



دانشکده مهندسی مکانیک
پایان نامه کارشناسی ارشد

تحلیل رفتار ترک در نانولوله‌های کربنی به کمک مدل مکانیک ساختاری

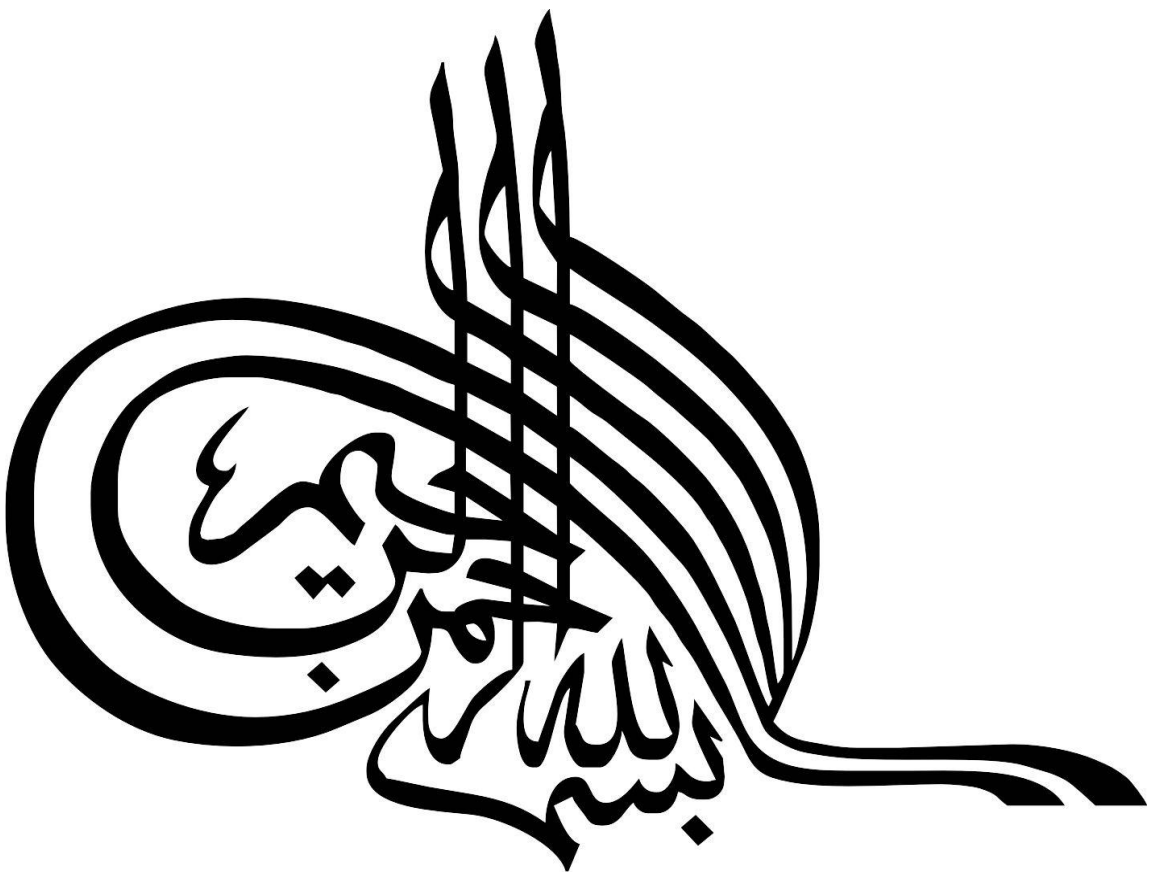
دانیال رادمنش

اساتید راهنما:

دکتر محمود شریعتی

دکتر حمیدرضا ایپکچی

شهریور ۱۳۹۳





دانشکده مهندسی مکانیک

گروه جامدات

تحلیل رفتار ترک در نانولوله‌های کربنی به کمک مدل مکانیک ساختاری

دانشجو: دانیال رادمنش

اساتید راهنما:

دکتر محمود شریعتی

دکتر حمیدرضا ایپکچی

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

شهریور ۱۳۹۳



دانشگاه صنعتی شاهرود

مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم شماره (۶)

باسمه تعالی

شماره:

تاریخ:

ویرایش:

فرم صورت جلسه دفاع از پایان نامه تحصیلی دوره کارشناسی ارشد

با تأییدات خداوند متعال و با استعانت از حضرت ولی عصر (عج) نتیجه ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد آقای دانیال رادمنش رشته مهندسی مکانیک گرایش طراحی کاربردی تحت عنوان "تحلیل رفتار ترک در نانولوله‌های کربنی به کمک مدل مکانیک ساختاری" که در تاریخ ۱۳۹۳/۶/۲۶ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار گردید به شرح ذیل اعلام می‌گردد:

<input type="checkbox"/> مردود	<input type="checkbox"/> دفاع مجدد	<input checked="" type="checkbox"/> قبول (با درجه: <u>بسیار خوب</u> امتیاز: <u>۱۸/۱۵</u>)
--------------------------------	------------------------------------	--

۲- بسیار خوب (۱۸/۹۹ - ۱۸)

۱- عالی (۲۰ - ۱۹)

۴- قابل قبول (۱۵/۹۹ - ۱۴)

۳- خوب (۱۷/۹۹ - ۱۶)

۵- نمره کمتر از ۱۴ غیر قابل قبول

امضاء	مرتبه علمی	نام و نام خانوادگی	عضو هیأت داوران
	استاد	دکتر محمود شریعتی دکتر حمیدرضا ایبکچی	۱- اساتید راهنما
			۲- استاد مشاور
	استاد	دکتر رضا طاهریان	۳- نماینده شورای تحصیلات تکمیلی
	استادیار	دکتر محمد باقر نظری	۴- استاد ممتحن
	استادیار	دکتر سید وحید حسینی	۵- استاد ممتحن

رئیس دانشکده: دکتر محمد محسن شاه مردان

امضاء



تقدیم به تمامی محققین دوستدار علم و دانش

آنچنان زندگی کن گویی که فردا فواهی مرد
آنچنان بیاموز گویی که تا ابد زنده فواهی ماند

ماهاتما گاندی

تقدیر و تشکر

سپاس خدای را که سخنوران، در ستودن او بمانند و شمارندگان، شمردن نعمت‌های او ندانند و کوشندگان، حق او را گزاردن نتوانند. و درود بر محمد و خاندان پاک او، طاهران معصوم، هم آنان که وجودمان وامدار وجودشان است.

بدون شک جایگاه و منزلت معلم، اجل از آن است که در مقام قدردانی از زحمات بی شائبه‌ی او، با زبان قاصر و دست ناتوان، چیزی بگوییم یا بنگاریم. اما از آنجایی که تجلیل از معلم، سپاس از انسانی است که هدف و غایت آفرینش را تأمین کرده و سلامت امانت‌هایی را که به دستش سپرده‌اند، تضمین می‌کند؛ بر حسب وظیفه و به مصداق "من لم یشکر المخلوق لم یشکر الخالق"، شایسته است:

- از پدر دلسوز و مادر فداکارم، این دو معلم بزرگوار، که همواره بر کوتاهی و درستی من قلم عفو کشیده و کریمانه از کنار غفلت‌هایم گذشته‌اند. آن‌ها که در تمام عرصه‌های زندگی یار و یآوری بی چشم داشت برای من بوده‌اند و با حمایت‌های خود در محیطی مطلوب، آرامش روحی و آسایش فکری لازم را فراهم نمودند تا مراتب تحصیلی و نیز پایان‌نامه خود را به نحو احسن به اتمام برسانم؛

- از استاد شایسته، جناب آقای دکتر شریعتی، که در کمال سعه‌صدر، با حسن خلق و فروتنی، از هیچ کمکی در این عرصه برای من دریغ ننمودند و زحمت راهنمایی این رساله را بر عهده گرفتند؛ و همچنین از جناب آقای دکتر ایپکچی، که از هیچ کمکی فروگذار نکردند.

کمال تشکر و قدردانی را دارم. باشد که این خردترین، بخشی از زحمات آنان را سپاس گوید. همچنین، بر خود فرض می‌دانم که سپاسگزار کمک‌ها و حمایت‌های تمامی اعضای خانواده و دوستان صمیمی خود، باشم.

دانیال رادمنش

شهریور ۱۳۹۳

تعهدنامه

اینجانب دانیال رادمنش دانشجوی دوره‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی مهندسی مکانیک-گرایش طراحی کاربردی دانشکده‌ی مهندسی مکانیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده‌ی پایان‌نامه‌ی تحلیل رفتار ترک در نانولوله‌های کربنی به کمک مدل مکانیک ساختاری، تحت راهنمایی دکتر محمود شریعتی و دکتر حمیدرضا ایپکچی متعهد می‌شوم.

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

تاریخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه‌ی حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه‌های رایانه‌ای، نرم‌افزارها و تجهیزات ساخته شده) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان‌نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی‌باشد.

چکیده

در این پایان‌نامه از مدلی ساختاری در محیط نرم‌افزار آباکوس برای تحلیل پارامترهای شکست یک نانولوله کربنی، از جمله نرخ رهایی انرژی استفاده شده است. در این مدل ساختاری از رابط‌های غیرخطی برای مدل کردن برهمکنش‌های پیوندی کشش و پیچش و همچنین از المان فنر غیرخطی محوری برای مدل کردن برهمکنش خمش زاویه‌ای استفاده شده است. از مزیت‌های این روش، اجرا شدن آن در فضای CAE نرم‌افزار آباکوس می‌باشد. این امر باعث می‌شود که برای تحلیل رفتار مکانیکی نانولوله‌های کربنی تحت شرایط مختلف مرزی و بارگذاری نیاز به برنامه‌نویسی نباشد و هر قابلیت‌هایی که نرم‌افزار در تحلیل مسائل مکانیکی داشته باشد، را بتوان بر روی نانولوله اعمال کرد. در این پایان‌نامه تنش و کرنش حداکثر و تاثیر عیوب بر روی این تنش و کرنش بررسی شده است. همچنین ترک بر روی نانولوله شبیه‌سازی شده و نرخ رهایی انرژی در آن با توجه به پارامترهای گوناگونی مانند هندسه، نوع و مود بارگذاری، شرایط مرزی و چیرالیتی نانولوله کربنی مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین نرخ رهایی انرژی از دو روش LEFM برای مدل پیوسته و روش انرژی بدست آمده و با یکدیگر مقایسه شده است؛ که نتایج انطباق قابل قبولی با یکدیگر دارند.

کلمات کلیدی: نانولوله کربنی، مدل مکانیک ساختاری، آباکوس، ترک، نرخ رهایی انرژی

فهرست عناوین

و.....	تقدیر و تشکر
ح.....	چکیده
ط.....	فهرست عناوین
ل.....	فهرست شکلها
س.....	فهرست جداول
۱.....	فصل ۱: مقدمه
۷.....	فصل ۲: نانولوله کربنی
۸.....	۱-۲- مقدمه
۸.....	۱-۱-۲- جهان نانو
۱۰.....	۲-۲- وضعیت پیوندها در نانولوله‌های کربنی
۱۱.....	۳-۲- ساختار نانولوله‌های کربنی
۱۴.....	۴-۲- برهمکنشها و پتانسیلهای موجود در نانولوله‌های کربنی
۱۶.....	۱-۴-۲- برهمکنش کشش پیوند
۱۷.....	۲-۴-۲- برهمکنش خمش زاویه‌ای پیوند (تغییر زاویه)
۱۹.....	۳-۴-۲- برهمکنش پیچش دوسطحی
۱۹.....	۴-۴-۲- برهمکنش پیچش خارج صفحه‌ای
۲۰.....	۵-۴-۲- برهمکنش واندروالس
۲۱.....	۶-۴-۲- برهمکنش الکترواستاتیک
۲۲.....	۵-۲- ویژگی‌های نانولوله کربنی
۲۳.....	۶-۲- مدل سازی نانولوله کربنی
۲۳.....	۱-۶-۲- مقدمه

۲۴ مدل سازی مولکولی ۲-۶-۲
۲۶ روش دینامیک مولکولی ۱-۲-۶-۲
۲۶ روشهای پایه ۲-۲-۶-۲
۲۷ مدل سازی پیوسته ۳-۶-۲
۲۸ مدل سازی مکانیک ساختاری ۴-۶-۲
۲۹ مدل اودگارد ۱-۴-۶-۲
۲۹ مدل لی و چو ۲-۴-۶-۲
۳۰ مدل هو ۳-۴-۶-۲
۳۱ مدل معو و روسی ۴-۴-۶-۲
۳۲ مدل ساختاری جدید ۵-۴-۶-۲
۳۹ فصل ۳: مروری بر مطالعات پیشین
۴۰ ۱-۳- مقدمه
۴۱ ۲-۳- مطالعات پیشین
۴۱ ۱-۲-۳- پروانه و شریعتی (۲۰۱۰)
۴۲ ۲-۲-۳- جوشی و همکاران (۲۰۱۰)
۴۳ ۳-۲-۳- رن و همکاران (۲۰۰۴)
۴۴ ۴-۲-۳- جین و یوان (۲۰۰۵)
۴۶ ۵-۲-۳- بلیسچکو و همکاران (۲۰۰۲)
۴۸ ۶-۲-۳- ورنیک و مگوئید (۲۰۰۹)
۴۹ ۷-۲-۳- ونگ و گوتیرز (۲۰۰۹)
۵۰ ۳-۳- مطالعات جدید
۵۰ ۱-۳-۳- هوآنگ و همکاران (۲۰۱۲)
۵۰ ۲-۳-۳- هو و همکاران (۲۰۱۴)
۵۱ ۳-۳-۳- فالزون و همکاران (۲۰۱۳)

فصل ۴: ضریب شدت تنش و نرخ رهایش انرژی	۵۳
۴-۱- مقدمه	۵۴
۴-۲- ضریب شدت تنش و نرخ رهایش انرژی	۵۶
۴-۳- نرخ رهایش انرژی در نانولوله کربنی	۶۰
فصل ۵: شبیه‌سازی و تحلیل نانولوله کربنی دارای ترک	۶۳
۵-۱- شبیه‌سازی ترک بر روی نانولوله کربنی	۶۴
۵-۱-۱- بررسی صحت مدل برای بارگذاری کششی	۶۹
۵-۱-۲- نانولوله معیوب	۷۱
۵-۱-۳- مقایسه نرخ رهایی انرژی با دو روش LEFM در محیط پیوسته و روش انرژی در نانولوله	۷۴
۵-۱-۴- مقایسه نرخ رهایی انرژی کرنشی در نانولوله بدون صفحه صلب در دو انتهای آن با نانولوله با صفحه صلب	۷۷
۵-۱-۵- مقایسه نرخ رهایش انرژی در قطرهای مختلف نانولوله کربنی	۷۸
۵-۱-۶- مقایسه انرژی کرنشی در نانولوله زیگزاگ و آرمچیر	۸۰
۵-۱-۷- نرخ رهایی انرژی با بارگذاری مود II	۸۲
۵-۱-۸- مقایسه نرخ رهایی انرژی بارگذاری مود II با بارگذاری مود I	۸۴
۵-۱-۹- مقایسه نرخ رهایش انرژی در قطرهای مختلف نانولوله کربنی با بارگذاری مود II	۸۵
فصل ۶: نتیجه‌گیری و پیشنهادها	۸۹
۶-۱- نتیجه‌گیری	۹۰
۶-۲- پیشنهادها	۹۱
مراجع	۹۳
Abstract	۹۷

فهرست شکل‌ها

- شکل ۱-۱: مدل چندمقیاسی ترک شامل مدل مسو (اطراف ترک) و مدل ماکرو (دورتر از ترک) [۲]. ۳۰
- شکل ۱-۲: طرحواره‌ای از (الف) فلوروئن (ب) نانولوله کربنی ۱۰
- شکل ۲-۲: تشکیل نانولوله کربنی توسط لوله کردن یک گرافن [۱۹]. ۱۱
- شکل ۳-۲: (الف) - طرحواره‌ای از یک نانولوله دو دیواره، (ب) - تصویر از یک نانولوله ده دیواره توسط SEM [۲۰]. ۱۲
- شکل ۴-۲: سه نوع ساختار مختلف نانولوله‌های کربنی [۲۰]. ۱۳
- شکل ۵-۲: چند نمونه از شاخص‌های مختلف برای تشکیل نانولوله‌های کربنی [۱۸]. ۱۴
- شکل ۶-۲: انواع برهمکنش‌های موجود در نانولوله کربنی ۱۵
- شکل ۷-۲: مقایسه پتانسیل‌های کشش پیوند مورس و هارمونیک ۱۷
- شکل ۸-۲: مقایسه پتانسیل‌های تغییر زاویه پیوند مورس و هارمونیک ۱۸
- شکل ۹-۲: مقایسه پتانسیل‌های پیچش دوسطحی پیوند مورس و هارمونیک ۲۰
- شکل ۱۰-۲: برهمکنش واندروالس در اتم‌های کربن ۲۱
- شکل ۱۱-۲: پیوند کربن-کربن: (الف) مدل فیزیکی، (ب) مدل FE کشش پیوند، (ج) مدل FE خمش پیوند ۳۱
- شکل ۱۲-۲: پارامترهای مربوط به یک سلول واحد شش ضلعی ۳۴
- شکل ۱۳-۲: نحوه قرار گرفتن دستگاه مختصات محلی بر روی مرکز اتم‌های کربن ۳۶
- شکل ۱۴-۲: المان‌های فنر و رابط متناظر با برهمکنش اتم‌های کربن ۳۷
- شکل ۱۵-۲: تصویر یک نانولوله کربنی زیگزاگ در فضای CAE نرم‌افزار آباکوس [۳۸]. ۳۷
- شکل ۱-۳: مدول یانگ نانولوله کربنی تک‌جداره به عنوان تابعی از نسبت ظاهری نانولوله [۷]. ۴۱
- شکل ۲-۳: ترک در نانولوله کربنی [۸]. ۴۳
- شکل ۳-۳: نمودار ضریب شدت تنش بر حسب قطر نانولوله کربنی [۸]. ۴۳
- شکل ۴-۳: تصویری از شکستگی نانولوله کربنی تک‌جداره چند رشته‌ای با سطوح شکست مسطح [۹]. ۴۴
- شکل ۵-۳: نمایش پارامترهای مورد استفاده در روش بسته شدن مجازی ترک [۱۰]. ۴۵
- شکل ۶-۳: شکل‌گیری ترک در نانولوله با عیب استون والز [۱۱]. ۴۷
- شکل ۷-۳: نانولوله چندجداره قرار گرفته بین دو فک [۱۱]. ۴۷

- شکل ۳-۸: نانولوله آرمچیر تحت بارگذاری پیچشی [۱۲] ۴۸
- شکل ۳-۹: منحنی تنش- کرنش بارگذاری کششی سیکلی در نانولوله زیگزاگ [۱۳] ۴۹
- شکل ۴-۱: نموداری از دو روش طراحی سنتی و مکانیک شکست [۱] ۵۵
- شکل ۴-۲: انواع ترک [۱] ۵۷
- شکل ۴-۳: تنش ارتجاعی σ_y در نوک ترک [۱] ۵۸
- شکل ۴-۴: لوله حاوی ترک [۴۱] ۶۰
- شکل ۵-۱: نانولوله بدون صفحه انتهایی و نانولوله با صفحه انتهایی ۶۵
- شکل ۵-۲: نمودار نیرو- جابجایی مربوط به برهم‌کنش کشیدگی پیوندهای کربن- کربن [۳۷] ۶۶
- شکل ۵-۳: نمودار نیرو- جابجایی مربوط به تغییر زاویه پیوندهای کربن- کربن- کربن [۳۷] ۶۷
- شکل ۵-۴: المان بندی اتم کربن ۶۸
- شکل ۵-۵: نمودار تنش- کرنش نانولوله زیگزاگ و آرمچیر [۱۲] ۷۰
- شکل ۵-۶: نمودار تنش- کرنش نانولوله زیگزاگ و آرمچیر در مدل حاضر ۷۱
- شکل ۵-۷: عیوب تهی جای اعمال شده در تحلیل‌ها ۷۲
- شکل ۵-۸: نمودار تنش- کرنش نانولوله سالم و معیوب ۷۲
- شکل ۵-۹: نمودار تنش- کرنش برای نانولوله سالم و معیوب و نتایج تجربی [۱۱] ۷۳
- شکل ۵-۱۰: جابجایی (نانومتر) نانولوله دارای ترک بعد از کشش ۷۴
- شکل ۵-۱۱: (الف)- نمایش شانزده اتم بر روی محیط نانولوله، (ب)- حالتی که یک المان برداشته شده است ۷۵
- شکل ۵-۱۲: تغییرات نرخ رهایی انرژی کرنشی در برابر تعداد المان حذف شده در نانولوله به قطر ۱/۲۵۷ ۷۶
- شکل ۵-۱۳: تغییرات نرخ رهایی انرژی کرنشی در برابر تعداد المان حذف شده در نانولوله به قطر ۰/۹۵ ۷۶
- شکل ۵-۱۴: مقایسه نمودار نرخ رهایی انرژی بر حسب تعداد المان حذف شده در حالت‌های با صفحه صلب و بدون صفحه صلب در دو انتهای آن ۷۷
- شکل ۵-۱۵: تغییرات نرخ رهایی انرژی در برابر طول ترک در قطرهای مختلف (نانومتر) نانولوله کربنی ۷۸
- شکل ۵-۱۶: نمایش یک ترک در نانولوله ۷۹
- شکل ۵-۱۷: انرژی کرنشی نانولوله (الف)- زیگزاگ و (ب)- آرمچیر ۸۰

- شکل ۵-۱۸: ترک در نانولوله (الف)- زیگزاگ و ب- آرمچیر [۱۱] ۸۱
- شکل ۵-۱۹: تغییرات انرژی کرنشی به طول ترک ۸۱
- شکل ۵-۲۰: نمودار نرخ رهایی انرژی نسبت به تعداد المان حذف شده برا بارگذاری مود II در دو جهت x, y ۸۳
- شکل ۵-۲۱: نمودار نرخ رهایی انرژی در بارگذاری مود II و کششی نسبت به طول ترک ۸۴
- شکل ۵-۲۲: تغییرات نرخ رهایی انرژی در برابر طول ترک با بارگذاری مود II در قطرهای مختلف ۸۵
- شکل ۵-۲۳: جابجایی (نانومتر) نانولوله با وجود ترکی به اندازه پنج المان تحت بار مود II ۸۶

فهرست جداول

- جدول ۱-۲: پارامترهای ساختارهای مختلف نانولوله‌های کربنی [۲۰] ۱۳
- جدول ۲-۲: ثابت‌های معادلات برهمکنش در نانولوله‌های کربنی ۳۵
- جدول ۱-۵: تنش کششی حداکثر و کرنش کششی حداکثر در دو نانولوله زیگزاگ و آرمچیر ۷۰

فصل ۱:

مقدمه

هدف از این فصل پاسخ به سه سؤال اولیه و اساسی است، که در هر تحقیق بنیادی باید مطرح شوند:
چه چیز؟ چرا؟ چگونه؟

کاربرد مواد در مهندسی، همیشه توأم با مسائل و مشکلاتی بوده است. به عنوان مثال در عصر حجر^۱ مشکل اساسی فقط شکل دادن مواد بود، در حالی که در اوایل عصر برنز^۲ و آهن^۳ هم تولید و هم شکل دادن مواد از مسائل مهم بوده‌اند. برای قرن‌های متمادی کار با فلزات^۴ بسیار کاربر و پر هزینه بوده است. به‌طوریکه یک برآورد تخمینی نشان می‌دهد که هزینه وسایل یک جنگجوی سواره نظام قرن سیزدهم، معادل قیمت تمام شده یک تانک در جنگ جهانی دوم بوده است.

با توسعه و افزایش مهارت کار با فلزات، کاربرد فلزات در ساختمان‌ها سریعاً افزایش یافت. گذشت زمان نشان داد که سازه‌های ساخته شده همیشه اطمینان بخش و قانع کننده نبوده‌اند، به‌طوریکه اغلب شکست‌ها و گسیختگی‌های قابل انتظار در این سازه‌ها رخ داده است. شرح عملیات ریخته‌گری و شکل دادن فلزات در قرون وسطی موجود است.

کاربرد وسیع (ولی نه به‌طور کاملاً صحیح) فلزات در قرن ۱۹ موجب حوادث فراوان و قربانیان زیادی گردید. به عنوان مثال در مارس ۱۹۲۵ حدود ۷۰۰ نفر برای تماشای یک مسابقه قایق سواری روی پل معلق مونتروس^۵ گرد آمده بودند. در اثنای مسابقه یکی از زنجیرهای پل گسیخته و عده زیادی جان سپردند. بعضی از این حوادث یقیناً به علت طراحی ضعیف و نادرست بوده است. اما به تدریج مشخص گردید که بعضی از معایب اولیه موجود در مواد موجب پیدایش ترک و سپس شکست می‌گردند. کشف معایب و نواقص موجود در مواد و رفع آن‌ها مانع بروز بعضی حوادث ناگوار می‌گردد. ظهور روش‌های تولید مواد همراه با گسترش علم مواد، تعداد حوادث ناگوار را به سطح پایین‌تر و قابل قبول رسانده است. اغلب شکست‌ها، تحت تنش‌های پایین اتفاق افتاده و تحقیقات نشان داده که عامل

¹ Stone age

² Bronze age

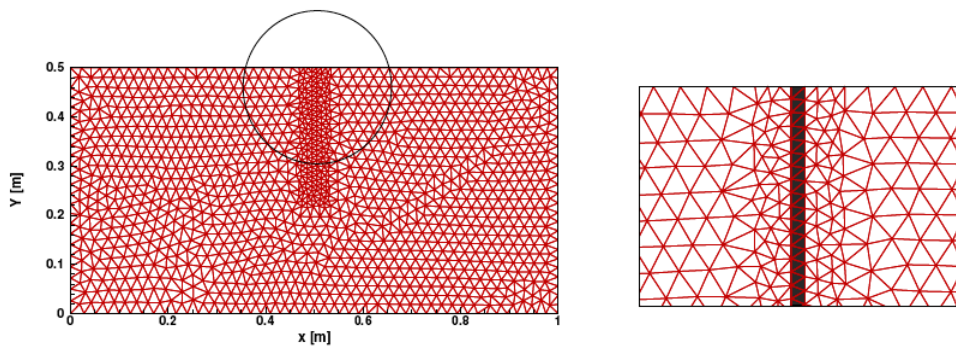
³ Iron age

⁴ Metal-working

⁵ Montrose

چنین شکست‌ها، معایبی مثل ترک‌های ریز^۱ می‌باشند. این شکست‌ها ترد و همراه با تغییر شکل پلاستیک کمی می‌باشند. درجه حرارت پایین و شرایط تنش سه بعدی از قبیل عیب یا شیار تیز^۲ وقوع شکست فولاد را تسهیل می‌نمایند. تحت این شرایط، سازه‌های فولادی بدون تغییر شکل پلاستیک قابل توجهی به روش ترد یا شکننده^۳ می‌شکنند. در دمایی بالاتر از یک دمای معین به نام دمای عبور، فولاد خواص یک جسم نرم را دارا می‌باشد. حرارت متناوب زمان جوشکاری موجب افزایش درجه حرارت عبور فولاد می‌گردد[۱].

ترک را می‌توان توسط روش‌های مکانیک پیوسته در جهان ماکرو و با در نظر گرفتن یک شکاف تحلیل کرد. اما این نتایج از دقت کافی برخوردار نخواهند بود. در روش‌های عددی معمولاً با کوچکتر کردن المان‌های تشکیل دهنده جسم پیوسته می‌توان به جواب مطلوب رسید. اما چون این کوچک سازی منجر به صرف زمان بیشتری برای حل مسئله خواهد شد، معمولاً از روش چند مقیاسی^۴ استفاده می‌کنند. به عنوان مثال برای حل مسئله ترک شکل ۱-۱، اطراف ترک را با المان‌های ریزتر و منظم‌تری نسبت به نواحی دور از ترک تقسیم‌بندی می‌کنند؛ یعنی به طور همزمان از روش ماکرو مقیاس و مسو^۵ مقیاس استفاده می‌گردد.



شکل ۱-۱: مدل چندمقیاسی ترک شامل مدل مسو (اطراف ترک) و مدل ماکرو (دورتر از ترک)[۲]

¹ Flaws
² Sharp notch
³ Cleavage
⁴ Multiscale
⁵ Meso

به طور کلی دو روش اساسی برای شبیه‌سازی عددی ترک وجود دارد: ۱- در نظر گرفتن ترک به صورت یک ناپیوستگی میان المان‌های مجاور هم، ۲- در نظر گرفتن ترک به صورت شکاف بر روی یک المان کامل [۲]. این دیدگاه‌ها را نیز می‌توان به دو دسته تقسیم کرد: ۱- بکارگیری انواع مدل‌های خاص در FEM، ۲- اعمال خصوصیات ماده‌ای خاص برای ناحیه ترک. همه این روش‌ها در حوزه مکانیک شکست قرار می‌گیرند که اندکی متفاوت از مکانیک پیوسته می‌باشد.

در مکانیک شکست، از پارامترهای جدیدی استفاده می‌شود که برگرفته از مفاهیم مکانیک پیوسته است. دلیل اینکه برخی از محققان به وجود چنین جهانی اعتقاد ندارند؛ همین است که آن‌ها این حیطه از مرزهای ابعادی را در حوزه‌های ماکرو و میکرو قرار داده و تحلیل مسائل در این جهان را توسط روش‌های این دو جهان انجام می‌دهند. بدیهی است که نتایج بدست آمده یا دارای دقت پایین و یا نیازمند زمان زیادی برای تحلیل خواهند بود. اما با توجه به اینکه با پیشرفت علم و نیاز به دقت بالا و زمان اندک برای مدل‌سازی و شبیه‌سازی ضروری به نظر می‌رسد، بنابراین وجود چنین جهانی الزامی است. ترک و مکانیک شکست در جهان نانو نیز کمی متفاوت با آنچه گفته شد می‌باشد. مطالب گفته شده مقدمه‌ای برای درک بهتر مکانیک شکست در نانولوله کربنی است، بنابراین در فصل‌های بعد به‌طور مفصل به بیان مفهوم ترک در نانولوله پرداخته می‌شود.

