



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده مکانیک

گروه طراحی جامدات

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

مدل سازی و تحلیل عددی رفتار کمانش نانو لوله‌های کربنی سه

تایی هم راستا تحت بار گذاری محوری، خمشی و پیچشی

دانشجو: علی لشکری زاده

استاد راهنما:

دکتر محمود شریعتی

تیر ماه ۱۳۹۰

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه صنعتی شاهرود

مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم شماره (۶)

بسمه تعالی

شماره: ۹۵/۴۲۹/۱۴۸

تاریخ: ۹۵/۴/۲۹

ویرایش:

فرم صورتجلسه دفاع از پایان نامه تحصیلی دوره کارشناسی ارشد

با تأییدات خداوند متعال و با استعانت از حضرت ولی عصر (عج) ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد آقای علی لشکری زاده رشته مکانیک گرایش طراحی کاربردی تحت عنوان مدل‌سازی و تحلیل عددی رفتار کمانش نانولوله های کربنی گروهی تحت بارگذاری محوری، خمشی و پیچشی که در تاریخ ۹۵/۴/۲۸ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار گردید به شرح ذیل اعلام می گردد:

قبول (با درجه: بسیار خوب امتیاز ۱۸/۴۸)	<input checked="" type="checkbox"/>	دفاع مجدد	<input type="checkbox"/>	مردود	<input type="checkbox"/>
--	-------------------------------------	-----------	--------------------------	-------	--------------------------

۱- عالی (۲۰-۱۹)

۲- بسیار خوب (۱۸/۹۹-۱۸)

۳- خوب (۱۶-۱۷/۹۹)

۴- قابل قبول (۱۴-۱۵/۹۹)

۵- نمره کمتر از ۱۴ غیر قابل قبول

امضاء	مرتبه علمی	نام و نام خانوادگی	عضو هیأت داوران
		دکتر محمود شریعتی	۱- استاد راهنما
			۲- استاد مشاور
		دکتر محمد جعفری	۳- نماینده شورای تحصیلات تکمیلی
		دکتر حمید رضا ایپکچی	۴- استاد ممتحن
		دکتر سید هادی قادری	۵- استاد ممتحن

رئیس دانشکده:

به پاس تعبیر عظیم و انسانی شان از کلمه ایثار و از خود گذشتگان، به پاس عاطفه سرشار و گرمای امیدبخش وجودشان که در این سردترین روزگاران بهترین پشتیبان است ، به پاس قلب های بزرگشان که فریاد رس است و سرگردانی و ترس در پناهشان به شجاعت می گراید و به پاس محبت های بی دریغشان که هرگز فروکش نمی کند.

این مجموعه را به پدر و مادر عزیزم تقدیم می کنم.

تقدیر و تشکر:

پس از حمد و ثنای پروردگار، سسین سرور اسان، بر خود لازم می‌دانم تا از زحمات استاد راهنمای محترم جناب آقای دکتر محمود شریعتی که مرا در به انجام رساندن این پایان نامه راهنمایی کردند، تقدیر و تشکر نمایم. در انتها از تمام عزیزانی که به هر طریقی در انجام این پروژه نقش آفرینی نموده‌اند، سپاسگزاری نموده و از خداوند منان آرزوی سلامت و توفیق روزافزون برایشان دارم.

دانشجو تأیید می‌نماید که مطالب مندرج در این پایان نامه نتیجه تحقیقات خودش می‌باشد و در صورت استفاده از نتایج دیگران مرجع آن را ذکر نموده است.

کلیه حقوق مادی مترتب از نتایج مطالعات، آزمایشات و نوآوری ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد.

تیر ۱۳۹۰

چکیده:

در پایان نامه پیش‌رو مدل مکانیک ساختاری برای بررسی رفتار کمانشی دسته نانو لوله‌های سه تایی کربنی هم راستا در محیط ABAQUS/CAE تحت بار محوری فشاری و ممان خمشی و پیچشی مورد بررسی قرار گرفته است. به منظور مدل کردن بر هم کنش‌های کششی و پیچشی، اتصال دهنده‌های غیر خطی و جهت مدل کردن بر هم کنش‌های زاویه‌ای، فنر غیر خطی مورد استفاده قرار گرفته است. پتانسیل مورس برای پتانسیل‌های کششی و خمشی و همچنین یک نوع پیوند پیچشی متناوب برای برهم‌کنش چرخشی به کار رفته است. در بررسی کمانش در دسته نانو لوله‌ها، اثر نیروی واندروالس بین اتم‌های هر نانو لوله با شبیه‌سازی فنر غیر خطی بررسی شده است.

اثرات شرایط مرزی مختلف دو سر ثابت، دو سر ساده و یک سر گیردار برای دسته نانو لوله‌های آرمچیر با نسبت ظاهری مختلف و همچنین رفتار کمانشی خمشی و پیچشی دسته نانو لوله کربن مورد بررسی قرار گرفته است. علاوه بر موارد فوق، شبیه سازی ساختاری برای فواصل بین لوله‌ای مختلف تحلیل شده است. در این تحقیق برای تعیین مقدار اثر فاصله‌ی بین نانو لوله‌ها در درون دسته بر روی خواص دسته نانو لوله-ی کربن، از سه فاصله‌ی بین لوله‌ای $0,22\text{nm}$ ، $0,34\text{nm}$ و $0,51\text{nm}$ در شبیه سازی مکانیک ساختاری استفاده شده است. نتایج بیان می‌دارند که در شرایط مرزی یک سر آزاد، نرخ کاهش بیشترین و کمترین بار کمانش بحرانی نیز مربوط به همین شرایط مرزی می‌باشد. علاوه بر آن، بار کمانش متوسط دسته نسبت به نانو لوله‌ی منفرد مقایسه و بررسی شده است. در نهایت به منظور بررسی اعتبار تحقیق نتایج مدل ساختاری حاضر، حتی الامکان با نتایج دینامیک مولکولی مقایسه شده است. نتایج شبیه سازی توافق خوبی با نتایج دینامیک مولکولی دارد.

کلمات کلیدی: مکانیک ساختاری، دسته نانو لوله، کمانش، شرایط مرزی، گشتاور بحرانی کمانش خمشی

و پیچشی

لیست مقالات مستخرج

- 1- Buckling analysis of carbon nanotube bundles via a structural mechanics model, ISME Conference 2011, P133, Birjand, Iran .
- 2- Torsional and bending buckling of DWCNTs via a structural mechanics approach .Physica E, (2011), (Under reveiw).
- 3- Buckling analysis of carbon nanotube bundles under axial compressive, bending and torsional loadings via a structural mechanics model (submitted to Physics and Chemistry of solids)

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول: مقدمه	
مقدمه.....	۲
فصل دوم: مروری بر روابط موجود و مطالعات پیشین	
۱-۲- انواع انرژی‌ها و بر هم کنش‌های موجود بین اتم‌های کربن.....	۱۰
۲-۲- قطر نانو لوله‌های کربنی.....	۱۵
۳-۲- خواص مکانیکی دسته نانو لوله‌های کربن تک جداره به عنوان مواد اولیه‌ی حجیم.....	۱۶
۴-۲- کارهای انجام شده بر روی دسته نانو لوله.....	۲۰
۲-۴-۲- مدل تئوری نانو مکانیک.....	۲۰
۲-۴-۲- مدل Bead-Spring.....	۲۸
۳-۴-۲- مدل Lollipop یک درجه‌ی آزادی.....	۳۲
۵-۲- خواص کششی و فشاری دسته نانو لوله‌های کربنی.....	۳۸
۱-۵-۲- مدل محاسباتی لی.....	۳۸
۲-۵-۲- دسته‌های نانو لوله‌های کربنی.....	۴۱
۳-۵-۲- دسته‌های نانو لوله‌ی کرب.....	۴۴
فصل سوم : شبیه سازی دسته نانو لوله‌های کربنی	
۱-۳- نرم افزار ABAQUS.....	۵۲
۱-۱-۳- تحلیل BUCKLE.....	۵۴
۲-۳- شبیه سازی نانو لوله‌ی کربنی منفرد.....	۵۵
۳-۳- شبیه سازی دسته نانو لوله‌ی کربنی.....	۶۰
فصل چهارم : نتایج حاصل از تحلیل با مدل مکانیک ساختاری	
۱-۴- نتایج حاصل از کمانش دسته نانو لوله کربنی تحت فشار محوری.....	۷۱
۲-۴- نتایج حاصل از کمانش دسته نانو لوله کربنی تحت ممان خمشی.....	۸۶
۳-۴- نتایج حاصل از کمانش دسته نانو لوله‌های کربنی تحت ممان پیچشی.....	۹۴
فصل پنجم : نتیجه گیری و پیشنهادات	
۱-۵- نتیجه گیری.....	۹۹
۲-۵- پیشنهادات.....	۱۰۱
مراجع.....	۱۰۲

فهرست اشکال و جداول

فصل اول: مقدمه

- شکل (۱-۱) ساختار مولکولی الماس، گرافیت، باکی بال و نانو لوله..... ۲
- شکل (۲-۱) نحوه‌ی شکل گیری نانو لوله از نظر نوع کایرالیته..... ۳
- شکل (۳-۱) انواع نانو لوله‌های کربنی از نظر نوع کایرالیته، (الف): کایرال ، (ب) : زیگ-زاگ ، (ج) :
- آرمیچر..... ۴
- شکل (۴-۱) انواع نانو لوله‌ها از نظر تعداد دیواره ، (الف): تک دیواره ، (ب): چند دیواره..... ۴
- شکل (۵-۱) نمای سطح مقطع دسته نانو لوله‌ها الف- دسته‌ی سه‌تایی، ب- دسته‌ی هفت‌تایی..... ۸

فصل دوم: مروری بر روابط موجود و مطالعات پیشین

- شکل (۱-۲) بر هم کنش و اندروالس در اتم‌های کربن..... ۱۰
- شکل (۲-۲) پتانسیل کشش بین پیوندی در اتم‌های کربن..... ۱۲
- شکل (۳-۲) پتانسیل خمش زاویه‌ای بین پیوندی در اتم‌های کربن..... ۱۳
- شکل (۴-۲) موقعیت‌های مربوط به $\Delta\theta$ و ΔR ۱۴
- شکل (۵-۲) پتانسیل پیچش دو سطحی در اتم‌های کربن..... ۱۴
- شکل (۶-۲) پتانسیل پیچش خارج صفحه‌ای در اتم‌های کربن..... ۱۵
- شکل (۷-۲) نمایش دو بعدی باندل برای بدست آوردن مدل پیوسته‌ی نانو مکانیک را نشان می‌دهد. در آن L طول کل ، l طول خمش، و Δ فاصله بندی بین لوله‌ای را نشان می‌دهد..... ۲۲
- شکل (۸-۲) حالت‌های تماسی و غیر تماسی سطح انرژی شکل..... ۲۴
- شکل (۹-۲) مدل‌های تمام اتمی : (الف) (۵، ۵) نانو لوله‌ی تک دیواره‌ی آرمیچر (ب) نانو لوله‌ی کربن دو جداره (۸، ۸) دیواره‌ی داخلی و (۱۲، ۱۲) دیواره‌ی خارجی..... ۲۶
- شکل (۱۰-۲) شبیه سازی نانو لوله‌ی در مقیاس مسو Bead-spring، ۴۰ نانو لوله‌ی دو جداره (با ارتفاع ۵۰ nm و فاصله بندی ۵ nm)، گرایش نانو لوله‌ها به دسته شدن با پیوند و اندر والس را نشان می‌دهد..... ۳۰
- شکل (۱۱-۲) تأیید نتایج شبیه سازی مقیاس مسو با مدل تئوری نانو مکانیک : (الف) طول متغیر (۵، ۵) swent برای دو جفت (۵۰ nm و ۱۰۰ nm)، (ب) فاصله‌ی متغیر بین لوله‌ها در (۵، ۵) SWCNT (در طول ۵۰ nm فاصله‌ی بین لوله‌ها بین ۳ nm تا ۵ nm)، (ج) DWCNTs با طول ۵۰ nm و فواصل مساوی ۵ nm و طول خمش 230 \AA ، (د) شکل دسته، SWCNTs با طول ۱۰۰ nm و فواصل مساوی ۵ nm..... ۳۱
- شکل (۱۲-۲) مدل یک درجه آزادی نانو لوله‌های کربن lollipop یک نانو لوله همگن با طول L به وسیله‌ی یک جزء منفرد را نشان می‌دهد..... ۳۳

شکل (۲-۱۳) فرضیات تئوری تیر : (الف) تیر دو سر ثابت، (ب) دارای زاویه‌ی تقریبی خمش، (ج) دارای تغییر طول خمش 1، با تطابق دسته : i) نانو لوله در شکل دسته، با طول تعادل برابر $l = l_e$ ، شکل اولیه، با طول خمش $l_e < l < L$ ، شکل نهایی پیوسته با طول خمش برابر با طول کلی $l = L$۳۵

شکل (۲-۱۴) انرژی پتانسیل کلی E_{TOT} یک جفت اتم کربن به عنوان یک تابع از فاصله‌ی بین اتمی r_{ij} را رسم کرده است. نمودار درونی مقادیر بین $0.2 \text{ nm} \leq r_{ij} < 0.4 \text{ nm}$ را نشان می‌دهد.....۴۰

شکل (۲-۱۵) شماتیک سطح مقطع را نشان می‌دهد. الفدسته نانو لوله کربن سه تایی و (ب) دسته نانو لوله‌ی هفت تایی، نانو لوله‌ها در دسته دارای فواصل مساوی می‌باشند.....۴۱

شکل (۲-۱۶) تغییر شکل‌های ساختاری دسته نانو لوله‌های سه و هفت تایی نانو لوله‌های کربن (۱۰،۱۰) در کرنش‌های مختلف در طی بار کششی را نشان می‌دهد.....۴۲

شکل (۲-۱۷) بارهای نهایی بحرانی P_{fl} در اندازه‌های مختلف دسته نانو لوله‌های سه تایی و هفت تایی نانو لوله‌های تک جداره را نشان می‌دهد.....۴۳

شکل (۲-۱۸) تغییر شکل‌های ساختاری دسته نانو لوله‌های سه تایی و هفت تایی نانو لوله‌ی تک جداره (۱۰،۱۰) را در کرنش‌های مختلف نشان می‌دهد.....۴۴

شکل (۲-۱۹) نمودار بارهای بحرانی کماتش P_{cr} دسته نانو لوله‌های سه و هفت تایی را بر حسب قطر SWCNT نشان می‌دهد.....۴۶

شکل (۲-۲۰) بار کماتشی P_{cr} برای قطرهای مختلف نانو لوله‌ی منفرد در دسته نانو لوله‌های کربن با و بدون در نظر گرفتن پیوندهای واندر والس بین لوله‌ای.....۴۷

شکل (۲-۲۱) بارهای کماتشی P_{cr} اندازه‌های مختلف دسته‌های نانو لوله کربن در شکاف فاصله‌ای مختلف با و بدون در نظر گرفتن پیوندهای واندر والس برد بلند.....۴۸

شکل (۲-۲۲) کرنش‌های بحرانی در اندازه‌های مختلف دسته نانو لوله‌های سه و هفت تایی.....۴۹

فصل سوم : شبیه سازی دسته نانو لوله‌های کربنی

شکل (۳-۱) نانو لوله‌های مونتاژ شده از نوع آرمچیر (الف) : $L = 2,09 \text{ nm}$ (ب) $L = 4,058 \text{ nm}$ (ج) : nm: ۵۶..... $L = 6,272$

شکل (۳-۲) نحوه قرار گرفتن دستگاه مختصات محلی بر روی مرکز اتم‌های کربن.....۵۷

شکل (۳-۳) نحوه‌ی قرار گرفتن فنرهای خمشی بین اتم‌های کربن.....۵۷

شکل (۳-۴) نحوه‌ی قرار گرفتن اتصالات بین اتم‌های کربن.....۵۸

شکل (۳-۵) مجموع فنرهای خمشی و اتصالات بین اتم..... ۵۸
 در شکل (۳-۶) نمونه‌ای از شکل مدهای ناشی از حل مسئله با المان بندی آورده شده است، (الف): بدون المان بندی، (ب) المان بندی شده..... ۵۹
 شکل (۳-۸) دسته نانو لوله‌ی سه تایی..... ۶۰
 شکل (۳-۹) اتصال اتم‌های کربن با کانکتور..... ۶۲
 شکل (۳-۱۰) شکل شماتیک از اتم‌های معرفی شده برای ایجاد کانکتور برای طول $L = 0,983 \text{ nm}$ ۶۲
 شکل (۳-۱۱) اتصال اتم‌های کربن با فنر..... ۶۳
 شکل (۳-۱۲) شکل شماتیک از اتصال اتم‌های کربن به شکل ستاره‌ای توسط فنر برای طول $L = 0,983 \text{ nm}$

شکل (۳-۱۳) اتصال اتم‌های کربن با کانکتور و فنر..... ۶۳
 شکل (۳-۱۴) شکل شماتیک از اتصال اتم‌های کربن با کانکتور و فنر برای طول $L = 0,983 \text{ nm}$ ۶۴
 شکل (۳-۱۵) شکل شماتیک از اتصال اتم‌های کربن با کانکتور و فنر برای طول $L = 0,983 \text{ nm}$ ۶۴
 شکل (۳-۱۶) فاصله‌ی بین لوله‌ای در دسته نانو لوله‌ی هفت تایی..... ۶۶
 شکل (۳-۱۷) تغییرات نیروی لنارد-جونز بر حسب فاصله‌ی بین اتمی اتم‌های کربن..... ۶۸
 شکل (۳-۱۸) شبیه سازی نیروهای واندروالس توسط المان‌های فنر..... ۶۹
 شکل (۳-۱۹) شبیه سازی دسته نانو لوله‌ی سه تایی آرمچیر بدون نیروی واندروالس بین لوله‌ای..... ۶۹

فصل چهارم : نتایج حاصل از مدل مکانیک ساختاری

شکل (۴-۱) - بارهای کمانشی بحرانی برای دسته نانو لوله‌ی سه تایی بر حسب نسبت ظاهری دسته نانو لوله‌ی منفرد برای شرایط مرزی دو سر ثابت..... ۷۲
 شکل (۴-۲) - شکل مدهای ناشی از کمانش نانو لوله-های آرمچیر (۷،۷) با شرایط مرزی دو سر ثابت در طول‌های متفاوت..... ۷۲
 شکل (۴-۳) - بارهای کمانشی بحرانی برای دسته نانو لوله‌ی سه تایی بر حسب نسبت ظاهری دسته نانو لوله‌ی منفرد برای شرایط مرزی دو سر ساده ۷۳
 شکل (۴-۴) - مد کمانشی بحرانی برای دسته نانو لوله‌ی سه تایی دسته نانو لوله‌ی منفرد با طول nm $L = 4,058$ برای شرایط مرزی دو سر ساده..... ۷۵
 شکل (۴-۵) - بارهای کمانشی بحرانی برای دسته نانو لوله‌ی سه تایی بر حسب نسبت ظاهری دسته نانو لوله‌ی منفرد برای شرایط مرزی یک سر گیر دار..... ۷۶
 شکل (۴-۶) - شکل مدهای ناشی از کمانش دسته نانو لوله‌های آرمچیر (۷ و ۷) در شرایط مرزی یک سر آزاد در طول‌های متفاوت ۷۶

شکل (۴-۷) - بارهای کمانشی بحرانی برای دسته نانو لوله‌ی سه تایی بر حسب نسبت ظاهری دسته نانو لوله‌ی منفرد ۷۷

شکل (۴-۸) - شکل مدهای کمانش دسته نانو لوله‌ی کربن (۷,۷) تحت آنالیز کمانش ۷۸

شکل (۴-۹) - با بحرانی کمانش متوسط و بار کمانش بحرانی دسته نانو لوله سه تایی با شرایط مرزی دو سر ثابت ۷۹

شکل (۴-۱۰) - بارهای کمانشی بحرانی برای نسبت‌های ظاهری مختلف با و بدون در نظر گرفتن نیروی واندروالس ۸۰

شکل (۴-۱۱) - بارهای کمانشی بحرانی برای نسبت‌های ظاهری مختلف با نیروی واندروالس برای طول ۲ nm ۸۱

شکل (۴-۱۲) - بارهای کمانشی بحرانی برای نسبت‌های ظاهری مختلف برای حالت دو سر ثابت ۸۲

شکل (۴-۱۳) - بارهای کمانشی بحرانی برای نسبت‌های ظاهری مختلف برای حالت دو سر ساده، بدون در نظر گرفتن نیروی واندروالس ۸۳

شکل (۴-۱۴) - بارهای کمانشی بحرانی برای نسبت‌های ظاهری مختلف برای حالت یک سر آزاد، بدون در نظر گرفتن نیروی واندروالس ۸۴

شکل (۴-۱۵) - بارهای کمانشی بحرانی برای نسبت‌های ظاهری مختلف برای حالت یک سر آزاد ۸۴

شکل (۴-۱۶) - اعمال ممان در جهت محور ۸۶

شکل (۴-۱۷) - تغییرات زاویه‌ی اعمالی مومنتوم بین صفر تا ۹۰ درجه ۸۷

شکل (۴-۱۸) - گشتاور بحرانی کمانشی برای دسته نانو لوله با طول $L=4.058$ در راستای مختلف ۸۷

شکل (۴-۱۹) - جهت اعمال گشتاور به دسته نانو لوله در جهت محورهای X و Y ۸۸

شکل (۴-۲۰) - گشتاور بحرانی کمانشی با گشتاور اعمالی در جهت محور X بر حسب نسبت ظاهری (L/D) مختلف ۸۹

شکل (۴-۲۱) - مد کمانشی با گشتاور اعمالی در جهت محور X بر حسب نسبت ظاهری (L/D) مختلف ۹۰

شکل (۴-۲۲) - گشتاور بحرانی کمانشی با گشتاور اعمالی در جهت محور Y بر حسب نسبت ظاهری (L/D) مختلف ۹۱

شکل (۴-۲۳) - مد شکل دسته نانو لوله‌های کربن آرمچیر $L=4,058$ nm تحت خمش در راستای Y ۹۱

شکل (۴-۲۴) - گشتاور بحرانی کمانشی محاسبه شده در فواصل بین لوله‌ای مختلف با گشتاور اعمالی در راستای محور X ۹۲

شکل (۴-۲۵) - گشتاور بحرانی کمانشی محاسبه شده در فواصل بین لوله‌ای مختلف با گشتاور اعمالی در راستای محور Y ۹۲

شکل (۴-۲۶) - مد شکل‌های دسته نانو لوله‌های کربن آرمچیر تحت خمش در راستای X و Y با در نظر گرفتن نیروی واندروالس.....۹۳

شکل (۴-۲۷) - نحوه‌ی اعمال گشتاور پیچشی در کمانش پیچشی..... ۹۴

شکل (۴-۲۸) - گشتاور کمانش بحرانی دسته نانو لوله‌ها بر حسب نسبت طول دسته به قطر نانو لوله‌ی منفرد.....۹۵

شکل (۴-۲۹) - مد شکل‌های دسته نانو لوله‌های کربن آرمچیر ب بدون اعمال نیروی واندروالس برای طول‌های مختلف.....۹۵

شکل (۴-۳۰) - مد شکل‌های دسته نانو لوله‌های کربن آرمچیر تحت پیچش با اعمال نیروی واندروالس و بدون اعمال نیروی واندروالس برای طول $L=4,058 \text{ Nm}$۹۶

شکل (۴-۳۱) - شکل مدهای بدست آمده برای دسته نانو لوله‌ی سه تایی آرمچیر (۷,۷) بدون نیروی واندروالس.....۹۷

فهرست جداول

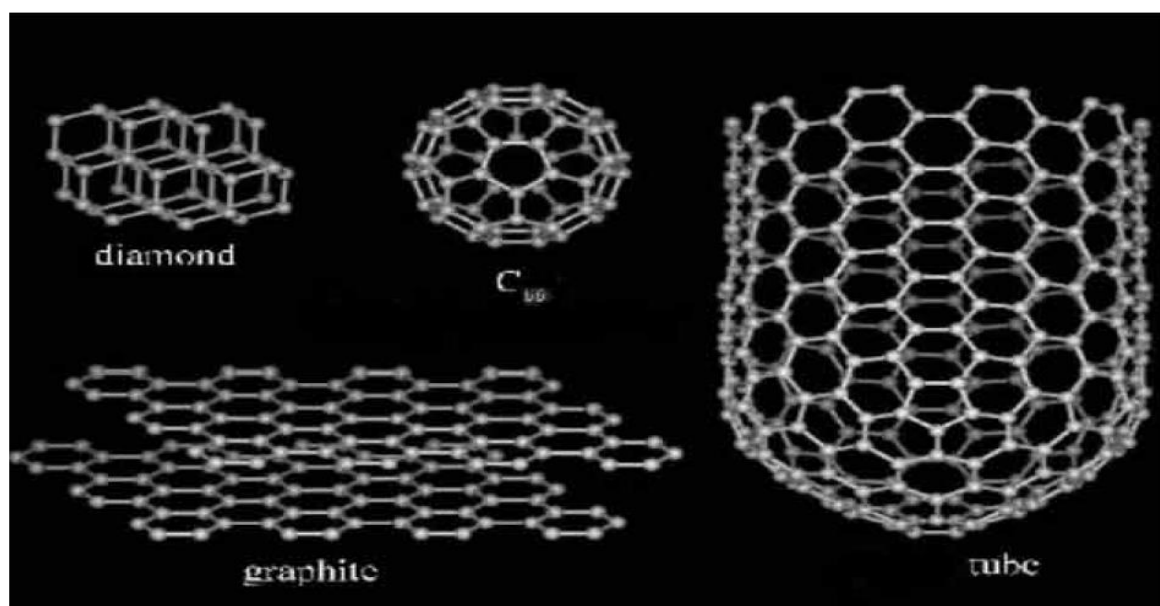
- جدول (۱-۲) ثابت‌های مربوط به پتانسیل‌های مکانیک مولکولی..... ۱۲
- جدول (۲-۲) نحوه‌ی بدست آوردن قطر نانو لوله با توجه به اندیس‌های آن‌ها..... ۱۶
- جدول (۳-۲) خلاصه نتایج شبیه‌سازی‌های تمام اتمی (برای هندسه‌ی خاص نانو لوله‌ی کربن)..... ۲۷
- جدول (۴-۲) خلاصه‌ی پارامترهای **Bead-spring** برای مدل مسوسکوپیک..... ۲۹
- جدول (۵-۲) خلاصه‌ی پارامترهای مدل یک درجه آزادی **Lollipop** با طول 1000 nm ۳۷
- جدول (۶-۲) بار نهایی P_{fl} و کرنش بحرانی ϵ_{cr} شکل‌های مختلف دسته نانو لوله‌های کربن..... ۴۵
- جدول (۱-۳) تعداد فنرها و کانکتورهای بکار رفته در هر نانو لوله..... ۶۷

فصل اول

مقدمه

مقدمه

حرکت شتابان و رو به رشد استفاده از نانو تکنولوژی در جهان امروز، شاخه‌های علمی بسیار زیادی را پیش روی دانشمندان و محققین قرار داده است. تا سال ۱۹۸۰، سه آلوتروپ کربن (کربن غیر بلوری) به نام‌های الماس، گرافیت و کربن بی شکل شناخته شده بودند. اما امروزه، خانواده کاملی از سایر اشکال کربن نیز وجود دارد. اولین آلوتروپ کربن که در سال ۱۹۸۵ کشف شد، فولرین باکمینستر^۱ نام داشت که به نام‌های دیگر باکی بال^۲ و فلورن^۳ نیز نام گذاری شده است. فلورن‌ها مولکول‌های کروی کربن هستند که به سبب شکل زیبا و خواص شگفت انگیز، توجه بسیاری از دانشمندان را به خود معطوف کرده‌اند. آلوتروپ بعدی کربن که در سال ۱۹۹۱ توسط دانشمندی به نام ایجیما^۴ [۱] کشف شد. نانو لوله^۵ نام دارد. در یک نانو لوله‌ی کربنی، اتم‌های کربن در ساختاری استوانه‌ای شکل آرایش یافته‌اند.



شکل (۱-۱) - ساختار مولکولی الماس، گرافیت، باکی بال و نانو لوله

^۱ -Buckminster fullerene

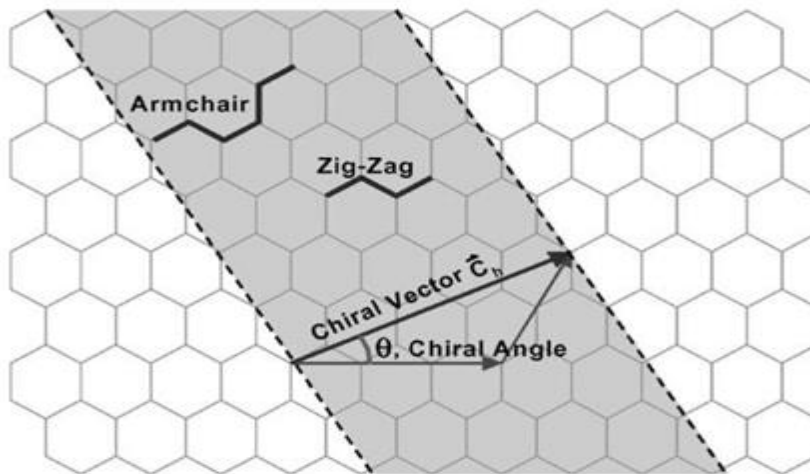
^۲ - Buckyball

^۳ - Fulleren

^۴ - Iijima

^۵ - Nanotube

خواص منحصر به فرد مکانیکی و الکتریکی این ساختار برای محققین بسیار جالب و قابل توجه بود. مدول یانگ بیش از ۱Tpa برای این ماده، همراه با چگالی کم آن، این ماده جدید را از نظر خواص مکانیکی از بسیاری از مواد دیگر متمایز می‌کند. پس از کشف این ماده و بررسی‌های انجام شده بر روی آن، وجود سه ساختار متفاوت از این ماده برای محققین به اثبات رسید که شامل ساختارهای زیگ-زاگ^۱، آرمچیر^۲ و کایرال^۳ می‌شود که در شکل‌های (۲-۱) و (۳-۱) نشان داده شده‌اند. با توجه به شکل (۲-۱) مشاهده می‌شود که نحوه‌ی چرخش صفحه‌ی گرافیت در جهات مختلف می‌تواند، سبب ایجاد کایرالیته‌های متفاوتی از نانو لوله گردد. نانو لوله‌ها به دو شکل تک دیواره و چند دیواره وجود دارند. نوع تک دیواره از یک صفحه‌ی گرافنی تشکیل می‌شود و نانو لوله‌های چند دیواره از آرایه‌ای از نانو لوله‌های هم مرکز تشکیل می‌شوند.

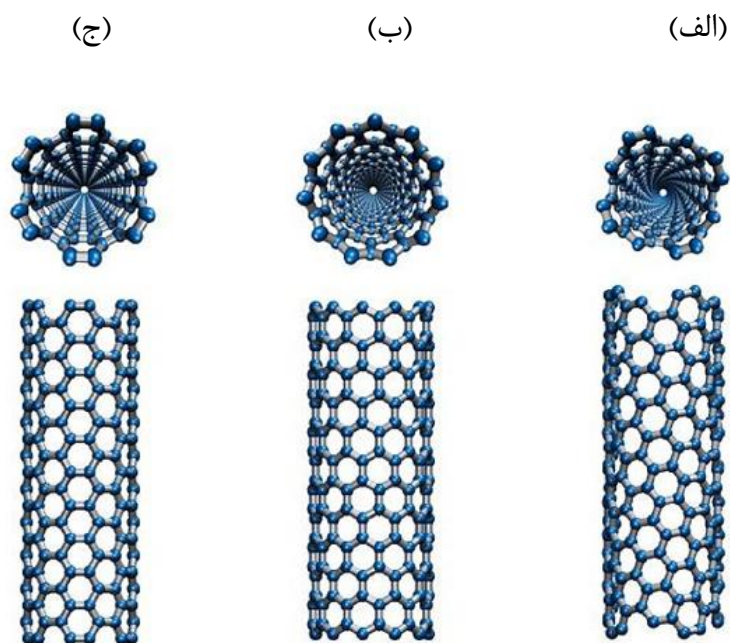


شکل (۲-۱) - نحوه‌ی شکل‌گیری نانو لوله از نظر نوع کایرالیته‌ی

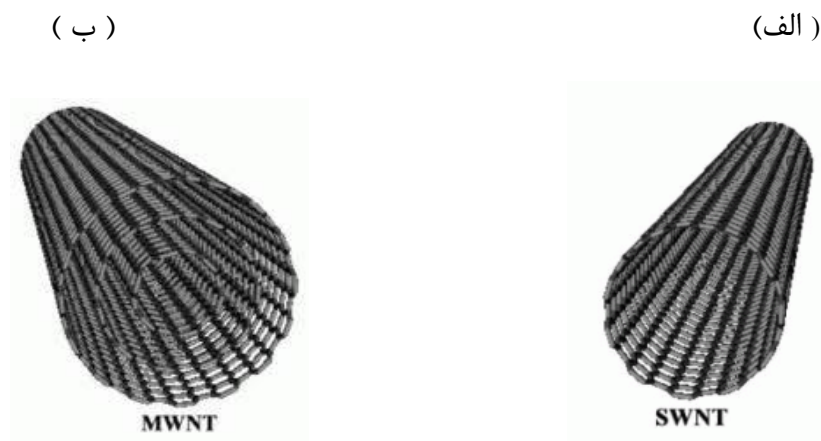
^۱ -Zig-zag

^۲ -Armchair

^۳ -Chiral



شکل (۳-۱) انواع نانو لوله‌های کربنی از نظر نوع کایرالیته، (الف): کایرال ، (ب) : زیگ-زاگ ، (ج) : آرمیچر



شکل (۴-۱) انواع نانو لوله‌ها از نظر تعداد دیواره ، (الف): تک دیواره ، (ب): چند دیواره

با مطالعات گسترده انجام شده بر روی نانو مواد، مشخص شد که نانو لوله‌های کربنی، دارای بسیاری از کاربردهای پتانسیلی و استفاده‌های مکانیکی، الکتریکی، گرمایی و خصوصیات نوری منحصر به فرد می‌باشند. تا کنون تحقیقات هم زمان فراوانی بر روی نانو لوله‌های کربنی به منظور مدل سازی پیوسته و اتمی آنها با تمرکز بر روی خواص، رفتار و کاربردهای مختلف انجام شده است. خواص مکانیکی

برتر نانو لوله‌های کربنی سبب گسترش استفاده از نانو مواد جدید می‌شود. برای مثال مدول یانگ نانو لوله‌ی کربنی تک جداره تقریباً برابر ($10^{12} Pa$) می‌باشد که در سال ۱۹۹۶ توسط ترسی^۱ به دست آمده است. این خصوصیت بیان می‌کند که نانو لوله‌های کربنی یکی از مستحکم‌ترین مواد ترکیبی شناخته شده می‌باشند که مدول الاستیک و استحکام نهایی تنش بالایی را دارا هستند. ده‌ها سال، برای استفاده از استحکام بالای نانو لوله کربنی منفرد، به روشی کار آمد تلاش شده است. اگر چه این خصوصیت نانو لوله‌های کربنی به سبب نیروی واندروالس می‌باشد، که منجر به تشکیل دسته‌های حاوی صدها و یا هزاران نانو لوله منفرد می‌شود. دلایل اصلی توجه محققین به این ساختار جدید را می‌توان در خواص منحصر به فرد مکانیکی و الکتریکی آن مشاهده نمود؛ زیرا در شرایط مختلف رفتارهای متفاوتی از خود نشان می‌دهد. این ساختار با توجه به کاربردهایی که در آینده از آن پیش بینی می‌شود، می‌تواند کاربردهای گسترده‌ای در صنایع و تجهیزات مکانیکی، نظامی، پزشکی و ... پیدا کند. همان طور که گفته شد، ساختار کامل (بدون عیب)، اندازه کوچک، چگالی کم، سختی بالا، استحکام کششی خارجی‌ترین جداره‌ی یک نانو لوله کربنی چند دیواره تقریباً ۱۰۰ برابر بیشتر از آلومینیوم است) و خواص عالی الکتریکی سبب استفاده‌ی گسترده آن‌ها در تقویت مواد، صفحه نمایش مسطح با انتشار میدانی، حسگرهای شیمیایی، دارو رسانی و علم نانو الکتریک شده است. نانو لوله‌ها، ساختارهای کربنی تو خالی هستند؛ بنابراین امکان قرار دادن مواد خارجی در داخل آن‌ها وجود دارد. برای مثال با قرار دادن فلزات درون دسته نانو لوله‌ها می‌توان خواص الکتریکی این مواد را بهبود بخشید. تحقیقات نشان داده است که نانو لوله‌های باز، مثل یک نی تو خالی عمل می‌کنند، این نی‌های مولکولی می‌توانند به وسیله عمل موئینگی و تحت شرایط خاص، برخی مواد را درون خود بکشند. همچنین دسته نانو لوله‌های کربنی برای ذخیره نمودن سوخت-های آلکانی و هیدروژن و ایجاد پیل‌های سوختی نیز مورد بررسی قرار گرفته‌اند. ذخیره‌ی هیدروژن در

^۱ -Tracy

داخل نانو لوله‌های تک دیواره ساخته شده حدود ۳ تا ۵ درصد وزنی نانو لوله‌هاست، بنابراین در مقایسه با دیگر انواع ذخیره سازی هیدروژن نظیر سیستم هیدروژن مایع، هیدروژن فشرده، هیدریدهای فلزی و سوپر اکتیو، سیستم نانو لوله‌ی کربنی و خصوصاً نانو لوله‌های تک دیواره، بهترین انتخاب برای اهداف مورد نظر بوده و می‌تواند به عنوان سیستمی سبک، فشرده، نسبتاً ارزان، ایمن و با قابلیت استفاده مجدد در ذخیره سازی هیدروژن مورد استفاده قرار گیرد. نانو لوله‌های کربنی همچنین برای استفاده در ساخت نانو ماشین‌ها پیشنهاد شده‌اند. نانو لوله‌ها به طور مناسب، با ساختارهای مختلف جانشین شده‌اند که می‌توانند به عنوان محور در نانو ماشین‌ها مورد استفاده قرار بگیرند. بررسی خواص نانو لوله‌ها با استفاده از روش‌های مختلف آزمایشگاهی و شبیه سازی‌های کامپیوتری از جمله مسائل مورد توجه برای محققین در سال‌های اخیر بوده است. پس از کشف نانو لوله‌های کربنی، محققین به انجام آزمایش بر روی این ساختار روی آوردند؛ اما صرف هزینه‌های مالی بسیار زیاد برای انجام این آزمایش‌ها محققین را بر آن داشت تا با استفاده از روش‌های مختلف کامپیوتری به شبیه سازی رفتارهای این ماده بپردازند. از مهم‌ترین این روش‌ها می‌توان به روش‌های *ab-initio* شبیه سازی دینامیک مولکولی (MD) و روش‌های *Tight binding* (ترکیبی از دو روش قبل) اشاره کرد، که البته در میان آن‌ها روش *ab-initio* دقیق‌ترین روش می‌باشد. با توجه به اینکه این روش‌ها نیز مستلزم صرف هزینه و وقت زیادی می‌باشند، محققین بسیاری سعی در ارائه‌ی روش‌های دیگری جهت شبیه سازی نانو لوله‌های کربنی کرده‌اند. در سال ۲۰۰۱ ادگار^۱ [۲] مدلی را ارائه کرد که در آن به وسیله‌ی شبیه سازی نیروها و انرژی‌های بین اتمی با استفاده از اتصالات خربایی مدول یانگ نانو لوله‌های کربنی را مورد تحقیق قرار داد. در سال ۲۰۰۳ لی و چو^۲ [۳] با استفاده از روش المان محدود به بررسی نانو لوله‌های کربنی تک دیواره پرداختند، آن‌ها قاب را به عنوان ساختار اتمی نانو لوله در نظر گرفتند، و اتم‌های کربن را به عنوان نقاط اتصال تیرهای فرضی لحاظ کردند

¹ -Odegard

² -Li and Chou

و مدل خود را بر این اساس گسترش دادند. آن‌ها با استفاده از ایجاد ارتباط بین مکانیک ساختاری و مکانیک مولکولی، خواص مکانیکی تیر فرضی و مدول یانگ نانو لوله‌ها را بدست آوردند [۵۳].

