مدل‌سازی ماکرومکانیک و تحلیل اثر موج هندسی بر خواص نانولوله‌های کربنی

تاریخ دریافت: ۱۴۰۵/۰۶/۲۵
تاریخ پذیرش: ۱۴۰۵/۰۷/۲۵

علی محمدی [۱]، مهدی شایانمهر [۲]، بهروز عرب [۳]
۱ دانش آموخته مقطع کارشناسی ارشد، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران شمال، تهران، ایران
۲ استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران شمال، تهران، ایران، mshtnb@iau.ac.ir
۳ استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران شمال، تهران، ایران

چکیده

این تحقیق به توسعه چارچوب معادل‌سازه‌ای برای انواع نانولوله‌های کربنی موج‌دار به روش ماکرومکانیک می‌پردازد. در این راستا اثر موج هندسی بر خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی با استفاده از روابط حاکم بر ماکرومکانیک بررسی می‌گردد. با توجه به تحقیقات انجام شده قبلی در مدل‌سازی دینامیک مولکولی، المان فنر خطی معادل جهت مدل‌سازی مورد استفاده قرار گرفته است. با بررسی حالت‌های مختلف موج محوری، یک رابطه ریاضی جهت پیش‌بینی مدول الاستیک نانولوله‌های موجدار ارائه شده است . نتایج نشان داد که افزایش تعداد موج و ارتفاع موج نقش تقویت‌کننده در کاهش مدول الاستیک دارند، در حالی که نسبت منظری نقش تعدیل‌کننده داشته و شدت را کاهش می‌دهد، بدون آنکه الگوی کلی تغییر کند. این رفتار ترکیبی اهمیت ویژه‌ای در تحلیل‌های پارامتریک دارد و نشان می‌دهد که کنترل خواص مکانیکی نانولوله‌ها در مقیاس ماکرو نیازمند توجه همزمان به این سه پارامتر هندسی است.

واژه‌های کلیدی: *نانولوله کربنی موجدار، ماکرومکانیک، خواص مکانیکی*

Macromechanical modeling and investigating the impact of geometric waviness on carbon nanotube properties

Ali mohammadi[1], Mahdi ShayanMehr[2], Behrouz arab[3]

1- M.Sc. Graduate Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, North Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran.
2,3- Assistant Professor, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, North Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran.

Abstract

This study develops a structural-equivalent framework for various types of wavy carbon nanotubes (CNTs) using a macromechanical approach. To this end, the effect of geometric waviness on the mechanical properties of CNTs is investigated through the governing equations of macromechanics. Drawing upon previous molecular dynamics (MD) simulations, an equivalent linear spring element is employed for the modeling. By examining different axial waviness configurations, a mathematical relation is established to predict the effective elastic modulus of wavy nanotubes. The results demonstrate that increasing both the wave count and wave height intensifies the reduction in the elastic modulus; conversely, the aspect ratio acts as a moderating factor, diminishing the magnitude of this effect without altering the overall trend. This coupled mechanical behavior is of paramount importance in parametric analyses, indicating that tailoring the mechanical properties of nanotubes at the macroscale necessitates the simultaneous consideration of these three geometric parameters.

Keywords: *Wavy carbon nanotubes, Macromechanical modeling, mechanical peropertie*

۱. مقدمه

این پژوهش با ارائه یک مدل فنری ساده و کاربردی، چارچوبی برای تحلیل و محاسبه مدول یانگ در نانولوله‌های کربنی موج‌دار ایجاد کرده است تا خلأ مطالعاتی موجود در این زمینه را پوشش دهد.

از میان نانوساختارهای کربنی، نانولوله‌های کربنی به‌دلیل پایداری، رسانایی و استحکام بالا، کاربردهای گسترده‌ای در حوزه‌هایی مانند الکترونیک، پزشکی و انرژی پیدا کرده‌اند [۱-۵]. نتایج تجربی یو [۶] مدول یانگ را در بازه ۰/۳۲ تا ۱/۴۷ تراپاسکال و استحکام کششی را تا ۶۳ گیگاپاسکال گزارش کرده و مدل‌سازی‌های پوپوف و همکاران [۷] نیز مقادیر حدود ۱ تراپاسکال برای مدول یانگ و ۰/۴۵ تراپاسکال برای مدول برشی ارائه کرده‌اند. مطالعات تأیید کرده‌اند که افزودن نانولوله‌های کربنی (به تنهایی یا همراه نانومواد دیگر) استحکام، مدول و رفتار مکانیکی کامپوزیت‌ها را به‌طور چشمگیری بهبود می‌دهد [۸-۱۱]. مطالعات گسترده‌ای به تعیین خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی صاف با استفاده از رویکردهای اتمی و پیوسته اختصاص یافته است. نتایج شبیه‌سازی‌های اتمی و مدل‌های معادل نشان می‌دهد که مدول یانگ نانولوله‌های تک‌جداره عموماً در حدود ۱ تراپاسکال و مدول برشی نزدیک به ۰/۴۵ تراپاسکال است [۱۲-۱۴] و این ساختارها می‌توانند تا حدود ۱۵٪ کرنش محوری رفتار الاستیک پایدار از خود نشان دهند [۱۵]. همچنین کاهش قطر به کمتر از یک نانومتر می‌تواند مدول یانگ را تا حدود ۱/۲ تراپاسکال افزایش داده و رشد تقریبی ۲۰٪ در سختی ایجاد کند که ناشی از اثرات مقیاس و خمیدگی پیوندهای کربنی است [۱۶, ۱۷]. در همین راستا، مدل‌های پوسته و تیر معادل قادر بوده‌اند سختی خمشی و فرکانس‌های طبیعی را با خطایی کمتر از ۵٪ نسبت به نتایج اتمی بازتولید کنند [۱۸-۱۹] و چارچوب‌های مبتنی بر انرژی پیوندی نیز مبنای دقیقی برای استخراج مدول کشسانی فراهم کرده‌اند [۱۴]. در حوزه پایداری و پاسخ غیرخطی، گزارش شده است که برای نانولوله‌ای با قطر حدود ۱/۴ نانومتر، فشار بحرانی کمانش نزدیک به ۲ گیگاپاسکال است [۲۰] و حضور سیال داخلی می‌تواند این مقدار را تا حدود ۱۰٪ افزایش دهد [۲۱]. در مقابل، نقص‌های ساختاری قادرند مدول یانگ را تا حدود ۳۰٪ کاهش دهند [۲۲]. همچنین نشان داده شده است که سختی مؤثر با افزایش طول کاهش می‌یابد که بیانگر وابستگی خواص معادل به ابعاد هندسی و اهمیت لحاظ اثرات مقیاس کوچک است [۲۳, ۲۴]. افزون بر این، افزایش طول نانولوله باعث رشد شدید هزینه‌های محاسباتی در شبیه‌سازی‌های اتمی می‌شود، که این موضوع نیاز به توسعه روش‌های چندمقیاسی و کاهش‌مرتبه را ضروری می‌سازد [۲۵]. در مقیاس سامانه‌های تقویت‌شده، مطالعات مبتنی بر مدل حجم نماینده و تیر تیموشنکو نشان داده‌اند که هم‌راستایی نانولوله‌ها می‌تواند مدول مؤثر را به‌طور محسوسی افزایش داده و حتی رشد حدود ۳۰٪ در سرعت موج و ۱۵٪ در بار بحرانی خمشی ایجاد کند [۲۶-۲۹]. ابعاد و ساختار فیزیکی نانولوله‌ها نیز تأثیر قابل توجهی بر رفتار مکانیکی دارند؛ به‌طوری که کاهش شعاع در نانولوله‌های تک‌دیواره می‌تواند مدول یانگ را به مقادیر بالاتر از ۱ تراپاسکال برساند [۳۰]. با این حال، عوامل محیطی و فرآیندی مانند آلاینده‌های سطحی، فشار، دما و شرایط سنتز قادرند خواص مکانیکی،

