مجله مهندسی مکانیک مدرس، خرداد 1396، دوره 17، شماره 3، ص‌ص 87-92

ماهنامه علمی پژوهشی

مهندسی مکانیک مدرس

mme.modares.ac.ir

بررسی تأثیر دمای محیط بر رفتار مکانیکی و شکست نانولوله‌های کربنی

مینا کمالی مقدم[1]، مسعود طهانی[2*]

1- کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد
2- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد
* مشهد، صندوق پستی 1111-91775، mtahani@um.ac.ir

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل
دریافت: 03 آذر 1395
پذیرش: 05 بهمن 1395
ارائه در سایت: 11 اسفند 1395

کلید واژگان:
نانولوله‌ی کربنی
مکانیک محیط پیوسته
رفتار شکست در نانولوله‌ها
اثر دما بر شکست

چکیده

هدف از این مقاله بررسی رفتار شکست نانولوله‌ی کربنی به وسیله‌ی مدل اصلاح شده مکانیک مولکولی ساختاری و شبیه‌سازی آن به کمک روش المان محدود می‌باشد. مدل اصلاح شده مکانیک مولکولی ساختاری، نانولوله را به کمک مدل قاب فضایی شبیه‌سازی می‌کند. این مدل شامل اتم‌های کربن و پیوندهایی به صورت المان تیر سه بعدی با مقطع عمومی است که در آن سفتی‌های خمشی داخل و خارج از صفحه به صورت مستقل تعریف می‌شود. در تحلیل‌های انجام شده، نانولوله‌ی کربنی به صورت دوسرگیردار در نظر گرفته شده و با نرخ کرنش ثابت تحت تنش کششی قرار داده می‌شود تا شکست در نانولوله ایجاد گردد. رفتار پیوندهای کربن-کربن به صورت غیرخطی در نظر گرفته شده که در کرنش 19% دچار گسیختگی می‌شود. همچنین بسته به تغییر رفتار مکانیکی پیوندها در دماهای مختلف پیش‌بینی می‌شود رفتار شکست در نانولوله‌ها وابسته به دمای محیط باشد. بنا به تحقیقات انجام شده، با افزایش دما، مدول یانگ نانولوله کاهش و ضریب پواسون افزایش می‌یابد. همچنین با افزایش دما، تنش و کرنش نهایی شکست کاهش پیدا می‌کند. در نهایت نتایج نشان می‌دهد که می‌توان رابطه‌ای غیرخطی (چندجمله‌ای) بین دما و مدول یانگ تعریف کرد که ثوابت آن وابسته به کایرالیتی نانولوله‌ها تغییر می‌کند.

Study the effect of environment temperature on mechanical and fracture behavior of carbon nanotubes

Mina Kamali Moghaddam, Masoud Tahani*

Department of Mechanical Engineering, Ferdowsi University of Mashhad, Iran
* P.O.B. 91775-1111 Mashhad, Iran, mtahani@um.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 23 November 2016
Accepted 24 January 2017
Available Online 01 March 2017

Keywords:
Carbon nanotube
Continuum mechanic
Fracture behavior
Temperature effect

ABSTRACT

The purpose of this paper is to deal with fracture behavior of carbon nanotubes by presenting a revised structural molecular mechanics model in the finite element method. Structural molecular mechanics modified model simulates nanotubes by using space frame model. This model contains carbon atoms and bonds using a three-dimensional beam element with general section in which bending stiffness and inversion are defined independently. In performed studies, a bridged carbon nanotube with constant strain rate is examined under tensile stress until the failure of nanotube. Carbon-carbon bonds behavior has been assumed nonlinearly and will be ruptured when the strain reaches 19%. Additionally, it is predicted that fracture behavior in carbon nanotubes depends on the environment temperature due to the mechanical behavior of carbon nanotube's bonds. Based on the present research, it can be concluded that by increasing the temperature, Poisson's ratio increases and Young's modulus decreases. Further, it can be said while the temperature increases, both the fracture ultimate strain and stress decrease. Finally, a nonlinear relationship is presented in which the constants depend on chirality of the carbon nanotubes.