تی‌سرپز و پاپانیکوس^۱ [۴]، هو و همکارش^۲ [۵] و کالامکارف^۳ [۶] نیز با استفاده از روش مکانیک ساختاری به شبیه سازی نانو لوله‌های کربنی پرداختند. در روش‌های آن‌ها سه المان شبیه به تیر بدون داشتن حرکت نسبی در یک نقطه (مرکز اتم) به یکدیگر پیوند داده شده‌اند. آن‌ها با معادل کردن انرژی-های کششی، خمشی و پیچشی تیر توانستند خواص مکانیکی و هندسی تیر مورد نظر را بدست آورند. در سال ۲۰۰۴ ناسدالا^۴ [۷] و همکارانش به ارائه‌ی مدل جدید دیگری پرداختند که در آن بر هم کنش‌های کششی، خمشی و پیچشی بین اتم‌ها با استفاده از فنرهای محوری، پیچشی و المان تیر مدل شده‌اند.

در تمامی مدل‌هایی که تا کنون ارائه شده است، کاستی‌ها و معایبی وجود دارد. این امر سبب شده تا محققین هم چنان به دنبال روشی جامع و مطمئن باشند تا به وسیله‌ی آن به توانند نانو لوله‌های کربنی را تحت بارگذاری‌ها و شرایط مرزی مختلف مورد بررسی قرار دهند. البته باید اشاره کرد که روش دینامیک مولکولی از روش‌هایی می‌باشد که دارای قابلیت‌های بسیاری است؛ اما استفاده از آن نیاز به وقت و هزینه‌ی زیادی دارد و به کار گیری آن برای همه مقدور نمی‌باشد. دسته^۵ نانو لوله‌ها به مجموعه‌ای از نانو لوله‌های تک جداره (SWNT) می‌گویند که به صورت موازی و در نظم دقیقی (معمولاً دسته‌های دو، سه و هفت تایی) در کنار یکدیگر قرار می‌گیرند. از آنجا که رفتار هر نانو لوله در دسته تابع رفتار بقیه‌ی نانو لوله‌هاست، از تحلیل پیچیده‌تری نسبت به حالت SWNT منفرد برخوردارند. دسته نانو لوله‌ها به دلیل سطح مقطع زیاد نسبت به نانو لوله‌های تک جداره می‌توانند برای تصفیه‌ی آب‌های آلوده و نانو می

¹ -Tserpes and Papanikos

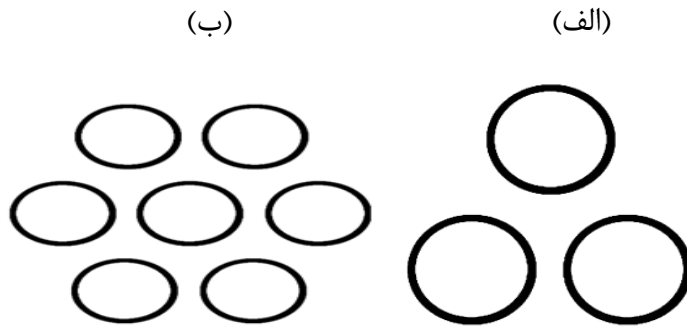
² -Hu et al.

³ -Kalamkarov

⁴ -Nasdala et al.

⁵ -Bundle

کامپوزیت‌ها بسیار مفید باشند. همچنین به دسته‌های بزرگ نانو لوله (مثلاً بیست‌تایی) معمولاً رشته^۱ گویند، که نسبت به SWNT ها استحکام زیادی دارند. دسته‌ی سه تایی و هفت تایی از متداول‌ترین دسته‌ها هستند که در شکل (۵-۱) نشان داده شده‌اند.



شکل (۵-۱) - نمای سطح مقطع دسته نانو لوله‌ها: (الف) - دسته‌ی سه‌تایی، (ب) - دسته‌ی هفت‌تایی

با توجه به مطالب بیان شده و در نظر گرفتن این نکته که برای استفاده نانو لوله‌ها در مصارف گوناگون ناچاریم از دسته نانو لوله‌ها استفاده کنیم، در این تحقیق به دنبال ساخت مدلی بودیم که علاوه بر داشتن قابلیت‌های گوناگون بتواند دسته نانو لوله‌ها را مورد تحلیل قرار دهد. با استفاده از روش مکانیک ساختاری مدلی را ارائه داده‌ایم که با استفاده از آن می‌توان کمانش دسته نانو لوله‌های کربنی را تحت بار محوری و ممان‌های خمشی و پیچشی مورد بررسی قرار داد.

بر این اساس در فصل بعد مروری بر تحقیقات انجام گرفته در سال‌های گذشته و تئوری‌های موجود در زمینه کمانش دسته نانو لوله‌های کربن و نانو لوله‌ی منفرد آورده شده است. در فصل سوم تئوری‌های مورد استفاده در ایجاد مدل ساختاری دسته نانو لوله در نرم افزار ABAQUS [۸] بیان شده است. در فصل چهارم کمانش دسته نانو لوله‌ها تحت بار محوری مورد مطالعه قرار گرفته و نتایج آن با تنها کار قبلی انجام شده مقایسه شده است و ضمناً کمانش دسته نانو لوله‌ها تحت ممان خمشی و پیچشی نیز تحلیل شده است.

^۱ -Rope.

فصل دوم

مروری بر روابط موجود و مطالعات

پیشین

فصل دوم - مروری بر روابط موجود و مطالعات پیشین

در حال حاضر بسیاری از محققین از روابط موجود در صفحات گرافیت به منظور بررسی نانو لوله‌های کربنی استفاده می‌کنند و همان پتانسیل‌ها و برهم کنش‌هایی که در صفحات گرافیت وجود دارد، برای نانو لوله‌های کربنی نیز در نظر می‌گیرند که در ادامه به آن‌ها اشاره می‌شود.

۲-۱- انواع انرژی‌ها و برهم کنش‌های موجود بین اتم‌های کربن

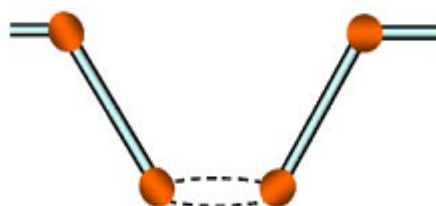
به طور کلی می‌توان انرژی‌های موجود بین اتم‌های کربن را به دو دسته تقسیم نمود.

۲-۱-۱ - برهم کنش‌های موجود بین اتم‌های کربن (غیر پیوندی)

این برهم کنش‌ها شامل دو نوع برهم کنش واندروالس^۱ و الکترواستاتیک (کولمب)^۲ می‌باشد. در ادامه به توضیح به این برهم کنش‌ها می‌پردازیم.

الف : برهم کنش واندروالس

این نوع از برهم کنش به دلیل نزدیک شدن و یا دور شدن دو اتم کربن در فاصله‌ی فضایی ایجاد می‌شود (شکل (۲-۱)).



Van der Waals force

شکل (۲-۱) - برهم کنش واندروالس در اتم‌های کربن

به منظور تعریف برهم کنش واندروالس، روابط مختلفی ارائه شده است که معروف‌ترین آن‌ها پتانسیل لِنارد-جونز می‌باشد و به صورت زیر است [۹]:

^۱ -Van der waals

^۲ -Electrostatic(Coulomb)

$$U(R) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right], \quad (1-2)$$

که در آن R فاصله‌ی بین اتمی و ε و σ ثابت‌های لنارد-جونز می‌باشند. این ثابت‌ها برای اتم کربن به شکل زیر تعریف می‌شوند [۱۰]:

$$\varepsilon = 3.8655 \times 10^{-4} \text{ nN.nm}, \quad \sigma = 0.34 \text{ nm}$$

نیروی لنارد-جونز نیز با استفاده از رابطه‌ی زیر تعیین می‌گردد [۱۰]:

$$F(R) = -\frac{dU(R)}{dR} = 24 \frac{\varepsilon}{\sigma} \left[2 \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^7 \right], \quad (2-2)$$

لازم به ذکر است که از این برهم کنش عموماً جهت مدل کردن نیروهای موجود بین اتم‌های کربن، واقع در دیواره‌ی جداگانه و بین دیواره‌های نانو لوله‌های مجاور استفاده می‌شود و برای اتم‌های واقع در یک دیواره و اتم‌های مجاور یکدیگر از این پتانسیل در مقابل پتانسیل‌های دیگر صرف‌نظر می‌شود. در اینجا σ قطر برخورد^۱، فاصله‌ای که در آن $U(R)=0$ است و ε انرژی جدایش است. در یک سیستم

اتمی، قطر برخورد برابر با چند آنگسترم \AA است که $1 \text{\AA} = 10^{-10} \text{ m}$ می‌باشد. مقدار ε مربوط به

مینیمم تابع (۱-۲) است که در طول پیوند تعادلی $\rho = 2^{1/6} \sigma$ اتفاق می‌افتد و $U(R) = -\varepsilon$.

از نظر فیزیکی ε مقدار کاری را نشان می‌دهد، که برای جدا کردن ذرات برهم اثر کننده از فاصله تعادلی ρ تا بینهایت لازم است. رسیدن به مینیمم پتانسیل در پتانسیل (LJ) امکان تشکیل پیوند برای دو ذره برخورد کننده را می‌دهد، مشروط بر اینکه انرژی جنبشی نسبی کمتر از ε باشد.

ب : برهم کنش الکترواستاتیکی

این نوع از برهم کنش بر اثر به وجود آمدن نیروهای الکترواستاتیکی بین الکترون‌های دو اتم مجاور یکدیگر ایجاد می‌شود و می‌توان آن را به صورت زیر تعریف کرد :

$$E_{es} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{a \in i, b \in j} \frac{q_{i,a} q_{j,b}}{|r_{i,a} - r_{j,b}|} \quad (3-2)$$

^۱ - Collision diameter

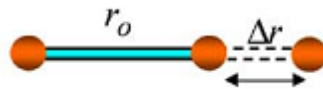
و باید گفت که تأثیر این بر هم کنش در مقایسه با دیگر پتانسیل‌ها بسیار ناچیز می‌باشد و لذا در هیچ یک از تحلیل‌ها در نظر گرفته نمی‌شود. ۲-۱-۲- پتانسیل‌های موجود در پیوند

اتمی

این پتانسیل‌ها شامل چهار نوع متفاوت که در زیر به آن‌ها اشاره شده است.

الف: پتانسیل کشش بین پیوندی^۱

این پتانسیل بر اثر تغییر فاصله‌ی بین اتم‌های کربن در یک پیوند اتمی ایجاد می‌شود (شکل (۲-۲)).



شکل (۲-۲) - پتانسیل کشش بین پیوندی در اتم‌های کربن

برای این پتانسیل روابط مختلفی ارائه شده است که از معروف‌ترین آن‌ها می‌توان به روابط مورس^۲ و برنر^۳ اشاره کرد. از میان این دو، رابطه‌ی برنر دقیق‌تر می‌باشد؛ اما رابطه‌ی مورس ساده‌تر است و لذا اکثر محققین از این رابطه در محاسبات خود استفاده کرده‌اند. می‌توان شکل غیر خطی رابطه‌ی مورس را به صورت زیر تعریف نمود [۱۱].

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

جدول (۱-۲) ثابت‌های مربوط به پتانسیل‌های مکانیک مولکولی [۷]

Interaction	پارامتر
U_r	$D_e = 0.6031 \text{ nN} \cdot \text{nm} , \beta = 26.25 \text{ nm}^{-1} , r_0 = 0.142 \text{ nm}$
U_θ	$k_\theta = 1.42 \text{ nN} \cdot \text{nm} / \text{Rad}^{-2} , K_{\text{sextic}} = 0.754 \text{ Rad}^{-4} , \theta_0 = 120^\circ$
U_ϕ	$k_\phi = 0.278 \text{ nN} \cdot \text{nm} / \text{Rad}^{-2} , n = 2 , \phi_0 = 180^\circ$
U_ω	$k_\omega = 0.287 \text{ nN} \cdot \text{nm} / \text{Rad}^{-2} , n = 2 , \omega_0 = 180^\circ$

^۱ -Bond stretching

^۲ -Morse

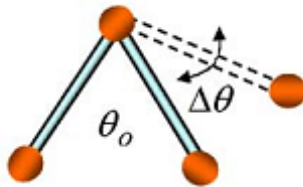
^۳ -Brenner

که در آن r فاصله‌ی بین دو اتم می‌باشد و مقادیر r_0 (فاصله‌ی بین دو اتم کربن در حالت تعادل)، D_e و β نیز در جدول (۱-۲) [۷] آورده شده‌اند. نیروی کشش بین پیوندی نیز به شکل زیر به دست می‌آید:

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

ب: پتانسیل خمش زاویه‌ای^۱ بین پیوندی

این شکل از پتانسیل به دلیل تغییر زاویه در پیوند مجاور دیگر ایجاد می‌شود (شکل (۳-۲)).



شکل (۳-۲) - پتانسیل خمش زاویه‌ای بین پیوندی در اتم‌های کربن

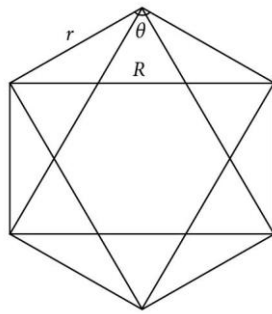
برای این پتانسیل نیز روابط مختلفی ارائه شده است که معروف‌ترین آن‌ها پتانسیل مورس می‌باشد که به شکل زیر تعریف می‌گردد [۱۱]:

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

که در آن θ زاویه‌ی بین دو پیوند مجاور می‌باشد و مقادیر θ_0 (زاویه‌ی بین دو پیوند در حالت تعادل)، K_θ و K_{sextic} در جدول (۱-۲) آورده شده است. معادله‌ی (۶-۲) را می‌توان از طریق ایجاد رابطه‌ی بین کشش و زاویه‌ی خمش بر حسب کشش به دست آورد. بر این اساس برای جابجایی‌های کوچک می‌توان رابطه‌ی زیر را به دست آورد [۲]:

$$\Delta\theta \approx \frac{2(\Delta R)}{r_0} \quad r_0 = 0.142 \text{ nm}, \quad (۷-۲)$$

^۱ - Angle variation or Bond bending



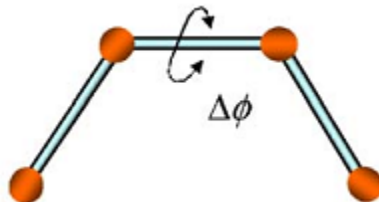
شکل (۲-۴) - موقعیت‌های مربوط به ΔR و $\Delta\theta$

در نهایت با استفاده از آن می‌توان نیروی خمشی زاویه‌ای را به شکل زیر به دست آورد:

$$F(R - R_0) = \frac{4}{r_0^2} K_\theta (R - R_0)^2 \left[1 + \frac{16}{r_0^4} \left(1 + \frac{4}{r_0^2} \right) K_{SEXTIC} (R - R_0)^4 \right] \quad (۲-۸)$$

ج- پتانسیل پیچش زاویه‌ای دو سطحی^۱

این پتانسیل بر اثر پیچش حول محور پیوند ایجاد می‌شود و در حقیقت بین چهار اتم تعریف می‌شود (شکل (۲-۵)).



شکل (۲-۵) - پتانسیل پیچش دو سطحی در اتم‌های کربن

پتانسیل پیچش دو سطحی را می‌توان به شکل زیر تعریف نمود [۱۲]:

$$U_\phi = \frac{1}{2} K_\phi [1 + \cos(n\phi - \phi_0)], \quad (۲-۹)$$

که در آن ϕ زاویه‌ی پیچش می‌باشد و مقادیر ϕ_0 (زاویه‌ی اولیه در حالت تعادل)، K_ϕ و n در جدول

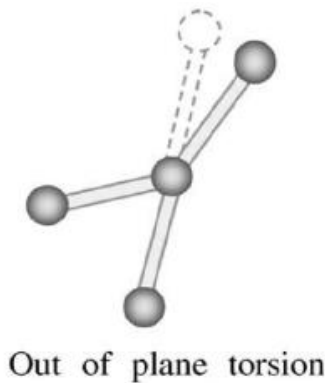
(۲-۱) آورده شده است. با استفاده از آن ممان پیچشی دو سطحی به صورت زیر به دست می‌آید:

^۱ -Dihedral angle torsion

$$T(\phi - \phi_0) = \frac{1}{2} k_\phi n \sin(n\phi - \phi_0), \quad (10-2)$$

د: پتانسیل پیچش خارج صفحه‌ای^۱

این پتانسیل به دلیل خارج شدن یک پیوند از صفحه‌ی دو پیوند دیگر به وجود می‌آید و این پتانسیل نیز بین چهار اتم تعریف می‌شود (شکل (۶-۲)).



شکل (۶-)- پتانسیل پیچش خارج صفحه‌ای در اتم‌های کربن

پتانسیل پیچش خارج صفحه‌ای را می‌توان به شکل زیر تعریف نمود:

$$U_\omega = \frac{1}{2} k_\omega [1 + \cos(n\omega - \omega_0)], \quad (11-2)$$

که در آن ω زاویه‌ی پیچش می‌باشد و مقادیر ω_0 (زاویه‌ی اولیه در حالت تعادل)، k_ω و n در جدول (۱-۲) آورده شده است. با استفاده از آن ممان پیچشی خارج صفحه‌ای به صورت زیر به دست می‌آید:

$$T(\omega - \omega_0) = \frac{1}{2} K_\omega \sin(n\omega - \omega_0), \quad (12-2)$$

به این ترتیب انرژی پتانسیل کل را می‌توان به شکل زیر نشان داد:

$$U_{total} = U_r + U_\theta + U_\phi + U_\omega + U_{vdw} + U_{el} \quad (13-2)$$

¹ -Out-of-plane torsion

۲-۲ - قطر نانو لوله‌های کربنی

Type of nanotube	n).Chiral indices (m	Chiral angle θ	D_{NT} , Tube diameter
Zig-zag	0),(m	0	$\frac{a_0 m}{\pi}$
Armchair	m),(m	30°	$\frac{\sqrt{3} a_0 m}{\pi}$
Chiral	n);m ≠ n ≠ 0 ,(m	0 < θ < 30°	$\frac{a_0 \sqrt{(m^2 + mn + n^2)}}{\pi}$

در اینجا یاد آوری می‌شود که قطر نانو لوله‌ها را می‌توان با توجه به اندیس آن‌ها به شرح جدول (۲-۲) بدست آورد [۵۴]:

جدول (۲-۲) نحوه‌ی بدست آوردن قطر نانو لوله با توجه به اندیس آن‌ها [۶]

پس از مروری بر روابط و پتانسیل موجود در نانو لوله‌های کربنی، در ادامه برخی از مقالات ارائه شده در زمینه‌ی دسته نانو لوله‌ها مورد بررسی قرار می‌گیرد.

۲-۳- خواص مکانیکی دسته نانو لوله‌های کربنی تک جداره به عنوان ماده اولیه حجیم^۱

نانو لوله‌های تک جداره SWCNTs بر اساس یافته‌های لوپز^۲ [۱۳] در سال ۲۰۰۱ اغلب در دسته‌های خود شکل یافته از لوله‌های هم تراز شده در یک صفحه‌ی مستطیلی و عمود بر محورهای مشترک شان، وجود دارند. همچنین بنا بر یافته‌های چارلی^۳ [۱۴] در سال ۱۹۹۶ پیش بینی شده است که تغییر شکل شعاعی در نتیجه‌ی سطح مقطع چند ضلعی، اصلاح نوار فاصله، تغییرات عمده‌ای را در خواص انتقال الکترون، در نانو لوله‌ها بوجود می‌آورد. این مشاهدات تا اندازه‌ای بررسی‌های جدید برای تعیین مدول الاستیک خطی دسته نانو لوله‌ها، به عنوان ماده اولیه حجیم را دارای انگیزه کرده است. اولین مقدار تجربی برای مدول برشی دسته SWCNT با قطر لوله‌ی حدود ۱,۴ نانومتر توسط

^۱ -Bulk material

^۲ -Lopez

^۳ -Charlier

سلولتات^۱ [۱۵] در سال ۱۹۹۹ به دست آمده است. این مدول برشی خارج صفحه‌ای با مقادیر ۰.۷ – $6.5 \text{ GPa} (\pm 50\%)$ در بررسی نیرویی دسته‌های نانو لوله‌ی منفرد به عنوان تیرهای عمودی بار گذاری شده، توسط یک میکروسکوپ اتمی (AFM) ارزیابی شده است. این مقدار به صورت تئوری، به طور قابل توجهی، کمتر از حد 19.5 GPa محاسبه شده است. بر اساس کارهای جدید لاسجانیاس^۲ در سال ۲۰۰۳، مدول برشی برای نمونه‌های تولیدی دسته SWCNT برابر 2 GPa به دست آمده است.

در مورد مدول برشی درون صفحه‌ای، تعدادی نتیجه‌ی ایده‌آل، از قبیل نتایج پوپوف^۳ [۱۶] در سال ۲۰۰۰ و سیتتر^۴ [۱۷] در سال ۲۰۰۳ به ترتیب مقادیر 5.3 GPa و 22.5 GPa به دست آمده‌اند. سیتتر^۴ [۱۸] در سال ۲۰۰۳، مدول سطحی، مدول برشی، مدول یانگ، سختی نرمال و ضریب پواسن که تمام آن‌ها در صفحه‌ی عمود بر دسته SWCNT می‌باشند را با استفاده از یک مدل، که در آن هر نانو لوله همانند یک لوله‌ی صلب پیوسته با یک سطح مقطع کاملاً دایروی و با پیوند واندروالس بین لوله-ای که با پتانسیل لنارد-جونز مدل شده است را محاسبه کرد. اما مقادیر آن‌ها اختلاف قابل توجهی با مقادیر محاسبه شده با استفاده از مدل دینامیک مولکولی شبکه‌ی نیرو ثابت که توسط پوپوف ارائه شده است را دارا می‌باشند. باید توجه کرد که کار اولیه‌ی ترشف^۵ [۱۹] و همکارانش در سال ۱۹۹۴، با استفاده از پتانسیل ترشف (یک مدل نیرو-والانس) برای پیوندهای اتمی درون لوله‌ای و یک پتانسیل نوع لنارد-جونز برای پیوندهای بین لوله‌ای به کار رفته است و بررسی‌های لو [۲۶] در سال ۱۹۹۷ با استفاده از ثابت‌های نیرویی برای پیوندهای درون لوله‌ای و پتانسیل لنارد-جونز برای پیوندهای بین لوله‌ای به سوی مقادیر خیلی کوچک‌تر نسبت به آنچه سیتتر [۱۷] در سال ۲۰۰۳ و پوپوف [۱۶] در سال ۲۰۰۰ به دست آورده‌اند می‌باشد.

¹-Salvetat

²-Lasjaunias

³- Popov

⁴-Seather

⁵- Tersoff and et al.

استفاده از مدل نیروی والانس برای پیوندهای اتمی درون هر لوله و مدل لنارد- جونز برای پیوند واندر والس بین لوله‌ای به کار می‌رود. ترشف و همکارش [۱۹] در سال ۱۹۹۴ پیش بینی کردند که لوله‌ها درون دسته‌های SWCNT با قطرهای بیشتر از ۲,۵nm نسبت به یکدیگر تحت جاذبه‌ی واندر والس، به شکل ساختار لانه زنبوری شکل می‌گیرند. سطح مقطع چند ضلعی ممکن است منجر به تغییرات ساختاری در خواص مکانیکی و دیگر خواص فیزیکی بر طبق اثر چارلیر [۱۴] در سال ۱۹۹۶ شود. این که نانو لوله‌ها با سطح مقطع‌های مختلف و پیوندهای مختلف $\pi^* - \sigma^*$ به همان نسبت، دارای ساختارها و خواص الکتریکی متفاوت می‌باشند قابل توجه است. با استفاده از یافته‌های ترشف که با کمک میکروسکوپ الکترونی HRTEM با رزولوشن بالا بدست آمده‌اند معلوم می‌شود که نانو لوله‌های کربن تک جداره، درون دسته با قطر های کوچکتر از ۱,۷nm می‌توانند دارای سطح مقطع چند ضلعی در حالت بدون تنش باشند. به عبارت دیگر شواهد معتبری از اثر فیزیکی رامان^۱ توسط ونکرزواران^۲ [۲۰] در سال ۱۹۹۹ و پیتر^۳ [۲۱] در سال ۲۰۰۰ و اثر پراش توسط تانگ^۴ [۲۲] در سال ۲۰۰۰ و رولز^۵ [۲۳] در سال ۲۰۰۱ بر روی تغییرات ساختاری دسته‌های SWCNT در واکنش به فشار گزارش شده است. بررسی‌های انجام شده توسط چان^۶ [۲۴] در سال ۲۰۰۳ نشان می‌دهد که چند ضلعی شدن فقط یک حالت نیم پایدار می‌باشد. انرژی دگرگونی، شکل‌ها را بر اثر فشار در ابتدا بیضی و سپس به شکل مسیر منحنی، تحت فشار بالا مسطح می‌کند.

لوله‌های درون دسته با استفاده از نیروی واندر والس بر روی یکدیگر اثر می‌گذارند. سطوح کوچک موازی و مسطح بین لوله‌های مجاور به دلیل چند ضلعی شدن دارای انرژی پیوند واندر والس کمتری نسبت به سطوح دو نانو لوله‌ی مجاور که کاملاً دایره‌ای می‌باشند، است. انرژی پیوند درون لوله‌ای، چنانچه مقطع لوله از سطح مقطع دایره به شکل چند ضلعی تبدیل شود، افزایش می‌یابد. این

^۱ -Raman

^۲ -Venkareswaran

^۳ -Peter

^۴ -Tang

^۵ - Roles

^۶ - Chan

انرژی تغییر شکل با افزایش قطر لوله کاهش می‌یابد، و در نهایت تسلیم انرژی پیوند بین لوله‌ای، بهینه می‌گردد، بنابر این، شبکه چند ضلعی لوله‌های SWCNT درون دسته‌ها پایداری بیشتری نسبت به شبکه لوله‌های دایروی، برای لوله‌های با قطر بزرگ را دارا می‌باشد. در کار لیو^۱ [۲۵] در سال ۲۰۰۴ ابتدا بر روی خصوصیات ناپایداری شبکه‌ی، دسته‌های SWCNT با آنالیز تعادل بین پیوندهای اتمی درون لوله‌ای و پیوندهای واندروالس بین لوله‌ای بررسی شده است و با استفاده از انرژی پیوندی در مدل پیوسته‌ی (HAC)، که در آن انرژی پیوند درون لوله‌ای هنگامی که پیوند بین لوله‌ای با پتانسیل لنارد جونز مدل شده باشد، با استفاده از روش پیوسته‌ی پایه‌ی دینامیک مولکولی محاسبه شده است. در مدل لیو سطح مقطع لوله، شبکه‌ای کامل از دسته‌های SWCNT می‌باشد. هنگامی که قطر لوله به ۲,۱ nm افزایش می‌یابد، که بزرگ‌تر از ۱,۷ nm و کوچک‌تر از ۲,۵ nm می‌باشد، کاملاً از حالت دایره‌ای به چند ضلعی با گوشه‌های گرد تبدیل شده‌اند، در این مدل از این سطح مقطع‌ها استفاده گردیده است. مشاهدات لوپز [۱۳] در بررسی‌هایی که با میکروسکوپ HRTEM صورت گرفته، مطابق با پیش بینی ترشف و همکارانش می‌باشد. ترشف در سال ۱۹۹۴ با استفاده از روش اتمی به این پیش بینی دست یافت که عیوب ساختاری موضعی اغلب ناپایداری‌ها را توسعه می‌دهد و یک شبکه‌ی کمی آشفته، منجر به آغاز چند ضلعی شدن سطح مقطع لوله‌ها برای قطرهای خیلی کوچک (برای مثال ۱,۸ nm) می‌گردد. به علت ایزوتروپی عرضی، خصوصیات الاستیک خطی دسته نانو لوله‌ی منفرد، می‌تواند با پنج ثابت غیر وابسته‌ی الاستیک توصیف شود. این پنج ثابت شامل مدول بالک درون صفحه‌ای یا تراکم پذیری، مدول برشی درون صفحه‌ای، مدول یانگ محوری، ضریب پواسان خارج صفحه‌ای و مدول برشی خارج صفحه‌ای می‌باشند. مطالعه‌ی تئوری معدودی همان طور که قبلاً گفته شد بر روی مدول، انجام شده است؛ اما هیچ کدام از این مطالعات مجموعه‌ای کامل از پنج مدول غیر وابسته را محاسبه نکرده‌اند. در مقاله لیو و همکارانش تراکم ناپذیری برابر 0.025 (GPa)^{-1} بیان شده

^۱-Liu

که در مقایسه با مقدار⁻¹ (GPa)⁻¹ ۰.۰۲۴ که توسط تانگ^۱ [۲۲] در سال ۲۰۰۰ گزارش شده است، بسیار نزدیک می‌باشد. همچنین یافت می‌شود که قابلیت شکل پذیری سطح مقطع لوله نقش عمده‌ای در توصیف مدول عرضی را دارد. خصوصیات الاستیک دسته نانو لوله‌ها دارای درجه‌ی زیادی از ناهمسانگردی در مقایسه با تمام کریستال‌های شش ضلعی که در کتاب راهنمای Every و McCurdy در سال ۱۹۹۲ آورده شده است یافت می‌شود [۲۷].

۲-۴- کارهای انجام شده بر روی دسته نانو لوله‌ها

منیوا^۲ [۲۸] انبساط گرمایی دسته نانو لوله‌ها را با استفاده از تکنیک پراش اشعه‌ی x مورد مطالعه قرار داده است. لوپز [۲۹] بررسی خصوصیات به هم پیوستگی آرایش نانو لوله‌های تک جداره تحت عملیات گرمایی را انجام داده است. لو^۳ [۳۰] خصوصیات الاستیک دسته نانو لوله‌های کربن را با استفاده از مدل تجربی نیرو ثابت تعیین کرده است. سلوات^۴ [۳۱] آزمایش‌هایی را به وسیله‌ی استفاده از یک میکروسکوپ اتمی و مواد مخصوص انجام داده است و مدول الاستیک و برشی دسته نانو لوله‌ها را بدست آورده است.

رو^۵ [۳۲] با استفاده از مدل اصلاح شده‌ی لانه‌ی زنبوری کمانش الاستیک دسته نانو لوله‌های کربنی را مورد مطالعه قرار داده و کیان^۶ [۳۳] طبیعت انتقال نیرو در دسته نانو لوله‌های کربنی را مورد بررسی قرار داده و سطح تنش و فاصله‌ی داخلی را به عنوان دو فاکتور مشترک در انتقال نیرو شناسایی کرده است.

۲-۴-۱- مدل تئوری نانو مکانیک

¹ - Tang

² - Maniwa

³-Lu

⁴ -Selveta

⁵ -Ru

⁶ - Qian

تئوری حاکم بر نانو مکانیک تشکیل و تعادل دسته نانو لوله‌های کربنی را از طریق تعادل انرژی، بین انرژی کرنشی خمشی و هم چنین تغییر شکل نقاط تماسی نانو لوله‌های کربنی را توضیح می‌دهد. در این تئوری نانو لوله‌های کربن همدیگر را با نیروی واندروالس جذب می‌کنند [۴۰]؛ اما درون دسته نانو لوله‌های کربنی، که به صورت عمودی و هم راستا آرایش یافته‌اند، هر لوله به عنوان یک تیر یک سر گیردار عمودی عمل می‌کند. بنابر این، تعادل بین انرژی کرنشی خمشی، انرژی تغییر شکل موضعی و انرژی اتصال به طور مؤثر اندازه شکل دسته نانو لوله‌ها را محدود می‌کند. برای کاربرد راحت‌تر معادلات، تغییر شکل نانو لوله‌ها فقط در دو جهت فرض شده است.

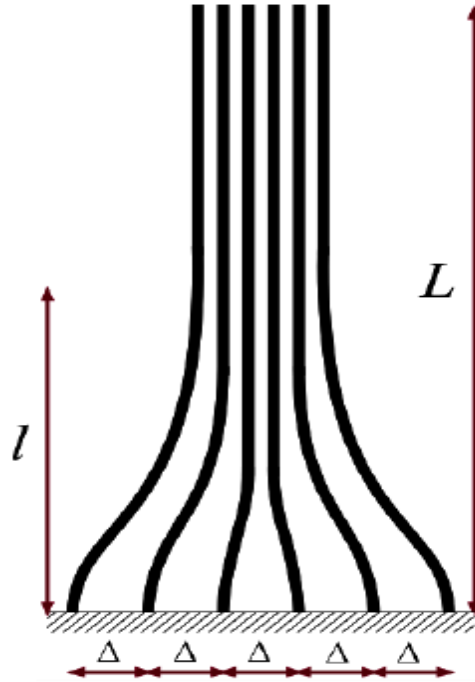
برای نانو لوله‌های استوانه‌ای، انرژی کرنشی خمشی در تمام جهات برابر می‌باشد و فقط وابسته به جابجایی مطلق نوک نانو لوله می‌باشد. علاوه بر آن پیوند واندروالس سبب جاذبه بین نانو لوله‌ها می‌گردد. در این تئوری پیوند بین نانو لوله‌های نزدیک به هم در شبیه سازی دینامیک مولکولی، به وسیله‌ی پتانسیلی که تابع فاصله‌ی بین نانو لوله‌ها در هر لحظه می‌باشد به دست می‌آید. در این تئوری پیوندها در صفحه‌ی دو بعدی در نظر گرفته می‌شوند، به دلیل اینکه در شبیه سازی‌های دینامیک مولکولی متغیرها تماماً به صورت سه بعدی نمایش داده می‌شوند، بنابر این فرمول‌های دو بعدی با تغییراتی، به صورت مطلق برای متغیرهای تئوری در نظر گرفته می‌شوند. تمام نانو لوله‌های در نظر گرفته شده از نظر هندسی با قطر (d)، ضخامت دیواره (t)، طول (L)، و فاصله‌ی بین نانو لوله-ای یکسان Δ مشابه یکدیگر می‌باشند.

شکل (۷-۲) نمایش دو بعدی دسته نانو لوله‌های کربن برای بدست آوردن مدل نانو مکانیک را نشان می‌دهد. در آن، L طول کل، l طول خمش و Δ فاصله بین لوله‌ای را نشان می‌دهد. تغییرات انرژی آزاد که سبب شکل گیری دسته‌های حاوی n نانو لوله می‌شوند از این روش به دست می‌آیند:

[۴۰]

$$W = \sum_{i=1}^n U_i^b + \sum_{i=1}^n U_i^c - \Delta_\gamma \times 2b \sum_{i=1}^n (L - l_i), \quad (14-2)$$

که در آن $\Delta\gamma$ انرژی چسبندگی، U_i^b انرژی کرنشی خمشی، U_i^c انرژی کرنشی که سبب تغییر شکل موضعی می گردد، l_i طول منطقه‌ی غیر تماسی می‌باشد. از آنجایی که، این فرمول بندی و مفهوم تعادل این انرژی‌ها، شکل پذیری طبیعی دسته‌های پایدار درون دسته نانو لوله‌های کربن بزرگ‌تر را کنترل می‌کنند، خلاصه نتایج آن‌ها در ذیل آمده است.



شکل (۷-۲) نمایش دو بعدی دسته نانو لوله‌ی کربنی برای بدست آوردن مدل نانو مکانیک کلاسیک را نشان می‌دهد. در آن L طول کل، l طول خمش، و Δ فاصله بندی بین لوله‌ای را نشان می‌دهد [۴۰].

الف- انرژی کرنشی خمشی

برای تغییر شکل‌های کوچک، این‌گونه فرض شده است که نانو لوله‌ها هم مانند تیر الاستیک عمل می‌کنند. با صرف‌نظر از تغییر شکل برشی، می‌توان یک مدل تیر با غلتش انتهایی صفر همراه با تئوری تیر الاستیک، به کار برد [۴۰]، بنابر این :

$$U_i^b = \frac{6EI\Delta_i^2}{l_i^3}, \quad (۱۵-۲)$$

در آن EI سفتی خمشی تیر، Δ_i تغییر شکل خمشی و l_i طول خمیدگی برای نانو لوله‌ی i^{th} را نشان می‌دهد.

ب- انرژی تغییر شکل موضعی ذخیره شده در منطقه تماس

به طور کلی تماس چسبندگی بین دو لوله سبب تغییر شکل موضعی پیرامون منطقه‌ی تماس می‌گردد،

که در آن انرژی کرنشی به خوبی ذخیره می‌شود. برای دو استوانه مدور برابر که در معرض نیروی خارجی قرار ندارند، این انرژی توسط گلسمکر^۱ [۳۶] در سال ۲۰۰۴ به دست آمده است:

$$U_i^c = (L - l_i) \left(\frac{b}{2}\right) \Delta\gamma \quad (16-2)$$

در این رابطه، $(L - l_i)$ طول تماس را نشان می‌دهد، $\Delta\gamma$ انرژی اتصال و b نصف فاصله‌ی تماسی می‌باشد که در شکل (۲-۸ الف) نشان داده شده است.

در نانو لوله‌های کربنی به سبب پیوند واندروالس فضای تعادلی فرض شده بین نانو لوله‌ها، دچار کمی تغییر شکل می‌شود. فاصله‌ی تعادلی بین مراکز محوری نانو لوله‌های مجاور به هم، که بیشتر از قطر نانو لوله‌ی منفرد می‌باشد، به عنوان یکی از فاکتورهای ساختاری، جابجایی نانو لوله‌ها در دسته نانو لوله بررسی شده است.

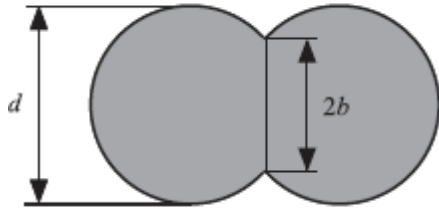
در این حالت انرژی تغییر شکل، تابع و نیازمند محاسبه‌ی منطقه‌ی تماس می‌باشد. همچنین برای مدل تئوری نانو مکانیک تغییر شکل موضعی توانسته است، سبب پیوندهای بین لوله‌ای نسبتاً کوچک گردد. از این رو با در نظر گرفتن $b=0$ و $U_i^c \approx 0$ همان طور که در آثار چن^۲ [۳۷] و زو^۳ [۳۸] نشان داده شده است، از این انرژی صرف نظر شده است.

ج- انرژی اتصال

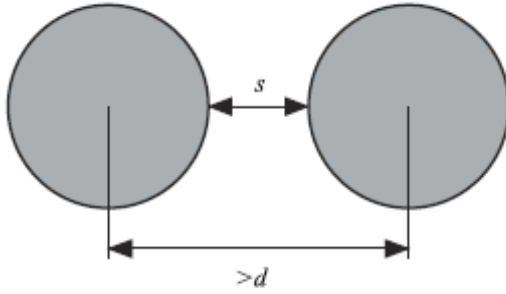
¹ - Glassmaker

² - Chen

³ - Zhou



الف) تماس با تغییر شکل موضعی



ب) تعادل غیر تماسی

انرژی اتصال نتیجه مستقیم پیوندهای واندروالس و جاذبه‌های اتمی بین نانو لوله‌های مجاور می‌باشد. انرژی چسبندگی می‌تواند در انرژی هر واحد سطح $\Delta\gamma$ زمانی که سطح تماس در نظر گرفته شده، یا انرژی هر واحد طول E_l در زمانی که تماسی در طول وجود ندارد، مورد استفاده قرار می‌گیرد.

شکل (۸-۲) - حالت‌های تماسی و غیر تماسی سطح انرژی تغییر شکل [۴۰]

برای تماس در شکل (۸-۲) از رابطه‌ی زیر استفاده شده است :

$$W_{adhesion} = -\Delta\gamma \times 2b \sum_{i=1}^n (L - l_i), \quad (17-2)$$

از طرف دیگر، $(L - l_i)$ طول تماس، $\Delta\gamma$ انرژی اتصال و b برای نیم فاصله‌ی سطح تماس استفاده شده است. برای حالت غیر تماسی در شکل (۸-۲) این رابطه اعمال شده است :

$$W_{adhesion} = -E_l \sum_{i=1}^n (L - l_i), \quad (18-2)$$

در آن E_l انرژی یا پیوند اتصالی برای هر واحد طول نانو لوله را نشان می‌دهد، که مقدار آن با شبیه-سازی اتمی معین می‌گردد.

د- شرایط تعادل

با تغییر شکل موضعی مینیمم، یا $U_i^c \approx 0$ و استفاده از انرژی اتصال برای هر واحد طول E_L ، انرژی آزاد شده، که در فرمول (۲-۱۴) بیان شده، به شکل ساده‌ی زیر تبدیل می‌شود:

$$W = \sum_{pairs} U_i^b - \sum_{pairs} E_L(L - l_i), \quad (19-2)$$

برای هر نانو لوله

$$\begin{aligned} W_i &= U_i^b - E_L(L - l_i) \\ &= \frac{6EI\Delta_i^2}{l_i^3} - E_L(L - l_i), \end{aligned} \quad (20-2)$$

برای هر دو نانو لوله در تماس بدست آمده است :

$$\frac{\partial W_i}{\partial l_i} = \frac{\partial}{\partial l_i} \left(\frac{6EI\Delta_i^2}{l_i^3} - E_L(L - l_i) \right) = 0, \quad (21-2)$$

که این هم نتیجه‌ی ارتباط بین انرژی اتصال E_L ، سختی نانو لوله EI ، فاصله بندی نانو لوله Δ_i و طول خمیدگی مورد نیاز l_i به دست آمده از نانو لوله‌ها می‌باشد:

$$l_i = \left[\frac{18EI\Delta_i^2}{E_L} \right]^{1/4} \leq L, \quad (22-2)$$

طول خمش (یا طول غیر تماسی) در تعادل، تابع یک متغیره از جابجایی خمشی Δ_i و علاوه بر آن وابسته به این دو ثابت (وابسته به نوع نانو لوله) می‌باشد: (۱) انرژی اتصال برای هر واحد طول، E_L و (۲) سفتی خمشی EI .