حرارتی و الکتریکی را مختل کنند و موجب کاهش عملکرد شوند [۳۱]. مطالعات روی نانولوله‌های موج‌دار در مقایسه با مدل‌های صاف محدودتر است، اما نتایج نشان می‌دهد که موج‌دارشدگی به‌عنوان یک انحراف هندسی، نقش مخربی در پاسخ مکانیکی دارد و می‌تواند مدول مؤثر را تا ۴۰ درصد کاهش دهد [۳۲]. به‌طور مشابه، در یک مطالعه دیگر نشان داده شد که افزایش دامنه موج‌دارشدگی موجب افت سختی محوری تا حدود ۵۰٪ می‌شود [۳۳] و در مدل‌های تیر معادل نیز کاهش سختی محوری در حدود ۲۵٪ برای نانولوله‌های دارای اعوجاج هندسی گزارش شده است [۳۴]. همچنین نشان داده شده است که سختی مؤثر به نسبت دامنه به طول موج موج‌دارشدگی وابسته است و با افزایش این نسبت، افت سختی تشدید می‌شود [۳۵]. در همین راستا، کاهش حدود ۳۰٪ در سختی خمشی نانولوله‌های موج‌دار نیز گزارش شده است [۳۶]. این تضعیف مکانیکی در مقیاس ساختارهای مجتمع و شبکه‌ای نیز مشاهده شده است. در کامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با نانولوله‌های موج‌دار، سختی محوری و کارایی انتقال تنش تا حدود ۳۰٪ کاهش می‌یابد [۳۳, ۳۷-۴۰]. موج‌دارشدگی و تجمع نانولوله‌ها اثر تقویتی را تا ۳۵٪ کاهش می‌دهد، اما در مقابل می‌تواند با بهبود درگیری مکانیکی، نیروی جداشدگی بین سطحی را تا ۱۵٪ افزایش دهد [۴۱]. در ساختارهای متراکم‌تر، از جمله جنگل‌ها و شبکه‌های نانولوله‌ای، اثر موج‌دارشدگی حتی شدیدتر است؛ به‌طوری‌که کاهش سختی مؤثر تا حدود ۷۰٪ در جنگل‌های نانولوله‌ای [۳۸] و حدود ۴۰٪ در شبکه‌های نانولوله‌ای گزارش شده است [۴۲]. علاوه بر سختی، پایداری سازه‌ای نانولوله‌های موج‌دار نیز به شدت تحت تأثیر نواقص هندسی اولیه قرار می‌گیرد. نتایج تحلیل‌های کمانش نشان داده‌اند که موج‌دارشدگی اولیه می‌تواند بار بحرانی کمانش را در حدود ۲۰ تا ۲۵٪ کاهش دهد [۴۱, ۴۳-۴۶]. از سوی دیگر، هم‌زمانی موج‌دارشدگی با نقص‌های ساختاری، افت خواص مکانیکی را تشدید می‌کند؛ به‌گونه‌ای که کاهش مقاومت کششی تا حدود ۴۰٪ [۳۹]، کاهش مدول یانگ در حدود ۳۰٪ و افت مقاومت شکست در حدود ۴۰٪ گزارش شده است [۴۴]. موج‌دارشدگی در حضور نقص‌های اتمی می‌تواند باعث تضعیف جدی رفتار مکانیکی نانولوله شود. همچنین، این پدیده بر پاسخ‌های پیچشی و ارتعاشی اثرگذار است؛ به‌طوری که نانولوله‌های آرمچیر در برابر پیچش (تا ۹۰ درجه) پایداری بیشتری نسبت به نوع زیگزاگ دارند [۴۵]. همچنین وجود موج‌دارشدگی می‌تواند فرکانس‌های طبیعی را تا حدود ۳۰٪ کاهش دهد [۴۷]. در حوزه پاسخ‌های دینامیکی نیز نشان داده شده است که موج‌دارشدگی می‌تواند فرکانس‌های طبیعی نانولوله‌ها را تا حدود ۳۰٪ کاهش دهد و هم‌زمان، از طریق تغییر روابط پاشندگی، بر انتشار و سرعت موج‌های خمشی اثر معناداری بگذارد [۴۷-۴۹]. موج‌دارشدگی با افزایش انرژی کرنشی، گویای حساسیت بالای پاسخ‌های مکانیکی نانولوله‌ها به ناهمواری‌های هندسی است [۵۰]. موج‌دار شدن به‌عنوان یک اختلال ساختاری کلیدی، موجب افت شدید مدول مؤثر، مقاومت کششی و پایداری حرارتی در نانوکامپوزیت‌ها می‌شود [۵۱]. شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی نیز کاهش حدود ۳۰٪ در مقاومت فشاری و افزایش حساسیت به بارهای محوری را تأیید کرده‌اند [۵۲]. تحلیل‌های عددی

و تجربی نشان می‌دهد که هندسه موج‌دار با ایجاد تمرکز تنش، کارایی تقویتی نانولوله‌ها را تضعیف کرده و مدول کشسانی نانوکامپوزیت‌ها را تا حدود ۵۰٪ کاهش می‌دهد [۵۳, ۵۴]. برای دستیابی به عملکرد مکانیکی مطلوب، کنترل دقیق کیفیت نانولوله‌ها ضروری است. همچنین، تحلیل دقیق خواص آن‌ها نیازمند شبیه‌سازی رفتار موجی و انتخاب روش‌های چندمقیاسی متناسب با شرایط است [۵۵]. در همین راستا الطحان و همکاران نشان دادند که موج‌دار بودن همراه با نقص جای خالی، مقاومت کششی را از ۸۳ به ۴۲ گیگاپاسکال (بیش از ۴۹٪) کاهش می‌دهد و مدول یانگ نیز افت قابل توجهی دارد [۵۶]. نتایج علیان و مگید نشان داد که خمیدگی نیروی جداشدگی بین سطحی را تا ۱۵٪ افزایش داده و تجمع نانولوله‌ها استحکام برشی را تا ۳۰٪ کاهش می‌دهد، در حالی که توزیع یکنواخت انتقال تنش را بهبود می‌بخشد [۵۷]. همچنین علیان و همکاران گزارش کردند که موج‌دار بودن و تجمع نانولوله‌ها اثر تقویتی را کاهش می‌دهد؛ به‌طوری‌که در حالت صاف مدول کشسانی تا ۲۵٪ افزایش داشت، اما در ساختارهای موج‌دار و تجمع‌یافته این مقدار تا ۳۵٪ نسبت به حالت تقویت‌شده کاهش یافت [۵۸]. با توجه به هزینه‌های سنگین شبیه‌سازی‌های اتمی و خلأ مدل‌های تحلیلی جامع برای تحلیل هم‌زمان هندسه و ساختار در پژوهش‌های پیشین، این پژوهش با توسعه یک مدل فنری معادل، ویژگی‌های ذاتی نانولوله صاف را با سه متغیر کلیدی هندسی، تعداد و ارتفاع موج (به‌عنوان عوامل تشدیدکننده افت مدول) و نسبت منظری (عامل تعدیل‌کننده) پیوند داده و چارچوبی ساده و کم‌هزینه برای پیش‌بینی دقیق مدول یانگ در مقیاس ماکرو ارائه می‌کند.

۲. مدل‌سازی

۱,۲. روش‌ها و فرضیات کلی

این فصل چارچوب معادل‌سازی فنری را برای نانولوله‌های کربنی موج‌دار ارائه می‌دهد تا با ساده‌سازی پاسخ‌های نانومقیاس به مدل‌های ماکروسکوپیک (تحت فرض رفتار الاستیک خطی ایستا)، مدول یانگ مؤثر را جهت کاربرد در طراحی مواد مرکب استخراج کند. در این روش، با تبدیل روابط نیرو – تغییر شکل به ثابت‌های فنری و استفاده از داده‌های مستقیم دینامیک مولکولی برای لحاظ کردن دقیق اثرات کیرالیته و لایه‌بندی، اعتبار مدل تضمین شده است. همچنین، این پژوهش با تحلیل جامع پارامترهای هندسی، تأثیر نسبت‌های طول به قطر (۴۰، ۶۰، ۸۰ و ۱۰۰)، تعداد موج (۱ تا ۵ قله) و نسبت ارتفاع موج به قطر ($\frac{3}{8}$، $\frac{4}{8}$ و $\frac{5}{8}$) را بر توزیع تنش و سختی مؤثر بررسی کرده و بازه اعتبار تقریب‌های خطی را نسبت به نانومدل‌های دقیق تعیین می‌کند.

۲,۲. مدل‌سازی ماکرومکانیک برای نانولوله‌های موج‌دار

مدل ماکرومکانیک نانولوله صاف با تعریف فنرهای معادل، شرایط مرزی و بارگذاری ایستا ساخته و تحت نیروی محوری F بررسی می‌شود. با محاسبه سختی K و مدول حاصل از فنرهای سری، این مدل به‌عنوان مرجع مقایسه برای تحلیل حالت‌های موج‌دار استفاده می‌گردد.

