

دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده مکانیک

گروه جامدات

## بررسی تاثیر عیب حفره بر ارتعاشات طبیعی نانولوله کربنی تک لایه

دانشجو: مجتبی امجدی پور

استاد راهنما:

آقای دکتر اردشیر کرمی محمدی

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

تیر 1389

## دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده: مهندسی مکانیک

گروه: جامدات

پایان نامه کارشناسی ارشد ( رساله دکتری ) آقای مجتبی امجدی پور

تحت عنوان:

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

امضاء	اساتید مشاور	امضاء	اساتید راهنما
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :

امضاء	نماینده تحصیلات تکمیلی	امضاء	اساتید داور
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :

تقدیم اثر:

به پاس تلاش های بی دریغ مادرم  
و مساعدت های فراوان همسر  
این اثر را هر چند ناچیز به این دو  
عزیز تقدیم می نمایم.

## تقدیر و تشکر

از اساتید محترم آقایان دکتر اردشیر کرمی محمدی و دکتر محمود شریعتی گروه جامدات دانشکده مهندسی مکانیک و دکتر حمید هراتی زاده دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود به پاس زحمت های فراوان ایشان در جهت به بار رسیدن این تحقیق کمال تشکر و قدردانی را دارم.

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

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

ماه و سال

## چکیده

نانو لوله های کربنی به سبب داشتن خواص منحصر به فرد مکانیکی، الکتریکی و حرارتی بعد از کشف توسط ایجیما در سال 1991 توجه بسیاری از محققین را به خود جلب کرده اند. این مشخصات نانولوله ها سبب شده تا کاربردهای متنوعی از قبیل استفاده در مواد کامپوزیتی به عنوان تقویت کننده، مصارف پزشکی، استفاده به عنوان سنسور و رزوناتور و غیره داشته باشند. نانو لوله های کربنی به علت داشتن استحکام بالا، چگالی پایین، نسبت طول به قطر بالا و فرکانس ارتعاش آزاد بالا انتخاب مناسبی برای سنسورها و رزوناتورها می باشند. یکی از مهمترین مشخصه های مکانیکی که عملکرد نانو لوله ها را به عنوان نانو رزوناتور تحت تاثیر قرار می دهد فرکانس طبیعی ارتعاش آنها می باشد لذا در این پایان نامه این موضوع بررسی شده است. تحقیقات پیشین ثابت کرده است که در بهترین شرایط تولید نانو لوله های کربنی، در هر 1 میکرو متر یک عیب قابل ملاحظه است. یکی از مهمترین عیوبی که در هنگام ساخت نانو لوله های کربنی در ساختار آنها ایجاد می شود و تاثیر مهمی در خواص فیزیکی نانو لوله های کربنی دارد عیب حفره می باشد. در این تحقیق سعی شده تا تاثیر وجود این عیب را در ارتعاشات آزاد نانو لوله های کربنی بررسی نماییم. در این تحقیق نانو لوله های زیگزاگ و آرمچیر با کایرالیته های به ترتیب  $(8,0)$ ،  $(10,0)$ ،  $(6,6)$  مورد بررسی قرار گرفته اند. نانو لوله های کربنی مذکور را تحت دو شرط مرزی دو سر درگیر و کانتی لور در نظر گرفته و بررسی نموده ایم. از روش دینامیک مولکولی به همراه روش المان های محدود برای شبیه سازی نانو لوله های کربنی بهره برده ایم. به منظور بررسی دقیقتر تاثیر عیوب بر ارتعاشات نانو لوله های کربنی عیوب در دو حالت در نظر گرفته شده اند. حالت اول وجود یک عیب حفره در ساختار نانو لوله و حالت دوم وجود چندین عیب حفره توزیع شده در ساختار که به واقعیت نزدیکتر می باشد. نتایج این تحقیق تاثیر بسزای وجود عیوب را در فرکانس طبیعی ارتعاشات نانو لوله های

کربنی نشان می دهد. همچنین مکان وجود عیب در ساختار نانو لوله کربنی در میزان تغییرات فرکانس ارتعاش نانو لوله تاثیر دارد. شرایط مرزی نیز تغییرات فرکانس ارتعاش طبیعی نانو لوله را تحت تاثیر قرار می دهد. در شرایط مرزی دو سر درگیر هرچه عیب به دو سر نانو لوله نزدیک می گردد تغییرات در فرکانس طبیعی نانو لوله بیشتر می شود. با کاهش طول و قطر نانو لوله ها میزان تاثیر عیوب بر فرکانس طبیعی افزایش می یابد.

**کلمات کلیدی:** نانو لوله های کربنی تک لایه، دینامیک مولکولی، ارتعاشات، عیب حفره



## مقالات مستخرج از پایان نامه:

- 1) Mojtaba Amjadipour, Ardeshir Karami Mohammadi, (2010) “Effect of Vacancy Defect on Natural Vibration of Single Walled Carbon Nanotube as Ultrahigh Nanoresonators”, 3<sup>rd</sup> conference on nonlinear science and complexity (NSC10), Ankara, Turkey.
- 2) Mojtaba Amjadipour, Ardeshir Karami Mohammadi, (2010) “Vibration analysis of single walled carbon nanotubes With vacancy defect as ultrahigh frequency Nanoresonators”, International Congress on Nanoscience and Nanotechnology, Shiraz, Iran.

## فهرست مطالب

آ.....	چکیده
پ.....	فهرست مطالب
ج.....	فهرست شکل ها
خ.....	فهرست جدول ها
1.....	فصل اول: مقدمه
2.....	1-1- مرور ادبیات
5.....	2-1- ارتباط موضوع تحقیق با کارهای انجام شده
6.....	3-1- اهداف پایان نامه
6.....	4-1- مطالب فصل های بعدی
8.....	فصل دوم: نانو لوله های کربنی
9.....	1-2- مقدمه
10.....	2-2- پیوند بین اتم های کربن
18.....	3-2- ساختمان و خواص نانو لوله های کربنی تک لایه
21.....	4-2- روش ساخت نانو لوله های کربنی
25.....	5-2- کاربرد نانو لوله های کربنی
29.....	6-2- روش های مدل سازی نانو لوله های کربنی
29.....	1-6-2- مدل سازی پوسته الاستیک
29.....	2-6-2- مدل سازی تیر الاستیک
30.....	3-6-2- مدل سازی مکانیک مولکولی

- 7-2- خواص مکانیکی نانو لوله های کربنی.....31
- 8-2- خواص فیزیکی نانو لوله های کربنی.....33
- 9-2- عیوب ساختاری نانو لوله های کربنی.....35
- 10-2- عیب حفره.....37
- فصل سوم: مدل سازی.....38
- 1-3- روش دینامیک مولکولی.....39
- 2-3- پتانسیل های پیوندی.....40
- 3-3- برآورد نیرو.....42
- 4-3- انرژی های پتانسیل بین اتمی.....42
- 5-3- ساخت مدل قاب مانند با استفاده از برابری انرژی ها.....47
- 6-3- ایجاد مدل قاب مانند.....49
- فصل چهارم: روش حل.....52
- 1-4- روش حل.....53
- فصل پنجم: بررسی ارتعاشی نانو لوله های کربنی ایده ال.....60
- 1-5- نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ (8,0).....61
- 2-5- نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ (10,0).....62
- 3-5- نتایج تحقیق لی و چو برای نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ (8,0).....65
- 4-5- نتایج تحقیق لی و چو برای نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ (10,0).....66
- 5-5- مقایسه نتایج حاصل از دو تحقیق برای نانو لوله های کربنی (8,0).....67
- 6-5- مقایسه نتایج حاصل از دو تحقیق برای نانو لوله های کربنی (10,0).....69

فصل ششم: نتایج بررسی ارتعاش نانو لوله های کربنی تک لایه با یک عیب حفره.....	72
6-1- بررسی ارتعاشی نانو لوله کربنی تک لایه با یک عیب حفره.....	73
6-2- بررسی ارتعاشی نانو لوله کربنی با عیب حفره توزیع شده.....	81
فصل هفتم: تحلیل نتایج.....	89
7-1- تحلیل نتایج حاصل از تحلیل ارتعاشی نانو لوله کربنی تک لایه با یک عیب حفره.....	90
7-1-1- نانو لوله کربنی زیگزاگ (8,0) با شرایط مرزی کانتی لور.....	90
7-1-2- نانو لوله کربنی زیگزاگ (8,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر.....	91
7-1-3- نانو لوله کربنی زیگزاگ (10,0) با شرایط مرزی کانتی لور.....	91
7-1-4- نانو لوله کربنی زیگزاگ (10,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر.....	92
7-1-5- نانو لوله کربنی آرمچیر (6,6) با شرایط مرزی کانتی لور.....	92
7-1-6- نانو لوله کربنی آرمچیر (6,6) با شرایط مرزی دو سر درگیر.....	93
7-2- تحلیل نتایج حاصل از تحلیل ارتعاشی نانو لوله کربنی تک لایه با عیب حفره توزیع شده.....	94
7-2-1- نانو لوله کربنی زیگزاگ (8,0) با شرایط مرزی کانتی لور.....	94
7-2-2- نانو لوله کربنی زیگزاگ (8,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر.....	95
7-2-3- نانو لوله کربنی زیگزاگ (10,0) با شرایط مرزی کانتی لور.....	95
7-2-4- نانو لوله کربنی زیگزاگ (10,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر.....	96
7-2-5- نانو لوله کربنی آرمچیر (6,6) با شرایط مرزی کانتی لور.....	97
7-2-6- نانو لوله کربنی آرمچیر (6,6) با شرایط مرزی دو سر درگیر.....	98
7-3- تاثیر کایرالیته بر فرکانس طبیعی نانو لوله کربنی تک لایه با عیب توزیع شده.....	99
نتیجه گیری.....	100

102.....	پیشنهادات برای تحقیقات آتی.....
103.....	مراجع.....
108.....	چکیده انگلیسی.....

## فهرست شکل ها

11.....	شکل 2-1: نمودار فازی کربن.....
12.....	شکل 2-2: ساختار پیوند کربن در الماس، گرافیت، نانو لوله ها و فلورن [49].....
14.....	شکل 2-3: تصویر TEM از نانو لوله کربنی چند لایه [49].....
	شکل 2-4: (الف) اولین تصویر TEM گزارش شده توسط ایچیمیا برای نانو لوله کربنی تک لایه (ب) تصویر
14.....	STM نانو لوله کربنی تک لایه [93].....
15.....	شکل 2-5: نانو لوله کربنی تک لایه و چند لایه.....
15.....	شکل 2-6: ساختار الماس.....
16.....	شکل 2-7: گرافیت.....
17.....	شکل 2-8: فلورن.....
19.....	شکل 2-9: بردار کایرال نانو لوله ها.....
	شکل 2-10: زمانیکه صفحه گرافیتی در راستای بردار کایرال (n,0) خم شود نانو لوله حاصل زیگزاگ
	و در صورتی که در امتداد بردار کایرال (m,m) خم شود نانو لوله حاصل آرمچیر و در هر حالتی غیر
20.....	از موارد مذکور نانو لوله کایرال بوجود می آید.....
23.....	شکل 2-11: روش قوس دشارژ.....

- شکل 2-12: شماتیک روش قوس دشارژ..... 23
- شکل 2-13: شماتیک روش سایش لیزری..... 24
- شکل 2-14: روش تجزیه شیمیایی بخار..... 24
- شکل 2-15: نانو لوله های چند لایه رشد یافته [49]..... 25
- شکل 2-16: تصویر SEM از یک نانو پراب ساخته شده از نانو لوله کربنی چند لایه [49]..... 28
- شکل 2-17: رشد یک نانو لوله کربنی تک لایه به منظور ساخت نانو پراب [49]..... 28
- شکل 2-18: الف. مدل پیوسته صلب ب. مدل پوسته الاستیک پ. مدل مکانیک مولکولی..... 30
- شکل 2-19: تغییرات مدول یانگ بر حسب قطر نانو لوله های کربنی [49]..... 32
- شکل 2-20: تغییرات مدول خمشی بر حسب قطر نانو لوله کربنی [93]..... 32
- شکل 2-21: نمودار تنش کرنش برای نانو لوله کربنی چند لایه [94]..... 32
- شکل 2-22: نمودار چگالی بر حسب واحد شبکه نانو لوله (9,0) [94]..... 34
- شکل 2-23: نمودار چگالی بر حسب واحد شبکه نانو لوله (11,0) [94]..... 35
- شکل 2-24: ساختار پنج گوش - هفت گوش..... 36
- شکل 2-25: نانو لوله کربنی با عیب SW..... 36
- شکل 2-26: عیب حفره..... 36
- شکل 2-27: نانو لوله کربنی (10,0) با عیب حفره توزیع شده در ساختار..... 37
- شکل 3-1: موقعیت پیوندهای کربن [39]..... 40
- شکل 3-2: برهم کنش بین اتم های کربن که با روش دینامیک مولکولی شبیه سازی می شود [42]..... 47
- شکل 3-3: مدل ساخته شده برای نانو لوله کربنی تک لایه (8,0)..... 50
- شکل 4-1: برخی نتایج حاصل از تحلیل به روش فوق در نرم افزار ANSYS..... 59
- شکل 5-1: فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله کربنی تک لایه (8,0) با شرایط مرزی کانتی لور..... 61

- شکل 5-2: فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله کربنی تک لایه (8,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر.....62
- شکل 5-3: فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله کربنی تک لایه (10,0) با شرایط مرزی کانتی لور.....63
- شکل 5-4: فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله کربنی تک لایه (10,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر.....63
- شکل 5-5: شکل مودهای ارتعاش نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ (10,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر.....64
- شکل 5-6: نتایج لی و چو برای فرکانس طبیعی نانو لوله کربنی تک لایه (8,0) با شرایط مرزی کانتی لور.....65
- شکل 5-7: نتایج لی و چو برای نانو لوله کربنی (8,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر.....65
- شکل 5-8: نتایج لی و چو برای فرکانس طبیعی نانولوله کربنی (10,0) با شرایط مرزی کانتی لور.....66
- شکل 5-9: نتایج لی و چو برای فرکانس طبیعی نانولوله کربنی (10,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر.....66
- شکل 5-10: مقایسه نتایج برای نانو لوله کربنی تک لایه (8,0) با شرایط مرزی کانتی لور.....67
- شکل 5-11: مقایسه نتایج برای نانو لوله کربنی تک لایه (8,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر.....68
- شکل 5-12: مقایسه نتایج حاصل از دو تحقیق برای نانو لوله کربنی تک لایه (10,0) با شرایط مرزی کانتی لور.....69
- شکل 5-13: مقایسه نتایج حاصل از دو تحقیق برای نانو لوله کربنی تک لایه (10,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر.....70
- شکل 6-1: شرایط مرزی کانتی لور.....73
- شکل 6-2: شرایط مرزی دو سر درگیر.....74
- شکل 6-3: نانو لوله کربنی (8,0) با یک عیب حفره و شرایط مرزی کانتی لور.....74
- شکل 6-4: نانو لوله کربنی (8,0) با یک عیب حفره و شرایط مرزی دو سر درگیر.....75
- شکل 6-5: نانو لوله کربنی (10,0) با یک عیب حفره و شرایط مرزی کانتی لور.....76

- شکل 6-6: نانو لوله کربنی (10,0) با یک عیب حفره و شرایط مرزی دو سردرگیر.....78
- شکل 6-7: نانو لوله کربنی (6,6) با یک عیب حفره و شرایط مرزی کانتی لور.....79
- شکل 6-8: نانو لوله کربنی (6,6) با یک عیب حفره و شرایط مرزی دو سر درگیر.....80
- شکل 6-9: نانو لوله کربنی تک لایه (8,0) با شرایط مرزی کانتی لور با عیب توزیع شده.....81
- شکل 6-10: نانو لوله کربنی تک لایه (8,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر با عیب توزیع شده.....82
- شکل 6-11: نانو لوله کربنی تک لایه (10,0) با شرایط مرزی کانتی لور با عیب توزیع شده.....83
- شکل 6-12: نانو لوله کربنی تک لایه (10,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر با عیب توزیع شده.....85
- شکل 6-13: نانو لوله کربنی تک لایه آرمچیر (6,6) با شرایط مرزی کانتی لور و عیب توزیع شده.....86
- شکل 6-14: نانو لوله کربنی تک لایه آرمچیر (6,6) با شرایط مرزی دو سر درگیر و عیب توزیع شده.....87
- شکل 6-15: مد اول ارتعاش نانو لوله (8,0) با 2 درصد عیب در ساختار.....88
- شکل 6-16: مد دوم ارتعاش نانو لوله (8,0) با 2 درصد عیب در ساختار.....88
- شکل 6-17: مد سوم ارتعاش نانو لوله (8,0) با 2 درصد عیب در ساختار.....88
- شکل 7-1: نانو لوله کربنی با عیب حفره توزیع شده.....93
- شکل 7-2: مقایسه تغییرات فرکانس طبیعی نانو لوله های (10,0) و (6,6).....99

## فهرست جداول

- جدول 2-1: دسته بندی نانو لوله های کربنی [9].....20
- جدول 2-2: پارامترهای پرکاربرد ساختار نانو لوله های کربنی [9].....21
- جدول 2-3: خواص مکانیکی نانو لوله ها.....33
- جدول 5-1: مقایسه نانو لوله کربنی (8,0) با شرایط مرزی یک مرزی کانتی لور.....67
- جدول 5-2: مقایسه نانو لوله کربنی (8,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر.....68



- جدول 5-3: مقایسه نانو لوله کربنی (10,0) با شرایط مرزی یک سر درگیر.....70
- جدول 5-4: مقایسه نانو لوله کربنی (10,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر.....71
- جدول 6-1: نانو لوله کربنی (8,0) با یک عیب حفره و شرایط مرزی کانتی لور.....75
- جدول 6-2: نانو لوله کربنی (8,0) با یک عیب حفره و شرایط مرزی دو سر درگیر.....76
- جدول 6-3: نانو لوله کربنی (10,0) با یک عیب حفره و شرایط مرزی کانتی لور.....77
- جدول 6-4: نانو لوله کربنی (10,0) با یک عیب حفره و شرایط مرزی دو سر درگیر.....78
- جدول 6-5: نانو لوله کربنی (6,6) با یک عیب حفره و شرایط مرزی کانتی لور.....79
- جدول 6-6: نانو لوله کربنی (6,6) با یک عیب حفره و شرایط مرزی دو سر درگیر.....80
- جدول 6-7: نانو لوله کربنی تک لایه (8,0) با شرایط مرزی کانتی لور با عیب توزیع شده.....82
- جدول 6-8: نانو لوله کربنی تک لایه (8,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر با عیب توزیع شده.....83
- جدول 6-9: نانو لوله کربنی تک لایه (10,0) با شرایط مرزی کانتی لور با عیب توزیع شده.....84
- جدول 6-10: نانو لوله کربنی تک لایه (10,0) با شرایط مرزی دو سر درگیر با عیب توزیع شده.....85
- جدول 6-11: نانو لوله کربنی تک لایه آرمچیر (6,6) با شرایط مرزی کانتی لور و عیب توزیع شده.....86
- جدول 6-12: نانو لوله کربنی تک لایه آرمچیر (6,6) با شرایط مرزی دو سر درگیر و عیب توزیع شده.....87

# فصل اول

مقدمه

## ۱-۱- مرور ادبیات

نانو لوله های کربنی برای اولین بار توسط سامیو ایجیما<sup>۱</sup> [۱] در سال ۱۹۹۱ در آزمایشگاه NEC کشف شد. نانو لوله های کربنی را می توان به روش های مختلف از قبیل قوس دشارژ، سایش لیزری و تجزیه شیمیایی بخار ساخت. از نظر ساختار اتمی نانو لوله ها را می توان به صورت استوانه ای که از خم کردن صفحه گرافیتی به وجود آمده تصور کرد. نانو لوله های کربنی به دو صورت تک لایه و چند لایه می باشند که می توانند دارای قطر و شبکه متفاوت باشند [۲,۳]. از زمان کشف نانو لوله ها تحقیقات گسترده ای برای محاسبه خواص فیزیکی آنها صورت پذیرفت [۴,۵]. تحقیقات نشان داد که خواص فیزیکی نانو لوله های کربنی به قطر و شبکه آنها وابسته است [۶]، و سختی، انعطاف پذیری و استحکام نانو لوله های کربنی بسیار بیشتر از مقدار محاسبه شده برای فیبرهای کربنی است [۷,۸,۹]. خواص غیر معمول نانو لوله های کربنی محققان را برای بررسی کاربردهای مختلف نانو لوله ها تشویق کرد [۱۰].

در کنار تحقیقات و بررسی های مختلف آزمایشگاهی، محققین زیادی شروع به بررسی و تحلیل نانو لوله های کربنی با استفاده از مدل سازی های تئوری کردند [۱۱,۵]. این روش های مدل سازی را می توان به دو گروه عمده تقسیم بندی کرد. روش اول مدل سازی اتمی که شامل تکنیک هایی از قبیل دینامیک مولکولی<sup>۲</sup> [۹,۱۲]، دینامیک مولکولی پیوندهای مستحکم<sup>۳</sup> [۱۳] و تئوری توابع چگالی<sup>۴</sup> [۱۴] می باشد. در واقع هر مسئله ای که شامل حرکت مولکولی یا اتمی باشد با این روش های مدل سازی قابل شبیه سازی می باشد. با توجه به میزان محاسبات مورد نیاز این روش ها، کاربرد آنها برای شرایطی که تعداد اتم ها و مولکول های مورد بررسی کم باشد محدود می گردد.

---

<sup>۱</sup> Iijima

<sup>۲</sup> Molecular dynamics

<sup>۳</sup> Tight binding molecular dynamics

<sup>۴</sup> Density functional theory

روش دوم مدل سازی مکانیک پیوسته می باشد. برخی از محققین برای مدل سازی نانو لوله های کربنی از روش مکانیک پیوسته بهره برده اند. به عنوان مثال ترسوف<sup>۵</sup> در سال ۱۹۹۲ محاسبات ساده ای را به منظور برآورد انرژی فلورن بر اساس صفحات گرافیت به صورت یک محیط پیوسته الاستیک انجام داد و نتیجه گرفت که می توان با استفاده از خواص الاستیک صفحات گرافیت، انرژی کرنشی الاستیک فلورن و نانو لوله های کربنی را پیش بینی کرد [۱۵]. یاکوبسن<sup>۶</sup> و همکارانش در سال ۱۹۹۶ به خواص منحصر به فرد فلورن اشاره کردند و یک مدل پوسته پیوسته را توسعه دادند [۱۶]. رو<sup>۷</sup> از این مدل پوسته پیوسته به منظور برآورد کماتش نانو لوله های کربنی تحت بار فشاری استفاده کرد [۱۷، ۱۸]. این قبیل مدل های پوسته پیوسته می تواند به منظور تحلیل خواص استاتیکی و دینامیکی نانو لوله های کربنی استفاده شوند. با این وجود این مدل ها تاثیر کایرالیته و نیروهای اعمالی بر هر اتم منحصر به فرد را در نظر نمی گیرند.

در این تحقیق از مدل سازی به روش دینامیک مولکولی بهره برده شده است. با اثبات خواص منحصر به فرد نانو لوله ها مقالات زیادی درباره کاربرد آنها منتشر شد [۲۳-۱۹]. با توجه به کاربرد نانو لوله ها در تجهیزات نانو مکانیکی از قبیل اکچویتورها<sup>۸</sup>، حسگرها و رزوناتورها<sup>۹</sup> و ...، بررسی ارتعاشی نانو لوله های کربنی از اهمیت بالایی برخوردار است. یکی دیگر از کاربردهای بررسی ارتعاشی نانو لوله ها بدست آوردن مدول الاستیک آنها به این روش می باشد. رزوناتورها از اجزا کلیدی در سیستم های انتقال امواج می باشند [۲۴]. کاهش اندازه رزوناتور باعث افزایش فرکانس رزونانس و کاهش مصرف انرژی آن می شود. برای سنسورها افزایش مقدار فرکانس رزونانس به معنی افزایش حساسیت می باشد [۲۵]. در ارتباطات وایرلس وجود رزوناتورهای با فرکانس بالاتر به معنی امکان ساخت فیلترها و اسیلاتورها و میکسرهای با فرکانس بالاتر می باشد. نانو لوله های کربنی خواص

---

<sup>۵</sup> Tersoff

<sup>۶</sup> Yakobson

<sup>۷</sup> Ru

<sup>۸</sup> Actuator

<sup>۹</sup> resonator

مطلوبی از قبیل مدول الاستیک بالا، فرکانس طبیعی بالا و هدایت گرمایی بالا دارند. این خواص منحصر به فرد به همراه اندازه نانو متری و ساختار اتمی مناسب آنها باعث شده که نانو لوله ها پتانسیل بسیار زیادی برای کاربرد در تجهیزاتی از این دست داشته باشند [۲۶,۲۷]. جنسن<sup>۱۰</sup> در سال ۲۰۰۸ کاربرد نانو لوله های کربنی را برای رزوناتورها مورد بررسی قرار داد و از آنها برای طراحی یک سیستم دریافت امواج بهره برد [۲۷]. پتانسیل کاربرد نانو لوله های چند لایه به عنوان نانو رزوناتور در سال ۲۰۰۹ مورد بررسی قرار گرفت [۲۸].

عیوب از قبیل ناخالصی ها، عیوب توپولوژیک و حفره و... ساختار نانو لوله ها را تغییر داده و سبب تغییر خواص الکتریکی، مکانیکی و گرمایی نانو لوله ها می شوند [۲۹,۳۰,۳۱] و در نتیجه کاربرد نانو لوله ها را در تجهیزات نانو الکترو مکانیکال و نانو کامپوزیت ها تحت تاثیر قرار می دهند [۲۸,۳۲-۳۵]. عیب حفره و SW<sup>۱۱</sup> از مهمترین عیوبی هستند که نانو لوله ها حین پروسه رشد دچار آنها می شوند. به عنوان مثال پیش بینی شده است که در حدود ۲ تا ۵ درصد اتم های نانو لوله های کربنی به این شکل معیوب هستند [۳۶].

ژو<sup>۱۲</sup> در سال ۲۰۰۷ خواص انتقالی این عیوب را در نانو لوله های تک لایه فلزی بررسی کرد [۳۷]. تونویر<sup>۱۳</sup> و همکارانش در سال ۲۰۰۸ خواص مکانیکی نانو لوله های تک لایه را با دو عیب حفره در همسایگی هم بررسی کردند و نتایج آنها تاثیر عمده عیوب در پیش بینی خواص مکانیکی نانو لوله ها را نشان داد [۳۸]. در حال حاضر تاثیر عیوب بر خواص الکتریکی و مکانیکی نانو لوله ها به عنوان یک اصل پذیرفته شده است [۳۵].

---

<sup>۱۰</sup> Jensen

<sup>۱۱</sup> Stone Wales

<sup>۱۲</sup> Zhou

<sup>۱۳</sup> Tunvir

## ۱-۲- ارتباط موضوع تحقیق با کارهای انجام شده قبلی

در این تحقیق به منظور مدل سازی نانو لوله های کربنی از روش دینامیک مولکولی بهره برده ایم. این روش توسط ادگارد<sup>۱۴</sup> به منظور پیش بینی مشخصات ساختمانی نانو لوله های کربنی مورد استفاده قرار گرفت [۳۹]. سختی خمشی صفحات گرافیت نیز با این روش توسط گیتس<sup>۱۵</sup> و همکاران برآورد شده است [۴۰]. سختی خمشی، کششی و پیچشی نانو لوله های کربنی تک لایه بر اساس انرژی های پتانسیل مولکولی و با روش دینامیک مولکولی پیش بینی شده است [۴۱]. لی و چو<sup>۱۶</sup> نیز از روشی مشابه و با استفاده از مکانیک محیط پیوسته به منظور برآورد خواص ایستایی و دینامیکی نانو لوله کربنی بهره اند [۲۵,۴۲].

در این تحقیق ارتعاشات طبیعی نانو لوله های کربنی تک لایه مورد بررسی قرار گرفته است. روش بررسی و تحلیل با استفاده از تئوری المان های محدود و دینامیک مولکولی انجام پذیرفته است. لی و چو در سال ۲۰۰۳ ارتعاشات نانو لوله های تک لایه را با ساختار ایده آل مورد بررسی قرار دادند [۲۵]. با توجه به اینکه وجود عیوب در نانو لوله های رشد داده شده مشخص شده است [۳۶]؛ اما تحقیقاتی درباره تاثیر وجود عیب حفره بر ارتعاشات نانو لوله های کربنی تک لایه انجام نشده است. در این تحقیق تاثیر وجود عیب حفره بر ارتعاشات طبیعی نانو لوله های کربنی تک لایه با توزیع های مختلف و کایرالیته، طول و قطرهای مختلف بررسی شده است.

---

<sup>۱۴</sup> Odegard

<sup>۱۵</sup> Gates

<sup>۱۶</sup> Li and Chou

### ۱-۳- اهداف پایان نامه

با توجه به کاربرد نانو لوله ها در رزوناتورها و حسگرها و اهمیت پیش بینی فرکانس طبیعی نانو لوله ها در عملکرد بهینه این تجهیزات در این تحقیق ارتعاشات طبیعی نانو لوله های کربنی مورد بررسی قرار گرفته است. با توجه به اینکه در رشد نانو لوله های کربنی عموماً عیوب وجود دارند و تاثیر به سزایی بر خواص نانو لوله ها دارند و کاربرد آنها را تحت تاثیر قرار می دهند، در این پایان نامه سعی شده تا با تحلیل ارتعاشی نانو لوله های معیوب، میزان و نحوه تاثیر عیب حفره در ساختار نانو لوله های کربنی تک لایه را بر ارتعاشات طبیعی آنها بررسی نماییم.

### ۱-۴- مطالب فصل های بعدی

**فصل دوم نانو لوله های کربنی:** در این فصل اطلاعات اجمالی درباره ساختار و خواص نانو لوله های کربنی آمده است. در این فصل اطلاعاتی درباره نحوه ساخت نانو لوله ها و کاربردهای نانو لوله ها آمده است. اطلاعاتی درباره روشهای تحلیل و مدل سازی نانو لوله ها نیز در این فصل بیان شده است.

**فصل سوم مدل سازی:** در این فصل، روش دینامیک مولکولی که در این پایان نامه به منظور مدل سازی نانو لوله ها مورد استفاده قرار گرفته شرح داده شده است. مدل سازی و محاسبه پارامترهای لازم برای مدل فضایی انجام شده نیز در این فصل بیان شده است.

**فصل چهارم روش حل:** در این فصل نحوه تحلیل ارتعاشی نانو لوله های کربنی تشریح شده و روابط مربوطه به همراه توضیحات مرتبط درج گردیده است.

**فصل پنجم بررسی ارتعاشی نانو لوله های ایده آل:** در این فصل ارتعاشات طبیعی نانو لوله های

تک لایه کربنی مورد بررسی قرار گرفته است. صحت مدل سازی انجام شده با مقایسه نتایج حاصله

برای تحلیل ارتعاشی نانو لوله های ایده آل با نتایج تحقیقات پیشین در این فصل بیان شده است.

**فصل ششم نتایج بررسی ارتعاشی نانو لوله های کربنی تک لایه با عیب حفره:** در این فصل

نتایج حاصل از بررسی ارتعاشی نانو لوله های کربنی تک لایه با عیب حفره و تاثیر توزیع عیب و

مشخصات نانو لوله بر فرکانس طبیعی نانو لوله آمده است.

**فصل هفتم بررسی و تحلیل نتایج:** در این فصل تاثیر پارامترهای مربوط به ساختار نانو لوله و

دیگر پارامترهای تاثیر گذار بر فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله های کربنی تک لایه با عیب حفره

بیان شده است. در این فصل تحلیل نتایج حاصل در فصل قبلی قابل ملاحظه می باشد.



## فصل دوم

نانو لوله های کربنی

بعد از سخنان رویا پردازانه ی فاینمن<sup>۱۷</sup> درباره دورنمای کوچک سازی در علم، ساخت و ایجاد مواد در اندازه نانو یکی از پرکارترین و جذاب ترین مسائل در علم بوده است [۴۳]. اشتیاق وحشتناکی برای توسعه تکنولوژی برای اهداف مشابه رشد کرد و باعث پیدایش نانو تکنولوژی شد. یکی از مهمترین مراحل در توسعه نانو تکنولوژی ساخت و ایجاد نانو لوله های کربنی توسط ایچیمادا بود [۱]. او در سال ۱۹۹۱ در ایجاد نانو لوله های کربنی چند لایه با روش دشارژ قوس کربن<sup>۱۸</sup> پیشرو بود. نانو لوله ها به عنوان یک آلوتروپ جدید کربن علاوه بر الماس، گرافیت و فولرن مطرح شدند. بعد از آن نانو لوله های کربنی به طور موفقیت آمیزی با روش قطع لیزری<sup>۱۹</sup> [۴۴]، با شکل دادن یک میله کربنی در حضور یک کاتالیزور فلزی [۲]، و با روش رسوب گیری شیمیایی بخار [۴۵] تولید شدند. این آلوتروپ جدید کربن خواص شیمیایی، الکتریکی و مکانیکی متمایزی از خود نشان داده است. به عنوان مثال می توان از مقاومت کششی بالا، نسبت منظری بالا، نسبت سطح به حجم بالای نانو لوله های کربنی یاد کرد. آنها از نظر شیمیایی خنثی هستند و می توانند بر اساس کایرالیته<sup>۲۰</sup> خود رسانا یا نیمه رسانا باشند [۴۶]. تمام این خواص متمایز باعث کاربرد نانو لوله های کربنی در موارد متنوعی از قبیل کامپوزیت های پولیمری، مخزن هیدروژن، نانو راکتورها و نانو الکترونیک و غیره شده است. در این فصل اطلاعات اولیه درباره نانو لوله های کربنی مطرح گردیده است.