ه- شبیه سازی اتمی کامل

سلسله آزمایش‌های که توسط کرنفورد و همکارانش^۱ [۴۰] برای تعیین پارامترهای مورد نیاز برای نانو لوله‌ی یک درجه آزادی انجام شده است حاوی سه مرحله‌ی زیر می‌باشد: (۱) بار گذاری کششی برای تعیین مدول یانگ E ; (۲) اعمال گشتاور برای معین کردن سفتی خمشی EI ، و (۳) کنار هم قرار دادن دو نانو لوله برای تعیین کردن انرژی اتصال، E_L (انرژی اتصال برای هر واحد طول، هر دو نانو

^۱-Cranford et al.

لوله، یا هر دو ماکرو مولکول، بر پایه‌ی پیوند اصلی فیزیکی بین اتم‌ها یا مولکول‌ها پایا فرض شده است). سلسله آزمایش‌های آنان برای دو نوع نانو لوله به کار رفته است: (۱) نانو لوله تک دیواره آرمچیر (۵،۵)؛ (۲) نانو لوله دو جداره حاوی نانو لوله‌ی کربنی آرمچیر (۸،۸) با دیواره‌ی خارجی آرمچیر (۱۲،۱۲)، همان طور که به ترتیب در شکل‌های (۲-۳ الف) و (۲-۳ ب) نشان داده شده است. کرنفورد [۴۰] و همکارانش از پتانسیل ترشف برای توضیح پیوند درون لوله‌ها و پتانسیل لنارد-جونز برای توضیح پیوندهای بین لوله‌ای استفاده کرده‌اند. توضیح جزئیات بیشتر شبیه سازی‌های اتمی و نتایج نانو لوله‌های کربنی تک جداره در مقاله‌ی بوهرلر^۱ [۳۴] در سال ۲۰۰۶ آمده است. همان دستور العمل‌ها در اثر کرنفورد برای نانو لوله‌های چند جداره نیز استفاده شده است.



شکل (۲-۹) - مدل‌های تمام اتمی: (الف) (۵، ۵) نانو لوله‌ی تک دیواره‌ی آرمچیر (ب) نانو لوله‌ی کربن دو جداره (۸، ۸) دیواره‌ی داخلی و (۱۲، ۱۲) دیواره‌ی خارجی [۴۰].
 آزمایش کشش برای شکل‌گیری نانو لوله‌ها به وسیله‌ی ثابت کردن یک انتهای نانو لوله‌ها و استفاده از جابجایی انتهای دیگر در سرعت‌های مختلف به کار رفته است. نتایج ارتباط بین نیرو و جابجایی به ارتباط بین تنش و کرنش با فرض اینکه نیروی اعمالی به سطح مقطع گرد نانو لوله اعمال شود، بر می‌گردد. این روش استفاده شده مشابه روش استفاده بوهرلر در سال ۲۰۰۶ می‌باشد. مدول یانگ از رابطه زیر محاسبه گردیده است:

$$E = \frac{\partial \sigma}{\partial \varepsilon} \approx \frac{\Delta \sigma}{\Delta \varepsilon} \quad (2-23)$$

به طور مشابه، آزمایش خمش با ثابت کردن یک طرف نانو لوله و اعمال نیروی عرضی به سمت دیگر نانو لوله با اعمال خمش پایه، قابل اجراست. از طریق تئوری الاستیک تیر، سفتی خمشی با فرمول زیر

¹ - Buehler

محاسبه شده است:

$$EI = \frac{FL^3}{3\Delta}, \quad (2-24)$$

برای شبیه سازی جاذبه‌ی بین سطحی، دو نانو لوله را به یکدیگر نزدیک می‌کردند و سپس از یکدیگر جدا می‌کردند، با روش مینیمم کردن انرژی در فاصله‌های گسسته با یکدیگر، شبیه سازی آنان انجام گرفته است. فضای تعادل در موقعیت مینیمم انرژی در نظر گرفته شده است. جدول (۲-۳) نتایج تمام شبیه سازی‌های اتمی را به طور خلاصه نشان می‌دهد.

جدول (۲-۳) : خلاصه نتایج شبیه سازی‌های تمام اتمی (برای هندسه‌ی خاص نانو لوله‌ی کربن) [۴۰].

پارامتر	مقدار	واحد
1.SWCNT		
Young modulus E	2.0×10^{12}	N/m ²
.Bending stiffness EI	6.65×10^{-26}	Nm ²
2.DWCNT		
Young modulus E	1.3×10^{12}	N/m ²
.Bending stiffness EI	8.30×10^{-26}	Nm ²
3.Adhesion Energy and Equilibrium spacing*		
SWCNT(5,5)	2.31×10^{-10}	J/m
	13.1	Å
DWCNT (8,8) -(12,12)	3.30×10^{-10}	J/m
	22.1	Å

انرژی اتصال برای هر واحد طول معین تعریف شده است. فاصله بندی تعادلی در بررسی کرنفورد به عنوان فاصله‌ی مرکز به مرکز دیواره‌های نانو لوله‌های مجاور به هم تعریف گردیده است. انرژی اتصال برای نانو لوله‌های بزرگتر ممکن است تحت تأثیر اثرات اضافی از قبیل فشردگی نانو

لوله‌های کربن، که آن هم سبب افزایش بیشتر انرژی چسبندگی شود، قرار گیرد. این اثرات در مدل آنان در نظر گرفته نشده و نتایج آنها تنها برای هندسه‌ی نانو لوله‌های کربن معرفی شده، معتبر می‌باشد.

۲-۴-۲- مدل Bead-Spring [۴۰]

روش مزوسکوپی^۱ (bead-spring) یک روش قابل پیشرفت در شبیه سازی آرایش نانو لوله‌های کربن می‌باشد که توسط بوهرلر در سال ۲۰۰۶ و کرنفورد و بوهرلر در سال ۲۰۰۹ آزمایش شده‌اند. این مدل مستقیماً از گسترش شبیه سازی‌های اتمی به دست آمده است؛ اما این روش‌ها هنوز به صدها و هزاران نانو لوله در یک آرایش مخصوص نانو لوله محدود می‌باشد. مدل Bead-Spring ابزار مناسبی برای تأیید معادلات توضیح داده شده در قسمت مدل تئوری نانو مکانیک می‌باشد؛ پایه‌ی مدل مزوسکوپی با تابع انرژی کلی، سیستم بیان شده است :

$$\Phi_{System} = \Phi_T + \Phi_B + \Phi_{weak} \quad (25-2)$$

در آن Φ_T انرژی شیمیایی ذخیره شده در پیوندهای شیمیایی به واسطه انبساط طولی، Φ_B انرژی که سبب خمش شده است، Φ_{weak} انرژی که سبب ایجاد پیوندهای ضعیف می‌گردد تعریف شده‌اند. توزیع انرژی کلی برای هر سیستم، به وسیله‌ی جمع زدن انرژی تمام اجزا در تمام فاصله‌ها و تمام پیوندهای سه گانه یا زاویه‌ای بین آنها درون سیستم محاسبه شده است، که با فرمول زیر بدست می‌آید :

$$\Phi_T(r) = \frac{1}{2} K_T (r - r_0)^2, \quad (26-2)$$

در آن K_T ضریب فنریت وابسته به فاصله‌ی r بین دو جزء می‌باشد. برای خمش، انرژی خمشی به وسیله جمع کردن تمام پیوندهای سه گانه‌ی درون سیستم به دست می‌آید:

$$\Phi_B(\varphi) = \frac{1}{2} K_B (\varphi - \varphi_0)^2, \quad (27-2)$$

^۱ -Meso-scale

در آن K_B ضریب فنریت وابسته زاویه‌ی خمش φ ، بین سه جزء می‌باشد. پیوند ضعیف و اندروالس توسط تابع لنارد- جونز تعریف شده است:

$$\Phi_{weak}(r) = 4\varepsilon_{LJ,*} \left(\left[\frac{\sigma_{LJ,*}}{r} \right]^{12} - \left[\frac{\sigma_{LJ,*}}{r} \right]^6 \right), \quad (2-28)$$

در آن r فاصله‌ی اتمی، $\varepsilon_{LJ,*}$ مینیمم انرژی تعادل و $\sigma_{LJ,*}$ فاصله‌ی است که انرژی تابع لنارد- جونز به مینیمم خود می‌رسد.

بنابر این مدل مزوسکوپیک توسط شش پارامتر $K_T, r_0, K_B, \varphi_0, \sigma_{LJ,*}, \varepsilon_{LJ,*}$ تعریف شده است. نتایج شبیه‌سازی اتمی این مدل برای تعیین شش پارامتر از طریق شرایط تعادل $(\sigma_{LJ,*}, \varphi_0, r_0)$ و بقای انرژی $(K_T, K_B, \varepsilon_{LJ,*})$ مورد استفاده قرار گرفته است. برای توضیح جزئیات بیشتر مشتقات پارامترها، به مرجع [۳۴] مراجعه شود. تمام پارامترها منحصراً از نتایج اتمی در جدول‌های (۲-۳) و (۲-۴) تعریف شده‌اند. باید به این نکته توجه داشت که فرمول بندی استفاده شده آنان در پتانسیل‌های هارمونیک ساده، تنها برای تغییر شکل‌های کوچک مناسب می‌باشد.

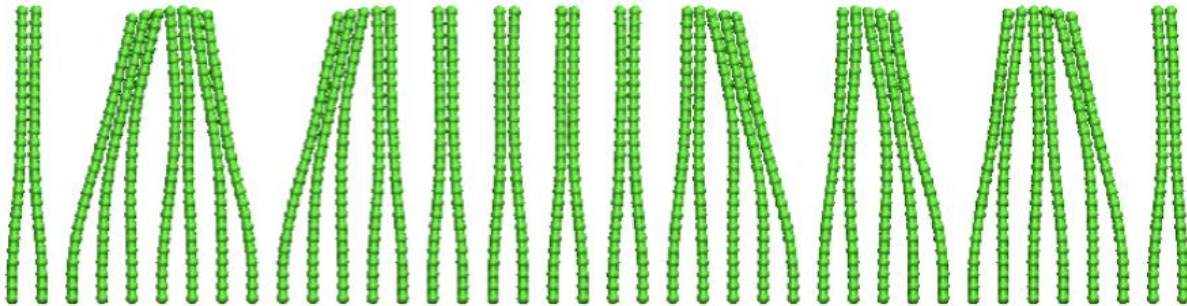
شبیه‌سازی‌های این مدل با کد مدل سازی ثابت LAMMPS که توسط پلیمپتون^۱ [۴۱] در سال ۱۹۹۵ ارائه شده انجام شده است. چون این مدل سازی با کد LAMMPS انجام شده است، قادر به محاسبات زیاد در درون دسته‌ها می‌باشد.

جدول (۲-۴) - خلاصه‌ی پارامترهای Bead-spring برای مدل مسوسکوپیک [۴۰].

پارامتر	SWCNT(5,5).	DWCNT(8,8) -(12,12)
K_T	1000 kcal/mol/Å ²	1880 kcal/mol/Å ²
r_0	10 Å	20 Å
K_B	14,300 kcal/mol/Å ²	90,000 kcal/mol/Å ²
φ_0	180°	180°
$\sigma_{LJ,*}$	9.35 Å	19.7 Å
$\varepsilon_{LJ,*}$	15.1 kcal/mol	3.2 kcal/mol

¹ - Plimpton

پارامترهای ارائه شده در این قسمت تنها برای مدل‌های هندسی خاص CNT معتبر می‌باشد. شبیه سازی‌ها، آرایش نانو لوله‌های حاوی صدها المان bead-spring در مقیاس کوچک بررسی کرده‌اند، شکل (۲-۱۰) آرایش نانو لوله‌ها را نشان می‌دهد.



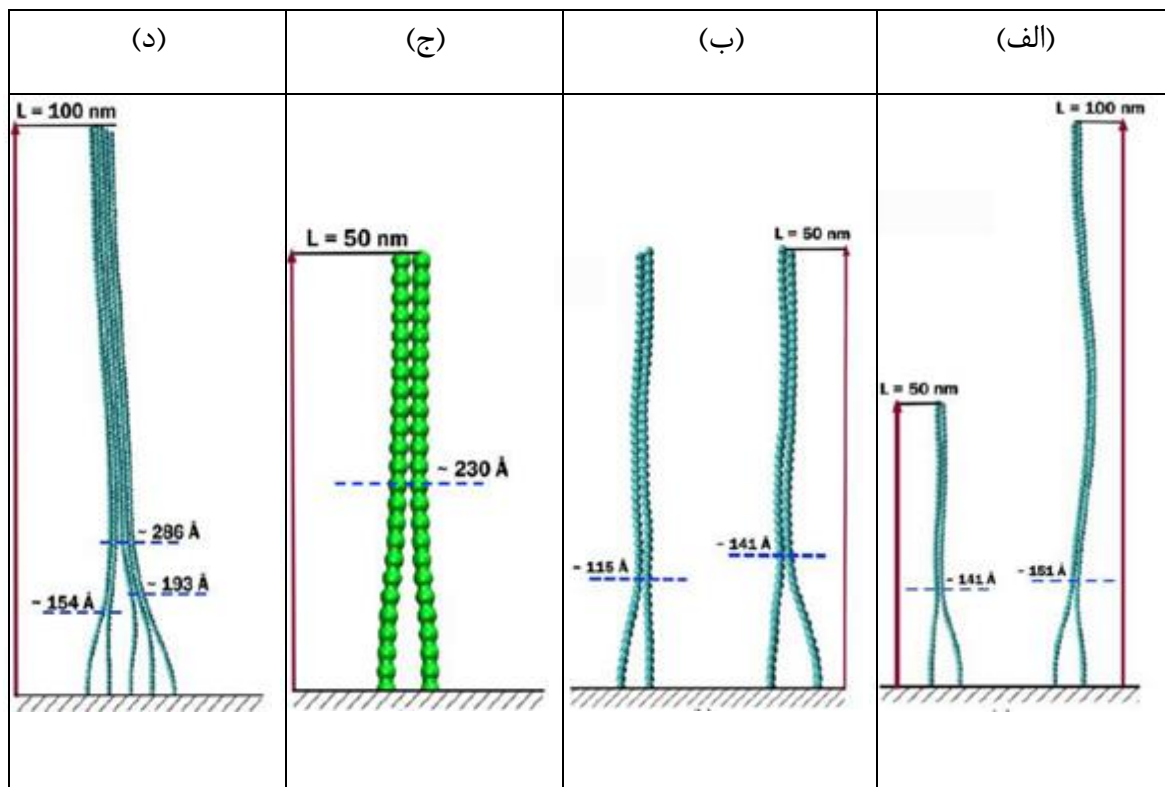
شکل (۲-۱۰) - شبیه سازی نانو لوله‌ی در مقیاس مسو Bead-spring، ۴۰ نانو لوله‌ی دو جداره (با ارتفاع ۵۰ nm و فاصله بندی ۵ nm)، گرایش نانو لوله‌ها به دسته شدن با پیوند واندروالسی را نشان می‌دهد [۴۰].

در شبیه سازی Bead-spring آنان بر روی این موارد تأکید شده است: (۱) وابستگی طول خمش به نسبت طول کلی نانو لوله؛ (۲) ارتباط بین جابجایی‌های خمشی و طول به هم چسبیده؛ (۳) اختلاف مؤثر بین سفتی خمشی و استحکام اتصال نانو لوله‌ی تک جداره در مقایسه با نانو لوله‌ی چند جداره.

مدل سازی بر روی دو جفت نانو لوله‌ی تک جداره (۵،۵) انجام شده است. در دو نانو لوله‌ی اول طول نانو لوله ۵۰ nm، در حالی که دو نانو لوله‌ی دیگر دارای طول ۱۰۰ nm می‌باشند. هر دو جفت در فاصله ۵ nm از یکدیگر قرار می‌گیرند، در صورتی که فاصله‌ی خمش مورد نیاز $\Delta = 2,5 \text{ nm}$ می‌باشد. با استفاده از معادله‌ی (۲-۲۲) طول خمش تقریباً برابر 134 \AA محاسبه شده است. شبیه سازی‌های آن‌ها، همان طور که در شکل (۲-۱۱) نشان داده شده است، به ترتیب، طول خمش را 141 \AA و 151 \AA برای اولین و دومین دوتایی را نشان می‌دهند. انحراف ناچیز مقدار محاسبه شده به بی‌تقارنی خمش نانو لوله‌ها نسبت داده می‌شود. هنگامی که جابجایی خمشی یکی از نانو لوله‌ها افزایش یابد ($\Delta > 2,5 \text{ nm}$)، نانو لوله به افزایش طول خمش نیازمند است.

برای تأیید جابجایی های مورد نیاز، فاصله ی نانو لوله ها بین ۳nm تا ۵nm بررسی شده است. نتایج دسته ی، دو تایی نانو لوله ی منفرد (۵،۵) با ارتفاع ۵۰nm در شکل (۲-۱۱) نشان داده شده است. طول محاسبه شده ی خمشی 104 \AA برای فاصله بندی ۳nm و طول 134 \AA برای فاصله بندی ۵nm، در مقایسه با نتایج به دست آمده از نانو مکانیک به ترتیب برابر 115 \AA و 141 \AA می باشند. هم چنان که پیش از این گفته شد، انحراف ناچیز مقدار محاسباتی مربوط به خمش جفت نانو لوله ها می باشد.

در نهایت، یک جفت نانو لوله ی دو جداره با هندسه برابر با دو نانو لوله ی تک جداره که هر دو دارای طول ۵۰nm و در فواصل مساوی ۵nm می باشند. با هم مقایسه شده اند. همان طور که در شکل (۲-۱۱) نشان داده شده است. بر اساس یافته های بوهرلر [۴۰] زمانی که نانو لوله های چند جداره به صورت دو تایی شبیه سازی می شوند، افزایش در جابجایی برای نانو لوله های بیرونی نسبت به مرکز نانو لوله نیازمند به افزایش در طول خمشی می باشد.



شکل (۲-۱۱) - تأیید نتایج شبیه سازی مقیاس مزو با مدل تئوری نانو مکانیک : (الف) طول متفاوت (۵، ۵) SWCNT برای دو جفت (۵۰nm و ۱۰۰nm)، (ب) فاصله‌ی متفاوت بین لوله‌ها در (۵، ۵) SWCNT (در طول ۵۰nm فاصله‌ی بین لوله‌ها بین ۳nm تا ۵nm)، (ج) DWCNTs با طول ۵۰nm و فواصل مساوی ۵nm و طول خمش 230 \AA ، (د) شکل دسته، SWCNTs با طول ۱۰۰nm و فواصل مساوی ۵nm [۴۰].

خط چین‌ها و اعداد از مدل نانو مکانیک تئوری گرفته شده‌اند. مطابقت بین نتایج شبیه سازی و مدل Bead-spring در شکل (۲-۱۱) دیده می‌شود. آنان هم چنین دریافتند که دسته‌های منظم تحت شبیه سازی‌های نسبتاً طویل پایدار می‌باشند.

۲-۴-۳- مدل Lollipop یک درجه آزادی (SDOF)

الف- مدل Lollipop برای تشکیل دادن دسته نانو لوله‌ها با یک درجه آزادی

این مدل توسط کرنفورد و همکارانش^۱ [۴۰] در سال ۲۰۰۹ ارائه گردیده است. قسمت مهم در توسعه‌ی مدل (lollipop) یک درجه‌ی آزادی، نمایش نانو لوله‌هایی است که قادر به شبیه سازی نظم ساختاری دسته‌های بزرگ نانو لوله‌های کربن می‌باشند. آنان با استفاده از خصوصیات تعیین شده‌ی نانو مواد با روش‌های اتمی به بررسی شکل‌گیری، مکانیک و نظم ساختاری دسته نانو لوله‌ها پرداختند. مدل یک درجه آزادی SDOF مستقیماً با شبیه سازی‌های اتمی، بدون نیاز به توسعه‌ی مدل Bead-Spring توسعه یافته است. شبیه سازی این مدل دارای اهداف دوگانه زیر است: اول، برای شکل دسته، نمونه‌های ترکیبی در مقیاس نسبتاً بزرگ تأیید شده باشند، و دوم، بررسی مؤثر قابلیت، با مهارت شکل دادن دسته نانو لوله‌ها درون آرایش‌های بزرگ نانو لوله می‌باشد، که با معرفی تغییرات هندسی بر روی المان‌های ساختاری و هندسی بدست می‌آیند. در این مدل بررسی‌های پارامتریک مرتبط با طول نانو لوله، فاصله بندی، قطرها و دیگر پارامترهای ساختاری و فیزیکی که به سرعت بتواند اشکال دسته نانو لوله‌ها را با مهارت تکمیل کند و به سطح منحصر به فردی از خصوصیات مکانیکی، آرایش‌های نانو لوله دست یابد نیز بررسی شده است. این روش می‌تواند در نانو ساختارهای جدید نیز مورد استفاده قرار گیرد.

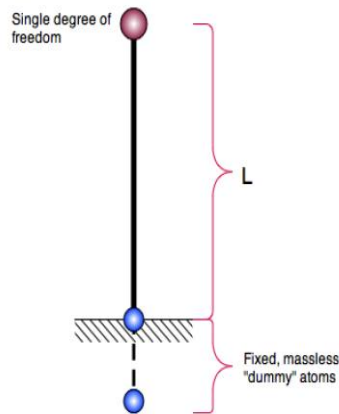
^۱ - Cranford et al.

با استفاده از پارامترهای مواد که به روش اتمی تعیین می‌شدند و همچنین مدل Lollipop نانو لوله‌های کربنی و با در نظر گرفتن نیروی واندروالس ضعیف بین نانو لوله‌ها در دسته، آنان توانستند به مطالعه بر روی ردیف‌های حاوی صدها هزار نانو لوله بپردازند. آنان همچنین مفاهیم پارامترهای نانو لوله‌ها، از قبیل: ضریب ظاهری، سفتی خمشی و انرژی سطح بر روی شکل و اندازه دسته‌ها، شکل عمودی دسته، را مورد بررسی قرار دادند. نانو لوله‌های تک جداره و دو جداره با نسبت ظاهری متفاوت و هم چنین توزیع چگالی داخلی دسته نانو لوله‌ها نیز توسط آنان مورد بررسی قرار گرفت. علاوه بر کاربرد نانو لوله‌ها، مدل آنان همچنین توانست برای آرایش‌های مختلف نانو لوله‌ها مورد استفاده قرار گیرد.

نکته‌ی دیگری که می‌توان به آن اشاره کرد این است که مدل SDOF از مدل Bead-Spring به دست نیامده است. شکل (۲-۱۲) به طور مشابه مدل SDOF با یک تابع انرژی کلی سیستم که در معادله‌ی (۲-۲۶) و یا معادله‌ی زیر بیان شده است را نشان می‌دهد:

$$\phi_{System} = \phi_T + \phi_B + \phi_{weak}, \quad (2-29)$$

اگر چه برخلاف مدل ما بین میکروسکوپی و ماکروسکوپی Bead-Spring، که پتانسیل‌ها برای نانو لوله در یک روش چند تابعی توسعه یافته است، فرمول بندی هر واحد مدل، SDOF یک نانو لوله کلی در نظر گرفته شده است. مدل آنان حاوی سه جزء می‌باشد؛ اگر چه دو جزء آن، اجزا بدون جرم تصنعی ثابت می‌باشند (همان طور که در شکل (۲-۱۲) نشان داده شده است) ولی بر روی فرایندهای شبیه سازی اثری ندارند.



شکل (۲-۱۲) - مدل یک درجه آزادی نانو لوله‌های کربن lollipop یک نانو لوله همگن با طول L به وسیله‌ی یک جزء منفرد را نشان می‌دهد [۴۰].

ب- جفت پتانسیل و سختی ساختاری

در مدل SDOF برای رفتار محوری از یک پتانسیل هارمونیک ساده استفاده شده است، که توسط معادله‌ی زیر بیان می‌شود:

$$\Phi_T(L) = \frac{1}{2} K_T (L - L_0)^2, \quad (30-2)$$

همان طور که دیده می‌شود، پتانسیلی که بر حسب طول کلی نانو لوله، L_0 برابر طول بی بار لوله و L به نمایندگی از طول کنونی لوله فرمول بندی شده است. از طرف دیگر تغییر شکل‌های کوچک در شکل بندی دسته نانو لوله بر روی کرنش‌های بزرگ محوری اثری نداشته است.

ج- سختی‌های خمشی و پیچشی

پتانسیل هارمونیک ساده، انرژی خمشی را نشان می‌دهد، علاوه بر آن پتانسیل دیگری با استفاده از تئوری تیر برای یک تیر دو سر گیردار شکل (۲-۱۱ الف) نیز فرمول بندی شده است. طول تیر به عنوان طول خمش هر نانو لوله (l_i) در نظر گرفته و گشتاور خمشی به کار رفته در دو انتهای ثابت به صورت زیر تعریف شده است:

$$M = \frac{6EI\Delta}{l_i^2}, \quad (31-2)$$

در این صورت نیروی معادل به شکل زیر در نظر گرفته می‌شود:

$$F = \frac{M}{l_i}, \quad (32-2)$$

آنان همچنین نشان دادند که انرژی خمشی این فرمول بندی با انرژی خمشی نشان داده شده در معادله‌ی (۱۵-۲) یکسان می‌باشد. سپس ارتباط نیرو با زاویه‌ی کلی که سبب جابجایی خمشی می‌شود را با فرمول زیر بیان کردند. از شکل (۲-۱۱-ب) دیده می‌شود:

$$\frac{\Delta}{L} = \tan \theta = \frac{1}{L} \frac{Fl_i^3}{6EI}, \quad (33-2)$$

در آن L طول کلی نانو لوله و عبارت است از:

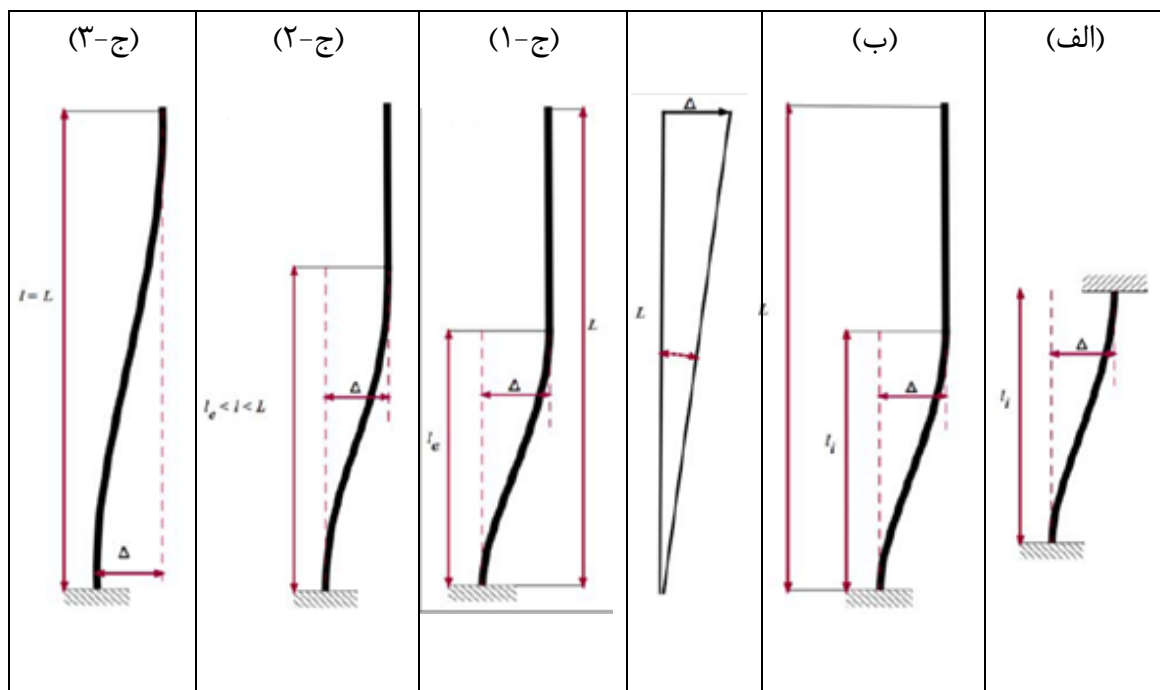
$$F = \left[\frac{6EIL}{l_i^3} \right] \tan \theta, \quad (34-2)$$

$$F = \left[\frac{6K_b L}{l_i^3} \right] \tan(\varphi - \varphi_0), \quad (35-2)$$

در این عبارت l_i را طول خمش مورد نیاز برای محاسبه‌ی معادله‌ی (۲-۲۲) در نظر گرفتند. L طول کلی نانو لوله، k_b سختی‌های خمشی نانو لوله کامل (به صورت تئوری برابر است با EI ، که برای تشخیص از سختی خمشی الاستیک به کار می‌رود)، φ زاویه‌ی نانو لوله، و φ_0 زاویه‌ی تعادل در نظر گرفته شد ($\varphi_0 = 180^\circ$).

قبل از دسته شدن، نانو لوله‌ها از نظر خمش در حالت اختیاری، آزاد می‌باشند. در نتیجه کرنفورد و همکارانش با استفاده از مقاومت خمشی و سختی خمشی به عنوان یک پارامتر محدود کننده برای شکل دسته و تمایل نانو لوله‌ها به دسته شدن توانستند با فرمول بندی مناسب، رابطه‌ی نیروی خمشی را بدست بیاورند. هنگامی که مقاومت خمشی به طور معکوس با طول خمش متناسب است، چنین بر می‌آید که، طول خمش به طول کلی نانو لوله نزدیک می‌گردد و نیرو به مینیمم خود نزدیک می‌شود. به سبب چسبندگی نانو لوله‌ها، زمانی که نانو لوله‌های نزدیک به هم، از هم جدا می‌شوند فرض کردند که طول خمش به طول کلی نزدیک می‌شود، همان طور که در شکل (۲-۱۳ج) نشان داده شده است.

$$F_{min} = \left[\frac{6K_b}{L^2} \right] \tan(\varphi - \varphi_0), \quad (36-2)$$



شکل (۲-۱۳) - فرضیات تئوری تیر: (الف) تیر دو سر ثابت، (ب) دارای زاویه‌ی تقریبی خمش، (ج) دارای تغییر طول خمش l ، با تطابق دسته: (۱) نانو لوله در شکل دسته، با طول تعادل برابر، (۲) شکل اولیه، با طول خمش $l_e < l < L$ (۳)، شکل نهایی پیوسته با طول خمش برابر با طول کلی $l = L$. [۴۰]

بنابر این نیروی خمش به جای دو پارامتر معین پتانسیل خمشی (φ_0 و K_b) در مدل bead-

spring، به سه پارامتر φ_0 ، K_b و L وابسته شده است. با افزایش طول نانو لوله، مقاومت آن نسبت به

خمش تغییر می‌یابد و سختی خمشی کلی نانو لوله کاهش می‌یابد.

د- پیوند اتصال

کرنفورد و همکارانش پیوندهای واندروالس بین دو نانو لوله‌ی کربنی را از روش پتانسیل لنارد- جونز به دست آوردند. در مدل SDOF، پیوند بین مناطق غیر تماسی در نانو لوله‌ها را قابل چشم پوشی فرض کردند. بر اساس مدل آن‌ها برای اتم کربن، هنگامی که فاصله‌ی اتم‌ها از یک نانو متر عبور کند نیروی واندروالس در نظر گرفته نمی‌شود [۴۲]. با استفاده از تغییر شکل خمشی مقطع عرضی تیر الاستیک مفروض، افزایش در انرژی پیوند برای فاصله‌ی مرکز به مرکز ۱ تا ۴ نانومتر به طور عددی محاسبه شده است، از پارامترهای سختی خمشی و انرژی چسبندگی برای نانو لوله‌ی کربنی (۵،۵) تک جداره با طول ۵۰ nm استفاده شده است. ماکزیمم افزایش انرژی پتانسیل تقریباً ۷٪ زمانی است که نانو

لوله‌ها تقریباً نزدیک به یکدیگر باشند. هنگامی که نانو لوله‌ها در فاصله‌ی بیشتر از ۲nm قرار گرفته باشند، افزایش افت پتانسیل به کمتر از ۳٪ رسیده است [۴۳].

در منطقه‌ی تماس در فاصله‌ی تعادل، انرژی تعادل را این چنین در نظر گرفتند:

$$\varepsilon_{LJ}^* = \frac{1}{2} E_L L, \quad (37-2)$$

$$\varepsilon_{LJ} = \mu \times \varepsilon_{LJ}^*, \quad (38-2)$$

در آن μ پارامتر تعریف شده به وسیله‌ی طول تماس می‌باشد :

$$\mu = \frac{L - l_i}{L}, \quad (39-2)$$

در آن L طول کلی نانو لوله، E_L انرژی چسبندگی هر واحد طول و l_i طول خمش برای هر

لوله در نظر گرفته شده است، هم چنان که در معادله‌ی (۲-۲۲) محاسبه شده است. این نتایج در پتانسیل لنارد-جونز اصلاح شده‌اند:

$$\Phi_{weak}(r_{ij}) = 4\mu\varepsilon_{LJ}^* \left(\left[\frac{\sigma_{LJ}}{r_{ij}} \right]^{12} - \left[\frac{\sigma_{LJ}}{r_{ij}} \right]^6 \right), \quad (40-2)$$

در (۲-۴۰) Γ و σ_{LJ} همان تعریف قبل را دارند ، μ به وسیله‌ی معادله‌ی (۲-۳۹)، و ε_{LJ}^* از معادله‌ی (۲-۳۷) به دست می‌آید.

ه- روش محاسباتی

مدل SDOF با استفاده از ویرایش اصلاح شده کد LAMPS که در سال ۱۹۹۵ توسط پیلیمپتون ارائه شده است، مدل سازی شده است. کد لمپس برای اجرای پیوندهای بین نانو لوله‌ها که در ابتدای این مدل توضیح داده شده است، توسعه یافته است. زیرا دارای تفاوت قابل توجهی با انجام دینامیک مولکولی مرسوم را دارد. در این مدل، آرایش‌ها با دوره‌ی زمانی ۱۰fs، با زمان کلی ۵ns شبیه سازی شده‌اند. اگر چه شبیه سازی مولکولی نسبتاً کوتاه مدت هستند؛ ولی برای بررسی و صرفاً برای رسیدن به تعادل و اجرا به زمان طولانی نیاز دارد. هم چنان که بیان شد، تعدادی از پارامترها تابعی از طول نانو لوله‌ی مدل می‌باشند، جدول (۲-۵) پارامترهای نانو لوله‌ها با طول ۱۰۰۰nm را نشان می‌دهد. در

مدل آنان نانو لوله‌ها در خلأ شبیه سازی شده‌اند و به موجب آن از هر گونه اثرات سطح و یا آرایش زیر لایه^۱ صرف نظر کردند.

جدول (۲-۵) - خلاصه‌ی پارامترهای مدل یک درجه آزادی Lollipop با طول ۱۰۰۰nm [۴۰]

پارامتر	SWCNT(5,5)	DWCNT(8,8) -(12,12)
K_T	1.000.000 kcal/mol/Å ²	1880.000 kcal/mol/Å ²
r_0	10 Å	1000 Å
K_B	95.800 kcal/mol) - Å	1.195.600 kcal/mol) - Å
φ_0	180°	180°
L	10000Å	10000Å
E_L	$2.31 \times 10^{-10} J/m$	$3.30 \times 10^{-10} J/m$
σ_{LJ}	9.35Å	19.7Å
ε_{LJ}^*	16625 kcal/mol	23750 kcal/mol

پارامترهای ارائه شده در اینجا تنها برای مدل‌های هندسی CNT خاص معتبر می‌باشند.

۲-۵- خواص کششی و فشاری دسته نانو لوله‌های کربنی

کمانش نانو لوله‌های کربنی اولین بار توسط یاکوبسن^۲ [۴۰] در سال ۱۹۶۶ مورد بررسی قرار گرفت. او با استفاده از تئوری مکانیک پیوسته و اعمال پتانسیل برنر نتایجی را برای بار بحرانی کمانش بدست آورد. لی و چو [۱۰] در سال ۲۰۰۴ اولین مدل ساختاری را برای تحلیل کمانش نانو لوله‌های کربنی به کار بردند. هو [۴۱] در سال ۲۰۰۷ با استفاده از مدل ساختاری خود به تحلیل کمانش نانو لوله‌های کربنی پرداخت. کسین^۳ [۴۲] در سال ۲۰۰۷ با استفاده از روش دینامیک مولکولی به بررسی اثرات طول، عیوب تهی جای و دما بر روی بار بحرانی و داخل صفحه‌ای پرداخت.

ونگ^۴ [۴۳] در سال ۲۰۰۸ با استفاده از یک مدل ترکیبی پیوسته-مولکولی، به بررسی بار و کرنش‌های کمانش پرداخت. پروانه و شریعتی در سال ۲۰۰۹ با مدل ساختاری جدید که در آن از رابط‌های غیر خطی محوری برای مدل کردن برهم‌کنش‌های پیوندی کشش و پیچش استفاده شده

¹ - substrate

² - Yakobson

³ - Xin

⁴ - Wang

است و همچنین با استفاده از المان فنر غیر خطی محوری برای مدل کردن برهم‌کنش‌های پیوندی تغییر زاویه استفاده شده است را ارائه داده‌اند و کمانش نانو لوله‌ی منفرد را مورد بررسی قرار دادند [۵۰]. تنها بررسی که بر روی خواص کششی و فشاری دسته نانو لوله‌ها انجام شده است تحلیل آقای لی و همکارانش [۴۸] می‌باشد.