1- مقدمه

از زمان کشف نانولوله‌های کربنی توسط ایجیما [1] در سال 1991، این مواد به دلیل داشتن ویژگی‌های الکتریکی و گرمایی ممتاز و همچنین ویژگی‌های فیزیکی فوق‌العاده از قبیل اندازه کوچک، چگالی کم، سختی و استحکام بالا، باعث شده تا تحقیقات پژوهشی گسترده‌ای در علوم مواد، شیمی، فیزیک و مهندسی در دو دهه اخیر بر روی این مواد صورت گیرد [2]. علاوه بر این، هندسه‌ی استثنایی (قطر کوچک و نسبت طول به قطر بالا) آن‌ها باعث شده است که پژوهش‌های زیادی برای توسعه کاربردهای آن‌ها در سامانه‌های نانوالکترومکانیک (NEMS) انجام گیرد. یکی از کاربردهای مهم نانولوله‌های کربنی استفاده از آن‌ها به عنوان ماده تقویتی در نانوکامپوزیت‌ها می‌باشد، بنابراین بررسی ویژگی‌های مکانیکی و مکانیزم‌های تغییر شکل آن‌ها ضروری می‌باشد. به دلیل ابعاد بسیار کوچک نانولوله‌ها، انجام آزمایش تجربی دقیق در بیشتر موارد امکان‌پذیر نیست. بنابراین شبیه‌سازی دینامیک مولکولی که روشی نیمه تجربی و مبتنی بر حل عددی معادلات حرکت است می‌تواند برای بررسی خواص مکانیکی این نانو مواد مفید باشد. علاوه بر روش دینامیک مولکولی، با روش المان محدود بر پایه مکانیک مولکولی [4,3] و روش اِی بی-

برای ارجاع به این مقاله از عبارت ذیل استفاده نمایید:

Please cite this article using:

M. Kamali Moghaddam, M. Tahani, Study the effect of environment temperature on mechanical and fracture behavior of carbon nanotubes, *Modares Mechanical Engineering*, Vol. 17, No. 3, pp. 87-92, 2017 (in Persian)

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-03-29]

[DOR: 20.1001.1.10275940.1396.17.3.42.6]

اینشو[1] بر پایه تئوری تابع چگالی [5]، مطالعاتی روی نانولوله‌های کربنی تک جداره انجام شده است.

در روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی؛ یاکوبسون و همکارانش [6] با میدان پتانسیل ترسوف-برنر[2]، مدول یانگ نانولوله‌های کربنی تک جداره را تحت تنش محوری فشاری حدود 9.9 تراپاسکال محاسبه کردند. جنگ و همکارانش [7] با میدان پتانسیل ترسوف-برنر، مدول یانگ را برای یک نانولوله‌ی تک جداره آرمچیر[3] 1.02 تراپاسکال تعیین نمودند. اگراوال و همکارانش [8] با پتانسیل مرتبه دوم پیوند ترسوف-برنر به همراه پتانسیل برهمکنشی ناپیوندی واندروالس لئونارد-جونز[4]، مدول یانگ نانولوله‌های کربنی تک جداره نوع آرمچیر و زیگزاگ را به ترتیب تقریبا 0.75 تراپاسکال به‌دست آوردند که با افزایش نسبت قطر به طول نانولوله، مدول یانگ کاهش می‌یابد. رابایات و چندرا [9] نشان دادند که تغییرات تنش شکست و کرنش شکست به ازای قطر، نامحسوس و روند مشخصی ندارد. همچنین در چند تحقیق قبلی برای نانولوله کربنی تغییر شکل پلاستیک و پدیده گلویی شدن در مکانیزم شکست گزارش شده است [9].

در مطالعات اخیر، ناردلی [11,10] در سال 1998 با مدل‌سازی نانولوله‌های کربنی نوع آرمچیر با نقص جابجایی، تنش بحرانی تحت بارگذاری عرضی را 5% کمتر نسبت به نانولوله‌های کامل و بی نقص گزارش کرد. ژانگ [12] نیز با تحقیقات و مطالعات بسیار نتیجه گرفت که تنش بحرانی در نانولوله‌های کربنی دارای نقص جابجایی، برای نوع آرمچیر با 6% افزایش و برای نوع زیگزاگ با 12% افزایش همراه است. تی سرپس [13] با ترکیب منحنی تنش-کرنش برای نانولوله‌های بی‌نقص و دارای نقص جابجایی توانست رفتار شکست در نانولوله‌های کربنی را شبیه‌سازی کند. همچنین وی متوجه شد که با جابجایی دو اتم، آرایش جدید شبکه باعث تغییر در طول پیوند با اتم‌های همسایه شده که این نیز انرژی پتانسیل موجود در پیوند را کاهش می‌دهد. از طرفی، سایو [14] در سال 2010 بر اساس نظریه مکانیک مولکولی، توانست شکست درنانولوله‌های کربنی و گسیختگی پیوند را شبیه‌سازی کند.

