیوب تهی جای در هر جداره باعث ایجاد کمانش در همان جداره می شود که منطقی نیز به نظر می رسد. سومین نکته این که شکل کمانشی عیوب تهی جای منفرد و دوگانه مربوط به عیوب در یک جداره مشابه هم می باشند و با ایجاد عیب تهی جای سه گانه مد کمانشی تغییر می کند. و در نهایت، نانولوله دوجداره دارای عیوب در هر دو جداره برای عیب تهی جای منفرد در جداره خارجی کمانش شروع می شود و عیوب دوگانه و سه گانه باعث می شود که کمانش از جداره داخلی و از مکان عیب شروع شود.



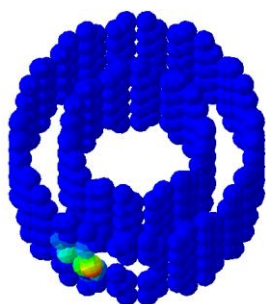
$(7,7)T@(12,12)$



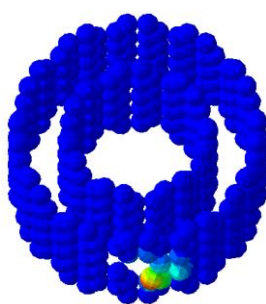
$(7,7)D@(12,12)$



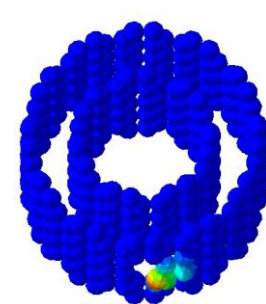
$(7,7)S@(12,12)$



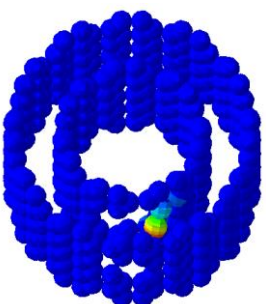
$(7,7)@(12,12)T$



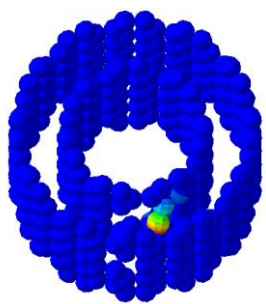
$(7,7)@(12,12)D$



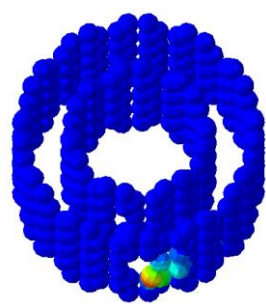
$(7,7)@(12,12)S$



$(7,7)T@(12,12)T$



$(7,7)D@(12,12)D$



$(7,7)S@(12,12)S$

شکل (۲۹-۳) تاثیر عیوب تهی جای بر مد کمانش محوری نانولوله دوجداره آرمچیر با طول ۰,۹۸۳ نانومتر

۳-۲-۳ کمانش نانولوله‌های کربنی تحت گشتاور پیچشی

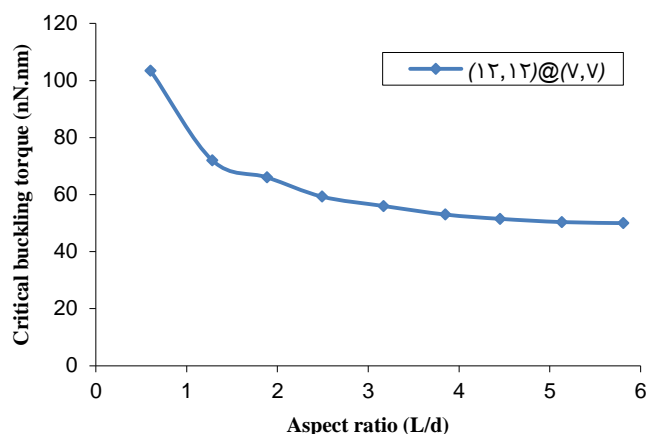
در این بخش به تحلیل کمانش نانولوله‌های دو جداره $(7,7)@(12,12)$ آرمچیر

با شرایط مرزی و بارگذاری مشابه با نانولوله‌های تک جداره خواهیم پرداخت.

در شکل (۳۰-۳) گشتاور پیچشی بحرانی کمانش برای مدل ساختاری جدید بر حسب نسبت

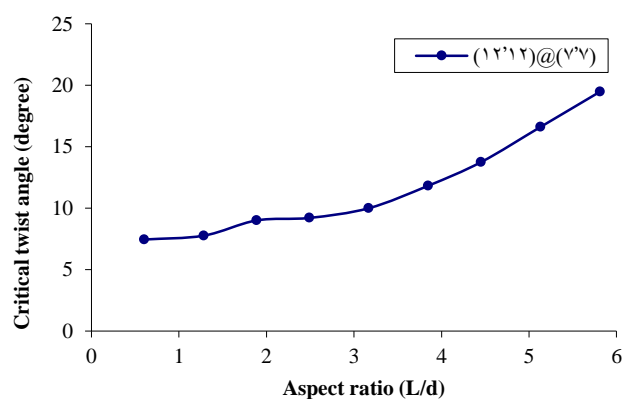
ظاهری رسم شده است. همانطور که مشاهده می‌شود با افزایش نسبت ظاهری از میزان گشتاور

پیچشی بحرانی کاسته می‌شود. این تغییرات در نسبت‌های ظاهری کوچک‌تر بیشتر می‌باشد.



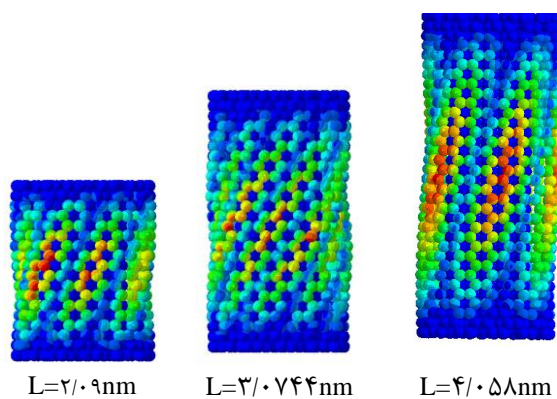
شکل (۳۰-۳) گشتاور پیچشی بحرانی کمانش نانولوله‌های کربنی دو جداره آرمچیر بر حسب نسبت ظاهری

در شکل (۳۱-۳) زاویه پیچش بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله دو جداره رسم شده است. در این جا با افزایش نسبت ظاهری میزان زاویه پیچش بحرانی نیز افزایش می یابد. بنابر این برای رسیدن به کمانش پیچشی به ازای قطر ثابت برای طول های بلندتر نیاز است نانولوله دو جداره را بیشتر پیچاند.

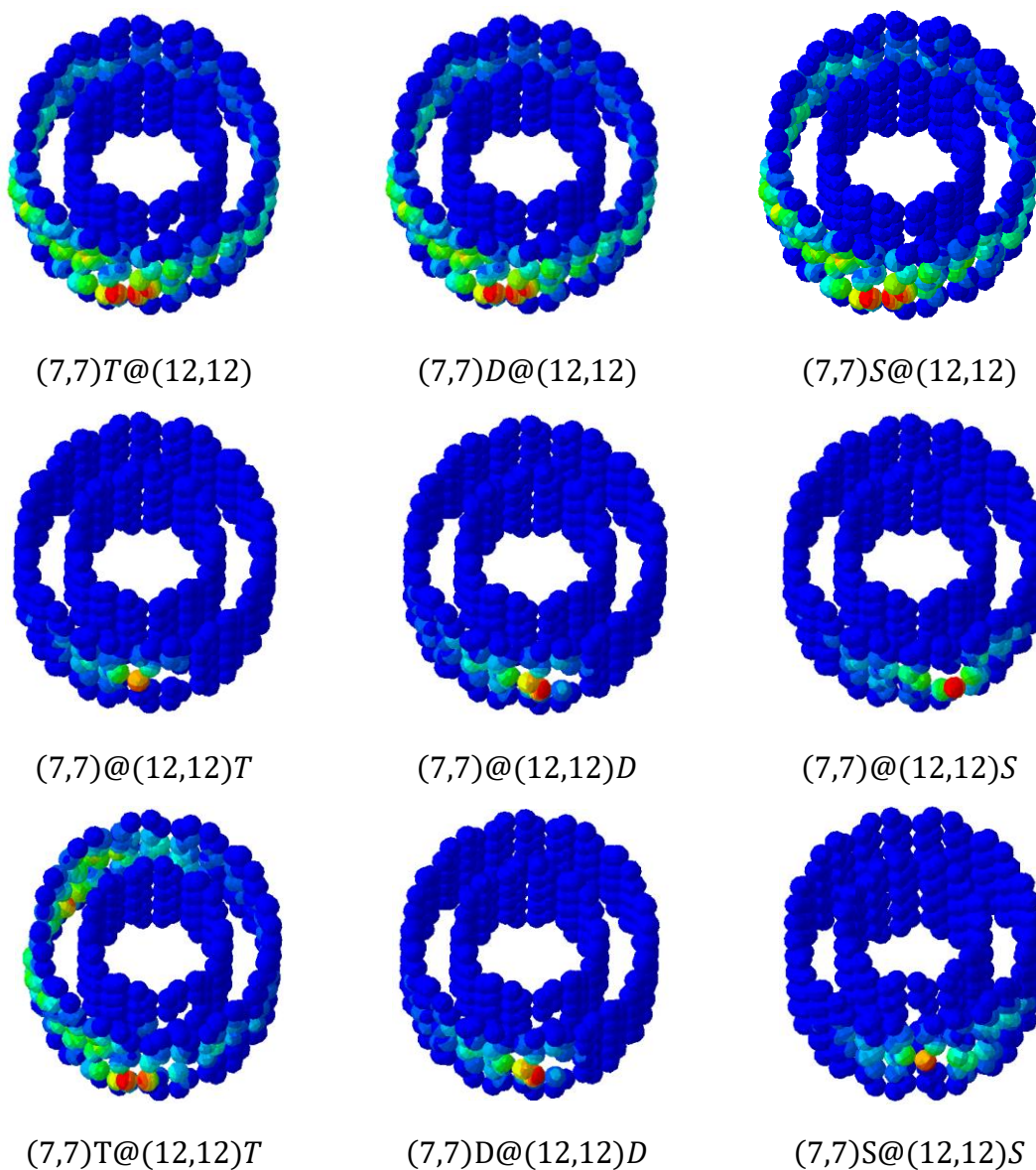


شکل (۳۱-۳) نمودار زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های دو جداره آرمچیر

در شکل (۳۲-۳) شکل مدهای کمانش پیچشی در طول های مختلف آورده شده است. با توجه به این شکل با افزایش طول از تعداد موج ها کاسته می شود. همچنین، جابجایی حداکثر در قسمت میانی نانولوله اتفاق می افتد. چون طول های مورد تحلیل کوچک هستند مد پوسته اتفاق می افتد.



شکل (۳۲-۳) شکل مدهای ناشی از کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی آرمچیر در طول‌های متفاوت



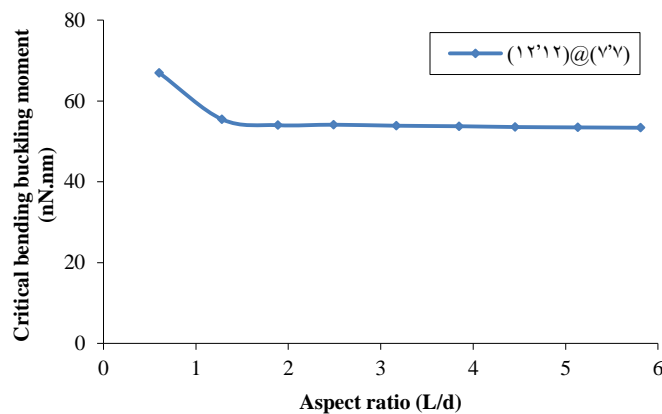
شکل (۳۳-۳) شکل مدهای ناشی از کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی دوجداره معیوب آرمچیر با طول ۰,۹۸۳ نانومتر

پس از تحلیل مدل ساختاری حاضر بصورت سالم، مطابق شکل (۲-۱۶) عیوبی در نانولوله های دوجداره ایجاد شد که شکل مد های کمانشی مربوط به طول ۰,۹۸۳ نانومتر در شکل (۳-۳۳) آورده شده است. همان طور که مشاهده می شود در تمام موارد، جداره خارجی دچار کمانش شده است. برای عیوب تهی جای در جداره داخلی، نانولوله خارجی بصورت گسترده تغییر شکل می دهد. در موارد دیگر کمانش به صورت محلی در ناحیه عیب تهی جای در جداره خارجی اتفاق افتاده است. برای عیب تهی جای سه گانه در دو جداره نیز مجدد کمانش بصورت گسترده رخ داده است. شکل کمانشی مدل ها در هر گروه تقریباً مشابه یکدیگر می باشد؛ ولی مقدار بار کمانشی متفاوت است که در فصل آینده به آن خواهیم پرداخت.

۳-۲-۴ کمانش نانولوله های کربنی تحت ممان و بار خمشی

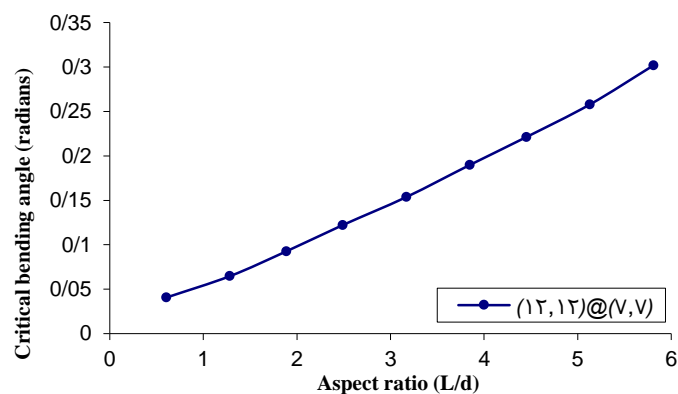
در این قسمت به کمانش خمشی مدل ساختاری حاضر خواهیم پرداخت. برای تحلیل کمانش نانولوله دو جداره از دو نوع بارگذاری تحت ممان خمشی و بار خمشی استفاده شده است. که به تفکیک نتایج هر بخش ارائه خواهد شد.

برای کمانش تحت ممان خمشی، بارگذاری مطابق شکل (۳-۱۶) به نانولوله دوجداره اعمال گردید. با توجه به تحلیل های مختلف انجام شده، بحرانی ترین موقعیت برای عیوب تهی جای موقعیت C می باشد. ممان بحرانی کمانش خمشی برحسب نسبت ظاهری برای این موقعیت در شکل (۳-۳۴) نشان داده شده است. با توجه به این شکل با افزایش نسبت ظاهری ممان خمشی بحرانی ابتدا کاهش و سپس به یک مقدار ثابت میل می کند. بنابراین به ازای قطر ثابت، با افزایش طول ممان بحرانی خمش تغییر چندانی نخواهد کرد و می توان گفت ممان بحرانی خمشی تقریباً مستقل از طول است. البته ذکر این نکته الزامی است که در نسبت های ظاهری استفاده شده در این تحلیل در منطقه مد پوسته قرار داریم.



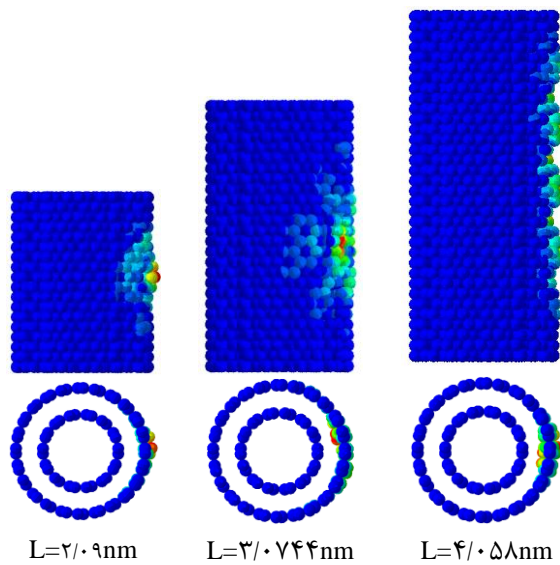
شکل (۳-۳۴) نمودار ممان خمشی بحرانی بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله دوجداره آرمچیر

در شکل (۳-۳۵) زاویه خمشی بحرانی بر حسب نسبت های ظاهری مختلف رسم شده است. همانطور که مشاهده می شود با افزایش نسبت ظاهری، زاویه بحرانی خمشی افزایش می یابد که این روند با نتایج پانتانو و همکارانش [۲۶] مطابقت دارد. آن ها نیز برای نانولوله های دوجداره، به ازای افزایش نسبت ظاهری، افزایش زاویه بحرانی کمانش تحت ممان خمشی را گزارش کردند.

