

دانشگاه صنعتی شاهرود  
دانشکده‌ی مهندسی مکانیک

# اثر عیب حفره بر خواص ارتعاشی نانولوله‌های کربنی

امیررضا افتخارفر

استاد راهنما:

دکتر اردشیر کرمی محمدی

بهمن ۱۳۹۲

رسالة محمد



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده‌ی مهندسی مکانیک

گروه مهندسی مکانیک جامدات

## اثر عیب حفره بر خواص ارتعاشی نانولوله‌های کربنی

دانشجو: امیررضا افتخارفر

استاد راهنما:

دکتر اردشیر کرمی محمدی

پایان‌نامه‌ی ارشد جهت دریافت درجه‌ی کارشناسی ارشد

ماه و سال انتشار: بهمن ۱۳۹۲



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 امیررضا افتخارفر رشته مهندسی مکانیک گرایش طراحی کاربردی تحت عنوان اثر عیب حفره بر خواص ارتعاشی نانولوله‌های کربنی که در تاریخ ۱۳۹۲/۱۱/۲۸ 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>۸۸.۸</u> ) |
|--------------------------------|------------------------------------|---|

- ۱- عالی (۲۰ - ۱۹)  
 ۲- بسیار خوب (۱۸/۹۹ - ۱۸)  
 ۳- خوب (۱۷/۹۹ - ۱۶)  
 ۴- قابل قبول (۱۵/۹۹ - ۱۴)  
 ۵- نمره کمتر از ۱۴ غیر قابل قبول

| عضو هیأت داوران                 | نام و نام خانوادگی | مرتبه علمی | امضاء |
|---------------------------------|--------------------|------------|-------|
| ۱- استاد راهنما                 | اردشیر کرمی محمدی  | استادیار   |       |
| ۲- استاد مشاور                  |                    |            |       |
| ۳- نماینده شورای تحصیلات تکمیلی | مجتبی قطعی         | استادیار   |       |
| ۴- استاد ممتحن                  | سید وحید حسینی     | استادیار   |       |
| ۵- استاد ممتحن                  | سید هادی قادری     | استادیار   |       |

رئیس دانشکده :

به یاد برادرم

و

تقدیم به مادر دلسوز و پدر مهربانم

## تشکر و قدردانی

اینجانب از آقای دکتر اردشیر کرمی محمدی که با ارائه‌ی نظرهای ارزشمند و سازنده‌ی خود درباره‌ی انتخاب موضوع و پیشبرد پایان‌نامه، آن را به گونه‌ای شایسته هدایت نموده‌اند بسیار سپاسگزارم. همچنین، از مادر فداکار و پدر بزرگووارم که با حمایت‌هایی بی‌وقفه، صبورانه مرا در نگارش این پایان‌نامه یاری رساندند قدردانی می‌کنم.

امیررضا افتخارفر

## تعهدنامه

اینجانب امیررضا افتخارفر دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته‌ی مهندسی مکانیک گرایش طراحی کاربردی دانشکده‌ی مهندسی مکانیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده‌ی پایان‌نامه‌ی اثر عیب حفره بر خواص ارتعاشی نانولوله‌های کربنی تحت راهنمایی دکتر اردشیر کرمی محمدی متعهد می‌شوم:

- تحقیقات در این پایان‌نامه توسط اینجانب انجام شده‌است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهش‌های محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده‌است.
- مطالب مندرج در پایان‌نامه تا کنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده‌است.
- کلیه‌ی 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 به‌دست‌آمدن نتایج اصلی پایان‌نامه تأثیرگذار بوده‌اند در مقالات مستخرج از پایان‌نامه رعایت می‌گردد.
- در کلیه‌ی مراحل انجام این پایان‌نامه، در مواردی که از موجود زنده (یا بافت‌های آن‌ها) استفاده شده‌است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده‌است.
- در کلیه‌ی مراحل انجام این پایان‌نامه، در مواردی که به حوزه‌ی اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده‌است اصل رازداری، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده‌است.

تاریخ

امضای دانشجو

### مالکیت نتایج و حق نشر

کلیه‌ی حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه‌های رایانه‌ای، نرم‌افزارها و تجهیزات ساخته‌شده) 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 پژوهش حاضر، اثر عیب حفره بر فرکانس‌های طبیعی نانولوله‌های کربنی مطالعه شده است و بحثی به میرایی ترموالاستیک در این مواد اختصاص یافته است. ساختار هندسی نانولوله‌هایی تک‌جداره و دوجداره با برنامه‌های رایانه‌ای تولید شده است و بدین ترتیب، حذف یک یا چند اتم کربن از ساختار برای ایجاد عیب در مدل نانولوله به‌سادگی صورت گرفته است. شبیه‌سازی ارتعاشات نانولوله‌ها در نرم‌افزاری ویژه و به روش دینامیک ملکولی اجرا شده است. در مسائل حل‌شده، چندین پارامتر تغییر داده شده‌اند تا تحلیل پاسخ سیستم‌ها جامع باشد. فرکانس طبیعی هر نانولوله با کمک تبدیلی از حوزه‌ی زمان به حوزه‌ی فرکانس به‌دست آمده است. نتایج نشان می‌دهند که در بیشتر موارد، وجود تک عیب حفره یا عیوب حفره با توزیع تصادفی سبب می‌شود فرکانس طبیعی اصلی سیستم کاهش یابد هرچند در برخی از مسأله‌ها، تغییرات درصد جابه‌جایی فرکانس با موقعیت عیب در راستای طول نانولوله یا با درصد تراکم عیب بی‌نظم است. همچنین، شایان ذکر است که مقادیر محاسبه‌شده برای ضریب کیفیت نانولوله‌ها در دمای اتاق کوچک‌اند و به‌دلیل آن‌که معکوس ضریب کیفیت در شرایط خاص مهیا شده، شاخص میرایی ترموالاستیک است این گونه‌ی میرایی در دمای اتاق، انرژی زیادی در نانولوله‌ها تلف می‌کند. سرانجام، وابستگی میرایی ترموالاستیک به دما و تأثیر تک عیب حفره بر میرایی در نانولوله دو موضوعی هستند که این گزارش با پرداختن به آن‌ها کامل شده است.

**واژگان کلیدی:** نانولوله‌های کربنی، عیب حفره، فرکانس طبیعی، ضریب کیفیت، میرایی ترموالاستیک، شبیه‌سازی دینامیک ملکولی.



## فهرست مطالب

|         |  |
|---------|--|
| و.....  | چکیده  |
| ط.....  | فهرست شکل‌ها   |
| ل.....  | فهرست جدول‌ها  |
| م.....  | فهرست علائم  |
| ۱.....  | فصل ۱- مقدمه   |
| ۲.....  | ۱-۱- فناوری نانو و نانولوله‌های کربنی                        |
| ۵.....  | ۲-۱- دگرشکل‌های کربن: از گذشته تا امروز                      |
| ۶.....  | ۱-۲-۱- اتم‌های کربن و تشکیل پیوند                            |
| ۸.....  | ۲-۲-۱- مقایسه‌ی ساختارها و خواص                              |
| ۱۱..... | ۳-۱- ساختارهای نانولوله‌ها و پدیده‌ی ارتعاش                  |
| ۱۲..... | ۱-۳-۱- روابط هندسی در ساختارها                               |
| ۱۵..... | ۲-۳-۱- شبکه‌ی بلور و ارتعاشات                                |
| ۱۶..... | ۴-۱- چهارچوب و اهداف گزارش                                   |
| ۱۷..... | فصل ۲- مدل‌سازی و مطالعه‌ی ارتعاشات در نانولوله‌های کربنی    |
| ۱۸..... | ۱-۲- پیشینه‌ی پژوهش  |
| ۲۰..... | ۲-۲- مدل‌های پیوسته  |
| ۲۰..... | ۱-۲-۲- مدل‌های تیر   |
| ۲۱..... | ۲-۲-۲- مدل‌های پیوسته  |
| ۲۲..... | ۳-۲-۲- مدل‌های غیرموضعی                                      |
| ۲۳..... | ۳-۲- مدل‌سازی در مقیاس اتمی                                  |
| ۲۴..... | ۱-۳-۲- مکانیک ملکولی-سازه‌ای                                 |
| ۲۶..... | ۲-۳-۲- اجزاء محدود در مقیاس اتمی                             |
| ۲۸..... | ۳-۳-۲- دینامیک ملکولی  |
| ۳۰..... | ۴-۲- گونه‌های میرایی در نانولوله‌ها                          |
| ۳۱..... | ۵-۲- عیب‌های ساختاری نانولوله‌ها                             |
| ۳۳..... | فصل ۳- حل مسأله‌ی ارتعاش آزاد در نانولوله‌های کربنی بدون عیب |
| ۳۴..... | ۱-۳- رهیافت برگزیده  |
| ۳۴..... | ۱-۱-۳- سیستم‌های اتمی و انرژی پتانسیل                        |

|     |   |
|-----|---|
| ۳۶  | ۳-۱-۲- پتانسیل بین‌ملکولی تطبیقی                                  |
| ۳۹  | ۳-۱-۳- محدودیت‌های محاسباتی                                       |
| ۴۲  | ۳-۱-۴- شبیه‌سازی دینامیک ملکولی                                   |
| ۴۶  | ۳-۲- اعتبارسنجی راه‌حل  |
| ۴۸  | ۳-۲-۱- تحلیل خطا  |
| ۵۱  | <b>فصل ۴- اثر عیب حفره بر فرکانس‌های طبیعی نانولوله‌های کربنی</b> |
| ۵۲  | ۴-۱- مقدمه‌ی حل مسأله   |
| ۵۴  | ۴-۲- اثر تک عیب حفره  |
| ۵۵  | ۴-۲-۱- نانولوله‌های تک‌جداره                                      |
| ۵۹  | ۴-۲-۲- نانولوله‌های دو‌جداره                                      |
| ۶۵  | ۴-۳- اثر عیوب حفره با توزیع تصادفی                                |
| ۶۶  | ۴-۳-۱- نانولوله‌های تک‌جداره                                      |
| ۶۹  | ۴-۳-۲- نانولوله‌های دو‌جداره                                      |
| ۷۱  | <b>فصل ۵- محاسبه‌ی میرایی ترموالاستیک در نانولوله‌های کربنی</b>   |
| ۷۲  | ۵-۱- میرایی ترموالاستیک در مقیاس نانو                             |
| ۷۵  | ۵-۲- چند روش محاسبه‌ی میرایی                                      |
| ۷۶  | ۵-۳- مدل‌سازی نانولوله‌ها با میرایی ترموالاستیک                   |
| ۷۷  | ۵-۳-۱- شبیه‌سازی با رایانه  |
| ۸۲  | ۵-۳-۲- مقایسه‌ی نتایج   |
| ۸۴  | ۵-۳-۳- وابستگی ضریب کیفیت به دما                                  |
| ۸۵  | ۵-۳-۴- میرایی با تک عیب حفره                                      |
| ۸۷  | <b>فصل ۶- نتیجه‌گیری و راهکارها</b>                               |
| ۸۸  | ۶-۱- چکیده‌ی نتایج و جمع‌بندی                                     |
| ۸۹  | ۶-۱-۱- اثر عیب حفره   |
| ۹۱  | ۶-۱-۲- میرایی ترموالاستیک   |
| ۹۲  | ۶-۲- پیشنهادها  |
| ۹۵  | <b>پیوست ۱- ضابطه‌ی پتانسیل بین‌ملکولی تطبیقی</b>                 |
| ۱۰۳ | <b>پیوست ۲- نمونه‌ی فایل داده و فایل ورودی لمپس</b>               |
| ۱۰۶ | <b>مراجع</b>  |

## فهرست شکل‌ها

- شکل ۱-۱- آرایش الکترونی اتم کربن؛ (الف) در حالت پایه و (ب) در حالت برانگیخته [۱۰] ..... ۷
- شکل ۱-۲- تعداد و جهت‌گیری اوربیتال‌های هیبرید  $sp^1$  (خطی)،  $sp^2$  (مسطح مثلثی) و  $sp^3$  (چهاروجهی) [۱۰] ..... ۹
- شکل ۱-۳- (الف) گرافیت [۵] و (ب) ساختارهای آن [۸]، (ج) تصویری از گرافن [۶]، (د) ساختار الماس مکعبی [۸]، (ه) الماس شش‌ضلعی [۸] و (و) نانولوله‌های کربنی [۷] ..... ۱۰
- شکل ۱-۴- ورق دوبعدی گرافن و تعیین سلول واحد نانولوله [۱۵] ..... ۱۲
- شکل ۱-۵- (الف) نانولوله‌ی زیگزاگ‌نمای (۱۰,۰)، (ب) نانولوله‌ی صندلی‌نمای (۵,۵) و (ج) نانولوله‌ی دست‌سان (۷,۴) ..... ۱۴
- شکل ۱-۲- نمایش جزء تیر از قاب فضایی [۸۳] ..... ۲۴
- شکل ۲-۲- برهم‌کنش اتم‌ها در مکانیک ملکولی؛ (الف) تغییر طول پیوند، (ب) خمش، (ج) پیچش با تشکیل زاویه‌ی دووجهی، (د) پیچش برون‌صفحه‌ای و (ه) برهم‌کنش واندروالس [۸۳] ..... ۲۵
- شکل ۲-۳- (الف) نانولوله‌ی تک‌جداره‌ی (۱۰,۱۰) و (ب) جزء محدود در مقیاس اتمی برای نانولوله (خط‌چین‌ها راهنمای دید هستند) [۴۰] ..... ۲۷
- شکل ۲-۴- نانولوله‌ی (۸,۶)؛ (الف) یک‌سر‌گیردار و (ب) دو‌سر‌گیردار ..... ۲۸
- شکل ۲-۵- (الف) عیب حفره‌ی یگانه و (ب) عیب حفره‌ی دوگانه در نانولوله‌ی تک‌جداره [۸۹] ..... ۳۱
- شکل ۲-۶- (الف) نمایش اتصال زانویی میان نانولوله‌ی صندلی‌نمای (۵,۵) و نانولوله‌ی زیگزاگ‌نمای (۹,۰) و (ب) بازآرایی استون-ویلز و تشکیل عیب «۵-۷-۷-۵» [۷] ..... ۳۲
- شکل ۳-۱- چهار شکل مود نخست از ارتعاشات جانبی نانولوله‌ی (۵,۵) با یک سر‌گیردار و نسبت منطری  $L/d = ۱۵,۰۵$  ..... ۳۹
- شکل ۳-۲- فرکانس‌های طبیعی متناظر با چهار مود نخست از ارتعاشات جانبی نانولوله‌ی (۵,۵) با یک سر‌گیردار به‌ازای نسبت‌های منطری مختلف (در مرجع ۸۱ و مطالعه‌ی حاضر به‌ترتیب، روش‌های دینامیک ملکولی و تفاضل محدود به‌کار رفته‌اند) ..... ۴۰
- شکل ۳-۳- نمودار طیف دامنه برای نانولوله‌ی (۵,۵) با ۲۹۰ اتم و یک سر‌گیردار ..... ۴۵
- شکل ۳-۴- برخی از فرکانس‌های طبیعی نانولوله‌ی (۵,۵) با یک سر‌گیردار به‌ازای نسبت‌های منطری مختلف ..... ۴۶
- شکل ۳-۵- برخی از فرکانس‌های طبیعی نانولوله‌ی (۵,۵) با دو سر‌گیردار به‌ازای نسبت‌های منطری مختلف ..... ۴۷
- شکل ۳-۶- شکل مود نخست برای نانولوله‌ی دوجداره‌ی (۱۰,۱۰)@ (۵,۵) با ۱۳۲۰ اتم و دو سر‌گیردار ..... ۴۷
- شکل ۳-۷- خطای محاسبه‌ی فرکانس طبیعی برای نانولوله‌ی (۵,۵) با دو سر‌گیردار به‌ازای نسبت‌های منطری مختلف ..... ۴۸
- شکل ۴-۱- شکل‌های مود نخست نانولوله‌ی (۶,۰) و نانولوله‌ی (۱۳,۳)@ (۶,۰) با وجود عیب حفره (در شکل‌های ۴-۱-ج تا ۴-۱-و، دو دیواره‌ی درونی و بیرونی نانولوله‌ی دوجداره جداگانه رسم شده‌اند) ..... ۵۲
- شکل ۴-۲- سه نانولوله‌ی تک‌جداره‌ی (الف) صندلی‌نمای (۳,۳)، (ب) زیگزاگ‌نمای (۶,۰) و (ج) دست‌سان (۵,۲) ..... ۵۳
- شکل ۴-۳- جابه‌جایی تک عیب حفره (با رنگ قرمز) در راستای طول نانولوله‌ی (۵,۲) با طول ۵ nm و یک سر‌گیردار (حلقه‌ی آبی انتهای چپ) ..... ۵۴
- شکل ۴-۴- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۳,۳) با یک سر‌گیردار و طول‌هایی متفاوت ..... ۵۵
- شکل ۴-۵- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۶,۰) با یک سر‌گیردار و طول‌هایی متفاوت ..... ۵۶
- شکل ۴-۶- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۵,۲) با یک سر‌گیردار و طول‌هایی متفاوت ..... ۵۶
- شکل ۴-۷- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۳,۳) با دو سر‌گیردار و طول‌هایی متفاوت ..... ۵۷

شکل ۴-۸- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۶,۰) با دو سر گیردار و طول‌هایی متفاوت ..... ۵۷

شکل ۴-۹- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۵,۲) با دو سر گیردار و طول‌هایی متفاوت ..... ۵۸

شکل ۴-۱۰- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با یک سر گیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله واقع است) ..... ۵۹

شکل ۴-۱۱- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با یک سر گیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی بیرونی نانولوله واقع است) ..... ۶۰

شکل ۴-۱۲- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۱۳,۳)@(۶,۰) با یک سر گیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله واقع است) ..... ۶۱

شکل ۴-۱۳- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۱۱,۶)@(۵,۲) با یک سر گیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله واقع است) ..... ۶۱

شکل ۴-۱۴- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با دو سر گیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله واقع است) ..... ۶۲

شکل ۴-۱۵- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با دو سر گیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی بیرونی نانولوله واقع است) ..... ۶۳

شکل ۴-۱۶- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۱۳,۳)@(۶,۰) با دو سر گیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله واقع است) ..... ۶۳

شکل ۴-۱۷- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۱۱,۶)@(۵,۲) با دو سر گیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله واقع است) ..... ۶۴

شکل ۴-۱۸- عیوب حفره‌ی یگانه و دوگانه با توزیع تصادفی و تراکم تقریبی ۲٪ در نانولوله‌ی (۵,۲) با طول ۵ nm و (الف) و (ب) یک یا (ج) و (د) دو سر گیردار ..... ۶۶

شکل ۴-۱۹- اثر عیوب حفره‌ی یگانه با توزیع تصادفی بر فرکانس‌های اصلی (الف) نانولوله‌های صندلی‌نما و (ب) نانولوله‌های زیگزاگ‌نما با طول ۵ nm و یک سر گیردار ..... ۶۶

شکل ۴-۲۰- اثر عیوب حفره‌ی دوگانه با توزیع تصادفی بر فرکانس‌های اصلی (الف) نانولوله‌های صندلی‌نما و (ب) نانولوله‌های زیگزاگ‌نما با طول ۵ nm و یک سر گیردار ..... ۶۷

شکل ۴-۲۱- اثر عیوب حفره‌ی یگانه با توزیع تصادفی بر فرکانس‌های اصلی (الف) نانولوله‌های صندلی‌نما و (ب) نانولوله‌های زیگزاگ‌نما با طول ۵ nm و دو سر گیردار ..... ۶۸

شکل ۴-۲۲- اثر عیوب حفره‌ی دوگانه با توزیع تصادفی بر فرکانس‌های اصلی (الف) نانولوله‌های صندلی‌نما و (ب) نانولوله‌های زیگزاگ‌نما با طول ۵ nm و دو سر گیردار ..... ۶۸

شکل ۴-۲۳- اثر عیوب حفره‌ی یگانه و دوگانه با توزیع تصادفی بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با طول ۵ nm و یک یا دو سر گیردار ..... ۶۹

شکل ۵-۱- کنترل دمای نانولوله‌ی (۳,۳) با طول ۵ nm و یک سر گیردار در شبیه‌سازی با لَمپس ..... ۷۹

شکل ۵-۲- (الف) انرژی پتانسیل، کل انرژی و (ب) انرژی جنبشی نانولوله‌ی (۳,۳) در شبیه‌سازی با کنترل دما ..... ۷۹

شکل ۵-۳- (الف) انرژی پتانسیل، کل انرژی و (ب) انرژی جنبشی نانولوله‌ی (۳,۳) در شبیه‌سازی ارتعاشات نانولوله با انرژی ثابت ..... ۸۰

شکل ۵-۴- تغییرات دمای نانولوله‌ی (۳,۳) در مدت شبیه‌سازی (الف) با کنترل دما و (ب) با ثابت نگه‌داشتن انرژی ..... ۸۱

شکل ۵-۵- ضرایب کیفیت در مدت شبیه‌سازی برای نانولوله‌های (۳,۳)، (۶,۰) و (۵,۲) با طول ۵ nm و دو سر گیردار ..... ۸۳

شکل ۵-۶- ضریب کیفیت در مدت شبیه‌سازی برای نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با طول ۵ nm و شرایط مرزی متفاوت ..... ۸۳

شکل ۵-۷- تغییرات ضریب کیفیت در نانولوله‌ی (۳,۳) با طول ۵ nm و دو سر گیردار در مدت شبیه‌سازی‌هایی با کنترل دما در حدود ۱۰۰ K تا ۸۰۰ K ..... ۸۵

شکل ۵-۸- افزایش ضریب کیفیت نانولوله‌ی (۳,۳) با طول ۵ nm و دو سر گیردار به دلیل وجود تک عیب حفره‌ی یگانه در میانه‌ی ساختار آن ..... ۸۶

شکل پ ۱-۱- نمودارهای پتانسیل وابسته به زاویه‌ی دووجهی؛  $V(\omega)$  و پتانسیل پیچشی ملکولی  $T(\omega)$  که برای پیوندی یگانه میان دو اتم با حالت هیبریدشدگی  $sp^3$  و شش اتم جانشین یکسان به دست می‌آید [۹۲] ..... ۱۰۲

## فهرست جدول‌ها

|  |    |
|--|----|
| جدول ۱-۱- نمونه‌هایی از ویژگی‌های چند دگرشکل کربن .....  | ۱۱ |
| جدول ۱-۲- مروری بر برخی از پژوهش‌های پیشین .....   | ۱۹ |
| جدول ۱-۳- مقادیر فرکانس اصلی برای نانولوله‌ی (۵,۵) با یک سر گیردار .....                                     | ۴۱ |
| جدول ۱-۵- مقادیر میانگین ضریب کیفیت در مدت شبیه‌سازی برای سه نانولوله‌ی تک‌جداره با طول ۵ nm .....           | ۸۲ |
| جدول ۲-۵- مقادیر میانگین ضریب کیفیت در نانولوله‌ی (۳,۳) با طول ۵ nm در مدت شبیه‌سازی‌هایی با کنترل دما ..... | ۸۴ |

## فهرست علائم

|   |                             |
|---|-----------------------------|
| طول بردار پایه‌ی شبکه   | $a$                         |
| مساحت مقطع عرضی در جزء قاب فضایی  | $A$                         |
| بردارهای پایه‌ی شبکه  | $\vec{a}_1, \vec{a}_2$      |
| طول پیوند کربن-کربن در گرافیت   | $a_{C-C}$                   |
| عرض تیر   | $b$                         |
| تابع مرتبه‌ی پیوند  | $B_{ij}, b_{ij}$            |
| تابع فرضی مرتبه‌ی پیوند   | $b_{ij}^*$                  |
| بیشینه‌ی مرتبه‌ی پیوند  | $b_{ij}^{\max}$             |
| کمینه‌ی مرتبه‌ی پیوند   | $b_{ij}^{\min}$             |
| تراکم عیب حفره‌ی یگانه  | $c_1$                       |
| تراکم عیب حفره‌ی دو گانه  | $c_2$                       |
| بردار دست‌سازنی   | $\vec{C}_h$                 |
| تابع برگزیننده‌ی اتصال  | $C_{ij}$                    |
| ظرفیت گرمایی بر واحد حجم در فشار ثابت                                       | $C_p$                       |
| ظرفیت گرمایی در حجم ثابت  | $C_v$                       |
| قطر نانولوله‌ی کربنی تک‌جداره   | $d_t$                       |
| مدول یانگ جزء قاب فضایی، پتانسیل بین‌ملکولی تطبیقی، مقدار تک‌دمای مدول یانگ | $E$                         |
| انرژی تشدیدساز  | $E^*$                       |
| مقدار بی‌درروی مدول یانگ  | $E_{ad}$                    |
| انرژی مود   | $E_i$                       |
| جمله‌ی نماینده‌ی برهم‌کنش واندروالس در تابع پتانسیل                         | $E^{LJ}, E_{ij}^{LJ}$       |
| جمله‌ی شامل مرتبه‌ی پیوند در تابع پتانسیل                                   | $E^{REBO}, E_{ij}^{REBO}$   |
| جمله‌ی نماینده‌ی برهم‌کنش پیچشی در تابع پتانسیل                             | $E^{tors}, E_{kijl}^{tors}$ |
| تابع مشتق‌پذیر دلخواه، فرکانس اصلی نانولوله‌ی دارای عیب                     | $f$                         |
| مشتق تابع $f$   | $f'$                        |
| تابع محاسبه‌شده با خطا، درصد جابه‌جایی فرکانس                               | $\hat{f}$                   |
| بردار نیروی گره‌ها در قاب فضایی   | $\vec{f}$                   |
| فرکانس اصلی نانولوله‌ی بدون عیب   | $f.$                        |
| برایند نیروهای پایستار مؤثر بر ذره‌ی $i$                                    | $\vec{f}_i$                 |
| برایند نیروهای ناپایستار مؤثر بر اتم $i$                                    | $\vec{F}_i$                 |
| نیروهای گره $i$ در قاب فضایی  | $f_{xi}, f_{yi}, f_{zi}$    |
| نیروهای گره $j$ در قاب فضایی  | $f_{xj}, f_{yj}, f_{zj}$    |
| مدول برشی جزء قاب فضایی   | $G$                         |
| عمل انتقال، گام زمانی، اندازه‌ی گام تفاضل محدود                             | $h$                         |
| گشتاور اینرسی سطح   | $I$                         |
| دو گره از قاب فضایی   | $i, j$                      |

|  |  |
|--|--|
| پیوندهای اتم $i$ با اتم‌های $j$ و $k$                      | $ij, ik$                                 |
| شماره‌ی اتم‌ها یا ذرات                                     | $i, j, k, l$                             |
| گشتاور اینرسی قطبی   | $J$                                      |
| پیوند دو اتم $j$ و $k$                                     | $jk$                                     |
| ماتریس سفتی نانولوله                                       | $\tilde{K}$                              |
| ماتریس سفتی جزء قاب فضایی                                  | $\tilde{K}^e$                            |
| ثابت‌های نیرو  | $k_r, k_\theta, k_\tau$                  |
| پیوند دو اتم $k$ و $l$                                     | $kl$                                     |
| طول بردار دست‌ساز، طول نانولوله‌ی کربنی، طول بُعدی از ماده | $L$                                      |
| نسبت منظری نانولوله‌ی کربنی                                | $L/d$                                    |
| پیوند دو اتم $l$ و $j$                                     | $lj$                                     |
| جرم اتم کربن   | $m$                                      |
| بزرگی لنگر خمشی در جزء قاب فضایی                           | $M$                                      |
| جرم اتم $i$  | $m_i$                                    |
| لنگرهای گره $i$ در قاب فضایی                               | $m_{xi}, m_{yi}, m_{zi}$                 |
| لنگرهای گره $j$ در قاب فضایی                               | $m_{xj}, m_{yj}, m_{zj}$                 |
| مدول کشسانی متناظر با پایان همه‌ی واهلش‌ها                 | $M_R$                                    |
| مدول کشسانی پیش از اتمام واهلش‌ها                          | $M_U$                                    |
| عدد طبیعی دلخواه   | $n$                                      |
| بزرگی نیروی محوری در جزء قاب فضایی، شمار ذرات بی‌بعد       | $N$                                      |
| شمار اتم‌های نانولوله                                      | $\mathcal{N}$                            |
| شمار عیب حفره‌ی یگانه                                      | $\mathcal{N}_1$                          |
| شمار عیب حفره‌ی دوگانه                                     | $\mathcal{N}_2$                          |
| شاخص‌های دست‌ساز   | $(n, m)$                                 |
| شاخص‌های دست‌ساز برای دیواره‌ی درونی نانولوله              | $(n_i, m_i)$                             |
| شاخص‌های دست‌ساز برای دیواره‌ی بیرونی نانولوله             | $(n_o, m_o)$                             |
| زیرلایه‌ی الکترونی   | $p$                                      |
| ضریب کیفیت   | $Q$                                      |
| اتلاف انرژی  | $Q^{-1}$                                 |
| میرایی ترموالاستیک در تیر نازک با مقطع مستطیلی             | $Q_Z^{-1}$                               |
| طول پیوند  | $r$                                      |
| طول تعادلی پیوند   | $r.$                                     |
| بردارهای مکان ذرات بی‌بعد                                  | $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N$ |
| فاصله‌ی میان‌لایه‌ای نانولوله‌ی کربنی                      | $r_g$                                    |
| بردار شتاب اتم $i$   | $\ddot{\vec{r}}_i$                       |
| بردارهای مکان اتم‌های $i, j$ و $k$                         | $\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k$        |
| فاصله‌ی دو اتم $i$ و $j$                                   | $r_{ij}$                                 |
| بردار متصل‌کننده‌ی اتم $i$ به اتم $j$                      | $\vec{r}_{ij}$                           |



|   |  |
|---|--|
| بیشترین فاصله‌ی دو اتم $i$ و $j$ برای تأثیر بر برهم‌کنش لِنارد-جونز     | $r_{ij}^{LJ \max}$                       |
| کمترین فاصله‌ی دو اتم $i$ و $j$ برای تأثیر بر برهم‌کنش لِنارد-جونز      | $r_{ij}^{LJ \min}$                       |
| بیشینه‌ی طول پیوند $ij$   | $r_{ij}^{\max}$                          |
| کمینه‌ی طول پیوند $ij$  | $r_{ij}^{\min}$                          |
| فاصله‌ی دو اتم $i$ و $k$  | $r_{ik}$                                 |
| بردار متصل‌کننده‌ی اتم $i$ به اتم $k$                                   | $\vec{r}_{ik}$                           |
| فاصله‌ی دو اتم $j$ و $k$  | $r_{jk}$                                 |
| فاصله‌ی دو اتم $k$ و $l$  | $r_{kl}$                                 |
| شعاع دیواره‌ی نانولوله‌ی کربنی  | $r_t$                                    |
| شعاع دیواره‌ی درونی نانولوله  | $r_{t1}$                                 |
| شعاع دیواره‌ی بیرونی نانولوله   | $r_{t2}$                                 |
| زیرلایه‌ی الکترونی  | $s$                                      |
| توابع برگزیننده   | $S, S'$                                  |
| زمان، لحظه‌ی جاری، شناسه‌ی توابع برگزیننده                              | $t$                                      |
| بزرگی لنگر پیچشی در جزء قاب فضایی، دما، پتانسیل پیچشی ملکولی            | $T$                                      |
| بردار انتقال سلول واحد  | $\vec{T}$                                |
| دما   | $T$                                      |
| تابع مقیاس‌بندی مرتبه‌ی پیوند   | $t_b$                                    |
| تابع مقیاس‌بندی وزن پیوند   | $t_c$                                    |
| تابع مقیاس‌بندی فاصله   | $t_r$                                    |
| انرژی پتانسیل (بین‌اتمی)  | $U$                                      |
| بردار تغییرمکان گره‌ها در قاب فضایی، جابه‌جایی نانولوله از موقعیت تعادل | $\vec{u}$                                |
| تغییرمکان‌های محوری گره $i$ در قاب فضایی                                | $u_{xi}, u_{yi}, u_{zi}$                 |
| تغییرمکان‌های محوری گره $j$ در قاب فضایی                                | $u_{xj}, u_{yj}, u_{zj}$                 |
| بزرگی نیروی برشی در جزء قاب فضایی، پتانسیل پیچشی                        | $V$                                      |
| بردار سرعت نانولوله   | $\vec{v}$                                |
| پتانسیل خارجی   | $V_1$                                    |
| پتانسیل جفتی  | $V_2$                                    |
| پتانسیل سه‌ذره‌ای   | $V_3$                                    |
| برهم‌کنش جاذبه‌ی دوه‌دو   | $V_A, V_{ij}^A$                          |
| یک تابع پتانسیل برای دو اتم $i$ و $j$                                   | $V_{ij}$                                 |
| پتانسیل لِنارد-جونز   | $V_{ij}^{LJ}$                            |
| ضریب ضابطه‌ی پتانسیل پیچشی  | $V_k$                                    |
| پتانسیل $m$ -ذره‌ای   | $V_m$                                    |
| پتانسیل $N$ -ذره‌ای   | $V_N$                                    |
| برهم‌کنش دافعه‌ی دوه‌دو   | $V_R, V_{ij}^R$                          |
| پتانسیل پیچشی   | $V^{\text{tors}}$                        |
| وزن پیوندهای $lj$ و $kl$ ، $jk$ ، $ik$ ، $ij$                           | $w_{ij}, w_{ik}, w_{jk}, w_{kl}, w_{lj}$ |

|   |   |
|---|---|
| شناسه‌ی تابع $f$                                    | $x$                                     |
| نقطه‌ی مرجع محیط پیوسته، بردار مختصات اتم‌های متحرک | $\vec{x}$                               |
| مختصه‌ی مکان، مؤلفه‌ی سرعت و مؤلفه‌ی شتاب اتم       | $x, \dot{x}, \ddot{x}$                  |
| نقطه‌ی دلخواه محیط پیوسته                           | $\vec{x}'$                              |
| بردار مختصات اتم‌های متحرک در موقعیت تعادل          | $\vec{x}_e$                             |
| مختصات مکان ذره‌ی $i$                               | $x_i, y_i, z_i$                         |
| محورهای دستگاه مختصات                               | $x, y, z$                               |
| نسبت موقعیت تک عیب حفره به طول نانولوله             | $z/L$                                   |
| عمل دوران، ضریب خطی انبساط گرمایی                   | $\alpha$                                |
| مقاومت واهلش مدول یانگ                              | $\Delta_E$                              |
| مقاومت واهلش مدول                                   | $\Delta_M$                              |
| انرژی هدررفته در یک سیکل ارتعاش                     | $\Delta E^*$                            |
| تغییر طول پیوند                                     | $\Delta r$                              |
| گام زمانی   | $\Delta t$                              |
| تغییر زاویه‌ی پیوند                                 | $\Delta \theta$                         |
| زاویه‌ی دووجهی                                      | $\Delta \varphi$                        |
| زاویه‌ی پیچش برون صفحه‌ای                           | $\Delta \omega$                         |
| کرنش، ارتفاع مانع پتانسیل                           | $\epsilon$                              |
| مشتق زمانی کرنش                                     | $\dot{\epsilon}$                        |
| بیشینه‌ی کرنش                                       | $\epsilon_c$                            |
| خطای محاسبه‌ی تابع $f$                              | $\epsilon_f$                            |
| پارامترهای پتانسیل لِنارد-جونز                      | $\epsilon_{ij}, \sigma_{ij}$            |
| شکل مود نانولوله                                    | $\vec{\eta}_i$                          |
| زاویه‌ی دست‌سازنی                                   | $\theta$                                |
| تابع پله‌ی هویساید                                  | $\Theta$                                |
| زاویه‌ی تعادلی پیوند                                | $\theta_c$                              |
| زاویه‌ی میان پیوندهای $ij$ و $ik$                   | $\theta_{ijk}$                          |
| تغییر مکان‌های زاویه‌ای گره $i$ در قاب فضایی        | $\theta_{xi}, \theta_{yi}, \theta_{zi}$ |
| تغییر مکان‌های زاویه‌ای گره $j$ در قاب فضایی        | $\theta_{xj}, \theta_{yj}, \theta_{zj}$ |
| تابعی از شاخص‌های دست‌سازنی                         | $\kappa$                                |
| سفتی مود  | $\kappa_i$                              |
| تنش   | $\sigma$                                |
| مشتق زمانی تنش                                      | $\dot{\sigma}$                          |
| بیشینه‌ی تنش  | $\sigma_c$                              |
| زمان واهلش  | $\tau, \tau_Z$                          |
| زمان واهلش تنش                                      | $\tau_\epsilon$                         |
| زمان واهلش کرنش                                     | $\tau_\sigma$                           |
| ضریب نفوذ گرمایی جامد                               | $\chi$                                  |

---

فرکانس ارتعاش، زاویه‌ی دووجهی

$\omega$

زاویه‌ی دووجهی متناظر با اتم‌های  $i, j, k$  و  $l$

$\omega_{ijkl}$

---

# فصل ۱- مقدمه

محتوای فصل:

- ❖ فناوری نانو و نانولوله‌های کربنی
- ❖ دگرشکل‌های کربن: از گذشته تا امروز
- ❖ ساختارهای نانولوله‌ها و پدیده‌ی ارتعاش
- ❖ چهارچوب و اهداف گزارش

## ۱-۱- فناوری نانو و نانولوله‌های کربنی

امروزه دانش و فناوری نانو با وجود داشتن پیشینه‌ای اندک در مقایسه با دیگر علوم، به عرصه‌ای پویا در اندیشه‌ی بشر تبدیل شده‌اند و رشد روزافزون آن‌ها دستاوردها و چالش‌هایی فراوان را در زمینه‌های دانش‌بنیان و کاربردی برای پژوهشگران به همراه داشته‌است. ریشه‌های دانش نانو را با هر آن‌چه از علوم پایه؛ مانند فیزیک و شیمی وام می‌گیرد باید در میان سایر رشته‌های علمی جست‌وجو کرد؛ هرچند با در نظر گرفتن ماهیتی عام برای علم و فناوری نانو - که مطالعه‌ی سیستم‌ها و به‌کارگیری روش‌های مهندسی برای آن‌ها در مقیاس‌هایی بسیار کوچک است [۱ و ۲]- گسترش مرزهای این دو شتابی فزاینده دارد. کشف‌ها و اختراعات اخیر به پیشبرد فناوری نانو کمک‌هایی شایان نموده‌اند؛ برای نمونه می‌توان از نانولوله‌های کربنی [۳] و میکروسکوپ نیروی اتمی [۴] نام برد.

با گذشت کمی بیش از دو دهه از کشف نانولوله‌های کربنی، این مواد در دانش و فناوری نانو جایگاهی ویژه یافته‌اند و شناخت عمیق‌تر آن‌ها برای کاربردهای بالقوه و عملی همچنان هدفی عمده به شمار می‌رود. با بیانی کلی، نانولوله‌ها درشت‌ملکول‌هایی از اتم‌های کربن با ساختاری استوانه‌ای و باریک اند. بهره‌گیری از نانولوله‌های کربنی به عنوان نوک کاوشگر در میکروسکوپ‌های نیروی اتمی، سبب ارتقای قدرت تفکیک و عملکرد آن‌ها شده‌است [۵]. همچنین، عامل‌دار کردن انتهای نانولوله با گروه‌های شیمیایی، نمایش برهم‌کنش‌های ملکولی را در سطح نمونه‌ها ممکن ساخته‌است؛ از این‌رو، میکروسکوپ نیروی اتمی می‌تواند گزینه‌ای مناسب برای کاربرد در بسیاری از مطالعات شیمی و زیست‌شناسی باشد. گونه‌هایی از سیستم‌های نانو بر پایه‌ی نانولوله‌های کربنی عمل می‌کنند. در چنین سیستم‌هایی، نانولوله به‌صورت تیری یک‌سر گیردار است و معمولاً نقش یک حسگر فیزیکی یا عملگر را ایفا می‌نماید [۶]. به‌علاوه، نانولوله‌های کربنی مبنای ساخت حسگرهایی شیمیایی هستند که از حساسیتی زیاد، اندازه‌ای کوچک و توان مصرفی کمی برخوردارند [۵]. نسبت بزرگ سطح به حجم، یکی از ویژگی‌های نانولوله‌های کربنی است که به‌کارگیری آن‌ها را در حسگرهای شیمیایی و

زیست‌حسگرها ممتاز نموده‌است. دسترسی مناسب و مستقیم به هر اتم از نانولوله، امکان اعمال اغتشاش به آن و اندازه‌گیری تغییراتی که حاصل می‌شوند شاخص‌هایی اساسی برای کاربرد نانولوله‌های کربنی در ساختمان حسگرها محسوب می‌گردند [۶]. نمونه‌هایی فراوان از مواد مرکب موجودند که نانولوله‌هایی کربنی به عنوان الیاف، عملکرد آن‌ها را بهبود داده‌اند و پیش‌بینی می‌شود که با بهره‌مندی از این مزیت، قابلیت‌های مواد مرکب در آینده‌ای نه چندان دور، تصویرهایی بسیار را به واقعیت تبدیل کنند. ذخیره‌سازی هیدروژن برای هوای پاک، گسیل میدانی الکترون و تشکیل مدارهای مجتمع بر روی زیرلایه‌ی انعطاف‌پذیر تنها برخی از دیگر نقش‌های نانولوله‌های کربنی در دنیای فناوری هستند [۵ و ۶].

آنچه نانولوله‌های کربنی را در کانون توجه دانشمندان قرار می‌دهد خواص کم‌نظیر این دگرشکل‌های کربن است که در ادامه، به اختصار مرور شده‌اند. ممکن است نانولوله‌های کربنی فلزی یا نیمه‌رسانا باشند. از میانه‌ی دهه‌ی ۱۹۹۰، گام‌هایی بلند به‌سوی شناخت خواص الکترونی در نانولوله‌ها برداشته‌شد که گزارش همبستگی مستقیم آن‌ها و ساختار در نوعی نانولوله نمونه‌ی آشکار این دستاوردها است. خواص مکانیکی نانولوله‌ها نیز شایان توجه‌اند. نانولوله‌های کربنی سفت‌ترین و بااستحکام‌ترین الیافی هستند که تا کنون تولید شده‌اند؛ مدول یانگ<sup>۱</sup> و استحکام کششی آن‌ها در بهترین حالت می‌توانند به‌ترتیب، ۱۰۰۰ GPa و ۶۳ GPa باشند که هر یک، از مقادیر متناظر برای فولاد بسیار بزرگ‌ترند. ویژگی‌های یادشده به همراه چگالی کم، نانولوله‌ها را به‌صورت بالقوه برای کاربرد در سازه‌ها مهیا نموده‌است [۷]. تغییرشکل انواعی از نانولوله‌های کربنی، تغییر در خواص الکترونی آن‌ها را در پی دارد؛ از این‌رو، خواص الکترومکانیکی نانولوله‌ها مطالعه شده‌اند. حساسیت دیامغناطیسی<sup>۲</sup> نانولوله‌های کربنی زیاد است و با کاهش دما افزایش می‌یابد. می‌توان انتظار داشت که پاسخ الکتریکی نانولوله‌ها به یک میدان مغناطیسی جالب‌توجه باشد و در نتیجه، خواص الکترومغناطیسی نانولوله‌ها مورد بحث قرار گرفته‌اند [۵ و ۷]. برای یک نانولوله‌ی ویژه، رسانایی

---

۱- Young's modulus

۲- Diamagnetic susceptibility

گرمایی در دمای اتاق برابر با  $6600 \text{ W/(m.K)}$  محاسبه شده است. آزمایش‌های نخست برای تعیین خواص گرمایی در نانولوله‌های کربنی بر روی ریسمان‌ها<sup>۱</sup> یا دسته‌هایی<sup>۲</sup> از آن‌ها صورت گرفته‌اند. برای کلاف‌هایی<sup>۳</sup> از دسته‌های درهم‌تنیده‌ی ریسمان‌ها، گستره‌ی رسانایی گرمایی در دمای اتاق تقریباً  $2-35 \text{ W/(m.K)}$  اندازه‌گیری شده است؛ هرچند، تلاش برای برگرداندن این اعداد به مقادیر متناظر با ریسمان‌های جداگانه، رسانندگی گرمایی آن‌ها را در محدوده‌ی  $5800-1750 \text{ W/(m.K)}$  حاصل کرده است [۷]. به‌علاوه، خاصیت‌های ترموالکتریکی در نمونه‌های مختلف نانولوله‌های کربنی، با یکدیگر تفاوت‌هایی چشم‌گیر دارند [۵]. در اشاره به خواص نوری نانولوله‌ها شایان ذکر است که نمونه‌های نانولوله معمولاً سیاه به نظر می‌رسند. با وجود این، به‌دلیل آن‌که نور مرئی تا عمقی نسبتاً زیاد در نانولوله‌ها نفوذ می‌کند ممکن است لایه‌هایی بسیار نازک از آن‌ها شفاف باشند [۷].

کوچک‌ترین قطر مشاهده‌شده در آزمایش‌های گونه‌ای از نانولوله‌ها  $1.6 \text{ nm}$  است؛ بدین ترتیب، این گونه از نانولوله‌ها تنها با قطری به بزرگی یادشده یا بزرگ‌تر از آن پایدار هستند؛ اگرچه، قطری بحرانی با اندازه‌ی تقریبی  $0.4-0.6 \text{ nm}$  نیز برای پایداری نانولوله‌ها محاسبه شده است. انرژی کرنشی به‌ازای یک اتم از نانولوله‌ها که در تعیین پایداری آن‌ها اهمیت دارد وابسته به قطر نانولوله و مستقل از ساختار آن گزارش شده است. همچنین، پژوهشگران حد نهایی پایداری گرمایی را برای نوعی نانولوله با کمک آزمایشی تعیین کرده‌اند که نتیجه‌ی آن، پایدار ماندن نانولوله در مقیاس اتمی و دماهایی نزدیک به  $3000^\circ \text{C}$  بوده است. این رخداد حاکی از آن است که نانولوله‌های کربنی از گرافیت و الماس مقاوم‌ترند [۷].

انتهای باز یک نانولوله‌ی کربنی در مقایسه با دیواره‌ی آن واکنش‌پذیرتر است. نانولوله‌ها طبیعتی آب‌گریز دارند و انحلال‌پذیر ساختن آن‌ها با کمک عامل‌دار کردن با گونه‌هایی آب‌دوست از اهداف عمده‌ی مطالعاتی بوده است. اتصال ملکول‌ها به نانولوله‌ها بدون تشکیل پیوند شیمیایی، ساختار

---

۱- Ropes

۲- Bundles

۳- Mats

نانولوله‌ها را برهم نمی‌زند و در نتیجه، همه‌ی خواص آن‌ها حفظ می‌شوند. جذب سطحی ملکول‌هایی مانند اکسیژن بر روی نانولوله‌های کربنی با انتقال بار الکتریکی همراه است و پاسخ الکترونی نانولوله به جذب سطحی شیمیایی بسیار مورد توجه قرار گرفته‌است. می‌توان نانولوله‌های کربنی را با پروتئین‌ها یا اسیدهای نوکلئیک عامل‌دار کرد. مطالعه‌ی عامل‌داری نانولوله‌ها با زیست‌ملکول‌ها زمانی شکلی جدی به خود گرفت که آشکار شد نانولوله‌های عامل‌دار شده قادرند از غشای سلول عبور کنند و ممکن است بتوانند عوامل درمانی را به داخل سلول منتقل نمایند. با وجود این، پیش از چنین ملاحظاتی لازم است سمیت احتمالی نانولوله‌ها ارزیابی شود [۵ و ۷].

مطالعه‌ی خواص نانولوله‌های کربنی نیازمند شناخت انواع و ساختار هندسی آن‌ها همراه با درک برهم‌کنش‌هایی است که در این مواد، میان اتم‌های کربن رخ می‌دهند. از سوی دیگر، مقایسه‌ای میان نانولوله‌های کربنی و سایر شکل‌های عنصر کربن، به دریافتی دقیق‌تر از ماهیت و ویژگی‌های نانولوله‌ها می‌انجامد. از این‌رو، بخش بعدی به مروری بر دگرشکل‌های کربن اختصاص یافته‌است.

## ۱-۲- دگرشکل‌های کربن: از گذشته تا امروز

در سال‌های اخیر، پیشرفت‌هایی فراوان در زمینه‌ی شناخت کربن و پژوهش درباره‌ی آن حاصل شده‌اند که ارزیابی آن‌ها و درک تأثیری که بر شیمی، فیزیک و علم مواد گذاشته‌اند بدون آگاهی از شکل‌های دیرآشنای کربن؛ به‌ویژه گرافیت و الماس ناممکن می‌نماید [۸].