نظریه مکانیک مولکولی، ساختار اتمی را به صورت یک مجموعه چند-ذره‌ای[5] می‌نگرد که در آن هر اتم، تنها با اتم‌های نزدیک به خود برهم‌کنش دارد. برهم‌کنش بین اتم‌های مورد نظر با معادلات ریاضی پتانسیل میدان نیرو بیان می‌شود. این نگرش مکانیک مولکولی اجازه می‌دهد تا مدل‌سازی ساختارهای اتمی در چهارچوب روش المان محدود امکان‌پذیر شود. بر این اساس، المان‌های محدود استاندارد یا المان‌های محدود خاص برای بررسی خواص مکانیکی نانو ساختارهای کربنی مورد استفاده قرار گرفته است. به ویژه، روش مکانیک مولکولی ساختاری[6] که در آن از یک المان تیر سه‌بعدی با مقطع دایره‌ای برای مدل‌سازی برهم‌کنش اتم‌ها استفاده می‌شود، به علت سادگی و دقت مناسب آن مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است.

در این مقاله از یک مدل تصحیح شده مکانیک مولکولی ساختاری، که در آن یک تیر با مقطع عمومی[7] اتم‌های کربن را به هم متصل می‌کند، استفاده شده و بیشتر به رفتار الاستیک نانولوله‌های کربنی پرداخته می‌شود. در این پژوهش علاوه بر رفتار الاستیک، شکست نانولوله‌های کربنی نیز بررسی می‌شود و اثر دمای محیط و عیوب بر ویژگی‌های مکانیکی نانولوله‌ها مورد ارزیابی قرار می‌گیرد.

2- روش مدل‌سازی

در این پژوهش، ابتدا نانولوله‌های کربنی تک‌جداره مورد نظر مدل‌سازی و مختصات اتم‌ها استخراج می‌شوند. سپس با استفاده از روش المان محدود ویژگی‌های مکانیکی نانولوله‌ها مورد بررسی قرار می‌گیرند. از دیدگاه مکانیک مولکولی، ساختار اتمی نانولوله کربنی، مجموعه‌ای است که در آن ذرات به صورت موضعی با یکدیگر اندرکنش دارند. انرژی پتانسیل بین اتمی، برهم‌کنش‌های مختلف بین اتمی را به صورت توابع ریاضی از مکان اتم‌ها بیان می‌نماید.

انرژی پتانسیل بین اتمی کل E_t را با چشم‌پوشی از نیروهای ضعیف غیر پیوندی الکترواستاتیک و یا واندروالس می‌توان به صورت رابطه (1) نمایش داد.

$$E_t = E_r + E_\theta + E_\varphi + E_\psi \quad (1)$$

که E_r نشان‌گر انرژی برهم‌کنش دو اتمی ناشی از تغییر طول پیوند است. E_θ انرژی برهم‌کنش سه اتمی است که به تغییر زاویه پیوند مرتبط می‌شود. E_φ و E_ψ انرژی ناشی از برهم‌کنش‌های چهار اتمی هستند که پیچش و خمش برون صفحه‌ای (وارونگی[8]) را به‌شمار می‌آورند. پارامترهای هندسی شامل طول پیوند r، زاویه پیوند θ، زاویه پیچش φ و زاویه خمش برون صفحه‌ای ψ است که در شکل 1 نشان داده شده‌اند. نهایتاً در شکل 2 نمایی از شکل هندسی یک نانولوله‌ی شبیه‌سازی شده مشاهده می‌شود که یک سر آن به صورت کامل بسته شده و سر دیگر آن به وسیله‌ی نیروی محوری کششی، دچار کشیدگی می‌گردد.

تغییر در پارامترهای هندسی و در نتیجه انرژی بین اتمی می‌تواند به تغییر شکل (محوری، خمشی و پیچشی) و انرژی کرنشی یک المان تیر مربوط شود. بر پایه‌ی این دیدگاه، مدل سازه‌ای نانولوله کربنی از به هم پیوستن اتم‌های کربن به وسیله المان تیر با مقطع دایره‌ای ایجاد گردید [7]. اما یک تیر با مقطع دایره‌ای، حول هر محور شعاعی مقطع، به ناچار سفتی یکسانی خواهد داشت. از آنجا که در مرجع [7] سفتی خمشی بر مبنای پارامترهای E_θ به دست آمد، تمایزی بین خمش در صفحه و خمش خارج صفحه در نظر گرفته نشد.