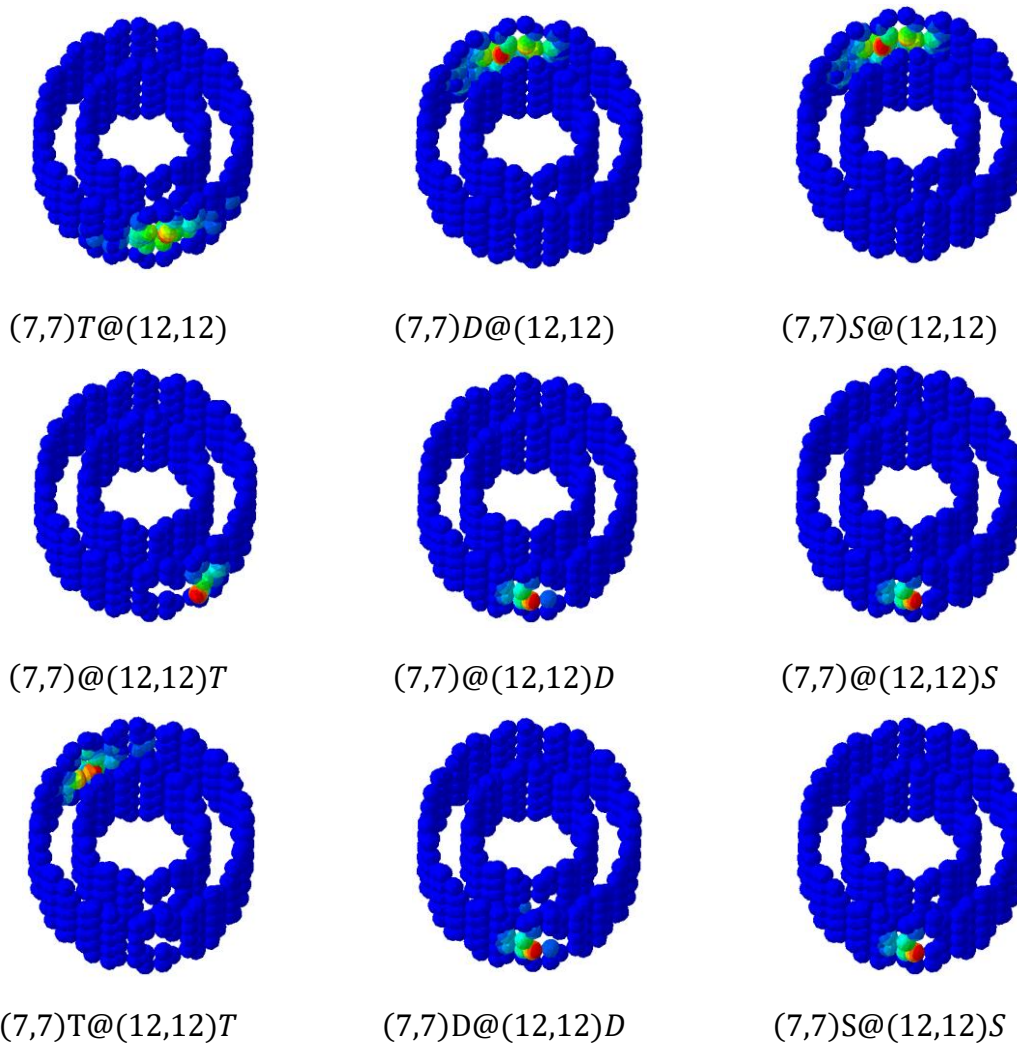


شکل (۳-۳۵) نمودار زاویه ی خمشی بحرانی بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله دوجداره آرمچیر

در ادامه شکل مدهای خمشی نانولوله های دوجداره نشان داده شده است (شکل (۳-۳۶)). همانطور که مشاهده می شود با افزایش طول نانولوله تعداد موجهای بوجود آمده در طول نانولوله افزایش می یابد.

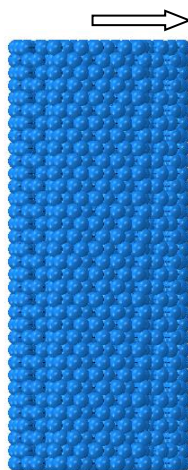


شکل (۳۶-۳) شکل مدهای ناشی از کمانش خمشی نانولوله‌های کربنی دو جداره در طول‌های متفاوت



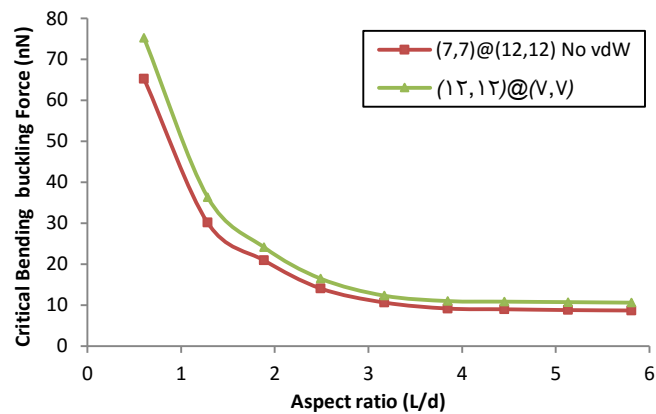
شکل (۳۷-۳) شکل مدهای ناشی از کمانش خمشی نانولوله‌های کربنی معیوب آرمچیر با طول ۰,۹۸۳ نانومتر تحت ممان خمشی

مدهای کمانش ناشی از بار خمشی در شکل (۳-۳۷) نمایش داده شده است. مشاهده می شود برای عیوب تهی جای منفرد و دوگانه در جداره داخلی، بیشترین جابجایی در پشت این عیوب در جداره خارجی اتفاق می افتد. برای عیب تهی جای سه گانه این جابجایی حداکثر به مقابل و جداره خارجی منتقل می شود. برای عیوب در جداره خارجی کانتور جابجایی در ناحیه عیوب شکل میگیرد. در مورد نانولوله هایی با عیوب تهی جای منفرد و دوگانه در هر دو جداره، شکل کمانش مشابه حالت قبل می باشد. ولی برای عیوب تهی جای سه گانه حداکثر جابجایی در محلی دیگر شکل می گیرد. کمانش خمشی را همچنین می توان با اعمال بار خمشی به انتهای نانولوله مطابق شکل (۳-۳۸) ایجاد کرد. شرایط مرزی مورد استفاده در این تحلیل یک سر آزاد می باشد که بار به انتهای آزاد مدل وارد می شود.



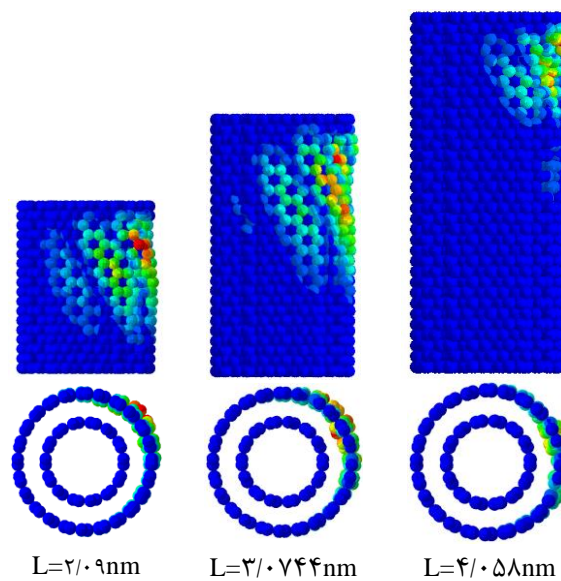
شکل (۳-۳۸) نحوه اعمال بار خمشی در تحلیل کمانشی نانولوله های دوجداره آرمچیر

در شکل (۳-۳۹) نمودار بار بحرانی کمانش خمشی بر حسب نسبت ظاهری رسم شده است. برای بررسی اثر نیروی واندروالس بر روی بار بحرانی خمشی، دو مدل یکی با نیروی واندروالس و دیگری فاقد این نیرو مورد آنالیز قرار گرفت که نتایج هر دو مدل در این شکل آورده شده است. همانطور که مشاهده می شود مدل فاقد نیروی واندروالس در بار کمتری دچار کمانش خمشی می شود. بنابراین نیروی واندروالس موجب مقاومت در برابر کمانش خمشی می شود.



شکل (۳۹-۳) نمودار بار بحرانی خمشی بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های دوجداره آرمچیر

در شکل (۴۰-۳) مدهای کمانشی نانوله‌های دوجداره تحت بار خمشی نمایش داده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، ناحیه دچار تغییر شکل به نقطه اعمال بار نزدیک می‌باشد و با افزایش طول نانولوله این ناحیه کوچک تر می‌شود.



شکل (۴۰-۳) شکل مدهای ناشی از کمانش خمشی نانولوله‌های کربنی دوجداره تحت بار خمشی در طول‌های متفاوت

فصل چهارم

مقایسه و نتیجه گیری

فصل ۴ - مقدمه

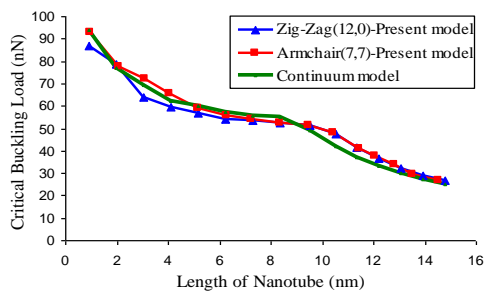
برای آنکه صحت و درستی مدل ارائه شده مشخص شود، باید نتایج بدست آمده از آن را با نتایج دیگر مدل‌های معتبر مقایسه نمود؛ لذا در این فصل به مقایسه‌ی نتایج حاصل از مدل ارائه شده و مدل‌های دیگر می‌پردازیم و همچنین نتایج حاصل از تحلیل نانولوله‌های سالم و معیوب را با یکدیگر مقایسه می‌نمائیم. نتایج مربوط به نانولوله‌های تک و دوجداره بصورت مجزا ارائه شده‌اند.

۴-۱ نانولوله‌های تک جداره

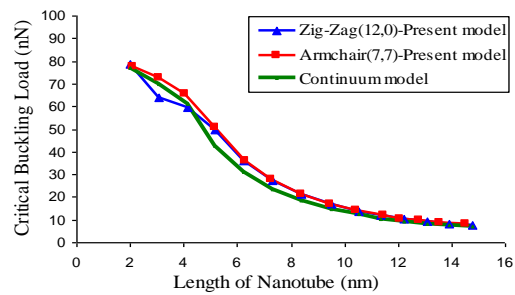
در این بخش به مقایسه نتایج ارائه شده در فصل سه پرداخته می‌شود. هریک از تحلیل‌ها در ادامه به تفصیل بررسی خواهد شد.

۴-۱-۱ مقایسه نتایج حاصل از تاثیر شرایط مرزی بر روی کمانش محوری

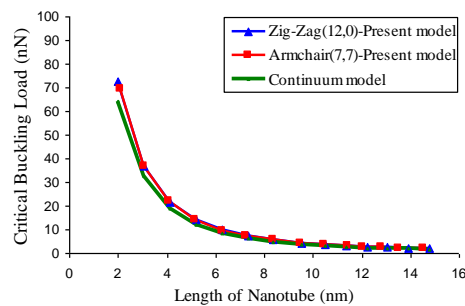
در شکل (۴-۱) بار بحرانی کمانش برای نسبت‌های ظاهری مختلف و شرایط مرزی متفاوت (الف) دو سر گیردار، (ب) دو سر ساده و (ج) یک سر آزاد) نشان داده شده است. با افزایش طول نانولوله، مدهای پوسته و اوپلر رخ خواهند داد. زمانی که مد کمانشی اوپلر ظاهر می‌شود، بار بحرانی کمانش از معادله اوپلر تبعیت می‌کند. بنابراین به سادگی می‌توان این بار را برای نانولوله‌های به اندازه کافی بلند محاسبه نمود. بایستی به این نکته توجه نمود که با کاهش پیوندها در دو سر نانولوله، مد پوسته در طول‌های کوچکتر رخ خواهد داد. بنابراین از معادله اوپلر می‌توان برای طول‌های کوتاه‌تر نیز استفاده نمود. در شکل (۴-۱) همچنین نتایج مدل حاضر با نتایج مدل مکانیک پیوسته مقایسه شده است.



الف



ب



ج

شکل (۴-۱) مقایسه نتایج مدل ارائه شده با مدل پیوسته برای بار کمانش بحرانی تحت شرایط مرزی: الف) دو سر گیردار، ب) دو سر ساده و ج) یک سر آزاد

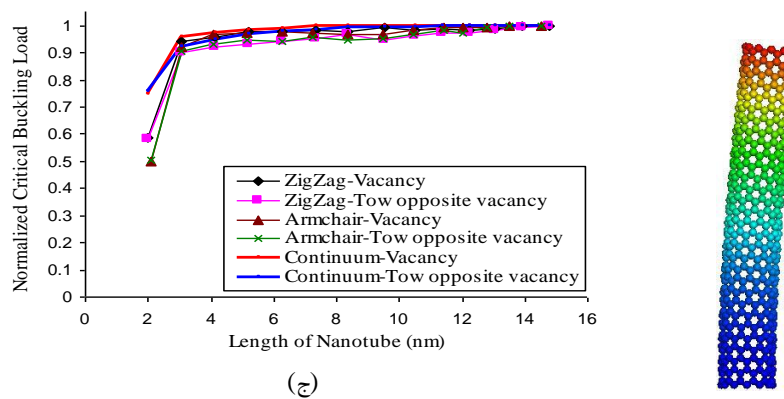
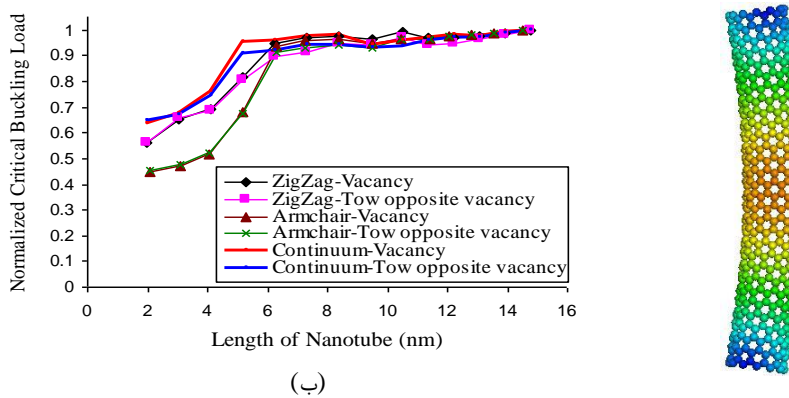
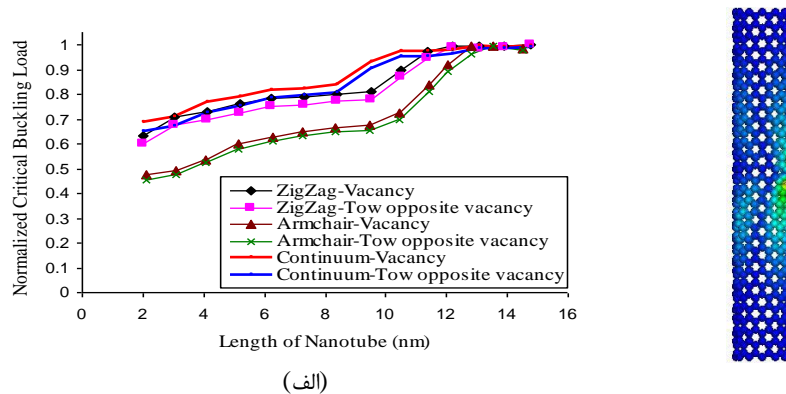
با کاهش درجات آزادی در شرایط مرزی، اتم های کربن با آزادی کمتری حرکت خواهند کرد. بنابراین، این امر منجر می شود به کمانش محلی^۱ (مد کمانشی پوسته) نانولوله های تک جداره و کمانش کلی^۲ (مد کمانشی اوپلر) را به تاخیر خواهد انداخت. این امر باعث افزایش بار کمانش بحرانی برای شرط مرزی دو سر گیردار نسبت به دو شرط مرزی دیگر می شود. بنابراین، مدهای کمانشی و بارهای بحرانی کمانش هم به شرایط مرزی و هم طول نانولوله وابسته هستند. هنگامی که مد پوسته رخ می دهد، شرایط مرزی تأثیری بر روی بار کمانشی نخواهند گذاشت. با ضخامت جداره موثر برابر ۰,۳۴ نانومتر برای نانولوله های تک جداره، نمی توانیم آن ها را با مدل پیوسته پوسته مدل سازی کنیم. زیرا مد اوپلر بسیار زود رخ خواهد داد. بنابراین، ضخامت معادلی برای مدل پیوسته نیاز است که بتواند بار کمانشی بحرانی و شکل متناظر با آن را به درستی پیش بینی کند. در شکل (۴-۱) نتایج مدل حاضر را با یک مدل پیوسته ساده مقایسه کرده ایم. ضخامت موثر برای این مدل برابر ۰,۰۶۶

¹ Local buckling

² Global buckling

نانومتر در نظر گرفته شد [۲۳]. در نتیجه می توان مشاهده کرد که نتایج مدل پیوسته سازگار با نتایج مدل حاضر هستند. زمانی که مد پیوسته اتفاق می افتد، بار کمانشی بحرانی مدل پیوسته بیشتر از مدل حاضر است. اما هنگامی که مد اوپلر رخ می دهد، این روند برعکس می شود. در نتیجه ضخامت مورد استفاده برای مدل پیوسته به درستی انتخاب شده است.