نانولوله‌های کربنی به دلیل خواص فوق‌العاده مکانیکی و الکتریکی از سال ۱۹۹۱ که توسط ایجیما^۱ کشف شده‌اند [۳]؛ در کانون توجه محققان در سرتاسر جهان قرار گرفته‌اند و کارهای بسیار وسیعی در حوزه‌های مختلف در مورد این مواد صورت گرفته است. پس از کشف نانولوله‌های کربنی محققین به انجام آزمایش بر روی این ساختار روی آورده‌اند؛ اما صرف هزینه‌های بسیار زیاد برای انجام این آزمایش‌ها محققان را بر آن داشت تا با استفاده از روش‌های مختلف کامپیوتری به شبیه‌سازی رفتارهای مختلف این ماده بپردازند. از مهم‌ترین این روش‌ها می‌توان به روش‌های

¹ Ijima

آبینیشیو^۱ و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی^۲ اشاره کرد. البته لازم به ذکر است که روش دینامیک مولکولی دارای دقت بسیار بالایی است؛ اما استفاده از آن نیاز به وقت و هزینه‌های زیادی دارد و بکارگیری آن برای همه مقصور نیست. این امر سبب شد تا محققین همچنان به دنبال روشی جامع و مطمئن باشند تا به وسیله آن بتوان نانولوله‌های کربنی را تحت بارگذاری‌ها و شرایط مرزی مختلف مورد بررسی قرار داد.

از این رو در سال ۲۰۰۲ استفاده از خصوصیات ساختاری برای مدل‌سازی نانوساختارها پیشنهاد شد [۴]. در طی سال‌های گذشته مدل‌های مکانیک ساختاری تکامل یافته است؛ اما در تمامی مدل‌هایی که تاکنون ارائه شده است کاستی‌ها و معایبی وجود دارد. همان‌طور که در قسمت‌های قبل گفته شد مکانیک شکست از اهمیت بالایی برخوردار است و اینکه در سال‌های اخیر با کشف نانولوله کربنی پیشرفت عظیمی در علم مواد و سایر علوم رخ داده است. بنابراین بررسی پارامترهای شکست در نانولوله کربنی بسیار مورد توجه و حائز اهمیت است. در این پروژه با استفاده از مدل مکانیک ساختاری رفتار نانولوله تحت بار کششی و نرخ‌های انرژی در نانولوله ترک‌دار مورد بررسی قرار می‌گیرد [۵].

¹ Ab-initio

² Molecular Dynamic (MD)

فصل ۲:

نانولوله کربنی

۲-۱- مقدمه

کربن یکی از معروفترین و کارآمدترین عناصر در ساخت ترکیبات مختلف است. کلمه کربن از کلمه لاتین به معنای " کربو"^۱ گرفته شده است که رومی‌ها آن را زغال چوب می‌نامند [۱۷]. البته در دنیای مدرن، آن فراتر از یک زغال چوب می‌باشد. از کربن، فیبرهای با استحکام بالا، یکی از بهترین روان‌کننده‌ها (گرافیت)، سخت‌ترین کریستال‌ها و مواد (الماس)، محصولات غیرفلورین (کربن شبه شیشه‌ای) و ... به دست می‌آیند. توانایی یک عنصر در ترکیب با اتم‌هایش مختص کربن نمی‌باشد. اما این عنصر در تعداد و تنوع آلوتروپ‌ها منحصر به فرد می‌باشد. این عنصر بیشترین تعداد آلوتروپ را در میان عناصر دیگر دارا می‌باشد. خصوصیات آلوتروپ‌های مختلف کربن می‌توانند بطور گسترده تغییر کنند. به عنوان مثال، الماس یکی از سخت‌ترین مواد شناخته شده و گرافیت یکی از نرم‌ترین آن‌ها می‌باشد. الماس یک عایق الکتریکی در حالیکه گرافیت یک هادی الکتریکی می‌باشد. در این میان نانولوله‌های کربن و فلورین‌ها، توجه دانشمندان را بیشتر از دیگر شکل‌های کربن به خود جلب کرده‌اند. اگرچه مدت زمان زیادی از کشف نانولوله‌های کربن و فلورین نمی‌گذرد؛ اما تحقیقات وسیعی در زمینه شناسایی، ساخت و بکارگیری آن‌ها در صنایع مختلف انجام شده و پیشرفت‌های زیادی نیز در این رابطه صورت گرفته است.

۲-۱-۱- جهان نانو

همزمان با سخنرانی پروفیسور فاینمن^۲ فیزیکدان برنده جایزه نوبل در سال ۱۹۵۹ تحت عنوان "آن پایین فضای خالی بسیاری وجود دارد"، نگاه‌ها به سمت جهان نانو معطوف شد [۱۸]. هرچند او از قوانینی که در این جهان ممکن بود حاکم باشد بی‌اطلاع بود، اما روش‌هایی را برای دستیابی به این جهان ارائه کرد. او اعتقاد داشت که با رسیدن به این جهان این امکان هست تا با دستکاری در اتم‌ها و

¹ Carbo

² Feynman

ملکول‌ها، به مواد جدیدی با قابلیت‌های منحصر به فرد رسید. گذشت زمان اعتبار سخن فاینمن را به اثبات رساند.

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

در همان زمان یک گروه تحقیقاتی از دانشگاه رایس^۱ به رهبری اسمالی^۲ موفق به کشف ملکول جدیدی به نام فلورون^۳ شدند که دارای خصوصیات منحصر به فردی بود شکل ۱-۲. این ملکول از ۶۰ اتم کربن تشکیل یافته است که به شکل کاملاً متقارن تشکیل ساختاری توپ مانند را می‌دهد. ابعاد این ملکول تقریباً یک نانومتر می‌باشد که ضمن توانایی عبور گرما و الکتریسیته از خود، محکمتر از فولاد و سبکتر از پلاستیک نیز می‌باشد. جایزه نوبل شیمی در سال ۱۹۸۶ برای این کشف اعطا شد.

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

یک تعریف مختصر و خوب از علم نانو و نانو تکنولوژی که خصوصیات خاص نانومقیاس را در بر

¹ Rice

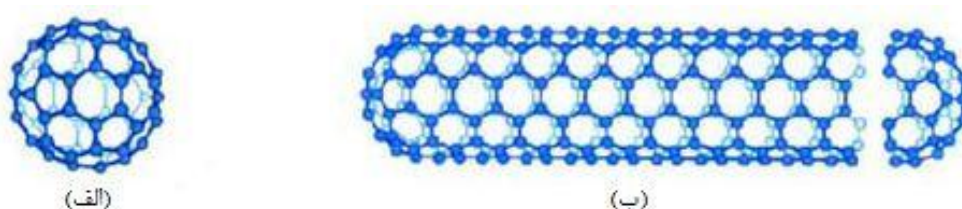
² Smalley

³ Fullerene

می‌گیرد، از سند ملی علوم بنیادی که توسط مایک راکو^۱ در سال ۲۰۰۱ منتشر شده است:

یک نانومتر (یک میلیاردیم متر) یک نقطه جادویی در مقیاس ابعادی می‌باشد. نانوساختارها

پیوندگاه کوچکترین وسایل ساخته شده بدست بشر و بزرگترین ملکول‌های زنده اشیا می‌باشند.



شکل ۱-۲: طرحواره‌ای از (الف) فلورون (ب) نانولوله کربنی

۲-۲- وضعیت پیوندها در نانولوله‌های کربنی

مکانیزم پیوندها در نانولوله‌های کربنی بسیار شبیه گرافن^۲ می‌باشد. عدد اتمی کربن ۶ است و از نقطه نظر فیزیک اتمی، ساختار الکترونیکی این اتم $1s^2 2s^2 2p^2$ می‌باشد. کوچکترین ساختار واحد تشکیل‌دهنده یک نانولوله کربنی، حلقه‌ای متشکل از شش اتم کربن می‌باشد. در این فرآیند، یک اوربیتال S و دو اوربیتال P با یکدیگر ترکیب می‌شوند تا سه اوربیتال ترکیبی sp^2 که نسبت به هم زاویه ۱۲۰ درجه دارند را در یک صفحه ایجاد کنند. این پیوند داخل صفحه‌ای را پیوند سیگما می‌نامند. این پیوند کوالانسی قوی، علت اصلی سختی و استحکام بالای نانولوله‌های کربنی می‌باشد. اینک یک اوربیتال P که عمود بر صفحه سیگما است، باقی می‌ماند. این پیوند که اصولاً در برهمکنش‌های بین لایه‌ای شرکت می‌کند، به عنوان پیوند پای (π) شناخته می‌شود. این پیوند خارج صفحه‌ای با پیوند پای لایه‌های مجاور برهمکنش می‌کند. این پیوندهای غیر مستقر بسیار ضعیف می‌باشند و بیشتر در بررسی خصوصیات خارج صفحه‌ای مانند سفتی خمشی دیواره نانولوله مهم می‌شوند.

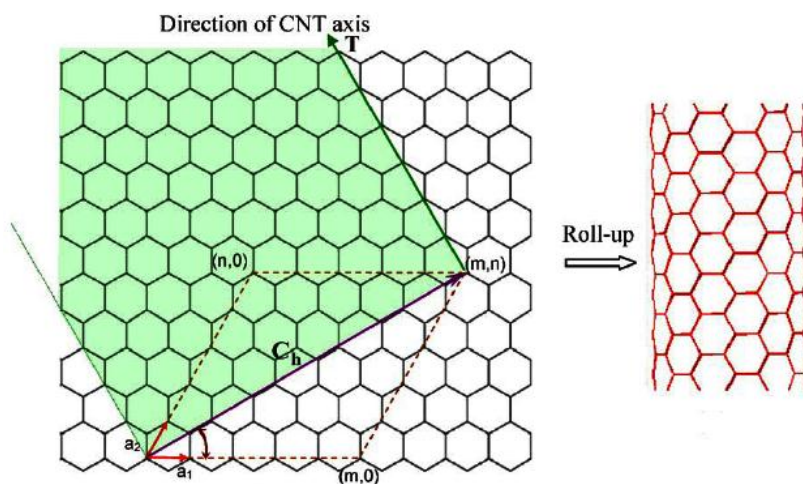
¹ Mike Roco

² Graphene

۲-۳- ساختار نانولوله‌های کربنی

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

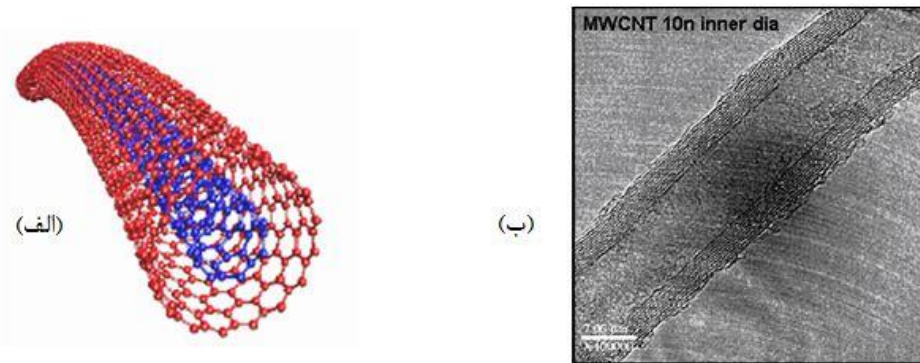
معمولا برای مدل‌سازی و درک بهتر از ساختار نانولوله‌های کربنی، فرض می‌کنند که این نانولوله‌ها از پیچیده شدن یک گرافن تشکیل یافته اند شکل ۲-۲ در واقع نانولوله‌ها در زمان تشکیل به صورت لوله‌ای بوجود می‌آیند و همانطور که در شکل ۱-۲ مشاهده می‌شود، توسط یک سرپوش نیمکره شبه فلوروتن بسته شده‌اند.



شکل ۲-۲: تشکیل نانولوله کربنی توسط لوله کردن یک گرافن [۱۹]

اگر نانولوله از یک لایه گرافن لوله شده تشکیل یافته باشد، به آن نانولوله تک دیواره و اگر از چند لایه گرافن لوله شده هم‌مرکز تشکیل یافته باشد، به آن نانولوله چند دیواره اطلاق می‌گردد شکل ۲-۳. فاصله میان نانولوله‌ها در یک دسته نانولوله یا فاصله میان دیواره‌های یک نانولوله تک دیواره تقریبا

معادل 0.34 نانومتر یعنی معادل فاصله بین لایه‌ای گرافیت می‌باشد. در یک صفحه گرافن، اتم‌های کربن به صورت ساختارهای شش‌گوش در کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند، به طوری‌که هر اتم با سه اتم دیگر مجاور است.



شکل ۲-۳: (الف) - طرحواره‌ای از یک نانولوله دو دیواره، (ب) - تصویر از یک نانولوله ده دیواره توسط SEM [۲۰]

حالت‌های مختلف زیادی برای لوله کردن یک گرافن وجود دارد. جهت چرخش این لایه گرافن، نوع ساختار نانولوله‌های کربنی را به وجود می‌آورد. همانگونه که در شکل ۲-۴ مشاهده می‌شود، سه نوع ساختار متفاوت از پیچیده شدن لایه گرافن ایجاد می‌گردد. جهت چرخش توسط یک بردار که به نام بردار چرخش یا بردار چیرال^۱ معروف است، بیان می‌شود. این بردار می‌تواند به صورت یک ترکیب خطی از بردارهای انتقال واحد در شبکه شش‌وجهی تعریف شود [۲۰]:

$$C_h = ma_1 + na_2 \quad (1-2)$$

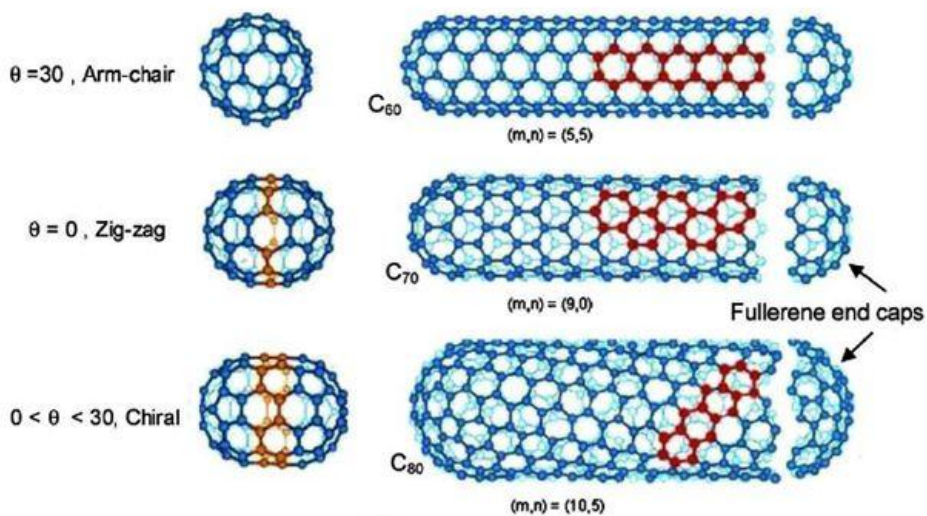
که m و n اعداد صحیح هستند و a_1 و a_2 بردارهای شبکه شش‌وجهی گرافیت می‌باشند.

زاویه بین a_1 و a_2 زاویه چیرال نامیده می‌شود که از رابطه زیر به دست می‌آید:

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

¹ Chiral

جدول ۱-۲ پارامترهای مربوط به ساختارهای مختلف نانولوله‌های کربنی را نشان می‌دهد.

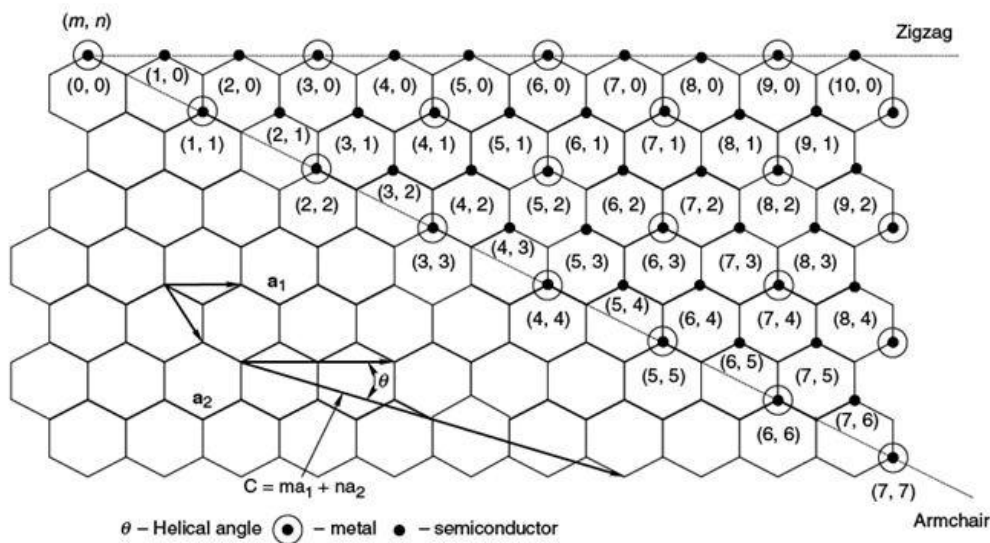


شکل ۲-۴: سه نوع ساختار مختلف نانولوله‌های کربنی [۲۰]

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

جدول ۱-۲: پارامترهای ساختارهای مختلف نانولوله‌های کربنی [۲۰]

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



شکل ۲-۵: چند نمونه از شاخص‌های مختلف برای تشکیل نانولوله‌های کربنی [۱۸]

۲-۴- برهمکنش‌ها و پتانسیل‌های موجود در نانولوله‌های کربنی

از نقطه نظر مکانیک ملکولی، یک نانولوله کربنی را می‌توان به صورت یک ملکول بزرگ شامل اتم‌های کربن در نظر گرفت و هسته‌های اتمی می‌توانند به عنوان نقاط در ماده باشند. حرکت این اتم‌ها با یک میدان نیرویی که ناشی از برهمکنش هسته-الکترون و برهمکنش هسته-هسته است، مرتبط می‌باشد [۲۱]. معمولا میدان نیرو به صورت یک انرژی پتانسیل فضایی در نظر گرفته می‌شود. این انرژی پتانسیل فقط وابسته به حرکت نسبی هسته‌های اتمی تشکیل دهنده ملکول می‌باشد. به طور کلی انرژی پتانسیل فضایی کل را به صورت زیر بیان می‌کنند [۲۲].

$$U_{total} = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum U_\phi + \sum U_\omega + \sum U_{vdw} + \sum U_{el} \quad (۳-۲)$$

که در آن U_r ، ناشی از برهمکنش کشش پیوند^۱، U_θ ناشی از برهمکنش خمش زاویه‌ای پیوند^۲، U_ϕ

ناشی از برهمکنش پیچش دوسطحی پیوند^۳، U_ω ناشی از برهمکنش پیچش خارج صفحه‌ای^۴، U_{vdw}

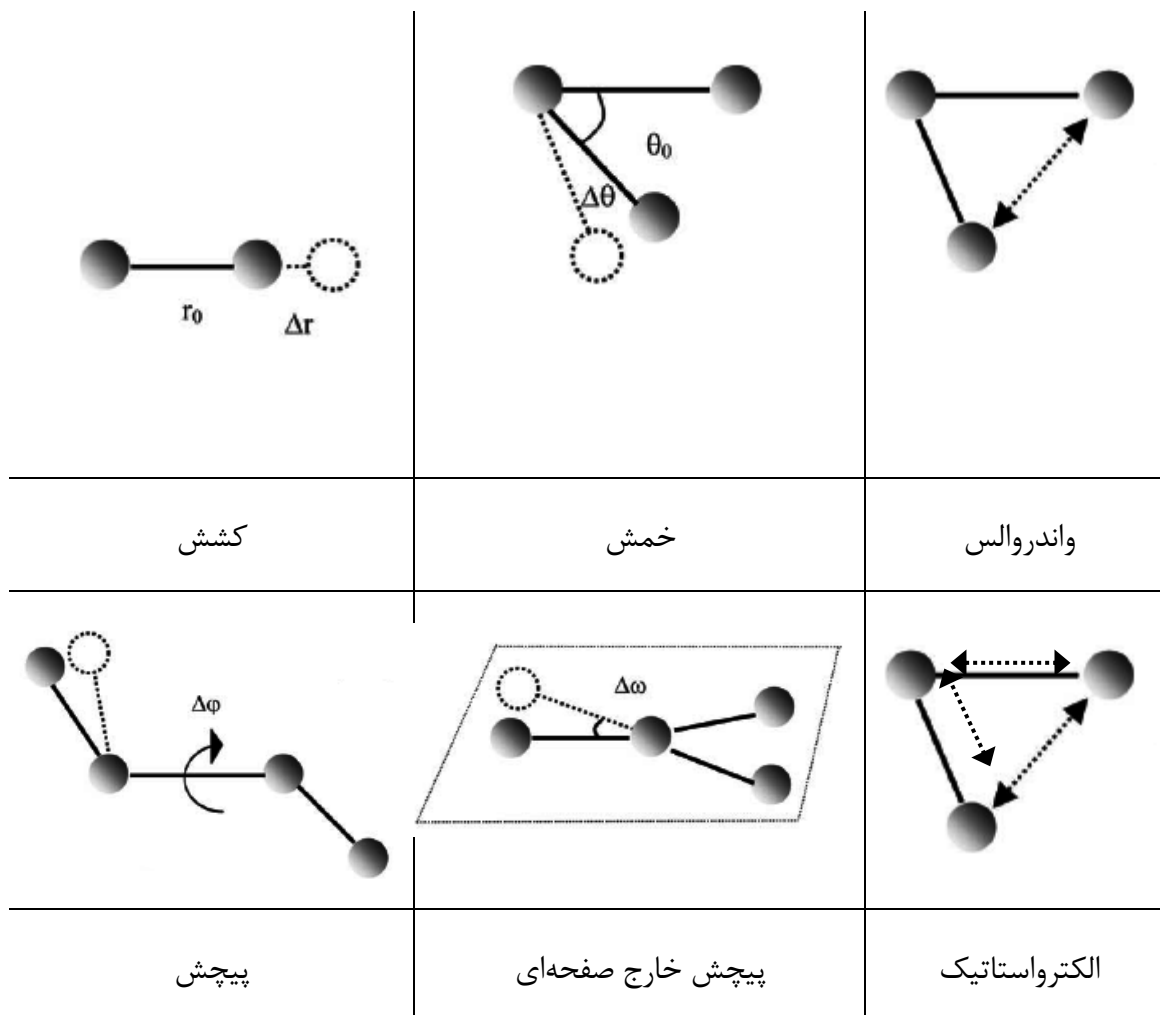
^۱ Stretching bond

^۲ Bending bond

^۳ Dihedral angle torsion

^۴ Out-of-plane torsion

ناشی از برهمکنش واندروالس^۱ و U_{el} ناشی از برهمکنش الکترواستاتیک^۲ بین اتم‌ها می‌باشد. چهار پتانسیل اول مربوط به برهمکنش‌های پیوندی در اتم می‌شوند و پتانسیل‌های واندروالس و الکترواستاتیک مربوط به برهمکنش‌های غیرپیوندی هستند شکل ۶-۲.



شکل ۶-۲: انواع برهمکنش‌های موجود در نانولوله کربنی

نشریات بسیار زیادی در زمینه مکانیک ملکولی وجود دارند که روشهای دستیابی به توابع هر یک از پتانسیل‌های فوق را ارائه کرده‌اند [۲۳-۲۴]. از اینرو بسته به نوع ماده و شرایط بارگذاری در نظر گرفته شده، توابع پتانسیل مختلفی به کار می‌رود. معمولاً به دلیل آنکه برهمکنش‌های واندروالس و الکترواستاتیک در مقابل سایر برهمکنش‌ها ضعیف‌تر می‌باشند، برای سیستم‌های

¹ Van der waals

² Electrostatic

کوالانسی از دو پتانسیل واندروالس و الکترواستاتیک صرف نظر می‌گردد. در ادامه به بررسی هر یک پتانسیل‌های فوق به صورت جداگانه پرداخته می‌شود.

۲-۴-۱- برهمکنش کشش پیوند

این برهمکنش یک برهمکنش پیوندی می‌باشد که از دور و نزدیک شدن دو اتم در راستای پیوند ناشی می‌شود. این برهمکنش، قوی‌ترین برهمکنش در سیستم‌های کوالانسی محسوب می‌شود. پتانسیل‌های مختلفی در نشریات گوناگون برای این پتانسیل ارائه گردیده است. یکی از پتانسیل‌های بسیار معروف که اخیراً به علت سادگی و دقت قابل قبول آن مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته است، پتانسیل مورس^۱ اصلاح شده می‌باشد [۱۱]:

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

که در آن r_0 ، طول اولیه (تعادل) پیوند C-C در نانولوله‌های کربنی و r ، طول ثانویه (کشیده یا فشرده) پیوند می‌باشد. طول تعادل پیوند در مقالات مختلف از ۰/۱۳۹ نانومتر تا ۰/۱۴۲ نانومتر تغییر می‌کند. سایر پارامترهای پتانسیل مورس، به صورت زیر است [۱۱]:

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

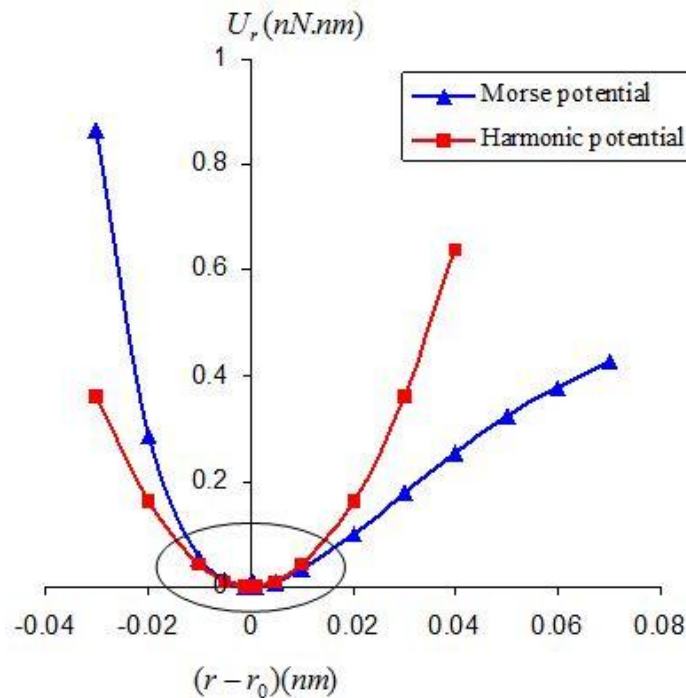
همانگونه که در شکل ۲-۷ مشاهده می‌شود، در جابجایی‌های کوچک می‌توان رفتار کشش پیوند را خطی فرض نمود و از پتانسیل هارمونیک زیر استفاده کرد:

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

حوزه‌ای که می‌توان با تقریب خوبی، از پتانسیل هارمونیک به جای پتانسیل مورس استفاده کرد، در شکل ۲-۷ توسط بیضی نشان داده شده است. معمولاً چون برای بدست آوردن پارامترهایی همچون مدول یانگ، مدول برشی و ضریب پواسون نیاز به کشش زیاد نانولوله نمی‌باشد، می‌توان از

^۱ Morse

پتانسیل هارمونیک استفاده نمود.



شکل ۲-۷: مقایسه پتانسیل‌های کشش پیوند مورس و هارمونیک

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

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

$$u_{\theta} = \frac{1}{2} k_{\theta} (\theta - \theta_0)^2 [1 + k_{\text{sextic}} (\theta - \theta_0)^4] \quad (6-2)$$

همانگونه که در شکل ۲-۸ مشاهده می‌شود، در جابجایی‌های کوچک می‌توان رفتار خمش پیوند

را خطی فرض نمود و از پتانسیل هارمونیک زیر استفاده کرد:

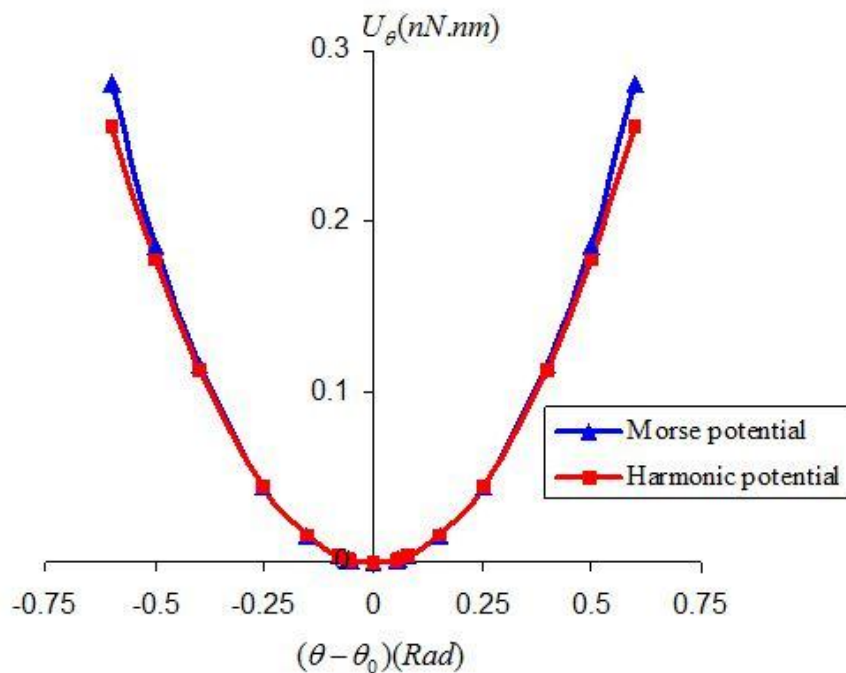
$$u_{\theta} = \frac{1}{2} k_{\theta} (\theta - \theta_0)^2, k_{\theta} = 100 \text{ nN.nm.rad}^{-2} \quad (7-2)$$

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

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

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

همانگونه که در شکل ۸-۲ مشاهده می‌شود، پتانسیل هارمونیک برای تغییر زاویه پیوند دارای تطابق بهتری نسبت به پتانسیل هارمونیک برای کشش پیوند است. بنابراین می‌توان از این پتانسیل با اطمینان به جای پتانسیل مورس استفاده کرد.