---

<sup>۱۷</sup> Feynman

<sup>۱۸</sup> Carbon arc discharge

<sup>۱۹</sup> Laser ablation

<sup>۲۰</sup> Chirality

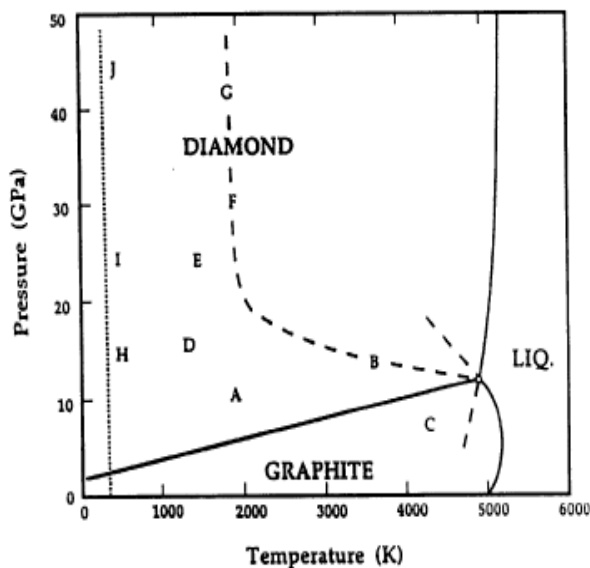
## ۲-۲- پیوند بین اتم های کربن

مولکول ها و شبکه های مواد پایه کربنی دارای خصوصیات بی همتایی از جهات گوناگونی هستند. یک تفاوت آنها که در شکل های زیادی از اتم های کربن مشاهده شده است خاصیت داشتن حالت های متفاوت الکتریکی اتم های کربن است که تحت نام خاصیت هیبرید شدگی اوربیتال های اتمی شناخته می شود و به نزدیک ترین پیوند اتمی کربن در همسایگی آن وابسته است. کربن ششمین عنصر در جدول تناوبی است که دارای کمترین الکترون در ستون IV می باشد. هر اتم کربن دارای شش الکترون می باشد که به صورت  $2p^2$ ,  $2s^2$ ,  $1s^2$  در اوربیتال های اتم کربن ظاهر شده اند. اوربیتال  $1s^2$  دارای دو الکترون با جاذبه شدید از طرف هسته می باشد. چهار الکترون با جاذبه ضعیفتر نسبت به دو الکترون پیشین در ظرفیت اوربیتال های  $2s^2, 2p^2$  قرار می گیرند. در فاز بلوری الکترون های ظرفیت به اوربیتال های  $2p^x$ ,  $2p^y$ ,  $2s$  و همینطور اوربیتال  $2p^z$  که نقش مهمی در ایجاد پیوند کوالانسی بین اتم های کربن دارد می روند [۷۳].

تا زمانی که تفاوت انرژی بین اوربیتال های بالای  $2p$  و پایین  $2s$  در مقایسه با انرژی پیوندی کمتر باشد توابع موج الکترونی این چهار الکترون می توانند به راحتی با هم ترکیب شوند به همین سبب اشغال اوربیتال های  $2s$  و سه اوربیتال  $2p$  تغییر می کند تا اینکه پیوند بین اتم ها و اتم های همسایه شان قوی تر گردد. در اساس پیوند اوربیتال های  $2s$  و  $2p$  به عنوان هیبرید شدگی یا پیوند زنی شناخته می شود جایی که پیوند یک الکترون اوربیتال  $2s$  با یک یا دو یا سه الکترون اوربیتال  $2p$  تحت نام هیبرید شدگی  $sp^n$  با  $n=1,2,3$  شناخته می شود.

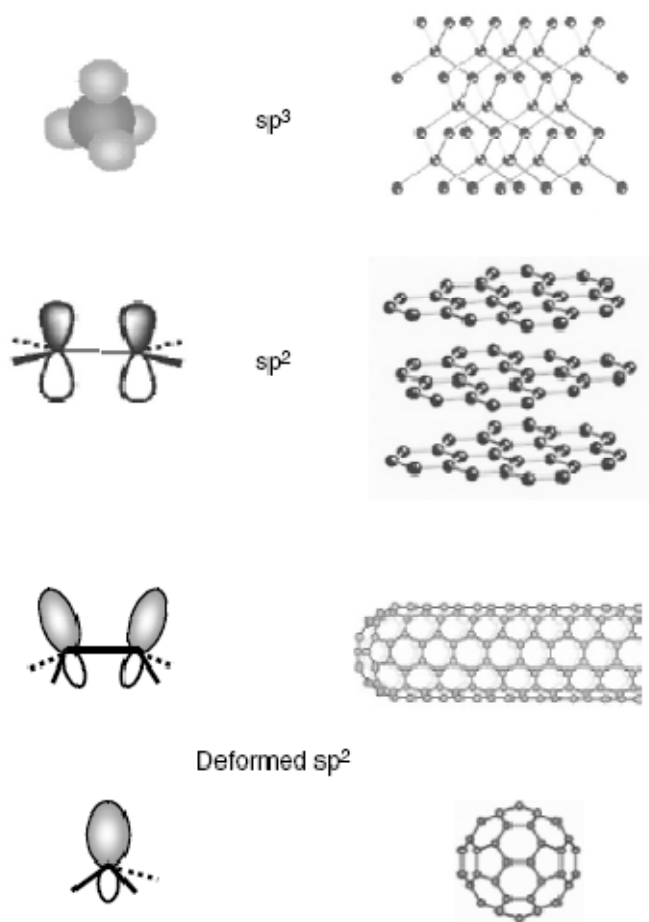
دیاگرام فازی کربن در شکل ۱-۲ تاریخچه ترکیب الماس را در سال ۱۹۶۰ نشان می دهد و تا زمان کشف دیگر ساختارهای کربن الهام دهنده بود. بدین وسیله اطلاعات زیادی درباره ساختار کربن روشن شد. سوالات زیادی نیز درباره ساختارهای ممکن اتم های کربن همچنان باقی مانده است. پیوند  $sp^2$  در شرایط محیطی سست ترین حالت فازی کربن را ایجاد می کند و پیوند  $sp^3$  در دماهای

بالا الماس را که پایدارترین حالت کربن است ایجاد می کند. باقی ناحیه های دیاگرام الماس شش وجهی و کربنهای شش وجهی و کربن مایع را نشان می دهد. اعتقاد بر این است که وریته فاز توده ای کربن مربوط به حالت جدید  $\pi$  الکترونی نیاز به بررسی بیشتر دارد [۴۹].



شکل ۲-۱: نمودار فازی کربن

به علاوه درباره آینده فاز توده ای در دیاگرام فازی کربن تا زمان کشف فلورن ها در سال ۱۹۸۵ و کشف نانو لوله های کربنی در سال ۱۹۹۱ توسط ایجیما [۱] بیشترین توجه بر حالت خوشه ای کوچک کربن می باشد. دلیل فیزیکی اینکه شکل ساختارهای نانویی به صورت لایه ی گرافن (به صورت یک لایه ۲ بعدی از گرافیت سه بعدی) که به اندازه محدود دارای تعداد زیادی از اتم ها با پیوندهای آویزان و پیوندهای آویزان نشانه دار می باشد بیان می شود، میزان انرژی حالتی بالای آنها است. از این رو میزان انرژی تعداد اندکی (۳۰-۱۰۰) اتم کربن با محدود کردن پیوندهای آویزان حتی با هزینه افزایش میزان انرژی کرنشی کاهش می یابد. بنابراین فرم قفسی بسته از خوشه ها را مانند فلورن ها و نانو لوله ها توسعه می دهند.



شکل ۲-۲: ساختار پیوند کربن در الماس، گرافیت، نانو لوله ها و فلورن [۴۹]

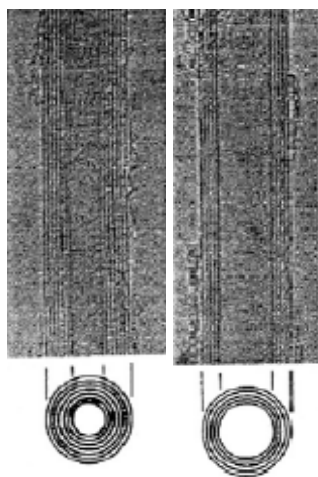
یک نانو لوله کربنی یک لایه گرافیت است که به شکل مناسب به صورت یک استوانه با قطر مختلف خم شده است. بنابراین باید انتظار داشته باشیم که پیوندهای صفحه ای  $sp^2$  که مشخصه گرافیت هستند نقش اساسی را در نانو لوله کربنی ایفا کنند. در خمیدگی های نانو لوله ها مقدار کمی ترکیب پیوندهای  $sp^3$  داریم که باعث می شوند که نیروی پیوندی در راستای جنب نانولوله نسبت به راستای محوری آن مقداری کاهش یابد. تا زمانی که یک نانو لوله کربنی یک جداره که دارای یک لایه اتم در محیط خود می باشد مد نظر باشد بردارهای موجی کمی برای بدست آوردن دوره آن لازم است.

این قیود باعث محصور شدن ذرات توابع موج در مسیر محور و جانب نانو لوله با یک حرکت موج صفحه ای که تنها در امتداد محور نانو لوله اتفاق می افتد مطابق با تعداد زیاد فضاهای بسته ای که به بردارهای موج اجازه می دهند می گردند. بنابراین با وجود اینکه نانو لوله های کربنی شدیداً به لایه های ۲ بعدی گرافین وابسته هستند اما انحنای لوله و محصور بودن ذرات در جهت جانبی باعث تعداد زیادی خصوصیات متفاوت در نانولوله های کربنی شده است. به علت وابستگی زیاد نانو لوله های کربنی و گرافیت شرح مختصری درباره گرافیت را در اینجا می آوریم.

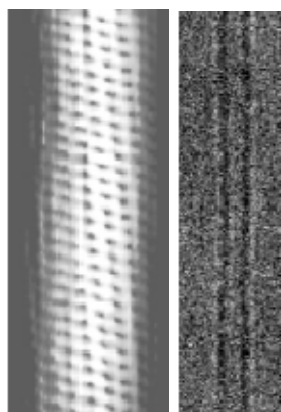
به شکلی که بیان شد  $(n, m)$  نانولوله کربنی می توانند هم فلزی باشند  $q = 3n - m$ ,  $q = 0, 1, 2, \dots$  و یا این که نیمه رسانا باشد  $(q = 0, 1, 2, \dots, n - m = 3q \pm 1)$  بنا بر این جز سازنده منحصر بفرد نانو لوله کربنی چند جداره و نانولوله تک جداره می تواند به صورت فلزی و یا نیمه رسانا باشد [۴۹]. این مشخصات الکتریکی قابل ملاحظه به سبب ساختار الکتریکی گرافیت ۲ بعدی تحت قید محبوس بودن ذرات موجود در راستای جداره دیده می شود.

مثال واقعی نانولوله کربنی به صورت یکی از دو فرم زیر مشاهده می شود:

- (۱) نانو لوله چند جداره (MWNT) که شامل تعدادی نانولوله تک جداره هم محور تو در تو با قطرهای متفاوت می شود [۱۶] که از هم جدا شده اند با فاصله ای در حدود  $0.34 \text{ nm}$ .
- (۲) یک طناب نانو لوله تک جداره که یک نانو کریستال می باشد که شامل ۱۰ تا ۱۰۰ نانو لوله کربنی تک جداره می شود (SWNT) که تمام محورهای آنها با هم موازی و یکپارچه شده است و به صورت یک شبکه سه وجهی با ثابت شبکه ای که تقریباً برابر است با  $d_t + c_t$  منظم شده اند جایی که  $d_t$  قطر نانو لوله است و  $c_t$  تقریباً با ثابت شبکه گرافیت لایه داخلی برابر است.



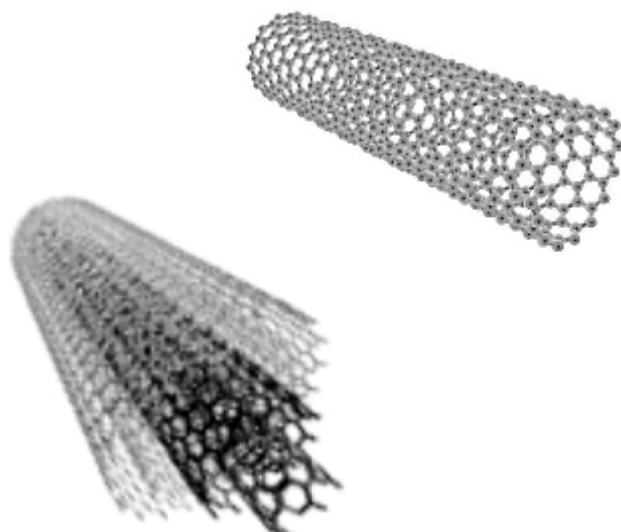
شکل ۲-۳: تصویر TEM از نانو لوله کربنی چند لایه [۴۹]



(الف) (ب)

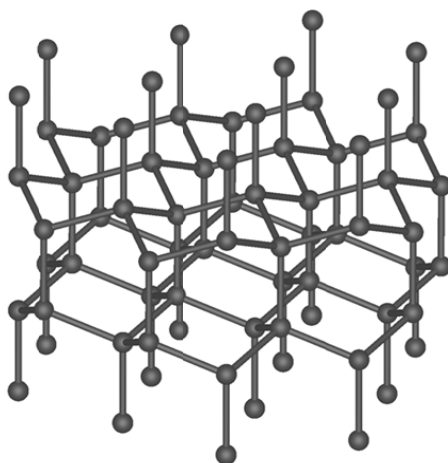
شکل ۲-۴: (الف) اولین تصویر TEM گزارش شده توسط ایجیما برای نانو لوله کربنی تک لایه (ب) تصویر STM نانو لوله کربنی تک لایه [۴۹]

در الماس [۴۷]، چهار الکترون والانس هر اتم کربن اوربیتال هیبریدی  $sp^3$  را اشغال می کنند و چهار پیوند کووالانت  $\sigma$  معادل به منظور اتصال با چهار اتم دیگر ایجاد می کنند. این ساختمان سه بعدی از داخل قفل شونده الماس را سخت ترین ماده شناخته شده تا به امروز می کند. به این دلیل که الکترون ها در الماس به جای پیوند ناپایدار  $\pi$  پیوند کووالانت  $\sigma$  را تشکیل می دهند و الماس از نظر الکتریکی نارسانا است.



شکل ۲-۵: نانولوله کربنی تک لایه و چند لایه

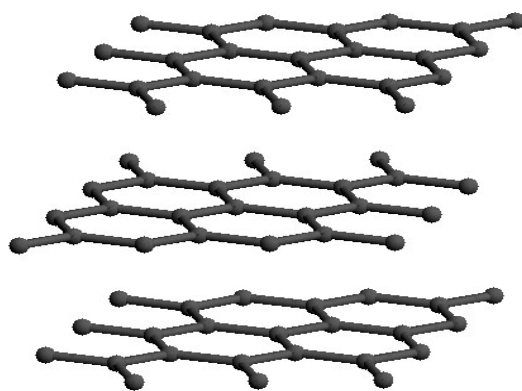
الکترون ها در الماس به سختی در بین اتم های کربن گیر افتاده اند. این الکترون ها نور را در نواحی ماورا بنفش جذب می کنند نه در نواحی نور مرئی و نور فرو سرخ، به همین خاطر الماس خالص به چشم انسان تمیز می آید. الماس دارای میزان انکسار نور زیادی است به همین سبب به عنوان یک سنگ قیمتی مطرح است. الماس به طور غیر معمولی دارای میزان هدایت گرمایی بالایی می باشد.



شکل ۲-۶: ساختار الماس



در گرافیت، سه الکترون در پوسته خارجی هر اتم کربن اوربیتال هیبریدی  $sp^2$  را اشغال می کنند و سه پیوند درون صفحه ای  $\sigma$  به همراه یک پیوند خارج صفحه ای اوربیتال  $\pi$  را ایجاد میکنند [۴۸]. این مسئله باعث ایجاد یک شبکه شش ضلعی صفحه ای می گردد. نیروهای واندروالس شبکه های شش ضلعی را به صورت موازی با هم با فاصله ای در حدود  $0.34$  نانومتر کنار یکدیگر نگاه می دارند.



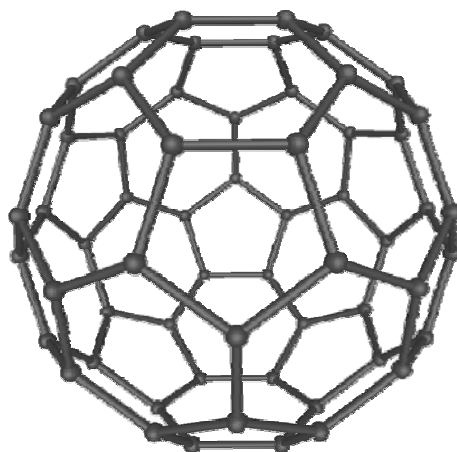
شکل ۲-۷: گرافیت

پیوندهای  $\sigma$  دارای  $0.14$  نانومتر طول و محکمی  $420 \text{ Kcal/mol}$  در اوربیتال  $sp^2$  و  $0.15$  نانومتر طول و محکمی  $360 \text{ Kcal/mol}$  در اوربیتال  $sp^3$  می باشند. به همین خاطر گرافیت دارای پیوندهای درون صفحه ای سخت تری نسبت به الماس می باشد. علاوه بر این اوربیتال ها یا الکترون های خارج صفحه ای  $\pi$  در صفحات گرافیت پخش هستند لذا باعث افزایش رسانایی گرمایی و الکتریکی گرافیت می گردد. برهم کنش الکترون های  $\pi$  آزاد با نور باعث می شود که گرافیت سیاه به نظر برسد. کشش ضعیف واندروالس بین صفحات گرافیت سبب می شود که لایه های گرافیت بتوانند به راحتی روی هم سر بخورند لذا می توان از گرافیت به عنوان یک روان کننده خوب استفاده کرد.

یک نانو لوله کربنی را می توان به صورت یک سیلندر توخالی که از خم کردن صفحات گرافیت ایجاد شده معرفی کرد. پیوندها در نانولوله ها اساساً  $sp^2$  هستند. با این وجود انحنا دایروی باعث

حبس ذرات و هیبریدازسیون مجدد  $\sigma-\pi$  می گردد به شکلی که سه پیوند  $\sigma$  مقداری در خارج صفحه قرار می گیرند برای جبران اوربیتال های  $\pi$  مقدار بیش تری در خارج لوله جا به جا می شوند [۴۹].

این مسئله باعث می شود که نانو لوله ها از نظر مکانیکی سخت تر و از نظر الکتریکی و گرمایی رسانایی بیشتری داشته باشند. از نظر بیولوژیکی و شیمیایی هم نسبت به گرافیت فعال تر هستند. فلورن ( $C_{60}$ ) از ۲۰ تا شش ضلعی و ۱۲ تا پنج ضلعی تشکیل شده است [۵۰]. پیوند بین آنها نیز از نوع  $sp^2$  می باشد، گاهی با  $sp^3$  به سبب میزان خمیدگی زیاد ترکیب می شود. ساختمان های تایید شده از مولکول های فلورن باعث تعجب ما می شوند مثلاً مانند یک انتقال دهنده فلزی نارسانا، نسبت های مغناطیسی غیر معمول، ساختمان زنجیری ارزشمند نوری و الکتریکی آنها، عاملیت شیمیایی و پکیج مولکولی آن. به دلیل این خواص، فلورن ها در سطح وسیعی برای کاربردهای الکتریکی، مغناطیسی، نوری، شیمیایی، بیولوژیکی و دارویی مورد استفاده قرار گرفته است.



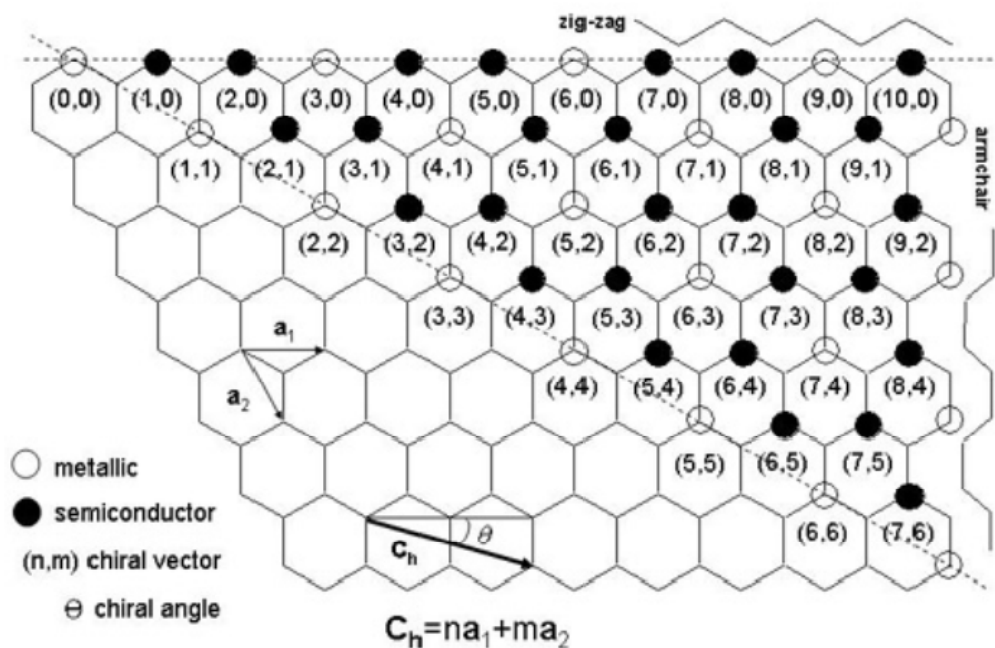
شکل ۲-۸: فلورن

## ۲-۳- ساختمان و خواص نانو لوله های کربنی تک لایه

خواص استثنایی نانو لوله های کربنی به ساختار آنها وابسته است. نانو لوله های کربنی را می توان به صورت یک لوله ساخته شده از خم کردن یک صفحه گرافیتی مشتمل بر پیوندهای  $sp^2$  و ساختار تماما شش ضلعی تجسم کرد. نحوه خم کردن صفحه گرافیتی توسط بردار کایرال  $C_n$  مشخص می شود. برای ایجاد کردن بردار کایرال، دو بردار یکه به عنوان بردارهای پایه ایی شبکه شش گوش به صورت  $a_1$  و  $a_2$  تعریف می شوند. بردار کایرال یک ترکیب خطی از این بردارهای یکه می باشد. به عنوان مثال  $C_n = na_1 + ma_2$  و  $n$  بزرگتر است از  $m$  (شکل ۲-۹). صفحه گرافیت در امتداد بردار کایرال خم می شود (شکل ۲-۹) به شکلی که بزرگی بردار کایرال نشان دهنده قطر نانو لوله می باشد.

یک بردار دیگر که بر بردار کایرال عمود می باشد بردار انتقال  $T$  می باشد و موازی محور لوله است. صرفنظر از مشخص کردن نانو لوله ی کربنی، می توان اطلاعاتی درباره تقارن و ساختار نانو لوله ها را با توجه به اندیس های بردار کایرال استنتاج کرد که برخی از این نتایج در جداول ۲-۱ و ۲-۲ آمده است. این اندیس ها همچنین مشخص کننده خواص الکتریکی نانو لوله های کربنی هستند. در صورتیکه اختلاف بین  $n$  و  $m$  مضربی از ۳ باشد نانو لوله هادی الکتریسیته و در غیر این صورت نیمه هادی می باشد [۵۱].

غالبا انتهای نانولوله های کربنی بسته می باشد. پوشش های انتهایی نانو لوله ها به سبب وجود عیوب ساختاری شکل می گیرند. به عنوان مثال برای ایجاد شیب مثبت سطح پوشش شبکه شش گوش تبدیل به پنج گوش می شود. نانو لوله های کربنی با انتهای باز را می توان به صورت عمدی از طریق در معرض اکسیداسیون قرار دادن در کنار یک واسطه و یا توسط یک اسید قوی ایجاد کرد [۵۲].



شکل ۲-۹: بردار کایرال نانو لوله ها

نانو لوله های کربنی از نظر کایرالیته در سه حالت ۱- زیگزاگ ۲- آرمچیر ۳- کایرال قابل مشاهده هستند (۲-۱۰).

### نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ

زمانی که صفحه گرافیتی در امتداد برداری با پارامتر  $m = 0$  خم شود نانو لوله حاصل دارای بردار کایرال به صورت  $(n, 0)$  خواهد بود در این حالت نانو لوله مذکور را زیگزاگ می خوانند.

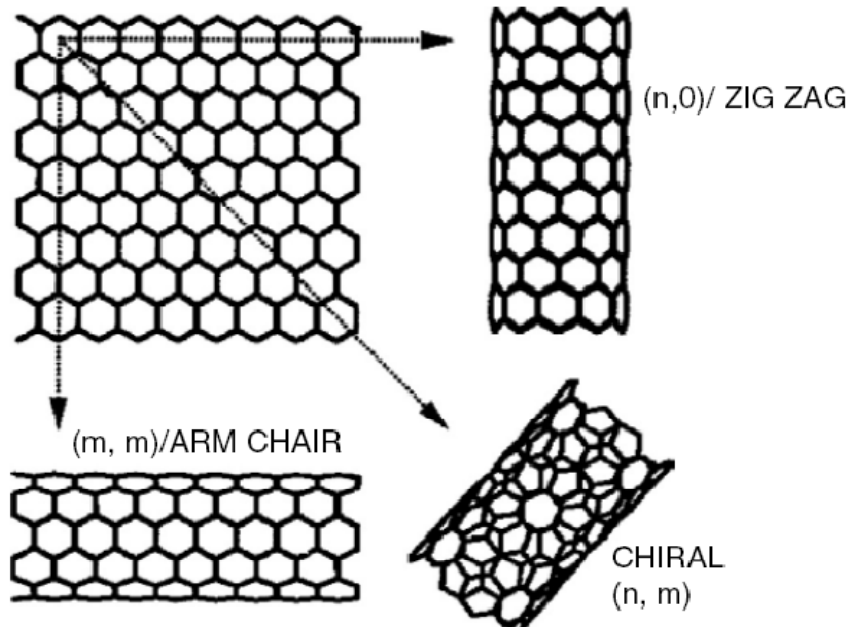
### نانو لوله کربنی تک لایه آرمچیر

زمانی که صفحه گرافیتی در امتداد برداری با پارامتر  $m = n$  خم شود نانو لوله حاصل دارای بردار کایرال به صورت  $(m, m)$  خواهد بود در این حالت نانو لوله مذکور را آرمچیر می خوانند.

## نانو لوله کربنی تک لایه کایرال

زمانی که صفحه گرافیتی در امتداد برداری به غیر از مواردی که در بالا شرح داده شد خم شود نانو

لوله حاصل را تحت عنوان کایرال می شناسیم.



شکل ۲-۱۰: زمانیکه صفحه گرافیتی در راستای بردار کایرال  $(n,0)$  خم شود نانو لوله حاصل زیگزاگ و در صورتی که در امتداد بردار کایرال  $(m,m)$  خم شود نانو لوله حاصل آرمچیر و در هر حالتی غیر از موارد مذکور نانو لوله کایرال بوجود می آید.

جدول ۲-۱: دسته بندی نانو لوله های کربنی [۹]

Type	$C_h$	$\theta$	Symmetry
Zigzag	$(n,0)$	$0^\circ$	$D_h \otimes C_i$
Armchair	$(n,n)$	$30^\circ$	$D_h \otimes C_i$
Chiral	$(n,m)$	$0 <  \theta  < 30^\circ$	$C_d \otimes C_{N/d}$
		$D_h \otimes C_i$	$= \begin{cases} D_{nh}, & \text{when } n \text{ is even} \\ D_{nd}, & \text{when } n \text{ is odd} \end{cases}$
	$C_d \otimes C_{N/d}$		$C_N, N \text{ is the number of hexagon in a unit cell}$

جدول ۲-۲: پارامترهای پرکاربرد ساختار نانو لوله های کربنی [۹]

Parameters	Symbol	Formula
Carbon-Carbon Bond Length	$a_{c-c}$	$= 1.44 \text{ \AA}$
Length of unit vector	A	$= \sqrt{3} a_{c-c}$
Length of chiral vector	$ C_h $	$= a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}, \quad \cdot <  m  <  n $
Diameter of the carbon nanotube	D	$=  C_h /\pi$
Translational vector	T	$= t_1 a_1 + t_2 a_2$
	$t_1$	$= 2m + n/\text{gcd}(2n + m, 2m + n)$
	$t_2$	$= 2n + m/\text{gcd}(2n + m, 2m + n)$
Chiral angle	$\theta$	$\left\{ \begin{array}{l} \sin^{-1} \frac{\sqrt{3}m}{2\sqrt{n^2+m^2+nm}}, \quad \cdot < \theta < \left  \frac{\pi}{6} \right  \\ \cos^{-1} \frac{2n+m}{2\sqrt{n^2+m^2+nm}} \\ \tan^{-1} \frac{\sqrt{3}m}{2n+m} \end{array} \right.$
Number of hexagon per unit cell	$N_h$	$= \frac{2(n^2 + m^2 + nm)}{\text{gcd}(2n + m, 2m + n)}$

## ۲-۴- روش های ساخت نانو لوله های کربنی

در حاضر سه روش قوس دشارژ<sup>۲۱</sup>، سایش لیزری<sup>۲۲</sup> و تجزیه شیمیایی فاز بخار<sup>۲۳</sup> پرکاربردترین

روش ها برای تولید نانو لوله های کربنی هستند.

<sup>۲۱</sup> Arc discharge

<sup>۲۲</sup> Laser ablation

<sup>۲۳</sup> Chemical vapor deposition

روش دشارژ در اساس به منظور ساخت فلورن بنا نهاده شد (شکل ۲-۱۱ و ۲-۱۲). با اعمال یک ولتاژ بالا در فضای نزدیک بین دو الکتروود گرافیتی دشارژ الکتریکی ایجاد می شود و آنچه در کاتد رسوب می کند حاوی نانو لوله کربنی می باشد. روش دوم، روش سایش لیزری در سال ۱۹۹۵ در دانشگاه رایس<sup>۲۴</sup> توسط گروهی از محققین بنیان گذاشته شد (شکل ۲-۱۳). این روش شامل تبخیر یک هدف گرافیتی توسط یک لیزر با توان بالا در یک کوره بوده و نانو لوله های کربنی در پایین دست جریان در کلکتور آب خنک تجمع می نمایند.

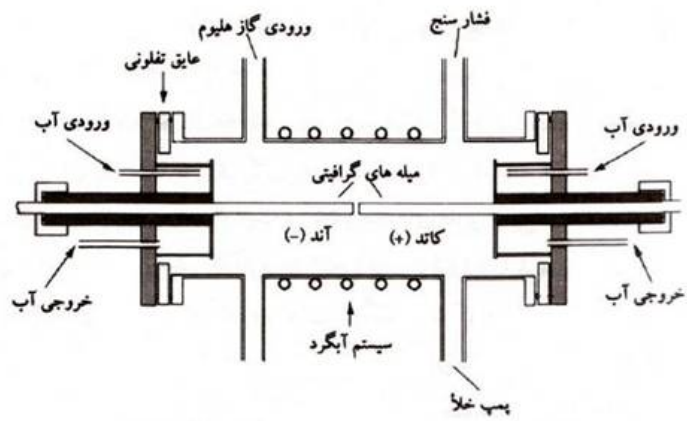
در ابتدا با این روش نانو لوله های چند لایه تولید شد. مقدار کمی نانو لوله تک لایه زمانی که مقداری ذرات کبالت نیکل به هدف گرافیتی اضافه می شود قابل دستیابی است. در روش سوم روش تجزیه شیمیایی بخار از یک کوره با قابلیت دمای بالا به منظور تجزیه گاز هیدروکربن ورودی استفاده می شود (شکل ۲-۱۴).

روش سایش لیزری تنها برای تولید نانو لوله های کربنی تک لایه کاربرد دارد. این روش نانو لوله های با کیفیت بالا اما در تعداد کم و با هزینه بالا تولید می کند. قوس دشارژ و رسوب شیمیایی فاز بخار برای تولید نانو لوله های کربنی تک لایه و چند لایه قابل استفاده هستند. مهمترین مزایای این روش ها نسبت به روش سایش لیزری تولید در تعداد زیاد و هزینه کم می باشد. معایب این روش ها وجود ناخالصی های زیاد و نیاز به خالص سازی می باشد.