نمودار های بی بعد شده بار بحرانی کمانش برای طول های مختلف نانولوله های زیگ-زاگ و آرمچیر در شکل (۲-۴) نشان داده شده اند. نانولوله ها شامل عیوب تپی جای در وسط می باشند.

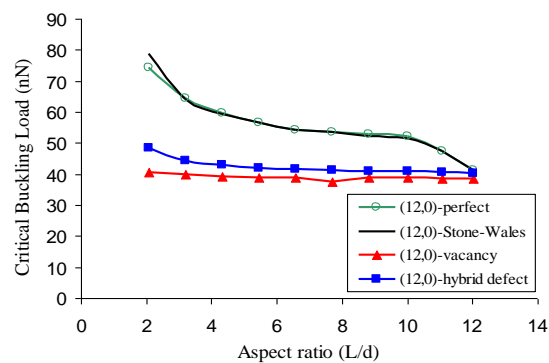


شکل (۲-۴) نمودار بار بحرانی بی بعد شده کمانش و مقایسه بین مد کمانشی مدل حاضر و مدل پیوسته برای شرایط مرزی: الف) دو سر گیردار، ب) دو سر ساده و ج) یک سر آزاد

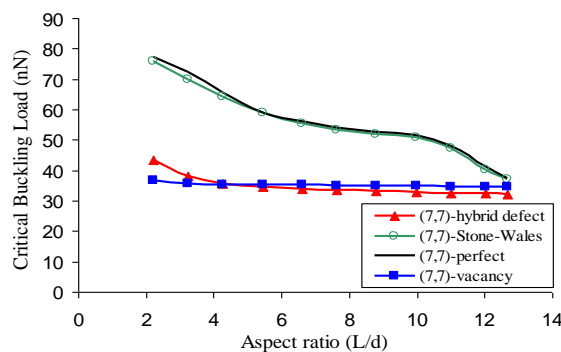
همان طور که در شکل (۲-۴) نشان داده شده است، زمانی که مد اوایلر اتفاق می افتد، عیوب تهی جای اثر بسیار کمی بر روی بار بحرانی کمانش دارند.

عیوب استون- والس تاثیر قابل توجهی بر روی بار بحرانی کمانش نخواهند داشت. حتی دو عیب مقابل استون- والس بار بحرانی کمانش را به ندرت کاهش می دهد. همانطور که پیش تر توضیح داده شد، زمانی که پیوند ها کاهش می یابند، مد اوایلر در طول های کوتاه تر رخ می دهد و اثر عیوب بر روی بار بحرانی کمانش نیز کاهش می یابد. بنابراین، عیوب استون- والس تحت شرایط مرزی دیگر در حالت کلی بر روی بار بحرانی کمانش اثر نخواهد داشت.

تاثیر عیوب ترکیبی نیز بر روی بار کمانش بحرانی مورد تحقیق قرار گرفته است و مقایسه نتایج حاصل با داده های مربوط به عیوب تهی جای منفرد در شکل (۳-۴) آورده شده است. می توان مشاهده نمود که عیب ترکیبی بار کمانش بحرانی را بیشتر از عیوب تهی جای منفرد کاهش می دهد. هرچند که دو اتم کربن در نانولوله معیوب حذف شده اند.



(الف)

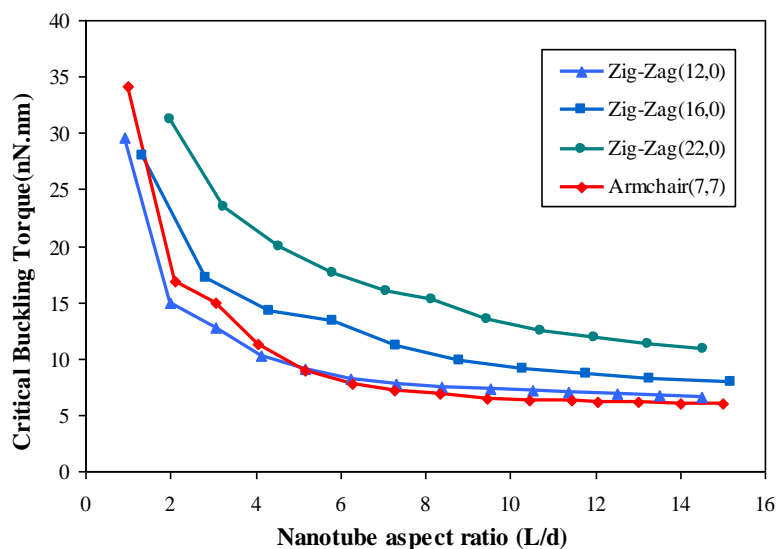


(ب)

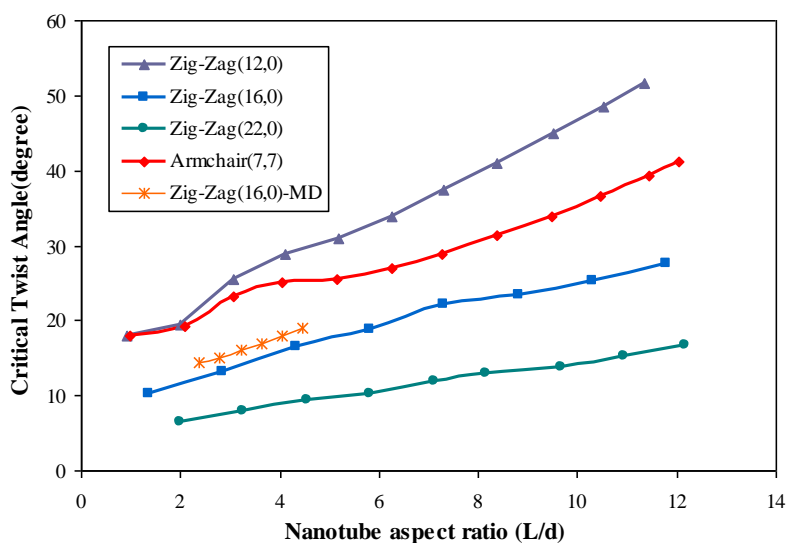
شکل (۳-۴) مقایسه بار بحرانی کمانش به ازای عیوب مختلف : الف) زیگ- زاگ، ب) آرمچیر.

۲-۱-۴ مقایسه‌ی نتایج حاصل از کمانش تحت ممان پیچشی

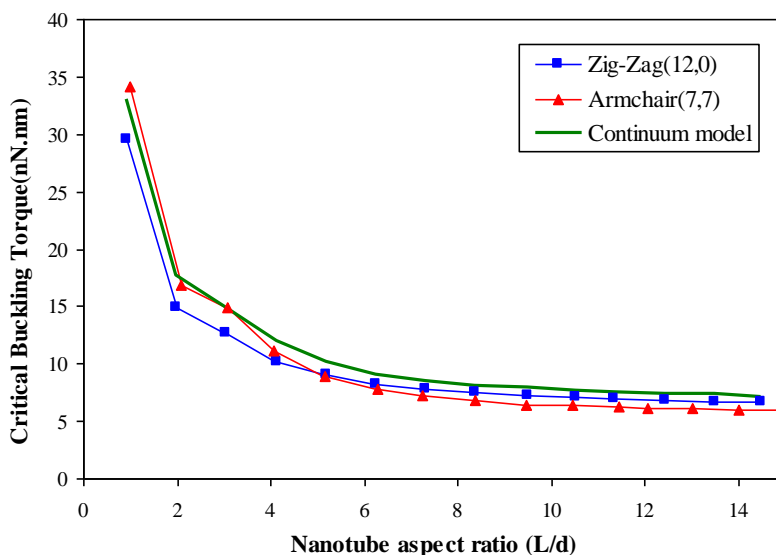
در شکل (۴-۴) و شکل (۵-۴) به ترتیب مقایسه‌ای میان ممان و زاویه بحرانی کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی زیگ-زاگ و آرمچیر در نسبت‌های ظاهری متفاوت صورت گرفته است. در شکل (۴-۴) مشاهده می‌شود که مقادیر ممان بحرانی کمانش برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰) و آرمچیر (۷،۷) بسیار به هم نزدیک می‌باشد و با افزایش نسبت ظاهری مقادیر آن‌ها به هم نزدیک‌تر می‌گردد. همچنین می‌توان نشان داد که با افزایش قطر، ممان پیچشی کمانش افزوده می‌گردد به طوری که برای نانولوله‌ی (۲۲،۰)، بیشترین مقادیر ممان بحرانی کمانش بدست آمده است. از شکل (۵-۴) می‌توان نتیجه گرفت، با آن که مقادیر ممان بحرانی کمانش برای دو نوع نانولوله‌ی زیگ-زاگ و آرمچیر به هم نزدیک است؛ ولی زوایای پیچش آنها تنها در نسبت‌های طولی بسیار کوچک (کوچک‌تر از ۳) به هم نزدیک می‌باشد. به طور کلی می‌توان گفت که نانولوله‌های کربنی زیگ-زاگ در زوایای پیچشی بزرگتری دچار کمانش می‌شوند. در شکل (۵-۴) همچنین مقایسه‌ای بین نتایج بدست آمده از مدل ارائه شده و مدل ونگ [۶۸] برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۶،۰) انجام گرفته است و مشاهده می‌شود که نتایج حاصل از این دو روش تطابق قابل قبولی با یکدیگر دارند.



شکل (۴-۴) نمودارهای ممان پیچشی بحرانی بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های کربنی زیگ-زاگ و آرمچیر



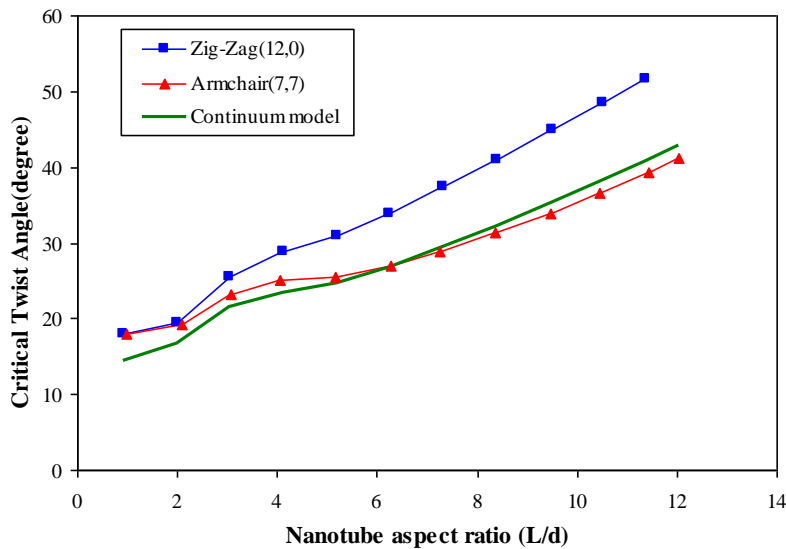
شکل (۴-۵) نمودارهای زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های کربنی زیگ-زاگ و آرمچیر در شکل (۴-۶) نمودارهای ممان پیچشی بحرانی بر حسب نسبت ظاهری، برای مدل ارائه شده و مدل پیوسته آورده شده است. مشاهده می‌شود که نتایج حاصل از دو مدل تطابق قابل قبولی با یکدیگر دارند و البته در نسبت‌های طولی کوچک، برای ممان پیچشی، نتایج حاصل از مدل پیوسته با نتایج بدست آمده برای نانولوله‌های آرمچیر مطابقت بیشتری دارد.



شکل (۴-۶) نمودارهای ممان پیچشی بحرانی بر حسب نسبت ظاهری

همچنین در شکل (۴-۷) نمودارهای زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت ظاهری برای دو مدل مورد بررسی نشان داده شده‌اند. می‌توان دید که نتایج حاصل از دو مدل تطابق قابل قبولی با یکدیگر

دارند و البته در نسبت‌های طولی بزرگ، برای زاویه‌ی پیچش، نتایج حاصل از مدل پیوسته با نتایج بدست آمده برای نانولوله‌های آرمچیر مطابقت بیشتری دارد. به طور کلی با توجه به این دو شکل می‌توان نتیجه گرفت که در کمانش تحت ممان پیچشی، مدل پیوسته با نانولوله‌های آرمچیر تطابق بیشتری دارد.



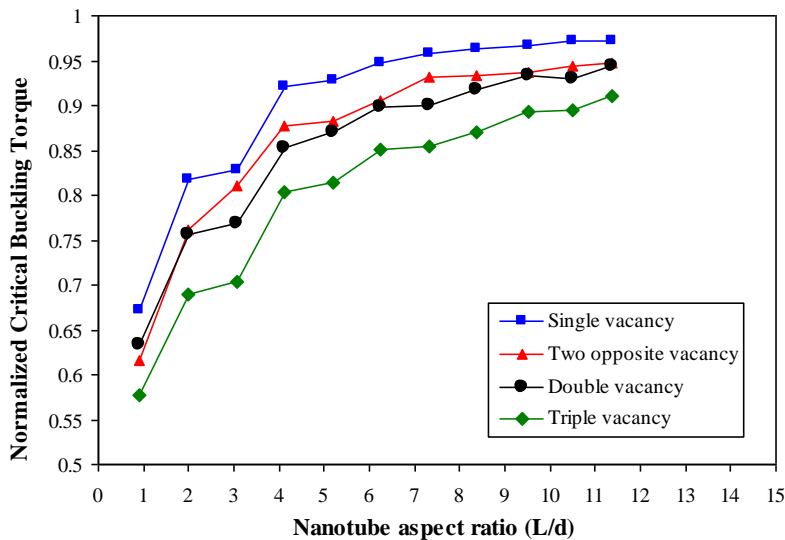
شکل (۷-۴) نمودارهای زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت ظاهری

به منظور بررسی تأثیر عیب بر ممان بحرانی کمانش نمودارهای بی‌بعد آن‌ها رسم شده است. بدین منظور از ضریب ممان بحرانی کمانش استفاده شده است که می‌توان آن را به صورت رابطه (۱-۴) تعریف نمود.

