تحلیل رفتار کمانشی نانولوله‌های کربنی با استفاده از مکانیک مولکولی ساختاری

مهناز ذاکری[1]، امید افضل‌نژاد[2]

۱ استادیار دانشکدهٔ مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، m.zakeri@kntu.ac.ir

۲ دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکدهٔ مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

تاریخ دریافت: ۱۳۹۳/۰۴/۲۱

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۳/۱۱/۲۱

چکیده

بروز پدیدهٔ کمانش در شرایط متنوع بارگذاری به ناپایداری سازه می‌انجامد. اساساً بار بحرانی کمانش به عواملی چون هندسه، اندازه، نوع بار و شرایط مرزی بستگی دارد. هدف از نگارش این مقاله، مطالعهٔ اثر ساختار بر رفتار کمانشی نانولوله‌های کربنی است. برای اینکه اثر زاویهٔ کایرال مستقل از اثر اندازه بررسی شود، از هندسه‌هایی با ابعاد برابر و کایرالیتهٔ متفاوت استفاده شده است. برای شبیه‌سازی پیوندهای شیمیایی بین اتم‌های کربن، انرژی پیوند کووالانت کربن - کربن به‌روش مکانیک مولکولی با المان تیر مدل می‌شود. همچنین مختصات گره‌ها به‌وسیلهٔ الگوریتمی ساده تعیین می‌گردد. سپس اثر کایرالیته بر بار کمانش محوری و پیچشی برای انواع ساختارها، با استفاده از روش اجزای محدود تحلیل می‌شود. نتایج مقاله نشان می‌دهد که زاویهٔ کایرال اثر قابل توجهی بر بار کمانش محوری ندارد. اما در بارگذاری پیچشی، ساختار نانولوله تأثیر قابل توجهی بر پایداری آن دارد؛ به‌طوری‌که در شرایط کمانش پیچشی، ساختارهای کایرال ممکن است ضعیف‌تر یا قوی‌تر از ساختارهای متقارن عمل کنند.

واژگان کلیدی

روش محیط پیوستهٔ معادل، کایرالیته، کمانش، پیچش ساعتگرد و پادساعتگرد

۱. مقدمه

امروزه فناوری نانو دانش روز دنیا محسوب می‌شود؛ دانشی که در حوزهٔ مهندسی و طراحی سازه نیز گسترش چشمگیری یافته است. نانولوله‌های کربنی[1]، که در سال ۱۹۹۱ توسط سومیو ایجیما[2] معرفی شدند [۱]، به‌دلیل ویژگی‌های منحصر به‌فردی چون خواص مکانیکی، حرارتی و الکتریکی ویژه مورد توجه قرار گرفتند. در حوزهٔ دانش و فناوری هوافضا نیز شناخت رفتار نانوکامپوزیت‌ها و کاربرد آنها بخش عمده‌ای از توجه پژوهشگران را به‌خود اختصاص داده است. در نانوکامپوزیت‌ها غالباً نانولوله‌های کربنی نقش الیاف را دارند. این نانولوله‌ها ساختارهای متنوعی دارند و سبب ایجاد خواص مکانیکی متفاوتی می‌گردند. نانولوله‌ها می‌توانند به‌وسیلهٔ پیچیدن یک ورق مستطیل‌شکل از یک لایهٔ گرافیت مدل شوند تا در نهایت یک لولهٔ استوانه‌ای‌شکل توخالی حاصل شود. از جمله کاربردهای نانولوله‌های کربنی می‌توان به طراحی آسانسور فضایی[3]، کابل‌های بسیار قوی و نیز استفاده در

ساختار نانوکامپوزیت‌ها اشاره کرد. این مواد پیشرفته، به‌دلیل سفتی و استحکام بسیار زیاد و چگالی کم برای استفاده در سازه‌های هوایی و فضایی مناسب‌اند. از طرفی، نانولوله‌های کربنی ویژگی‌های الکتریکی و حرارتی منحصر به‌فردی دارند و می‌توانند در خواص سایشی کامپوزیت‌ها بهبود قابل ملاحظه‌ای ایجاد کنند. افزایش چقرمگی سازه‌ها و سفتی و استحکام آنها بدون کاهش بیشینهٔ کرنش شکست و همچنین افزایش عمر خستگی، از جمله ویژگی‌های منحصر به‌فرد استفاده از نانولوله‌های کربنی به‌عنوان تقویت‌کننده در کامپوزیت‌هایی با زمینهٔ پلیمری است. همچنین با به‌کارگیری این مواد می‌توان بارهای بحرانی کمانشی را افزایش داد و بر ایمنی عملکرد سازه افزود [۲]. نانولوله‌ها به‌سبب هندسه و مشخصات منحصر به‌فرد برای کاربردهای دقیقی چون تیرهای نوک میکروسکوپ‌های اکتشافی و نوک وسائل تشخیص ترک نیز مناسب‌اند [۳]. اما چون بار فشاری می‌تواند منجر به کمانش نانولوله شود، دقت و کیفیت این ابزار نیز کاهش می‌یابد و بر عملکرد کلی سازه تأثیر می‌گذارد. از طرفی نانولوله‌های کایرال، که ساختار هندسی نامتقارنی دارند، رفتار متفاوتی را در بارگذاری‌های پیچشی ساعتگرد و پادساعتگرد نشان می‌دهند و از اینرو نیازمند بررسی پایداری در کمانش پیچشی هستند [۴].