۱،۲،۲. سختی فنر در راستای اعمال نیرو

سختی مؤثر یک المان محوری تشریح شده است؛ فرض بر این است که تمامی فنرهای موازی با محور و دارای طول مؤثر یکسان از یک ماده و مدول الاستیک یکسان برخوردارند، بنابراین پاسخ الاستیکی و مقدار سختی برای همه یکسان خواهد بود. سختی هر المان بر اساس هندسه (مساحت مقطع مؤثر و طول) و خواص ماده تعیین می‌شود و برای همه فنرهای موازی و هم‌طول یک مقدار ثابت دارد.

$$K = K_x = \frac{A \times E_0}{L_{Elm}} \quad (x = 1,2, \dots ,n) \qquad (۱)$$

که در رابطه بالا K سختی المان فنر در راستای نیرو، K_x سختی المان فنر در راستای فنر، A مساحت مقطع مؤثر المان، E_0 مدول یانگ نمونه مرجع در راستای نیرو و L_{Elm} طول المان فنر مرجع در راستای نیرو می‌باشند.

اگر تنها یک فنر در راستای بارگذاری وجود داشته باشد، تمام بار و جابه‌جایی به همان فنر منتقل می‌شود. در نتیجه سختی معادل سیستم برابر سختی آن فنر خواهد بود.

$$K_{Total} = K \qquad (۲)$$

که در رابطه بالا K_{Total} سختی معادل کل سیستم و K سختی المان فنر در راستای نیرو می‌باشد.

در آرایش سری فنرها، نیروی وارد بر همه المان‌ها یکسان است و جابه‌جایی کل برابر مجموع جابه‌جایی‌های هر فنر خواهد بود. سختی معادل از نسبت نیروی مشترک به جابه‌جایی کل به‌دست می‌آید؛ فنرهای نرم‌تر یا با طول مؤثر بیشتر سهم بیشتری در جابه‌جایی داشته و بیشترین نقش را در کاهش سختی مجموعه ایفا می‌کنند.

$$\frac{1}{K_{Total}} = \frac{1}{K_1} + \frac{1}{K_2} + \dots + \frac{1}{K_{44}}$$

$$\overset{(1)}{\Rightarrow} \frac{1}{K_{Total}} = \frac{1}{K} + \frac{1}{K} + \dots + \frac{1}{K} = \frac{44}{K} \qquad (۳)$$

$$\Rightarrow K_{Total} = \frac{K}{44}$$

که در رابطه بالا K_{Total} معادل سختی کل سیستم، K سختی المان فنر در راستای نیرو و K_1 و ... و K_{44} سختی المان‌های فنر هستند که همه در راستای اعمال نیرو می‌باشند.

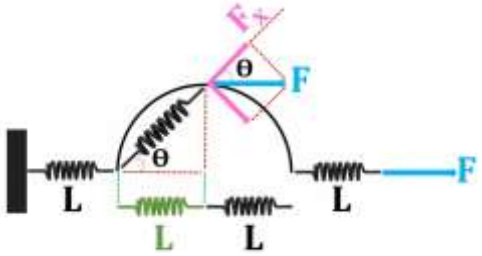
وقتی فنر با زاویه نسبت به محور بارگذاری قرار گیرد، تنها مؤلفه‌ای از نیرو و جابجایی در راستای محور مؤثر است و سختی محوری کمتر از سختی نامی خواهد بود. برای محاسبه سختی مؤثر باید مؤلفه‌های نیرو و تغییر طول در راستای محور تفکیک و نسبت آن‌ها محاسبه شود. بنابراین جهت‌گیری و هندسه فنرها در مدل‌سازی سختی نقش کلیدی دارند و بی‌توجهی به مؤلفه‌گیری می‌تواند خطای قابل توجهی در برآورد پاسخ سازه ایجاد کند.

$$F_x = F \times (\cos\theta) \Rightarrow \frac{F_x}{(\cos\theta)} = F \qquad (۴)$$

$$F = K \times \delta \qquad (۵)$$

$$\overset{(4)\,\cdot\,(5)}{\Longrightarrow} \frac{F_x}{(\cos\theta)} = K \times \delta \Rightarrow F_x = K \times \delta \times (\cos\theta) \qquad (۶)$$

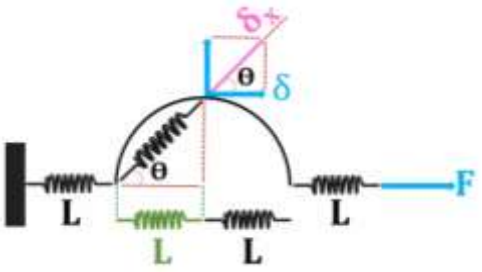
که در روابطه بالا F_x نیرو در راستای فنر زاویه‌دار، F نیرو در راستای محور اصلی، θ زاویه بین محور اصلی و فنر زاویه‌دار، K سختی فنر مرجع در راستای نیرو و δ تغییر طول فنر مرجع در راستای نیرو می‌باشند.



شکل ۱. تجزیه نیروی در راستای محور اصلی به مؤلفه در راستای فنر زاویه‌دار

$$\delta = \delta_x \times (\cos\theta) \quad (۷)$$

که در رابطه بالا δ_x تغییر طول فنر زاویه‌دار در راستای خودش، θ زاویه بین محور اصلی و فنر زاویه‌دار و δ تغییر طول فنر مرجع در راستای نیرو می‌باشند.



شکل ۲. تجزیه تغییر طول در راستای فنر زاویه‌دار به مؤلفه در راستای محور اصلی

$$\xrightarrow{(6)\,،\,(7)} F_x = K \times \delta_x \times (\cos\theta)^2 \quad (۸)$$

$$F_x = K_x \times \delta_x \quad (۹)$$

$$\xrightarrow{(8)\,،\,(9)} K_x = K \times (\cos\theta)^2 \quad (۱۰)$$

موج‌دار شدن نانولوله مسیر بار محوری را خمیده و طول واقعی آن را افزایش می‌دهد؛ در نتیجه انتقال بار از مسیر طولانی‌تر و پرانحنا باعث کاهش سختی مؤثر و نرم‌تر شدن پاسخ محوری می‌شود. بنابراین در محاسبات باید طول واقعیِ شامل موج در نظر گرفته شود، زیرا با وجود ثابت بودن مقطع و مدول ماده، مقاومت محوری کاهش می‌یابد.

$$K_{real} = \frac{A \times E}{L_{real}} \xrightarrow{L_{real} = \frac{L}{(\cos\theta)}} K_{real} = \frac{A \times E \times (\cos\theta)}{L} = K \times (\cos\theta) \quad (۱۱)$$

$$\xrightarrow{(10)\,،\,(11)} K_{real} = K \times (\cos\theta)^2 \times (\cos\theta) \quad (۱۲)$$

$$\Rightarrow K_{real} = K \times (\cos\theta)^3$$

که در روابطه بالا K سختی المان فنر در راستای نیرو، K_{real} سختی واقعی المان در راستای نیرو، θ زاویه بین محور اصلی و فنر زاویه‌دار، A مساحت مقطع مؤثر المان، E_0 مدول یانگ نمونه مرجع در راستای نیرو، L_{real} طول واقعی المان فنر زاویه‌دار و L_{Elm} طول المان فنر مرجع در راستای نیرو می‌باشند.

سختی معادل در راستای اعمال نیرو بصورت زیر بدست می آید:

$$\frac{1}{K_{Total}} = \frac{1}{K_1} + \dots + \frac{1}{K_{21}} + \frac{1}{K_{22}} + \frac{1}{K_{23}} + \frac{1}{K_{24}} + \dots + \frac{1}{K_{44}}$$

$$\xrightarrow{(1)\,،\,(12)} \frac{1}{K_{Total}} = \frac{1}{K} + \dots + \frac{1}{K} + \frac{1}{K\times(\cos\theta)^3} + \frac{1}{K\times(\cos\theta)^3} + \frac{1}{K} + \dots + \frac{1}{K} \quad (۱۳)$$

$$= \frac{42}{K} + \frac{2}{K \times (\cos\theta)^3} = \frac{(42 \times (\cos\theta)^3 + 2)}{K \times (\cos\theta)^3}$$

$$\Rightarrow K_{Total} = \frac{K \times (\cos\theta)^3}{(42 \times (\cos\theta)^3 + 2)}$$

۲،۲. مدول نهایی براساس مدول ابتدایی

استخراج مدول معادل کل به‌صورت گام به گام تشریح می‌شود. ابتدا به‌عنوان نسبت نیروی کل به تغییر طول کل تعریف شده، سپس نیروی کل از سختی معادل مجموعه محاسبه و در رابطه مدول جایگزین می‌گردد. با ساده‌سازی، تغییر طول حذف شده و مدول نهایی به‌صورت تابعی از سختی معادل، طول مؤثر و سطح مقطع به‌دست می‌آید؛ این روند منطق محاسبات را حفظ کرده و زمینه استفاده از فرمول‌ها در ادامه فراهم می‌شود.