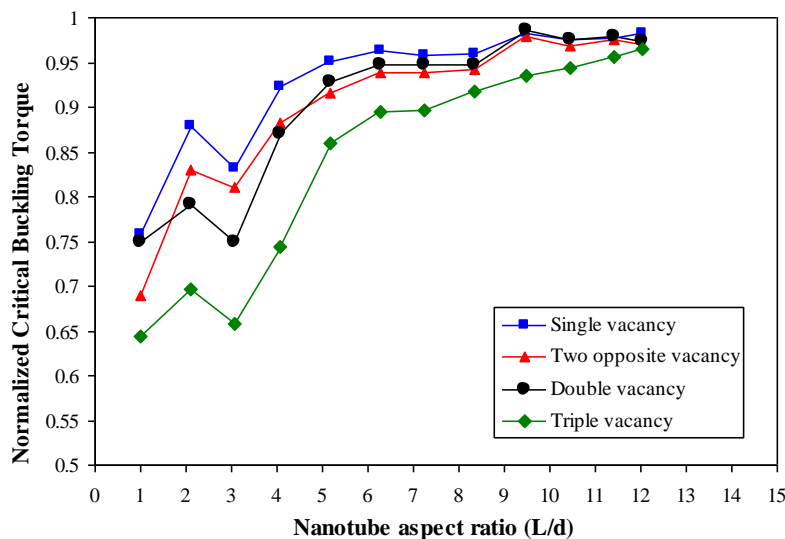
$$k = \frac{T_d}{T_p} \quad (1-4)$$

که در آن T_p و T_d به ترتیب مقادیر ممان پیچشی بحرانی برای نانولوله‌های سالم و معیوب می‌باشد. در شکل (۸-۴) و شکل (۹-۴) به ترتیب نمودارهای ضریب ممان بحرانی بر حسب نسبت ظاهری نشان داده شده‌اند. همانطور که مشاهده می‌شود، با افزایش نسبت ظاهری بر مقدار این ضریب افزوده می‌شود. این امر بدان معناست که با افزایش طول از میزان ممان بحرانی کمانش کاسته می‌شود و برای طول‌های بلند می‌توان از وجود عیب در نانولوله چشم‌پوشی کرد. همچنین مشاهده می‌شود که عیب تهی‌جای سه‌گانه و عیب تهی‌جای منفرد به ترتیب بیشترین و کمترین تأثیر را بر ممان بحرانی

کمانش می‌گذارند. همچنین در این نمودارها می‌توان دید که عیوب تهی‌جای دوگانه و دو تهی‌جای منفرد روبروی هم، تأثیرات بسیار نزدیکی را بر ممان بحرانی کمانش می‌گذارند و این امر به معنای آن است که در کمانش تحت پیچش بر خلاف کمانش تحت فشار محوری، تراکم و یا عدم تراکم عیوب بر روی جداره‌ی نانولوله، تفاوت چندانی با یکدیگر نمی‌کنند.



شکل (۸-۴) نمودار ضریب ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ

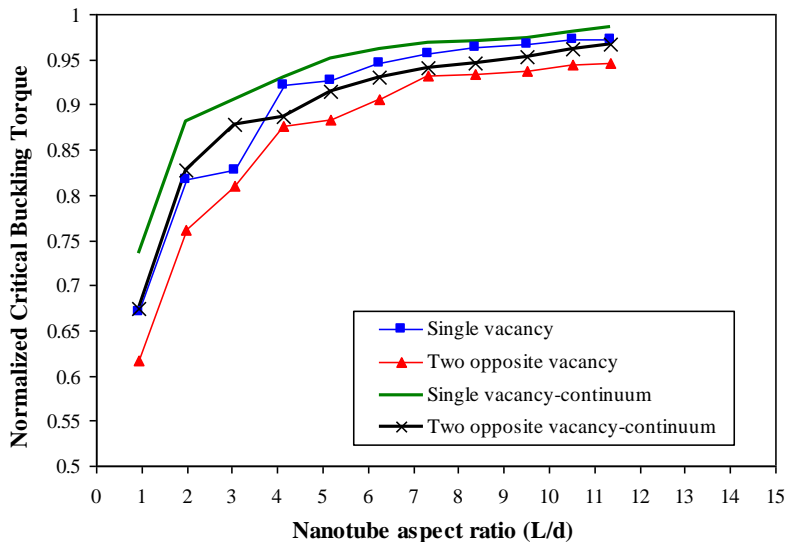


شکل (۹-۴) نمودار ضریب ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های معیوب آرمچیر

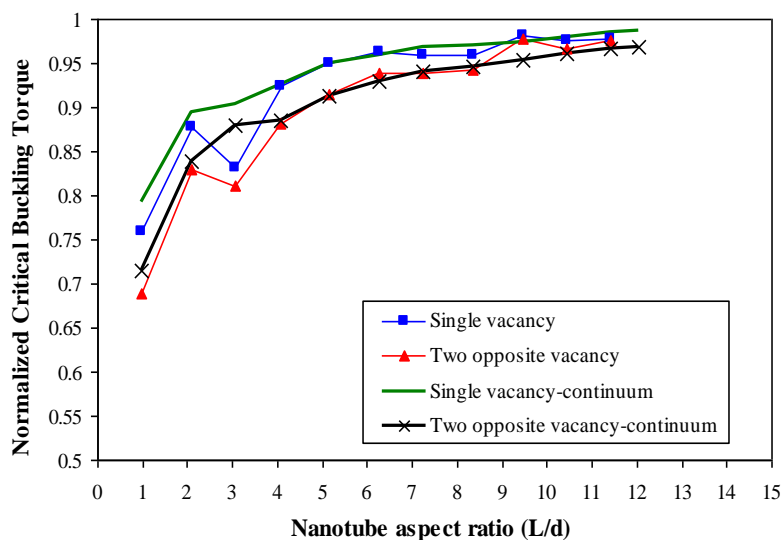
در نهایت به منظور مقایسه‌ی تأثیر عیب بر روی نانولوله‌های کربنی و مدل پیوسته شکل (۴-۱۰) و

شکل (۴-۱۱) آورده شده‌اند که به ترتیب متعلق به نانولوله‌های زیگ-زاگ و آرمچیر می‌باشند.

مشاهده می‌گردد که نتایج بدست آمده از دو روش تطابق قابل قبولی با یکدیگر دارند و این تطابق با افزایش طول نیز بیشتر می‌شود.

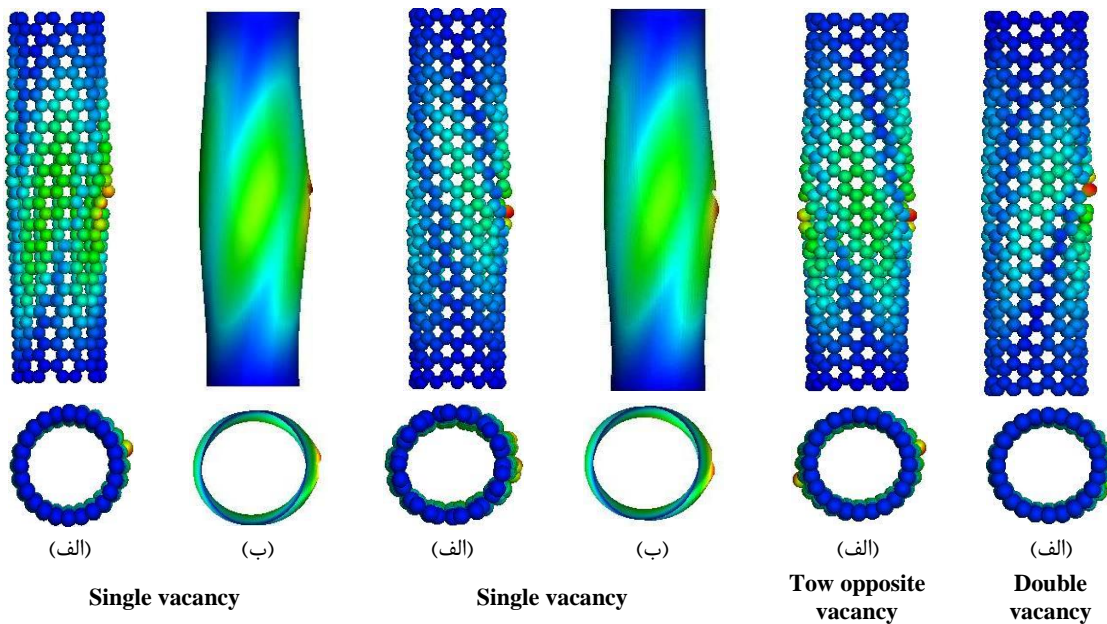


شکل (۴-۱۰) نمودار ضریب ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ



شکل (۴-۱۱) نمودار ضریب ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت ظاهری برای نانولوله‌های معیوب آرمچیر

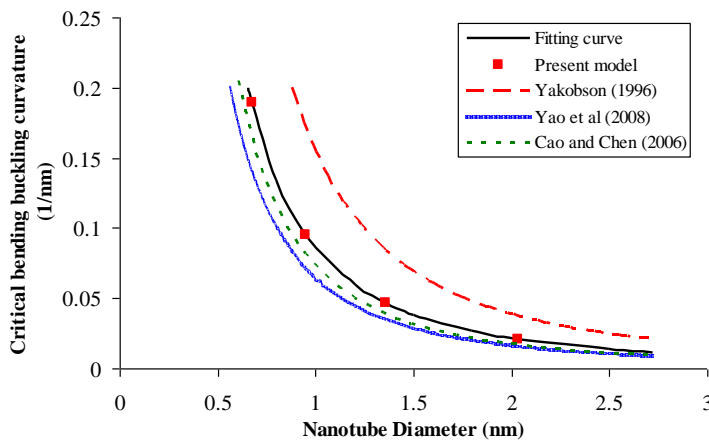
در شکل (۴-۱۲) نیز شکل‌مدهای مربوط به کمانش نانولوله‌ها و مدل پیوسته‌ی معیوب تحت ممان پیچشی نشان داده شده است. مشاهده می‌گردد که در اینجا نیز تطابق قابل قبولی بین شکل مدهای آن‌ها وجود دارد.



شکل (۱۲-۴) شکل‌مدهای کمانشی بدست آمده، تحت ممان پیچشی الف) مدل حاضر و ب) مدل پیوسته

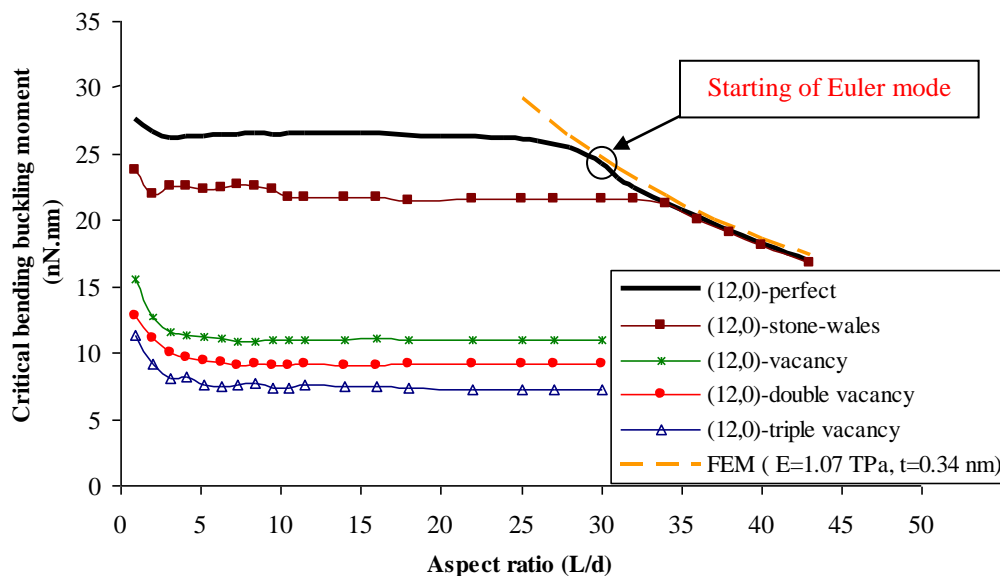
۳-۱-۴ مقایسه نتایج حاصل از کمانش تحت ممان خمشی

برای اعتبار سنجی مدل حاضر نتایج این مدل را با نتایج یاکوبسون و همکارانش [۲۳]، چائو و چن [۹۱] و یائو و همکارانش [۹۲] در شکل (۱۳-۴) مقایسه شده اند. از این شکل می توان نتیجه گرفت که نتایج حاضر برای مدل زیگ-زاگ بسیار نزدیک به نتایج چائو و چن [۹۱] هستند. آن ها مقدار پارامتر a (رابطه (۱-۳)) را $۰,۰۷۳۸$ نانومتر بدست آوردند.



شکل (۱۳-۴) مقایسه نتایج حاضر با نتایج مدل های معتبر موجود برای طول ۲۴ نانومتر (تاثیر قطر نانولوله بر روی انحنای بحرانی کمانش خمشی)

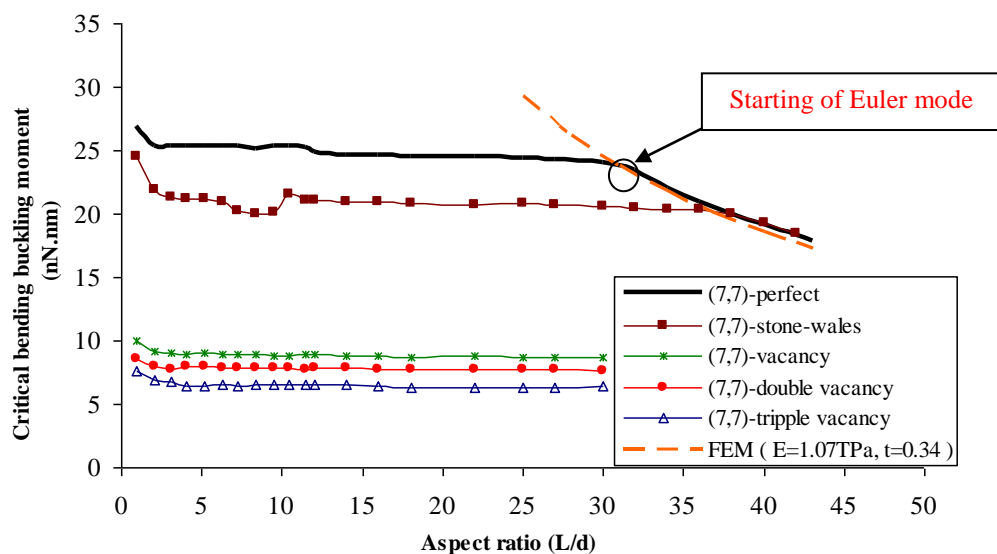
همان طور که در شکل (۳-۱۶) مشاهده می شود، عیوب در پیرامون محیط و در سه موقعیت A، B و C قرار دارند. شکل (۴-۱۴) و شکل (۴-۱۵) به ترتیب ممان بحرانی کمانش خمشی برای نانولوله های زیگ-زاگ (۰ و ۱۲) و آرمچیر (۷ و ۷) را برای نسبت های ظاهری مختلف نشان می دهند. همان طور که مشاهده می شود، با افزایش نسبت ظاهری، ممان بحرانی کاهش می یابد و سپس ثابت باقی می ماند. برای نانولوله های سالم از حدود نسبت ظاهری ۳۰ مد کمانشی اوپلر^۱ رخ می دهد؛ ولی با ایجاد عیب در نانولوله این مد به تاخیر خواهد افتاد. با افزایش نسبت ظاهری، به ترتیب مد پوسته^۲ و اوپلر رخ خواهد داد. انحنا و ممان بحرانی کمانش خمشی برای مدل پیوسته نیز بدست آمده اند. با افزایش نسبت ظاهری، به ترتیب مدهای پوسته و اوپلر اتفاق می افتند. زمانی که مد کمانشی اوپلر رخ می دهد (نسبت ظاهری ۳۰)، انحنا و ممان بحرانی کمانش از مدل پیوسته ($E = 1.07 \text{ TPa}, t = 0.34 \text{ nm}$) تبعیت می کند. بنابراین، انحنا و ممان بحرانی کمانش به سادگی برای نانولوله های بلند با استفاده از مدل پیوسته قابل محاسبه هستند.