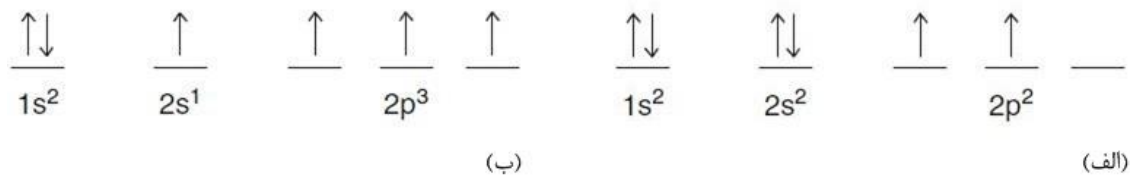
آشنایی بشر با زغال چوب و دوده و به‌کارگیری آن‌ها برای مقاصد گوناگون قدمتی چند هزارساله دارند. همچنین، پیشینه‌ای طولانی برای کاربرد گرافیت موجود است. در قرن نوزدهم، کاوش‌ها درباره‌ی عنصر کربن جهش پیدا نمودند و نقش محوری کربن در مواد آلی آشکار گردید. به‌علاوه، در این سده، ارائه‌ی آرایش چهاروجهی برای اتم‌های کربن با عدد هم‌آرایی چهار، تفسیری را که از فعالیت شیمیایی این عنصر وجود داشت دگرگون کرد. از آغاز تا اواسط قرن بیستم، کشف و کاربرد ایزوتوپ‌های کربن نکته‌ای قابل ذکر است. نخستین مشاهده‌ی فولرن‌ها در سال ۱۹۸۵ و



نانولوله‌های کربنی به عنوان دگرشکلی جدید در ۱۹۹۱، پژوهش را درباره‌ی کربن به پیش راندند و می‌توان از آن زمان، دوره‌ای جدید برای این عرصه‌ی علمی قائل شد. سرانجام، باید اشاره‌ای به الماس داشت که کشف آن به حدود ۴۰۰۰ سال پیش از میلاد باز می‌گردد. عصر الماس مصنوعی در سال ۱۹۵۵ آغاز شد و اندکی بعد، با کمک فشار ناشی از موج ضربه‌ی انفجار، گرافیت به الماس تبدیل شد. از میانه‌ی دهه‌ی ۱۹۶۰، نوعی کاملاً جدید از الماس علاوه بر گونه‌ی سنتی و کم‌وبیش حجیم آن در دسترس قرار گرفت که با رسوب‌دهی شیمیایی از بخار به‌دست می‌آید، به شکل لایه‌هایی نازک موجود است و پوشش‌دهی سطوح از کاربردهای آن محسوب می‌گردد. امروزه چندین ماده با نام الماس شناخته می‌شوند. شایان ذکر است که تا پایان قرن هجدهم، این واقعیت که الماس، گرافیت و دوده همگی عنصری واحد هستند پوشیده ماند [۸]. همانند الماس، فولرن‌ها انواعی متفاوت دارند؛ فازهایی دیگر از کربن موجودند که به گرافیت شبیه اند [۸] و با جست‌وجو در مراجع، می‌توان نام‌هایی تازه به فهرست دگرشکل‌های کربن افزود. از این‌رو، برای رعایت اختصار در مقدمه‌ی حاضر، تنها نمونه‌هایی از نظر خواهند‌گذشت که مقایسه‌ی نانولوله‌های کربنی با آن‌ها مفیدتر است. فراوانی دگرشکل‌های کربن و خواصی مجزا و گاهی متضاد که از خود بروز می‌دهند انگیزه‌ای برای مطالعه‌ی اتم‌های کربن و برهم‌کنش آن‌ها در چهارچوب دانش شیمی است.

### ۱-۲-۱- اتم‌های کربن و تشکیل پیوند

عنصر کربن نافلزی است که اتم مجزای آن دو الکترون نزدیک به هسته و چهار الکترون در لایه‌ی ظرفیت دارد. با کمک مدل کوانتومی، آرایش الکترونی حالت پایه در اتم یادشده  $1s^2 2s^2 2p^2$  است (شکل ۱-۱-الف). الکترون‌های  $1s$  در برقراری پیوند بین اتم کربن و دیگر اتم‌ها نقشی ندارند. چنین پیوندی نتیجه‌ی همپوشانی اوربیتال‌های اتمی است که هرگاه با به اشتراک گذاشتن جفت‌های الکترون همراه باشد پیوند کووالانسی نامیده می‌شود. نمونه‌هایی از این گونه، پیوندهایی هستند که میان اتم‌های کربن شکل می‌گیرند [۹].



شکل ۱-۱- آرایش الکترونی اتم کربن؛ (الف) در حالت پایه و (ب) در حالت برانگیخته [۱۰]

رخ دادن فرایندی مهم به نام هیبرید شدن<sup>۱</sup> سبب می‌گردد اتم کربن بتواند چهار پیوند تشکیل دهد. درباره‌ی این فرایند باید اشاره کرد که پیش از شکل‌گیری پیوند، اتم کربن حالتی برانگیخته پیدا می‌کند. یک الکترون از اوربیتال ۲s با دریافت اندکی انرژی، اوربیتال خالی ۲p را اشغال می‌نماید (شکل ۱-۳-ب) و اوربیتال‌های ۲p همگی نیمه‌پر می‌شوند؛ سپس سه رویداد برای الکترون باقی‌مانده‌ی ۲s و الکترون‌های ۲p امکان‌پذیرند؛ اوربیتال ۲s می‌تواند با یک، دو یا هر سه اوربیتال ۲p آمیخته شود که حاصل آن به‌ترتیب، اوربیتال‌های هیبرید  $2sp^1$ ،  $2sp^2$  و  $2sp^3$  است (شکل ۱-۲). اوربیتال هیبرید در مقایسه با اوربیتال‌های سازنده‌ی خود ویژگی‌هایی متفاوت دارد [۹ و ۱۰].

در حالت کلی، دو نوع پیوند شیمیایی بین اتم‌های کربن وجود دارند. چنان‌چه دو اوربیتال هیبرید ( $2sp^1$ ،  $2sp^2$  یا  $2sp^3$ ) در راستای میان هسته‌ها همپوشانی سربه‌سر داشته باشند پیوند سیگما<sup>۲</sup> شکل می‌گیرد که بسیار قوی است و در آن، چگالی بار الکتریکی در بین دو اتم کربن بیشینه است. به‌علاوه، امکان همپوشانی جانبی برای اوربیتال‌های p که بر محور بین دو هسته عمودند وجود دارد و نتیجه‌ی آن تشکیل پیوند پی<sup>۳</sup> است. در این نوع پیوند بر خلاف گونه‌ی سیگما تقارن چرخشی مشاهده نمی‌شود و بار الکتریکی در دو سوی محور گذرنده از هسته‌ها و موازی با آن تراکمی بیشتر دارد [۸-۱۰].

برای هر ملکول مورد نظر، با رسم ساختار لوویس<sup>۴</sup> و شمارش پیوندهای اتم کربن، می‌توان چگونگی هیبریدشدگی را در آن تعیین کرد. پیوندهای یادشده به تعداد اوربیتال‌هایی هیبرید هستند

۱- Hybridisation

۲- Sigma bond

۳- Pi bond

۴- Lewis structure

که در شکل‌گیری پیوند نقش داشته‌اند و شمار اوربیتال‌های هیبرید نوع آن‌ها را مشخص می‌کند (شکل ۱-۲). به عنوان نمونه، در ملکول اِتن ( $C_2H_4$ ) هر اتم کربن با دو اتم هیدروژن پیوند یگانه و با دیگر اتم کربن پیوند دوگانه دارد؛ بنابراین، میان دو اتم کربن، اوربیتال‌های هیبرید  $2sp^2$  یک پیوند سیگما تشکیل داده‌اند که به همراه یک پیوند پی، پیوندی دوگانه برقرار ساخته‌است. همچنین، اوربیتال‌های  $2sp^1$  و  $2sp^3$  به ترتیب، در پیوندهای کووالانسی سه‌گانه و یگانه سهم دارند [۱۰].

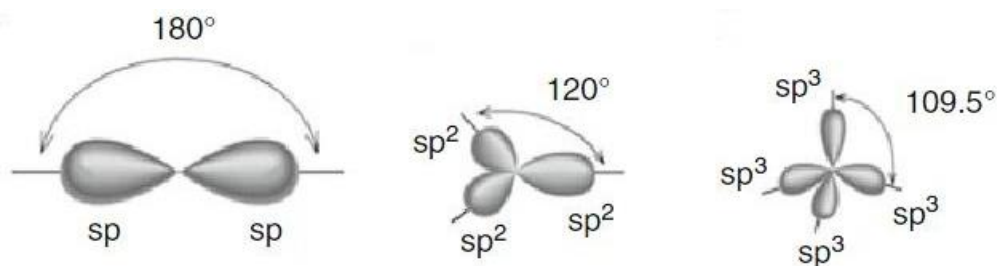
وجود پیوندهای پی بر طول پیوند و آنتالپی تشکیل آن اثرگذار است. برای مثال، فاصله‌ی دو اتم کربن در پیوند یگانه‌ی سیگما  $1,544 \text{ \AA}$  است؛ حال آن‌که این فاصله در پیوندهای دوگانه و سه‌گانه که شامل یک و دو پیوند پی هستند به ترتیب،  $1,334 \text{ \AA}$  و  $1,206 \text{ \AA}$  است [۸].

ماده‌ای که دارای اتم کربن باشد وابسته به حالت هیبریدشدگی در آن، ساختاری متفاوت دارد. هرگاه اوربیتال‌های  $2sp^1$  در پیوند اتم کربن سهمیم باشند زنجیره‌ای خطی حاصل می‌شود. از سوی دیگر، اوربیتال‌های  $2sp^2$  و  $2sp^3$  به ترتیب، با شکل‌گرفتن ساختارهایی مسطح و شبکه‌هایی چهاروجهی متناظرند (شکل ۱-۲) [۸]. در نتیجه، می‌توان انتظار داشت که پیوندهای کربن-کربن، آرایش اتم‌های کربن را در دگرشکل‌های این عنصر رقم بزنند. معرفی ساختار و خواص برخی از شکل‌های گوناگون کربن، موضوعی است که در ادامه به آن پرداخته می‌شود.

### ۱-۲-۲- مقایسه‌ی ساختارها و خواص

ساختار گرافیت از چیده شدن لایه‌هایی مسطح شامل اتم‌های کربن بر روی یکدیگر شکل می‌گیرد که هر لایه ضخامتی به اندازه‌ی یک اتم دارد (شکل ۱-۳-الف). فاصله‌ی لایه‌ها  $3,354 \text{ \AA}$  است و تنها برهم‌کنش‌های ضعیف واندروالس<sup>۱</sup> در میان آن‌ها، مجموعه‌ی ساختار را حفظ می‌کنند؛ از این‌رو، لایه‌های گرافیت به‌سادگی بر روی یکدیگر می‌لغزند. در هر یک از لایه‌ها، اتم‌های کربن در رئوس شش‌ضلعی‌هایی منتظم قرار دارند و شبکه‌ای دوبعدی تشکیل می‌دهند. پیوندهای کربن-کربن از نوع سیگما هستند و با هیبریدشدگی  $sp^2$  متناظرند. طول این پیوندها برابر با  $1,415 \text{ \AA}$  است [۸].

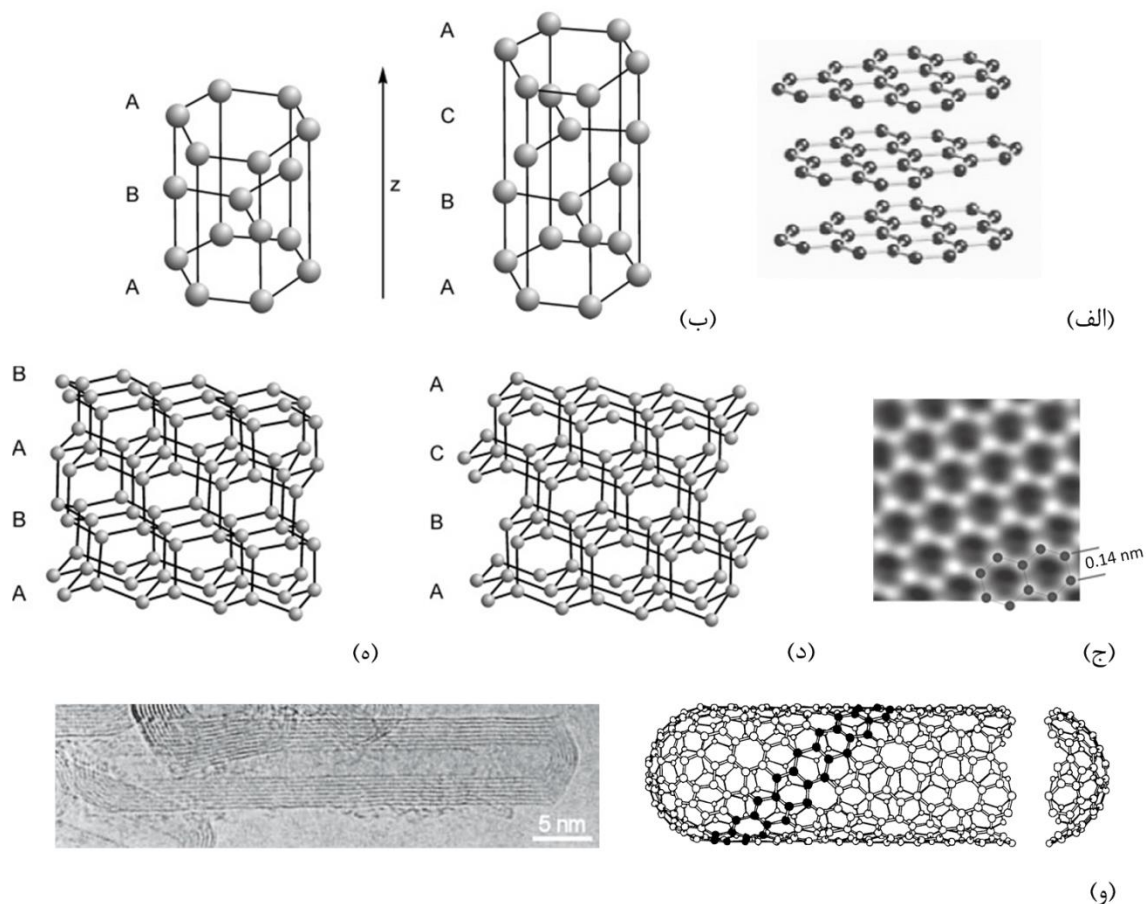
۱- Van der Waals



شکل ۱-۲- تعداد و جهت گیری اوربیتال‌های هیبرید  $sp^1$  (خطی)،  $sp^2$  (مسطح مثلثی) و  $sp^3$  (چهاروجهی) [۱۰]

الکترون‌هایی که در پیوندهای سیگما نقشی ندارند بین تمام اتم‌های لایه به اشتراک گذاشته می‌شوند؛ با بیان دیگر، ابری پیوسته شامل پیوندهای پی تشکیل می‌دهند و بدین سان، مانند گازی دوبعدی از الکترون رفتار می‌کنند. رسانایی الکتریکی ناهمسانگرد نمونه‌ای از خواصی است که به دلیل قابلیت جابه‌جایی الکترون‌های مزبور در ماده ایجاد می‌گردد. شکل ۱-۳-ب نماینده‌ی ساختارهای امکان‌پذیر برای گرافیت است [۸]. در سال ۲۰۰۴ برای نخستین بار، یک لایه‌ی جداگانه از ساختار گرافیت به‌دست آمد [۱۱] که گرافن نام دارد (شکل ۱-۳-ج). این دگرشکل کربن [۶] که در زمانی اندک، تلاش برای شناخت آن به موضوعی ویژه در پژوهش‌ها تبدیل شده‌است دارای ساختار و خواصی است که سبب می‌شوند مقایسه‌ی آن با نانولوله‌های کربنی در دانش و فناوری نانو بسیار راهگشا باشد. هر اتم کربن در الماس، چهار همسایه‌ی مجاور دارد که با آرایش چهار وجهی آن را احاطه کرده‌اند. هیبریدشدگی همه‌ی اتم‌ها به‌صورت  $sp^3$  و طول تمام پیوندها  $1.5445 \text{ \AA}$  است. همانند دو شکل ۱-۳-د و ۱-۳-ه؛ ساختار الماس می‌تواند به‌ترتیب، مکعبی یا شش‌ضلعی باشد که گونه‌ی نخست فراوانی بیشتری دارد. الماس‌های مکعبی و شش‌ضلعی، ساختارهایی سه‌بعدی و همسانگردند. شبکه‌ی بلور الماس «معمولی» مکعبی با وجوه مرکزپُر است [۸].

مطابق شکل ۱-۳-و، در نانولوله‌های کربنی، هر اتم در شبکه‌ای شش‌ضلعی قرار دارد و مجموعه‌ی اتم‌ها یک یا چند لایه‌ی استوانه‌ای تشکیل می‌دهند. ممکن است انتهای نانولوله باز باشد یا با کلاهکی بسته شده‌باشد [۷ و ۸]. اساس تشکیل پیوند در نانولوله‌های کربنی هیبریدشدگی  $sp^2$  است [۵]. در ادامه‌ی این فصل، انواع و ساختار نانولوله‌ها تشریح خواهند شد.



شکل ۱-۳- (الف) گرافیت [۵] و (ب) ساختارهای آن [۸]، (ج) تصویری از گرافن [۶]، (د) ساختار الماس مکعبی [۸]، (ه) الماس شش ضلعی [۸] و (و) نانولوله‌های کربنی [۷]

در جدول ۱-۱، نمونه‌هایی از برخی مشخصه‌های نانولوله‌های کربنی، گرافن، گرافیت و الماس فهرست شده‌اند. شایان ذکر است که اندک بودن مشخصه‌ها به دلیل رعایت مقایسه‌پذیری آن‌ها و محدودیت ادبیات موضوعی در این زمینه است؛ به علاوه، کوشش شده‌است تا برای دقیق‌تر بودن مقایسه‌ها، مقادیری که حاصل آزمایش‌هایی تازه هستند ارائه شوند. از سوی دیگر، باید توجه داشت که ممکن است در مطالعات مختلف، نمونه‌های مدل‌شده یا آزمایش‌شده خود، ساختارهایی متفاوت داشته باشند. با وجود تلاش برای پرهیز از چنین تفاوت‌هایی در انتخاب مشخصه‌های جدول ۱-۱، خاطرنشان می‌شود که هدف از درج آن‌ها تنها به دست آوردن دیدگاهی کلی درباره‌ی نانولوله‌های کربنی در قیاس با سه نمونه‌ی مهم از سایر دگرشکل‌های کربن است. به‌ویژه، مقایسه‌ی خواص مکانیکی و گرمایی فهرست‌شده در جدول ۱-۱، با موضوع گزارش حاضر متناسب است.

جدول ۱-۱- نمونه‌هایی از ویژگی‌های چند دگرشکل کربن

| مشخصه                        | نانولوله‌های کربنی            | مرجع | گرافن      | مرجع | گرافیت             | مرجع    | الماس     | مرجع |
|------------------------------|-------------------------------|------|------------|------|--------------------|---------|-----------|------|
| ظاهر                         | معمولاً سیاه*                 | [۷]  | بسیار شفاف | [۱۲] | سیاه با درخشش فلزی | [۸]     | بی‌رنگ    | [۸]  |
| مدول یانگ (TPa)              | ۱٫۰                           | [۷]  | ۱٫۰        | [۱۲] | ۰-۰٫۹۵۰            | [۹]     | ۱٫۲۲      | [۹]  |
| استحکام کششی (GPa)           | ۳۰                            | [۷]  | ۱۳۰        | [۱۲] | ۰٫۰۰۴۸             | [۹]     | >۱٫۲      | [۹]  |
| نسبت پواسون                  | ۰٫۱-۰٫۳                       | [۱۴] | ~۰٫۱       | [۱۳] | ۰٫۱۷               | [۱۴]    | ۰٫۲       | [۹]  |
| رسانایی گرمایی (W/(m.K))     | >۳۰۰۰                         | [۷]  | ~۵۰۰۰      | [۱۲] | ۲-۲۰۰۰             | [۹ و ۷] | ۲۰۰۰-۲۶۰۰ | [۹]  |
| شکاف انرژی <sup>۱</sup> (eV) | ۰ تا مرتبه‌ی ۱۰ <sup>-۲</sup> | [۷]  | ۰          | [۱۲] | ۰                  | [۸]     | ۵٫۵       | [۸]  |

\* نمونه‌های<sup>۲</sup> نانولوله

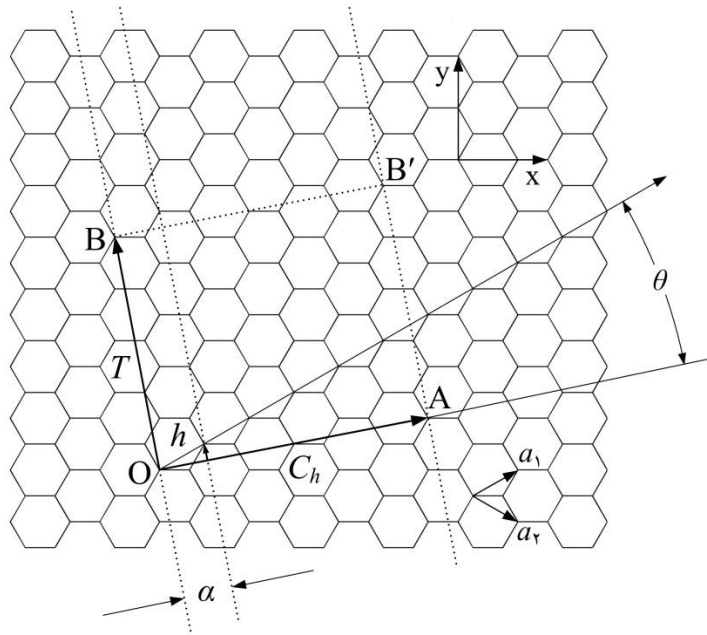
### ۱-۳- ساختارهای نانولوله‌ها و پدیده‌ی ارتعاش

نانولوله‌های کربنی به دو گونه‌ی تک‌جداره و چندجداره دسته‌بندی می‌شوند. آرایش فضایی اتم‌های کربن در هر دیواره‌ی نانولوله‌ای چندجداره همانند یک نانولوله‌ی تک‌جداره است (شکل ۱-۳-و)؛ بنابراین، گام نخست برای شناخت ساختار نانولوله‌ها، محاسبه‌ی مکان اتم‌ها در نانولوله‌ای تک‌جداره با ساختاری بدون عیب است. یادآوری می‌شود که در این گزارش، نانولوله‌هایی کربنی با دو انتهای باز مطالعه می‌گردند؛ از این‌رو، در بخش حاضر، به هندسه‌ی کلاهک در نانولوله‌ها پرداخته نخواهد شد.

با توجه به شکل ۱-۴، می‌توان ساختار نانولوله‌ای تک‌جداره را با گرد کردن یک ورق گرافن به‌صورت فرضی و منطبق ساختن دو لبه‌ی آن بر یکدیگر به‌دست آورد. با بیانی دقیق‌تر، سلول واحد نانولوله‌ی کربنی که ساختار نانولوله از تکرار الگوی آن در فضا شکل می‌گیرد دارای ساختمانی است که به روش یادشده تشکیل خواهد شد. در شکل ۱-۴، مستطیل OAB'B نماینده‌ی سلول واحد برای یک نانولوله‌ی معین است؛ همچنین، بردار  $\vec{T}$  هم‌راستای محور نانولوله است؛ ساختار سلول واحد موازی با آن و به اندازه‌ی آن انتقال می‌یابد و بدین ترتیب، طول نانولوله افزایش پیدا می‌کند [۱۵].

۱- Band gap

۲- Samples



شکل ۱-۴- ورق دوبعدی گرافن و تعیین سلول واحد نانولوله [۱۵]

### ۱-۳-۱- روابط هندسی در ساختارها

با دقت در شکل ۱-۴، ملاحظه می‌شود که طول و جهت بردار  $\vec{C}_h$  در تعیین ساختار سلول واحد برای نانولوله‌ای تک‌جداره نقش دارند. برای سنجش جهت مزبور، زاویه  $\theta$  بین  $\vec{C}_h$  و راستای زیگزاگی که با پیکان خارج‌شده از نقطه‌ی O مشخص شده‌است تعریف می‌شود. واضح است که جهت‌گیری آرایش اتم‌ها در سلول واحد به  $\theta$  وابسته است؛ هرچند ساختارهای یکتا برای سلول واحد، تنها به‌ازای مقادیر  $0^\circ \leq \theta \leq 30^\circ$  حاصل می‌گردند. همچنین، با فرض آن که ورق گرافن گرد شود،  $\vec{C}_h$  بر پیرامون نانولوله منطبق خواهد شد؛ در نتیجه، می‌توان قطر نانولوله را به عنوان تابعی از طول  $\vec{C}_h$  نوشت. از سوی دیگر، اثبات می‌شود که طول  $\vec{T}$  که عمود بر  $\vec{C}_h$  است به طول  $\vec{C}_h$  بستگی دارد؛ بنابراین،  $\vec{T}$  عملاً نقشی در تعیین سلول واحد نخواهد داشت. با جمع‌بندی نکات ذکرشده، آشکار می‌گردد که چنانچه دو پارامتر؛ یعنی زاویه  $\theta$  و قطر نانولوله با نماد  $d_t$  معلوم باشند ساختار سلول واحد آن به‌دست می‌آید. اگرچه  $\theta$  و  $d_t$  به یکدیگر وابسته اند این وابستگی تابعی نیست. برای محاسبه‌ی قطر، لازم است  $\vec{C}_h$  برحسب بردارهای پایه‌ی شبکه که در شکل ۱-۴،  $\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$  هستند نوشته شود. طول پیوند کربن-کربن در گرافیت  $a_{C-C} = 1,421 \text{ \AA}$  است؛ از این‌رو،

$$a_1 = a_r = a = \sqrt{3}a_{C-C} = 2,46 \text{ \AA}, \quad (1-1-f)$$

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

لازمه‌ی منطبق شدن نقطه‌ی O بر نقطه‌ی A (یا B بر B') در شکل ۱-۴ آن است که O (یا B) با یک یا چند انتقال در جهت  $\vec{a}_1$  و/یا  $\vec{a}_r$  و هر بار به اندازه‌ی طول آن‌ها به A (یا B') نگاشته شود؛ به علاوه، برداری است که نقطه‌ی O را به A می‌نگارد. بنابراین،

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_r \quad (2-1)$$

که  $n$  و  $m$  دو عدد صحیح نامنفی هستند. طول  $\vec{C}_h$  با نماد  $L$  از معادله‌ی

$$L = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (3-1)$$

حاصل می‌شود و با یادآوری رابطه‌ی  $d_t$  و  $L$  که به آن اشاره شد، می‌توان قطر نانولوله را به صورت

$$d_t = \frac{L}{\pi} = \frac{\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}{\pi} a \quad (4-1)$$

برحسب  $n$  و  $m$  به دست آورد. همچنین،  $\theta$  به عنوان تابعی از  $n$  و  $m$  با ضابطه‌ی

$$\theta = \tan^{-1} \frac{\sqrt{3}m}{2n + m} \quad (5-1)$$

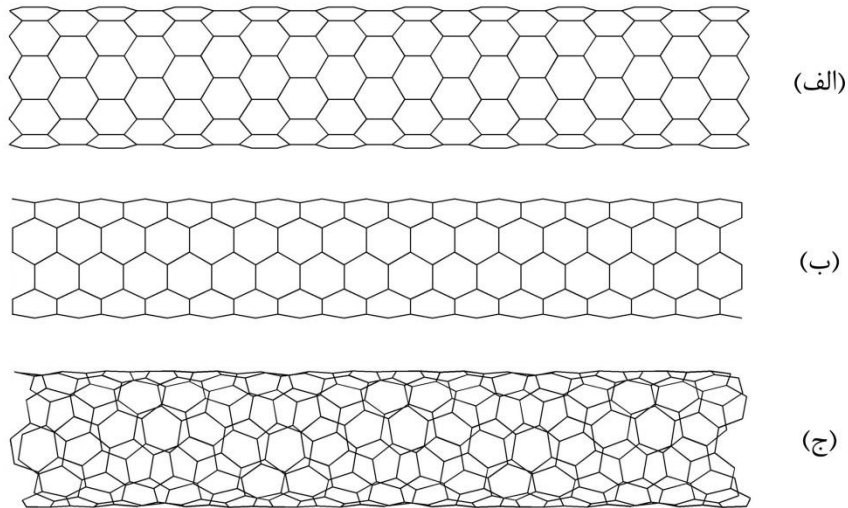
قابل نمایش است. در نتیجه، می‌توان ساختار سلول واحد نانولوله را به جای  $\theta$  و  $d_t$  با کمک زوج  $(n, m)$  تعیین نمود. شرط‌های  $n > 0$  و  $0 \leq m \leq n$  برای حاصل شدن ساختارهای یکتا بر  $n$  و  $m$  اعمال می‌شوند. نامساوی مضاعف یادشده  $m$  را به  $n$  وابسته می‌سازد [۱۵ و ۱۶].

مطابق شکل ۱-۵، جهت‌گیری اتم‌ها در ساختار نانولوله‌ی تک‌جداره با توجه به مقادیر  $\theta$  به سه صورت کلی تقسیم‌بندی می‌شود؛  $\theta = 0^\circ$ ،  $\theta = 30^\circ$  و  $0^\circ < \theta < 30^\circ$ . به ترتیب، با نانولوله‌های «زیگزاگ‌نما»، «صندلی‌نما» و «دست‌سان» متناظرند. با دقت در شکل ۱-۵، ظاهر نانولوله‌های ترسیم‌شده دلیل این نام‌گذاری‌ها را آشکار می‌سازد [۱۵].

---

۱- Zigzag nanotubes  
۲- Armchair nanotubes  
۳- Chiral nanotubes





شکل ۱-۵- (الف) نانولوله‌ی زیگزاگ‌نمای (۱۰,۰)، (ب) نانولوله‌ی صندلی‌نمای (۵,۵) و (ج) نانولوله‌ی دست‌سان (۷,۴)

الگوی قرار گرفتن اتم‌ها در محیط نانولوله‌ی شکل ۱-۵- الف زیگزاگ است و در شکل ۱-۵- ب مشابه صندلی است. همچنین، نانولوله‌های دست‌سان برخلاف دو گونه‌ی دیگر و مانند دست، با تصویر آینه‌ای خود یکسان نیستند (شکل ۱-۵- ج). بنا بر معادله‌ی (۱-۵)، به‌ازای  $\theta = 0^\circ$ ،  $m = 0$  و چنان‌چه  $\theta = 30^\circ$ ،  $m$  با  $n$  برابر است. از این‌رو، نانولوله‌های  $(n,0)$  و  $(n,n)$  به‌ترتیب، زیگزاگ‌نما و صندلی‌نما هستند. سایر مقادیر  $(n,m)$  نیز نانولوله‌های دست‌سان را مشخص می‌کنند. شایان ذکر است که  $(n,m)$  شاخص‌های دست‌سانی<sup>۱</sup>،  $\theta$  زاویه‌ی دست‌سانی و  $\vec{C}_h$  بردار دست‌سانی نام دارند [۹ و ۱۵].

برای نانولوله‌های کربنی چندجداره، مسأله‌ی مهم در تعیین ساختار هندسی، محاسبه‌ی شاخص‌های دست‌سانی متناظر با دیواره‌های مجاور است. چنان‌چه  $(n_1, m_1)$  و  $(n_2, m_2)$  به‌ترتیب، شاخص‌های دست‌سانی دیواره‌ای درونی و دیواره‌ی بیرونی مجاور آن باشند فاصله‌ی دو دیواره - که به دو استوانه‌ی هم‌محور شباهت دارند- سبب برقراری رابطه‌ای میان زوج‌های اعداد مزبور می‌شود. شعاع دیواره‌ی بیرونی حاصل جمع فاصله‌ی میان‌لایه‌ای  $r_g$  و شعاع دیواره‌ی درونی است؛ با بیان ریاضی،

$$r_{t2} = r_{t1} + r_g \quad (۶-۱)$$

به‌علاوه،  $r_g = 3,4 \text{ \AA}$  و مطابق معادله‌ی (۱-۴)، شعاع هر دیواره با ضابطه‌ی

۱- Chiral indices

$$r_t = \frac{d_t}{\gamma} = \frac{\sqrt{n^{\gamma} + m^{\gamma} + nm}}{2\pi} a \quad (7-1)$$

تابع شاخص‌های دست‌سازنی آن است. در نتیجه، با تعریف

$$\kappa(n_1, m_1) = \left[ \frac{2\pi(r_{t1} + r_g)}{a} \right]^{\gamma} \quad (8-1)$$

معادله‌ی (۶-۱) به صورت

$$m_{\gamma}^{\gamma} + m_{\gamma} n_{\gamma} + n_{\gamma}^{\gamma} - \kappa(n_1, m_1) = 0 \quad (9-1)$$

بازنویسی می‌شود. با معلوم بودن  $(n_1, m_1)$ ، می‌توان با انتخاب مقداری برای  $n_{\gamma}$  و محاسبه‌ی  $m_{\gamma}$  از

معادله‌ی (۹-۱)، بردار دست‌سازنی دیواره‌ی بیرونی را تعیین کرد [۹].

### ۱-۳-۲- شبکه‌ی بلور و ارتعاشات

پرسشی که به‌طور طبیعی پس از شناخت ساختار نانولوله‌ها مطرح می‌گردد درباره‌ی امکان تغییرشکل آن بر اثر برهم‌کنش‌های درون‌ملکولی و/یا اعمال نیروهای خارجی بر نانولوله‌ها است. به‌ویژه، اگر ساختار این درشت‌ملکول‌ها با گذر زمان، تغییرشکل داشته‌باشد با توجه به قیدهایی که می‌توان در عمل، برای حرکت نانولوله در نظر گرفت مطالعه‌ی پدیده‌ی ارتعاش در نانولوله‌های کربنی از دیدگاه مهندسی مکانیک، موضوعی قابل بحث است.

مجموعه‌ای از اتم‌های کربن در هر نانولوله که میان آن‌ها پیوند شیمیایی برقرار است آرایشی فضایی دارند که شبکه‌ی بلور نامیده می‌شود. اتم‌های موجود در این شبکه، به‌دلیل برهم‌کنش با یکدیگر، به‌صورت ذاتی حول موقعیت‌هایی تعادلی نوسان می‌کنند. اکنون می‌توان به‌سادگی تصویری ذهنی از همبستگی این نوسان‌های اتمی و وجود حرکت در سراسر شبکه‌ی بلور به‌دست آورد. شایان ذکر است که در چنین حرکتی، سرعت‌های گروهی از اتم‌ها با تعریف دما مرتبط اند.

از سوی دیگر، چنان‌چه حرکات اتم‌ها بدون در نظر گرفتن ساختار درونی آن‌ها و پیوندهای شیمیایی در قالب نیروهای بین‌اتمی و نسبتاً ساده مد نظر باشند برای شناخت ارتعاشات در نانولوله‌ها،

امکان مدل‌سازی آن‌ها به عنوان سیستم‌هایی ارتعاشی فراهم می‌گردد و این موضوعی است که در دانش مکانیک، به‌طور گسترده به آن پرداخته می‌شود. جرم اتم‌ها، نیروهای بازگرداننده در پیوندهای شیمیایی و اتلاف انرژی در نانولوله‌ها که سبب میرایی حرکت آن‌ها می‌شود همگی بر رویداد ارتعاش مؤثرند. بنا بر آن چه ذکر شد، می‌توان در مهندسی مکانیک، ارتعاشات نانولوله‌ها را مطالعه کرد.

## ۱-۴- چهارچوب و اهداف گزارش

در فصل ۲ از گزارش حاضر مروری بر ادبیات موضوعی صورت گرفته‌است و مدل‌های پیشنهادشده برای مطالعه‌ی ارتعاشات در نانولوله‌های کربنی به اختصار معرفی شده‌اند. همچنین، گونه‌های میرایی و عیوب ساختاری در نانولوله‌ها به‌دلیل تناسبی که با محتوای ادامه‌ی گزارش دارند در فصل ۲ مرور شده‌اند. حل مسأله‌ی مقدار ویژه برای ارتعاشات نانولوله‌هایی با ساختار بدون عیب، موضوع فصل ۳ را تشکیل داده‌است. به‌علاوه، در این فصل، رهیافت برگزیده برای حل مسأله‌ی مزبور تشریح شده‌است و اعتبارسنجی نتایج محاسبات، بحث را کامل می‌کند. فصل ۴ به مطالعه‌ی اثر عیب حفره بر پاسخ ارتعاش آزاد نانولوله‌ها اختصاص دارد. تغییرات فرکانس‌های طبیعی و شکل‌های مود در نانولوله‌های تک‌جداره و دوجداره به‌دلیل وجود تک عیب حفره یا عیب حفره با توزیع تصادفی در ساختار نانولوله، گزارش شده‌اند. در فصل ۵، روشی برای محاسبه‌ی میرایی ترموالاستیک در نانولوله‌های کربنی ارائه شده‌است که بر مبنای شبیه‌سازی با رایانه است. همچنین، در توضیح جزئیات روش یادشده به پژوهش‌های پیشین استناد شده‌است و مقادیر به‌دست‌آمده برای ضریب کیفیت در نمونه‌هایی از نانولوله‌های کربنی فهرست شده‌اند. شبیه‌سازی صورت‌گرفته با نرم‌افزاری ویژه اجرا شده‌است که مقدمه‌ای بر آن، بخشی دیگر از فصل ۵ است. چکیده‌ای از نتایج مطالعات و حاصل مقایسه‌ی آن‌ها در فصل ۶ - که واپسین فصل گزارش حاضر است - ارائه شده‌اند. سرانجام، جمع‌بندی یافته‌ها و چند پیشنهاد برای گسترش و پیشبرد پژوهش‌ها درباره‌ی ارتعاشات نانولوله‌های کربنی، در خاتمه‌ی متن گزارش از نظر خواهند‌گذشت.

# فصل ۲- مدل سازی و مطالعه ارتعاشات در نانولوله های کربنی

محتوای فصل:

- ❖ پیشینه ی پژوهش
- ❖ مدل های پیوسته
- ❖ مدل سازی در مقیاس اتمی
- ❖ گونه های میرایی در نانولوله
- ❖ عیب های ساختاری نانولوله ها

## ۲-۱- پیشینه‌ی پژوهش

مقاله‌ای که گیبسون<sup>۱</sup> و دیگران [۱۷] درباره‌ی ارتعاشات نانولوله‌های کربنی و مواد مرکب شامل آن‌ها تألیف کرده‌اند اهمیت پدیده‌ی ارتعاش را در نانولوله‌ها آشکار می‌سازد. برای نمونه، تعیین خواص مکانیکی در نانولوله‌های کربنی با کمک اندازه‌گیری ارتعاشات آن‌ها امکان‌پذیر است. ممکن است چنین ارتعاشاتی با تشدید نانولوله پدید آیند [۱۸-۲۰] یا به‌طور طبیعی در آن وجود داشته باشند [۲۱-۲۳] که در این حالت، ارتعاشات گرمایی ذاتی نامیده می‌شوند. مشاهده و ثبت ارتعاشات نانولوله‌ها، در مطالعه‌ی خواص ارتعاشی آن‌ها نقش داشته‌اند [۲۴ و ۲۵]. با وجود این، مروری بر ادبیات موضوعی منتشرشده در یک دهه‌ی اخیر نشان می‌دهد که رهیافت‌های نظری و شبیه‌سازی، ابزارهایی قدرتمند برای تحلیل ارتعاشات در نانولوله‌های کربنی محسوب می‌گردند. همچنین، محدودیت‌هایی عملی که مشاهده‌ی رفتار و سنجش خواص در نمونه‌های واقعی نانولوله به همراه دارند می‌تواند عاملی برای روی آوردن پژوهشگران به مدل‌سازی ارتعاشات نانولوله‌ها با کمک رایانه بوده‌باشد. از منظر کاربردی، محققان این اشیاء نانومقیاس را در ساختمان تشدیدسازها<sup>۲</sup> [۲۶-۲۹]، نوسانگرها [۳۰ و ۳۱] و حسگرها [۳۲-۳۴] به‌کار گرفته‌اند و بدیهی است که پژوهش‌های نظری نیز، به درک بهتر خواص در سیستم‌هایی ارتعاشی که بر پایه‌ی نانولوله‌های کربنی عمل می‌کنند کمکی شایان نموده‌اند. از این‌رو در جدول ۱-۲، برخی از مهم‌ترین دستاوردهای پژوهشی که نتیجه‌ی مطالعه‌ی ارتعاشات در نانولوله‌ها از دیدگاه نظری هستند با رعایت ترتیب زمانی مرور شده‌اند. به‌علاوه، معرفی جزئیاتی از مدل‌های ارائه‌شده برای تحلیل ارتعاشات در نانولوله‌ها که دو بخش بعدی به آن اختصاص یافته‌اند زمینه‌ساز استدلال درباره‌ی انتخاب رهیافتی مناسب برای تعیین اثر عیب حفره بر خواص ارتعاشی نانولوله‌های کربنی است. همچنین در ادامه‌ی این فصل، اشاره‌ای به گونه‌های میرایی و عیوب ساختاری در نانولوله‌ها امکان تعریف دقیق مسأله را فراهم می‌کند.

---

۱- Gibson

۲- Resonators

جدول ۱-۲- مروری بر برخی از پژوهش‌های پیشین

| مرجع | رهیافت/مدل                            | نوع نانولوله | دستاورد                             | پژوهشگران                         |
|------|---------------------------------------|--------------|-------------------------------------|-----------------------------------|
| [۳۵] | دینامیک ملکولی                        | تک‌جداره     | تشخیص ارتعاش خودانگیخته             | ژو <sup>۱</sup> و شی <sup>۲</sup> |
| [۳۶] | تیرهای چندگانه‌ی کشسان                | چندجداره     | فرکانس‌های تشدید ناهم‌محور          | یون <sup>۳</sup> و دیگران         |
| [۳۷] | مکانیک ملکولی-سازه‌ای                 | تک‌جداره     | نانوتشدیدساز با فرکانس اصلی بزرگ    | لی <sup>۴</sup> و چو <sup>۵</sup> |
| [۳۸] | تیرهای چندگانه‌ی کشسان                | چندجداره     | رفتار ارتعاشی در زمینه‌ای کشسان     | یون و دیگران                      |
| [۳۹] | مکانیک ملکولی-سازه‌ای                 | دو‌جداره     | شناخت تشدیدسازهای نانومکانیکی       | لی و چو                           |
| [۴۰] | اجزاء محدود در مقیاس اتمی             | تک‌جداره     | شناسایی مود انبساطی ارتعاش          | لیو <sup>۶</sup> و دیگران         |
| [۴۱] | مکانیک ملکولی-سازه‌ای                 | تک‌جداره     | تعیین جرم با موازنه در مقیاس نانو   | لی و چو                           |
| [۴۲] | مکانیک ملکولی-سازه‌ای                 | تک‌جداره     | نانولوله به عنوان حسگر کرنش و فشار  | لی و چو                           |
| [۴۳] | پوسته‌های چندگانه‌ی کشسان             | چندجداره     | اثر فشار بر مودهای تنفس شعاعی       | وانگ <sup>۷</sup> و دیگران        |
| [۴۴] | لوله‌ی کشسان                          | چندجداره     | ارتعاشات و ناپایداری با انتقال سیال | یون و دیگران                      |
| [۴۵] | تیرهای دوگانه‌ی تیموشنکو <sup>۸</sup> | دو‌جداره     | فرکانس‌های تشدید نانولوله‌ی کوتاه   | یون و دیگران                      |
| [۴۶] | تیرهای دوگانه‌ی کشسان                 | دو‌جداره     | ارتعاش جانبی با بار محوری فشاری     | ژانگ <sup>۹</sup> و دیگران        |
| [۴۷] | الاستیسیته‌ی غیرموضعی                 | دو‌جداره     | توصیف ارتعاش آزاد جانبی             | ژانگ و دیگران                     |
| [۴۸] | پوسته‌های چندگانه‌ی کشسان             | چندجداره     | حل مسأله‌ی ارتعاش آزاد              | وانگ و دیگران                     |
| [۴۹] | پوسته‌های چندگانه‌ی کشسان             | چندجداره     | مودهای متقارن محوری و تیرمانند      | وانگ و دیگران                     |
| [۵۰] | دینامیک ملکولی                        | تک‌جداره     | نانولوله در نقش حسگر کرنش           | کائو <sup>۱۰</sup> و دیگران       |
| [۵۱] | دینامیک ملکولی                        | تک‌جداره     | درکی از ارتعاشات طبیعی گرمایی       | کائو و دیگران                     |
| [۵۲] | تیر اویلر-برنولی <sup>۱۱</sup>        | تک‌جداره     | زیست‌حسگر بر پایه‌ی نانولوله        | چودهاری <sup>۱۱</sup> و دیگران    |
| [۵۳] | تیر غیرموضعی تیموشنکو                 | تک‌جداره     | توصیف ارتعاش آزاد غیرخطی            | یانگ <sup>۱۳</sup> و دیگران       |
| [۵۴] | اجزاء محدود                           | چندجداره     | ارتعاش با شرایط مرزی ناهمگون        | چودهاری و دیگران                  |
| [۵۵] | پوسته‌ی غیرموضعی                      | تک‌جداره     | پارامتر غیرموضعی در ارتعاشات        | آرش و انصاری                      |
| [۵۶] | تیر اویلر-برنولی                      | تک‌جداره     | نوسان‌های غیرخطی با تغییر دما       | انصاری و دیگران                   |
| [۵۷] | دینامیک ملکولی                        | دو‌جداره     | مدل دقیق غیرموضعی برای ارتعاش       | انصاری و دیگران                   |

۱- Zhou

۲- Shi

۳- Yoon

۴- Li

۵- Chou

۶- Liu

۷- Wang

۸- Timoshenko

۹- Zhang

۱۰- Cao

۱۱- Chowdhury

۱۲- Euler-Bernoulli

۱۳- Yang

## ۲-۲- مدلهای پیوسته

بی‌تردید، شباهت‌هایی که ساختار کلی نانولوله‌ی کربنی با تیر و پیوسته دارد انگیزه‌ای برای مطالعه‌ی ارتعاشات آن با کمک مدل‌هایی از دو سازه‌ی یادشده است. معادلات حرکت تیر و پیوسته که در مکانیک محیط‌های پیوسته فرمول‌بندی شده‌اند به روش‌هایی متفاوت قابل حل هستند و دقت آن‌ها برای توصیف ارتعاشات در سازه‌ها اثبات شده است. با وجود این، به‌کارگیری چنین معادله‌هایی با هدف مدل‌سازی حرکت در سیستم‌هایی مانند نانولوله که ابعادی بسیار کوچک‌تر دارند نیازمند احتیاط و اعتبارسنجی است. خوشبختانه، می‌توان درستی نتایجی را که از مدل‌سازی نانولوله‌ها به‌صورت سیستم‌هایی پیوسته حاصل می‌شوند با معیارهایی دقیق‌تر آزمود و برای بسیاری از مسائل ارتعاش نانولوله، مقایسه‌ی پاسخ‌های به‌دست‌آمده با معیارهای مزبور نشان‌دهنده‌ی آن است که مدل تیر یا پیوسته از دقتی مناسب برخوردار است. در ادامه، به این دو مدل پیوسته اشاره شده است.

### ۲-۲-۱- مدل‌های تیر

در تحلیل ارتعاشات نانولوله، می‌توان (هر) جداره‌ی آن را به‌صورت تیری با ضخامت معین مدل کرد. بدین ترتیب، مدل نانولوله‌ی تک‌جداره یک تیر خواهد بود [۵۲] و برای نانولوله‌های چندجداره، تیرهایی هم‌محور نماینده‌ی جداره‌ها هستند؛ همچنین، با در نظر گرفتن نیروهایی میان این تیرها، برهم‌کنش‌های واندروالس موجود در بین جداره‌ها محاسبه می‌شوند [۳۶ و ۳۸]. علاوه بر سازگاری هندسی مدل تیر با ساختار نانولوله، لازم است خواص تیر با دقت تعیین شوند؛ برای نمونه، چگالی، مدول یانگ و مدول برشی آن در مطالعه‌ی نانولوله‌های دوجداره به‌ترتیب، برابر با  $۲,۳ \text{ g/cm}^3$ ،  $۱ \text{ TPa}$  و  $۰,۴ \text{ TPa}$  فرض شده‌اند [۴۵]. شرایط مرزی مدل وابسته به وضعیت دو انتهای نانولوله تغییر می‌کند و برای نانولوله‌های چندجداره، ممکن است شرایط مرزی در جداره‌های مجاور نیز با یکدیگر متفاوت باشند [۵۸].

توصیف ارتعاشات نانولوله با بیان ریاضی، با کمک معادلات حرکتی که از دو نظریه‌ی تیر

اویلر-برنولی [۵۹] و تیر تیموشنکو [۴۵ و ۶۰] حاصل می‌شوند امکان‌پذیر است. برای نانولوله‌های چندجداره، می‌توان برهم‌کنش‌های واندروالس را به‌ازای ارتعاش با دامنه‌ی بسیار کوچک، با توابعی خطی از تفاضل خیز جداره‌ها در معادله‌های حرکت نمایش داد [۳۶ و ۳۸]؛ به‌علاوه، ممکن است نیروهای غیرخطی واندروالس در ارتعاشات آزاد نانولوله نقش داشته باشند و سبب غیرخطی شدن معادلات حرکت شوند [۶۱]. ارتعاشات غیرخطی نانولوله‌ها با به‌کارگیری مدل تیر مطالعه شده‌اند [۵۶ و ۶۱-۶۳]. دقت محاسبات در این گونه از مسائل می‌تواند چنان باشد که با کمک آن‌ها مودهایی کمتر شناخته‌شده نیز برای ارتعاش نانولوله تشخیص داده شوند [۶۳].

کاربرد مدل تیر در مقایسه با دیگر رهیافت‌های تحلیل ارتعاشات در نانولوله‌های کربنی، ساده است و بر مبنای آن، حل‌هایی بسته برای مسأله‌ی ارتعاش نانولوله موجودند. با وجود این، نمی‌توان با مدل تیر، تغییرشکل مقطع عرضی نانولوله را شبیه‌سازی کرد و دقت مدل به مقادیری از پارامترهای نمایندگی هندسه و سفتی وابسته است که در فرمول‌بندی آن به کار می‌روند [۶۴].