شکل ۸-۲: مقایسه پتانسیل‌های تغییر زاویه پیوند مورس و هارمونیک

۲-۴-۳- برهمکنش پیچش دوسطحی

این برهمکنش یک برهمکنش پیوندی می‌باشد که از چرخش زاویه‌ای دو اتم نسبت به هم حول محور پیوند ایجاد می‌شود. مقدار این برهمکنش از برهمکنش‌های کششی و خمشی ضعیف‌تر می‌باشد. یکی از توابعی که بسیار برای برهمکنش پیچشی به کار می‌رود، یک نوع پتانسیل پیچشی متناوب است که به صورت زیر بیان می‌گردد [۲۳]:

$$U_{\phi} = \frac{1}{2} k_{\phi} [1 + \cos(n\phi - \phi_0)] \quad (۸-۲)$$

که در آن ϕ_0 ، زاویه اولیه (تعادل) میان سه پیوند C-C در دوسطح و ϕ ، زاویه ثانویه میان دو سطح می‌باشد. مقدار زاویه تعادل در نانولوله‌های کربنی ۱۸۰ درجه می‌باشد. سایر پارامترهای تابع فوق به صورت زیر است:

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

همانگونه که در شکل ۲-۹ مشاهده می‌کنید، در جابجایی‌های کوچک می‌توان رفتار پیچش پیوند را خطی فرض نمود و از پتانسیل هارمونیک زیر استفاده کرد:

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

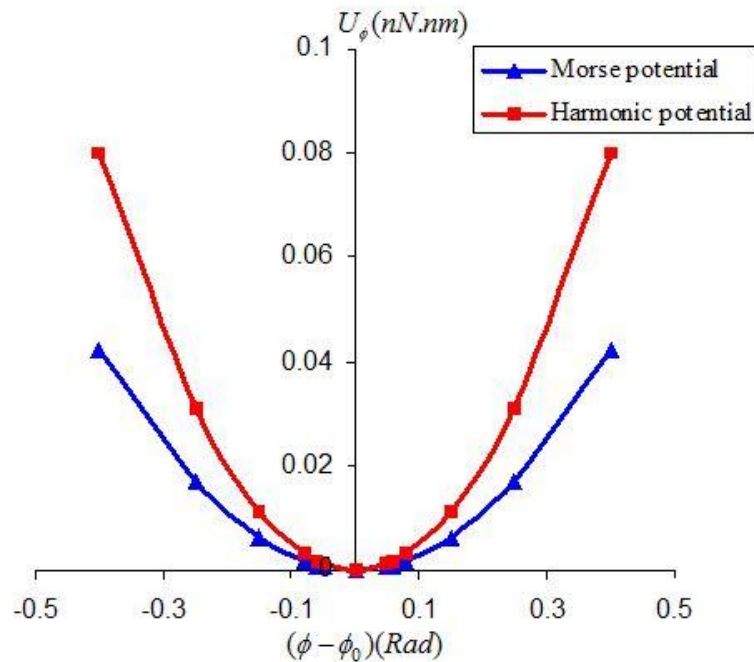
۲-۴-۴- برهمکنش پیچش خارج صفحه‌ای

این برهمکنش، یک برهمکنش پیوندی می‌باشد که از چرخش یک پیوند حول صفحه تشکیل دهنده سه اتم مجاور ناشی می‌شود. این برهمکنش فقط تحت شرایط خاص بارگذاری در نظر گرفته می‌شود. تابع پیشنهاد شده برای پتانسیل مزبور به صورت زیر است [۲۳]:

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

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

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



شکل ۹-۲: مقایسه پتانسیل‌های پیچش دوسطحی پیوند مورس و هارمونیک

همانند شکل ۹-۲، در جابجایی‌های کوچک می‌توان رفتار پیچش پیوند را خطی فرض نمود و از

پتانسیل هارمونیک زیر استفاده کرد:

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

۲-۴-۵- برهمکنش و اندروالس

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

نانولوله‌های چنددیواره از نوع واندروالس می‌باشد شکل ۲-۱۰.



شکل ۲-۱۰: برهمکنش واندروالس در اتم‌های کربن

به منظور تعریف برهمکنش واندروالس روابط مختلفی ارائه شده است که معروف‌ترین آن‌ها پتانسیل لنارد-جونز^۱ می‌باشد و به صورت زیر تعریف می‌شود [۲۵]:

$$U_{vdw} = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (۲-۱۲)$$

که در آن r ، فاصله میان دو اتم می‌باشد. سایر پارامترهای پتانسیل لنارد-جونز به صورت زیر می‌باشند [۲۶].

$$\varepsilon = 0.4396, \quad \sigma = 0.341nm$$

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

۲-۴-۶- برهمکنش الکترواستاتیکی

این برهمکنش یک برهمکنش غیر پیوندی است و بر اثر به وجود آمدن نیروهای الکترواستاتیکی بین الکترون‌های دو اتم مجاور یکدیگر ایجاد می‌شود. این برهمکنش نسبت به برهمکنش‌های پیوندی بسیار ضعیف است و حتی در مسائلی که برهمکنش واندروالس را در نظر می‌گیرند از این برهمکنش

^۱ Lenard Jonze

صرف نظر می کنند [۱۱]. فرم کلی تابع پتانسیل الکترواستاتیک به صورت زیر می باشد:

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

این برهمکنش معمولاً در همه مسائل مکانیکی شامل نانولوله های کربنی قابل چشم پوشی است و به دلیل اینکه محاسبات مورد نیاز برای آن بسیار سنگین و زمان بر است، بنابراین فقط در مسائل خاص شیمی و فیزیک مورد استفاده قرار می گیرد.

۲-۵- ویژگی های نانولوله کربنی

بعد از کشف نانولوله کربنی دانشمندان دریافتند خواص مکانیکی که برای این ساختارهای جالب پیش بینی می شود، مانند استحکام و سفتی بالا و چگالی کم می تواند این ساختارها را جایگزین بسیاری از مواد در کاربردهای صنعتی نماید. خواص الکترونیکی، مولکولی و ساختاری نانولوله ها تا حد زیادی از ساختار تقریباً یک بعدی آن ها ناشی می شود. در زیر تعدادی از خواص مهم نانولوله های کربنی آورده شده است.

۱- اندازه بسیار کوچک (قطر کوچک تر از ۰/۴ نانومتر)

۲- حالت رسانا و نیمه رسانایی آن ها بر حسب شکل هندسی شان

۳- قدرت رسانایی گرمایی بالا

۴- مدول یانگ بالا

۵- حساس به تغییر کوچک نیروهای اعمال شده

۶- چگالی سطحی بسیار بالا

۷- قابلیت ذخیره سازی انرژی

۸- استحکام و مقاومت کششی بالا

۹- بروز خواص الکتریکی و مکانیکی منحصربه‌فرد در طول آن‌ها

برای نمونه در سال ۲۰۰۰، مقاومت کششی یک نانولوله چندجداره برابر ۶۳GPa اندازه‌گیری شد [۲۷]. به عنوان مقایسه، مقاومت کششی یک فولاد با درصد کربن بالا برابر $۱/۲\text{GPa}$ است. همچنین نانولوله‌های تک جداره ضریب کشسانی بسیار بالایی دارند، با در نظر گرفتن اینکه نانولوله‌های کربنی چگالی وزنی پایینی دارند ($۱/۳-۱/۴\text{ g/cm}^3$) استحکام ویژه آن‌ها در میان تمامی مواد شناخته شده، بهترین است. خواص ویژه و منحصر به فرد نانولوله‌های کربنی از جمله مدول یانگ بالا و استحکام زیاد از یک طرف و طبیعت کربنی بودن نانولوله‌ها (به خاطر این که کربن ماده‌ای است کم وزن و بسیار پایدار) از سوی دیگر باعث شده که در دهه گذشته تحقیقات مهمی در کارایی این ساختار در فرایندهای مکانیکی انجام شده باشد. با توجه به خصوصیات ذکر شده بررسی پارامترهای شکست اهمیت ویژه‌ای پیدا می‌کند، مخصوصاً تحلیل پارامترهایی بر روی نانولوله ترک دار؛ از این رو به تازگی دانشمندان پژوهش‌هایی در زمینه مکانیک شکست نانولوله‌ها و صفحه‌های گرافن انجام داده‌اند.

۲-۶- مدل‌سازی نانولوله کربنی

۲-۶-۱- مقدمه

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

بیاورند بطوریکه کارهای اساسی برای مدل‌سازی و شبیه‌سازی از سال ۱۹۹۶ ارائه گردیده‌اند.

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

۲-۶-۲- مدل‌سازی مولکولی

در این روش، سیستم به عنوان یک سیستم گسسته از اتم‌ها در نظر گرفته خواهد شد. سپس اندرکنش‌های بین مولکولی با استفاده از یکی از مدل‌های پتانسیل برای سیستم مورد نظر مدل می‌شوند. با استفاده از محاسبات عددی، انرژی سیستم محاسبه شده، سپس انرژی کل سیستم در مراحل بعدی برای محاسبه خواص مکانیکی نانولوله کربن بکار برده می‌شوند.

به دلیل محدودیت‌های جاری در مورد تست‌های مکانیکی در مقیاس نانو، شبیه‌سازی‌های مولکولی به ابزاری مهم برای مطالعه مکانیک نانولوله‌ها مبدل گشته‌اند. آن‌ها می‌توانند به دو صورت مورد استفاده قرار گیرند:

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

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

اخیراً تست‌هایی که به روش تجربی امکان‌پذیر نبوده‌اند، نظیر تست پیچش، به راحتی توسط شبیه‌سازی مولکولی انجام گرفته‌اند. این شبیه‌سازی‌ها تنها به شرایط مرزی مناسب نیاز دارند. تجربه‌های جدید دارای دقت و تفکیک‌پذیری پایین هستند که به وسیله شبیه‌سازی مولکولی قابل برطرف

شدن است. هر چند، این نکته باید ذکر شود که شبیه‌سازی‌های مولکولی تنها تخمین هستند. آن‌ها بر پایه بسیاری از فرضیات و ساده‌سازی‌ها منطبق هستند. تمام نتیجه‌گیری‌های به دست آمده از شبیه‌سازی‌های مولکولی با شناخت از این موضوع بایستی مورد بررسی قرار گیرند. این بدان معنی است که مدل‌های مولکولی بایستی به عنوان ابزاری برای فهم نانولوله‌ها مورد استفاده قرار گیرند و زمانی که داده‌های فیزیکی تجربی موجود است، این داده‌ها ترجیح داده می‌شود.

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

۱- مکانیک مولکولی^۱

۲- مکانیک کوانتومی^۲

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

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

¹ Molecular Dynamics (MD)

² Quantum mechanics

۲-۶-۲-۱- روش دینامیک مولکولی^۱

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

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

۲-۶-۲-۲- روش‌های پایه^۲

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

¹ Molecular mechanics

² Ab-initio

نمی‌توان چارچوب مناسبی برای مطالعه دینامیک سیستم‌ها تعریف نمود.

برای حل این مشکل، روش‌هایی بر پایه مکانیک کوانتوم که مستقل از پتانسیل‌های برهمکنش می‌باشند، گسترش یافته‌اند. این روش‌ها را روش‌های شبیه‌سازی پایه (آب‌نیشیو) می‌نامند. اساس این روش بر پایه استنتاج نیروهای تحمل شده توسط هسته‌های اتمی در یک نانوسیستم می‌باشد نه بر اساس پتانسیل‌های برهمکنش از پیش تعیین شده. هنگامی که روش‌های آب‌نیشیو مورد استفاده قرار می‌گیرند، اولویت از ایجاد توابع انرژی پتانسیل تقریبی، به انتخاب طرح‌های تقریبی برای محاسبه معادلات شرودینگر^۱ چندعضوی تغییر می‌کند. مزیت روش‌های آب‌نیشیو این است که دستورهای پیش‌بینی نشده زیادی قبل از شروع شبیه‌سازی مجاز به اجرا در طول مسیر شبیه‌سازی هستند.

۲-۶-۳- مدل‌سازی پیوسته

روش‌های شبیه‌سازی که قبلاً مورد بحث قرار گرفتند، به تعداد اتم‌های از درجه 10^8 و بازه‌های زمانی نانوثانیه محدود شده‌اند. بنابراین شبیه‌سازی سیستم‌های بزرگ‌تر با بازه زمانی طولانی‌تر باید توسط روش‌های مکانیک پیوسته صورت پذیرد. اخیراً کارهای زیادی بر روی مدل‌های پیوسته نانولوله‌های کربنی صورت گرفته است. اولین کارهای انجام‌شده در این زمینه، توسط ترسوف^۲ در سال ۱۹۹۲ [۲۸]، یاکوبسون^۳ در سال ۱۹۹۶ [۲۹] و رو^۴ در سال ۲۰۰۰ [۳۰] انجام شده است. ترسوف به کمک یکسری محاسبات ساده از انرژی فلورون، نشان داد که می‌توان با استفاده از خصوصیات الاستیک ورقه گرافیت و فلورون، پیش‌بینی انرژی کرنش الاستیک فلورون‌ها و نانولوله‌های کربنی را انجام داد. یاکوبسون و رو، یک مدل پوسته پیوسته بدون در نظر گرفتن کایرالیته^۵ و نیروهای اعمالی به اتم‌ها برای نانولوله‌های کربنی تک دیواره در نظر گرفتند. گاویندجی^۶ در سال ۱۹۹۹ به

¹ Schodinger

² Tersof

³ Yakobson

⁴ Ru

⁵ Chairality

⁶ Govindjee

کمک تئوری تیر اویلر، نانولوله‌های چنددیواره را مدل کرد. آن‌ها نشان دادند که خصوصیات مواد در نانومقیاس، بسیار وابسته به اندازه‌شان می‌باشد [۳۱]. یکی از روش‌های بسیار مهم مکانیک پیوسته توسط ژانگ^۱ و همکارانش در سال ۲۰۰۲ برای پیش‌بینی خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی تک دیواره ارائه گردید [۳۲]. روش آن‌ها بر پایه کاربرد پتانسیل‌های برهمکنش قرار داشت.

۲-۶-۴- مدل‌سازی مکانیک ساختاری

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

¹ Zhang

فاحشی داشته‌اند که این امر نشان‌دهنده نقص در مدل‌های مربوط می‌باشد. در نهایت یکی از کامل‌ترین مدل‌های ساختاری ارائه گردیده تاکنون که در این پایان‌نامه مورد استفاده قرار گرفته، معرفی خواهد شد و به بررسی شبیه‌سازی ترک روی این مدل پرداخته می‌شود.

۲-۶-۴-۱- مدل اودگارد^۱

برای اولین بار اودگارد و همکارانش در سال ۲۰۰۲، استفاده از خصوصیات ساختاری را برای مدل‌سازی مواد نانوساختار پیشنهاد کردند [۴]. آن‌ها نشان دادند که با معادل قرار دادن انرژی پتانسیل مولکولی یک ماده نانوساختار با انرژی کرنشی یک خرپا و مدل پیوسته معادل، می‌توان خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی را پیش‌بینی کرد. در این مدل، یک المان حجم معرف ساختار شیمیایی گرافن، با یک مدل خرپای معادل جایگزین شده است. دو پارامتر مستقل ضخامت دیواره و سفتی خمشی مورد بررسی قرار گرفته است. مدل اودگارد را می‌توان مدل خرپا نیز نامید. در این مدل نانولوله‌های کربنی همانند یک ساختار خرپا در نظر گرفته شده‌اند، به طوری که اتم‌های کربن به عنوان مفصل‌های ارتباط‌دهنده این اعضا عمل می‌کنند. چون مدل اودگارد برای نانولوله‌های تحت بار کششی مورد استفاده قرار گرفته است، بنابراین او فقط دو برهمکنش کشش و تغییر زاویه را میان اتم‌های کربن لحاظ کرد و از سایر پتانسیل‌ها صرف‌نظر نمود. برای هر یک از برهمکنش‌ها از دو میله با مدول یانگ و سطح مقطع مختلف استفاده شده است.

۲-۶-۴-۲- مدل لی و چو^۲

لی و چو در سال ۲۰۰۳ یک دیدگاه مکانیک ساختاری را برای مدل‌سازی تغییر شکل نانولوله‌های کربنی ارائه کردند [۳۳]. اصل اساسی در این مدل در برگیرنده این مفهوم است که نانولوله‌های کربنی در واقع ساختارهای هندسی قاب مانند هستند. در این مدل، پیوند میان اتم‌ها به صورت تیرهای حامل بار عمل می‌کنند؛ درحالی‌که اتم‌ها به عنوان نقاط اتصال دهنده (مفصل) عضوهای تیر،

¹ Odegard

² Li and Chou

ایفای نقش می‌کنند. با برقراری ارتباط میان مکانیک ساختاری و مکانیک مولکول می‌توان پارامترهای خصوصیات مقطعی عضوهای تیر را به دست آورد.

لی و چو برای پیش‌بینی مدول یانگ و برشی نانولوله‌های تک دیواره، از برهمکنش واندروالس صرف نظر نمودند؛ اما در سال ۲۰۰۴ آن‌ها با اضافه نمودن برهمکنش واندروالس به مدل خود توانستند خواص مکانیکی نانولوله‌های چند دیواره را نیز پیش‌بینی کنند.

۲-۶-۳- مدول هو^۱

هو و همکارانش در سال ۲۰۰۵، مدلی را ارائه کردند که در آن از المان‌های تیر برای مدل‌سازی برهمکنش‌های پیوندی استفاده شده بود [۳۴]. هو نشان داد که مدل خرپا نمی‌تواند مدل مناسبی نانولوله‌های کربنی باشد. او با محاسبات خود نشان داد که مدل خرپا تنها در صورتی درست است که $3\nu = 1$ باشد. آن بدین معنی است که مدل خرپای معادل فقط می‌تواند به صورت یک ماده پیوسته همگن با ضریب پواسون $0/33$ در نظر گرفته شود. اما می‌دانیم که ضریب پواسون یک ورقه گرافیت در بازه $0/16$ تا $0/29$ قرار دارد. در واقع هیچ ماده‌ای با چنین توپولوژی نمی‌توان برای این خرپای معادل در نظر گرفت. هو برای غلبه بر این مشکل، یک مدل تیر در نظر گرفت و از تیر تیموشنکو برای مدل‌سازی استفاده نمود.

گرچه مدل تیر هو برای پیش‌بینی مدول یانگ و برشی نانولوله‌ها مناسب است؛ اما نتایج به دست آمده از این مدل برای پیش‌بینی بار کمانشی در سال ۲۰۰۷ نشان داد که اختلاف فاحشی میان نتایج او و نتایج دینامیک مولکول وجود دارد [۳۵]. او همچنین در سال ۲۰۰۷ با در نظر گرفتن المان میله برای مدل کردن برهمکنش واندروالس میان دو دیواره در نانولوله‌های چند دیواره، بار کمانشی را برای این نانولوله‌ها تعیین کرد.

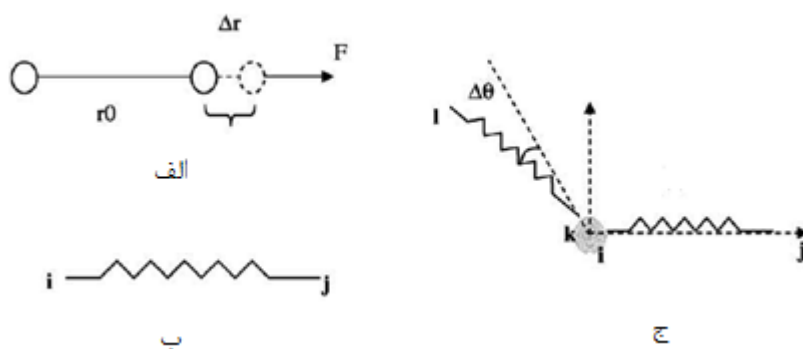
تحقیقات انجام‌شده در زمان حاضر نشان می‌دهد که احتمالاً نمی‌توان با استفاده از مدل تیر،

¹ Hu

خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی را تحت شرایط مختلف بارگذاری و مرزی به دست آورد. یکی از مسائل بسیار مهم که مدل تیر قادر به توجیه آن نیست، بار کمانش بهینه با افزایش قطر نانولوله است. در مدل تیر با افزایش قطر نانولوله، بار کمانش به طور مداوم افزایش خواهد یافت و شیب این افزایش در ابتدا زیاد و در ادامه کم می‌شود. اما در مدل‌های جدید و دینامیک مولکولی [۳۶]، با افزایش قطر نانولوله، بار کمانشی تا یک مقدار بهینه افزایش و سپس کاهش می‌یابد؛ به طوریکه در یک قطر خاص به یک مقدار بهینه در بار کمانش رسیده خواهد شد.

۲-۶-۴-۴-مدل معو و روسی^۱

معو و روسی در سال ۲۰۰۶ مدلی برای پیش‌بینی استحکام نهایی نانولوله‌های کربنی ارائه نمودند که در آن از المان‌های فنر استفاده شده است [۳۷]. آن‌ها فقط پتانسیل‌های کشش پیوند و تغییر زاویه را در مدل خود اعمال کردند و از سایر پتانسیل‌ها چشم‌پوشی نمودند. همان‌گونه که در شکل ۲-۱۱ مشاهده می‌شود، آن‌ها از یک فنر غیرخطی محوری برای مدل کردن برهمکنش کشش پیوند و یک فنر غیرخطی پیچشی برای مدل کردن برهمکنش خمش پیوند استفاده نمودند.



شکل ۲-۱۱: پیوند کربن-کربن: (الف) مدل فیزیکی، (ب) مدل FE کشش پیوند، (ج) مدل FE خمش پیوند

این مدل در نرم‌افزار MATLAB اجرا شده است. از آن جایی که معو و روسی از مدل خود برای

¹ Meo and Rossi

بررسی زوال^۱ نانولوله‌ها در کشش استفاده نموده‌اند، بنابراین از پتانسیل پیچش پیوند که در کمانش نانولوله‌های کربنی بسیار مهم می‌باشد، صرف‌نظر کرده‌اند. هرچند نتایج آن‌ها برای تحلیل‌هایی که با کشش نانولوله سر و کار دارند، مناسب است؛ اما مدل آن‌ها قادر به تحلیل مسائل دیگر مکانیکی نظیر کمانش نانولوله‌ها نمی‌باشد.

همان طور که مشاهده می‌گردد، همه این مدل‌های ساختاری از فرض ساده‌سازی استفاده نموده‌اند. بنابراین برای حوزه خاصی از مسائل کاربرد دارند و در بعضی موارد دارای نتایج دقیق نیستند. از این رو محدودیت در پوشش تمام مسائل مکانیکی را می‌توان مشکل عمده همه این مدل‌ها دانست. بجز مدل هو و مدل لی و چو که برای تحلیل کمانش مورد استفاده قرار گرفتند، سایر مدل‌ها صرفاً برای پیش‌بینی مدول یانگ، مدول برشی و ضریب پواسون مورد استفاده قرار گرفته‌اند. حتی مقایسه نتایج مدل هو و مدل لی و چو نیز نشان می‌دهد که مدل‌های ساختاری آن‌ها قادر به پیش‌بینی بار کمانش نمی‌باشد. در ادامه ابتدا به معرفی کامل‌ترین مدل ساختاری ارائه گردیده تاکنون پرداخته خواهد شد. سپس در فصل بعد به شبیه‌سازی ترک روی این مدل پرداخته خواهد شد و در انتها نتایج حاصل از این شبیه‌سازی با کارهای دیگر صورت گرفته در این زمینه مقایسه خواهد شد.

۲-۶-۴-۵- مدل ساختاری جدید

پروانه در سال ۱۳۸۸ کامل‌ترین مدل ساختاری را برای نانولوله پیشنهاد کرد و توسط این مدل خواص نانولوله و کمانش آن را مورد بررسی قرارداد[۵]. در این مدل از المان‌های فنر و رابط برای مدل کردن برهمکنش‌های میان اتم‌های کربن استفاده شده است. در ادامه شیوه مدل‌سازی آورده شده است. نرم-افزار مورد استفاده در شبیه‌سازی این مدل نرم‌افزار آباکوس می‌باشد[۳۸].

نرم‌افزار آباکوس یک مجموعه از برنامه‌های مدل‌سازی بسیار توانمند می‌باشد که مبتنی بر روش اجزا محدود بوده و قابلیت حل مسائل مختلف از یک تحلیل خطی ساده تا پیچیده‌ترین مدل‌سازی-

¹ Failure

های غیرخطی را دارا می‌باشد. این نرم‌افزار دارای مجموعه المان‌های بسیار گسترده‌ای است که هر نوع هندسه‌ای را می‌تواند به صورت مجازی توسط المان‌ها مدل کند. قسمت اصلی این نرم‌افزار فضای CAE آن است که به کاربر امکان اجرای دستورات توسط آیکون‌های کمکی و مشاهده گرافیکی نتایج حاصل را می‌دهد. این فضا به بخش‌های مختلف تقسیم می‌شود که فرآیند مدل‌سازی در طی این بخش‌ها صورت می‌پذیرد. در ادامه ایجاد نانولوله کربنی توسط این بخش‌ها گفته خواهد شد.

بخش اول مربوط به ساخت هسته اولیه مدل می‌باشد. برای ایجاد نانولوله کربنی به ایجاد اتم‌های کربن نیاز است. این کار در بخش part نرم‌افزار از طریق ایجاد کره‌های توخالی صلب به عنوان اتم کربن امکان‌پذیر است. شعاع کره برابر شعاع اتم‌های کربن یعنی 0.077 نانومتر می‌باشد. علاوه بر اتم‌ها دو صفحه صلب دایروی به منظور اعمال شرایط تکیه‌گاهی طراحی شده است.

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

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

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

آخرین بخش برای تکمیل مدل بخش interaction می‌باشد. در واقع هسته اصلی مدل این بخش است. در این بخش، المان‌های مختلفی برای ایجاد برهمکنش میان دو قسمت وجود دارد. برای اعمال

برهمکنش بین اتم‌ها ابتدا باید پتانسیل‌های موجود بین اتمی به دست آورده شود.

در بخش ۲-۴ درباره انرژی‌های پتانسیل موجود در نانولوله‌های کربنی بحث شد. انرژی پتانسیل کل در نظر گرفته شده برای مدل ساختاری در اینجا به صورت زیر می‌باشد که در آن از پتانسیل‌های غیر پیوندی الکترواستاتیک و واندروالس صرف نظر گردیده است [۱۱].

$$u_{total} = u_r + u_\theta + u_\phi + u_\omega \quad (۱۴-۲)$$

که در آن

$$u_r = D_e \{ [1 - e^{-\beta(r-r_0)}]^2 - 1 \} \quad (۱۵-۲)$$

$$u_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 [1 + k_{sextic} (\theta - \theta_0)^4] \quad (۱۶-۲)$$

$$u_\phi = \frac{1}{2} k_\phi [1 + \cos(n\phi - \phi_0)] \quad (۱۷-۲)$$

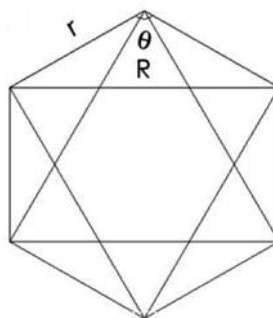
$$u_\omega = \frac{1}{2} k_\omega [1 + \cos(n\omega - \omega_0)] \quad (۱۸-۲)$$

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

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

$$\Delta\theta = \frac{2(\Delta R)}{r_0}, r_0 = 0.142nm \quad (۱۹-۲)$$

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



شکل ۲-۱۲: پارامترهای مربوط به یک سلول واحد شش ضلعی

با توجه به معادله (۲-۱۹)، معادله (۲-۱۶) را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$u_{\theta} = \frac{2}{r_0^2} k_{\theta} (R - R_0)^2 \left[1 + \frac{16}{r_0^4} k_{\text{sextic}} (R - R_0)^4 \right] \quad (20-2)$$

نیروی کشش، گشتاور خمشی تغییر زاویه، گشتاور پیچشی دوسطحی و گشتاور پیچشی خارج صفحه‌ای را می‌توان توسط مشتق‌گیری از معادلات (۲-۱۵)، (۲-۱۶)، (۲-۱۷) و (۲-۱۸) به دست آورد:

$$F(r - r_0) = 2\beta D_e \left[1 - e^{-\beta(r-r_0)} \right] e^{-\beta(r-r_0)} \quad (21-2)$$

$$F(R - R_0) = \frac{du_{\theta}}{dR} = \frac{4}{r_0^2} K_{\theta} (R - R_0) \left[1 + \frac{48}{r_0^4} K_{\text{sextic}} (R - R_0)^4 \right] \quad (22-2)$$

$$T(\phi - \phi_0) = \frac{1}{2} k_{\phi} n \sin(n\phi - \phi_0) \quad (23-2)$$

$$T(\omega - \omega_0) = \frac{1}{2} k_{\omega} n \sin(n\omega - \omega_0) \quad (24-2)$$

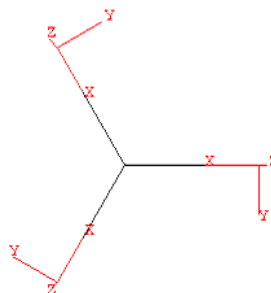
ثابت‌های اعمال شده در معادلات برهمکنش در آورده شده است:

جدول ۲-۲: ثابت‌های معادلات برهمکنش در نانولوله‌های کربنی

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

در این مدل ساختاری از المان‌های فنر و رابط برای مدل کردن برهمکنش‌های میان اتم‌های

کربن استفاده شده است؛ به طوری که یک فنر محوری غیرخطی برای مدل کردن برهمکنش تغییر زاویه پیوند و یک رابط غیرخطی برای مدل کردن برهمکنش‌های کشش پیوند و پیچش پیوند بکار رفته است شکل ۲-۱۴ این المان‌ها به نقاط مرجع^۱ واقع بر مرکز گره‌های تو خالی متصل می‌گردند. بر روی هر یک از این گره‌ها یک سیستم مختصات محلی قرار گرفته است که ترکیبی از سیستم مختصات کارتزین^۲ برای کشش و سیستم مختصات چرخشی^۳ برای پیچش می‌باشند. جهت x سیستم مختصات در جهت رابط و جهت z آن در جهت عمود بر محور مرکزی نانولوله و به سمت مرکز می‌باشد. به دلیل آنکه در فضای CAE نرم‌افزار آباکوس فقط قادر به استفاده از فنر خطی هستیم، بنابراین با اجرای دستور فنر غیرخطی در فایل ورودی^۴ نرم‌افزار و اعمال رابطه غیرخطی برای $F(\Delta R)$ بر اساس ΔR با استفاده از معادله (۲-۲۲) می‌توان فنر خمشی را به مدل اعمال کرد. برای اعمال نیروهای کششی و پیچشی به رابط‌ها، می‌توان به طور مستقیم سفتی‌های غیرخطی را در سه جهت x ، y و z اعمال کرد. برای سفتی‌های کششی در جهت x ، می‌توانیم داده‌های غیرخطی را برای $F(\Delta r)$ بر اساس Δr و توسط معادله (۲-۲۱) به دست آوریم. برای سفتی‌های پیچشی در جهت x ، می‌توان داده‌های غیرخطی را برای $T(\Delta \phi)$ بر اساس $\Delta \phi$ و توسط معادله (۲-۲۳) به دست آورد. و در نهایت برای سفتی‌های پیچشی در جهت y می‌توان داده‌های غیرخطی را برای $T(\Delta \omega)$ بر اساس $\Delta \omega$ و توسط معادله (۲-۲۴) محاسبه کرد.



