

تأثیر زاویه کایرال بر خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره

مهناز ذاکری^۱، مهدی شایانمهر^۲

دانشکده مهندسی هوافضا، دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی

دریافت مقاله: ۱۳۹۲/۰۲/۱۹

پذیرش مقاله: ۱۳۹۲/۰۵/۰۶

چکیده

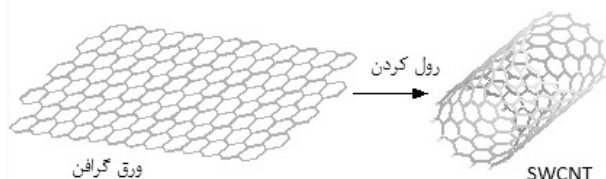
نانولوله‌های کربنی، آلوتروپ‌هایی از کربن با ویژگی‌های منحصر به فرد هستند. ساختار هر نانولوله با برداری به نام بردار کایرال توصیف می‌شود. در این مقاله، با دریافت طول نانولوله و دو مقدار ورودی n و m برای معرفی بردار کایرال در یک الگوریتم ساده، موقعیت اتم‌های کربن مشخص شده و هندسه کامل نانولوله شبیه‌سازی می‌گردد. سپس رفتار نمونه‌های گوناگونی از نانولوله‌ها با زوایای کایرال مختلف، با انجام تحلیل اجزای محدود، مورد بررسی قرار گرفته و خواص مکانیکی آنها به دست می‌آید. مقایسه نتایج مدل‌سازی حاضر با نتایج موجود در سایر مراجع و ناچیز بودن میزان خطا، نشان دهنده دقت مناسب الگوریتم حاضر در شبیه‌سازی هندسه نانولوله‌ها است. نتایج نشان می‌دهد که نانولوله‌های کربنی در زوایای کایرال بین ۱۷ تا ۲۲ درجه بیشترین مدول کششی را دارند که مقدار آن در حدود ۱ TPa است.

کلید واژه

نانولوله کربنی، مدل‌سازی اجزای محدود، زاویه کایرال، خواص مکانیکی.

مقدمه^۱

هگزاگونال به صورت استوانه ساخته می‌شوند و نانولوله کربنی چندجداره از چند لوله گرافیتی هم مرکز تشکیل شده است. به طور کلی، یک نانولوله می‌تواند با پیچیدن یک ورق مستطیل شکل از یک لایه گرافن مدل شود تا در نهایت یک لوله استوانه‌ای شکل به دست آید مانند شکل (۱).



شکل ۱. نحوه تولید نانولوله با رول کردن صفحه گرافن

از جمله روش‌های مورد استفاده برای مدل‌سازی و بررسی خواص مکانیکی نانولوله‌ها می‌توان به روش‌های مدل‌سازی اتمی، حل تحلیلی و روش‌های عددی اشاره کرد (مانند [۴-۱]). مطالعات حوزه مدل‌سازی‌های اتمی به سه دسته کلی دینامیک مولکولی، روش‌های کوانتومی آبی.م.م. و روش مونت کارلو تقسیم می‌شود [۵]. در روش‌های دینامیک مولکولی و مونت کارلو، نیروهای موثر بر روی اتم‌ها با مشتق‌گیری از توابع پتانسیل بین اتمی

امروزه در حوزه مهندسی مکانیک و هوافضا، شناخت رفتار نانوکامپوزیت‌ها و کاربرد آنها برای طراحی سازه‌هایی مقاوم‌تر و سبک‌تر، مورد توجه زیادی قرار گرفته است. در نانوکامپوزیت‌ها غالباً نانولوله‌های کربنی نقش الیاف را بر عهده دارند. این نانولوله‌ها ساختارهای مختلفی دارند که باعث خواص مکانیکی متفاوت در آنها می‌گردد. همچنین مشخصات مواد در مقیاس نانو می‌تواند نسبت به موارد مشابه خود در مقیاس بزرگ‌تر (ماکرو) بسیار متفاوت باشد. شبیه‌سازی نانولوله‌ها با ساختارهای گوناگون، پیچیدگی‌های خاصی داشته و مدل کردن این ساختارها برای تحلیل رفتار مکانیکی آنها، همواره برای محققین چالش برانگیز بوده است. نانولوله‌های کربنی که در سال ۱۹۹۱ توسط سومیو ایجیما کشف شدند، در واقع لوله‌هایی از گرافیت می‌باشند که خواص جالب توجهی را به همراه خود دارند و در چند سال اخیر مورد توجه فراوان محققین قرار گرفته‌اند. این آلوتروپ‌ها اندازه‌های مختلفی داشته و می‌توانند تک جداره یا چندجداره باشند. نانولوله کربنی تک‌جداره از لوله کردن صفحات گرافیتی با ساختار

۱. استادیار، m.zakeri@kntu.ac.ir (نویسنده مخاطب)

۲. کارشناس ارشد، mahdishayanmehr@gmail.com

محدود قرار می‌گیرند تا رفتار نانولوله‌ها تحت بارگذاری‌های مختلف کششی، خمشی و پیچشی بررسی شده و خواص مکانیکی آنها تعیین شود.