## ۲-۲-۲- مدل‌های پوسته

به‌دلیل آن‌که پوسته در قیاس با تیر، برای تغییرشکل دادن توانایی بیشتری دارد، جزئیاتی که مدل پوسته از ارتعاشات نانولوله‌ی کربنی آشکار می‌کند فراوان‌ترند. به عنوان مثال، چنان‌چه هر یک از جداره‌های نانولوله‌ای چندجداره به‌صورت پوسته مدل شود حرکت نسبی جداره‌ها در راستای شعاعی که سبب تغییر نیروهای واندروالس میان آن‌ها می‌گردد قابل توصیف خواهد بود. مرور پژوهش‌ها نشان می‌دهد که ارتعاشات نانولوله‌ها با مدل‌های مختلف پوسته مطالعه شده‌اند. برای نمونه، ارتعاش آزاد نانولوله‌ی چندجداره [۴۸] و موده‌های متقارن محوری و تیرمانند در ارتعاشات آن [۴۹] با مدل پوسته‌ی فلوگه<sup>۱</sup> تحلیل شده‌اند و برای نانولوله‌هایی از نوع یادشده، تأثیر فشار بر موده‌های تنفس شعاعی با کمک مدل پوسته‌های چندگانه مطالعه شده‌است [۴۳]؛ همچنین، شناخت اثری که برهم‌کنش‌های واندروالس بر مشخصه‌های ارتعاش در نانولوله‌های چندجداره دارند [۶۵]، مطالعه‌ی

۱- Flügge



مشخصه‌های مزبور با فرض قرار داشتن نانولوله تحت بارگذاری محوری [۶۶] و تحلیل ارتعاش غیرخطی در نانولوله‌ی دوجداره [۶۷] با کاربرد مدل پوسته‌ی دانل<sup>۱</sup> صورت گرفته‌اند.

معادلات حرکت برای مدل‌های پوسته در مقایسه با مدل‌های تیر پیچیده‌ترند. از سوی دیگر، می‌توان با مدل‌سازی نانولوله به صورت پوسته، مسأله ارتعاش آن را با دقتی بیشتر حل کرد. در مدل پوسته امکان تغییرشکل مقطع عرضی و قابلیت برای پیچش وجود دارد حال آن‌که مدل تیر از این ویژگی‌ها بی‌بهره است. دو مدل تیر و پوسته به دلیل پیوسته بودن، قادر نیستند ساختار اتمی نانولوله‌ها را نمایش دهند؛ بدین ترتیب، نمی‌توان با به‌کارگیری آن‌ها اثر آرایش اتم‌ها را در نانولوله بر رفتار ارتعاشی آن مطالعه کرد. همچنین، همانند مدل تیر، دقت نتایجی که از کاربرد مدل پوسته حاصل می‌شوند به شدت وابسته به مقادیری است که برای پارامترهای هندسی و مکانیکی به‌کاررفته در معادلات حرکت آن در نظر گرفته می‌شوند [۶۴].

### ۲-۲-۳- مدل‌های غیرموضعی

در جامدات کشسان، انتشار امواجی تخت و کشسان با طول موج کوتاه (دارای فرکانس بزرگ) پاشنده<sup>۲</sup> است. با وجود این، در نظریه‌ی کلاسیک الاستیسیته، به دلیل چشم‌پوشی از نیروهای بین‌مولکولی بلندبرد به پاشندگی پرداخته نمی‌شود و نظریه‌ی یادشده تنها به‌ازای طول‌موج‌های بسیار بلند اعتبار دارد. به‌طور مشابه، برای جامدات دانه‌ای و رشته‌ای<sup>۳</sup>، مکانیک کلاسیک محیط‌های پیوسته نیازمند اصلاحاتی است تا بتوان با کمک آن، حرکات و تغییرشکل‌های مستقل دانه‌ها را توصیف نمود [۶۸]. از این‌رو، نظریه‌ی الاستیسیته‌ی غیرموضعی [۶۸-۷۱] مطرح شد که بنا بر آن، تنش در یک نقطه‌ی مرجع  $\vec{x}$ ، تابعی میدان کرنش در هر نقطه‌ی  $\vec{x}'$  از جسم است. بر اساس این نظریه، مسائلی درباره‌ی نابجایی پیچشی و امواج سطحی حل شده‌اند و نتایج نظری به‌دست‌آمده با مشاهده‌های آزمایشی و محاسبات دینامیک شبکه همخوانی چشم‌گیری دارند [۷۲].

۱- Donnell

۲- Dispersive

۳- Fibrous

مدل‌های تیر و پوسته برای مطالعه‌ی ارتعاشات در نانولوله‌های کربنی بر مبنای نظریه‌ی الاستیسیته‌ی غیرموضعی بهبود یافته‌اند. در چنین مدل‌های اصلاح‌شده‌ای، وجود پارامتر غیرموضعی در معادلات حرکت دقت حل مسأله را افزایش می‌دهد. این پارامتر وابسته به جنس ماده و مقیاس طولی کوچکی است که می‌تواند طول پیوند کربن-کربن باشد [۴۷]. روابط ساختاری الاستیسیته‌ی غیرموضعی برای مدل‌های تیر و پوسته‌ی نانولوله ارائه شده‌اند و درباره‌ی پارامتر مقیاس کوچک بحث شده‌است [۷۳]. به‌ویژه، معادلات حرکت تیر اویلر-برنولی و تیر تیموشنکو با کمک رابطه‌های ساختاری غیرموضعی دوباره فرمول‌بندی شده‌اند و با به‌کارگیری آن‌ها مطالعه‌ای درباره‌ی خیز جانبی، ارتعاش آزاد و کماتش نانولوله‌های کربنی صورت گرفته‌است [۷۴]. ارتعاشات آزاد [۴۷ و ۷۵-۷۷]، واداشته [۷۷ و ۷۸] و غیرخطی نانولوله‌ها [۵۳، ۷۹ و ۸۰]، محاسبه‌ی پارامتر غیرموضعی برای مسأله‌ی ارتعاش [۵۵، ۵۷ و ۸۱] و تأثیر این پارامتر بر فرکانس‌های ارتعاش نانولوله [۸۲] چند نمونه از موضوعات پژوهش‌هایی هستند که در آن‌ها مدل‌هایی غیرموضعی برای نانولوله‌ها به‌کار رفته‌اند. با وجود این، نبود روشی نظام‌مند برای تعیین پارامتر غیرموضعی مشکلی است که کاربرد مدل‌های غیرموضعی را در مطالعه‌ی ارتعاشات نانولوله با چالش همراه می‌سازد. خوشبختانه در حل بسیاری از مسائل، پرهیز از نقص‌هایی که مدل‌های غیرموضعی و دیگر مدل‌های پیوسته دارند با مدل‌سازی نانولوله‌ها در مقیاس اتمی امکان‌پذیر است.

## ۲-۳- مدل‌سازی در مقیاس اتمی

چنان‌چه هر نانولوله‌ی کربنی به‌صورت مجموعه‌ای از اتم‌هایی که با یکدیگر برهم‌کنش دارند مدل شود می‌توان تأثیر موقعیت اتم‌ها و برهم‌کنش آن‌ها را بر خواص مکانیکی نانولوله مطالعه کرد. بدیهی است که از این منظر، مدل‌های مقیاس اتمی از مدل‌های پیوسته دقیق‌ترند. همچنین، هر اتم یک نقطه‌ی مادی با جرم کل اتم کربن فرض می‌شود. برهم‌کنش‌های اتمی نیز با نیروهای ساده‌ی فنر یا نیروهایی پیچیده‌تر که به تعریف پتانسیل‌هایی بین‌اتمی وابسته هستند مدل می‌شوند. به‌دلیل آن‌که مسائل

طرح شده در ادامه‌ی گزارش با کمک مدل‌سازی نانولوله‌ها در مقیاس اتمی حل شده‌اند رهیافت‌های ارائه شده برای این گونه از مدل‌سازی در قیاس با مدل‌های پیوسته، با جزئیاتی بیشتر مرور خواهند شد.

### ۲-۳-۱- مکانیک ملکولی-سازه‌ای

هر نانولوله‌ی تک‌جداره همانند قابی فضایی است که در آن، پیوندهای شیمیایی میان اتم‌ها همچون عضوهای باربر قاب عمل می‌کنند و در محل اتصال عضوها، یک اتم نقش مفصل را دارد. مطابق شکل ۱-۲، هر عضو چنین قابی یک تیر است که می‌تواند نیروی محوری، نیروی برشی و لنگرهای خمشی و پیچشی تحمل کند. تیر به عنوان جزئی از قاب در هر انتها سه درجه‌ی آزادی انتقالی و سه درجه‌ی آزادی چرخشی دارد. بدین ترتیب، می‌توان برای جرم‌هایی متمرکز در دو گره  $i$  و  $j$  تیر، به‌ازای هر درجه‌ی آزادی یک معادله‌ی تعادل نوشت و ماتریس سفتی این جزء را از دستگاه معادلات

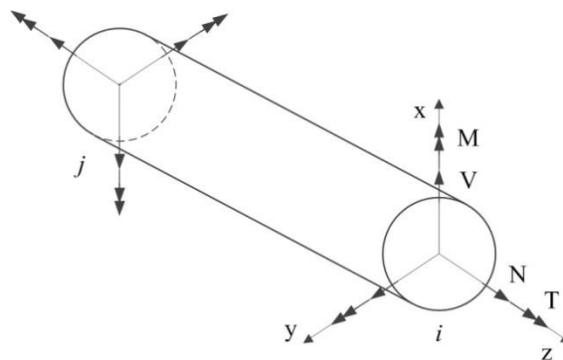
$$\tilde{K}^e \vec{u} = \vec{f} \quad (1-2)$$

به‌دست آورد که در آن،  $\tilde{K}^e$ ،  $\vec{u}$  و  $\vec{f}$  به ترتیب، ماتریس سفتی جزء، بردار تغییرمکان گره‌ها و بردار نیروی گره‌ها هستند. بردارهای مزبور با تساوی‌های

$$\vec{u} = [u_{xi}, u_{yi}, u_{zi}, \theta_{xi}, \theta_{yi}, \theta_{zi}, u_{xj}, u_{yj}, u_{zj}, \theta_{xj}, \theta_{yj}, \theta_{zj}]^T, \quad (2-2-الف)$$

$$\vec{f} = [f_{xi}, f_{yi}, f_{zi}, m_{xi}, m_{yi}, m_{zi}, f_{xj}, f_{yj}, f_{zj}, m_{xj}, m_{yj}, m_{zj}]^T \quad (2-2-ب)$$

تعریف می‌شوند و درایه‌های غیرصفر  $\tilde{K}^e$  به طول تیر، مقاومت کششی، صلابت خمشی و سفتی پیچشی آن وابسته‌اند [۸۳].

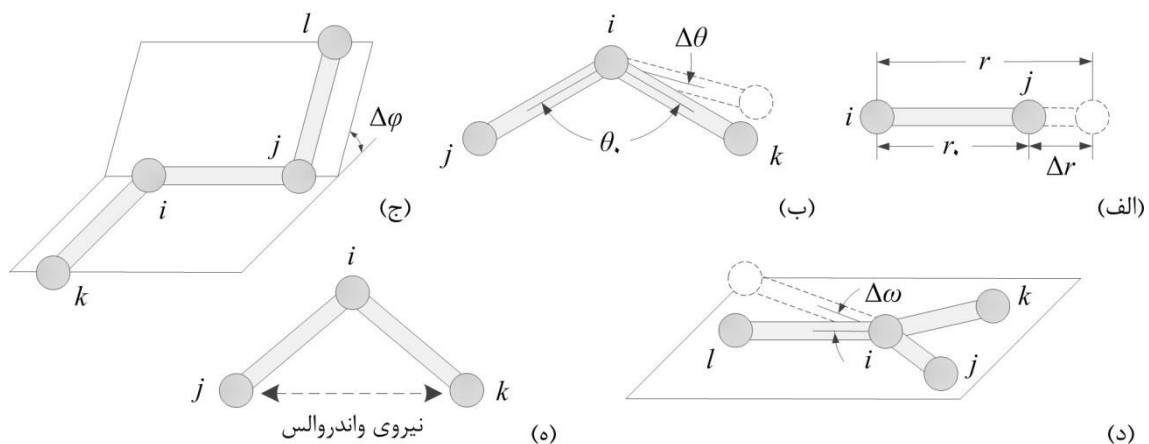


شکل ۱-۲- نمایش جزء تیر از قاب فضایی [۸۳]

تیر نماینده‌ی پیوند کربن-کربن است؛ در نتیجه، طول آن برابر با طول پیوند است و چنانچه مقطع عرضی تیر گرد انتخاب شود سه پارامتر  $EA$ ،  $EI$  و  $GJ$  که به آن‌ها اشاره شد مجهول خواهند بود. برای تعیین این پارامترها که در مکانیک سازه‌ها نقش دارند می‌توان از روابطی در مکانیک ملکولی کمک گرفت. برهم‌کنش‌های الکترون-هسته و هسته-هسته میان اتم‌های نانولوله یک میدان نیرو تشکیل می‌دهند که متناظر با انرژی پتانسیل نانولوله است. مطابق شکل ۲-۲، با چشم‌پوشی از برهم‌کنش‌های الکتروستاتیک، انرژی یادشده از تغییر طول پیوند، خمش، پیچش با تشکیل زاویه‌ی دووجهی، پیچش برون‌صفحه‌ای و برهم‌کنش واندروالس نشأت می‌گیرد. چنانچه جمله‌های انرژی پتانسیل به صورت نظیر به نظیر با جملات انرژی کرنشی تیر مساوی قرار داده شوند معادله‌های

$$\frac{EA}{L} = k_r, \quad \frac{EI}{L} = k_\theta, \quad \frac{GJ}{L} = k_\tau \quad (۳-۲)$$

برای تعیین پارامترهای سفتی به دست می‌آیند. در معادلات (۳-۲)،  $L$  طول تیر است و  $k_r$ ،  $k_\theta$  و  $k_\tau$  ثابت‌های نیرو با مقادیری معلوم هستند. سپس می‌توان ماتریس سفتی هر جزء از قاب را محاسبه کرد. ماتریس سفتی قاب که مدل نانولوله است به روش اجزاء محدود سرهم‌بندی می‌شود. به علاوه، ماتریس جرم قاب قطری است و درایه‌های قطر اصلی آن برابر با جرم اتم کربن اند. از این‌رو، مسأله‌ی مقدار ویژه برای ارتعاش نانولوله‌ی تک‌جداره حل خواهد شد [۸۳].



شکل ۲-۲- برهم‌کنش اتم‌ها در مکانیک ملکولی؛ (الف) تغییر طول پیوند، (ب) خمش، (ج) پیچش با تشکیل زاویه‌ی دووجهی، (د) پیچش برون‌صفحه‌ای و (ه) برهم‌کنش واندروالس [۸۳]

روش مکانیک ملکولی-سازه‌ای برای مدل‌سازی هر یک از جداره‌های نانولوله‌ای چندجداره نیز به کار رفته است و توصیف برهم‌کنش‌های واندروالس میان جداره‌های نانولوله با مدل غیرخطی میله‌ی خرپا صورت گرفته است [۸۴].

## ۲-۳-۲- اجزاء محدود در مقیاس اتمی

روش تعیین ماتریس سفتی یکی از وجوه تمایز رهیافت‌هایی است که برای مدل‌سازی نانولوله‌های کربنی در مقیاس اتمی به کار می‌روند. نانولوله به عنوان یک سیستم، دارای انرژی پتانسیلی است که یک تابع نماینده‌ی آن است. تابع پتانسیل برحسب موقعیت اتم‌ها در دستگاه مختصات دکارتی<sup>۱</sup> نوشته می‌شود و غیرخطی است. آرایشی از اتم‌ها در فضا که به‌ازای آن مقدار تابع پتانسیل نانولوله کمینه شود یک موقعیت تعادل سیستم محسوب می‌شود. رهیافت اجزاء محدود در مقیاس اتمی برای نانولوله‌های تک‌جداره بر دو فرض ساده‌کننده و اساسی استوار است. نخست، سیستم حول موقعیت تعادل خود خطی می‌شود و ماتریس سفتی  $\bar{K}$  از معادله‌ی

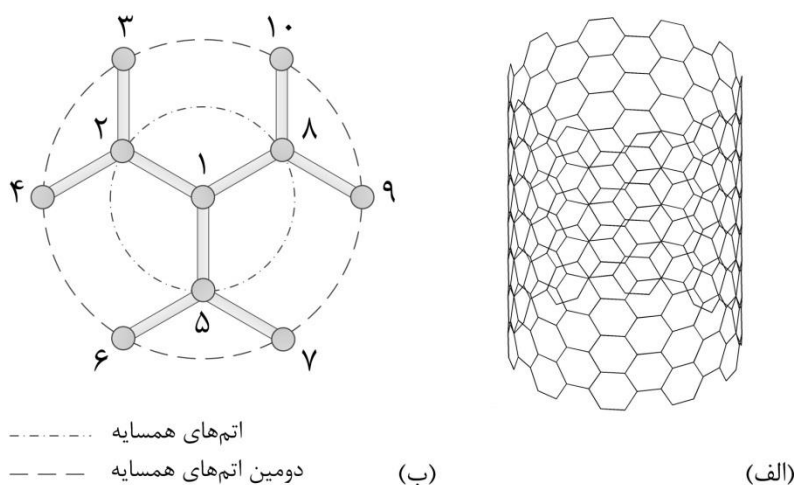
$$\bar{K} = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial \vec{x} \partial \vec{x}} \right|_{\vec{x}=\vec{x}_e} \quad (۴-۲)$$

به‌دست می‌آید که در آن،  $\vec{x}$  برداری است که مؤلفه‌های آن مختصات اتم‌های متحرک اند،  $\vec{x}_e$  مختصات مزبور را به‌ازای تعادل سیستم نشان می‌دهد و  $U$  بخشی از انرژی پتانسیل است که تنها از برهم‌کنش اتم‌ها نشأت می‌گیرد و پتانسیل بین‌اتمی نامیده می‌شود. همچنین، نماد مشتق در معادله‌ی (۴-۲) به معنای دو بار مشتق‌گیری جزئی نسبت به همه‌ی مختصه‌های  $\vec{x}$  است. سپس، محاسبه‌ی ماتریس سفتی ساده می‌شود. پتانسیل بین‌اتمی  $U$  تجربی است و ضابطه‌هایی مختلف برای آن ارائه شده‌اند که ممکن است علاوه بر دقیق بودن، بسیار پیچیده باشند. بنابراین، هر چند می‌توان ضابطه‌ی  $U$  را انتخاب کرد محاسبات معادله‌ی (۴-۲) معمولاً پرهزینه اند. خوشبختانه، به‌کارگیری جزئی محدود از ساختار نانولوله‌ی کربنی که شامل چندین اتم همسایه است برای کاستن از حجم محاسبه

۱- Cartesian

راهگشا است. مطابق شکل ۲-۳، این جزء از یک اتم مرکزی، نزدیکترین اتم‌های همسایه و دومین اتم‌های همسایه‌ی آن تشکیل شده‌است. میان این اتم‌ها پیوندهایی برقرارند که بنا بر فرض، تغییرمکان اتم شماره‌ی ۱ تنها بر انرژی ذخیره‌شده در آن‌ها مؤثر است؛ در نتیجه، درایه‌هایی از ماتریس سفتی که با اتم شماره‌ی ۱ و اتم‌های ده‌گانه‌ی جزء متناظر نباشند صفر خواهند بود. بدیهی است که برای همه‌ی اتم‌های متحرک می‌توان چنین اجزاء محدودی تعریف کرد و بدین ترتیب، بسیاری از درایه‌های  $\bar{K}$  برابر با صفر فرض می‌شوند. از سوی دیگر، ماتریس جرم نانولوله قطری است و درایه‌های قطر اصلی آن برابر با جرم اتم کربن هستند. از این‌رو، می‌توان برای نانولوله‌های تک‌جداره، فرکانس‌های طبیعی و شکل‌های مود متناظر با آن‌ها را به‌سادگی تعیین کرد [۴۰].

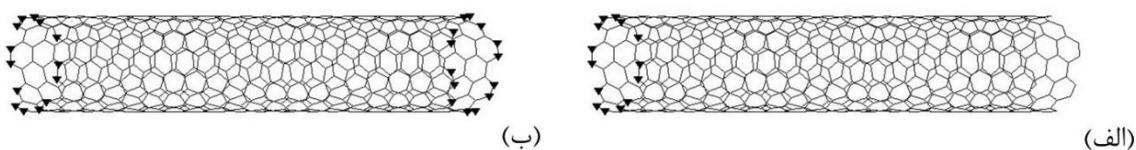
هرچند مکانیک ملکولی-سازه‌ای و اجزاء محدود در مقیاس اتمی مزیت‌هایی دارند اثر دما بر ارتعاشات نانولوله با کمک هیچ‌یک از آن‌ها قابل توصیف نیست. به‌علاوه، با چنین روش‌هایی نمی‌توان حرکت نانولوله را با گذشت زمان رصد کرد و تشکیل یا شکستن پیوندهای شیمیایی را در ساختار آن پیش‌بینی نمود. این کاستی‌ها نشان می‌دهند دست‌یابی به دقت بیشتر در تحلیل ارتعاشات نانولوله نیازمند رهیافتی است که بتوان با بهره‌گیری از آن، واقعیت پدیده‌ی ارتعاش را در نانولوله‌ها بهتر توصیف کرد. برای رسیدن به این هدف، شبیه‌سازی دینامیک ملکولی گزینه‌ای مناسب است.



شکل ۲-۳- (الف) نانولوله‌ی تک‌جداره‌ی (۱۰,۱۰) و (ب) جزء محدود در مقیاس اتمی برای نانولوله (خط‌چین‌ها راهنمای دید هستند) [۴۰]

### ۲-۳-۳- دینامیک ملکولی

پاسخ ارتعاشی سیستمی پیوسته با شرایط مرزی معین که نیروهایی خارجی و معلوم بر آن وارد شوند از حل معادله یا معادلاتی که حرکت آن را توصیف می‌کنند و اعمال شرایط اولیه سیستم بر نتیجه‌ی حل به دست می‌آید. با مدل‌سازی نانولوله‌ی کربنی به عنوان مجموعه‌ای از اتم‌های دارای برهم‌کنش، می‌توان ایده‌ای مشابه را برای مطالعه‌ی ارتعاشات آن به کار گرفت. برهم‌کنش‌های اتمی در نانولوله که نیروهای داخلی سیستم اند با یک تابع پتانسیل توصیف می‌شوند. همچنین، ممکن است بر هر اتم نیرویی خارجی اثر کند که توانایی تعیین اندازه و جهت آن از ویژگی‌های مدل‌سازی در مقیاس اتمی است. شرایط مرزی نانولوله با مشخص کردن اتم‌هایی که روی مرزهای سیستم قرار دارند و مقید کردن حرکت آن‌ها رعایت می‌شوند. برای نمونه، مطابق شکل ۲-۴، ممکن است نانولوله‌ای تک‌جداره یک‌سر گیردار یا دوسر گیردار باشد. به علاوه، موقعیت و سرعت اولیه‌ی اتم‌ها که شرایط اولیه‌ی سیستم هستند مشخص اند. بنابراین، می‌توان با حل معادله‌ی حرکت برای هر اتم متحرک، مسیر حرکت آن را به دست آورد. چنین رهیافتی مبنای شبیه‌سازی دینامیک ملکولی است که برای تحلیل ارتعاشات نانولوله بسیار مفید است. در شبیه‌سازی مزبور، نخست باید سیستم را به عنوان تعدادی اتم با جرم‌های معین در بخشی مناسب از فضا تعریف کرد و تابع پتانسیل، شرایط مرزی، شرایط اولیه و نیروهای خارجی احتمالی را مشخص نمود. سپس، می‌توان به سیستم اجازه داد تا با شرط‌هایی ویژه متحول شود؛ برای نمونه، انرژی آن با گذشت زمان تغییر نکند یا به یک دمای تعادل برسد. آنچه درباره‌ی دینامیک ملکولی ذکر شد بیان ساده‌ای است که قابلیت‌های آن را برای مطالعه‌ی پدیده‌ی ارتعاش در نانولوله‌ها نشان می‌دهد. در شبیه‌سازی دینامیک ملکولی، روند حل مسأله جزئیاتی دارد که در ادامه‌ی این بخش به برخی از آن‌ها اشاره شده است.



شکل ۲-۴- نانولوله‌ی (۸,۶)؛ (الف) یک‌سر گیردار و (ب) دوسر گیردار

تعیین مسیر حرکت هر اتم با انتگرال گیری عددی از معادله‌ی حرکت آن امکان پذیر است و در دینامیک ملکولی، این روش به کار می‌رود. در نتیجه، لازم است یک گام زمانی  $\Delta t$  برای محاسبات تعریف شود. در هر لحظه از شبیه‌سازی، موقعیت و سرعت اتم مورد نظر همراه با برابند نیروهای که به آن وارد می‌شوند به دست می‌آیند. به علاوه، با معلوم بودن برابند نیروها شتاب، قابل محاسبه است. چنان چه  $x(t)$  یکی از مختصه‌های مکان اتم باشد بسط تیلور آن به صورت

$$x(t+h) = x(t) + h\dot{x}(t) + \frac{h^2}{2}\ddot{x}(t) + O(h^3) \quad (5-2)$$

نوشته می‌شود که در آن،  $t$  لحظه‌ی جاری است و  $h \equiv \Delta t$ ؛ همچنین،  $\dot{x}(t)$  و  $\ddot{x}(t)$  به ترتیب، مؤلفه‌ی سرعت و شتاب هستند. بسط متناظر با  $x(t-h)$  مشابه بسط (5-2) است و با جمع کردن این دو و مرتب‌سازی، معادله‌ی

$$x(t+h) = 2x(t) - x(t-h) + h^2\ddot{x}(t) + O(h^3) \quad (6-2)$$

برای محاسبه‌ی موقعیت در لحظه‌ی  $t + \Delta t$  به دست می‌آید. سرعت لحظه‌ی جاری نیز از تساوی

$$\dot{x}(t) = \frac{x(t+h) - x(t-h)}{2h} + O(h^2) \quad (7-2)$$

حاصل می‌شود. شایان ذکر است که معادله‌های (6-2) و (7-2) تنها نماینده‌ی نمونه‌ای از روش‌های ارائه شده برای تعیین موقعیت و سرعت اتم‌ها در دینامیک ملکولی هستند [۸۵].

حرکت یک نانولوله‌ی کربنی با محاسبه‌ی تغییرمکان اتم‌های آن در مدت شبیه‌سازی قابل تعقیب است و می‌توان با تحلیل داده‌های تغییرمکان با کمک تبدیل سریع فوریه<sup>۱</sup> فرکانس‌های ارتعاشات نانولوله را یافت [۵۱]. از سوی دیگر، پیش از شبیه‌سازی حرکت نانولوله، بهتر است انرژی پتانسیل آن کمینه شود تا سیستم در یک موقعیت تعادل باشد. توانایی محاسبه‌ی نیروها در لحظه‌ی صفر (قبل از تحول سیستم با گذشت زمان) تعیین ماتریس سفتی نانولوله را به‌ازای موقعیت تعادل آن ممکن می‌سازد. بدین ترتیب، مسأله‌ی مقدار ویژه برای ارتعاش نانولوله به‌سادگی حل می‌شود و فرکانس‌های طبیعی سیستم همراه با شکل‌های مود متناظر با آن‌ها به دست می‌آیند.

۱- Fast Fourier transform (FFT)



## ۴-۲- گونه‌های میرایی در نانولوله‌ها

اتلاف انرژی در نانولوله‌های کربنی می‌تواند در حضور عامل خارجی روی دهد و/یا منشأ داخلی داشته باشد. وجود تکیه‌گاه یکی از عوامل خارجی است که سبب میرایی حرکت در نانولوله‌ها می‌شود. این نوع میرایی، هدررفت تکیه‌گاهی<sup>۱</sup> نام دارد و نمونه‌ی آن هنگامی رخ می‌دهد که نانولوله‌ای در حال ارتعاش به زیرلایه‌ی خود بچسبد و از آن جدا گردد [۳۰]. چنانچه بخشی از انرژی ارتعاش نانولوله به‌صورت موج از محل تکیه‌گاه تلف شود هدررفت تکیه‌گاهی کشسان روی داده‌است و اتلاف انرژی به‌دلیل گیرش ویسکوز تکیه‌گاه، هدررفت تکیه‌گاهی ناکشسان نامیده می‌شود. روشی ساده برای کنترل هدررفت تکیه‌گاهی به‌کارگیری نانولوله‌هایی با نسبت طول به قطر بزرگ است؛ هرچند گونه‌ی ناکشسان آن به ماهیت گیرش وابسته است و از این‌رو، ممکن است همچنان یک منشأ قابل توجه برای اتلاف انرژی هنگام ارتعاش نانولوله باشد. گیردار کردن نقاط گره در ارتعاشات تشدیدسازها و ساخت تشدیدساز به شکل دیپازون با هدف تداخل ویرانگر ارتعاشات در محل تکیه‌گاه دو شیوه‌ی جایگزین برای کنترل هدررفت تکیه‌گاهی اند [۸۶]. برهم‌کنش نانولوله و سیالی که در آن ارتعاش می‌کند با اتلاف انرژی همراه است. نیروی پسایی که هوای محیط بر نانولوله وارد می‌کند تحت شرایطی ویژه، برابر با حاصل ضرب یک ضریب میرایی و سرعت نانولوله است [۸۷]. همچنین، میرایی ویسکوز در آب بر فرکانس تشدید و ضریب کیفیت نانولوله تأثیر دارد [۸۸]. هدررفت سطحی گونه‌ای دیگر از اتلاف انرژی است که به‌دلیل وجود سیستم‌هایی همچون پیوندهای شکسته، آویخته<sup>۲</sup> یا ملکول‌های جذب‌شده در سطح تشدیدساز رخ می‌دهد. افزایش اندازه‌ی تشدیدساز سبب می‌شود اثر هدررفت سطحی کاهش یابد. اگرچه ممکن است هدررفت‌های تکیه‌گاهی و سطحی صورت‌هایی غالب از اتلاف انرژی در تشدیدسازهای نانومکانیکی باشند احتمال کاهش آن‌ها با مهندسی مناسب وجود دارد [۸۶]. بدین ترتیب، تأثیرپذیری ضریب کیفیت نانولوله از دیگر گونه‌های اتلاف انرژی شایان توجه است.

---

۱- Clamping loss

۲- Dangling bonds

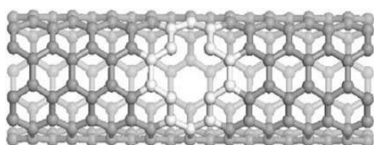
ایجاد گرادیان‌های دما در نانولوله به دلیل ارتعاشات آن موجب انتقال برگشت‌ناپذیر گرما از بخش‌های گرم نانولوله به بخش‌های سرد می‌شود و در نتیجه، انرژی مکانیکی هدر می‌رود. این صورت از اتلاف انرژی که میرایی ترموالاستیک نام دارد به‌طور ذاتی در نانولوله‌ها روی می‌دهد و بزرگ‌ترین مقدار امکان‌پذیر برای ضریب کیفیت به آن وابسته است. گونه‌هایی از میرایی که در این بخش به آن‌ها اشاره شد همراه با سایر صورت‌های اتلاف انرژی در نانولوله بر تعیین ضریب کیفیت کل مؤثرند و با انتخاب نماد  $Q$  برای ضریب کیفیت، معادله‌ی

$$Q_{\text{کل}}^{-1} = Q_{\text{تکیه‌گاهی}}^{-1} + Q_{\text{سطحی}}^{-1} + Q_{\text{ترموالاستیک}}^{-1} + \dots \quad (۸-۲)$$

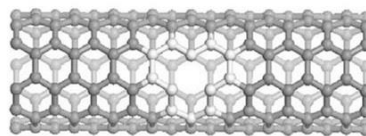
نشان‌دهنده‌ی سهم هر گونه‌ی میرایی است [۸۶].

## ۲-۵- عیب‌های ساختاری نانولوله‌ها

ساختار بدون عیب نانولوله‌ای کربنی که دو انتهای باز دارد با چشم‌پوشی از لبه‌های آن، از اتم‌هایی تشکیل شده‌است که هر یک با برقراری سه پیوند شیمیایی در شبکه‌ای شش‌ضلعی، بر سطح یک استوانه‌ی فرضی واقع هستند. به‌علاوه، محور این ساختار استوانه‌ای مستقیم است. بدین ترتیب، عیب ساختاری نانولوله به معنای نبود یکی از ویژگی‌های یادشده در ساختار آن است. عیوب ساختاری با برهم خوردن نظم در آرایش اتم‌های کربن مرتبط اند و ساده‌ترین نمونه‌ی آن‌ها کمبود یک اتم در شبکه‌ی بلور است که عیب حفره‌ی یگانه نامیده می‌شود. همچنین، ممکن است دو اتم مجاور در ساختار موجود نباشند و عیب حفره‌ی دوگانه وجود داشته باشد. شکل ۲-۵ نشان‌دهنده‌ی عیوب حفره است. حلقه‌هایی پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی از اتم‌های کربن در اتصال دو نانولوله‌ی تک‌جداره به یکدیگر نقش دارند و این اتصال خود، عیبی ساختاری است (شکل ۲-۶-الف) [۷].

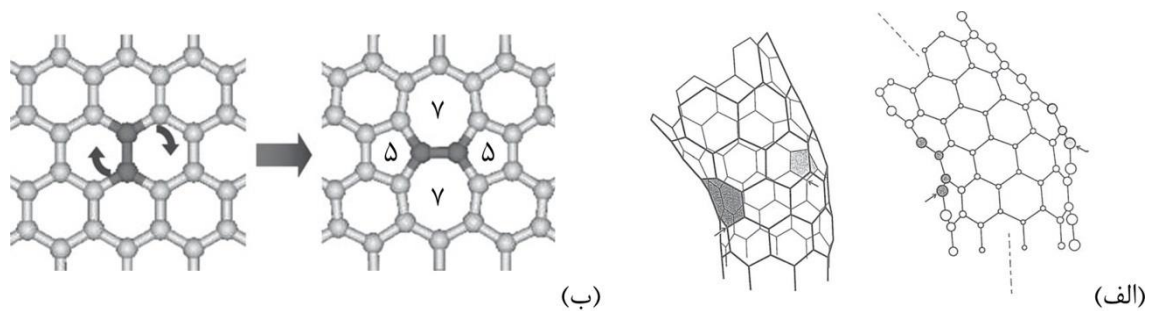


(ب)



(الف)

شکل ۲-۵- (الف) عیب حفره‌ی یگانه و (ب) عیب حفره‌ی دوگانه در نانولوله‌ی تک‌جداره [۸۹]



شکل ۲-۶- (الف) نمایش اتصال زانویی<sup>۱</sup> میان نانولوله‌ی صندلی‌نمای (۵,۵) و نانولوله‌ی زیگزاگ‌نمای (۹,۰) و

(ب) بازآرایی استون-ویلز<sup>۲</sup> و تشکیل عیب «۵-۷-۷-۵» [۷]

دسته‌ای دیگر از عیب‌ها حلقه‌های مجاور پنج‌ضلعی و هفت‌ضلعی اند که به صورت جفت در ساختار نانولوله‌ها موجودند. جفت حلقه‌های مزبور، تنها هستند یا در یک بازآرایی «۵-۷-۷-۵» پدید می‌آیند. مطابق شکل ۲-۶-ب، این بازآرایی نتیجه‌ی تبدیل استون-ویلز است که در آن، پیوند بین دو اتم  $90^\circ$  می‌چرخد [۷]. عیب «۵-۷-۷-۵» به عیب استون-ویلز نیز موسوم است. اتم‌های جذب‌شده در سطح نانولوله [۷] و اتم‌های جانشین و بین‌نشین در شبکه‌ی بلور آن نیز عیب محسوب می‌شوند. در فصل بعدی، اثر عیب حفره بر ارتعاشات آزاد نانولوله‌ها تشریح خواهد شد و پیش از آن، شایسته است به بازسازی عیب حفره<sup>۳</sup> اشاره شود. تشکیل پیوند میان اتم‌های کربن در محل عیب حفره امکان‌پذیر است و سبب بهینه شدن ساختار نانولوله در دمایی معین می‌شود. نتایج پژوهشی نشان می‌دهند عیب حفره و بازسازی آن بر مدول یانگ نانولوله‌های تک‌جداره مؤثرند [۱۸۹]. با وجود این، در گزارش حاضر، به مسائل طرح‌شده بدون تأکید بر بازسازی عیب حفره یا با چشم‌پوشی از آن پاسخ داده شده است و محاسبات برای نانولوله‌هایی تک‌جداره و دوجداره صورت گرفته‌اند که در آن‌ها، عیوب حفره‌ی یگانه و دوگانه (حداقل در آغاز) به ترتیب، همانند شکل‌های ۲-۵-الف و ۲-۵-ب هستند.

۱- Elbow connection

۲- Stone-Wales transformation

۳- Vacancy defect reconstruction

# فصل ۳- حل مسأله‌ی ارتعاش آزاد در نانولوله‌های کربنی بدون عیب

محتوای فصل:

❖ رهیافت برگزیده

❖ اعتبارسنجی راه‌حل

### ۳-۱- رهیافت برگزیده

با توجه به آن چه در بخش ۲-۵ درباره‌ی ماهیت عیب حفره ذکر شد، برای مطالعه‌ی اثر آن بر ارتعاشات نانولوله‌های کربنی لازم است هر نانولوله به صورت سیستمی از اتم‌های کربن مدل شود و در نتیجه، مدل‌سازی در مقیاس اتمی که بخش ۲-۳ به آن اختصاص داشت ضرورت پیدا می‌کند. حل مسأله‌ی مقدار ویژه برای ارتعاش نانولوله نیازمند محاسبه‌ی ماتریس سفتی سیستم است و چنانچه ماتریس یادشده با انتخاب یک تابع پتانسیل دقیق و به کارگیری صریح آن در معادله‌ی (۲-۴) محاسبه شود می‌توان پاسخی با دقت مناسب انتظار داشت. بدین ترتیب، نخست ساختار هندسی نانولوله، بدون عیب حفره (یا همراه با آن) با کمک معادله‌های (۱-۱) تا (۱-۹) تعیین می‌شود و موقعیتی برای هر اتم در نانولوله به دست می‌آید. لازمه‌ی کاربرد معادله‌ی (۲-۴)، یافتن موقعیت تعادل سیستم است که با کمینه ساختن انرژی پتانسیل آن حاصل می‌گردد. سپس با معلوم بودن ماتریس‌های جرم و سفتی، فرکانس‌های طبیعی نانولوله و شکل‌های مود متناظر با آن‌ها محاسبه می‌شوند. این روش حل مسأله به رهیافت اجزاء محدود در مقیاس اتمی شباهت دارد؛ هرچند با بهره‌گیری از برنامه‌های رایانه‌ای، به دلیل توان محاسباتی زیاد، همه‌ی درایه‌های ماتریس سفتی به‌ازای موقعیت تعادل نانولوله به دست می‌آیند. با این توضیح، بدیهی است که انتخاب تابع پتانسیل بر دقت حل، بسیار تأثیرگذار است و از این رو، در ادامه‌ی بخش حاضر، ابتدا مقدمه‌ای درباره‌ی آن ارائه خواهد شد و سپس، ضابطه‌ی پتانسیلی که برای توصیف برهم‌کنش‌های اتمی برگزیده شده است از نظر خواهد گذشت.

### ۳-۱-۱- سیستم‌های اتمی و انرژی پتانسیل

آرایش  $N$  ذره‌ی بی‌بعد در فضا با کمک بردارهای مکان آن‌ها؛ یعنی  $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots$  و  $\vec{r}_N$  قابل تعیین است. چنانچه مجموعه‌ی ذرات مزبور یک سیستم فرض شوند؛ مختصات تعمیم‌یافته‌ی سیستم، موقعیت هر ذره را به طور یکتا مشخص می‌کنند. نیروها در سیستمی از ذرات به دو دسته‌ی پایستار و ناپایستار تقسیم‌بندی می‌شوند. به‌ازای نیروهای پایستار، تابعی ویژه از مختصه‌های ذرات به صورت

$$U = U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (1-3)$$

موجود است که انرژی پتانسیل یا پتانسیل سیستم نام دارد. به علاوه، برابند نیروهای پایستاری که بر ذره  $i$  وارد می‌شوند با مشتق‌گیری جزئی از  $U$  نسبت به مختصات ذره به دست می‌آیند. به بیان دیگر،

$$\vec{f}_i = -\left(\hat{i} \frac{\partial}{\partial x_i} + \hat{j} \frac{\partial}{\partial y_i} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial z_i}\right) U \equiv -\vec{\nabla}_i U, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2-3)$$

برای سیستمی شامل  $N$  اتم که با یکدیگر برهم‌کنش داشته باشند و هر یک با جرمی نقطه‌ای مدل شوند، در غیاب قیده‌های هولونومیک، می‌توان مختصات تعمیم‌یافته را برابر با مختصه‌های دکارتی اتم‌ها در نظر گرفت. صورت نیوتنی معادله‌ی حرکت برای اتم  $i$ ،

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = -\vec{\nabla}_i U + \vec{F}_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (3-3)$$

است که در آن،  $\vec{F}_i$  برابند نیروهای ناپایستاری است که بر اتم یادشده اثر دارند [۹۰].

در معادله‌ی (۳-۳)، برهم‌کنش‌های اتمی با کمک تابع پتانسیل  $U$  توصیف می‌شوند که با شرط دقیق بودن می‌تواند بسیار پیچیده باشد. ماهیت این برهم‌کنش‌ها از آثاری کوانتومی نشأت می‌گیرد که در مقیاس زیراتمی روی می‌دهند و تعیین‌کننده‌ی خواصی شیمیایی همچون انرژی پیوند و علت تشکیل و شکستن پیوندها هستند. ساختار کلی تابع پتانسیل با معادله‌ی

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) = \sum_i V_1(\vec{r}_i) + \sum_{i,j>i} V_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \sum_{i,j>i,k>j} V_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) + \dots + V_N(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) \quad (4-3)$$

قابل نمایش است که در آن، تابع  $V_m$  پتانسیل  $m$ -ذره‌ای نامیده می‌شود [۹۰ و ۹۱]. همچنین، تابع  $V_1$  به پتانسیل خارجی،  $V_2$  به پتانسیل جفتی و  $V_m$  به‌ازای  $m > 2$  به پتانسیل چندذره‌ای موسوم است.  $V_1$  تنها به موقعیت اتم  $i$  وابسته است و برای نمونه، چنان‌چه سیستم درون یک میدان نیروی خارجی؛ مانند میدان گرانشی یا الکتروستاتیک قرار گیرد غیرصفر خواهد بود. توابع  $V_2$  و  $V_3$  نیز به ترتیب، با برهم‌کنش‌های دوه‌دو و سه‌ذره‌ای اتم‌ها متناظرند. برای کاهش هزینه‌ی محاسبات در شبیه‌سازی‌های عددی، حذف جمله‌های حاصل جمع (۴-۳) پس از جمله‌ی دوم و وارد ساختن تمام آثار چندذره‌ای در

تابع  $V_2$  با دقتی مناسب امکان پذیر است.  $V_2$  وابستگی انرژی پتانسیل کل؛ یعنی  $U$  را به فاصله‌های بین‌اتمی نشان می‌دهد. اگر  $\vec{r}_i$  و  $\vec{r}_j$  بردارهای مکان دو اتم دلخواه در سیستم باشند آنگاه،

$$V_2(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = V_2(r_{ij}), \quad r_{ij} = |\vec{r}_{ij}| = |\vec{r}_i - \vec{r}_j| \quad (5-3)$$

برهم‌کنش‌های دوبه‌دو به دو نوع عمده تقسیم‌بندی می‌شوند که یکی برهم‌کنش‌های بلندبرد الکتروستاتیک و دیگری برهم‌کنش‌های کوتاه‌برد بین ذرات خنثای الکتریکی است. پتانسیل سه‌ذره‌ای  $V_3$  نشان‌دهنده‌ی وابستگی پتانسیل  $U$  به زاویه‌ی  $\theta_{ijk}$  بین دو بردار  $\vec{r}_{ij}$  و  $\vec{r}_{ik}$  است؛ این بردارها به ترتیب، اتم  $i$  را به اتم‌های  $j$  و  $k$  وصل می‌کنند. با بیانی دقیق‌تر،

$$V_3(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k) = V_3(\cos \theta_{ijk}), \quad \cos \theta_{ijk} = \frac{\vec{r}_{ij} \cdot \vec{r}_{ik}}{r_{ij} r_{ik}} \quad (6-3)$$

پتانسیل‌های سه‌ذره‌ای برای نمایاندن تغییرات شکل ملکول‌ها و هندسه‌های پیوند در ساختارهای اتمی کاربرد دارند. جمله‌های مرتبه‌بالتر پتانسیل (۳-۴) (به‌ازای  $m > 2$ ) می‌توانند در مدل‌سازی ساختارهای ملکولی پیچیده و جامدات - با توصیف شکل‌گیری پیوندهای شیمیایی، آرایش آن‌ها در فضا و ظرفیت شیمیایی اتم‌ها- ایفای نقش کنند. با وجود این، ممکن است پیاده‌سازی مدل‌هایی برای برهم‌کنش‌های چندذره‌ای در عمل، پیچیدگی بسیاری داشته باشد. از این‌رو، معمول است که از آثاری چندذره‌ای که مرتبه‌ی آن‌ها از سه بالاتر است چشم‌پوشی شود [۹۰].

### ۳-۱-۲- پتانسیل بین‌ملکولی تطبیقی<sup>۱</sup>

مطابق معادله‌ی (۳-۴)، تابع پتانسیل  $U$  حاصل‌جمعی از پتانسیل‌های خارجی  $V_1$  و جملاتی است که برهم‌کنش‌های اتمی را توصیف می‌کنند. برای حل مسأله‌هایی که در این گزارش طرح شده‌اند، فرض می‌شود نانولوله‌ها تحت تأثیر میدان گرانشی زمین یا سایر عوامل خارجی قرار نداشته باشند؛ بنابراین، پتانسیل‌های خارجی برابر با صفر خواهند بود و  $U$  تنها نماینده‌ی برهم‌کنش میان اتم‌ها است. دسته‌ای از پتانسیل‌های بین‌اتمی که با ساده‌سازی معادله‌ی (۳-۴) به دست می‌آیند به‌ازای هر اتم  $i$ ، ساختاری

<sup>۱</sup>- Adaptive intermolecular reactive empirical bond order (AIREBO) potential

کلی به صورت

$$V_{ij} = V_R(r_{ij}) - B_{ij}V_A(r_{ij}), \quad r_{ij} = |\vec{r}_{ij}| \quad (7-3)$$

دارند که در آن،  $V_R$  و  $V_A$  به ترتیب، برهم کنش‌های دافعه و جاذبه‌ی دوبه‌دو هستند و  $B_{ij}$  تابع مرتبه‌ی پیوند<sup>۱</sup> است که هدف از به‌کارگیری آن، در نظر گرفتن آثاری چندذره‌ای با توصیف آرایش پیوندهای نزدیک به هر اتم در فضا است [۹۰]. پتانسیل‌هایی بین‌اتمی که در ضابطه‌ی خود دارای ساختار (۷-۳) هستند پتانسیل‌های مرتبه‌ی پیوند نامیده می‌شوند.

در گزارش حاضر، پتانسیل بین‌اتمی انتخاب‌شده برای نانولوله‌های کربنی، یک پتانسیل مرتبه‌ی پیوند [۹۲] با معادله‌ی

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \left( E_{ij}^{\text{REBO}} + E_{ij}^{\text{LJ}} + \sum_{k \neq i, j} \sum_{l \neq i, j, k} E_{kijl}^{\text{tors}} \right) \quad (8-3)$$

است که در آن،

$$E_{ij}^{\text{REBO}} = V_R(r_{ij}) + b_{ij}V_A(r_{ij}), \quad (9-3 \text{ الف})$$

$$E_{ij}^{\text{LJ}} = S(t_r(r_{ij})) S(t_b(b_{ij}^*)) C_{ij} V_{ij}^{\text{LJ}}(r_{ij}) + [1 - S(t_r(r_{ij}))] C_{ij} V_{ij}^{\text{LJ}}(r_{ij}), \quad (9-3 \text{ ب})$$

$$E_{kijl}^{\text{tors}} = w_{ij}(r_{ij}) w_{jk}(r_{jk}) w_{kl}(r_{kl}) V^{\text{tors}}(\omega_{ijkl}) \quad (9-3 \text{ ج})$$

هرچند ضابطه‌های توابع معرفی‌شده با معادلات (۹-۳) در پیوست ۱ تشریح شده‌اند شایان ذکر است که پتانسیل  $E$  در معادله‌ی (۸-۳) تجربی است؛ کاربرد جمله‌ی  $E_{ij}^{\text{REBO}}$  در آن که شامل تابع مرتبه‌ی پیوند؛ یعنی  $b_{ij}$  است پیش‌بینی تشکیل و شکستن پیوند شیمیایی را ممکن می‌سازد و بدین ترتیب، واکنش‌پذیری سیستم اتمی قابل توصیف است؛  $E_{ij}^{\text{LJ}}$  متناظر با برهم‌کنش‌های واندروالس اتم‌ها است که معمولاً در فاصله‌های بین‌ملکولی رخ می‌دهند و سرانجام،  $E_{kijl}^{\text{tors}}$  جمله‌ای وابسته به زاویه‌ی دوجوهی به‌ازای چهار اتم  $i, j, k$  و  $l$  است و با کمک آن، برهم‌کنش‌های پیچشی اتم‌ها توصیف می‌شوند. همچنین، ضابطه‌هایی که برای  $E_{ij}^{\text{LJ}}$  و  $E_{kijl}^{\text{tors}}$  تعیین شده‌اند به گونه‌ای هستند که مقادیر

۱- Bond order function



آن‌ها در معادله‌ی (۳-۸)، وابسته به موقعیت نسبی اتم‌ها و شرایط پیوندها به صورت تدریجی تغییر می‌کنند و در نتیجه، مقدار پتانسیل بین‌اتمی با وضعیت سیستم، مطابقتی بهتر خواهد داشت [۹۲]. با توجه به آن‌چه در این بند ذکر شد دلیل نام‌گذاری  $E$  به عنوان پتانسیل بین‌مولکولی تطبیقی آشکار است.