تاکنون تحقیقات گسترده‌ای در زمینهٔ بررسی رفتار کمانشی نانولوله‌های کربنی انجام شده است. هان و لو با استفاده از روش مکانیک محیط پیوسته، کمانش پیچشی نانولوله‌های دوجداره را، که در یک محیط الاستیک قرار گرفته بودند، بررسی کردند [۵]. وانگ و همکاران کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی چندجداره را مطالعه نمودند [۶]. چانگ و همکاران نیز میزان کرنش بحرانی را برای نانولوله‌های کربنی زیگزاگ و آرمچیر به‌دست آوردند [۷]. کائو و چن به‌کمک شبیه‌سازی اتمی، آثار طول، قطر و کایرالیتی را بر رفتار و خواص مکانیکی نانولوله‌ها بررسی کردند [۸]. وانگ و همکاران کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی را تحت بارگذاری ترکیبی محوری و پیچشی مطالعه نمودند [۹]. ژیاهو و کیانگ نیز رفتار کمانشی نانولوله‌های چندجداره را مطالعه کردند [۱۰]. سان و لیو به‌کمک دینامیک مولکولی رفتار کمانش نانولوله‌ای را که تحت بارگذاری ترکیبی محوری و پیچشی و فشار داخلی است بررسی کردند [۱۱]. یائو و همکاران رفتار کمانشی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره، دوجداره و چندجداره را به‌کمک روش اجزای محدود، تحت بار خمشی بررسی نمودند [۱۲]. قربان‌پور و همکاران با استفاده از نرم‌افزار انسیس[۴] و بهرگیری از المان پوسته، نانولوله‌های کربنی زیگزاگ و آرمچیر را مدلسازی کردند [۱۳]. کانگ و همکاران کمانش نانولوله‌های کربنی تحت بار فشاری محوری را به‌کمک دو روش مکانیک مولکولی و روش اجزای محدود محاسبه کردند [۱۴]. انصاری و روحی به‌کمک روش اجزای محدود تأثیر شرایط مختلف مرزی را بر بار کمانشی نانولوله‌های کربنی بررسی نمودند [۱۵]. ساودرا و همکاران نیز به‌کمک روش اجزای محدود هایپرالاستیک کمانش نانولولهٔ کربنی تک‌جداره را بررسی کردند [۱۶]. همچنین انصاری و همکاران نانولولهٔ تک‌جداره را در محیطی تحت تأثیر شرایط دمایی و بار فشاری مطالعه کردند [۱۷]. قوامیان و آکنـر در بررسی خود آثار عیوب را بر بار کمانشی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره و چندجداره، برای دو نوع زیگزاگ و آرمچیر بررسی کردند [۱۸]. شیمشک و یورتسو به‌کمک نظریهٔ تیر تیماشنکو غیرموضعی رفتار کمانشی و خمشی نانولوله‌ها را بررسی کردند [۱۹].

بررسی آثار طول، قطر و شرایط تکیه‌گاهی بر کمانش محوری و پیچشی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره، موضوع بسیاری از پژوهش‌های گذشته بوده است، اما تاکنون آثار ساختار نانولوله بر کمانش محوری و پیچشی آن بررسی نشده است. در این مقاله، رفتار کمانشی انواع نانولوله‌ها با ساختارهای گوناگون، تحت شرایط بارگذاری محوری و پیچشی مطالعه می‌شود. ساختارها به‌گونه‌ای انتخاب شده‌اند که دارای طول و قطر یکسان اما زاویهٔ کایرال متفاوت از صفر تا ۳۰ درجه هستند. نانولوله‌های کربنی براساس ارتباط بین مکانیک مولکولی و مکانیک محیط پیوسته و با جایگزینی المان تیر خطی به‌جای پیوندهای کربن - کربن شبیه‌سازی می‌شوند تا با انجام تحلیل‌های عددی اجزای محدود، تأثیر زاویهٔ کایرال بر پایداری نانولوله‌ها بررسی گردد.

۲. ساختار اتمی نانولوله

شبیه‌سازی نانولوله‌ها با ساختارهای گوناگون، پیچیدگی‌های خاصی داشته است. به‌طوری‌که مدل‌کردن این ساختارها برای تحلیل رفتار آنها همواره برای پژوهشگران چالش‌برانگیز بوده است. ساختار اصلی تشکیل‌دهندهٔ یک نانولوله، بدنهٔ استوانه‌ای آن است که از پیچیده‌شدن صفحهٔ گرافیتی با اندازه و جهتی معین به‌دست می‌آید. چون باید حاصل این پیچش تقارنی استوانه‌ای‌شکل باشد، برای به‌دست آوردن استوانهٔ بسته فقط

می‌توان صفحات را در جهتی خاص پیچید. بدین منظور دو اتم گرافیت انتخاب می‌شوند، یکی به‌عنوان مبدأ در نظر گرفته می‌شود، سپس صفحه پیچیده می‌شود تا اتم دوم روی اتم اول منطبق گردد. برداری که از اتم مبدا به جهت اتم دوم اشاره می‌کند، بردار کایرال نام دارد و به‌صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\overrightarrow{C_h}=n\overrightarrow{a_1}+m\overrightarrow{a_2} \qquad (۱)$$

طول این بردار برابر محیط نانولوله و محور نانولوله عمود بر بردار کایرال است. بیان فرایند لوله‌شدن از طریق بردارهای یکۀ $\overrightarrow{a_1}$ و $\overrightarrow{a_2}$ است. مقادیر n و m اعداد صحیحی هستند که نوع ساختار نانولوله را مشخص می‌کند. سایر اندازه‌های نانولوله مثل محیط، قطر و زاویۀ کایرال را می‌توان به‌وسیلۀ این دو مقدار محاسبه کرد. قطر و زاویۀ کایرال نانولوله $(0\le\theta\le 30)$ به‌صورت روابط ۲ و ۳ محاسبه می‌شود:

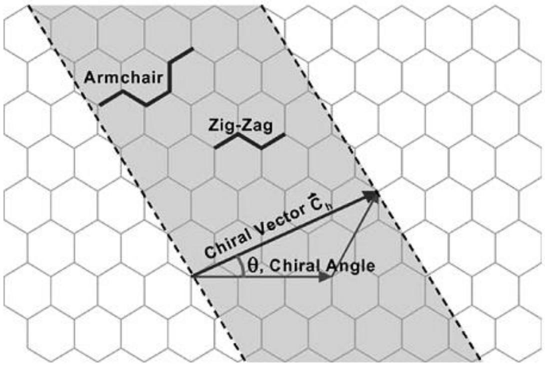
$$D=\frac{a_{c-c}\sqrt{3\left(n^2+m^2+nm\right)}}{\pi} \qquad (۲)$$

$$\cos\theta=\frac{2n+m}{2\sqrt{n^2+m^2+nm}} \qquad (۳)$$

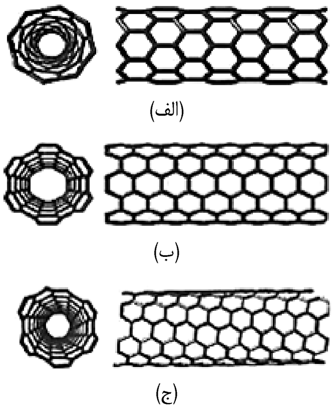
به‌طوری‌که در رابطۀ ۲، a_{c-c} طول پیوند کربن - کربن است که برابر با ۰/۱۴۲ نانومتر می‌باشد [۲۰]. نانولوله‌هایی با ساختار (n,n) با زاویۀ کایرال ۳۰ درجه، آرمچیر و با ساختار $(n,0)$ با زاویۀ کایرال صفر درجه، زیگزاگ نامیده می‌شوند. نانولوله‌هایی با ساختارهای غیرمنظم (n,m) که $n>m$ و زاویۀ کایرال $0<\theta<30$ را کایرال می‌نامند. در شکل ۱ صفحۀ گرافن، بردار و زاویۀ کایرال و در شکل ۲ نمونه‌هایی از انواع ساختار نانولوله‌ها شامل زیگزاگ، آرمچیر و کایرال نمایش داده شده است.