$$E_{Total} = \frac{F \times L_{Total}}{A \times \delta_{Total}} \quad (۱۴)$$

$$F = K_{Total} \times \delta_{Total} \quad (۱۵)$$

$$\xrightarrow{14)\,،\,(15)} E_{Total} = \frac{K_{Total} \times \delta_{Total} \times L_{Total}}{A \times \delta_{Total}} \Rightarrow E_{Total} = \frac{K_{Total} \times L_{Total}}{A} \quad (۱۶)$$

$$\xrightarrow{(1)\,،\,(16)} E_{Total} = \frac{A \times E_0}{L_{Elm}} \times \frac{L_{Total}}{A} = E_0 \times \frac{L_{Total}}{L_{Elm}}$$
$$\xrightarrow{L_{Total}= L_{Elm}} E_{Total} = E_0 \times \frac{1 \times L_{Elm}}{L_{Elm}} \Rightarrow E_{Total} = E_0 \quad (۱۷)$$

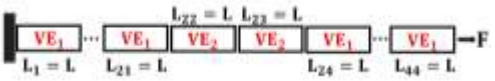
که در روابط بالا E_{Total} مدول یانگ مؤثر کل در راستای نیرو، F نیروی محوری اعمال شده، A مساحت مقطع مؤثر المان، K_{Total} سختی معادل کل سیستم، L_{Total} طول مؤثر کل نمونه و δ_{Total} تغییر طول محوری کل نمونه تحت بار محوری می‌باشند.

رابطه بالا در نانولوله بدون اعوجاج با طول کامل :

$$\xrightarrow{(3)\,،\,(16)} E_{Total} = \frac{A \times E_0}{L_{Elm}} \times \frac{1}{44} \times \frac{L_{Total}}{A} = E_0 \times \frac{1}{44} \times \frac{L_{Total}}{L_{Elm}}$$
$$\xrightarrow{L_{Total}= 44 \times L_{Elm}} E_{Total} = E_0 \times \frac{44 \times L_{Elm}}{44 \times L_{Elm}} \Rightarrow E_{Total} = E_0 \quad (۱۸)$$

مدول نهایی براساس مدول ابتدایی در نانولوله کامل از رابطه زیر بدست می آید:

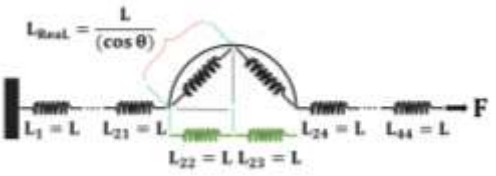
$$\xrightarrow{(13)\,،\,(16)} E_{Total} = \frac{A \times E_0}{L_{Elm}} \times \frac{(\cos\theta)^3}{(42 \times (\cos\theta)^3 + 2)} \times \frac{L_{Total}}{A} = E_0 \times \frac{L_{Total}}{L_{Elm}} \times \frac{(\cos\theta)^3}{(42 \times (\cos\theta)^3 + 2)}$$
$$\xrightarrow{L_{Total}= 44 \times L_{Elm}} E_{Total} = E_0 \times \frac{44 \times L_{Elm}}{L_{Elm}} \times \frac{(\cos\theta)^3}{(42 \times (\cos\theta)^3 + 2)} \Rightarrow E_{Total} = E_0 \times \frac{44 \times (\cos\theta)^3}{(42 \times (\cos\theta)^3 + 2)} \quad (۱۹)$$



شکل ۳. نانولوله کربنی دارای یک موج با طول 44L و مدل‌سازی معادل آن به‌صورت المان مکانیکی

۳. فرمولاسیون رابطه مدول و استخراج آن از مدل‌سازی ماکرومکانیک

فرمولاسیون ریاضی مدول مؤثر در چارچوب مدل ماکرو تدوین شد؛ در این روش مدول استاتیکی حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای هر ترکیب کیرالیته و تعداد لایه به‌عنوان ورودی پایه استفاده می‌شود و وابستگی مدول به پارامترهای هندسی و موجی مانند نسبت طول به قطر، تعداد موج و دامنه موج به‌طور صریح لحاظ می‌گردد. با وارد کردن نسبت‌های مختلف دامنه موج از طریق روابط مثلثاتی، اثر هندسه موجی دقیقاً بازتاب داده می‌شود. در نهایت مدول مؤثر به‌صورت تابعی از مدول شبیه‌سازی شده و پارامترهای هندسی-موجی استخراج شده، محدوده اعتبار آن مشخص و نتایج برای تحلیل حساسیت و پیش‌بینی خواص مکانیکی ساختارهای موج‌دار به‌کار گرفته می‌شوند.



شکل ٤. مدل‌سازی معادل نانولوله کربنی دارای یک موج با طول nL به‌صورت فنر مکانیکی

همانطور که مشخص می‌باشد، دامنه موج برابر با R می‌باشد و برای R باید رابطه‌ای با $\cos\theta$ در نظر گرفت. به همین جهت برای ورود نسبت تغییر دامنه موج در روابط بالا، از روابط جایگزین زیر استفاده می‌کنیم.

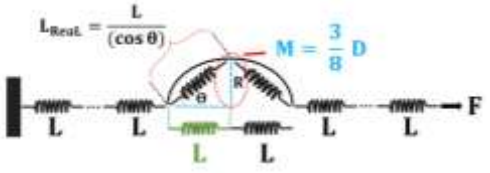
$$\tan\theta = \frac{R}{L_{Elm}} \quad (۲۰)$$

$$R = M = \frac{3}{8} \times D$$
$$(M = \frac{3}{8} \times D\ ,\ \frac{4}{8} \times D\ ,\ \frac{5}{8} \times D\ ) \qquad (۲۱)$$

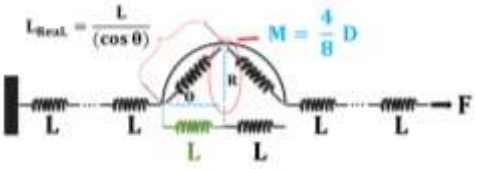
$$cos\,\theta = \sqrt{\frac{1}{1+(tan\,\theta)^2}} \qquad (۲۲)$$

$$\xRightarrow{(22)\,،\,(24)} E_{Total} = E_0 \times \frac{16\times\left(\frac{1}{1+(\frac{3}{8}\times\frac{D}{L_{Elm}})^2}\right)^{\frac{3}{2}}}{\left(14\times\left(\frac{1}{1+(\frac{3}{8}\times\frac{D}{L_{Elm}})^2}\right)^{\frac{3}{2}}\right)+2} \qquad (۲۵)$$

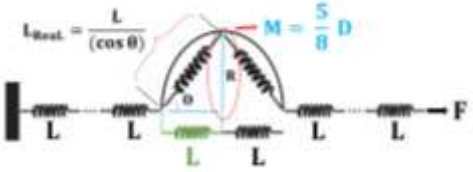
در روابط بالا R و M ارتفاع موج و یا همان دامنه موج، D قطر نانولوله، L_{Elm} طول المان مرجع و θ زاویه بین فنر زاویه‌دار با محور اصلی می‌باشد.



شکل ۵. ارتفاع موج با توجه به نسبت ارتفاع به قطر $\frac{\square}{\square}$



شکل ۶. ارتفاع موج با توجه به نسبت ارتفاع به قطر $\frac{4}{8}$



شکل ۷. ارتفاع موج با توجه به نسبت ارتفاع به قطر $\frac{\square}{\square}$

اگر طول نانولوله کامل را ۱۶ برابر طول نانولوله مرجع درنظر بگیریم :

$$\xRightarrow{(19)\,،\,(20)} E_{Total} = \qquad (۲۳)$$

$$E_0 \times \frac{16\times\left(\frac{1}{1+(tan\,\theta)^2}\right)^{\frac{3}{2}}}{\left(14\times\left(\frac{1}{1+(tan\,\theta)^2}\right)^{\frac{3}{2}}\right)+2}$$

$$\xRightarrow{(21)\,،\,(23)} E_{Total} = E_0 \times \frac{16\times\left(\frac{1}{1+(\frac{R}{L_{Elm}})^2}\right)^{\frac{3}{2}}}{\left(14\times\left(\frac{1}{1+(\frac{R}{L_{Elm}})^2}\right)^{\frac{3}{2}}\right)+2} \qquad (۲۴)$$

اگر میزان افزایش طول کل نانولوله به طول اولیه را γ، تعداد موج را N بنامیم و نسبت دامنه موج به قطر نانولوله $(\frac{M}{D})$ را β بنامیم خواهیم داشت:

$$E_{Total} = E_0 \times \frac{\gamma\times\left(\frac{1}{1+(\beta\times\frac{D}{L_{Elm}})^2}\right)^{\frac{3}{2}}}{\left(\frac{(\gamma-(2N)}{)\times\left(\frac{1}{1+(\beta\times\frac{D}{L_{Elm}})^2}\right)^{\frac{3}{2}}}\right)+(2N)} \qquad (۲۶)$$

در رابطه بالا D قطر نانولوله، L_{Elm} طول المان مرجع و β نسبت دامنه موج به قطر نانولوله، γ تعداد کل المان‌ها، N تعداد موج‌ها و E_0 مدول یانگ نمونه مرجع در راستای نیرو می‌باشد.