پتانسیل بین‌اتمی  $E$  برای کاربرد در مدل‌سازی نانولوله‌های کربنی مزیت‌هایی بسیار دارد. این پتانسیل، ویژه‌ی هیدروکربن‌ها و نسخه‌ی بهبودیافته‌ی پتانسیلی پرکاربرد است که پیش از آن ارائه شده‌است؛ بنابراین، می‌توان معادله‌ی (۳-۸) را با اطمینان به کار گرفت. به‌علاوه، بازسازی عیب حفره که با تشکیل و شکستن پیوندها مرتبط است با بهره‌گیری از ویژگی‌های پتانسیل  $E$  قابل پیش‌بینی است. توصیف برهم‌کنش‌های واندروالس نیز که برای نانولوله‌های چندجداره از اهمیتی خاص برخوردار است با کمک ضابطه‌ی  $E$  با دقتی مناسب صورت می‌گیرد. تابع  $V_{ij}^{LJ}$  در معادله‌ی (۳-۹-ب)، پتانسیل لِنارد-جونز<sup>۱</sup> است که وابستگی آن به فاصله‌ی بین‌اتمی  $r_{ij}$  با تساوی

$$V_{ij}^{LJ}(r_{ij}) = \epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (۳-۱۰)$$

نمایش داده می‌شود؛ همچنین، برای دو اتم کربن،  $\epsilon_{ij} = ۰.۱۰۰۲۸۴ \text{ eV}$  و  $\sigma_{ij} = ۳.۴۰ \text{ \AA}$  [۹۲].

پیچیدگی ضابطه‌ی  $E$  سبب می‌شود مشتق‌گیری جزئی از آن نسبت به مختصات اتم‌های متحرک در محاسبه‌ی نیروهای داخلی سیستم دشوار باشد. از سوی دیگر، مطابق معادله‌ی (۲-۴)، ماتریس سفتی نانولوله به روش مستقیم، با تعیین مشتق‌های جزئی مرتبه‌دوم به‌دست می‌آید و بدین ترتیب، دشواری حل مسأله دوچندان خواهد شد. با وجود این، مشتق‌های جزئی مرتبه‌اول و همزمان، نیروهای داخلی سیستم با برنامه‌نویسی رایانه‌ای محاسبه شده‌اند و موقعیت تعادل سیستم که مترادف با صفر بودن نیروهای داخلی آن است با کمینه ساختن  $E$  حاصل شده‌است؛ سپس با معلوم بودن موقعیت مزبور و مشتق‌های جزئی مرتبه‌اول به‌ازای آن، مشتق‌های مرتبه‌دوم که درایه‌های ماتریس سفتی هستند با روش تفاضل محدود به‌دست آمده‌اند.

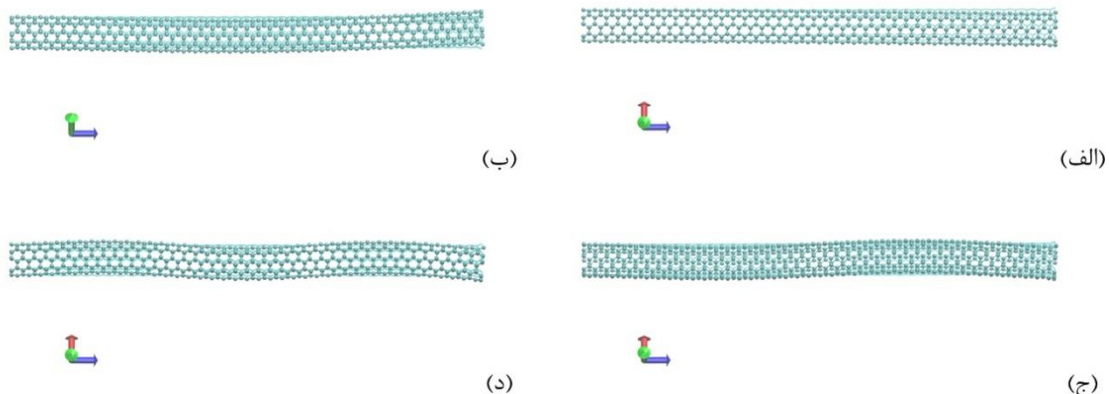
۱- Lennard-Jones

### ۳-۱-۳- محدودیت‌های محاسباتی

برای محاسبه‌ی هر درایه از ماتریس سفتی نانولوله، روش تفاضل محدود مرکزی با معادله‌ی آشنای

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} + O(h^2) \quad (۱۱-۳)$$

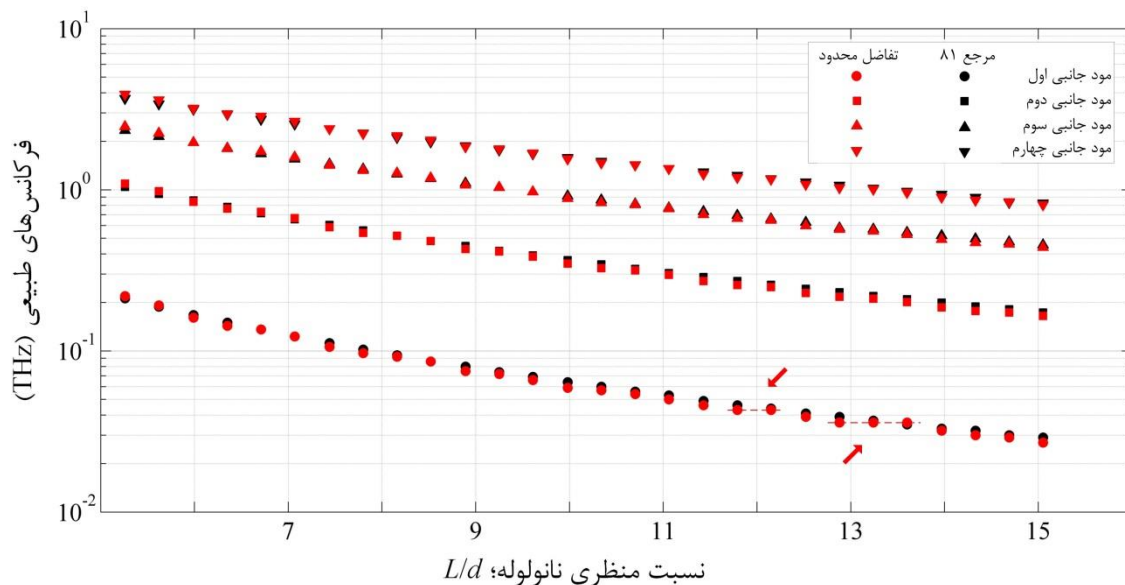
در تقریب مشتق تابع  $f$  به کار رفته‌است و با کمک آن، مسأله‌ی مقدار ویژه برای ارتعاش نانولوله حل شده‌است. مشاهده و مقایسه‌ی نمونه‌ای از نتایج این رهیافت، مزیت‌ها و کاستی‌های آن را بیشتر آشکار می‌کند. از این‌رو، برای نانولوله‌ی  $(۵,۵)$  با یک سر گیردار و نسبت منظری  $L/d = ۱۵,۰۵$  که نسبت طول به قطر آن است چهار شکل مود نخست از ارتعاشات جانبی در شکل ۳-۱ به نمایش درآمده‌اند. انتهای چپ نانولوله گیردار است و فرکانس‌های طبیعی متناظر با شکل‌های مود ۳-۱-الف تا ۳-۱-د به ترتیب افزایش می‌یابند. به علاوه، فرکانس متناظر با شکل مود ۳-۱-الف، فرکانس طبیعی اصلی سیستم است. با توجه به شکل ۳-۱، حرکت ارتعاشی نانولوله‌ی تک‌جداره در راستای جانبی می‌تواند مشابه تیر باشد؛ همچنین، راستای یادشده لزوماً بر محور  $x$  یا  $y$  از دستگاه مختصات - که به ترتیب، با پیکان‌های قرمز و سبز مشخص شده‌اند - منطبق نخواهد بود. شایان ذکر است که برای نمایش بهتر، هر یک از شکل‌های مود با بزرگ‌نمایی در تغییر شکل رسم شده‌اند و تغییر مکان هر اتم نسبت به موقعیت تعادل آن، چندان بزرگ نیست که وجود آثاری غیرخطی را در ارتعاشات آزاد نانولوله محتمل سازد.



شکل ۳-۱- چهار شکل مود نخست از ارتعاشات جانبی نانولوله‌ی  $(۵,۵)$  با یک سر گیردار و نسبت منظری

$$L/d = ۱۵,۰۵$$

هرچند شکل‌های مود الگویی مناسب دارند معیار درستی یافته‌ها در این مثال، فرکانس‌هایی طبیعی از نانولوله‌ی (۵,۵) و دارای همان شرایط مرزی هستند که با کاربرد شبیه‌سازی دینامیک ملکولی، به‌ازای گستره‌ای از نسبت‌های منظری حاصل شده‌اند [۸۱]. برای چهار مود نخست از ارتعاشات جانبی نانولوله، مقایسه‌ی فرکانس‌های طبیعی به‌دست‌آمده با دو روش تفاضل محدود و دینامیک ملکولی در نمودار شکل ۲-۳ صورت گرفته‌است. با وجود بیشینه‌ی خطای ۷/۸۱٪ و خطای نسبی ۳/۱۵٪، پیکان‌هایی که به نمودار اشاره می‌کنند نشان می‌دهند محاسبه‌ی فرکانس اصلی با کمک روش تفاضل محدود، به‌ازای دو بخش از گستره‌ی نسبت منظری به تغییر تعداد اتم‌ها حساس نیست. مقادیری از فرکانس که با این بخش‌ها متناظرند در جدول ۱-۳ فهرست شده‌اند. چنان‌که ملاحظه می‌شود با افزایش طول نانولوله، فرکانس اصلی محاسبه‌شده با کمک روش تفاضل محدود تغییری نداشته‌است حال آن‌که مطابق انتظار، نتیجه‌ی شبیه‌سازی دینامیک ملکولی، کاهش فرکانس اصلی با بیشتر شدن طول نانولوله است. چنین نقص‌هایی سبب می‌شوند روش تفاضل محدود به عنوان راه‌حل نهایی انتخاب نشود.



شکل ۲-۳- فرکانس‌های طبیعی متناظر با چهار مود نخست از ارتعاشات جانبی نانولوله‌ی (۵,۵) با یک سرِ گیردار به‌ازای نسبت‌های منظری مختلف

(در مرجع ۸۱ و مطالعه‌ی حاضر به‌ترتیب، روش‌های دینامیک ملکولی و تفاضل محدود به‌کار رفته‌اند)

جدول ۳-۱- مقادیر فرکانس اصلی برای نانولوله‌ی (۵,۵) با یک سر گیردار

| نسبت منظری؛ $L/d$ | تعداد اتم‌ها | فرکانس طبیعی اصلی (THz) |
|-------------------|--------------|-------------------------|
|                   |              | مرجع ۸۱                 |
| ۱۱,۷۹             | ۶۶۰          | ۰,۰۴۳                   |
| ۱۲,۱۵             | ۶۷۰          | ۰,۰۴۴                   |
| ۱۲,۸۸             | ۷۲۰          | ۰,۰۳۹                   |
| ۱۳,۲۴             | ۷۳۰          | ۰,۰۳۷                   |
| ۱۳,۶۰             | ۷۵۰          | ۰,۰۳۵                   |

با توجه به معادله‌ی (۳-۱۱)، اندازه‌ی گام  $h$  یک منشأ خطا برای روش تفاضل محدود است؛ به‌علاوه، هر یک از درایه‌های ماتریس سفتی با کمک چنین معادله‌ای محاسبه می‌شوند. در نتیجه، به نظر می‌رسد که با بزرگ‌تر شدن ابعاد ماتریس، خطای روش مزبور احتمالاً افزایش یابد. از سوی دیگر، انتخاب اندازه‌ی گام  $h$  برای کاربرد معادله‌ی (۳-۱۱) در حل مسائل گوناگون، مشکل اساسی به شمار می‌رود. با افزایش مقدار  $h$  خطای برش<sup>۱</sup> و با کاهش آن خطای گرد کردن بیشتر می‌شود؛ بنابراین، برای هر مسأله‌ی معین، یک مقدار بهینه‌ی  $h$  وجود دارد.

تعیین  $h$  در روش تفاضل محدود برای به‌دست آوردن فرکانس‌های طبیعی و شکل‌های مود نانولوله با برگزیدن مقداری ثابت در همه‌ی محاسبات [۹۳]، به‌کارگیری قاعده‌هایی سرانگشتی [۹۴] یا بررسی الگوریتمی برای یافتن مقدار بهینه [۹۵] مورد مطالعه قرار گرفت. چندین بار حل تعدادی مسأله‌ی نمونه نشان داد که کاربرد مقدار ثابت  $h$  یا قاعده‌های سرانگشتی، ضمانت نمی‌کند که ماتریس سفتی محاسبه‌شده معین مثبت باشد و از این‌رو، ممکن است حل مسأله به بن‌بست برسد. همچنین، پیاده‌سازی الگوریتمی برای بهینه‌سازی اندازه‌ی گام، با در نظر گرفتن حجم محاسبات هرگز مقرون به صرفه نیست. این دشواری روش تفاضل محدود همراه با نقص‌هایی که همچون نتایج جدول ۳-۱ در توانایی آن آشکار می‌گردند انگیزه‌ای برای بهره‌گیری از شبیه‌سازی دینامیک ملکولی است اما به‌دلیل آن که نمی‌توان با رهیافت یادشده شکل‌های مود را تعیین کرد نتایجی که از روش تفاضل محدود حاصل می‌شوند به عنوان تقریبی از فرکانس‌های طبیعی و شکل‌های مود همچنان ارزشمند هستند.

۱- Truncation error

چنانچه مقدار تابع  $f$  در معادله‌ی (۳-۱۱) با خطای  $\epsilon_f$  محاسبه شود؛ یعنی نتیجه برابر با

$$\hat{f} = f + \epsilon_f \quad (۳-۱۲)$$

باشد معادله‌ی مزبور به صورت

$$f'(x) = \frac{\hat{f}(x+h) - \hat{f}(x-h)}{2h} + O\left(h^2 + \frac{\epsilon_f}{h}\right) \quad (۳-۱۳)$$

تصحیح می‌شود و بنابراین، خطای محاسبه‌ی مشتق به‌ازای

$$h = O\left(\epsilon_f^{\frac{1}{3}}\right) \quad (۳-۱۴)$$

کمینه است [۹۳]. با این توضیح، برای یافتن ماتریس سفتی نانولوله، با فرض آن که در محاسبه‌ی مقادیر مشتق‌های مرتبه‌اول با اجرای برنامه‌ی رایانه‌ای تنها خطای گرد کردن روی دهد شمار رقم‌های اعشاری مقادیر، مرتبه‌ی خطا را مشخص می‌سازند. مشتق‌های مرتبه‌اول با نه رقم اعشاری حاصل می‌گردند و در نتیجه، با توجه به تساوی (۳-۱۴)، در تمام محاسبات یک مسأله،

$$h = O\left(10^{-\frac{1}{3}}\right) \quad (۳-۱۵)$$

و یک عدد ثابت انتخاب می‌شود. هرچند ثابت بودن اندازه‌ی گام دلیلی بر دستیابی به پاسخ نخواهد بود می‌توان مرتبه‌ی  $h$  را حفظ کرد اما مقدار آن را تغییر داد و بیش از یک بار برای حل مسأله تلاش کرد. سرانجام، یادآوری این نکته لازم است که روش تفاضل محدود، بیشتر در تعیین شکل‌های مود و شناسایی مدهای ارتعاش به‌کار رفته‌است.

### ۳-۱-۴- شبیه‌سازی دینامیک ملکولی

قابلیت‌های دو نرم‌افزار متلب<sup>۱</sup> و لمپس<sup>۲</sup> که متن‌باز و ویژه‌ی دینامیک ملکولی است رهیافت برگزیده را ممکن ساخته‌اند. ساختار هندسی نانولوله چنانکه پیش‌تر ذکر شد با برنامه‌نویسی در متلب به‌دست می‌آید و مختصات اتم‌های آن به عنوان بخشی از داده‌های مورد نیاز ذخیره می‌شوند. برای اجرای شبیه‌سازی باید سه فایل آماده گردند که یکی از آن‌ها ضابطه‌ی کامل تابع پتانسیل را در خود دارد.

۱- MATLAB

۲- LAMMPS

چنین فایلی همراه با نرم‌افزار ارائه می‌شود و بنا بر آنچه در بخش ۳-۱-۲ از نظر گذشت، فایل پتانسیل بین‌ملکولی تطبیقی گزینه‌ی تأییدشده است. تعداد و انواع (ثابت یا متحرک) اتم‌ها، مختصات و احتمالاً سرعت آن‌ها در لحظه‌ی صفر (پیش از آغاز شبیه‌سازی)، جرم هر نوع اتم و مرزهای بخشی از فضا که جعبه نام دارد و نانولوله در هنگام ارتعاش درون آن جای خواهدداشت در فایل داده مشخص می‌گردند. در نهایت، فایل ورودی شامل فرمان‌هایی برای ذخیره‌سازی اطلاعات اتم‌ها، تعیین یکاهای کمیت‌ها، دوبعدی یا سه‌بعدی بودن شبیه‌سازی و شرایط مرزی جعبه است. به‌علاوه، خواندن فایل داده، بازداشتن نوع ثابت اتم‌ها از حرکت با صفر کردن نیروی برآیندی که در مدت شبیه‌سازی بر اتم مورد نظر وارد می‌شود، به‌کارگیری تابع پتانسیل، چگونگی شبیه‌سازی، اندازه‌ی گام زمانی، تعداد آن و سرانجام، خروجی‌های شبیه‌سازی با اجرای فرمان‌هایی دیگر در فایل ورودی تعیین می‌شوند و لمپس دستور شبیه‌سازی را از این فایل دریافت می‌کند. چنان‌چه سرعت اتم‌ها پیش از شبیه‌سازی، در فایل داده وارد نشده‌باشد لازم است این اطلاعات در فایل ورودی برای نرم‌افزار فراهم شوند. بدین ترتیب، شرایط اولیه‌ی سیستم؛ یعنی موقعیت و سرعت اولیه برای انتگرال‌گیری از معادلات حرکت آن مهیا خواهندبود. همچنین، مدت شبیه‌سازی برابر با حاصل‌ضرب گام زمانی و تعداد آن است.

نکات یادشده درباره‌ی فایل داده و فایل ورودی نشان می‌دهند کاربرد دینامیک ملکولی دارای ظرافت‌هایی خاص است و روند حل مسأله با کمک آن باید از دقتی مناسب برخوردار باشد. از این‌رو، در ادامه‌ی رهیافت برگزیده گام‌هایی طی شده‌اند که بر مبنای سه مرجع مرتبط با مطالعه‌ی ارتعاشات نانولوله‌ها با بهره‌گیری از دینامیک ملکولی [۵۰، ۹۶ و ۹۷] هستند. گام‌های مزبور به دلیل اهمیت، تا پایان این بخش با رعایت ترتیب، هر یک در بندی جداگانه مرور خواهندشد.

مختصات اتم‌ها در ساختار هندسی نانولوله که با برنامه‌نویسی در متلب حاصل شده‌است در قالب یک فایل داده به لمپس ارائه می‌شود و این نرم‌افزار با کمینه‌سازی انرژی پتانسیل نانولوله، موقعیت تعادل آن را در خروجی ثبت می‌کند. این گام، مقدمه‌ی شبیه‌سازی دینامیک سیستم است. نانولوله‌ها در شرایط آزمایشگاهی دمایی دارند که مد نظر داشتن آن ضرورت دارد. در نتیجه،

نخستین شبیه‌سازی برای برقراری تعادل گرمایی در نانولوله صورت می‌گیرد. با انتخاب گام زمانی ۱ fs به تعداد ۱۰۰۰۰۰، سیستم که شمار اتم‌های آن ثابت است در جعبه‌ای با ابعاد ثابت، حرکت خود را از موقعیت تعادل آغاز می‌کند و دمای آن در مدت شبیه‌سازی، با به‌کارگیری دمایی نوز-هوور<sup>۱</sup> [۹۸] در حدود دمای اتاق (۳۰۰ K) کنترل می‌شود. در انتهای این گام، نانولوله به دمای تعادل می‌رسد و مختصات اتم‌های آن و سرعت آن‌ها برای گام‌های بعدی ذخیره می‌شوند.

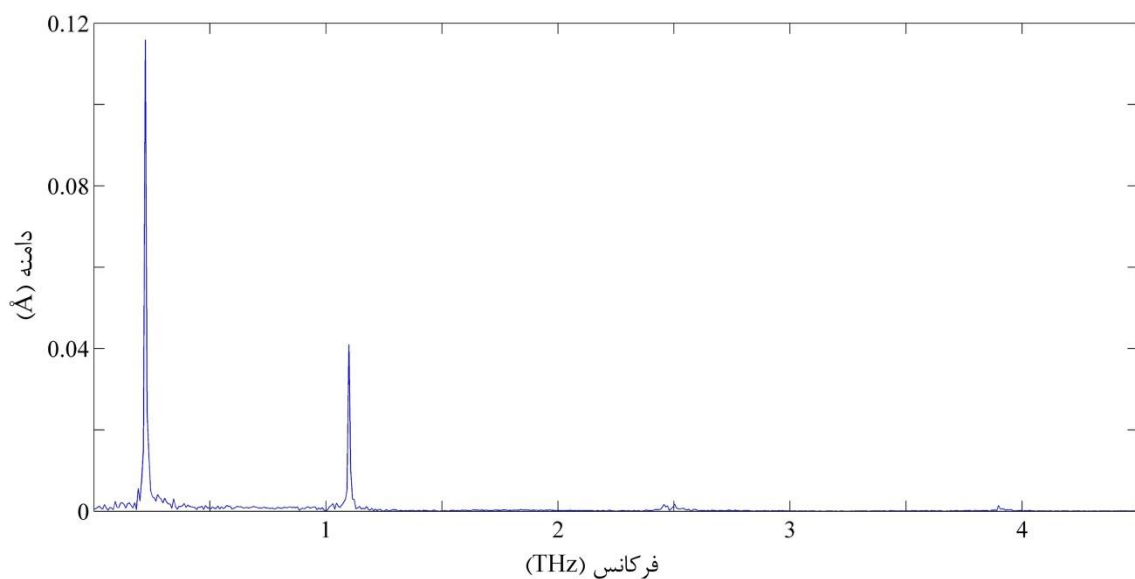
مختصات ذخیره‌شده‌ی اتم‌ها به گونه‌ای دستکاری می‌شوند که پیش از شبیه‌سازی مجدد برای محاسبه‌ی هر فرکانس طبیعی، نانولوله به شکل مود متناظر با آن شباهت پیدا کند. با بیان دقیق‌تر، مضرری از شکل مود با مختصات اتم‌ها جمع می‌شود هرچند، این تغییر شکل باید به اندازه‌ای کوچک باشد که از بروز آثار غیرخطی در ارتعاشات آزاد نانولوله جلوگیری شود. شایان ذکر است که میزان چنین تغییرشکلی در مراجع مختلف مشاهده نشد و با فرضی منطقی، معیار تغییر مکان اتم‌ها چنان انتخاب شده‌است که طول هر پیوند حداکثر، کمتر از ۱۰ درصد طول پیوند کربن-کربن (در گرافیت)؛ یعنی ۱٫۴۲۱ Å افزایش یا کاهش یابد. بدین ترتیب، می‌توان سیستم را نزدیک به یک مود معین، تحریک شده دانست و سپس حرکت ارتعاشی آن را شبیه‌سازی کرد.

دومین شبیه‌سازی نیز به‌طور مشابه، با گام زمانی ۱ fs و در دمای اتاق صورت می‌گیرد؛ به‌علاوه، مدت آن با توجه به تعداد اتم‌های نانولوله و شرایط مرزی آن متفاوت است (شمار بیشتر اتم‌ها و دو سر گیردار در مقایسه با یک سر گیردار و یک سر آزاد، شبیه‌سازی را طولانی‌تر می‌سازند؛ به عنوان مثال، برای نانولوله‌هایی تک‌جداره با ۲۹۰ تا ۸۳۰ اتم و یک یا دو انتهای گیردار، شبیه‌سازی به‌ترتیب، در مدت ۱۳۰ ps تا ۴۰۰ ps و ۲۶۰ ps تا ۸۰۰ ps اجرا شده‌است). مختصات مرکز جرم نانولوله در این مدت تغییر می‌کنند و در پایان هر گام زمانی ثبت می‌شوند؛ بنابراین، تغییر مکان مرکز جرم با زمان در سه راستای x، y و z از دستگاه مختصات به‌دست می‌آید و با تبدیل سریع فوریه، این نتایج به حوزه‌ی فرکانس انتقال می‌یابند. سرانجام، نمودارهای طیف دامنه (برحسب فرکانس) برخی از

---

۱- Nose-Hoover

فرکانس‌های طبیعی را آشکار می‌نمایند که در میان آن‌ها، فرکانس مود تحریک‌شده نیز وجود دارد. برای نمونه، مطابق شکل ۳-۳، نمودار طیف دامنه‌ی متناظر با مختصه‌ی  $x$  از مرکز جرم نانولوله‌ی (۵,۵) با ۲۹۰ اتم و یک سر گیردار که ارتعاش جانبی آن شبیه‌سازی شده‌است دارای چهار قله‌ی مشخص است که فرکانس‌های متناظر با آن‌ها کوچک‌ترین فرکانس‌های ارتعاش جانبی هستند؛ از این‌رو، فرکانس اصلی سیستم به‌سادگی برابر با ۰,۲۲۱ THz محاسبه می‌شود. نکته‌ی جالب درباره‌ی نمودار شکل ۳-۳ آن است که اگرچه با تحریک مود جانبی نخست، بلندترین قله‌ی نمودار نماینده‌ی آن است سه مود جانبی بعدی همراه با آن تحریک شده‌اند. محاسباتی مشابه برای نانولوله‌ی (۵,۵) نشان داده‌اند که تحریک مود جانبی نخست به‌ازای شرایط مرزی یک‌سر گیردار و دوسر گیردار به‌ترتیب، برای یافتن چهار فرکانس نخست ارتعاش جانبی و فرکانس‌های اول و سوم ارتعاش جانبی کفایت می‌کند. می‌توان مشاهده نشدن فرکانس‌های دوم و چهارم را در نمودار طیف دامنه‌ی متعلق به نانولوله‌ی دوسر گیردار با تقارن شکل‌های مود جانبی با شماره‌ی زوج نسبت به میانه‌ی نانولوله مرتبط دانست که سبب می‌گردد مرکز جرم نانولوله در هنگام ارتعاش آن، تغییر مکانی قابل‌توجه نداشته باشد. با وجود این، در بیشتر مسائل، هدف، به‌دست آوردن فرکانس اصلی است که با رهیافت برگزیده تحقق خواهد یافت.



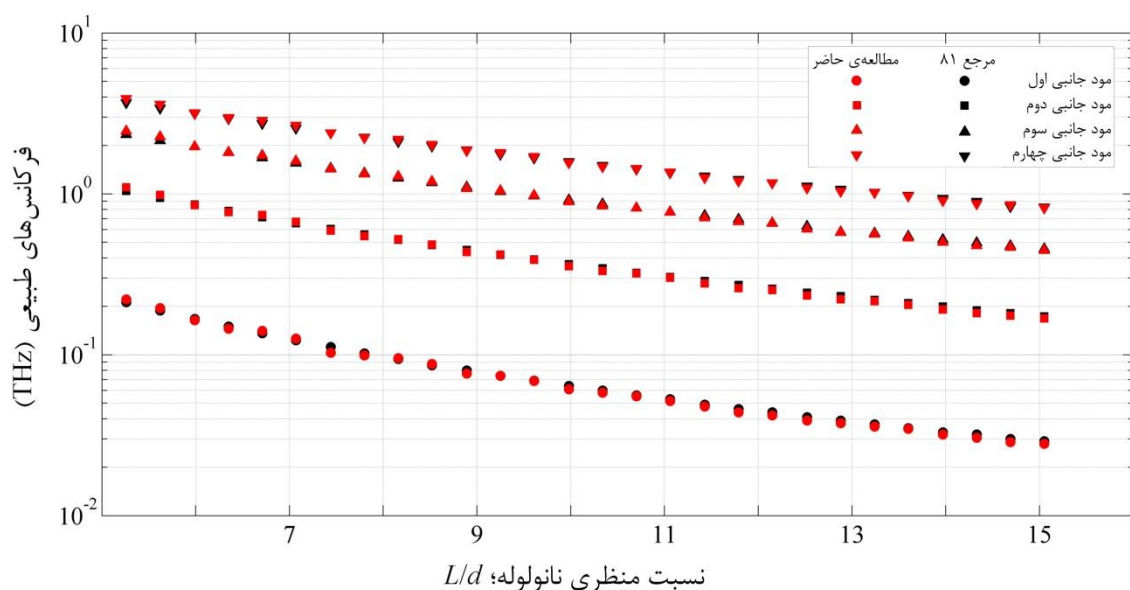
شکل ۳-۳- نمودار طیف دامنه برای نانولوله‌ی (۵,۵) با ۲۹۰ اتم و یک سر گیردار



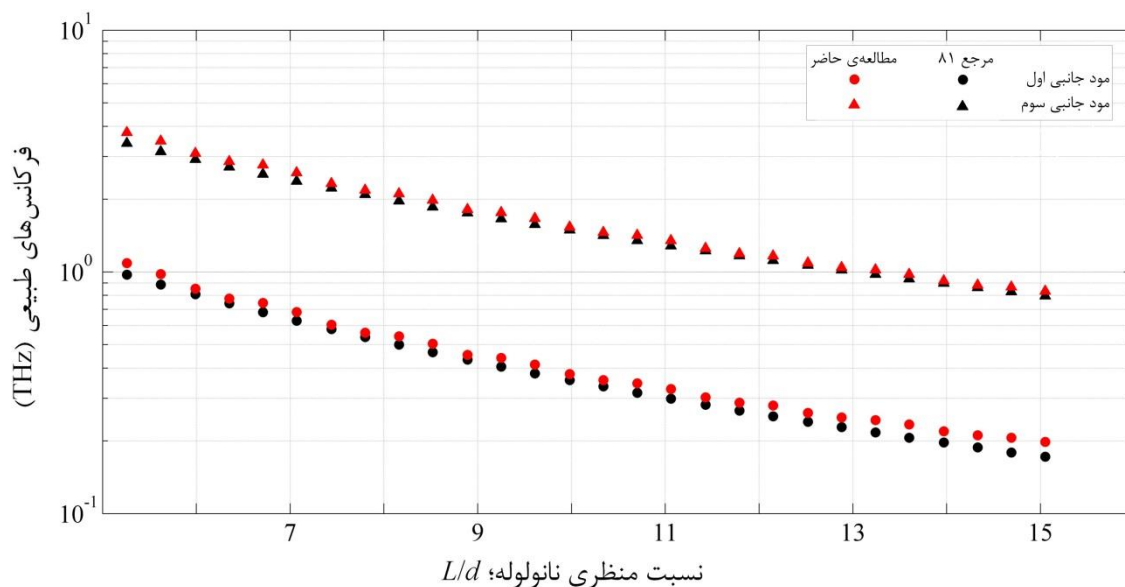
در خاتمه، یادآوری می‌شود که روش تشریح‌شده در بخش حاضر برای هر دو گونه‌ی تک‌جداره و دوجداره‌ی نانولوله به کار رفته‌است و نمونه‌ی فایل‌های داده و فایل‌های ورودی شبیه‌سازی در پیوست ۲ ارائه شده‌است.

### ۳-۲- اعتبارسنجی راه‌حل

رهیافت برگزیده بر پایه‌ی دینامیک ملکولی است و با وجود جست‌وجوی بسیار در مراجع موجود، مقالاتی که بتوان با داده‌های آن‌ها اعتبار راه‌حل را ارزیابی کرد انگشت‌شمار هستند. در توضیح چنین محدودیتی برای اعتبارسنجی، شایان ذکر است که دقت زیاد، یکی از ویژگی‌های دینامیک ملکولی است و در موردی خاص مانند ارتعاشات نانولوله، نتایجی دقیق‌تر که در آزمون رهیافت مزبور مفید باشند فراوانی و گوناگونی چندانی ندارند. بنابراین، برای نانولوله‌های تک‌جداره، تنها برخی از فرکانس‌های طبیعی نانولوله‌ی (۵,۵) با داده‌هایی متناظر از مرجع ۸۱- به عنوان نتایج منتشرشده‌ی قابل اعتماد- مقایسه شده‌اند؛ هرچند مقادیر مرجع یادشده نیز با شبیه‌سازی دینامیک ملکولی به دست آمده‌اند و لزوماً از دقتی بیشتر برخوردار نیستند. در شکل‌های ۳-۴ و ۳-۵، اختلاف نتایج رهیافت برگزیده با مقادیری که نقش معیار را دارند به نمایش درآمده‌است.



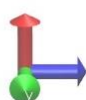
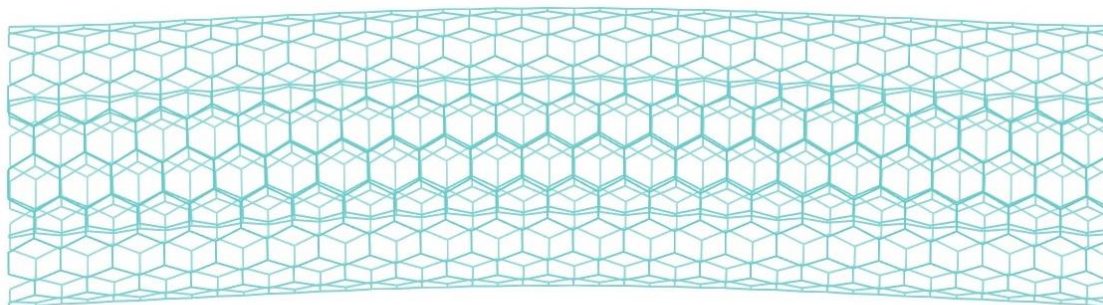
شکل ۳-۴- برخی از فرکانس‌های طبیعی نانولوله‌ی (۵,۵) با یک سر گیردار به‌ازای نسبت‌های منطری مختلف



شکل ۳-۵- برخی از فرکانس‌های طبیعی نانولوله‌ی (۵,۵) با دو سر گیردار به‌ازای نسبت‌های منظری مختلف

به‌ازای شرایط مرزی یک‌سر گیردار، بیشینه‌ی خطا و خطای نسبی به‌ترتیب، ۸,۰۴٪ و ۲,۵۱٪ هستند که هر دو قابل‌قبول اند و به‌ازای شرایط مرزی دوسر گیردار، این خطاها به ۱۵,۱٪ و ۷,۰۳٪ افزایش می‌یابند. در ادامه، بیشینه‌ی خطای ۱۵,۱٪ تحلیل شده‌است.

اعتبارسنجی راه‌حل برای نانولوله‌های دوجداره با داده‌های مراجع موجود امکان‌پذیر نیست. به عنوان مثال، در متن مرجع ۵۷ یک بار، نسبت منظری نانولوله‌ی دوجداره به‌صورت نسبت طول به شعاع دیواره‌ی درونی به‌کار رفته‌است اما در ارائه‌ی فرکانس‌های طبیعی برحسب نسبت منظری، تعریفی واضح از آن مشاهده نمی‌شود.

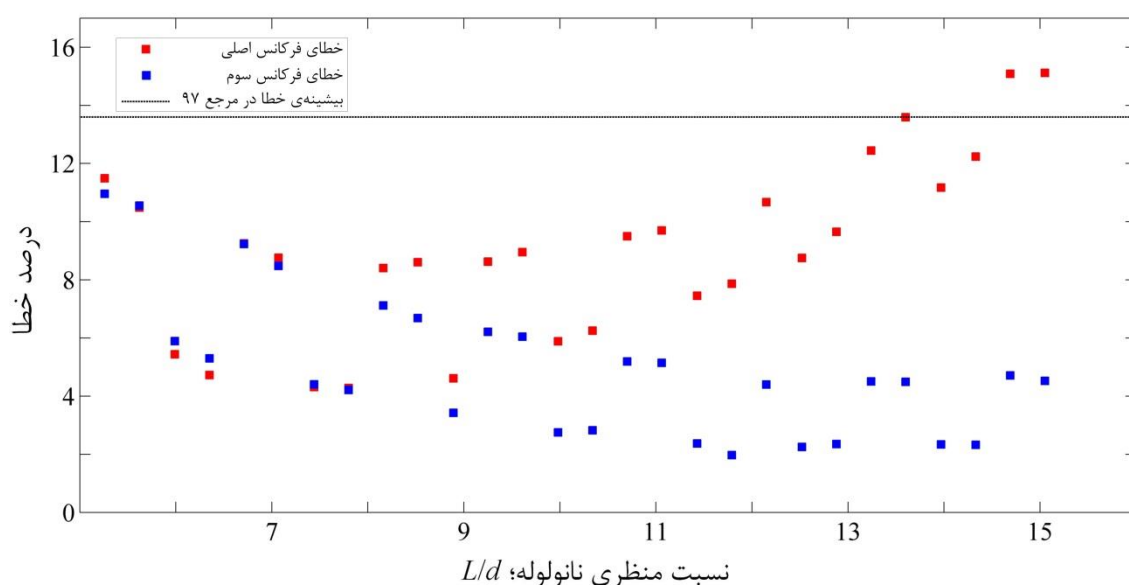


شکل ۳-۶- شکل مود نخست برای نانولوله‌ی دوجداره‌ی (۱۰,۱۰)@(۵,۵) با ۱۳۲۰ اتم و دو سر گیردار

از سوی دیگر، کاربرد روش تفاضل محدود نشان می‌دهد نانولوله‌ی دوجداره‌ی  $(10,10)@(\delta,\delta)$  با دو سر گیردار، در راستای جانبی به گونه‌ای ارتعاش می‌کند که مطابق انتظار، شکل مود نخست آن (متناظر با فرکانس طبیعی اصلی) همانند شکل ۳-۶ است. از این‌رو، روش تفاضل محدود در به‌دست آوردن تصویری از شکل‌های مود نانولوله‌های دوجداره نیز مفید است.

### ۳-۲-۱- تحلیل خطا

در مرجع ۹۷، نظیر اعتبارسنجی بخش پیشین، نتایج دو شبیه‌سازی دینامیک ملکولی برای ارتعاشات آزاد نانولوله‌ی  $(\delta,\delta)$  مقایسه شده‌اند که از میان آن‌ها، یکی معیار قرار گرفته‌است. همچنین، بیشینه‌ی خطای محاسبه‌شده برابر با  $13.6\%$  است که در نمودار شکل ۳-۷، میزان مجاز خطا برای فرکانس‌های به‌دست‌آمده با رهیافت برگزیده انتخاب شده‌است. چنان‌که ملاحظه می‌شود تنها فرکانس اصلی نانولوله‌ی  $(\delta,\delta)$  با دو سر گیردار به‌ازای نسبت‌های منطری بزرگ‌تر، خطاهایی بیشتر از میزان مجاز دارد و الگوی خطای آن با افزایش نسبت منطری، نوسانی است هرچند صعودی به نظر می‌رسد. با این برداشت از نمودار و با توجه به آن‌که رهیافت برگزیده با شبیه‌سازی مشابهی که لزوماً دقیق‌تر نیست محک خورده‌است؛ تحلیل بیشینه‌ی خطای رهیافت به توضیحی مفصّل‌تر نیاز دارد.



شکل ۳-۷- خطای محاسبه‌ی فرکانس طبیعی برای نانولوله‌ی  $(\delta,\delta)$  با دو سر گیردار به‌ازای نسبت‌های منطری مختلف

چنانچه نتیجه‌ی یک شبیه‌سازی، بدیع، پیش‌بینی نشده یا عجیب باشد ممکن است پدیده‌ای تازه کشف شده باشد و/یا نتیجه نادرست باشد [۹۹]. درباره‌ی نتایج رهیافت برگزیده که بیشینه‌ی خطای آن‌ها غیرعادی می‌نماید این گزاره‌ها رد می‌شوند و بدین ترتیب، اعتبار راه‌حل اثبات می‌شود. در بیان دلیل، نخست باید یادآوری کرد که مجموعه‌ی یافته‌ها (فرکانس‌های طبیعی) از دیدگاه کمی و کیفی با درکی که از ارتعاشات نانولوله‌ها وجود دارد سازگارند و نمی‌توان آن‌ها را نماینده‌ی پدیده‌ای تازه دانست. دوم، برای نادرستی نتایج پنج علت ذکر شده‌اند [۹۹] که نامناسب بودن مدل به‌کاررفته در حل مسأله، جامع نبودن میدان نیرو<sup>۱</sup>، عدم همگرایی نتایج به‌دلیل نمونه‌برداری ناکافی، نقص‌های نرم‌افزار و به‌کارگیری غلط آن هستند و هر یک می‌توانند عامل نادرست بودن نتایج باشند. از سوی دیگر، بنا بر آنچه پیش‌تر بیان شد مدل‌سازی نانولوله برای مطالعه‌ی ارتعاشات آن بادقتی مناسب صورت گرفته‌است و تابع پتانسیل انتخاب‌شده میدان نیرو را به‌درستی توصیف می‌کند؛ به‌علاوه، فرکانس طبیعی ارتعاش نانولوله در غیاب آثار غیرخطی، مستقل از زمان است و بنابراین، از مدت شبیه‌سازی (میزان نمونه‌برداری) تأثیری معنادار نمی‌پذیرد. در اجرای شبیه‌سازی‌ها نیز تازه‌ترین نسخه‌ی نرم‌افزار لمپس (تا زمان تدوین گزارش حاضر) به‌کار رفته‌است؛ این نرم‌افزار متن‌باز، پیوسته به‌روز می‌شود و همزمان، نقص‌هایی از آن برطرف می‌شوند چنان‌که برای حل مسأله‌های طرح‌شده در این متن، وجود نقص در نرم‌افزار محتمل نیست. سرانجام، کاربرد صحیح لمپس با شناخت مسأله و تسلط بر راه‌حل دشوار نخواهد بود. دلایل مزبور همگی نشان می‌دهند که نتایج رهیافت برگزیده درست هستند و راه‌حلی که در این فصل ارائه شد معتبر است.



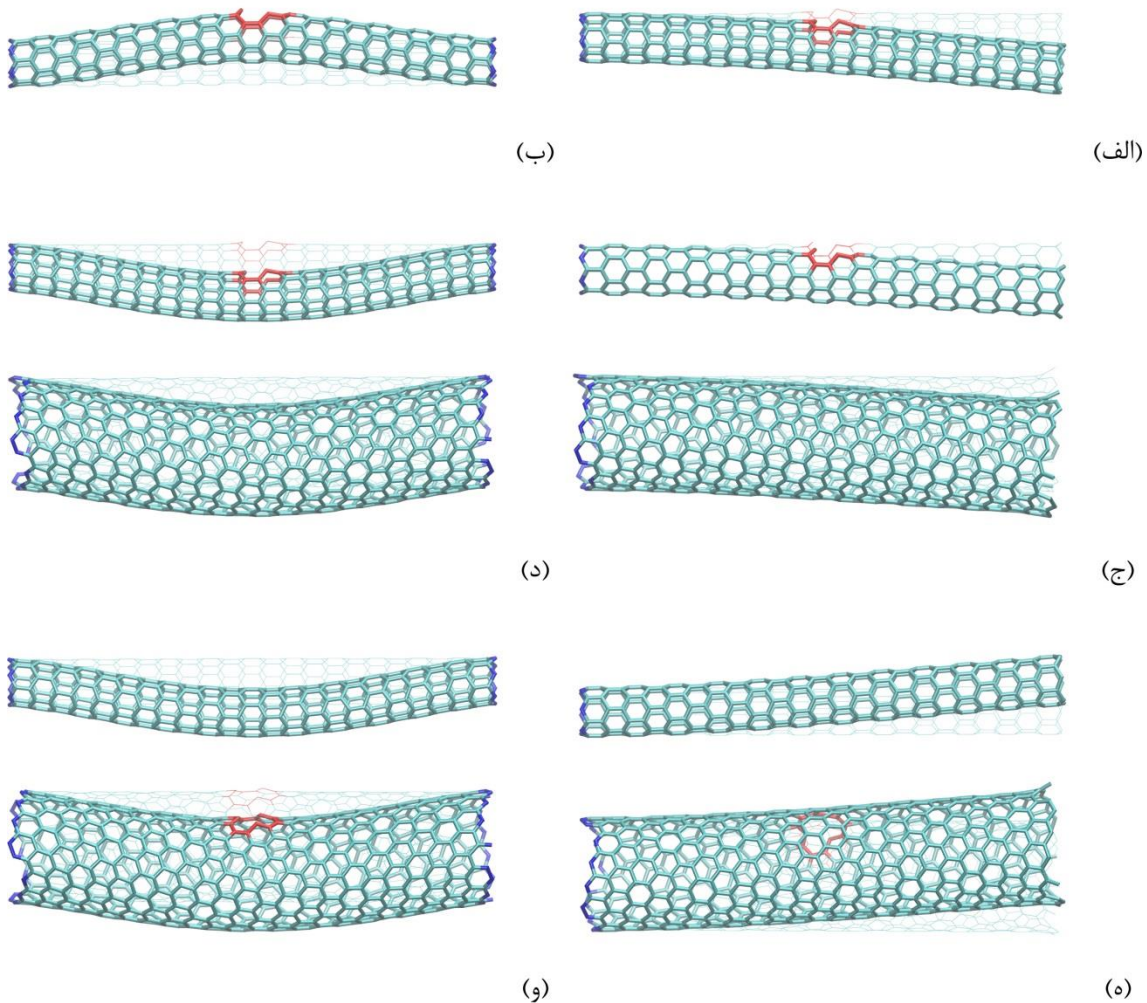
# فصل ۴- اثر عیب حفره بر فرکانس‌های طبیعی نانولوله‌های کربنی

محتوای فصل:

- ❖ مقدمه‌ی حل مسأله
- ❖ اثر تک عیب حفره
- ❖ اثر عیوب حفره با توزیع تصادفی

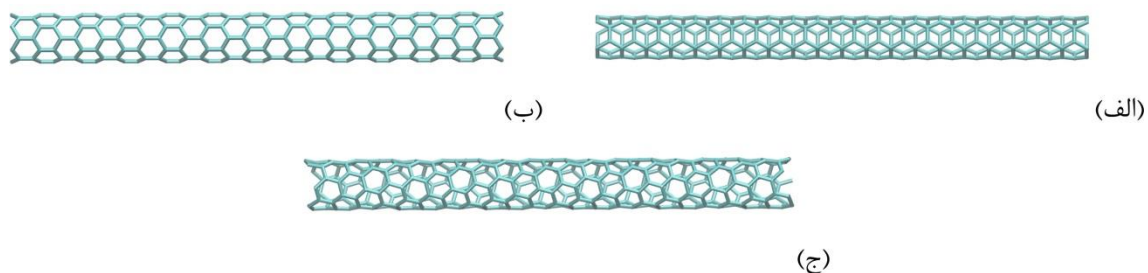
#### ۱-۴- مقدمه‌ی حل مسأله

وجود عیب حفره در ساختار نانولوله وجه تمایز مسائل فصل حاضر و مسأله‌هایی است که در فصل پیشین به آن‌ها پرداخته شد. تأثیر عیب بر شکل‌های مود نانولوله پیش از تحلیل ارتعاشات آن ناشناخته است و از سوی دیگر، در رهیافت برگزیده از شباهت شکل مود نخست به موج سینوسی (یا نیم‌سینوسی) برای تحریک اولیه‌ی نانولوله بهره گرفته می‌شود؛ در نتیجه، مطابق شکل ۱-۴، نخست با کمک روش تفاضل محدود، چندین شکل مود نمونه برای نانولوله‌های  $(6,0)$  و  $(13,3)@(6,0)$  با وجود عیب حفره به‌ازای شرایط مرزی متفاوت به‌دست آمده‌اند.



شکل ۱-۴- شکل‌های مود نخست نانولوله‌ی  $(6,0)$  و نانولوله‌ی  $(13,3)@(6,0)$  با وجود عیب حفره (در شکل‌های ۱-۴-ج تا ۱-۴-و، دو دیواره‌ی درونی و بیرونی نانولوله‌ی دوجداره جداگانه رسم شده‌اند)

چنان‌که ملاحظه می‌شود، برای نانولوله‌های تک‌جداره و دوجداره‌ی شکل ۴-۱ با یک یا دو سر گیردار (حلقه‌های انتهایی آبی‌رنگ)، تک‌عیب حفره (با رنگ قرمز) در میانه‌ی ساختار اثر چندانی بر شکل مود نخست ندارد و آرایش اتم‌ها تنها در نزدیکی محل عیب اندکی تغییر می‌کند. بر اساس چنین مشاهدیهایی و با فرض آن‌که وجود عیب حفره صورت مسأله‌ی مقدار ویژه را عوض نکند مسائل این فصل با رهیافت برگزیده حل شده‌اند. باید توجه داشت که فراوانی و گوناگونی مسأله‌ها به‌دلیل امکان تغییر پارامترهایی بسیار، دامنه‌ی مطالعات را گسترده می‌سازند؛ برای نمونه، طول، قطر، نسبت منظری، دست‌سازنی و شرایط مرزی نانولوله، تراکم و محل عیب حفره، تعداد جداره‌های نانولوله و یگانه یا دوگانه بودن عیب، هر یک می‌توانند بر ارتعاشات آزاد نانولوله تأثیرگذار باشند. با وجود این، با رعایت اختصار در ارائه‌ی نتایج ضمن حفظ عمومیت حل، سه نانولوله‌ی تک‌جداره‌ی (۳,۳)، (۶,۰) و (۵,۲) و سه نانولوله‌ی دوجداره‌ی (۸,۸)@(۳,۳)، (۱۳,۳)@(۶,۰) و (۱۱,۶)@(۵,۲) برای تحلیلی مقایسه‌ای انتخاب شده‌اند و به‌ازای شرایط مرزی یک‌سر گیردار و دوسر گیردار و طول‌های ۱۵-۵ nm، اثر تک‌عیب حفره بر فرکانس طبیعی اصلی آن‌ها مطالعه شده‌است. اهمیت این فرکانس سیستم در قیاس با فرکانس‌های طبیعی بزرگ‌تر از آن -که به‌ویژه در مباحث مهندسی ارتعاشات بر آن تأکید می‌شود- باعث چشم‌پوشی از محاسبه‌ی دیگر فرکانس‌های طبیعی برای هر نانولوله شده‌است. به‌علاوه، حسن انتخاب نانولوله‌های صندلی‌نمای (۳,۳) و زیگزاگ‌نمای (۶,۰) که دارای کوچک‌ترین قطرهای ممکن هستند [۵۰] کوتاه کردن زمان محاسبات است. قطر نانولوله‌ی دست‌ساز (۵,۲) نیز اندکی بزرگ‌تر است و نزدیکی اندازه‌ی قطرها به مطالعه‌ی بهتر آثار طول و دست‌سازنی می‌انجامد (شکل ۴-۲).