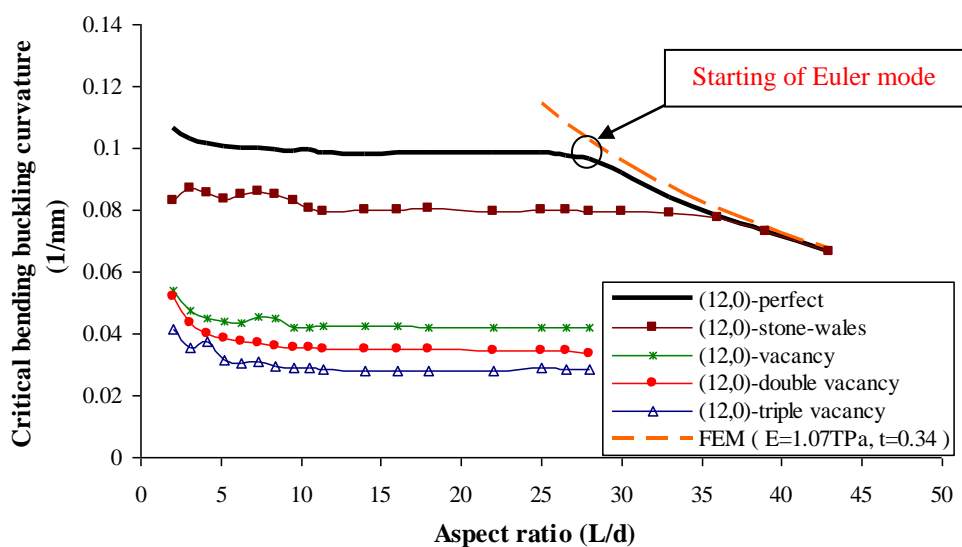
شکل (۴-۱۴) ممان بحرانی کمانش خمشی بر حسب نسبت ظاهری نانولوله های زیگ-زاگ (۰ و ۱۲) سالم و معیوب

¹ Euler mode

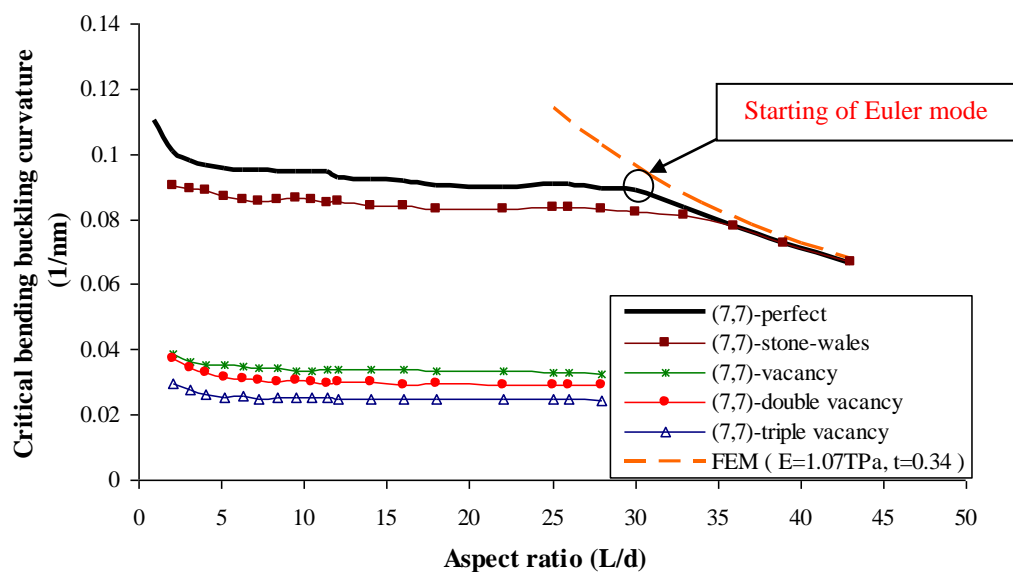
² Shell mode



شکل (۴-۱۵) ممان بحرانی کمانش خمشی بر حسب نسبت ظاهری نانولوله های آرمچیر (۷و۷) سالم و معیوب شکل (۴-۱۶) و شکل (۴-۱۷) به ترتیب انحنای بحرانی کمانش خمشی برای نانولوله های زیگ-زاگ (۰ و ۱۲) و آرمچیر (۷و۷) را برای نسبت های ظاهری مختلف نشان می دهند. در اینجا نیز با افزایش نسبت ظاهری انحنای بحرانی کاهش می یابد و سپس ثابت باقی می ماند. وجود عیب در این جا نیز باعث به تاخیر افتادن مد کمانش اوایلر نسبت به نانولوله سالم می شود. همچنین مشاهده می شود ممان ها و انحنای بحرانی با شروع مد پوسته ثابت باقی می مانند. سپس، با افزایش نسبت ظاهری و پیدایش مد اوایلر ممان بحرانی کاهش می یابد..



شکل (۴-۱۶) انحنای بحرانی کمانش خمشی بر حسب نسبت ظاهری نانولوله های زیگ-زاگ (۰ و ۱۲) سالم و معیوب



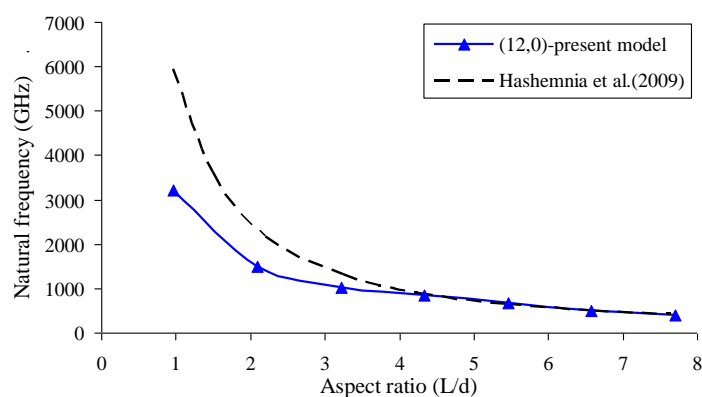
شکل (۴-۱۷) انحنای بحرانی کماتش خمشی بر حسب نسبت ظاهری نانولوله های آرچپیر (۷و۷) سالم و معیوب انواع عیوب تهی جای و استون- والس مورد استفاده در این بررسی در شکل (۲-۱۳) و شکل (۲-۱۴) مشاهده می شوند. تمامی عیوب در این شکل ها در وسط نانولوله تک جداره واقعند. واضح است که که ممان و انحنای بحرانی برای عیب تهی جای سه تایی بیشتر از عیوب دیگر کاهش می- یابد و در حالت کلی عیوب تهی جای تاثیر بیشتری نسبت به عیوب استون- والس دارند.

نتایج شبیه سازی نشان می دهد که اثر موقعیت عیوب بر ممان بحرانی کماتش خمشی و انحنای قابل توجه است. با قرار دادن عیوب بر محیط نانولوله نتیجه می شود که نقطه بحرانی برای وجود عیب موقعیت C می باشد (شکل (۳-۱۶)). تمامی عیوب در شکل (۴-۱۴) تا شکل (۴-۱۷) در وسط نانولوله و در موقعیت C واقعند. همان طور که در این شکل ها مشاهده می شود، زمانی که مد اوپلر رخ می دهد، عیوب اثر بسیار ضعیفی بر روی انحنای و ممان بحرانی کماتش دارند. ولی باید به این نکته توجه کرد که برای نانولوله های معیوب مد اوپلر دیرتر رخ می دهد. به عنوان مثال مد اوپلر برای عیب استون- والس در نسبت ظاهری حدود ۳۵ اتفاق می افتد. از مشاهدات فوق می توان به این نتیجه رسید انتخاب از نانولوله های معیوب طویل ایمن تر است.

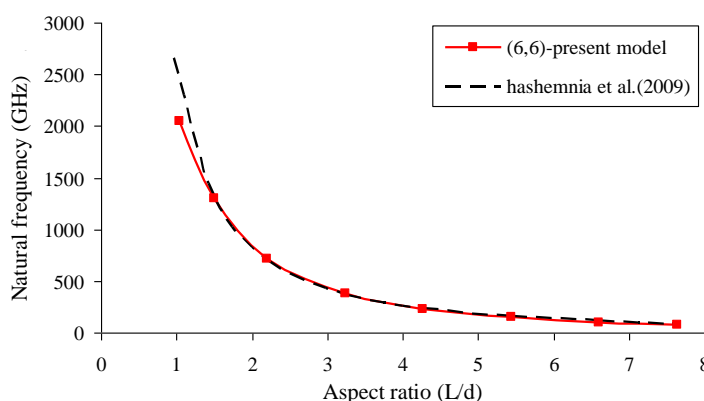
نتایج نشان می دهد با جابجایی عیب به سمت اعمال بار، کاهش بار بحرانی کماتش کمتر می شود. بنابراین، نقطه بحرانی برای وجود عیب در وسط نانولوله می باشد.

۴-۱-۴ نتایج حاصل از تحلیل فرکانسی نانولوله های سالم و معیوب

در شکل (۴-۱۸) فرکانس های طبیعی نانولوله های سالم با نسبت های ظاهری مختلف و شرایط مرزی دو سر گیردار نمایش داده شده است. این نتایج با نتایج هاشم نیا و همکارانش^۱ [۹۳] مقایسه شده است. همانطور که مشاهده می شود زمانی که مد اوپلر اتفاق می افتد، نتایج انطباق خوبی با یکدیگر دارند. هرچند برای مد پوسته، نتایج هاشم نیا و همکارانش از نتایج حاصل از این تحقیق، بزرگتر هستند. این اختلاف برای شرایط مرزی یک سر آزاد مشاهده نمی شود (شکل (۴-۱۸)). نتایج مدل حاضر با کار دینامیک مولکولی دووان و همکارانش^۲ [۹۴] یکسان است. هرچند آن ها نتایج را برای نسبت های ظاهری کوچک و نانولوله های معیوب بدست نیاوردند (جدول (۴-۱)).



(الف)



(ب)

شکل (۴-۱۸) مقایسه نتایج مدل ساختاری و نتایج مدل ساختاری تیر برای نانولوله های زیگ-زاگ (۱۲۰) با شرایط مرزی الف) دو سر گیردار و ب) یک سر آزاد (تاثیر نسبت ظاهری بر روی فرکانس طبیعی)

¹ Hashemnia et al.

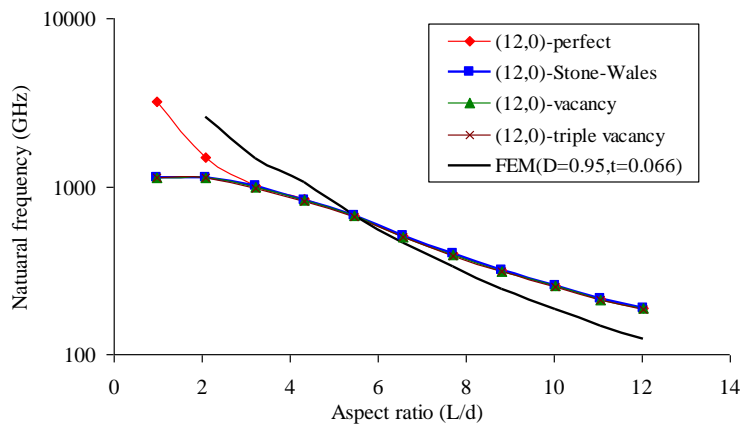
² Duan et al.

جدول (۱-۴) فرکانس های طبیعی (GHz) حاصل از مدل حاضر و مدل MD.

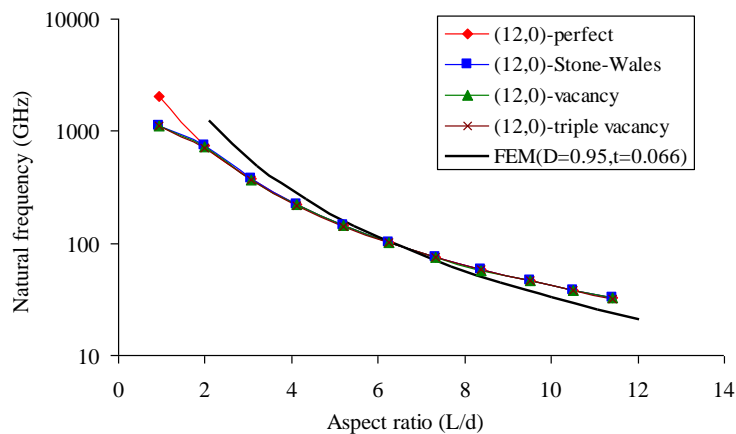
Aspect Ratio	Fixed-Fixed		Fixed-Free	
	Present Model	W.H.Duan (2007)	Present Model	W.H.Duan (2007)
5.26	983	975	216	212
6.35	747	741	154	150
7.07	634	628	126	123
8.16	505	500	97	94
9.25	411	406	76	74
10.34	341	336	63	60
11.43	286	282	51	49
12.52	244	240	42	41
13.6	209	206	34	35

در شکل (۱۹-۴) نتایج مدل ساختاری با مدل پیوسته (با ضخامت جداره ۰,۰۶۶ نانومتر [۲۳]) در نرم افزار آباکوس مقایسه شده است. جرم نانولوله معادل با جرم تمام اتم های کربن در مدل ساختاری قرار داده شده است. فرکانس های طبیعی به صورت لگاریتمی برای نسبت های ظاهری مختلف رسم شده است. هنگامی که مد پوسته رخ می دهد، نتایج FEM مدل پیوسته برای هر دو شرط مرزی بسیار بیشتر از نتایج مدل حاضر هستند. دلیل اصلی این اختلاف رفتار نانوله ها در مدهای پوسته و اوپلر می باشد. نانولوله های تک جداره را تنها زمانی می توان با مدل پیوسته شبیه سازی کرد که مد اوپلر رخ دهد. با مقایسه بین نتایج می توان به این نتیجه رسید که مدل پیوسته نمی تواند به صورت دقیق فرکانس طبیعی نانولوله ها را پیش بینی کند. هنگامی که مد پوسته رخ می دهد، نتایج مدل پیوسته بیشتر و زمانی که مد اوپلر رخ می دهد برعکس.

همانطور که در شکل (۱۹-۴) مشاهده می شود، هنگامی که مد اوپلر رخ می دهد، عیوب اثر ضعیفی بر روی فرکانس های طبیعی دارند. ولی به این نکته باید توجه شود که برای نانولوله معیوب، مد اوپلر دیرتر رخ می دهد. برای عیوب تهی جای و استون- والس در نسبت ظاهری ۴,۵ و برای عیوب تهی جای دوگانه و سه گانه به ترتیب در نسبت های ظاهری ۵,۵ و ۶ رخ می دهد. با توجه به مدل حاضر اثر عیوب زمانی بحرانی می شود که مد پوسته اتفاق بیافتد. بنابر این در استفاده از نانولوله های کوتاه بایستی از نانولوله های سالم استفاده نمود.



(الف)



(ب)

شکل (۴-۱۹) نمودار فرکانس طبیعی برای نسبت های ظاهری مختلف نانولوله های زیگ-زاگ (۱۲ و ۰) سالم و معیوب با شرایط مرزی الف) دو سر گیردار و ب) یک سر آزاد

۲-۴ نانولوله های دو جداره

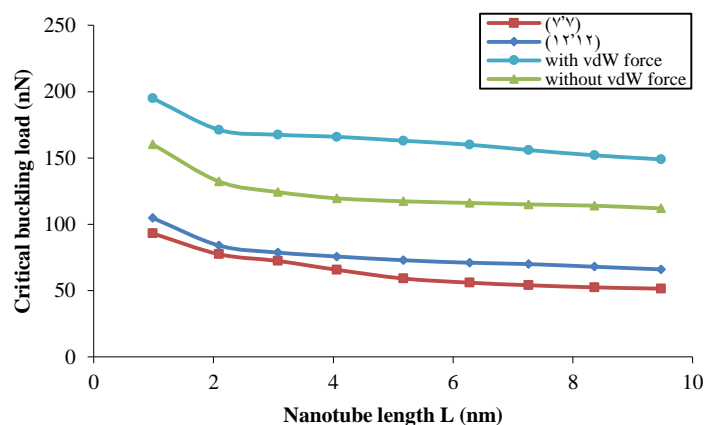
در این بخش به مقایسه نتایج ارائه شده در فصل سه برای نانولوله های دو جداره و بررسی تاثیر نیروی واندروالس پرداخته می شود. هریک از تحلیل ها در ادامه به تفصیل بررسی خواهد شد.

۱-۲-۴ مقایسه نتایج حاصل از کمانش محوری

کمانش نانولوله های دو جداره تحت چهار نوع بارگذاری دو سرگیردار، دو سر ساده، یک سر آزاد و لولاشده-گیردار انجام گرفته است. ولی با توجه به این که کمانش در محدوده مد پوسته رخ می دهد،

شرایط مرزی تاثیر قابل ملاحظه ای بر روی رفتار کمانشی نانولوله های دوجداره نخواهند داشت، بنابراین در ادامه تنها به بحث در مورد شرایط مرزی معمول دو سرگیردار پرداخته خواهد شد.

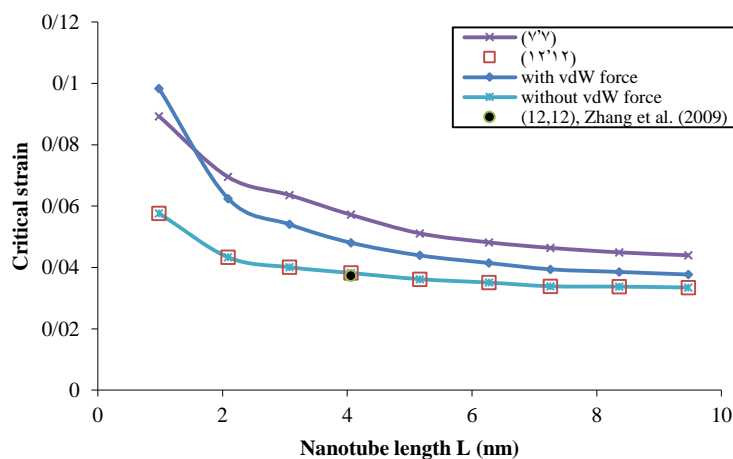
در شکل (۴-۲۰) بار بحرانی کمانش در طول های مختلف را برای نانولوله های تک و دو جداره نشان می دهد. همانطور که مشاهده می شود، با افزایش قطر بار کمانش افزایش می یابد. همچنین، تاثیر نیروی واندروالس بر روی بار کمانشی نانولوله های دوجداره در این شکل قابل مشاهده است. نیروی واندروالس باعث افزایش بار بحرانی کمانش خواهد شد. با توجه به نتایج می توان نتیجه گرفت با اندکی تقریب می توان بار کمانشی نانولوله های دو جداره را با جمع نتایج برای نانولوله های تک جداره تشکیل دهنده آن، بدست آورد. این نکته با نتایج سیرس و باترا [۶۹] هم خوانی دارد و صحت مدل حاضر را تایید می کند.