شکل ۸. نمای گرافیکی نانولوله کربنی دارای سه موج با طول 44L

۴. نتایج مدل ماکرومکانیک

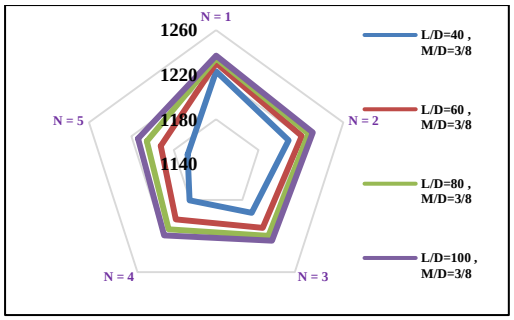
این فصل با هدف ارزیابی مدل‌سازی سازه‌ای برای نانولوله‌های کربنی، به تبدیل پاسخ‌های نانومقیاس به مدل‌های کارآمد ماکرومکانیکی می‌پردازد. خروجی اصلی این رویکرد، استخراج پارامترهای مکانیکی (مانند مدول یانگ) و ایجاد روابط پارامتریک کاربردی برای طراحی مهندسی است؛ به‌طوری‌که این مدلِ پل‌مانند، ضمن اثبات اعتبار مدل‌های فنری معادل، امکان تعمیم تحلیل‌های دقیق اتمی به سازه‌های بزرگ‌تر و کامپوزیت‌ها را فراهم می‌سازد.

۲،۴. تحلیل متغیرهای شبیه‌سازی ماکرومکانیک

برای لحاظ کردن اثرات ساختاری مانند کیرالیته و تعداد لایه‌ها در مدل ماکرو، ابتدا مدول یانگ نمونه‌ی بدون موج (استخراج شده از شبیه‌سازی نانو) به‌عنوان مقدار مبنا وارد روابط معادل‌سازی می‌شود. سپس، تأثیر مجزای هر متغیر بر خروجی‌های مدل و پارامترهای فنری از طریق نمودارهای مقایسه‌ای بررسی می‌شود. در نهایت، تغییرات مدول یانگ به‌صورت درصدی و کمی گزارش می‌گردد تا میزان اثرگذاری و نواحی حساس هر پارامتر بر خواص مکانیکی به‌طور شفاف مشخص شود.

۱،۲،۴. نسبت منظری و تعداد موج

ارزیابی پارامتریک نانولوله‌های کربنی مؤید آن است که نسبت منظری در مدل‌های ایده‌آل (بدون موج)، فاقد اثرگذاری معنادار بر مدول یانگ است؛ اما در پیکربندی‌های موج‌دار، این پارامتر با ایفای نقشِ تعدیل‌گر هندسی، شدت افت سختی را تا ۳۳ درصد مهار نموده و سیستم را به سوی تعادل مکانیکی سوق می‌دهد. از سوی دیگر، تعداد موج به‌عنوان محرک اصلی الگوی نزولی، رفتاری پیوسته و پیش‌بینی‌پذیر را به نمایش می‌گذارد؛ به‌طوری‌که با افزوده شدن هر موج، شدت کاهش مدول یانگ با نرخی ثابت (حدود ۰/۰۱۳ درصد) تقلیل یافته و همگرایی مقادیر در درجات بالاترِ موج آشکار می‌گردد. این تعامل دوجانبه نشان می‌دهد که در حالی‌که تعداد موج، سازه و الگوی کلیِ رفتار نزولی را دیکته می‌کند، نسبت منظری صرفاً دامنه‌ی این پاسخ را کنترل می‌نماید. در واقع، افزایش نسبت منظری نه‌تنها نوسانات مدول یانگ را در سطوح مختلفِ تعداد موج به حداقل می‌رساند، بلکه با تثبیت شیب تغییرات، بستری همگن برای تعمیم مدل‌های ماکرومکانیکی فراهم می‌آورد. در نهایت، این هم‌افزایی پارامتریک، مدل را قادر می‌سازد تا بدون تغییر در مکانیزم حاکم، افت مدول را در مقادیر کنترل‌شده‌ای تثبیت کرده و قابلیت اطمینان نتایج را برای پیش‌بینی رفتار نانوساختارهای موج‌دار در ابعاد گوناگون تضمین نماید [۵۹].



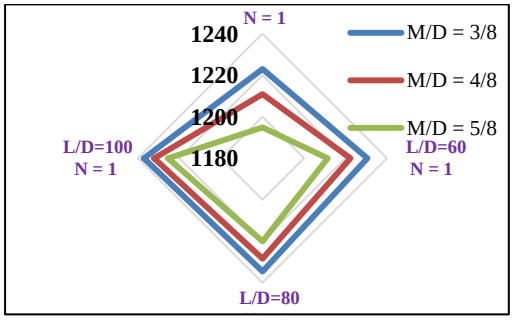
شکل ۹. مدول یانگ بر حسب تعداد موج و نسبت منظری

۲،۲،۴. نسبت منظری و ارتفاع موج

همان‌طور که پیش‌تر توضیح داده شد، نسبت منظری به‌تنهایی در حالت بدون موج اثری بر مدول ندارد و تنها در حضور موج نقش

تعدیل‌کننده پیدا می‌کند. افزایش نسبت منظری موجب کاهش شدت تغییرات مدول می‌شود و مدول یانگ به سمت مقدار پایدار میل می‌کند. در شرایطی که نسبت منظری برابر با ۴۰ و تعداد موج ثابت و برابر با یک موج باشد، افزایش ارتفاع موج اثر مستقیم بر کاهش مدول دارد. افزایش ارتفاع موج از مقدار $\frac{3}{8}$ به $\frac{4}{8}$ منجر به کاهش مدول یانگ به میزان تقریبی ۰/۹۸ درصد گردید؛ به‌طوری که مقدار مدول از ۱۲۲۲/۹۷ به ۱۲۱۰/۸۹ گیگاپاسکال کاهش یافت. ادامه این روند نشان می‌دهد که با افزایش ارتفاع موج از $\frac{4}{8}$ به $\frac{5}{8}$، میزان کاهش مدول نسبت به حالت قبل حدود ۲۵ درصد بیشتر شد و مقدار آن به حدود ۱/۳۳ درصد رسید. بنابراین، افزایش ارتفاع موج حتی در شرایط ثابت بودن سایر پارامترها، به‌طور مستقیم موجب کاهش مدول مؤثر می‌شود و شدت این کاهش با افزایش بیشتر ارتفاع موج افزایش می‌یابد. در بررسی مشترک این دو متغیر، نتایج نشان دادند که نسبت منظری نقش تعدیل‌کننده دارد و شدت کاهش مدول ناشی از افزایش ارتفاع موج را کم می‌کند، در حالی که الگوی کلی تغییرات (شیب روند) ثابت باقی می‌ماند.

به‌طور مشخص، در نسبت منظری ۴۰ و با یک موج ثابت، کاهش مدول در مرحله اول ($\frac{3}{8}$ به $\frac{4}{8}$) حدود ۰/۹۸ درصد بود و در مرحله دوم ($\frac{4}{8}$ به $\frac{5}{8}$)، این مقدار به حدود ۱/۳۳ درصد رسید. بررسی تعامل پارامترها نشان داد که با افزایش نسبت منظری به ۶۰، ۸۰ و ۱۰۰، در حالی که شیب کلی نمودار ثابت باقی می‌ماند، شدت کاهش مدول یانگ به‌ترتیب تا ۳۳، ۲۵ و ۲۰ درصد تعدیل می‌شود. نتایج مؤید آن است که ارتفاع موج تعیین‌کننده‌ی اصلی روند نزولی مدول است و افزایش آن موجب تشدید افت می‌گردد، در حالی که نسبت منظری با ایفای نقش تعدیل‌کننده، امکان مهار این کاهش را فراهم می‌سازد. از این رو، در تحلیل‌های پارامتریک و طراحی نانوساختارها، لحاظ هم‌زمان این دو متغیر برای کنترل بهینه رفتار مکانیکی ضروری است [۶۰].