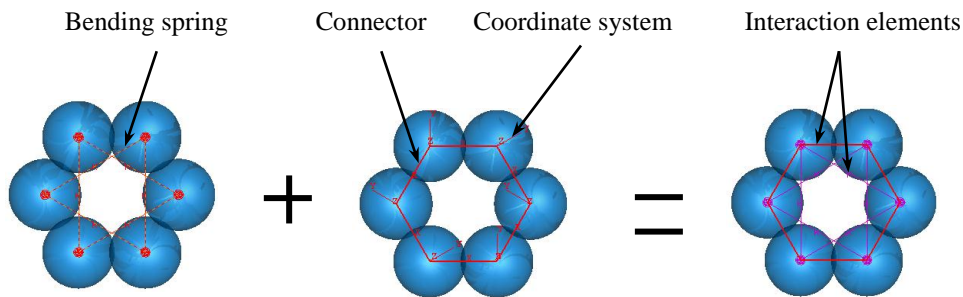
شکل ۲-۱۳: نحوه قرار گرفتن دستگاه مختصات محلی بر روی مرکز اتم‌های کربن

¹ Reference point

² Cartesian coordinate

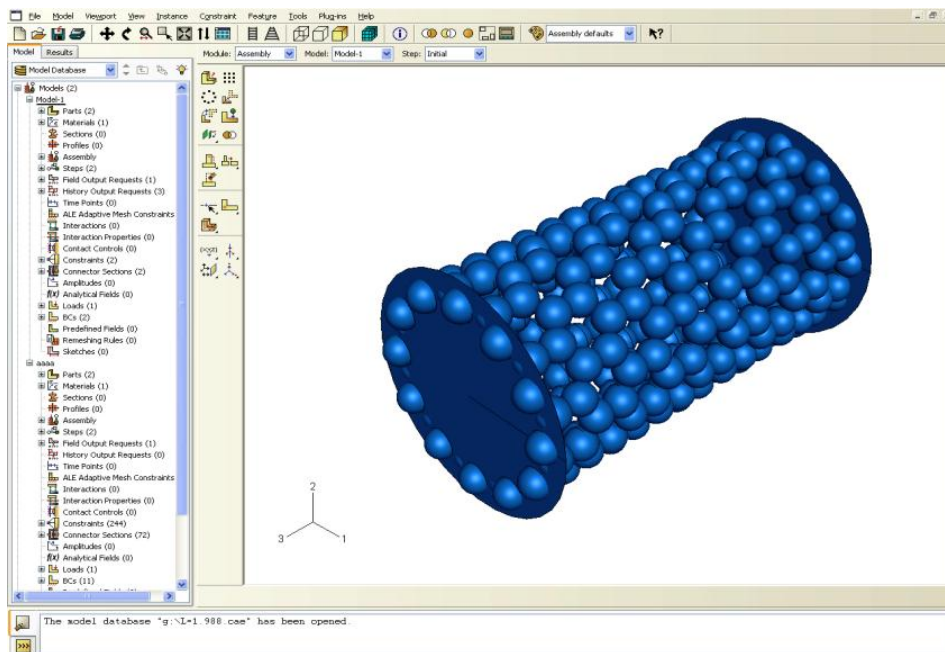
³ Rotation coordinate

⁴ Input File



شکل ۲-۱۴: المان‌های فنر و رابط متناظر با برهمکنش اتم‌های کربن

در شکل ۲-۱۵، یک مدل کامل از نانولوله کربنی زیگزاگ به همراه صفحات تکیه‌گاهی در فضای CAE نرم‌افزار ABAQUS نمایش داده شده است. در فصل بعد رفتار مکانیکی این مدل از نانولوله کربنی حاوی ترک بررسی خواهد شد.



شکل ۲-۱۵: تصویر یک نانولوله کربنی زیگزاگ در فضای CAE نرم‌افزار آباکوس [۳۸]

فصل ۳:

مروری بر مطالعات پیشین

۳-۱- مقدمه

با توجه به پیشرفت تکنولوژی و صنعت، بشر همواره به دنبال موادی بوده که نسبت به مواد موجود دارای ویژگی‌ها و کیفیت برتری باشند. یکی از این مواد نانولوله‌های کربنی می‌باشد که در سال‌های گذشته استفاده از آن به دلیل ویژگی‌های منحصر به فردی نظیر استحکام بالا، وزن سبک و قابلیت جذب انرژی بالا، افزایش یافته است [۶]. ویژگی‌های ذکر شده از مهمترین عوامل در مکانیک شکست، خستگی و ترک در مواد هستند. از این رو محققان به انجام آزمایش بر روی این ساختار روی آورده‌اند. اما مشکلات موجود در کارهای تجربی مانند صرف هزینه‌های مالی بسیار زیاد، محققان را بر آن داشته تا با استفاده از روش‌های مختلف کامپیوتری به مدل‌سازی و شبیه‌سازی رفتارهای مختلف این ماده بپردازند. روش‌های مختلف کامپیوتری برای شبیه‌سازی نانولوله‌ها پیشنهاد شده است که مهم‌ترین آن‌ها روش دینامیک مولکولی و مکانیک ساختاری می‌باشد. روش دینامیک مولکولی روش بسیار دقیقی است اما به دلیل حجم محاسبات بسیار بالا، این روش معمولاً به سیستم‌های کوچک محدود می‌شود. روشی که در سال‌های اخیر مورد استفاده قرار گرفته، روش مکانیک ساختاری می‌باشد. در این سال‌ها روش‌های مختلفی برای شبیه‌سازی مکانیک ساختاری نانولوله کربنی ارائه شده که هر کدام دارای عیب و کاستی بوده‌اند. مهم‌ترین عیب همه مدل‌های گذشته محدودیت آن‌ها در پوشش تمام مسائل مکانیکی است. در این پایان‌نامه از یک مدل ساختاری برای شبیه‌سازی رفتار ترک در نانولوله‌های کربنی استفاده شده است [۵]. انواع روش‌های مدل‌سازی در فصل ۳ بررسی شده است.

در ادامه ابتدا به معرفی کارهای صورت گرفته بر روی نانولوله‌ها با استفاده از این مدل پرداخته می‌شود؛ سپس کارهای انجام شده در زمینه بارهای سیکلی، خستگی، ترک در گرافن، عیوب در نانولوله و همچنین ترک در نانولوله معرفی می‌شود. و در فصل‌های آینده به موضوع اصلی این پایان‌نامه، یعنی بررسی و تحلیل ترک در نانولوله کربنی به شیوه مکانیک ساختاری و با استفاده از مدل معرفی شده، پرداخته می‌شود.

۳-۲- مطالعات پیشین

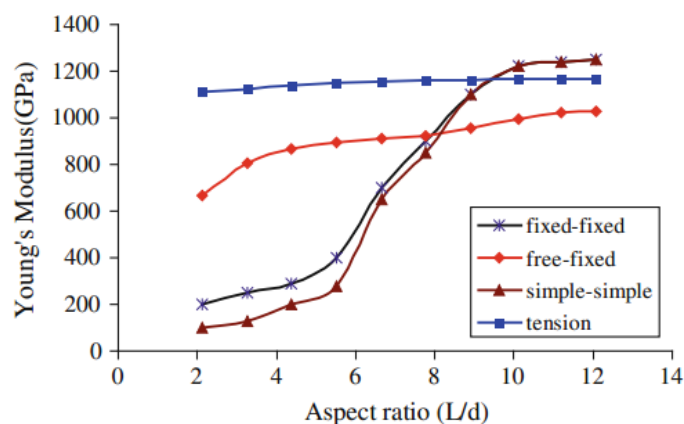
۳-۲-۱- پروانه و شریعتی (۲۰۱۰)

پروانه و شریعتی در سال ۲۰۱۰ به بررسی خواص مکانیکی نانولوله کربنی پرداختند. آن‌ها با توجه به پراکندگی نتایج تجربی در زمینه پیش‌بینی مدول یانگ نانولوله کربنی، در مقاله‌ای به بررسی تأثیر انواع بارگذاری و عیوب بر مدول یانگ نانولوله کربنی تک جداره با استفاده از مدل ساختاری پرداختند [۷]. در تمامی روش‌های آزمایشگاهی باید از نانولوله کربنی به قدر کافی بزرگ استفاده شود. همچنین روش‌های مختلفی برای به دست آوردن مدول یانگ نانولوله کربنی وجود دارد. آن‌ها در این بررسی مدول یانگ انواع مختلف نانولوله کربنی با طول‌ها و اقطار مختلف را با روش‌های گوناگون به دست آوردند شکل ۳-۱ و دریافتند که:

۱- بهترین روش برای پیش‌بینی مدول یانگ نانولوله کربنی استفاده از تست پیچش می‌باشد.

۲- عیوب مختلف تأثیر چندانی بر مدول یانگ نانولوله کربنی بزرگ ندارد. البته این تأثیر اندک در نانولوله کوچک بیشتر نمایان می‌باشد.

۳- نانولوله‌های آرمچیر^۱ در مقابل عیوب نسبت به نوع زیگزاگ^۲ آن حساس‌ترند.



شکل ۳-۱: مدول یانگ نانولوله کربنی تک جداره به عنوان تابعی از نسبت ظاهری نانولوله [۷]

¹ Armchair

² Zigzag

۳-۲-۲- جوشی^۱ و همکاران (۲۰۱۰)

جوشی و همکاران در سال ۲۰۱۰ از روش المال محدود گسترش یافته^۲ (XFEM) برای شبیه‌سازی انتشار ترک در نانولوله کربنی استفاده کردند [۸]. با توجه به اینکه مکانیک شکست در ابعاد نانو پدیده بسیار پیچیده‌ای است، و بسیاری از تحلیل‌ها در ابعاد ماکرو می‌شود با استفاده از شبیه‌سازی برای ابعاد نانو به کار رود، آن‌ها تاثیرات شکست در یک نانولوله کربنی تک جداره را با استفاده از شبیه‌سازی مورد بررسی قرار دادند. فرضیات آن‌ها بدین صورت است که نانولوله با استفاده از روش المان محدود تحلیل شده است. و از پتانسیل بین اتمی مورس برای شبیه‌سازی نیروهای غیر خطی بین اتم‌ها استفاده شده است. مدل‌ها شامل نانولوله زیگزاگ، آرمچیر و چیرال^۳ هستند که تحت بار کششی محوری می‌باشند.

آن‌ها با روش کانتور انتگرال برای محاسبه انتگرال J استفاده کرده‌اند و در نهایت ضریب شدت تنش برای انواع مکان‌های ترک و قطرهای مختلف نانولوله زیر بار کششی را محاسبه کرده‌اند. و مشاهده شده است که برای طول‌های کمتر نانولوله با افزایش قطر ضریب شدت تنش به صورت خطی افزایش می‌یابد و برای طول‌های بزرگتر تغییرات ضریب شدت تنش به صورت غیر خطی است.

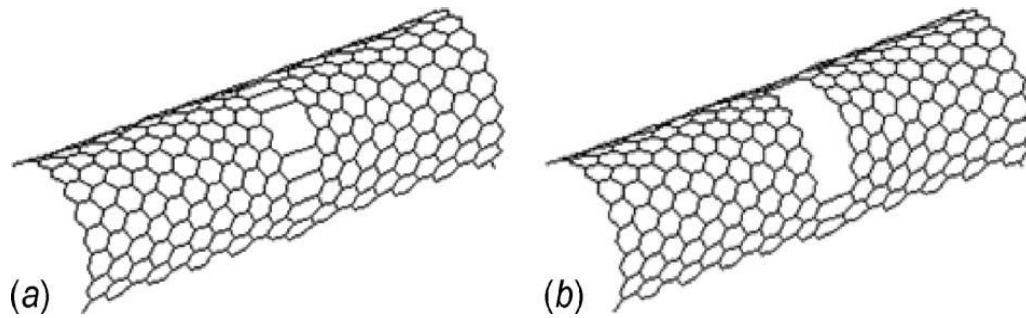
همچنین رشد ترک در مدل پیوسته ساخته شده در نرم‌افزار المان محدود مشاهده شده است و همچنین فاکتور شدت تنش نسبت به طول‌های کمتر حساسیت بیشتری از خود نشان می‌دهد و همچنین شانس بیشتری برای انتشار ترک و شکستگی نانولوله‌های کربنی وجود دارد.

در این مقاله آن‌ها ترک را در نانولوله مانند شکل ۲-۳ ایجاد کردند و اثر قرارگیری ترک در مکان‌های مختلف نانولوله را مانند شکل ۳-۳ در نموداری مقایسه کرده‌اند.

¹ Joshi

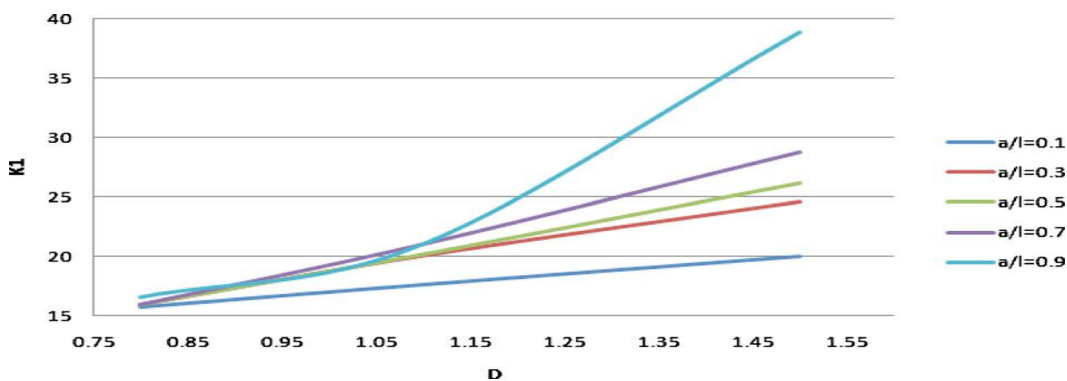
² Extended finite element method

³ Chiral



شکل ۳-۲: ترک در نانولوله کربنی [۸]

همانطور که ملاحظه می‌شود ترک را با برداشتن یک یا چند پیوند در نانولوله ایجاد کرده‌اند.



شکل ۳-۳: نمودار ضریب شدت تنش بر حسب قطر نانولوله کربنی [۸]

شکل ۳-۳ بیانگر ضریب شدت تنش نسبت به قطر می‌باشد که با توجه به تغییر مکان ترک

متفاوت می‌باشد، ک در اینجا a نشان‌دهنده فاصله ترک از لبه نانولوله و l طول نانولوله می‌باشد.

۳-۲-۳-۳- رن^۱ و همکاران (۲۰۰۴)

رن و همکاران در سال ۲۰۰۴ مکانیزم شکست خستگی بر روی نانولوله کربنی تک جداره چند رشته‌ای که در یک ماتریس اپوکسی^۲ اضافه شده است زیر بار تکراری کششی را مورد مطالعه قرار دادند [۹]. آن‌ها موارد زیر را مشاهده کردند:

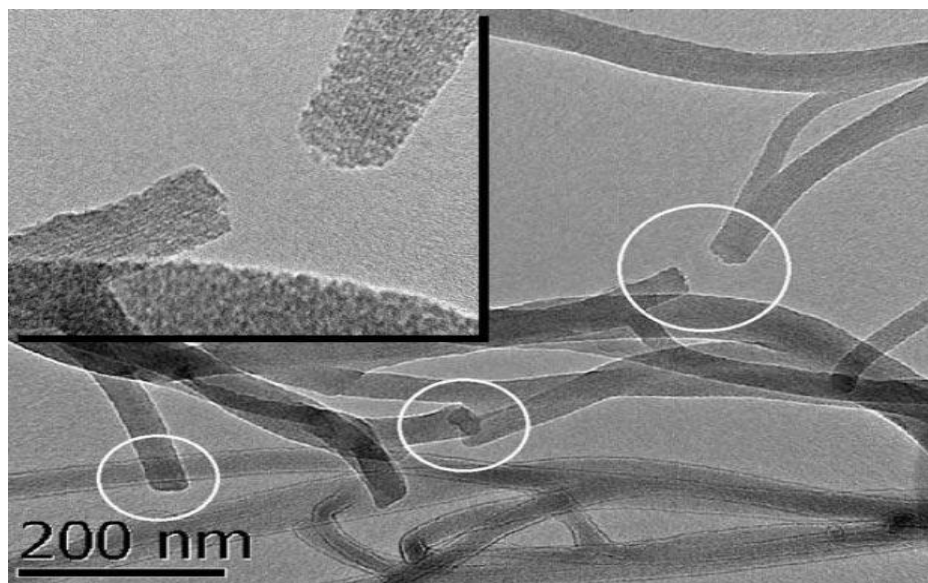
۱- ترک در رشته‌های نانولوله‌های کربنی تک جداره

¹ Ren
² epoxy

۲- شکل پیچ خوردگی و شکست‌های بعدی در نانولوله‌های کربنی تک جداره

۳- شکست رشته‌های نانولوله‌های کربنی تک جداره

در این مقاله آن‌ها الگوهای انتشار ترک تحت بار کششی در نانولوله‌های کربنی تک جداره با شبیه‌سازی مکانیک مولکولی را مورد مطالعه قرار دادند. این تحقیق بر روی نانولوله بدون عیب و نانولوله با عیب استون‌والز^۱ در دو مود متفاوت انجام شده است. آن چیزی که در نتایج شبیه‌سازی مکانیک مولکولی مشاهده کرده‌اند آن است که سطح شکست در نانولوله‌های کربنی تک جداره می‌تواند به خوبی گسترش پیدا کند. همچنین مکانیک شکست خستگی نشان می‌دهد که سطح شکست مانند شکل ۳-۴ در نانولوله‌های کربنی تک جداره در کامپوزیت‌ها هم گسترش می‌یابد.



شکل ۳-۴: تصویری از شکستگی نانولوله کربنی تک جداره چند رشته‌ای با سطوح شکست مسطح [۹]

۳-۲-۴- جین^۲ و یوان^۳ (۲۰۰۵)

جین و یوان در سال ۲۰۰۵ در مقاله‌ای پارامترهای شکست ماکروسکوپی در سیستم‌های گرافن دو بعدی که شامل ترک در ابعاد اتمی می‌باشند را مورد بررسی قرار دادند [۱۰]. در شبیه‌سازی‌های

^۱ Stone-Wales

^۲ Jin

^۳ Yuan

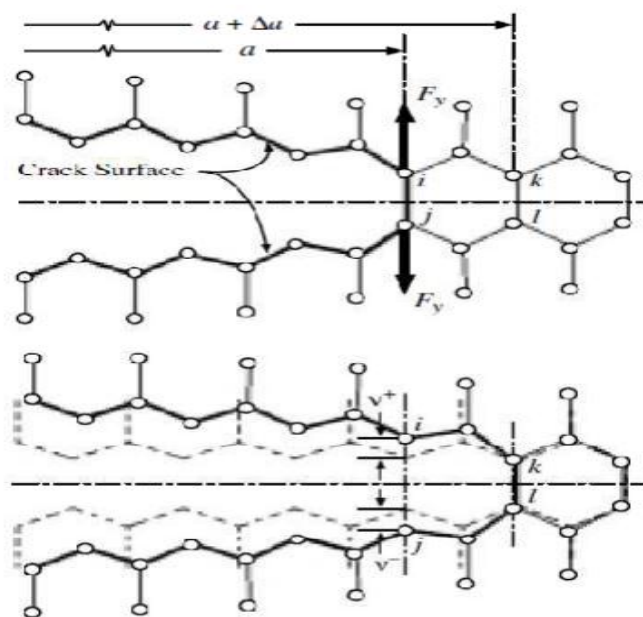
مربوط به سیستم اتمی گسسته برهمکنش‌های بین اتمی را با استفاده از پتانسیل تروسوف-برنر^۱ محاسبه کردند. و دو روش برای محاسبه نرخ رهایش انرژی الاستیک در سیستم‌های اتمی در این مقاله ارائه دادند.

۱- روش نیرو (local force method)

۲- روش انرژی (global energy method)

روش نیرو یا روش بسته شدن مجازی ترک بدین صورت است که ابتدا نیرو و جابجایی هر المان محاسبه شده و با استفاده از رابطه زیر نرخ رهایش انرژی کرنشی بدست می‌آید.

$$G_1 = \frac{1}{2\Delta a.t} F_y (v^+ - v^-) \quad (1-3)$$



شکل ۳-۵: نمایش پارامترهای مورد استفاده در روش بسته شدن مجازی ترک [۱۰]

که G نرخ رهایش انرژی کرنشی، F نیروی وارد بر اتم i ، v جابجایی اتم مورد نظر، Δa میزان

¹ Tersoff-Brenner

افزایش طول ترک و t ضخامت صفحه گرافن می‌باشد که برابر 0.34 نانومتر در نظر گرفته می‌شود. روش انرژی نیز بنا بر تعریف نرخ رهایش انرژی است که با استفاده از فرمول زیر بدست می‌آید.

$$G = -\frac{U_{2a+2\Delta a} - U_{2a}}{2\Delta a \times t} \quad (2-3)$$

که G نرخ رهایش انرژی کرنشی، U انرژی کرنشی، Δa میزان افزایش طول ترک و t ضخامت صفحه گرافن می‌باشد. این روش تفاوت‌های دیگری با روش قبل دارد که در فصل‌های بعد به طور مفصل مورد بحث قرار می‌گیرد.

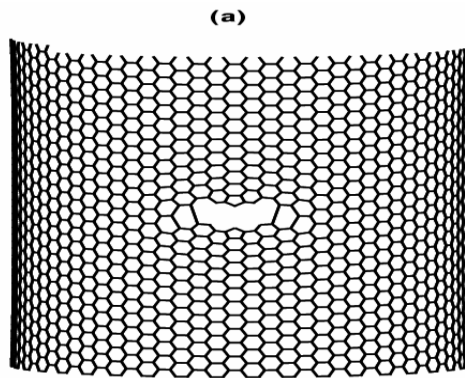
۳-۲-۵- بلیسچکو^۱ و همکاران (۲۰۰۲)

در سال ۲۰۰۲ بلیسچکو و همکاران با ارائه مقاله‌ای شکست نانولوله کربنی با استفاده از شبیه‌سازی اتمی را مورد مطالعه قرار دادند [۱۱]. با توجه به اینکه رفتار شکست تقریباً مستقل از انرژی جداسازی و در درجه اول به پتانسیل بین اتمی بستگی دارد، طیف وسیعی از کرنش‌های شکست را با نتایج تجربی مقایسه کرده‌اند که در محدوده‌ی تنش‌های شکست به طور قابل توجهی بالاتر از مشاهدات بوده است. آن‌ها بر روی نانولوله نقص‌های قابل قبولی ایجاد کرده که تنش شکست در آن‌ها با نتایج تجربی تطابق خوبی داشته است. آن‌ها دریافتند که شکست نانولوله به صورت ترد اتفاق می‌افتد و همچنین نتایج نشان می‌دهد که استحکام شکست در حد متوسطی به چیرالیتی بستگی دارد. و همچنین تنش شکست بزرگتر از حد پیش‌بینی شده است، حتی وقتی نانولوله معیوب می‌باشد. این نشان می‌دهد که کرنش شکست در سیستم‌های بسیار همگن با پیوند کووالانسی مانند نانولوله کربنی در درجه اول با نقطه اتکای بسیار زیادی بر روی برهمکنش بین اتمی استوار است. آن‌ها محدوده تنش شکست را از 95GPa تا 112GPa و کرنش شکست از $15/8\%$ تا $18/7\%$ محاسبه کردند.

همچنین اثرات از دست رفتن اتم‌ها و پنج تا هفت نقص را مورد بررسی قرار دادند. شکل ۳-۶.

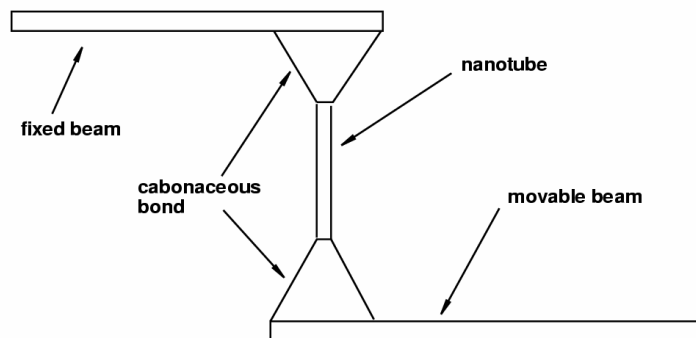
¹ Belytschko

اتم‌های برداشته شده اثرات قابل توجهی در استحکام نانولوله دارند، اما کرنش شکست با کاهش بسیار کمی روبرو می‌شود.



شکل ۳-۶: شکل‌گیری ترک در نانولوله با عیب استون والز [۱۱]

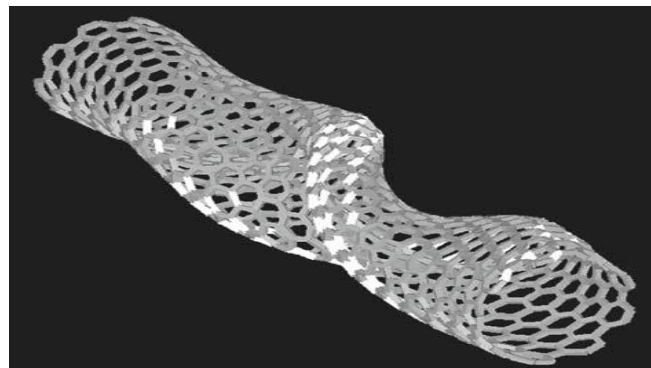
آن‌ها نانولوله‌های چند جداره را برای آزمایش استفاده کردند. مطابق با شکل ۳-۷ در اغلب موارد نانولوله‌های بیرونی به کنسول متصل شده‌اند و تنها نانولوله‌های بیرونی در این مطالعات مدل‌سازی شده‌اند.



شکل ۳-۷: نانولوله چندجداره قرار گرفته بین دو فک [۱۱]

۳-۲-۶- ورنیک^۱ و مگوئید^۲ (۲۰۰۹)

در سال ۲۰۰۹ ورنیک و مگوئید مقاله‌ای برای تعیین خواص غیرخطی نانولوله‌های کربنی ارائه کردند [۱۲]. با توجه به مقیاس نانو که در شبیه‌سازی‌های ساختاری نانولوله وجود دارد آن‌ها شبیه‌سازی اتمی را با بهره از خواص ساختارهای پیوسته انجام داده‌اند. و همچنین برهمکنش‌های بین اتمی را در چارچوب مکانیک محیط پیوسته از پتانسیل اصلاح مورس بدست آورده‌اند. با توجه به بررسی‌هایی که آن‌ها انجام دادند دریافتند که مولفه خمش زاویه‌ای نقش بسیار مهمی در ثبات ساختاری ایفا می‌کند. پاسخ غیر خطی از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ تحت بار کششی و پیچشی گرفته و در این مقاله نیز ارائه داده‌اند. و علاوه بر آن، فرایند شکست تحت بارگذاری کششی و پدیده کمانش پیچشی بررسی شده است. همچنین نتایجی از قبیل اینکه؛ با توجه به پیوند مناسب، پراکندگی و چیدمان نانولوله‌های آرمچیر به عنوان یک عامل بهتر تقویت‌کننده در کامپوزیت‌ها عمل می‌کنند. در نانولوله‌های زیگزاگ، شکستگی به سرعت رخ می‌دهد و شبیه انتشار ترک ایده‌آل در جهت عمود محور طولی نانولوله پیش می‌رود. خواص برشی و همچنین کمانش پیچشی برای هر دو پیکربندی نانولوله خیلی مشابه هم هستند. از نتایج بدست آمده پیش‌بینی می‌شود که ساختار نانولوله زیگزاگ دارای مقاومت بالاتری نسبت به کمانش پیچشی می‌باشد. شکل ۳-۸ نانولوله آرمچیر را تحت بارگذاری پیچشی نشان می‌دهد.