۲-۵-۱- مدل محاسباتی لی و همکارانش^۱ در سال ۲۰۰۶ [۴۸]

لی و همکارانش با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی خواص کششی و فشاری دسته نانو لوله‌ها را با مدل کردن پتانسیل برنر همراه با پتانسیل واندروالس بدست آوردند. در مدل آنان، از پتانسیل برنر استفاده شده است، که در آن $V_A(r)$ و $V_R(r)$ به ترتیب جفت ترم‌های دافع و جاذب می‌باشند. و \bar{b}_{ij} مرتبه‌ی پیوند واکنشی و تجربی بین اتم‌ها می‌باشد. برای مدل لی پیوندهای واندروالس درون و بین نانولوله‌های کرین اعمال شده‌اند. لی، پتانسیل اصلی برنر در معادله‌ی (۲-۴۶)، را با پتانسیل لنارد جونز توسعه داده و عبارت ترکیبی محاسبه شده (۲-۴۴) را بدست آورده است:

$$E_{REBO} = V_R(r_{ij}) - \bar{b}_{ij}V_A(r_{ij}), \quad (۲-۴۳)$$

$$E_{TOT} = \sum_i \sum_{i>j} [E_{REBO} + E_{vdw}], \quad (۲-۴۴)$$

که در آن E_{vdw} به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$E_{vdw} = \begin{cases} 0 & r_{ij} < r'_s \\ c_{3,k}(r_{ij} - r_k)^3 + c_{2,k}(r_{ij} - r_k)^2 & r'_s \leq r_{ij} < r'_m \\ E^{LJ}(r_{ij}) & r_m \leq r_{ij} < r'_b \end{cases} \quad (۲-۴۵)$$

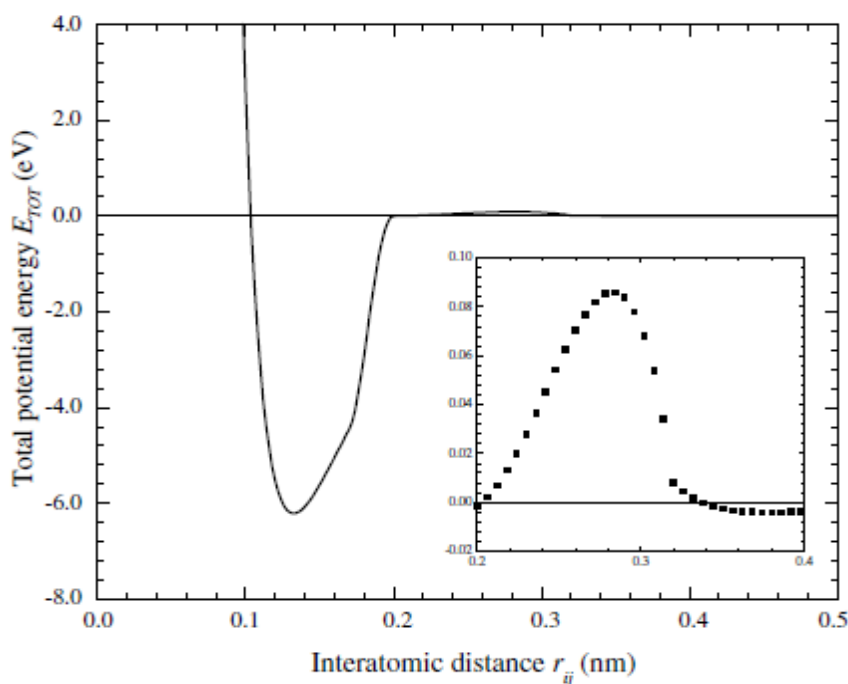
$c_{n,k}$ ضریب اسپلین فضایی $r'_s = 0,2 \text{ nm}$ ، $r'_m = 0,32 \text{ nm}$ ، $r'_b = 1,0 \text{ nm}$ می‌باشد. E^{LJ} به عنوان پتانسیل

لنارد جونز تعریف شده است که به صورت زیر محاسبه می‌گردد:

^۱ - Liew

$$E^{LJ} = 4\xi \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right] \quad (2-46)$$

در آن ξ پارامتر عمق چاه و برابر $4,55 \text{ meV}$ و σ برابر $0,3367 \text{ nm}$ و به عنوان قطر برخورد بین دو اتم تعریف شده است. در مدل دینامیک مولکولی لی، پتانسیل واندروالس تنها زمانی که پتانسیل برد کوتاه باشد برای مثال برای $r_{ij} < 0,2 \text{ nm}$ ، صفر در نظر گرفته شده است. شکل (2-14) انرژی کلی جفت اتم‌های کربن در فواصل مختلف را نشان می‌دهد. هنگامی که r_{ij} کمتر از $0,2 \text{ nm}$ باشد، پتانسیل توسط معادله (2-44) محاسبه گردیده. زمانی که $0,2 \text{ nm} \leq r_{ij} < 0,32 \text{ nm}$ پتانسیل به یک پتانسیل تدافعی تبدیل شده و با تابع سپلاین فضایی (2-45) محاسبه می‌گردد. در انتها زمانی که $0,32 \text{ nm} \leq r_{ij} < 1$ باشد، پتانسیل توسط معادله (2-46) به دست آمده است.



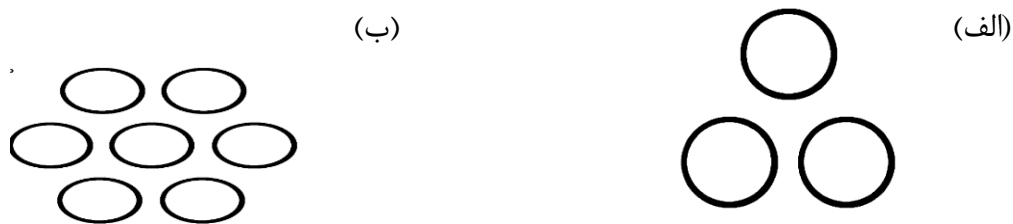
شکل (2-14) - انرژی پتانسیل کلی یک جفت اتم کربن به عنوان یک تابع از فاصله‌ی بین اتمی r_{ij} را رسم کرده است. نمودار درونی مقادیر بین را نشان می‌دهد [48].

در تحلیل لی، با به کار گرفتن پتانسیل برنر با محاسبه‌ی انرژی کرنشی هر اتم نانو لوله‌ی کربن (8، 0) و مقایسه‌ی آن با نتایج صریواستوا¹ [49] صحت آن بررسی شده است. در این مطالعه،

¹ - Srivastava

آنالیز بدون در نظر گرفتن کنترل دمایی انجام گرفته است. در شبیه سازی دینامیک مولکولی معادلات حرکت با الگوریتم پیش بینی و تصحیح کننده کامل می‌شوند، هنگامی که کشش و فشار محوری دسته نانو لوله کربن با استفاده از نرخ ثابت 20 m/s در هر دو انتها ساخته می‌شوند. هر شبیه سازی دارای مجموع 25000 مرحله‌ی زمانی و هر مرحله‌ی زمانی شبیه سازی برابر 1 fs می باشد.

شکل (۲-۱۵) شماتیک دو دسته نانو لوله‌ی کربن در دینامیک مولکولی را نشان می‌دهد. دسته نانو لوله‌های کربن حاوی سه و یا هفت نانو لوله‌ی کربن منفرد که در کنار یکدیگر در یک ردیف قرار گرفته‌اند. در شبیه سازی دینامیک مولکولی، اندازه‌های مختلفی از دسته نانو لوله‌ها مورد استفاده قرار گرفته‌اند. این اندازه‌ها به وسیله اندازه نانو لوله منفرد تعیین می‌شوند.



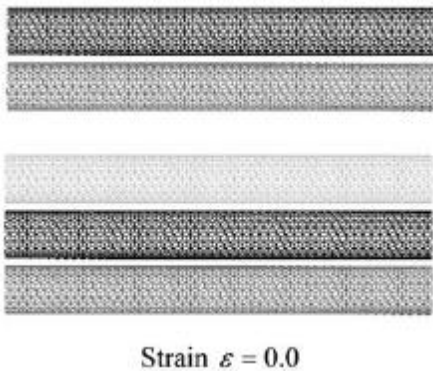
شکل (۲-۱۵)- شماتیک سطح مقطع را نشان می‌دهد. (الف) دسته نانو لوله کربن سه تایی و (ب) دسته نانو لوله‌ی هفت تایی، نانو لوله‌ها در دسته دارای فواصل مساوی می‌باشند.

۲-۵-۲- دسته‌های نانو لوله‌های کربن تحت کشش محوری

در شبیه سازی‌های دینامیک مولکولی دسته نانو لوله‌های کربن، تحت کشش محوری، تماماً از چهاردسته با نانو لوله‌های منفرد با نام‌های (۵،۵) و (۷،۷) و (۱۰،۱۰) و (۱۲،۱۲) استفاده شده است. اختلاف فاصله بین نانو لوله‌های منفرد در 0.34 nm ثابت شده‌اند. در طی بار گذاری کششی، دسته نانو لوله‌های کربن تحت تغییر شکل‌های ساختاری همان‌طور که در شکل (۲-۱۵) نشان داده شده است قرار می‌گیرند. شکل (۲-۱۵) نشان می‌دهد که هیچ تغییر شکل ساختاری در هر دو دسته نانو لوله‌ی کربنی سه تایی و هفت تایی (۱۰ و ۱۰) در کرنش صفر وجود ندارد. زمانی که دسته نانو لوله-

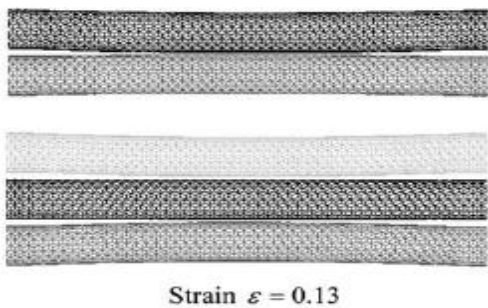
های کربن مجدداً تحت نیروی کششی همان طور که در شکل (۲-۱۶) نشان داده شده قرار می‌گیرند، در کرنش $\varepsilon = 0.13$ دسته نانو لوله‌های کربن تمایل به منقبض شدن در امتداد قطرشان را دارند. در کرنش $\varepsilon = 0.266$ هر دو دسته شروع به شکستن می‌کنند قبل از اینکه کاملاً از هم جدا گردند. شکل (۲-۱۶) بارهای شکست P_{f1} در اندازه‌های مختلف دسته نانو لوله‌های سه تایی و هفت تایی را به ترتیب نشان می‌دهد. نمودارها به وضوح نشان می‌دهند که دسته نانو لوله‌های کربن با قطر نانو لوله‌های منفرد بزرگتر دارای بار نهایی بیشتری می‌باشند.

بر اساس یافته‌های لی [۴۸]، بار نهایی متوسط هر نانو لوله‌ی منفرد در یک دسته‌ی سه تایی خیلی نزدیک به مقدار بار نهایی متوسط دسته‌ی نانو لوله‌ی هفت تایی می‌باشد. بنابراین، می‌توان دریافت که بار نهایی بحرانی دسته نانو لوله‌های کربنی مستقیماً متناسب با بار نهایی متوسط هر نانو لوله‌ی کربنی در دسته می‌باشد.



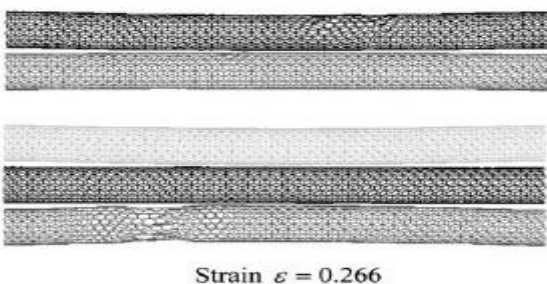
دسته نانو لوله‌ی سه تایی در کرنش $\varepsilon = 0$

دسته نانو لوله‌ی هفت تایی در کرنش $\varepsilon = 0$



دسته نانو لوله‌ی سه تایی در کرنش $\varepsilon = 0.13$

دسته نانو لوله‌ی هفت تایی در کرنش $\varepsilon = 0.13$

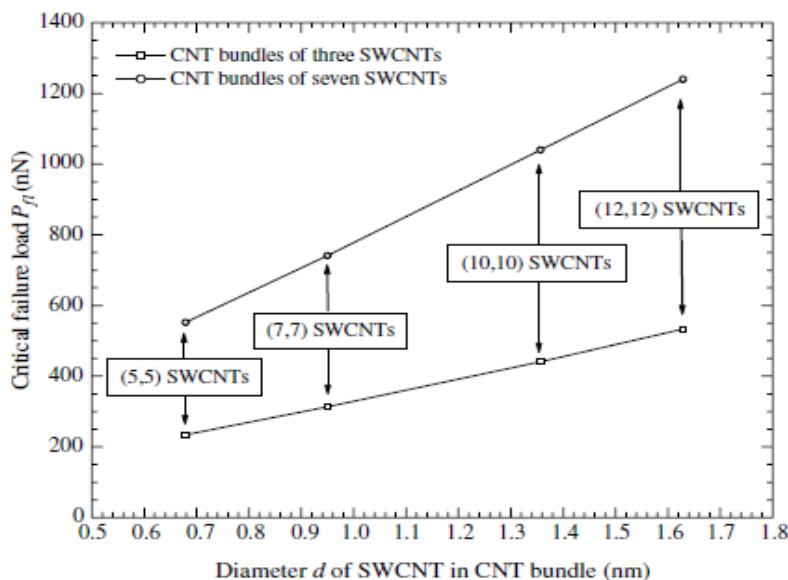


دسته نانو لوله‌ی سه تایی در کرنش $\varepsilon = 0.266$

دسته نانو لوله‌ی هفت تایی در کرنش $\varepsilon = 0.266$

شکل (۲-۱۶) - تغییر شکل‌های ساختاری دسته نانو لوله‌های سه و هفت تایی نانو لوله‌های کربن (۱۰،۱۰) در کرنش - های مختلف در طی بار کششی را نشان می‌دهد [۴۸].

این اطلاعات اجازه‌ی محاسبه ساده‌ی دسته نانو لوله‌های کربن تا حد صدها نانو لوله‌ی تک جداره بدون انجام محاسبات گران شبیه سازی‌های دینامیک مولکولی با میلیون‌ها اتم را می‌دهد. برای مثال، بار نهایی متوسط بحرانی یک دسته نانو لوله‌ی سه تایی و هفت تایی نانو لوله‌ی تک جداره (۱۰،۱۰) به ترتیب برابر ۱۴۷،۱ تا ۱۴۸،۱ nN می‌باشد.



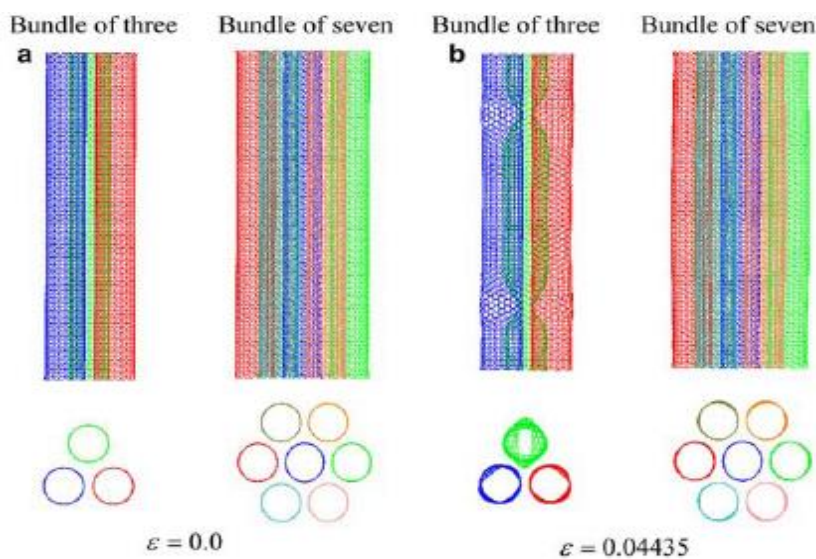
شکل (۲-۱۷) - بارهای نهایی بحرانی در اندازه‌های مختلف دسته نانو لوله‌های سه تایی و هفت تایی نانو لوله‌های تک جداره را نشان می‌دهد [۴۸].

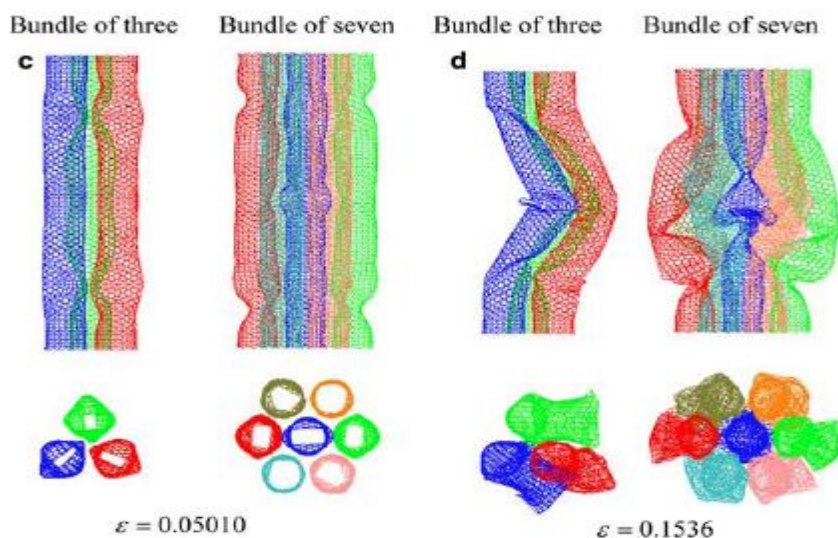
از این رو بار نهایی بحرانی یک دسته نانو لوله‌ی با بیست نانو لوله‌ی منفرد (۱۰،۱۰) تقریباً برابر ۲۹۴،۲ nN می‌باشد. شکل همچنین نشان می‌دهد که بار نهایی بحرانی از یک رابطه‌ی تقریباً خطی نسبت به قطر d هر نانو لوله‌ی تک جداره درون دسته‌ها متابعت می‌کند. این توانایی‌ها امکان تعیین بار نهایی بحرانی اندازه‌های دیگر دسته نانو لوله‌های کربن را با درون‌یابی ساده داده‌ها را به وجود می‌آورد.

کرنش‌های بحرانی ε_{cr} که در آنها دسته نانو لوله‌های کربن دچار دگرگونی می‌شوند توسط لی به دست آمده‌اند. با توجه به این یافته‌ها کرنش بحرانی ε_{cr} نسبتاً غیر مرتبط با دسته‌های نانو لوله‌های کربن مختلف می‌باشد، با وجود اختلاف در اندازه‌ی آنها و تعداد کل نانو لوله‌های در دسته می‌باشد. اگر چه کرنش‌های بحرانی ε_{cr} معمولاً بین ۰,۲۶۶ تا ۰,۲۶۹ می‌باشد، اما این مقادیر به ۰,۲۴۲ و ۰,۲۵۶ به ترتیب برای دسته‌های سه تایی و هفت تایی نانو لوله‌ی کربن تک جداره (۱۲,۱۲) افت می‌کند [۴۸].

۲-۵-۳- دسته‌های نانو لوله‌ی کربن تحت فشار محوری

دومین تحلیلی که توسط لی و همکارانش [۴۸] انجام گرفته است تحلیل کمانش دسته نانو لوله‌ها می‌باشد. هنگامی که دسته نانو لوله‌ها فشرده می‌شوند دچار تغییر شکل‌های ساختاری می‌گردند. شکل (۲-۱۸) تغییرات شکل، مراحل مختلف فرایند فشار را دسته نانو لوله‌های تک جداره سه و هفت تایی (۱۰,۱۰) را نشان می‌دهد.





شکل (۲-۱۸) - تغییر شکل‌های ساختاری دسته نانو لوله‌های سه تایی و هفت تایی نانو لوله‌ی تک جداره (۱۰،۱۰) را در کرنش‌های مختلف نشان می‌دهد [۴۸].

شکل دسته‌ی نانو لوله‌های کربنی (CNT) در کرنش $\varepsilon = 0$ ، که در شکل (۲-۱۸) نشان داده شده است، هیچ تغییر شکلی در آن وجود ندارد. در کرنش $\varepsilon = 0.04435$ دسته سه تایی CNT خود به خود دچار فروپاشی به یک حالت سه تایی می‌شود، در صورتی که دسته نانو لوله‌ی هفت تایی کمی به طرف بیرون از هسته دسته نانو لوله خم می‌شود. در کرنش $\varepsilon = 0.0501$ ، دسته نانو لوله‌ی سه تایی به تغییر شکل ادامه می‌دهد و در کرنش $\varepsilon = 0.1536$ هر دو دسته کاملاً دچار تغییر شکل ساختاری می‌گردند. نتایج بررسی‌های لی و همکارانش بر روی خصوصیات کمانشی دسته نانو لوله‌ها در جدول (۲-۶) آورده شده است.

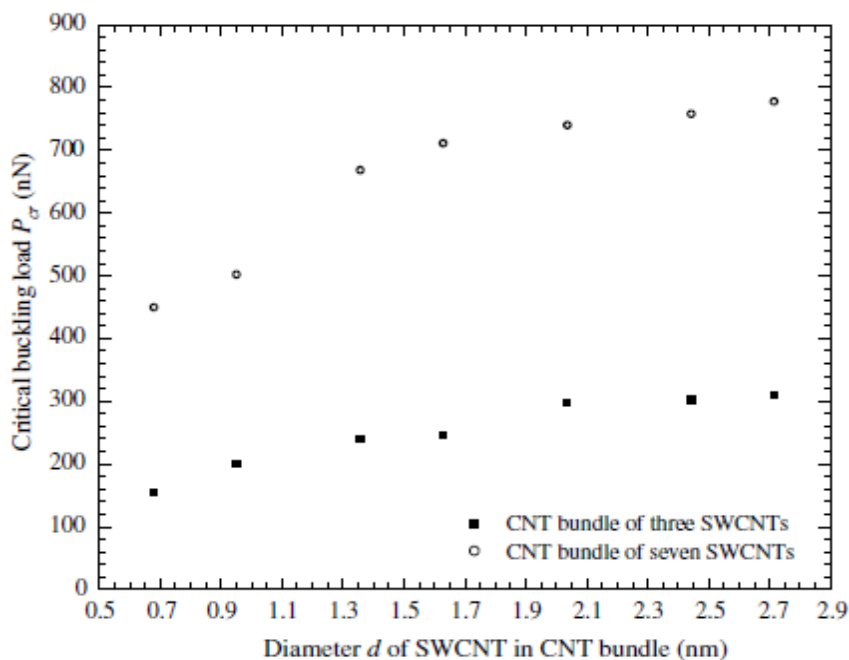
جدول (۲-۶) بار نهایی P_{fl} و کرنش بحرانی ε_{cr} شکل‌های مختلف دسته نانو لوله‌های کربن [۴۰]

انواع دسته‌ها	بار نهایی P_{fl}	بار نهایی متوسط برای هر نانو لوله‌ی تک جداره	کرنش بحرانی strain ε_{cr}
CNT bundle of three (5, 5) SWCNTs	۲۳۳،۵	۷۷،۸	۰،۲۶۹
CNT bundle of three (7,7) SWCNTs	۳۱۳،۵	۱۰۴،۳	۰،۲۶۹
CNT bundle of three (10,10) SWCNTs	۴۴۱،۵	۱۴۷،۱	۰،۲۶۶

CNT bundle of three (12, 12) SWCNTs	۵۳۲,۷	۱۷۷,۶	۰,۲۶۶
CNT bundle of seven (5, 5) SWCNTs	۵۵۱,۶	۷۸,۸	۰,۲۶۶
CNT bundle of seven (7, 7) SWCNTs	۷۴۱,۳	۱۰۵,۹	۰,۲۶۶
CNT bundle of seven (10,10) SWCNTs	۱۰۳,۷	۱۴۸,۱	۰,۲۶۶
CNT bundle of seven (12,12) SWCNTs	۱۲۳,۶	۱۷۶,۶	۰,۲۴۳

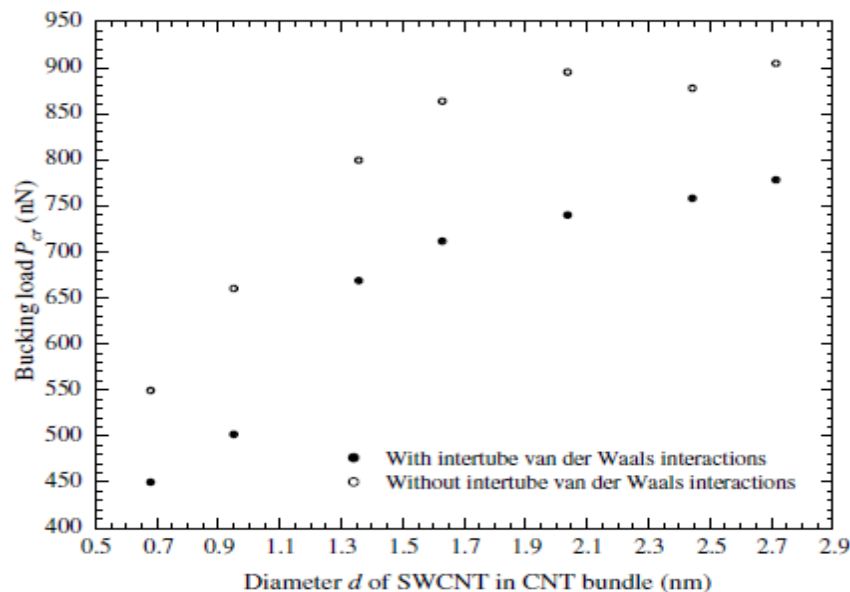
در تحلیل کمانش دسته نانو لوله‌ها توسط لی، از هفت اندازه مختلف نانو لوله‌ی کربنی منفرد در دسته استفاده شده است، اندازه آن‌ها عبارتند از (۵,۵)، (۷,۷)، (۱۰,۱۰)، (۱۲,۱۲)، (۱۵,۱۵)، (۱۸,۱۸) و (۲۰,۲۰). نمودار شکل (۲-۱۹) بارهای کمانشی بحرانی P_{cr} بدست آمده توسط لی، برای اندازه‌های مختلف دسته نانو لوله‌های سه و هفت تایی را نشان می‌دهد. از نتایج آنان می‌توان دریافت، هنگامی که اندازه قطر نانو لوله منفرد افزایش یابد، بار بحرانی کمانش P_{cr} نیز به طور نمایی افزایش می‌یابد. همچنین، بار کمانش بحرانی P_{cr} دسته نانو لوله‌های سه تایی تمایل به رسیدن به مقدار ماکزیمم $P_{cr} \approx 300nN$ با وجود افزایش قطر نانو لوله‌ی کربنی منفرد را دارند؛ اگر چه دسته‌های CNT با هفت نانو لوله منفرد دارای بار بحرانی در حدود P_{cr} حدود دو یا سه برابر بزرگتر از دسته نانو لوله‌های سه تایی می‌باشند.

زمانی که قطر d نانو لوله در دسته نانو لوله‌ی هفت تایی افزایش می‌یابد، اختلاف در بار کمانشی بحرانی بین دسته‌های سه تایی و هفت تایی افزایش می‌یابد. برای مثال آنان دریافتند، در قطر نانو لوله‌ی منفرد، $d = 0.68nm$ بار بحرانی کمانش دسته نانو لوله‌ی (۵,۵) در حدود ۲,۱ برابر بزرگتر است. با این وجود زمانی که قطر به $d = 2.44nm$ افزایش می‌یابد، بار کمانشی بحرانی دسته نانو لوله‌ی (۱۸,۱۸) به ۲,۴ برابر افزایش می‌یابد. شکل (۲-۲) یافته‌های لی، برای بار بحرانی کمانش برای اندازه‌های مختلف دسته نانو لوله را نشان می‌دهد، مربع‌های تو پر با در نظر گرفتن پیوند واندروالس بین لوله‌ای و نقاط تو خالی بدون در نظر گرفتن این پیوند می‌باشند.



شکل (۲-۱۹) - نمودار بارهای بحرانی کمانش دسته نانو لوله های سه وهفت تایی را بر حسب قطر SWCNT نشان می دهد [۴۸].

از نتایج بدست آمده توسط آنان که در نمودار شکل (۲-۱۹) نشان داده شده است، این مطلب یافت می شود که با وجود تعداد یکسان SWCNT درون دسته ها، بار بحرانی کمانشی P_{cr} به صورت نمایی با افزایش مقدار قطر نانو لوله های منفرد در درون دسته افزایش می یابد؛ آنان هم چنین دریافتند، گرایش افزایشی بارهای کمانشی P_{cr} در دو دسته ی هفت و سه تایی شبیه به هم می باشند، ولی به بار کمانشی بزرگتر زمانی می توان دست یافت که، پیوند واندروالس بین لوله ای در نظر گرفته نشود. این یافته ی لی و همکارانش [۴۸] در توافق با یافته های لو [۳۰] می باشد، نتایج به دست آمده توسط لو نشان می دهند که، پیوندهای واندروالس ضعیف بین نانو لوله های منفرد درون دسته، سبب کاهش مدول الاستیک دسته می شود. دلیل این کاهش به سبب رفتار نیروی واندروالس بین نانو لوله های منفرد در دسته می باشد. نیروی واندروالس بین نانو لوله ها مانع حرکت و چرخش آسان نانو لوله های منفرد درون دسته می شود.



شکل (۲-۲۰) - بار کمانشی P_{cr} برای قطرهای مختلف نانو لوله‌ی منفرد در دسته نانو لوله‌ی هفت تایی کربن با و بدون در نظر گرفتن پیوندهای واندر والس بین لوله‌ای [۴۸].

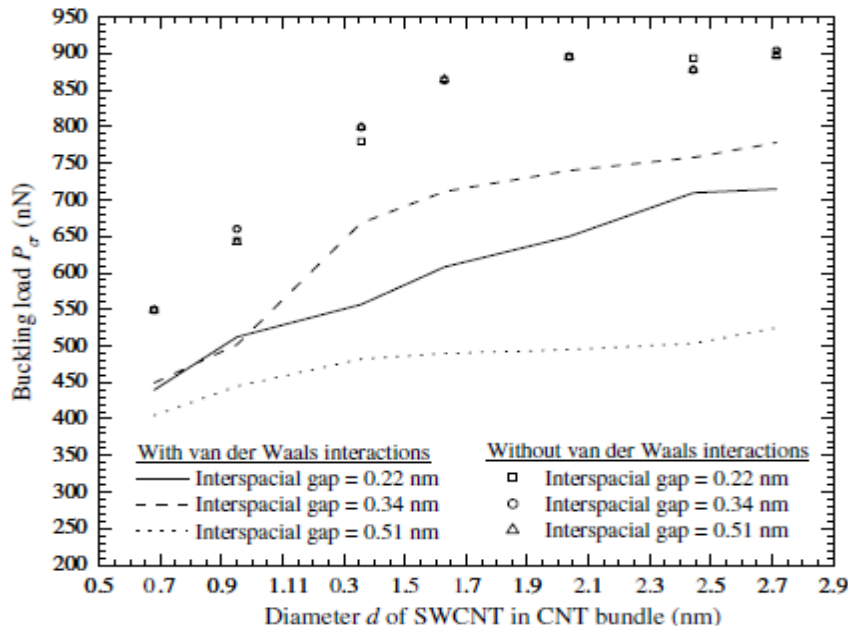
پارامتر دیگری که توسط لی مورد بررسی قرار گرفته است اثر فاصله‌ی بین نانو لوله‌های

منفرد درون دسته می‌باشد. در تحلیل لی [۴۸] که با استفاده از شبیه سازی‌های دینامیک مولکولی در شکاف‌های فاصله‌ای مختلف انجام شده است به این نتیجه رسیده است که، در دسته نانو لوله‌های کربنی هنگامی که پیوندهای واندرالس بین لوله‌ای وجود داشته باشد، اندازه‌ی شکاف فاصله‌ای نقش مهمی در خصوصیات کمانشی دسته نانو لوله‌ها دارد. در تحلیل لی مجموعاً از سه شکاف فاصله‌ای 0.22 nm ، 0.34 nm و 0.51 nm نانومتری استفاده شده است. شکل (۲-۲۰) نتایج به دست آمده توسط لی برای بار کمانشی P_{cr} در قطرهای مختلف نانو لوله‌ی منفرد در دسته نانو لوله‌ی هفت تایی کربن با و بدون در نظر گرفتن پیوندهای واندرالس بین لوله‌ای را نشان می‌دهد.

لی همچنین به این نتیجه رسیده است که شکاف فاصله‌ای کمتر از 0.2 nm بر اساس

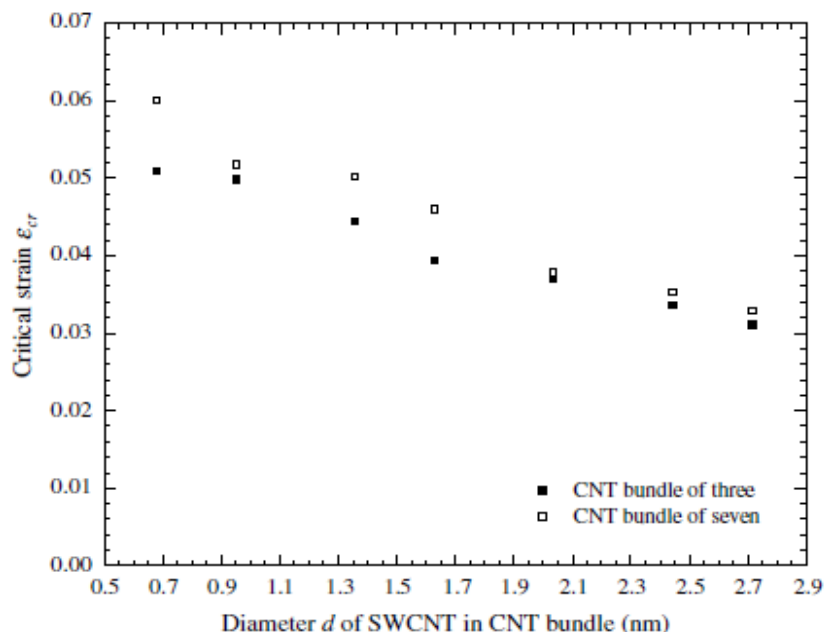
معادله‌ی (۲-۴۵) برای اعمال نیروی واندرالس انتخاب نمی‌شود، زیرا پیوند کووالانسی درون لوله‌ای زمانی که $r_{ij} < 0.2\text{ nm}$ باشد، در نظر گرفته خواهد شد. شکل (۲-۲۱) یافته‌های لی در مورد بار بحرانی کمانش در اندازه‌های مختلف دسته نانو لوله‌های کربن با شکاف‌های فاصله‌ای مختلف را نشان می‌دهد. زمانی که پیوندهای واندر والس در نظر گرفته نمی‌شوند، مقدار بار بحرانی کمانش دسته نانو

لوله‌ها با فواصل بین لوله‌ای متفاوت تقریباً یکسان می‌باشند. بر اساس یافته‌های آنان افزایش قطر نانو لوله‌ی منفرد در دسته تا مقدار ۲,۰۴ نانومتر باعث افزایش بار کمانش بحرانی می‌شود اما از این قطر به بعد افزایش قطر نانو لوله‌ی منفرد در دسته نانو لوله تأثیر زیادی بر روی بار کمانش بحرانی ندارد.



شکل (۲-۲۱) - بارهای کمانشی اندازه‌های مختلف دسته‌های نانو لوله کربن در شکاف فاصله‌ای مختلف با و بدون در نظر گرفتن پیوندهای واندروالس [۴۸].

هنگامی که پیوندهای واندروالس برد بلند بین لوله‌ای در محاسبات آن‌ها در نظر گرفته شد، بار بحرانی در فاصله‌های مختلف بین نانو لوله‌ای دیگر مقادیر یکسانی نداشت. در شکاف فاصله‌ای 0.22 nm نانو متری بار بحرانی کمانش دسته نانو لوله‌های کربن بزرگ‌تر از شکاف فاصله‌ای 0.51 nm نانومتری شد. دلیل آن به سبب ایجاد پیوند کووالانسی بین نانو لوله‌های کربنی منفرد در دسته نانو لوله با فاصله‌ی بین لوله‌ای 0.2 nm بیان شده است. هنگامی که این دسته نانو لوله‌ی کربنی فشرده می‌شود، فاصله‌ی بین اتم‌های دو نانو لوله‌ی مجاور از مقدار 0.2 nm کمتر می‌شود و امکان ایجاد پیوند کووالانسی فراهم می‌شود. نزدیک شدن بیش از حد دو لوله‌ی مجاور درون دسته نانو لوله‌ی کربن با شکاف فاصله‌ای 0.22 nm نانو متر پیوندهای واندروالس تدافعی ایجاد می‌کند که سبب کاهش بار بحرانی کمانش کمتر از یک دسته نانو لوله با فاصله‌ی بین لوله‌ای 0.34 nm نانو متر را در پی دارد. (شکل درون نمودار ۲-۱۴).



شکل (۲-۲۲) - کرنش‌های بحرانی در اندازه‌های مختلف دسته نانو لوله‌های سه و هفت تایی [۴۸].

در بررسی‌های لی و همکارانش کرنش بحرانی ϵ_{cr} دسته‌های مختلف CNT نیز مورد بررسی قرار گرفته است. شکل (۲-۲۲) نتایج کرنش‌های بحرانی بر حسب قطر نانو لوله‌ی منفرد را نشان می‌دهد. همان طور که نمودار (۲-۲۲) نشان می‌دهد، هنگامی که قطر نانو لوله تک جداره درون دسته نانو لوله‌ها افزایش یابد، کرنش بحرانی ϵ_{cr} کاهش خواهد یافت. علاوه بر آن کرنش بحرانی دسته نانو لوله‌های کربنی هفت تایی عموماً از دسته‌های سه تایی بزرگترند. اما هنگامی که قطر افزایش می‌یابد، اختلاف بین کرنش بحرانی ϵ_{cr} برای هر دو دسته نانو لوله سه تایی و هفت تایی کمتر می‌شود [۴۸].

فصل سوم

شبیه سازی

دسته نانو لوله های کربنی

از زمانی که مدل سازی و شبیه سازی نانو لوله‌های کربنی آغاز شده است، روش‌های مختلفی برای این نانو مواد ارائه گردیده‌اند که هر کدام به نوبه خود قادر به حل مسائل در زمینه‌های مختلف مکانیکی هستند. به علت اندازه بسیار کوچک نانو مواد، محاسبه خصوصیات مکانیکی از قبیل مدول یانگ، استحکام کششی و فشاری و همچنین مقاومت کمانشی، بحث‌های زیادی را در میان محققان نانو مکانیک در سال‌های اخیر ایجاد کرده است. با اینکه کارهای تجربی در زمینه نانو مواد بسیار قابل توجه هستند؛ اما نیاز به شرایط خاص آزمایشگاهی برای این گونه کارهای تجربی و اختلاف فاحش میان نتایج بدست آمده در بعضی موارد باعث شده است که محققان برای توجیه و تفسیر کارهای تجربی به کارهای محاسباتی رو بیاورند. در بسیاری از مواد نانو ساختار، نانو لوله‌های کربنی به علت ویژگی منحصر به فرد مکانیکی و الکتریکی خود از توجیه بیشتری برخوردار هستند.

در کنار کارهای تجربی صورت گرفته بر روی نانو لوله‌های کربنی، تحقیقات نظری زیادی نیز برای مدل سازی این نانو لوله‌ها انجام شده است. ۱- روش‌های مکانیک مولکولی: در واقع هر مسئله مرتبط با حرکت‌های اتمی و مولکولی را می‌توان با این روش مدل کرد؛ اما به علت حجم محاسباتی بالای آن‌ها، این روش‌ها معمولاً به سیستم‌های کوچک که شامل تعداد کمی از مولکول‌ها و اتم‌ها هستند و پدیده‌های با عمر کوتاه از پیکو ثانیه تا نانو ثانیه محدود می‌شوند. ۲- دیدگاه دیگر مدل سازی مکانیک پیوسته می‌باشد که به علت سهولت در به کار گیری و نیاز به زمان کمتری برای تحلیل، محققان زیادی به آن رو آورده‌اند. اما مدل‌های بدست آمده از این دیدگاه نمی‌توانند کایرالیتهی نانو لوله‌ها را در نظر بگیرند. بنابر این نیروهای اعمال شده بر روی اتم را به شمار نمی‌آورند. مدل مکانیک ساختاری علاوه بر نداشتن محدودیت در به شمار آوردن کایرالیتهی، از نظر زمان تحلیل نیز بسیار کمتر از روش‌هایی مانند دینامیک مولکولی زمان صرف می‌کند.

در این فصل ابتدا به صورت مختصر بخش‌های مورد استفاده از نرم افزار اجزاء محدود ABAQUS معرفی شده‌اند و سپس نحوه‌ی شبیه سازی نانو لوله منفرد و دسته نانو لوله در این نرم افزار مورد بحث و بررسی قرار گرفته است.

۳-۱- نرم افزار ABAQUS

امروزه با پیشرفت صنعت، از روش‌های تحلیلی و تقریب‌های مهندسی در مسایل پیچیده کمتر استفاده می‌شود. از این رو حل این مسائل هر روز بیش از پیش خود را وابسته به روش‌های حل عددی، هم چون روش اجزا محدود می‌بیند. ABAQUS نرم افزاری برای تحلیل‌های المان محدود می‌باشد. این نرم افزار بطور گسترده ای در صنعت خودروسازی، هوافضا و صنایع ساخت کالاهای صنعتی مورد استفاده قرار می‌گیرد. همچنین این بسته نرم‌افزاری به خاطر قابلیت گسترده در مدل سازی مواد گوناگون و نیز توانائی سفارشی کردن آن به وسیله برنامه‌نویسی، در محیط‌های تحقیقاتی آکادمیک بسیار محبوبیت دارد. در نتیجه این بسته نرم‌افزاری دارای گستره‌ی وسیعی از مدل‌های مواد می‌باشد نرم افزار ABAQUS مبتنی بر روش اجزاء محدود بوده و قابلیت حل مسائل مختلف از یک تحلیل ساده تا پیچیده‌ترین مدل سازی‌های غیر خطی را دارا می‌باشد. این نرم افزار دارای مجموعه المان‌های بسیار گسترده‌ای است که هر نوع هندسه‌ای را می‌تواند به صورت مجازی، توسط المان‌ها مدل می‌کند. همچنین این نرم افزار دارای توانایی در نظر گرفتن انواع مواد مهندسی از جمله فلزات، لاستیک‌ها، پلیمرها، کامپوزیت‌ها، بتن‌ها و... می‌باشد.