شکل (۴-۲۰) نمودار بار بحرانی کمانش محوری بر حسب طول نانولوله های تک و دوجداره

در شکل (۴-۲۱) کرنش بحرانی بر حسب طول نانولوله های تک و دوجداره رسم شده است. همان طور که مشاهده می شود، با افزایش قطر از کرنش بحرانی نانولوله های تک جداره کاسته می شود. همچنین نانولوله دوجداره فاقد نیروی واندروالس دارای کرنش بحرانی یکسان با نانولوله آرمچیر (۱۲ و ۱۲) می باشد. بنابراین نانولوله داخلی تاثیری بر تغییر کرنش بحرانی نخواهد داشت. این نکته با نتایج دینامیک مولکولی لو و همکارانش [۹۵] سازگاری دارد. برای تعیین صحت نتایج، کرنش بحرانی برای نانولوله آرمچیر (۱۲ و ۱۲) با طول ۴,۰۸ نانومتر با نتایج ژانگ و همکارانش [۹۶] مقایسه شده

است. همانطور که مشاهده می شود، نتایج بسیار بهم نزدیک هستند که دقت مدل حاضر در تحلیل رفتار کمانش محوری تایید می کند. نکته دیگر در مورد شکل (۴-۲۱) این است که نیروی واندروالس کرنش بحرانی را نسبت به نانولوله دوجداره فاقد این نیرو افزایش می دهد. این امر به این علت است که زمانی که یک جداره به سمت نانولوله دیگر نزدیک می شود، نیروی واندروالس نیرویی دفع کننده تولید می کند و زمانی که جداره ها از هم دور می شوند، نیروی واندروالس دو جداره را به هم نزدیک می سازد. بنابراین، نیروی واندروالس همیشه تاثیری مخالف کمانش ایجاد می کند که در نهایت موجب افزایش کرنش بحرانی خواهد شد. این نکته با نتایج هی و همکارانش [۹۷] مطابقت دارد.



شکل (۴-۲۱) نمودار کرنش بحرانی بر حسب طول نانولوله های تک و دوجداره

برای بررسی و مقایسه تاثیر عیوب مختلف (مطابق شکل (۲-۱۶)) نتایج مربوطه در

جدول (۴-۲) آورده شده است. همانطور که مشاهده می شود، با افزایش تعداد عیوب تهی جای بار کمانش بحرانی کاهش می یابد. در هر مورد می توان بار بحرانی را با مدل سالم مقایسه نمود. با توجه به نتایج می توان نتیجه گرفت که عیوب در نانولوله داخلی تاثیر بیشتری نسبت به جداره خارجی بر روی بار بحرانی دارند و آن را بیشتر کاهش می دهند که با نتایج دینامیک مولکولی ژین و همکارانش [۵۷] سازگار است. همانطور که انتظار می رفت، عیوب همزمان در دو جداره نسبت به عیوب در هر یک از جداره ها بار بحرانی کمانش را بیشتر کاهش می دهد.

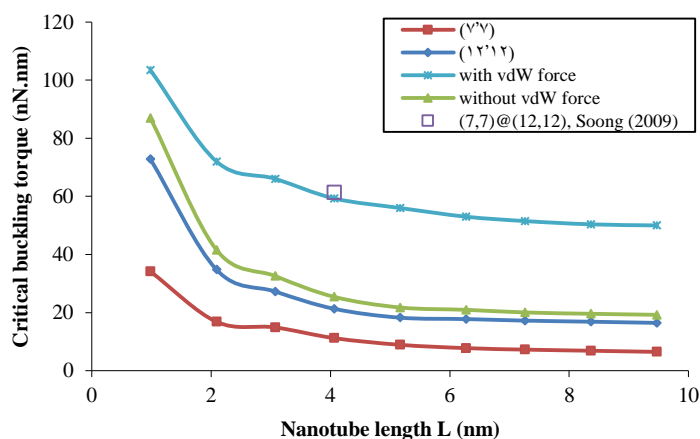
جدول (۲-۴) بار بحرانی کمانش محوری نانولوله های دو جداره سالم و معیوب با طول های مختلف

Critical axial buckling load (nN)										
Length (nm)	perfect	1 Vacancy			2 Vacancy			3 Vacancy		
	(7,7)@(12,12)	(7,7)	(12,12)	(7,7)@(12,12)	(7,7)	(12,12)	(7,7)@(12,12)	(7,7)	(12,12)	(7,7)@(12,12)
0.98	195.00	146.25	150.74	132.60	142.35	146.25	128.70	134.55	140.40	126.75
2.09	171.27	128.45	132.05	116.46	125.03	128.45	113.04	118.18	123.31	111.33
3.07	167.55	125.83	129.85	113.93	122.31	125.66	110.58	115.61	120.64	108.91
4.06	165.96	124.30	127.79	112.85	121.15	124.47	109.53	114.51	119.49	107.87
5.17	163.04	122.77	126.85	110.87	119.02	122.28	107.61	112.50	117.39	105.98
6.27	160.35	121.87	124.11	109.04	117.06	120.26	105.83	110.64	115.45	104.23
7.26	156.46	115.78	118.91	106.39	114.22	117.35	103.26	107.96	112.65	101.70
8.36	152.65	114.49	117.69	103.80	111.43	114.49	100.75	105.33	109.91	99.22
9.47	149.77	107.83	115.47	101.84	109.33	112.33	98.85	103.34	107.83	97.35

۲-۲-۴ مقایسه نتایج حاصل از کمانش پیچشی

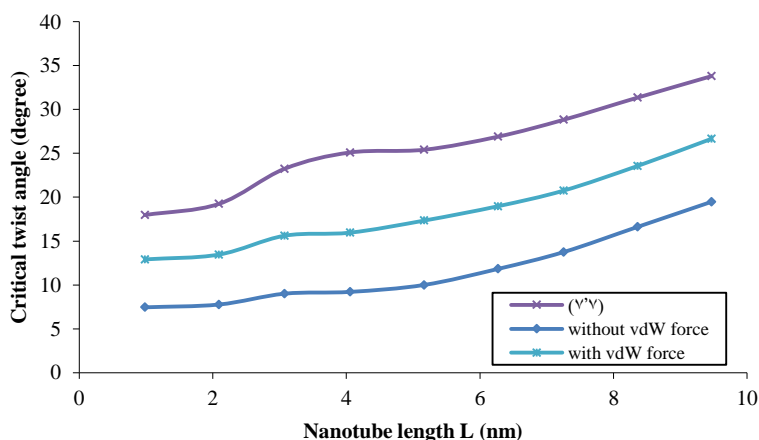
پس از مقایسه نتایج تحلیل رفتار کمانش محوری نانولوله های دوجداره در این بخش به داده های کمانش پیچشی خواهیم پرداخت.

در شکل (۲۲-۴) گشتاور پیچشی بحرانی کمانش برای نانولوله های تک و دوجداره با طول های مختلف آورده شده است. همانطور که مشاهده می شود، با افزایش طول گشتاور بحرانی پیچشی کاهش می یابد. بنابراین، طول های بزرگ تر مقاومت کمتری در مقابل گشتاور پیچشی از خود نشان می دهند. در این نمودار گشتاور پیچشی بحرانی مدل حاضر برای طول ۴,۰۵۸ نانومتر با کار دینامیک مولکولی سونگ [۵۸] مقایسه شده است و انطباق بسیار خوبی بین نتایج مشاهده می شود. با توجه به شکل می توان گفت نیروی واندروالس گشتاور پیچشی کمانش را افزایش می دهد. همچنین با افزایش قطر گشتاور بحرانی نیز افزایش می یابد. این روند تغییرات در مقاله دینامیک مولکولی یانگ و وی [۹۸] نیز مشاهده می شود که صحت مدل حاضر را بار دیگر تایید می کند. در تمامی گراف ها با افزایش طول نرخ کاهش گشتاور پیچشی کاهش می یابد و به یک عدد ثابت نزدیک می شود. البته باید توجه کرد که در این ناحیه مد پوسته رخ می دهد و مسلماً با شروع مد اویلر گراف ها دچار تغییر خواهند شد.



شکل (۴-۲۲) نمودار گشتاور پیچشی بحرانی کمانش بر حسب طول نانولوله های تک و دوجداره

در شکل (۴-۲۳) تغییرات زاویه پیچش بر حسب طول نانولوله داخلی و دوجداره همراه و فاقد نیروی واندروالس مشاهده می کنید. لازم به ذکر است زاویه پیچش نانولوله (۱۲ و ۱۲) بسیار نزدیک به نانولوله دوجداره فاقد نیروی واندروالس می باشد و از رسم آن خودداری شده است. این بدان معناست که در غیاب نیروی واندروالس، افزودن نانولوله ای با قطر کمتر به نانولوله با قطر بیشتر زاویه پیچش نانولوله بزرگ تر را تغییر نخواهد داد. ولی وجود این نیرو باعث افزایش زاویه پیچش نسبت به نانولوله خارجی خواهد شد. همانطور که در این شکل دیده می شود، با افزایش طول، زاویه پیچشی افزایش می یابد. همچنین، نیروی واندروالس باعث افزایش زاویه پیچش می شود. با افزایش قطر، از زاویه پیچش کاسته می شود که این روند نیز با نتایج مرجع [۹۸] سازگار است.



شکل (۴-۲۳) نمودار زاویه پیچش بحرانی کمانش بر حسب طول نانولوله های تک و دوجداره

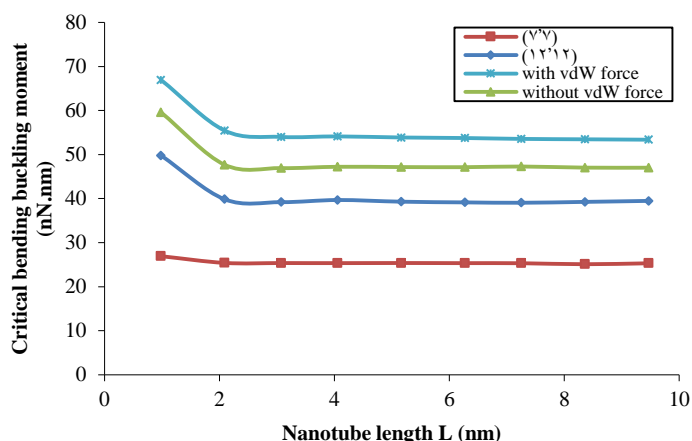
پس از بررسی نانولوله های سالم، نانولوله های معیوب با عیوب تهی جای مختلف (شکل (۲-۱۶)) مورد تحلیل قرار گرفتند که گشتاور پیچشی بحرانی کمانش آن ها در جدول (۴-۳) آورده شده است. با مقایسه نتایج در می یابیم که بحرانی ترین حالت مربوط به عیب تهی جای سه گانه است و با افزایش دانسیته اتم های حذفی، میزان گشتاور پیچشی بیشتر کاهش می یابد. همچنین، عیوب تهی جای بر روی جداره خارجی نسبت به جداره داخلی در کاهش گشتاور خمشی موثر ترند.

جدول (۴-۳) گشتاور پیچشی بحرانی کمانش نانولوله های دو جداره سالم و معیوب با طول های مختلف

Critical buckling torque (nN.nm)										
Length (nm)	perfect	1 Vacancy			2 Vacancy			3 Vacancy		
	(7,7)@(12,12)	(7,7)	(12,12)	(7,7)@(12,12)	(7,7)	(12,12)	(7,7)@(12,12)	(7,7)	(12,12)	(7,7)@(12,12)
0.98	103.41	101.72	82.48	81.03	100.49	83.81	81.19	99.64	73.72	70.00
2.09	72.12	70.68	57.70	56.51	70.08	56.97	55.53	69.49	51.41	49.04
3.07	66.04	64.72	52.83	51.75	64.18	52.17	50.85	63.63	47.08	44.91
4.06	59.31	58.12	47.45	46.47	57.63	46.85	45.67	57.14	42.28	40.33
5.17	56.12	55.00	44.90	43.98	54.54	44.34	43.21	54.08	40.01	38.16
6.27	53.04	51.98	42.43	41.56	51.54	41.90	40.84	51.11	37.81	36.07
7.26	51.51	50.48	41.21	40.36	50.06	40.69	39.66	49.63	36.72	35.03
8.36	50.37	49.36	40.29	39.47	48.95	39.79	38.78	48.53	35.91	34.25
9.47	50.17	49.17	40.14	39.31	48.75	39.63	38.63	48.34	35.77	34.12

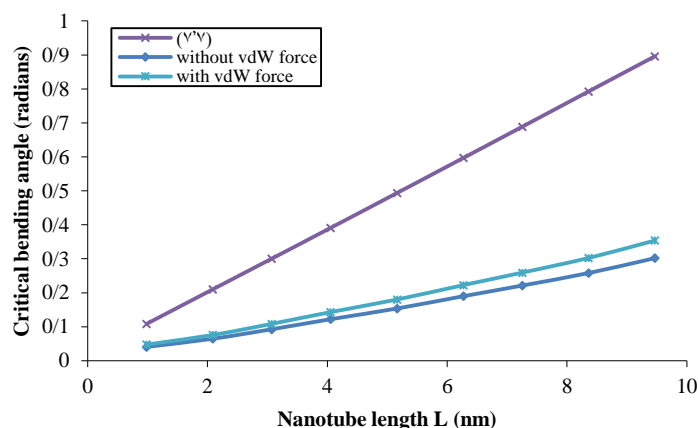
۲-۲-۳ مقایسه نتایج حاصل از کمانش خمشی

در شکل (۴-۲۴) ممان خمشی بحرانی بر حسب طول نانولوله های تک و دو جداره رسم شده است. همانطور که مشاهده می شود، در ناحیه مد پوسته با افزایش طول از میزان ممان خمشی کاسته می شود و به سرعت به یک مقدار ثابت میل می کند. در نتیجه تغییر طول تاثیر قابل توجهی بر روی ممان خمشی بحرانی نخواهد گذاشت. همچنین مشاهده می شود، با افزایش قطر ممان خمشی افزایش می یابد که به دلیل افزایش سفتی خمشی نانولوله می باشد. نکته دیگر در مورد نیروی واندروالس است که موجب افزایش ممان خمشی بحرانی می شود.



شکل (۴-۲۴) نمودار ممان خمشی بحرانی کمانش بر حسب طول نانولوله های تک و دوجداره

در شکل (۴-۲۵) زاویه خمش بحرانی بر حسب رادیان برای طول های مختلف نانولوله های تک و دوجداره سالم رسم شده است. همانطور که مشاهده می شود نیروی واندروالس باعث افزایش زاویه خمش می شود. همچنین با افزایش طول زاویه خمش افزایش می یابد.



شکل (۴-۲۵) نمودار ممان خمشی بحرانی کمانش بر حسب طول نانولوله های تک و دوجداره

جدول (۴-۴) ممان خمشی بحرانی برای نانولوله های تک و دوجداره سالم و معیوب در موقعیت بحرانی C نشان می دهد. در این جا نیز مشاهده می شود با افزایش طول، ممان خمشی ابتدا کاهش و به سرعت به یک مقدار ثابت میل می کند. همچنین بار تهی جای سه گانه به میزان قابل توجهی ممان خمشی را کاهش می دهد و با افزایش دانسیته اتم های حذفی، ممان بیشتر کاهش می یابد. لازم به ذکر است که برای طول های مورد تحلیل، مد کمانشی پوسته رخ می دهد.