۳. مبانی مکانیک مولکولی و شبیه‌سازی اجزای محدود

روش مدلسازی محیط پیوسته معادل یکی از پیشرفته‌ترین روش‌های محیط پیوسته است که از ترکیب روش‌های مکانیک مولکولی و اجزای محدود ایجاد شده است. این روش عمدتاً روش‌های مدلسازی نانولوله با استفاده از المان‌های پوسته [۲۲]، خرپا، فنر و تیر را شامل می‌شود که برای تعیین خواص و رفتار استاتیکی و دینامیکی نانولوله‌ها قابل استفاده‌اند. المان‌های پوسته و خرپا در مدلسازی نانولوله‌های کربنی چندان دقت بالایی ندارند؛ زیرا با توجه به گسسته‌بودن هندسۀ نانولوله المان پوسته نمی‌تواند تقریب خوبی از رفتار نانولوله باشد و از طرفی المان‌های خرپایی هم به‌دلیل محدودیت در مدلسازی رفتار خمشی، برای مطالعۀ رفتار نانولوله‌های کربنی مناسب نمی‌باشند. اما به‌کمک المان‌های فنر و تیر می‌توان رفتار پیوندهای کربنی را به‌خوبی تقریب زد. برای مدلسازی تغییر شکل پیوندهای کربنی با استفاده از المان‌های فنر باید به‌طور همزمان از دو نوع فنر پیچشی و کششی استفاده کرد [۲۳]، که این در نانولوله‌های بزرگ سبب افزایش تعداد المان‌ها و هزینۀ محاسبات می‌شود. بنابراین با توجه به محدودیت‌های ذکرشده، المان‌های تیر جهت مدلسازی تغییر شکل نانولوله‌های کربنی مناسب‌ترین گزینه است.



شکل ۱. نمایش بردار و زاویۀ کایرال در یک صفحۀ گرافن [۲۱]


(الف)

(ب)

(ج)

شکل ۲. نمونه‌هایی از ساختار الف) زیگزاگ، ب) آرمچیر، ج) کایرال

در سطح مولکولی، برهم‌کنش بین اتم‌ها براساس انرژی‌های پتانسیل مولکولی توصیف می‌شود. برای مطالعۀ شبکۀ مولکولی تحت تغییر شکل‌های کوچک، انرژی پتانسیل پیوندی بین اتم‌ها را می‌توان با توابع پتانسیل غیرخطی یا توابع خطی هارمونیک تخمین زد. با توجه به کوچک‌بودن تغییر شکل‌ها، در این مقاله از توابع پتانسیل هارمونیک برای انرژی پتانسیل بین اتم‌ها استفاده می‌شود که براساس روابط ۴ تا ۶ بیان می‌گردند [۲۴]:

$$E_{total} = E_{bonded} + E_{nonbonded}$$ (۴)

$$E_{bonded} = E_s + E_b + E_t + E_l$$ (۵)

$$E_{nonbonded} = E_{vdw} + E_{es} + E_{hb}$$ (۶)

در این روابط E_{bonded}، $E_{nonbonded}$، E_s، E_b، E_t، E_l، E_{vdw}، E_{es} و E_{hb} به‌ترتیب عبارت‌اند از انرژی پیوندی، انرژی غیرپیوندی، انرژی پتانسیل کششی، خمشی، پیچشی، خارج صفحه‌ای، نیروهای واندروالس، نیروهای الکترواستاتیکی و پیوندهای هیدروژنی. برای ساده‌سازی روابط، معمولاً از انرژی‌های $E_{nonbonded}$، شامل انرژی نیروهای واندروالس، نیروهای الکترواستاتیکی و پیوندهای هیدروژنی و E_l صرف‌نظر می‌شود. در این‌صورت داریم:

$$E_{total} = E_s + E_b + E_t$$ (۷)

به‌طوری‌که در این رابطه داریم:

$$E_s = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2$$ (۸)

$$E_b = \frac{1}{2} k_\theta (\Delta \theta)^2$$ (۹)

$$E_t = \frac{1}{2} k_\varphi (\Delta \varphi)^2$$ (۱۰)

$$E_{tot} = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2 + \frac{1}{2} k_\theta (\Delta \theta)^2 + \frac{1}{2} k_\varphi (\Delta \varphi)^2$$ (۱۱)

در این روابط k_r، k_θ و k_φ به‌ترتیب معرف ثوابت نیرویی کشش پیوند، خمش پیوند و پیچش پیوند هستند. همچنین Δr، $\Delta\theta$ و $\Delta\varphi$ نیز به‌ترتیب نمایندهٔ تغییرات طول پیوند، زاویهٔ داخل صفحه‌ای پیوند و پیچش خارج صفحهٔ پیوند هستند. برای ثوابت نیرویی فوق می‌توان از مقادیر ۱۲ تا ۱۴ استفاده کرد [۲۰]:

$$k_r = 938 \frac{kcal}{mole.A^2} = 652 \frac{nN}{nm}$$ (۱۲)

$$k_\theta = 126 \frac{kcal}{mole.rad^2} = 0.876 \ nN \frac{nm}{rad^2}$$ (۱۳)

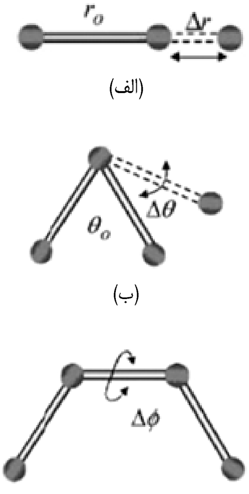
$$k_\varphi = 40 \frac{kcal}{mole.rad^2} = 0.278 \ nN \frac{nm}{rad^2}$$ (۱۴)