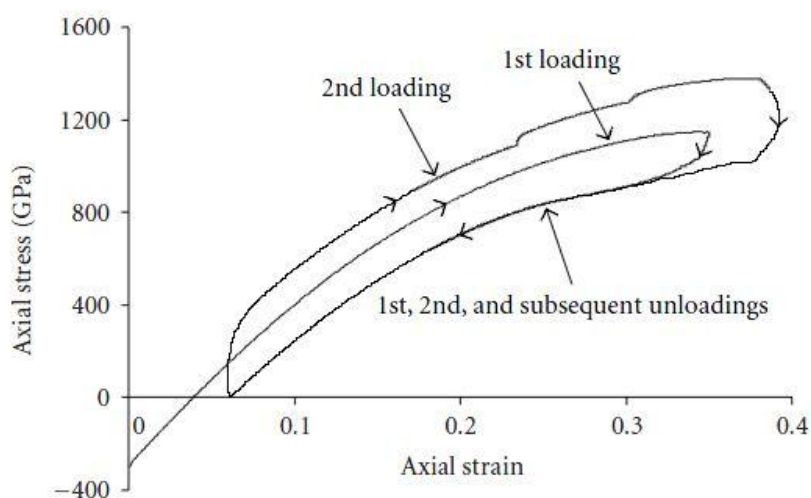
شکل ۳-۸: نانولوله آرمچیر تحت بارگذاری پیچشی [۱۲]

¹ Wernik

² Meguid

۳-۲-۷- ونگ^۱ و گوتیرز^۲ (۲۰۰۹)

در سال ۲۰۰۹ ونگ طی مقاله‌ای به عنوان شبیه‌سازی اتمی رفتار نانولوله کربنی تحت بار سیکلی با استفاده از روش المان محدود، تنش و کرنش تسلیم نانولوله را بدست آورد [۱۳]. از آنجا که هیچ گونه اثر ترمودینامیکی در این مقاله برای تنش‌های سیکلی در نظر گرفته نمی‌شود، رفتار نانولوله کربنی در حین تسلیم تحت کنترل حالت شکست تمام مکانیکی است. مشخصه متمایز ویسکوالاستیک بافت‌های نرم شامل پسماند، الاستیسیته‌ی غیر خطی و کرنش‌های بزرگ برای یک نانولوله کربنی در طول وضعیت بارگذاری سیکلی مشاهده گردیده است. با وجود آنکه نانولوله‌ها تا بیشترین مقدار کرنشی که می‌توانستند پیش از تسلیم در هر چرخه‌ی بارگذاری تحمل کنند، بارگذاری شده بودند هیچ نشانی از شکست چرخشی در شبیه‌سازی‌ها مشاهده نشد. در شکل ۳-۹ منحنی تنش-کرنش بارگذاری کششی سیکلی در نانولوله زیگزاگ نمایش داده می‌شود، که در تمام شبیه‌سازی‌ها، بارگذاری سیکلی تا زمانی که مسیر تنش در آخرین سیکل بارگذاری شروع به تکرار وضعیت نهایی (آخرین سیکل بارگذاری) نکند متوقف نمی‌گردد. به عبارت دیگر چنانچه شبیه‌سازی ادامه پیدا کند دقیقاً همان رفتار سیکلی در چرخه‌های بارگذاری بعدی نتیجه خواهد شد.



شکل ۳-۹: منحنی تنش-کرنش بارگذاری کششی سیکلی در نانولوله زیگزاگ [۱۳]

¹ Wang

² Gutierrez

در شبیه‌سازی‌ها مقاومت یک نانولوله کربنی در برابر بارگذاری سیکلی فشاری به خوبی با مشاهدات آزمایشگاهی بلوک‌های نانولوله کربنی مطابقت داشته است. آن‌ها فهمیدند که هندسه‌ی ذاتی و مشخصه‌های مکانیکی ساختار نانولوله به خودی خود نقش عمده‌ای در استحکام، کرنش و رفتار مدولی بازی می‌کند.

۳-۳- مطالعات جدید

۳-۳-۱- هوآنگ^۱ و همکاران (۲۰۱۲)

هوآنگ و همکاران در سال ۲۰۱۲ مقاله‌ای تحت عنوان تجزیه و تحلیل شکست در نانولوله‌های کربنی با استفاده از الگوریتم سلول‌های خودکار ارائه کردند [۱۴]. آن‌ها نانولوله را با استفاده از الگوریتم سلول‌های خودکار شبیه‌سازی نمودند. که در این شبیه‌سازی، برهمکنش‌های بین اتمی از معادلات پتانسیل تروسوف- برنر بدست آمده است. این شبیه‌سازی جز روش‌های دینامیک مولکولی می‌باشد. انواع روش‌های شبیه‌سازی در فصل بعد به طور مفصل توزیع داده می‌شود. آن‌ها نمودار تنش- کرنش را برای نانولوله معیوب از نوع تهی‌جای^۲ بدست آوردند.

در تحقیقات و مقاله‌های اخیر نانوکامپوزیت‌ها و موادی که با افزودن نانولوله، خواص بهتری پیدا می‌کنند؛ مورد توجه قرار گرفته است. که در ادامه به بررسی دو نمونه از این تحقیقات پرداخته می‌شود.

۳-۳-۲- هو^۳ و همکاران (۲۰۱۴)

هو و همکاران در سال ۲۰۱۴ مقاله‌ای تحت عنوان افزایش چقرمگی شکست^۴ خمیر سیمان با

¹ Huang

² Vacancy

³ Hu

⁴ Fracture Toughness

استفاده از نانولوله‌های کربنی چند جداره ارائه کردند [۱۵]. در این مقاله بیان شده که چگونه تعداد حفره‌ها در حد ابعاد ۲۵-۵۰ نانومتر را با افزودن نانولوله‌های چند جداره کاهش می‌دهند.

۳-۳-۳- فالزون^۱ و همکاران (۲۰۱۳)

فالزون و همکاران در سال ۲۰۱۳ مقاله‌ای تحت عنوان بررسی مود I و مود II، برای افزایش چقرمگی شکست کامپوزیت‌ها با استفاده از نانولوله‌های کربنی چند جداره ارائه کردند [۱۶]. در این مقاله یک روش جدید برای افزودن نانولوله‌های کربنی چند جداره در یک کامپوزیت فیبر کربن پیش آغشته‌ی ورقه ورقه ارائه شده است. آن‌ها مشاهده کردند که در مود I چقرمگی شکست ورقه T700/M21 به طور متوسط ۳۱٪ و در ورقه T700/SE84LV به طور متوسط ۶۱٪ افزایش داشته است. در حالی که در مود II چقرمگی شکست ورقه T700/M21 به طور متوسط ۱۶۱٪ افزایش یافته است. همچنین میکروسکوپ الکترونی، رطوبت خوبی از لایه‌های نانولوله کربنی و همچنین شواهدی از نفوذ لایه‌های نانولوله کربنی به لایه‌های مجاور نشان می‌دهد.

¹ Falzon

فصل ۴:

ضریب شدت تنش و نرخ رهايش انرژی

۴-۱- مقدمه

یکی از مهمترین دستاوردهای علم و تکنولوژی تامین رفاه و آسایش زندگی بشر می‌باشد. با وجود دستیابی نسبی به این خواسته، متأسفانه وقوع بعضی حوادث ناگوار از جمله شکست پیش بینی نشده سازه‌ها که عموماً در اثر پدیده خستگی می‌باشد، این آسایش را به مخاطره انداخته و علاوه بر گرفتن جان انسان‌ها خسارت مالی فراوانی را موجب شده است [۱].

در بررسی علل شکست سازه‌ها محققین دریافتند که طراحی بسیاری از این سازه‌ها بر مبنای روش‌های مرسوم درست بوده است؛ اما پس از تحقیقات زیاد به این نتیجه رسیدند که عامل شکست، معایب و به خصوص ترک‌های بسیار ریزی بودند که در سازه وجود داشته و یا در حین کار ایجاد شده‌اند. دانش موجود اوایل قرن ۲۰، قادر به تجزیه و تحلیل و کشف علل شکست این سازه‌ها نبوده است. لذا در دهه دوم قرن بیستم، علم جدیدی به نام مکانیک شکست^۱ پایه‌گذاری شد که به تجزیه و تحلیل سازه‌ها بر مبنای وجود عیب و به خصوص ترک در آن‌ها می‌پردازد.

علم مکانیک شکست یکی از علوم مهندسی است که پدیده شکست قطعات را تحت بارهای استاتیکی و دینامیکی بررسی می‌کند. بر اساس شناخت دقیق این پدیده است که طراحی ایمن سازه‌ها، امکان پذیر می‌باشد. این علم کاربرد گسترده‌ای در صنایع خودرو سازی، کشتی‌سازی، نیروگاهی، فضایی، انرژی اتمی و ... دارد [۱].

بعد از جنگ جهانی دوم کاربرد مواد با استحکام بالا^۲ به طور چشم‌گیری افزایش یافت. این مواد اغلب برای کاهش وزن سازه به کار می‌روند. در همان دوران آنالیز تنش نیز توسعه و تعیین تنش‌های محلی با قابلیت اطمینان بیشتری امکان‌پذیر گردید. کاهش وزن بیشتر قطعات موجب کاهش ضریب اطمینان می‌گردد. در نتیجه ضریب اطمینان سازه‌های طراحی شده با مواد استحکام بالا، کم می‌باشد. بدین مفهوم که ممکن است تنش به قدر کافی زیاد باشد تا بتواند ترک‌هایی را ایجاد نماید، به

¹ Fracture Mechanics

² High strength materials

خصوصاً اگر معایب اولیه در مواد وجود داشته باشند. گاهی اوقات محیط خورنده ایجاد ترک را تسهیل می‌نماید. مواد با استحکام بالا، در مقابل ایجاد و گسترش ترک مقاومت کمتری از خود نشان می‌دهند. به عبارتی دیگر چقرمگی شکست^۱ آن‌ها پایین می‌باشد. هرگاه ترک‌های کوچکی در قطعات وجود داشته باشند، سازه با مواد استحکام بالا در تنش‌هایی کمتر از تنش‌های مورد نظر طراحی، امکان شکست دارند [۱].

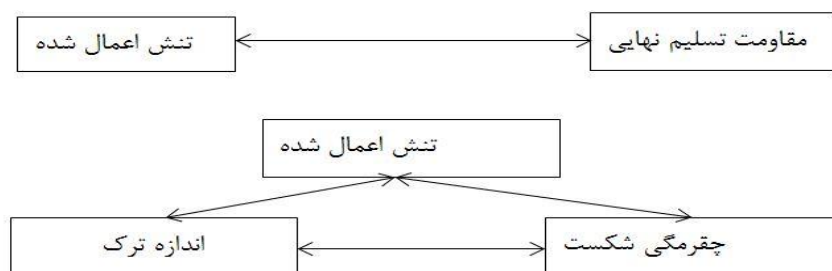
مکانیک شکست مهندسی، روش‌هایی را برای تعریف مفاهیم و معیار طراحی قراردادی اعلام می‌دارد. این معیارهای طراحی قراردادی بر اساس پارامترهای زیر استوار است:

۱- استحکام کششی^۲

۲- استحکام تسلیم^۳

۳- تنش کمانش^۴

در حال حاضر و بعد از دو دهه، این معیارها برای بسیاری از سازه‌ها مناسب می‌باشند. اما اگر ترک‌هایی در سازه وجود داشته باشند، این معیارها کافی نیستند. تقریباً بعد از دو دهه توسعه، مکانیک شکست وسیله خوبی در طراحی مواد با مقاومت عالی شده است. نموداری از دو روش طراحی سنتی و مکانیک شکست را می‌توان به صورت شکل ۴-۱ ارائه نمود:



شکل ۴-۱: نموداری از دو روش طراحی سنتی و مکانیک شکست [۱]

¹ Fracture toughness

² Tensile strength

³ Yield strength

⁴ Buckling strength

در روش مکانیک شکست، سه عامل تنش اعمالی، ابعاد ترک و چقرمگی از معیارهای طراحی به شمار می‌آیند. مطابق روش انرژی، گسترش ترک (شکست) هنگامی اتفاق می‌افتد که انرژی لازم برای رشد ترک و غلبه بر مقاومت ماده فراهم شده باشد. مقاومت ماده ممکن است شامل انرژی سطحی، کار پلاستیک و یا سایر تلفات انرژی در هنگام رشد ترک باشد [۱].

در این فصل سعی شده است با نگاهی به جدیدترین کاربردهای موجود در نانولوله‌های کربنی، یعنی بررسی و تحلیل نانولوله‌های کربنی ترک‌دار پرداخته شود. برای این منظور ابتدا به تعریف شکست نانولوله، تعریف ترک در نانولوله، تعریف نرخ رهایش انرژی، چگونگی تعریف خستگی در نانولوله و پیاده‌سازی همه این موارد در نرم‌افزار المان محدود آباکوس پرداخته می‌شود.

۴-۲- ضریب شدت تنش و نرخ رهایش انرژی

در این قسمت به طور مختصر و در حد آشنایی در رابطه با ضریب شدت تنش و نرخ رهایش انرژی توضیح داده می‌شود، و در ادامه برای یک نانولوله نرخ رهایش انرژی یک بار از تعریف آن و بار دیگر با استفاده از هندبوک و مدل پیوسته بدست می‌آید و در نهایت دو حالت فوق در یک نمودار مقایسه می‌شوند. هدف از این کار بررسی صحت روش محاسبه نرخ رهایش انرژی می‌باشد.

همان‌طور که در شکل ۴-۲ مشهود است، یک ترک می‌تواند به سه طریق تحت تنش واقع شده و

گسترش یابد [۱]:

۱- مود I یا باز شونده^۱: جابجایی سطح ترک عمود بر سطح ترک می‌باشد.

۲- مود II یا لغزشی^۲: جابجایی سطح ترک در صفحه ترک اما عمود بر لبه ترک می‌باشد.

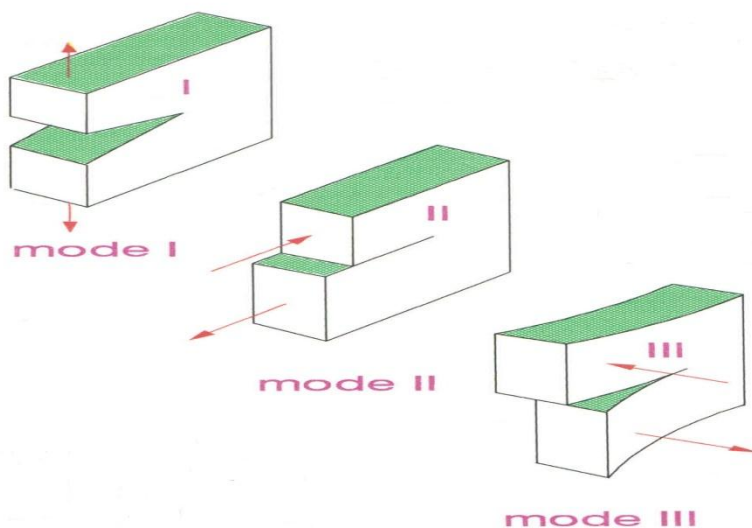
۳- مود III یا پارگی^۳: جابجایی سطح ترک در صفحه ترک ولی موازی لبه ترک است.

¹ Opening mode

² Sliding mode

³ Tearing mode

مود II به وسیله برش در صفحه و مود III به وسیله برش خارج از صفحه ایجاد می‌گردد. ترکیب سه حالت فوق حالت عمومی ترک را بیان می‌کند. مود I مهمترین حالت می‌باشد.



شکل ۴-۲: انواع ترک [۱]

به طور خلاصه جز کوچکی از صفحه به ابعاد d_x و d_y ، به فاصله r از نوک ترک و با زاویه θ نسبت به صفحه ترک، تنش‌های عمودی σ_x و σ_y و تنش برشی τ_{xy} را تحمل می‌نماید. این تنش‌ها را می‌توان از معادلات (۱-۴ الف) بدست آورد [۱].

$$\sigma_x = \sigma \sqrt{\frac{a}{2r}} \cos \frac{\theta}{2} [1 - \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{3\theta}{2}] \quad (۱-۴ \text{ الف})$$

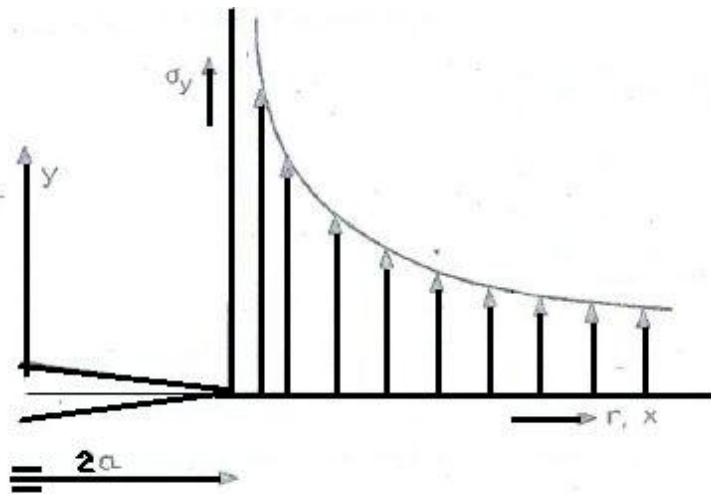
$$\sigma_y = \sigma \sqrt{\frac{a}{2r}} \cos \frac{\theta}{2} [1 + \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{3\theta}{2}] \quad (۱-۴ \text{ الف})$$

$$\tau_{xy} = \sigma \sqrt{\frac{a}{2r}} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{3\theta}{2} \quad (۱-۴ \text{ الف})$$

که در آن a پارامتر مشخص کننده نصف طول ترک می‌باشد.

توزیع تنش σ_y بر حسب r برای $\theta=0$ در شکل ۴-۳ رسم شده است. برای مقادیر زیاد r تنش σ_y به سمت صفر میل می‌کند، در صورتی که باید به سمت σ میل کند. علت این است که

معادلات (۱-۴ الف) فقط برای یک ناحیه مشخص اطراف نوک ترک صادق است. هر یک از معادلات (۱-۴ الف) جمله اول یک سری می‌باشند. در مجاورت نوک ترک این جمله اول سری، توزیع تنش را با تقریب خوبی نشان می‌دهد، زیرا جملات بعدی (جمله دوم به بعد) در مقایسه با جمله اول کوچک می‌باشند. بنابراین وقتی از نوک ترک دور شده (ازدیاد r) مقدار جمله اول سری کوچک می‌شود و نمی‌توان از جملات بعدی صرف‌نظر کرد. با منظور نمودن این جملات مقدار σ_y صفر نشده بلکه برابر σ خواهد شد.



شکل ۳-۴: تنش ارتجاعی σ_y در نوک ترک [۱]

توابع r و θ در معادلات (۱-۴ الف) توابع صریح می‌باشند. می‌توان این معادلات را به صورت

عمومی زیر نوشت:

$$\sigma_{ij} = \frac{K_I}{\sqrt{2\pi r}} f_{ij}(\theta) \quad (۲-۴)$$

$$K_I = \sigma \sqrt{\pi a}$$

که در آن K_I را ضریب شدت تنش می‌نامند. اندیس I نشان دهنده ترک مود I می‌باشد.

در این قسمت به تعریف ضریب شدت تنش پرداخته شد، در ادامه به تعریف نرخ رهائش انرژی

پرداخته می‌شود.

اگرچه مکانیک شکست در دو دهه اخیر توسعه یافته است، ولی یکی از معادلات اساسی آن قبلاً در سال ۱۹۲۱ توسط گریفیس^۱ [۴۰] بنا شده است. گریفیس اولین کسی بود که مساله مکانیک شکست را در سال ۱۹۲۱ حل نمود. بدین جهت بعدها به عنوان پدر تئوری مکانیک شکست نامیده شد.

ترک وقتی رشد می‌کند که انرژی رها شده در اثر رشد ترک برای تامین انرژی لازم جهت رشد آن کافی باشد. اگر انرژی رها شده کمتر از انرژی لازم باشد، جهت رشد ترک بایستی مقدار تنش σ را افزایش داد. ترک وقتی ناپایدار می‌شود که انرژی رها شده در اثر رشد آن، بیش از انرژی جذب شده توسط سطح ترک جدید ایجاد شده باشد. چون مقدار انرژی لازم جهت رشد ترک به مقدار تنش اعمالی بر قطعه بستگی ندارد (بلکه به طول ترک و جنس بستگی دارد) و برعکس مقدار انرژی رها شده در اثر رشد ترک به مقدار تنش بستگی دارد، لذا در صورت کم بودن تنش، احتمال دارد که انرژی رها شده به اندازه انرژی لازم جهت گسترش ترک نباشد. در این صورت برای رشد ترک ضروری است که مقدار تنش اعمالی افزایش پیدا کند. اگر تنش خیلی افزایش پیدا کند ممکن است حالتی پیش آید که انرژی رها شده خیلی بیشتر از انرژی لازم جهت رشد ترک باشد، در این صورت ترک خیلی سریع و به صورت ناپایدار^۲ گسترش می‌یابد. شرط رشد ترک عبارت است از [۱]:

$$\frac{dU}{da} = \frac{dW}{da} \quad (۳-۴)$$

که در آن U انرژی الاستیک، W انرژی لازم جهت رشد ترک، dU مقدار انرژی رها شده در اثر گسترش ترک به اندازه da ، dW مقدار انرژی لازم جهت گسترش ترک به اندازه da ، dU/da انرژی رها شده به ازای واحد طول رشد ترک یا نرخ انرژی رها شده، dW/da کار لازم جهت رشد ترک به اندازه واحد یا نرخ کار لازم می‌باشند.

^۱ Griffith

^۲ Unstable crack growth

بر اساس محاسبات انجام شده توسط انگلیس^۱ برای میدان تنش یک ترک بیضوی، گریفیس dU/da را به صورت رابطه (۴-۴) به دست آورد:

$$\frac{dU}{da} = \frac{\pi\sigma^2 a}{E} \quad (۴-۴)$$

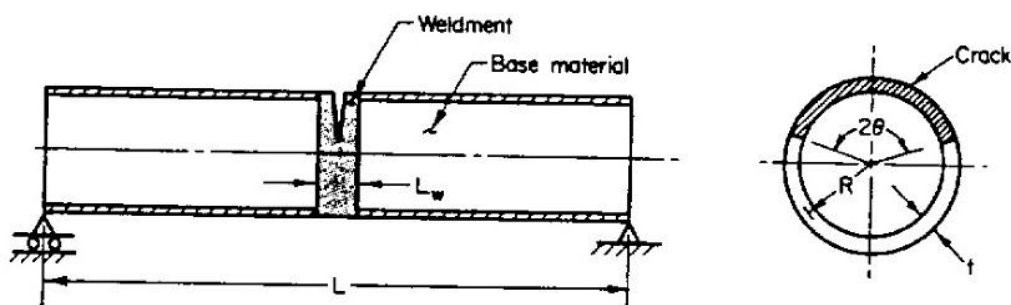
که در آن E مدول یانگ و ضخامت صفحه واحد می باشد. معمولاً dU/da با G جایگزین می شود. پس:

$$G = \frac{\pi\sigma^2 a}{E} \quad (۵-۴)$$

که در آن پارامتر G نرخ انرژی ارتجاعی رها شده^۲ برای یک نوک ترک نام گذاری شده است. نرخ آزاد سازی انرژی، تغییرات انرژی پتانسیل را به ازای افزایش طول ترک نشان می دهد و رفتار موضعی کلی را توصیف می کند. در حالی که K_I ضریب شدت تنش، کرنش ها و جابجایی های اطراف ترک را تعیین می کند و یک پارامتر محلی می باشد.

۴-۳- نرخ رهایش انرژی در نانولوله کربنی

در این قسمت به روابطی که در این پروژه مورد استفاده قرار گرفته است، اشاره می شود. شکل ۴-۴ ترک در یک لوله پیوسته را نشان می دهد.



شکل ۴-۴: لوله حاوی ترک [۴۱]

^۱ Inglis

^۲ Elastic energy release rate

نرخ رهایش انرژی در یک لوله پیوسته به صورت زیر تعریف می‌شود [۴۱]:

$$G = \frac{\partial U^T}{\partial A} = \frac{\partial}{\partial A} (U^c + U^{nc}) = \frac{\partial U^c}{\partial A} \quad (۶-۴)$$

که در آن U^T انرژی کرنشی داخلی کل، U^{nc} انرژی کرنشی زمانی که ترک بر روی لوله وجود ندارد، U^c انرژی کرنشی زمانی که ترک بر روی لوله وجود دارد و A برابر است با رابطه (۷-۴) که مساحت ترک را نشان می‌دهد [۴۱].

$$A = 2R\theta t \quad (۷-۴)$$

که در آن R قطر لوله، θ زاویه‌ای که ترک ایجاد شده است و t ضخامت لوله می‌باشد.

برای بدست آوردن نرخ رهایش در نانولوله، رابطه (۶-۴) را به صورت رابطه (۸-۴) می‌توان نوشت. و در زمانی که ضخامت لوله کم باشد و به سمت صفر میل کند، می‌توان G را از رابطه (۹-۴) بدست آورد.

$$G = \frac{\Delta U^c}{\Delta A} \quad (۸-۴)$$

$$G = \frac{K_I^2}{E} \quad (۹-۴)$$

که در آن E مدول الاستیسیته و K_I ضریب شدت تنش در مود I می‌باشد. که در تئوری مکانیک شکست الاستیک خطی^۱ K_I به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$K_I = \sigma \sqrt{\pi R \theta} F_B(\theta) \quad (۱۰-۴)$$

که در آن $F_B(\theta)$ ضریبی است که با توجه به هندبوک تادا [۴۱] برابر رابطه (۱۱-۴) است.

^۱ LEFM

^۲ Tada

$$F_B(\theta) \approx 1 + A_b \left(\frac{\theta}{\pi}\right)^{1.5} + B_b \left(\frac{\theta}{\pi}\right)^{2.5} + C_b \left(\frac{\theta}{\pi}\right)^{3.5}$$

$$A_b = -3.2654 + 1.5278\left(\frac{R}{t}\right) - 0.0727\left(\frac{R}{t}\right)^2 + 0.0016\left(\frac{R}{t}\right)^3$$

$$B_b = 11.3632 - 3.9141\left(\frac{R}{t}\right) + 0.1862\left(\frac{R}{t}\right)^2 - 0.0041\left(\frac{R}{t}\right)^3$$

$$C_b = -3.1861 + 3.8476\left(\frac{R}{t}\right) - 0.1830\left(\frac{R}{t}\right)^2 + 0.0040\left(\frac{R}{t}\right)^3$$

(۱۱-۴)

فصل ۵:

شبیه‌سازی و تحلیل نانولوله کربنی دارای

ترک

۵-۱- شبیه‌سازی ترک بر روی نانولوله کربنی

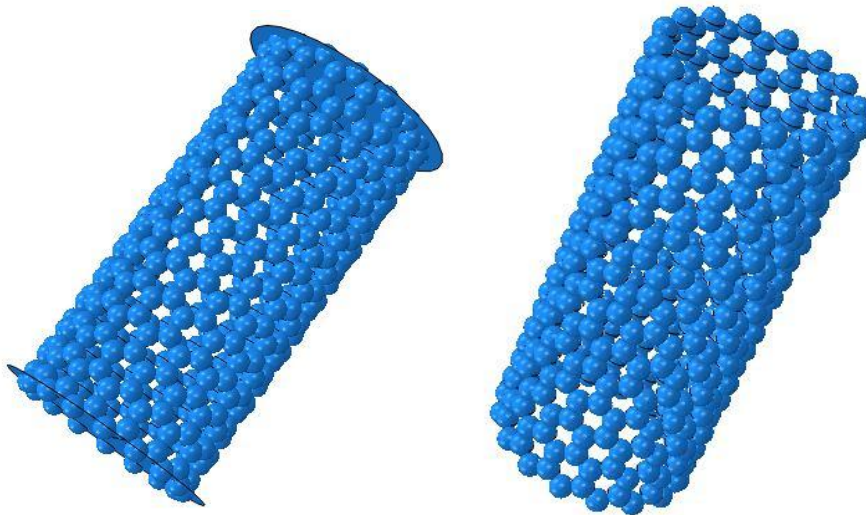
در فصل قبل شیوه شبیه‌سازی نانولوله کربنی در نرم‌افزار آباکوس به شیوه مکانیک ساختاری بیان شد. در این فصل توضیح داده می‌شود که چگونه نانولوله به صورت غیر خطی در آمده تا شرایط مکانیک شکست بر روی آن اعمال شود. زیرا اگر نانولوله خطی بوده و بارگذاری بر روی آن اعمال شود، نمی‌توان نمودار تنش-کرنش صحیحی برای آن ترسیم کرد و با اعمال هر میزان بار کششی، هرچقدر که کرنش زیاد شود تنش نیز زیاد می‌شود، و هیچ‌گونه شکستی در نانولوله ایجاد نمی‌شود. با این تغییراتی که در خواص کانکتورها و فنرها داده شده، نانولوله به حالت طبیعی خود رسیده است. حال می‌شود انواع پارامترهای شکست را بر روی آن مورد بررسی قرار داد. در ادامه به بررسی چگونگی اعمال ترک و همچنین تا حدودی اعمال بار سیکلی بر روی نانولوله در نرم‌افزار آباکوس پرداخته می‌شود.