ABAQUS/CAE به عنوان یک رابط گرافیکی کاربر، در بسته نرم افزاری ABAQUS گنجانده شده است. این محیط توانایی آن را دارد که یک مدل هندسی را سریعاً و به سادگی بسازد یا از یک نرم افزار مدل سازی دیگر وارد کند. با استفاده از این نرم افزار می‌توان مدل را گسسته سازی کرد و خواص مواد آن را تعیین و شرایط مرزی و بار اعمالی را مشخص کرد. این محیط به بخش‌های ده‌گانه‌ای تقسیم شده است که در هر یک از این بخش‌ها می‌توان فرایندهای خاصی را بر روی مدل انجام داد. هر چند که در ابتدا استفاده از ABAQUS/CAE انجام مراحل پیش پردازش را ساده می‌نماید اما ABAQUS دارای این توانایی نیز می‌باشد که کاربر بتواند با استفاده از کد نویسی مدل سازی را انجام دهد؛ زیرا با استفاده از این روش می‌توان، به کار انجام شده تسلط بیشتری داشت و پارامترها را به راحتی تغییر داد و پاسخ‌های جدیدی گرفت، یا از دستورات شرطی و چرخه‌ای استفاده

کرد. 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 اعمال تغییرات مورد نیاز حل کرد.

۱-۳-۱- تحلیل Buckle

کمانش به رفتاری گفته می‌شود که معمولاً از عضو تحت فشار سر می‌زند. اعضای تحت فشار یک سازه، پیش از رسیدن به حداکثر مقاومت فشاری و در حقیقت پیش از شکست تحت اثر تنش تسلیم فشاری، تحت اثر پدیده کمانش دچار شکست خواهند گردید. هرچه ستون بلندتر و سطح مقطع کوچکتری داشته باشد (ستون لاغر)، زودتر تحت اثر پدیده کمانش تسلیم می‌گردد.

کمانش پدیده‌ای است که بیانگر به وجود آمدن یک ناپایداری در یک قطعه تحت بارگذاری است. به منظور رسیدن به نتایج مورد نظر باید از فرایند حل Buckle در نرم افزار ABQUS استفاده کرد. این فرایند یک تحلیل خطی مقدار ویژه است و برای بدست آوردن مقادیر ویژه کمانش برای سازه‌های الاستیک و صلب مورد استفاده قرار می‌گیرد. به عبارت دیگر بار بحرانی، تغییر شکل‌های بحرانی و نیز شکل مدهای کمانش را می‌دهد. یک مثال ساده از سازه‌های سخت، ستون اوپلر است. در یک مسئله مقدار ویژه، هدف تعیین بارهایی است که در این بارها ماتریس سفتی مدل تکین شود. بنابراین داریم:

$$(۱-۳)$$

$$K^{MN}v^M = 0$$

این رابطه حل‌های غیر صفر خواهد داشت. وقتی بار اعمال می‌شود K^{MN} ماتریس سختی است و v^M جابجایی‌های مخالف صفر هستند. بارهای اعمال شده می‌توانند شامل فشار نیروی متمرکز جابجایی-های غیر صفر و یا بارگذاری حرارتی باشند.

فرمول بندی مسئله‌ی مقدار ویژه به صورت زیر است :

$$(K_0^{MN} + \lambda_i K_A^{MN})v_i^M = 0 \quad (۲-۳)$$

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

۳-۲-۲- شبیه سازی نانو لوله های کربنی منفرد

۳-۲-۱- شبیه سازی تک نانو لوله ی کربنی ۷ مدل سازی در نرم افزار ABAQUS

طبق مراحل زیر می باشد:

۳-۲-۱- مرحله ایجاد اتم های کربن به صورت کره های تو خالی

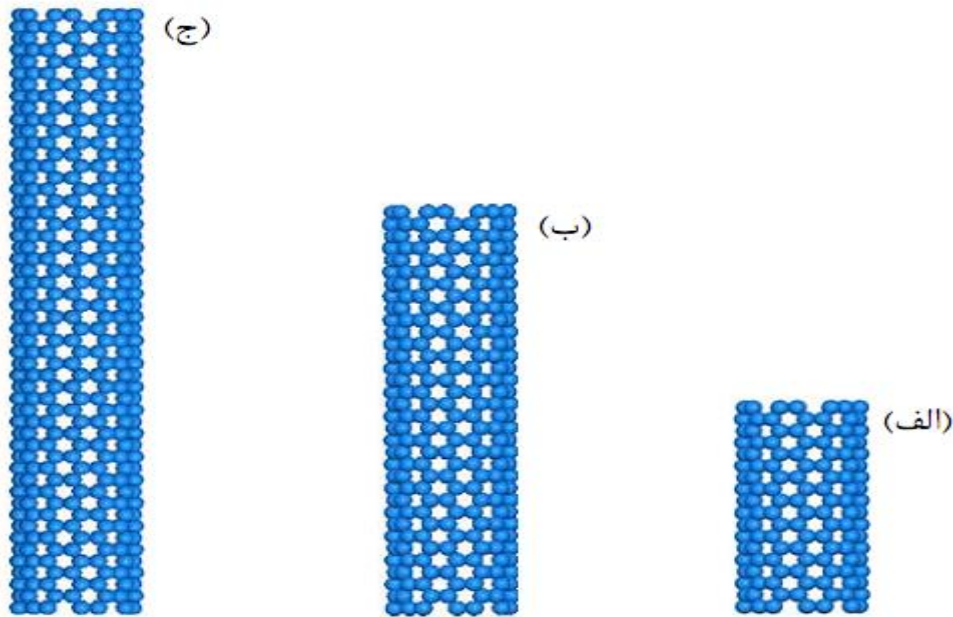
این مرحله مربوط به ساخت هسته ی اولیه ی مدل می باشد. برای ایجاد یک نانو لوله ی کربنی به ایجاد اتم های کربن نیاز است. در این مدل، اتم های کربن به صورت کره های تو خالی در نظر گرفته می شوند. برای این منظور در بخش Part، بر روی گزینه ی Creat part کلیک کرده و با انتخاب حالت Solid و Discret Rigid کره های را با قطری برابر یک اتم کربن ($D=0,077nm$) ایجاد می نماییم. به این دلیل کره را Discrete Rigid گرفتیم که نیازی به تغییر شکل ندارد. پس از انجام این کار نقطه ی مرکز کره را به عنوان Refrence Point در نظر گرفته که در حقیقت این نقطه نماینده ی کل کره می باشد.

۳-۲-۲- مرحله تعیین خواص مکانیکی

در این حوزه، خصوصیات ماده که در اینجا کره های تو خالی هستند، اعمال می شوند. با ورود به بخش Property می توان برای ماده خواص مکانیکی مورد نظر را تعریف کرد. در این مدل نیازی به نسبت دادن هیچ گونه خاصیت مکانیکی به ماده نمی باشد؛ چرا که این بر هم کنش های بین اتم ها است که رفتار کلی نانو لوله را تعیین می کند. البته در صورت استفاده از مدل در تحلیل دینامیکی می توان چگالی جرمی مورد نیاز (مطابق با چگالی جرمی اتم کربن) را برای آن در نقطه مرجع در نظر گرفت.

۳-۲-۳ - مونتاژ اتم‌های کربن

در این مرحله اتم‌های کربن را بر حسب تعداد و نوع کایرالیته‌ی که می‌تواند آرمچیر و یا زیگزاگ باشد در موقعیت‌های مناسب قرار داده می‌شوند و در حقیقت مونتاژ می‌شوند. با توجه شکل (۳-۱) مشاهده می‌شود که نانو لوله‌های با طول‌های متفاوت و یا کایرالیته‌ی متفاوت را می‌توان مدل نمود.

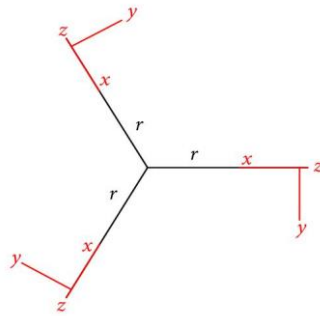


شکل (۳-۱) نانو لوله‌های مونتاژ شده از نوع آرمچیر (الف): $L = 2,09 \text{ nm}$; (ب): $L = 4,058 \text{ nm}$; (ج): $L = 6,272 \text{ nm}$. لازم به ذکر است که قطر نانو لوله‌ها را می‌توان با استفاده از روابط موجود در جدول (۲-۲) بدست آورد.

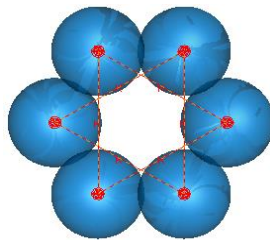
۳-۲-۴ - اعمال برهم‌کنش‌های بین اتمی

در بخش Interaction می‌توان بر هم کنش‌های بین اتمی را تعریف نمود و برای این کار باید طبق روش زیر عمل کرد: همان‌طور که گفته شد در مرکز هر اتم کربن یک نقطه مرجع قرار داده شده است. از این نقاط می‌توان برای ایجاد دستگاه مختصات محلی استفاده نمود. قابل ذکر است در نرم افزار ABAQUS برای نسبت دادن برخی از انواع بر هم کنش‌های بین اتصالات، باید بر روی نقاط ابتدایی و انتهایی اتصال یک مختصات محلی تعریف نمود. مختصاتی که در این جا تعریف شده است از نوع کارترین می‌باشد که جهت محور X آن، در جهت اتصال بین دو اتم بوده و جهت محور Z آن عمود بر محور مرکزی نانو لوله در نظر گرفته شده است (شکل (۳-۲)). پس از آن فنرهایی را که نقش

خمش بین اتم‌ها را ایفا می‌کنند، مطابق شکل (۳-۳) بین آن‌ها قرار می‌دهیم. در این حالت فنرها را به صورت الاستیک در نظر می‌گیریم. 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 نمود.



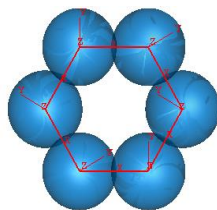
شکل (۲-۳) - نحوه قرار گرفتن دستگاه مختصات محلی بر روی مرکز اتم‌های کربن



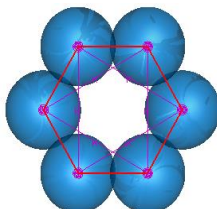
شکل (۳-۳) - نحوه قرار گرفتن فنرهای خمشی بین اتم‌های کربن

پس از اعمال فنرها در این بخش، باید بین هر یک از اتم‌های کربن و اتم کربن مجاور آن یک اتصال ایجاد نمود و سپس برای آن 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 ابتدایی و انتهایی انتخاب کرد. بعد از آن بر روی گزینه Create connector section کلیک کرده و رفتار مورد نیاز را برای آن تعریف نمود. برای اعمال رفتارهای بین اتمی، یعنی کشش بین اتم‌ها، پیش از زاویه‌ای دو سطحی و پیش از خارج صفحه‌ای، مطابق شکل بر روی Basic type کلیک کرده و از قسمت Translational type بر روی Rotation کلیک کرده و شبیه‌سازی ادامه می‌یابد. سپس در پنجره ظاهر شده بر روی گزینه‌ی add کلیک کرده و Elasticity را انتخاب نموده، در

زیر بخش Nonlinear, Definition را انتخاب کرده و داده‌های مورد نیاز بر روی آیکن Create connector assignment کلیک کرده و با انتخاب اتصالات مربوطه این رفتارها را به اتصالات نسبت داده می‌شوند. شکل (۳-۴) نحوه‌ی قرار گرفتن اتصالات بین اتم‌های کربن را نشان می‌دهد. در شکل (۳-۵) نیز می‌توان مجموع فنرهای خمشی و اتصالات را که در کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند را مشاهده نمود.



شکل (۳-۴) - نحوه‌ی قرار گرفتن اتصالات بین اتم‌های کربن.



شکل (۳-۵) - مجموع فنرهای خمشی و اتصالات بین اتم‌های کربن.

۳-۲-۵- بارگذاری و شرایط مرزی

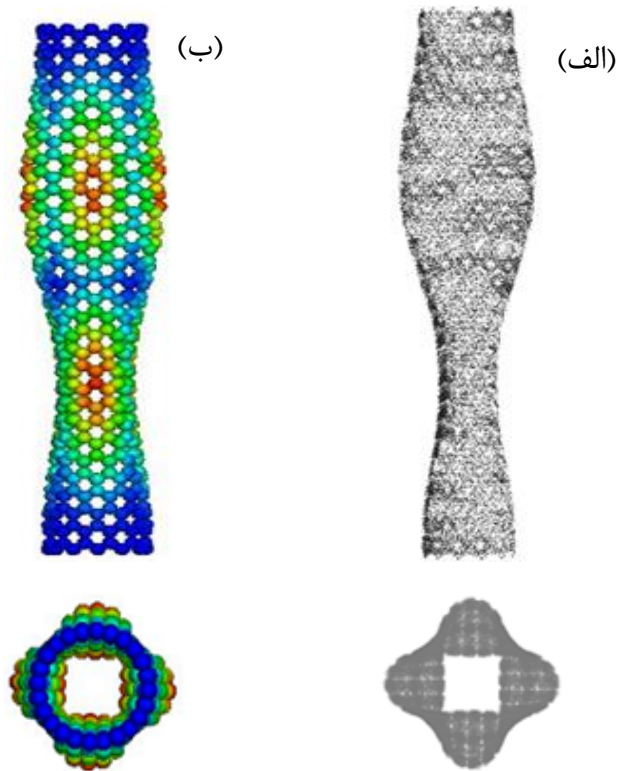
در بخش Condition شرایط مرزی و بار گذاری‌های مورد نیاز را اعمال نموده. برای هر سه نوع بار گذاری

یعنی فشاری، خمشی و پیچشی اعمال بار و شرایط مرزی متفاوت می‌باشد که هر کدام در قسمت مربوط به خود توضیح داده خواهد شد.

۳-۲-۶- المان بندی اتم‌های مونتاژ شده

در بخش Mesh می‌توان اتم‌های کربن را که به صورت یک کره تعریف شده‌اند را المان بندی کرد. اگرچه می‌توان مدل ایجاد شده را بدون اینکه المان بندی شوند نیز حل کرد، در این حالت مدل قابل حل است و مقادیر ویژه مربوطه را بدست می‌دهد؛ ولی شکل مدهایی که از آن بدست می‌آید، چندان قابل بررسی نمی‌باشد. دلیل اینکه مدل بدون المان بندی حل می‌شود، این است که رفتار ماده به

برهم‌کنش‌های بین اتم‌ها بر می‌گردد و نه به خواص مکانیکی خود اتم. حل مدل بدون مش بندی زمان حل مسئله را بسیار کوتاه می‌کند که این کوتاه شدن زمان حل، یکی از قابلیت‌های خاص مدل ارائه شده می‌باشد.



شکل (۳-۶) نمونه‌ای از شکل مدهای ناشی از حل مسئله با المان بندی آورده شده است، (الف) بدون المان بندی، (ب) المان بندی شده

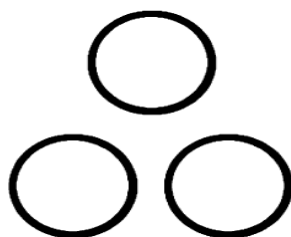
همان‌طور که در شکل مشاهده می‌شود در حالتی که نانو لوله‌ها بدون المان بندی حل شوند، تنها فنرهای خمشی و اتصالات در نتایج دیده می‌شود.

۳-۲-۷- بخش حل مسئله

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

۳-۳- شبیه سازی دسته نانو لوله‌های کربنی

دسته نانو لوله‌های کربنی با کنار هم قرار گرفتن سه نانو لوله‌ی کربنی منفرد در کنار یکدیگر شبیه سازی می‌شوند. برای شبیه سازی دو لوله دیگر علاوه بر لوله موجود از فایل Inp نرم افزار ABAQUS استفاده شده است. به این دلیل از فایل inp استفاده می‌شود که مدل سازی تعداد زیادی از اتم‌ها، کانکتورها و فنرها در محیط ABAQUS/CAE قابل انجام نمی‌باشد، همان طور که در قسمت مدل سازی نانو لوله‌ی منفرد توضیح داده شد، نقطه مرجع هر اتم طی مراحل مختلف از قبیل قرار دادن دستگاه مختصات، متصل کردن اتم‌های مجاور به وسیله‌ی کانکتور و همچنین برای ایجاد فنر غیرخطی به شکل ستاره‌ای چندین بار انتخاب می‌شوند و نیز برای قرار دادن دستگاه مختصات محلی برای هر اتم نانو لوله‌ی منفرد هر لوله می‌بایست به اندازه تعداد اتم‌های موجود در طول مورد نظر، لوله بچرخد تا دستگاه مختصات محلی برای اتم مورد نظر در راستا و جهت درست قرار بگیرد. این پیچیدگی مدل سازی و هم چنین گستردگی مدل حاصل از افزایش سه برابری تعداد اتم‌ها در مقیاس اتمی برای یک دسته نانو لوله‌ی سه تایی سبب می‌شود نتوان مدل را در محیط ABAQUS/CAE به راحتی چرخاند و فنر یا کانکتور مورد نظر را به درستی در محل مناسب خود قرار داد. بنابراین بایستی از کد نویسی برنامه‌ی Matlab استفاده نمود.



شکل (۳-۸) - دسته نانو لوله‌ی سه تایی

۳-۲-۱- استفاده از متلب برای ایجاد فایل ورودی ABAQUS

متلب (MATLAB) یکی از زبان‌های برنامه نویسی سطح بالا با تمرکز بر روی تکنیک‌های محاسباتی است. این نرم افزار، محیطی مناسب برای انجام عملیات‌های ریاضی، ایجاد محیط‌های ویژوال و برنامه

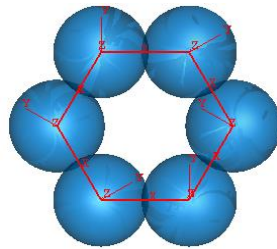
نویسی آسان را همزمان فراهم کرده است. این نرم افزار دارای سیستم اندرکنشی بوده که در آن تمامی داده‌ها، به صورت آرایه‌ها، بدون تعیین بعد معین و مشخص، ذخیره می‌شوند. این خاصیت این امکان را به ما می‌دهد که مسائل محاسباتی بسیاری را با استفاده از فرمول‌های برداری و ماتریسی برای طیف وسیعی از داده‌ها بنویسیم. این نحوه از برنامه نویسی در حقیقت کسری از زمانی است که در یک زبان سطح متوسط غیر دینامیک چون C و FORTRAN صرف می‌شود.

همان طور که در قسمت قبل توضیح داده شد، مدل سازی دسته نانو لوله‌های کربنی با برنامه نویسی فایل ورودی نرم افزار ABAQUS انجام گرفته است. در کد نویسی با برنامه‌ی مطلب، برنامه طوری نوشته می‌شود که خروجی آن در هر مرحله مطابق با فرم فایل Inp نرم افزار ABAQUS باشد. در این برنامه با توجه به آرایش متفاوت برای دو حالت آرمچیر و زیگزآگ به طور جدا از یکدیگر نوشته می‌شوند. این برنامه با گرفتن قطر و طول نانو لوله قادر به ایجاد خروجی مناسب برای نرم افزار ABAQUS می‌باشد.

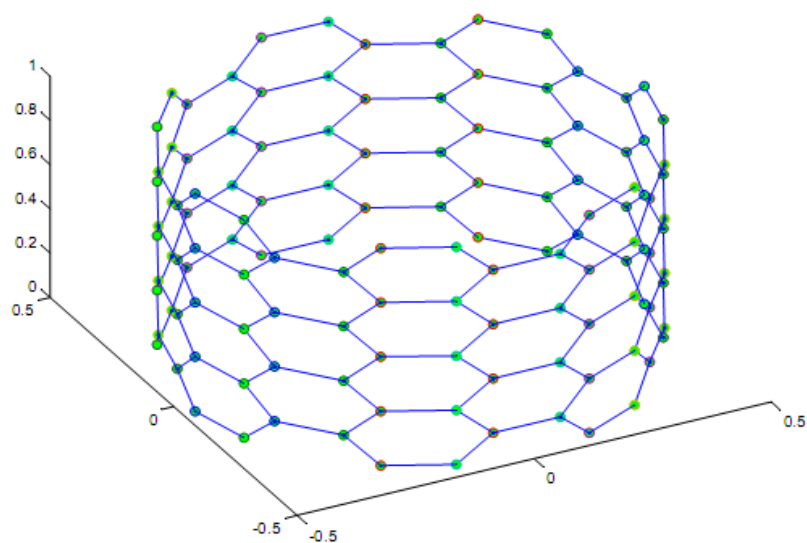
الف- موقعیت دهی اتم‌ها: مرحله اول قرار گرفتن اتم‌ها در مکان مناسب خود که می‌بایست هر اتم مطابق با نامی که اختیار می‌کند دقیقاً در محلی قرار گیرد که اتم متناظر با آن، در نرم افزار ABAQUS مورد نظر ما می‌باشد. به این معنی که اولین اتم کربن در صفحه‌ی (X) و (Y) در همان موقعیتی که اتم اول در محیط ABAQUS/CAE شبیه سازی شده می‌بایست قرار بگیرد. هنگامی که اولین اتم در همان موقعیت قرار گرفت سایر اتم‌ها با حفظ موقعیت نسبی خود نسبت به اتم اولیه در صفحه‌ی (X) و (Y) قرار می‌گیرند و ردیف‌های بعدی در راستای محور (Z) که راستای طول نانو لوله می‌باشد گسترش می‌یابند. در اینجا هر اتم تنها با یک نقطه نمایش داده می‌شود که معادل نقطه مرجع در شبیه سازی با نرم افزار تحلیلی مورد استفاده می‌باشد. نقاط رنگی شکل (۳-۱۰) مرکز کره اتم کربن می‌باشند.

ب- قرار دادن کانکتور: گرفتن خروجی مناسب برای فایل inp که در آن اتم‌های مجاور که بین آن‌ها کانکتور قرار داده شده، ساختار را به یک ساختار آرمچیر تبدیل می‌کنند. برای پی بردن به درستی

انجام مرحله‌ی اتصال اتم‌ها با کانکتور، با گرفتن شکل سه بعدی از این برنامه که اتم‌هایی را که برای اتصال با کانکتور معرفی شده‌اند را با خط به یکدیگر متصل می‌کند تا به درستی ایجاد کانکتور بین اتم‌ها مطمئن شویم.

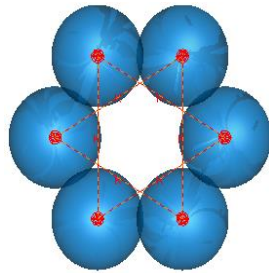


شکل (۳-۹) - اتصال اتم‌های کربن با کانکتور



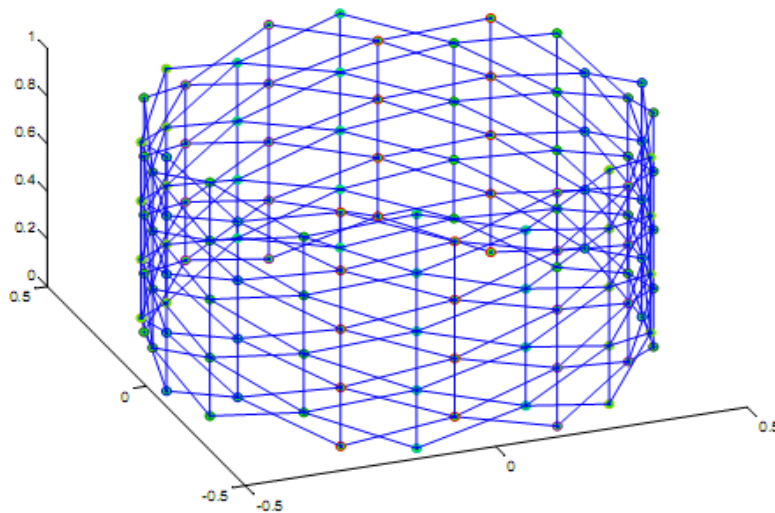
شکل (۳-۱۰) - شکل شماتیک از اتم‌های معرفی شده برای ایجاد کانکتور برای طول $L = 0,983 \text{ nm}$

ج- فنر گذاری: در این مرحله می‌بایست اتم‌های کربن به شکل ستاره‌ای مطابق شکل (۳-۱۱) و همان طور که اتم‌ها در محیط ABAQUS/CAE به یکدیگر با فنر متصل شده‌اند با هم مرتبط شوند. در خروجی این قسمت می‌بایست، اتم‌ها به فرم inp نرم افزار مورد تحلیل معرفی شوند، که شکل ساختاری فنر بندی لوله حفظ شود.

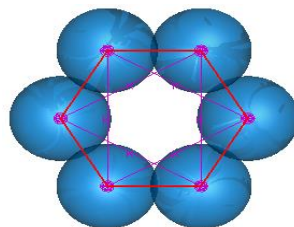


شکل (۱۱-۳) - اتصال اتم‌های کربن با فنر

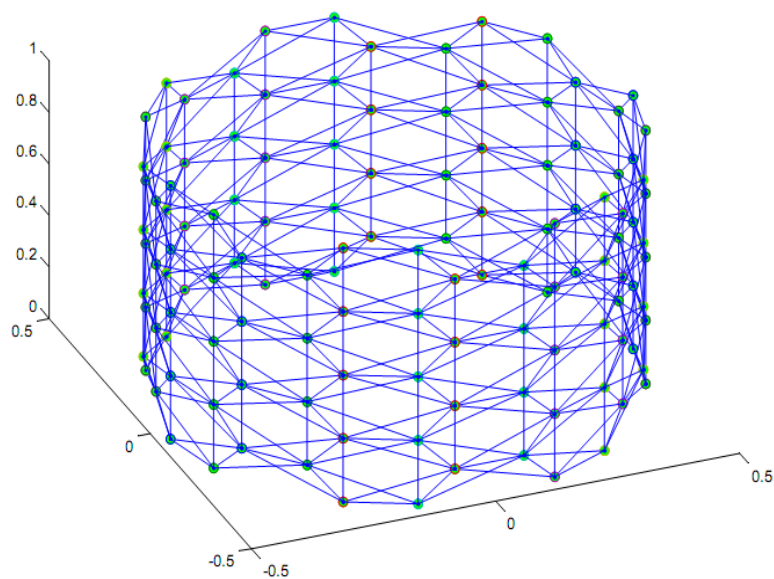
در شکل (۱۲-۳) اتم‌های کربن برای یک نانو لوله‌ی کربن منفرد برای طول $L=0,983 \text{ nm}$ نشان داده شده است که با کانکتور و فنر به یکدیگر متصل شده‌اند. دلیل انتخاب این طول برای نمایش، وضوح بیشتر و جلوگیری از پیچیده شدن این شکل می‌باشد. همان طور که قبلاً اشاره شد، این برنامه برای تمام طول و شعاع‌های تعریف شده برای نانو لوله‌ی آرمچیر قابل انجام است.



شکل (۱۲-۳) - شکل شماتیک از اتصال اتم‌های کربن به شکل ستاره‌ای توسط فنر برای طول $L=0,983 \text{ nm}$

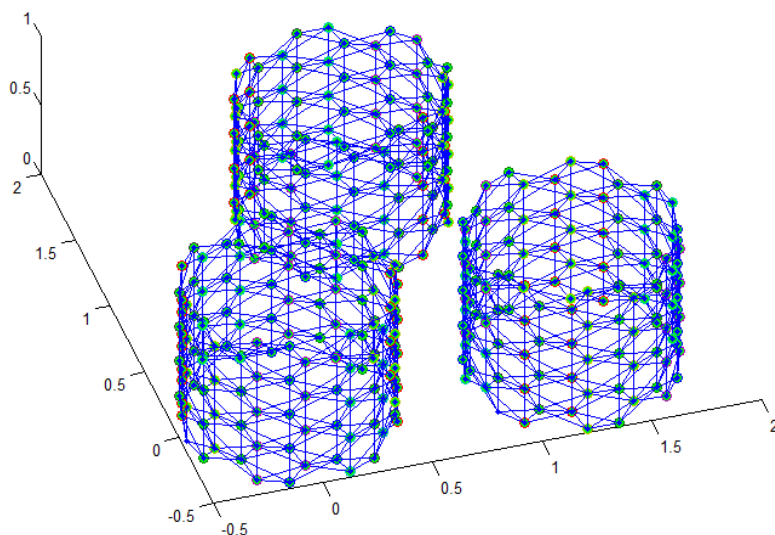


شکل (۱۳-۳) - اتصال اتم‌های کربن با کانکتور و فنر



شکل (۳-۱۴) - شماتیک از اتصال اتم‌های کربن با کانکتور و فنر برای طول $L=0,983 \text{ nm}$

د- تشکیل دسته نانو لوله: در این قسمت سه لوله در فاصله‌های تعریف شده در کنار یکدیگر قرار می‌گیرند. در شکل زیر سه لوله با شکاف فاصله‌ای $0,34 \text{ nm}$ در مقابل همدیگر قرار گرفته‌اند. هر سه لوله آرمچیر و دارای طول $L=0,983 \text{ nm}$ می‌باشند.



شکل (۳-۱۵) - شماتیک از اتصال اتم‌های کربن با کانکتور و فنر برای طول $L=0,983 \text{ nm}$

ه- پیوند واندروالس بین لوله‌ای:

مولکولی که متشکل از تنها دو اتم می‌باشد را در نظر بگیرید. حرکت اتم‌ها را به یک بعد و آن هم در راستای خط واصلشان محدود می‌کنیم. نیروی کششی که میان اتم‌ها وجود دارد، ممکن است به خاطر نیروی کششی واندروالسی باشد که به صورت دینامیکی از گشتاورهای دو قطبی القا شده در هر اتم سر چشمه می‌گیرد. در هر حال فرض می‌کنیم که میان دو اتم نیرویی وجود دارد، به نام $f(r)$ ، که تنها به فاصله دو اتم از هم، r ، بستگی دارد. اگر این نیرو کاملاً کششی باشد، اتم‌ها به سوی هم شتاب گرفته و در هم آمیخته می‌شوند. الکترون‌های اطراف هسته، به خاطر برهم کنش الکترواستاتیکی، همدیگر را می‌رانند. همچنین قانونی بنیادی از مکانیک کوانتومی آن‌ها را از اشغال کردن یک حجم از فضا باز می‌دارد. پس زمانی که اتم‌ها بسیار به هم نزدیک می‌شوند، نیروی کششی به رانشی تبدیل می‌شود. در اینجا بهتر است به جای نیروی برهم کنشی $f(r)$ ، با انرژی پتانسیل برهم کنشی $\phi(r)$ ، که با رابطه‌ی ذیل بیان می‌شود، استفاده کنیم.

$$f(r) = -\frac{d\phi}{dr} \quad (1-3)$$

این معادله انرژی پتانسیل را جدای از یک ثابت دلخواه که مفهوم فیزیکی ندارد، تعیین می‌کند. همچنین انرژی پتانسیل را می‌شود برابر کار منفی دانست که در جابجایی از نقطه صفر انرژی پتانسیل، r_0 ، به نقطه r انجام می‌گیرد.

$$\phi(r) = -\frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}}, \quad (2-3)$$

که در آن A و B به ترتیب قدرت برهم کنش کششی و رانشی را تعیین می‌کنند. وابستگی کششی $1/r^6$ ، مشخصه برهم کنش واندروالس است. در حالی که وابستگی رانشی قوی‌تر است، یعنی زمانی که اتم‌ها نزدیک هم هستند و با افزایش r سرعت کاهش آن بیشتر از برهمکنش کششی است که از این رو برای r های بزرگ، کشش بزرگ‌تر می‌باشد. مقدار صفر انرژی پتانسیل $\phi(r)$ به گونه‌ای انتخاب می‌شود که، هنگامی که اتم‌ها بی‌نهایت از هم دور هستند، انرژی صفر باشد. نیروی واندروالس یکی از برهم کنش‌های موجود بین اتم‌های کربن (غیر پیوندی) می‌باشد. همان‌طور که در فصل ۲ توضیح داده شد، این نوع از برهم کنش به دلیل نزدیک شدن و یا دور شدن دو اتم کربن در فضای فاصله‌ای

بین آنها ایجاد می‌شود. معروف‌ترین رابطه برای تعریف برهم‌کنش واندروالس پتانسیل لنارد-جونز^۳ می‌باشد و به صورت زیر تعریف می‌شود، [۳]:

$$V(R) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right], \quad (3-3)$$

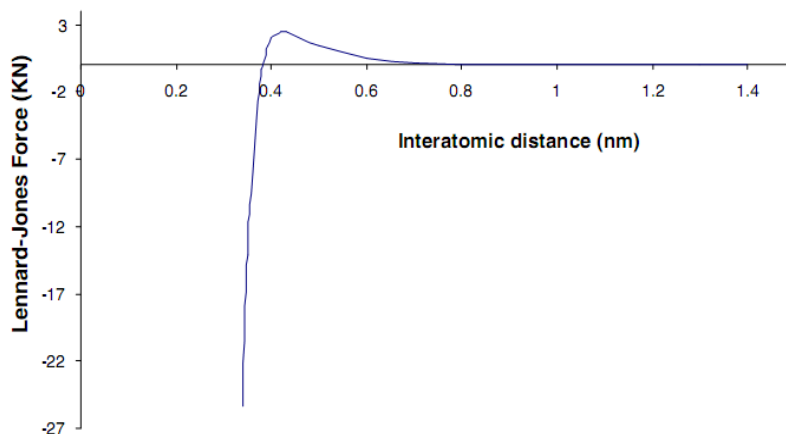
ثابت های لنارد-جونز می‌باشند. این ثابت‌ها برای اتم کربن به σ و ε فاصله‌ی بین اتمی و R که در آن شکل زیر تعریف می‌شوند [۳]:

$$\varepsilon = 3.8655 \times 10^{-4} \text{ nN.nm} \quad \sigma = 0.34 \text{ nm}$$

نیروی لنارد-جونز نیز با استفاده از رابطه‌ی زیر تعیین می‌گردد [۳]:

$$F(R) = -\frac{dv(R)}{dR} = 24 \frac{\varepsilon}{\sigma} \left[2 \left(\frac{\sigma}{R} \right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^7 \right], \quad (4-3)$$

نیروی واندروالس در مدل حاضر برای ایجاد پیوند بین اتم‌های دو لوله‌ی متفاوت به کار رفته است. همان طور که در نمودار زیر نشان داده شده است مقدار نیروی اعمالی دو اتم مجاور به یکدیگر به فاصله‌ی بین اتمی آنها مرتبط می‌باشد. همان طور که در شکل (۳-۱۶) دیده می‌شود مقدار فاصله‌ی بحرانی که در آن بیشترین پتانسیل واندروالس وارد می‌شود، برابر 0.38 nm می‌باشد [۵۱].



شکل (۳-۱۶) - تغییرات نیروی لنارد-جونز بر حسب فاصله‌ی بین اتم‌های کربن [۵۲]

نیروی بر هم

رسم شده است. توجه شود که r در شکل (۳-۱۶) به صورت تابعی از $f(r)$ -کنشی مدل لنارد جونز منفی نیرو است، بنابر این دو مقدار مثبت، متناظر با یک نیروی کششی است. $f(r)$

برای ایجاد پیوند واندروالس بین اتم‌های کربن در سه نانو لوله‌ی کربن می‌بایست، اتم‌های بین

دو لوله را که فاصله بین آن‌ها کمتر از $0,85 \text{ nm}$ می‌باشند، برای متصل شدن با فنر غیر خطی

مشخص شوند. فاصله بین اتمی $0,85 \text{ nm}$ بر طبق نمودار (۳-۱۶)، نمودار تغییرات نیروی واندروالس

بر حسب فاصله‌ی بین اتمی انتخاب شده است. فایل Matlab موجود به دلیل داشتن مختصات تمام

اتم‌های موجود در باندل می‌تواند اتم‌هایی را که فاصله آن‌ها کمتر از $0,85 \text{ nm}$ است را با حالتی که

قابل جایگذاری در متن فایل Inp باشد، مشخص کند. برای نشان دادن گستردگی مدل ساخته شده

تعداد اتم‌ها و فنرهای درون لوله‌ای و بین لوله‌ای و همچنین تعداد کانکتورها برای طول‌های مختلف

در جدول (۳-۱) آورده شده است. همان طور که در جدول دیده می‌شود، برای طول $L = 6,272 \text{ Nm}$

تعداد اتم‌های نانو لوله‌ی منفرد آن برابر 742 و تعداد اتم‌های درون دسته سه برابر آن 2226 می‌باشد.

تعداد کانکتورها 3234 و تعداد فنرهای درون لوله‌ای 6384 و تعداد فنرهای غیر خطی بین لوله‌ای

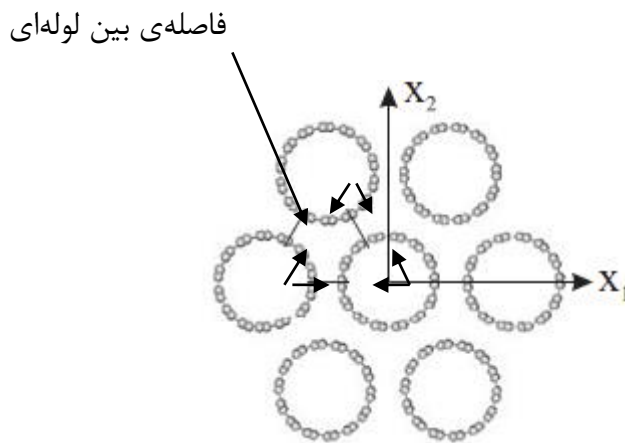
35384 برای اعمال نیروی واندروالس بین لوله‌ای به کار رفته است.

جدول (۳-۱) تعداد فنرها و کانکتورهای بکار رفته در هر نانو لوله

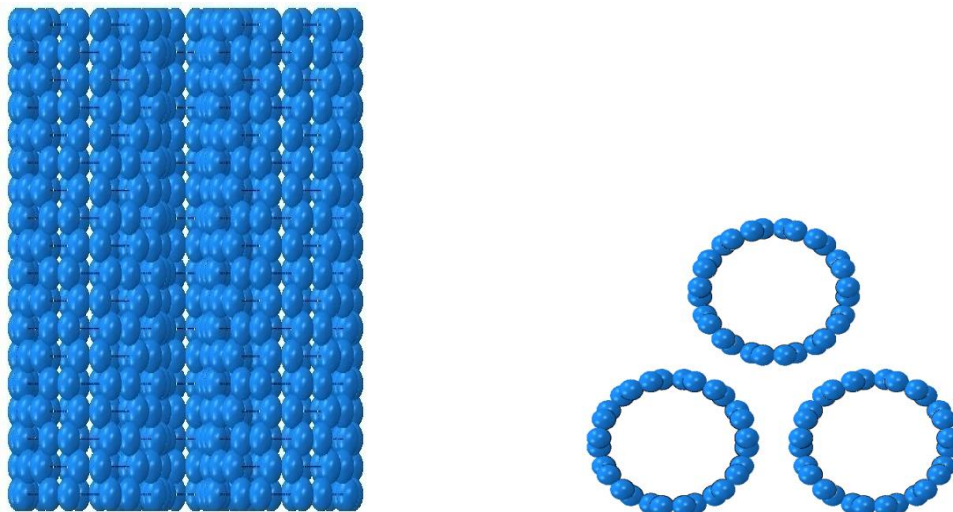
L	تعداد اتم در نانو لوله- ی منفرد	تعداد اتم در دسته نانو لوله	تعداد کانکتور در CNT دسته	تعداد فنر درون لوله- CNT ای در دسته	تعداد فنر غیر خطی بین لوله‌ای
$L = 2,09 \text{ nm}$	252	756	1092	2100	11142
$L = 3,0744 \text{ nm}$	364	1092	1596	3108	16846
$L = 4,0580 \text{ nm}$	476	228	2100	4116	22550
$L = 5,1450 \text{ nm}$	616	1848	2667	5250	28967
$L = 6,277 \text{ nm}$	742	2226	3234	6384	35384
$L = 7,255 \text{ nm}$	840	2520	3738	7392	41088
$L = 8,360 \text{ nm}$	966	2898	4305	8520	47505
$L = 9,4690 \text{ nm}$	1092	3267	4782	9660	53922
$L = 10,453 \text{ nm}$	1218	3654	5273	10668	59626

۲-۲-۳- شبیه سازی دسته نانو لوله‌های کربنی در فایل Inp

با بدست آوردن مختصات تمام اتم‌های کربن سه لوله و نام گذاری آن‌ها مشابه نام گذاری اتم‌های موجود در فایل ABAQUS/CAE، بعد از این مرحله با وجود داشتن مختصات تمام اتم‌های موجود در دسته نانو لوله که با کد نویسی مطلب انجام شده است، خروجی مشابه فایل inp نرم افزار آباکوس را داریم، یعنی برای هر اتم یک نقطه مرجع که نقطه اتصال کانکتورها و فنرها برای یک اتم خاص می‌باشد را در نظر گرفته‌ایم که این نقطه همان نقطه reference point برای هر اتم کربن می‌باشد. مختصات این نقاط طوری می‌باشند که نوع زیگزاگ و آرمچیر خود را حفظ کرده باشند. در شبیه سازی دسته نانو لوله‌ها از سه فاصله‌ی بین لوله‌ای استفاده شده است. این سه فاصله بر اساس کار لی [۴۸] انتخاب شده‌اند، این سه فاصله برابر $0,22\text{nm}$ ، $0,34\text{nm}$ و $0,51\text{nm}$ می‌باشند. این فاصله، فاصله مرکز به مرکز دو اتم کروی در صفحه‌ی سطح مقطع باندل می‌باشند و بین لوله‌ها ارتباطی توسط نیروی واندروالس ایجاد شده است. دسته نانو لوله‌ها در دسته‌های سه و هفت تایی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. دسته‌های سه‌تایی و هفت تایی از متداول‌ترین دسته‌ها هستند.