الگوریتم مدل‌سازی هندسی نانولوله کربنی

سلول واحد ساختار هگزاگونال یک نانولوله با یک بردار بیکه توصیف می‌شود که بردار کایرال (C_h) نامیده می‌شود. در نانولوله‌ها، مختصات اتم‌های کربن توسط دو بردار a_1 و a_2 که با هم زاویه 60° دارند بیان می‌شود (شکل ۲). از ترکیب a_1 و a_2 می‌توان بردار کایرال را تعریف کرد. این بردار که مشخصه اصلی ساختار نانولوله است از رابطه (۱) محاسبه می‌شود [۱۵]:

$$C_h = na_1 + ma_2 \quad (1)$$

که n بیانگر تعداد شش ضلعی‌ها در راستای a_1 و m بیانگر تعداد شش ضلعی‌ها در راستای a_2 است. نانولوله‌ای که در ساختار آن $m = n = 0$ است زیگزآگ نامیده می‌شود. این نانولوله‌ها دارای زاویه کایرال صفر هستند. وقتی در ساختار یک نانولوله $m = n$ است، این ساختار آرمیچر نامیده می‌شود. در این نانولوله زاویه کایرال 30° است. در مقابل ساختارهای متقارن آرمیچر و زیگزآگ، نانولوله‌های کایرال قرار دارند که در آنها $m \neq n$ است. همان‌طور که در شکل (۲) مشاهده می‌شود، بردار کایرال یک لبه مستطیل را تشکیل داده است، پس بردار ثانویه‌ای برای تشکیل کامل نانولوله مورد نیاز است که این بردار، بردار انتقالی T بوده و به صورت کوتاه‌ترین بردار عمود بر C_h که به اتم کربن برخورد می‌کند تعریف می‌شود. زمانی که صفحه مستطیل شکل پیچیده می‌شود ابتدا و انتهای C_h بر هم منطبق شده و طول این بردار، محیط نانولوله را تعیین می‌کند. محور نانولوله نیز موازی بردار T می‌باشد.

برای مدل‌کردن هندسه نانولوله‌ها، الگوریتم کامل و قابل استفاده‌ای در مقالات ارائه نشده است. با توجه به هزینه بالای مورد نیاز برای تهیه نرم افزارهای مدل‌سازی نانولوله‌ها، به نظر می‌رسد که استخراج یک الگوریتم برنامه‌نویسی بر اساس هندسه ورق گرافن بسیار مفید خواهد بود. در این پژوهش برای مدل‌کردن نانولوله‌هایی با انواع ساختار زیگزآگ، آرمیچر و ساختارهای کایرال دلخواه، الگوریتم ساده‌ای ارائه شده است. در مرحله اول از این الگوریتم، یک ورق گرافن به صورت شکل (۲) در نظر گرفته شده و با دریافت سه مقدار ورودی شامل طول نانولوله، n و m به تولید مدل هندسی پرداخته می‌شود. بر اساس داده‌های ورودی، مقدار زاویه کایرال θ از رابطه (۲) محاسبه می‌گردد:

$$\theta = \text{Arc tan} \left(\frac{n \cdot \sin 60}{n \cdot \cos 60 + m} \right) = \text{Arc tan} \left(\frac{n\sqrt{3}}{n + 2m} \right) \quad (2)$$

به دست می‌آید. روش آ. بی. مقدماتی نیز بر اساس حل دقیق معادله شرودینگر استوار است [۶].

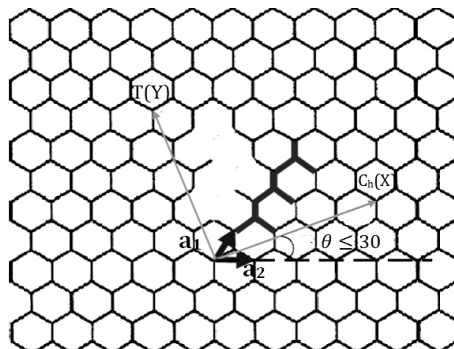
اودگارد و همکارانش برای اولین بار در سال ۲۰۰۲ روش محیط پیوسته معادل را به صورت تحلیلی توسعه دادند [۷]. در این روش، پیوندهای کربن - کربن در ساختار نانولوله با المان خرپا جایگزین شدند و با مساوی قراردادن انرژی پتانسیل مولکولی نانولوله با انرژی کرنشی کل سازه خرپایی معادل آن، ارتباط بین شیمی محاسباتی و مکانیک محیط پیوسته برقرار شد. اما نیاز به ارتقاء روش‌های مدل‌سازی و توسعه شیوه‌های سریع‌تر برای محاسبه خواص مکانیکی نانولوله کربنی، محققین را به سمت استفاده از روش‌های عددی سوق داده است. آنچه در این مدل‌سازی‌ها حائز اهمیت است، نوع المان به کار رفته برای مدل کردن پیوند کووالانته کربن-کربن و تابع پتانسیل مورد استفاده برای مدل‌سازی این پیوند است.

برای استفاده از تئوری‌های محیط پیوسته جهت مدل‌سازی نانولوله کربن که یک سازه گسسته می‌باشد، توسعه روش‌های محیط پیوسته نانومقیاس که تئوری‌های مکانیک محیط پیوسته را با ساختار مولکولی نانومقیاس ترکیب می‌کنند، مورد توجه محققین قرار گرفته است. در سال ۲۰۰۳، لی و چو [۸] موفق به برقراری رابطه‌ای بین فضای مکانیک سازه‌ای و مکانیک مولکولی به منظور استخراج پارامترهای سفتی المان تیر جانشین پیوندهای کربن-کربن با استفاده از روشی موسوم به مکانیک ساختار مولکولی شدند.