لی و چو تساوی بین انرژی پتانسیل بین مولکولی در محاسبات علم شیمی و انرژی کرنشی در مکانیک ساختاری را برقرار کردند [۲۵]. آنها با این روش، رابطه‌ای مستقیم بین پارامترهای مکانیک ساختاری و ثوابت میدان نیرویی مکانیک مولکولی ایجاد نمودند. بنا بر تحقیقات ایشان، روابط انرژی کرنشی ذخیره‌شده در تیر تحت بارگذاری‌های خالص کشش، خمش و پیچش (شکل ۳) عبارت‌اند از [۲۵]:

$$U_{Axial force} = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = \frac{N^2 L}{2EA} = \frac{EA}{2L} (\Delta L)^2$$ (۱۵)

$$U_{bending} = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = \frac{2EI}{L} \alpha^2 = \frac{EI}{2L} (2\alpha)^2$$ (۱۶)

$$U_{torsion} = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{T^2 L}{2GJ} \alpha^2 = \frac{GJ}{2L} (\Delta \beta)^2$$ (۱۷)



(الف)

(ب)

(ج)

شکل ۳. انواع تغییر شکل‌های المان تیر تحت بارگذاری

الف) کششی، ب) خمشی، ج) پیچشی

در روابط ۸ تا ۱۰ و ۱۵ تا ۱۷ ملاحظه می‌شود که E_s و $U_{Axial force}$ انرژی ناشی از کشش، E_b و $U_{bending}$ انرژی ناشی از خمش و E_t و $U_{torsion}$ انرژی ناشی از پیچش پیوندهای کربنی و المان تیر هستند. با معادل گرفتن ΔL با Δr، 2α با $\Delta\theta$ و $\Delta\beta$ با $\Delta\varphi$ در این روابط، معادلات ۱۸ تا ۲۰ به‌دست می‌آید:

$$k_r = \frac{EA}{L}$$ (۱۸)

$$k_\theta = \frac{EI}{L}$$ (۱۹)

$$k_\varphi = \frac{GJ}{L}$$ (۲۰)

با فرض سطح مقطع دایروی به قطر d و طول ۰/۱۴۲ نانومتر برای المان تیر مفروض و محاسبهٔ مشخصات مقطع به‌صورت زیر، مشخصات مکانیکی و هندسی المان تیر جایگزین پیوندها (شکل ۴) برابر است با [۲۰]:

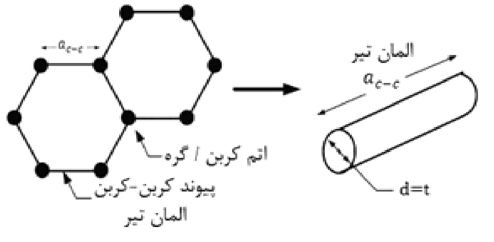
$$A = \frac{\pi d}{4} \ , \ I = \frac{\pi d^4}{64} \ , \ J = \frac{\pi d^4}{32}$$

$$d = 4\sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}} = 0.14662\ nm \tag{۲۱}$$

$$E = \frac{L\,{k_r}^2}{4\pi\, k_\theta} = 5.488\ \ TPa \tag{۲۳}$$

$$G = \frac{{k_r}^2\, k_\varphi\, L}{8\pi\, {k_\theta}^2} = 0.871\ \ TPa \tag{۲۳}$$

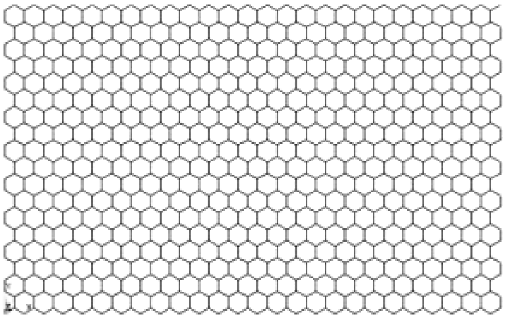
در این مقاله برای مدلسازی پیوند میان اتمهای کربن از المان تیر خطی BEAM4 استفاده شده است. این المان دو گرهی، الاستیک و با قابلیت تحلیل بارهای محوری، پیچشی و خمشی است و در هر گره شش درجه آزادی دارد [۲۶].



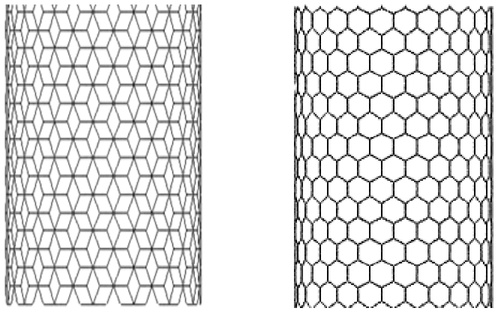
شکل ۴. مدلسازی پیوندهای کووالانسی بین اتم‌های کربن با المان تیر در روش محدود [۲۴]