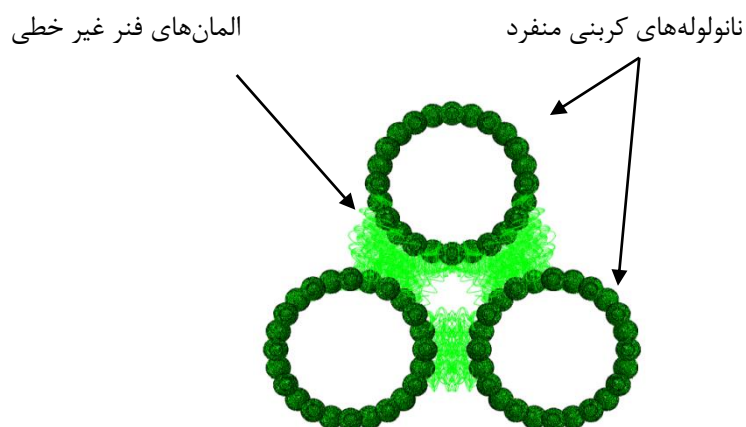


شکل (۳-۱۷)- فاصله‌ی بین لوله‌ای در دسته نانو لوله‌ی هفت تایی



شکل (۳-۱۸) - شبیه سازی دسته نانو لوله‌ی سه تایی آرمچیر بدون نیروی واندروالس بین لوله‌ای

برای مدل سازی نیروی واندروالس در مدل حاضر، ابتدا اتم‌هایی را که دارای فاصله‌ی بین اتمی کمتر از 0.85nm می‌باشند، توسط برنامه‌ی نرم افزار Matlab مشخص می‌گردند و سپس این اتم‌ها در فایل ورودی Input file نرم افزار ABAQUS با یکدیگر توسط فنر متصل می‌شوند. نیروی واندروالس بین اتمی توسط فنرهای غیر خطی برای اتم‌های تعریف شده در فایل ورودی شبیه سازی می‌شوند. مدل ساختاری توسعه یافته برای آنالیز کمانش محوری، پیچشی و خمشی برای دسته نانو لوله‌های کربنی در شکل (۳-۱۹) نشان داده شده است. برای اعمال نیروی فشاری یکنواخت و همچنین اعمال گشتاور دو صفحه به دو انتهای دسته نانو لوله متصل شده است.



شکل (۳-۱۹) - شبیه سازی نیروهای واندروالس توسط المان‌های فنر غیر خطی

فصل چهارم

نتایج حاصل از

مدل مکانیک ساختاری

۴- نتایج حاصل از مدل مکانیک ساختاری

در این فصل دسته نانو لوله‌ی سه تایی آرمچیر (۷،۷) شبیه سازی شده در فصل قبل تحت کمانش با بارگذاری محوری فشاری و تحت ممان خمشی و پیچشی قرار می‌گیرد.

۴-۱- نتایج حاصل از کمانش دسته نانو لوله‌های کربنی تحت نیروی محوری

یکی از مسائل مهمی که در بحث نانو لوله‌ها مطرح می‌شود، پایداری آن‌ها در برابر کمانش است. همان طور که قبلاً اشاره شد، نتایج عددی برای دسته نانو لوله‌های آرمچیر (۷ و ۷) در طول‌های متفاوت به دست آمده‌اند که در ادامه مورد بررسی قرار گرفته‌اند. علاوه بر آن اثر وجود یا عدم وجود نیروهای واندروالس در دسته نانو لوله‌های سه تایی کربنی با فاصله‌های بین لوله‌های ۰،۲۲، ۰،۳۴، و نیز ۰،۵۱ مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. در بیشتر مدل‌های ارائه شده در زمینه رفتارهای مکانیکی نانو لوله‌های کربنی، محققین برای آن که صحت و درستی مدل خود را بهتر نشان دهند، به بررسی دو نوع خروجی از حل‌های خود پرداخته‌اند: یکی بار بحرانی کمانش و دیگری کرنش بحرانی متناظر با آن. لذا در این پایان نامه به بیان دو نوع خروجی اشاره شده از حل‌های آن پرداخته شده است (بار بحرانی کمانش و کرنش بحرانی). همچنین به منظور استنتاج بهتر از نمودارها، آن‌ها را به صورت بار بحرانی کمانش بر حسب طول دسته نانو لوله و طول نانو لوله‌ی منفرد آورده شده است.

۴-۱-۱- کمانش محوری دسته نانو لوله‌های کربنی

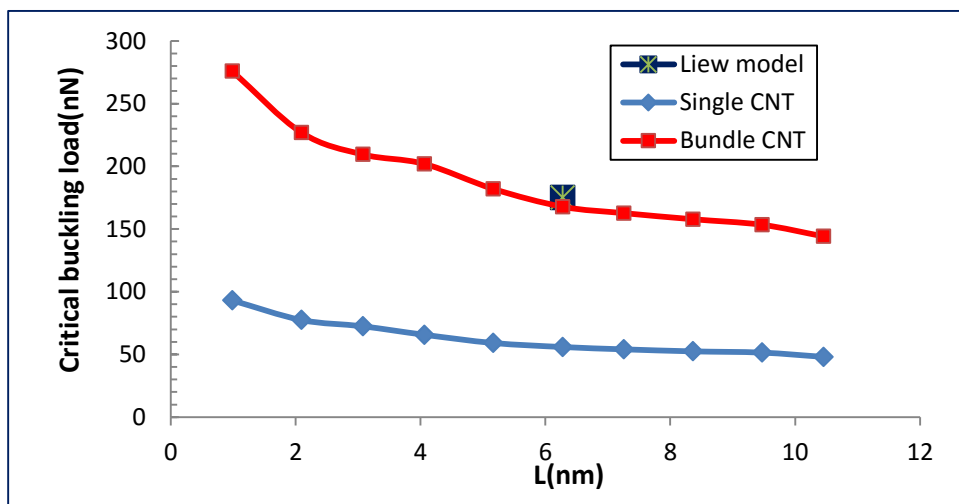
در این قسمت با استفاده از نرم افزار ABAQUS بار بحرانی کمانشی در شرایط مرزی مختلف تحلیل شده است.

الف- شرایط مرزی دو سر گیردار: در این شرایط مرزی صفحه‌ی پایین کاملاً ثابت و مقید شده و صفحه‌ی بالایی فقط در راستای اعمال نیرو قابلیت حرکت را دارد و در سایر جهات مقید شده است.

ب- شرایط مرزی ساده : در این حالت شرایط مرزی دو سر دسته نانو لوله شبیه به هم می‌باشند. هر دو انتها قابلیت چرخش در سه جهت را دارند؛ ولی قابلیت حرکت به سه جهت را ندارند، به غیر از صفحه‌ی اعمال نیرو که می‌تواند در راستای اعمال نیرو نیز حرکت داشته باشد.

ج- شرایط مرزی یک سر آزاد-یک سر درگیر: در این حالت نیز سر ثابت دسته نانو لوله مانند حالت اول کاملاً مقید و ثابت است؛ یعنی تمام حرکات و چرخش‌های آن مقید است و انتهای دیگر دسته نانو لوله کاملاً آزاد است.

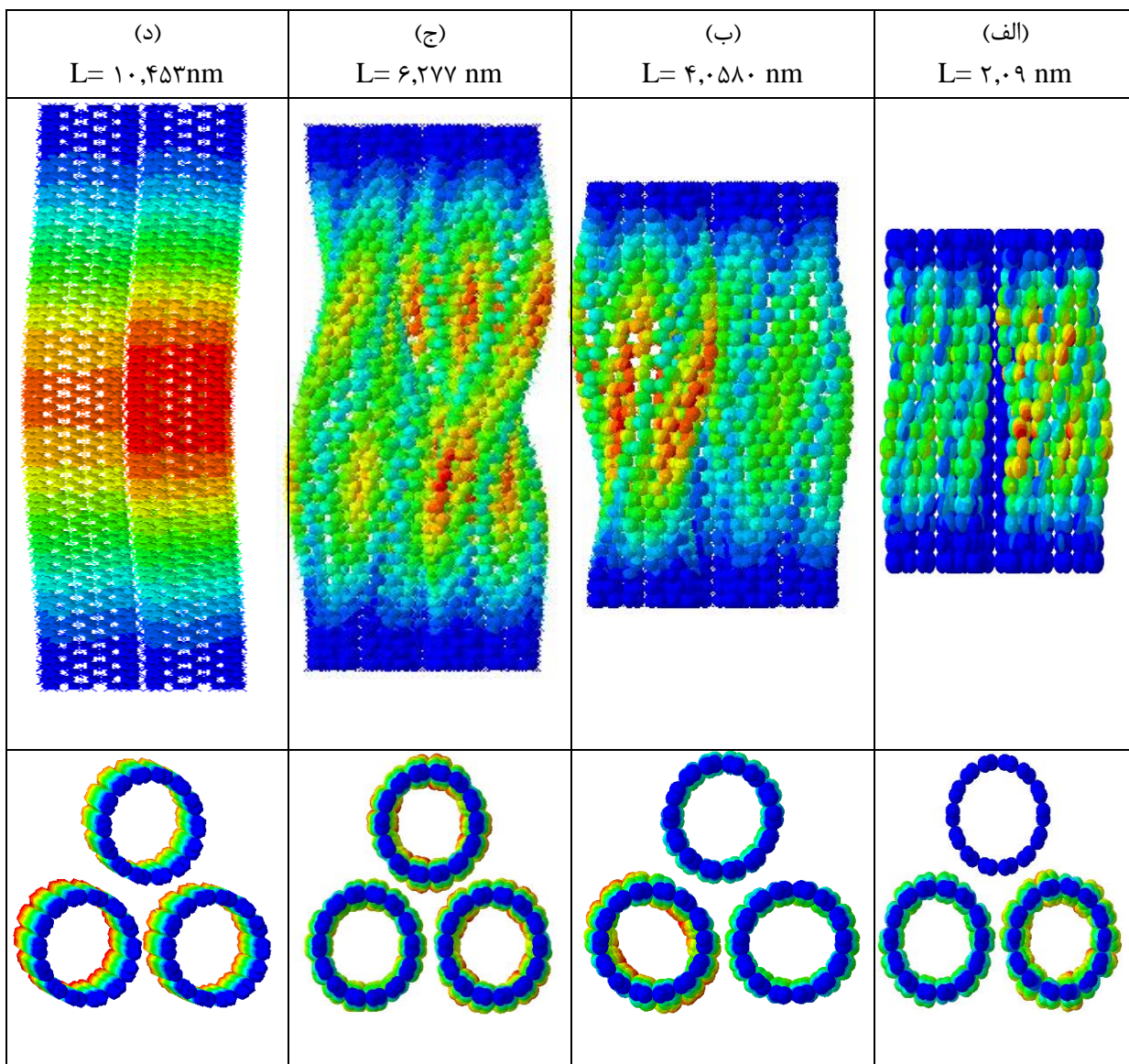
نمودار بار بحرانی کمانش برای دسته نانو لوله‌ی کربنی آرمچیر (۷ و ۷) بر حسب طول نانو لوله‌ی منفرد بدون در نظر گرفتن نیروی واندروالس در شکل (۱-۴) آورده شده است. نتایج بدست آمده با این مدل ساختاری با نتایج بدست آمده توسط لی مقایسه شده است [۴۸].



شکل (۱-۴)- بارهای کمانشی بحرانی برای دسته نانو لوله‌ی سه تایی بر حسب طول دسته نانو لوله برای شرایط مرزی دو سر گیر دار

همان طور که در شکل (۱-۴) مشاهده می‌شود، برای نانو لوله‌ی منفرد و دسته نانو لوله با افزایش طول بار کمانشی بحرانی کاهش می‌یابد. کاهش بار کمانشی بحرانی به دلیل افزایش طول نانو لوله‌ی منفرد در دسته می‌باشد. با توجه به شکل می‌توان دید که با افزایش طول، شیب نمودار تغییر می‌کند که این امر به دلیل تغییر در شکل مدهای کمانش اتفاق می‌افتد. این تغییرات در شکل (۲-۴) نشان داده شده‌اند. همان طور که مشاهده می‌شود، در طول‌های کوتاه نانو لوله‌های کربنی دچار

کمانش پوسته‌ای شده و با افزایش طول به سمت کمانش اوپلر پیش می‌روند. بر این اساس شکل مدها به ترتیب به صورت تک موج سه پهلوی، تک موج دو پهلوی، دو موج و سه موج ظاهر می‌شوند و در انتها به صورت کمانش اوپلری در می‌آیند. بر اساس آنچه که در شکل‌های زیر دیده می‌شود، هر سه نانو لوله زمانی که بین آن‌ها نیروی واندر والس موجود نباشد، با یکدیگر دچار تغییر شکل و کمانش نمی‌گردند.

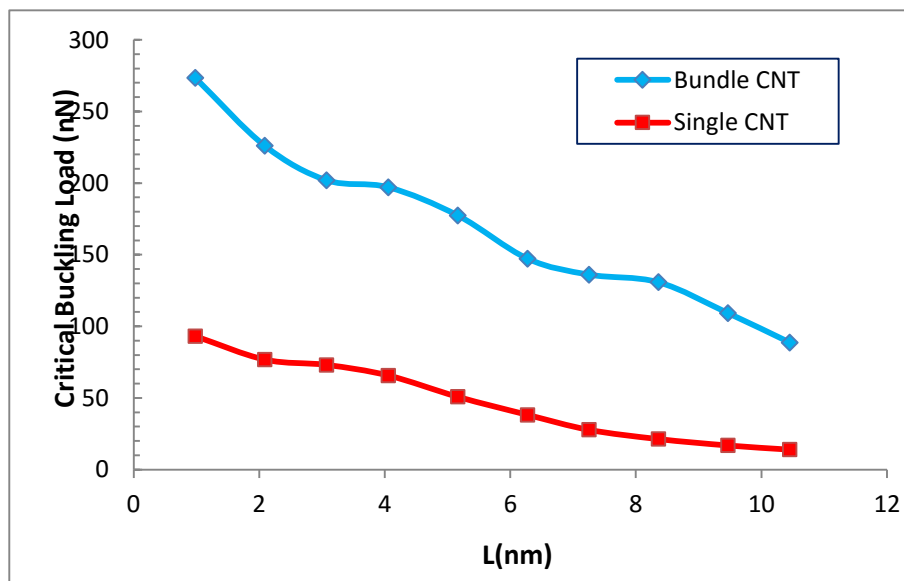


شکل (۴-۲) - شکل مدهای ناشی از کمانش نانو لوله‌های آرمچیر (۷،۷) با شرایط مرزی دو سر ثابت در طول‌های متفاوت (الف) مد پیچشی تک موج، (ب) دو موج (ج) سه موج (د) مد کمانش اوپلری.

این تغییر شکل نامتقارن با نتایج بدست آمده لی [۴۸] که در شکل (۲-۱۸) فصل دوم نشان

داده شده‌اند نیز مطابقت دارد و دلیل آن تغییر شکل‌های خیلی کوچک در ساختار مدل می‌باشد که

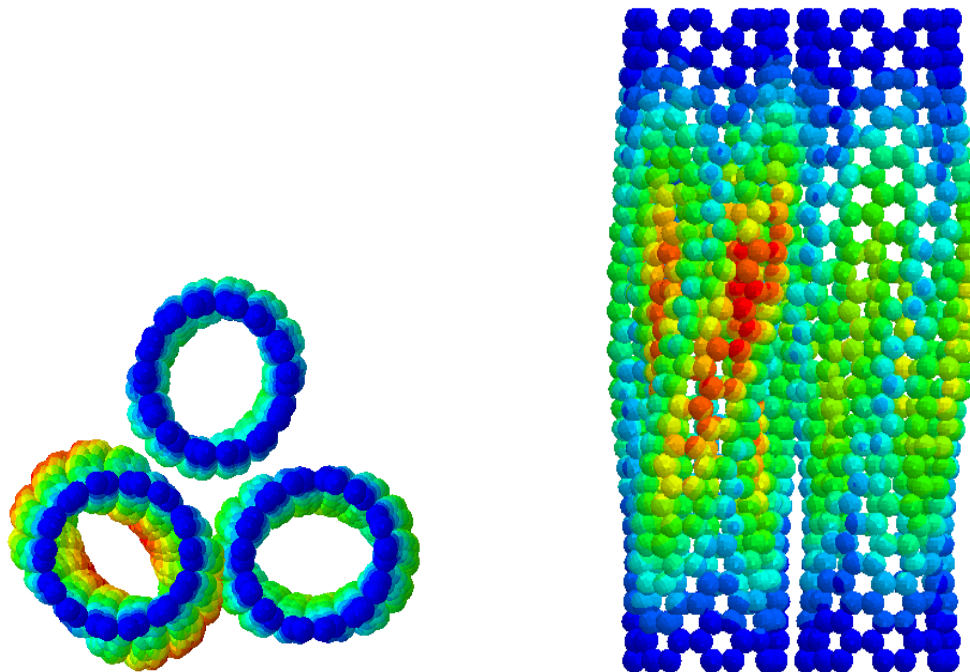
سبب تغییر شکل بیشتر در یک لوله نسبت به سایر لوله‌ها در دسته می‌شود. تغییر شکل کمانشی در مدهای مختلف متفاوت می‌باشد و در هر مد کمانشی یک نانو لوله دچار تغییر شکل می‌گردد. در شکل (۳-۴) بار کمانش بحرانی برای شرایط مرزی دو سر ساده برای طول‌های مختلف دسته نانو لوله‌ی آرمچیر تحت بار محوری فشاری آورده شده است. به طور کلی می‌توان گفت روند تغییرات بار کمانش بحرانی مشابه با روند تغییرات در کمانش با شرایط مرزی دو سر ثابت می‌باشد ولی بار کمانش بحرانی برای کمانش با شرایط مرزی دو سر لولا کمتر از بار کمانشی دو سر ثابت می‌باشد و نیز مقدار کاهش بار کمانشی با افزایش طول بیشتر از مقدار کاهش شرایط مرزی دو سر ثابت مشاهده می‌شود. همان طور که انتظار می‌رود، بار کمانشی بحرانی دسته نانو لوله بیشتر از نانو لوله‌ی منفرد می‌باشد و مقدار آن در این حالت که نیروی واندروالس بین لوله‌ها وجود ندارد، تقریباً سه برابر بار بحرانی نانو لوله‌ی منفرد می‌باشد.



شکل (۳-۴) - بارهای کمانشی بحرانی برای دسته نانو لوله‌ی سه تایی بر حسب طول دسته نانو لوله برای شرایط مرزی دو سر ساده.

شکل (۴-۴) مد کمانشی بحرانی برای دسته نانو لوله‌ی سه تایی دسته نانو لوله‌ی منفرد با طول $L=4,058 \text{ nm}$ برای شرایط مرزی دو سر ساده را نشان می‌دهد. در طول‌های کوچک، شکل مد

کمانش حالت دو سر ساده، فقط نانولوله‌ها حول محور مرکزی خود دچار چرخیدگی می‌شوند؛ اما برای طول‌های بزرگ، پیچیدگی نانولوله‌ها وجود ندارد و فقط خم می‌شوند.

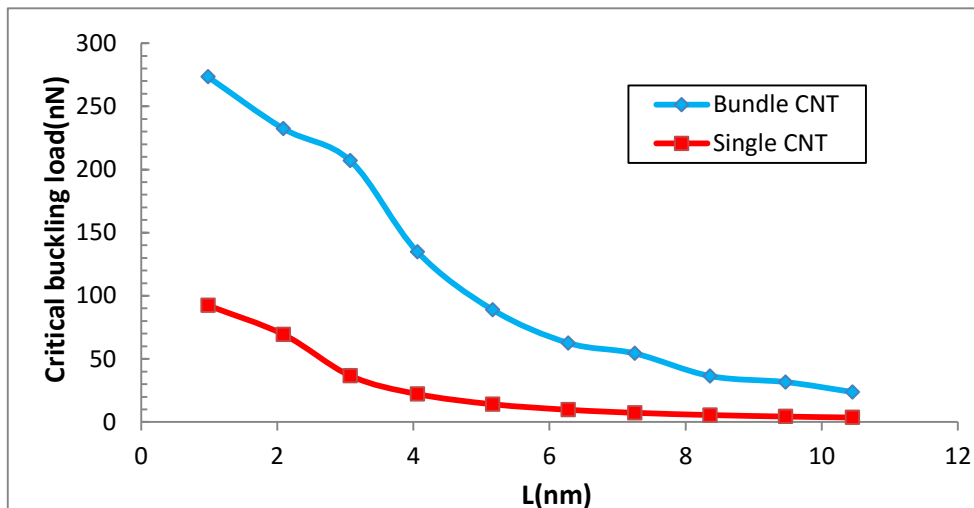


شکل (۴-۴) - مد کمانشی بحرانی برای دسته نانولوله‌ی سه تایی دسته نانولوله‌ی منفرد با طول $L=4,058 \text{ nm}$ برای شرایط مرزی دو سر ساده

در شکل (۴-۵) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب طول دسته نانولوله برای دسته نانولوله‌ی سه تایی و نانولوله‌ی منفرد برای شرایط مرزی یک سر آزاد یک سر گیر دار آورده شده است. مشاهده می‌شود که در اینجا نیز روند تغییرات بار کمانشی بحرانی برای دسته نانولوله و نانولوله‌ی منفرد شبیه به دو شرایط مرزی قبلی می‌باشد و بار کمانش بحرانی دسته نانولوله بیشتر از نانولوله منفرد می‌باشد و با افزایش طول، بار کاهش می‌یابد؛ با این تفاوت که مقدار بار بحرانی به علت آزاد بودن یک انتهای نانولوله، کمتر از دو شرایط مرزی قبلی بوده و برای طول‌های بیشتر، اختلاف بار بحرانی دسته نانولوله‌ی آرمچیر به نانولوله‌ی منفرد نزدیک می‌شود.

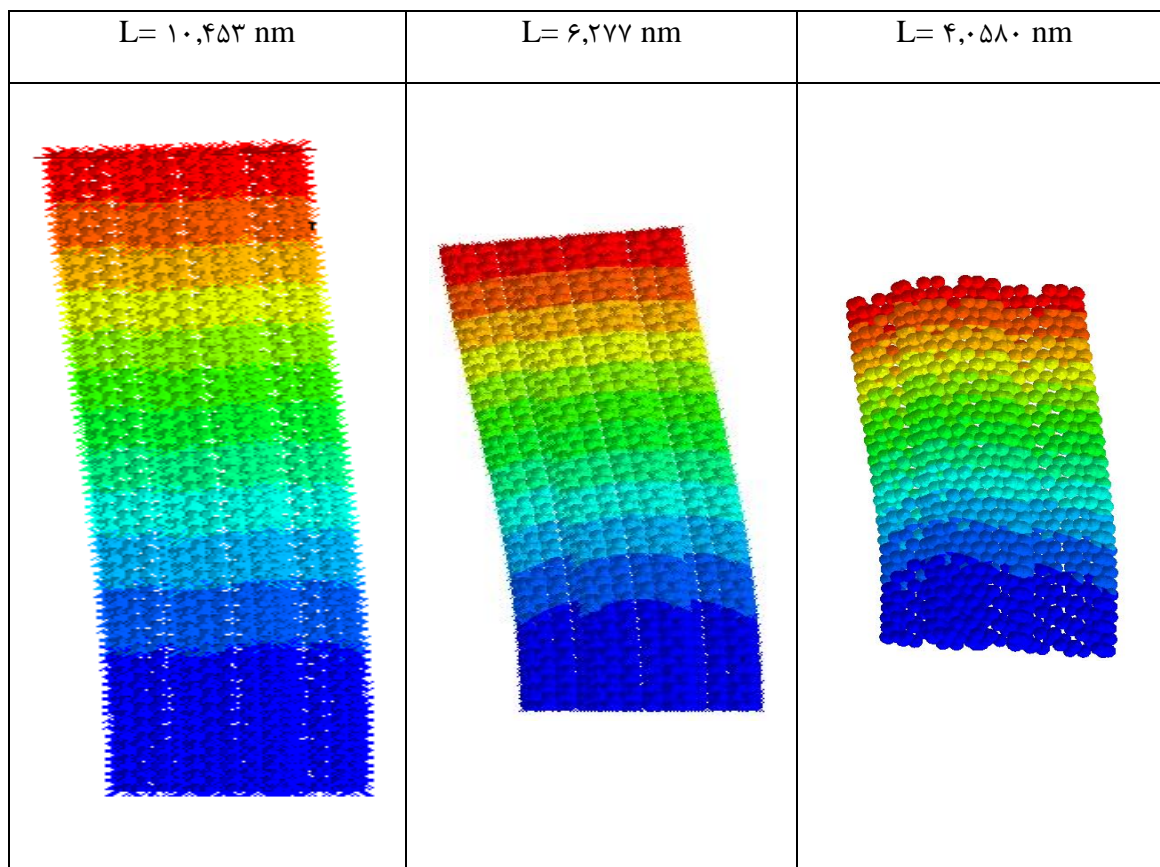
شکل مدهای ناشی از کمانش دسته نانولوله‌های کربنی آرمچیر برای سه طول $4,058 \text{ nm}$ ، $6,272 \text{ nm}$ و $10,453 \text{ nm}$ در شکل (۴-۶) آورده شده است. همان طور که در این شکل دیده می‌شود، مد کمانشی با شرایط مرزی یک سر آزاد برای طول‌های بالا تقریباً یکسان می‌باشد. اما برای

طول‌های کوچک که دچار کمانش می‌گردند، دیواره آن‌ها دچار پیچیدگی می‌شود که این رفتار در طول‌های بلند دیده نمی‌شود، مشخص است که تفاوت در شکل مدهای کمانش آن‌ها به دلیل تفاوت در ساختار دیواره‌های آن‌ها می‌باشد.

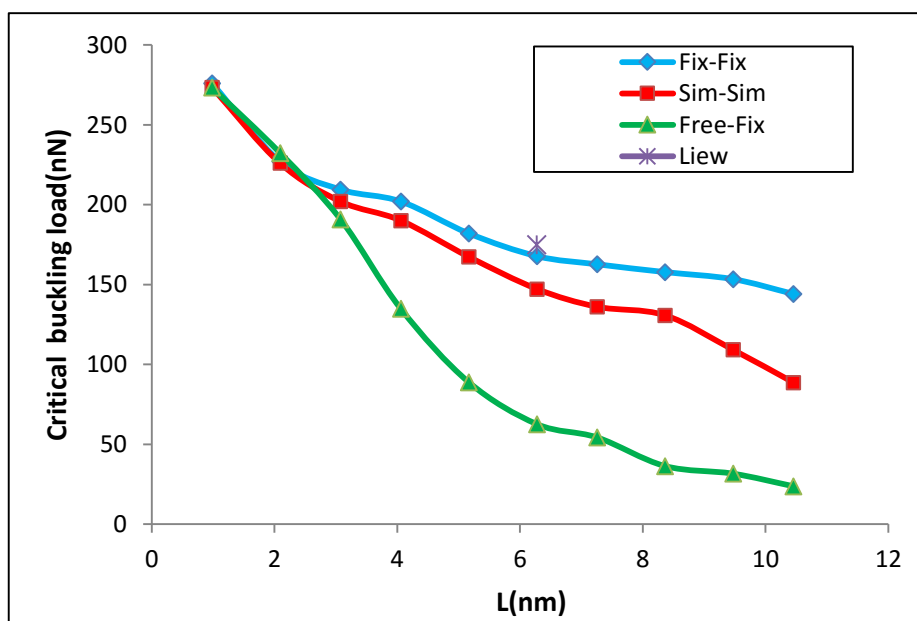


شکل (۴-۵) - بارهای کمانشی بحرانی برای دسته نانو لوله‌ی سه تایی بر حسب طول دسته نانو لوله‌ی منفرد برای شرایط مرزی یک سر آزاد- یک سر درگیر

در نمودار (۴-۷) بار کمانشی بحرانی در سه شرایط مرزی مختلف مقایسه شده است. با افزایش طول نانو لوله در هر سه شرایط مرزی از میزان بار بحرانی کمانش کاسته می‌شود. همچنین بار بحرانی کمانش دسته نانو لوله سه تایی علیرغم افزایش طول دسته نانو لوله، تمایل به رسیدن به مقدار مینیمم را دارد. ماکزیمم و مینیمم مقادیر بار کمانشی بحرانی برای تمام طول‌های نانو لوله منفرد، به ترتیب برای شرایط مرزی دو سر گیردار و یک سر آزاد-یک سر درگیر دیده می‌شود.



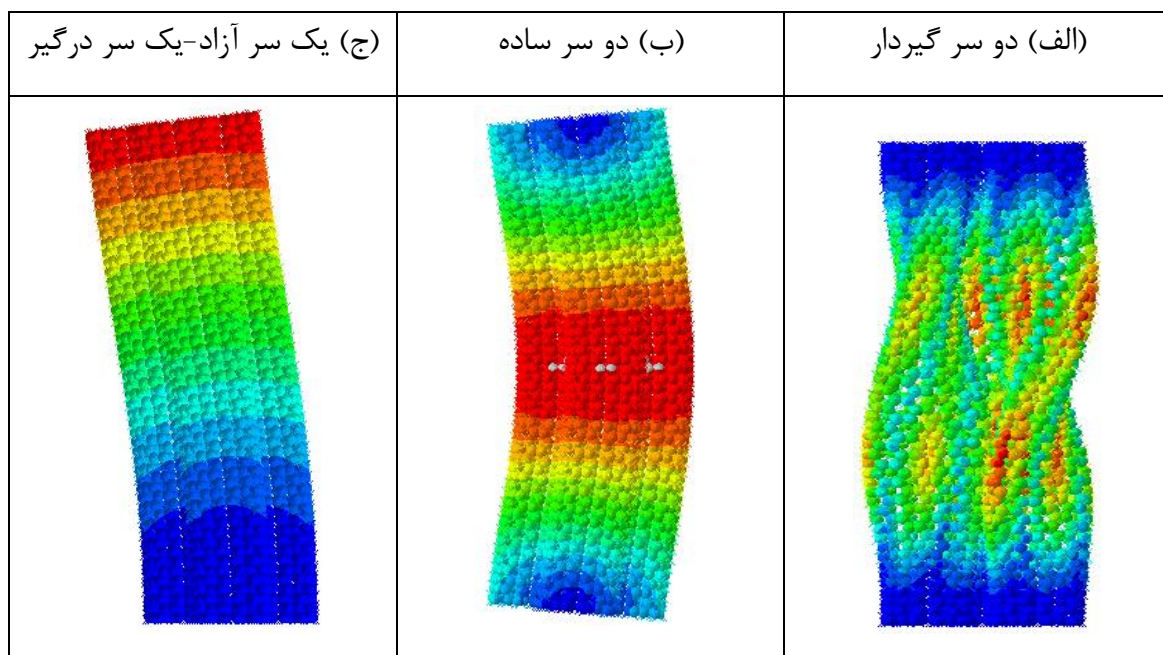
شکل (۴-۶) - شکل مدهای ناشی از کمانش دسته نانولوله‌های آرمچیر (۷ و ۷) در شرایط مرزی یک سر آزاد یک سر درگیر در طول‌های متفاوت



شکل (۴-۷) - بارهای کمانشی بحرانی برای دسته نانولوله‌ی سه تایی بر حسب طول دسته نانولوله‌ی منفرد

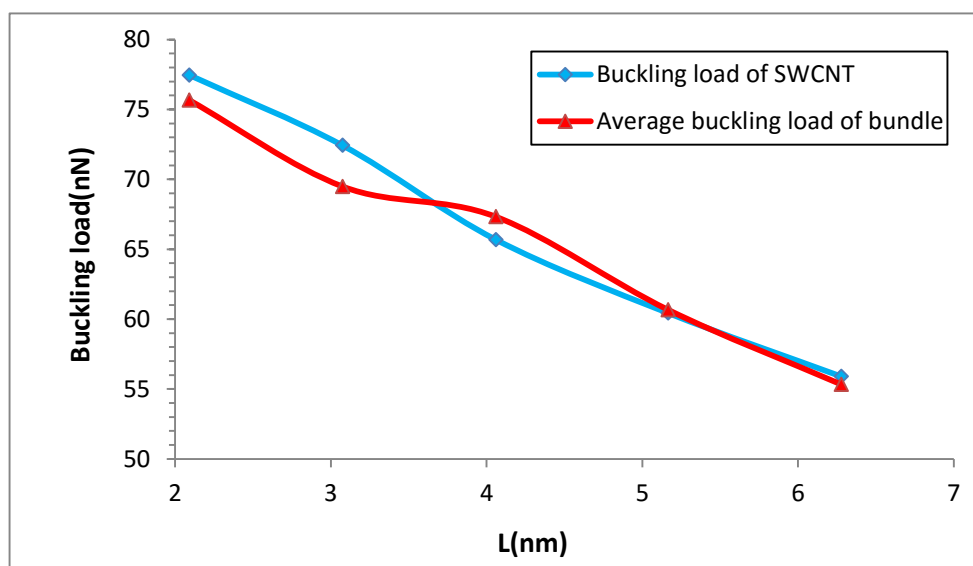
برای طول‌های کوچک تا حدود ۲ nm، مقادیر بار بحرانی کمانش برای هر سه شرط مرزی تقریباً یکسان می‌باشند، دلیل نزدیکی مقادیر بار بحرانی در سه شرایط مرزی در طول‌های کوچک، تغییر شکل مد کمانشی آنها می‌باشد که در سه حالت دسته نانو لوله دچار پیچیدگی دیواره‌ها می‌گردند و در طول‌های بلند دچار خمش می‌گردند. برای طول به قطر بین ۲,۲ nm و ۵,۴۳۷nm بار بحرانی کمانش در شرایط دو سر ثابت و دو سر ساده تقریباً با هم برابر می‌باشند. دلیل نزدیک بودن بار بحرانی کمانش در دو شرایط مرزی دو سر ثابت و دو سر ساده نیز یکسان بودن شکل مدهای کمانشی آنها می‌باشد.

هنگامی که نانو لوله تحت کمانش قرار می‌گیرد، دچار تغییر شکل ساختاری می‌گردد. شکل (۸-۴) مدهای کمانشی مختلف دسته نانو لوله سه تایی آرمچیر با طول ۶,۲۷۲ را برای شرایط مرزی دو سر ثابت و دو سر ساده و یک سر آزاد را نشان می‌دهد. همان طور که از نمودار پیش آشکار بود، زمانی دسته نانو لوله دارای مد کمانش پیچشی باشد؛ بیشترین بار کمانش بحرانی را دارد. هنگامی که تغییر شکل مد کمانشی از حالت پیچیدگی به خمیده شدن رخ دهد، مقدار بحرانی دچار افت بیشتری نسبت به طول‌های کوچکتر از خود می‌شود.



شکل (۸-۴) - شکل مدهای کمانش دسته نانو لوله‌ی کربن (۷,۷) تحت آنالیز کمانش

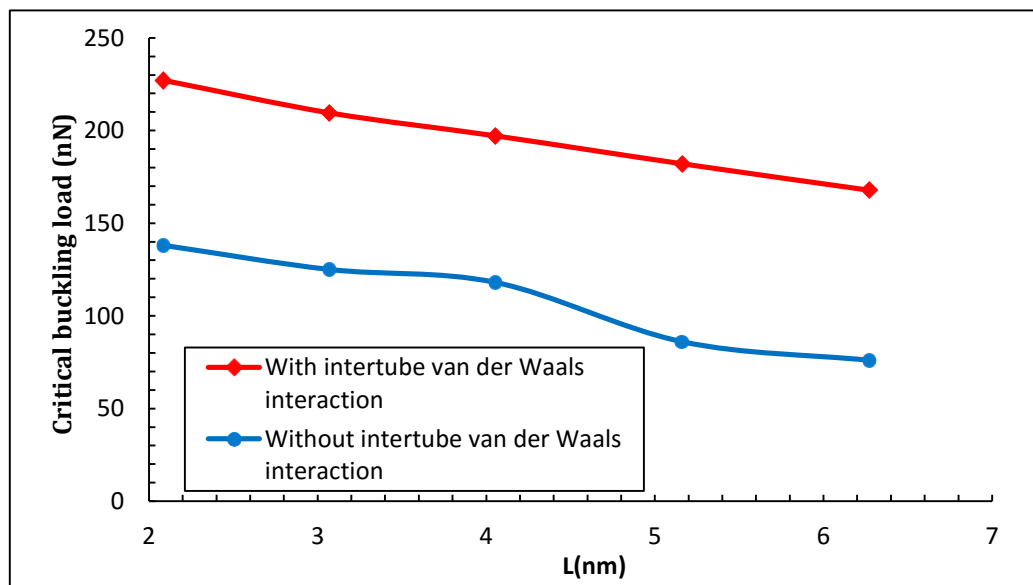
برای مقایسه‌ی بار کمانشی بحرانی متوسط یک دسته نانو لوله‌ی سه تایی با نانو لوله‌ی کربنی منفرد در شرایط مرزی دو سر ثابت نمودار شکل (۴-۹) رسم شده است. همان طور که از شکل (۴-۹) مشهود است، بار کمانشی بحرانی متوسط دسته نانو لوله‌ی سه تایی، در صورتی که پیوند واندروالس بین لوله‌ها در نظر گرفته نشود، بسیار نزدیک به بار کمانشی نانو لوله‌ی منفرد می‌باشد. بنابر این می‌توان نتیجه گرفت که بار کمانش بحرانی دسته نانو لوله‌های کربنی متناسب با بار بحرانی متوسط هرکدام از نانو لوله‌های منفرد درون دسته نانو لوله می‌باشند. این اطلاعات اجازه‌ی یک محاسبه‌ی ساده برای دسته نانو لوله‌های بیش از صد نانو لوله‌ی منفرد بدون محاسبات کامپیوتری گسترده و همچنین شبیه سازی‌های دینامیک مولکولی برای میلیون‌ها اتم را می‌دهد. این نتیجه با نتایج لی [۴۸] نیز هماهنگی دارد.



شکل (۴-۹)- با بحرانی کمانش متوسط و بار کمانش بحرانی دسته نانو لوله سه تایی با شرایط مرزی دو سر ثابت

برای فهم اثر نیروی واندروالس بر روی خواص فشاری، خمشی و پیچشی دسته نانو لوله‌های کربنی، دو نوع شبیه سازی ساختاری مدل سازی شده است: با در نظر گرفتن نیروی واندر والس و بدون در نظر گرفتن این نیرو بین لوله‌های دسته نانو لوله‌ی کربن. در محاسبات تنها از نیروی واندروالس درون یک نانو لوله صرف نظر شده است. شکل (۴-۱۰) بار کمانشی برای طول‌های مختلف دسته نانو لوله‌های کربنی را، با و بدون در نظر گرفتن المان‌های پیوندی بین لوله‌ای را نشان می‌دهد.