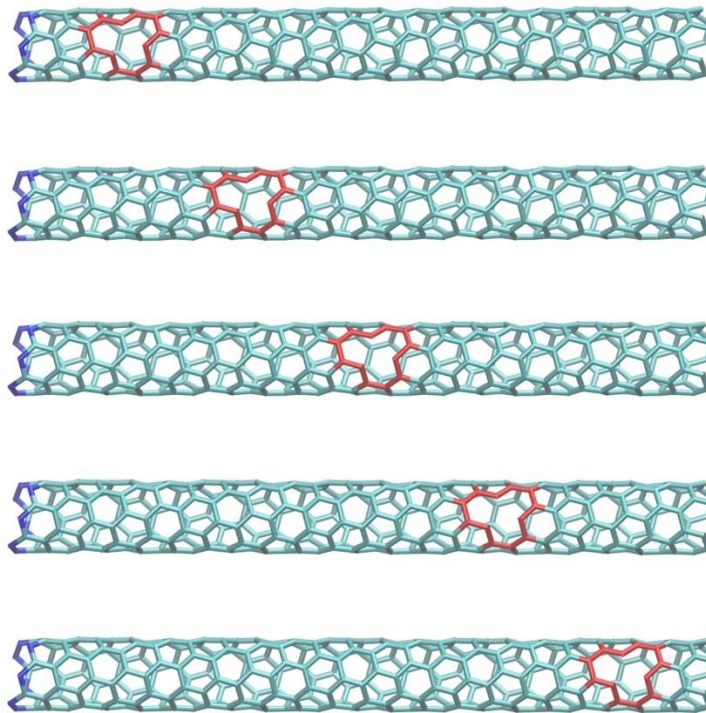
شکل ۴-۲- سه نانولوله‌ی تک‌جداره‌ی (الف) صندلی‌نمای (۳,۳)، (ب) زیگزاگ‌نمای (۶,۰) و (ج) دست‌ساز (۵,۲)



#### ۲-۴- اثر تک عیب حفره

مطابق نمونه‌ی شکل ۳-۴، برای نانولوله‌های تک‌جداره، یک عیب حفره‌ی یگانه در راستای طول هر نانولوله جابه‌جا شده‌است تا تأثیر آن بر فرکانس اصلی سیستم آشکار گردد. نکته‌ی قابل توجه آن است که جابه‌جایی عیب، روی محیط نانولوله صورت نگرفته‌است و نیز، طول نانولوله به میزانی انتخاب شده‌است که بتوان با وجود محدود بودن دقت حل، اثر کمبود یک اتم را از مجموعه‌ی چند صد اتم بر فرکانس به‌درستی تشخیص داد. بنابراین، طول هر نانولوله‌ی تک‌جداره ۵ nm، ۱۰ nm یا ۱۵ nm در نظر گرفته شده‌است.

با توضیحی مشابه برای نانولوله‌های دوجداره، طول ۵ nm یا ۱۰ nm مناسب آن‌ها است و تک عیب حفره یک بار در دیواره‌ی درونی و یک بار در صورت امکان، در دیواره‌ی بیرونی هر یک جابه‌جا شده‌است. در ادامه، با ارائه‌ی بخشی از نتایج محاسبات، تأثیر تک عیب حفره بر فرکانس‌های اصلی چند نانولوله مطالعه خواهد شد.



شکل ۳-۴- جابه‌جایی تک عیب حفره (با رنگ قرمز) در راستای طول نانولوله‌ی (۵,۲) با طول ۵ nm و یک سر گیردار (حلقه‌ی آبی انتهایی چپ)

برای سادگی مقایسه، همه‌ی نتایج در قالب نمودار ارائه می‌شوند و درصد جابه‌جایی فرکانس

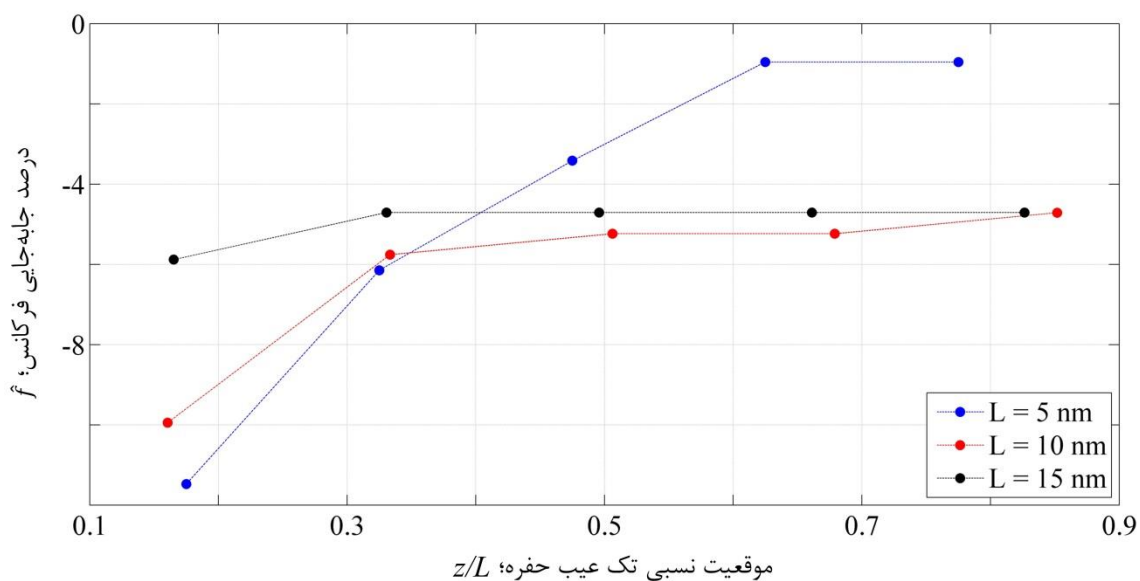
با نماد  $\hat{f}$ ، به صورت

$$\hat{f} = \frac{f - f_0}{f_0} \times 100 \quad (1-4)$$

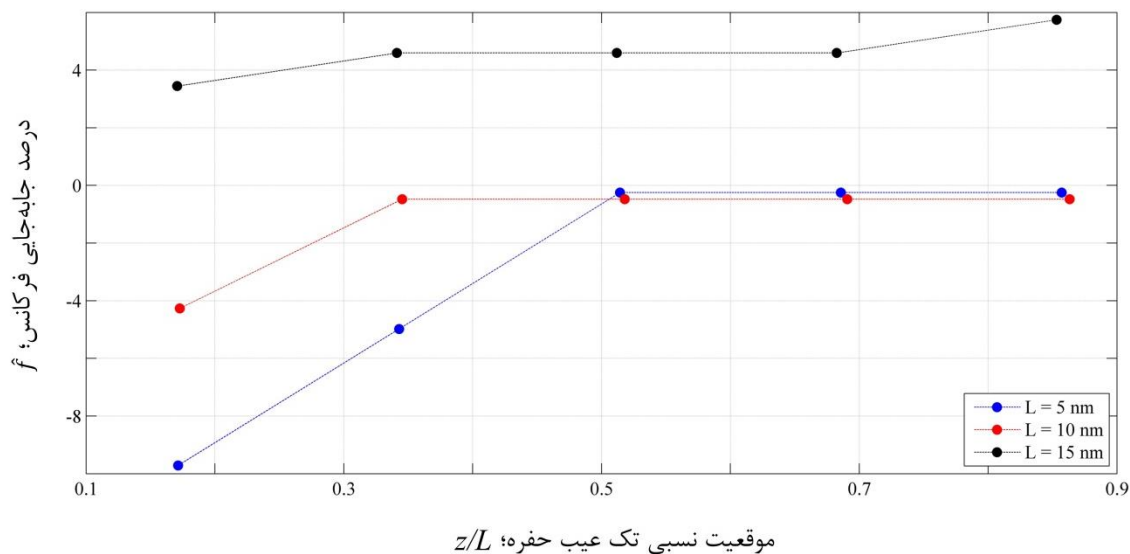
تعریف می‌شود که در آن،  $f_0$  و  $f$  به ترتیب، فرکانس اصلی نانولوله‌ی بدون عیب و نانولوله‌ی دارای عیب هستند. همچنین، با توجه به معادله‌ی (۱-۴)،  $\hat{f}$  با تغییر فرکانس هم‌علامت است و نشان‌دهنده‌ی کاهش یا افزایش آن خواهد بود. شایان ذکر است که عدم تأثیرپذیری فرکانس اصلی از عیب حفره بر کافی نبودن دقت حل دلالت نمی‌کند.

#### ۴-۲-۱- نانولوله‌های تک‌جداره

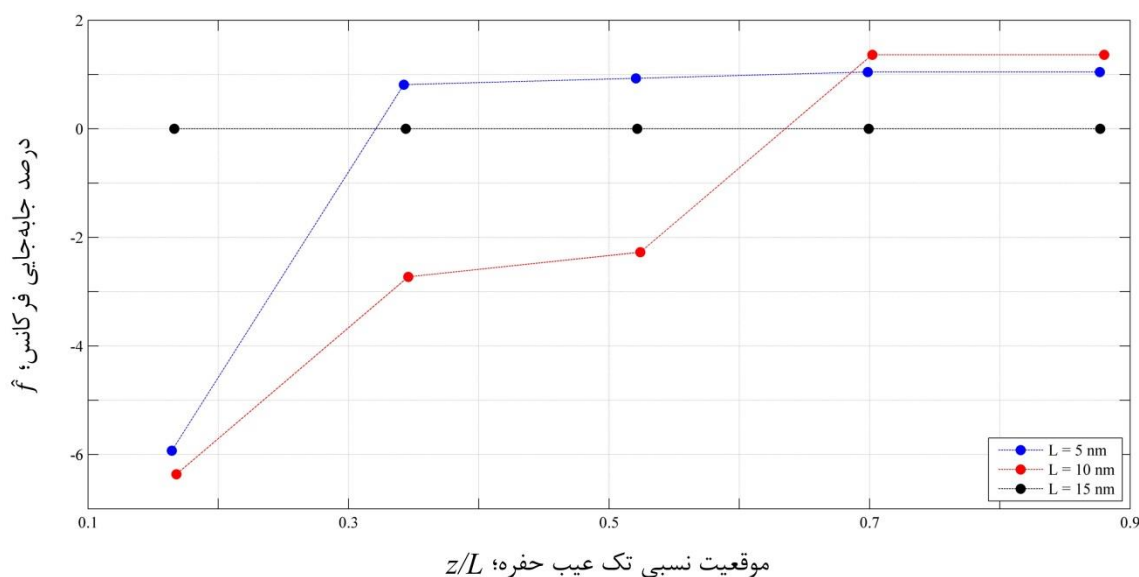
در شکل‌های ۴-۴ تا ۹-۴، برای شش نانولوله‌ی تک‌جداره با یک یا دو سر گیردار که در ساختار آن‌ها تنها یک عیب حفره‌ی یگانه وجود دارد  $\hat{f}$  برحسب نسبت موقعیت عیب به طول نانولوله (با نماد  $z/L$ ) رسم شده است (در نانولوله‌های یک‌سر گیردار، انتهای گیردار متناظر با  $z/L = 0$  است). مطابق شکل ۴-۴، برای نانولوله‌ی (۳,۳) با یک سر گیردار، وجود عیب کاهش فرکانس اصلی را در پی دارد و با افزایش طول نانولوله، حساسیت  $\hat{f}$  به محل عیب کمتر می‌شود.



شکل ۴-۴ اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۳,۳) با یک سر گیردار و طول‌هایی متفاوت



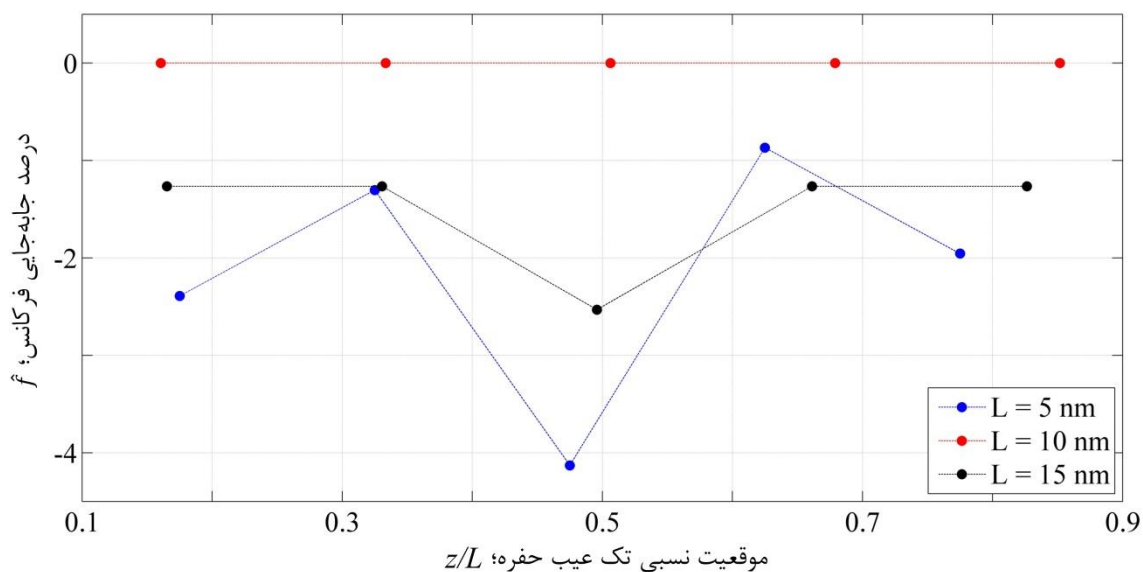
شکل ۴-۵- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۶,۰) با یک سر گیردار و طول‌هایی متفاوت



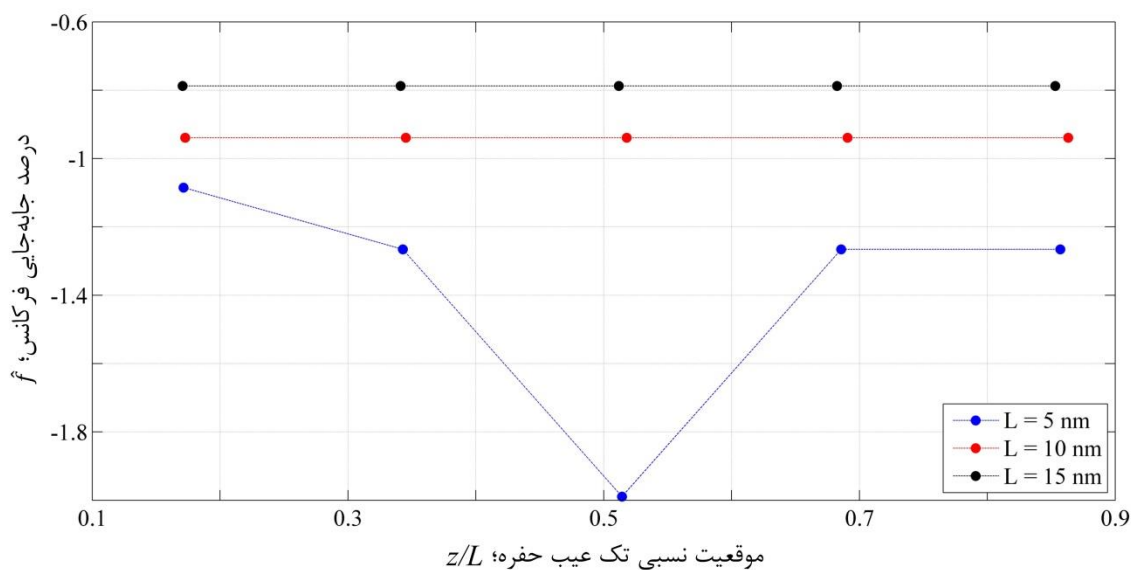
شکل ۴-۶- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۵,۲) با یک سر گیردار و طول‌هایی متفاوت

با توجه به دو شکل ۴-۵ و ۴-۶، برخلاف نانولوله‌ی (۳,۳) با یک سر گیردار، وجود تک عیب در نانولوله‌های (۶,۰) و (۵,۲) می‌تواند سبب افزایش یا کاهش فرکانس اصلی شود. از سوی دیگر، عدم کاهش  $f$  با دور شدن عیب از انتهای گیردار، وجه مشترک هر سه گونه‌ی نانولوله است و تغییر فرکانس هر یک همواره کمتر از ۱۰٪ است. شایان ذکر است که فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۶,۰) با طول ۵ nm یا ۱۰ nm تنها هنگامی که عیب در نزدیکی انتهای گیردار آن است تغییری

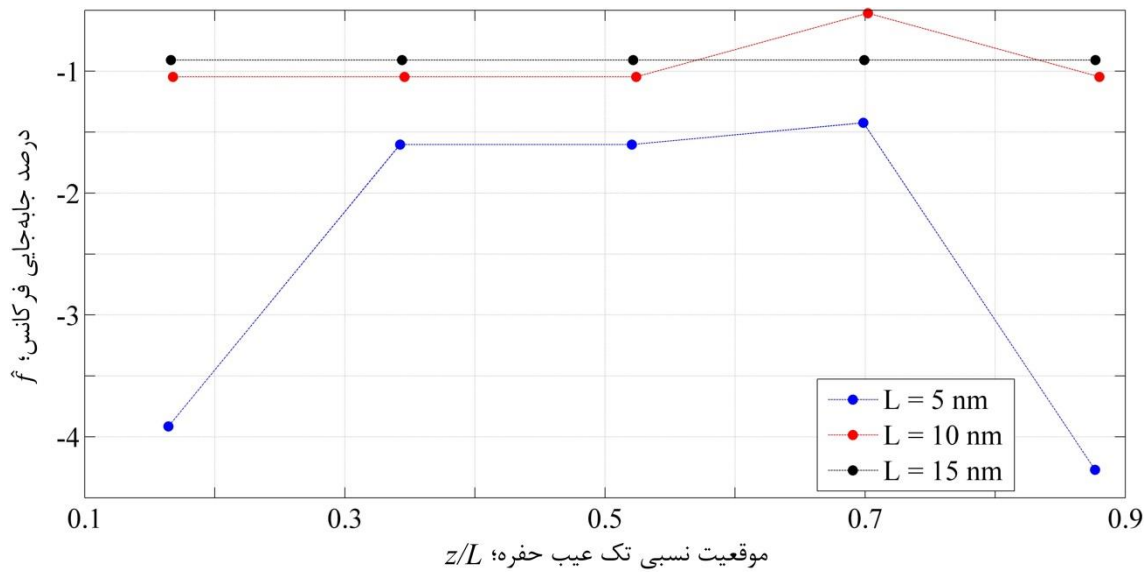
قابل توجه دارد هرچند، فرکانس اصلی نانولوله‌ی مزبور با طول ۱۵ nm به وجود عیب و موقعیت نسبی آن وابسته است. به علاوه، برای نانولوله‌ی (۵,۲) با طول ۵ nm یا ۱۰ nm، با افزایش  $z/L$  سرانجام، فرکانس اصلی بزرگ‌تر می‌شود اما به‌ازای طول ۱۵ nm، فرکانس یادشده از تک عیب حفره تأثیر نمی‌پذیرد. بدون شک، تفاوت‌هایی که میان نمودارهای رسم‌شده برای سه نانولوله‌ی تک‌جداره با یک سر‌گیردار مشاهده می‌شوند به دست‌سازنی آن‌ها -یعنی آرایش فضایی اتم‌ها در ساختار- بستگی دارند.



شکل ۴-۷- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۳,۳) با دو سر‌گیردار و طول‌هایی متفاوت



شکل ۴-۸- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۶,۰) با دو سر‌گیردار و طول‌هایی متفاوت



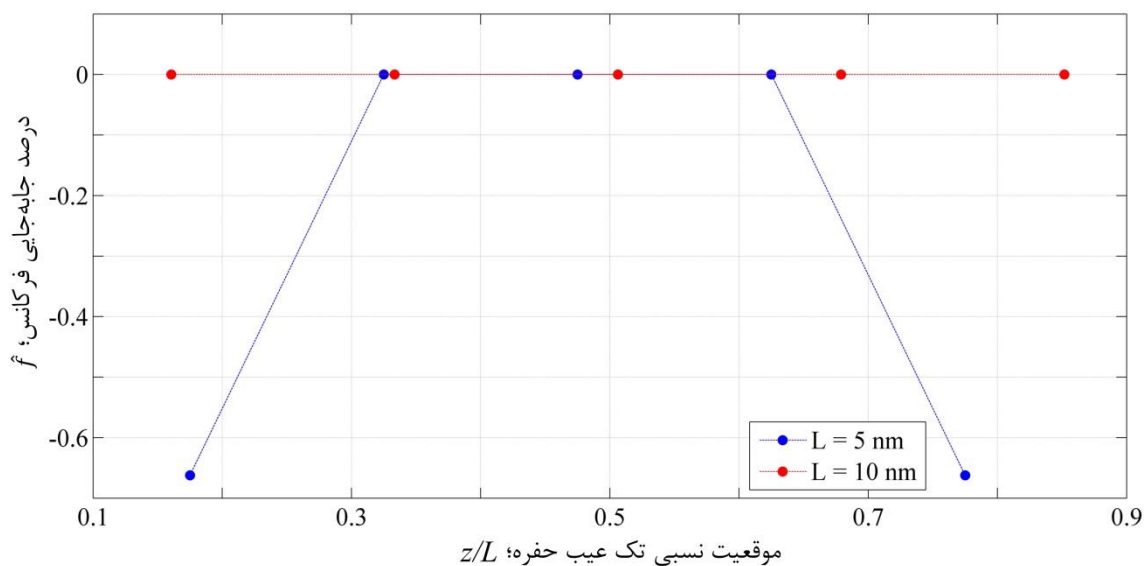
شکل ۴-۹- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۵,۲) با دو سر گیردار و طول‌هایی متفاوت

چنان‌که در شکل ۴-۷ ملاحظه می‌شود برای نانولوله‌ی (۳,۳) با دو سر گیردار و طول ۵ nm یا ۱۵ nm، بیشترین کاهش فرکانس اصلی هنگامی رخ می‌دهد که عیب در میانه‌ی ساختار نانولوله باشد و تقارن هندسه و شرایط مرزی سیستم نسبت به نقطه‌ی میانی آن سبب شده‌است نمودارهای متناظر با طول‌های مزبور نسبت به خط  $z/L = 0.5$  تقریباً متقارن باشند؛ همچنین، فرکانس اصلی این نانولوله با طول ۱۰ nm به تک عیب حفره وابسته نیست. در مقایسه با شرایط مرزی یک‌سر گیردار (شکل ۴-۴)، تک عیب حفره بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۳,۳) با دو سر گیردار کمتر تأثیرگذار است. مطابق شکل ۴-۸، فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۶,۰) با دو سر گیردار بر اثر وجود عیب کاهش می‌یابد، به‌ازای طول ۵ nm، بیشترین کاهش فرکانس با  $z/L \sim 0.5$  به‌دست می‌آید و با افزایش طول نانولوله، فرکانس اصلی آن کمتر تغییر می‌کند. به‌ازای طول‌های ۱۰ nm یا ۱۵ nm،  $f$  مستقل از  $z/L$  محاسبه شده‌است. به‌علاوه، در قیاس با شرایط مرزی یک‌سر گیردار (شکل ۴-۵)، فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۶,۰) با دو سر گیردار از عیب حفره کمتر تأثیر می‌پذیرد. برای این نانولوله با طول ۵ nm یا ۱۵ nm، در مقایسه با نانولوله‌ی (۳,۳) با طول یکسان و دو انتهای گیردار، تغییرات جابه‌جایی فرکانس برحسب موقعیت عیب، خفیف‌ترند هرچند به‌ازای طول ۱۰ nm، گزاره‌ی یادشده نقض می‌شود.

با توجه به شکل ۴-۹، اثر تک عیب حفره بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۵,۲) با دو سر گیردار چنان است که همواره کاهش آن را در پی دارد، بیشترین درصد کاهش فرکانس به‌ازای طول ۵ nm رخ می‌دهد و این تغییر هنگامی بیشینه است که عیب به یکی از دو انتهای گیردار نزدیک‌تر باشد. از سوی دیگر، با افزایش طول نانولوله از ۱۰ nm به ۱۵ nm، وابستگی  $f$  به  $z/L$  از بین می‌رود و فرکانس اصلی سیستم تنها به دلیل وجود عیب تغییر می‌کند. سرانجام، مقایسه‌ی اثر شرایط مرزی در دو شکل ۴-۶ و ۴-۹ نشان می‌دهد که به‌ازای طول‌های ۵ nm و ۱۰ nm، تغییرات  $f$  برحسب  $z/L$  برای نانولوله‌ی (۵,۲) با یک سر گیردار گسترده‌ترند.

#### ۴-۲-۲- نانولوله‌های دوجداره

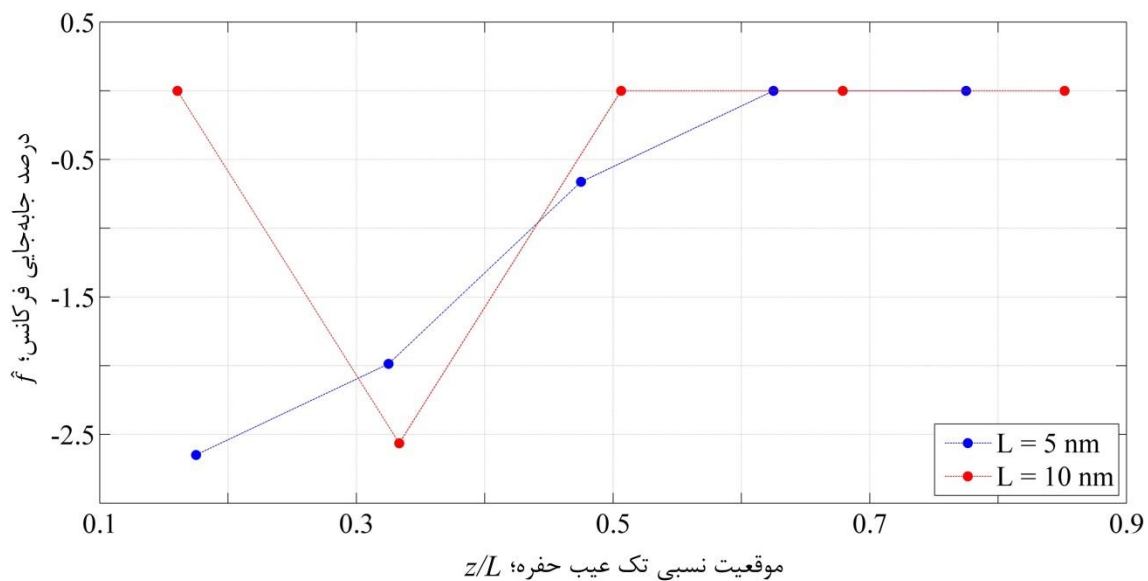
نکته‌ای قابل ذکر درباره‌ی نانولوله‌های دوجداره پرهزینه بودن محاسبات آن‌ها است؛ به عنوان مثال، تعداد اتم‌های نانولوله‌ای دوجداره بیش از سه برابر شمار اتم‌های نانولوله‌ای تک‌جداره با طولی مشابه است؛ از این‌رو، مدت محاسبه بسیار بیشتر خواهد شد. با این توضیح و با هدف صرفه‌جویی در وقت، مدت شبیه‌سازی برای نانولوله‌های دوجداره‌ی یک‌سر گیردار و گونه‌های متناظر دوسر گیردار، یکسان در نظر گرفته شده است که یک استثنا در رهیافت برگزیده است.



شکل ۴-۱۰- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با یک سر گیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله واقع است)

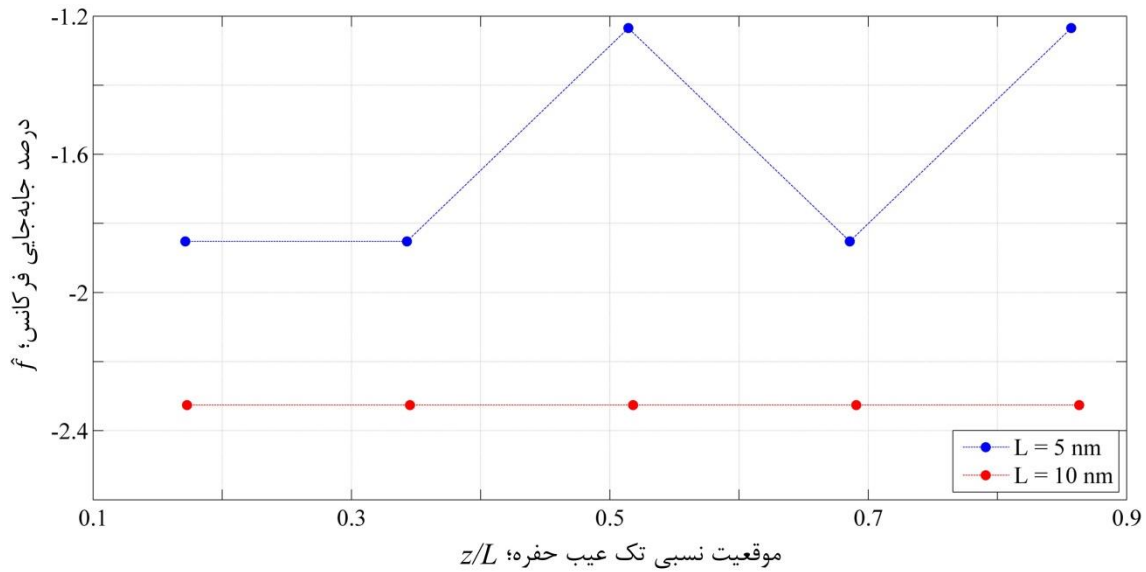
بدین ترتیب، شبیه‌سازی حرکت نانولوله‌های دوجداره از حدود ۲ ns که معادل ۲۰۰۰۰۰۰ گام زمانی است طولانی‌تر نشده‌است. پیش از مطالعه‌ی حاضر، در اقدامی مشابه، مدت شبیه‌سازی برای نانولوله‌هایی تک‌جداره مستقل از تعداد اتم‌های آن‌ها و برابر با ۱ ns انتخاب شده‌است [۵۰].

در شکل‌های ۴-۱۰ تا ۴-۱۷، برای هشت نانولوله‌ی دوجداره با یک یا دو سر گیردار که در ساختار آن‌ها تنها یک عیب حفره‌ی یگانه وجود دارد  $f$  برحسب نسبت موقعیت عیب به طول نانولوله؛ یعنی  $z/L$  رسم شده‌است (دیواره‌های هر نانولوله طولی یکسان دارند و در نانولوله‌های یک‌سر گیردار، انتهای گیردار متناظر با  $z/L = 0$  است). چنان‌که در شکل ۴-۱۰ ملاحظه می‌شود برای نانولوله‌ی  $(8,8)@(3,3)$  با یک سر گیردار و طول ۵ nm، فرکانس اصلی هنگامی تغییر می‌کند که عیب در دیواره‌ی درونی به یکی از دو انتهای نانولوله نزدیک‌تر باشد و به‌ازای طول ۱۰ nm، تک عیب حفره بر فرکانس اصلی تأثیر ندارد. می‌توان وابستگی فرکانس را به محل عیب در نزدیکی انتهای آزاد نانولوله ( $z/L \sim 0,8$ ) به خطای محاسبات نسبت داد. با نگاهی به دو شکل ۴-۴ و ۴-۱۰، آشکار است که در قیاس با نانولوله‌ی  $(3,3)$  با یک سر گیردار، وجود دیواره‌ی بیرونی در نانولوله‌ی  $(8,8)@(3,3)$  با شرایط مرزی مشابه، اثرپذیری فرکانس اصلی سیستم را از تک عیب حفره به‌شدت کاهش می‌دهد.

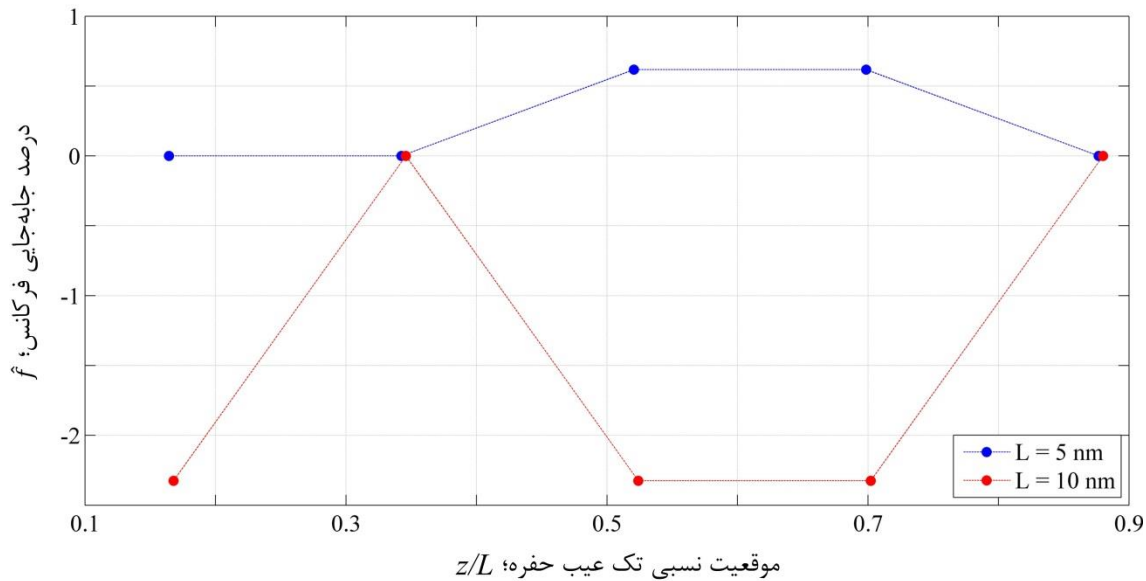


شکل ۴-۱۱- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی  $(8,8)@(3,3)$  با یک سر گیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی بیرونی نانولوله واقع است)

مطابق شکل ۴-۱۱، اگر عیب حفره در دیواره‌ی بیرونی نانولوله‌ی  $(8,8)@(3,3)$  با یک سر گیردار، از نزدیکی انتهای گیردار به سوی انتهای آزاد جابه‌جا شود به‌ازای طول  $5\text{ nm}$ ، فرکانس اصلی سیستم افزایش می‌یابد تا با فرکانس اصلی نانولوله‌ی بدون عیب برابر گردد و به‌ازای طول  $10\text{ nm}$ ، فرکانس اصلی به عیب حفره وابسته نیست (تغییر فرکانس به خطای محاسبات نسبت داده می‌شود).



شکل ۴-۱۲ اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی  $(13,3)@(6,0)$  با یک سر گیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله واقع است)

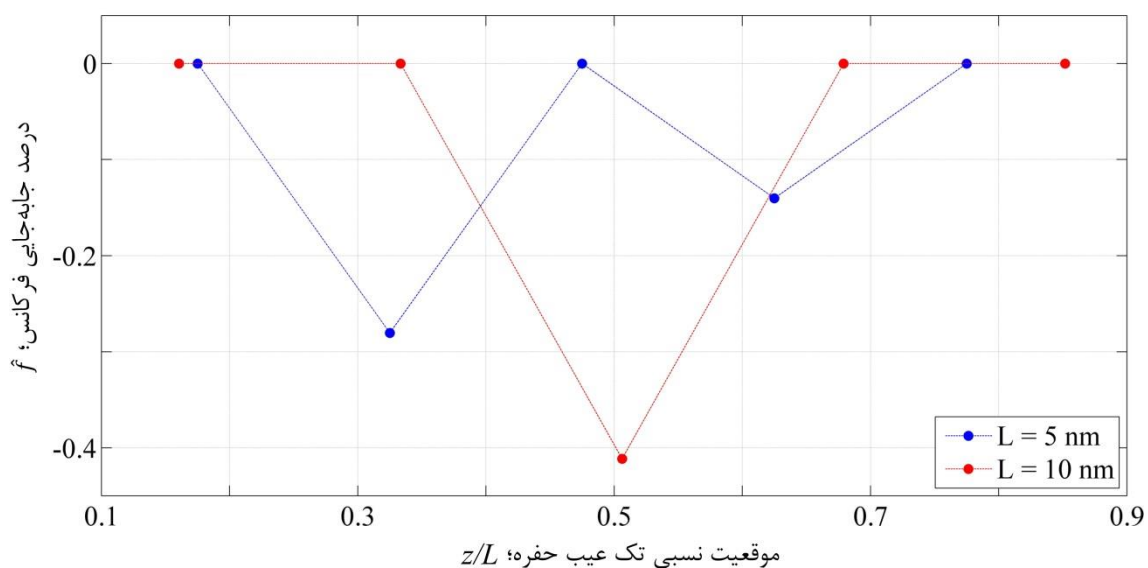


شکل ۴-۱۳ اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی  $(11,6)@(5,2)$  با یک سر گیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله واقع است)



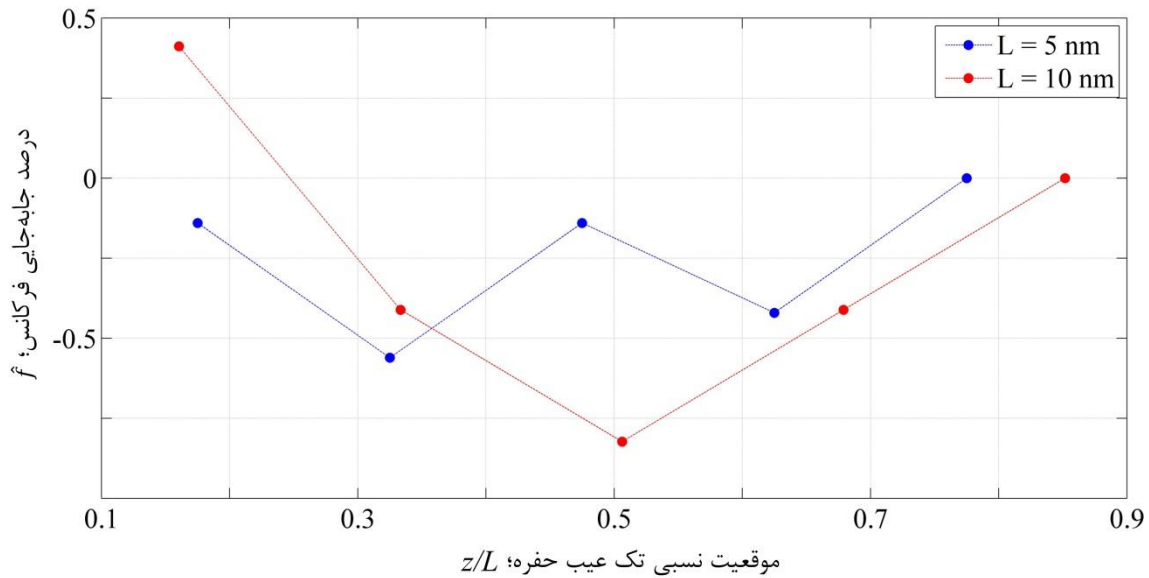
وجود تک عیب حفره در دیواره‌ی درونی نانولوله‌ی  $(13,3)@(6,0)$  با یک سرگیردار و طول ۵ nm یا ۱۰ nm سبب کاهش فرکانس اصلی آن می‌شود، به‌ازای طول ۵ nm، تغییرات جابه‌جایی فرکانس برحسب موقعیت عیب قابل توجه اند اما برای نانولوله‌ی مزبور با طول ۱۰ nm، محل عیب بر فرکانس اصلی تأثیر ندارد (شکل ۴-۱۲). برخلاف نانولوله‌ی  $(8,8)@(3,3)$  با یک سرگیردار، بیشترین درصد کاهش فرکانس بر اثر وجود عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله به‌ازای طول ۱۰ nm رخ می‌دهد (شکل‌های ۴-۱۰ و ۴-۱۲) و در مقایسه با نانولوله‌ی  $(6,0)$  با یک سرگیردار، درصد جابه‌جایی فرکانس تغییراتی بسیار محدودتر دارد (شکل‌های ۴-۵ و ۴-۱۲).

برای نانولوله‌ی  $(11,6)@(5,2)$  با یک سرگیردار، وجود عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله فرکانس اصلی را به‌ازای طول ۵ nm کاهش و به‌ازای طول ۱۰ nm افزایش نمی‌دهد؛ همچنین، همانند نانولوله‌ی  $(13,3)@(6,0)$  با شرایط مرزی مشابه، بیشترین درصد کاهش فرکانس هنگامی حاصل می‌شود که طول نانولوله ۱۰ nm باشد (شکل‌های ۴-۱۲ و ۴-۱۳). شایان ذکر است که برای نانولوله‌ی  $(11,6)@(5,2)$  با یک سرگیردار، وجود دیواره‌ی بیرونی سبب شده‌است که در قیاس با نانولوله‌ی  $(5,2)$  با شرایط مرزی یکسان، فرکانس اصلی سیستم تأثیرپذیری کمتری از عیب حفره داشته باشد.

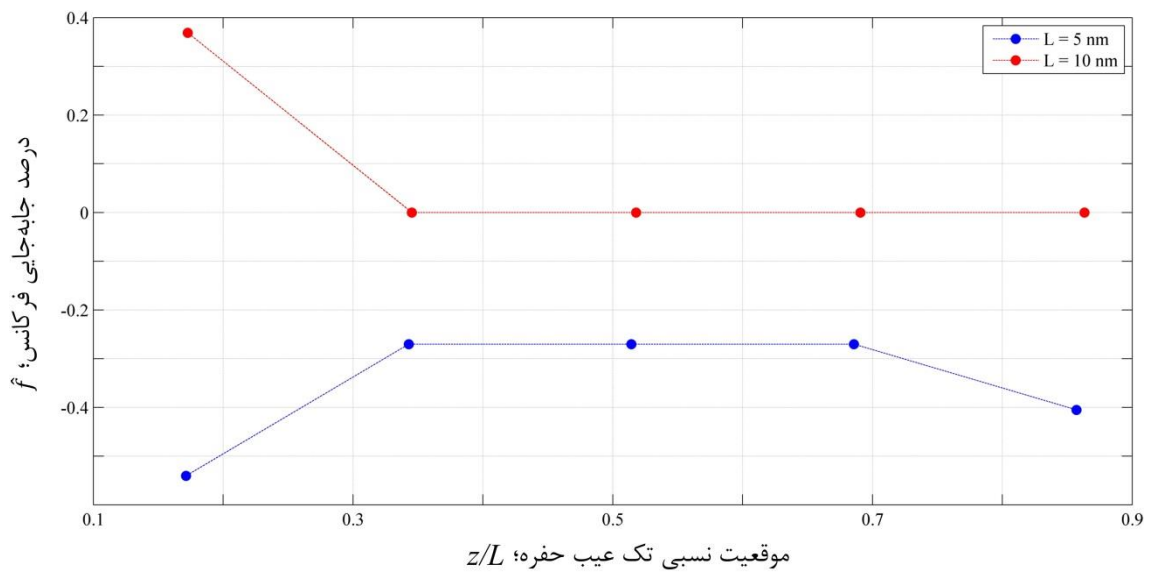


شکل ۴-۱۴- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی  $(8,8)@(3,3)$  با دو سرگیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله واقع است)

با نگاهی به شکل ۴-۱۴ برای نانولوله‌ی  $(8,8)@(3,3)$  با دو سر گیردار که یک عیب حفره در دیواره‌ی درونی آن واقع است، چنان که انتظار می‌رود تقارن تقریبی نمودارها نسبت به خط  $z/L = 0.5$  آشکار است؛ به علاوه، وجود عیب افزایش فرکانس اصلی را در پی ندارد و موقعیت نسبی آن به‌ازای طول ۵ nm در مقایسه با ۱۰ nm، درصد جابه‌جایی فرکانس را بیشتر تحت تأثیر قرار می‌دهد.



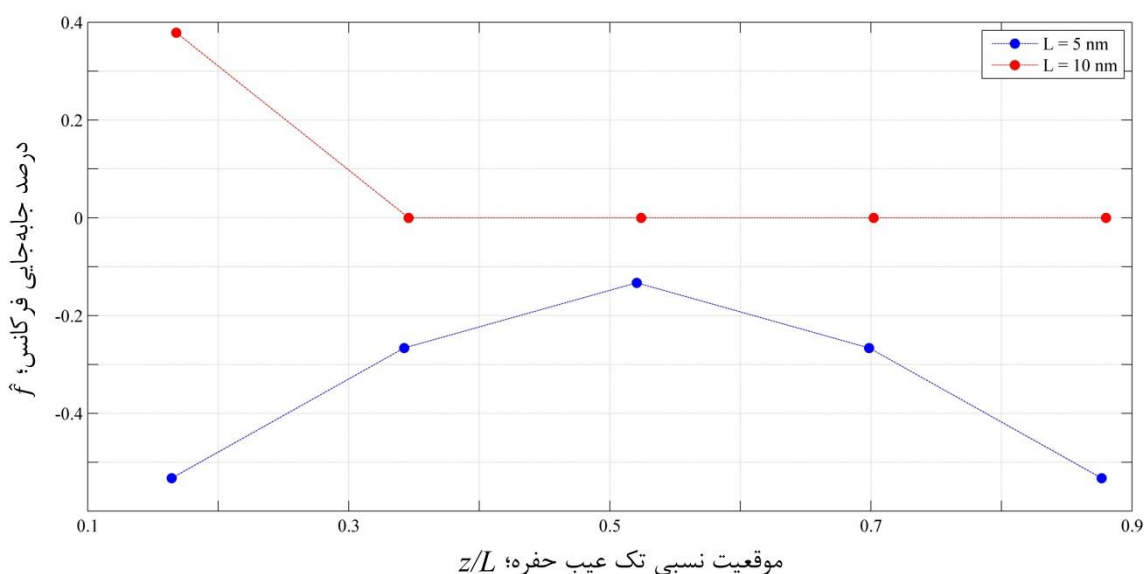
شکل ۴-۱۵- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی  $(8,8)@(3,3)$  با دو سر گیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی بیرونی نانولوله واقع است)



شکل ۴-۱۶- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی  $(13,3)@(6,0)$  با دو سر گیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله واقع است)

نمودارهای شکل ۴-۱۵ نشان می‌دهند که فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با دو سر گیردار و طول ۵ nm، بر اثر جابه‌جایی تک عیب حفره در دیواره‌ی بیرونی نانولوله کاهش می‌یابد و به‌ازای طول ۱۰ nm، بیشترین کاهش فرکانس اصلی با نزدیک بودن عیب به میانه‌ی نانولوله متناظر است. چنانچه عدم تقارن نمودارهای یادشده به خطای محاسبات نسبت داده شود می‌توان اثر هندسه و شرایط مرزی متقارن سیستم را بر چگونگی تغییرات  $f$  به‌سادگی دریافت. از سوی دیگر، نتایج ارائه‌شده نشان‌دهنده‌ی آن هستند که عیب در دیواره‌ی بیرونی بیش از عیب در دیواره‌ی درونی بر فرکانس اصلی نانولوله مؤثر است (شکل‌های ۴-۱۴ و ۴-۱۵).

مطابق شکل ۴-۱۶، وجود عیب حفره در دیواره‌ی درونی نانولوله‌ی (۱۳,۳)@(۶,۰) با دو سر گیردار و طول ۵ nm سبب کاهش فرکانس اصلی آن می‌شود و هنگامی که عیب به یکی از دو انتهای نانولوله نزدیک‌تر باشد این تغییر شدیدتر است؛ همچنین، فرکانس اصلی به‌ازای طول ۱۰ nm، وابستگی چندانی به تک عیب حفره ندارد. با توجه به دو شکل ۴-۸ و ۴-۱۶، شایان ذکر است که برای نانولوله‌ی (۱۳,۳)@(۶,۰) با دو سر گیردار و طول ۵ nm در قیاس با نانولوله‌ی (۶,۰) با شرایط مرزی و طول مشابه، تغییر درصد جابه‌جایی فرکانس، محدودتر است.



شکل ۴-۱۷- اثر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۱۱,۶)@(۵,۲) با دو سر گیردار و طول‌هایی متفاوت (عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله واقع است)

برای نانولوله‌ی (۱۱,۶)@(۵,۲) با دو سر گیردار و طول ۵ nm، فرکانس اصلی به دلیل وجود عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله کاهش می‌یابد و همانند نانولوله‌ی (۱۳,۳)@(۶,۰) با شرایط مرزی و طول یکسان، اگر عیب به یکی از دو انتهای نانولوله نزدیک‌تر باشد کاهش فرکانس اصلی شدیدتر است؛ به علاوه، به‌ازای طول ۱۰ nm، تأثیرپذیری فرکانس مزبور از تک عیب حفره قابل‌توجه نیست (شکل‌های ۴-۱۶ و ۴-۱۷). با یادآوری تنوع و فراوانی بسیاری که مسائل قابل طرح در زمینه‌ی ارتعاشات آزاد نانولوله‌ها دارند، در این بند به بحث درباره‌ی اثر تک عیب حفره پایان داده می‌شود و ادامه‌ی فصل حاضر به توزیع تصادفی عیوب حفره در ساختار چند نانولوله و تأثیری که عیب‌ها بر فرکانس اصلی هر سیستم دارند اختصاص یافته‌است.