در میان انبوه تحقیقات صورت گرفته، کورن ول و وایل [۹] و همچنین یاو و لوردی [۱۰] با مطالعاتی مبتنی بر مدل‌سازی اتمی، به رفتار کاهنده مدول الاستیک نانولوله با افزایش قطر آن اشاره کرده‌اند. ژانگ و همکارانش [۱۱] و نیز گائو و لی [۱۲] مدول یانگ نانولوله را با فرض رول کردن ورق گرافن محاسبه نموده‌اند. نات سوکی و همکارانش [۱] کاهش مدول یانگ را با افزایش قطر نانولوله به واسطه جایگزین کردن نانولوله با استوانه توپر گزارش کرده‌اند. شکریه و همکاران [۱۳] از مدل الاستیک خطی برای مدل کردن چند ساختار از نانولوله‌ها استفاده کرده و مدول یانگی معادل 1TPa به دست آوردند. آیت‌اللهی و همکاران [۱۴] برای مدل کردن نانولوله از پتانسیل غیر خطی مورس استفاده کرده و مشاهده کردند که تا حدود کرنش ۰.۵٪، نانولوله رفتاری کاملاً خطی دارد اما پس از کرنش ۰.۵٪ رفتار آن تغییر می‌کند.

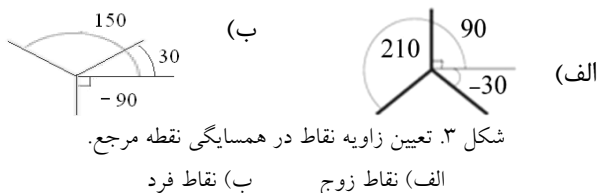
ما در مطالعات انجام گرفته، ساختارهای نامتقارن یا نانولوله کایرال به ندرت مورد توجه و بررسی قرار گرفته است. در این مقاله، ابتدا الگوریتم ساده‌ای معرفی می‌شود که با استفاده از آن می‌توان نانولوله با هر ساختار دلخواه را مدل‌سازی کرد. سپس مدل‌های ایجاد شده بر اساس این الگوریتم، مورد تحلیل اجزای

که θ زاویه بین محور a_2 و بردار کایرال C_h است. به دلیل تقارن، میزان زاویه θ از صفر تا 30° درجه تغییر می‌کند. پس از تعریف بردار C_h ، بردار عمود بر آن در داخل این صفحه به عنوان بردار T در نظر گرفته می‌شود (شکل ۲). همان‌طور که اشاره شد پس از رول کردن، ابتدا و انتهای C_h بر هم منطبق می‌شوند. لذا می‌توان بردار C_h را به عنوان محور x و بردار T را به عنوان محور y از مختصات کارتزین دوبعدی در نظر گرفت.



شکل ۲. پارامترهای ورق گرافن برای مدل‌سازی نانولوله

تمامی همسایه‌های نقاط زوج، فرد هستند و بالعکس. برای مثال، وقتی نقطه $(0,0)$ زوج است، همسایه‌های ۱ و ۲ و ۳ آن نقاطی فرد هستند. پس برای محاسبه مجدد نقطه مرجع، باید از معادلات شماره (۵) و (۶) استفاده شود. با تعیین نقاط همسایه برای هر نقطه مرجع، خط رابطی نیز بین هر دو نقطه ایجاد می‌گردد تا به عنوان پیوند میان اتم‌های کربن، مورد استفاده قرار گیرد. پس از محاسبه مختصات تمام نقاط و مشخص شدن موقعیت اتم‌های کربن در مختصات کارتزین، صفحه گرافن مورد نظر برای رول کردن آماده است. شکل (۴) نمونه‌ای از هندسه تولید شده برای ورق گرافن را قبل از رول شدن آن نمایش می‌دهد. خطوط مورب روی این تصویر، نشان دهنده امتداد نقاطی هستند که پس از رول شدن ورق بر روی هم منطبق می‌شوند. در آخرین مرحله، مختصات کارتزین صفحه‌ای به مختصات سه بعدی استوانه‌ای تبدیل می‌شود تا ساختار استوانه‌ای شکل نانولوله حاصل گردد.

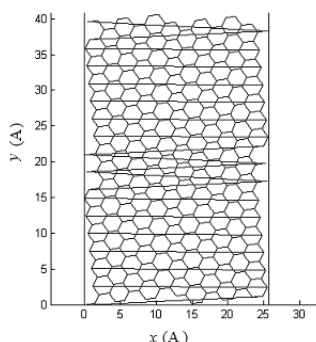


شکل ۳. تعیین زاویه نقاط در همسایگی نقطه مرجع.

الف) نقاط زوج ب) نقاط فرد

مدل‌سازی محیط پیوسته عددی

در این پژوهش برای بررسی ویژگی‌های نانولوله‌های کربنی، از روش مکانیک محیط پیوسته عددی استفاده شده است. در سطح مولکولی، برهم‌کنش بین اتم‌ها بر اساس انرژی‌های پتانسیل مولکولی توصیف می‌گردد. هسته‌های اتم‌ها به صورت نقاط مادی در نظر گرفته می‌شوند که حرکات آنها مبتنی بر حوزه نیروهای به وجود آمده از برهم‌کنش بین هسته - الکترون و هسته - هسته تنظیم می‌شود.



شکل ۴. یک نمونه ورق گرافن مدل شده در نرم افزار مطلب برای تشکیل نانولوله‌ای با ساختار (۷,۵).