۴. مدلسازی و تحلیل رفتار کمانشی نانولوله‌های کربنی

مدلسازی نانولوله‌های کربنی طی دو مرحله انجام می‌شود. ابتدا مدل هندسی شامل موقعیت گره‌ها (اتمهای کربن) و المان‌های متصل به آنها در بستهٔ نرم‌افزاری متلب[۵] ایجاد و نتایج آن در محیط نرم‌افزار انسیس فراخوانی می‌شود و صفحهٔ گرافن (شکل ۵) مدل می‌گردد. سپس رول‌کردن این صفحه در مختصات استوانه‌ای، بارگذاری و شرایط مرزی اعمال می‌شود. جدول ۱ مشخصات نانولوله‌های مورد بررسی در این مقاله را نشان می‌دهد. تمام ساختارها به‌گونه‌ای انتخاب شده‌اند که طول و قطر یکسانی داشته باشند تا در مرحلهٔ تحلیل، آثار طول و قطر حذف شده و فقط تأثیر زاویهٔ کایرال مشخص گردد. در این بررسی از نانولوله‌های کوتاه، متوسط و بلند با نسبت‌های منظری ۳، ۸ و ۱۲ و طول‌های ۶۰A، ۱۶۳A و ۲۴۰A استفاده شده است. برای افزایش نسبت منظری نانولوله‌ها، با انتخاب ساختارهایی که قطر تقریباً یکسان دارند، قطر نانولوله‌ها ثابت نگه داشته شده و فقط طول آنها افزایش یافته است. همچنین براساس نتایج پژوهش‌های پیشین، از قطر ۲۰A به بعد اثر قطر بر رفتار مکانیکی نانولوله‌های مدل شده قابل صرف‌نظر است [۲۷]، لذا در این مقاله، قطر نانولوله‌ها اندکی بیش از ۲۰A در نظر گرفته شده است. برای بررسی اثر زاویهٔ کایرال بر کمانش محوری نانولوله‌ها، تمام گره‌های یک طرف نانولوله را بسته و در انتهای دیگر آن، بر گرهٔ مرجعی که تعریف شده است بار فشاری ۱ نانونیوتن وارد می‌شود. بارگذاری بر گرهٔ مرجع سبب می‌شود بار به‌صورت یکنواخت بر تمام گره‌ها اعمال شود و از ایجاد تمرکز تنش و تغییر شکل‌های موضعی به‌علت تمرکز بار روی تک‌تک گره‌ها جلوگیری کند. این گره به‌کمک المان TARGE170 ایجاد شده است. شکل ۶ نمونه‌ای از مدل‌های نانولوله زیگزاگ و آرمچیر ایجادشده در محیط انسیس را نمایش می‌دهد. برای بررسی کمانش پیچشی نانولوله‌ها نیز از ساختارهای موجود در جدول ۱ استفاده می‌شود و هنگام بارگذاری بر گرهٔ مرجع به‌جای بار فشاری، گشتاور پیچشی به اندازهٔ ۰/۱ نانونیوتن - نانومتر اعمال می‌گردد.



شکل ۵. نمونه‌ای از صفحات گرافن برای مدلسازی نانولوله

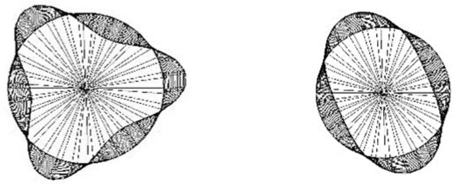

(الف)
(ب)

شکل ۶. مدل اجزای محدود ساختارهای الف) آرمچیر، ب) زیگزاگ

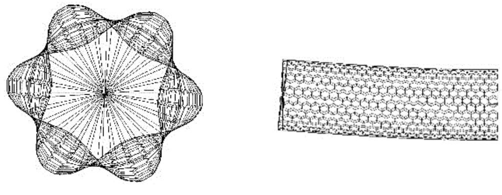
۵. بحث و بررسی نتایج

در این بخش، نتایج حاصل برای کمانش نانولوله‌ها ارائه و بررسی می‌شود. نخست اثر زاویهٔ کایرال بر کمانش محوری و سپس تأثیر آن بر کمانش پیچشی بررسی می‌گردد. شکل‌های ۷ تا ۹ چهار مد اول کمانش نانولولهٔ آرمچیر را برای نسبت‌های منظری ۳، ۸ و ۱۲ نشاش می‌دهد. همان‌طور که ملاحظه می‌شود، اولین مود کمانشی

که برای نسبت‌های منظری ۱۲ و ۸ اتفاق افتاده است، از نوع اویلری و برای نسبت منظری ۳ از نوع موضعی است.

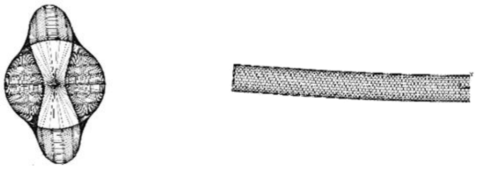


مود اول مود دوم

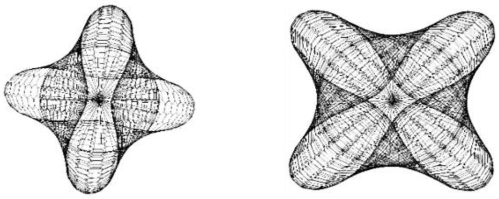


مود سوم مود چهارم

شکل ۷. چهار مود اول کمانش محوری نانولولهٔ آرمچیر با نسبت منظری ۳

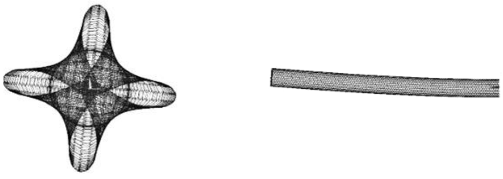


مود اول مود دوم

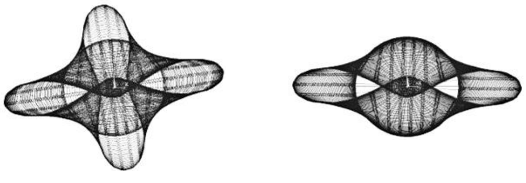


مود سوم مود چهارم

شکل ۸. چهار مود اول کمانش محوری نانولولهٔ آرمچیر با نسبت منظری ۸



مود اول مود دوم



مود سوم مود چهارم

شکل ۹. چهار مود اول کمانش محوری نانولوله آرمچیر با نسبت منظری ۱۲

در واقع، نتایج تحلیل‌ها برای تمام ساختارها نشان می‌دهد که در کمانش محوری، ناپایداری در قالب دو نوع مود کمانشی اتفاق می‌افتد و نوع اولین مود کمانشی به نسبت منظری نانولوله بستگی دارد. بدین‌صورت که برای نانولوله‌های بلند و متوسط، کمانش کلی و برای نانولوله‌های کوتاه کمانش موضعی اتفاق می‌افتد.