#### ۴-۳- اثر عیوب حفره با توزیع تصادفی

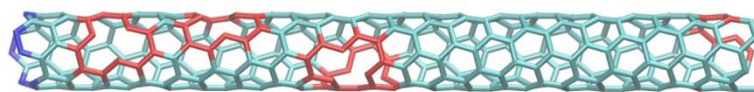
شایسته است پس از مطالعه‌ی آثار طول و دست‌سازنی نانولوله همراه با تک عیب حفره در ساختار آن، اثر عیوب حفره با توزیع تصادفی در نانولوله‌هایی با قطرهای متفاوت مد نظر قرار گیرد؛ از این‌رو، نانولوله‌های صندلی‌نمای (۳,۳)، (۴,۴)، (۵,۵)، (۶,۶) و (۷,۷)، نانولوله‌های زیگزاگ‌نمای (۶,۰)، (۷,۰)، (۸,۰)، (۹,۰) و (۱۰,۰) و نانولوله‌ی دوجداره‌ی (۸,۸)@(۳,۳) در این بخش انتخاب شده‌اند و تأثیر عیوب حفره‌ی یگانه یا دوگانه‌ای که در ساختار هر یک، به‌صورت تصادفی پراکنده هستند بر فرکانس طبیعی اصلی سیستم ارزیابی شده‌است. تراکم عیب حفره‌ی یگانه یا دوگانه به ترتیب با معادله‌ی

$$c_1 = \frac{N_1}{N} \times 100 \quad (۲-۴)$$

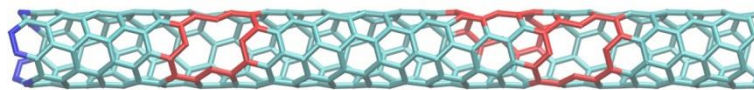
و معادله‌ی

$$c_2 = \frac{2N_2}{N} \times 100 \quad (۳-۴)$$

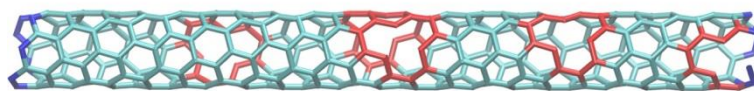
تعریف می‌شود که در آن‌ها،  $N$  تعداد اتم‌های نانولوله است و  $N_1$  و  $N_2$  به ترتیب، شمار عیب یگانه و شمار عیب دوگانه اند. برای هر نانولوله با شرایط مرزی معین یک‌سر گیردار یا دوسر گیردار،  $c_1$  و  $c_2$  با تقریب از ۰٫۵٪ تا ۲٫۵٪ تغییر می‌کنند (شکل ۴-۱۸).



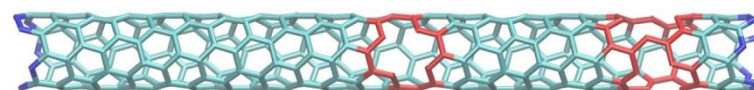
(الف)



(ب)



(ج)

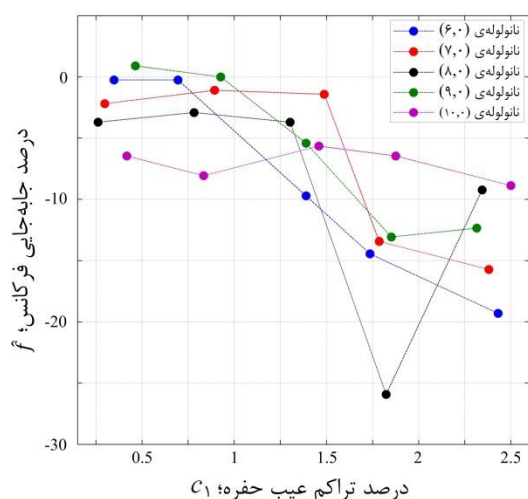


(د)

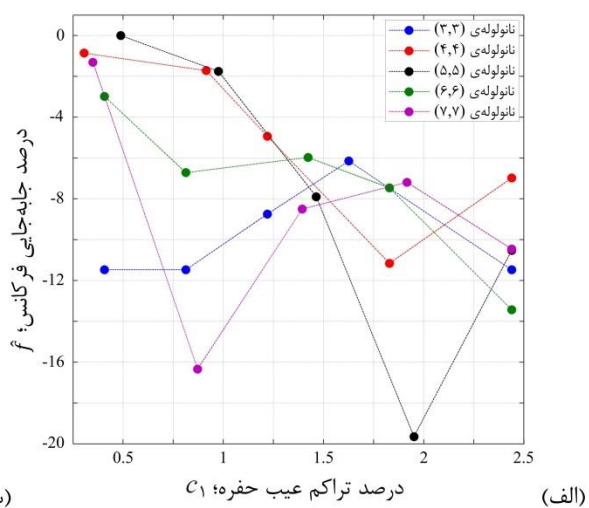
شکل ۴-۱۸- عیوب حفره‌ی یگانه و دوگانه با توزیع تصادفی و تراکم تقریبی ۲٪ در نانولوله‌ی (۵,۲) با طول ۵ nm و (الف) و (ب) یک یا (ج) و (د) دو سر گیردار

### ۴-۳-۱- نانولوله‌های تک‌جداره

در شکل‌های ۴-۱۹ تا ۴-۲۲، درصد جابه‌جایی فرکانس اصلی؛ یعنی  $f$  در تساوی (۴-۱)، برحسب تراکم عیوب (یگانه و دوگانه) برای نانولوله‌های تک‌جداره با طول ۵ nm رسم شده‌است.



(ب)

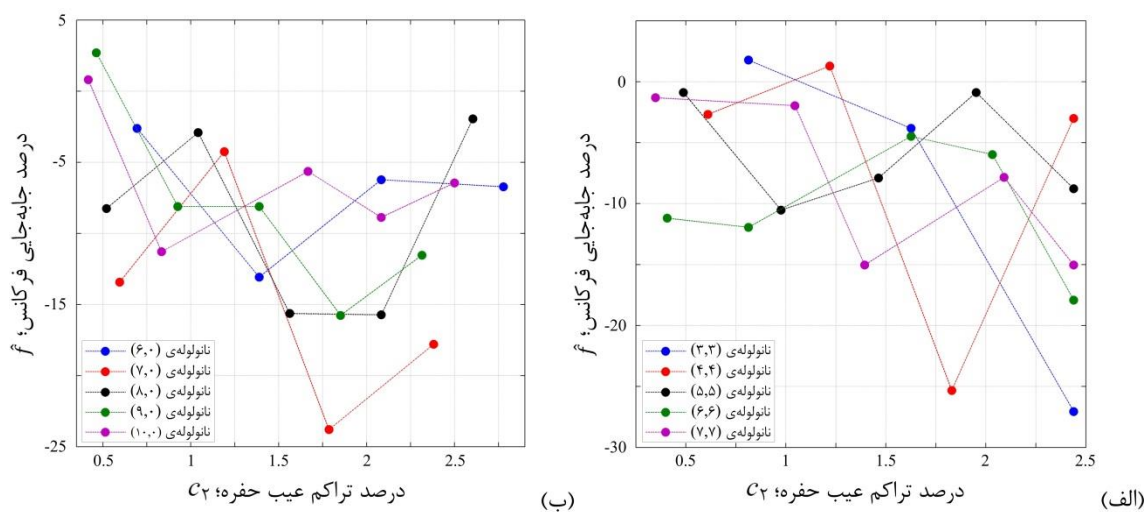


(الف)

شکل ۴-۱۹- اثر عیوب حفره‌ی یگانه با توزیع تصادفی بر فرکانس‌های اصلی (الف) نانولوله‌های صندلی‌نما و (ب) نانولوله‌های زیگزاگ‌نما با طول ۵ nm و یک سر گیردار

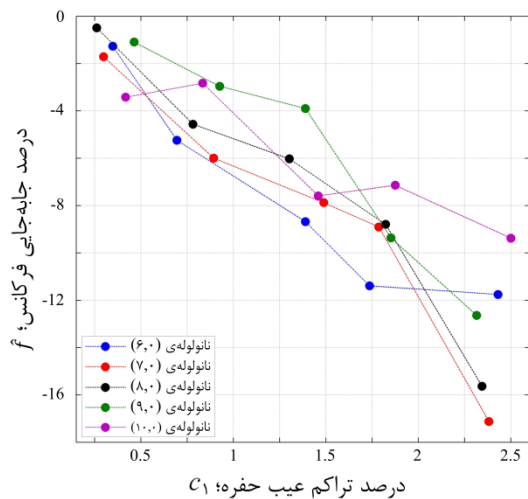
با توجه به نمودارهای رسم شده در شکل ۴-۱۹، می توان نتیجه گرفت که وجود عیوب حفره‌ی یگانه با توزیع تصادفی در ساختار نانولوله‌های تک‌جداره با یک سر گیردار، (به جز در چند حالت) سبب می‌شود فرکانس اصلی هر یک کاهش یابد؛ به علاوه، یکنوا نبودن تغییرات  $f$  بر حسب  $c_1$  با تصادفی بودن پراکندگی عیب در ساختار همخوانی دارد. در نانولوله‌های صندلی‌نما و زیگزاگ‌نمای انتخاب شده، بزرگ‌تر شدن قطر به تغییری معنادار در درصد جابه‌جایی فرکانس نمی‌انجامد اما با افزایش تراکم عیب از ۰٫۵٪ تا ۲٫۵٪ به‌ویژه در نانولوله‌های زیگزاگ‌نما،  $f$  معمولاً کاهش می‌یابد؛ همچنین، بیشینه‌ی کاهش  $f$  به میزان ۱۹٫۶٪ و ۲۶٫۰٪ به ترتیب، برای نانولوله‌ی (۵،۵) و نانولوله‌ی (۸،۰) قابل توجه است (شکل‌های ۴-۱۹ الف و ۴-۱۹ ب).

به‌طور مشابه، چنان‌که در شکل ۴-۲۰ ملاحظه می‌شود، نتایج به‌دست‌آمده برای نانولوله‌های تک‌جداره با یک سر گیردار به گونه‌ای هستند که نمودارهای تغییرات  $f$  تحت تأثیر عیوب حفره‌ی دوگانه با توزیع تصادفی و تراکم متغیر، الگویی منظم ندارند هرچند، فرکانس اصلی هر نانولوله در اکثر موارد به‌دلیل وجود عیوب دوگانه کاهش یافته‌است. با وجود عیب‌های دوگانه نیز، بیشینه‌ی کاهش  $f$  به میزانی بیشتر از ۲۰٪ برای نانولوله‌های (۳،۳) و (۷،۰) نشان می‌دهد که فرکانس اصلی سیستم‌های مزبور از عیوب دوگانه با توزیع تصادفی، اثرپذیری بسیاری دارد.

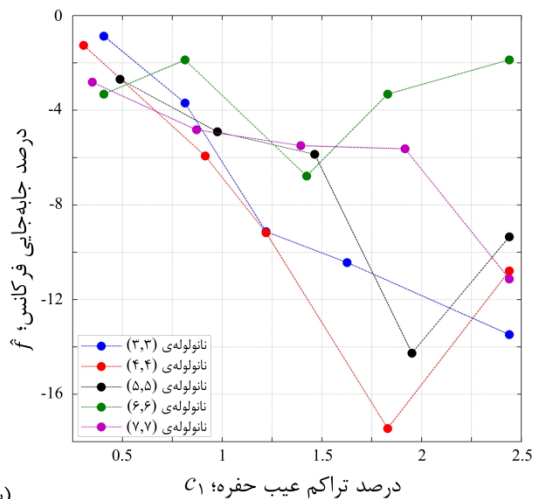


شکل ۴-۲۰- اثر عیوب حفره‌ی دوگانه با توزیع تصادفی بر فرکانس‌های اصلی (الف) نانولوله‌های صندلی‌نما و

(ب) نانولوله‌های زیگزاگ‌نما با طول ۵ nm و یک سر گیردار

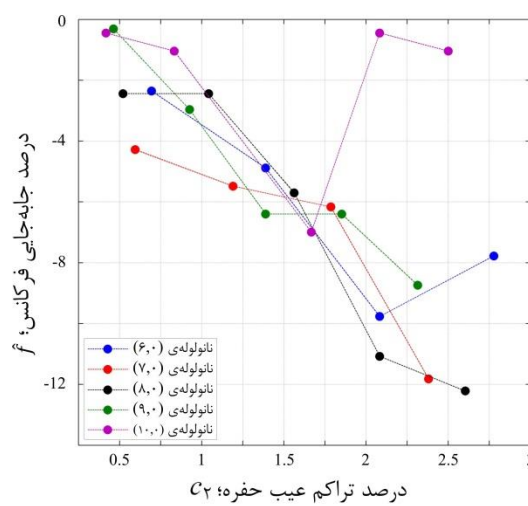


(ب)

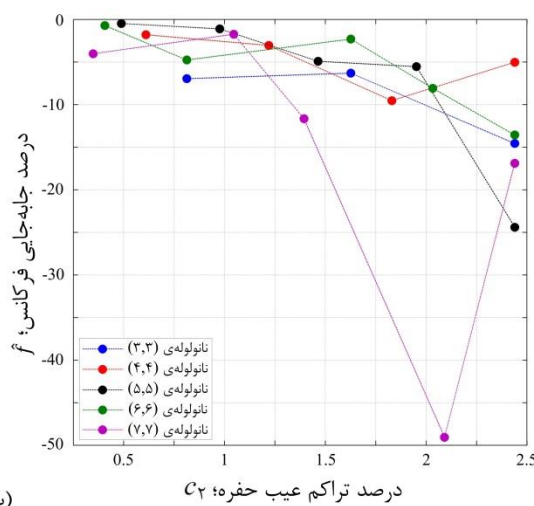


(الف)

شکل ۴-۲۱- اثر عیوب حفره‌ی یگانه با توزیع تصادفی بر فرکانس‌های اصلی (الف) نانولوله‌های صندلی‌نما و (ب) نانولوله‌های زیگزاگ‌نما با طول ۵ nm و دو سر گیردار



(ب)



(الف)

شکل ۴-۲۲- اثر عیوب حفره‌ی دوگانه با توزیع تصادفی بر فرکانس‌های اصلی (الف) نانولوله‌های صندلی‌نما و (ب) نانولوله‌های زیگزاگ‌نما با طول ۵ nm و دو سر گیردار

مطابق انتظار، آنچه در نمودارهای دو شکل ۴-۲۱ و ۴-۲۲ برای نانولوله‌های تک‌جداره با دو

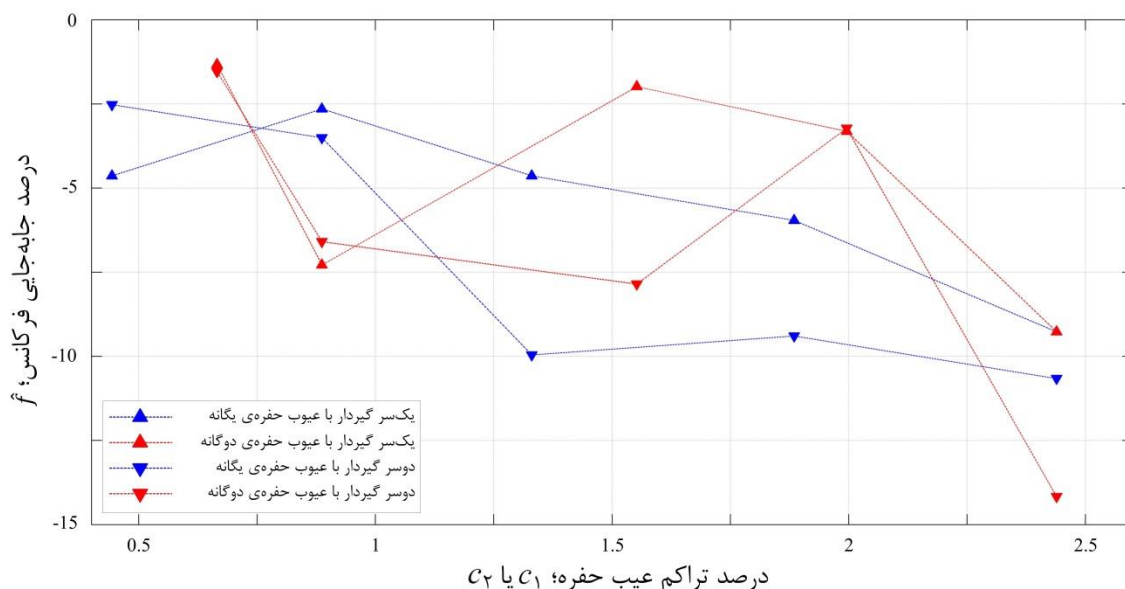
سر گیردار جلب نظر می‌کند افت و خیز درصد جابه‌جایی فرکانس با تغییر تراکم عیوبی است که به صورت تصادفی در ساختار هر نانولوله پراکنده شده‌اند. به علاوه، وجود عیوب حفره با توزیع تصادفی همواره سبب می‌شود فرکانس اصلی هر یک از نانولوله‌های یادشده کاهش یابد؛ به عنوان مثال،

فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۷,۷) به ازای  $C_2 = 2,1\%$  تقریباً ۵۰٪ کمتر شده‌است (شکل ۴-۲۲-الف).

شایان ذکر است که توزیع تصادفی عیوب حفره در ساختار نانولوله‌ها یکتا نیست و قابل پیش‌بینی است که متناظر با پراکندگی‌های متفاوت عیوب یگانه یا دوگانه مجموعه‌ای شامل چندین پاسخ برای مقادیر فرکانس اصلی حاصل شود؛ در نتیجه، ممکن است حل‌های متوالی مسأله‌ای معین با یکدیگر برابر نباشند و نیاز به محاسبه‌ی مقدار میانگین فرکانس وجود داشته باشد. بدین ترتیب، مشاهده‌ی الگویی منظم در نمودار تغییرات  $f$  برحسب درصد تراکم عیب دور از انتظار نخواهد بود. نکته‌ای که در این بند به آن اشاره شد درباره‌ی هر دو گونه‌ی تک‌جداره و چندجداره‌ی نانولوله‌ها صدق می‌کند.

#### ۴-۳-۲- نانولوله‌های دوجداره

در مسائل این بخش، عیوب حفره در هر دو دیواره‌ی نانولوله‌های دوجداره با تراکمی یکسان توزیع شده‌اند و به اثر عیوب یگانه و دوگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی  $(8,8)@ (3,3)$  با شرایط مرزی یک‌سر گیردار یا دو‌سر گیردار و طول ۵ nm پرداخته شده‌است. درصد جابه‌جایی فرکانس اصلی نیز همچنان مطابق معادله‌ی (۴-۱) تعریف می‌شود.



شکل ۴-۲۳- اثر عیوب حفره‌ی یگانه و دوگانه با توزیع تصادفی بر فرکانس اصلی نانولوله‌ی  $(8,8)@ (3,3)$  با طول ۵ nm و یک یا دو سر گیردار



با توجه به شکل ۴-۲۳، چگونگی تغییرات  $f$  با افزایش تراکم هر یک از انواع یگانه و دوگانه‌ی عیب برای نانولوله‌های یک‌سر گیردار و دوسر گیردار مشابه است؛ همچنین، فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) بر اثر وجود عیوبی با توزیع تصادفی در ساختار آن همواره کاهش می‌یابد؛ به‌ازای شرایط مرزی معین، وابستگی درصد جابه‌جایی فرکانس به  $c_1$  بیشتر از وابستگی آن به  $c_2$  است و کمترین مقدار  $f$  برای هر نانولوله با بیشترین تراکم عیب (یگانه یا دوگانه) متناظر است. از سوی دیگر، در مقایسه با شرایط مرزی یک‌سر گیردار، مقدار مزبور به‌ازای شرایط مرزی دوسر گیردار کمتر است. سرانجام، یادآوری می‌شود که با در نظر گرفتن پراکندگی‌هایی متفاوت برای عیوب و حل‌های متوالی هر مسأله می‌توان اثرپذیری فرکانس اصلی نانولوله را از عیوب حفره‌ی یگانه و دوگانه دقیق‌تر ارزیابی کرد.

# فصل ۵- محاسبه‌ی میرایی ترموالاستیک در نانولوله‌های کربنی

محتوای فصل:

- ❖ میرایی ترموالاستیک در مقیاس نانو
- ❖ چند روش محاسبه‌ی میرایی
- ❖ مدل‌سازی نانولوله‌ها با میرایی ترموالاستیک

## ۵-۱- میرایی ترموالاستیک در مقیاس نانو [۱۰۰]

موج صوتی متحرک در ماده‌ای کشسان و بی‌اندازه بزرگ و مودی طبیعی از ارتعاش یک تشدیدساز کشسان با ابعاد متنه‌هایی از موده‌های آکوستیکی هستند که به دلیل برهم‌کنش غیرخطی با موده‌هایی کشسان و برانگیخته‌ی گرمایی که آن‌ها را فرامی‌گیرند میرا می‌شوند. چنان‌چه طول میانگین پویش آزاد برای موده‌های گرمایی از طول موج مود آکوستیکی بسیار کوچک‌تر باشد ذرات ماده در مقیاس مورد نظر برای رسیدن به تعادل گرمایی به میزان کافی برهم‌کنش خواهند داشت. بنابراین، حتی هنگامی که سیستم در حالت تعادل گرمایی نباشد می‌توان به‌صورت موضعی دما تعریف کرد و به‌طور معادل، یک میدان دمای خوش‌تعریف<sup>۱</sup> وجود دارد. در این شرایط، کنش متقابل مود آکوستیکی و موده‌های گرمایی محیطی در یک جامد همسانگرد با ضریب انبساط گرمایی ماده که از معادله‌ی

$$\alpha = \frac{1}{L} \frac{\partial L}{\partial T} \quad (۱-۵)$$

به‌دست می‌آید قابل توصیف است؛ این پارامتر خطی، تغییر طول و تغییر دما را همبسته می‌سازد. حرکت یک جامد کشسان که با افزایش انرژی‌های جنبشی و پتانسیل آن همراه است جامد را از حالت تعادل خارج می‌کند. در جامد کشسان تک‌دما و کاملاً خطی چنین عدم تعادلی می‌تواند پیوسته ادامه یابد. از سوی دیگر، در جامد ترموالاستیک، همبستگی میدان کرنش با یک میدان دما سازوکاری برای اتلاف انرژی پدید می‌آورد که بازگشت سیستم را به حالت تعادل امکان‌پذیر می‌نماید. گرادیان‌های موضعی دما که از همبستگی با میدان کرنش نشأت می‌گیرند سبب انتقال گرمایی برگشت‌ناپذیر می‌شوند که به واهلش<sup>۲</sup> جامد ترموالاستیک می‌انجامد. این فرایند اتلاف انرژی، میرایی ترموالاستیک نامیده می‌شود و ذاتی است.

نخستین بار زنر<sup>۳</sup> به اهمیت میرایی ترموالاستیک در تشدیدسازهای مکانیکی پی برد و

۱- Well-defined temperature field

۲- Relaxation

۳- Zener

نظریه‌ای عام برای آن ارائه داد. او مدلی معیار از جامد غیرکشسان<sup>۱</sup> معرفی کرد که مبتنی بر بسطی از قانون هوک<sup>۲</sup> به عمومی‌ترین معادله‌ی همگن خطی است که شامل تنش  $\sigma$ ، کرنش  $\epsilon$  و مشتق‌های زمانی اول آن‌ها باشد. این معادله به صورت

$$\sigma + \tau_\epsilon \dot{\sigma} = M_R(\epsilon + \tau_\sigma \dot{\epsilon}) \quad (2-5)$$

نوشته می‌شود. تفسیر فیزیکی سه پارامتری که در مدل زیر به کار رفته‌اند ساده است. با ثابت نگه‌داشتن کرنش، تنش با زمان واهلش  $\tau_\epsilon$  به‌طور نمایی به تعادل می‌رسد. به گونه‌ای مشابه،  $\tau_\sigma$  زمان واهلش کرنش به‌ازای تنش ثابت است.  $M_R$  مقدار مدول کشسانی متناظر با پایان همه‌ی واهلش‌ها است. همچنین، مقدار مدول کشسانی پیش از اتمام واهلش‌ها از تساوی

$$M_U = M_R \frac{\tau_\sigma}{\tau_\epsilon} \quad (3-5)$$

حاصل می‌گردد. در شرایطی دینامیکی و تناوبی که با معادلات

$$\sigma(t) = \sigma_0 e^{i\omega t}, \quad (4-5 \text{ الف})$$

$$\epsilon(t) = \epsilon_0 e^{i\omega t} \quad (4-5 \text{ ب})$$

بیان شوند یک مدول کشسانی مختلط و وابسته به فرکانس، میان دامنه‌های تنش و کرنش رابطه برقرار می‌کند. اتلاف انرژی یا «اصطکاک داخلی» در جامد با نماد  $Q^{-1}$ ، کسری از انرژی تعریف می‌شود که به‌ازای هر رادیان از ارتعاش هدر می‌رود و اگر اندک باشد با نسبت بخش‌های موهومی و حقیقی مدول مختلط برابر است؛ در نتیجه،

$$Q^{-1} = \Delta_M \frac{\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2} \quad (5-5)$$

که در آن،  $\tau = \sqrt{\tau_\sigma \tau_\epsilon}$  و

$$\Delta_M = \frac{M_U - M_R}{\sqrt{M_R M_U}} \quad (6-5)$$

۱- Anelastic

۲- Hooke's law

کمّیتی بی‌بعد است که مقاومت واهلش<sup>۱</sup> مدول نام دارد. با توجه به معادله‌ی (۵-۵)،  $Q^{-1}$  به عنوان تابعی از  $\omega\tau$  به‌ازای  $\omega\tau = 1$  به مقدار بیشینه‌ی خود می‌رسد. از دیدگاه کیفی می‌توان دلیل بیشینه شدن اتلاف انرژی را هنگامی که  $\omega\tau$  واحد است درک کرد؛ اگر فرکانس ارتعاش؛ یعنی  $\omega$  از آهنگ مؤثر واهلش جامد که  $\frac{1}{\tau}$  است بسیار کوچک‌تر باشد سیستم اساساً در حالت تعادل باقی می‌ماند و انرژی بسیار کمی هدر می‌رود؛ به‌علاوه، چنان‌چه  $\omega$  از  $\frac{1}{\tau}$  بسیار بزرگ‌تر باشد سیستم زمانی برای واهلش ندارد و بار دیگر، اتلاف انرژی ناچیز خواهد بود. میزان هدررفت انرژی تنها هنگامی قابل توجه است که  $\omega$  و  $\frac{1}{\tau}$  هم‌مرتبه باشند.

در جامد ترموالاستیک، مقاومت واهلش به مدول یانگ تعلق دارد؛ از تساوی‌های

$$\Delta_E = \frac{E_{ad} - E}{E} = \frac{E\alpha^{\vee}T}{C_p} \quad (۷-۵)$$

به‌دست می‌آید و مقدار آن با کمک دانسته‌های ترمودینامیک پایه محاسبه می‌شود؛ همچنین،  $E$  و  $E_{ad}$  به‌ترتیب، مقادیر بی‌دررو و تک‌دمای مدول یانگ هستند؛  $E_{ad}$  با نبود واهلش و  $E$  با اتمام آن متناظر است.  $C_p$  ظرفیت گرمایی بر واحد حجم در فشار یا تنش ثابت است اما جایگزین کردن آن با ظرفیت گرمایی در حجم یا کرنش ثابت؛ یعنی  $C_v$  خطایی در  $\Delta_E$  ایجاد می‌کند که تنها از مرتبه‌ی  $\Delta_E^{\vee}$  است. به‌دلیل آن که  $Q^{-1}$  و در نتیجه،  $\Delta_E$  نیز کوچک فرض می‌شوند چنین خطایی قابل چشم‌پوشی است. با در نظر گرفتن ملاحظات مشابه، جایگزین ساختن  $\sqrt{E_{ad}E}$  در مخرج کسر معادله‌ی (۶-۵) با  $E$  مشکل‌ساز نیست. زبر نشان داد که برای تیرهایی (نازک) که مقطع مستطیلی دارند تقریباً ۹۸٫۶٪ از واهلش در مود اول روی می‌دهد که زمان واهلش آن برابر با

$$\tau_Z = \frac{b^2}{\pi^{\vee}\chi} \quad (۸-۵)$$

است. در معادله‌ی (۸-۵)،  $\chi$  ضریب نفوذ گرمایی جامد و  $b$  عرض تیر است. بنابراین، فرض واهلشی ساده در تیر نازک مرتعش با یک زمان واهلش  $\tau_Z$  خطایی ناچیز در پی خواهد داشت و با توجه به

---

۱- Relaxation strength

معادله‌های (۵-۵) تا (۸-۵)،

$$Q_z^{-1} = \frac{E\alpha^* T}{C_p} \frac{\omega\tau_z}{1 + (\omega\tau_z)^2} \quad (9-5)$$

میرایی ترموالاستیک در تیر نازک با مقطع مستطیلی است.

تا زمانی که یک سیستم شرایط تشریح شده در نخستین بند این بخش را داشته باشد وجود میرایی ترموالاستیک در مقیاس‌های طولی کوچک دور از انتظار نیست چراکه بزرگی میرایی نشأت گرفته از همبستگی ترموالاستیک مستقل از هندسه‌ی سیستم و به عنوان تابعی از دما تنها به خواص ترمودینامیکی ماده وابسته است و به علاوه، در ارتعاشات جانبی تیرهای نازک، موقعیت بیشینه‌ی میرایی که تابعی از فرکانس است به ابعاد تیر بستگی دارد؛ از این رو، هرچند با کوچک تر شدن تشدیدسازها فرکانس‌های طبیعی آن‌ها افزایش می‌یابند فرکانس متناظر با بیشینه‌ی میرایی نیز بزرگ تر می‌شود. این عوامل برای معنا دادن به میرایی ترموالاستیک در مقیاس نانو هماهنگ هستند.

## ۵-۲- چند روش محاسبه‌ی میرایی

ضریب کیفیت  $Q$  که معکوس آن شاخصی برای میرایی یک تشدیدساز به شمار می‌رود دارای تعریفی آشنا با معادله‌ی

$$Q = 2\pi \frac{E^*}{\Delta E^*} \quad (10-5)$$

است که در آن،  $E^*$  انرژی تشدیدساز و  $\Delta E^*$  انرژی هدررفته در یک سیکل ارتعاش است. نانولوله در نقش تشدیدساز، مودهایی گوناگون از ارتعاش و صورتهایی جداگانه از انرژی دارد و این نکته دلیلی برای متفاوت بودن تعریف  $E^*$  در مراجع مختلف است. جیانگ<sup>۱</sup> و همکاران [۱۰۱]،  $E^*$  را با بیشینه‌ی انرژی پتانسیل و آکیتا<sup>۲</sup> و دیگران [۱۰۲]،  $E^*$  را با انرژی جنبشی نانولوله مساوی دانسته‌اند. وجود ابهام در چنین تعریف‌هایی و برخی محدودیت‌ها سبب شده‌اند در روشی جایگزین، بدون کاربرد  $E^*$

۱- Jiang

۲- Akita

تغییر مکان مرکز جرم نانولوله در فضای سه بعدی برای محاسبه  $Q$  به کار گرفته شود [۱۰۳]. از سوی دیگر، با تصویر کردن بردارهای جابه جایی و سرعت اتم‌ها بر یکی از شکل‌های مود نانولوله می‌توان انرژی مود متناظر با آن را در هر لحظه تعیین کرد؛ بدین ترتیب، اگر  $\vec{\eta}_i$  شکل مود مورد نظر،  $\vec{u}(t)$  جابه جایی نانولوله از موقعیت تعادل،  $\vec{v}(t)$  بردار سرعت آن،  $m$  جرم (اتم کربن) و  $\kappa_i$  سفتی مود باشد انرژی مود با نماد  $E_i$  - که حاصل جمع انرژی‌های پتانسیل و جنبشی مود است - به صورت تابعی از زمان با ضابطه‌ی

$$E_i(t) = \frac{\kappa_i}{2} [\vec{u}(t) \cdot \vec{\eta}_i]^2 + \frac{m}{2} [\vec{v}(t) \cdot \vec{\eta}_i]^2 \quad (11-5)$$

به دست می‌آید [۱۰۴]. الگوی اتلاف انرژی در نانولوله‌هایی تک‌جداره با توجه به تغییرات انرژی در مودی معین مطالعه شده است [۱۰۵ و ۱۰۶]. تعریف ضریب کیفیت برای هر مود ارتعاش نانولوله با کمک معادله‌ی (۱۱-۵) امکان‌پذیر است.

### ۵-۳- مدل سازی نانولوله‌ها با میرایی ترموالاستیک

اگرچه در مرجع ۱۰۰ ضمن اشاره به تقریب زینر با معادله‌ی (۵-۹)، عبارتی دقیق برای توصیف میرایی ترموالاستیک در تیرهای نازک با مقطع مستطیلی ارائه شده است به کارگیری آن برای نانولوله‌ها که ساختاری مشابه استوانه دارند ناممکن است. از این رو، ضریب کیفیت نانولوله مطابق معادله‌ی (۵-۱۰) محاسبه شده است. با یادآوری سهم هر گونه‌ی میرایی در اتلاف انرژی و بازنویسی تساوی (۲-۸)،

$$Q^{-1} = Q_{\text{تکیه‌گاهی}}^{-1} + Q_{\text{سطحی}}^{-1} + Q_{\text{ترموالاستیک}}^{-1} + \dots \quad (12-5)$$

بدیهی است که میرایی ترموالاستیک تنها با حذف سایر گونه‌های میرایی از سیستم، قابل مطالعه است. شبیه‌سازی با رایانه در نرم‌افزار لمپس چنین امکانی را فراهم می‌کند و ابزار حل مسأله در این فصل است. در بخش بعدی، بحثی درباره‌ی میرایی ترموالاستیک در نانولوله‌هایی با دمای ثابت از نظر خواهد گذشت اما پیش از آن، ذکر چند فرض اساسی برای منحصر کردن اتلاف انرژی به میرایی ترموالاستیک ضرورت دارد. لازمه‌ی کنترل دمای نانولوله در مدت شبیه‌سازی، تبادل انرژی آن با

محیط است و در محاسبات، از اتلاف انرژی نانولوله با انتقال آن به محیط چشم‌پوشی می‌شود. همچنین، بنا بر تقریب زینر، میرایی ترموالاستیک در مود نخست ارتعاش نانولوله (که مودی جانبی است) روی می‌دهد؛ در نتیجه، باید چنین فرض کرد که در شبیه‌سازی حرکت نانولوله، مود مزبور غالب است. سرانجام، تأثیر ناچیز پیوندهای آویخته در اتم‌های انتهایی نانولوله بر ضریب کیفیت [۱۰۳]، شبیه‌سازی را توجیه‌پذیر می‌نماید. عدم برهم‌کنش نانولوله با یک سیال، ساختار بدون عیب نانولوله و بی‌حرکت بودن اتم‌های (هر) انتهای گیردار آن سبب حذف گونه‌هایی باقی‌مانده از میرایی می‌شوند که در بخش ۲-۴ به آن‌ها اشاره شد.

### ۵-۳-۱- شبیه‌سازی با رایانه

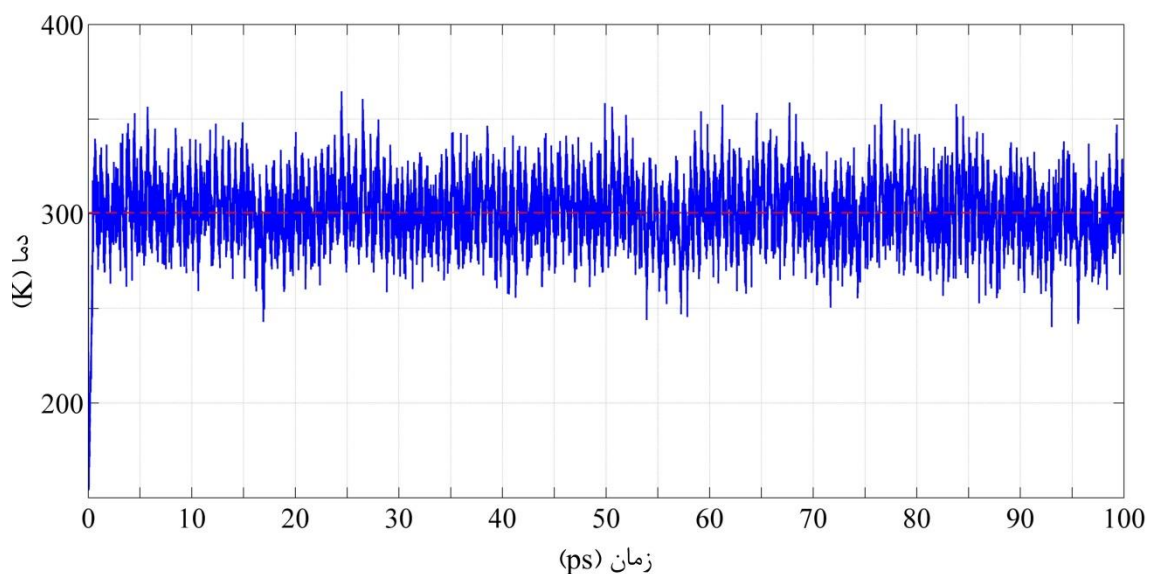
رهیافت برگزیده‌ی فصل ۳، برای مطالعه‌ی میرایی ترموالاستیک در نانولوله‌ها کاملاً مناسب است چراکه در یکی از پژوهش‌های پیشین [۱۰۷] با صراحت ادعا شده‌است که انرژی پتانسیل نانولوله نیروی محرک ارتعاشات آن است و با بیانی ساده، انرژی جنبشی نانولوله نماینده‌ی ارتعاشی گرمایی و تصادفی است؛ به‌علاوه، جزئیات روش شبیه‌سازی در پژوهش یادشده مشابه رهیافت برگزیده هستند و محاسبه‌ی ضریب کیفیت  $Q$  برای نانولوله‌هایی تک‌جداره در دمای ثابت صورت گرفته‌است. از سوی دیگر،  $E^*$  در معادله‌ی (۵-۱۰) برابر با تفاضل انرژی پتانسیل سیستم دقیقاً پیش از تحریک آن و انرژی پتانسیل در مدت شبیه‌سازی در نظر گرفته شده‌است؛ بدین ترتیب، کافی است انرژی پتانسیل در آغاز شبیه‌سازی و در پایان هر گام آن با نرم‌افزار لمپس تعیین شود. سپس  $Q$  به‌سادگی با کمک معادله‌ی (۵-۱۰) قابل محاسبه است.

با توجه به توضیح ذکرشده، برای حل مسائل این فصل، فرکانس اصلی هر نانولوله و در نتیجه، دوره‌ی تناوب اصلی آن که متناظر با مود نخست ارتعاش نانولوله است با رهیافت برگزیده به‌دست آمده‌است و در مدت شبیه‌سازی ارتعاشات در دمای ثابت، انرژی پتانسیل نیز به‌عنوان خروجی ثبت شده‌است. پس از شبیه‌سازی، مقادیر  $\Delta E^*$  به‌ازای هر دوره‌ی تناوب حاصل شده‌اند و سرانجام، ضریب

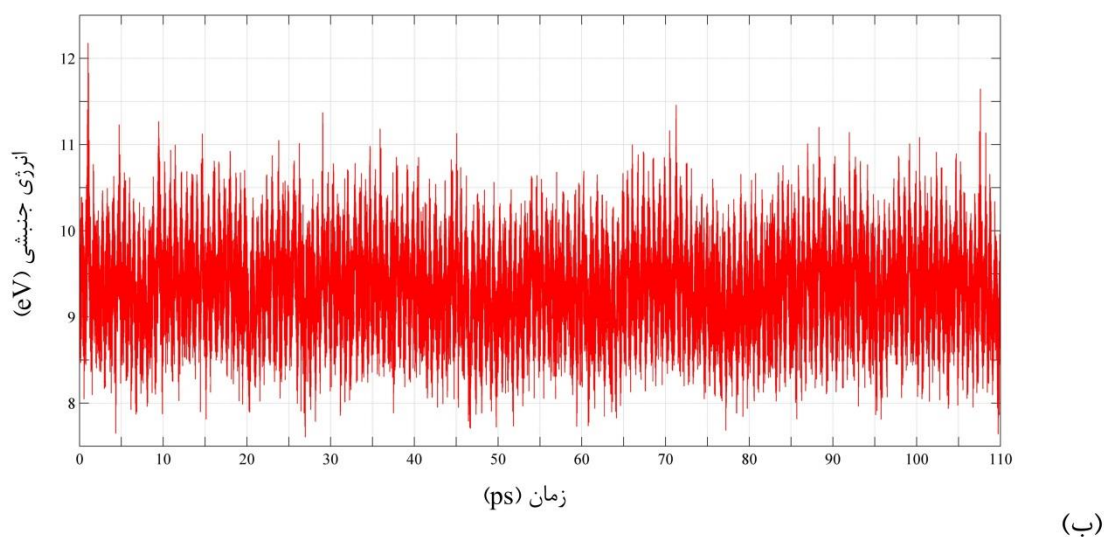
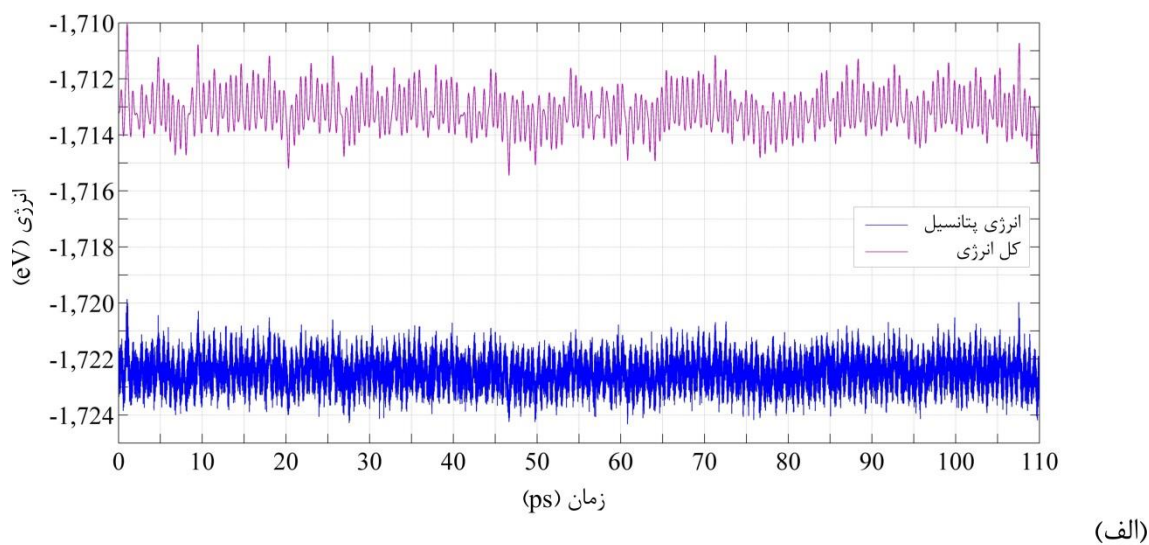


کیفیت با معادله‌ی (۵-۱۰) وابسته به زمان، محاسبه شده‌است. یادآوری می‌شود که انتخاب صورت مسأله، شیوه‌ی مدل‌سازی نانولوله و کاربرد فرض‌هایی ساده‌کننده سبب شده‌اند معکوس  $Q$  شاخص میرایی ترموالاستیک در سیستم باشد.

بررسی مختصر عملکرد لمپس در کنترل دما یا ثابت نگه‌داشتن انرژی نانولوله‌ای که به تعادل گرمایی رسیده‌باشد مکمل مطالعه‌ی اتلاف انرژی در نانولوله‌ها با به‌کارگیری این نرم‌افزار است. شکل ۱-۵ نشان می‌دهد که نانولوله‌ی (۳,۳) با طول ۵ nm و یک سر گیردار - که به عنوان نمونه انتخاب شده‌است - چگونه به دمای تعادل ۳۰۰ K می‌رسد. تنها با گذشت زمانی کوتاه از آغاز شبیه‌سازی، دمای نانولوله که با شماری معین از اتم‌ها درون جعبه‌ای با ابعاد ثابت متحول می‌گردد از مقدار اولیه‌ی ۱۵۵ K تا حدود دمای تعادل افزایش می‌یابد و سپس حول آن نوسان می‌کند. این نخستین گامی است که در رهیافت برگزیده، پس از کمینه ساختن انرژی پتانسیل نانولوله اجرا می‌شود (دامنه‌ی تغییرات دما برای نانولوله‌هایی با تعداد بیشتری اتم کوچک‌تر است). در گام بعدی شبیه‌سازی، می‌توان برای محاسبه‌ی فرکانس اصلی، در دو حالت متفاوت به نانولوله اجازه‌ی ارتعاش داد؛ با بیانی دقیق‌تر، لمپس قادر است در یک شبیه‌سازی دیگر، دمای سیستم را که با شماری ثابت از اتم‌ها درون جعبه‌ای با ابعاد ثابت قرار می‌گیرد کنترل کند یا انرژی سیستم را با همین شرایط ثابت نگاه‌دارد.

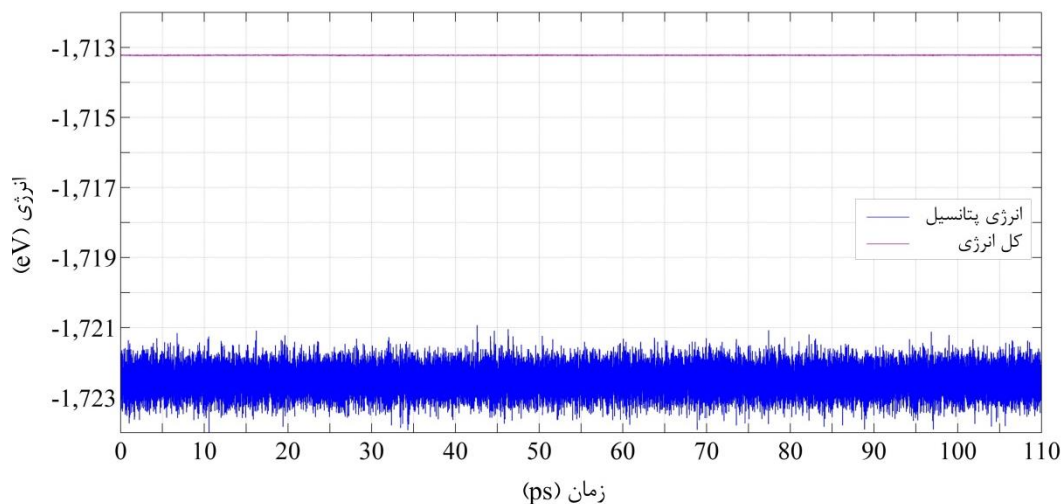


شکل ۱-۵- کنترل دمای نانولوله‌ی (۳,۳) با طول ۵ nm و یک سر گیردار در شبیه‌سازی با لمپس

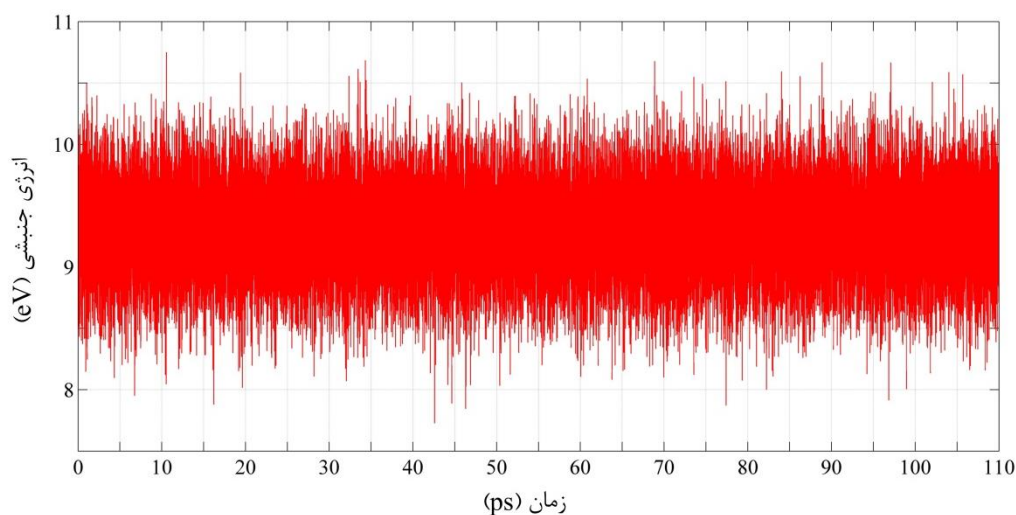


شکل ۵-۲- (الف) انرژی پتانسیل، کل انرژی و (ب) انرژی جنبشی نانولوله ی (۳,۳) در شبیه سازی با کنترل دما

با هدف مقایسه ی برخی کمیت ها، ارتعاش نانولوله ی (۳,۳) که پیش تر به تعادل گرمایی رسیده است در هر دو حالت شبیه سازی شده است. با کنترل دوباره ی دمای نانولوله در حدود  $300\text{ K}$ ، انرژی های جنبشی، پتانسیل و کل انرژی نانولوله که حاصل جمع انرژی های جنبشی و پتانسیل است در مدت  $110\text{ ps}$  همانند نمودارهای شکل ۵-۲ تغییر کرده اند. چنان که ملاحظه می شود در دمای اتاق، انرژی پتانسیل بخش عمده ی انرژی سیستم را تشکیل داده است و مقادیر هر سه گونه ی انرژی نوسان دارند. از سوی دیگر، با ثابت نگه داشتن انرژی نانولوله در یک شبیه سازی جداگانه، کل انرژی سیستم با گذشت زمان نوسان هایی بسیار ناچیز داشته است (شکل ۳-۵ الف).