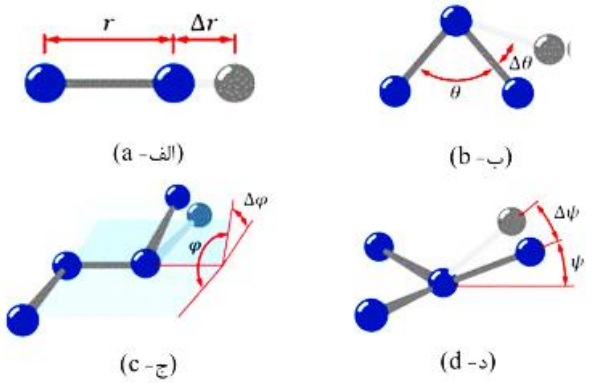


Fig. 1 Interatomic interactions caused by (a) length change (b) bending (c) torsion and (d) inversion

شکل **1** اندرکنش‌های بین اتمی ناشی از (الف) تغییر طول پیوند، (ب) خمش درون صفحه‌ای، (ج) پیچش و (د) خمش برون صفحه‌ای

[1] AB-initio
[2] Tersoff-Brenner
[3] Armchair
[4] Leonard-Jones
[5] Multiparticle
[6] Molecular structural mechanics
[7] General section
[8] Inversion

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-03-29]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1396.17.3.42.6]

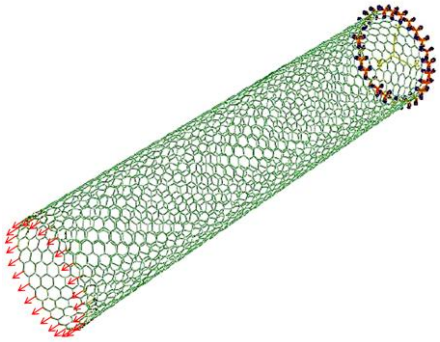


Fig. 2 Geometry of the simulated carbon nanotube

شکل 2 هندسه نانولوله‌ی کربنی شبیه‌سازی شده

در مدل پیشنهاد شده در این مقاله، هر المان تیر بین دو اتم، دارای سطح مقطع عمومی با مساحت $0.01697\ \text{nm}^2$ است که جهت‌های اصلی آن با روشی که در ادامه می‌آید، مشخص می‌شوند. همچنین تعریف یک ماده و استخراج ثابت‌های آن برای تیر لازم نیست. در مقابل، برای هر کدام از تغییر شکل‌های محوری، خمش داخل صفحه، خمش خارج صفحه و پیچش، سفتی و نیروهای گره‌ای مستقل تعریف می‌شود.

همچنین می‌توان گفت در بررسی رفتار الاستیک غیرخطی و مدل‌سازی آنها که ابتدا توسط بیلیتسکو در سال 2002 انجام شد، از انرژی‌های پتانسیلی برای پیچش و خمش برون صفحه‌ای، به‌علت کوچک بودن، صرف نظر شده – است. لذا روابط (2) تا (4) را می‌توان نوشت [15]:

$$E = E_{\text{stretch}} + E_{\text{angle}} \quad (2)$$

$$E_{\text{stretch}} = D_e\{\left[1 - e^{-\beta(r-r_0)}\right]^2 - 1\} \quad (3)$$

$$E_{\text{angle}} = \frac{1}{2}k_\theta(\theta-\theta_0)^2[1 + k_{\text{sextic}}(\theta-\theta_0)^4] \quad (4)$$

که در اینجا E_{stretch} انرژی حاصل از کشش پیوندها و E_{angle} انرژی ناشی از خمش بین دو پیوند است. همچنین r طول پیوند و θ زاویه‌ی بین دو پیوند می‌باشد. بقیه پارامترها نیز به صورت زیر در جدول 1 تعریف می‌شوند [16].

طبق مشاهدات و تحقیقات انجام شده، برای پیدا کردن مدول الاستیسیته در پیوندها، انرژی کششی پیوند در نانولوله‌های کربنی بر تغییر زاویه‌ی آن، به علت کوچک بودن انرژی حاصل از خمش زاویه‌ای، چیره می‌شود [17]. در نتیجه می‌توان در مقابل انرژی کششی از انرژی خمشی صرف نظر کرد. پس می‌توان نیرو و گشتاور حاصل را به صورت روابط (5) و (6) به‌دست آورد.

$$F = \frac{dE_r}{dr} = 2\beta D_e(1 - e^{-\beta(r-r_0)})e^{-\beta(r-r_0)} \quad (5)$$

$$M = \frac{dE_\theta}{dr} = k_\theta(\theta-\theta_0) + [1 + 3k_{\text{sextic}}(\theta-\theta_0)^4] \quad (6)$$