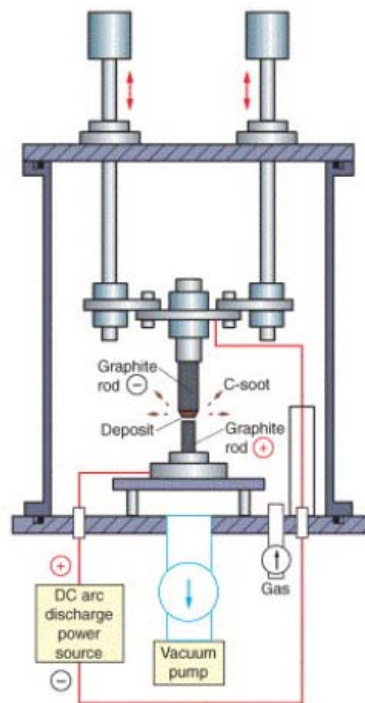
خالص سازی یک مرحله بسیار مهم در تولید نانو لوله های کربنی است. لازم است که ناخالصی هایی از قبیل کربن های بی نظم و متبلور نشده، صفحات گرافیت، کاتالیزورهای فلزی و فولرن ها در ساختار نانو لوله های کربنی از بین روند. جدایش بر اساس انتخاب اندازه و بر اساس انتخاب ساختار دو نتیجه مهم روش های خالص سازی مرسوم هستند.

---

<sup>۲۴</sup> Rice university

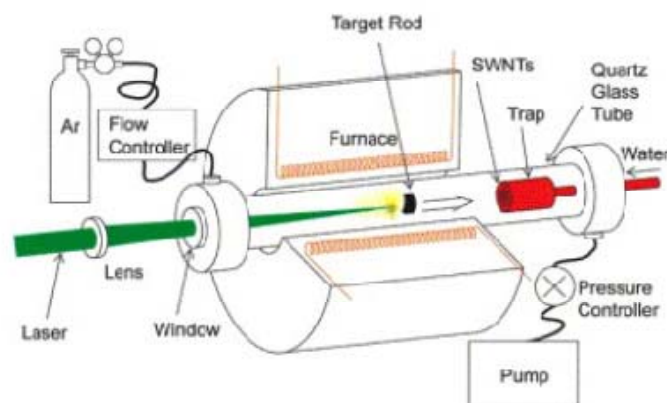


شکل ۲-۱۱: روش قوس دشارژ

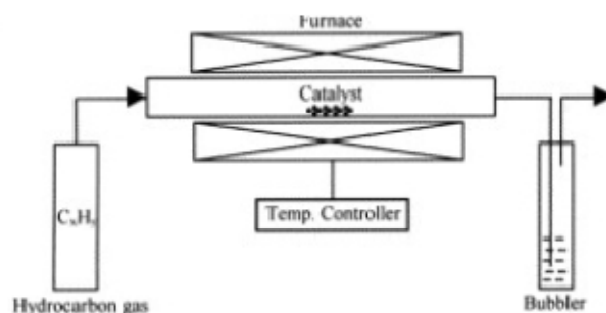


شکل ۲-۱۲: شمانیک روش قوس دشارژ





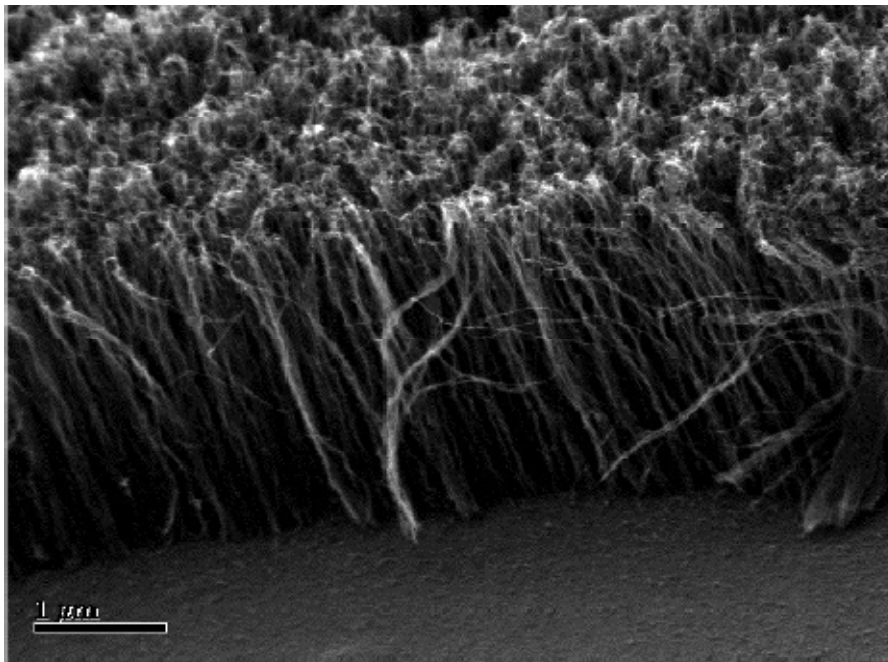
شکل ۲-۱۳: شماتیک روش سایش لیزری



شکل ۲-۱۴: روش تجزیه شیمیایی بخار

جدایش ساختار انتخاب، باعث از بین بردن ناخالصی ها شده و جدایش اندازه انتخاب، یکنواختی در اندازه فیزیکی نانو لوله را افزایش می دهد. روش های بهبود اسیدی<sup>۲۵</sup>، آنیلینگ<sup>۲۶</sup>، اکسیداسیون<sup>۲۷</sup>، التراسونیک<sup>۲۸</sup>، میکرو فیلتراسیون<sup>۲۹</sup>، جدایش فرو مغناطیسی<sup>۳۰</sup> و تکنیک رنگ نگاری<sup>۳۱</sup> پر کاربردترین روش های خالص سازی برای نانو لوله های تک لایه هستند.

<sup>۲۵</sup> Acid treatment  
<sup>۲۶</sup> Annealing  
<sup>۲۷</sup> Oxidation  
<sup>۲۸</sup> Ultrasonic  
<sup>۲۹</sup> Micro filtration  
<sup>۳۰</sup> Ferromagnetic separation  
<sup>۳۱</sup> Chromatographic



شکل ۲-۱۵: نانو لوله های چند لایه رشد یافته [۴۹]

## ۲-۵- کاربرد نانو لوله های کربنی

نسبت منظری بالای نانو لوله های کربنی یک پارامتر بسیار مهم در کاربرد آنها به عنوان قلم برای انتشار میدان الکترون ها می باشد [۵۳]. این مشخصه به منظور استفاده از نانو لوله ها در یک صفحه نازک به منظور انتشار الکترون ها به یک صفحه فسفری توسعه پیدا کرده است. مدول الاستیسیته نانو لوله های کربنی در راستای لوله آنها بسیار بالا می باشد (در حدود ۱ TPa)، و همینطور از الاستیسیته بالایی تحت خمش برخوردار هستند [۵۴]. این مشخصات باعث شده که از نانو لوله ها به عنوان تقویت کننده در مواد کامپوزیتی و پلاستیکی بهره ببرند. با این وجود در این کاربرد این مشکل وجود دارد که نانو لوله ها به منظور استفاده از مزیت استحکام بالای آنها می بایست به ماتریکس بچسبند. این مسئله تا زمانی که جداره نانو لوله ها از نظر شیمیایی خنثی هستند مشکل است. تلاش هایی به منظور پیوند زدن دیگر مولکول ها به جداره نانو لوله ها به منظور بهبود چسبندگی آنها به ماتریس ها

صورت پذیرفته است [۵۵]. استفاده از نانو لوله های چند جداره به سبب این واقعیت که نانو لوله های اولیه از چسبندگی مناسبی برخوردار نیستند دشوار است [۵۶].

کاربرد طبی نانو لوله های کربنی به عنوان یک وعده مهم مد نظر است. موضوع برخی از تحقیقات حاضر از قبیل تحقیق ژائو<sup>۳۲</sup>، هو<sup>۳۳</sup>، سوادھین کی<sup>۳۴</sup>، ماندال<sup>۳۵</sup> و هادون<sup>۳۶</sup> [۵۷] استفاده از نانو لوله های کربنی برای پیوند استخوان های شکسته برای کمک به بدن برای ترمیم بهتر می باشد. دیگر کاربرد ممکن نانو لوله ها در یافتن و بهبود سرطان هاست.

تحقیق ونگ<sup>۳۷</sup> و هنگ جی دای<sup>۳۸</sup> [۵۸] نشان می دهد که می توان از نانو لوله های کربنی برای انتقال پروتئین در امتداد غشاء سلول ها برای از بین بردن سرطان استفاده کرد. آلكساندر استار<sup>۳۹</sup>، اوگن تو<sup>۴۰</sup>، جوزف نیمان<sup>۴۱</sup>، جین کریستوف<sup>۴۲</sup> [۵۹] از نانو لوله های کربنی برای شناسایی DNA استفاده کرده اند.

استفاده از نانو لوله های کربنی به عنوان لوله های مقیاس نانو نیز موضوع جذابی است. این موضوع کاربردهای زیادی در علوم پزشکی دارد، مانند استفاده برای مخزن دارو. دیگر کاربرد ممکن نانو لوله ها در پزشکی استفاده برای بهبود و یا ایجاد مجاری انتقال خون در بدن است.

از نانو لوله های کربنی به سبب رسانایی الکتریکی آنها می توان به عنوان افزایش دهنده رسانایی در مواد پلاستیکی نیز استفاده کرد.

دیگر کاربرد نانو لوله کربنی به این سبب استفاده از آنها در باتری های یونی می باشد. از نانو لوله های کربنی به سبب داشتن سطح جانبی زیاد می توان به عنوان نگهدارنده کاتد در باتری های یونی

---

<sup>۳۲</sup> Zhao

<sup>۳۳</sup> Hu

<sup>۳۴</sup> Swadhin K.

<sup>۳۵</sup> Mandal

<sup>۳۶</sup> Haddon

<sup>۳۷</sup> Wong

<sup>۳۸</sup> Hongjie Dai

<sup>۳۹</sup> Alexander Star

<sup>۴۰</sup> Eugene Tu

<sup>۴۱</sup> Joseph Niemann

<sup>۴۲</sup> Jean Christophe

بهره برد. نتایج تحقیق کلی<sup>۴۳</sup> [۶۰] نشان می دهد که نانو لوله های کربنی در این کاربرد از گرافیت موثرتر هستند.

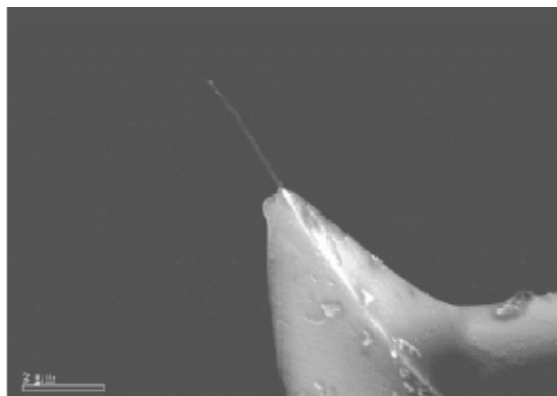
آینده با کشفیات جدیدی از قبیل پیوند بین زنجیره های پلیمری مخصوصا DNA و نانو لوله های کربنی نوید کاربردهای بیشتر نانو لوله های کربنی را می دهد [۶۱]. پلیمرها دارای پیوند واندروالسی می باشند و برخی از آنها از خود تمایلی برای پوشاندن نانو لوله ها نشان داده اند. DNA با ساختار مارپیچ منحصر به فرد خود می توانند نانو لوله ها را با قطر های مشخص دربر بگیرند و کاملا بپوشانند و به عنوان حسگر و یا بایو چیپ ها استفاده شوند.

نشان داده شده است که می توان از نانو لوله ای کربنی نیمه هادی که تماس های فلزی آنها ته نشین شده است به عنوان ترانزیستور استفاده کرد [۶۲].

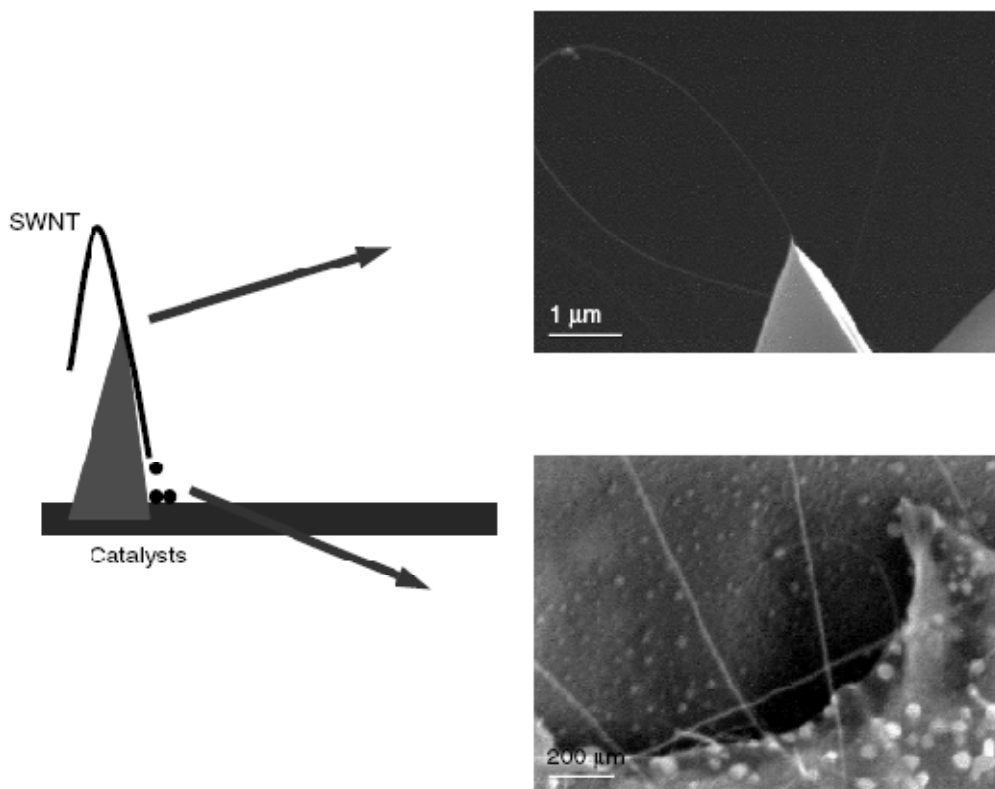
رزوناتورها از اجزا کلیدی در سیستم های انتقال امواج می باشند [۲۴]. کاهش اندازه رزوناتور باعث افزایش فرکانس رزونانس و کاهش مصرف انرژی آن می شود. برای سنسورها افزایش مقدار فرکانس رزونانس به معنی افزایش حساسیت می باشد [۲۵]. در ارتباطات وایرلس وجود رزوناتورهای با فرکانس بالاتر به معنی امکان ساخت فیلترها و آسیلاتورها و میکسرهای با فرکانس بالاتر می باشد. پیشرفت در نانو الکترو مکانیکال سیستم با فرکانس بالا موجب کاربردهای جدیدی متغیر از اجرام مکانیکی تا سنسورهای بار الکتریکی [۲۶,۶۳] و نانو تجهیزات برای انتقال سیگنال ها [۶۴] در عکس برداری بیولوژیکی [۶۵] گردید. به سبب خواص شگفت انگیز نانو لوله ها از قبیل استحکام بالا، رسانایی گرمایی بالا و فرکانس طبیعی بالا از نانو لوله ها می توان در زوناتورها، سنسورها، پراب ها و دیگر تجهیزات از این دست بهره برد.

---

<sup>۴۳</sup> Kley



شکل ۲-۱۶: تصویر SEM از یک نانو پراب ساخته شده از نانو لوله کربنی چند لایه [۴۹]



شکل ۲-۱۷: رشد یک نانو لوله کربنی تک لایه به منظور ساخت نانو پراب [۴۹]

## ۲-۶-۶- روش های مدل سازی نانو لوله های کربنی

مدل سازی و شبیه سازی ما را در شناخت، تحلیل و طراحی نانو لوله ها یاری می نماید. با توجه به اینکه بررسی نانو لوله ها در محیط آزمایشگاهی بسیار دشوار و پرهزینه می باشد، روش های تئوری مدل سازی مورد توجه قرار گرفتند. روش های مختلفی به منظور شبیه سازی نانو لوله استفاده شده اند. از مهمترین روش های مدل سازی نانو لوله های کربنی می توان به مدل سازی پوسته الاستیک و تیر الاستیک و مکانیک مولکولی اشاره کرد.

### ۲-۶-۱- مدل سازی پوسته الاستیک

در این تکنیک نانو لوله کربنی را به وسیله یک پوسته استوانه ای الاستیک مدل کرده و با استفاده از روابط اصلاح شده مکانیک محیط پیوسته برای پوسته ها رفتار آن پیش بینی می شود. در این حالت برای پیش بینی رفتار مدل تعیین خواص اساسی آن از قبیل مدول یانگ ضریب پواسون و ضخامت لازم است مقادیر این خواص با استفاده از سایر تکنیک های مورد اشاره به دست آمده و به این مدل وارد می شوند. شایان ذکر است که بر مبنای همین تکنیک می توان فلورین ها را نیز با پوسته های کروی الاستیک مدل سازی کرد.

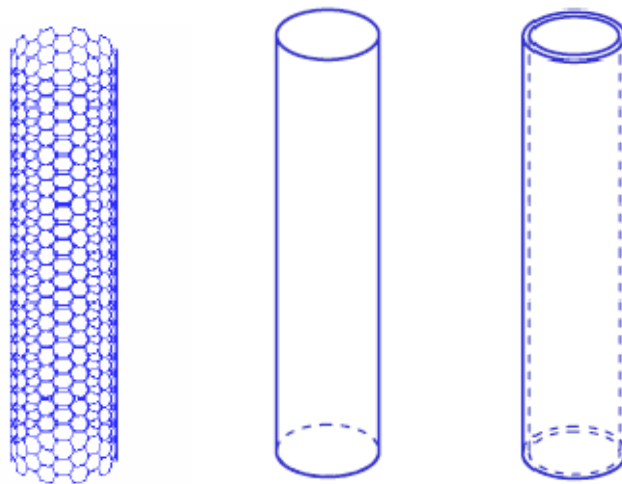
### ۲-۶-۲- مدل سازی تیر الاستیک

در این روش نانو لوله کربنی به وسیله یک تیر (جهت مدلسازی نانو لوله های تک لایه) یا چند تیر هم مرکز (جهت مدل سازی نانو لوله های چند لایه) که از روابط تئوری اویلر - برنولی یا تیموشنکو پیروی می کنند مدل می شود. این مدل سازی نیز نیازمند تعیین خواص اساسی نانو لوله از قبیل مدول یانگ ضریب پواسون و ضخامت می باشد. مقادیر این خواص با استفاده از سایر تکنیک ها به

دست آمده و به این مدل وارد می شوند. عمده کاربرد این تکنیک در مدل سازی رفتاری نانو لوله های با نسبت منظری بزرگ در بارگذاری های فشاری و خمشی و هم چنین تحلیل انتشار امواج در نانو لوله ها می باشد. در این حالت رفتار پیش بینی شده نانو لوله با نتایج شبیه سازی های دینامیک مولکولی مطابقت خوبی دارد.

## ۲-۶-۳- مدل سازی مکانیک مولکولی

این شیوه مدل سازی به علت دقت مناسب و بازدهی بالا اخیراً به طور قابل توجهی محققین را جهت شبیه سازی ساختارهای نانویی مورد استفاده قرار گرفته است و از ترکیب آنها تکنیک های حل اجزای محدود روش های بسیار جالب و موثری برای پیش بینی رفتار مکانیک نانو ساختارها به دست آمده است. این شیوه قادر به مدل سازی نانو لوله های تک لایه و چند لایه (شامل تعداد زیادی اتم) با در نظر گرفتن مشخصه های اتمی و پیوندهای بین اتم ها می باشد این مدلسازی نیازمند روابطی است که رفتار اتم ها در سیستم را مشخص کند. این تکنیک برای اولین بار در سال ۲۰۰۳ توسط لی و چو ارائه شد. آنها بیان کردند که شباهت هایی میان ساختار مولکولی یک نانو لوله کربنی و ساختار یک سازه فضایی وجود دارد.



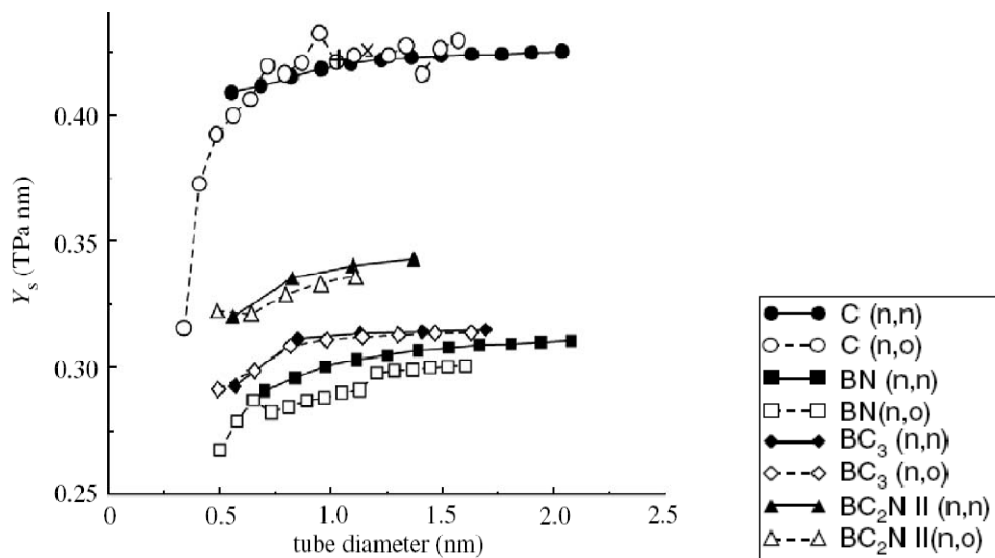
شکل ۲-۱۸: الف. مدل پیوسته صلب ب. مدل پوسته الاستیک پ. مدل مکانیک مولکولی

در یک نانو لوله کربنی به اتم های کربن به وسیله پیوندهای کووالانسی به یکدیگر مرتبط می باشند. این پیوندها مشخصه های خودشان از قبیل طول و زاویه پیوندی در یک ساختار فضایی سه بعدی را دارا می باشند. هم چنین رفتار یک نانو لوله کربنی از طریق محاسبات اندر کنش های هر یک از اتم های آن با اتم های مجاور پیش بینی می شود. این اندر کنش ها را می توان توسط پتانسیل های بین اتمی بیان کرد.

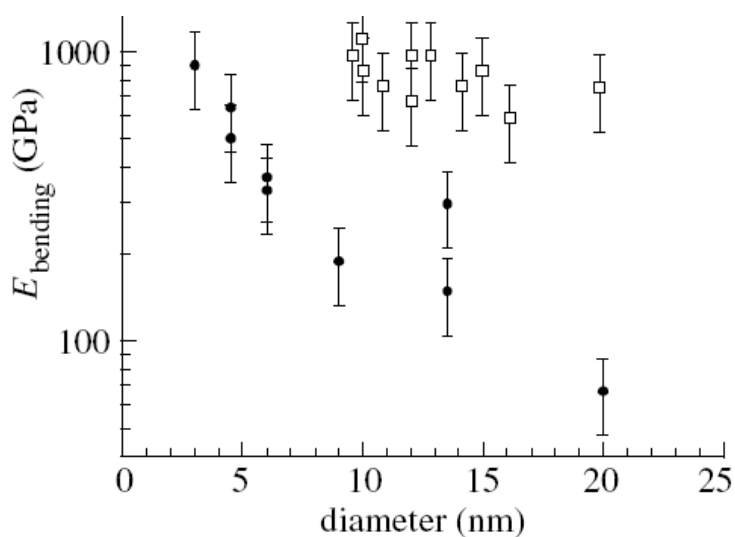
## ۲-۷- خواص مکانیکی نانو لوله های کربنی

پیوند کربن\_کربن یکی از مستحکم ترین پیوند هاست، لذا هر ماده ای که از کنار هم قرار گرفتن این پیوندها ساخته شده باشد دارای استحکام بسیار بالایی خواهد بود. به همین دلیل نانو لوله های کربنی که در واقع فیبرهای ساخته شده از کربن هستند دارای استحکام بسیار بالایی هستند. مدول یانگ محاسبه شده برای نانو لوله های کربنی در حدود  $1/8$  ترا پاسکال می باشد [۶۰]. مقدار تئوری پیش بینی شده برای مدول یانگ نانو لوله ها در حدود  $1-5$  ترا پاسکال می باشد. اندازه گیری مدول الاستیک برای یک نانو لوله مشخص کار بسیار دشواری است. مشکل نانو لوله های چند لایه این است که در نانو لوله های چند لایه، لایه های مختلف می توانند بر روی یکدیگر بلغزند و این لغزش باعث کاهش مقدار مدول یانگ در آنها می گردد. اندازه گیری مدول یانگ نانو لوله ها بر اساس طیف بینی ارتعاشی انجام می گردد. میکروسکوپ الکترونی و AFM بدین منظور استفاده می گردند.

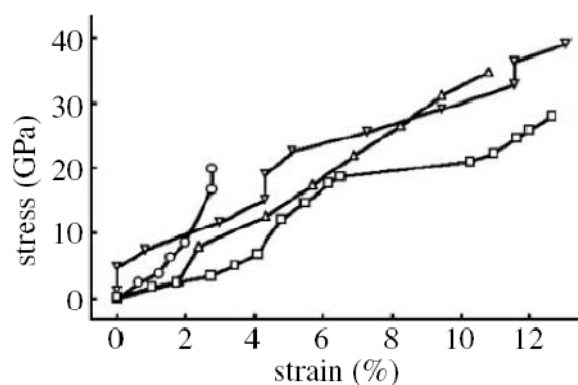




شکل ۲-۱۹: تغییرات مدول یانگ بر حسب قطر نانو لوله های کربنی [۴۹]



شکل ۲-۲۰: تغییرات مدول خمشی بر حسب قطر نانو لوله کربنی [۹۳]



شکل ۲-۲۱: نمودار تنش کرنش برای نانو لوله کربنی چند لایه [۹۴]

یکی دیگر از خواص مهم مکانیکی نانو لوله ها، قابلیت تحمل کرنش بالای آنها در کشش است (در حدود ۴۰ درصد). نانو لوله ها قابلیت تحمل تغییر شکل های گوناگون را دارند. قابلیت ارتجاعی صفحات گرافیت به سبب قابلیت هیبریدازسیون اتم های کربن از مهمترین دلایل این خصوصیت می باشد.

جدول ۲-۳: خواص مکانیکی نانو لوله ها

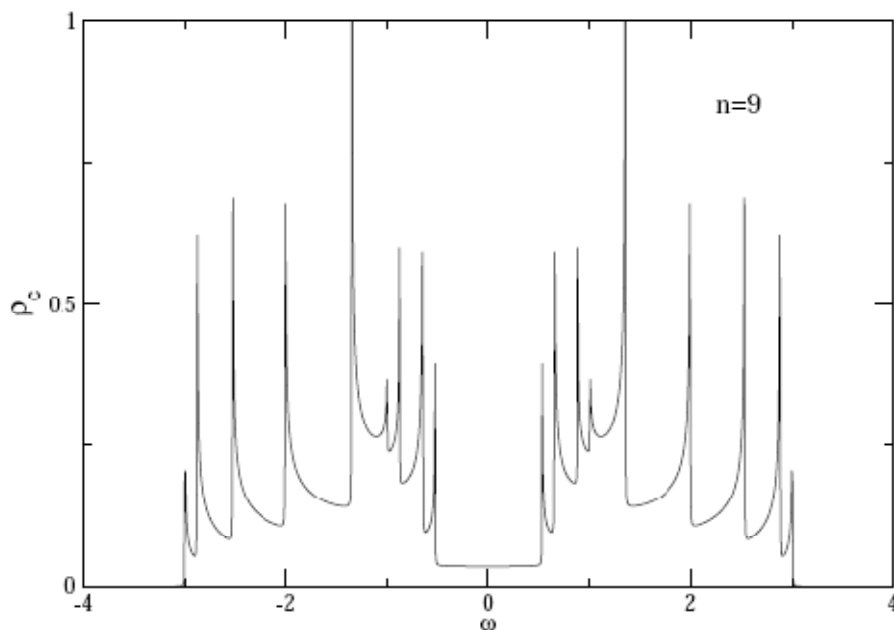
	Young modulus (Gpa)	Tensile Strength (Gpa)	Density (g/cm <sup>۳</sup> )
MWNT	۱۲۰۰	۱۵۰	۲/۶
SWNT	۱۰۵۴	۷۵	۱/۳
SWNT bundle	۵۶۳	۱۵۰	۱/۳
Graphit (in-plane)	۳۵۰	۲.۵	۲/۶
Steel	۲۰۸	۰/۴	۷/۸

## ۲-۸- خواص فیزیکی نانو لوله های کربنی

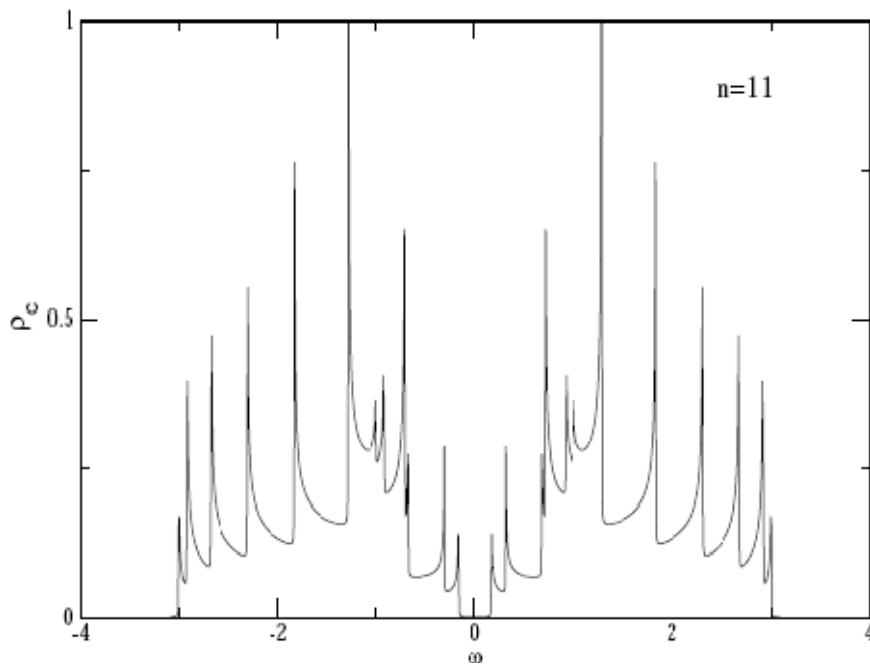
نانو لوله های کربنی به نسبت وزن استحکام بسیار بالایی دارند (چگالی نانو لوله چند لایه در حدود ۲/۶ گرم بر سانتی متر مکعب و نانو لوله تک لایه در حدود ۱/۳ گرم بر سانتی متر مکعب می باشد). به همین سبب نانو لوله ها در کاربردهایی که نیاز به وزن کم دارند بسیار موثر هستند. این مقدار در حدود ۱۰۰ برابر مقدار مرسوم برای فولاد و بیشتر از دو برابر فیبرهای کربنی است. نانو لوله های کربنی شدیداً در مقابل خوردنده های شیمیایی مقاوم هستند. اکسید کردن کربن های نانو لوله های کربنی بسیار دشوار است و دمای اکسیداسیون آنها ۱۰۰ درجه سانتی گراد بیشتر از دمای

اکسیداسیون فیبرهای کربنی است. به عبارت دیگر در کاربرد نانو لوله های کربنی دما یک محدودیت نیست. سطح نانو لوله ها در حدود ۱۰ تا ۲۰ متر مربع بر گرم می باشد که از گرافیت بیشتر است [۷۴]

پیش بینی می شود که نانو لوله های کربنی دارای رسانایی گرمایی بالایی نیز باشند؛ اما این مقدار برای یک نانو لوله مشخص اندازه گیری نشده است.