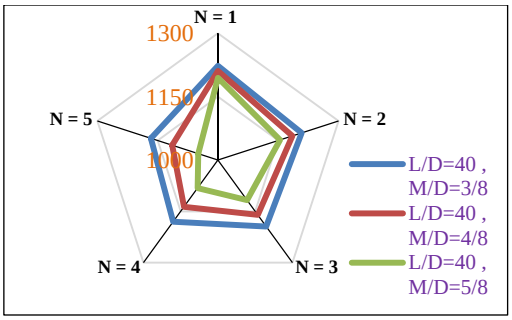


شکل ۱۰. مدول یانگ بر حسب نسبت منظری و ارتفاع موج

۳،۲،۴. تعداد موج و ارتفاع موج

در بررسی اثر تعداد موج و ارتفاع موج به‌صورت هم‌زمان بر مدول مؤثر، نتایج نشان می‌دهند که با افزایش تعداد موج از موج اول تا موج پنجم، روند تغییرات مدول یانگ دارای شیبی ملایم و نزولی است. در حالت اولیه، درصد کاهش مدول از حدود ۱/۲۰۱۱ تا ۱/۱۴۶۰ درصد مشاهده می‌شود. با افزایش ارتفاع موج، این مقادیر به بازه‌ای در حدود ۲/۱۷۷۰ تا ۲/۰۰۲۶ درصد تغییر می‌کنند. این امر نشان می‌دهد که افزایش ارتفاع موج موجب تقویت روند کاهش مدول شده و شدت نزولی بودن آن را افزایش می‌دهد؛ به‌گونه‌ای که میزان قدرت این روند در حدود ۴۶ تا ۴۲ درصد بیشتر می‌شود. افزایش ارتفاع موج نیز روندی مشابه را تکرار کرد، به‌گونه‌ای که شدت کاهش مدول یانگ تا ۳۸

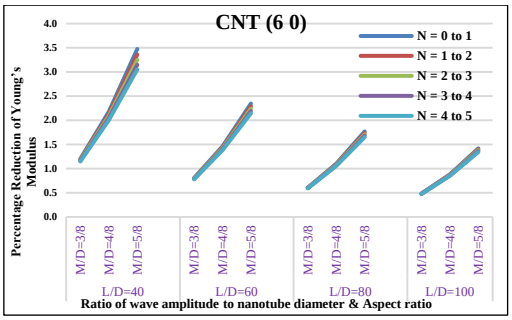
درصد تقویت گردید و شیب نزولی پاسخ مکانیکی تشدید شد. این یافته‌ها نشان می‌دهد که علاوه بر تعداد موج، ارتفاع موج نیز نقشی تقویت‌کننده در افت مدول مؤثر ایفا می‌کند. در نتیجه، هم‌افزایی این دو پارامتر هندسی، تغییرات قابل‌توجهی در خواص مکانیکی معادل ایجاد می‌کند که لحاظ‌کردن آن در تحلیل‌های پارامتریک برای پیش‌بینی دقیق رفتار نانولوله‌ها ضروری است [۶۱].



شکل ۱۱. مدول یانگ بر حسب تعداد موج و ارتفاع موج

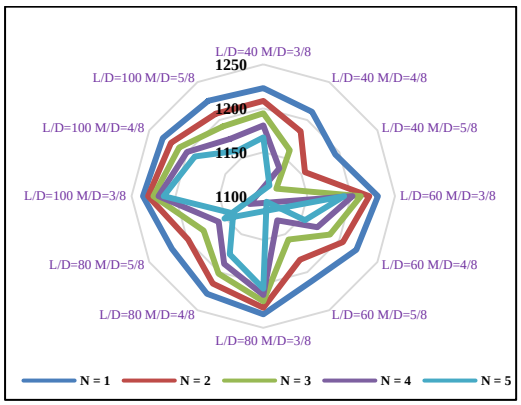
۴،۲،۴. تعداد موج و ارتفاع موج و نسبت منظری

در تحلیل نهایی، اثر سه متغیر اصلی شامل تعداد موج، ارتفاع موج و نسبت منظری به‌صورت هم‌زمان بر مدول مؤثر در چارچوب شبیه‌سازی ماکرو بررسی شد. نتایج نشان می‌دهند که هر یک از این متغیرها نقش مشخصی در تغییرات مدول یانگ دارند و ترکیب آن‌ها رفتار مکانیکی نانولوله را به‌طور قابل توجهی تحت تأثیر قرار می‌دهد. ابتدا مشاهده شد که افزایش تعداد موج از موج اول تا موج پنجم، روندی نزولی و ملایم در کاهش مدول ایجاد می‌کند. در حالت اولیه، درصد کاهش مدول در بازه‌ای حدود ۱/۲۰۱۱ تا ۱/۱۴۶۰ درصد قرار داشت، اما با افزایش ارتفاع موج این مقادیر به حدود ۲/۱۷۷۰ تا ۲/۰۰۲۶ درصد تغییر یافت. این امر نشان می‌دهد که افزایش ارتفاع موج نقش تقویت‌کننده در شدت کاهش مدول دارد و موجب می‌شود شیب نزولی روند تغییرات تشدید گردد. در مراحل بعدی نیز با افزایش بیشتر ارتفاع نانولوله، همین الگو تکرار شد و شدت کاهش مدول به میزان ۳۴ تا ۳۸ درصد بیشتر گردید. بنابراین، ترکیب تعداد موج و ارتفاع موج نه تنها باعث کاهش مدول مؤثر می‌شود، بلکه افزایش ارتفاع موج موجب افزایش قدرت روند نزولی و تشدید تغییرات مکانیکی می‌گردد. از سوی دیگر، بررسی همزمان ارتفاع موج و نسبت منظری نشان داد که نسبت منظری نقش تعدیل‌کننده در روند کاهش مدول ایفا می‌کند. در نسبت منظری ۴۰، کاهش مدول در مرحله اول حدود ۰/۹۸ درصد بود که با افزایش ارتفاع موج به حدود ۱/۳۳ درصد رسید و یک شیب صعودی در روند کاهش ایجاد کرد. با افزایش نسبت منظری به ۶۰، شدت کاهش مدول حدود ۳۳ درصد کمتر شد، در حالی که شیب روند تغییرات ثابت باقی ماند. در نسبت‌های منظری بالاتر (۸۰ و ۱۰۰) نیز همین الگو مشاهده شد؛ به‌گونه‌ای که شیب تغییرات حفظ شد اما شدت کاهش مدول به‌ترتیب به حدود ۲۵ و ۲۰ درصد محدود گردید. این نتایج نشان می‌دهد که نسبت منظری به‌عنوان یک پارامتر هندسی کلیدی، شدت تغییرات ناشی از افزایش ارتفاع موج را تعدیل می‌کند، بدون آنکه الگوی کلی روند تغییرات دستخوش تغییر شود.



شکل ۱۲. تغییر درصدی مدول یانگ بر حسب تعداد موج، نسبت منظری و ارتفاع موج

همچنین، در بررسی اثر همزمان تعداد موج و نسبت منظری مشخص شد که افزایش نسبت منظری موجب کاهش شدت تغییرات درصدی می‌شود؛ اما شیب روند نزولی ناشی از افزایش تعداد موج، ثابت باقی می‌ماند. به‌عنوان نمونه در حضور موج اول، کاهش مدول حدود ۱/۲ درصد بود که با افزایش نسبت منظری به ۶۰، این مقدار حدود ۳۳ درصد کمتر شده و به ۰/۸ درصد رسید. در موج‌های بعدی نیز همین الگو تکرار شد و کاهش مدول با نرخ ثابت تعدیل گردید. در نسبت‌های منظری بالاتر (۸۰ و ۱۰۰)، شدت کاهش مدول به‌ترتیب به حدود ۲۵ و ۲۰ درصد محدود شد. تحلیل‌های پارامتریک نشان می‌دهد که تعداد و ارتفاع موج، عوامل تقویت‌کننده‌ی روند نزولی مدول یانگ هستند، در حالی که نسبت منظری با ایفای نقشی تعدیل‌کننده، شدت این کاهش را مهار می‌کند، بدون آنکه الگوی کلی تغییرات تحت‌الشعاع قرار گیرد. در این راستا، تمامی بررسی‌ها بر پایه‌ی رابطه‌ی (۲۶) انجام گرفته است که به‌عنوان چارچوب اصلی، امکان انتقال معتبر خواص مکانیکی از نمونه‌های نانومقیاس به مدل ماکرومکانیکی را فراهم می‌سازد. نتایج مؤید آن است که این مدل، با دقت بالایی قادر به بازتولید و تفسیر اثرات هندسی مذکور بوده و رابطه‌ی ارائه شده، مبنایی قابل اتکا برای تحلیل اثرگذاری متغیرها بر خواص مکانیکی معادل نانولوله‌هاست [۶۲].