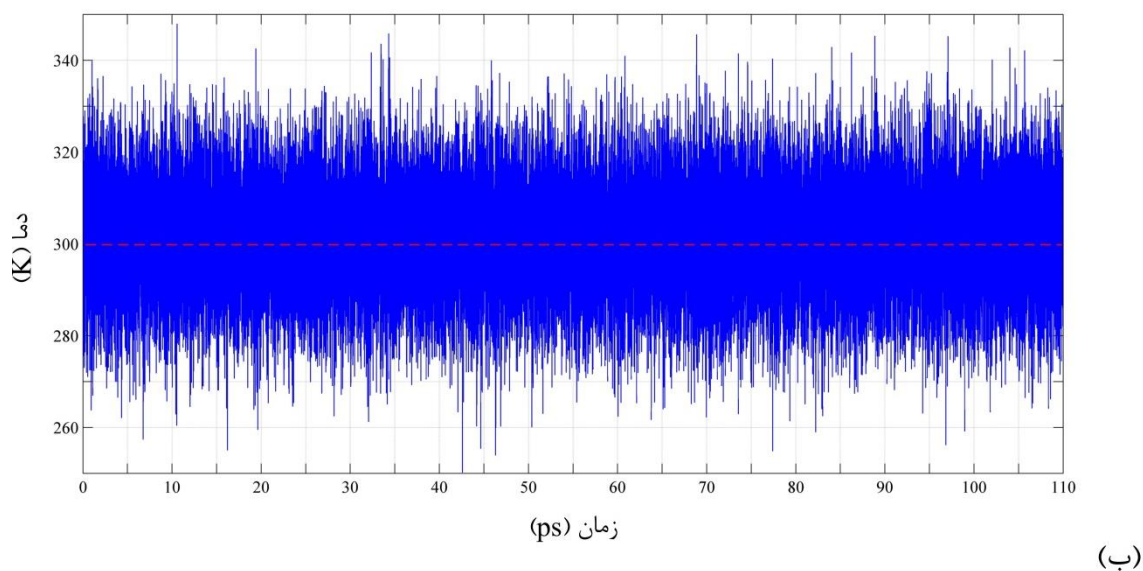
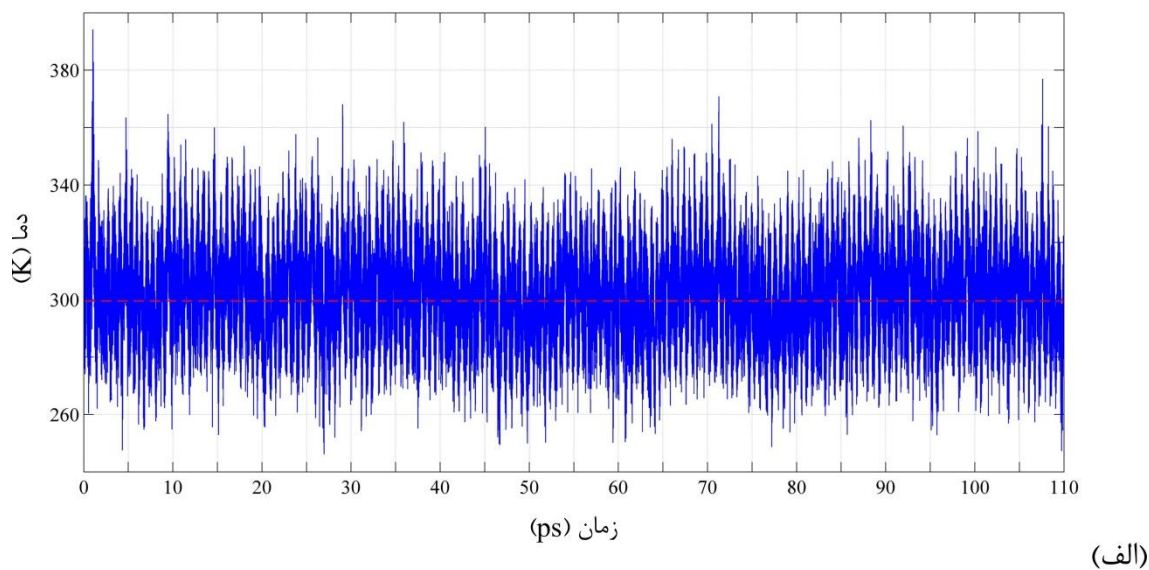
(الف)



(ب)

شکل ۵-۳- (الف) انرژی پتانسیل، کل انرژی و (ب) انرژی جنبشی نانولوله‌ی (۳,۳) در شبیه‌سازی ارتعاشات نانولوله با انرژی ثابت

مطابق شکل ۵-۳، مجموع انرژی‌های جنبشی و پتانسیل نانولوله که کل انرژی آن است در هنگام ارتعاش نانولوله (با تقریب) ثابت باقی مانده‌است؛ در نتیجه، به مقداری که انرژی جنبشی یا پتانسیل افزایش (یا کاهش) یافته باشد دیگری کاهش (یا افزایش) یافته‌است. به علاوه، در این حالت نیز انرژی پتانسیل از انرژی جنبشی بسیار بزرگ‌تر است. نکته‌ای دیگر که درباره‌ی عملکرد لمپس قابل توجه است با مقایسه‌ی تغییرات دمای نانولوله در دو حالت شبیه‌سازی آشکار می‌گردد. دمای کنترل‌شده‌ی نانولوله و دمای آن با ثابت نگاه‌داشتن انرژی در شکل ۵-۴ برحسب زمان رسم شده‌اند.



شکل ۴-۵- تغییرات دمای نانولوله‌ی (۳,۳) در مدت شبیه‌سازی (الف) با کنترل دما و (ب) با ثابت نگاه‌داشتن انرژی

به‌ازای انرژی ثابت، نانولوله دمایی با مقدار میانگین  $300.9 \text{ K}$  و انحراف معیار  $11.22 \text{ K}$  داشته‌است حال آن‌که متوسط دمای نانولوله در شرایط کنترل آن برابر با  $301.7 \text{ K}$  و انحراف معیار آن اندکی بیشتر و به میزان  $15.85 \text{ K}$  بوده‌است. این نتایج برای نانولوله‌ی (۳,۳) نشان می‌دهند که پس از برقراری تعادل گرمایی در سیستم، نوسان‌های نامنظم دما در هر دو حالت شبیه‌سازی به گونه‌ای هستند که دمای  $300 \text{ K}$  به عنوان دمای تعادل، با تقریب حفظ می‌شود. از این‌رو، به نظر می‌رسد بتوان شبیه‌سازی ارتعاشات نانولوله را با ثابت نگاه‌داشتن انرژی آن اجرا کرد و بدین ترتیب، یک فرض

ساده‌کننده را که چشم‌پوشی از مبادله‌ی انرژی سیستم با محیط است حذف نمود. با وجود این، باید توجه داشت که با ثابت ماندن انرژی نانولوله در هنگام ارتعاش، انرژی مود غالب می‌تواند به سایر مودهای ارتعاش منتقل شود [۱۰۵] و در نتیجه، غالب بودن مود نخست ارتعاش، فرضی است که نقض خواهد شد. با این توضیح، راه‌حل مسائل، شبیه‌سازی ارتعاشات نانولوله‌ها با کنترل دمای آن‌ها است.

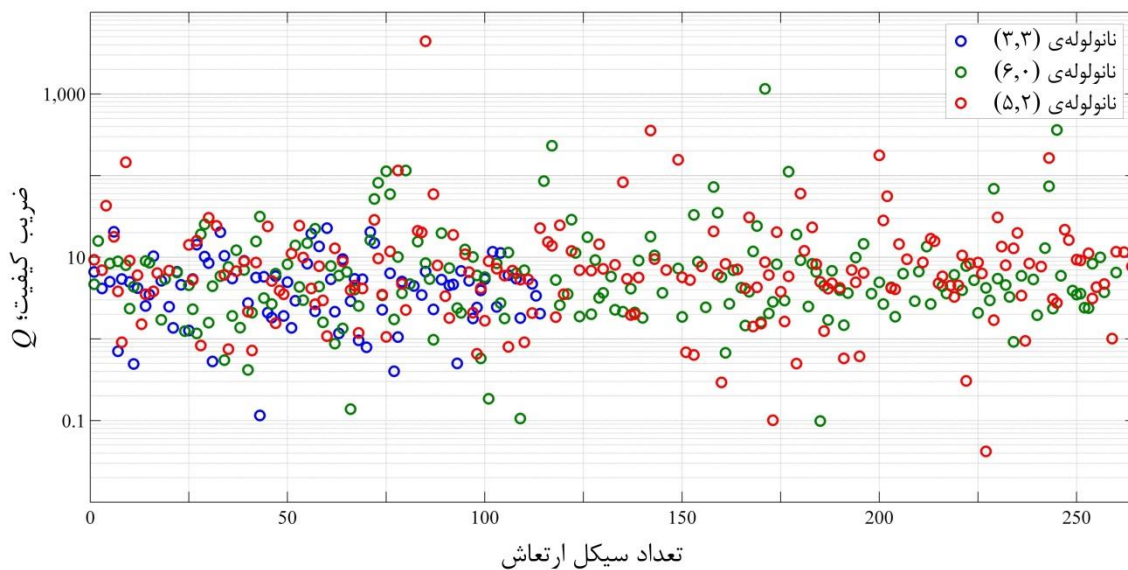
### ۵-۳-۲- مقایسه‌ی نتایج

نخست یادآوری می‌شود که ضرایب کیفیت گزارش‌شده در قالب نتایج، در دمای  $K 300$  محاسبه شده‌اند مگر آن‌که دمای کنترل‌شده‌ی شبیه‌سازی ذکر گردد. در جدول ۵-۱، مقادیر میانگین  $Q$  در مدت شبیه‌سازی برای نانولوله‌های (۳,۳)، (۶,۰) و (۵,۲) با طول  $5 \text{ nm}$  و یک یا دو سر گیردار فهرست شده‌اند. با توجه به شکل ۵-۵، معدل‌گیری از ضرایب کیفیت متغیر با زمان، مقایسه‌ی آن‌ها را ساده‌تر می‌کند هرچند طبیعی است که به‌دلیل نوسان‌های نامنظم انرژی پتانسیل، محاسبه‌ی  $Q$  با معادله‌ی (۵-۱۰) به‌ازای همه‌ی سیکل‌های ارتعاش امکان‌پذیر نباشد. مقادیر جدول ۵-۱ نشان می‌دهند که ضریب کیفیت نانولوله‌ای تک‌جداره می‌تواند به دست‌سازنی آن وابسته باشد چنان‌که با هر یک از شرایط مرزی، ضریب کیفیت به‌ترتیب در نانولوله‌های (۳,۳)، (۶,۰) و (۵,۲) که طول قطر آن‌ها تقریباً یکسان است افزایش می‌یابد.

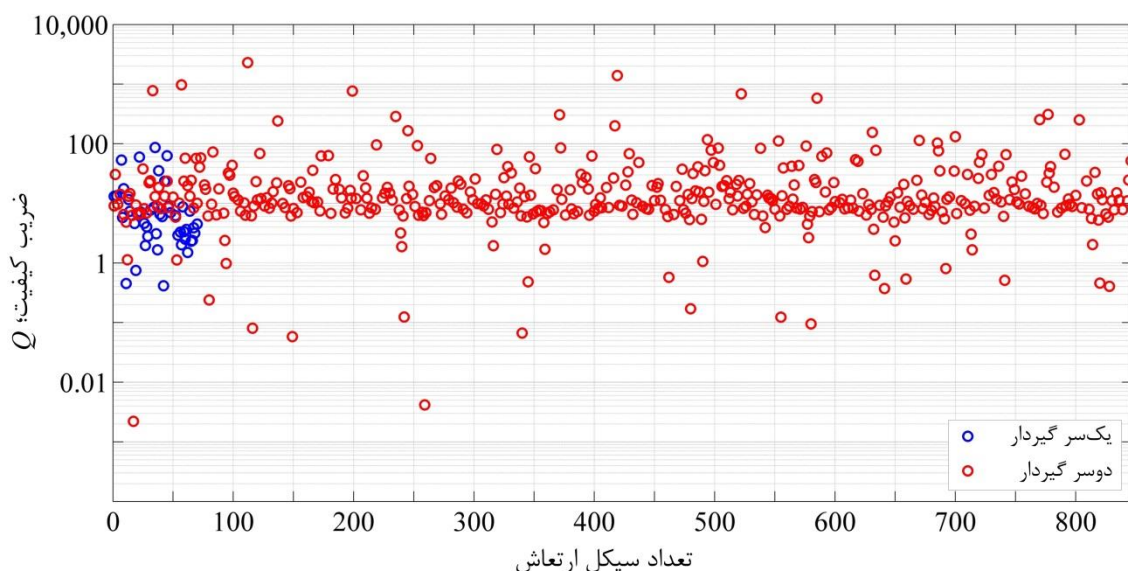
در مرجع ۱۰۶، ضریب کیفیت نانولوله‌های تشدیدساز در دمای محیط در بازه‌ی  $300-8$  گزارش شده‌اند و مرتبه‌ی مقادیر  $Q$  در جدول ۵-۱ با بازه‌ی یادشده همخوانی دارد. کوچک بودن ضرایب کیفیت محاسبه‌شده که با میرایی ترموالاستیک متناظرند نقش عمده‌ی این گونه‌ی میرایی را در اتلاف انرژی نانولوله‌ها در دمای اتاق تأیید می‌نماید.

جدول ۵-۱- مقادیر میانگین ضریب کیفیت در مدت شبیه‌سازی برای سه نانولوله‌ی تک‌جداره با طول  $5 \text{ nm}$

| دوسر گیردار |       |       | یک‌سر گیردار |       |       | شرایط مرزی |
|-------------|-------|-------|--------------|-------|-------|------------|
| (۵,۲)       | (۶,۰) | (۳,۳) | (۵,۲)        | (۶,۰) | (۳,۳) | نانولوله   |
| ۳۹٫۷        | ۱۷٫۶  | ۱۱٫۵  | ۸٫۱          | ۴٫۵   | ۴٫۱   | ضریب کیفیت |



شکل ۵-۵- ضرایب کیفیت در مدت شبیه‌سازی برای نانولوله‌های (۳,۳)، (۶,۰) و (۵,۲) با طول ۵ nm و دو سر گیردار



شکل ۵-۶- ضریب کیفیت در مدت شبیه‌سازی برای نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با طول ۵ nm و شرایط مرزی متفاوت

تغییرات  $Q$  در نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با طول ۵ nm همانند شکل ۵-۶ شبیه‌سازی شده‌اند.

مطابق انتظار، متوسط ضریب کیفیت این نانولوله نیز در دمای اتاق کوچک و به‌ازای شرایط مرزی

یک‌سر گیردار یا دوسر گیردار به‌ترتیب برابر با  $11/9$  یا  $39/4$  است؛ اگرچه مقادیر مزبور از ضرایب

کیفیت نانولوله‌ی (۳,۳) با شرایط مرزی مشابه که در جدول ۵-۱ ارائه شده‌اند بزرگ‌ترند. شایان ذکر

است که اختلاف تعداد سیکل ارتعاش در دو شکل ۵-۵ و ۵-۶ برای نانولوله‌های مختلف به‌دلیل تفاوت

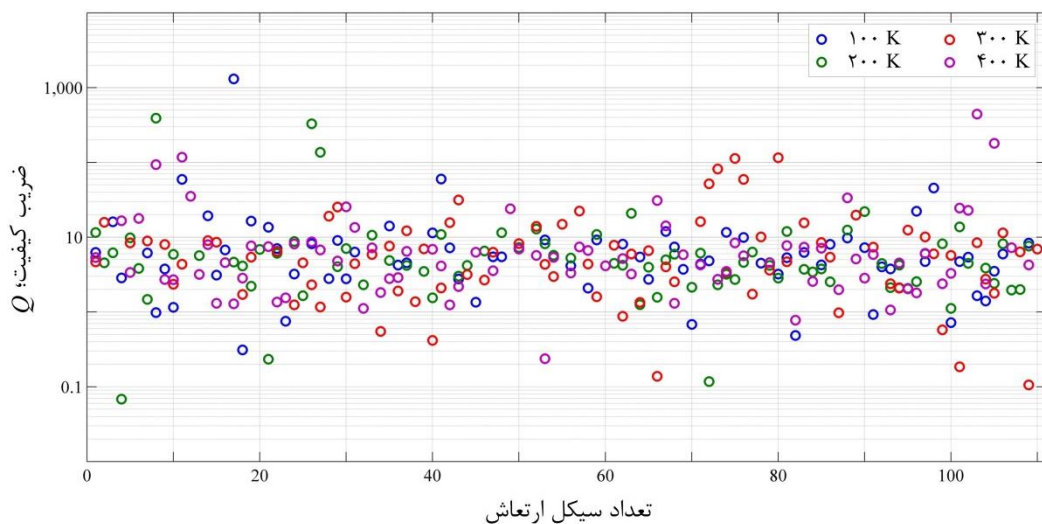
در دوره‌ی تناوب اصلی و مدت شبیه‌سازی ارتعاشات آن‌ها است.

### ۵-۳-۳- وابستگی ضریب کیفیت به دما

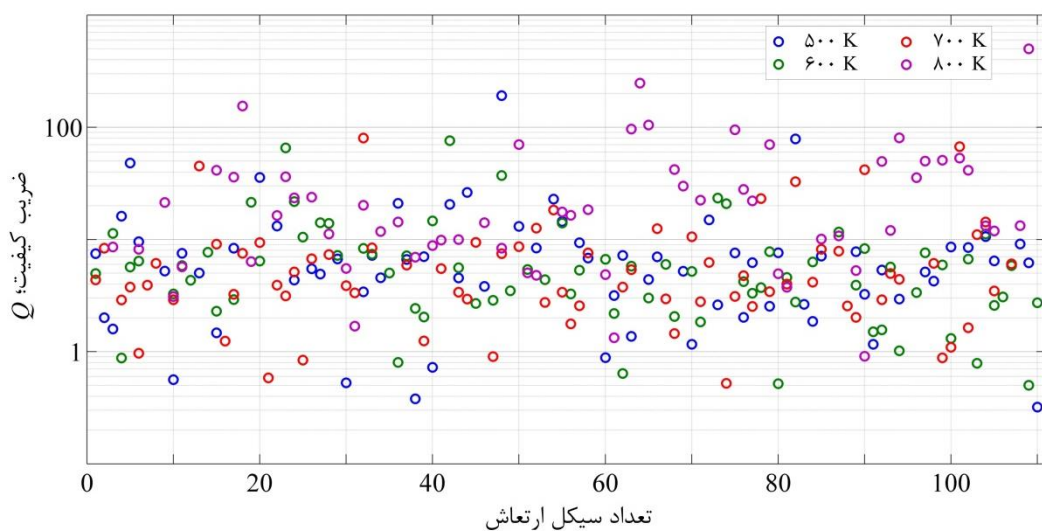
ضریب  $Q$  که معکوس آن شاخص میرایی ترموالاستیک در نانولوله است خود، تابع دما است [۱۰۰]. در بخش حاضر، نمایش وابستگی  $Q$  به دما با محاسبه‌ی تغییرات آن در نانولوله‌ی (۳,۳) با طول ۵ nm - که به عنوان نمونه انتخاب شده است - صورت گرفته است. شبیه‌سازی‌هایی با کنترل دمای نانولوله به‌ازای شرایط مرزی یک‌سر گیردار یا دوسر گیردار و دماهای K ۸۰۰ - ۱۰۰ اجرا شده‌اند و اختلاف دمای هر دو شبیه‌سازی متوالی K ۱۰۰ در نظر گرفته شده است [۵۱]. نتایج به‌دست‌آمده برای میانگین ضریب کیفیت در جدول ۲-۵ فهرست شده‌اند و در شکل ۵-۷، تغییرات ضریب کیفیت نانولوله با دو سر گیردار در مدت هر شبیه‌سازی به نمایش درآمده‌اند. مطابق جدول ۲-۵، تابعیت ضریب کیفیت نانولوله از دما یکنوا نیست و چنان‌که نمودارهای دو شکل ۵-۷ الف و ۵-۷ ب نشان می‌دهند با افزایش دمای کنترل‌شده، پراکندگی مقادیر  $Q$  در مدت شبیه‌سازی بیشتر می‌شود. ضریب کیفیت محاسبه‌شده در دماهای K ۸۰۰ - ۱۰۰ کوچک است و در نتیجه، میرایی ترموالاستیک می‌تواند عامل اتلاف انرژی نانولوله در دماهایی به‌جز دمای اتاق نیز باشد. همچنین، با شبیه‌سازی ارتعاش نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با طول ۵ nm در دمای K ۱۰۰، متوسط ضریب کیفیت به‌ازای شرایط مرزی یک‌سر گیردار یا دوسر گیردار به‌ترتیب، ۳۱٫۱ یا ۱۱٫۲ به‌دست آمده است که در مقایسه با مقدار متناظر ۱۱٫۹ یا ۳۹٫۴ در دمای K ۳۰۰، تغییر کرده است.

جدول ۲-۵- مقادیر میانگین ضریب کیفیت در نانولوله‌ی (۳,۳) با طول ۵ nm در مدت شبیه‌سازی‌هایی با کنترل دما

| شرایط مرزی |      |      |      |      |      |      |      | یک‌سر گیردار |
|------------|------|------|------|------|------|------|------|--------------|
| ۱۰۰        | ۲۰۰  | ۳۰۰  | ۴۰۰  | ۵۰۰  | ۶۰۰  | ۷۰۰  | ۸۰۰  | دما (K)      |
| ۶٫۱        | ۹٫۰  | ۴٫۱  | ۶٫۲  | ۴٫۴  | ۱۱٫۵ | ۲۳٫۰ | ۳٫۹  | ضریب کیفیت   |
| شرایط مرزی |      |      |      |      |      |      |      | دوسر گیردار  |
| ۱۰۰        | ۲۰۰  | ۳۰۰  | ۴۰۰  | ۵۰۰  | ۶۰۰  | ۷۰۰  | ۸۰۰  | دما (K)      |
| ۲۶٫۱       | ۱۶٫۰ | ۱۱٫۵ | ۱۶٫۹ | ۱۱٫۳ | ۸٫۲  | ۸٫۵  | ۳۸٫۶ | ضریب کیفیت   |



(الف)



(ب)

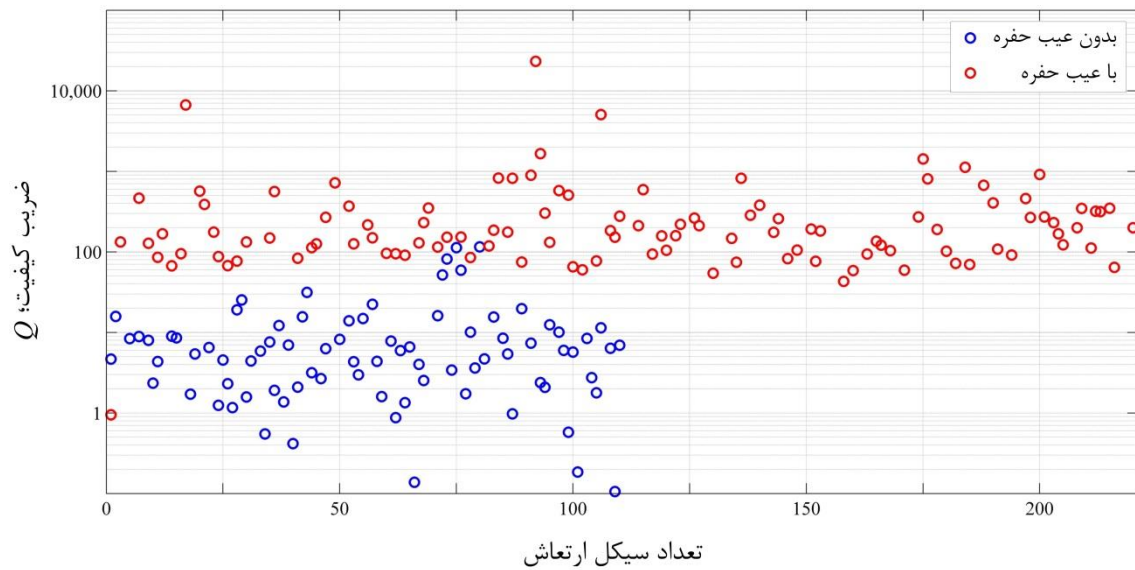
شکل ۵-۷- تغییرات ضریب کیفیت در نانولوله‌ی (۳,۳) با طول ۵ nm و دو سر گیردار در مدت شبیه‌سازی‌هایی با کنترل دما در حدود ۱۰۰ K تا ۸۰۰ K

### ۵-۳-۴- میرایی با تک عیب حفره

چنانچه در ساختار نانولوله‌ای عیب حفره وجود داشته باشد نمی‌توان معکوس ضریب کیفیت آن را شاخص میرایی ترموالاستیک نامید چراکه شکستن پیوندهای شیمیایی در تشکیل عیب حفره بر میرایی (و  $Q$ ) تأثیرگذار است. با آگاهی از این نکته، میانگین ضریب کیفیت نانولوله‌ی (۳,۳) با طول ۵ nm و تک عیب حفره‌ی یگانه در میانه‌ی ساختار آن به‌ازای شرایط مرزی یک‌سر گیردار یا دوسر گیردار به‌ترتیب برابر با ۱۴۶٫۸ یا ۵۶۸٫۱ محاسبه شده‌است که از مقدار متناظر ۴٫۱ یا ۱۱٫۵ بدون عیب



حفره بسیار بزرگ‌تر است. سرانجام، برای نانولوله‌ی  $(8,8)@(3,3)$  با طول  $5\text{ nm}$  و دو سر گیردار که تک عیب حفره‌ی یگانه در میانه‌ی دیواره‌ی درونی آن واقع است، متوسط ضریب کیفیت  $7,1$  به دست آمده است و کاهش آن در قیاس با مقدار  $39,4$  برای نانولوله‌ی مشابه و بدون عیب نشان می‌دهد که تک عیب حفره‌ی یگانه سبب اتلاف انرژی در این نانولوله می‌شود.



شکل ۵-۸- افزایش ضریب کیفیت نانولوله‌ی  $(3,3)$  با طول  $5\text{ nm}$  و دو سر گیردار به دلیل وجود تک عیب حفره‌ی یگانه در میانه‌ی ساختار آن

## فصل ۶- نتیجه‌گیری و راهکارها

محتوای فصل:

❖ چکیده‌ی نتایج و جمع‌بندی

❖ پیشنهادها

## ۶-۱- چکیده‌ی نتایج و جمع‌بندی

گزارش حاضر به مطالعه‌ی اثر عیب حفره بر فرکانس‌های اصلی نانولوله‌های کربنی و محاسبه‌ی میرایی ترموالاستیک در این مواد اختصاص یافته‌است. در فصل ۴، با کمک روش تفاضل محدود، اجرای شبیه‌سازی با رایانه و تبدیل سریع فوریه، تأثیر تک عیب حفره‌ی یگانه بر فرکانس اصلی نانولوله‌هایی تک‌جداره و دوجداره، با مقایسه‌ی نمودارهای درصد جابه‌جایی فرکانس بررسی شده‌است. محل عیب مزبور در ساختار هر نانولوله در راستای طول آن تغییر کرده‌است. به‌علاوه، اثرپذیری درصد جابه‌جایی فرکانس از طول، دست‌سازنی و شرایط مرزی نانولوله‌ها ارزیابی شده‌است. سپس، با توزیع تصادفی عیوب یگانه یا دوگانه در ساختار چند نانولوله‌ی تک‌جداره و دوجداره، تغییرات فرکانس اصلی با درصد تراکم عیب محاسبه شده‌اند. همچنین، مقایسه‌ای میان تغییرات یادشده در نانولوله‌های صندلی‌نما و زیگزاگ‌نما با شرایط مرزی متفاوت صورت گرفته‌است. در فصل ۵، درباره‌ی میرایی ترموالاستیک در نانولوله‌ها با استدلال بحث شده‌است، معادله‌هایی برای تعیین ضریب کیفیت در نانولوله ارائه شده‌اند و در ادامه، با انتخاب راه‌حل، ضرایب کیفیتی که معکوس هر یک از آن‌ها شاخصی برای میرایی ترموالاستیک باشد برای تعدادی نانولوله فهرست شده‌اند. تحلیل مسأله‌های فصل ۵ نیز نیازمند به‌دست آوردن فرکانس اصلی است و در نتیجه، بخشی عمده از رهیافتی که در آن به‌کار رفته‌است همانند روش معرفی‌شده در فصل ۴ است. برنامه‌نویسی در متلب و شبیه‌سازی با نرم‌افزار لمپس، مدل‌سازی و مطالعه‌ی ارتعاشات نانولوله را به عنوان سیستمی از اتم‌ها امکان‌پذیر ساخته‌اند. نکته‌ی کلیدی در حل چنین مسائلی، داشتن شناخت کافی از ماهیت سیستم برای تعریف مدل، پیاده‌سازی صحیح صورت مسأله در برنامه‌ی رایانه‌ای و سرانجام، برگزیدن و پردازش داده‌هایی است که پاسخ نهایی را در پی دارند. شایان ذکر است که در این گزارش، راه‌حل‌های عددی پیش از مرور نتایج (و در فصل ۳) اعتبارسنجی شده‌اند. بیان خلاصه‌ای از یافته‌های پژوهشی ارائه‌شده در فصل‌های ۴ و ۵ محتوای این بخش را کامل می‌کند.

## ۶-۱-۱- اثر عیب حفره

برای بررسی تأثیری که فرکانس اصلی نانولوله‌ها از تک عیب حفره می‌پذیرد نانولوله‌های تک‌جداره‌ی (۳,۳)، (۶,۰) و (۵,۲) با طول‌های ۵ nm، ۱۰ nm و ۱۵ nm و نانولوله‌های دوجداره‌ی (۸,۸)@(۳,۳)، (۱۳,۳)@(۶,۰) و (۱۱,۶)@(۵,۲) با طول‌های ۵ nm و ۱۰ nm که در ساختار آن‌ها تک عیب حفره‌ی یگانه وجود دارد مطالعه شده‌اند. در حالت کلی، ممکن است فرکانس اصلی نانولوله‌ای با یک یا دو سر گیردار از عیب تأثیر نپذیرد یا بر اثر وجود آن افزایش یا کاهش یابد. به علاوه، تغییرات فرکانس اصلی با موقعیت عیب در راستای طول نانولوله، به‌ازای پارامترهایی مانند طول و دست‌سازنی نانولوله متفاوت است. بدین ترتیب، درصد جابه‌جایی فرکانس با نماد  $f$  و نسبت موقعیت عیب به طول نانولوله؛ یعنی  $z/L$  متغیرهایی هستند که مورد بحث قرار گرفته‌اند.

وجود عیب در نانولوله‌ی (۳,۳) با یک سر گیردار کاهش فرکانس اصلی آن را در پی دارد و حساسیت  $f$  به محل عیب با افزایش طول نانولوله کمتر می‌شود. با وجود این، در نانولوله‌های (۶,۰) و (۵,۲) با یک سر گیردار، وجود تک عیب می‌تواند سبب افزایش یا کاهش فرکانس اصلی شود. همچنین، با دور شدن عیب از انتهای گیردار در هر سه گونه‌ی نانولوله، درصد جابه‌جایی فرکانس کاهش نمی‌یابد و فرکانس اصلی هر یک همواره کمتر از ۱۰٪ تغییر می‌کند. تقارن هندسه و شرایط مرزی نانولوله‌های تک‌جداره با دو سر گیردار نسبت به نقطه‌ی میانی آن‌ها باعث شده‌است که برای هر نانولوله، نمودارهای  $f$  بر حسب  $z/L$  نسبت به خط  $z/L = 0.5$  تقریباً متقارن باشند. هنگامی که عیب در میانه‌ی ساختار نانولوله‌ی (۳,۳) با دو سر گیردار و طول ۵ nm یا ۱۵ nm واقع باشد بیشترین کاهش فرکانس اصلی رخ می‌دهد اما این فرکانس به‌ازای طول ۱۰ nm به عیب وابسته نیست. از سوی دیگر، بر اثر وجود عیب در نانولوله‌ی (۶,۰) با دو سر گیردار فرکانس اصلی آن کاهش می‌یابد و با افزایش طول نانولوله کمتر تغییر می‌نماید. سرانجام، در نانولوله‌ی (۵,۲) با دو سر گیردار؛ همانند نانولوله‌ی (۶,۰) با شرایط مرزی یکسان، تک عیب حفره سبب کاهش فرکانس اصلی می‌شود؛ به‌علاوه، درصد جابه‌جایی فرکانس نانولوله به‌ازای طول ۱۵ nm به موقعیت نسبی عیب وابسته نیست.

در نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با یک سرِ گیردار که تک عیب حفره در دیواره‌ی درونی آن واقع است، در قیاس با نانولوله‌ی (۳,۳) با شرایط مرزی مشابه، وجود دیواره‌ی بیرونی تأثیرپذیری فرکانس اصلی سیستم را از تک عیب حفره به شدت کاهش می‌دهد. در این نانولوله‌ی دوجداره، به‌ازای طول ۵ nm، تنها هنگامی که عیب به یکی از دو انتهای نانولوله نزدیک‌تر باشد فرکانس اصلی تغییر می‌کند و به‌ازای طول ۱۰ nm، تک عیب حفره بر فرکانس اصلی بی‌تأثیر است. همچنین، با جابه‌جا شدن عیب حفره در دیواره‌ی بیرونی نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با یک سرِ گیردار از نزدیکی انتهای گیردار به سوی انتهای آزاد، به‌ازای طول ۵ nm، فرکانس اصلی سیستم بزرگ‌تر می‌شود و به‌ازای طول ۱۰ nm، بار دیگر فرکانس اصلی به عیب حفره وابسته نیست. فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۱۳,۳)@(۶,۰) با یک سرِ گیردار بر اثر وجود تک عیب حفره در دیواره‌ی درونی کاهش می‌یابد. برای نانولوله‌ی مزبور با طول ۱۰ nm، فرکانس اصلی از محل عیب تأثیر نمی‌پذیرد. به‌علاوه، چنان‌چه عیب در دیواره‌ی درونی هر یک از نانولوله‌های (۱۳,۳)@(۶,۰) و (۱۱,۶)@(۵,۲) با یک سرِ گیردار واقع باشد بیشترین درصد کاهش فرکانس، متناظر با طول ۱۰ nm برای آن‌ها است.

همانند نانولوله‌های تک‌جداره، ساختار هندسی و شرایط مرزی نانولوله‌های دوجداره با دو سرِ گیردار نیز چنان هستند که برای آن‌ها، بیشتر نمودارهای  $f$  بر حسب  $z/L$  نسبت به خط  $z/L = 0.5$  تقارن تقریبی دارند. وجود تک عیب حفره در دیواره‌ی درونی نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با دو سرِ گیردار افزایش فرکانس اصلی آن را در پی ندارد؛ اگر دیواره‌ی بیرونی نانولوله دارای عیب باشد فرکانس اصلی سیستم به‌ازای طول ۵ nm، با جابه‌جایی عیب کوچک‌تر می‌شود و به‌ازای طول ۱۰ nm، بیشترین کاهش فرکانس اصلی هنگامی روی می‌دهد که عیب به میانه‌ی نانولوله نزدیک باشد. فرکانس اصلی نانولوله‌ی (۱۳,۳)@(۶,۰) با دو سرِ گیردار و طول ۵ nm بر اثر وجود عیب حفره در دیواره‌ی درونی آن کاهش می‌یابد؛ از سوی دیگر، فرکانس اصلی به‌ازای طول ۱۰ nm، چندان به تک عیب حفره وابسته نیست. سرانجام، عیب در دیواره‌ی درونی نانولوله‌ی (۱۱,۶)@(۵,۲) با دو سرِ گیردار و طول ۵ nm سبب می‌شود فرکانس اصلی سیستم کاهش یابد اما برای این نانولوله به‌ازای طول ۱۰ nm

تأثیر عیب دیواره‌ی درونی بر فرکانس مزبور قابل توجه نیست.

اثر عیوب حفره با توزیع تصادفی در نانولوله‌هایی تک‌جداره و دوجداره با طول 5 nm و شرایط مرزی متفاوت مطالعه شده‌است. سیستم‌های انتخاب‌شده، نانولوله‌های صندلی‌نمای (۳,۳)، (۴,۴)، (۵,۵)، (۶,۶) و (۷,۷)، نانولوله‌های زیگزاگ‌نمای (۶,۰)، (۷,۰)، (۸,۰)، (۹,۰) و (۱۰,۰) و نانولوله‌ی (۸,۸)@ (۳,۳) هستند. درصد تراکم عیب یگانه (یا دوگانه) با نماد  $c_1$  (یا  $c_2$ ) در هر نانولوله تغییر داده شده‌است و با رسم درصد جابه‌جایی فرکانس؛ یعنی  $f$  برحسب آن مقایسه‌ای میان تغییرات فرکانس اصلی در نانولوله‌ها صورت گرفته‌است.

در نانولوله‌های تک‌جداره با یک سر گیردار، وجود عیوب حفره‌ی یگانه یا دوگانه با توزیع تصادفی (به جز در چند حالت) کاهش فرکانس اصلی را در پی دارد و درصد جابه‌جایی فرکانس برحسب  $c_1$  یا  $c_2$  بدون الگوی منظم تغییر می‌کند. نبود چنین الگویی برای نانولوله‌هایی تک‌جداره با دو سر گیردار نیز مشاهده می‌شود و عیوب حفره‌ای که به‌طور تصادفی در ساختار این نانولوله‌ها توزیع شده باشند سبب می‌شوند فرکانس اصلی آن‌ها کاهش یابد.

عیوب حفره با توزیع تصادفی در هر دو دیواره‌ی نانولوله‌ی (۸,۸)@ (۳,۳) با تراکمی یکسان پراکنده شده‌اند؛ فرکانس اصلی سیستم بر اثر توزیع تصادفی عیب در ساختار آن کاهش می‌یابد و با شرایط یک‌سر گیردار و دوسر گیردار نانولوله، چگونگی تغییرات  $f$  با افزایش  $c_1$  یا  $c_2$  مشابه است. همچنین، به‌ازای شرایط مرزی معین، کمترین مقدار  $f$  با بیشترین تراکم عیب متناظر است.

## ۶-۱-۲- میرایی ترموالاستیک

ضرایب کیفیت محاسبه‌شده برای نانولوله‌های (۳,۳)، (۶,۰)، (۵,۲) و (۸,۸)@ (۳,۳) با طول 5 nm و یک یا دو سر گیردار در دمای اتاق (۳۰۰ K) کوچک هستند و در نتیجه، میرایی ترموالاستیک در دمای یادشده نقشی عمده در اتلاف انرژی این نانولوله‌ها دارد. تفاوت مقادیر ضریب کیفیت در نانولوله‌های (۳,۳)، (۶,۰) و (۵,۲) نشان می‌دهد که دست‌سازنی نانولوله‌ای تک‌جداره می‌تواند بر ضریب

کیفیت آن مؤثر باشد. به علاوه، ضرایب کیفیت نانولوله‌های تک‌جداره و دوجداره‌ی مزبور به شرایط مرزی آن‌ها وابسته اند.

ضریب کیفیت نانولوله تابعی از دما است و برای نانولوله‌ی (۳,۳) با طول ۵ nm و یک یا دو سر گیردار، در محدوده‌ی دمای ۸۰۰-۱۰۰ K، تابعیت ضریب کیفیت از دما یکنوا نیست. میرایی ترموالاستیک در دماهایی به جز ۳۰۰ K نیز باعث اتلاف انرژی نانولوله به میزانی قابل توجه می‌شود. همچنین، مقادیر ضریب کیفیت برای نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با طول ۵ nm به‌ازای شرایط مرزی معین، در دو دمای ۱۰۰ K و ۳۰۰ K متفاوت اند.

آخرین نتایج ارائه‌شده در این گزارش درباره‌ی تأثیر عیب حفره بر میرایی در نانولوله‌ها هستند. در دمای اتاق، ضریب کیفیت نانولوله‌ی (۳,۳) با طول ۵ nm که تک عیب حفره‌ی یگانه در میانه‌ی ساختار آن واقع است از مقدار متناظر نانولوله‌ی بدون عیب بسیار بزرگ‌تر است. از سوی دیگر، در دمای ۳۰۰ K، ضریب کیفیت نانولوله‌ی (۸,۸)@(۳,۳) با طول ۵ nm و دو سر گیردار بر اثر وجود عیب یادشده در میانه‌ی دیواره‌ی درونی آن کاهش می‌یابد و بنابراین، علاوه بر میرایی ترموالاستیک، تک عیب حفره‌ی یگانه منشأ اتلاف انرژی نانولوله است.

## ۶-۲- پیشنهادها

با تعریف مسأله‌هایی گوناگون می‌توان تأثیر عیب حفره را بر خواص ارتعاشی نانولوله‌ها بیشتر مطالعه کرد؛ برای نمونه، ممکن است در نانولوله‌های تک‌جداره و چندجداره عیوب حفره‌ی یگانه، دوگانه یا ترکیبی از آن‌ها بر فرکانس‌های طبیعی و ضریب کیفیت در دماهای مختلف مؤثر باشند و بدیهی است که تغییر پارامترهایی مانند طول، قطر و دست‌سازنی نانولوله‌ها و شرایط مرزی آن‌ها تنوع مسائل را دوچندان می‌سازد. با توجه به ابعاد نانولوله‌ها در مقیاس آزمایشگاهی، ارائه‌ی روش‌هایی دقیق برای تحلیل ارتعاشات نانولوله‌هایی که طول آن‌ها از مرتبه‌ی میکرومتر باشد مفید است. همچنین، راه‌حلی تحلیلی برای محاسبه‌ی میرایی ترموالاستیک در نانولوله‌ها با مد نظر داشتن ساختار آن‌ها ارزشمند

خواهد بود. نکته‌ی شایان ذکر درباره‌ی عیوب حفره با توزیع تصادفی، حل‌های متوالی هر مسأله با چندین بار توزیع عیب است که انتظار می‌رود پاسخی با دقت بیشتر در پی داشته باشند. در پایان، توصیه می‌شود شبیه‌سازی‌های دینامیک ملکولی برای سیستمی که اتم‌های آن بیش از چند صد عدد باشند در رایانه‌ای با پردازنده‌های قدرتمند و توان محاسباتی زیاد اجرا شوند.





# پوست ۱- ضابطہ ی پتانسیل بین ملکولی تطبیقی

در این پیوست، جزئیات پتانسیل بین‌ملکولی تطبیقی [۹۲] تشریح شده‌اند.

برهم‌کنش هر زوج از اتم‌هایی که میان آن‌ها پیوندی کووالانسی برقرار است با پتانسیل

$$E_{ij}^{\text{REBO}} = V_{ij}^{\text{R}}(r_{ij}) + b_{ij} V_{ij}^{\text{A}}(r_{ij}) \quad (\text{پ} ۱-۱)$$

مدل می‌شود که در آن،  $V_{ij}^{\text{R}}$  و  $V_{ij}^{\text{A}}$  به ترتیب، پتانسیل‌های دافعه و جاذبه‌ی دوجه‌دو هستند که با توجه به نوع اتم‌های  $i$  و  $j$  (هیدروژن یا کربن) تعیین می‌گردند. به‌علاوه، وابستگی مقدار  $E_{ij}^{\text{REBO}}$  به جمله‌ی بس‌ذره‌ای  $b_{ij}$  سبب می‌شود این پتانسیل به موقعیت و ماهیت شیمیایی اتم‌های نزدیک به پیوند  $ij$  بستگی داشته باشد. آثار شیمیایی گوناگونی که بر قدرت پیوند کووالانسی مؤثرند همگی با این جمله توصیف شده‌اند. برای نمونه، مقدار  $b_{ij}$  به‌ازای پیوند میان اتم‌های کربنی با عدد هم‌آرایی سه ( $sp^3$ ) در قیاس با مقدار آن به‌ازای پیوند بین اتم‌های کربنی با عدد هم‌آرایی چهار ( $sp^3$ ) بزرگ‌تر است. بنابراین، وزن جمله‌ی جاذبه برای اتم‌های کربنی که عدد هم‌آرایی سه ( $sp^3$ ) دارند بیشتر است و در نتیجه، قدرت پیوندهای دوگانه افزایش می‌یابد.

برهم‌کنش‌های دافعه‌ی بین‌ملکولی و لاندن<sup>۱</sup> با کمک یک پتانسیل لنارد-جونز با معادله‌ی

$$V_{ij}^{\text{LJ}}(r_{ij}) = \epsilon_{ij} \left[ \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (\text{پ} ۲-۱)$$

مدل شده‌اند. سه معیار برگزیده برای حضور یا حذف برهم‌کنش لنارد-جونز و نیز فاصله‌ی تأثیر آن وجود دارند که بر اساس آن‌ها، حذف این برهم‌کنش به شکلی تطبیقی صورت می‌گیرد و وابسته به (الف) فاصله‌ی دو اتم مورد نظر، (ب) قدرت هر گونه برهم‌کنش پیوندی بین آن‌ها و (ج) شبکه‌ی پیوندهایی است که آن‌ها را به یکدیگر متصل می‌نماید. در حالت کلی، دو اتم با فاصله‌ی کم، تنها در صورتی دافعه‌ی لنارد-جونز را حس می‌کنند که برقراری پیوند شیمیایی میان آن‌ها امکان‌پذیر نباشد و در یک ملکول، همسایه‌های نزدیک (اول تا چهارم) یکدیگر نباشند. بدین ترتیب، عبارت ریاضی کاملی که مدل برهم‌کنش لنارد-جونز میان اتم‌های  $i$  و  $j$  است با معادله‌ی

$$E_{ij}^{\text{LJ}}(r_{ij}) = S(t_r(r_{ij})) S(t_b(b_{ij}^*)) C_{ij} V_{ij}^{\text{LJ}}(r_{ij}) + [1 - S(t_r(r_{ij}))] C_{ij} V_{ij}^{\text{LJ}}(r_{ij}) \quad (\text{پ} ۳-۱)$$

<sup>۱</sup> London

بیان می‌شود که در آن،  $S(t)$  یک تابع عمومی برگزیننده<sup>۱</sup> و دارای ضابطه‌ی

$$S(t) = \Theta(-t) + \Theta(t)\Theta(1-t)[1-t^2(3-2t)] \quad (\text{پ-۴})$$

است. در معادله‌ی (پ-۴)،  $\Theta(t)$  تابع پله‌ی هویساید<sup>۲</sup> است. مقدار تابع  $S(t)$  به‌ازای  $t < 0$  برابر با یک و به‌ازای  $t > 1$  مساوی صفر است؛ همچنین به‌ازای مقادیر میانی  $t$ ، با یک اسپلاین<sup>۳</sup> درجه سه به‌طور هموار، از یک تا صفر تغییر می‌کند. تابع و مشتق اول آن در نقاط انتهایی بازه‌ی تغییرات پیوسته‌اند.

تأثیر فاصله‌ی زوجی از اتم‌ها بر قدرت برهم‌کنش لنارد-جونز آن‌ها در جمله‌ی  $S(t_r(r_{ij}))$  از

معادله‌ی (پ-۳) نمایان می‌شود. تابع مقیاس‌بندی  $t_r(r_{ij})$  با ضابطه‌ی

$$t_r(r_{ij}) = \frac{r_{ij} - r_{ij}^{\text{LJ min}}}{r_{ij}^{\text{LJ max}} - r_{ij}^{\text{LJ min}}} \quad (\text{پ-۵})$$

مقیاس دامنه‌ی تابع برگزیننده؛ یعنی  $S(t)$  را تغییر می‌دهد. مطابق معادله‌ی (پ-۳) تا (پ-۵)،

چنان‌چه  $r_{ij}$  از  $r_{ij}^{\text{LJ max}}$  بزرگ‌تر باشد  $S(t_r(r_{ij}))$  صفر است و فاصله‌ی دو اتم بر برهم‌کنش لنارد-جونز

مؤثر نیست و از سوی دیگر، اگر  $r_{ij}$  از  $r_{ij}^{\text{LJ max}}$  کوچک‌تر باشد جمله‌ی نخست در طرف راست

معادله‌ی (پ-۳) غیرصفر است و در نتیجه، برهم‌کنش لنارد-جونز به مقادیر دو تابع برگزیننده‌ی

دیگر وابسته خواهد بود. بازه‌ی تغییرات  $[r_{ij}^{\text{LJ min}}, r_{ij}^{\text{LJ max}}]$  به گونه‌ای انتخاب شده‌است که کمینه‌ی

چاه پتانسیل لنارد-جونز در مقایسه با برهم‌کنش اولیه؛ یعنی  $V_{ij}^{\text{LJ}}(r_{ij})$ ، بدون تغییر باقی بماند و

هنگامی که برهم‌کنش‌های لنارد-جونز حذف می‌شوند، به‌دلیل دافعه‌های لنارد-جونز در فاصله‌های

کوتاه، مانعی مصنوعی برای واکنش شیمیایی وجود نداشته باشد. با وجود قیدهای مزبور، بازه‌ی

تغییرات به‌ازای  $r_{ij}^{\text{LJ min}} = \sigma_{ij}$  و  $r_{ij}^{\text{LJ max}} = \frac{1}{2^6}\sigma_{ij}$  دارای بیشترین گستردگی است. به‌علاوه، با انتخاب

$r_{ij}^{\text{LJ min}} = \sigma_{ij}$  پیوستگی مشتق دوم پتانسیل به‌ازای  $r_{ij} = r_{ij}^{\text{LJ min}}$  تضمین می‌شود.