در اکثر شبیه‌سازی‌هایی که انجام شده است ابتدا و انتهای نانولوله یک صفحه صلب قرار گرفته است، این صفحه‌های صلب برای راحتی اعمال بارگذاری و شرایط مرزی می‌باشند. این صفحه‌ها به اتم‌های بالایی و پایینی نانولوله کاملاً متصل شده و همراه همان اتم‌ها حرکت دارند. به عبارتی بین صفحه صلب و اتم‌ها تماسی از نوع tie داده شده است. این صفحه‌ها در بخش part نرم‌افزار ایجاد شده و در بخش assembly مونتاژ شده و در انتها و ابتدای نانولوله قرار می‌گیرند.

از آنجایی که این صفحه‌ها کاملاً صلب بوده و به اتم‌های انتهایی دوخته می‌شوند، در نتیجه اجازه تغییر در قطر نانولوله در ابتدا و انتهای آن را نمی‌دهند و این مساله زمانی که تحلیل بر روی ترک انجام می‌شود کمی خطا ایجاد می‌کند. برای رفع این خطا در بعضی از تحلیل‌ها صفحه‌های صلب را کاملاً حذف کرده و به جای آن‌ها شرایط مرزی و بارگذاری بر روی خود اتم‌های ابتدایی و انتهایی اعمال می‌شود؛ به طوریکه اتم‌های بالایی و پایینی در یک مجموعه^۱ تعریف شده و بارگذاری به آن

^۱ Set

مجموعه اعمال می‌شود و نهایتاً نتایج نیز از روی آن مجموعه بررسی می‌شود. در شکل ۱-۵ نانولوله با صفحه صلب متصل به دو انتهای آن و بدون صفحه صلب نشان داده شده است.



شکل ۱-۵: نانولوله بدون صفحه انتهایی و نانولوله با صفحه انتهایی

برهم‌کنش‌های مختلفی بین اتم‌های کربن در ساختار نانولوله وجود دارد، در فصل قبل به طور مفصل به انواع این برهم‌کنش‌ها پرداخته شد، در اینجا به صورت مختصر و چگونگی اعمال آن‌ها در نرم‌افزار آباکوس در محیط interaction بیان می‌شود.

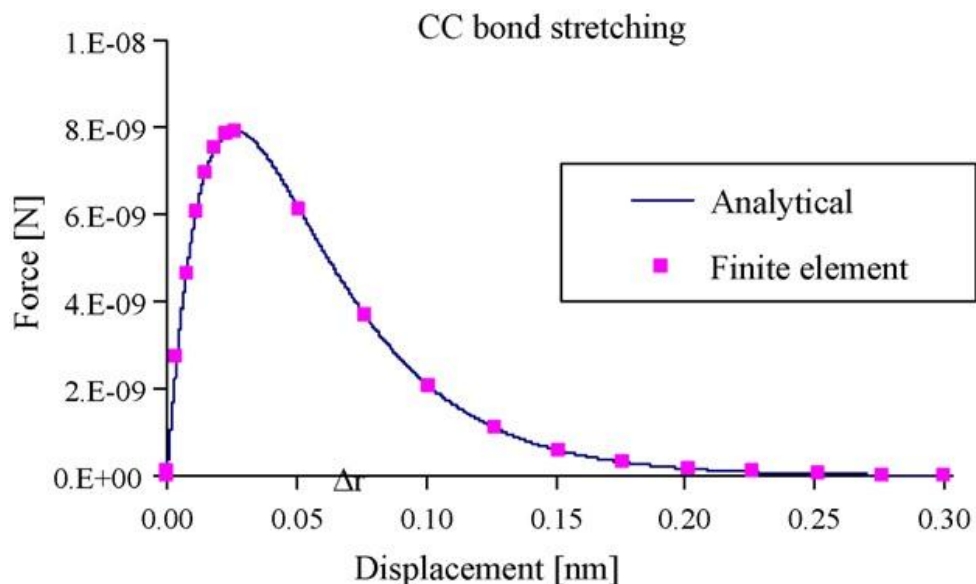
در مدل ساختاری حاضر، برهم‌کنش‌های کشیدگی پیوندهای کربن-کربن و تغییر زاویه پیوندهای کربن-کربن-کربن به ترتیب با استفاده از المان‌های میله (کانکتور^۱) و فنر غیر خطی شبیه‌سازی می‌شوند. برای بدست آوردن نیروی کشیدگی پیوندهای کربن-کربن کافیسیت از رابطه پتانسیل مربوط به آن مشتق گرفته شود تا رابطه (۱-۵) بدست آید.

$$F(r - r_0) = 2\beta D_e \left[1 - e^{-\beta(r - r_0)} \right] e^{-\beta(r - r_0)} \quad (1-5)$$

یک المان غیر خطی برای شبیه‌سازی کشیدگی پیوندهای کربن-کربن بکار گرفته می‌شود. این المان دارای سه درجه آزادی در هر گره است که شامل جابجایی در راستای محورهای دستگاه

¹ Connector

مختصات کلی می‌باشد. شکل ۲-۵ نمودار نیرو-جابجایی مورد استفاده برای برهم‌کنش کشیدگی پیوندها را نشان می‌دهد. همین نمودار در قسمت غیر خطی خواص میله نرم‌افزار آباکوس داده شده است.



شکل ۲-۵: نمودار نیرو-جابجایی مربوط به برهم‌کنش کشیدگی پیوندهای کربن-کربن [۳۷]

برای شبیه‌سازی برهم‌کنش تغییر زاویه پیوندهای کربن-کربن-کربن، با مشتق‌گیری از رابطه (۲-۶) (انرژی پتانسیل مورس مربوط به تغییر زاویه پیوندها)، رابطه ممان-تغییر زاویه مطابق با رابطه (۲-۵) بدست خواهد آمد.

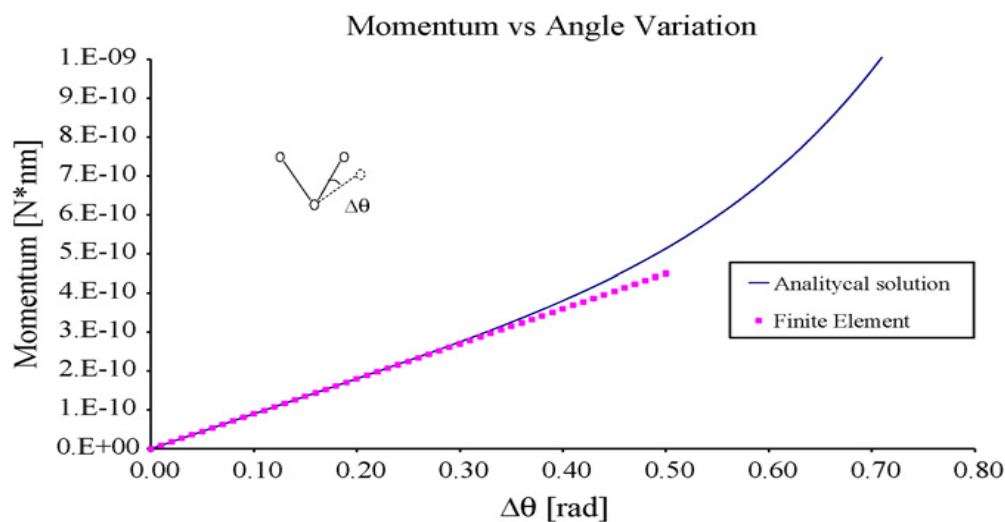
$$M_{(\theta-\theta_0)} = K_{(\theta-\theta_0)} [1 + 3K_{sextic} (\theta - \theta_0)^4] \quad (2-5)$$

اما از آنجا که برای شبیه‌سازی تغییر زاویه پیوندهای کربن-کربن-کربن از یک فنر غیرخطی محوری استفاده شده است، نیاز به رابطه‌ای است تا تغییر در زاویه پیوندها را با تغییر در طول فنر متناظر مرتبط سازد. شکل ۳-۵ نشان دهنده نمودار این رابطه می‌باشد. برای جابجایی‌های کوچک تغییر در طول فنر، می‌تواند از رابطه زیر محاسبه شود [۴]:

$$\Delta\theta = \frac{2(\Delta R)}{r_0} \quad (3-5)$$

که r_0 طول اولیه پیوند کربن-کربن، و ΔR تغییر در طول فنر متناظر می‌باشد. با جایگزینی معادله (3-5) در (2-5) و مشتق گرفتن از آن، معادله (4-5) به دست خواهد آمد که رابطه نیرو-جابجایی را برای فنر بیان می‌کند.

$$F(R-R_0) = \frac{du_\theta}{dR} = \frac{4}{r_0^2} K_\theta (R-R_0) \left[1 + \frac{48}{r_0^4} K_{sextic} (R-R_0)^4 \right] \quad (4-5)$$



شکل 3-5: نمودار نیرو-جابجایی مربوط به تغییر زاویه پیوندهای کربن-کربن-کربن [37]

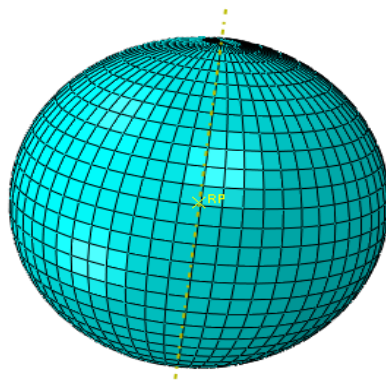
برای شبیه‌سازی این برهم‌کنش نیز، از یک المان فنر غیر خطی استفاده شده است. برای اینکه این فنر به صورت غیر خطی در نرم‌افزار مدل شود، باید نمودار آن به صورت داده‌های عددی در کیوورد¹ نرم‌افزار داده شود؛ زیرا در محیط کاری نرم‌افزار فقط فنر خطی موجود می‌باشد.

در بخش step نوع حلگر تعیین می‌شود، برای بارگذاری‌های کششی و تحلیل ترک از حلگر static general استفاده شده است. این بخش یک سری تنظیمات ساده دارد که برای حالت‌های مختلف انجام شده در این پایان‌نامه تقریباً یکسان است.

¹ keyword

در بخش load شرایط مرزی و شرایط بارگذاری تعیین می‌شوند. در این مدل شرایط مرزی را با توجه به پارامتر مورد تحلیل در نقطه مرکزی دو صفحه صلب اعمال می‌کنیم (یک سر گیردار و دو سر گیردار بودن نانولوله کربنی). ولی برای اینکه بارگذاری‌ها اکثراً به صورت کششی بوده و بیشتر مدل‌های استفاده شده به صورت یک سر گیردار هستند. همانطور که در بخش‌های قبل بیان شد صفحه‌های صلب برداشته شده‌اند و بارگذاری بر روی خود اتم‌ها انجام می‌شود تا از بروز خطای احتمالی جلوگیری شود. در بخش‌های بعدی در هر قسمت بارگذاری مربوط به همان قسمت توضیح داده می‌شود.

بعد از انجام تمام مراحل بالا به بخش Mesh می‌رسیم.



شکل ۴-۵: المان بندی اتم کربن

در این حوزه المان بندی اجزای تعریف شده صورت می‌پذیرد. هرچند که نوع و تعداد المان‌ها با توجه به صلب بودن تمامی اجزا تأثیری بر روی نتیجه نهایی نخواهد داشت؛ اما برای مشاهده تصویر تغییر شکل یافته نانولوله کربنی نیاز به المان بندی می‌باشد. برای اتم کربن از المان بندی Sweep استفاده شده به گونه‌ای که المان R3D4 در المان بندی قرار گرفته است. این المان بندی بر روی یک اتم کربن در شکل ۴-۵ آورده شده است.

پس از مش بندی وارد بخش Job می‌شویم؛ در این بخش عملیات و محاسبات تحلیل صورت

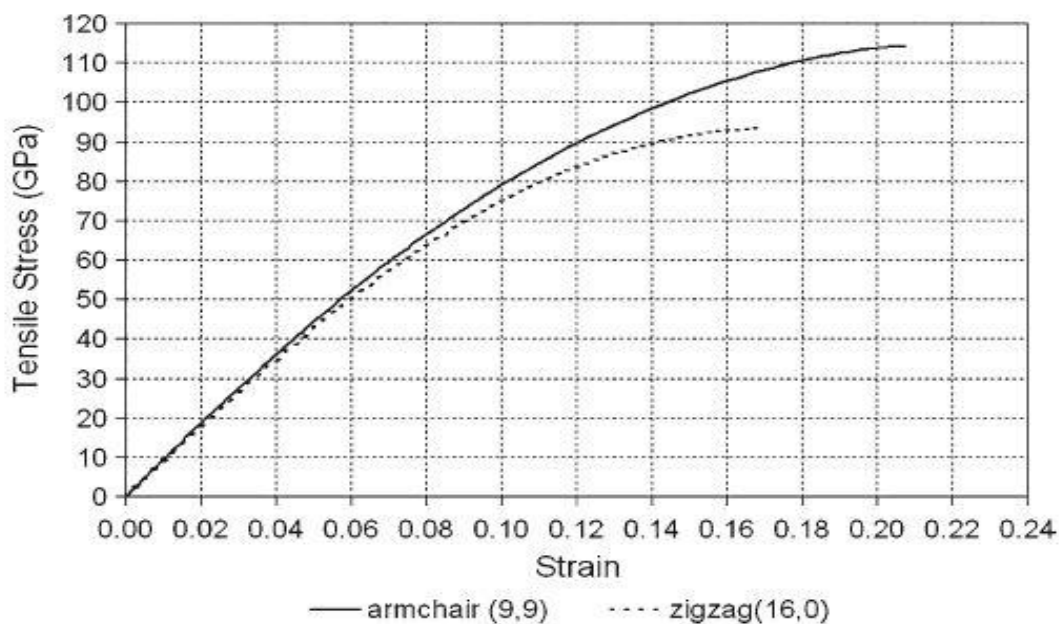
می‌گیرد. زمان تحلیل به اندازه نانولوله کربنی (تعداد کره‌های توخالی) و تعداد المان‌ها بستگی دارد. در این قسمت به دو روش می‌توان برنامه را اجرا کرد. زمانی که نیاز به اجرای فایل کیوورد برنامه باشد؛ مثلاً وقتی که فنر غیر خطی به فایل کیوورد اضافه شده یا زمانی که ترک در نانولوله ایجاد می‌شود، باید در این موارد فایل کیوورد برنامه اجرا شود. زیرا این تغییرات در محیط کاری نرم‌افزار نمی‌باشد. روش دوم اجرای معمولی برنامه که در محیط job به صورت ساده تعبیه شده است. پس از تحلیل می‌توان نتیجه نهایی و نمودارهای لازم را در بخش Visualization به دست آورد.

موضوع اصلی که در این پایان‌نامه مورد تحلیل قرار می‌گیرد، محاسبه نرخ رهايش انرژی در نانولوله ترک دار می‌باشد. در ابتدا صحت مدل برای بارگذاری کششی بررسی می‌شود، به طوریکه بارگذاری بر روی نانولوله سالم انجام می‌گیرد و نمودارهای تنش- کرنش نانولوله با رفتار غیرخطی برهم‌کنش‌ها بدست می‌آیند. در نهایت این نمودارها با مقاله‌های مختلف مقایسه می‌شوند. در ادامه ترک بر روی نانولوله ایجاد شده و نرخ رهايش انرژی برای یک بارگذاری خاص بدست می‌آید و نتیجه با مدل پیوسته که نرخ رهايش انرژی در آن با استفاده از هندبوک‌ها بدست آمده، مقایسه شده تا صحت کار برای نانولوله ترک دار نیز به اثبات برسد. پارامترهای مختلفی از جمله تاثیر کرنش‌های مختلف، تاثیر قطر نانولوله، تاثیر نوع بارگذاری، تاثیر نوع نانولوله (زیگزاگ یا آرمچیر) و تاثیر مکان ترک بر روی نانولوله در نرخ رهايش انرژی در ادامه بررسی خواهد شد.

۵-۱-۱- بررسی صحت مدل برای بارگذاری کششی

ابتدا به بررسی صحت بارگذاری و اینکه مدل در این نوع بارگذاری درست عمل کرده و نمودارهای تنش-کرنش بدست آمده از آن درست می‌باشد، پرداخته می‌شود. یک مدل یک سر گیردار از نانولوله زیگزاگ و آرمچیر که در طرف دیگر آن کرنش نسبتاً زیادی، در حدی که نانولوله کاملاً به دو قسمت تبدیل شود داده می‌شود. در ادامه نمودار نیرو- جابجایی از نرم‌افزار بدست می‌آید، در نهایت این نمودار به نمودار تنش- کرنش تبدیل شده و با نمودارهای موجود در مقاله مورد نظر مقایسه می‌شود.

ورنیک و همکاران در سال ۲۰۱۰ تحت مقاله‌ای با عنوان رفتار نانولوله غیر خطی با استفاده از مدل اتمی، نمودار تنش- کرنش نانولوله زیگزاگ و آرمچیر را بدست آوردند [۱۲]، که در شکل ۵-۵ میزان کرنش و تنش حداکثر کاملاً واضح است.

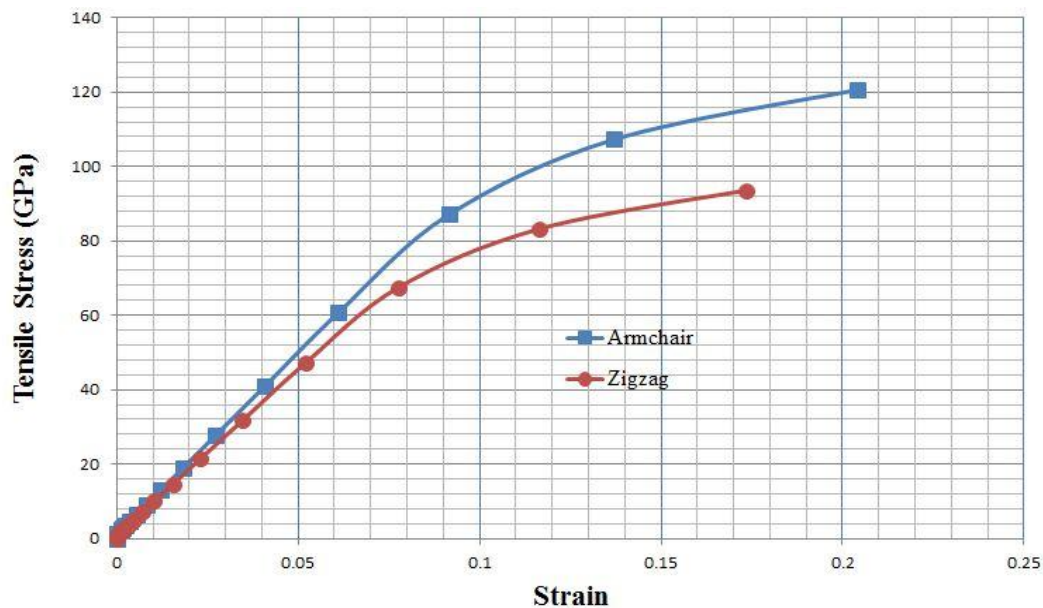


شکل ۵-۵: نمودار تنش- کرنش نانولوله زیگزاگ و آرمچیر [۱۲]

جدول ۱-۵: تنش کششی حداکثر و کرنش کششی حداکثر در دو نانولوله زیگزاگ و آرمچیر

	نوع نانولوله	تنش کششی حداکثر (GPa)	کرنش کششی حداکثر (%)
مقاله ورنیک [۱۲]	زیگزاگ	۹۳/۴	۱۷/۵
	آرمچیر	۱۱۴/۴	۲۰/۷
مدل حاضر	زیگزاگ	۹۳/۶	۱۷/۳
	آرمچیر	۱۲۰/۶۴	۲۰/۴
مدل معو [۳۴]	آرمچیر	۱۲۱/۳	۲۰/۶۸

در شکل ۶-۵ نمودار تنش- کرنش مدل حاضر آورده شده است. این نمودار شامل دو نانولوله زیگزاگ و آرمچیر می‌باشد، که قطر آن‌ها کاملاً همانند مقاله می‌باشد.



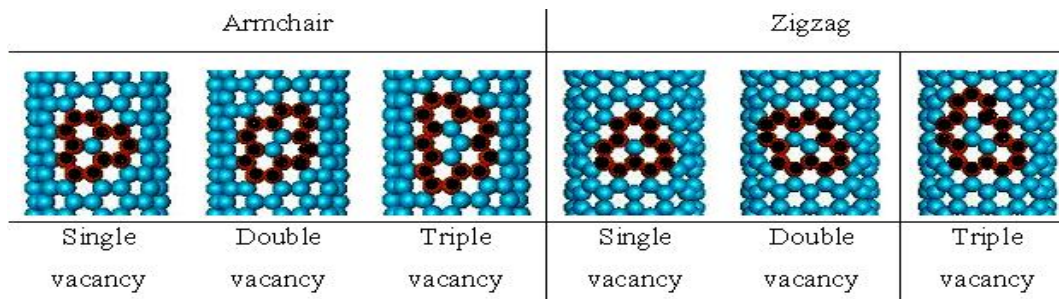
شکل ۵-۶: نمودار تنش - کرنش نانولوله زیگزاگ و آرمچیر در مدل حاضر

همانطور که در جدول ۵-۱ ملاحظه می‌شود؛ نتایج مقاله [۱۲] با نتایج مدل ارائه شده در این پایان‌نامه یکسان است. از آنجا که برای نانولوله آرمچیر تنها یک قطر آن برای مدل حاضر در دسترس است، یعنی نانولوله آرمچیر (۷،۷) و در مقاله ورنیک نانولوله آرمچیر (۹،۹) کار شده است، بنابراین تنش کششی حداکثر در جدول بالا اختلاف دارند. برای اطمینان از صحت تنش کششی حداکثر در نانولوله آرمچیر این نتایج با مقاله معو و روسی [۳۷] که مقاله‌ای مرجع به حساب می‌آید نیز مقایسه شده است. در آن مقاله تنش کششی حداکثر و کرنش کششی حداکثر به ترتیب برابر $۱۲۱/۳$ و $۲۰/۶۸$ می‌باشد، که با نتایج انطباق دارد.

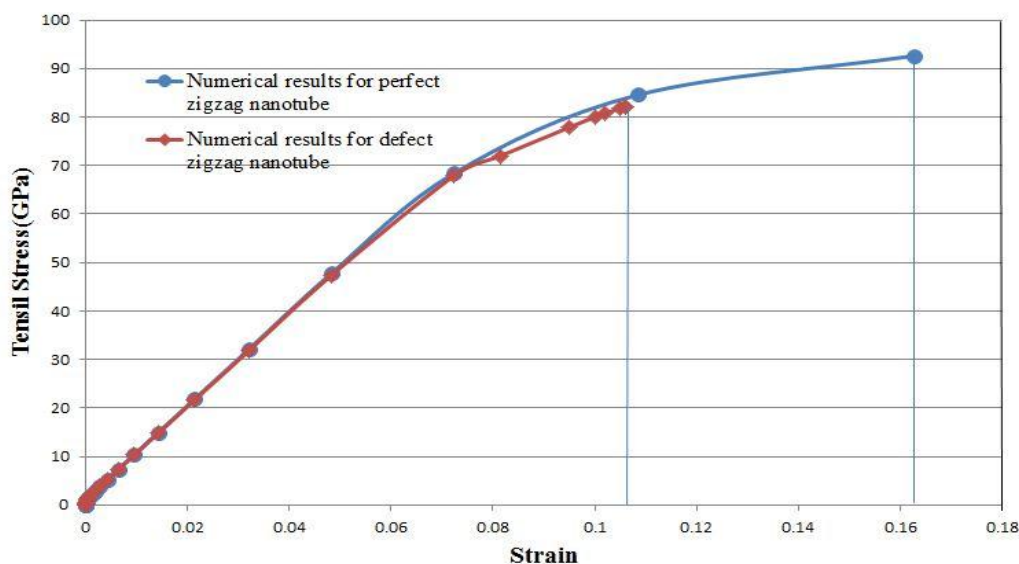
۵-۱-۲- نانولوله معیوب

به علت محدودیت‌هایی که در ساخت نانولوله‌ها وجود دارد، امکان تولید نانولوله‌های سالم شانسی کمتری نسبت به نانولوله‌های معیوب دارند. با توجه به اینکه عیوب تأثیر زیادی بر روی خواص مکانیکی دارند، بنابراین بررسی عیوب در نانولوله‌های کربنی یکی از موضوعات مهم قابل بحث می‌باشد و در دهه گذشته نیز تحقیقات اندکی در این مورد ارائه گردیده است. در یک نانولوله کربنی، امکان

تولید انواع عیوب وجود دارد. یکی از عیوب بسیار مهم در نانولوله‌های کربنی، عیوب تهی‌جای می‌باشد. انواع عیوب تهی‌جای^۱ که در تحلیل‌ها اعمال می‌شوند، در شکل ۷-۵ نشان داده شده‌اند.



شکل ۷-۵: عیوب تهی‌جای اعمال شده در تحلیل‌ها

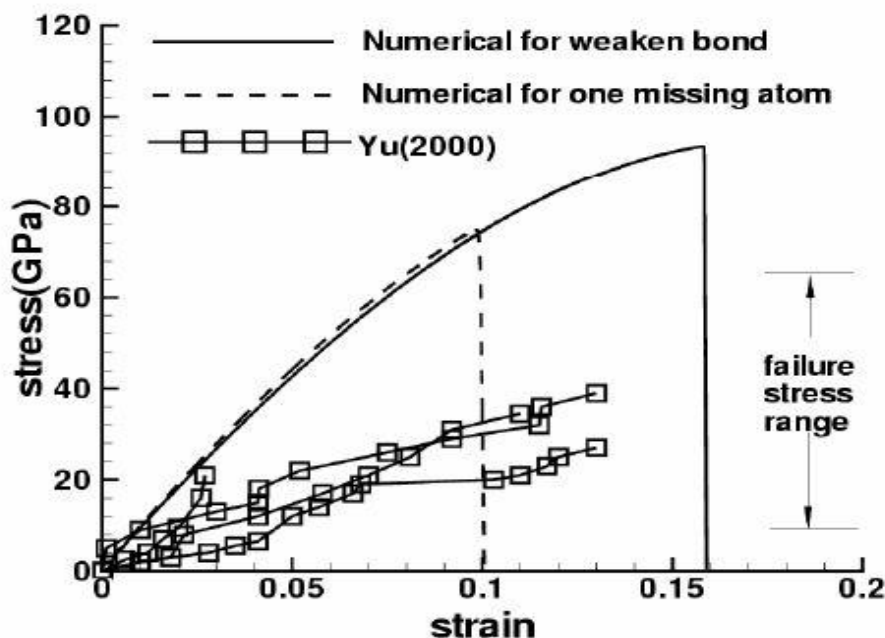


شکل ۸-۵: نمودار تنش - کرنش نانولوله سالم و معیوب

در این قسمت نمودار تنش - کرنش نانولوله زیگزاگ به قطر ۰/۹۵ نانومتر و طول ۴/۱۱۸ نانومتر در دو حالت سالم و حالتی که یک اتم آن حذف شده باشد، در شکل ۸-۵ مشاهده می‌شود. کاملاً واضح است که وقتی نانولوله به صورت معیوب در می‌آید و اتمی از آن حذف می‌شود هم میزان تنش حداکثر و هم میزان کرنش حداکثر آن کمتر از حالت سالم می‌شود. این نمودار شباهت زیادی با

^۱ Vacancy

نموداری که یو و همکاران ارائه کرده بودند، در شکل ۵-۹، انطباق دارد [۱۱].



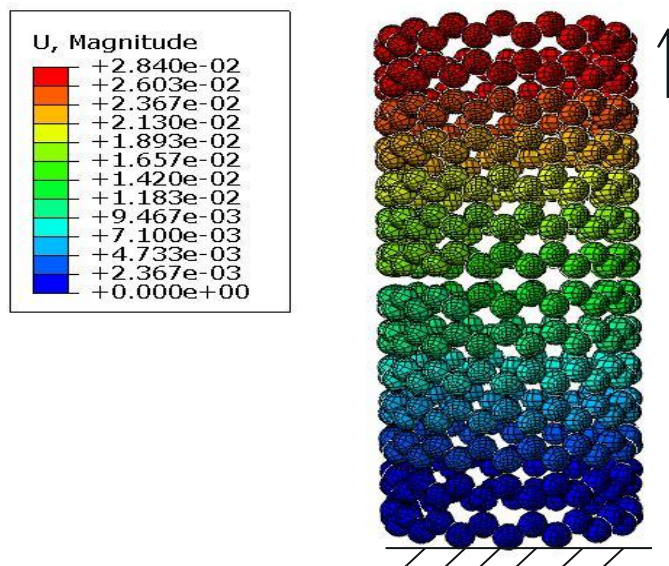
شکل ۵-۹: نمودار تنش-کرنش برای نانولوله سالم و معیوب و نتایج تجربی [۱۱]

در این پایان‌نامه نانولوله حاوی ترک تحت بار کششی قرار می‌گیرد؛ بنابراین میزان انرژی کرنشی حاوی ترک از نرم‌افزار استخراج می‌شود. و در رابطه (۴-۸) قرار می‌گیرد. برای کرنش‌های مختلف نرخ رهایش انرژی متفاوتی بدست می‌آید و در ادامه مدل پیوسته‌ای متناسب با مدل اصلی ایجاد شده و همان میزان کرنش به آن وارد می‌شود تا نیروی کششی اعمالی بدست آید که با تقریب خوبی برابر همان نیرویی است که در مدل اتمی می‌باشد. نیروی بدست آمده در رابطه (۵-۵) قرار می‌گیرد تا تنش بدست آید و نهایتاً در روابط (۴-۱۰) و (۴-۹) قرار داده شده و نرخ رهایش انرژی از روش مکانیک شکست الاستیک خطی بدست می‌آید. در انتها دو نمودار نرخ رهایش انرژی در یک نمودار باهم مقایسه می‌شوند.

$$\sigma = \frac{F}{2R\pi.t} \quad (۵-۵)$$

در شکل ۵-۱۰ کاملاً واضح است که ترک مقداری بعد از کشش باز شده است. به علت ضعف

بخش نمایش نرم‌افزار آباکوس کانکتورها (المان‌ها) که مهمترین قسمت این مدل‌سازی می‌باشند در قسمت نتایج دیده نمی‌شوند و تنها اتم‌ها نمایش داده می‌شوند. نقطه قوت این نتایج استخراج یکجا انرژی تمام کانکتورها می‌باشد، که برای بدست آوردن نرخ‌های انرژی کار را بسیار راحت می‌کند.