جدول ۱. مشخصات هندسی نانولوله‌های مورد بررسی

ساختار نانولوله	قطر (انگستروم)	نسبت منظری	زاویهٔ کایرال (درجه)
(۲۶،۰)	۲۰/۳۵	۸/۰۰	۰
(۲۶،۱)	۲۰/۷۵	۷/۸۵	۱/۸۷
(۲۵،۲)	۲۰/۴۰	۷/۹۹	۳/۸۱
(۲۵،۳)	۲۰/۸۴	۷/۸۱	۵/۵۹
(۲۴،۴)	۲۰/۵۳	۷/۹۴	۷/۵۸
(۲۳،۵)	۲۰/۲۴	۸/۰۴	۹/۶۳
(۲۳،۶)	۲۰/۲۴	۷/۸۵	۱۱/۳۰
(۲۲،۷)	۲۰/۵۲	۷/۹۴	۱۳/۳۷
(۲۱،۸)	۲۰/۳۱	۸/۰۲	۱۵/۴۹
(۲۰،۹)	۲۰/۱۲	۸/۰۹	۱۷/۶۴
(۲۰،۱۰)	۲۰/۷۱	۷/۸۶	۱۹/۱۰
(۱۹،۱۱)	۲۰/۵۷	۷/۹۲	۲۱/۲۴
(۱۸،۱۲)	۲۰/۴۷	۷/۹۶	۲۳/۴۱
(۱۷،۱۳)	۲۰/۴۰	۷/۹۹	۲۵/۵۹
(۱۶،۱۴)	۲۰/۳۵	۸/۰۰	۲۷/۷۹
(۱۵،۱۵)	۲۰/۳۴	۸/۰۱	۳۰

شکل‌های ۱۰ و ۱۱ نیز تغییرات نیروی بحرانی مربوط به هر یک از مودهای کلی و موضعی را برای نسبت‌های منظری مختلف AR[۶] با تغییر کایرالیتهٔ ساختارها نشان می‌دهند. از نمودارهای ۱۰ و ۱۱ مشاهده می‌شود که اثر کایرالیته بر بار کمانش محوری نانولوله‌های کربنی ناچیز و قابل صرف‌نظر است. به‌طوری‌که با تغییر زاویهٔ کایرال از ۰ تا ۳۰ درجه، بار بحرانی دچار تغییرات قابل توجهی نمی‌شود. از طرفی با دقت در شکل ۱۰ مشاهده می‌شود که با کاهش نسبت منظری (کاهش طول) مقدار بار بحرانی از

مقدار تقریبی ۶ نانونیوتن برای نسبت منظری ۱۲ به مقدار تقریبی ۱۲ نانونیوتن برای نسبت منظری ۸ رسیده و تقریباً دو برابر شده است. همچنین آثار کایرالیتی محسوس‌تر است، به‌طوری‌که میزان تغییرات نیروی بحرانی با تغییرات کایرالیتی نسبت به نانولوله‌های بلندتر به حدود ۱۰ درصد می‌رسد. شکل ۱۱ تغییرات بار بحرانی اولین مود کمانش موضعی با زاویهٔ کایرال را نمایش می‌دهد. طبق این نمودار، بیشترین مقدار بار بحرانی به ازای نسبت منظری ۳ است و برای نسبت‌های منظری ۸ و ۱۲ مقدار بار اولین مود کمانش موضعی با هم برابر و بر یکدیگر منطبق شده است. به‌منظور صحه‌گذاری مدلسازی و نتایج حاصل از این مقاله، مقادیر بار کمانش ساختارهای مختلف با نتایج قابل دسترس در پژوهش‌های پیشین مقایسه شده است.

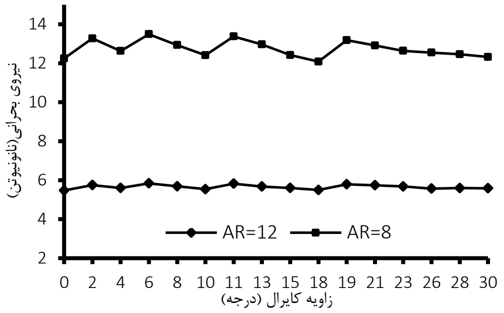
چن و همکاران برای انجام مدلسازی از روش اجزای محدود استفاده نموده و کمانش نانولوله‌هایی با ساختار متقارن را به‌کمک نرم‌افزار انسیس و با استفاده از المان تیر بررسی کرده‌اند [۲۸]. نتایج برای ساختار (۱۰و۱۰) در سه نسبت منظری ۱/۱۱، ۴/۰۶ و ۱۲/۶۸ اختلاف بسیار ناچیزی با مقالهٔ حاضر داشته‌اند و بیشترین اختلاف ۳/۲ درصد برای نسبت منظری ۱۲/۶۸ می‌باشد.

قوامیان و همکارش نیز با تکنیکی بر پایهٔ روش عددی اجزای محدود و با استفاده از توابع غیرخطی و المان فنر، ساختار (۱۰و۱۰) با نسبت منظری ۱۱/۶ را مدلسازی کردند و بار بحرانی کمانش را ۳/۹۲ نانونیوتن به‌دست آوردند که ۱/۵ درصد با نتیجهٔ پژوهش حاضر (۳/۹۸ نانونیوتن) اختلاف دارد [۱۸]. انصاری و روحی به‌کمک روش اجزای محدود و نرم‌افزار انسیس کمانش نانولوله‌های کربنی متقارن را بررسی کرده‌اند [۱۵]. در جدول ۲ نتایج مقالهٔ حاضر برای سایر ساختارها، با نتایج موجود در مقالات مختلف مقایسه شده است. اختلاف ناچیز بین این نتایج مؤید صحت مدلسازی انجام‌شده در این تحقیق است. نانولوله‌های کربنی به‌علت ساختار خاصشان نسبت به جهت اعمال گشتاور پیچشی - که می‌تواند راستگرد یا چپ‌گرد باشد - حساس بوده و رفتار دوگانه‌ای را از خود نشان می‌دهند [۴]. این رفتار ممکن است در مورد کمانش آنها هم صادق باشد. از اینرو در این بخش، رفتار کمانش پیچشی نانولوله‌ها بررسی شده است. در بررسی اثر زاویهٔ کایرال بر ناپایداری نانولوله‌ها تحت پیچش، از ساختارهای موجود در جدول ۱ استفاده شده است. شکل‌های ۱۲ تا ۱۴ نمودارهای حاصل از بررسی اثر زاویهٔ کایرال بر گشتاور پیچشی بحرانی را برای نسبت منظری‌های ۱۲، ۸ و ۳ نشان می‌دهد. ملاحظه می‌شود که در نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر مقادیر پیچش بحرانی در دو جهت مختلف با هم برابر است که این امر به‌علت تقارن هندسی دو ساختار می‌باشد.