اگرچه نانولوله‌های کربنی ساختارهایی با رفتار غیرخطی هستند اما برای مطالعه شبکه مولکولی تحت تغییر شکل‌های کوچک، انرژی پتانسیل پیوندی را می‌توان توسط توابع ساده هارمونیک به خوبی تخمین زد. بر اساس مراجع موجود، انرژی پتانسیل بین مولکولی برای

هر اتم کربن در صفحه گرافیت با ۳ اتم دیگر پیوند کووالانسی دارد. لذا در ساختار نانولوله، هر اتم دارای ۳ اتم همسایه خواهد بود. در مرحله اول از محاسبات می‌توان اتم یا نقطه مرجع را در مختصات $(0,0)$ در نظر گرفت. این نقطه با ۳ نقطه دیگر در تماس است و برای محاسبه مختصات x, y مربوط به سه نقطه مجاور نقطه مرجع از روابط (۳) و (۴) استفاده می‌شود:

$$X_n = X_R + a \times \cos(-30 + 120(i-1) - \theta) ; i = 1, 2, 3 \quad (3)$$

$$Y_n = Y_R + a \times \sin(-30 + 120(i-1) - \theta) ; i = 1, 2, 3 \quad (4)$$

که X_n و Y_n مختصات اتم همسایه و X_R و Y_R بیانگر مختصات اتم مرجع است. سپس هر اتم جدید، به عنوان یک اتم مرجع در نظر گرفته شده و محاسبات برای تعیین موقعیت ۳ اتم همسایه آن انجام می‌شود. i نیز شماره اتم‌های همسایه است که نسبت به یکدیگر دارای جایگشت هستند. بر حسب زوایای مختلف کایرال، نقاط همسایه مورد نظر به دو دسته کلی زوج و فرد تقسیم می‌شوند. زوج و فرد بودن هر نقطه طبق شکل (۳) به صورت زیر تعریف می‌شود:

نقاط زوج: همسایه‌های هر نقطه در حالت زوج دارای زوایای $90^\circ, 210^\circ, 30^\circ$ درجه هستند (شکل ۳-الف). از این رو برای تعیین مختصات این نقاط، از روابط (۳) و (۴) استفاده می‌شود.

نقاط فرد: اینگونه از نقاط همسایه، دارای زوایای $30^\circ, 150^\circ$ و 90° درجه هستند (شکل ۳-ب). برای تعیین مختصات این نقاط از روابط (۵) و (۶) استفاده می‌شود.

$$X_n = X_R + a \times \cos(-90 + 120(i-1) - \theta) ; i = 1, 2, 3 \quad (5)$$

$$Y_n = Y_R + a \times \sin(-90 + 120(i-1) - \theta) ; i = 1, 2, 3 \quad (6)$$

شده است [۱۸]. خصوصیات هندسی و مکانیکی مورد نیاز برای تعریف این المان در جدول (۱) آمده است. شکل (۷) یک نمونه از نانولوله‌ها با ساختار کایرال را نشان می‌دهد که در نرم افزار انسیس مدل شده است. در تمام مدل‌ها، شرایط تکیه گاهی به گونه‌ای تعریف می‌شود که یک انتهای نانولوله‌ها ثابت بوده و انتهای دیگر آن آزاد باشد.



شکل ۷. نمونه‌ای از مدل‌سازی پیوند اتمهای کربن در نانولوله با استفاده از المان‌های تیر در نرم افزار ANSYS

جدول ۱. خواص هندسی و مکانیکی مورد استفاده برای المان تیر در مدل‌سازی اجزای محدود [۷]

پارامتر	مقدار
طول المان / پیوند	1.42 (A)
قطر المان	1.46 (A)
مساحت سطح مقطع	1.678(A)
ممان اینرسی مقطع	0.22 (A ⁴)
مدول الاستیسیته	5.78 (TPa)
مدول برشی	0.871(TPa)

مدل‌سازی نقطه اثر نیرو

برای بارگذاری‌ها به خصوص بارگذاری‌های خمشی و پیچشی نیاز است تا نیرو یا جابه‌جایی اعمال شده به تمامی گره‌های انتهایی نانولوله بصورت یکنواخت وارد شود. جهت ایجاد شرایط مناسب برای انتقال بار از المان‌های TARGE170 در نرم افزار استفاده می‌شود [۱۸].

با تعریف یک نقطه اثر مجازی توسط المان TARGE170 از نوع Pilot در میانگین ارتفاع نودهای نانولوله، تمامی بارگذاری‌ها مستقیماً به آن اعمال می‌شود. برای انتقال جابه‌جایی یکنواخت به تمام نودهای آزاد انتهایی، المان‌های TARGE170 دیگری از نوع Line تعریف شده و نقطه اثر مجازی به تمامی نودهای انتهایی متصل می‌شود.

پیوندهای کووالانت، طبق رابطه (۷) توسط توابع هارمونیک محاسبه می‌شود [۱۶]:

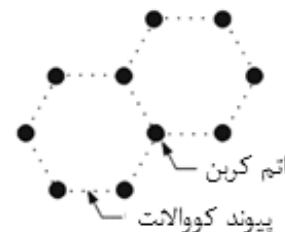
$$E_{total} = \frac{1}{2}k_r(\Delta r)^2 + \frac{1}{2}k_\theta(\Delta\theta)^2 + \frac{1}{2}k_\phi(\Delta\phi)^2 \quad (7)$$

که در آن k_r ، k_θ و k_ϕ به ترتیب معرف ثوابت نیرویی کشش پیوند، خمش پیوند و پیچش پیوند هستند. پارامترهای Δr ، $\Delta\theta$ و $\Delta\phi$ نیز به ترتیب تغییرات در طول پیوند، زاویه داخل صفحه‌های پیوند و پیچش خارج صفحه پیوند می‌باشند. با در نظر گرفتن تشابه فیزیکی مستتر بین انرژی مولکولی و انرژی کرنشی سازه می‌توان گفت [۸]:

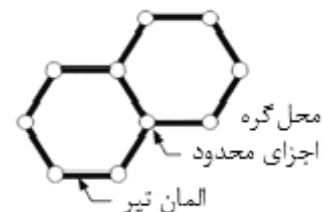
$$k_r = \frac{E_o A_o}{l}, \quad k_\theta = \frac{E_o I_o}{l}, \quad k_\phi = \frac{G_o J_o}{l} \quad (8)$$

در این رابطه E_o ، G_o ، I_o ، J_o ، A_o ، l به ترتیب طول، مساحت مقطع، ممان اینرسی، ممان اینرسی قطبی، مدول الاستیسیته و مدول برشی المان تیری با مقطع دایره‌ای به قطر d می‌باشد که جایگزین پیوند کربن-کربن در نانولوله‌های کربنی می‌شود.

رابطه (۸) پایه و اساس جایگزینی پیوندهای کربن-کربن شکل (۵) در ورق گرافن و نانولوله کربنی را با یک سازه قاب مانند پیوسته که در شکل (۶) ملاحظه می‌شود، پدید می‌آورد. در این سازه، پارامترهای سختی تیر معادل پیوند همانند مدول یانگ، مدول برشی، طول، ممان اینرسی، ممان قطبی و سطح مقطع آن بر اساس ثوابت نیرویی در فضای مکانیک مولکولی استخراج می‌شوند.

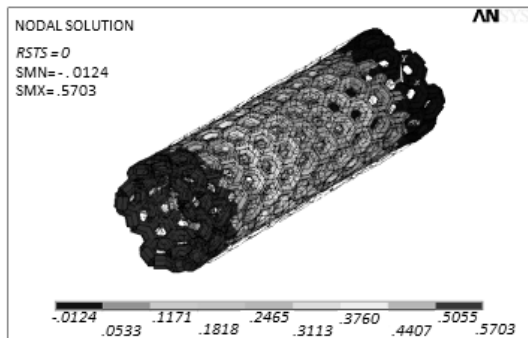


شکل ۵. نمایش چیدمان اتم‌های کربن در ساختار نانولوله [۱۷]

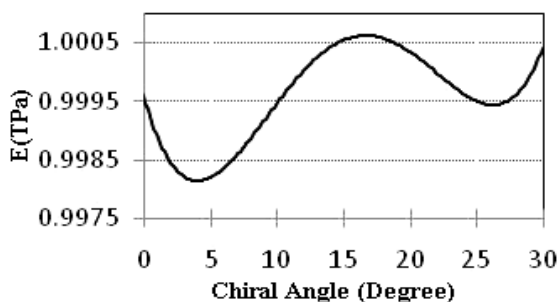


شکل ۶. نحوه جایگزینی پیوند بین اتم‌های کربن با المان تیر در مدل اجزای محدود [۱۷]

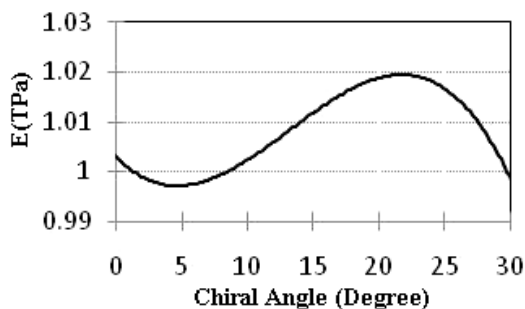
در این پژوهش برای مدل کردن پیوند میان اتم‌های کربن نانولوله با المان تیر در نرم‌افزار انسیس، از المان تیر خطی استفاده



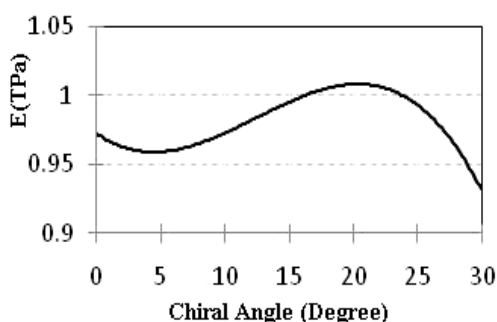
شکل ۸. تحلیل تنش در بارگذاری کششی نانولوله (۱۰ و ۵)



شکل ۹. تغییر مدول کششی ساختارهای (m و ۱۸) با زاویه کایرال



شکل ۱۰. تغییر مدول کششی ساختارهای (m و ۱۵) با زاویه کایرال



شکل ۱۱. تغییر مدول کششی ساختارهای (m و ۱۲) با زاویه کایرال

بارگذاری خمشی

در این مرحله، نقطه اثر مجازی به مقدار $1A$ در راستای عمود بر محور نانولوله جابه‌جا می‌شود. با جابه‌جایی این نقطه، جابه‌جایی به‌طور کامل به نقاط آزاد ابتدای نانولوله انتقال پیدا می‌کند و در نتیجه نقاط مختلف نانولوله در راستای عمود بر آن جابه‌جا

تحلیل خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی

در این مرحله، به تحلیل مدل‌های تولید شده برای سه گروه ساختاری از نانولوله‌ها با زوایای کایرال مختلف پرداخته می‌شود. برای اختصار، ساختارهایی مانند (۱۲ و ۰)، (۱۲ و ۳)، (۱۲ و ۶)، (۱۲ و ۱۲) به صورت گروه ساختاری (m و ۱۲) نشان داده می‌شوند که با افزایش m از ۰ تا ۱۲، زاویه کایرال آنها از ۰ تا ۳۰ درجه تغییر می‌کند. در تمام این نمونه‌ها، نسبت طول به قطر نانولوله برابر با ۳ انتخاب شده است.