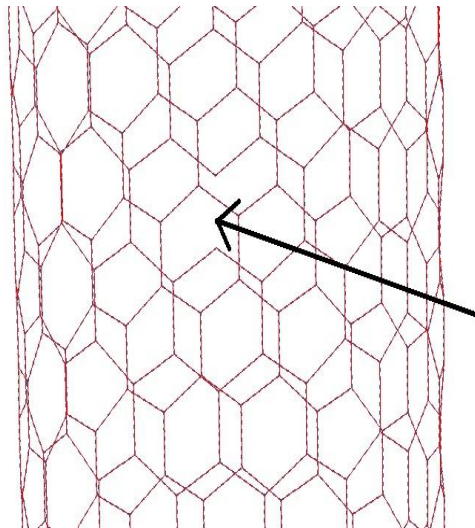
شکل ۵-۱۰: جابجایی (نانومتر) نانولوله دارای ترک بعد از کشش

۵-۱-۳- مقایسه نرخ‌های انرژی با دو روش LEM در محیط پیوسته و روش انرژی در نانولوله

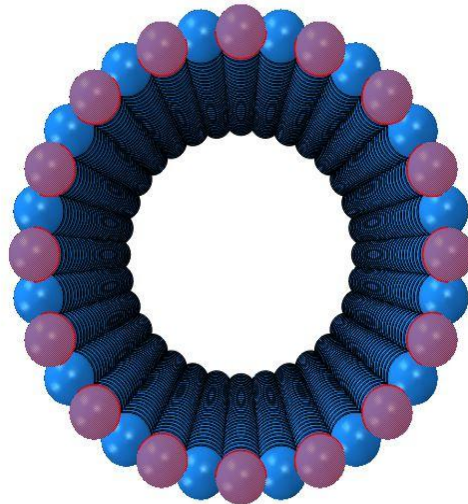
نانولوله زیگزاگ به قطر ۱/۲۵۷ نانومتر به طول ۴/۳۳۱ نانومتر تحت نیروی کششی قرار گرفته است و کرنشی برابر ۰/۰۴۳۳۱ به آن اعمال شده است. در نرم‌افزار المان محدود Abaqus، انرژی کرنشی نانولوله زمانی که ترک با طول‌های مختلف بر روی نانولوله اعمال می‌شود، خوانده می‌شود. دلیل اعمال این مقدار کرنش این است که برابر یک درصد طول باشد تا تغییر شکل محسوس نبوده و المان‌ها از هم گسیخته نشوند، زیرا برای بدست آوردن تغییرات انرژی از این روش که در بخش قبل توضیح داده شد، تنها باید تغییراتی در انرژی کرنشی که به واسطه ترک به وجود آمده اندازه‌گیری شود.

همانطور که در شکل ۵-۱۱ نشان داده شده است، بر روی محیط این نانولوله شانزده اتم قرار دارد. که به ازای آن شانزده المان نیز وجود دارد و با برداشتن هر کدام از آن‌ها می‌توان یک ترک به

اندازه یک المان ایجاد کرد، که با برداشتن المان اول، اندازه ترک دو المان بوده و از آن به بعد با برداشتن هر المان، یک المان به طول ترک اضافه می‌شود. در بخش بعدی این موضوع کامل‌تر شرح داده شده است.



ب



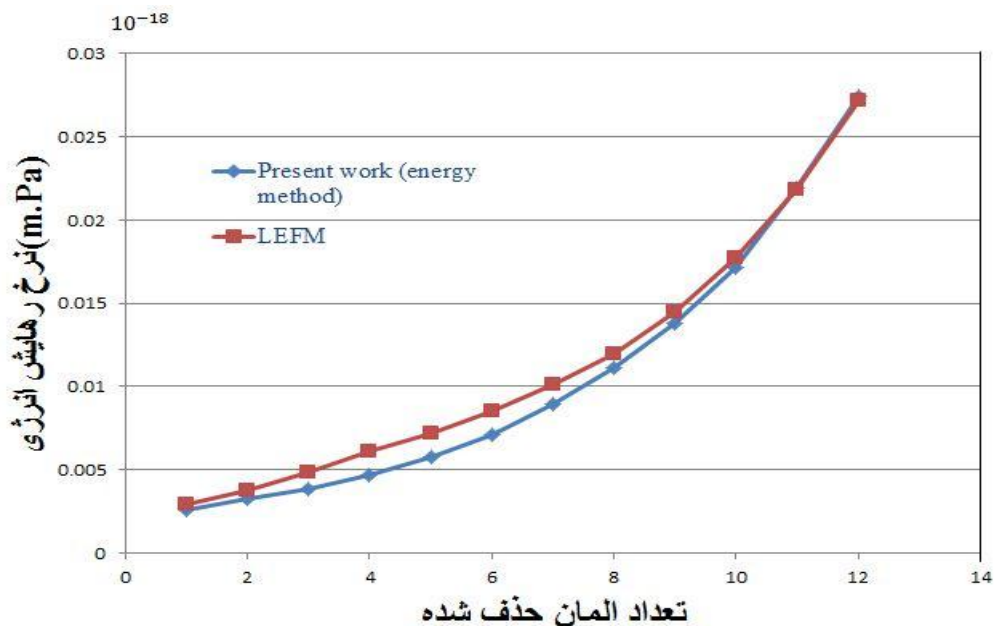
الف

شکل ۵-۱۱: (الف) - نمایش شانزده اتم بر روی محیط نانولوله، (ب) - حالتی که یک المان برداشته شده است

این نانولوله با ترک‌هایی در اندازه‌های مختلف از $\frac{2\pi}{16}$ تا $\frac{9\pi}{16}$ تحت بارگذاری قرار گرفته است و

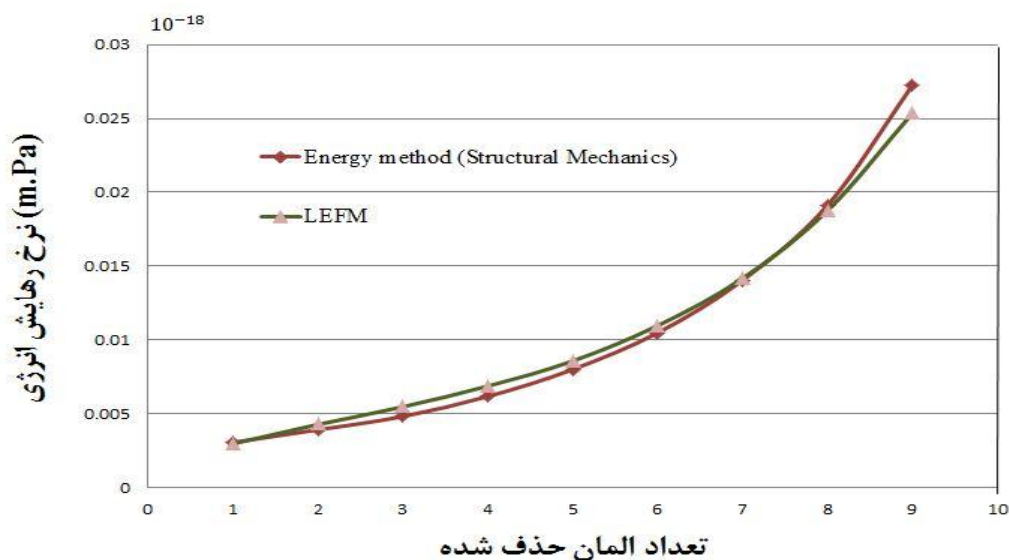
انرژی کرنشی آن در هر مرحله ثبت شده و با استفاده از معادله (۴-۸) نرخ رهایش انرژی بدست آمده است، همچنین با استفاده از معادلات (۴-۹) تا (۴-۱۱) و (۵-۵) نرخ رهایش برای مدل پیوسته بدست می‌آید. در نهایت نمودارهای نرخ رهایی انرژی کرنشی بر حسب تعداد المان حذف شده مطابق شکل ۵-۱۲ با هم مقایسه شده‌اند.

نکته بسیار مهمی باید ذکر شود که در نرم‌افزار آباکوس مدل خطی پیوسته‌ای که خواص نانولوله کربنی به آن اختصاص داده شده؛ ایجاد شده است. و روابط LEFM برای آن استفاده شده و نرخ رهایی انرژی بدست آمده است. از طرفی از روابط انرژی برای مدل نانولوله کربنی گسسته که مدلی غیر خطی است استفاده شده است.



شکل ۵-۱۲: تغییرات نرخ رهایی انرژی کرنشی در برابر تعداد امان حذف شده در نانولوله به قطر ۱/۲۵۷

شکل ۵-۱۲ نشان دهنده نرخ رهایی انرژی از دو روش تعریف انرژی و روش مکانیک شکست الاستیک خطی می‌باشد. ملاحظه می‌شود که دو نمودار تطابق خوبی باهم دارند و هر چقدر طول ترک زیادتر می‌شود، میزان نرخ رهایی انرژی نیز بیشتر شده و شیب بیشتری پیدا می‌کند.

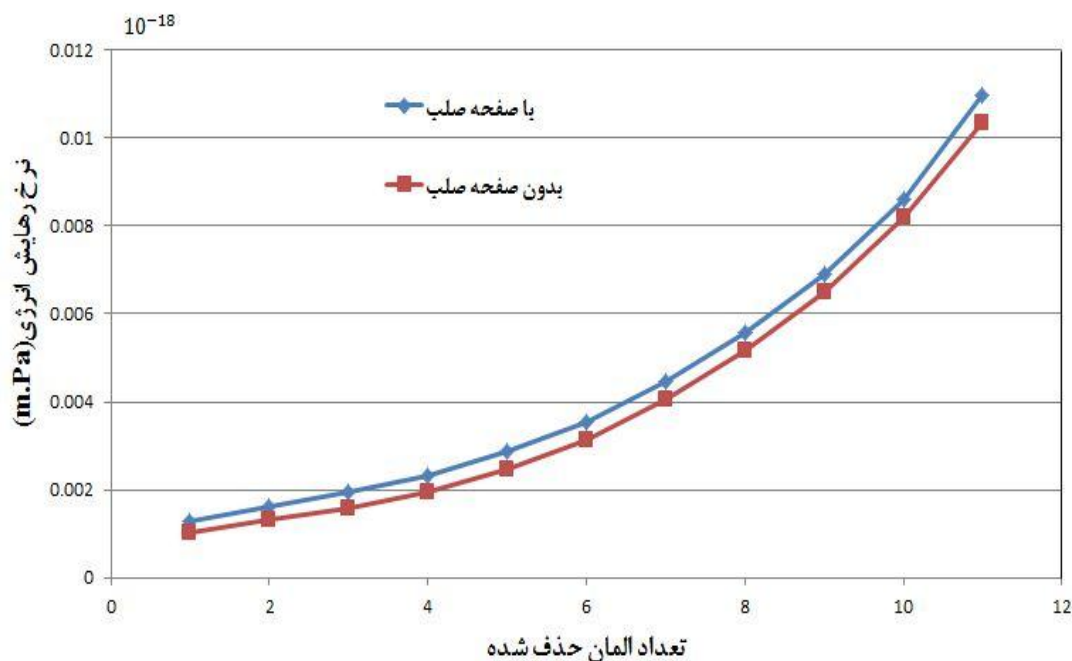


شکل ۵-۱۳: تغییرات نرخ رهایی انرژی کرنشی در برابر تعداد امان حذف شده در نانولوله به قطر ۰/۹۵

دلیل زیاد شدن شیب نمودار در نقاط انتهایی این است که هر چه که طول ترک افزایش می‌یابد، مقاومت ماده در برابر نیرو کمتر شده و ترک با سرعت بیشتری انتشار می‌یابد. پس می‌توان نتیجه گرفت که نرخ رهایی انرژی در هر دو روش با تقریب خوبی یکسان است. همانطور که در نمودار ملاحظه می‌شود، هر آنچه طول ترک زیادتر می‌شود، نمودارها به هم نزدیکتر می‌گردند؛ این امر در نانولوله به قطر ۰/۹۵ نیز در شکل ۵-۱۳ مشهود است.

۵-۱-۴- مقایسه نرخ رهایی انرژی کرنشی در نانولوله بدون صفحه صلب در دو انتهای آن با نانولوله با صفحه صلب

در بخش قبل در رابطه با صفحه صلب و تاثیر آن بر انرژی کرنشی حاصل از نانولوله ترک دار توضیح داده شد. اینجا دو نمودار نرخ رهایی انرژی در نانولوله با صفحه صلب و بدون صفحه صلب در شکل ۵-۱۴ باهم مقایسه شده‌اند. ملاحظه می‌شود زمانی که صفحه صلب وجود ندارد و اجازه تغییر شکل شعاعی در دو انتهای نانولوله داده می‌شود، نمودارهای نرخ رهایی انرژی با یکدیگر کمی تفاوت دارد.

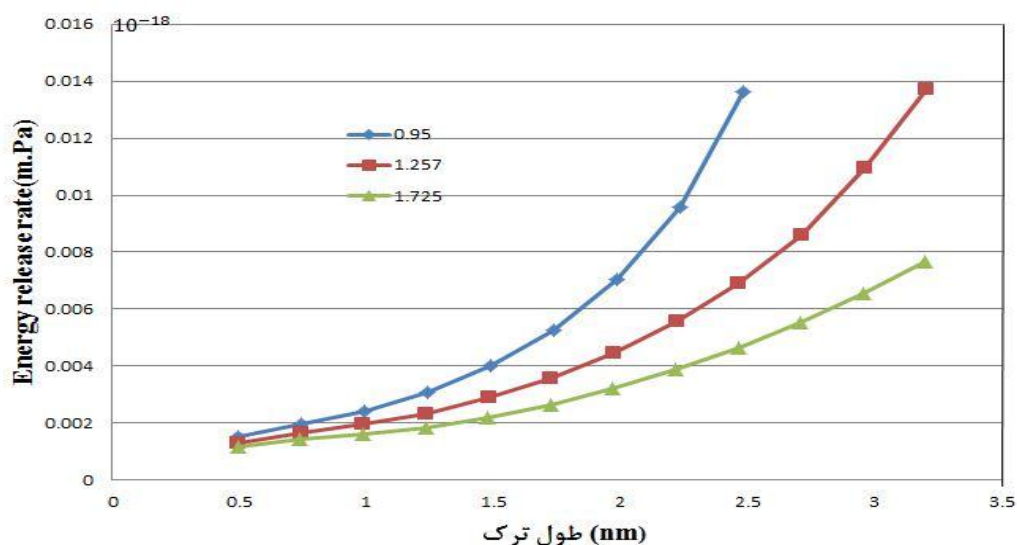


شکل ۵-۱۴: مقایسه نمودار نرخ رهایی انرژی بر حسب تعداد المان حذف شده در حالت‌های با صفحه صلب و بدون صفحه صلب در دو انتهای آن

نرخ رهایی انرژی در حالتی که صفحه صلب وجود دارد کمی بیشتر است؛ زیرا در این حالت اتم‌های ابتدایی و انتهایی در جهت‌های x و y مهار شده‌اند و ضریب شدت تنش بیشتر می‌شود. در نتیجه نرخ رهایی انرژی نیز کمی زیادتر می‌شود. با برداشتن صفحه‌ها و اجازه حرکت به اتم‌های ابتدایی و انتهایی در جهت‌های x و y این خطا نیز برطرف می‌شود. در بخش‌های بعدی این فصل نرخ رهایی انرژی نانولوله‌های مختلف در حالت‌های متفاوت با یکدیگر مقایسه شده و نمودار آن‌ها نمایش داده می‌شود.

۵-۱-۵- مقایسه نرخ رهایی انرژی در قطرهای مختلف نانولوله کربنی

معیار هزینه در مصارف صنعتی و فاکتور زمان در تحلیل‌های کامپیوتری از جمله پارامترهای مهم برای پژوهشگران به حساب می‌آیند. از این رو آن‌ها همیشه به دنبال راهی برای حداکثر صرفه‌جویی در این زمینه بوده‌اند. یکی از عوامل مهم در این صرفه‌جویی انتخاب اندازه ماده در تحلیل‌ها می‌باشد که باید سعی شود از مفیدترین ابعاد با بیش‌ترین کارایی در آزمایش‌ها و شبیه‌سازی‌ها استفاده گردد. از عوامل مهم در این زمینه می‌توان به قطر نانولوله کربنی و طول آن اشاره کرد. عامل قطر در بحث ترک اهمیت قابل توجهی دارد.

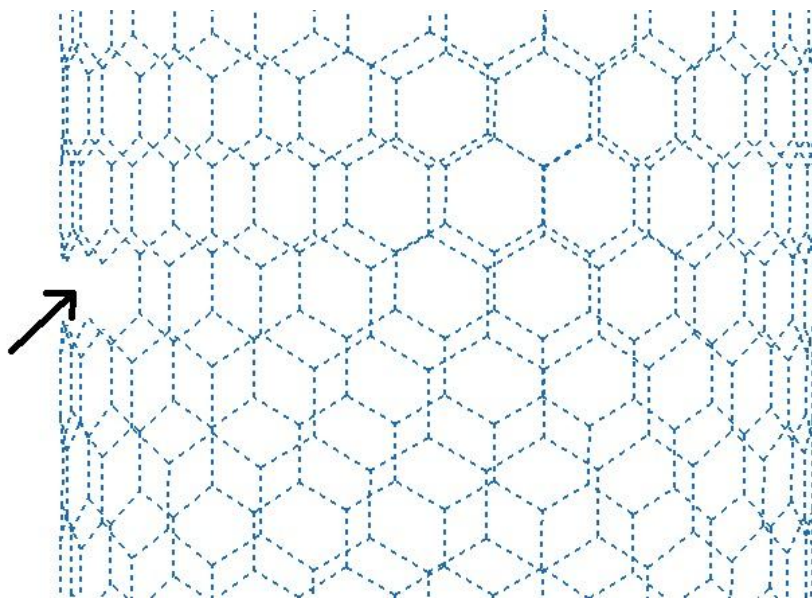


شکل ۵-۱۵: تغییرات نرخ رهایی انرژی در برابر طول ترک در قطرهای مختلف (نانومتر) نانولوله کربنی

همانطور که قطر بر روی تنش و کرنش تاثیر دارد، بر روی نرخ رهایی انرژی نیز تاثیر گذاشته و عاملی مهم در تحلیل ترک می‌باشد. در این بخش اثر قطر نانولوله بررسی می‌شود. برای بررسی اثر قطر، از سه نمونه نانولوله کربنی با طول یکسان به قطرهای ۰/۹۴، ۱/۲۵۷ و ۱/۷۲۵ نانومتر استفاده شده است. نرخ رهایی برای هر کدام از آن‌ها بدست آمده و در نمودار شکل ۵-۱۵ باهم مقایسه می‌شوند. شکل ۵-۱۵ بیانگر تغییرات نرخ رهایی انرژی نسبت به طول ترک در سه قطر متفاوت نانولوله می‌باشد. ابتدا باید ذکر شود که طول ترک در این جا به چه معنی است، اگر ترک در یک صفحه باشد، طول ترک واضح می‌باشد؛ ولی در نانولوله به خاطر وجود انحنا طول ترک با توجه به زاویه‌ای که ترک به وجود می‌آورد بیان می‌شود. با توجه به شکل ۵-۱۶ انحنا در طول ترک کاملاً مشهود می‌باشد. با توجه به این مطلب مقداری که برای طول ترک در نظر گرفته می‌شود با استفاده از رابطه (۵-۶) بدست می‌آید.

$$a = r.\theta \quad (۵-۶)$$

که در آن a طول ترک روی محیط نانولوله، r شعاع نانولوله و θ زاویه‌ای که ترک در مرکز نانولوله می‌سازد. θ نیز نسبت تعداد المان‌های حذف شده به تعداد کل المان‌ها ضرب در 2π می‌باشد.



شکل ۵-۱۶: نمایش یک ترک در نانولوله

به طور مثال در شکل ۵-۱۶ چهار المان حذف شده است که ترکی به اندازه پنج المان که برابر

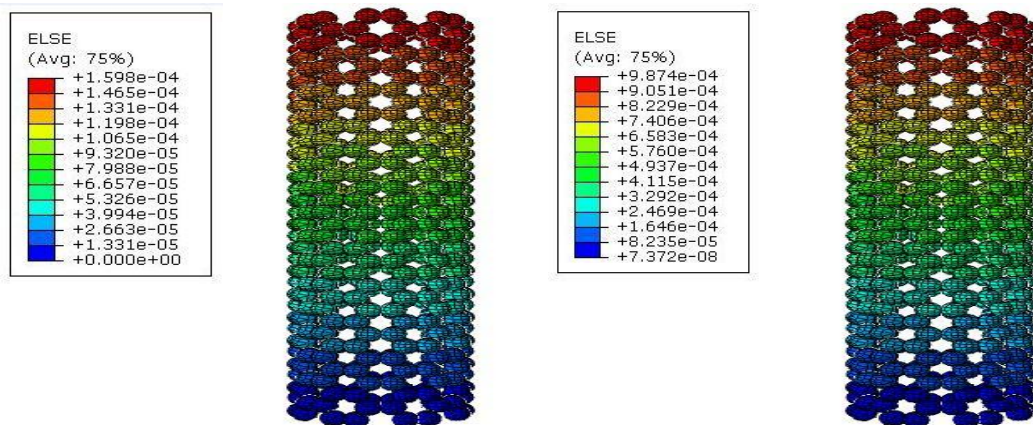
$$a = \left(\frac{5 \times 2\pi \times 0.8625}{22} \right) nm$$

می‌باشد. در این رابطه 0.8625، شعاع نانولوله و 22، تعداد المان‌های

کل این نانولوله می‌باشد. این مثال یک حالت خاص برای درک بهتر موضوع می‌باشد.

۵-۱-۶- مقایسه انرژی کرنشی در نانولوله زیگزاگ و آرمچیر

همان طور که در فصل قبل گفته شد، نانولوله‌های کربنی از پیچیده شدن یک صفحه گرافن ساخته می‌شوند. حالت‌های مختلف زیادی برای لوله کردن یک گرافن وجود دارد. جهت چرخش این لایه گرافن، نوع ساختار نانولوله‌های کربنی را به وجود می‌آورد. دو نوع از این ساختار به نام‌های زیگزاگ و آرمچیر هستند که در فصل قبل به صورت تفصیلی معرفی شدند. در شکل ۵-۱۷ کانتور انرژی کرنشی برای المان‌های مختلف در دو نانولوله زیگزاگ و آرمچیر نشان داده شده است. البته به دلیل اینکه این کرنش برای کانکتورها تعریف شده و آن‌ها در قسمت نتایج نرم‌افزار دیده نمی‌شوند، تغییر رنگ فقط در کانتور وجود دارد و این تفاوت در خود نانولوله دیده نمی‌شود.



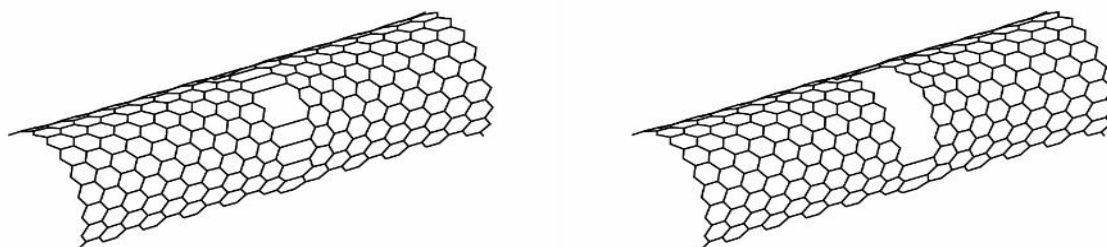
ب

الف

شکل ۵-۱۷: انرژی کرنشی نانولوله (الف)-زیگزاگ و (ب)-آرمچیر

در شکل ۵-۱۷ هر دو نانولوله دارای قطر ۰/۹۵ نانومتر و طول ۴/۱۱۸ نانومتر می‌باشند. در هر دو

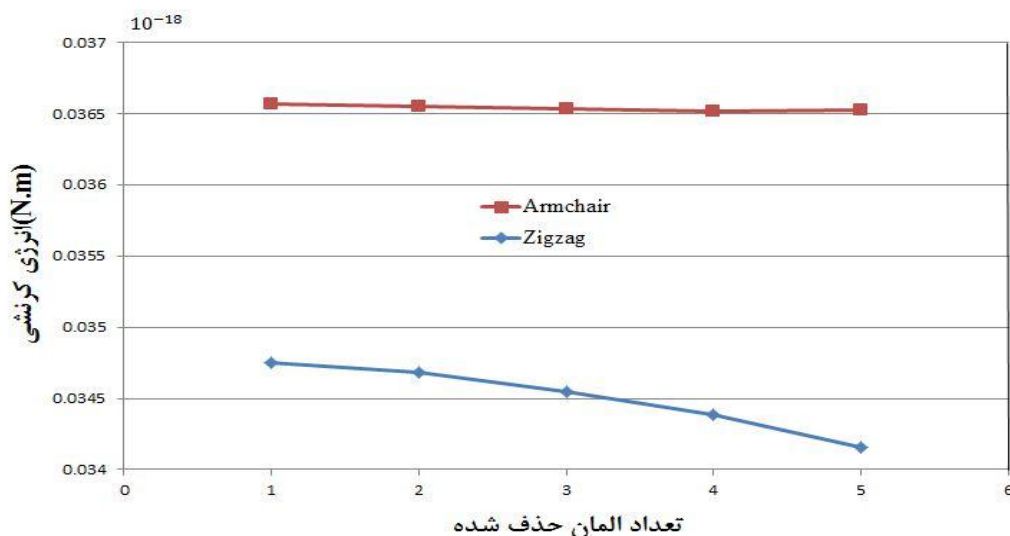
نانولوله ۴ اتم از قسمت وسط نانولوله حذف شده و قسمت پایینی آن ثابت بوده و قسمت بالایی به اندازه ۱٪ طول کشیده شده است. از آن جا که نوع چیدمان نانولوله آرمچیر طوری است که وقتی المان‌های کنار هم برداشته می‌شود تا ترکی بر روی سطح آن ایجاد شود؛ راستای این ترک مانند شکل ۵-۱۸ زاویه‌ای با خط افق ایجاد می‌کند. همان طور که ملاحظه می‌شود ترک در نانولوله زیگزاگ خطی موازی سطح مقطع نانولوله است در صورتی که در نانولوله آرمچیر این خط زاویه دار بوده، بنابراین مانند قسمت قبل نمی‌توان از فرمول انرژی، نرخ رهایی انرژی کرنشی را بدست آورد، از این رو خود انرژی کرنشی در شرایط یکسان دو نانولوله باهم مقایسه شده‌اند.



ب

الف

شکل ۵-۱۸: ترک در نانولوله (الف) - زیگزاگ و ب - آرمچیر [۱۱]



شکل ۵-۱۹: تغییرات انرژی کرنشی به طول ترک

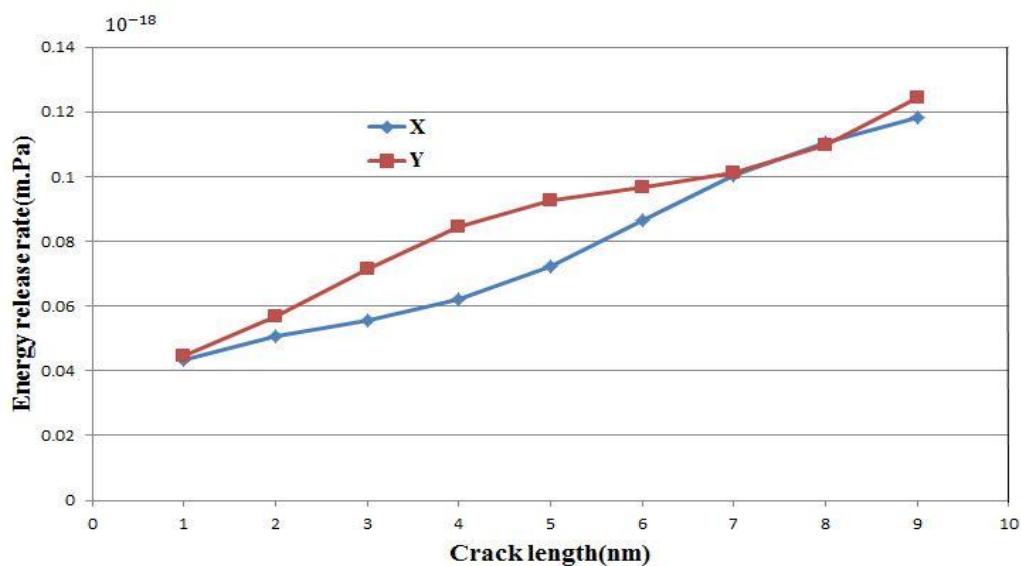
حال برای اینکه تغییرات انرژی کرنشی در دو نانولوله فوق باهم مقایسه شوند، از یک المان تا پنج المان از نانولوله حذف شده و انرژی کرنشی به دست آمده در نموداری که در شکل ۵-۱۹ آمده است، با یکدیگر مقایسه شده‌اند. در شکل ۵-۱۹ ملاحظه می‌شود که مقدار انرژی کرنشی در نانولوله آرمچیر بیشتر است این مطلب تایید کننده نمودار تنش- کرنش نیز می‌باشد. ولی تغییرات انرژی کرنشی در نانولوله زیگزاگ بسیار بیشتر از نانولوله آرمچیر می‌باشد، زیرا ترک در نانولوله زیگزاگ کاملاً عمود بر راستای نیرو است و میزان نیرویی که به نوک ترک وارد می‌شود، بیشتر از نانولوله آرمچیر است.