شکل ۲-۲۲: نمودار چگالی برحسب واحد شبکه نانو لوله (۹,۰) [۹۴]

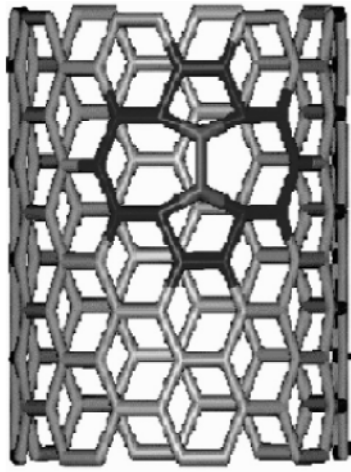


شکل ۲-۲۳: نمودار چگالی برحسب واحد شبکه نانو لوله (۱۱,۰) [۹۴]

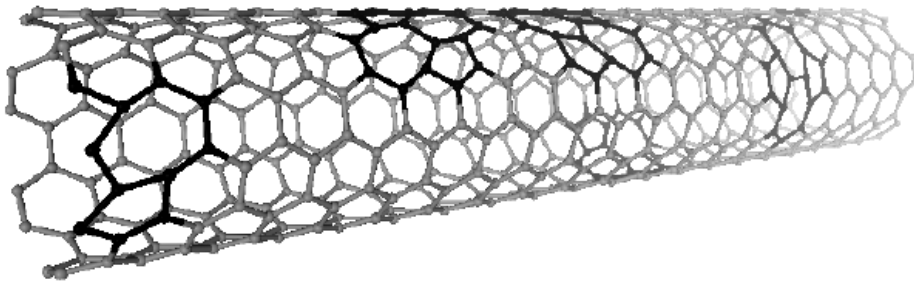
## ۲-۹- عیوب ساختاری نانو لوله های کربنی

عموما نانو لوله های کربنی تک لایه به صورت یک سیم کریستالی کامل در نظر گرفته می شود و این در حالی است که تحقیقات وجود حداقل یک عیب در هر ۴ میکرومتر طول نانو لوله های کربنی تک لایه در بهترین شرایط تولید را نشان داده اند. عیوب از قبیل حفره، اتم ناپایدار، ساختار پنج گوش، ساختار هفت گوش، عیوب استون والز<sup>۴۴</sup>، دیواره ناپیوسته و غیره غالبا در نانو لوله های کربنی مشاهده می شود [۹۰,۹۱]. این عیوب می تواند نتیجه مستقیم پروسه تولید نانو لوله ها باشد. مطابق مشاهدات انجام گرفته توسط میکروسکوپ STM تقریبا ده درصد نانو لوله های تک لایه مورد بررسی معیوب بوده اند [۹۲]. عیوب همچنین می تواند توسط بارگذاری انجام شده بر نانو لوله ها ایجاد شود. این مسئله که عیوب در سطح نانو لوله ها توزیع شده است با دلیل قابل اثبات می باشد.

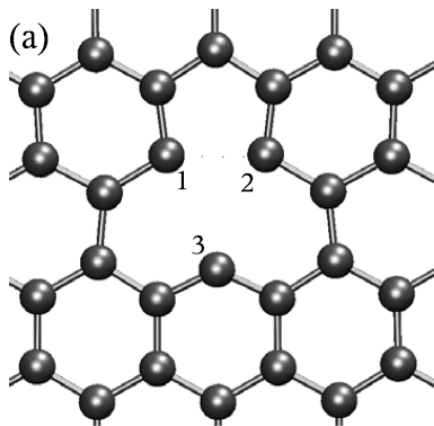
<sup>۴۴</sup> Stone-Wales



شکل ۲-۲۴: ساختار پنج گوش - هفت گوش



شکل ۲-۲۵: نانو لوله کربنی با عیب SW



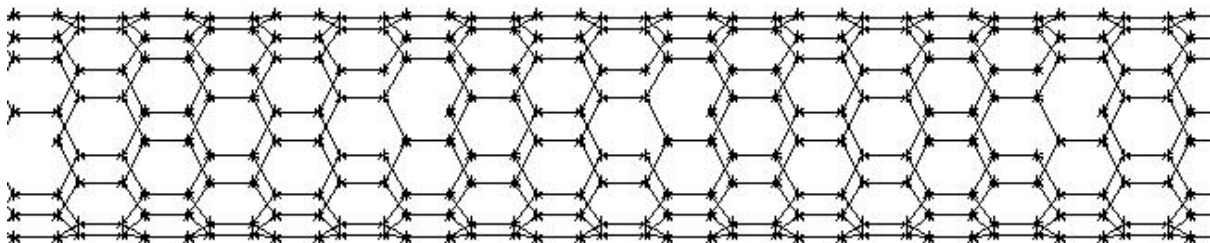
شکل ۲-۲۶: عیب حفره

## ۲-۱۰- عیب حفره

حفره یکی از متداول ترین عیوب در جامدات کریستالی می باشد و عمیقا خواص فیزیکی جامد را تحت تاثیر قرار می دهد. عیب حفره به میزان کمی در گرافیت به علت رشد معیوب و یا در حین به تعادل گرمایی رسیدن ایجاد می گردد [۶۶]. این عیوب در موادی که توسط الکترون ها و یون ها تحت تابش قرار گرفته اند بیشتر دیده می شود و معتقدند که عیب غالب در سطح گرافیت تابش داده شده نیز عیب حفره می باشد [۶۷].

عیب نقطه ای که توسط تخریب تابشی در گرافیت ایجاد می شود نیز به سبب کاربرد گرافیت به عنوان یک ماده میانجی در راکتورهای هسته ای توجه محققین زیادی را به خود جلب کرده است [۶۸]. نانو ساختارهای گوناگونی از قبیل نانو لوله های کربنی با اتصالات شاخه ای در اثر بررسی و دوباره سازی نانولوله های کربنی تک لایه با عیب حفره ساخته شده اند [۶۹].

چندین روش تجربی پیشرفته از قبیل میکروسکوپ اسکن تونلی<sup>۴۵</sup> [۶۷]، اسپکتروسکوپی پوزیترونی<sup>۴۶</sup> [۷۰] و میکروسکوپ الکترونی انتقالی<sup>۴۷</sup> [۷۱] به منظور تحقیق در ساختار و خواص فیزیکی گرافیت و نانو لوله های کربنی مورد استفاده قرار گرفته اند. در همین زمان تحقیقات گسترده ای روی تاثیر حفره در گرافیت صورت گرفته است [۷۲].



شکل ۲-۲۷: نانو لوله کربنی (۱۰,۰) با عیب حفره توزیع شده در ساختار

<sup>۴۵</sup> Scanning tunneling microscope

<sup>۴۶</sup> Positron annihilation spectroscopy

<sup>۴۷</sup> Transmission electron microscope

# فصل سوم

مدلسازی

### ۳-۱- روش دینامیک مولکولی

روش دینامیک مولکولی در سطح گسترده ای برای مدلسازی نانو مواد استفاده می گردد. دینامیک مولکولی امکان پیش بینی صحیح از برهم کنش اجزا سازنده در مقیاس اتمی را فراهم می کند. این روش شامل برآورد تحول زمانی برای یک سری از اتم های در گیر با هم می باشد که با انتگرال گیری از معادله حرکت مقارن انجام می گیرد. معادله حرکت با استفاده از قانون دوم نیوتن محاسبه می گردد [۴۰].

$$F_i = m_i \cdot a_i \quad (۱-۳)$$

به طوریکه  $F_i$  معرف نیروی وارد بر اتم  $i$  و  $m_i$  و  $a_i$  به ترتیب جرم و شتاب اتم  $i$  ام در یک سیستم متشکل از  $N$  اتم می باشند.

دینامیک مولکولی یک روش مکانیک آماری می باشد. توزیع یک سری از پیکربندی ها توسط یک مجموعه آماری و یا توابع آماری می باشد، نحوه حرکت اتم ها تحت تاثیر برهم کنش های بین اتمی محاسبه می شود. مسیر حرکت در یک فضای حالت مشتمل از ۶ بعد محاسبه می شود. در روش شبیه سازی دینامیک مولکولی مقادیر فیزیکی توسط میانگین ریاضی از مقدار انرژی آنی اتم ها بوسیله قدم های مدلسازی یکتا صورت می پذیرد. مدلسازی دینامیک مولکولی در صورتی که برای یک زمان نامحدود اجرا شود؛ می تواند به صورت کامل فضای حالت مورد نظر را مدل نماید؛ اما در دنیای واقعی زمان یک محدودیت می باشد. مقادیر فیزیکی پس از آن که مدل دینامیک مولکولی به تعادل ترمودینامیکی رسید، نمونه سازی می شوند. برهم کنش اتم های متفاوت توسط پتانسیل های اتمی بیان می شوند. مجموع انرژی پتانسیل سیستم توسط تابعی از موقعیت اتم ها در یک لحظه قابل بیان است.



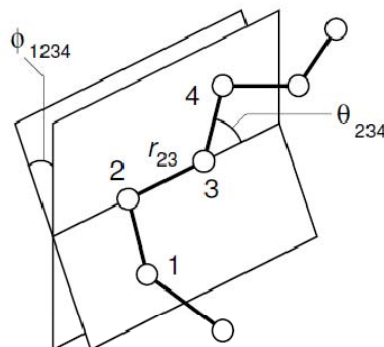
$$V = V(r_i \dots r_N) \quad (2-3)$$

جاییکه  $r_i$  موقعیت اتم  $i$  ام در یک سیستم متشکل از  $N$  اتم برای یک مرحله مشخص مدلسازی می باشد. موقعیت اتم ها نسبت به هم تعریف می شود؛ لذا پتانسیل اتمی مستقل از مختصات می باشد. نیروی وارد بر اتم  $i$  ام توسط گرادیان پتانسیل  $V$  نسبت به جابجایی اتمی قابل محاسبه است.

$$F_i = -\nabla V(r_1 \dots r_N) \quad (3-3)$$

### ۲-۳- پتانسیل های پیوندی

نوعا برای برآورد چگالی الکترون ها در سراسر اتم از محاسبات تک مولکولی شیمی- کوانتوم استفاده می شود که نهایتا ممکن است توسط سهم انرژی های جزئی و یا به صورت صحیح تر توسط سهم چند قطبی های الکترواستاتیکی مدل شود. برای مولکول ها باید برهمکنش های پیوندی درون اتمی را نیز در نظر گرفت. یک مدل دینامیک مولکولی شامل موارد ذیل می باشد [۷۵].



شکل ۳-۱: موقعیت پیوندهای کربن [۳۹]

موقعیت پیوندها در شکل مشخص شده است. در ساختار قاب مانند مولکول اتم ها فاصله ای به اندازه  $r_{ij} = |r_i - r_j|$  بین اتم های مجاور وجود دارد، در معادله یک فرم متناسب با فاصله معادل مشخص در نظر گرفته شده است. البته این شیوه تنها شیوه ممکن نیست.

$$U_{intramolecular} = \frac{1}{2} \sum_{bonds} k_{ij}^r (r_{ij} - r_{eq})^2 \quad (4-3)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{beng\ angle} k_{ijk}^\theta (\theta_{ijk} - \theta_{eq})^2$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{torsion\ angle} \sum_m k_{ijkl}^{\phi,m} (1 + \cos(m\phi_{ijkl} - \gamma_m))$$

زاویه بین  $r_i - r_j$  و  $r_j - r_k$  زاویه پیوندی  $\theta_{ijk}$  می باشد که به شکل ذیل قابل بیان است.

$$\cos\theta_{ijk} = \hat{r}_{ij} \cdot \hat{r}_{ik} = (r_{ij} \cdot r_{ij})^{-\frac{1}{2}} (r_{ik} \cdot r_{ik})^{-\frac{1}{2}} (r_{ij} \cdot r_{ik}) \quad (5-3)$$

در روابط معمولا ترم خمش به صورت کوادراتیک در نظر گرفته می شود. ترم زاویه پیش  $\phi_{ijk}$  برای سه پیوند متصل به هم به صورت ذیل تعریف می شود:

$$\cos\phi_{ijkl} = \hat{n}_{ijk} \cdot \hat{n}_{jkl} , \text{ where } n_{ijk} = r_{ij} \times r_{ik} , n_{jkl} = r_{jk} \times r_{kl} \quad (6-3)$$

با مشخص کردن دقیق پارامترهای معادله (4-3) می توان یک مجموعه میدان نیرو را شبیه سازی کرد. در واقع معادله (5-3) یک معادله ساده سازی شده می باشد. دینامیک مولکولی بر پیش بینی دقیق ساختمان و خواص متمرکز شده است و می تواند شامل ترم های اضافی از قبیل خمش پیوندی به عنوان

مثال MM<sup>۳</sup> [۷۶,۷۷] و MM<sup>۴</sup> [۷۸,۷۹] باشد. محاسبات مکانیک کوانتومی می تواند یک راهنما برای دستیابی به بهترین شبیه سازی میدان نیروی مولکولی باشد.

یک خانواده جدا از میدان های نیرو مانند آمبر<sup>۴۸</sup> [۸۰,۸۱] و چارم<sup>۴۹</sup> [۸۲] و اپلس<sup>۵۰</sup> [۸۳] برای مولکول های بزرگتر مانند پلیمرها و پروتئین ها در فاز چگال موجود است که معادله آنها ساده تر از معادله (۳-۵) بوده و پارامترهای مرتبط با استفاده از ترکیب محاسبات شیمی کوانتوم و ترموفیزیک و تقارن فاز محاسبه شده است.

### ۳-۳- برآورد نیرو

بعد از مشخص شدن تابع انرژی پتانسیل  $U(r^N)$  قدم بعدی محاسبه نیروهای اتمی می باشد.

$$f_i = - \frac{\partial}{\partial r_i} U(r^N) \quad (۷-۳)$$

### ۳-۴- انرژی های پتانسیل بین اتمی

انرژی پتانسیل جفت اتمی به پتانسیلی گفته می شود که با استفاده از موقعیت دو اتم، انرژی پتانسیل مابین آنها را بیان می کند. از جمله این پتانسیل ها می توان به پتانسیل ترسف - برنر و پتانسیل مورس اشاره کرد. از این پتانسیل ها برای به دست آوردن خصوصیات پیوندهای کووالانسی میان اتم های کربن استفاده می شود.

---

<sup>۴۸</sup> AMBER  
<sup>۴۹</sup> CHARM  
<sup>۵۰</sup> OPLS

پتانسیل بین اتمی ترسف- برنر [۸۴] که به طور گسترده ای برای بررسی رفتار سیستم های کووالانت استفاده می شود به شکل زیر بیان می شود:

$$E_b = \sum_i \sum_{j(>i)} [V_R(r_{ij}) - \overline{B_{ij}} V_A(r_{ij})], \quad (\lambda-3)$$

در رابطه (۸-۳)،  $V_R(r)$  بیان کننده ترم دافعه و  $V_A(r)$  بیان کننده ترم جاذبه می باشد. این دو ترم به صورت زیر قابل بیان می باشند.

$$V_R(r_{ij}) = \frac{f_{ij}(r_{ij}) D_{ij}^{(e)}}{S_{ij}^{-1}} e^{-\sqrt{\tau S_{ij}} \beta_{ij}(r-R_{ij}^{(e)})} \quad (9-3)$$

$$V_A(r_{ij}) = S_{ij} \frac{f_{ij}(r_{ij}) D_{ij}^{(e)}}{S_{ij} - 1} e^{-\sqrt{\tau/S_{ij}} \beta_{ij}(r-R_{ij}^{(e)})}$$

پارامترهای  $D_{ij}^{(e)}$ ،  $S_{ij}$ ،  $\beta_{ij}$  و  $R_{ij}^{(e)}$  با استفاده از خواص فیزیکی شناخته شده کربن، گرافیت، الماس به دست می آیند. تابع محدود کننده ای است که برد پتانسیل را محدود به اولین همسایگی اتم می کند.

$$f_c(r) = \begin{cases} 1 & r < R_{ij}^{(1)} \\ 0.5 \times \left\{ 1 + \cos \left[ \frac{\pi(r-R_{ij}^{(1)})}{R_{ij}^{(2)}-R_{ij}^{(1)}} \right] \right\} & R_{ij}^{(1)} < r < R_{ij}^{(2)} \\ 0 & r > R_{ij}^{(2)} \end{cases} \quad (10-3)$$

این تابع پیوسته است که دارای شعاع قطع  $R^{(1)} = 0.17 \text{ nm}$  و  $R^{(2)} = 0.2 \text{ nm}$  می باشد که فقط برای شامل شدن همسایه های اتم مورد نظر برای کربن تنظیم شده است. پارامتر B در رابطه (۸-۳) یک

کوپلینگ چند جسمی بین پیوند مورد نظر و اتم های اطراف آن پیوند را بیان می کند که توسط رابطه زیر داده می شود [۸۴]:

$$\overline{B_{ij}} = \cdot \Delta(B_{ij} + B_{ij}) + F_{ij}(N_i^{(t)}, N_j^{(t)}, N_{ij}^{conj}) \quad (11-3)$$

$$B_{ij} = \left[ 1 + \sum_{k \neq i, j} G_i(\theta_{ijk}) f_{ik}(r_{ik}) e^{\alpha_{ijk}[(r_{ij} - R_{ij}^{(e)}) - (r_{ik} - R_{ik}^{(e)})]} + H_{ij}(N_i^{(H)}, N_i^{(C)}) \right]^{-\delta} \quad (12-3)$$

در رابطه ۱۲-۳  $r_{ik}$  فاصله بین اتم اول پیوند یعنی  $i$  و اتم همسایه  $k$  می باشد.  $f_{ik}$  تابع قطع و  $\theta_{ijk}$  زاویه بین پیوندهای  $i-j$  و  $i-k$  می باشد و تابع  $G_i$  توسط رابطه ۱۶-۳ داده می شود:

$$N_i^{(H)} = \sum_{j(=hydrogen)} f_{ij}(r_{ij}) , \quad (13-3)$$

$$N_i^{(C)} = \sum_{j(=carbon)} f_{ij}(r_{ij}) ,$$

$$N_i^{(t)} = N_i^{(H)} + N_i^{(C)} .$$

مقدار  $N_i^{(t)}$  بیانگر این موضوع است که آیا همسایه های دو اتم کربن پیوند جزیی از یک ساختار می باشند؟ برای مثال اگر تمام اتم های کربن اطراف دارای مقداری کمتر از ۴ باشند؛ می توان نتیجه گرفت که پیوند جزیی از یک ساختار پیوسته است. مقدار  $N_{ij}^{conj}$  برای پیوند بین دو اتم  $i$  و  $j$  به صورت زیر می باشد:

$$N_{ij}^{conj} = 1 + \sum_{\text{carbons } k(\neq i, j)} f_{ik}(r_{ik}) F(x_{ik}) + \sum_{\text{carbons } l(\neq i, j)} f_{jl}(r_{jl}) F(x_{jl}) \quad (14-3)$$

جایی که

$$F(x_{ik}) = \begin{cases} 1 & x_{ik} \leq 2 \\ 0.5 \times \{1 + \cos[\pi(x_{ik} - 2)]\} & 2 < x_{ik} < 3 \\ 0 & x_{ik} \geq 3 \end{cases}$$

(۱۵-۳)

و

$$x_{ik} = N_k^{\text{tot}} - f_{ik}(r_{ik}).$$

$$G_i(\theta) = a. \left[ 1 + \frac{c.^\gamma}{d.^\gamma} - \frac{c.^\gamma}{d.^\gamma + (1 + \cos \theta)^\gamma} \right] \quad (۱۶-۳)$$

پارامترهای  $c$ ،  $a$ ،  $d$ ،  $\beta$ ،  $s$  و  $D^{(e)}$  توسط برنر برای انرژی پیوندی دانه های گرافیت، الماس و سازه

های مکعبی ساده به دست آمده اند و به قرار زیر می باشند [۸۵]:

$$D^{(e)} = 6 \text{ eV} , s = 1/22 , \beta = 21 \text{ nm}^{-1} , R(e) = 0.139 \text{ nm} \delta = 0.5 \quad a. = 0.00020813 ,$$

$$c. = 330 , d. = 3/5$$

که در رابطه (۱۲-۳) با توجه به ساختار لانه زنبوری شش ضلعی ، زاویه بین پیوندها ۱۲۰ درجه است.

بنابراین می توان B را محاسبه کرد.

با مشتق گیری از تابع پتانسیل بین اتمی داده شده در رابطه (۸-۳) می توان نیروی بین اتمی را

محاسبه کرد. مقدار این نیرو از رابطه (۱۸-۳) به دست می آید. با مشتق گیری مجدد ضریب سختی فنی

در کشش به دست می آید.

$$\frac{dV}{dr} = -194.63e^{-32.8r+4.56} + 863.09e^{-26.89r+3.74} \quad (17-3)$$

$$\frac{d^2V(r)}{dr^2} = 29346.55e^{-32.8r+4.56} - 2320.646e^{-26.89r+3.74} \quad (18-3)$$

این رابطه بیان کننده تغییرات ضریب سختی معادل نسبت به تغییرات فاصله دو اتم می باشد. با توجه به اینکه مشتق دوم انرژی پتانسیل باید در نقطه تعادل محاسبه شود، مقدار  $r = 0.142 \text{ nm}$  برابر با طول پیوند را در رابطه (18-3) گذاشته و بدین گونه ضریب سختی کششی معادل به دست می آید.

$$Kr = \frac{d^2V}{dr^2} |_{r.} = 4620.26 \text{ eV/nm}^2 = 755/37 \text{ N/m} \quad (19-3)$$

با روشی مشابه سختی خمشی معادل نیز به دست می آید.

$$k_{\theta} = \frac{d^2V}{d\theta^2} |_{\theta. = 120.} = 1/0.3 \text{ nN} \cdot \text{nm/rad}^2 \quad (20-3)$$

با مطالعه مراجع مقادیر دیگری نیز برای سختی های معادل کششی و خمشی مشاهده می شود. از جمله می توان به نتایج کرنل<sup>۵۱</sup> [۸۵] اشاره کرد. این اختلاف در نتایج در اثر اختلاف در مقادیر پارامترهای موجود در پتانسیل های ذکر شده به وجود می آیند. هم چنین می توان با استفاده از شکل تصحیح شده پتانسیل تجربی مورس که با اضافه کردن یک جمله پتانسیل خمش زاویه پیوندی (Bond-Angle Bending) که توسط بلیتچکو<sup>۵۲</sup> و همکارانش [۴۰] معرفی شده است، ثابت های پیوندی دیگری را به دست آورد.

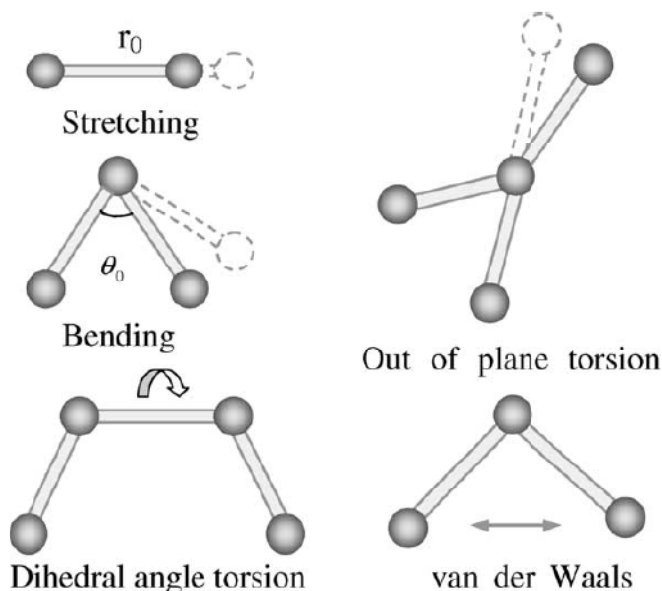
---

<sup>۵۱</sup> cornell  
<sup>۵۲</sup> Belytscho

### ۳-۵- ساخت مدل قاب مانند با استفاده از برابری انرژی ها

از نقطه نظر دینامیک مولکولی، نانو لوله های کربنی را می توان به صورت مولکول های بزرگی که از اتم های کربن تشکیل شده اند تعریف کرد. هسته اتم ها را می توان به صورت نقاط مادی در نظر گرفت. حرکت آنها تحت تاثیر نیروهای وارده شکل می گیرد. این نیروها به سبب برهم کنش های هسته-الکترون و هسته-هسته بوجود می آیند [۸۴,۴۲]. معمولا این میدان نیرو با انرژی پتانسیل های وابسته به محل قرار گیری اتم در فضا تعریف می شوند. این مسئله منحصر به مکان نسبی اتم ها در مولکول وابسته است. این انرژی ها با صرف نظر کردن از برهم کنش های الکترو استاتیکی، به صورت مجموعی از انرژی های مربوط به پیوند های والانس و واندروالس قابل بیان است.

$$U = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum (U_\phi + U_\omega) + \sum U_{VDW} \quad (21-3)$$



شکل ۳-۲: برهم کنش بین اتم های کربن که با روش دینامیک مولکولی شبیه سازی می شود [۴۲].



جایی که  $U_r$  و  $U_\theta$  و  $U_\varphi$  و  $U_\omega$  و  $U_{VDW}$  به ترتیب پتانسیل کششی و زاویه خمشی و زاویه پیچشی دو وجهی و پیچش خارج صفحه ای و پتانسیل پیوند واندروالس را نشان می دهد. تحقیقات زیادی در زمینه دینامیک مولکولی برای یافتن روابط مناسب پتانسیل های مذکور انجام شده است [۸۶,۸۷,۸۸,۸۹]. با این وجود با توجه به فرضیات مربوط به متریکال و شرایط بارگذاری فرم های گوناگونی برای این پتانسیل ها قابل استفاده است. در واقع برای سیستم های کواوالانت، سهم اصلی پتانسیل ها مربوط به چهار ترم اول معادله می شود. برای تغییر شکل های کوچک تقریب هارمونیک برای پتانسیل ها قابل پذیرش می باشد [۸۹]. به منظور ساده سازی و راحتی تحلیل معادلات مذکور با ساده ترین فرم هارمونیک به شرح ذیل بیان شده اند [۴۲].

$$U_r = \sum_{bonds} \frac{1}{2} k_r (r - r_{eq})^2 \quad (22-3)$$

جایی که  $k_r$  ثابت نیروی کششی پیوند ،  $r$  فاصله بین اتم ها و  $r_{eq}$  فاصله تعادل بین اتم ها می باشد.

$$U_\theta = \sum_{angles} \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_{eq})^2 \quad (23-3)$$

جایی که  $k_\theta$  ثابت نیروی خمشی زاویه پیوندی،  $\theta$  زاویه پیوندی و  $\theta_{eq}$  زاویه تعادل پیوندی می باشد.

$$U_\varphi + U_\omega = \sum_{dihedral} \frac{1}{2} k_\tau (\varphi - \varphi_{eq})^2 \quad (24-3)$$

جایی که  $k_\tau$  ثابت نیروی مقاومت پیچشی پیوند،  $\varphi$  زاویه پیچش پیوند و  $\varphi_{eq}$  زاویه تعادل پیچش پیوند می باشد [۳۹].

### ۳-۶- ایجاد مدل قاب مانند

در نانو لوله های کربنی، اتم های کربن با پیوندهای کووالانت با یکدیگر پیوند برقرار کرده اند و یک شبکه شش ضلعی را در دیواره های نانو لوله شکل داده اند. این پیوندهای کووالانت مشخصه های خود از قبیل طول پیوند و زاویه پیوند در یک فضای سه بعدی را دارند. زمانی که یک نانو لوله تحت تاثیر یک نیروی خارجی قرار می گیرد جابجایی اتم ها به وسیله پیوندها محدود می گردد. تغییر شکل نهایی نانو لوله نتیجه برهم کنش های این پیوندها می باشد. اگر پیوند بین اتم های کربن را به وسیله یک المان که دو اتم را به هم متصل کرده در نظر بگیریم می توانیم یک مدل فضایی قاب مانند از نانو لوله بسازیم. اتم های کربن مانند لولا های المان های متصل به هم عمل می نمایند.

در ادامه ارتباط بین ثابت های المان مکانیکی و ثابت های دینامیک مولکولی در این مدل قاب مانند شرح داده می شود. برای سادگی مدل سازی سطح مقطع المان مورد استفاده برای پیوند کربن-کربن را یکنواخت و گرد در نظر می گیریم. لذا می توان نتیجه گرفت که  $I_x = I_y = I$  و تنها نیازمند تعریف سه پارامتر  $EA$ ،  $EI$  و  $GJ$  هستیم.

به خاطر اینکه تغییر شکل قاب فضایی به دلیل تغییر در انرژی های کرنشی آن به وقوع می پیوندد، می توان سه پارامتر مذکور را بر اساس برابری انرژی ها محاسبه کرد. لازم است مورد توجه قرار گیرد که در روابط انرژی های مربوط به مکانیک مولکولی تنها برهم کنش های پیوندی هر اتم به صورت منحصر به فرد در نظر گرفته شده است لذا در ایجاد مدل فضایی نیز به همین شکل در نظر گرفته می شود. بر اساس تئوری های کلاسیک مکانیک انرژی کرنشی برای یک تیر یکنواخت و همگن به طول  $L$  که تحت تاثیر یک نیروی محوری  $N$  قرار گرفته به شرح ذیل است:

$$U_A = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = \frac{1}{2} \frac{N^2 L}{EA} = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (\Delta L)^2 \quad (۳-۲۵)$$

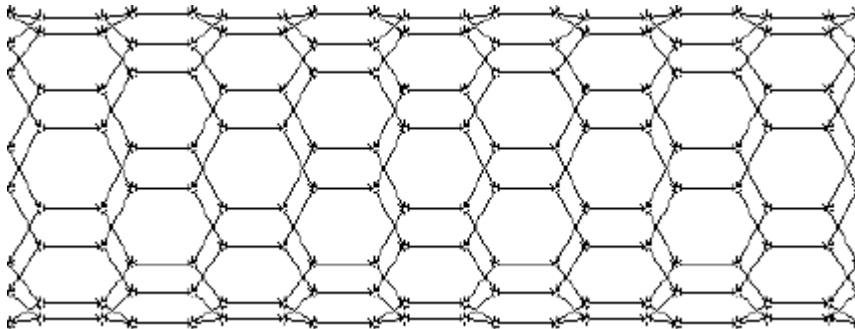
جایی که  $\Delta L$  تغییر شکل محوری می باشد. انرژی کرنشی برای یک تیر یکنواخت به طول  $L$  که تحت ممان خمشی خالص  $M$  قرار گرفته به شرح ذیل است:

$$U_M = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = \frac{2EI}{L} \alpha^2 = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (2\alpha)^2 \quad (26-3)$$

جایی که  $\alpha$  معرف زاویه چرخش در انتهای تیر است. انرژی کرنشی برای یک تیر یکنواخت به طول  $L$  که تحت تاثیر پیچش خالص  $T$  قرار گرفته است به شرح ذیل است:

$$U_T = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{1}{2} \frac{T^2 L}{GJ} = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\Delta\beta)^2 \quad (27-3)$$

جاییکه  $\Delta\beta$  معرف زاویه پیچش نسبی دو انتهای تیر می باشد.



شکل ۳-۳: مدل ساخته شده برای نانو لوله کربنی تک لایه (۸,۰)

با توجه به روابط (۲۲-۳) و (۲۵-۳) هر دو ترم  $U_A$  و  $U_T$  معرف انرژی کششی، روابط (۲۳-۳) و (۲۶-۳) هر دو ترم  $U_M$  و  $U_\theta$  معرف انرژی خمشی و روابط (۲۴-۳) و (۲۷-۳) هر دو ترم  $U_T$  و  $U_\tau$  معرف زاویه پیچشی هستند. می توان  $2\alpha$  را معادل تغییرات زاویه پیوندی  $\Delta\theta$ ،  $\Delta L$  را معادل  $\Delta r$  و  $\Delta\beta$  را معادل  $\Delta\phi$

در نظر گرفت. با مقایسه روابط (۲۲-۳) تا (۲۷-۳) مربوط به انرژی ها می توان یک رابطه مستقیم بین پارامترهای مکانیک جامدات  $EA$ ،  $EI$  و  $GJ$  و مکانیک مولکولی  $k_r$ ،  $k_\theta$  و  $k_\tau$  برقرار کرد.

$$\frac{EI}{L} = k_r, \quad \frac{EI}{L} = k_\theta, \quad \frac{GJ}{L} = k_\tau \quad (۲۸-۳)$$

رابطه (۲۸-۳) نحوه استفاده از تئوری های مکانیک جامدات در مدل سازی نانو لوله های کربنی و فلورن ها نشان می دهد. تا زمانی که ثابت های انرژی های دینامیک مولکولی  $k_r$ ،  $k_\theta$  و  $k_\tau$  مشخص باشند می توان ثابت های المان های مورد استفاده در مدل فضایی  $EA$ ،  $EI$  و  $GJ$  را بدست آورد [۴۲].