پس از تعریف مختصات نقاط و تعریف خصوصیات ماده در محیط نرم افزار مطلب، فایلی ایجاد شده و در محیط انسیس فراخوانی می‌شود. سپس حل مسئله در سه قسمت مجزا شامل بارگذاری کششی، خمشی و پیچشی انجام می‌گیرد.

بارگذاری کششی

برای اعمال کشش طولی در این مرحله، نقطه اثر مجازی نانولوله به مقدار $1A$ در راستای نانولوله جابه‌جا می‌شود. این جابه‌جایی به‌طور یکنواخت به نقاط آزاد ابتدای نانولوله انتقال پیدا می‌کند و در نتیجه اتم‌های نانولوله با توجه به مختصاتشان و فاصله شان از نقطه اثر نانولوله، جابه‌جا می‌شوند. پس از اعمال جابه‌جایی، مقدار نیروی بیشینه که مربوط به نقاط انتهایی نانولوله در محل تکیه‌گاه است توسط نرم افزار محاسبه می‌شود. حال می‌توان با استفاده از رابطه (۹) و همچنین رابطه خطی موجود بین تنش و کرنش، میزان مدول الاستیسیته در راستای طولی را حساب کرد:

$$E = \frac{F.L}{\Delta L.A} \quad (9)$$

که F ، L ، ΔL و A به ترتیب نیروی محوری وارد بر نانولوله، طول اولیه، تغییرات طول و مساحت مقطع نانولوله می‌باشند. منظور از سطح مقطع، مساحتی است که تحت بار قرار می‌گیرد:

$$A = \pi(r_{out}^2 - r_{in}^2), \quad r_{out} = \frac{D+t}{2}, \quad r_{in} = \frac{D-t}{2} \quad (10)$$

که در آن D قطر نانولوله و t ضخامت دیواره آن است. شکل (۸) یک نمونه از نتایج تحلیل تنش در نانولوله تحت کشش را نشان می‌دهد. در شکل‌های (۹) تا (۱۱) روند تغییرات مدول کششی بر حسب زاویه کایرال برای سه گروه ساختاری نشان داده شده است. پس از محاسبه مدول یانگ کششی، می‌توان این مقدار را در مساحت مقطع نانولوله ضرب کرد تا میزان صلیبیت کششی ماده (EA) تعیین شود. نتایج حاصل در نمودار شکل (۱۲) مشاهده می‌شود.

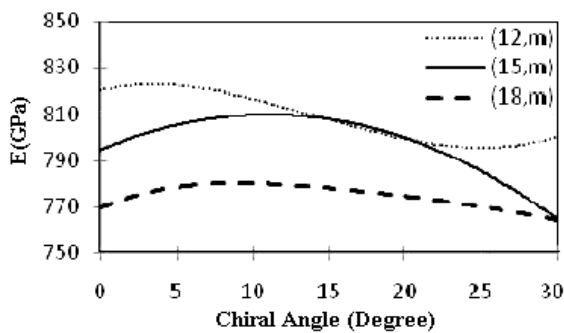
می‌شوند. سپس مقدار ممان پیچشی ایجاد شده در انتهای نانولوله (تکیه‌گاه) محاسبه می‌شود و با توجه به رابطه (۱۳) مدول پیچشی به دست می‌آید:

$$G = \frac{T \cdot L}{J \cdot \theta} \quad (13)$$

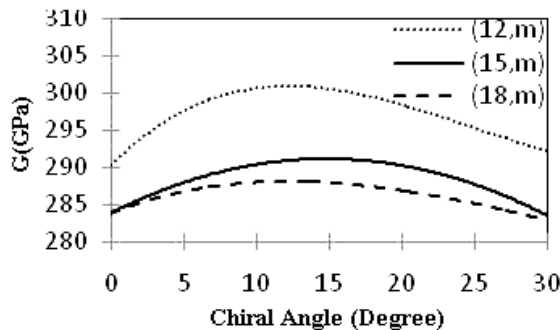
که در آن T, L و θ به ترتیب بیانگر ممان پیچشی، طول و میزان پیچش نانولوله هستند. J ممان اینرسی قطبی نانولوله است که با توجه به رابطه (۱۴) حساب می‌شود:

$$J = \frac{\pi}{2} (r_{out}^4 - r_{in}^4) \quad (14)$$

شکل (۱۵) نمودار تغییرات مدول پیچشی نانولوله‌ها با زاویه کایرال را نشان می‌دهد.



شکل ۱۴. نمودار تغییرات مدول خمشی بر حسب زاویه کایرال



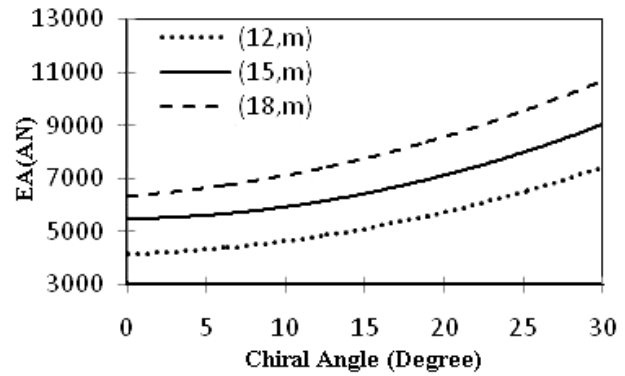
شکل ۱۵. نمودار تغییرات مدول پیچشی بر حسب زاویه کایرال

اعتبارسنجی و بحث روی نتایج

هدف اصلی این تحقیق، مطالعه تاثیر زاویه کایرال بر خواص مکانیکی نانولوله‌ها است. در ادامه به بررسی نتایج به دست آمده و ارزیابی صحت آنها با استفاده از نتایج پژوهش‌های پیشین پرداخته می‌شود.