جدول (۴-۴) ممان خمشی بحرانی کمانش نانولوله های دو جداره سالم و معیوب با طول های مختلف

Critical bending buckling moment (nN.nm)										
Length (nm)	perfect	1 Vacancy			2 Vacancy			3 Vacancy		
	(7,7)@(12,12)	(7,7)	(12,12)	(7,7)@(12,12)	(7,7)	(12,12)	(7,7)@(12,12)	(7,7)	(12,12)	(7,7)@(12,12)
0.98	66.95	65.87	39.11	38.36	65.74	38.78	36.34	64.36	36.90	31.35
2.09	55.45	54.56	32.39	31.77	54.45	32.16	30.60	53.29	30.50	26.62
3.07	54.00	53.13	31.55	30.94	53.02	31.32	29.80	51.89	29.70	25.92
4.06	54.12	53.25	31.62	31.01	53.14	31.39	29.87	52.01	29.77	25.98
5.17	53.87	53.00	31.47	30.87	52.90	31.25	29.73	51.77	29.63	25.86
6.27	53.75	52.88	31.40	30.80	52.78	31.18	29.66	51.65	29.56	25.80
7.26	53.55	52.69	31.28	30.68	52.58	31.06	29.55	51.46	29.45	25.70
8.36	53.46	52.60	31.23	30.63	52.49	31.01	29.50	51.38	29.40	25.66
9.47	53.37	52.51	31.18	30.58	52.41	30.95	29.45	51.29	29.35	25.62

۳-۴ نتیجه گیری

با توجه به مباحث مطرح شده در این پایان نامه نتایج مهمی در زمینه ی کمانش نانولوله های کربنی تک و دو جداره، تحت بارهای محوری فشاری، گشتاور پیچشی و خمشی بدست آمده اند که در زیر به آن ها اشاره شده است.

۱- نتایج بدست آمده از مدل ارائه شده مطابقت قابل قبولی با نتایج حاصل از مدل دینامیک مولکولی و مدل پیوسته دارند.

۲- مقادیر بار بحرانی کمانش برای نانولوله های آرمچیر و زیگ-زاگ نزدیک به هم می باشد؛ ولی شکل مدهای آنها با یکدیگر متفاوتند.

۳- نتایج حاصل از مدل پیوسته، در کمانش تحت فشار محوری، به نتایج حاصل از مدل ارائه شده برای نانولوله های کربنی زیگ-زاگ نزدیک تر است.

۴- در طول های بلند، مقادیر بار کمانش برای نانولوله های آرمچیر و زیگ-زاگ به هم نزدیک تر می شوند و در نهایت به داده های بدست آمده از روابط اویلر میل می کنند.

- ۵- عیوب تهی‌جای تأثیرات قابل ملاحظه‌ای بر بار بحرانی کمانش می‌گذارند و از میان عیوب تهی‌جای مورد بررسی، عیب تهی‌جای سه‌گانه، بیشترین و عیب تهی‌جای منفرد کمترین تأثیر را بر بار بحرانی کمانش می‌گذارند.
- ۶- تأثیر عیوب تهی‌جای دوگانه و دو عیب تهی‌جای منفرد روبه روی هم، در کمانش تحت فشار با یکدیگر متفاوت بوده و می‌توان نتیجه گرفت که تراکم عیوب در یک مکان (تهی‌جای دوگانه) اثرات مخربتری بر بار بحرانی کمانش می‌گذارد.
- ۷- تغییر موقعیت عیوب در طول نانولوله موجب تغییر در بار بحرانی کمانش می‌شود و نتایج نشان می‌دهند که وجود عیب در مرکز نانولوله بیشترین تأثیر را بر بار بحرانی می‌گذارد.
- ۸- ضخامت موثر $0,066$ نانومتر برای تحلیل کمانشی نانولوله‌های سالم و معیوب تک جداره با قطر $0,95$ نانومتر و شرایط مرزی متفاوت مناسب می‌باشد.
- ۹- عیب استون- والس اثر ضعیفی روی بار کمانش بحرانی در شرایط دو سر گیردار دارد.
- ۱۰- با کاهش پیوندها از شرایط مرزی نانولوله‌های تک جداره مد اوپلر سریع تر رخ می‌دهد و تأثیر عیوب تهی‌جای کاهش می‌یابد.
- ۱۱- عیوب ترکیبی بار کمانش بحرانی را بیشتر از عیوب تهی‌جای منفرد کاهش می‌دهند.
- ۱۲- نتایج حاصل از کمانش تحت پیچش نشان می‌دهند، ممان بحرانی کمانش برای نانولوله‌های آرمچیر و زیگ-زاگ بسیار به هم نزدیک می‌باشد.
- ۱۳- مقادیر زاویه‌ی پیچش بحرانی برای نانولوله‌های آرمچیر و زیگ-زاگ تنها در نسبت‌های طولی کوچک به هم نزدیک‌اند و با افزایش نسبت طول تفاوت بین آنها بیشتر می‌شود. به طور کلی نانولوله‌های کربنی زیگ-زاگ در زوایای پیچشی بزرگتری دچار کمانش می‌شوند.
- ۱۴- با افزایش قطر نانولوله‌های کربنی، بر میزان ممان بحرانی کمانش افزوده شده و از مقدار زاویه‌ی پیچش بحرانی کاسته می‌گردد. همچنین، با افزایش قطر، ممان بحرانی کمانش به یک مقدار مشخص میل می‌کند. در صورتی که زاویه پیچش بحرانی واگرا خواهد بود.

- ۱۵- در نانولوله های زیگ-زاگ و آرمچیر مقادیر زاویه پیچش بحرانی برای نانولوله های کوتاه مشابهند. هرچند، با افزایش طول این مقادیر واگرا خواهند بود.
- ۱۶- نتایج بدست آمده از کمانش پیچشی مدل پیوسته نشان می دهد که در این بارگذاری مقادیر بدست آمده برای ممان و زاویه پیچش بحرانی، با مقادیر بدست آمده برای نانولوله های آرمچیر نزدیک تر است و مطابقت خوبی با آن دارد.
- ۱۷- در نانولوله های کوتاه، هر چه عیوب تهی جای بزرگتر می شوند، کاهش ممان بحرانی کمانش پیچشی بیشتر قابل توجه می شود.
- ۱۸- تأثیر عیوب تهی جای بر ممان بحرانی کمانش قابل توجه می باشد و از میان عیوب تهی جای مورد بررسی عیب تهی جای سه گانه، بیشترین و عیب تهی جای منفرد کمترین تأثیر را بر ممان بحرانی کمانش می گذارند.
- ۱۹- تأثیر عیوب تهی جای دوگانه و دو عیب تهی جای منفرد روبه روی هم مشابه یکدیگر بوده و تراکم عیب در یک مکان تأثیر متفاوتی بر روی ممان بحرانی کمانش نخواهد داشت.
- ۲۰- به دلیل مشابهت رفتار کمانشی مدل ساختاری و پیوسته، می توانیم نانولوله های تک جداره معیوب را با پوسته های استوانه ای همراه با گشودگی مدل کنیم.
- ۲۱- به صورت کلی هنگام کمانش تحت فشار محوری، نانولوله های آرمچیر و در زمان کمانش تحت ممان پیچشی، نانولوله های زیگ-زاگ، نسبت به وجود عیوب حساس تر هستند.
- ۲۲- برای نانولوله ها به اندازه کافی بلند می توانیم از مدل ساده پیوسته برای محاسبه انحنا و ممان بحرانی کمانش خمشی استفاده کنیم.
- ۲۳- هنگامی که مد پوسته اتفاق می افتد، عیوب تهی جای و استون- والس اثر قابل ملاحظه ای بر ممان بحرانی خمشی دارند. این تأثیر برای عیوب تهی جای بیشتر از عیوب استون- والس است.

۲۴- عیوب باعث تاخیر در مد اوپلر می شوند و ایمن تر است که نانولوله های معیوب طویل انتخاب شوند.

۲۵- عیب تهی جای دوگانه ممان بحرانی را بیشتر از دو عیب تهی جای روبه رو کاهش می دهد.

۲۶- موقعیت عیوب اثر مهمی بر روی انحنا و ممان بحرانی کمانش نانولوله های (۱۲ و ۰) و (۷ و ۷). موقعیت بحرانی برای عیب در وسط و موقعیت C آن ها خواهد بود.

۲۷- مدل حاضر به دلیل تطابق خوب با شبیه سازی های دینامیک مولکولی می تواند برای پیش بینی رفتار کمانش خمشی نانولوله های تک جداره به کار رود.

۲۸- برای تمامی مدل های ساختاری به منظور پیش بینی فرکانس طبیعی نیاز است نانولوله های به اندازه کافی بلند انتخاب نمود. این شرط به ویژه برای شرط مرزی دو سرگیردار حائز اهمیت است.

۲۹- عیوب تاثیر چندانی بر روی فرکانس طبیعی نانولوله های به اندازه کافی بلند ندارند. ولی این اثر برای طول های کوتاه با اهمیت می باشد.

۳۰- با جابجایی عیب به سمت آزاد نانولوله یک سر آزاد، کاهش انتقال فرکانس پایه کم تر می شود. هرچند ماکزیمم این انتقال در وسط نانولوله های دو سر گیردار هنگامی که مد اوپلر رخ می دهد اتفاق می افتد.

۳۱- زمانی که مد اوپلر رخ می دهد، نانولوله های معیوب شامل عیوب استون- والس فرکانس بیشتری نسبت به نانولوله های سالم دارند.

۳۲- مدل جدید ارائه شده برای نانولوله های دوجداره به خوبی مدول الاستیسیته را پیش بینی می کند که مقداری از مدول الاستیسیته نانولوله تک جداره داخلی بیشتر است. همچنین، عیوب تهی جای منفرد به دلیل دانسیته کم اتم های حذف شده، مدول الاستیسیته را به میزان کمی کاهش می دهد. بنابراین این عیوب تاثیر اندکی بر روی مدول یانگ دارند.

۳۳- برهم کنش های واندروالس باعث افزایش بار و کرنش بحرانی کمانش محوری می شوند.

- ۳۴- کرنش بحرانی نانولوله های دوجداره با مقادیر مربوط به جداره خارجی تقریباً مشابهند. بنابراین، در نانولوله های دوجداره، جداره داخلی کرنش بحرانی کلی را افزایش نمی دهند.
- ۳۵- به استثنای تغییر شکل های کمانش، با جمع نتایج نانولوله های تک جداره سازنده نانولوله دوجداره، تحت بارگذاری و شرایط مرزی یکسان می توان با اندکی اختلاف نتایج را برای نانولوله های دوجداره بدست آورد.
- ۳۶- با افزایش طول، زاویه پیچش و خمش افزایش می یابد و از میزان گشتاور پیچشی و ممان خمشی کاسته می شود.
- ۳۷- بر هم کنش های واندروالس باعث افزایش مقاومت نانولوله های دوجداره در مقابل کمانش پیچشی و خمشی می شوند.
- ۳۸- زاویه پیچش کمانش و گشتاور بحرانی پیچشی برای نانولوله دوجداره به طور قابل ملاحظه- ای نسبت به نانولوله تک جداره خارجی بیشتر می باشند. بنابراین با اضافه کردن نانولوله داخلی به نانولوله ای با قطر بزرگتر می توان به طور برجسته ای رفتار پیچشی نانولوله حاصل را نسبت به نانولوله تک جداره تحت همان شرایط بارگذاری تغییر داد.
- ۳۹- دانسیته اتم های حذفی در نانولوله های دو جداره معیوب با عیوب تهی جای تاثیر به سزایی در کاهش مقاومت پیچشی و خمشی این نانولوله ها دارد.
- ۴۰- بطور کلی رفتار نانولوله های دو جداره، مشابه رفتار نانولوله های تک جداره سازنده آن ها می باشد و با معلوم بودن رفتار کمانشی این نانولوله ها می توان به صورت تقریبی رفتار نانولوله دوجداره معادل را پیش بینی کرد.
- ۴۱- مدل ارائه شده حاصل به خوبی می تواند خواص مکانیکی و رفتار کمانشی نانولوله های تک و دو جداره تحت بارگذاری ها و شرایط مرزی مختلف پیش بینی کند و دارای زمان و هزینه کم اجرا و دقت قابل قبول نسبت به مدل های دینامیک مولکولی می باشد.

۴-۴ پیشنهادها و ادامه کار

در زمینه نانولوله های تک جداره تقریباً آنالیز کامل و همه جانبه ای به منظور تعیین خواص و رفتار مکانیکی انجام گرفت. ولی در ارتباط با نانولوله های دو و چند جداره با توجه به گستردگی و پیچیدگی تحلیل این نانولوله ها می توان آنالیزهای دیگری نیز بوسیله مدل ساختاری حاضر در ادامه کار ارائه شده در این پایان نامه انجام داد که در ذیل به صورت خلاصه آورده شده است.

۱- انجام تحلیل های کمانشی بر روی نانولوله های بلند تر و همچنین نانولوله های زیگ-زاگ با قطرهای مختلف (شامل قطر داخلی و خارجی).

۲- آنالیز نانولوله های معیوب با عیوب استون- والس و ترکیبی (هیبرید).

۳- انجام تحلیل کمانشی بر روی نانولوله های چند جداره سالم و معیوب با آرایش های متفاوت (استفاده از آرایش زیگ-زاگ و آرمچیر به طور مجزا و یا همزمان در جداره های مختلف). با توجه به ویژگی های منحصر بفرد مدل حاضر این امر به سادگی قابل اجراست و تنها نیاز به سیستم های پیشرفته دارد.

۴- تحلیل فرکانسی نانولوله های دو و چند جداره سالم و معیوب.

۵- با توجه به امکان مدل سازی دقیق نیروی واندروالس در مدل حاضر به صورت شناور با بسط این نیرو بین اتم های کربن با سایر مواد می توان کامپوزیت هایی که با الیافی از جنس نانولوله های کربنی تک و یا چند جداره تقویت شده اند، مدل سازی نمود و به تحلیل خواص مکانیکی آن ها پرداخت.

-
- [١] Iijima S. (1991). "Helical microtubes of graphitic carbon" **Nature** , 354, pp 56-58.
- [٢] ABAQUS, (2006). ABAQUS 6.6 User's Manual, Hibbit, Karlson and Sorenson, Inc.
- [٣] M. Monthieux and Vladimir L. Kuznetsov, (2006) "Who should be given the credit for the discovery of carbon nanotubes?", **CARBON**, 44 1621.
- [٤] D.A. Bochvar and E. G. Galpern, Dokl. Akad.Nauk. (1973) **USSR**, Vol. 209, (610).
- [٥] I. V. Stankevich, M.V. Nikerov, and D.A.Bochvar, (1984) **Russ.Chem.Rev.**, Vol. 53, (640).
- [٦] H.W. Kroto, J.R.Heath, S.C.O'Brien, R.F. Curl, and R.E. Smalley, (1985) " C60: Buckminster fullerene", **Nature**, Vol. 318, pp. 162-163.
- [٧] W.Kratschmer, Lowell D.Lamb, K.Fostiropoulos and Donald R. Huffman, (1990) " Solid C60: a new form of carbon", **Nature** 347, pp. 354-358.
- [٨] A. Oberlin, M. Endo, and T. Koyama, (1976) **J. Cryst. Growth**, Vol. 32, p. 335.
- [٩] United States Patent 4663230, "Carbon fibrils, method for producing same and compositions containing same".
- [١٠] T. Yildirim, O.Gülseren, C. Kilic, and S. Ciraci (2000) "Pressure-induced interlinking of carbon nanotubes " **PHYSICAL REVIEW B**, Vol.19.
- [١١] M. S., Dresselhaus, G., and Eklund, Dresselhaus, P. C., (1996).
- [١٢] Kroto, H.W., Heath, J.R., O'Brien, S.C., Curl, R.F. and Smalley, R.E., (1985) "C60: Buckminsterfullerene", **Nature**, 318 (6042), 162-163.
- [١٣] Zhu, H.W., Xu, C.L., Wu, D.H., Wei, B.Q., Vajtai, R. and Ajayan, P.M., (2002) "Direct Synthesis of Long Single-Walled Carbon Nanotube Strands", **Science**, 296 (5569), 884-886.
- [١٤] Y. Saito, T. Ichihashi, S. Bandow, M. Tomita and T. Hayashi, (1993) Interlayer spacings in carbon nanotubes, **Phys. Rev. B** 48(3), pp. 1907-1909.
- [١٥] O. Zhou, RM. Fleming, DW. Murphy, CH. Chen, RC. Haddon, AP. Ramirez and SH. Glarum, (1994) Defects in carbon nanostructures, **Science** 263(5154), pp. 1744-1747.
- [١٦] CH. Kiang, M. Endo, PM. Ajayan, G. Dresselhaus and MS. Dresselhaus, (1998) Size effects in carbon nanotubes, **Phys. Rev. Lett.** 81(9), pp. 1869-1872.
- [١٧] S. Amelinckx, D. Bernaerts, XB. Zhang, G. Vantendeloo and J. Vanlanduyt, (1995) A structure model and growth-mechanism for multishell carbon nanotubes, **Science** 267(5202), pp. 1334-1338.
- [١٨] JG. Lavin, S. Subramoney, RS. Ruoff, S. Berber and D. Tomanek, (2001) Scrolls and nested tubes in multiwall carbon tubes, **Carbon** 40(7), pp. 1123-1130.