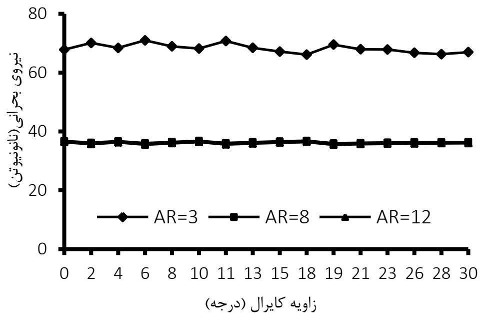
جدول ۲. صحه‌گذاری نتایج حاضر برای بارکمانش محوری با برخی از مطالعات گذشته

ساختار نانولوله	نسبت منظری	بار بحرانی کمانش محوری (نانونیوتن)			
		نتایج [۲۸]	نتایج [۱۵]	نتایج [۱۸]	مقالهٔ حاضر
(۵۰،۰)	۳/۲۴	۴۸	–	–	۴۶/۹۳
(۱۳،۰)	۵/۸۹	۶۹	–	–	۶۸/۹۳
(۶،۰)	۱۲/۷۷	۱۵	–	–	۱۴/۹۵
(۵،۵)	۲	–	۱۰۰	–	۱۰۶/۹
(۲۶،۰)	۷	–	۲۰	–	۲۲/۹۸
(۵۱،۰)	۷	–	۳۹	–	۳۷/۲۰
(۱۴،۰)	۱۴/۲۵	–	–	۲/۰۶۲	۲/۰۷

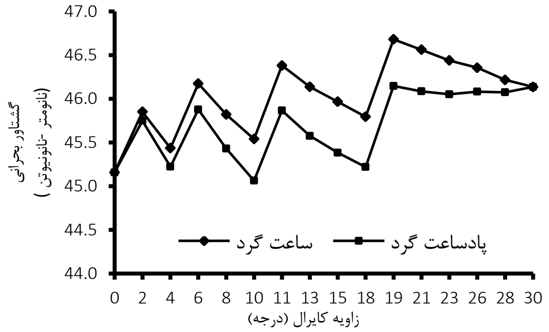
اما در مورد کمانش پیچشی نانولوله‌های کایرال، تغییرات گشتاور بحرانی با افزایش زاویهٔ کایرال روند یکنواختی را نشان نمی‌دهد. در واقع با تغییر زاویهٔ کایرال، جهت‌گیری المان‌ها تغییر کرده و تأثیر آنها در تحمل تنش‌های محیطی تغییر می‌یابد. بنابراین در هر زاویهٔ کایرالی که المان‌ها در جهت محیطی مؤثرتر باشند، پایداری بیشتری وجود خواهد داشت. از نمودارهای تغییرات گشتاور بحرانی با زاویهٔ کایرال برای هر سه نسبت منظری مشاهده می‌شود گشتاور بحرانی به ازای ساختار ۹/۶۴ درجه در حالت بارگذاری پیچشی پادساعتگرد کمترین مقدار را در بین ساختارها دارد. همچنین بیشترین مقدار گشتاور بحرانی در بین تمام ساختارها، به ازای زاویهٔ کایرال ۱۹/۱۱ است. نمودارهای گشتاور بحرانی به ازای هر سه نسبت منظری نشان می‌دهند که میزان گشتاور بحرانی برای نانولوله‌های آرمچیر بیشتر از زیگزاگ است؛ یعنی ساختار آرمچیر در برابر پیچش پایدارتر است که این امر را می‌توان متأثر از قرارگیری المان‌های بیشتر در راستای محیطی نانولوله در این ساختارها دانست.



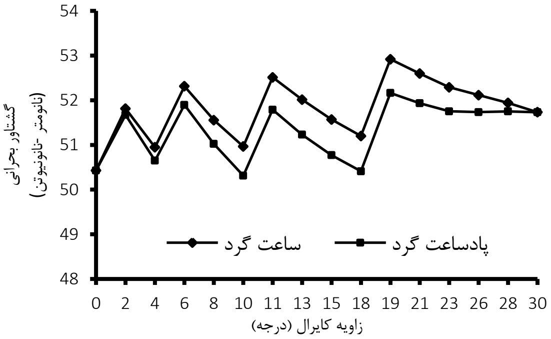
شکل ۱۰. تغییرات بار بحرانی با زاویهٔ کایرال در اولین مود کمانش کلی



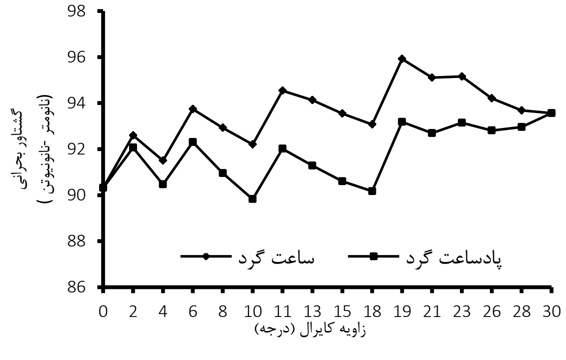
شکل ۱۱. تغییرات بار بحرانی با زاویهٔ کایرال در اولین مود کمانش موضعی



شکل ۱۲. تغییرات گشتاور بحرانی با زاویهٔ کایرال (نسبت منظری ۱۲)



شکل ۱۳. تغییرات گشتاور بحرانی با زاویهٔ کایرال (نسبت منظری ۸)



شکل ۱۴. تغییرات گشتاور بحرانی با زاویهٔ کایرال (نسبت منظری ۳)

۶. نتیجه‌گیری

در این مقاله با استفاده از روش اجزای محدود رفتار کمانش محوری و پیچشی نانولوله‌های کربنی بررسی شد. برای شبیه‌سازی نانولوله‌ها، المان تیر خطی به‌عنوان جایگزین برای پیوندهای کربن - کربن به‌کار رفت. در بررسی آثار زاویهٔ کایرال بر رفتار کمانش محوری و پیچشی نانولوله‌ها نتایجی بدین قرار حاصل شد. در کمانش محوری، پارامترهای طول و قطر بیشترین تأثیر را بر بار بحرانی دارند و تغییرات کایرالیتی اثر قابل توجهی بر نانولوله‌ها در نسبت‌های منظری بالا ندارد. اما در نسبت‌های منظری پایین، آثار کایرالیتی محسوس‌تر می‌شود. برای نسبت‌های منظری پایین، مود کمانش موضعی و برای نسبت‌های منظری بالا مود کمانش کلی اولین مود ناپایداری کمانشی است که روی خواهد داد. همچنین بیشترین مقدار گشتاور پیچشی بحرانی به ازای زاویهٔ کایرال ۱۹/۱۱ درجه است که نشان‌دهندهٔ پایداری بیشتر آن در بین انواع ساختارهاست. در حالت بارگذاری پادساعتگرد، کمترین مقدار گشتاور پیچشی بحرانی مربوط به نانولوله با زاویهٔ کایرال ۹/۶۴ درجه است.