نتایج مربوط به کشش

مدول کششی نانولوله‌های مورد بررسی از ۰/۹۳ TPa تا ۱/۰۲ TPa تغییر می‌کند. همچنین در نانولوله‌هایی با زاویه‌های مختلف کایرال، همواره بیشینه مقدار مدول کششی طولی در زاویه‌های بین ۲۲ تا ۱۷



شکل ۱۲. تغییرات صلبیت کششی بر حسب زاویه کایرال

می‌گردند. شکل (۱۳) یک نمونه بارگذاری خمشی بر روی نانولوله را نشان می‌دهد. سپس مقدار نیروی بیشینه عمود بر سطح مقطع در نقاط تکیه‌گاهی توسط نرم افزار محاسبه می‌شود. حال می‌توان با استفاده از فرمول زیر، میزان مدول خمشی را تعیین کرد:

$$E = \frac{F \cdot L^3}{3 \cdot I \cdot \delta} \quad (11)$$

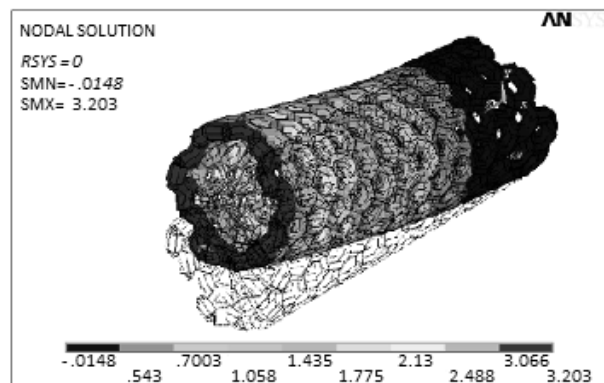
که در آن F, L و δ به ترتیب بیانگر نیروی خمشی، طول نانولوله و میزان خیز خمشی انتهای آزاد است. I ممان اینرسی نانولوله است که با توجه به رابطه (۱۲) حساب می‌شود:

$$I = \frac{\pi}{4} (r_{out}^4 - r_{in}^4) \quad (12)$$

تغییرات مدول خمشی نانولوله‌ها با زاویه کایرال در نمودار شکل (۱۴) ارائه شده است.

بارگذاری پیچشی

برای اعمال شرایط پیچشی، مختصات از کارترین به استوانه‌ای تغییر داده می‌شود و زاویه پیچش کوچکی بر نقطه اثر مجازی اعمال می‌گردد که در نتیجه آن، تمامی نقاط ابتدای نانولوله دچار پیچش



شکل ۱۳. توزیع تنش در بارگذاری خمشی نانولوله (۱۰ و ۵)

جدول ۳. ارزیابی نتایج برای مدول خمشی و پیچشی نانولوله‌ها

مدول خمشی (TPa)		
تحلیل حاضر	مرجع [۲۰]	مرجع [۱۴]
۰/۷۶ - ۰/۸۲	۰/۱ - ۱	آرمچیر: ۰/۷۴ - ۱/۳ زیگراگ: ۰/۸۳
مدول پیچشی (TPa)		
تحلیل حاضر	مرجع [۱۹]	مرجع [۱۷]
۰/۲۸۳ - ۰/۳۰۱	۰/۲۳۷ - ۰/۴۶۹	آرمچیر: ۰/۳۴۳۴ زیگراگ: ۰/۳۴۴۲

نتایج مربوط به خمش

درجه اتفاق می‌افتد. در جدول (۲) برخی از نتایج به دست آمده با نتایج موجود در سایر مقالات مقایسه شده‌اند که همخوانی مناسبی مشاهده می‌شود. در مورد صلیبیت کششی ملاحظه می‌شود که میزان آن با افزایش زاویه کایرال و افزایش عدد n در ساختارها (مثلاً از $12m$ به $15m$) افزایش می‌یابد. به طور کلی، تغییرات مقدار صلیبیت کششی بین $AN \times 10^3 \times 4/5$ تا $AN \times 10^3 \times 11$ می‌باشد و در صورتی که بقیه خواص نانولوله ثابت باقی بمانند، ساختارهایی که دارای مقدار n بزرگ‌تری هستند صلیبیت بیشتری دارند.

نتیجه‌گیری و جمع‌بندی

نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که نانولوله‌های کربنی با ساختار مختلف در زوایای کایرال بین ۲۲ تا ۱۷ درجه بیشترین مدول کششی را دارند. اما تغییرات مقدار E با تغییر ساختار بسیار ناچیز است و به طور کلی میزان این کمیت از $TPa \times 0/93$ تا $TPa \times 1/02$ تغییر می‌کند. تغییرات مقدار صلیبیت کششی بین $AN \times 10^3 \times 4/5$ تا $AN \times 10^3 \times 11$ بوده و با افزایش زاویه کایرال و افزایش عدد n ساختارها افزایش پیدا می‌کند.