۵-۱-۷- نرخ رهایی انرژی با بارگذاری مود II

در همه نتایج قسمت‌های قبل بارگذاری به صورت کششی بوده است. به طوریکه ترک در نانولوله ایجاد شده و جابجایی اندکی در حدود ۱٪ طول، به نانولوله اعمال شده است. انرژی کرنشی آن از طریق نرم‌افزار محاسبه شده و در نهایت طبق توضیحاتی که در بخش‌های قبل داده شد، نرخ رهایی انرژی کرنشی بدست می‌آید. اما در این قسمت نوع بارگذاری تغییر داده شده است و بارگذاری به شکلی اعمال می‌شود که خمش در نانولوله ایجاد شود و به عبارت دیگر نوعی بار ترکیبی از کشش و برش بر ترک اعمال می‌شود و نوع بارگذاری شبیه مود II می‌باشد. در همه حالت‌های قبل طول نانولوله در جهت محور z بوده و بارگذاری کششی در همان جهت انجام شده است. در این‌جا بارگذاری را می‌توان در جهت‌های x, y اعمال کرد، که به جای کشش، خمش در نانولوله ایجاد می‌شود. در نهایت نرخ رهایی انرژی از روش‌های قبل بدست آمده و در نموداری ارائه می‌شود.

نانولوله زیگزاگ با قطر ۰/۹۵ نانومتر و طول ۴/۱۱۸ نانومتر در نظر گرفته می‌شود. در هر مرحله بارگذاری، یک المان حذف شده، انرژی کرنشی کل نانولوله بدست آمده و از رابطه (۴-۸) نرخ رهایی انرژی کرنشی به دست می‌آید. در شکل ۵-۲۰ نمودار نرخ رهایی انرژی دو بارگذاری در جهت x, y با یکدیگر مقایسه شده‌اند. همان‌طور که در شکل ملاحظه می‌شود بارگذاری در جهت y ابتدا با شیب زیادتر شروع می‌شود و در ادامه شیب آن کم می‌شود. دلیل این امر این است که ترک در وسط

نانولوله قرار دارد و طول آن در هر مرحله از یک طرف بیشتر می‌شود. البته در اصل چون ترک متقارن است باید از دو طرف ترک رشد کند که این اتفاق در زمانی که بار افزایش داده می‌شود می‌افتد، ولی برای اینکه نرخ رهایی انرژی برای طول‌های متفاوت ترک بدست آید در هر مرحله یک المان حذف می‌شود، که این کار در یک طرف ترک انجام شده و به جلو می‌رود. بنابراین در ابتدا که طول ترک کمتر است بارگذاری کاملاً متقارن در جهت باز شدن ترک است و شیب نرخ رهایی انرژی زیادتر می‌شود، ولی در ادامه وقتی طول ترک از یک طرف زیاد می‌شود، تقارن کمتر شده و جهت بارگذاری با ترک متقارن نمی‌باشد. شیب نرخ رهایی کمتر می‌شود ولی با وجود کم شدن شیب اندازه نرخ رهایی انرژی زیاد می‌شود، برای اینکه طول ترک افزایش پیدا کرده است.

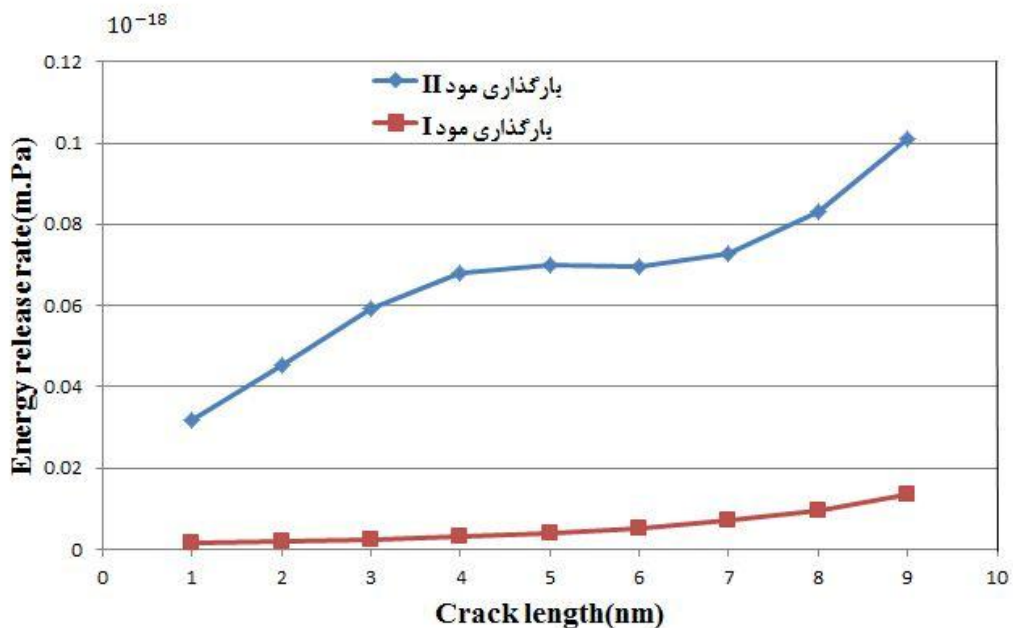


شکل ۵-۲۰: نمودار نرخ رهایی انرژی نسبت به تعداد المان حذف شده برا بارگذاری مود II در دو جهت x, y

در بارگذاری در جهت x این امر کاملاً برعکس می‌باشد. کاملاً واضح است که تقارن در بارگذاری امری مهم تلقی می‌شود و در اینجا نمودار کاملاً به صورت متقارن است. در جهت x ابتدا شیب کم است زیرا بارگذاری کاملاً در جهت افزایش طول ترک نیست ولی در ادامه با افزایش طول ترک بارگذاری به سمت تقارن با جهت ترک رفته و شیب نمودار زیاد می‌شود، تا جایی که منطبق بر نمودار در جهت y می‌شود.

۵-۱-۸- مقایسه نرخ رهایی انرژی بارگذاری مود II با بارگذاری مود I

در قسمت قبل گفته شد که جهت بارگذاری عوض شده تا نتایج حاصل از این کار دیده شود. در این قسمت دو نانولوله که تمام شرایط آنها یکسان بوده در نظر گرفته شده‌اند. در بارگذاری کششی نوع بارگذاری به صورت جابجایی-کنترل^۱ است، حال برای اینکه میزان نیرویی که در حالت بارگذاری کششی اعمال شده است عیناً در بارگذاری مود II تکرار شود، در هر مرحله نیروی وارد بر نانولوله در بارگذاری کششی محاسبه شده و در بارگذاری مود II اعمال می‌شود. یعنی نیرویی که در جهت محور z در بارگذاری کششی بوده، همان نیرو این بار در جهت y بر روی نانولوله اعمال می‌شود. بنابراین در بارگذاری مود II نوع بارگذاری از نوع بار-کنترل^۲ می‌باشد. با این روش تمام شرایط یکسان بوده تنها جهت بارگذاری عوض شده است. در شکل ۵-۲۱ دو نمودار با یکدیگر مقایسه می‌شوند.



شکل ۵-۲۱: نمودار نرخ رهایی انرژی در بارگذاری مود II و کششی نسبت به طول ترک

در شکل ۵-۲۱ نمودار نرخ رهایی دو نانولوله به قطر ۰/۹۵ نانومتر آمده است. همان‌طور که در

¹ Displacement-control

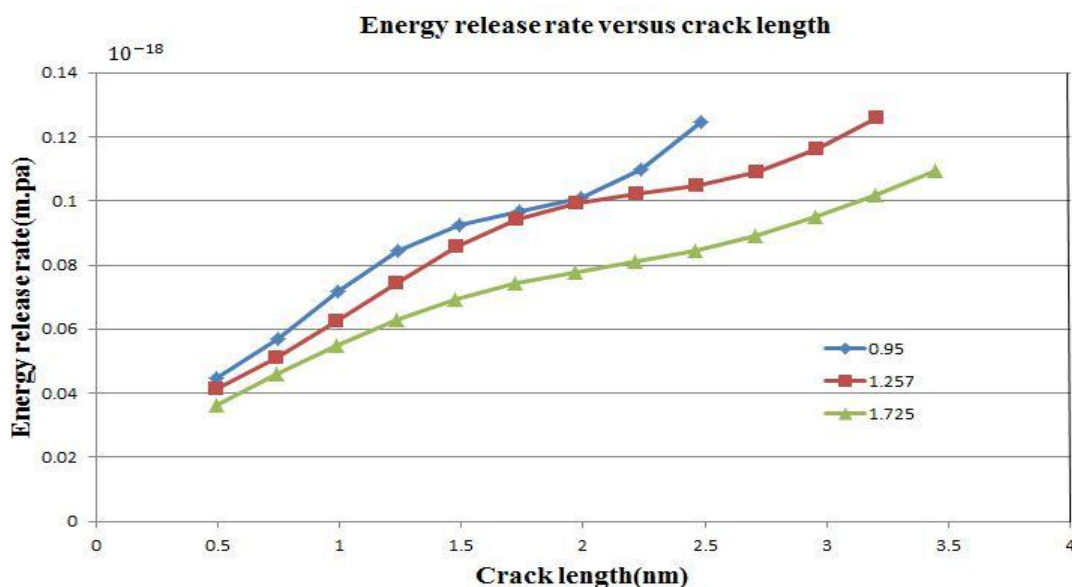
² Load-control

بخش قبل گفته شد، برای نداشتن تقارن در بارگذاری مود II شیب نمودار ابتدا زیاد، بعد کم و دوباره زیاد می‌شود. ولی از آنجا که بارگذاری مود II تاثیر بیشتری بر روی رشد ترک گذاشته، بنابراین هم شیب و هم مقدار نرخ رهایی انرژی از حالت بار کششی بیشتر می‌باشد.

۵-۱-۹- مقایسه نرخ رهایش انرژی در قطرهای مختلف نانولوله کربنی با

بارگذاری مود II

در این قسمت نرخ رهایی انرژی در سه قطر ۰/۹۵ و ۱/۲۵۷ و ۱/۷۲۵ نانومتر نانولوله زیگزاگ در بار مود II با یکدیگر مقایسه شده‌اند. شکل ۵-۲۲ این سه نمودار را نشان می‌دهد.

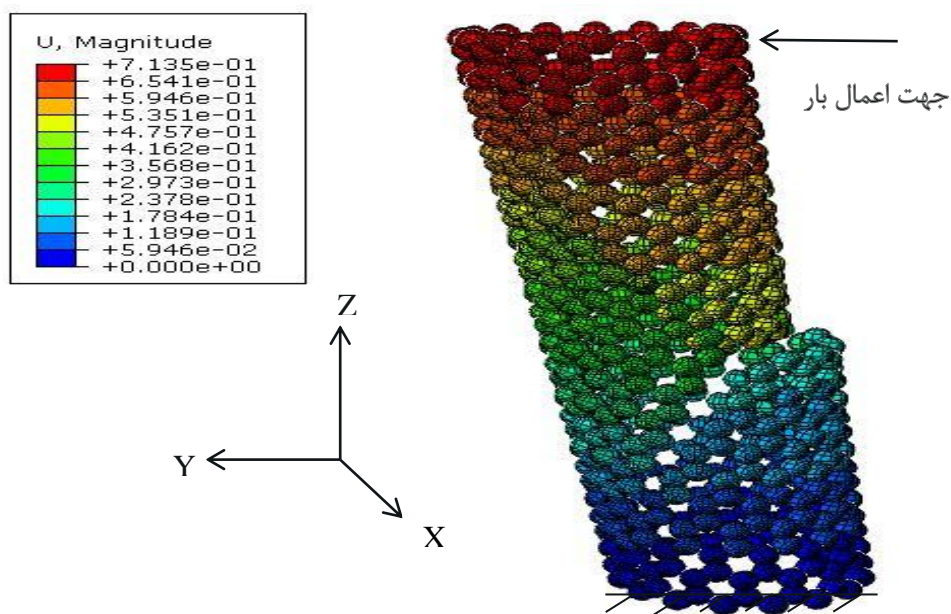


شکل ۵-۲۲: تغییرات نرخ رهایی انرژی در برابر طول ترک با بارگذاری مود II در قطرهای مختلف

همان‌طور که ملاحظه می‌شود هر سه نمودار ابتدا شیب زیادتر دارند و بعد ملایم شده و در انتها دوباره شیب آن‌ها زیاد می‌شود. در ابتدا ترک در راستای عمود بر جهت بارگذاری است ولی در ادامه تقارن از بین می‌رود، ولی در انتها هم به دلیل اینکه طول ترک زیاد شده هم اینکه تقارن بیشتر می‌شود، شیب نمودار زیاد می‌شود. همچنین مانند حالت بارگذاری قبلی هر چه قطر نانولوله کمتر باشد، نرخ رهایی انرژی در آن بیشتر است. در نمودار ۱/۲۵۷ و ۱/۷۲۵ ابتدا دو نمودار موازی هم و در

فاصله کمی از یکدیگر قرار دارند ولی در ادامه از هم فاصله گرفته و بعد دوباره تقریباً موازی می‌شوند. دلیل این امر متفاوت بودن قطر و اینکه در قطر ۱/۷۲۵ تعداد اتم بیشتری در سطح مقطع نانولوله وجود داشته، و هنگامی که المان‌ها برای ایجاد ترک حذف می‌شوند، در قطر ۱/۷۲۵ تعداد بیشتری المان باقی می‌ماند، تا ترک به انتها برسد. ولی در قطر ۱/۲۵۷ المان کمتری باقی می‌ماند. این امر هم تقارن در بارگذاری و هم مقاومت نانولوله در برابر بارگذاری را تحت تاثیر قرار می‌دهد، و موجب تفاوت در نمودار می‌شود. بنابراین شیب نمودار در این قطر دیرتر کم شده است. زیرا تقارن با شیب ملایمتری کم می‌شود.

در قسمت ۴-۴-۵ که نانولوله با قطرهای مختلف تحت بار کششی با یکدیگر مقایسه شدند، دیده شد که نمودارها کاملاً متقارن بوده و تغییرات شیب در آن‌ها یک روند منطقی داشته و با زیاد شدن شیب به جلو می‌روند. که در شکل ۵-۱۵ این امر واضح است. ولی در قسمت ۴-۴-۹ این تقارن وجود ندارد. در پاراگراف قبل دلیل این امر تا حدودی توضیح داده شد ولی یک دلیل دیگر که مکمل دلیل قبل است و در عین حال دلیل جامع‌تر و مهمتری می‌باشد، وجود دارد. به شکل ۵-۲۳ توجه شود.



شکل ۵-۲۳: جابجایی (نانومتر) نانولوله با وجود ترکی به اندازه پنج المان تحت بار مود II

در این شکل بار به انتهای نانولوله در جهت قطر آن وارد شده است. این نالوله زیگزاگ با قطر ۱/۲۵۷ نانومتر بوده که ترکی در مرکز آن به اندازه پنج المان می‌باشد. مساله‌ای که مورد توجه است اینکه رشد ترک در جهت ادامه روند برداشتن المان‌ها نمی‌باشد و با زاویه‌ای از ترک افقی رشد کرده است. در بارگذاری کششی این امر وجود نداشت و جهت رشد ترک با جهت برداشتن المان‌ها یکی بود ولی در این قسمت این امر وجود دارد و تفاوتی در روند نمودارها ایجاد کرده است.

البته این امر خطایی در نتایج ایجاد نمی‌کند زیرا روند بدست آوردن نرخ‌هایی انرژی ربطی به روند رشد ترک ندارد. زیرا جابجایی که در هر مرحله داده می‌شود به قدری نیست که ترک رشد کند. تنها تغییر کوچکی است که بتوان اثر نبود هر المان را در انرژی کرنشی دید، ایجاد می‌شود. و در نهایت این امر هم در شکل ۵-۲۳ و هم در نمودارها تایید کننده یکدیگر می‌باشند.

نتیجه اساسی که از این دو قسمت می‌توان گرفت این می‌باشد؛ «هرگاه نمودار نرخ‌هایی انرژی کاملاً با روند منطقی و زیاد شونده به جلو رود و شیب نمودار اگر افزایش یابد، روند افزایشی در شیب را حفظ کند، در نتیجه مانند شکل ۵-۱۵ جهت برداشتن المان‌ها با جهت رشد واقعی ترک یکسان می‌باشد».

فصل ۶:

نتیجه‌گیری و پیشنهادها

۶-۱- نتیجه‌گیری

- با توجه به مباحث مطرح شده در این پایان‌نامه نتایج مهمی در زمینه تنش و کرنش حداکثر و نرخ رهایی انرژی در نانولوله ترک دار بدست آمد که در زیر به آن‌ها اشاره شده است:
- ۱- تنش کششی حداکثر در نانولوله آرمچیر بیشتر از نانولوله زیگزاگ می‌باشد.
 - ۲- کرنش کششی حداکثر در نانولوله آرمچیر بیشتر از نانولوله زیگزاگ می‌باشد.
 - ۳- در نانولوله زیگزاگ هرچه قطر بیشتر می‌شود، تنش و کرنش حداکثر نیز بیشتر می‌شود.
 - ۴- تنش کششی حداکثر در نانولوله معیوب (از نوع vacancy) کمتر از نانولوله سالم می‌باشد. در نتیجه استحکام آن کمتر است.
 - ۵- نرخ رهایی انرژی از هر دو روش LEFM در محیط پیوسته و روش انرژی بر روی مدل ساختاری حاضر در قطرهای مختلف تطابق قابل قبولی دارد.
 - ۶- نرخ رهایی انرژی زمانی که صفحه صلب در انتها و ابتدای نانولوله وجود دارد. بیشتر از زمانی است؛ که انتها و ابتدای نانولوله آزاد است.
 - ۷- در نانولوله زیگزاگ هرچه قطر نانولوله کمتر باشد. نرخ رهایی انرژی بیشتر است.
 - ۸- در یک اندازه و بارگذاری کاملاً یکسان، میزان انرژی کرنشی در نانولوله ترک دار آرمچیر بیشتر است، ولی شیب نمودار در نانولوله زیگزاگ بیشتر می‌باشد.
 - ۹- در شرایط کاملاً یکسان نانولوله، در بارگذاری مود II نرخ رهایی انرژی بیشتر از مود I می‌باشد.
 - ۱۰- در بارگذاری مود II جهت رشد ترک دارای زاویه‌ای با بارگذاری مود I می‌باشد.

۶-۲- پیشنهادها

۱- مدل‌سازی را می‌توان قدری هوشمندتر کرد تا بتوان قطرهای و طول‌های متفاوت بیشتری با صرف زمان کمی تولید کرد.

۲- مدل‌سازی را با مدلی در نرم‌افزارهای دیگر المان محدود مانند انسیس^۱ مقایسه کرد تا نتایج دقیقتری بدست آید. و از همه مهمتر این مدل‌ها می‌توانند با اشتراک نقاط قوت، ضعف‌های هم را برطرف کنند.

۳- تغییراتی در مدل ایجاد شود تا هم ضعف فنر غیرخطی، که به سختی در مدل اعمال می‌شود، برطرف شود هم بتوان بارگذاری‌های پیچیده‌تری از قبیل بار سیکلی را بر روی آن شبیه‌سازی کرد.

۴- می‌توان از انتگرال J و دیگر پارامترهای شکست در پروژه‌های بعدی برای تحلیل ترک استفاده کرد.

۵- نرخ‌هایی انرژی را از روش‌های دیگری مانند روش نیرو نیز می‌توان بدست آورد که در کارهای بعدی می‌توانند این روش‌ها مفید باشند.

۶- می‌توان مسیر ترک را به جای خط صاف در منحنی‌های دیگری در نانولوله شبیه‌سازی کرد.

۷- می‌توان چیرالیتی را نیز هوشمند کرد تا به غیر از مدل‌های زیگزاگ و آرمچیر مدل چیرال نیز بدست آید.

۸- یکی از بیشترین کاربردهای نانولوله در کامپوزیت‌ها و استفاده از نانو در اپوکسی‌ها می‌باشد، می‌توان از نتایج این پایان‌نامه استفاده کرد و مدلی از نانولوله کربنی در کامپوزیت که کاربرد بسیاری در صنعت دارد ایجاد کرده و تحلیل‌های ترک را بر روی مدل نانوکامپوزیتی انجام

¹ Ansys

داد.

[۱] قاجار، رحمت الله، "مقدمه‌ای بر مکانیک شکست"، ویرایش اول، انتشارات دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی، ۱۳۸۱.

[2] Quilici S, Cailletaud G. (1999) "FE simulation of macro-meso- and micro-scales in polycrystalline plasticity" J of Computational mater, 16, pp 383-390.

[3] Iijima S. (1991) "Helical microtubes of graphitic carbon", Nature, Vol. 354, pp. 56-58.

[4] Odegard G.M, Gates, T.S, Nicholson L.M, Wise K.E. (2002) "Equivalent-continuum modeling with application to carbon nanotubes", Composites Science and Technology, Vol. 62, pp. 1869–1880.

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

[6] Ajayan P M 1999 Chem. Rev. 99 1787.

[7] Parvaneh V, Shariati M. (2010) "Effect of defects and loading on prediction of Young's modulus of SWCNTs", Acta Mech, Vol. 216, pp. 281–289.

[8] Joshi Anand Y, Sharma Satish C, Harsha S. P. (2010) "Analysis of Crack Propagation in Fixed-Free Single-Walled Carbon Nanotube Under Tensile Loading Using XFEM", Journal of Nanotechnology in Engineering and Medicine, Vol. 1, No. 041008, pp. 1-7.

[9] Ren Y, Fu Y. Q, Liaoa K. (2004) "Fatigue failure mechanisms of single-walled carbon nanotube ropes embedded in epoxy", American Institute of Physics, Vol. 84, No. 15, pp. 2811-2813.

[10] Jin Y, Yuan F. G. (2005) "Nanoscopic Modeling of Fracture of 2D Graphene Systems", Journal of Nanoscience and Nanotechnology, Vol. X, pp. 1-8.

[11] Belytschko T, Xiao S.P, Schatz G.C, Ruoff R.S. (2002) "Atomistic simulations of nanotube fracture", Physical Review B, Vol. 65, pp. 235–430.

[12] Wernik Jacob M, Meguid Shaker A. (2009) "Atomistic-based continuum modeling of the nonlinear behavior of carbon nanotubes", Acta Mech.

- [13] Wang J, Gutierrez M. S. (2009) “*Molecular Simulations of Cyclic Loading Behavior of Carbon Nanotubes Using the Atomistic Finite Element Method*”, Journal of Nanomaterials, Vol. 2009, pp. 1-9.
- [14] Huang X.H, He X.Q. (2012) “*Fracture analysis of carbon nanotubes in the context of an atomic-based cellular automata algorithm*”, Computational Materials Science, Vol. 65, pp. 85-90.
- [15] Hu Yu, Luo Danni, Li Penghui, Li Qingbin, Sun Guoqiang. (2014) “*Fracture toughness enhancement of cement paste with multi-walled carbon nanotubes*”, Construction and Building Materials, Vol. 70, pp. 332-338.
- [16] Falzon Brian .G, Hawkins Stephen .C, Huynh Chi .P, Radjef Racim, Brown Callum. (2013) “*An investigation of Mode I and Mode II fracture toughness enhancement using aligned carbon nanotubes forests at the crack interface*”, Composite Structures, Vol. 106, pp. 65-73.
- [17] Hugh O.P. (2004) “*Handbook of Carbon, Graphite, Diamond and Fullerenes*”, Vol. 1, Consultant and Sandia National Laboratories, New Mexico, pp. 12-36.
- [18] Forbes. (2002) “*An Insider’s Guide to the World of Nanotechnology*”, Wolfe Nanotech Report, pp. 1-9.
- [19] Mantell C. L. (1968) “*Carbon and Graphite Handbook*”, Interscience, New York, pp. 132-141.
- [20] Kalamkarov A.L, Georgiades A.V, Rokkam S.K, Veedu V.P, Ghasemi-Nejhad M.N. (2006) “*Analytical and numerical techniques to predict carbon nanotubes properties*”, International Journal of Solids and Structures, Vol. 43, pp. 6832–6854.
- [21] Machida K. (1999) “*Principles of Molecular Mechanics*”, Kodansha and John Wiley & Sons Co-publication, Tokyo, pp. 321-327.
- [22] Salvétat J, Bonard J, Thomson N.H, Kulik A.J, Forro L, Benoit W, Zuppiroli L. (1999) “*Mechanical properties of carbon nanotubes*”, Applied Physics A, Vol. 69, pp. 255-260.
- [23] Cornell W.D, Cieplak P, Bayly C.I. (1995) “*A second generation force-field for the simulation of proteins, nucleic-acids, and organic-molecules*”, Journal of American Chemical Society, Vol. 117, pp. 5179-5197.
- [24] Rappe A.K, Casewit C.J, Colwell K.S. (1992) “*A full periodic-table force-field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations*”, Journal of American Chemical Society, Vol. 114, pp. 10024-10035.

- [25] Li C.Y. and Chou T.W, (2003) “*Elastic moduli of multi-walled carbon nanotubes and the effect of van der Waals forces*”, *Comput. Sci. Technol*, Vol. 63, pp. 1517–1524.
- [26] Li C.Y, Chou T.W, (2004). “*Modeling of elastic buckling of carbon nanotubes by molecular structural mechanics approach*” *Mech. Mater*, Vol. 36, pp. 1047–1055.
- [27] Min-Feng Yu, Oleg Lourie, Mark J. Dyer, Katerina Moloni, Thomas F. Kelly, Rodney S. Ruoff. (2000) “*Strength and Breaking Mechanism of Multiwalled Carbon Nanotubes Under Tensile Load*”, *Science*, Vol. 287, No. 5453, pp. 637-640.
- [28] Tersoff J. (1992) “*Energies of fullerenes*”, *Phys. Rev. B.*, Vol. 46, pp. 15546-15549.
- [29] Yakobson B.I, Brabec C.J, Bernholc J. (1996) “*Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear range*”, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 76, No. 14, pp. 2511–2514.
- [30] Ru C.Q. (2000) “*Effective bending stiffness of carbon nanotubes*”, *Phys. Rev. B.*, Vol. 62, pp. 9973–9976.
- [31] Govindjee S, Sackman J.L. (1999) “*On the use of continuum mechanics to estimate the properties of nanotubes*”, *Solid State Commun*, Vol. 110, pp. 227–230.
- [32] Zhang P, Huang Y, Gao H, Hwang K.C. (2002) “*Fracture nucleation in single-wall carbon nanotubes under tension: a continuum analysis incorporating interatomic potentials*”, *J. Appl. Mech.*, Vol. 69, pp. 454–458.
- [33] Li C.Y, Chou T.S. (2003) “*A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes*”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 40, pp. 2487–2499.
- [34] Hu N, Fukunaga H, Lu C, Kameyama M, Yan B. (2005) “*Prediction of elastic properties of carbon nanotube-reinforced composites*”, *Mathematical and Physical Sciences*, Vol. 461, pp. 1685–1710.
- [35] Hu N, Nunoya K, Pan D, Okabe T, Fukunaga H. (2007) “*Prediction of buckling characteristics of carbon nanotubes*”, *International Journal of solids and structures*, Vol. 44, pp. 6535-6550.
- [36] Wang Q, Liew K.M, Duan W.H. (2008) “*Modeling of the mechanical instability of carbon nanotubes*”, *Carbon*, Vol. 46, pp. 285-290.
- [37] Meo M, Rossi M. (2006) “*Tensile failure prediction of single wall carbon nanotube*”, *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 73, pp. 2589-2599.

- [38] ABAQUS user's manual, (2011), version 6.11.3.
- [39] Xiao J.R, Gama B.A, Gillespie J.r J.W. (2005) “*An analytical molecular structural mechanics model for the mechanical properties of carbon nanotubes*”, Int J Solids Struct, Vol. 42, pp. 3075–3092.
- [40] Griffith A.A. (1921) “*The phenomena of repture and flow in solids*”, Phil Trans Rov Soc, pp. 163-197.
- [41] Rahman S, Brust F. W. (1992) “*An estimation method for evaluating energy release rates of circumferential through-wall cracked pipe welds*”, Engineering Fracture Mechanics, Vol. 43, No. 3, pp. 417-430.

Abstract

In this thesis, the structural model in ABAQUS software to analyze the failure parameters of a carbon nanotube ,including the energy release rate used. In this structural model a nonlinear connector is considered for modeling of stretching and torsional interactions, and a nonlinear spring is used for modeling of the angle variation interactions. The present model is constructed in the CAE environment of, so there is no need to programing for different loading and boundary conditions. Every feature of the software in the analysis of mechanical problems has to be imposed on carbon nanotube. In this thesis, the maximum stress and strain and the effect of defects on the stress and strain is investigated. Also crack the nanotube simulation, and energy release rate it according to various parameters such as geometry, type and mode of loading, boundary conditions and chirality carbon nanotubes have been studied. Also energy release rate from tow method LEFM for continuous model and energy method obtained and compared with each other; the results coincide reasonably well with each other.

Keywords: *Carbon nanotubes, structural mechanics model, ABAQUS, crack, energy release rate*



Shahrood University of Technology

Faculty mechanic engineer

**Analysis of crack behavior in carbon nanotubes
using a structural mechanics model**

Danial Radmanesh

Supervisors:

Dr. Mahmood Shariati

Dr. Hamidreza Ipakchi

September 2014