## فصل چہارم

روش حل

## ۴-۱- روش حل

برای یک سیستم نامیرا معادله حرکت به فرم ذیل می باشد:

$$[M]\{\ddot{y}\} + [K]\{y\} = \cdot \quad (۱-۴)$$

که در معادله فوق ماتریس  $[M]$  و ماتریس  $[K]$  به ترتیب ماتریس جرم و سفتی کلی سیستم و  $\{y\}$  و  $\{\ddot{y}\}$  به ترتیب بردار جابجایی و شتاب نودها می باشند. ماتریس کلی سفتی را می توان از ترکیب ماتریس های سفتی المان ها به دست آورد به صورت  $[K] = \sum_{e=1}^n [K]^e$  که در رابطه  $n$  تعداد المان ها می باشد. پروسه ترکیب با توجه به تکنیک های المان محدود قابل انجام است [۲۲]. ماتریس  $[K]^e$  با توجه به مدلسازی انجام شده به شکل زیر محاسبه می شود:

$$[K]^e = \begin{bmatrix} [k_{ii}] & [k_{ij}] \\ [k_{ji}] & [k_{jj}] \end{bmatrix} \quad (۲-۶)$$

که ماتریسهای فرعی  $[k_{ii}]$  و  $[k_{ij}]$  و  $[k_{ji}]$  و  $[k_{jj}]$  ماتریس سختی مربوط به المان  $i$ - $j$  را نشان می دهند.

$$K_{ii} = \begin{bmatrix} \frac{EA}{L} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \frac{12EI_x}{L^3} & \cdot & \cdot & \cdot & \frac{6EI_x}{L^2} \\ \cdot & \cdot & \frac{12EI_y}{L^3} & \cdot & \frac{-6EI_y}{L^2} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \frac{GJ}{L} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \frac{-6EI_y}{L^2} & \cdot & \frac{4EI_y}{L} & \cdot \\ \cdot & \frac{6EI_x}{L^2} & \cdot & \cdot & \cdot & \frac{4EI_x}{L} \end{bmatrix}$$

$$K_{ij} = \begin{bmatrix} -EA/L & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & -12EI_x/L^3 & \cdot & \cdot & \cdot & -6EI_x/L^2 \\ \cdot & \cdot & -12EI_y/L^3 & \cdot & -6EI_y/L^2 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & -GJ/L & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 6EI_y/L^2 & \cdot & 4EI_y/L & \cdot \\ \cdot & -6EI_x/L^2 & \cdot & \cdot & \cdot & 4EI_x/L \end{bmatrix}$$

$$K_{jj} = \begin{bmatrix} EA/L & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 12EI_x/L^3 & \cdot & \cdot & \cdot & -6EI_x/L^2 \\ \cdot & \cdot & 12EI_y/L^3 & \cdot & 6EI_y/L^2 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & GJ/L & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 6EI_y/L^2 & \cdot & 4EI_y/L & \cdot \\ \cdot & -6EI_x/L^2 & \cdot & \cdot & \cdot & 4EI_x/L \end{bmatrix}$$

ماتریس جرم کلی  $[M]$  را می توان از ترکیب ماتریس جرم المان ها بدست آورد، از جرم الکترون ها در مقابل جرم هسته صرف نظر شده است. ضرایب مربوط به دوران پیچشی  $\frac{1}{3}m_c r_c^2$  در ماتریس جرم صفر در نظر گرفته شده اند [۲۵] تنها ترم مربوط به جابجایی های انتقالی مد نظر گرفته شده است. به این شکل ماتریس کلی به صورت ذیل به دست می آید:

$$[M]^e = \text{diag} \left[ \frac{m_c}{3} \quad \frac{m_c}{3} \quad \frac{m_c}{3} \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \right] \quad (3-4)$$

ضریب  $\frac{1}{\rho}$  در معادله مذکور به سبب اینکه هر اتم کربن در ساختار نانو لوله با سه اتم همسایه خود پیوند برقرار می کند و سهم هر المان از جرم هسته این مقدار می باشد منظور شده است. در این صورت فرکانس ارتعاش و شکل مد های مربوط را می توان با حل معادله مقدار ویژه ذیل بدست آوریم.

$$([K]_s - \omega^2 [M]_s)\{y_p\} = 0 \quad (4-4)$$

که  $[K]_s$  و  $[M]_s$  ماتریس سختی و جرم کلی کاهش مرتبه یافته و  $\{y_p\}$  بردار جابجایی مربوط به مختصات اولیه سیستم هستند.

به منظور حل و بدست آوردن فرکانس ارتعاش آزاد نانو لوله های کربنی از روش آنالیز کاهش بهره برده شده که اساس حل به شرح ذیل می باشد.

در این روش انرژی پتانسیل سیستم حفظ می گردد و تاثیر انرژی جنبشی نیز در قیاس با روش های مشابه بهبود داده شده است. فشرده سازی انرژی جنبشی برای سیستم های با فرکانس مد پایین تاثیر کمتری بر نتایج دارد نسبت به سیستم های با فرکانس مد بالا. در این روش می بایست در ابتدای حل تعداد درجات آزادی مد نظر برای سیستم تعریف شود. فرم کاهش یافته به شکل ذیل می باشد:

$$[\hat{K}]\{\hat{\phi}_1\} = \lambda_i[\hat{M}]\{\hat{\phi}_1\} \quad (5-4)$$

به طوری که :

$[\hat{K}]$  : ماتریس کاهش یافته سختی

$\{\hat{\phi}_1\}$  : بردار ویژه نامعلوم



$\lambda_i$  : مقدار ویژه نامعلوم

$[\hat{M}]$  : ماتریس کاهش یافته جرم

برای حل معادله فوق می بایست به فرم استاندارد تبدیل شود که در این فرم ماتریس  $A$  می بایست متقارن باشد به شکل ذیل این تبدیل صورت می پذیرد:

$$[A]\{\psi\} = \lambda\{\psi\} \quad (۶-۴)$$

$$[\hat{M}]^{-1}[\hat{K}]\{\hat{\phi}_1\} = \lambda_i\{\hat{\phi}_1\} \quad (۷-۴)$$

به روش جولسکی عمل می نماییم  $[L][L]^T$  :

$$[L]^T[L]^{-1}[\hat{K}]\{\hat{\phi}\} = \lambda\{\hat{\phi}\} \quad (۸-۴)$$

$$\{\hat{\phi}\} = [L]^{-T}\{\psi\} \quad (۹-۴)$$

$$[L]^{-1}[\hat{K}][L]^{-T}\{\psi\} = \lambda\{\psi\} \quad (۱۰-۴)$$

یا

$$[A]\{\psi\} = \lambda\{\psi\} \quad (۱۱-۴)$$

به طوری که:

$$[A] = [L]^{-1}[\hat{K}][L]^{-T} \quad (۱۲-۴)$$

با این روش تقارن ماتریس  $A$  نیز حفظ می شود.

تبدیل ماتریس A به فرم تریدیاگونال:

بدین منظور از روش هوس هولدرز با تبدیلات مشابه استفاده می نماییم:

$$[B] = [T]^T[A][T] \quad (۱۳-۴)$$

[B] : ماتریس تریدیاگونال A

[T] : ماتریسی که به منظور بدست آوردن تریدیاگونال با تکرار ساخته شده است.

مسئله مقدار ویژه به مسئله ذیل کاهش می یابد:

$$[B]\{\psi\} = \lambda\{\psi\} \quad (۱۴-۴)$$

باید مورد توجه قرار گیرد که طی این تبدیل ها مقادیر ویژه تغییر خواهند نمود در حالی که بردارهای

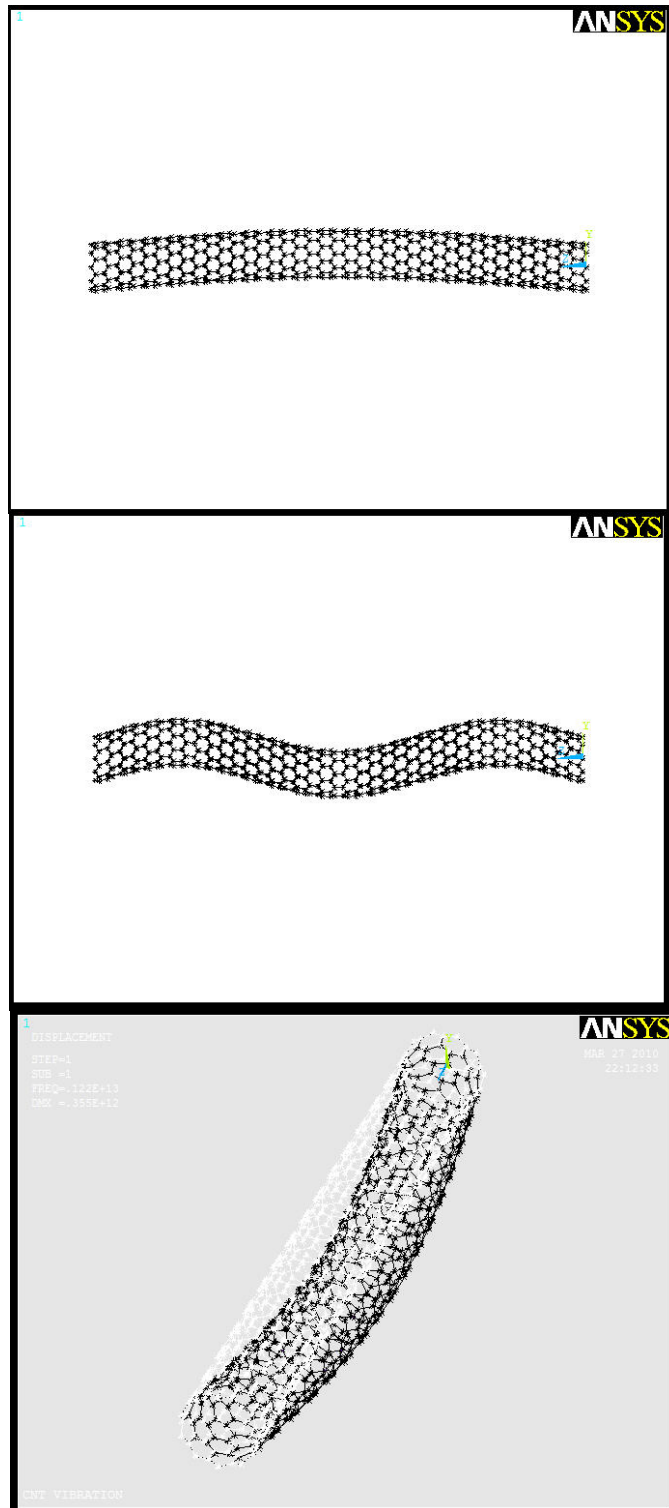
ویژه ثابت خواهند ماند و به صورت ذیل قابل دستیابی می باشد [۲۰]:

$$\{\hat{\phi}_i\} = [L]^{-T}[L]\{\psi_i\} \quad (۱۵-۴)$$

در این تحقیق از نرم افزار ANSYS به منظور مدل سازی و تحلیل استفاده شده است. به این شکل که مدل سازی بر اساس جانمایی اتم های کربن در ساختار نانو لوله انجام پذیرفته است. پیوندهای بین اتم های کربن نیز مطابق آنچه در فصل مدل سازی آمد شبیه سازی شده اند. به منظور شبیه سازی جرم اتم ها در محیط نرم افزار از المان جرم ۲۱ Mass استفاده شده است. برای مدل سازی پیوند بین اتم های کربن از المان ۲۴ Beam بهره برده ایم.

روش تحلیل مدل نیز بر اساس تئوری کاهش که قبلا شرح داده شده است انجام گرفته است. درجات آزادی برای نودهای جرم شش درجه مد نظر گرفته شده است.

در شکل ۴-۱ برخی از مدهای ارتعاشات آزاد نانو لوله کربنی (۸,۰) آمده است:



شکل ۴-۱ برخی نتایج حاصل از تحلیل به روش فوق در نرم افزار ANSYS

## فصل پنجم

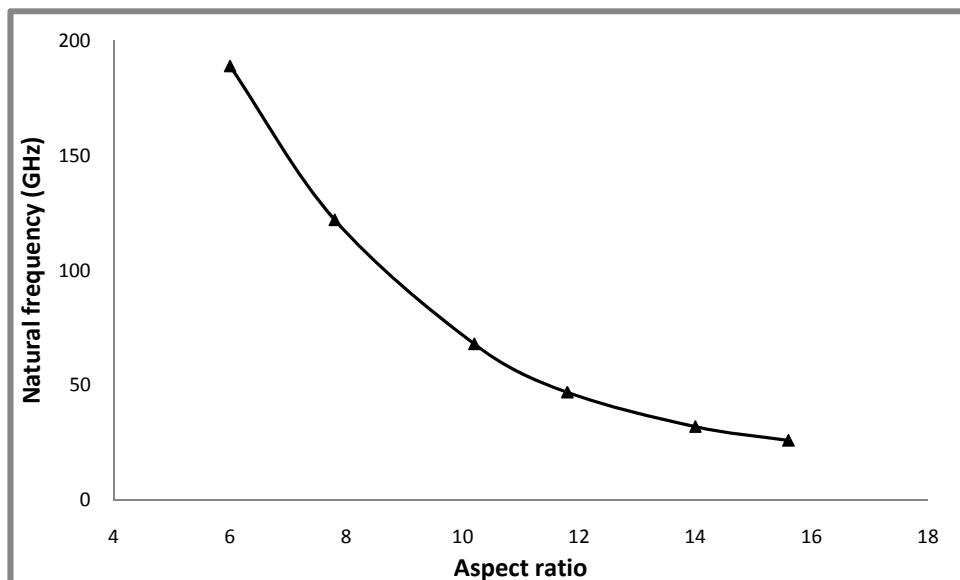
بررسی ارتعاشی نانولوله های کربنی ایده ال

در این فصل با استفاده از مدل سازی انجام شده و روش حل مورد ذکر فرکانس طبیعی نانو لوله های کربنی تک لایه مورد بررسی قرار می گیرد و در انتها به منظور صحت گذاری بر مدل سازی انجام گرفته نتایج با نتایج حاصل از تحقیق مشابه مقایسه می گردد.

### ۵-۱- نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ (۸,۰)

در این قسمت تحلیل ارتعاشی نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ با بردار کایرال (۸,۰) تحت دو شرایط مرزی دوسر درگیر و کانتی لور انجام شده است. تحلیل ارتعاشی برای نسبت طول به قطرهای مختلف انجام شده است.

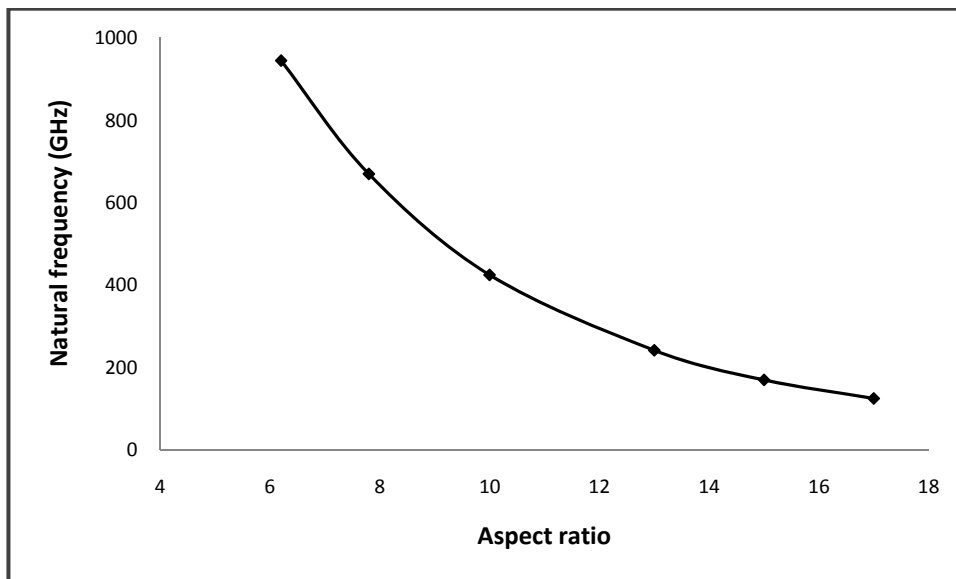
شکل ۵-۱ فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله کربنی زیگزاگ (۸,۰) را برحسب نسبت طول به قطر و برای شرایط مرزی کانتی لور نمایش می دهد.



شکل ۵-۱ فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله کربنی تک لایه (۸,۰) با شرایط مرزی کانتی لور

شکل ۲-۵ فرکانس طبیعی نانو لوله های کربنی تک لایه زیگزاگ  $(۸,۰)$  را با شرایط مرزی دو سر

درگیر و نسبت طول به قطر های مختلف نشان می دهد.

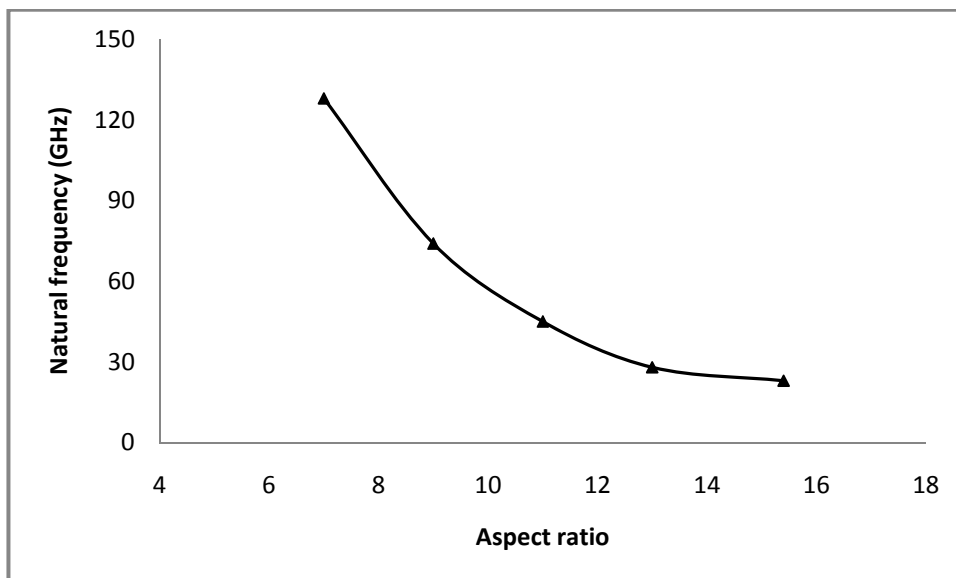


شکل ۲-۵ فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله کربنی تک لایه  $(۸,۰)$  با شرایط مرزی دو سر درگیر

### ۲-۵- نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ $(۱۰,۰)$ :

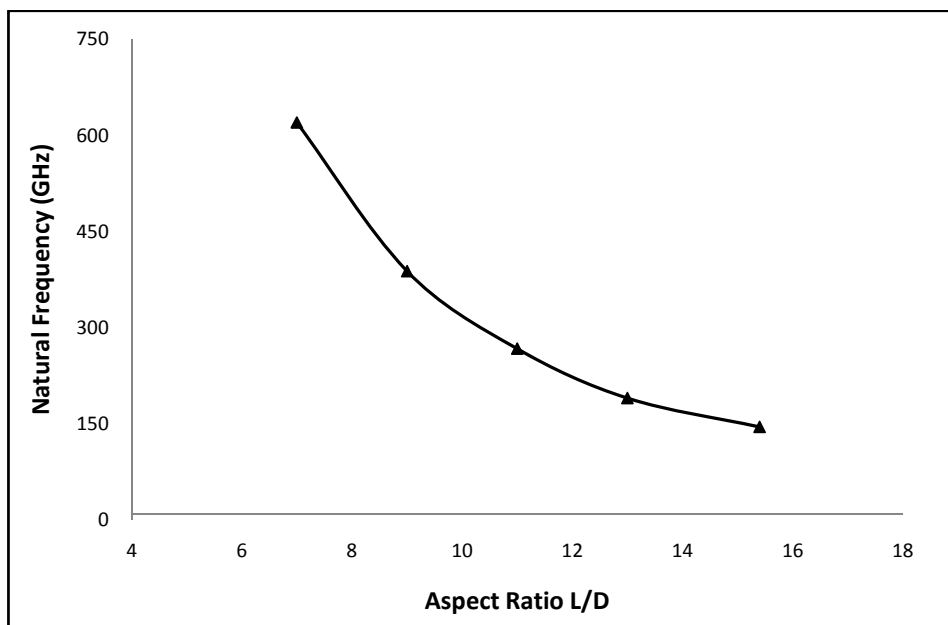
شکل ۳-۵ فرکانس طبیعی نانو لوله های کربنی تک لایه زیگزاگ  $(۱۰,۰)$  را با شرایط مرزی کانتی

لور و نسبت طول به قطر های مختلف نشان می دهد.



شکل ۳-۵ فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله کربنی تک لایه (۱۰۰) با شرایط مرزی کانتی لور

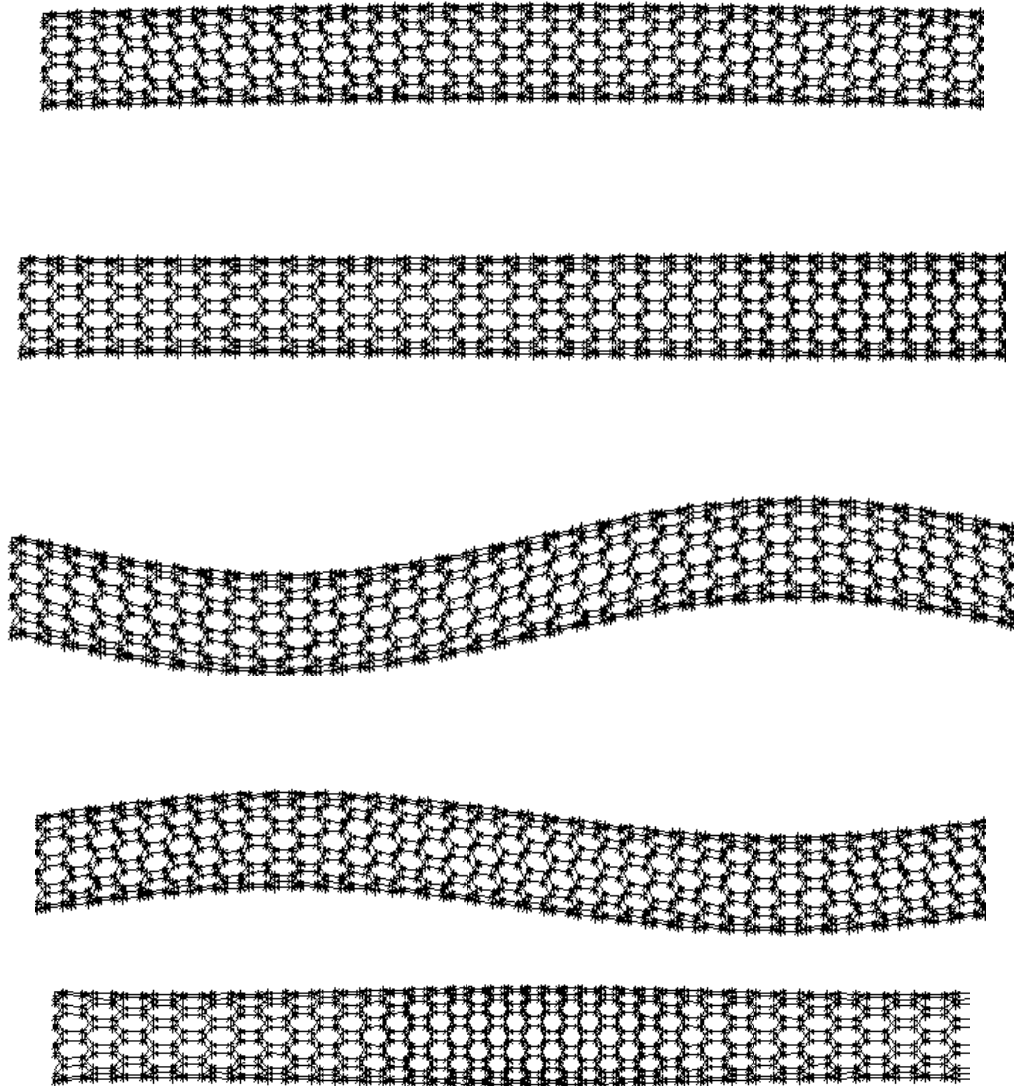
شکل ۴-۵ فرکانس طبیعی نانو لوله های کربنی تک لایه زیگزاگ (۱۰,۰) را با شرایط مرزی دو سر درگیر و نسبت طول به قطر های مختلف نشان می دهد.



شکل ۴-۵ فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله کربنی تک لایه (۱۰,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر



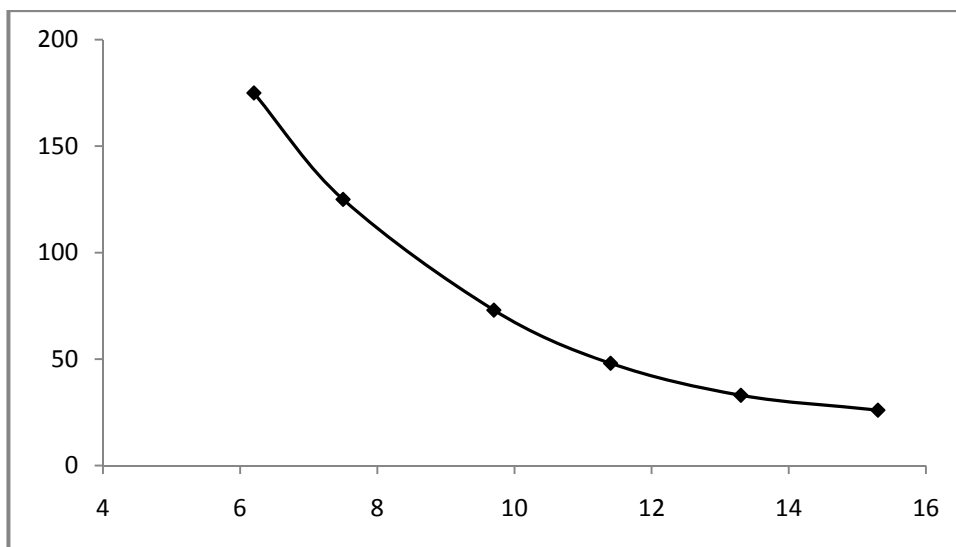
در شکل ۵-۵ برخی از شکل مد های ارتعاش نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ  $(10,0)$  با شرایط مرزی دو سر درگیر قابل ملاحظه است.



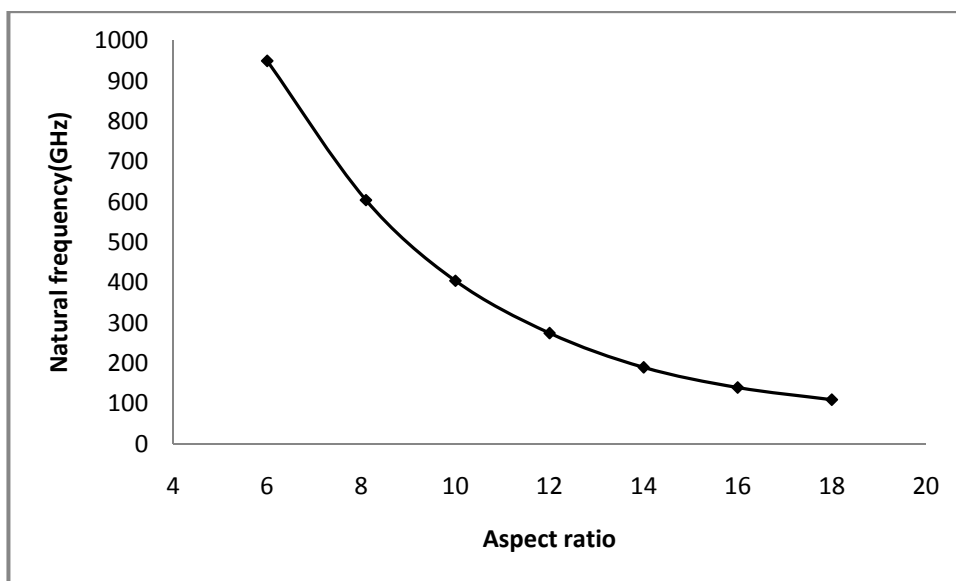
شکل ۵-۵: شکل مودهای ارتعاش نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ  $(10,0)$  با شرایط مرزی دو سر درگیر

### ۵-۳- نتایج تحقیق لی و چو برای نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ (۸,۰):

در شکل ۵-۶ نتایج مربوط به تحقیق لی و چو درباره برآورد فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله های کربنی (۸,۰) با شرایط مرزی کانتی لور مشاهده می شود. در شکل ۵-۷ نتایج لی و چو برای نانو لوله کربنی تک لایه (۸,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر نشان داده شده است.

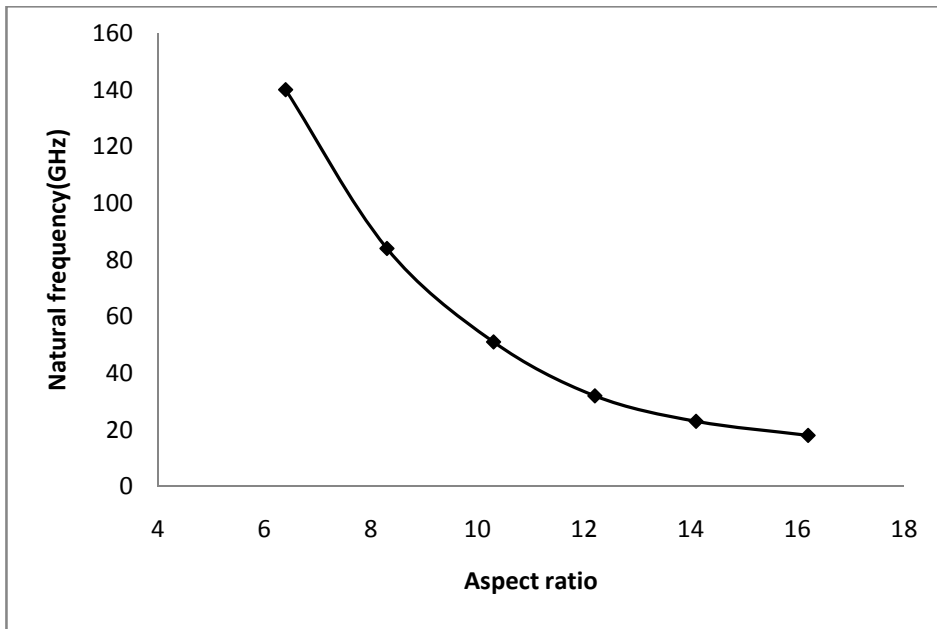


شکل ۵-۶ نتایج لی و چو برای فرکانس طبیعی نانو لوله کربنی تک لایه (۸,۰) با شرایط مرزی کانتی لور

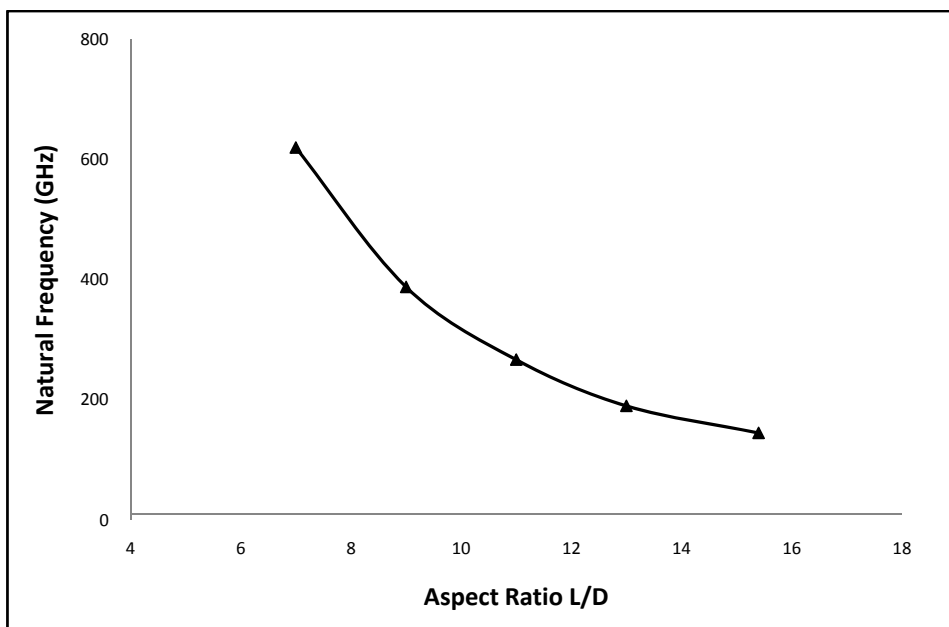


شکل ۵-۷ نتایج لی و چو برای نانو لوله کربنی (۸,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر

۴-۵- نتایج لی و چو برای نانولوله کربنی تک لایه زیگزاگ (۱۰,۰):



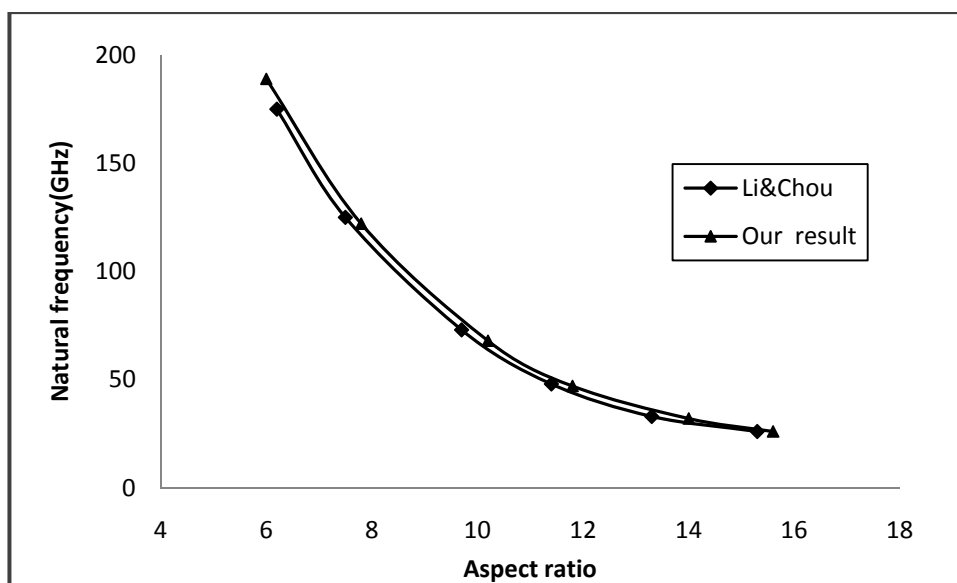
شکل ۵-۸: نتایج لی و چو برای فرکانس طبیعی نانولوله کربنی (۱۰,۰) با شرایط مرزی کانتی لور



شکل ۵-۹: نتایج لی و چو برای فرکانس طبیعی نانولوله کربنی (۱۰,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر

## ۵-۵- مقایسه نتایج حاصل از دو تحقیق برای نانو لوله کربنی (۸,۰)

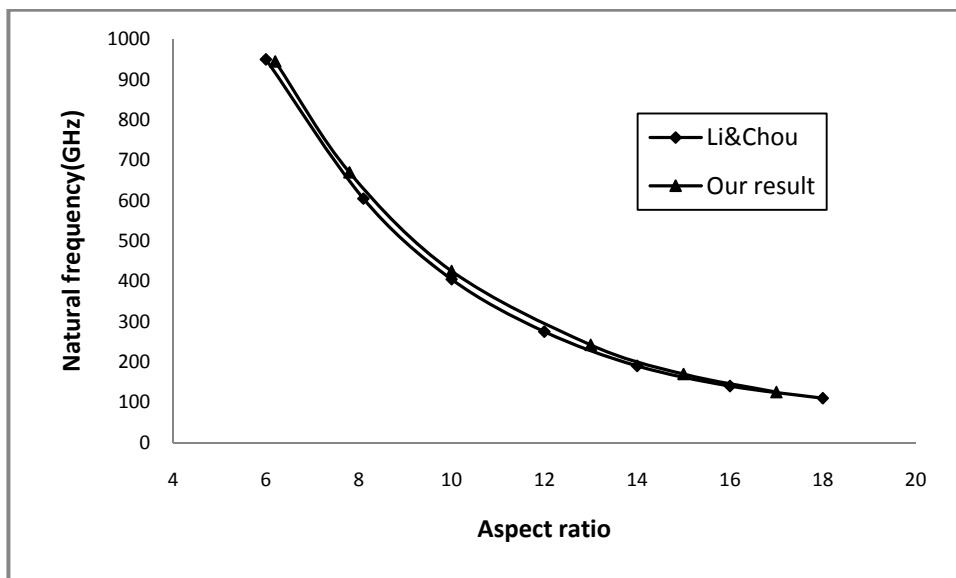
در شکل های ۵-۱۰ و ۵-۱۱ نتایج مربوط به بررسی لی و چو و نتایج حاصل از این تحقیق برای تحلیل ارتعاشی نانو لوله های کربنی تک لایه زیگزاگ (۸,۰) تحت دو شرایط مرزی مختلف آمده است.