۷. مآخذ

[1] Iijima, S. Helical microtubules of graphitic carbon, *nature,* Vol. 354, No. 6348, 1991, pp. 56-58.

[2] Asadi, E., M. FarhadiNia. Vibrational study of laminated composite plates reinforced by carbon nanotubes, *Modares Mechanical Engineering,* Vol. 14, No. 3, 2014, pp. 7-16.

[3] O'Connell, M., *Carbon nanotubes: properties and applications*, United States of America: CRC Press Taylor & Francis Group, 2006.

[4] Shima, H. “Buckling of carbon nanotubes: a state of the art review.” *Carbon Nanotubes: Synthesis, Characterization and Applications,* Vol. 5, 2011, pp. 47-84.

[5] Han Q., G. Lu. “Torsional buckling of a double-walled carbon nanotube embedded in an elastic medium.” *European Journal of Mechanics-A/Solids,* Vol. 22, No. 6, 2003, pp. 875-883.

[6] Wang, X., H. Yang, K. Dong. “Torsional buckling of multi-walled carbon nanotubes.” *Materials Science and Engineering: A,* Vol. 404, No. 1, 2005, pp. 314-322.

[7] Chang, T., G. Li, X. Guo. “Elastic axial buckling of carbon nanotubes via a molecular mechanics model.” *Carbon,* Vol. 43, No. 2, 2005, pp. 287-294.

[8] Cao, G., X. Chen. “The effects of chirality and boundary conditions on the mechanical properties of single-walled carbon nanotubes.” *International Journal of Solids and Structures,* Vol. 44, No. 17, 2007, pp. 5447-5465.

[9] Zhang, Y., V. Tan, C. Wang. “Effect of strain rate on the buckling behavior of single-and double-walled carbon nanotubes.” *Carbon,* Vol. 45, No. 3, 2007, pp. 514-523.

[10] Xiaohu, Y., H. Qiang. “Investigation of axially compressed buckling of a multi-walled carbon nanotube under temperature field.” *Composites science and technology,* Vol. 67, No. 1, 2007, pp. 125-134.

[11] Sun, C., K. Liu. “Combined torsional buckling of multi-walled carbon nanotubes coupling with axial loading and radial pressures.” *International journal of solids and structures,* Vol. 45, No. 7, 2008, pp. 2128-2139.

[12] Yao, X., Q. Han, H. Xin. “Bending buckling behaviors of single-and multi-walled carbon nanotubes.” *Computational Materials Science,* Vol. 43, No. 4, 2008, pp. 579-590.

[13] Ghorbanpour Arani, A., R. Rahmani, A. Arefmanesh. “Elastic buckling analysis of single-walled carbon nanotube under combined loading by using the ANSYS software.” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures,* Vol. 40, No. 7, 2008, pp. 2390-2395.

[14] Kang, Z., M. Li, Q. Tang. “Buckling behavior of carbon nanotube-based intramolecular junctions under compression: Molecular dynamics simulation and finite element analysis.” *Computational Materials Science,* Vol. 50, No. 1, 2010, pp. 253-259.

[15] Ansari, R., S. Rouhi. “Atomistic finite element model for axial buckling of single-walled carbon nanotubes.” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures,* Vol. 43, No. 1, 2010, pp. 58-69.

[16] Saavedra Flores, E., S. Adhikari, M. Friswell, F. Scarpa. “Hyperelastic axial buckling of single wall carbon nanotubes.” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures,* Vol. 44, No. 2, 2011, pp. 525-529.

[17] Ansari, R., S. Sahmani, H. Rouhi. “Axial buckling analysis of single-walled carbon nanotubes in thermal environments via the Rayleigh–Ritz technique.” *Computational Materials Science,* Vol. 50, No. 10, 2011, pp. 3050-3055.

[18] Ghavamian, A., A. Öchsner. “Numerical investigation on the influence of defects on the buckling behavior of single-and multi-walled carbon nanotubes.” *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. Vol. 46, 2012, pp. 241-249.

[19] Şimşek, M., H. Yurtcu. “Analytical solutions for bending and buckling of functionally graded nanobeams based on the nonlocal Timoshenko beam theory.” *Composite Structures,* Vol. 97, 2013, pp. 378-386.

[20] Tserpes, K., P. Papanikos. “Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes.” *Composites Part B: Engineering,* Vol. 36, No. 5, 2005, pp. 468-477.

[21] Lu, X., Z. Hu. “Mechanical property evaluation of single-walled carbon nanotubes by finite element modeling.” *Composites Part B: Engineering,* Vol. 43, No. 4, 2012, pp. 1902-1913.

[22] Pantano, A., D. M Parks, M. C. Boyce. “Mechanics of deformation of single-and multi-wall carbon nanotubes.” *Journal of the Mechanics and Physics of Solids,* Vol. 52, No. 4, 2004, pp. 789-821.

[23] Meo, M., M. Rossi. “Prediction of Young’s modulus of single wall carbon nanotubes by molecular-mechanics based finite element modelling.” *Composites Science and Technology,* Vol. 66, No. 11, 2006, pp. 1597-1605.

[24] Wernik, J., S. Meguid. “Multiscale modeling of the nonlinear response of nano-reinforced polymers.” *Acta Mechanica,* Vol. 217, No. 1-2, 2011, pp. 1-16.

[25] Li, C., T.-W. Chou. “A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes.” *International Journal of Solids and Structures,* Vol. 40, No. 10, 2003, pp. 2487-2499.

[26] *Ansys Software Help,* 12.0 Release, SAS IP, Inc, 2009.

[27] Zakeri, M., O. Basiri. “Estimation of shear and bending moduli for carbon nanotubes with chirral structures.” *Modares Mechanical Engineering,* Vol. 13, No. 14, 2014, pp. 56-67.

[28] Chen, L., Q. Zhao, H. Zhang. “Axial buckling behavior of single-walled carbon nanotubes with finite element modeling”, in Proceeding of, IEEE, NEMS, 2010, pp. 276-279.

پی‌نوشت

---

1. carbon nanotubes
2. Sumio Iijima (1939 –   )
3. space elevator
4. ANSYS ®
5. MATLAB ®
6. aspect ratio