شکل ۱۳. مدول یانگ بر حسب تعداد موج، نسبت منظری و ارتفاع موج

۵. جمع‌بندی

نتایج تحلیل‌های ماکرومکانیکی نشان می‌دهد که رفتار مدول یانگ نانولوله‌های کربنی زیگزاگ به دلیل برهم‌کنش پیچیده متغیرهای هندسی، ماهیتی غیرخطی داشته و به شرح زیر تبیین می‌شود:

- اثر تعداد موج: افزایش تعداد موج، با تضعیف مسیر باربری و افزایش تغییر شکل‌های موضعی، روند نزولی پایه را در مدول یانگ ایجاد می‌کند.
- اثر ارتفاع موج: این پارامتر به‌عنوان عامل تقویت‌کننده عمل کرده و با تشدید تمرکز کرنش در نقاط بحرانی، شیب و شدت کاهش مدول را به‌طور معناداری افزایش می‌دهد.
- نقش نسبت منظری: این متغیر به‌عنوان پارامتر تعدیل‌کننده عمل کرده و اثرات منفی افزایش ارتفاع موج را محدود می‌سازد؛ این تعدیل موجب پایداری بیشتر پاسخ مکانیکی می‌شود، بدون آنکه الگوی کلی روند تغییرات را دگرگون سازد.

- شرایط بحرانی: بیشترین شکاف عملکردی نانولوله موج‌دار نسبت به ساختار مستقیم، در شرایط تعداد و ارتفاع موج بالا و نسبت منظری پایین به وقوع می‌پیوندد که در آن تمرکز کرنش و خمیدگی مسیر باربری به حداکثر می‌رسد.
- اعتبار مدل: انطباق نتایج مدل‌سازی ماکرومکانیکی با رفتارهای مشاهده شده در مقیاس نانو، توانمندی این چارچوب تحلیلی را در بازتولید و تفسیر دقیق اثرات هندسی بر خواص مکانیکی معادل تأیید می‌کند.

در نهایت، با توجه به حساسیت بالای رفتار سازه‌ای نانولوله‌ها به تغییرات هندسی، لحاظ‌کردن هم‌زمان این پارامترها در طراحی‌های مهندسی برای پیش‌بینی دقیق عملکرد مکانیکی ضروری است.

۶. دستاوردهای نهایی پژوهش

در بررسی ماکرومکانیکی، خواص مربوط به تعداد لایه‌ها و ساختار با ورود مدول یانگ نمونه‌ی بدون موج همان ساختار و لایه در روابط معادل‌سازی لحاظ شدند و دیگر به‌صورت جداگانه در روابط نیامدند. در این سطح، تمرکز اصلی بر اثر سه متغیر هندسی یعنی تعداد موج، ارتفاع موج و نسبت منظری بود. نتایج نشان داد که افزایش تعداد موج و ارتفاع موج نقش تقویت‌کننده در کاهش مدول دارند و موجب تشدید روند نزولی می‌شوند، در حالی که نسبت منظری نقش تعدیل‌کننده داشته و شدت این کاهش را کاهش می‌دهد، بدون آنکه الگوی کلی تغییر کند. این رفتار ترکیبی اهمیت ویژه‌ای در تحلیل‌های پارامتریک دارد و نشان می‌دهد که طراحی و کنترل خواص مکانیکی نانولوله‌ها در مقیاس ماکرو نیازمند توجه همزمان به این سه پارامتر هندسی است.

۷. پیشنهادهایی برای تحقیقات آتی

علی رغم تبیین اثر پارامترهای هندسی بر رفتار مکانیکی نانولوله‌ها در پژوهش حاضر، توسعه‌ی این مدل با ادغام شرایط محیطی (دما و فشار) و بارگذاری‌های دینامیکی، گامی ضروری در مطالعات آتی است. بررسی هم‌زمان این متغیرها در کنار فاکتورهای هندسی، ضمن افزایش دقت پیش‌بینی، قابلیت اطمینان طراحی نانوساختارها را برای کاربردهای واقعی ارتقا خواهد داد.

۸. منابع و مأخذ

[1] Eatemadi, A., et al., Carbon nanotubes: Properties, synthesis, purification, and medical applications. Nanoscale research letters, 2014. 9: p. 393.
[2] Tong, Z., et al., A review on applications and challenges of carbon nanotubes in lithium- ion battery. Carbon Energy, 2025. 7(2): p. e643.
[3] Tenchov, R., et al., Transforming Medicine: Cutting-Edge Applications of Nanoscale Materials in Drug Delivery. ACS Nano, 2025. 19(4): p. 4011–4038.
[4] Elahi, N. and C.D. Zeinalipour-Yazdi, Advances in the Synthesis of Carbon Nanomaterials and their Application in Medicine. 2025.
[5] Kulakovskaya, S.I., et al., Promising Electrocatalytic Systems 2, 5-di-Me-Pyrazine-di-N-Oxide-Cyclohexanol-Single-Walled and Multi-Walled Carbon Nanotubes for the Simultaneous Metal-Free Oxidation of Cyclohexanol at Anode and Release of Hydrogen Evolution at Cathode. Catalysis Research, 2026. 6(1): p. 1–31.
[6] Yu, M.-F., Fundamental Mechanical Properties of Carbon Nanotubes: Current Understanding and the Related Experimental Studies. Journal of Engineering Materials and Technology, 2004. 126(3): p. 271–278.
[7] Popov, V.N., V.E. Van Doren, and M. Balkanski, Elastic properties of single-walled carbon nanotubes. Physical Review B, 2000. 61(4): p. 3078–3084.
[8] Damasceno, D.A., et al., Mechanical Properties of Polyethylene/Carbon Nanotube Composites from Coarse-Grained Simulations. Nanomaterials, 2025. 15(3): p. 200.