-
- [۱۹] Min-Feng Yu, Oleg Lourie, Mark J. Dyer, Katerina Moloni, Thomas F. Kelly, Rodney S. Ruoff, Science, (2000) "Strength and Breaking Mechanism of Multiwalled Carbon Nanotubes Under Tensile Load", Vol. **287**. No. **5453**, pp. **637-640**.
- [۲۰] Kalamkarov A.L., Georgiades A.V., Rokkam S.K., Veedu V.P. and Ghasemi-Nejhad, M.N. (2006). "Analytical and numerical techniques to predict carbon nanotubes properties" **Int. J. Solids Struct.**, **43**, pp **6832-6854**.
- [۲۱] M. Sammalkorpi, A. Krasheninnikov, A.Kuronen, K. Nordlund, and K. Kaski, (2004) " Mechanical properties of carbon nanotubes with vacancies and related defects", **Physical Review B**.
- [۲۲] Gates, T.S., G.M. Odegard, S.J. V. Frankland and T.C. Clancy, (2005) Computational materials: Multi-scale modeling and simulation of nanostructured materials **Composites Science and Technology**. **65**: p. **2416-2434**.
- [۲۳] Yakobson, B.I., Brabec, C.J., Bernholc, J., (1996). Nanomechanics of carbon nanotubes: instabilities beyond linear response. **Phys. Rev. Lett.** **76**, **2511–2514**.
- [۲۴] Yu, M.F., Lourie, O., Dyer, M.J., Moloni, K., Kelley, T., Ruoff, R.S., (2000). Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load. **Science** **287**, **637–640**.
- [۲۵] Ru, C.Q., Degraded, (2001) Axial buckling strain of multiwalled carbon nanotubes due to interlayer slips. **J. of Appl. Phys.** **89(6)**: p.**3426-3433**.
- [۲۶] A. Pantano, M. C. Boyce and D. M. Parks, (2003) Nonlinear structural mechanics based modeling of carbon nanotube deformation. **Phys. Rev. Lett.** **91** **145504**.
- [۲۷] Pantano, A., Boyce, M.C., Parks, D.M., (2004). Mechanics of axial compression of single and multi-wall carbon nanotubes. **J. Eng. Mat.Tech.** **126**, **279–284**.
- [۲۸] C. Bower, R. Rosen, L. Jin, J. Han and O. Zhou , (1999) Deformation of carbon nanotubes in nanotube-polymer composites. **Appl. Phys. Lett.** **74**, **3317**.
- [۲۹] Arroyo, M., Belytschko, T., (2004). Finite element methods for the non-linear mechanics of crystalline sheets and nanotubes. **Int. J. Numer.Methods Eng.** **59**, **419–456**.
- [۳۰] Li, C., Chou, T.-W., (2003). Elastic moduli of multi-walled carbon nanotubes and effects of van der Waals forces. **Compos. Sci. Tech.** **63**,**1517–1524**.
- [۳۱] G.M. Odegard, S.J.V. Frankland, T.S. Gates, (2005) **AIAA J.** **43** **1828**.
- [۳۲] Kao, J., (1987) A molecular orbital based molecular mechanics approach to study conjugated hydrocarbons. **J. of Am. Chem. Soc.** **109(13)**:p. **3817-3835**.
- [۳۳] P. Hohenberg, W. Kohn, (1964) **Phys. Rev.**, **B** **136** **864**.
- [۳۴] W. Kohn, L.J. Sham, (1965) **Phys. Rev.**, **A** **140** **1133**.
- [۳۵] D.C. Langreth, M.J. Mehl, (1983) **Phys. Rev.**, **B** **28** **1809**.
- [۳۶] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, (1996) **Phys. Rev. Lett.**, **77** **3865**.
- [۳۷] R. Car, M. Parrinello, (1985) **Phys. Rev. Lett.**, **55** **2471**.
- [۳۸] Leach, A. R., (2001) Molecular Modeling, Principles and Applications 2nd ed., **Harlow, Eng.:** **Prentice Hall**.

-
- [٣٩] Troya, D., S.L. Mielke and G.C. Schatz, (2003) CNT fracture-differences between quantum mechanical mechanisms and those of empirical potentials. **Chem. Phys. Lett.**, **382(1-2)**:p. **133-141**.
- [٣٠] Allinger, N.L., Yuh, Y.H., Lii, J.-H., (1989). Molecular mechanics – the MM3 force-field for hydrocarbons. **Int. J. Am. Chem. Soc.** **111**,8551–8566.
- [٣١] Ponder, J.W., (2000). Computer Code: Tinker Molecular Modeling Package. Washington University in St. Louis, St. Louis.
- [٣٢] Brenner, D.W., (1990). Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films. **Phys. Rev. B** **42**, 9458.
- [٣٣] Kollman, P.A., Amber. (1995).
- [٣٤] Tuzun, R.E., D.W. Noid, B.G. Sumpter and R.C. Merkle, (1996) Dynamics of fluid flow inside carbon nanotubes. **Nanotechnol.** **7**:p. **241-246**.
- [٣٥] Sears, A. and Batra, R. C. (2004). “Deduction of macroscopic properties of carbon nanotubes from molecular mechanics simulations.” **Phys. Rev. B**, Vol. **69**, No.235406.
- [٣٦] Rapaport, D.C., (1995) The Art of Molecular Dynamics Simulation, **Cambridge University Press**.
- [٣٧] Robertson, D.H., Brenner, D.W., Mintmire, J.W., (1992). Energetics of nanoscale graphitic tubules. **Phys. Rev. Lett. B** **45 (12)**, 592.
- [٣٨] Cornwell, C.F. and L.T. Wille, (1997) Elastic properties of single-walled carbon nanotubes in compression. **Solid State Communications.** **101(8)**: p.555-558.
- [٣٩] Halicioglu, T., (1998) Stress calculation for carbon nanotubes. **Thin Solid Films.** **312**: p. **11-14**.
- [٤٠] Lu, J.P., (1997). Elastic properties of carbon nanotubes and nanoropes. **Phys. Rev. Lett.** **79 (7)**, 1297–1300.
- [٤١] Hernandez E, Goze C, Bernier P, Rubio A. (1998) Elastic properties of C and BxCyNz composite nanotubes. **Phys. Rev. Lett.**;80(20): 4502–5.
- [٤٢] Yao, N., Lordi, V., (1998). Young’s modulus of single-walled carbon nanotubes. **J. of Appl. Phys.**84 (4), 1939–1943.
- [٤٣] Ozaki, T., Y. Iwasa and T.Mitani. (2000) Stiffness os single-walled carbon nanotubes under large strain. **Phys. Rev. Lett.** **84(8)**: p. 1712-1715.
- [٤٤] Lier, G.V., C.V. Alsenoy, V.V. Doren and P. Geerlings, (2000) Ab initio study of the eladtic properties of single-walled carbon nanotubes and grapheme. **Chem. Phys. Lett.** **326**: p.181-185.
- [٤٥] Zhou, X., Zhou, J.J., Ou-Yang, Z.C., (2000). Strain energy and Young’s modulus of single-wall carbon nanotubes calculated from electronic energy-band theory. **Phys. Rev. B** **62**, 13692–13696.
- [٤٦] Belytschko, T., S.P. Xiao, G.C. Schatz and R.S. Ruoff, (2002) Atomistic simiulation of nanotube fracture. **Phys. Rev. B.** **66(22)**.
- [٤٧] Xin H., Han Q. and Yao X.H. (2008). “Buckling of defective single-walled and double-walled carbon nanotubes under axial compression by molecular dynamics simulation” **Compos. Sci.and Technol.** , **68**, pp 1809-1814.

-
- [ΔΑ] Soong, S. H., (2009). Torsional Buckling of Double-Walled Carbon Nanotubes.14 NUROP Congress, National University of Singapore Kent Ridge, Singapore 119260.
- [ΔΒ] Machida, K., (1999). Principles of Molecular Mechanics. **John Wiley and Sons, Chichester, NY.**
- [Ϛ•] Rappe, A.K., Casewit, C.J., Colwell, K.S., (1992). A full periodic-table force-field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations. **J. of Am. Chem. Soc. 114, 10024–10035.**
- [ϚΑ] Tersoff, J., (1992). Energies of fullerenes. **Phys. Rev. B 46, 15546–15549.**
- [ϚΒ] Cornell, W.D., Cieplak, P., Bayly, C.I., (1995). A second generation force-field for the simulation of proteins, nucleic-acids, and organic molecules. **J. of Am. Chem. Soc. 117, 5179–5197.**
- [ϚΓ] Gelin, B.R., (1994). Molecular Modeling of Polymer Structures and Properties. Verlag, Munich.
- [ϚΔ] Haile, J.M., (1992). Molecular Dynamics Simulation: Elements. Methods. **John Wiley and Sons, NY.**
- [ϚΕ] Walther, J.H., Jaffe, R., Halicioglu, T., Koumoutsakos, P., (2001). Carbon nanotubes in water: structural characteristics and energetics. **J. of Phys. Chem. B 105 (41), 9980–9987.**
- [ϚϚ] Arroyo, M. and Belytschko, T. (2005). “Continuum mechanics modeling and simulation of carbon nanotubes.” **Meccanica**, Vol. 40, Issue 4-6, pp. 455-469.
- [ϚϜ] Wang, Q. (2005). “Effect of the van der Waals interaction on analysis of double-walled carbon nanotubes.” **Int. J. of Stab. and Dyn.**, Vol. 5, No. 3, pp. 457-474.
- [Ϛϝ] Wang Q., Quek S.T. and Varada V.K. (2007). “Torsional buckling of carbon nanotubes” **Phys. Lett. A, 367**, pp 135–139.
- [ϚϞ] Sears, A. and Batra, R. C. (2006). “Buckling of multiwalled carbon nanotubes under axial compression.” **Phys. Rev. B**, Vol. 73, No.8, p. 805410 (11 pages).
- [Ϛ•] Arroyo, M. and Arias, I. (2008). “Rippling and a phase transforming mesoscopic model for multi-walled carbon Nanotubes.” **J. of the Mech. and Phys. of Solids**, Vol. 56, pp. 1224-1244.
- [Ϛϟ] Arias, I and Arroyo, M. (2008). Size dependent nonlinear elastic scaling of multi-walled carbon nanotubes, **Phys. Rev. Lett.**, 100, 085503.
- [ϚϠ] Rajasekaran, S. and Chitra, P. (2008). Structural mechanics approach for carbon nanotubes, **Structural Eng.** p.: 247-358.
- [Ϛϡ] Hu N., Nunoya K., Pan D., Okabe T. and Fukunaga H. (2007). “Prediction of buckling characteristics of carbon nanotubes” **Int. J. Solids Struct**, 44, pp 6535-6550.
- [ϚϢ] Wong, E.W., Sheehan, P.E., Lieber, C.M., (1997). Nanobeam mechanics: elasticity, strength, and toughness of nanorods and nanotubes. **Science 277, 1971–1975.**
- [Ϛϣ] Salvétat JP, Bonard JM, Thomson NH, Kulik AJ, Farro L, Bennit W, Zuppiroli L. (1999) Mechanical properties of carbon nanotubes. **J. Appl. Phys. A;69:255–60.**
- [ϚϤ] Tomblor, T.W., Zhou, C., Alexseyev, L., Kong, J., Dai, H., Liu, L., Jayanthi, C.S., Tang, M., Wu, S.-Y., (2000). Reversible electromechanical characteristics of carbon
- [Ϛϥ] Yu, M.F., Files, B.S., Arepalli, S., Ruoff, R.S., (2000). Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties. **Phys. Rev. Lett. 84 (24), 5552–5555.**

- [۷۸] Treacy, M.M.J., Ebbesen, T.W., Gibson, J.M., (1996). Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes. **Nature** **381**, 678–680.
- [۷۹] Qian, D., Wagner, G.J., Liu, W.K., Yu, M.F., Ruoff, R.S., (2002). Mechanics of carbon nanotubes. **Appl. Mech. Revs.** **55** (6), 495–533.
- [۸۰] Krishnan, A., Dujardin, E., Ebbesen, T.W., Yianilos, P.N., Treacy, M.M.J., (1998). Young's modulus of single-walled nanotubes. **Phys. Rev. B** **58** (20), 14013–14019.
- [۸۱] Cooper, C.A. and R.J. Young, (2000) Investigation into the deformation of carbon nanotubes and their composites through the use of Raman spectroscopy. **Proceeding of SPIE.** **4098**: p. 172-181.
- [۸۲] Lourie, O., Wagner, H.D., (1998). Evaluation of Young's modulus of carbon nanotubes by micro-Raman spectroscopy. **J. of Materials Research** **13** (9), 2418–2422.
- [۸۳] Poncharal, P., Z.L. Wang, D. Ugarte and W.A.d. Heer, (1999) Electrostatic deflections and electromechanical resonances of carbon nanotubes. **Science.** **283**:p. 5407.
- [۸۴] پروانه و، (۱۳۸۸)، پایان نامه ارشد: "مدلسازی و شبیه سازی نانولوله های کربنی به منظور پیش بینی خواص مکانیکی آن"، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی شاهرود.
- [۸۵] مجد ثابتی ا. م، (۱۳۸۸)، پایان نامه ارشد: "معرفی یک مدل جدید به منظور پیش بینی رفتار کمانشی نانولوله های کربنی تحت بارگذاری های فشاری و پیچشی"، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی شاهرود
- [۸۶] Parvaneh, V., Shariati, M., Majd Sabeti, A.M., (2009). Investigation of vacancy defects effects on the buckling behavior of SWCNTs via a SM approach, **Euro. J. Mech-A/Solids.** **28**, 1072-1078.
- [۸۷] Brcic, M., Canadija, M., Brnic, J., Lanc, D., Krscanski, M. and Vukelic, G., (2009) FE modelling of multi-walled carbon nanotubes, **Estonian J. of Eng.**, **15**, 2, 77–86.
- [۸۸] A. J. Stone and D. J. Wales, (1986) "Theoretical studies of icosahedral C and some related species," **Chem. Phys. Lett.**, vol. **128**, No. 5-6, pp. 501–503.
- [۸۹] Kelly B.T., (1981) Physics of graphite. London: **Appl. Sci. Press.**
- [۹۰] Wong, C. H., Liew, K. M., He, X. Q., Tan, M. J.m and Meguid, S. A., (2004) Modeling and simulation of multi-walled carbon nanotubes using molecular dynamics simulation. **NSTI-Nanotech.**, ISBN 0-9728422-9-2. Vol. 3.
- [۹۱] Cao, G.X., Chen, X., (2006). Buckling of single-walled carbon nanotubes upon bending: molecular dynamics simulations and finite element methods. **Phys. Rev. B** **73**, 155435-1-10.
- [۹۲] Yao, X., Han, Q., Xin, H., (2008). Bending buckling behaviors single- and Multi walled carbon nanotubes. **Comput. Materials Sci.** **43**, 579-590.
- [۹۳] K. Hashemnia, M. Farid, R. Vatankhah, (2009) **Comput. Materials Sci.** **47**, 9–85.
- [۹۴] W.H. Duan, C.M. Wang, Y.Y. Zhang, (2007) **J. of Appl. Phys.** **101**, 024305.
- [۹۵] Lu, J. M., Hwang, C. C., Kuo, Q. Y., and Wang, Y. C. (2007) Mechanical buckling of multi-walled carbon nanotubes: The effect of slenderness ratio. **Physica E.** **08**.120.
- [۹۶] Zhang, Y. Y., Wang, C. M., Duan, W. H., Xiang, Y., and Zong, Z., (2009) Assessment of continuum mechanics models in predicting buckling strains of single-walled carbon nanotubes. **Nanotech.** **20** . 395707 (8pp).

-
- [٩٧] He, X. Q., Kitipornchai, S., Wang, C. M., and Liew, K. M., (2005) Modeling of van der Waals force for infinitesimal deformation of multi-walled carbon nanotubes treated as cylindrical shells. **Inter. J. of Solids and Struct.** **42** 6032-6047.
- [٩٨] Yang, S. H., Wei, Z. X., (2009) Molecular dynamic study of effects of sp3 interwall bridging upon torsional behavior of DWCNT. **Phys. Lett. A.** **373**, 682-685.