شکل ۵-۱۰ مقایسه نتایج برای نانو لوله کربنی تک لایه (۸,۰) با شرایط مرزی کانتی لور

جدول ۵-۱: مقایسه نانو لوله کربنی (۸,۰) با شرایط مرزی یک مرزی کانتی لور

نتایج Li & Chou		نتایج تحقیق حاضر	
نسبت منظری	فرکانس طبیعی	نسبت منظری	فرکانس طبیعی
۶/۲	۱۷۵	۶	۱۸۹
۷/۵	۱۲۵	۷/۸	۱۲۲
۹/۷	۷۳	۱۰/۲	۶۸
۱۱/۴	۴۸	۱۱/۸	۴۷
۱۳/۳	۳۳	۱۴	۳۲
۱۵/۳	۲۶	۱۵/۶	۲۶



شکل ۵-۱۱ مقایسه نتایج برای نانو لوله کربنی تک لایه (۸,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر

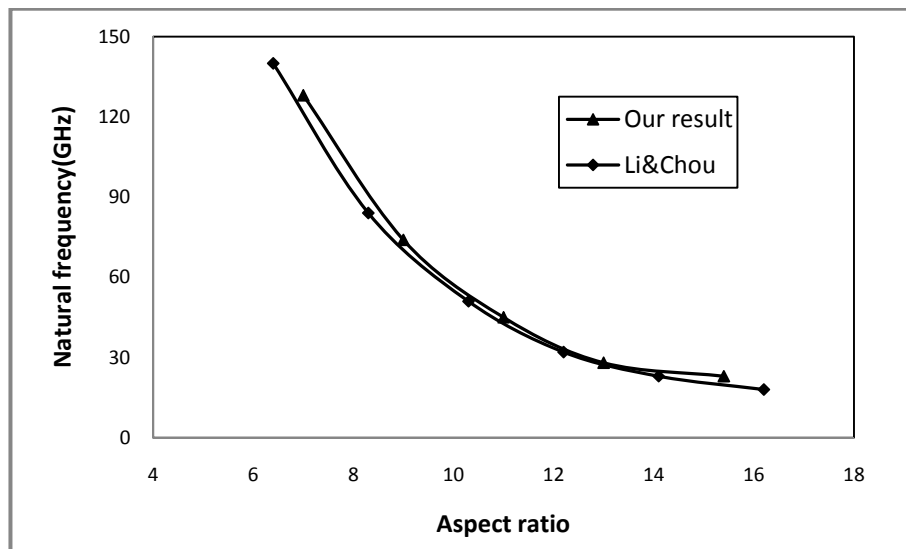
جدول ۵-۲: مقایسه نتایج نانو لوله کربنی (۸,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر

نتایج Li & Chou		نتایج تحقیق حاضر	
نسبت منظری	فرکانس طبیعی	نسبت منظری	فرکانس طبیعی
۶	۹۵۰	۶/۲	۹۴۵
۸/۱	۶۰۵	۷/۸	۶۷۰
۱۰	۴۰۵	۱۰	۴۲۵
۱۲	۲۷۵	۱۳	۲۴۲
۱۴	۱۹۰	۱۵	۱۷۰
۱۶	۱۴۰	۱۷	۱۲۵
۱۸	۱۱۰		

با مقایسه نتایج حاصل از دو تحقیق می توان نزدیکی نتایج را مشاهده کرد، لذا بدین شکل می توان از مدل سازی و روش حل انتخاب شده برای تحلیل ارتعاشی نانو لوله های کربنی معیوب اطمینان یافت.

#### ۵-۶- مقایسه نتایج حاصل از دو تحقیق برای نانو لوله کربنی (۱۰,۰):

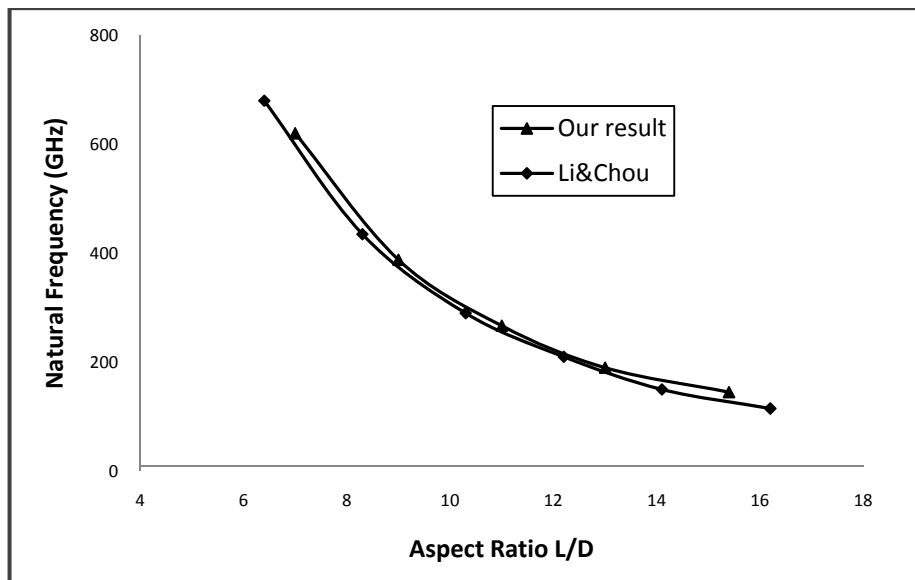
با مشاهده شکل های ۵-۱۲ و ۵-۱۳ می توان نزدیکی نتایج دو تحقیق برای بررسی ارتعاشی نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ با بردار کایرال (۱۰,۰) و شرایط مرزی کانتی لور و دو سر درگیر را مشاهده کرد. لذا می توان از صحت مدل سازی و روش تحلیل اطمینان یافت.



شکل ۵-۱۲ مقایسه نتایج حاصل از دو تحقیق برای نانو لوله کربنی تک لایه (۱۰,۰) با شرایط مرزی کانتی لور

جدول ۳-۵: مقایسه نانو لوله کربنی (۱۰ و ۰) با شرایط مرزی یک سر درگیر

نتایج Li & Chou		نتایج تحقیق حاضر	
نسبت	فرکانس	نسبت	فرکانس
منظری	طبیعی	منظری	طبیعی
۶/۴	۱۴۰	۷	۱۲۸
۸/۳	۸۴	۹	۷۴
۱۰/۳	۵۱	۱۱	۴۵
۱۲/۲	۳۲	۱۳	۲۸
۱۴/۱	۲۳	۱۵/۴	۲۳
۱۶/۲	۱۸		



شکل ۳-۵: مقایسه نتایج حاصل از دو تحقیق برای نانو لوله کربنی تک لایه (۱۰, ۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر

جدول ۴-۵: مقایسه نانو لوله کربنی (۱۰ و ۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر

نتایج Li & Chou		نتایج تحقیق حاضر	
نسبت منظری	فرکانس طبیعی	نسبت منظری	فرکانس طبیعی
۶/۴	۶۸۰	۷	۶۲۰
۸/۳	۴۳۵	۹	۳۸۸
۱۰/۳	۲۹۰	۱۱	۲۶۷
۱۲/۲	۲۱۰	۱۳	۱۹۰
۱۴/۱	۱۵۰	۱۵/۴	۱۴۵
۱۶/۲	۱۱۵		



## فصل ششم

نتایج بررسی ارتعاشی نانو لوله های کربنی تک لایه

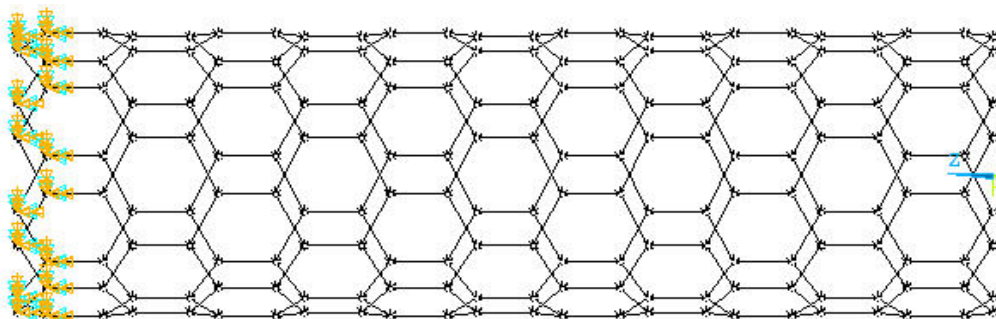
با یک عیب حفره

## ۱-۶- بررسی ارتعاشی نانو لوله کربنی تک لایه با یک عیب حفره

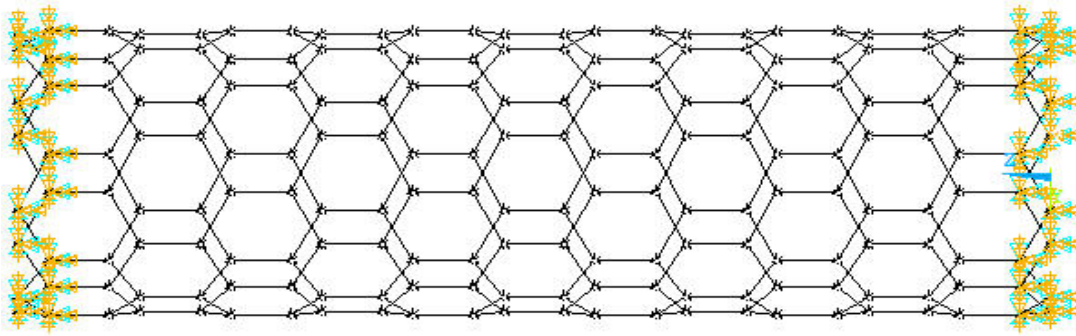
در این بخش نتایج حاصل از بررسی ارتعاشی نانو لوله های کربنی تک لایه با یک عیب حفره آمده است. برای نشان دادن تاثیر پارامترهای مختلف بر ارتعاشات طبیعی نانو لوله های کربنی تک لایه نتایج حاصل از تحلیل ارتعاشی در گراف هایی آمده است. در این گراف ها تغییرات فرکانس طبیعی نانو لوله ها که از رابطه ۱-۶ قابل محاسبه است بر حسب مکان عیب و نسبت طول به قطر برای نانو لوله های کربنی تک لایه قابل مشاهده است. در گراف های مختلف نانو لوله ها با کایرالیته های مختلف و شرایط مرزی کانتی لور و دو سر درگیر نیز مورد بررسی قرار گرفته اند. تغییرات فرکانس طبیعی از رابطه ذیل محاسبه شده است.

$$\Delta f = f_p - f_a \quad (1-6)$$

که در رابطه فوق  $f_p$  فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله بدون عیب و  $f_a$  فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله معیوب می باشد.

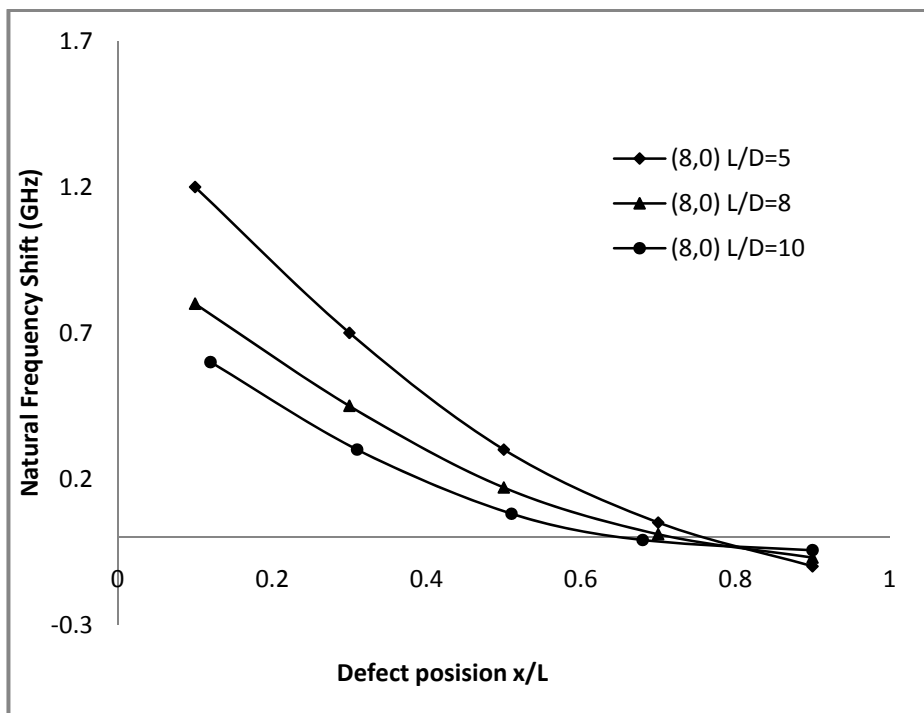


شکل ۱-۶: شرایط مرزی کانتی لور



شکل ۶-۲: شرایط مرزی دو سر درگیر

در شکل ۶-۳ تغییرات فرکانس طبیعی نانو لوله های کربنی زیگزاگ با بردار کایرال  $(8,0)$  و نسبت طول به قطر متفاوت قابل ملاحظه است. شرایط مرزی برای نانو لوله های مذکور کانتی لور در نظر گرفته شده است.

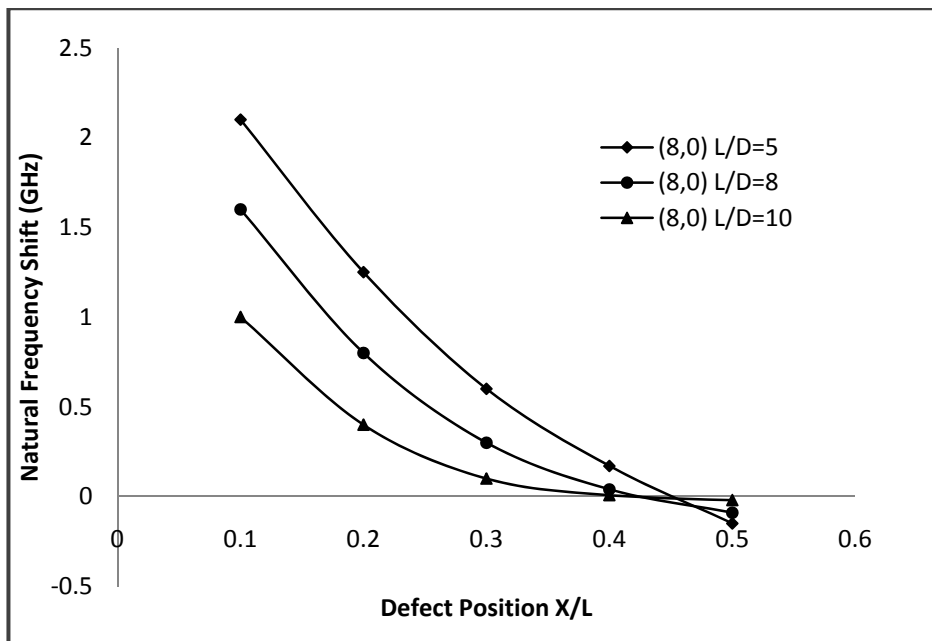


شکل ۶-۳: نانو لوله کربنی  $(8,0)$  با یک عیب حفره و شرایط مرزی کانتی لور

جدول ۶-۱: نانو لوله کربنی (۸,۰) با یک عیب حفره و شرایط مرزی کانتی لور

L/D=۵		L/D=۸		L/D=۱۰	
X/L	تغییرات فرکانس	X/L	تغییرات فرکانس	X/L	تغییرات فرکانس
۰/۱	۱/۲	۰/۱	۰/۸	۰/۱۲	۰/۶
۰/۳	۰/۷	۰/۳	۰/۴۵	۰/۳۱	۰/۳
۰/۵	۰/۳	۰/۵	۰/۱۷	۰/۵۱	۰/۰۸
۰/۷	۰/۰۵	۰/۷	۰/۰۱	۰/۶۸	-۰/۰۱
۰/۹	-۰/۱	۰/۹	-۰/۰۷	۰/۹	-۰/۰۴۵

در شکل ۴-۶ تغییرات فرکانس طبیعی ارتعاش برای نانو لوله های کربنی تک لایه زیگزاگ با بردار کایرال (۸,۰) آمده است. شرایط مرزی دو سر در گیر در این حالت در نظر گرفته شده است.

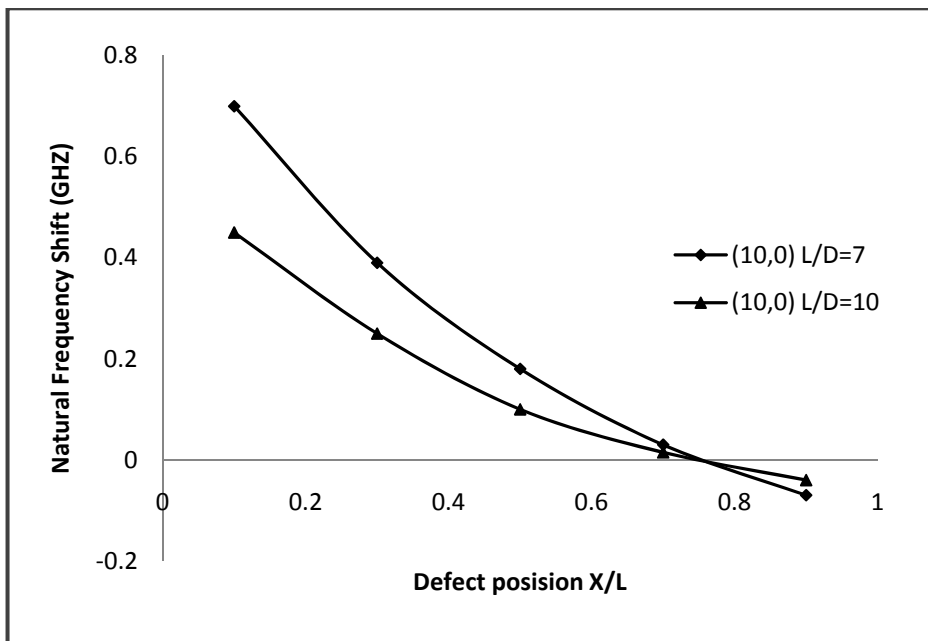


شکل ۴-۶: نانو لوله کربنی (۸,۰) با یک عیب حفره و شرایط مرزی دو سر درگیر

جدول ۶-۲: نانو لوله کربنی (۸,۰) با یک عیب حفره و شرایط مرزی دو سر درگیر

L/D=۵		L/D=۸		L/D=۱۰	
X/L	تغییرات فرکانس	X/L	تغییرات فرکانس	X/L	تغییرات فرکانس
۰/۱	۲/۱	۰/۱	۱/۶	۰/۱	۱
۰/۲	۱/۲۵	۰/۲	۰/۸	۰/۲	۰/۴
۰/۳	۰/۶	۰/۳	۰/۳	۰/۳	۰/۱
۰/۴	۰/۱۷	۰/۴	۰/۰۴	۰/۴	۰/۰۰۸
۰/۵	-۰/۱۵	۰/۵	-۰/۰۹	۰/۵	-۰/۰۲

در شکل ۶-۵ تغییرات فرکانس طبیعی ارتعاش برای نانو لوله های کربنی تک لایه زیگزاگ با بردار کایرال (۱۰,۰) آمده است. شرایط مرزی کانتی لور در نظر گرفته شده است.



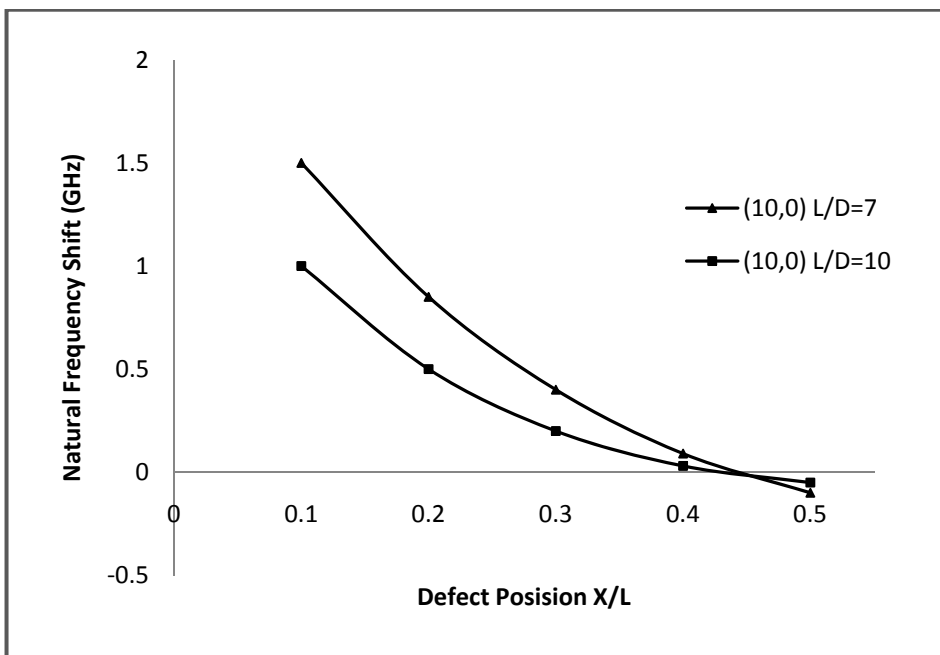
شکل ۶-۵: نانو لوله کربنی (۱۰,۰) با یک عیب حفره و شرایط مرزی کانتی لور

جدول ۳-۶: نانو لوله کربنی (۱۰,۰) با یک عیب حفره و شرایط مرزی کانتی لور

کانتی لور		
نسبت منظری	تغییرات فرکانس	موقعیت عیب
L/D=۷	۰/۷	۰/۱
	۰/۳۹	۰/۳
	۰/۱۸	۰/۵
	۰/۰۳	۰/۷
	-۰/۰۷	۰/۹
L/D=۱۰	۰/۴۵	۰/۱
	۰/۲۵	۰/۳
	۰/۱	۰/۵
	۰/۰۱۵	۰/۷
	-۰/۰۴	۰/۹

در شکل ۶-۶ تغییرات فرکانس طبیعی ارتعاش برای نانو لوله های کربنی تک لایه زیگزاگ با بردار

کایرال (۱۰,۰) آمده است. شرایط مرزی دو سر در گیر در این حالت در نظر گرفته شده است.



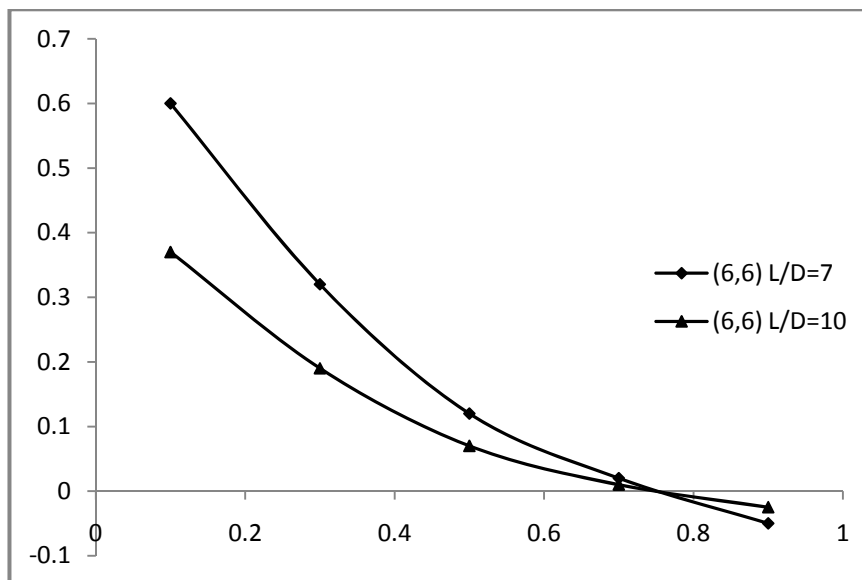
شکل ۶-۶: نانو لوله کربنی (۱۰,۰) با یک عیب حفره و شرایط مرزی دو سردرگیر

جدول ۶-۴: نانو لوله کربنی (۱۰,۰) با یک عیب حفره و شرایط مرزی دو سردرگیر

دو سردرگیر		
نسبت منطری	تغییرات فرکانس	موقعیت عیب
L/D=7	۱/۵	۰/۱
	۰/۸۵	۰/۲
	۰/۴	۰/۳
	۰/۰۹	۰/۴
	-۰/۱	۰/۵
L/D=۱۰	۱	۰/۱
	۰/۵	۰/۲
	۰/۲	۰/۳
	۰/۰۳	۰/۴
	-۰/۰۵	۰/۵

در شکل ۶-۷ تغییرات فرکانس طبیعی ارتعاش برای نانو لوله های کربنی تک لایه آرمچیر با بردار

کایرال (۶,۶) آمده است. شرایط مرزی کانتی لور در این حالت در نظر گرفته شده است.



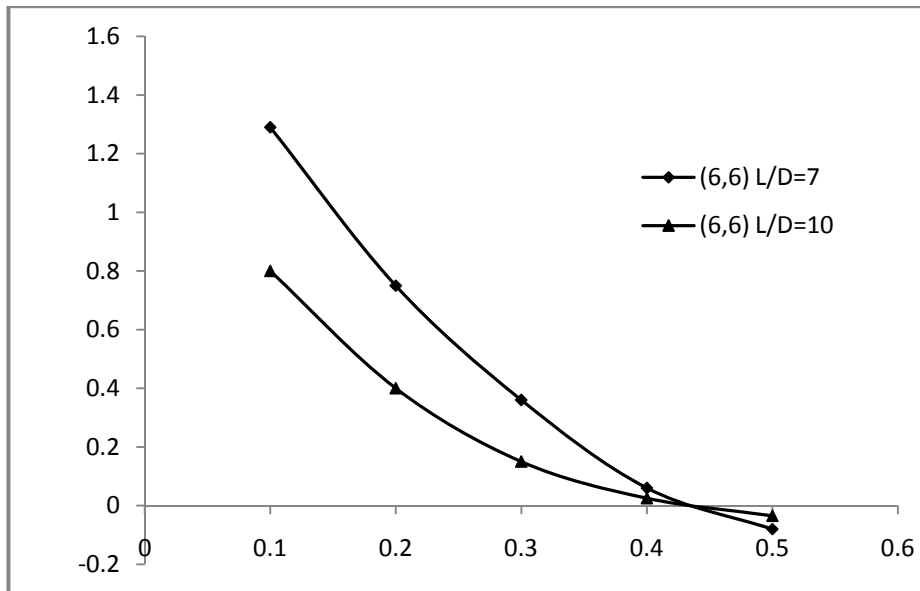
شکل ۶-۷: نانو لوله کربنی (۶,۶) با یک عیب حفره و شرایط مرزی کانتی لور

جدول ۶-۵: نانو لوله کربنی (۶,۶) با یک عیب حفره و شرایط مرزی کانتی لور

کانتی لور		
موقعیت عیب	تغییرات فرکانس	نسبت منظری
۰/۱	۰/۶	L/D=۷
۰/۳	۰/۳۲	
۰/۵	۰/۱۲	
۰/۷	۰/۰۲	
۰/۹	-۰/۰۵	
۰/۱	۰/۳۷	L/D=۱۰
۰/۳	۰/۱۹	
۰/۵	۰/۰۷	
۰/۷	۰/۰۱	
۰/۹	-۰/۰۲۵	



در شکل ۶-۸ تغییرات فرکانس طبیعی ارتعاش برای نانو لوله های کربنی تک لایه آرمچیر با بردار کایرال (۶,۶) آمده است. شرایط مرزی دو سر در گیر در این حالت در نظر گرفته شده است.



شکل ۶-۸: نانو لوله کربنی (۶,۶) با یک عیب حفره و شرایط مرزی دو سر درگیر

جدول ۶-۶: نانو لوله کربنی (۶,۶) با یک عیب حفره و شرایط مرزی دو سر درگیر

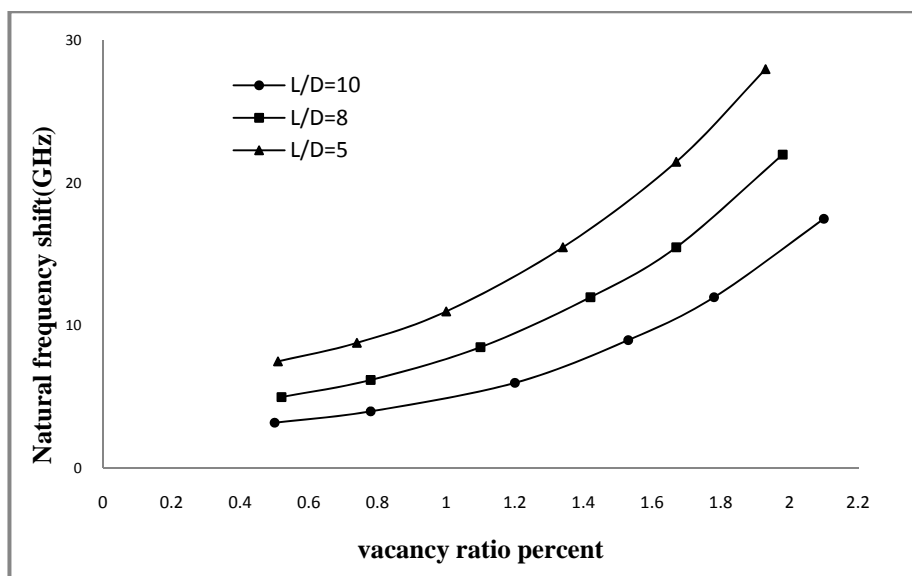
دو سر درگیر		
موقعیت عیب	تغییرات فرکانس	نسبت منظری
۰/۱	۱/۲۹	L/D=۷
۰/۲	۰/۷۵	
۰/۳	۰/۳۶	
۰/۴	۰/۰۶	
۰/۵	-۰/۰۸	
۰/۱	۰/۸	L/D=۱۰
۰/۲	۰/۴	
۰/۳	۰/۱۵	
۰/۴	۰/۰۲۵	
۰/۵	-۰/۰۳۵	

## ۶-۲- بررسی ارتعاشی نانو لوله کربنی با عیب حفره توزیع شده

در این قسمت عیب حفره با نسبت های مختلف در ساختار نانو لوله های تک لایه توزیع شده است. توزیع عیوب حفره در ساختار نانو لوله به صورت تصادفی و با دو محدودیت انجام گرفته است. اول اینکه نباید هیچ دو عیبی در همسایگی هم واقع شوند، دوم آنکه توزیع به صورت یکنواخت در طول نانو لوله انجام گردد.

تغییرات فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله های کربنی تک لایه با عیب حفره توزیع شده در گراف هایی آمده است. در این گراف ها تغییرات فرکانس ارتعاش طبیعی نانو لوله ها با نسبت طول به قطر ها و میزان عیب متفاوت قابل مشاهده است. نانو لوله های کربنی با کایرالیته های مختلف در گراف های بعدی مورد بررسی قرار گرفته اند.