buckling of carbon nanotubes. Carbon, 2011. 49(5): p. 1705–1711.
[22] Salamon, M.B., M. Marder, and J. Greene, Effect of structural defects on the Young's modulus of carbon nanotubes. Physical Review B, 2004. 69(23): p. 235406.
[23] Zhang, P., et al., Small-scale effect on the mechanical properties of carbon nanotubes. International Journal of Engineering Science, 2003. 41(10): p. 1047–1060.
[24] Reddy, J.N. and S.D. Pang, Vibration analysis of carbon nanotubes using nonlocal elasticity theory. International Journal of Solids and Structures, 2005. 42(13): p. 3377–3392.
[25] Fonseca, A.F., et al., Scaling laws for atomistic simulations of carbon nanotubes. Computational Materials Science, 2010. 49(4): p. 998–1003.
[26] Kiani, M. and M.R. Eslami, Vibration analysis of carbon nanotube-reinforced composite beams using Timoshenko beam theory. International Journal of Mechanics and Materials in Design, 2015. 12(1): p. 79–92.
[27] Kim, H.Y., H.J. Kim, and J.H. Lee, Flexural stability of carbon nanotube-reinforced composite beams. International Journal of Solids and Structures, 2015. 45(10): p. 3435–3448.
[28] Soni, R.S., S.K. Goutam, and B.N. Singh, Wave Propagation in Carbon Nanotube Reinforced Polymer Composites. Journal of Composites Science, 2020. 8(7): p. 258.
[29] Ahmad, M., et al., Effect of carbon nanotube orientation on the elastic modulus of polymer nanocomposites: Representative volume element study. Reviews on Advanced Materials Science, 2021. 60(1): p. 276–285.
[30] Rashko, M.N., et al., Mechanical Properties of Carbon Nanotubes (CNTs): A Review. EURASIAN JOURNAL OF SCIENCE AND ENGINEERING, 2022. 8(2): p. 54–68.
[31] Hertel, T., R.E. Walkup, and P. Avouris, Deformation of carbon nanotubes by surface van der Waals forces. Physical Review B, 1998. 58(20): p. 13870–13873.
[32] Yu, M.F., B.I. Yakobson, and R.S. Ruoff, Effect of waviness on the elastic properties of carbon nanotubes. Applied Physics Letters, 2002. 80(17): p. 3061–3063.
[33] Ghavamian, A. and A. Öchsner, Effect of geometrical imperfections on the mechanical properties of carbon nanotubes. C, 2019. 5(2): p. 54.
[34] Wang, C.Y. and L.C. Zhang, Equivalent-beam modeling of carbon nanotubes with geometric imperfections. International Journal of Mechanical Sciences, 2005. 47(5): p. 765–776.
[9] Cao, S., et al. Mechanical Performance of Diamine Silane Modified Carbon Nanotubes Reinforced Epoxy Resin Composites. Coatings, 2025. 15, DOI: 10.3390/coatings15010060.
[10] Jyoti, J., et al., Synergistic Effect of Sandwich Layer of Carbon Nanotube Bucky Paper in Carbon Fiber Reinforced Hybrid Laminated Composite for High-Performance Mechanical and Electromagnetic Interference Shielding. Polymer Composites, 2026.
[11] Jia, Y., et al., Multifunctional Graphene/Carbon Nanotubes/Poly (Butylene Terephthalate) Composites With Flame Retardancy, Wave Absorption, and Improved Mechanical Properties. Journal of Applied Polymer Science, 2026: p. e70529.
[12] Park, C.J., D. Srivastava, and K. Cho, Elastic properties of carbon nanotubes: Experiment and theory. Physical Review B, 2000. 61(4): p. 3078–3081.
[13] Yakobson, B.I., C.J. Brabec, and J. Bernholc, Elastic properties of single-walled carbon nanotubes determined from atomic structure. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2003. 51(2): p. 271–284.
[14] Yakobson, B.I., G.G. Samsonidze, and M.P. Campbell, Elastic and inelastic deformation of carbon nanotubes: atomistic and continuum mechanics. International Journal of Solids and Structures, 2004. 41(11–12): p. 3395–3412.
[15] Lu, J.P., Elastic properties of carbon nanotubes. Physical Review Letters, 1996. 76(14): p. 2511–2514.
[16] Wei, C.T., D. Srivastava, and K. Cho, Tensile strength and mechanical properties of carbon nanotubes. Physical Review Letters, 1997. 79(1): p. 1297–1300.
[17] Lin, H.F., Y.W. Wang, and Z.M. Guo, Size-dependent elastic properties of single-walled carbon nanotubes studied by molecular mechanics simulations. Computational Materials Science, 2008. 42(4): p. 627–635.
[18] Wang, C.M., et al., Vibrational analysis of single-walled carbon nanotubes using a continuum shell model. Meccanica, 2005. 40(3): p. 307–320.
[19] Wang, C.Y., Y.Y. Zhang, and Y. Xiang, Bending analysis of carbon nanotubes using an equivalent beam model. International Journal of Mechanical Sciences, 2005.
[20] Huang, M.Y., B.S. Han, and M. Zhao, Radial deformation of single-walled carbon nanotubes under pressure. Physical Review B, 2000. 62(10): p. 10405–10408.
[21] Maruyama, S., T. Nakagami, and A. Corigliano, Effect of internal fluid on the

[35] Yakobson, B.I., C.J. Brabec, and J. Bernholc, Effect of waviness on the effective stiffness of carbon nanotubes. International Journal of Solids and Structures, 2004. 41(3-4): p. 935–944.
[36] Li, C. and T.W. Chou, Bending stiffness reduction in wavy carbon nanotubes. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2004. 52(9): p. 2069–2086.
[37] Huang, L.S., et al., Buckling of waviness carbon nanotubes in polymer composites. Composites Science and Technology, 2003. 63(15): p. 2239–2245.
[38] Cao, A., et al., Effect of waviness on the mechanical properties of carbon nanotube forests. Carbon, 2013. 62: p. 207–216.
[39] Abazari, A.M. and M.M. Shokrieh, Combined influence of defects and waviness on the tensile response of carbon nanotubes. Procedia Engineering, 2015. 114: p. 590–597.
[40] Karami, Z., Y. Alizadeh, and M.M. Shokrieh, Effect of carbon nanotube waviness on stress transfer efficiency in nanocomposites. Nanomaterials, 2021. 11(9): p. 2261.
[41] Singh, R., V.K. Patel, and N. Chandra, Influence of carbon nanotube curvature on interfacial adhesion and pull-out behavior in polymer composites. Thin Solid Films, 2019. 683: p. 45.
[42] Deng, F. and Q.S. Zheng, Effect of nanotube waviness on the effective modulus of carbon nanotube networks. Carbon, 2014. 75: p. 410.
[43] Zhang, P., L. Shen, and J. Wu, Effects of structural defects and waviness on the mechanical properties of carbon nanotubes. Physics Letters A, 2006. 357(1): p. 77.
[44] Zhang, Y.Y. and C.M. Wang, Effect of waviness amplitude on the buckling behavior of carbon nanotubes. Carbon, 2011. 49(5): p. 1715.
[45] Chang, T. and X. Guo, Torsional stability of carbon nanotubes: Armchair vs. zigzag structures. Carbon, 2013. 53: p. 384.
[46] Li, X., Y. Zhang, and H. Chen, Buckling behavior of carbon nanotubes with initial waviness: A computational study. International Journal of Mechanical Sciences, 2023. 242: p. 108640.
[47] Narendar, S. and S. Gopalakrishnan, Influence of waviness on the vibrational characteristics of carbon nanotubes. Computational Materials Science, 2017. 136: p. 10.
[48] Wang, Q. and V.K. Varadan, Wave propagation in nanotubes considering rotary inertia and shear deformation effects. International Journal of Mechanical Sciences, 2010. 52(9): p. 1126.
[49] Narendar, S. and S. Gopalakrishnan, Wave propagation in distorted carbon nanotubes: Effects of geometric imperfections. International Journal of Mechanical Sciences, 2015. 99: p. 193.
[50] Elliot, J.A., J.K.W. Sandler, and A.H. Windle, Strain energy and deformation analysis of wavy carbon nanotubes. Journal of Physical Chemistry B, 2004. 108(44): p. 13298.
[51] Ginga, N.J., W. Chen, and S.K. Sitaraman, Waviness reduces effective modulus of carbon nanotube forests by several orders of magnitude. Carbon, 2014. 66: p. 57–66.
[52] Mourad, A., M. Alkhedher, and A. AlTahhan, Molecular Dynamics study on buckling behavior of vertically aligned carbon nanotube (VACNT) bundles with characterized waviness. 2023.
[53] Fisher, F.T., R.D. Bradshaw, and L.C. Brinson, Effects of nanotube waviness on the modulus of nanotube-reinforced polymers. Applied Physics Letters, 2002. 80(24): p. 4647–4649.
[54] Bradshaw, R.D., F.T. Fisher, and L.C. Brinson, Fiber waviness in nanotube-reinforced polymer composites—II: modeling via numerical approximation of the dilute strain concentration tensor. Composites Science and Technology, 2003. 63(11): p. 1705–1722.
[55] Mahrous, E.N., et al. Multiscale Modeling of Elastic Waves in Carbon-Nanotube-Based Composite Membranes. Journal of Composites Science, 2024. 8, DOI: 10.3390/jcs8070258.
[56] Tahhan, A.B.A., et al., Effect of induced vacancy defects on the mechanical behavior of wavy single-walled carbon nanotubes. Nano Trends, 2023. 3: p. 100016.
[57] Alian, A.R. and S.A. Meguid, Molecular dynamics simulations of the effect of waviness and agglomeration of CNTs on interface strength of thermoset nanocomposites. Physical Chemistry Chemical Physics, 2017. 19(6): p. 4426–4434.
[58] Alian, A.R., S. El-Borgi, and S.A. Meguid, Multiscale modeling of the effect of waviness and agglomeration of CNTs on the elastic properties of nanocomposites. Computational Materials Science, 2016. 117: p. 195–204.
[59] Shi, D. L., Feng, X. Q., Huang, Y. Y., Hwang, K. C., & Gao, P. X. (2004). The effect of nanotube waviness and agglomeration on the elastic properties of carbon nanotube-reinforced composites. ASME Journal of Engineering Materials and Technology, 126(3), 250–257.

[60] Anumandla, V., & Gibson, R. F. (2006). A comprehensive closed form micromechanics model for estimating the elastic modulus of nanotube-reinforced composites. Composites Part A: Applied Science and Manufacturing, 37(12), 2178–2185.
[61] Pan, J., Bian, L., Zhao, H., & Zhao, Y. (2016). A new micromechanics model and effective elastic modulus of nanotube reinforced composites. Computational Materials Science, 113, 21–26.
[62] Shi, D. L., Feng, X. Q., Huang, Y. Y., Hwang, K. C., & Gao, H. (2004). The effect of nanotube waviness and agglomeration on the elastic property of carbon nanotube-reinforced composites. Journal of Engineering Materials and Technology, 126(3), 250–257.