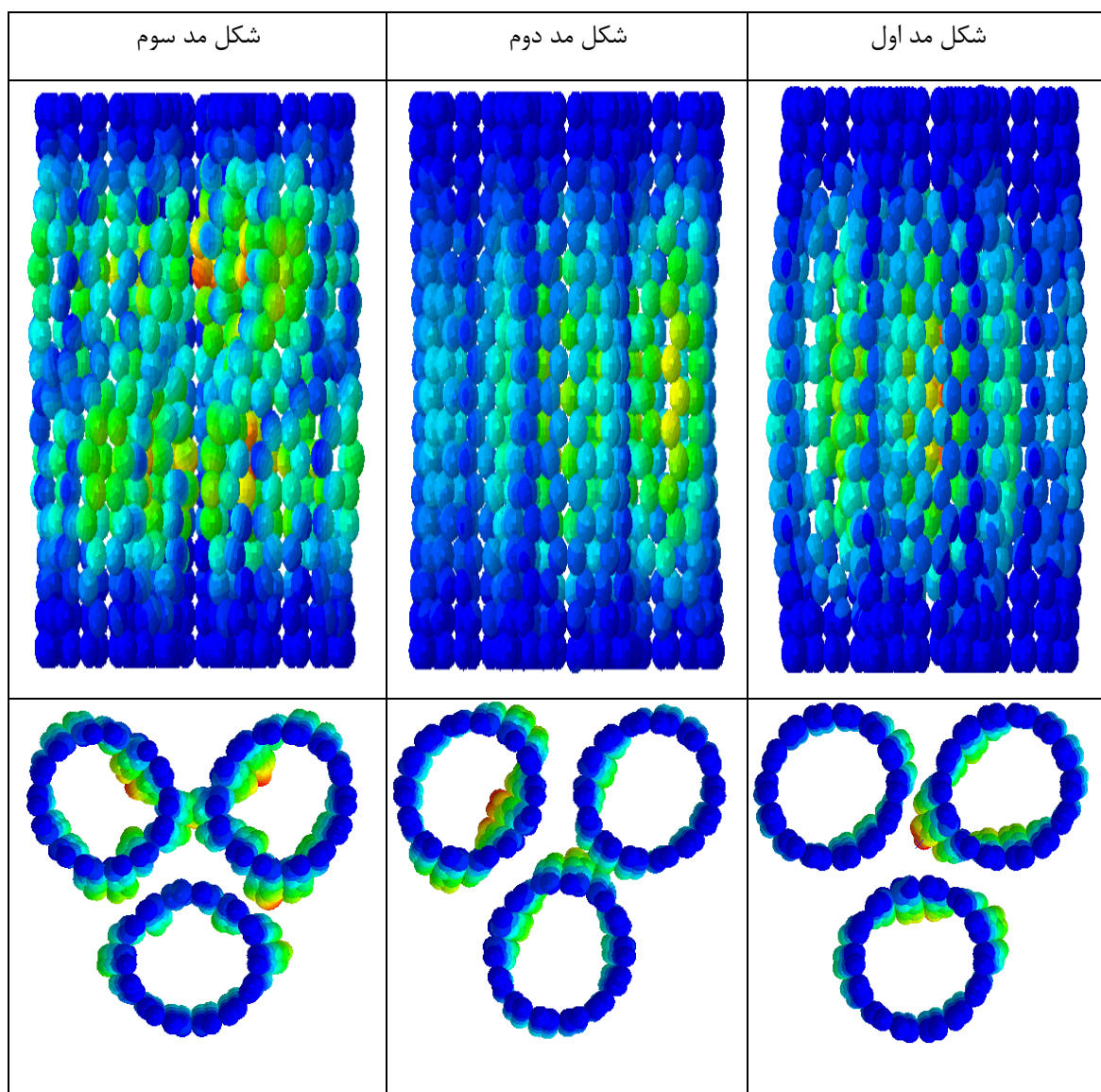
از این نمودار می‌توان دریافت که علیرغم اینکه در دو مدل ساختاری که از یک تعداد مساوی لوله‌ی کربنی تشکیل شده‌اند، بار کمانش بحرانی با افزایش طول دسته نانو لوله به صورت یک تابع نمایی کاهش می‌یابد. اگرچه بار کمانش بحرانی در هر دو مدل ساختاری دسته نانو لوله با افزایش طول کاهش می‌یابد؛ ولی مدل ساختاری که در بین لوله‌های آن نیروی واندروالس اعمال شده است، دارای بار کمانش بحرانی کمتری نسبت به مدل بدون در نظر گرفتن این پیوند می‌باشد. این خاصیت دسته نانو لوله همراه با پیوند بین لوله‌ای با یافته‌های لی و همکارانش [۴۸] و همچنین لو^۱ [۳۰] مطابقت دارد. آنها نشان داده‌اند که دسته نانو لوله‌های کربنی تمایل به داشتن مدول الاستیک پایین‌تر در مقایسه با نانو لوله کربن منفرد می‌باشند. این تمایل به این دلیل است که پیوند ضعیف واندروالس باعث جلوگیری از حرکت و چرخش نانو لوله‌ی منفرد در دسته نانو لوله می‌شود.



شکل (۴-۱۰) - بارهای کمانشی بحرانی برای طول‌های مختلف با و بدون در نظر گرفتن نیروی واندروالس
 شکل (۴-۱۱) مدهای کمانشی را برای طول $L = 2,09 \text{ nm}$ در شرایط مرزی دو سر ثابت با در نظر گرفتن پیوند واندروالس بین لوله‌ای در نمای روبرو و سطح مقطع باندل را نشان می‌دهد. زمانی که پیوند واندروالس بین لوله‌ها وجود نداشته باشد؛ در تمام شکل مدها هر سه لوله هم زمان با هم دچار کمانش نمی‌شوند. این مسئله ممکن است به دلیل اختلاف‌های بسیار جزئی در مدل سازی آنها باشد؛

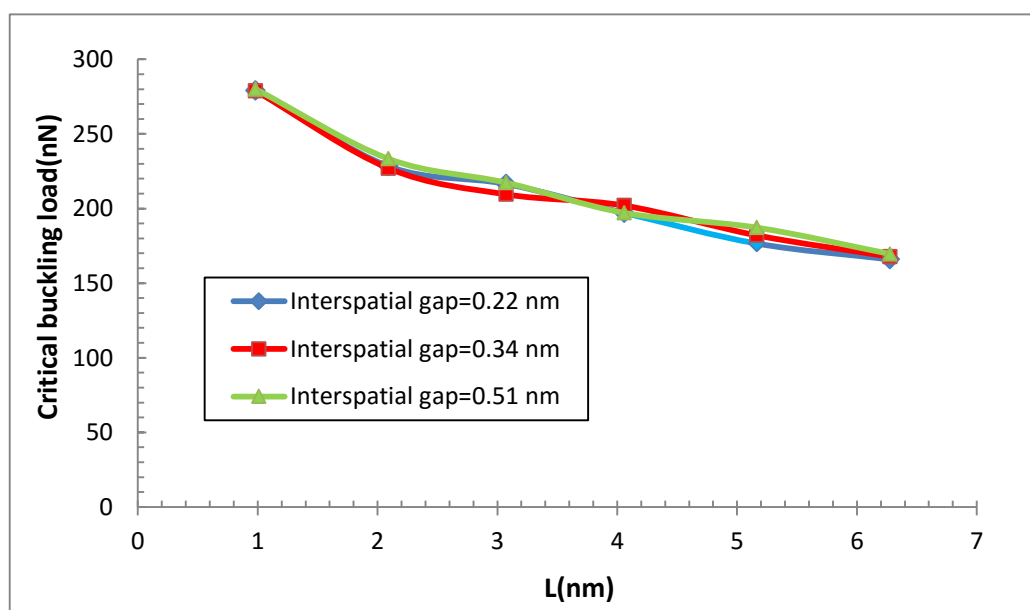
^۱ -Lu

اما هنگامی که نیروی واندروالس بین لوله‌ای بین اتم‌های هر سه لوله وجود داشته باشد، هر سه لوله با هم دچار کمانش می‌شوند؛ زیرا اتم‌های سه لوله با یکدیگر توسط فنر غیر خطی مرتبط می‌باشند و جابجایی هر اتم، اتم‌های دیگری را که در لوله‌های مجاور با فنر به آنها متصل شده است را تحت تأثیر قرار می‌دهد و جابجایی‌های اتمی را به آنها تحمیل می‌کند. در نتیجه‌ی این عمل و عکس العمل هر سه نانو لوله با هم دچار کمانش می‌گردند. اما به علت مد شکل‌های متفاوت نانو لوله‌ی منفرد درون دسته در هر مد کمانشی یک لوله دچار تغییر شکل بیشتری نسبت به سایرین می‌شود.



شکل (۴-۱۱) - شکل مدهای کمانش بحرانی برای طول‌های مختلف با نیروی واندروالس برای طول ۲ nm

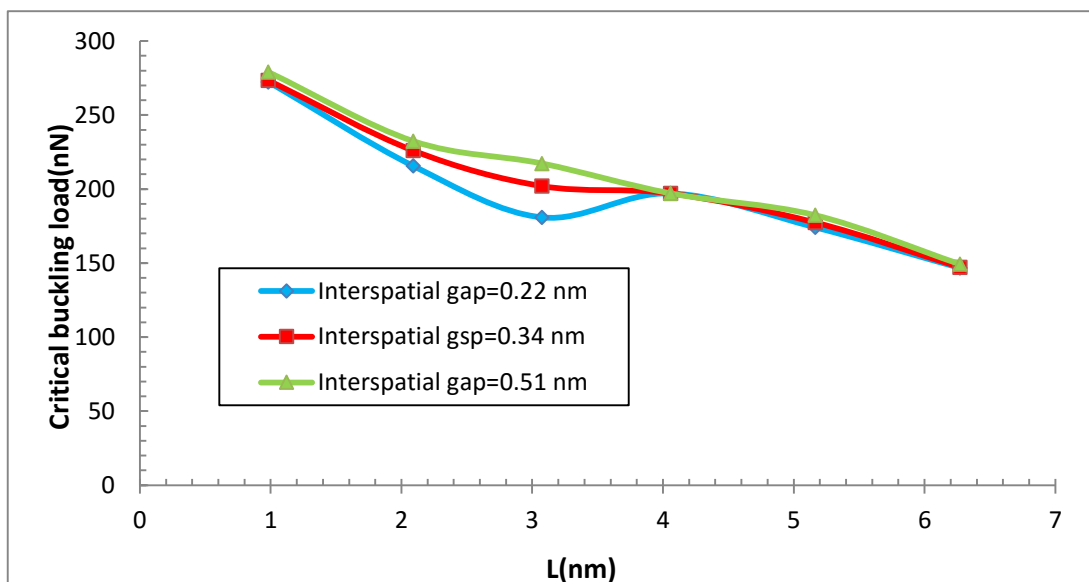
همان طور که در فصل شبیه سازی توضیح داده شد دسته نانو لوله با سه فاصله‌ی بین لوله‌ای همان 0.22 nm ، 0.34 nm و 0.51 nm شبیه سازی شده اند. شکل (۴-۱۳) تأثیر فاصله‌ی بین لوله‌ای بر روی بار کمانش بحرانی دسته نانو لوله سه تایی آرمچیر را برای حالتی که دو سر باندل ثابت می‌باشند را نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌شود، با افزایش طول نانو لوله‌ها از میزان بار بحرانی کمانش کاسته می‌شود. با توجه به شکل می‌توان دید که در طول طولی $L=2$ شیب نمودار تغییر می‌کند که این امر به دلیل تغییر در شکل مدهای کمانش اتفاق می‌افتد.



شکل (۴-۱۲)- بارهای کمانشی بحرانی برای طول‌های مختلف برای حالت دو سر ثابت

با توجه به شکل (۴-۱۲) می‌توان دید که تغییر فاصله‌ی بین نانو لوله‌ها در دسته نانو لوله، زمانی که پیوند واندر والس بین آن‌ها نباشد، تأثیر قابل توجهی بر بار کمانش بحرانی دسته نانو لوله نمی‌گذارد. نزدیک بودن مقادیر بارهای کمانشی بحرانی برای سه فاصله‌ی بین لوله‌ای مختلف با نتایجی که توسط لی و همکارانش [۴۴] در دسته نانو لوله‌ی هفت تایی انجام شده است، تغییر فاصله‌ی بین لوله‌ای تأثیری کمی در مقدار بار بحرانی دسته نانو لوله با در نظر گرفتن نیروی واندر والس می‌گذارد.

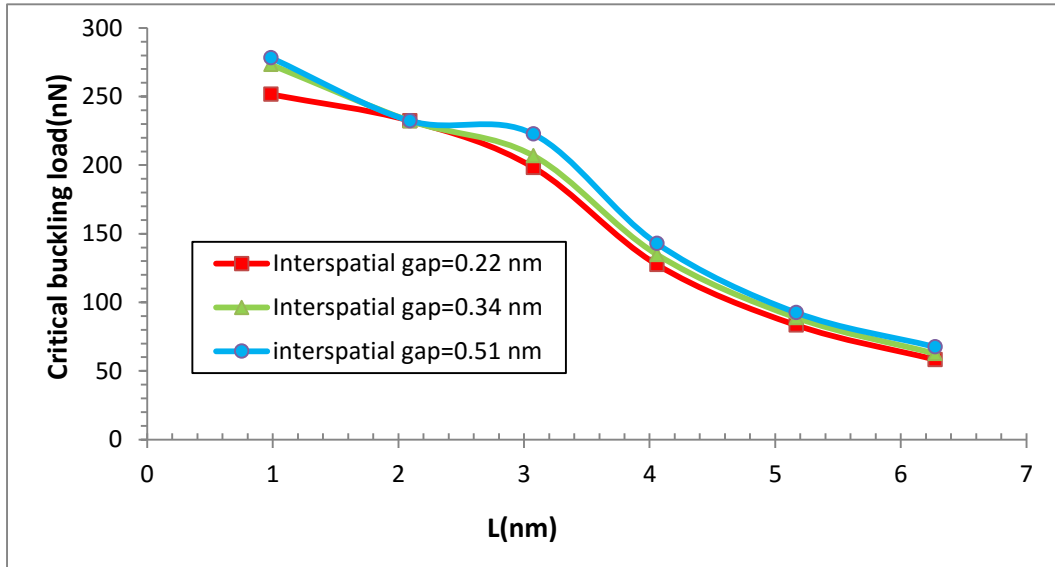
شکل‌های (۱۳-۴) و (۱۴-۴) بار بحرانی کمانشی را در دسته نانو لوله‌های کربنی با فواصل بین لوله‌ای متفاوت را برای شرایط مرزی دسته نانو لوله‌ی دو سر ساده و یک اثر آزاد را نشان می‌دهد. در این دو شرط مرزی هم مانند شرط مرزی قبل، تغییر فاصله‌ی بین لوله‌ای تأثیر کمی بر روی بار کمانشی بحرانی دسته نانو لوله بدون در نظر گرفتن نیروی واندروالس می‌گذارد. بار بحرانی کمانشی با افزایش طول در هر سه شرایط مرزی کاهش می‌یابد. در هر سه شرایط مرزی مورد بررسی، با توجه به نزدیک بودن مقادیر بار بحرانی کمانش برای هر سه فاصله‌ی بین لوله‌ای، ولی مقادیر بار بحرانی کمانش برای دسته نانو لوله‌ها با فاصله‌ی بین لوله‌ای ۰,۵۱ nm به مقدار اندکی بیشتر از دسته نانو لوله با شکاف‌های فاصله‌ای ۰,۲۲ nm و ۰,۳۴ nm می‌باشد.



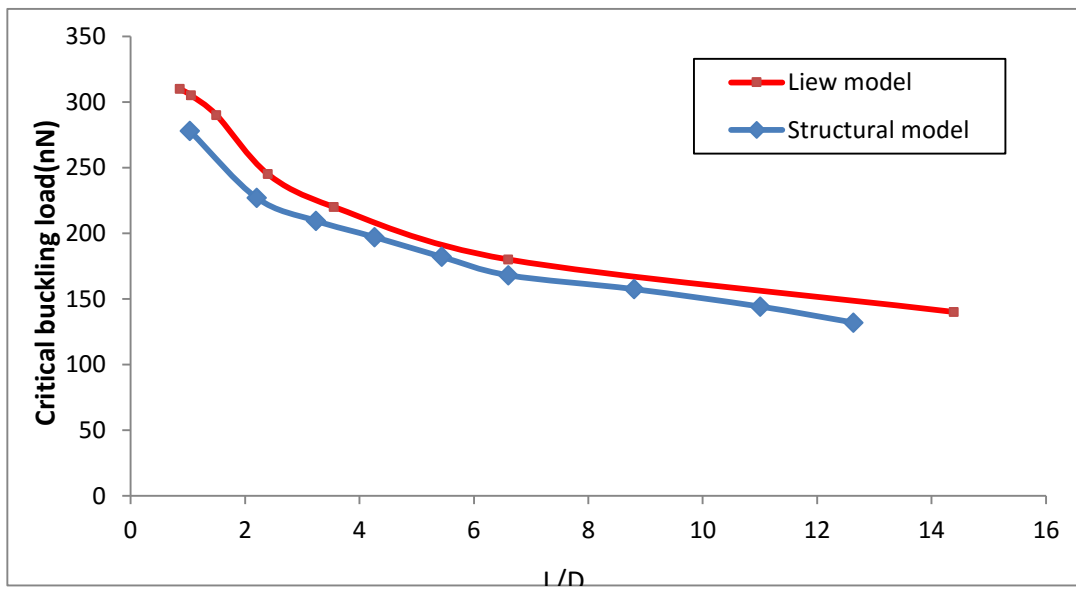
شکل (۱۳-۴) - بارهای کمانشی بحرانی برای طول‌های مختلف برای شرایط مرزی دو سر ساده، بدون در نظر گرفتن نیروی واندروالس

با توجه به نمودار، مقدار نیروی واندروالس بر حسب فاصله‌ی بین لوله‌ای مشخص می‌شود که اثر تدافعی نیروی واندروالس بین لوله‌ای در دسته نانو لوله با فاصله بین لوله ۰,۲۲ Nm، سبب کاهش بار بحرانی نسبت به دسته نانو لوله‌های با شکاف فاصله‌ای ۰,۳۴Nm و ۰,۵۱Nm می‌شود. شکل (۴-۴)

۱۵) بارهای کمانشی بحرانی برای طول‌های مختلف برای حالت یک سر آزاد برای مدل دینامیک مولکولی لی [۴۸] و مدل مکانیک ساختاری جدید را نشان می‌دهد.



شکل (۴-۱۴) - بارهای کمانشی بحرانی برای طول‌های مختلف برای شرایط مرزی یک سر آزاد-یک سر گیردار، بدون در نظر گرفتن نیروی واندروالس



شکل (۴-۱۵) - بارهای کمانشی بحرانی برای نسبت‌های طول به قطر نانو لوله‌ی منفرد مختلف برای حالت یک سر آزاد-یک سر گیردار

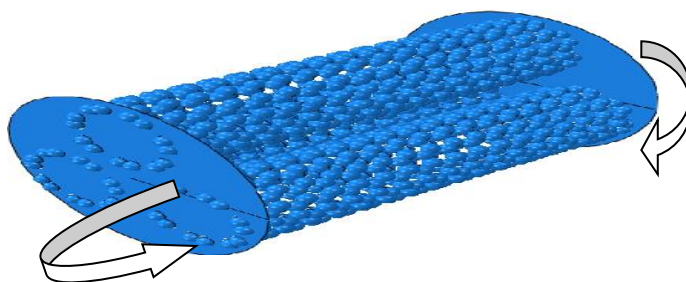
برای مقایسه‌ی نتایج بدست آمده مدل ساختاری جدید با مدل دینامیک مولکولی لی [۴۸]، بارهای بحرانی کمانش بحرانی برای دسته نانو لوله‌ی سه تایی با فاصله‌ی بین لوله‌ای ۰,۳۴ در شرایط مرزی دو سر ثابت در شکل (۴-۱۵) آورده شده است. اختلاف بین نتایج به دلیل دقت زیاد روش دینامیک مولکولی می‌باشد؛ روش دینامیک مولکولی دارای دقت بالا و می‌تواند محدوده‌ی وسیعی از مدل را حل کند، اما این روش همان طور که در فصل قبل هم اشاره شد روشی پر هزینه و زمان بر است. در مقابل مدل مکانیک ساختاری حاضر بدون نیاز به برنامه نویسی طولانی و پیچیده و در مدت زمان کوتاه قادر به حل مسأله می‌باشد، به همین دلیل دارای مزیت بیشتری نسبت به روش دینامیک مولکولی می‌باشد.

۲-۴- نتایج حاصل از کمانش نانو لوله‌های کربنی تحت ممان خمشی

در این بخش به منظور نشان دادن صحت مدل ارائه شده، ممان خمشی بحرانی در دسته نانو لوله‌های آرمچیر با طول‌ها و فواصل بین لوله‌ای و زوایای اعمال مومنتوم متفاوت مورد بررسی قرار گرفته است. همان طور که در فصل‌های گذشته اشاره شد، مقالات بسیار کمی در زمینه‌ی کمانش تحت فشار محوری ارائه شده و در زمینه‌ی کمانش دسته نانو لوله‌ها تحت ممان خمشی و پیچشی مدل دیگری وجود ندارد و تا به حال مقاله‌ای در این مورد ارائه نشده است.

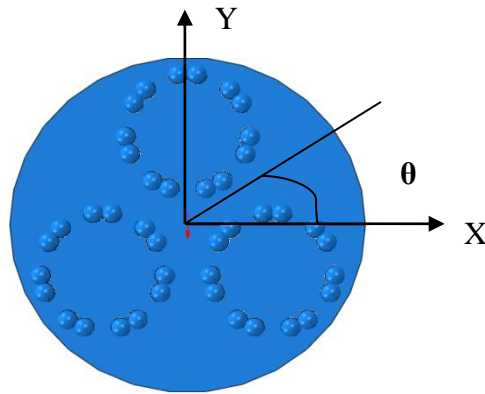
۲-۴-۱- کمانش خمشی دسته نانو لوله‌های کربنی در زوایای مختلف

در این فصل کمانش خمشی دسته نانو لوله‌های کربنی سه تایی آرمچیر (۷ و ۷) مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین اثرات تغییر در فاصله‌ی بین لوله‌ای و نیز وجود یا عدم وجود نیروی واندروالس در میان دسته نانو لوله‌ها مورد تحلیل شده است. برای اعمال گشتاور به دسته نانو لوله‌های کربنی، ابتدا دو صفحه به بالا و پایین دسته نانو لوله ثابت شده و سپس گشتاور خمشی به مراکز این دو صفحه وارد می‌گردد به نحوی که جهت اعمال گشتاور، برای مثال در جهت محور X در صفحه‌ی بالایی و در جهت مخالف محور X به صفحه‌ی پایینی اعمال می‌گردد. نحوه اعمال گشتاور در شکل (۴-۱۶) آورده شده است. ممان خمشی در راستای شعاع صفحه‌ی ابتدا و انتهای دسته نانو لوله وارد می‌شود. زاویه‌ی ممان نسبت به محور Xها در زوایای ۰ و ۲۲,۵ و ۴۵ و ۶۷,۵ و ۹۰ درجه مورد تحلیل قرار گرفته است.



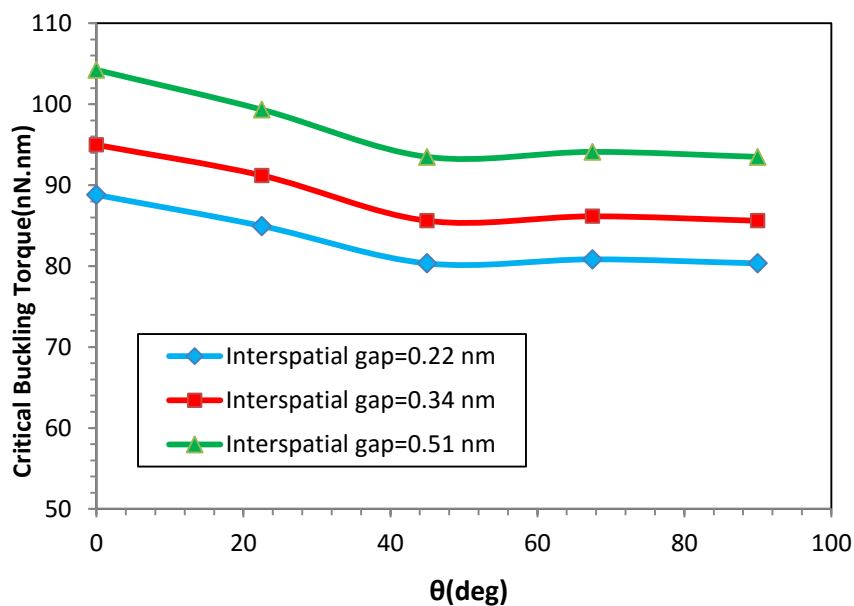
شکل (۴-۱۶)- اعمال ممان در جهت محور X

در این قسمت دسته نانو لوله‌ی کربنی تحت گشتاور در صفحه‌ی X و Y و در زوایای مختلف اعمال می‌شود. زاویه‌ی اعمالی مطابق شکل (۴-۱۷) از محور X ها شروع شده و تا محور Y افزایش می‌یابد.



شکل (۴-۱۷)- تغییرات زاویه‌ی اعمالی مومنتوم بین صفر تا ۹۰ درجه

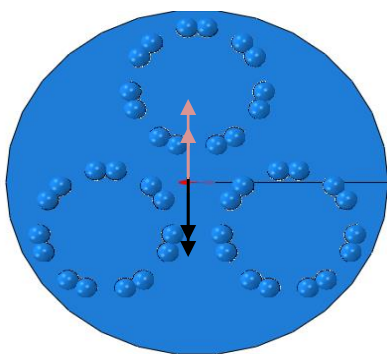
برای اینکه اثر فاصله بین لوله‌ای در مدل مکانیک ساختاری دسته نانو لوله‌ها معین شود، در نمودار شکل (۴-۱۸) ممان کمانشی خمشی در مدل ساختاری دسته نانو لوله‌های سه تایی با فواصل بین لوله‌ای متفاوت نشان داده شده‌اند. فواصل بین لوله‌ای که در این مدل از آن‌ها استفاده شده است؛ برابر 0.22 nm ، 0.34 nm و 0.51 nm می‌باشند.



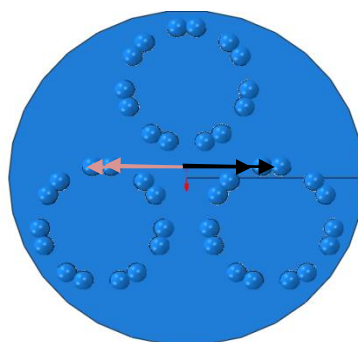
(۴-۱۸)- گشتاور بحرانی کمانشی برای دسته نانو لوله با طول $L=4.058$ در راستای مختلف

شکل (۴-۱۸) ممان بحرانی کمانش خمشی برای دسته نانو لوله با طول $4,058 \text{ nm}$ بر حسب زوایای مختلف اعمالی را نشان می‌دهد. زاویه‌ی اعمالی گشتاور در صفحه‌ای که در بالای دسته نانو لوله قرار دارد، از محور X شروع شده و به صورت پاد ساعتگرد افزایش می‌یابد. در این تحلیل مجموعاً پنج زاویه‌ی صفر، $22,5$ ، 45 ، $67,5$ و 90 درجه مورد تحلیل قرار گرفته‌اند. با افزایش زاویه‌ی اعمال گشتاور نسبت به محور X و در جهت مثلثاتی، گشتاور بحرانی کمانش کاهش می‌یابد و در زوایای بیشتر از حدود 45 درجه به مقدار ثابت می‌رسد. در مقابل با افزایش فاصله‌ی بین لوله‌ای مقدار گشتاور بحرانی افزایش می‌یابد. مقدار ماکزیمم و مینیمم ممان بحرانی کمانش خمشی به ترتیب مربوط به اعمال گشتاور در راستای محورهای X و Y می‌شود. علت اینکه گشتاور در زاویه‌ی قائمه دارای کم‌ترین مقدار گشتاور می‌باشد، این است که محور Y یکی از سه محور اصلی دسته نانو لوله در نظر گرفته می‌شود و محور تقارن دسته‌ی سه تایی نیز می‌باشد. شکل (۴-۱۹) جهت اعمال گشتاور به دسته نانو لوله در جهت محورهای X و Y را نشان می‌دهد. ممان رنگ مشکی مماسی است که به صفحه‌ی بالایی اعمال می‌شود و ممان خاکستری مماسی را نشان می‌دهد که در خلاف جهت مماسی بالایی، ولی در همان راستا به صفحه‌ی پایینی اعمال می‌شود.

(ب) در راستای محور Y



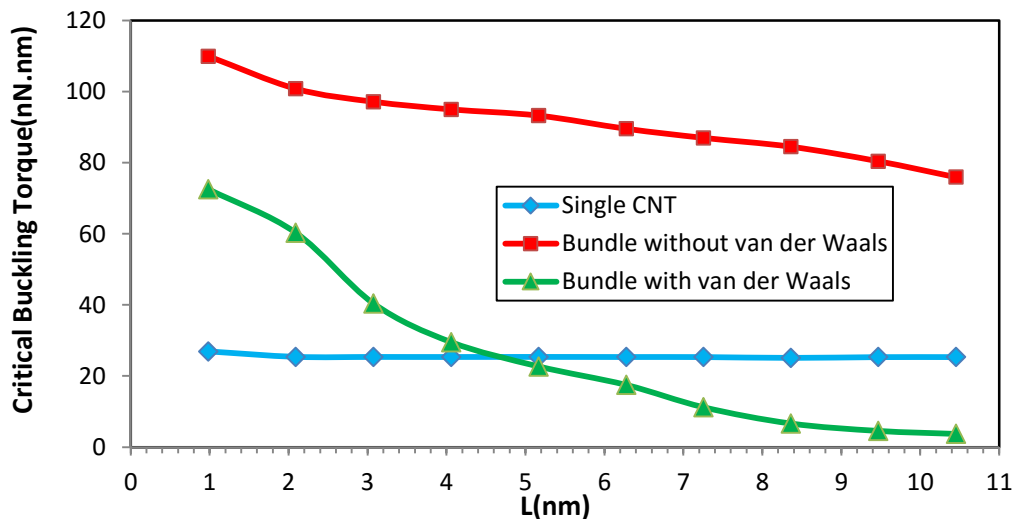
(الف) در راستای محور X



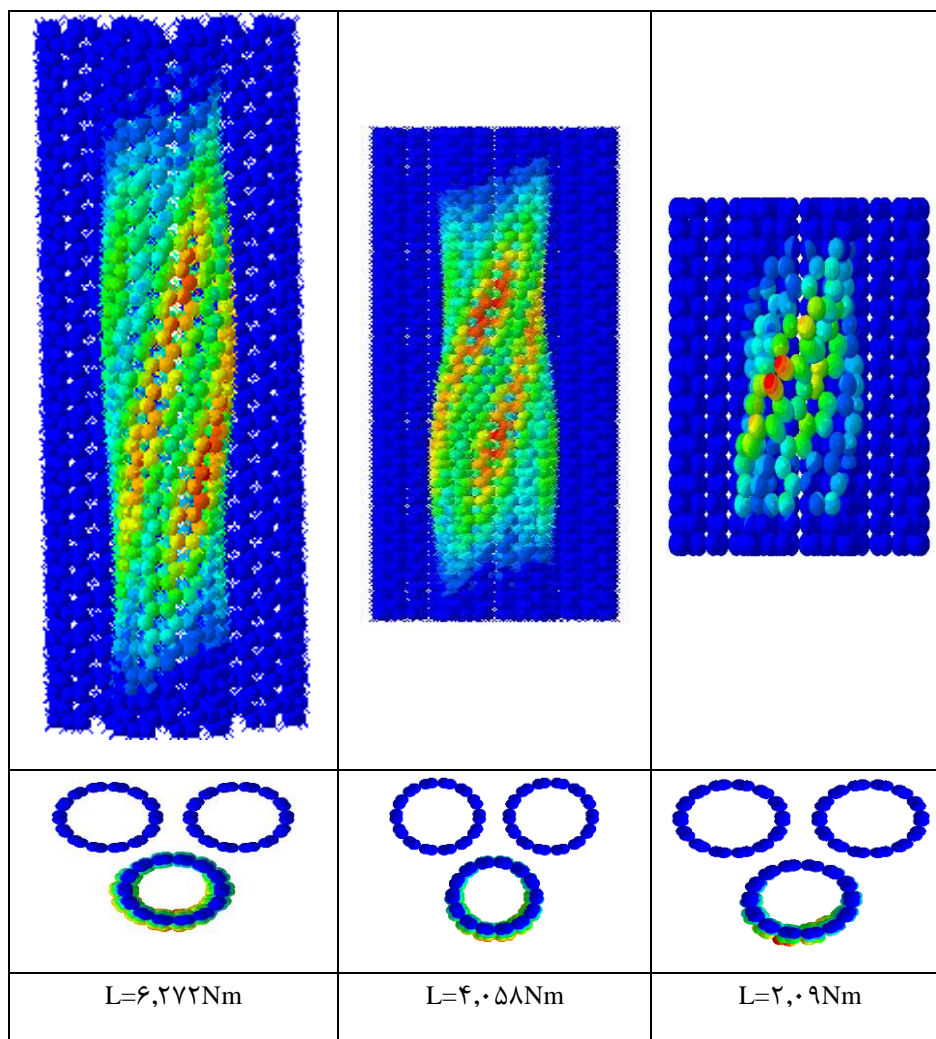
شکل (۴-۱۹) - جهت اعمال گشتاور به دسته نانو لوله در جهت محورهای X و Y

شکل‌های (۴-۲۰) مقادیر ممان بحرانی را برای طول‌های مختلف دسته نانو لوله با فاصله‌ی بین لوله‌ای $0,34 \text{ nm}$ را با در نظر گرفتن نیروی واندروالس و بدون در نظر گرفتن نیروی بین لوله‌ای

در دسته نانو لوله‌ی سه تایی در مقایسه با نانو لوله‌ی منفرد را نشان می‌دهد. ممان در دو صفحه‌ی ابتدا و انتهای دسته نانو لوله به ترتیب در جهت محور X و در خلاف جهت همان محور اعمال می‌گردد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، دسته نانو لوله‌ای که در آن پیوند واندروالس بین لوله‌ای در مدل مکانیک ساختاری آن به کار نرفته باشد؛ دارای ماکزیمم ممان بحرانی می‌باشد. ولی در دسته نانو لوله با در نظر گرفتن نیروی واندروالس نسبت به حالتی که در درون دسته نیروی بین لوله‌ای وجود ندارد، دارای بار کمانش بحرانی کمتری می‌باشد. نیروی واندروالس بین لوله‌های دسته سبب می‌شود در طول‌های بلند، بار کمانش بحرانی دسته نانو لوله با پیوند بین لوله‌ای از بار کمانش بحرانی نانو لوله منفرد نیز کمتر شود. نیروی واندروالس با اینکه نیروی ضعیفی در فاصله‌های بیش از 0.3 nm در نظر گرفته می‌شود؛ اما در فاصله‌ی بین اتمی کمتر از 0.3 nm این نیرو افزایش می‌یابد و اثر زیادی بر روی بار کمانش بحرانی می‌گذارد. این نیرو سبب ایجاد ناهماهنگی در تغییر شکل مد کمانشی در طول‌های بزرگ نسبت به طول‌های کوچک می‌شود.

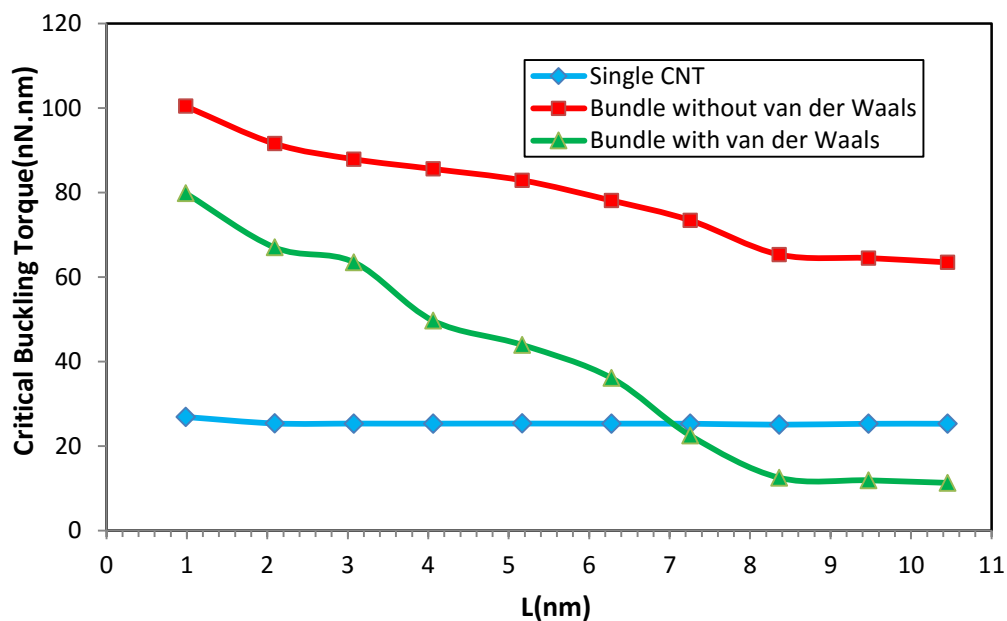


شکل (۴-۲۰) گشتاور بحرانی کمانشی با گشتاور اعمالی در جهت محور X بر حسب طول‌های مختلف

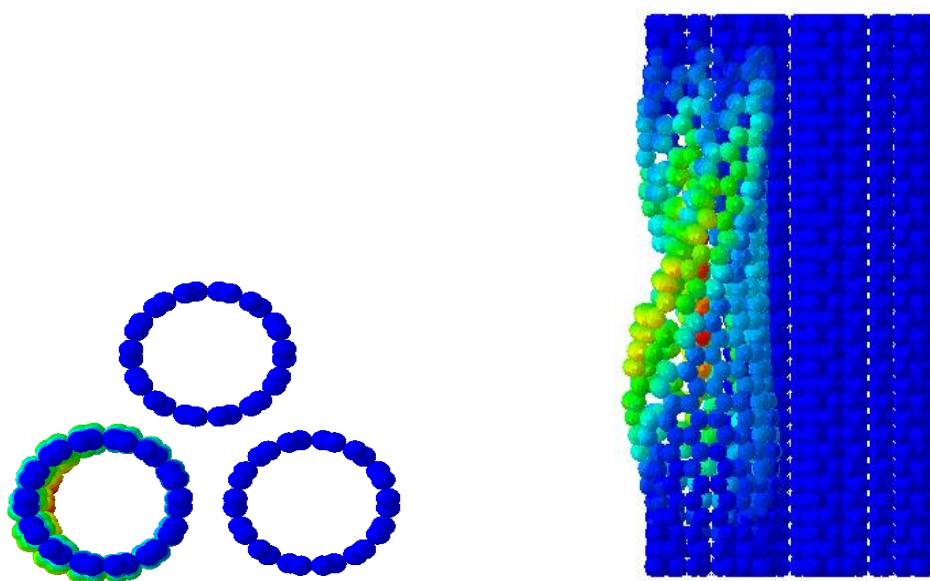


شکل (۴-۲۱) مد کمانشی با گشتاور اعمالی در جهت محور X بر حسب طول مختلف

در شکل‌های (۴-۲۲) نمودارهای کمانش بحرانی بر حسب طول برای نانو لوله‌های آرمچیر نشان داده شده است. همان طور که دیده می‌شود، در تمامی آن‌ها با افزایش طول نانو لوله از میزان ممان بحرانی کاسته می‌شود. این میزان کاهش در طول‌های کوتاه محسوس‌تر می‌باشد. با افزایش طول نانو لوله‌ها، مقدار ممان بحرانی برای هر یک از آن‌ها، مقدار زیادی کاهش می‌یابد؛ به نحوی که نمودارها تقریباً به خط راست تبدیل می‌شوند.

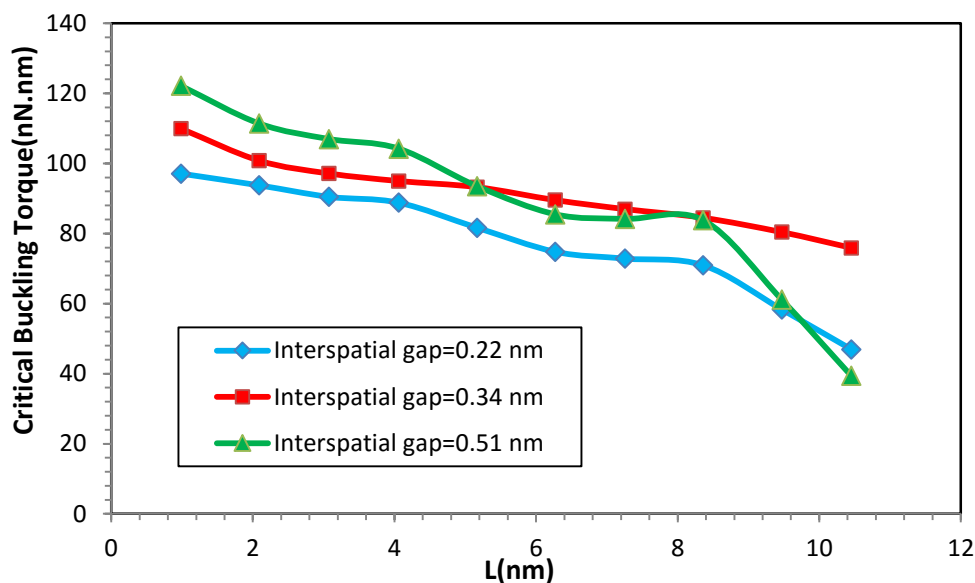


شکل (۴-۲۲) گشتاور بحرانی کمانشی با گشتاور اعمالی در جهت محور Y بر حسب طول مختلف با افزایش طول دسته نانو لوله، گشتاور بحرانی کمانش اوپلری کاهش می‌یابد. یکی از مد شکل‌های کمانشی بر اساس خطوط جابجایی برای طول $L=4,058\text{nm}$ در شکل (۴-۲۳) نشان داده شده‌اند. همان طور که در شکل (۴-۲۳) دیده می‌شود، به علت موجود نبودن پیوند واندروالس بین لوله‌ای درون دسته نانو لوله و همچنین اختلاف ساختاری خیلی کوچک در هر یک از نانو لوله‌های منفرد درون دسته نانو لوله، یک لوله نسبت به دو لوله‌ی دیگر زودتر دچار کمانش می‌شود.