در شکل ۶-۹ تغییرات فرکانس ارتعاش طبیعی برای نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ با بردار کایرال  $(8,0)$  قابل مشاهده است. در این حالت شرایط مرزی کانتی لور در نظر گرفته شده است.

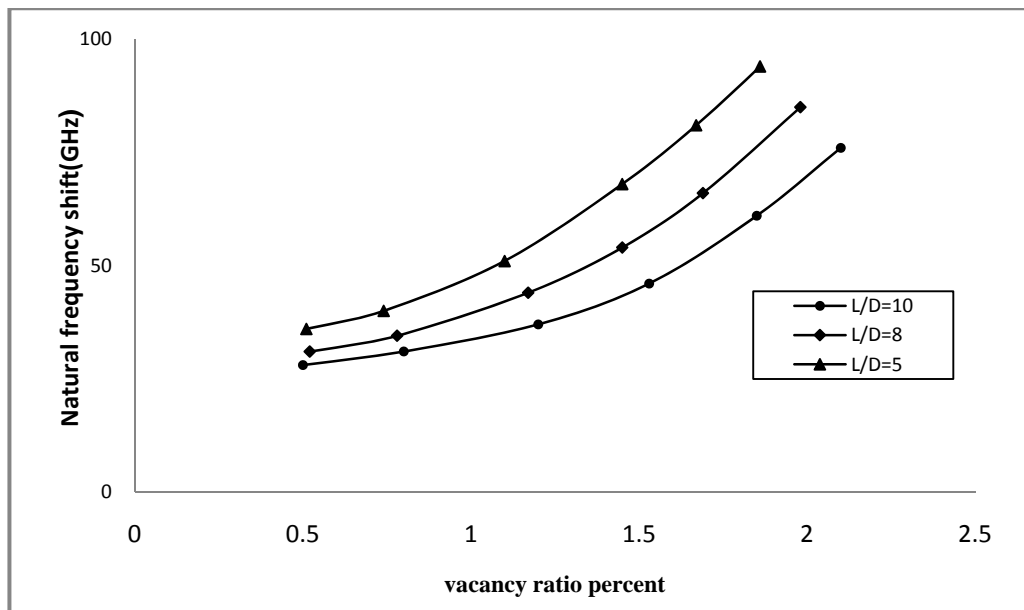


شکل ۶-۹: نانو لوله کربنی تک لایه  $(8,0)$  با شرایط مرزی کانتی لور با عیب توزیع شده

جدول ۶-۷: نانو لوله کربنی تک لایه (۸,۰) با شرایط مرزی کانتی لور با عیب توزیع شده

نانو لوله زیگزاگ کانتی (۸,۰)			نانو لوله زیگزاگ (۸,۰)			نانو لوله زیگزاگ (۸,۰)		
میزان عیب	تغییرات فرکانس	نسبت منطری	میزان عیب	تغییرات فرکانس	نسبت منطری	میزان عیب	تغییرات فرکانس	نسبت منطری
۰/۵	۳/۲	L/D=۱۰	۰/۵۲	۵	L/D=۸	۰/۵۱	۷/۵	L/D=۵
۰/۷۸	۴		۰/۷۸	۶/۲		۰/۷۴	۸/۸	
۱/۲	۶		۱/۱	۸/۵		۱	۱۱	
۱/۵۳	۹		۱/۴۲	۱۲		۱/۳۴	۱۵/۵	
۱/۷۸	۱۲		۱/۶۷	۱۵/۵		۱/۶۷	۲۱/۵	
۲/۱	۱۷/۵		۱/۹۸	۲۲		۱/۹۳	۲۸	

در شکل ۶-۱۰ تغییرات فرکانس ارتعاش طبیعی برای نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ با بردار کایرال (۸,۰) قابل مشاهده است. در این حالت شرایط مرزی دو سر درگیر در نظر گرفته شده است.

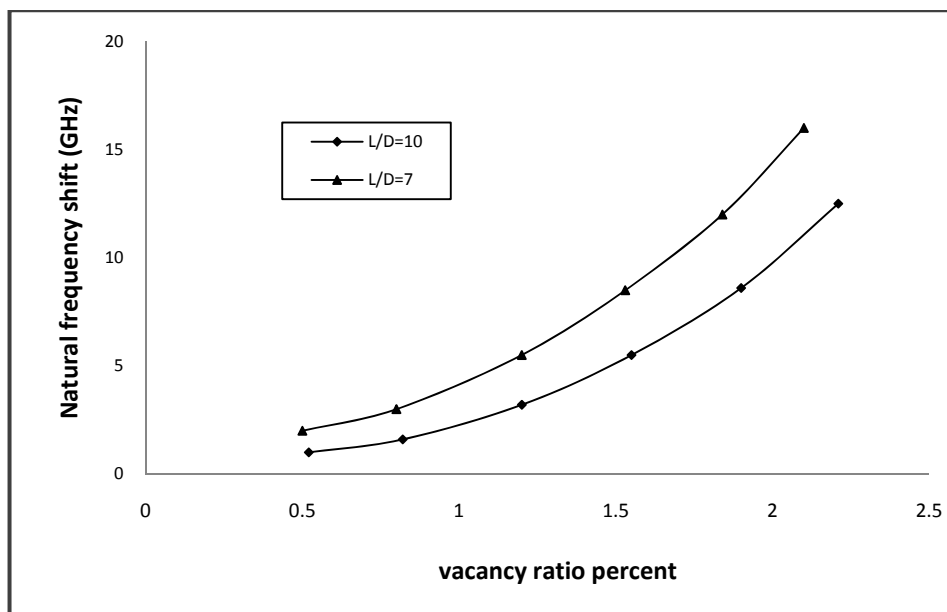


شکل ۶-۱۰: نانو لوله کربنی تک لایه (۸,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر با عیب توزیع شده

جدول ۶-۸: نانو لوله کربنی تک لایه (۸,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر با عیب توزیع شده

دو سر درگیر (۸,۰)			دو سر درگیر (۸,۰)			دو سر درگیر (۸,۰)		
میزان عیب	تغییر فرکانس	نسبت منظری	میزان عیب	تغییر فرکانس	نسبت منظری	میزان عیب	تغییر فرکانس	نسبت منظری
۰/۵	۲۸	L/D=۱۰	۰/۵۲	۳۱	L/D=۸	۰/۵۱	۳۶	L/D=۵
۰/۸	۳۱		۰/۷۸	۳۴/۵		۰/۷۴	۴۰	
۱/۲	۳۷		۱/۱۷	۴۴		۱/۱	۵۱	
۱/۵۳	۴۶		۱/۴۵	۵۴		۱/۴۵	۶۸	
۱/۸۵	۶۱		۱/۶۹	۶۶		۱/۶۷	۸۱	
۲/۱	۷۶		۱/۹۸	۸۵		۱/۸۶	۹۴	

در شکل ۶-۱۱ تغییرات فرکانس ارتعاش طبیعی برای نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ با بردار کایرال (۱۰,۰) قابل مشاهده است. در این حالت شرایط مرزی کانتی لور در نظر گرفته شده است.

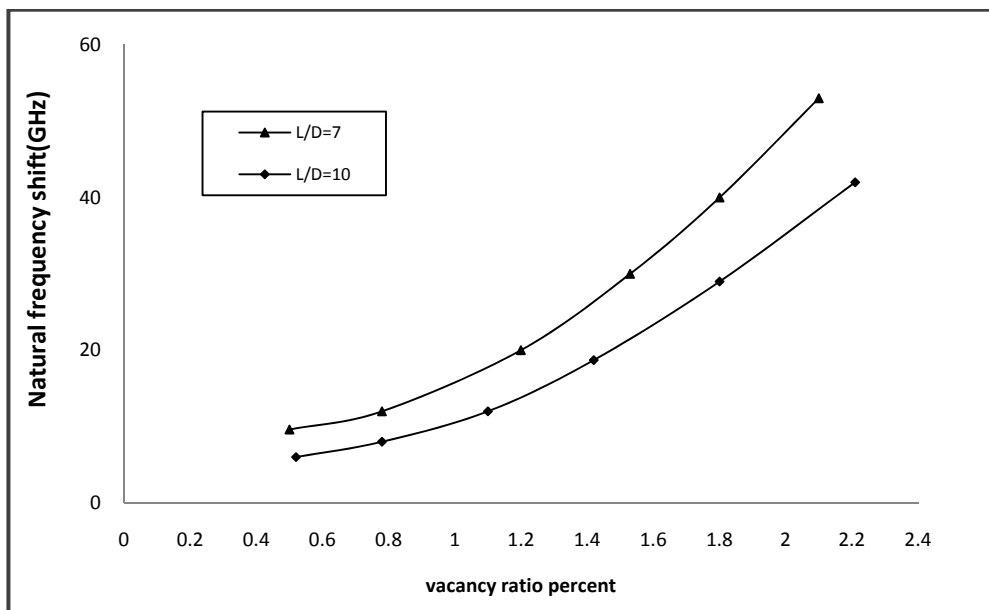


شکل ۶-۱۱: نانو لوله کربنی تک لایه (۱۰,۰) با شرایط مرزی کانتی لور با عیب توزیع شده

جدول ۶-۹: نانو لوله کربنی تک لایه (۱۰,۰) با شرایط مرزی کانتی لور با عیب توزیع شده

عیب حفره توزیع شده		
کانتی لور (۱۰,۰)		
نسبت منظری	تغییرات فرکانس	میزان عیب
L/D=۷	۲	۰/۵
	۳	۰/۸
	۵/۵	۱/۲
	۸/۵	۱/۵۳
	۱۲	۱/۸۴
	۱۶	۲/۱
L/D=۱۰	۱	۰/۵۲
	۱/۶	۰/۸۲
	۳/۲	۱/۲
	۵/۵	۱/۵۵
	۸/۶	۱/۹
	۱۲/۵	۲/۲۱

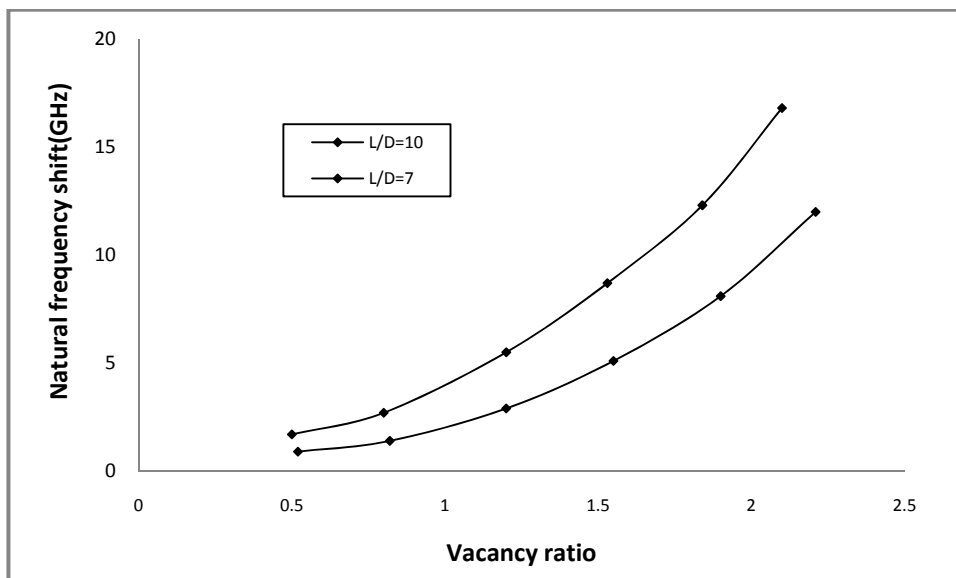
در شکل ۶-۱۲ تغییرات فرکانس ارتعاش طبیعی برای نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ با بردار کایرال (۱۰,۰) قابل مشاهده است. در این حالت شرایط مرزی دو سر درگیر در نظر گرفته شده است.



شکل ۶-۱۲: نانو لوله کربنی تک لایه (۱۰,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر با عیب توزیع شده

جدول ۶-۱۰: نانو لوله کربنی تک لایه (۱۰,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر با عیب توزیع شده

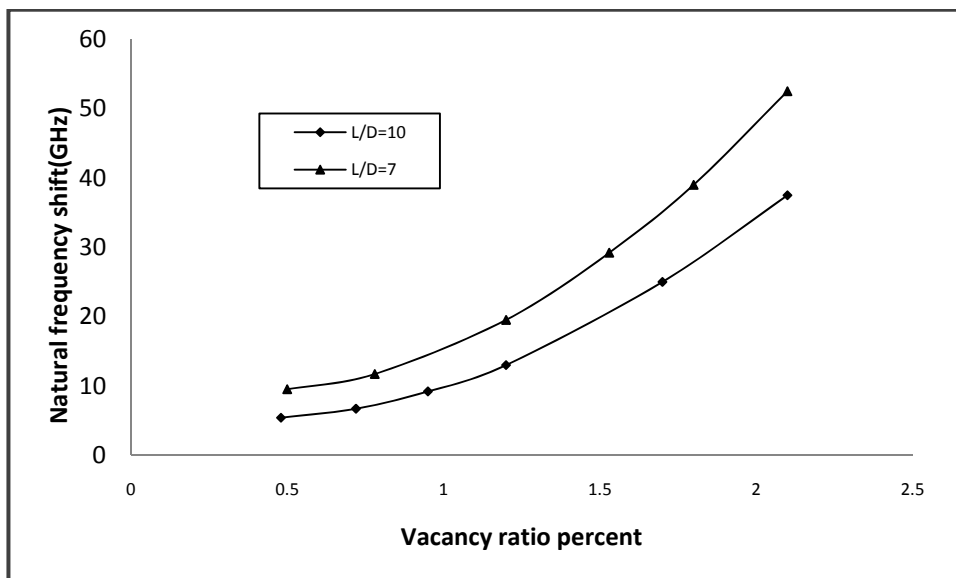
عیب حفره توزیع شده		
دوسر درگیر (۱۰,۰)		
میزان عیب	تغییرات فرکانس	نسبت منظری
۰/۵	۹/۶	L/D=۷
۰/۷۸	۱۲	
۱/۲	۲۰	
۱/۵۳	۳۰	
۱/۸	۴۰	
۲/۱	۵۳	
۰/۵۲	۶	L/D=۱۰
۰/۷۸	۸	
۱/۱	۱۳	
۱/۴۲	۱۹	
۱/۸	۲۹	
۲/۲۱	۴۲	



شکل ۶-۱۳: نانو لوله کربنی تک لایه آرمچیر (۶,۶) با شرایط مرزی کانتی لور و عیب توزیع شده

جدول ۶-۱۱: نانو لوله کربنی تک لایه آرمچیر (۶,۶) با شرایط مرزی کانتی لور و عیب توزیع شده

آرمچیر		
کانتی لور (۶,۶)		
میزان عیب	تغییرات فرکانس	نسبت منظری
۰/۵	۱/۷	L/D=۷
۰/۸	۲/۷	
۱/۲	۵/۵	
۱/۵۳	۸/۷	
۱/۸۴	۱۲/۳	
۲/۱	۱۶/۸	
۰/۵۲	۰/۹	L/D=۱۰
۰/۸۲	۱/۴	
۱/۲	۲/۹	
۱/۵۵	۵/۱	
۱/۹	۸/۱	
۲/۲۱	۱۲	

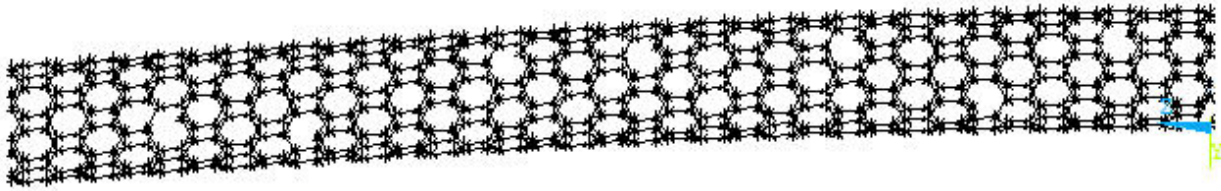


شکل ۶-۱۴: نانو لوله کربنی تک لایه آرمچیر (۶,۶) با شرایط مرزی دو سر درگیر و عیب توزیع شده

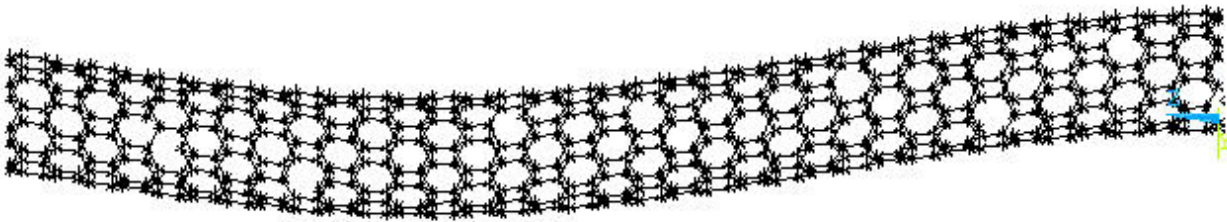
جدول ۶-۱۲: نانو لوله کربنی تک لایه آرمچیر (۶,۶) با شرایط مرزی دو سر درگیر و عیب توزیع شده

آرمچیر		
دو سر درگیر (۶,۶)		
میزان عیب	تغییرات فرکانس	نسبت منطری
۰/۵	۹/۵	L/D=۷
۰/۷۸	۱۱/۷	
۱/۲	۱۹/۵	
۱/۵۳	۲۹/۲	
۱/۸	۳۹	
۲/۱	۵۲/۵	
۰/۴۸	۵/۴	L/D=۱۰
۰/۷۲	۶/۷	
۰/۹۵	۹/۲	
۱/۲	۱۳	
۱/۷	۲۵	
۲/۱	۳۷/۵	

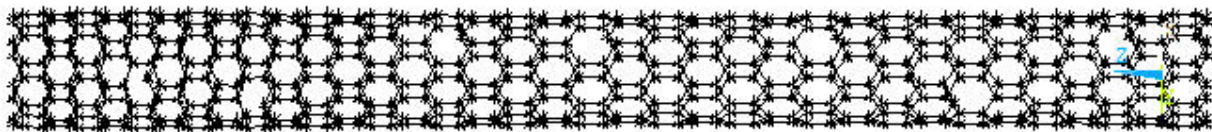




شکل ۶-۱۵: مد اول ارتعاش نانو لوله  $(8,0)$  با ۲ درصد عیب در ساختار



شکل ۶-۱۶: مد دوم ارتعاش نانو لوله  $(8,0)$  با ۲ درصد عیب در ساختار



شکل ۶-۱۷: مد سوم ارتعاش نانو لوله  $(8,0)$  با ۲ درصد عیب در ساختار

## فصل هفتم

تحليل نتايج

## ۷-۱- تحلیل نتایج حاصل از تحلیل ارتعاشی نانو لوله کربنی تک لایه با یک

### عیب حفره

#### ۷-۱-۱- نانو لوله کربنی زیگزاگ (۸,۰) با شرایط مرزی کانتی لور

تغییرات فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله کربنی زیگزاگ با بردار کایرال (۸,۰) در شکل ۶-۳ آمده است. نانو لوله زیگزاگ (۸,۰) با نسبت طول به قطر ۱۰ زمانیکه مکان عیب از موقعیت ۰/۱ تا موقعیت ۰/۹ تغییر می کند به مقدار ۰/۶۴ تا ۰/۰۴۵- گیگا هرتز نسبت به حالت بدون عیب در فرکانس طبیعی تغییرات نشان می دهد. این تغییرات برای نسبت طول به قطر ۸ به مقدار ۰/۸ تا ۰/۰۶۵- و برای نسبت طول به قطر ۵ به مقدار ۱/۲۵ تا ۰/۱- مشاهده شده است.

نتایج نشان می دهد که هرچه طول نانو لوله بیشتر شده مقدار تغییرات در فرکانس طبیعی کاهش یافته است. لذا تغییرات فرکانس طبیعی با طول نانو لوله رابطه معکوس دارد. موقعیت عیب بر مقدار تغییرات تاثیر دارد به این شکل که هرچه عیب به سمت درگیر نانو لوله نزدیک می شود مقدار تغییرات افزایش می یابد. به عبارتی دیگر تغییرات فرکانس طبیعی در شرایط مرزی کانتی لور با  $D/L$  رابطه معکوس دارد. نتایج نشان می دهد که وقتی مکان عیب در حدود  $X/L = ۰/۷۵$  واقع است تغییرات فرکانس به صفر می رسد، یعنی اینکه در این نقطه فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله کربنی معیوب و ایده آل با هم برابر است. از این نقطه به بعد تغییرات فرکانس طبیعی نانو لوله منفی می شود و این بدان معناست که فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله معیوب از فرکانس نانو لوله ایده آل بیشتر است.

### ۷-۱-۲- نانو لوله کربنی زیگزاگ (۸,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر

تغییرات فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله کربنی زیگزاگ با بردار کایرال (۸,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر در شکل ۶-۴ آمده است. نانو لوله زیگزاگ (۸,۰) با نسبت طول به قطر ۱۰ زمانی که مکان عیب از موقعیت ۰/۱ تا موقعیت ۰/۵ تغییر می کند به مقدار ۱/۱ تا ۰/۰۲۵- گیگا هرتز نسبت به حالت بدون عیب کاهش در فرکانس طبیعی ارتعاش نشان می دهد. این تغییرات برای نسبت طول به قطر ۸ به مقدار ۱/۶۵ تا ۰/۰۹- و برای نسبت طول به قطر ۵ به مقدار ۲/۱ تا ۰/۱۵- مشاهده شده است. نتایج نشان می دهد که تغییرات فرکانس طبیعی ارتعاش با طول و موقعیت عیب  $X/L$  رابطه معکوس دارد، هرچه طول نانو لوله افزایش می یابد تغییرات فرکانس نسبت به حالت ایده آل کاهش می یابد. هرچه عیب از سمت درگیر نانو لوله فاصله گرفته و به وسط نانو لوله نزدیک می شود تغییرات در فرکانس کاهش می یابد. مقایسه دو شکل ۶-۳ و ۶-۴ نشان می دهد که شرایط مرزی بر مقدار تغییرات فرکانس طبیعی نانو لوله تاثیر دارد. مقدار تغییرات در شرایط مرزی دو سر درگیر بیشتر از شرایط کانتی لور می باشد. تغییرات فرکانس نانو لوله در تقریباً  $X/L = 0/42$  به صفر می رسد که این مسئله بر برابری فرکانس نانو لوله معیوب و ایده آل دلالت می کند. از این نقطه به بعد تا میان نانو لوله تغییرات منفی می شود. این بدان معناست که فرکانس طبیعی نانو لوله معیوب بیش از نانو لوله بی عیب می باشد.

### ۷-۱-۳- نانو لوله کربنی زیگزاگ (۱۰,۰) با شرایط مرزی کانتی لور

تغییرات فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله کربنی زیگزاگ با بردار کایرال (۱۰,۰) با شرایط مرزی کانتی لور در شکل ۶-۵ آمده است. نانو لوله زیگزاگ (۱۰,۰) با نسبت طول به قطر ۱۰ زمانیکه مکان عیب از موقعیت ۰/۱ تا موقعیت ۰/۹ تغییر می کند به مقدار ۰/۴۵ تا ۰/۰۴- گیگا هرتز نسبت به حالت بدون عیب کاهش در فرکانس طبیعی ارتعاش نشان می دهد. این تغییرات برای نسبت طول به

قطر ۷ به مقدار ۰/۷ تا ۰/۰۷- مشاهده شده است. با افزایش طول مقدار تغییرات فرکانس نانو لوله کاهش می یابد. بیشترین کاهش فرکانس ارتعاش نانو لوله زمانی که عیب در نزدیکی سمت درگیر نانو لوله است مشاهده می شود. در موقعیت  $X/L = ۰/۷۸$  تغییرات فرکانس به صفر می رسد که نشان دهنده برابری فرکانس طبیعی نانو لوله معیوب و کامل است. از این نقطه به بعد تغییرات منفی شده که نشان دهنده این موضوع است که فرکانس نانو لوله معیوب از نانو لوله کربنی کامل بیشتر است.

#### ۷-۱-۴- نانو لوله کربنی زیگزاگ (۱۰,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر

تغییرات فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله کربنی زیگزاگ با بردار کایرال (۱۰,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر در شکل ۶-۶ آمده است. نانو لوله زیگزاگ (۱۰,۰) با نسبت طول به قطر ۱۰ زمانی که مکان عیب از موقعیت ۰/۱ تا موقعیت ۰/۵ تغییر می کند به مقدار ۱ تا ۰/۰۵- گیگا هرتز نسبت به حالت بدون عیب کاهش در فرکانس طبیعی ارتعاش نشان می دهد. این تغییرات برای نسبت طول به قطر ۷ به مقدار ۱/۵۵ تا ۰/۱- مشاهده شده است. تغییرات فرکانس طبیعی با افزایش طول نانو لوله کربنی کاهش می یابد. زمانی که عیب به سمت درگیر نزدیک تر است، تغییرات فرکانس بیشتر می شود و زمانی که عیب به سمت میانی نانو لوله حرکت می کند تغییرات فرکانس کاهش می یابد. در موقعیت  $X/L = ۰/۴۳$  تغییرات فرکانس به صفر می رسد و از این نقطه به بعد تا  $X/L = ۰/۵$  نقطه میانی نانو لوله تغییرات فرکانس منفی می گردد. تاثیر شرایط مرزی بر مقدار تغییرات فرکانس ارتعاش نانو لوله های کربنی با مقایسه شکل ۶-۵ و ۶-۶ قابل مشاهده است. تغییرات در فرکانس طبیعی برای یک موقعیت مشابه عیب برای شرایط مرزی دو سر درگیر بیش از شرایط کانتی لور مشاهده شده است.

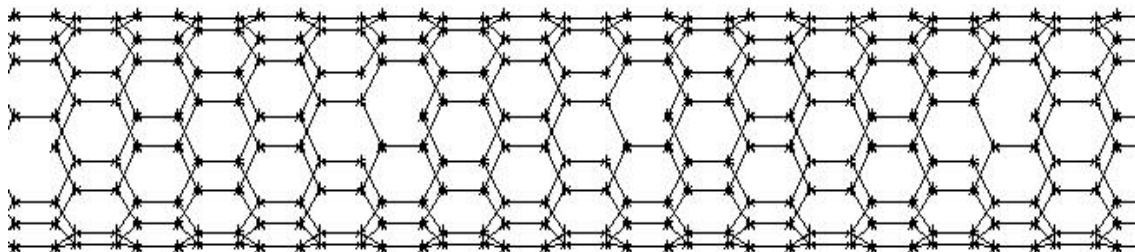
#### ۷-۱-۵- نانو لوله کربنی آرمچیر (۶,۶) با شرایط مرزی کانتی لور

شکل ۶-۷ نشان می دهد که تغییرات فرکانس طبیعی نانو لوله کربنی تک لایه آرمچیر با بردار کایرال (۶,۶) و شرایط مرزی کانتی لور زمانی که نسبت طول به قطر برابر با ۱۰ بوده و موقعیت حفره

از ۰/۱ تا ۰/۹ تغییر می کند به مقدار ۰/۶ تا ۰/۰۵- کاهش نسبت به فرکانس طبیعی نانو لوله بدون عیب نشان می دهد. افزایش طول و حرکت عیب به سمت انتهای آزاد نانو لوله باعث کاهش تغییرات در فرکانس طبیعی آن می شود. بیشترین تغییرات در فرکانس طبیعی زمانی که حفره در نزدیکی انتهای درگیر نانو لوله واقع است مشاهده می شود. میزان تغییرات در موقعیت  $X/L = ۰/۷۸$  به صفر می رسد و از این نقطه به بعد تا انتهای آزاد نانو لوله تغییرات منفی می شود.

### ۷-۱-۶- نانو لوله کربنی آرمچیر (۶,۶) با شرایط مرزی دو سر درگیر

تغییرات فرکانس طبیعی ارتعاش نانو لوله کربنی آرمچیر با بردار کایرال (۶,۶) با شرایط مرزی دو سر درگیر در شکل ۶-۸ آمده است. نانو لوله زیگزاگ (۶,۶) با نسبت طول به قطر ۱۰ زمانی که مکان عیب از موقعیت ۰/۱ تا موقعیت ۰/۵ تغییر می کند به مقدار ۰/۸ تا ۰/۰۳۵- گیگا هرتز نسبت به حالت بدون عیب کاهش در فرکانس طبیعی ارتعاش نشان می دهد. این تغییرات برای نسبت طول به قطر ۷ به مقدار ۱/۳ تا ۰/۰۸- مشاهده شده است. افزایش طول سبب کاهش تغییرات در فرکانس طبیعی نانو لوله می شود. موقعیت حفره بر مقدار تغییرات در فرکانس طبیعی تاثیر می گذارد بدین شکل که هرچه عیب از سمت درگیر نانو لوله فاصله می گیرد تغییرات فرکانس کاهش می یابد. با مقایسه دو شکل ۶-۷ و ۶-۸ تاثیر شرایط مرزی بر تغییرات فرکانس طبیعی قابل مشاهده است.



شکل ۷-۱: نانولوله کربنی با عیب حفره توزیع شده

## ۷-۲- تحلیل نتایج حاصل از تحلیل ارتعاشی نانو لوله کربنی تک لایه با عیب

### حفره توزیع شده

#### ۷-۲-۱- نانو لوله کربنی زیگزاگ (۸,۰) با شرایط مرزی کانتی لور

تغییرات فرکانس ارتعاش برای نانو لوله های تک لایه با بردار کایرال (۸,۰) و با شرایط مرزی کانتی لور و با نسبت طول به قطرهای ۵، ۸ و ۱۰ در شکل ۷ قابل ملاحظه است. همان طور که در نمودار مشخص است میزان تغییرات در فرکانس طبیعی برای نانو لوله کربنی تک لایه با نسبت طول به قطر ۱۰ و شرایط مرزی کانتی لور و ۲/۱ درصد عیب حفره در ساختار در حدود ۱۸ گیگا هرتز می باشد. این مقدار برای نسبت طول به قطر ۸ با همان شرایط مرزی و میزان ۲ درصد عیب در ساختار برابر است با ۲۲ گیگا هرتز، و برای نسبت طول به قطر ۵ تغییرات فرکانس ارتعاش با ۱/۹ درصد عیب در ساختار به حدود ۲۸ گیگا هرتز می رسد.

همان طور که در نمودار نمایان است؛ با افزایش درصد عیب موجود در ساختار نانو لوله ها میزان تغییرات در فرکانس طبیعی نانو لوله ها نیز افزایش می یابد. اما شیب این تغییرات برای نسبت های منطقی مختلف متفاوت است. به طوری که در نمودار نمایان است با کاهش نسبت منطقی شیب نمودار افزایش می یابد و این بدان معناست که نانو لوله به افزایش میزان عیب حساس تر می گردد. برای نانو لوله های کربنی با درصد عیب کمتر از حدودا ۰/۷ درصد میزان تغییرات در قیاس با دیگر مقادیر کمتر بوده و این بدان معناست که اگر بتوان عیوب را در این حدود حفظ کرد می توان تغییرات در فرکانس طبیعی نانو لوله ها را تا حد زیادی کنترل کرد.

## ۷-۲-۲- نانو لوله کربنی زیگزاگ (۸,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر

تغییرات فرکانس ارتعاش برای نانو لوله های تک لایه با بردار کایرال (۸,۰) و با شرایط مرزی دو سر درگیر و با نسبت طول به قطرهای ۵، ۸ و ۱۰ در شکل ۸ قابل ملاحظه است. همان طور که در نمودار مشخص است میزان تغییرات در فرکانس طبیعی برای نانو لوله کربنی تک لایه با نسبت طول به قطر ۱۰ و شرایط مرزی دو سر درگیر و ۲/۱ درصد عیب حفره در ساختار در حدود ۷۵ گیگا هرتز می باشد. این مقدار برای نسبت طول به قطر ۸ با همان شرایط مرزی و میزان ۲ درصد عیب در ساختار برابر است با ۸۵ گیگا هرتز، و برای نسبت طول به قطر ۵ تغییرات فرکانس ارتعاش با ۱/۹ درصد عیب در ساختار به حدود ۹۴ گیگا هرتز می رسد.

همان طور که در نمودار نمایان است با افزایش درصد عیب موجود در ساختار نانو لوله ها میزان تغییرات در فرکانس طبیعی نانو لوله ها نیز افزایش می یابد. اما شیب این تغییرات برای نسبت های منطقی مختلف متفاوت است. به طوری در نمودار نمایان است با کاهش نسبت منطقی شیب نمودار افزایش می یابد و این بدان معناست که نانو لوله به افزایش میزان عیب حساس تر می گردد. برای نانو لوله های کربنی با درصد عیب کمتر از حدودا ۰/۷ درصد، میزان تغییرات در قیاس با دیگر مقادیر کمتر بوده و این بدان معناست که اگر بتوان عیوب را در این حدود حفظ کرد می توان تغییرات در فرکانس طبیعی نانو لوله ها را تا حد زیادی کنترل کرد. با مقایسه شکل ۶-۹ و ۶-۱۰ می توان تاثیر شرایط مرزی را بر فرکانس طبیعی مشاهده کرد. با مقایسه دو نمودار مشخص می گردد که تغییرات فرکانس طبیعی در شرایط مرزی دو سر درگیر بیش از شرایط کانتی لور می باشد.