مدول خمشی و پیچشی نانولوله‌ها در زوایای کایرال ۱۵-۱۰ درجه به بیشترین مقدار خود می‌رسد. تغییرات این مدول‌ها با تغییر زاویه کایرال چندان قابل توجه نیست و برای ساختارهای گوناگون، مدول پیچشی در محدوده $TPa \times 0/28$ تا $TPa \times 0/3$ و مدول خمشی در محدوده $TPa \times 0/76$ - $TPa \times 0/82$ تغییر می‌کند. همچنین با افزایش مقدار n ساختارها، میزان مدول خمشی و پیچشی کاهش می‌یابد.

مراجع

- Natsuki, T., Tantrakarn, K., and Endo, M. 2004. Prediction of elastic properties for single walled carbon nanotubes. *Carbon* 42: 39-45.
- Chopra, N., Benedict, L., Crespi, V., Cohen, M., Louie, S., and Zettl, A. 1995. Fully collapsed carbon nanotubes. *Nature (London)* 377: 135-138.
- Xiao, J.R., Gama, B.A., and Gillespie, JW. 2005. An analytical molecular structural mechanics model for the mechanical properties of carbon nanotubes. *Int J. Solids and Struct* 42: 3075-3092.
- Wu, Y., Zhang, X., Leung, A.Y.T., and Zhong, W. 2006. An energy-equivalent model on studying the mechanical properties of single-walled carbon nanotubes. *Thin-walled Structures* 44: 667-676.
- Rafii-Tabar, H. 2004. Computational modelling of

جدول ۲. مقایسه نتایج حاصله برای مدول کششی با کارهای پیشین

مدول کششی (TPa)		
تحلیل حاضر	مرجع [۱۹]	مرجع [۱۳]
۰/۹۳ - ۱/۰۲	۱/۰۶۷ - ۱/۱۹۷	۱/۰۳۳ - ۱/۰۴۲

نتایج مربوط به پیچش

به طور کلی مدول پیچشی نانولوله‌های مورد بررسی در محدوده $TPa \times 0/283$ - $TPa \times 0/301$ تغییر می‌کند. همان‌طور که جدول (۳) نشان می‌دهد، این مقدار با نتایج سایر محققین همخوانی دارد. میزان مدول پیچشی با افزایش زاویه کایرال شروع به افزایش کرده و در زاویه‌های بین ۱۰ تا ۱۵ درجه به بیشترین مقدار می‌رسد. با توجه به نمودارهای به دست آمده، میزان مدول پیچشی ساختار آرمچیر و زیگراگ در یک مجموعه ساختار، تقریباً با هم برابر است. نکته قابل ملاحظه دیگر این است که مشابه با مدول خمشی، مدول پیچشی نیز با افزایش عدد n ساختارها کاهش می‌یابد.

- Int J. Solids and Struct* 40: 7329–7337.
13. Shokrieh, M.M., and Rafiee, R. 2010. On the tensile behavior of an embedded carbon nanotube in polymer matrix with nonbonded interphase region. *Composite Structures* 92: 647–652.
 14. Ayatollahi, M.R., Shadlou, S., and Shokrieh M.M. 2011. Multiscale modeling for mechanical properties of carbon nanotube reinforced nanocomposites subjected to different types of loading. *Composite Structures* 93: 2250–2259.
 15. Gogotsi, Y. Ed. 2006. *Nanomaterials Handbook*, London & New York: CRC Press.
 16. Gelin, B.R. 1994. *Molecular modeling of polymer structures and properties*, Germany: Hanser/Gardner Publishers.
 17. Wernik, J.M., and Meguid, S. A. 2011. Multiscale modeling of the nonlinear response of nano reinforced polymers. *Acta Mech* 217: 1-16.
 18. Inc, ANSYS. 2009. *ANSYS Guide*. Europe.
 19. Xiaoxing, Lu, and Zhong, Hu. 2012. Mechanical property evaluation of single-walled carbon nanotubes by finite element modeling. *Composites: Part B* 43: 1902–1913.
 20. Krishnan, A., Dujardin, E., Ebbesen, T.W., and Treacy, M.M.J. 1998. Young's modulus of single-walled nanotubes. *Phys Rev B* 58: 14013–9.
 - thermo-mechanical and transport properties of carbon nanotubes. *Physics Reports* 390: 235–452.
 6. Lu, Q., and Bhattacharya, B. 2005. The role of atomistic simulations in probing the small scale aspects of fracture – a case study on a single-walled carbon nanotube. *Engineering Fracture Mechanics* 72: 2037–2071.
 7. Odegard, G.M., Gates, T.S., Nicholson, L.M., and Wise, K.E. 2002. Equivalent-continuum modeling of nano-structured materials. *Comp Sci and Tech* 62: 1869–1880.
 8. Li, C., and Chou, T.W. 2003. A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes. *Int J. Solids and Struct* 40: 2487–2499.
 9. Cornwell, C.F., and Wille, L.R. 1997. Elastic properties of single-walled carbon nanotubes in Compression. *Solid State Commun* 101(8): 555-558.
 10. Yao, N., and Lordi, V. 1998. Young's modulus of single-walled carbon nanotubes. *J. App Phys* 84(4): 1939-1943.
 11. Zhang, H.W., Wang, J.B., and Guo, X. 2005. Predicting the elastic properties of single-walled carbon nanotubes. *J. the Mech and Phys of Sol* 53: 1929–1950.
 12. Gao, X.L., and Li, K. 2003. Finite deformation continuum model for single-walled carbon nanotubes.