تغییر قدرت پیوند دومین معیاری است که می‌تواند برهم‌کنش لنارد-جونز را تحت تأثیر قرار

دهد و با جمله‌ی  $S(t_b)$  از معادله‌ی (پ-۳) توصیف شده‌است. تابع مقیاس‌بندی  $t_b(b_{ij})$  با ضابطه‌ی

۱- Universal switching function

۲- Heaviside step function

۳- Spline

$$t_b(b_{ij}) = \frac{b_{ij} - b_{ij}^{\min}}{b_{ij}^{\max} - b_{ij}^{\min}} \quad (\text{پ ۶-۱})$$

گستره‌ی مقادیر  $b_{ij}$  را برای به‌کارگیری آن در تابع برگزیننده‌ی  $S(t)$  تغییر می‌دهد. چنان‌چه مرتبه‌ی پیوند ( $b_{ij}$ ) بزرگ باشد بین دو اتم مورد نظر پیوند کووالانسی تشکیل می‌شود و  $t_b > 1$ ؛ در نتیجه، برهم‌کنش‌های دافعه‌ی لنارد-جونز حذف خواهند شد. به‌ازای مقادیر کوچک مرتبه‌ی پیوند، برقراری پیوند کووالانسی امکان‌پذیر نیست و برهم‌کنش لنارد-جونز به میزانی متغیر که به مقدار  $b_{ij}$  وابسته است وجود خواهد داشت. سرانجام، اگر مقدار  $b_{ij}$  به اندازه‌ی کافی کوچک باشد دافعه‌ی لنارد-جونز به‌طور کامل اعمال می‌گردد. جمله‌ی  $b_{ij}^*$  در معادله‌ی (۵-۲۱) با  $b_{ij}$  اندکی متفاوت است. برهم‌کنش تطبیقی لنارد-جونز در معادله‌ی مزبور معمولاً برای زوج‌هایی از اتم‌ها محاسبه می‌شود که در فاصله‌های بین‌ملکولی از یکدیگر قرار دارند. به‌دلیل آن‌که فاصله‌های یادشده به‌طور معمول، از فاصله‌ی  $r_{ij}^{\max}$  برای پیوند کووالانسی بیشتر هستند جمله‌ی  $b_{ij}$  توصیفی دقیق از مرتبه‌ی پیوند میان اتم‌های  $i$  و  $j$  حاصل نمی‌کند. بنابراین، جمله‌ی مرتبه‌ی پیوند  $b_{ij}^*$  در بخش‌های ناپیوندی پتانسیل، نماینده‌ی یک جمله‌ی فرضی  $b_{ij}$  است که به‌ازای  $r_{ij} = r_{ij}^{\min}$  محاسبه می‌گردد؛ یعنی

$$b_{ij}^* = b_{ij} \Big|_{r_{ij}=r_{ij}^{\min}} \quad (\text{پ ۷-۱})$$

در محاسبه‌ی  $b_{ij}^*$  فرض می‌شود فاصله‌ی اتم‌های  $i$  و  $j$  با هر یک از اتم‌های همسایه‌ی آن‌ها بدون تغییر باقی بماند.

سومین معیاری که برای محاسبه‌ی برهم‌کنش لنارد-جونز به‌کار می‌رود اتصال اتم‌ها به کمک شبکه‌ای از پیوندها است. برهم‌کنش‌های نخستین اتم‌های همسایه (اتم‌های مجاور اول و دوم) و نیز دومین اتم‌های همسایه (اتم‌های مجاور اول و سوم) به‌خوبی مدل می‌شوند؛ از این‌رو، برای زوج‌هایی از اتم‌ها که شامل اتم‌های همسایه‌ی اول تا سوم باشند همه‌ی برهم‌کنش‌های لنارد-جونز از فرمول‌بندی حذف می‌گردند. همچنین، برهم‌کنش‌های اتم‌های مجاور اول و چهارم به کمک پتانسیل زاویه‌ی دووجهی که بخشی دیگر از پتانسیل بین‌ملکولی تطبیقی است توصیف می‌شوند و در نتیجه،

برهم‌کنش‌های لنارد-جونز متناظر با آن‌ها نیز در نظر گرفته نمی‌شوند. حذف کردن برهم‌کنش‌های لنارد-جونز برای اتم‌های همسایه‌ی نزدیک به این روش، با محدودیت‌هایی مشابه در پتانسیل‌های مکانیک ملکولی قابل مقایسه است که در آن‌ها، تغییرات طول پیوند، زاویه‌ی پیوند و زاویه‌ی دوجبه‌ی جدا از برهم‌کنش‌های ناپیوندی مدل می‌شوند. با وجود این، پتانسیل بین‌ملکولی تطبیقی برخلاف پتانسیل‌های مکانیک ملکولی، قادر است متناسب با تغییر آرایش‌های مرتبط با تشکیل پیوند، اثر برهم‌کنش‌های ناپیوندی را به‌طور تدریجی در محاسبات وارد سازد. تبدیل برهم‌کنش‌های پیوندی به گونه‌های ناپیوندی که همزمان با تجزیه‌ی یک ملکول، به‌صورت هموار و تدریجی روی می‌دهد با کمک جملات  $w_{ij}(r_{ij})$  که نماینده‌ی وزن پیوندها هستند مدل می‌شود. وزن پیوند؛ یعنی  $w_{ij}$ ، عددی بین صفر و یک است که شاخصی برای تشکیل پیوند میان دو اتم  $i$  و  $j$  به شمار می‌رود؛ با بیان دیگر، به‌ازای  $w_{ij} = 1$  برقرار است، به‌ازای  $w_{ij} = 0$  پیوندی وجود ندارد و  $0 < w_{ij} < 1$  نشان می‌دهد که دو اتم به‌طور جزئی از یکدیگر جدا شده‌اند.  $w_{ij}$  به‌صورت تابعی برگزیننده بر مبنای فاصله تعریف شده‌است که مقدار آن در بازه‌ای متناظر با شکل‌گیری پیوند کووالانسی به‌صورت هموار از یک تا صفر تغییر می‌کند؛ بدین ترتیب،

$$w_{ij}(r_{ij}) = S'(t_c(r_{ij})) \quad (\text{پ} ۱-۸)$$

که در آن،

$$t_c(r_{ij}) = \frac{r_{ij} - r_{ij}^{\min}}{r_{ij}^{\max} - r_{ij}^{\min}} \quad (\text{پ} ۱-۹)$$

و تابع  $S'(t)$  با ضابطه‌ی

$$S'(t) = \Theta(-t) + \frac{1}{\pi} \Theta(t) \Theta(1-t) [1 + \cos(\pi t)] \quad (\text{پ} ۱-۱۰)$$

تعریف می‌شود. برای هر دو اتم که با مجموعه‌ای از سه پیوند یا تعدادی کمتر از آن به یکدیگر متصل شده باشند برهم‌کنش‌های لنارد-جونز حذف می‌گردند و اگر پیوندهای مزبور به‌صورت جزئی برقرار باشند آنگاه بخشی از برهم‌کنش‌های لنارد-جونز حذف خواهد شد. این عمل به کمک تابع برگزیننده‌ی

اتصال  $C_{ij}$  در معادله‌ی (پ ۱-۳) صورت می‌پذیرد که مقدار آن از تساوی

$$C_{ij} = 1 - \max\{w_{ij}(r_{ij}), w_{ik}(r_{ik})w_{kj}(r_{kj}), \forall k, w_{ik}(r_{ik})w_{kl}(r_{kl})w_{lj}(r_{lj}), \forall k, l\} \quad (پ ۱-۱۱)$$

به دست می‌آید. در تعریف  $C_{ij}$ ، قوی‌ترین مجموعه‌ی شامل سه پیوند یا کمتر که اتم‌های  $i$  و  $j$  را به یکدیگر متصل می‌کنند تعیین می‌گردد. چنان‌چه اتم‌های  $i$  و  $j$  همسایه باشند یا به کمک یک یا دو اتم همسایه‌ی میانی به یکدیگر متصل شده باشند  $C_{ij}$  صفر است و میان اتم‌های یادشده برهم‌کنش ندارد-جونز وجود ندارد.

به عنوان خلاصه‌ی بحث، با در نظر داشتن معیارهای فاصله، مرتبه‌ی پیوند و اتصال، می‌توان چنین نتیجه گرفت که برای اعمال شدن برهم‌کنش‌های لنارد-جونز به‌طور کامل، دو اتم مورد نظر نباید اتم‌های همسایه‌ی اول تا چهارم یکدیگر باشند و فاصله‌ی آن‌ها باید از اندازه‌ی یک شعاع برش<sup>۱</sup> بیشتر یا مقدار مرتبه‌ی پیوند آن‌ها باید به میزان کافی کوچک باشد. میان هر دو اتمی که معیارهای مزبور برای آن‌ها برآورده نمی‌شوند برهم‌کنش لنارد-جونز تضعیف می‌شود یا تماماً حذف می‌گردد.

در پتانسیل بین‌ملکولی تطبیقی جمله‌ای نیز وابسته به زاویه‌های دووجهی است. همانند آنچه درباره‌ی برهم‌کنش‌های ناپیوندی ذکر شد، لازمه‌ی ماهیت واکنشی پتانسیل آن است که در روشی که به‌طور متداول برای مدل‌سازی برهم‌کنش‌های پیچشی به کار می‌رود اصلاح‌هایی صورت گیرد. صورت معمولی پتانسیل پیچشی، یک سری توانی کسینوسی بر حسب زاویه‌ی دووجهی است؛ با بیان ریاضی،

$$V = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^3 V_k [1 - (-1)^k \cos(k\omega)] \quad (پ ۱-۱۲)$$

ضرایب  $V_k$  برای هر ملکول جداگانه بر مبنای انرژی‌ها و موانع نسبی چرخش انتخاب می‌شوند اما هنگامی که ملکول در واکنشی شیمیایی شرکت می‌کند، در یک پتانسیل واکنشی انرژی‌ها و موانع یادشده باید تغییر کنند. بنابراین، ترجیح بر آن است که تقارن پتانسیل پیچشی، به جای آن که نتیجه‌ی تعیین پارامترها باشد به‌طور ذاتی از پیرامون محلی اتم‌ها نشأت گیرد. در فرمول‌بندی

۱- Cutoff distance

پتانسیل بین‌ملکولی تطبیقی، این هدف با کمک پتانسیلی پیچشی با یک مقدار کمینه برآورده شده‌است. این پتانسیل با ضابطه‌ی

$$V^{\text{tors}}(\omega) = \epsilon \left[ \frac{256}{405} \cos^{10} \left( \frac{\omega}{2} \right) - \frac{1}{10} \right] \quad (\text{پ} 13-1)$$

تعریف می‌شود. ثابت‌های معادله‌ی (پ 13-1) به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که چنانچه به‌ازای نه زاویه‌ی دووجهی که با پیوندی یگانه میان دو اتم کربن همانند متناظرند برهم‌کنش‌هایی پیچشی با یکدیگر جمع شوند پتانسیل پیچشی ملکولی مجموع؛ یعنی  $T(\omega)$ ، تقارن سه‌گانه‌ی مورد انتظار را با ارتفاع مانع  $\epsilon$  داشته‌باشد؛ با بیان دیگر،

$$T(\omega) = 3V(\omega) + 3V\left(\omega + \frac{2\pi}{3}\right) + 3V\left(\omega - \frac{2\pi}{3}\right) = \frac{1}{3}\epsilon[1 + \cos(3\omega)] \quad (\text{پ} 14-1)$$

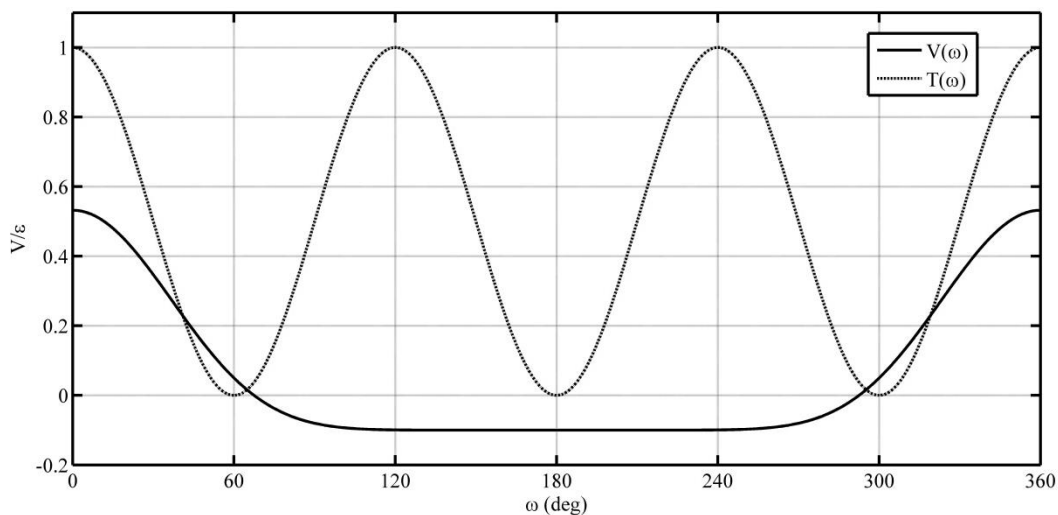
در شکل پ 1-1، نمودارهایی از پتانسیل پیچشی جدید؛  $V(\omega)$  و صورت ترکیب‌شده‌ی  $T(\omega)$  رسم شده‌اند. ضابطه‌ی ویژه‌ی (پ 13-1) برای تابع  $V^{\text{tors}}$ ، پتانسیلی پیچشی حاصل می‌کند که نسبت به موقعیت تنها نقطه‌ی کمینه و تنها نقطه‌ی بیشینه‌ی خود زوج است (شکل پ 1-1). این ویژگی‌ها نماینده‌ی تقارن‌های فیزیکی موجود در دافعه (میان اتم‌ها یا پیوندها) هستند که فرض می‌شود منشأ اصلی پتانسیل پیچشی باشد. همچنین، هر توان زوج از  $\cos\left(\frac{\omega}{2}\right)$  خواص یادشده را دارد؛ یعنی  $V(\omega) = \cos^{2n}\left(\frac{\omega}{2}\right)$ . معادله‌ی (پ 14-1) تنها در صورتی به‌دست می‌آید که  $n$  برابر با 3، 4 یا 5 باشد. در پتانسیل بین‌ملکولی تطبیقی، بر اساس اندازه‌ی نسبی موانعی که در  $V(\omega)$  و  $T(\omega)$  وجود دارند صورت متناظر با  $n = 5$  انتخاب شده‌است.

پتانسیل پیچشی (پ 13-1) در مدل پتانسیل، برای همه‌ی زاویه‌های دووجهی موجود در سیستم، متناسب با وزن پیوندهایی که آن‌ها را شکل داده‌اند به‌کار می‌رود؛ بدین ترتیب،

$$E^{\text{tors}} = \frac{1}{3} \sum_i \sum_{j \neq i} \sum_{k \neq i, j} \sum_{l \neq i, j, k} w_{ij}(r_{ij}) w_{jk}(r_{jk}) w_{kl}(r_{kl}) V^{\text{tors}}(\omega_{ijkl}) \quad (\text{پ} 15-1)$$

به‌کارگیری وزن پیوندها تضمین می‌نماید که چنانچه هر یک از پیوندهای تشکیل‌دهنده‌ی یک زاویه‌ی دووجهی بشکنند انرژی پیچشی متناظر با آن زاویه به‌صورت تدریجی حذف خواهدشد.





شکل پ ۱-۱- نمودارهای پتانسیل وابسته به زاویه‌ی دووجهی؛  $V(\omega)$  و پتانسیل پیچشی ملکولی  $T(\omega)$  که برای پیوندی یگانه میان دو اتم با حالت هیبریدشدگی  $sp^3$  و شش اتم جانشین یکسان<sup>۱</sup> به دست می‌آید [۹۲]

سرانجام، کل انرژی سیستم با نماد  $E$ ، از معادله‌ی

$$E = E^{\text{REBO}} + E^{\text{LJ}} + E^{\text{tors}} \quad (\text{پ ۱-۱۶})$$

محاسبه می‌شود که در آن، سه پتانسیل  $E^{\text{REBO}}$ ،  $E^{\text{LJ}}$  و  $E^{\text{tors}}$  به ترتیب، با معادلات (پ ۱-۱)، (پ ۱-۳) و (پ ۱-۱۵) متناظرند.

<sup>۱</sup>. Identical substituents

# پیوست ۲- نمونه‌ی فایل داده و فایل ورودی لمپس

فایل داده و فایل ورودی ارائه شده در این پیوست، برای شبیه‌سازی دینامیک ملکولی با کمک نرم‌افزار لمپس مهیا شده‌اند تا نخست انرژی نانولوله‌ی (۳,۳) با طول ۵ nm و یک سر گیردار (که بدون عیب است) کمینه شود و سپس، سیستم در دمای اتاق (۳۰۰ K) به تعادل گرمایی برسد.

### فایل داده

Data file for the carbon nanotube

```

2      atom types

246    atoms

-30 30    xlo xhi
-30 30    ylo yhi
-20 80    zlo zhi

Masses

1      12;carbon
2      12;carbon

Atoms

1 1 1.017716283601125 1.762736310887324 1.230622098777687
2 1 -0.353449156058592 2.004509772914317 1.230622098777687
3 1 -2.035432567202249 0.000000000000001 1.230622098777687
4 1 -1.559231807448679 -1.308350834550070 1.230622098777687
5 1 1.017716283601124 -1.762736310887325 1.230622098777687
6 1 1.912680963507270 -0.696158938364248 1.230622098777687
7 1 2.035432567202249 0.000000000000000 2.461244197555375
8 1 1.559231807448679 1.308350834550070 2.461244197555375
9 1 1.017716283601125 1.762736310887324 3.691866296333062
10 1 -0.353449156058592 2.004509772914317 3.691866296333062
11 1 -1.017716283601124 1.762736310887325 2.461244197555375
.
.
.
237 1 -1.017716283601124 1.762736310887325 49.224883951107472
238 1 -1.912680963507271 0.696158938364248 49.224883951107472
239 1 -1.017716283601126 -1.762736310887324 49.224883951107472
240 1 0.353449156058591 -2.004509772914317 49.224883951107472
241 2 2.035432567202249 0.000000000000000 0.000000000000000
242 2 1.559231807448679 1.308350834550070 0.000000000000000
243 2 -1.017716283601124 1.762736310887325 0.000000000000000
244 2 -1.912680963507271 0.696158938364248 0.000000000000000
245 2 -1.017716283601126 -1.762736310887324 0.000000000000000
246 2 0.353449156058591 -2.004509772914317 0.000000000000000

```

## فایل ورودی

#Input file for MD simulation

```
units          metal
atom_style     atomic

dimension      3
boundary       p p p

read_data      datafile_nvt

group          fixed type 2
group          free subtract all fixed

pair_style     airebo 3.0 1 1
pair_coeff     * * CH.airebo C C

### ENERGY MINIMIZATION ###
min_style      fire

fix            min fixed setforce 0 0 0

timestep       0.001
thermo         10
thermo_style   custom step etotal
dump           min all xyz 10 structure_minimized.xyz

minimize       0.0 1.0e-5 1000000 100000000

unfix          min
undump         min

### MD SIMULATION ###
velocity       free create 300 2753 mom yes rot yes dist gaussian

fix            nvt_ensemble free nvt temp 300 300 0.1
fix            fixed fixed setforce 0 0 0

timestep       0.001
compute        myTemp free temp
thermo         10
thermo_style   custom step c_myTemp pe ke etotal
dump           1 all xyz 10 structure_nvt.xyz
dump           2 all custom 10 velocity_nvt.txt id type vx vy vz

run            100000
```

## مراجع

- [١] Lindsay, S. M. (٢٠٠٩), “*Introduction to Nanoscience*”, Oxford University Press, New York, pp. ١ – ٢.
- [٢] Van Rijn, C. J. M. (٢٠٠٤), “*Nano and Micro Engineered Membrane Technology*”, Elsevier, Amsterdam, p. ٢٧٧.
- [٣] Iijima, S. (١٩٩١), “Helical Microtubules of Graphitic Carbon”, *Nature*, Vol. ٣٥٤, No. ٦٣٤٨, pp. ٥٦ – ٥٨.
- [٤] Binnig, G., Quate, C. F. and Gerber, Ch. (١٩٨٦), “Atomic Force Microscope”, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. ٥٦, No. ٩, pp. ٩٣٠ – ٩٣٣.
- [٥] Meyyappan, M. (٢٠٠٤), “*Carbon Nanotubes: Science and Applications*”, CRC Press, Boca Raton, FL, pp. ١ – ٢٢, ١٣٧ and ٢٣٤.
- [٦] Philip Wong, H.-S. and Akinwande, D. (٢٠١١), “*Carbon Nanotube and Graphene Device Physics*”, Cambridge University Press, New York, pp. ٤٨ and ٢٣٤ – ٢٤٣.
- [٧] Harris, P. J. F. (٢٠٠٩), “*Carbon Nanotube Science: Synthesis, Properties and Applications*”, Cambridge University Press, New York, pp. ٢٦, ١٠٩ – ١١٢, ١٥٢ and ١٦٩ – ٢٠٤.
- [٨] Krüger, A. (٢٠١٠), “*Carbon Materials and Nanotechnology*”, Wiley-VCH, Weinheim, Germany, pp. ١ – ٣٢, ٤١ and ١٢٦.
- [٩] Rafii-Tabar, H. (٢٠٠٩), “*Computational Physics of Carbon Nanotubes*”, Cambridge University Press, New York, pp. ١٥ – ٣٩.
- [١٠] Abdul Aziz, A., Abu Bakar, S. and Rusop, M. (٢٠١١), Carbon Nanostructured Materials, pp. ١٦٥ – ١٩٣, In: “*Carbon and Oxide Nanostructures: Synthesis, Characterisation and Applications*”, Yahya, N., Springer, Berlin.
- [١١] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., ... Firsov, A. A. (٢٠٠٤), “Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films”, *Science*, Vol. ٣٠٦, No. ٥٦٩٦, pp. ٦٦٦ – ٦٦٩.
- [١٢] Zhu, Y., Murali, S., Cai, W., Li, X., Suk, J. W., Potts, J. R. and Ruoff, R. S. (٢٠١٠), “Graphene and Graphene Oxide: Synthesis, Properties, and Applications”, *Adv. Mater.*, Vol. ٢٢, No. ٣٥, pp. ٣٩٠٦ – ٣٩٢٤.
- [١٣] Zakharchenko, K. V., Katsnelson, M. I. and Fasolino, A. (٢٠٠٩), “Finite Temperature Lattice Properties of Graphene beyond the Quasiharmonic Approximation”, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. ١٠٢, No. ٤, pp. ٠٤٦٨٠٨-١ – ٠٤٦٨٠٨-٤.
- [١٤] Popov, V. N. and Van Doren, V. E. (٢٠٠٠), “Elastic Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes”, *Phys. Rev. B*, Vol. ٦١, No. ٤, pp. ٣٠٧٨ – ٣٠٨٤.
- [١٥] Dresselhaus, M. S., Dresselhaus, G. and Saito, R. (١٩٩٥), “Physics of Carbon Nanotubes”, *Carbon*, Vol. ٣٣, No. ٧, pp. ٨٨٣ – ٨٩١.
- [١٦] White, C. T., Robertson, D. H. and Mintmire, J. W. (١٩٩٣), “Helical and Rotational Symmetries of Nanoscale Graphitic Tubules”, *Phys. Rev. B*, Vol. ٤٧,

No. 9, pp. 5485 – 5488.

- [17] Gibson, R. F., Ayorinde, E. O. and Wen, Y.-F. (2007), “Vibrations of Carbon Nanotubes and Their Composites: A Review”, *Compos. Sci. Technol.*, Vol. 67, No. 1, pp. 1 – 28.
- [18] Poncharal, P., Wang, Z. L., Ugarte, D. and de Heer, W. A. (1999), “Electrostatic Deflections and Electromechanical Resonances of Carbon Nanotubes”, *Science*, Vol. 283, No. 5407, pp. 1513 – 1516.
- [19] Gao, R., Wang, Z. L., Bai, Z., de Heer, W. A., Dai, L. and Gao, M. (2000), “Nanomechanics of Individual Carbon Nanotubes from Pyrolytically Grown Arrays”, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 85, No. 3, pp. 622 – 625.
- [20] Wang, Z. L., Poncharal, P. and de Heer, W. A. (2000), “Measuring Physical and Mechanical Properties of Individual Carbon Nanotubes by in situ TEM”, *J. Phys. Chem. Solids*, Vol. 61, No. 7, pp. 1025 – 1030.
- [21] Treacy, M. M. J., Ebbesen, T. W. and Gibson, J. M. (1996), “Exceptionally High Young’s Modulus Observed for Individual Carbon Nanotubes”, *Nature*, Vol. 381, No. 6584, pp. 678 – 680.
- [22] Krishnan, A., Dujardin, E., Ebbesen, T. W., Yianilos, P. N. and Treacy, M. M. J. (1998), “Young’s Modulus of Single-Walled Nanotubes”, *Phys. Rev. B*, Vol. 58, No. 20, pp. 14013 – 14019.
- [23] Treacy, M. M. J., Krishnan, A. and Yianilos, P. N. (1996), “Inferring Physical Parameters from Images of Vibrating Carbon Nanotubes”, *Microsc. Microanal.*, Vol. 6, No. 4, pp. 317 – 323.
- [24] Babić, B., Furer, J., Sahoo, S., Farhangfar, Sh. And Schönenberger, C. (2003), “Intrinsic Thermal Vibrations of Suspended Doubly Clamped Single-Wall Carbon Nanotubes”, *Nano Lett.*, Vol. 3, No. 11, pp. 1577 – 1580.
- [25] Garcia-Sanchez, D., San Paulo, A., Esplandiu, M. J., Perez-Murano, F., Forró, L., Aguasca, A. and Bachtold, A. (2007), “Mechanical Detection of Carbon Nanotube Resonator Vibrations”, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 99, No. 8, pp. 085501-1 – 085501-4.
- [26] Hüttel, A. K., Steele, G. A., Witkamp, B., Poot, M, Kouwenhoven, L. P. and van der Zant, H. S. J. (2009), “Carbon Nanotubes as Ultrahigh Quality Factor Mechanical Resonators”, *Nano Lett.*, Vol. 9, No. 7, pp. 2547 – 2552.
- [27] Witkamp, B., Poot, M and van der Zant, H. S. J. (2006), “Bending-Mode Vibration of a Suspended Nanotube Resonator”, *Nano Lett.*, Vol. 6, No. 12, pp. 2904 – 2908.
- [28] Lassagne, B., Tarakanov, Y., Kinaret, J., Garcia-Sanchez, D. and Bachtold, A. (1999), “Coupling Mechanics to Charge Transport in Carbon Nanotube Mechanical Resonators”, *Science*, Vol. 285, No. 5444, pp. 1107 – 1110.
- [29] Jensen, K., Girit, Ç, Mickelson, W. and Zettl, A. (2006), “Tunable Nanoresonators Constructed from Telescoping Nanotubes”, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 96, No. 21, pp. 215503-1 – 215503-4.

- [30] Sazonova, V., Yaish, Y., Üstünel, H., Roundy, D., Arias, T. A. and McEuen, P. L. (2004), “A Tunable Carbon Nanotube Electromechanical Oscillator”, *Nature*, Vol. 431, No. 7006, pp. 284 – 287.
- [31] Papadakis, S. J., Hall, A. R., Williams, P. A., Vicci, L., Falvo, M. R., Superfine, R. and Washburn, S. (2004), “Resonant Oscillators with Carbon-Nanotube Torsion Springs”, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 93, No. 14, pp. 146101-1 – 146101-4.
- [32] Jensen, K., Kim, K. and Zettl, A. (2008), “An Atomic-Resolution Nanomechanical Mass Sensor”, *Nat. Nanotechnol.*, Vol. 3, No. 9, pp. 533 – 537.
- [33] Chiu, H.-Y., Hung, P., Postma, H. W. Ch. and Bockrath, M. (2008), “Atomic-Scale Mass Sensing Using Carbon Nanotube Resonators”, *Nano Lett.*, Vol. 8, No. 12, pp. 4342 – 4346.
- [34] Chaste, J., Eichler, A., Moser, J., Ceballos, G., Rurali, R. and Bachtold, A. (2012), “A Nanomechanical Mass Sensor with Yoctogram Resolution”, *Nat. Nanotechnol.*, Vol. 7, No. 5, pp. 301 – 304.
- [35] Zhou, L. G. and Shi, S. Q. (2002), “Molecular Dynamic Simulations on Tensile Mechanical Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes with and without Hydrogen Storage”, *Comp. Mater. Sci.*, Vol. 23, No. 1, pp. 166 – 174.
- [36] Yoon, J., Ru, C. Q. and Mioduchowski, A. (2002), “Noncoaxial Resonance of an Isolated Multiwall Carbon Nanotube”, *Phys. Rev. B*, Vol. 66, No. 23, pp. 233402-1 – 233402-4.
- [37] Li, C. and Chou, T.-W. (2003), “Single-Walled Carbon Nanotubes as Ultrahigh Frequency Nanomechanical Resonators”, *Phys. Rev. B*, Vol. 68, No. 7, pp. 073405-1 – 073405-4.
- [38] Yoon, J., Ru, C. Q. and Mioduchowski, A. (2003), “Vibration of an Embedded Multiwall Carbon Nanotube”, *Compos. Sci. Technol.*, Vol. 63, No. 11, pp. 1533 – 1542.
- [39] Li, C. and Chou, T.-W. (2004), “Vibrational Behaviors of Multiwalled-Carbon-Nanotube-Based Nanomechanical Resonators”, *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 84, No. 1, pp. 121 – 123.
- [40] Liu, B., Huang, Y., Jiang, H., Qu, S. and Hwang, K. C. (2004), “The Atomic-Scale Finite Element Method”, *Comput. Method. Appl. M.*, Vol. 193, No. 17, pp. 1849 – 1864.
- [41] Li, C. and Chou, T.-W. (2004), “Mass Detection Using Carbon Nanotube-Based Nanomechanical Resonators”, *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 84, No. 25, pp. 5246 – 5248.
- [42] Li, C. and Chou, T.-W. (2004), “Strain and Pressure Sensing Using Single-Walled Carbon Nanotubes”, *Nanotechnology*, Vol. 15, No. 11, pp. 1493 – 1496.
- [43] Wang, C. Y., Ru, C. Q. and Mioduchowski, A. (2005), “Pressure Effect on Radial Breathing Modes of Multiwall Carbon Nanotubes”, *J. Appl. Phys.*, Vol. 97, No. 2, pp. 024310-1 – 024310-10.

- [۴۴] Yoon, J., Ru, C. Q. and Mioduchowski, A. (۲۰۰۵), “Vibration and Instability of Carbon Nanotubes Conveying Fluid”, *Compos. Sci. Technol.*, Vol. ۶۵, No. ۹, pp. ۱۳۲۶ – ۱۳۳۶.
- [۴۵] Yoon, J., Ru, C. Q. and Mioduchowski, A. (۲۰۰۵), “Terahertz Vibration of Short Carbon Nanotubes Modeled as Timoshenko Beams”, *J. Appl. Mech.-T. ASME*, Vol. ۷۲, No. ۱, pp. ۱۰ – ۱۷.
- [۴۶] Zhang, Y., Liu, G. and Han, X. (۲۰۰۵), “Transverse Vibrations of Double-Walled Carbon Nanotubes under Compressive Axial Load”, *Phys. Lett. A*, Vol. ۳۴۰, No. ۱, pp. ۲۵۸ – ۲۶۶.
- [۴۷] Zhang, Y. Q., Liu, G. R. and Xie, X. Y. (۲۰۰۵), “Free Transverse Vibrations of Double-Walled Carbon Nanotubes Using a Theory of Nonlocal Elasticity”, *Phys. Rev. B*, Vol. ۷۱, No. ۱۹, pp. ۱۹۵۴۰۴-۱ – ۱۹۵۴۰۴-۷.
- [۴۸] Wang, C. Y., Ru, C. Q. and Mioduchowski, A. (۲۰۰۵), “Free Vibration of Multiwall Carbon Nanotubes”, *J. Appl. Phys.*, Vol. ۹۷, No. ۱۱, pp. ۱۱۴۳۲۳-۱ – ۱۱۴۳۲۳-۱۱.
- [۴۹] Wang, C. Y., Ru, C. Q. and Mioduchowski, A. (۲۰۰۵), “Axisymmetric and Beamlike Vibrations of Multiwall Carbon Nanotubes”, *Phys. Rev. B*, Vol. ۷۲, No. ۷, pp. ۰۷۵۴۱۴-۱ – ۰۷۵۴۱۴-۱۰.
- [۵۰] Cao, G., Chen, X. and Kysar, J. W. (۲۰۰۵), “Strain Sensing of Carbon Nanotubes: Numerical Analysis of the Vibrational Frequency of Deformed Single-Wall Carbon Nanotubes”, *Phys. Rev. B*, Vol. ۷۲, No. ۱۹, pp. ۱۹۵۴۱۲-۱ – ۱۹۵۴۱۲-۶.
- [۵۱] Cao, G., Chen, X. and Kysar, J. W. (۲۰۰۶), “Thermal Vibration and Apparent Thermal Contraction of Single-Walled Carbon Nanotubes”, *J. Mech. Phys. Solids*, Vol. ۵۴, No. ۶, pp. ۱۲۰۶ – ۱۲۳۶.
- [۵۲] Chowdhury, R., Adhikari, S. and Mitchell, J. (۲۰۰۹), “Vibrating Carbon Nanotube Based Bio-Sensors”, *Physica E*, Vol. ۴۲, No. ۲, pp. ۱۰۴ – ۱۰۹.
- [۵۳] Yang, J., Ke, L. L. and Kitipornchai, S. (۲۰۱۰), “Nonlinear Free Vibration of Single-Walled Carbon Nanotubes Using Nonlocal Timoshenko Beam Theory”, *Physica E*, Vol. ۴۲, No. ۵, pp. ۱۷۲۷ – ۱۷۳۵.
- [۵۴] Chowdhury, R., Wang, C. Y. and Adhikari, S. (۲۰۱۰), “Low Frequency Vibration of Multiwall Carbon Nanotubes with Heterogeneous Boundaries”, *J. Phys. D Appl. Phys.*, Vol. ۴۳, No. ۸, pp. ۰۸۵۴۰۵-۱ – ۰۸۵۴۰۵-۸.
- [۵۵] Arash, B. and Ansari, R. (۲۰۱۰), “Evaluation of Nonlocal Parameter in the Vibrations of Single-Walled Carbon Nanotubes with Initial Strain”, *Physica E*, Vol. ۴۲, No. ۸, pp. ۲۰۵۸ – ۲۰۶۴.
- [۵۶] Ansari, R., Hemmatnezhad, M. and Rezapour, J. (۲۰۱۱), “The Thermal Effect on Nonlinear Oscillations of Carbon Nanotubes with Arbitrary Boundary Conditions”, *Curr. Appl. Phys.*, Vol. ۱۱, No. ۳, pp. ۶۹۲ – ۶۹۷.
- [۵۷] Ansari, R., Rouhi, H. and Sahmani, S. (۲۰۱۱), “Calibration of the Analytical Nonlocal Shell Model for Vibrations of Double-Walled Carbon Nanotubes with



- Arbitrary Boundary Conditions Using Molecular Dynamics”, *Int. J. Mech. Sci.*, Vol. 53, No. 9, pp. 786 – 792.
- [68] Xu, K.-Y., Aifantis, E. C. and Yan, Y.-H. (2008), “Vibrations of Double-Walled Carbon Nanotubes with Different Boundary Conditions between Inner and Outer Tubes”, *J. Appl. Mech.-T. ASME*, Vol. 75, No. 2, pp. 021013-1 – 021013-9.
- [69] Natsuki, T., Ni, Q.-Q. and Endo, M. (2008), “Analysis of the Vibration Characteristics of Double-Walled Carbon Nanotubes”, *Carbon*, Vol. 46, No. 12, pp. 1570 – 1573.
- [70] Wang, C. M., Tan, V. B. C. and Zhang, Y. Y. (2006), “Timoshenko Beam Model for Vibration Analysis of Multi-Walled Carbon Nanotubes”, *J. Sound Vib.*, Vol. 294, No. 4, pp. 1060 – 1072.
- [71] Xu, K. Y., Guo, X. N. and Ru, C. Q. (2006), “Vibration of a Double-Walled Carbon Nanotube Aroused by Nonlinear Intertube Van Der Waals Forces”, *J. Appl. Phys.*, Vol. 99, No. 6, pp. 064303-1 – 064303-7.
- [72] Hawwa, M. A. and Al-Qahtani, H. M. (2010), “Nonlinear Oscillations of a Double-Walled Carbon Nanotube”, *Comp. Mater. Sci.*, Vol. 48, No. 1, pp. 140 – 143.
- [73] Liu, J. Z., Zheng, Q. and Jiang, Q. (2001), “Effect of a Rippling Mode on Resonances of Carbon Nanotubes”, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 86, No. 21, pp. 4843 – 4846.
- [74] Arghavan, S. (2012), Ph.D. thesis, “Vibration of Carbon Nano-Structures”, Dept. of Mechanical and Materials Engineering, University of Western Ontario.
- [75] He, X. Q., Eisenberger, M. and Liew, K. M. (2006), “The Effect of Van Der Waals Interaction Modeling on the Vibration Characteristics of Multiwalled Carbon Nanotubes”, *J. Appl. Phys.*, Vol. 100, No. 12, pp. 124317-1 – 124317-12.
- [76] Sun, C. and Liu, K. (2007), “Vibration of Multi-Walled Carbon Nanotubes with Initial Axial Loading”, *Solid State Commun.*, Vol. 143, No. 4, pp. 202 – 207.
- [77] Yan, Y., Zhang, L. X. and Wang, W. Q. (2008), “Dynamical Mode Transitions of Simply Supported Double-Walled Carbon Nanotubes Based on an Elastic Shell Model”, *J. Appl. Phys.*, Vol. 103, No. 11, pp. 113523-1 – 113523-6.
- [78] Eringen A. C. (1972), “Nonlocal Polar Elastic Continua”, *Int. J. Eng. Sci.*, Vol. 10, No. 1, pp. 1 – 16.
- [79] Eringen A. C. and Edelen, D. G. B. (1972), “On Nonlocal Elasticity”, *Int. J. Eng. Sci.*, Vol. 10, No. 3, pp. 233 – 248.
- [80] Eringen A. C. (1972), “Linear Theory of Nonlocal Elasticity and Dispersion of Plane Waves”, *Int. J. Eng. Sci.*, Vol. 10, No. 5, pp. 425 – 435.
- [81] Eringen A. C. (1976), Nonlocal Polar Field Theories, pp. 205 – 267, In: “*Continuum Physics*”, Vol. 4, Eringen A. C., Academic Press, New York.
- [82] Eringen A. C. (1983), “On Differential Equations of Nonlocal Elasticity and Solutions of Screw Dislocation and Surface Waves”, *J. Appl. Phys.*, Vol. 54, No.

- 9, pp. 4703 – 4710.
- [73] Wang, Q. and Wang C. M. (2007), “The Constitutive Relation and Small Scale Parameter of Nonlinear Continuum Mechanics for Modelling Carbon Nanotubes”, *Nanotechnology*, Vol. 18, No. 7, pp. 075702-1 – 075702-4.
- [74] Reddy, J. N. and Pang, S. D. (2008), “Nonlocal Continuum Theories of Beams for the Analysis of Carbon Nanotubes”, *J. Appl. Phys.*, Vol. 103, No. 2, pp. 023511-1 – 023511-16.
- [75] Wang, Q. and Varadan, V. K. (2006), “Vibration of Carbon Nanotubes Studied Using Nonlocal Continuum Mechanics”, *Smart Mater. Struct.*, Vol. 15, No. 2, pp. 659 – 666.
- [76] Ghorbanpourarani, A., Mohammadimehr, M., Arefmanesh, A. and Ghasemi, A. (2010), “Transverse Vibration of Short Carbon Nanotubes Using Cylindrical Shell and Beam Models”, *P. I. Mech. Eng. C-J. Mec.*, Vol. 224, No. 3, pp. 745 – 756.
- [77] Adali, S. (2009), “Variational Principles for Transversely Vibrating Multiwalled Carbon Nanotubes Based on Nonlocal Euler-Bernoulli Beam Model”, *Nano Lett.*, Vol. 9, No. 5, pp. 1737 – 1741.
- [78] Şimşek, M. (2010), “Vibration Analysis of a Single-Walled Carbon Nanotube under Action of a Moving Harmonic Load Based on Nonlocal Elasticity Theory”, *Physica E*, Vol. 43, No. 1, pp. 182 – 191.
- [79] Ke, L. L., Xiang, Y., Yang, J. and Kitipornchai, S. (2009), “Nonlinear Free Vibration of Embedded Double-Walled Carbon Nanotubes Based on Nonlocal Timoshenko Beam Theory”, *Comp. Mater. Sci.*, Vol. 47, No. 2, pp. 409 – 417.
- [80] Ansari, R. and Ramezannezhad, H. (2011), “Nonlocal Timoshenko Beam Model for the Large-Amplitude Vibrations of Embedded Multiwalled Carbon Nanotubes Including Thermal Effects”, *Physica E*, Vol. 43, No. 6, pp. 1171 – 1178.
- [81] Duan, W. H., Wang, C. M. and Zhang, Y. Y. (2007), “Calibration of Nonlocal Scaling Effect Parameter for Free Vibration of Carbon Nanotubes by Molecular Dynamics”, *J. Appl. Phys.*, Vol. 101, No. 2, pp. 024305-1 – 024305-7.
- [82] Pradhan, S. C. and Murmu, T. (2009), “Small Scale Effect on Vibration Analysis of Single-Walled Carbon Nanotubes Embedded in an Elastic Medium Using Nonlocal Elasticity Theory”, *J. Appl. Phys.*, Vol. 105, No. 12, pp. 124306-1 – 124306-9.
- [83] Li, C. and Chou, T.-W. (2003), “A Structural Mechanics Approach for the Analysis of Carbon Nanotubes”, *Int. J. Solids Struct.*, Vol. 40, No. 10, pp. 2487 – 2499.
- [84] Li, C. and Chou, T.-W. (2003), “Elastic Moduli of Multi-Walled Carbon Nanotubes and the Effect of Van Der Waals Forces”, *Compos. Sci. Technol.*, Vol. 63, No. 11, pp. 1517 – 1524.
- [85] Rapaport, D. C. (2004), “*The Art of Molecular Dynamics Simulation*”, 2nd edition, Cambridge University Press, New York, pp. 60 – 61.

- [186] Jensen, K. J. (2008), Ph.D. thesis, “Nanomechanics of Carbon Nanotubes”, Dept. of Physics, University of California, Berkeley.
- [187] Martin, M. J. and Houston, B. H. (2007), “Gas Damping of Carbon Nanotube Oscillators”, *Appl. Phys. Lett.*, Vol. 91, No. 10, pp. 103116-1 – 103116-3.
- [188] Sawano, S., Arie, T. and Akita, S. (2010), “Carbon Nanotube Resonator in Liquid”, *Nano Lett.*, Vol. 10, No. 9, pp. 3395 – 3398.
- [189] Yuan, J. and Liew, K. M. (2009), “Effect of Vacancy Defect Reconstruction on the Elastic Properties of Carbon Nanotubes”, *Carbon*, Vol. 47, No. 6, pp. 1526 – 1533.
- [190] Liu, W. K., Karpov, E. G. and Liu, Y. (2010), Computational Nanomechanics, pp. 22-1 – 22-43, In: “*Handbook of Nanophysics: Principles and Methods*”, Sattler, K. D. (ed.), CRC Press, Boca Raton, FL.
- [191] Stillinger, F. H. and Weber, T. A. (1985), “Computer Simulation of Local Order in Condensed Phases of Silicon”, *Phys. Rev. B*, Vol. 31, No. 8, pp. 5262 – 5271.
- [192] Stuart, S. J., Tutein, A. B. and Harrison, J. A. (2000), “A Reactive Potential for Hydrocarbons with Intermolecular Interactions”, *J. Chem. Phys.*, Vol. 112, No. 14, pp. 6472 – 6486.
- [193] Kelley, C. T. (1987), “*Iterative Methods for Optimization*”, SIAM, New York, p. 17.
- [194] Miranda, M. J. and Fackler, P. L. (2002), “*Applied Computational Economics and Finance*”, MIT Press, Cambridge, MA, p. 103.
- [195] Mathur, R. (2012), Ph.D. thesis, “An Analytical Approach to Computing Step Sizes for Finite-Difference Derivatives”, Dept. of Aerospace Engineering and Engineering Mechanics, University of Texas at Austin.
- [196] Zhang, Y. Y., Wang, C. M. and Tan, V. B. C. (2009), “Assessment of Timoshenko Beam Models for Vibrational Behavior of Single-Walled Carbon Nanotubes Using Molecular Dynamics”, *Adv. Appl. Math. Mech.*, Vol. 1, No. 1, pp. 89 – 106.
- [197] Ansari, R., Ajori, S. and Arash, B. (2012), “Vibrations of Single- And Double-Walled Carbon Nanotubes with Layerwise Boundary Conditions: A Molecular Dynamics Study”, *Curr. Appl. Phys.*, Vol. 12, No. 3, pp. 707 – 711.
- [198] Hoover, W. G. (1985), “Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions”, *Phys. Rev. A*, Vol. 31, No. 3, pp. 1695 – 1697.
- [199] Van Gunsteren, W. F. and Mark, A. E. (1998), “Validation of Molecular Dynamics Simulation”, *J. Chem. Phys.*, Vol. 108, No. 15, pp. 6109 – 6116.
- [100] Lifshitz, R. and Roukes, M. L. (2000), “Thermoelastic Damping in Micro- and Nanomechanical Systems”, *Phys. Rev. B*, Vol. 61, No. 8, pp. 5600 – 5609.
- [101] Jiang, H., Yu, M.-F., Liu, B. and Huang, Y. (2004), “Intrinsic Energy Loss Mechanisms in a Cantilevered Carbon Nanotube Beam Oscillator”, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 93, No. 18, pp. 185501-1 – 185501-4.
- [102] Akita, S., Sawaya, S. and Nakayama, Y. (2007), “Energy Loss of Carbon

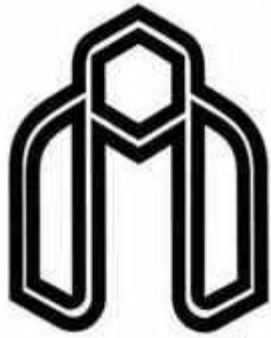
- Nanotube Cantilevers for Mechanical Vibration”, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol. 46, No. 9B, pp. 6295 – 6298.
- [1.3] Vallabhaneni, A. K., Rhoads, J. F., Murthy, J. Y. and Ruan, X. (2011), “Observation of Nonclassical Scaling Laws in the Quality Factors of Cantilevered Carbon Nanotube Resonators”, *J. Appl. Phys.*, Vol. 110, No. 3, pp. 034312-1 – 034312-7.
- [1.4] Greaney, P. A. and Grossman, J. C. (2007), “Nanomechanical Energy Transfer and Resonance Effects in Single-Walled Carbon Nanotubes”, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 98, No. 12, pp. 125503-1 – 125503-4.
- [1.5] Greaney, P. A., Lani, G., Cicero, G. and Grossman, J. C. (2009), “Anomalous Dissipation in Single-Walled Carbon Nanotube Resonators”, *Nano Lett.*, Vol. 9, No. 11, pp. 3699 – 3703.
- [1.6] Greaney, P. A., Lani, G., Cicero, G. and Grossman, J. C. (2011), “Mpemba-Like Behavior in Carbon Nanotube Resonators”, *Metall. Mater. Trans. A*, Vol. 42, No. 13, pp. 3907 – 3912.
- [1.7] Tashi, T. (2009), M.S. thesis, “Molecular Dynamics Simulation for Investigating Intrinsic Mechanical Properties of Carbon Nanotubes and Graphene Monolayers”, Mechanical Engineering Dept., University of Wyoming.



## **Abstract**

In the present research, the effect of vacancy defects on natural frequencies of carbon nanotubes is investigated and thermoelastic damping in these materials is discussed. The geometric structure of single-walled and double-walled nanotubes is obtained through programming and therefore, the defects in each nanotube model are simply generated by removing one or more atoms from the structure. Molecular dynamics simulations of nanotube vibrations are conducted using special software. In the problems considered, many parameters are varied in order to do a comprehensive analysis of the systems' responses. Natural frequencies of a nanotube are determined by means of a transform from the time domain to the frequency domain. The results show that in most cases, the existence of a single vacancy or vacancies with a random distribution causes a reduction in the fundamental natural frequency of the system. However in some of the problems, the variation of frequency shift percent with the position of a single vacancy along a nanotube's axis or with the concentration of vacancy defect does not follow a specific trend. It is also noteworthy that the values calculated for the quality factor of nanotubes at room temperature are small and as in the particular conditions provided the inverse of quality factor represents thermoelastic damping, this form of damping leads to significant energy dissipation in the nanotubes at room temperature. Finally, the dependence of thermoelastic damping on temperature and the effect of a single vacancy on dissipation in nanotubes are discussed in this thesis.

**Keywords:** carbon nanotubes, vacancy defect, natural frequency, quality factor, thermoelastic damping, molecular dynamics simulation.



Shahrood University of Technology  
Mechanical Engineering Faculty

# **Effects of Vacancy Defects on the Vibrational Properties of Carbon Nanotubes**

Amir Reza Eftekharfar

Supervisor:  
Ph.D. Ardeshir Karami Mohammadi

February 2014