## ۷-۲-۳- نانو لوله کربنی زیگزاگ (۱۰,۰) با شرایط مرزی کانتی لور

تغییرات فرکانس ارتعاش برای نانو لوله های تک لایه با بردار کایرال (۱۰,۰) و با شرایط مرزی کانتی لور و با نسبت طول به قطرهای ۷ و ۱۰ در شکل ۶-۱۱ قابل ملاحظه است. همان طور که در



نمودار مشخص است میزان تغییرات در فرکانس طبیعی برای نانو لوله کربنی تک لایه با نسبت طول به قطر ۱۰ و شرایط مرزی کانتی لور و ۲/۲ درصد عیب حفره در ساختار در حدود ۱۳ گیگا هرتز می باشد. این مقدار برای نسبت طول به قطر ۷ با همان شرایط مرزی و میزان ۲/۱ درصد عیب در ساختار برابر با ۱۶ گیگا هرتز است.

همان طور که در نمودار نمایان است با افزایش درصد عیب موجود در ساختار نانو لوله ها میزان تغییرات در فرکانس طبیعی نانو لوله ها نیز افزایش می یابد. اما شیب این تغییرات برای نسبت های منطقی مختلف متفاوت است. به طوری در نمودار نمایان است با کاهش نسبت منطقی شیب نمودار افزایش می یابد و این بدان معناست که نانو لوله به افزایش میزان عیب حساس تر می گردد. برای نانو لوله های کربنی با درصد عیب کمتر از حدودا ۰/۹ درصد میزان تغییرات در قیاس با دیگر مقادیر کمتر بوده و این بدان معناست که اگر بتوان عیوب را در این حدود حفظ کرد می توان تغییرات در فرکانس طبیعی نانو لوله ها را تا حد زیادی کنترل کرد.

#### ۷-۲-۴- نانو لوله کربنی زیگزاگ (۱۰,۰) با شرایط مرزی دو سر درگیر

تغییرات فرکانس ارتعاش برای نانو لوله های تک لایه با بردار کایرال (۱۰,۰) و با شرایط مرزی دو سر درگیر و با نسبت طول به قطرهای ۷ و ۱۰ در شکل ۶-۱۲ قابل ملاحظه است. همانطور که در نمودار مشخص است میزان تغییرات در فرکانس طبیعی برای نانو لوله کربنی تک لایه با نسبت طول به قطر ۱۰ و شرایط مرزی دو سر درگیر و ۲/۲ درصد عیب حفره در ساختار در حدود ۴۱ گیگا هرتز می باشد. این مقدار برای نسبت طول به قطر ۷ با همان شرایط مرزی و میزان ۲/۱ درصد عیب در ساختار برابر است با ۵۳ گیگا هرتز.

همانطور که در نمودار نمایان است با افزایش درصد عیب موجود در ساختار نانو لوله ها میزان تغییرات در فرکانس طبیعی نانو لوله ها نیز افزایش می یابد. اما شیب این تغییرات برای نسبت های منطقی مختلف متفاوت است. به طوری در نمودار نمایان است با کاهش نسبت منطقی شیب نمودار

افزایش می یابد و این بدان معناست که نانو لوله به افزایش میزان عیب حساس تر می گردد. برای نانو لوله های کربنی با درصد عیب کمتر از حدودا ۰/۹ درصد میزان تغییرات در قیاس با دیگر مقادیر کمتر بوده و این بدان معناست که اگر بتوان عیوب را در این حدود حفظ کرد می توان تغییرات در فرکانس طبیعی نانو لوله ها را تا حد زیادی کنترل کرد. با مقایسه شکل ۶-۱۱ و ۶-۱۲ می توان تاثیر شرایط مرزی را بر فرکانس طبیعی مشاهده کرد. با مقایسه دو نمودار مشخص می گردد که تغییرات فرکانس طبیعی در شرایط مرزی دو سر درگیر بیش از شرایط کانتی لور می باشد.

#### ۷-۲-۵- نانو لوله کربنی آرمچیر (۶,۶) با شرایط مرزی کانتی لور

تغییرات فرکانس ارتعاش برای نانو لوله های تک لایه با بردار کایرال (۶,۶) و با شرایط مرزی کانتی لور و با نسبت طول به قطرهای ۷ و ۱۰ در شکل ۶-۱۳ قابل ملاحظه است. همان طور که در نمودار مشخص است میزان تغییرات در فرکانس طبیعی برای نانو لوله کربنی تک لایه با نسبت طول به قطر ۱۰ و شرایط مرزی کانتی لور و ۲/۱ درصد عیب حفره در ساختار در حدود ۱۲ گیگا هرتز می باشد. این مقدار برای نسبت طول به قطر ۷ با همان شرایط مرزی و میزان ۲/۱ درصد عیب در ساختار برابر با ۱۶/۸ گیگا هرتز است.

همانطور که در نمودار نمایان است با افزایش درصد عیب موجود در ساختار نانو لوله ها میزان تغییرات در فرکانس طبیعی نانو لوله ها نیز افزایش می یابد. اما شیب این تغییرات برای نسبت های منظری مختلف متفاوت است. به طوری در نمودار نمایان است با کاهش نسبت منظری شیب نمودار افزایش می یابد و این بدان معناست که نانو لوله به افزایش میزان عیب حساس تر می گردد. برای نانو لوله های کربنی با درصد عیب کمتر از حدودا ۰/۸ درصد میزان تغییرات در قیاس با دیگر مقادیر کمتر بوده و این بدان معناست که اگر بتوان عیوب را در این حدود حفظ کرد می توان تغییرات در فرکانس طبیعی نانو لوله ها را تا حد زیادی کنترل کرد.

## ۶-۲-۷- نانو لوله کربنی آرمچیر (۶,۶) با شرایط مرزی دو سر درگیر

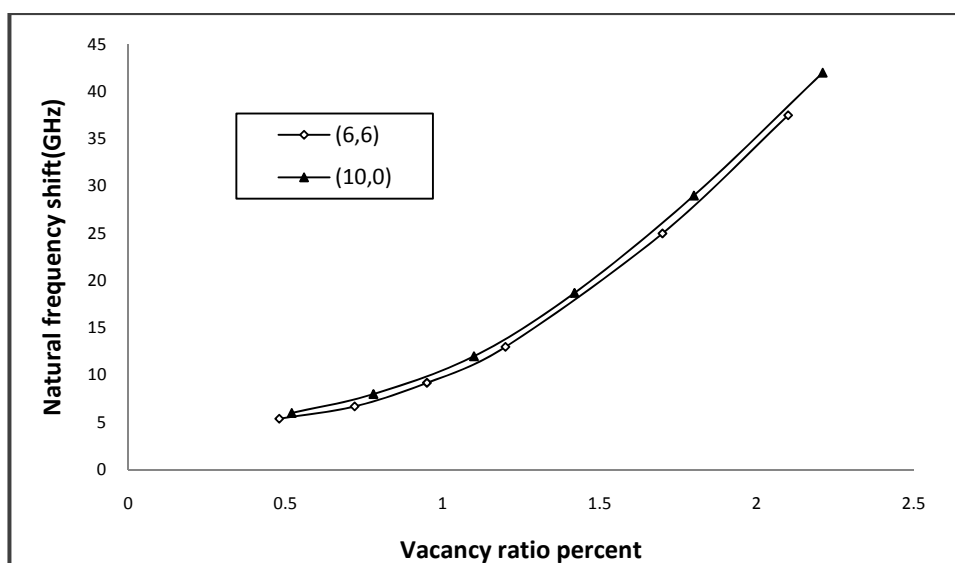
تغییرات فرکانس ارتعاش برای نانو لوله های تک لایه با بردار کایرال (۶,۶) و با شرایط مرزی دو سر درگیر و با نسبت طول به قطرهای ۷ و ۱۰ در شکل ۶-۱۴ قابل ملاحظه است. همانطور که در نمودار مشخص است میزان تغییرات در فرکانس طبیعی برای نانو لوله کربنی تک لایه با نسبت طول به قطر ۱۰ و شرایط مرزی دو سر درگیر و ۲/۱ درصد عیب حفره در ساختار در حدود ۳۷/۵ گیگا هرتز می باشد. این مقدار برای نسبت طول به قطر ۷ با همان شرایط مرزی و میزان ۲/۱ درصد عیب در ساختار برابر با ۵۲/۵ گیگا هرتز است.

همان طور که در نمودار نمایان است با افزایش درصد عیب موجود در ساختار نانو لوله ها میزان تغییرات در فرکانس طبیعی نانو لوله ها نیز افزایش می یابد. اما شیب این تغییرات برای نسبت های منظری مختلف متفاوت است. به طوری در نمودار نمایان است با کاهش نسبت منظری شیب نمودار افزایش می یابد و این بدان معناست که نانو لوله به افزایش میزان عیب حساس تر می گردد. برای نانو لوله های کربنی با درصد عیب کمتر از حدودا ۰/۸ درصد میزان تغییرات در قیاس با دیگر مقادیر کمتر بوده و این بدان معناست که اگر بتوان عیوب را در این حدود حفظ کرد می توان تغییرات در فرکانس طبیعی نانو لوله ها را تا حد زیادی کنترل کرد. با مقایسه شکل ۶-۱۲ و ۶-۱۳ می توان تاثیر شرایط مرزی را بر فرکانس طبیعی مشاهده کرد. با مقایسه دو نمودار مشخص می گردد که تغییرات فرکانس طبیعی در شرایط مرزی دو سر درگیر بیش از شرایط کانتی لور می باشد.

### ۳-۷- تاثیر کایرالیته بر فرکانس طبیعی نانو لوله کربنی تک لایه با عیب توزیع

شده

بدین منظور تغییرات فرکانس نانو لوله کربنی تک لایه زیگزاگ با بردار کایرال  $(10,0)$  و نانو لوله کربنی تک لایه آرمچیر با بردار کایرال  $(6,6)$  با نسبت منطری ۱۰ و شرایط مرزی دو سر درگیر را با یکدیگر مقایسه کرده ایم. این مقایسه در شکل ۲-۷ قابل مشاهده است. همانطور که در شکل ۲-۷ مشخص است میزان تغییرات فرکانس طبیعی برای هر دو نانو لوله به هم نزدیک است. با بررسی نمودار می توان نتیجه گرفت که تاثیر کایرالیته بر تغییرات فرکانس طبیعی ناچیز است.



شکل ۲-۷: مقایسه تغییرات فرکانس طبیعی نانو لوله های  $(10,0)$  و  $(6,6)$

## نتیجه گیری

در این تحقیق تاثیر عیوب در دو حالت مورد بررسی قرار گرفت؛ حالت اول وجود یک عیب حفره در ساختار و حالت دوم وجود عیوب توزیع شده در ساختار نانو لوله. نتایج بررسی تاثیر به سزای وجود عیوب بر ارتعاشات طبیعی نانو لوله های کربنی را در هر دو حالت نشان می دهد.

در حالتی که یک عیب در ساختار نانو لوله کربنی وجود دارد، پارامتری که در میزان تغییر فرکانس طبیعی نانو لوله تاثیر به سزایی دارد، مکان عیب می باشد. همان طور که در فصول قبلی توضیح داده شد، هر چه عیب به سمت درگیر نانو لوله ها نزدیک تر باشد، تغییرات در فرکانس طبیعی نانو لوله ها بیشتر خواهد بود.

یکی دیگر از مسائلی که میزان تاثیر عیب بر ارتعاشات نانو لوله های کربنی را تحت تاثیر قرار می دهد، شرایط مرزی نانو لوله می باشد. نتایج نشان می دهد که تغییرات فرکانس طبیعی برای نانو لوله کربنی معیوب در حالتی که شرایط مرزی دو سر درگیر می باشد بیش از حالتی است که شرایط مرزی یک سر درگیر می باشد.

نتایج نشان می دهد که در نانو لوله های کربنی با یک عیب حفره، نقطه ای وجود دارد که اگر عیب در آن نقطه واقع شود، تغییرات فرکانس طبیعی صفر می گردد و این بدان معنا است که فرکانس ارتعاش طبیعی نانو لوله کربنی تک لایه معیوب با فرکانس ارتعاش طبیعی نانو لوله کربنی معیوب برابر است.

نتایج نشان می دهد که با کاهش قطر و افزایش طول نانو لوله های کربنی میزان تغییرات فرکانس طبیعی ارتعاش به ترتیب افزایش و کاهش می یابد.

در حالتی که عیوب در ساختار نانو لوله کربنی توزیع شده است، نتایج نشان می دهد که با افزایش طول نانو لوله کربنی، تغییرات در فرکانس طبیعی کاهش می یابد و با کاهش قطر نانو لوله های کربنی و وجود عیب توزیع شده در ساختار تغییرات فرکانس افزایش می یابد.

با افزایش میزان عیوب در ساختار نانو لوله کربنی تک لایه، تغییرات فرکانس طبیعی ارتعاش افزایش می یابد و نتایج این تحقیق نشان می دهد که در این حالت نیز نحوه توزیع عیوب بر میزان تغییرات فرکانس تاثیر گذار است.

شرایط مرزی نانو لوله کربنی در حالت وجود عیوب توزیع شده در ساختار نیز بر فرکانس طبیعی ارتعاش تاثیر گذار است. میزان تغییرات در فرکانس طبیعی مشاهده شده برای یک نانو لوله کربنی تک لایه با یک طول و قطر و نسبت عیب برابر تحت دو شرایط مرزی یک سر درگیر و دو سر درگیر نشان می دهد که میزان تغییرات در شرایط مرزی دو سر درگیر بیش از حالت یک سر درگیر می باشد.

## پیشنهادات برای تحقیقات آتی

برای تحقیقات آینده موارد زیر را پیشنهاد می کنیم:

- بهبود مدلسازی پیوندهای بین اتم های کربن به صورت غیر خطی
- بررسی تأثیر عیب ساختاری هفت گوش و پنج گوش در ارتعاشات طبیعی نانو لوله
- بررسی تأثیر انحنای نانو لوله ها بر ارتعاشات طبیعی

- [1] Iijima, S., (1991) "Helical microtubules of graphitic carbon", *Nature* 354, 56–58.
- [2] Iijima, S., Ichlhashi, T., (1993) "Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter", *Nature* 363, 603–605.
- [3] Bethune, D.S., Kiang, C.H., Devries, M.S., Gorman, G., Savoy, R., Vazquez, J., et al., (1993) "Cobaltcatalyzed growth of carbon nanotubes with single-atomic-layer walls", *Nature* 363, 605–607.
- [4] Thostenson, E.T., Ren, Z., Chou, T.-W., (2001) "Advances in the science and technology of carbon nanotubes and their composites: a review", *Composites Science and Technology* 61, 1899–1912.
- [5] Harris, P.J.F., (1999) "*Carbon Nanotubes and Related Structures*", Cambridge University Press, UK.
- [6] Terrones, M., Hsu, W.K., Kroto, H.W., Walton, D.R.M., (1999) "Nanotubes: a revolution in materials science and electronics", *Topic in current Chemistry* 199, 190–234.
- [7] Treacy, M.M.J., Ebbesen, T.W., Gibson, T.M., (1996) "Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes", *Nature* 381, 680–687.
- [8] Salvétat, J.P., Bonard, J.M., Thomson, N.H., Kulik, A.J., Forró, L., Benoit, W., Zuppiroli, L., (1999) "Mechanical properties of carbon nanotubes", *Applied Physics A* 69, 255–260.
- [9] Iijima, S., Brabec, C., Maiti, A., Bernholc, J., (1996) "Structural flexibility of carbon nanotubes", *Journal of Chemical Physics* 104, 2089–2092.
- [10] Ajayan, P.M., Zhou, O.Z., (2001) "Application of carbon nanotubes", *Topics in Applied Physics* 80, 391–425.
- [11] Saito, S., Dresselhaus, D., Dresselhaus, M.S., (1998) "*Physical Properties of Carbon Nanotubes*", Imperial College Press, London.
- [12] Yakobson, B.I., Campbell, M.P., Brabec, C.J., Bernholc, J., (1997) "High strain rate fracture and C-chain unraveling in carbon nanotubes", *Computational Materials Science* 8, 341–348.
- [13] Hernandez, E., Goze, C., Bernier, P., Rubio, A., (1998) "Elastic properties of C and BxCyNz composite nanotubes", *Physical Review Letters* 80, 4502–4505.
- [14] Sanchez-Portal, D. et al., (1999) "Ab initio structural, elastic, and vibrational properties of carbon nanotubes", *Physical Review B* 59, 12678–12688.
- [15] Tersoff, J., (1992) "Energies of fullerenes", *Physical Review B* 46, 15546–15549.
- [16] Yakobson, B.I., Brabec, C.J., Bernholc, J., (1996) "Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear range", *Physical Review Letters* 76, 2511–2514.
- [17] Ru, C.Q., (2000) "Effective bending stiffness of carbon nanotubes", *Physical Review B* 62, 9973–9976.
- [18] Ru, C.Q., (2000) "Elastic buckling of single-walled carbon nanotube ropes under high pressure", *Physical Review B* 62, 10405–10408.
- [19] Collins PG, Avouris P, (2000) "Nanotubes for electronics", *Sci Am*; 283:62–9.
- [20] Avouris P, Appenzeller J, Martel R, Wind SJ, (2003) "Carbon nanotube electronics", *Proc IEEE*;91(11):1772–84.
- [21] Tsukagoshi K, Yoneya N, Uryu S, Aoyagi Y, Kanda A, Ootuka Y, et al, (2002) "Carbon nanotube devices for electronics", *Physica B*; 323(1–4):107–14.
- [22] Baughman RH, Zakhidov AA, de Heer WA, (2002) "Carbon nanotubes – the route toward applications", *Science*; 297:787–92.



- [23] Choi WB, Bae E, Kang D, Chae S, Cheong B, Ko J, et al, (2004) “Aligned carbon nanotubes for nanoelectronics”, *Nanotechnology*;15: S512–6.
- [24] H. J. De Los Santos, (1999) “*Introduction to Microelectromechanical Microwave Systems*”, Artech House Publishers, London.
- [25] Chunyu Li and Tsu-Wei Chou, (2003) “Single-walled carbon nanotubes as ultrahigh frequency nanomechanical resonators”, *Physical Review B* 68, 073405.
- [26] P. Poncharal, Z.L. Wang, D. Ugarte, W.A. de Heer (1999), *Science* 283. 1513.
- [27] K. Jensen, K. Kim, A. Zettl (2008), *Nature Nanotechnology* 3. 533.
- [28] Jeong Won Kang, Oh Kuen Kwon, Jun Ha Lee, Young Gyu Choi, Ho Jung Hwang (2009) “Frequency change by inter-walled length difference of double-wall carbon nanotube resonator”, *Solid State Communications* 149.1574\_1577.
- [29] Choi H J, Ihm J, Louie S G, et al (2000) “Defects, quasibound states, and quantum conductance in metallic carbon nanotubes”, *Phys Rev Lett*, 84: 2917–2920.
- [30] Suenaga K, Wakabayashi H, Koshino M, et al (2007) “Imaging active topological defects in carbon nanotubes”, *Nature*, 2: 358–360.
- [31] Alexandre S S, Mazzoni M S C, Chacham H (2008) “Edge states and magnetism in carbon nanotubes with line defects” *Phys Rev Lett*,100: 146801.
- [32] Wang C C, Zhou G, Wu J, et al (2006) “Effects of vacancy-carboxyl pair functionalization on electronic properties of carbon nanotubes”, *Appl Phys Lett*, 89: 173130.
- [33] Wang C C, Zhou G, Liu H T, et al (2006) “Chemical functionalization of carbon nanotubes by carboxyl groups on Stone-Wales defects: A density functional theory study”, *J Phys Chem B*, 110: 10266–10271
- [34] Park J Y (2007) “Electrically tunable defects in metallic single-walled carbon nanotubes”, *Appl Phys Lett*, 90: 023112.
- [35] Qian HaiYun, Zhou Tao (2010) “Electronic properties of multi-defected zigzag carbon nanotubes” *Sci China Phys Mech Astron*. Vol. 53: 11-15.
- [36] Monthieux M (2002) “Filling single-wall carbon nanotubes”, *Carbon*, 40: 1809–1823.
- [37] Zhou T, Wu J, Duan W H, et al (2007) “Physical mechanism of transport blocking in metallic zigzag carbon nanotubes”, *Phys Rev B*, 75:205410.
- [38] Tunvir K, Kim A, Nahm S H (2008) “The effect of two neighboring defects on the mechanical properties of carbon nanotubes” *Nanotechnology*, 19: 065703.
- [39] Odegard GM, Gates TS, Nicholson LM, Wise KE, (2002) “Equivalent continuum modeling of nano-structured materials”, *Compos Sci Technol*; 62:1869–80.
- [40] Gates TS, Odegard GM, Frankland SJV, Clancy TC, (2005) “Computational materials: multi-scale modeling and simulation of nanostructured materials”, *Compos Sci Technol*; 65(15–16):2416–34.
- [41] Bodily BH, Sun CT, (2003) “Structural and equivalent continuum properties of single-walled carbon nanotubes”, *Int J Mater Product Technol*;18(4/5/6):381–97.
- [42] Li C, Chou T-W, (2003) “A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes”, *Int J Solids Struct*; 40:2487–99.
- [43] Feynman, R., (1960), *Engineering and Science*, 23, 22 36.
- [44] Thess, A.; Lee, R.; Nikolaev, P.; Dai, H.J.; Petit, P.; Robert, J.; Xu, C.H.; Lee, Y.H.; Kim, S.G.; Rinzler, A.G.; Colbert, D.T.; Scuseria, G.E.; Tomanek, D.; Fischer, J.E.; and Smalley, R.E., (1996), *Science*, 273 , 483.
- [45] Dal, H.J.; Rinzler, A.G.; Nikolaev, P.; Thess, A.; Colbert, D.T.; Smalley, R.E., (1996), *Chem. Phys. Lett*, 260, 471.
- [46] Ajayan, P.M. *Chem. Rev.* 1999, 99, 1787.
- [47] M.A. Prelas, G. Popovici, and L.K. Bigelow, Eds, (1997) “*Handbook of Industrial Diamonds and Diamond Films*”, Marcel Dekker, New York.
- [48] B.T. Kelly, (1981) “*Physics of Graphite*”, Applied Science, London.

- [49] M.Meyyappan, (2005) “Carbon nanotube science and applications”, *Nasa Ames Research Center Moffet field, CA*.
- [50] H.W. Kroto et al., (1985), *Nature*, 318, 162.
- [51] Jeroen, W.G.; Venema, C.V.; Rinzler, A.G.; Smalley, R.E.; Dekker, C., (1998), *Nature*, 291, 59.
- [52] Geng, H.Z.; Zhang, X.B.; Mao, S.H.; Kleinhammes,A.; Shimoda,H.;Wu,Y.; Zhou O.Chem, (2004), *Phys. Lett*, 399, 109.
- [53] Rinzler, A.G, Hafner, J.H., Nikolaev, P., Lou, L., Kim, S.G., Tomanek, D., Nordlander, P., Colbert, D.T., and R.E. Smalley. (1995), “Unraveling nanotubes: fieldemission from an atomic wire”, *Science* 269, 1550-1553.
- [54] Salvetat, J.P., Briggs, G.A.D., Bonard, J.M, Bacsá, R.R., Kulik, A.J., Stöckli, T.,Burnham, N.A., and Forró, L. (1999), “Elastic and Shear Moduli of Single-Walled Carbon Nanotube Ropes”, *Phys. Rev. Lett.* 82, 944 – 947.
- [55] Mickelson, E.T., Huffman C.B., Rinzler, A.G., Smalley, R.E., Hauge, R.H., andMargrave, J.L. (1998), “Fluorination of single-wall carbon nanotubes”, *Chem. Phys.Lett.* 296, 188-194.
- [56] Schadler, L.S., Giannaris, S.C., and Ajayan, P.M. (1998), “Load transfer in carbon nanotube epoxy composites”, *App. Phys. Lett.* 73, 3842-3844.
- [57] Bin Zhao, Hui Hu, Swadhin K. Mandal, Robert C. Haddon, (2005) “A Bone Mimic Based on the Self-Assembly of Hydroxyapatite on Chemically Functionalized Single-Walled Carbon Nanotubes”, *Chemistry of Materials*, Vol. 17, 3235-3241
- [58] Nadine Wong Shi Kam, Hongjie Dai, (2005) “Carbon Nanotubes as Intracellular Protein Transporters: Generality and Biological Functionality”, *Journal of the American Chemical Society*, Vol.127, 6021 -6026
- [59] Alexander Star, Eugene Tu, Joseph Niemann, Jean-Christophe P. Gabriel, C. Steve Joiner, Christian Valcke, (2006) “Label-free detection of DNA hybridization using carbon nanotube network field-effect transistors”, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, Vol. 103, 921-926
- [60] Claye, A.S., Fischer, J.E., Huffman, C.B., Rinzler, A.G., and Smalley, R.E. (2000), “Solid-State Electrochemistry of the Li Single Wall Carbon Nanotube System,” *J. Electrochem. Soc.* 147, 2845-2852.
- [61] Zheng, M., Jagota, A., Semke, E.D., Diner, B.A., Mclean, R.S., Lustig, S.R., Richardson, R.E., and Tassi, N.G. (2003), “DNA-assisted dispersion and separation of carbon nanotubes”, *Nat. Mater.* 2, 338-342.
- [62]Ishibashi, K., Tsuya, D., Suzuki, M., and Aoyagi, Y. (2003), “Fabrication of a single electron inverter in multiwall carbon nanotubes”, *App. Phys. Lett.* 82, 3307-3309.
- [63] A. N. Cleland and M. L. Roukes, (1998), *Nature* , London, 392, 160.
- [64] A. Erbe and R. H. Blick, (2002), *Control* 49, 1114.
- [65] T. A. Barrett, C. R. Miers, H. A. Sommer, K. Mochizuki, and J. T. Markert, (1998), *J. Appl. Phys.* 83, 6235.
- [66] J. G. Kushmerick, K. F. Kelly, H. P. Rust, N. J. Halas, and P. S. Weiss, (1999), *J. Phys. Chem. B* **103**, 1619 .
- [67] J. R. Hahn and H. Kang, (1999), *Phys. Rev. B* **60**, 6007.
- [68] B. T. Kelly, (1981), “*Physics of Graphite*”, Applied Science, London.
- [69] M. Terrones, F. Banhart, N. Grobert, J.-C. Charlier, H. Terrones, and P. M. Ajayan, (2002), *Phys. Rev. Lett.* **89**, 075505.
- [70] Z. Tang, M. Hasegawa, T. Shimamura, Y. Nagai, T. Chiba, Y. Kawazoe, M. Takenaka, E. Kuramoto, and T. Iwata, *Phys. Rev.*
- [71] P. A. Throver, (1969), *Chem. Phys. Carbon* **5**, 217.
- [72] E. Kaxiras and K. C. Pandey, (1988), *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2693.

- [73] Meyyappan, M.; and Srivastava, D., (2003), “*Handbook of NANOSCIENCE, ENGINEERING and TECHNOLOGY*”, CRC Press, 18-1.
- [74] Saito, R.; Dresselhaus, G.; Dresselhaus, M.S., (1998), “*Physical Properties of Carbon Nanotubes*”, Imperial College Press: London.
- [75] Michael P. Allen, (2004), “Introduction to Molecular Dynamics Simulation”, *NIC Series*, Vol. 23, ISBN 3-00-012641-4, pp. 1-28.
- [76] N. L. Allinger, Y. H. Yuh, and J.-H. Lii., (1989), “Molecular mechanics - the MM3 force\_eld for hydrocarbons. 1.”, *J. Am. Chem. Soc.*, 111:8551.8566.
- [77] J.-H. Lii and N. L. Allinger, (1989) “Molecular mechanics - the MM3 force\_eld for hydrocarbons. 3. the Van der Waals potentials and crystal data for aliphatic and aromatic hydrocarbons”, *J. Am. Chem. Soc.*, 111:8576.8582.
- [78] N. L. Allinger, K. S. Chen, and J.-H. Lii., (1996) “An improved force field (MM4) for saturated hydrocarbons”, *J. Comput. Chem.*, 17:642.668.
- [79] N. Nevins, J.-H. Lii, and N. L. Allinger, (1996) “Molecular mechanics (MM4) calculations on conjugated hydrocarbons”, *J. Comput. Chem.*, 17:695.729.
- [80] S. J. Weiner, P. A. Kollman, D. A. Case, U. C. Singh, C. Ghio, G. Alagona, S. Profeta, and P. Weiner, (1984) “A new force field for molecular mechanical simulation of nucleic acids and proteins”, *J. Am. Chem. Soc.*, 106:765.784.
- [81] W. D. Cornell, P. Cieplak, C. I. Bayly, I. R. Gould, K. M. Merz, D. M. Ferguson, D. C. Spellmeyer, T. Fox, J. W. Caldwell, and P. A. Kollman, (1995) “A 2nd generation force field for the simulation of proteins, nucleic-acids, and organic molecules”, *J. Am. Chem. Soc.*, 117:5179.5197.
- [82] B. R. Brooks, R. E. Bruccoleri, B. D. Olafson, D. J. States, S. Swaminathan, and M. Karplus, (1983) “CHARMM - A program for macromolecular energy, minimization, and dynamics calculations”, *J. Comput. Chem.*, 4:187.217.
- [83] W. L. Jorgensen, D. S. Maxwell, and J. TiradoRives, (1996) “Development and testing of the OPLS all-atom force field on conformational energetics and properties of organic liquids. *J. Am. Chem. Soc.*, 118:11225.11236.
- [84] Machida, K., (1999), “*Principles of Molecular Mechanics*”, Kodansha and John Wiley & Sons Co-publication, Tokyo.
- [85] Cornell, W.D., Cieplak, P., Bayly, C.I., et al., (1995) “A second generation force-field for the simulation of proteins, nucleic-acids, and organic-molecules”, *Journal of American Chemical Society* 117, 5179–5197.
- [86] A. K. Rappe (1992). *J. Am. Chem. Soc.* 114, 10024.
- [87] Brenner, D.W., (1990) “Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films”, *Physical Review B* 42, 9458.
- [88] Mayo, S.L., Olafson, B.D., Goddard, W.A., (1990) “Dreiding - a generic force-field for molecular simulations”, *Journal of Physical Chemistry* 94, 8897–8909.
- [89] Gelin, B.R., (1994) “Molecular Modeling of Polymer Structures and Properties”, Hanser / Gardner Publishers, Cincinnati.
- [90] Charlier J C (2002), “Defects in carbon nanotube”, *Acc. Chem. Res.* **35** 1063–9.
- [91] Saether E (2003) “Transversemechanical properties of carbon nanotube crystals”, *Compos. Sci. Technol.* **63** 1551–9.

- [92] Ouyang M *et al*, (2001) “Atomically resolved single-walled carbon nanotube intramolecular junctions”, *Science* **291** 97.
- [93] Andras Kis, Alex Zettl, (2008), “Nanomechanics of Carbon Nanotubes”, *Philosophical Transactions of the Royal Society*, 1591-1611.
- [94] T. Lobo, M.S. Figueira, and M.S. Ferreira, (2006) “Electronic Transport through a Single-Wall Carbon Nanotube with a Magnetic Impurity”, *Brazilian Journal of Physics*, vol. 36, no. 2A.

## Abstract

Discovery of unique properties of carbon nanotubes like mechanical, electrical and thermal properties by Iijima since 1991 has attracted many of researches. These properties cause to use carbon nanotubes in medical application, reinforced in composite material, sensors and resonators etc. Resonators are key components in signal processing systems. Reduction in the size of a resonator enhances its resonant frequency and reduces its energy consumption. For sensors, higher resonant frequency means higher sensitivity. For wireless communications, higher frequency resonators enable the production of higher frequency filters, oscillators, and mixers. CNTs have favorable properties, such as extremely high in-plane elastic modulus, high natural frequency and thermal conductivity. These properties, combined with their nanometer-sized, perfect atomic structure, imply that CNTs have potential applications in nano-electromechanical systems, such as components for high frequency oscillators in sensing and signal processing applications. Meanwhile vibration analysis of carbon nanotubes affects their application as nanoresonators strongly. Previous researches indicate that in the best situation at least one defect is observable in 1  $\mu\text{m}$  of CNTs length. One of the most important defects that occur during growth process is vacancy defect. This thesis presents the effect of vacancies on natural vibration of single walled carbon nanotubes. Zigzag and armchair carbon nanotube with chirality indices (8,0), (10,0) and (6,6) are considered. Vibration analysis for single walled carbon nanotubes with two boundary cantilevered and bridged are considered. Molecular dynamic model and finite element method are used to simulate SWCNTs. Related stiffness is calculated from molecular potential energy. Vacancies' effect is considered in two conditions, one a vacancy on structure, two scattered vacancies. Vacancies are scattered randomly on SWCNT structure for better simulation of actual condition. Accuracy of modelling is verified by comparing our results of predicting ideal SWCNT natural frequency, with results of previous studies. Results indicate that vacancies affect natural frequency of SWCNTs strongly. Effects of aspect ratio, diameter, distribution of vacancies, and boundary conditions on natural vibration of defected SWCNTs are investigated. Our results indicate that by decreasing aspect ratio and CNT diameter, natural vibration frequency shift increases. Distribution of vacancies affects natural frequency shift. As vacancies approach to the clamped end, natural frequency shift increases.