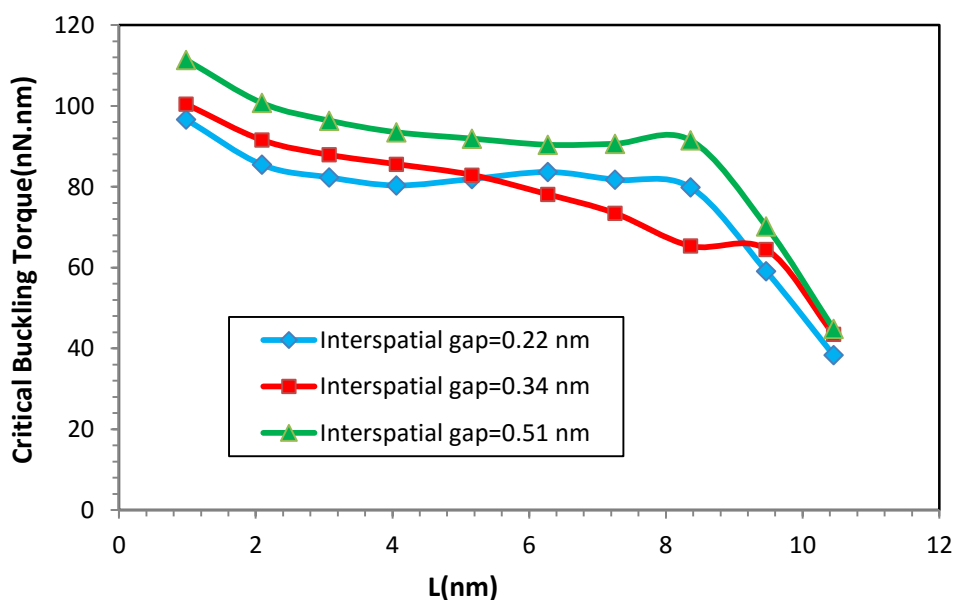


شکل (۴-۲۳)- شکل مد دسته نانو لوله‌های کربن آرمچیر $L=4,058\text{nm}$ تحت خمش در راستای Y

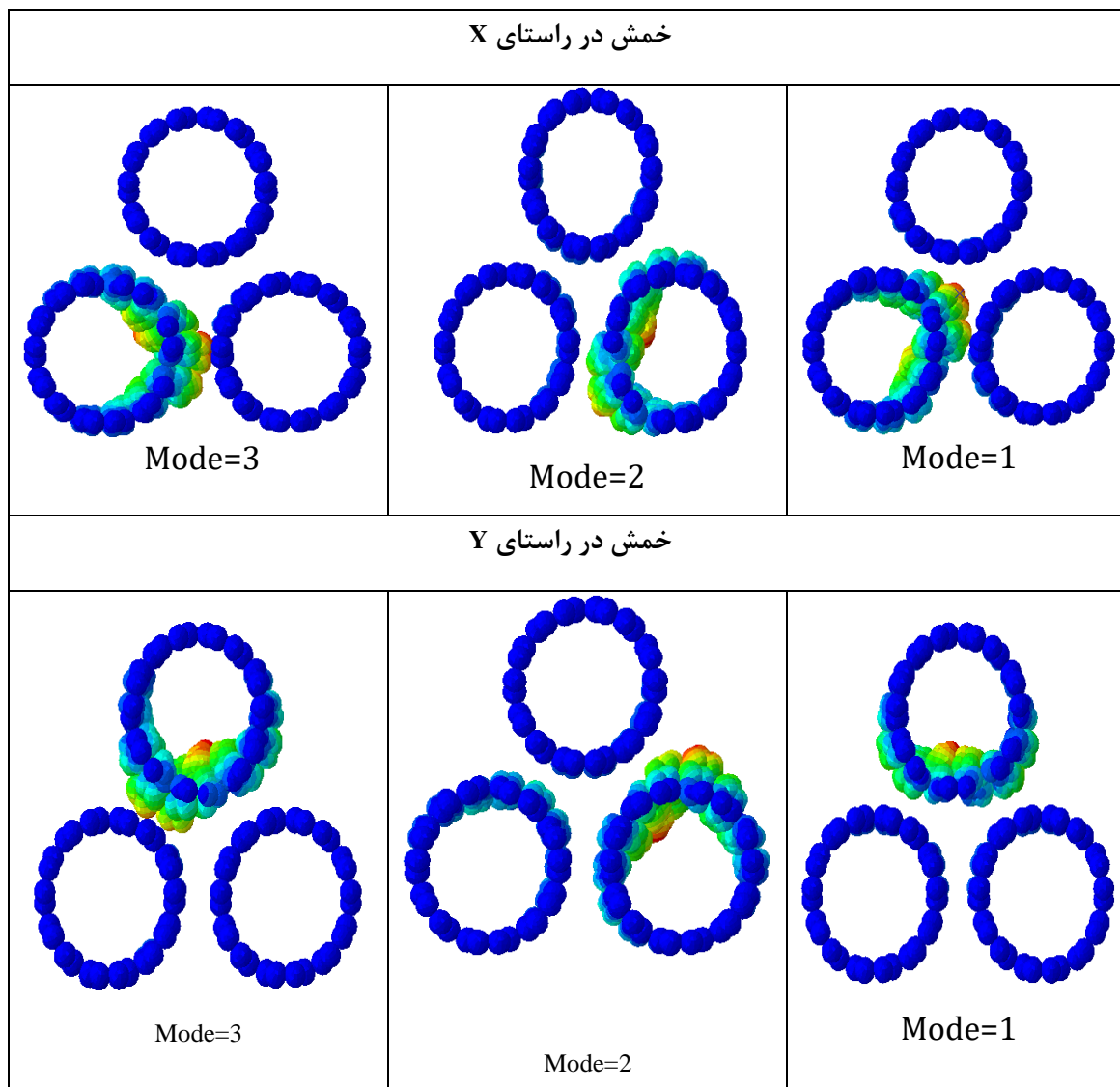
شکل (۴-۲۴) و شکل (۴-۲۵) گشتاور بحرانی در دسته نانو لوله‌ها با فواصل بین لوله‌ای مختلف را نشان می‌دهد. نمودار (۴-۲۴) بار بحرانی در راستای اعمال ممان در راستای محور X و نمودار (۴-۲۵) بار بحرانی در راستای اعمال ممان در راستای محور Y را نشان می‌دهد. این مقادیر به علت در نظر نگرفتن نیروی واندروالس نزدیک به هم می‌باشند.



شکل (۴-۲۴)- گشتاور بحرانی کمانشی محاسبه شده در فواصل بین لوله‌ای مختلف با گشتاور اعمالی در راستای محور X



شکل (۴-۲۵)- گشتاور بحرانی کمانشی محاسبه شده در فواصل بین لوله‌ای مختلف با گشتاور اعمالی در راستای محور Y



شکل (۴-۲۶) - شکل مدهای دسته نانو لوله‌های کربن آرمچیر تحت خمش در راستای X و Y با در نظر گرفتن نیروی

واندروالس

همان طور که در شکل (۴-۲۶) مشاهده می‌شود، شکل مدهای دسته نانو لوله‌های کربنی

آرمچیر، تحت خمش در راستای X و Y با در نظر گرفتن نیروی واندروالس نشان داده شده‌اند. در این

دسته نانو لوله، نیروی واندروالس بین اتم‌های بین سه لوله وجود دارد. در هر یک از دسته‌ها با وجود

نیروی واندروالس، در هریک از مدهای کماتش یک نانو لوله دچار تغییر شکل بیشتری نسبت به دو

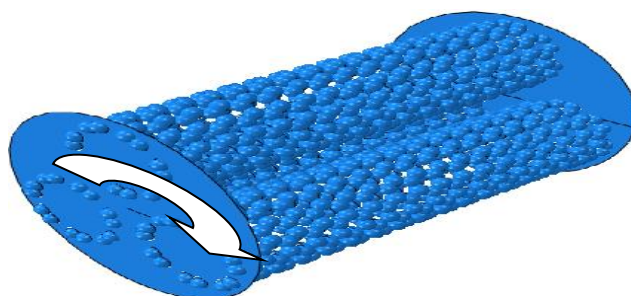
لوله‌ی دیگر در دسته در هر دو راستای اعمال ممان می‌شود.

۳-۴- نتایج حاصل از کمانش نانو لوله‌های کربنی تحت ممان پیچشی

در این قسمت ممان بحرانی برای دسته نانو لوله‌های کربنی تحت گشتاور پیچشی حول محور طولی دسته نانو لوله مورد بررسی قرار گرفته است.

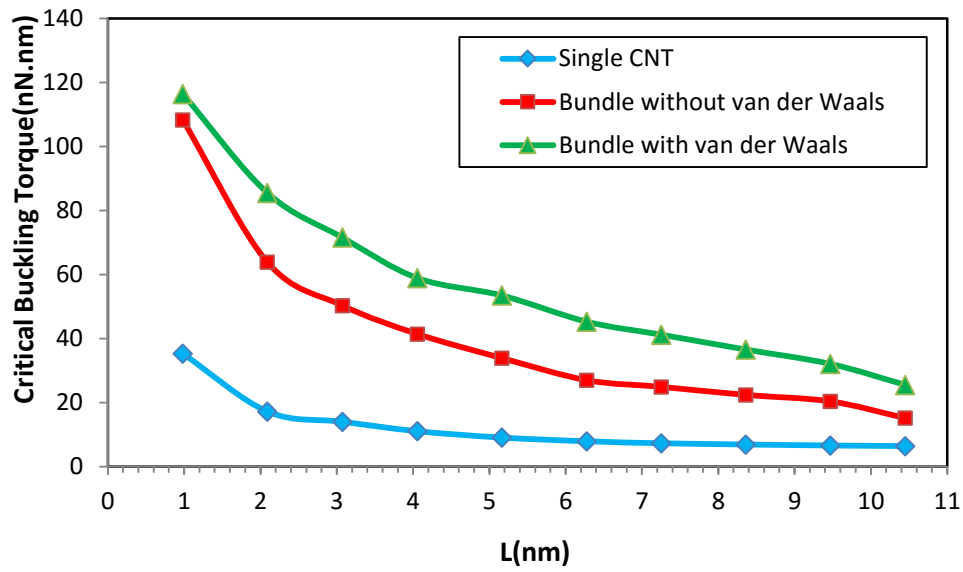
۳-۴-۱- کمانش پیچشی دسته نانو لوله‌های کربن

در شکل (۴-۲۷) نحوه‌ی اعمال ممان پیچشی به دسته نانو لوله‌ی سه تایی آرمچیر نشان داده شده است. همان طور که در شکل دیده می‌شود، مانند دو آنالیز پیشین دو صفحه در دو سر دسته قرار می‌گیرد و یک سر دسته نانو لوله کاملاً ثابت می‌باشد و سر دیگر آن دارای آزادی چرخش در راستای محور دسته را دارا می‌باشد، به مرکز این صفحه ممان در جهت نشان داده شده در شکل (۴-۲۷) به دسته نانو لوله اعمال می‌گردد.

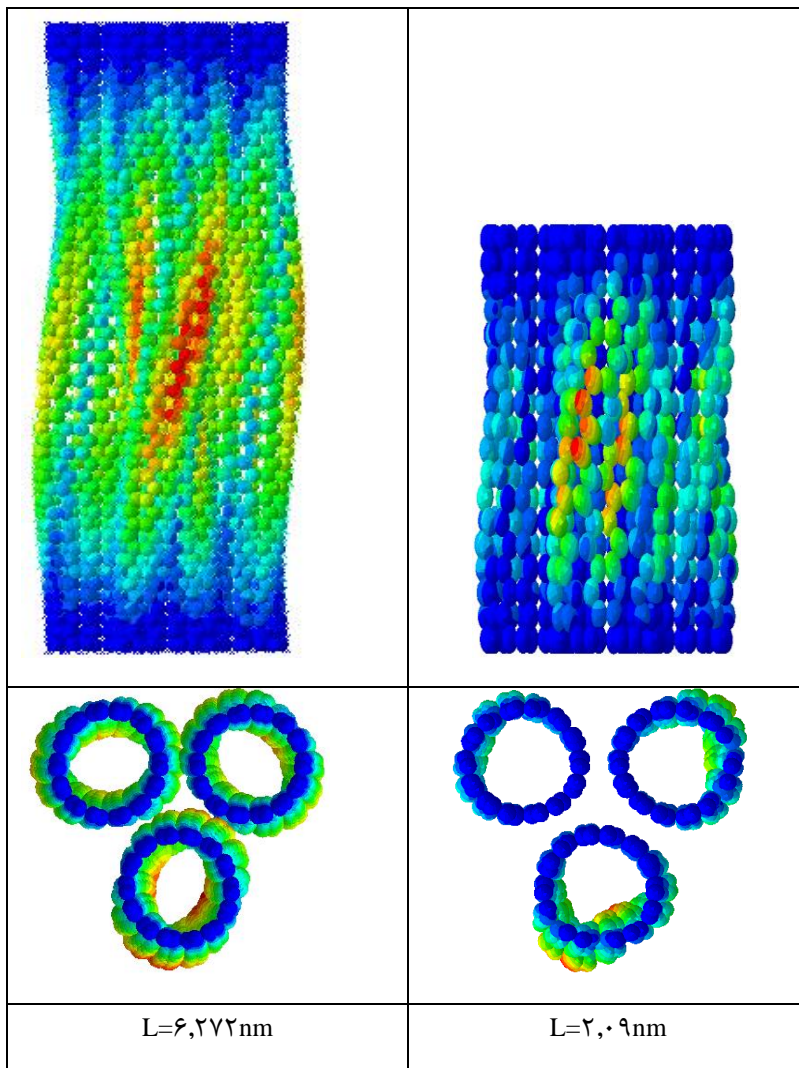


شکل (۴-۲۷)- نحوه‌ی اعمال گشتاور پیچشی در کمانش پیچشی

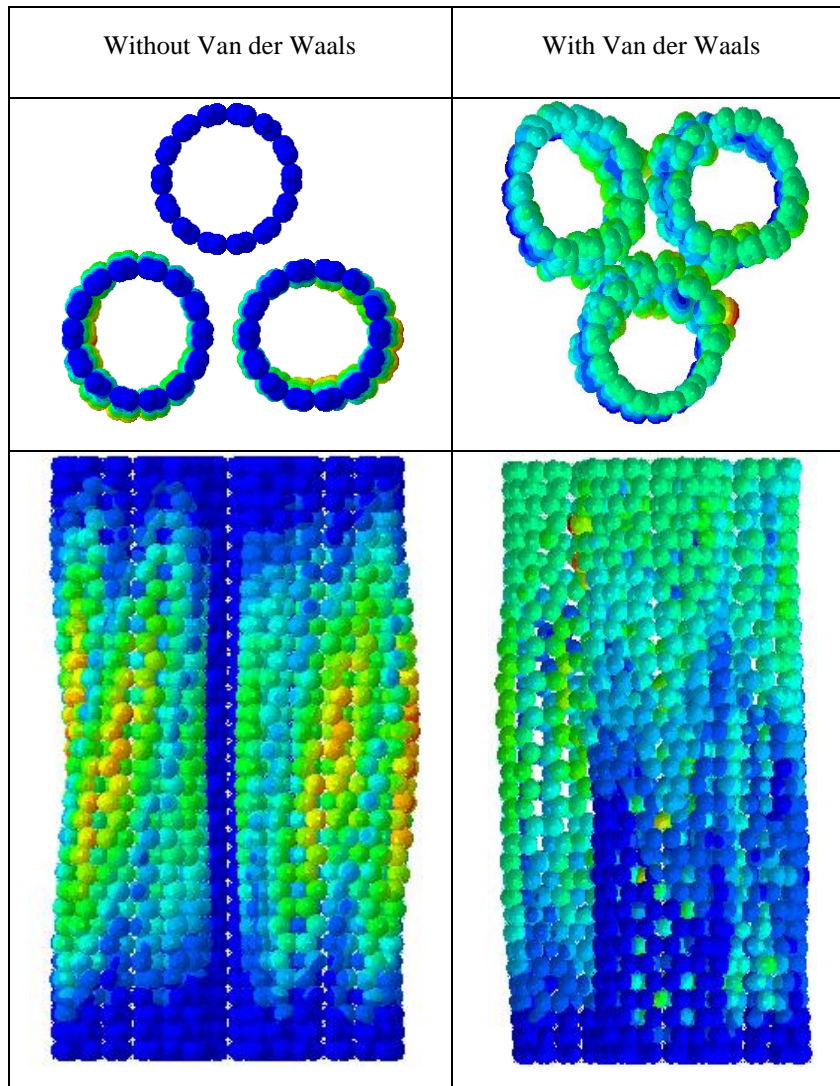
همان طور که در شکل (۴-۲۸) دیده می‌شود، در تمامی طول‌ها با افزایش طول نانو لوله از میزان ممان بحرانی کاسته می‌شود. این میزان کاهش در طول‌های کوتاه محسوس‌تر می‌باشد. با افزایش طول نانو لوله‌ها، تغییر در مقدار ممان بحرانی برای هر یک از آن‌ها به مقدار زیادی کاهش می‌یابد؛ به نحوی که نمودارها تقریباً به خط راست تبدیل می‌شوند. تنها در بارگذاری ممان پیچشی دیده می‌شود که گشتاور کمانشی بحرانی دسته نانو لوله‌ی آرمچیر با وجود نیروی واندروالس بیشتر از دسته مشابه با همان طول می‌باشد. این روند برای تمام طول‌ها در بارگذاری پیچشی حفظ شده است.



شکل (۴-۲۸) - گشتاور پیچشی کمانش بحرانی دسته نانو لوله‌ها بر حسب طول دسته نانو لوله

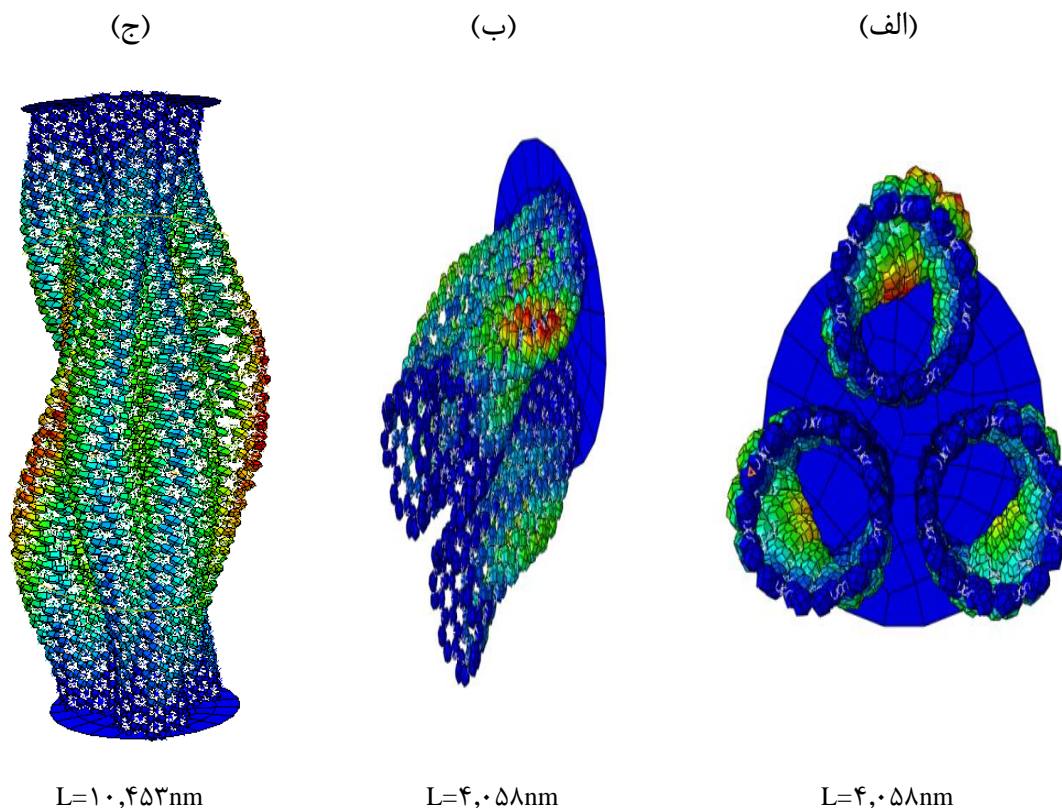


شکل (۴-۲۹) - شکل مدهای دسته نانو لوله‌های کربن آرمچیر بدون اعمال نیروی واندروالس برای طول‌های مختلف برای نشان دادن اثر نیروی واندروالس بین لوله‌ای بر روی شکل مد کمانش، شکل (۴-۳۰) شکل مدهای کمانشی دسته نانو لوله‌ی سه تایی با اعمال و بدون اعمال نیروی واندروالس را نشان می‌دهد. همان طور که در این شکل دیده می‌شود هنگامی که نیروی واندروالس بین نانو لوله‌ها وجود دارد، اتم‌های بیشتری در بارگذاری کمانشی نقش دارند. اما زمانی که نیروی بین لوله‌ای در تحلیل نباشد، همان طور که در شکل (۴-۳۰) دیده می‌شود، برای این طول خاص، دو نانو لوله دچار تغییر شکل ساختاری بیشتری نسبت به لوله‌ی دیگر می‌گردند.



شکل (۴-۳۰) - شکل مدهای دسته نانو لوله‌های کربنی آرمچیر تحت پیچش با اعمال نیروی واندروالس و بدون اعمال نیروی واندروالس برای طول $L=4,058 \text{ nm}$

در شکل (۴-۳۱) می‌توان شکل مدهای مربوط به کمانش پیچشی نانو لوله‌های کربنی آرمچیر در طول‌های متفاوت را مشاهده نمود. مشاهده می‌گردد که با افزایش طول نانو لوله‌ها در دسته، از تعداد موج‌ها کاسته می‌شود؛ ولی مقدار پیچیدگی در طول نانو لوله افزایش می‌یابد. همان‌طور که در فصل‌های گذشته اشاره شد، مقالات بسیار کمی در زمینه‌ی کمانش نانو لوله‌های کربنی تحت پیچش ارائه شده است. از این رو امکان مقایسه‌ی نتایج بدست آمده از مدل ارائه شده با مدل‌های دیگر وجود ندارد؛ خصوصاً در زمینه‌ی کمانش دسته نانو لوله‌های کربنی که تا به حال مقاله‌ای در این مورد ارائه نشده است.



شکل (۴-۳۱) - شکل مدهای بدست آمده برای دسته نانو لوله‌ی سه تایی آرمچیر (۷،۷) بدون نیروی

واندروالس

فصل پنجم

نتایج و پیشنهادات

۵-۱- نتایج

با توجه به مباحث مطرح شده در این پایان نامه نتایج مهمی در زمینه‌ی کمانش دسته نانو لوله-های کربنی، تحت بار فشاری و ممان‌های خمشی و پیچشی بدست آمده‌اند که در زیر به آن‌ها اشاره شده است:

مدل ارائه شده با استفاده از روش مکانیک ساختاری ایجاد شده است به طوری که می‌تواند به خوبی بار بحرانی را در کمانش تحت فشار محوری و ممان بحرانی را برای کمانش تحت خمش و پیچش نشان دهد.

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

۲- پیوند واندروالس بین لوله‌ای در دسته نانو لوله مقدار بار بحرانی کمانش را کاهش می‌دهد.

۳- با افزایش طول نانو لوله‌ی منفرد ابتدا بار بحرانی کمانش کاهش یافته و سپس به مقدار ثابتی می‌رسد.

۴- ماکزیمم و مینیمم بار بحرانی کمانش برای یک طول به ترتیب در شرایط مرزی دو سر ثابت و یک سر آزاد رخ می‌دهد.

۵- مقدار کاهش بار بحرانی کمانشی برای شرایط مرزی یک سر آزاد بیشتر از دیگر شرایط مرزی می‌باشد.

۶- پیوند واندروالس در بین نانو لوله‌های کربنی باعث کاهش مقدار گشتاور بحرانی کمانش خمشی می‌شود.

۷- با افزایش طول نانو لوله‌ی منفرد در دسته نانو لوله، گشتاور بحرانی کمانش خمشی و پیچشی کاهش می‌یابد.

۸- ماکزیمم و مینیمم گشتاور بحرانی به ترتیب برای دسته نانو لوله‌های با فاصله‌ی بین لوله‌ای $0,51\text{ nm}$ و $0,22\text{ nm}$ می‌باشد.

۹- در دسته نانو لوله‌ی سه تایی با اعمال گشتاور در راستای محور X بیشترین مقدار گشتاور بحرانی کمانش خمشی حاصل می‌شود.

۱۰- اثر پیوند واندروالس بین نانو لوله‌ها سبب افزایش گشتاور بحرانی تحت کمانش پیچشی می‌شود؛ ولی این اثر، در کمانش خمشی باعث کاهش گشتاور بحرانی می‌گردد.

۱۱- در کمانش پیچشی نیز همانند کمانش محوری و خمشی، با افزایش طول دسته نانو لوله به قطر ثابت نانو لوله‌ی منفرد، گشتاور کمانشی پیچشی کاهش می‌یابد.

۱۲- تغییر فاصله‌ی بین لوله‌ای در دسته نانو لوله، تغییری در بار کمانش پیچشی ایجاد نمی‌کند.

۵-۲- پیشنهادات

در انتهای این پایان نامه برخی از پیشنهادات در رابطه با مباحث مربوط به دسته نانو لوله‌های کربنی و همچنین مدل ارائه شده قابل ذکر است که به شرح زیر می‌باشند:

۱- کمانش دسته نانو لوله‌های کربنی تحت بارگذاری‌های ترکیبی را نیز با استفاده از مدل ارائه شده می‌توان انجام داد.

۲- تحلیل‌های دینامیکی مختلف را با در نظر گرفتن قابلیت‌های متنوع نرم افزار ABAQUS می‌توان مورد بررسی قرار داد.

۳- با اصلاح این مدل می‌توان رابطه‌ی بین تعداد نانو لوله‌های کربنی را با خواص مکانیکی دسته نانو لوله‌ها را مورد بررسی قرار داد.

۴- با استفاده از مدل ارائه شده می‌توان کمانش دسته نانو لوله‌های چند جداره را نیز مورد بررسی قرار داد.

۵- از این مدل می‌توان برای مدل سازی کامپوزیت‌هایی که از دسته نانو لوله‌های کربنی به عنوان ذرات افزاینده به زمینه استفاده می‌کنند، استفاده کرد.

۶- اثر عیوب مختلف تهی جای بر روی بارها و کرنش‌های بحرانی در مدهای کمانش مختلف دسته نانو لوله‌ها را بررسی نمود.

۷- می‌توان مدول یانگ دسته نانو لوله با تعداد نانو لوله‌های مختلف را بررسی کرد.

۸- با استفاده از سیستم‌های پیشرفته‌تر می‌توان دسته نانو لوله‌ها با تعداد بیشتری از نانو لوله‌ها را نیز بررسی نمود.

۹- دسته نانو لوله‌های آرمچیر، زیگزاگ و چیرال را شبیه سازی کرده و خواص مکانیکی آنها را بررسی نمود.

- [1] Iijima S. (1991). "Helical microtubes of graphitic carbon" *Nature*, 354, pp 56-58.
- [2] Odegard G.M., Gates T.S., Nicholson L.M. and Wise K.E. (2002). "Equivalent- continuum modeling with application to carbon nanotubes" *NASA/TM*, pp 211454.
- [3] Li C.Y. and Chou T.S. (a). "A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes" *Int. J. Solids Struct*, 40, pp 2487-2499.
- [4] Tserpes K.I. and Papanikos P. (2005). "Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes" *Comp: P. B*, 36, pp 468-477.
- [5] Hu N., Fukunaga H., Lu C., Kameyama M. and Yan, B. (2005). "Prediction of elastic properties of carbon nanotube-reinforced composites" *Proc. Royal So. Series A*, 461, pp 1685-1710.
- [6] 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.
- [7] Cornell W. D., Cieplak P., Bayly C. I. et al. (1995). "A second generation force field for the simulation of proteins, nucleic-acids, and organic-molecules" *J. Amer. Chem. Soci*, 117, pp 5179-5197.
- [8] Hibbitt, Karlsson and Sorensen. 2009. ABAQUS, Finite Element Computer Program. Theory manual. Version 6.9-1., N.Y., USA, Pawtucket, RI.
- [9] Haile, J.M, 1992. "Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods". John Wiley and Sons, New York.
- [10] Li C.Y. and Chou T.W., (2004). "Modeling of elastic buckling of carbon nanotubes by molecular structural mechanics approach" *Mech. Mater*, 36, pp 1047-55
- [11] Belytschko T., Xiao S. P., Schatz G. C. and Ruoff R. S. (2002). "Atomistic simulations of nanotube fracture" *Phys. Rev. B*, 65, pp 235-430.
- [12] Cornell W. D., Cieplak P., Bayly C. I. et al. (1995). "A second generation force-field for the simulation of proteins, nucleic-acids, and organic-molecules" *J. Amer. Chem. Soci*, 117, pp 5179-5197.
- [13] Lopez, M.J., Rubio, A., Alonso, J.A., Qin, L.-C., Iijima, S., 2001. Novel polygonized single-wall carbon Nanotube bundles". *Phys. Rev. Lett.* 86, pp 3056-3059.
- [14] Charlier, J.-C., Lambin, Ph., Ebbesen, T. W., 1996. "Electronic properties of carbon nanotubes with Polygonized cross-sections". *Phys. Rev. B* 54, R8377-R8380.
- [15] Salvetat, J.-P., Briggs, G.A.D., Bonard, J.-M., Bacsá, R.R., Kulik, A.J., Stockli, T., Burnham, N.A.,

Forro,L.,1999. “Elastic and shear moduli of single-walled carbon nanotube ropes”.**Phys.Rev.Lett.**82, 944–947.

[16] Popov,V.N.,VanDoren,V.E.,Balkanski,M.,2000. “Elastic properties of crystals of single-walled carbon nanotubes”. **Solid State Commun** .114 ,pp **395–399**.

[17] Saether,E.,2003.“Transverse mechanical properties of single-walled carbon nanotube crystals PartII:sensitivity to latticed is torsion”.**Comput.Sci.Technol.**63,pp**1551–1559**.

[18] Saether,E.,Frankland,S.J.V.,Pipes,R.B.,2003. “Transverse mechanical properties of single-walled Carbon nanotube crystals PartI:determination of elasticmoduli” .**Comput. Sci. Technol.** 63,1543–1550.

[19]Tersoff,J.,Ruoff,R.S.,1994. “Structural properties of a carbon-nanotube crystal”. **Phys. Rev. Lett.** 73, **676–679**.

[20] Venkateswaran, U.D.,Rao, A.M. , Richter,E., Menon, M., Rinzler, A., Smalley, R.E., Eklund, P.C.,1999. “ Probing the single-wall carbon nanotube bundle:Ramans cattering under high pressure”. **Phys.Rev.** **B59**,pp **10928 –10934**.

[21] Peters, M.J., McNeil, L.E., Lu,J.P., Kahn,D., 2000. “Structural phase transition in carbon nanotube Bundles under pressure”. **Phys. Rev.****B61**,pp **5939–5944**.

[22] Tang, J., Qin, L.C., Sasaki, T.,Yudasaka, M., Matsushita, A., Iijima,S.,2000. “Compressibility and Polygonization of single-walled carbon nanotubes under hydrostatic pressure”. **Phys. Rev. Lett.** **85**, Pp **1887–1889**.

[23] Rols,S.,Goncharenko, I.N., Almairac, R.,Sauvajol, J.L.,Mirebeau ,I.,2001. “Polygonization of single-Wall carbon nanotube bundles under high pressure”. **Phys.Rev.****B64**,153401.

[24] Chan,S.-P.,Yim,W.-L.,Gong,X.G.,Liu,Z.-F.,2003. “Carbon nanotube bundles under high pressure: Transformation to low-symmetry structures”. **Phys.Rev.****B68**,075404.

[25] Liu,J.Z.,Zheng,Q.-S.,Jiang,Q.,2003. “Effect of bending in stabilities on the measurements of mechanical Properties of multi walled carbonnanotubes”.**Phys.Rev.****B67**,075414.

[26] Tang,J.,Qin,L.C.,Sasaki,T.,Yudasaka,M.,Matsushita,A.,Iijima,S.,2000. “Compressibility and Polygonization of single-walled carbon nanotubes under hydrostatic pressure”.**Phys.Rev.Lett.**85,
1887 – 1889.

[27] Every, A.G., McCurdy, A.K., 1992. “Low frequency properties of dielectric crystals”. In: Nelson, D.F.(Ed.),Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. GroupIII: Crystal and Solid State Physics.**Springer**,Berlin.

[28] Maniwa Y, Fujiwara R, Kira H, Tou H, Kataura H, Suzuki S, etal. 2001 “Thermal expansion of single-walled carbon nanotube (SWNT) bundles : X-ray diffraction studies”. **Phys RevB**;64:241402.

- [29] López MJ, Rubio A, Alonso JA. **2004** “Deformations and thermal stability of Carbon nanotube ropes”. *IEEE Trans Nano technol*;3:230–6.
- [30] Lu JP. **1997** “Elastic properties of carbon nanotubes and nano ropes”. *PhysRev Lett*;79:pp 1297–300.
- [31] Salvetat JP, Briggs GAD, Bonard JM, Bacsá RR, KulikAJ, Stöckli T, et al. **1999** “ Elastic and shear moduli of single-walled carbon nanotube ropes”. *Phys Rev Lett*;82:944–7.
- [32] Ru CQ. **2000** “ Elastic buckling of single-walled carbon nanotube ropes Under high pressure”. *Phys Rev B***2000**; 62:10405–8.
- [33] Qian D, Liu WK ,Ruoff RS. **2003** “Load transfer mechanism in carbon Nanotube ropes”. *Compos Sci Technol*;63:pp **1561–9**.
- [34] Buehler, M.J., Duin, A.C.T.v., Goddard, W.A., **2006**. “ Multi-paradigm modeling of dynamical crack propagation in silicon using the ReaxFF reactive force field”. *Phys. Rev. Lett.*pp 96-99 , 095505
- [35] Qi, H.J., Teo, K.B.K., Lau, K.K.S., Boyce, M.C., Milne, W.I., Robertson, J., Gleason, K.K., **2003**. “Determination of mechanical properties of carbon nanotubes and vertically aligned carbon nanotubeforests using nanoindentation”. *Journal of Mechanics and Physics of Solids* 51,pp **2213-2237**.
- [36] Glassmaker, N.J., Jagota, A., Hui, C.Y., Kim, J., **2004**. “Diesgin of biomimetic fibrillar interfaces: 1. Making contact”. *J.R. Soc. London Interface* 1,pp **23-33**.
- [37] Chen, B., Gao, M., Zuo, J.M., Qu, S., Liu, B., Huang, Y., **2003**. “Binding energy of parallel carbon nanotubes”. *Applied Physics Letters* 83 (17).
- [38] Zhu, H.W., Xu, C.L., Wu, D.H., Wei, B.Q., Vajtai, R., Ajayan, P.M., **2002**. “Direct Synthesis of LongSingle-Walled Carbon Nanotube Strands”. *Science* 296,pp **884-886**.
- [39] Hui, C.Y., Jagota, A., Lin, Y.Y., Kramer, E.J., **2002**. “Constraints on microcontact printing imposed by stamp deformation”. *Langmuir* 18 (4) ,pp **1394-1407**.
- [40] Cranford.s .Yao.H.,Ortiz .c,Buehler.M.J(**2009**). “A Single of Freedom 'Lollipop'Model for Carbon Nanotube Bundle Formation”.*Int. .J.Mechanic and Physics solids.*, doi: 10.1016. j. mps. 2009. 11.002
- [41] Plimpton, S.J., **1995**. “Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics”. *Journal of Computational Physics* 117,pp **1-19**.
- [42] Brenner, D.W., Robertson, D.H., Elert, M.L., White, T.C., **1993**. “Detonations at nanometer resolution using molecular dynamics. *Physical Review Letters* 70,pp **2174-2177**.
- [43] Chen, B., Gao, M., Zuo, J.M., Qu, S., Liu, B., Huang, Y., **2003**. “Binding energy of parallel carbon nanotubes”. *Applied Physics Letters* 83 (17).
- [44] Yakobson, B.I., Brabec, C.J., Bernholc, J., **1996**. “Nano mechanics of carbon tubes: instability beyond linear response”. *Physical Review Letters* 76, pp **2511–2514**.

- [45] Hu, N., Nunoya, K., Pan, D., Okabe, T., Fukunaga, H., 2007. "Prediction of buckling Characteristics of carbon nanotubes". **International Journal of Solids and Structures** 44, 6535–6550.
- [46] Xin, H., Han, Q., Yao, X.H., 2007. " Buckling and axially compressive properties of Perfect and defective single-walled carbon nanotubes". *Carbon* 45,pp 2486–2495.
- [47] Wang, Q., Liew, K.M., Duan, W.H., 2008. "Modeling of the mechanical instability of Carbon nanotubes". *Carbon* 46,pp 285–290.
- [48] Liew.K.M.,Wong.C.H.,Tan.M.J.(2005). "Tensile and compressive properties of carbon nanotube bundles"**Int.J. Acta Materialia**(2006) 225-231.
- [49] Srivastava D, Menon M, ChoK. 1999 " Nano plasticity of single-wall carbon Nanotubes under uniaxial compression". **Phys Rev Lett**; 83:pp 2973–6.
- [50] V.Parvaneh,M.Shariati,andA.M.MajdSabeti, 2009,"Investigation of vacancy defects effects on the buckling behavior of SWCNTs Via a structural mechanics approach ," **European Journal of Mechanics, A/Solids**, vol. 28, no.6, pp. 1072–1078
- [51] Walther, J.H., Jaffe, R., Halicioglu, T., Koumoutsakos, P., 2001. "Carbon nanotubes in water: structural characteristics and energetic".**Journal of Physical Chemistry B** 105 (41) , 9980–9987.
- [52] Walther, J.H., Jaffe,R., Halicioglu, T., Koumoutsakos, P.,2001. "Carbon nanotubes in water: structural characteristics and energetics".**Journal of Physical Chemistry B** 105(41) ,pp 9980–9987.
- [53] پروانه و (۱۳۸۸)، پایان نامه ارشد "مدل سازی و شبیه سازی نانو لوله های کربنی به منظور پیش بینی خواص مکانیکی آن" ، دانشکده مکانیک ، دانشگاه صنعتی شاهرود.
- [54] مجد ثابتی، ا (۱۳۸۸)، پایان نامه ارشد " معرفی یک مدل جدید به منظور پیش بینی رفتار تغییر شکل نانو لوله های کربنی تحت بار گذاری مختلف" ، دانشکده مکانیک ، دانشگاه صنعتی شاهرود.

Abstract

In the present thesis a structural mechanics model is employed for the investigation of the buckling behavior of CNT bundles of three SWCNTs under axial compressive, bending and torsional loading in the CAE space of ABAQUS. A nonlinear connector is considered for modeling of stretching and torsional interactions, and a nonlinear spring is used for modeling of the angle variation interaction. A Morse potential is employed for stretching and bending potentials, and a periodic type of bond torsion is used for torsion interactions. To evaluate the buckling loads of carbon nanotube bundles, the effects of van der Waals forces are further modeled using a nonlinear spring element.

The effects of different types of boundary conditions (Fixed–Fixed, Simple–Simple and Fixed-Free) are studied for armchair nanotubes with various aspect ratios (length/diameter) and also the bending and torsional buckling behaviors of carbon nanotube bundle are investigated. Apart from the above, structural simulations were performed at different interspatial gaps. This is to determine the size effect of the interspatial gaps on the buckling properties of CNT bundles. In this work, a total of three interspatial gaps were used, i.e. 0.22, 0.34 and 0.51 nm. The structural mechanics simulations reveal that CNT bundles comprising longer SWCNTs will exhibit lower critical buckling load. Results indicate that for Fixed- Free boundary condition the rate of critical buckling load's reduction is highest and lowest critical buckling load occurs. In addition, the average buckling load of each SWCNT was computed and compared with buckling loads for individual SWCNTs. Finally, the results of the present structural model are compared with results of molecular dynamics (MD). Simulation show good agreement between our model and the MD model.

Keywords: Structural mechanic, Carbon nanotube bundle, Buckling, Boundary condition, critical bending and torsional buckling torque



Shahrood University of Technology
Department of Mechanical Engineering

**Modeling and Numerical Analysis for Buckling
Behaviour of Carbon Bundle Nanotubes under Axial,
Bending and Torsional Loadings**

Ali Lashkari zadeh

**Supervisor:
Dr.M.Shariati**

July 2011