همان‌طور که گفته شد یک نانولوله‌ی کربنی تک‌جداره را تحت کشش قرار داده و مطابق مشاهدات آزمایشگاهی و رابطه (6) نتایج صحیح و معتبر حاصل می‌شود. شکل 3 رابطه بین نیروی F و کرنش ε را در پیوند کربن-کربن نشان می‌دهد. کرنش پیوند از رابطه $\varepsilon_b = (r - r_0)/r_0$ به‌دست می‌آید. همان‌طور که مشاهده می‌شود رابطه نیرو-کرنش کاملاً غیرخطی است. در ناحیه جذب به خصوص در کرنش‌های بالا، نقطه عطف (نیروی حداکثر) در کرنش 19% اتفاق می‌افتد. سرعت کاهش طول پیوند ($\varepsilon_b < 0$) در حالت دافعه کمتر از حالت جذب افزایش می‌یابد [18]. لازم به ذکر است که در اینجا از پتانسیل بهبود یافته مورس استفاده می‌شود تا مقایسه نتایج با تحقیقات مشابه انجام شده امکان پذیر باشد. بعلاوه جهت ساده‌سازی، تئوری الاستیسته خطی به‌کار گرفته می‌شود.

جدول 1 پارامترهای المان تیر در پیوند کربن-کربن [16]

Table 1 beam element parameters in carbon-carbon band [16]

$0.1421(10^{-9})$ m	r_0
2.094 rad	θ_0
$6.03105\ (10^{-19})$ Nm	D_e
$2.625\ (10^{10})\ \text{m}^{-1}$	β
$0.9\ (10^{-18})\ \text{Nm/rad}^2$	k_θ
$0.754\ \text{rad}^{-4}$	k_{sextic}

3- اثر تغییر دما روی ثوابت میدان نیرو

همان‌طور که قبلاً اشاره شد، انرژی پتانسیل یک ساختار مولکولی از رابطه (2) به دست می‌آید. برای تحلیل نانولوله‌های کربنی در دماهای مختلف، تحت بارگذاری محوری، تمام جملات به غیر از دو جمله اول قابل صرف نظر کردن است [19]. به بیان دیگر، فرض می‌شود برای نانولوله‌ها تحت بارگذاری محوری، زاویه θ در دماهای مختلف محیط، مقدار 120 درجه باقی می‌ماند و صرفاً فاصله بین دو اتم با افزایش دمای محیط، افزایش و با کاهش دما، کاهش می‌یابد. تغییرات فاصله بین دو اتم کربن با تغییرات دمای محیط از رابطه‌ی (7) بدست می‌آید.

$$r_T = r_0(1 + \alpha T) \quad (7)$$

در این رابطه T دمای محیط برحسب کلوین و α ضریب انبساط حرارتی گرافین است که مطابق شکل 4 برای دماهای مختلف محاسبه شده است [20].

همچنین ثابت‌های نیروی کششی پیوند و خمشی زاویه پیوند در دمای محیطی T بر حسب کلوین، از قانون باگر[1] به شکل روابط (8) و (9) به‌دست می‌آید [21].

$$k_r^T = k_r \frac{1}{(1+\alpha T)^3} \quad (8)$$

$$k_\theta^T = k_\theta \frac{1}{(1+\alpha T)^3} \quad (9)$$

4- تحلیل و بررسی نتایج

در ابتدا برای تایید صحت روش شبیه‌سازی حاضر با استفاده از المان محدود (مدل قاب فضایی) نانولوله‌ی کربنی نوع آرمچیر (5,5) در دمای 300 کلوین و

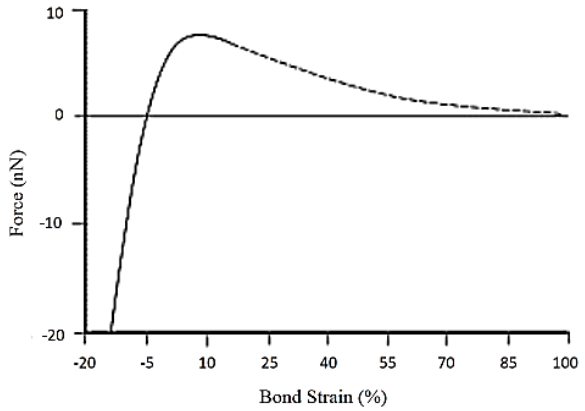


Fig. 3 The relationship between force (in Carbon-Carbon bond) and strain in terms of modified Morse potential [18]

شکل 3 رابطه نیرو (بین پیوند کربن-کربن) و کرنش بر اساس پتانسیل بهبود یافته مورس [18]

[1] Badger

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-03-29]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1396.17.3.42.6]

جدول 2 ضریب انبساط حرارتی در دماهای مختلف محیط [20]

Table 2 Thermal expansion coefficient in different environment temperature [20]

1073	773	578	298	10	0	T (K)
9.9	9.2	8.8	0	-10	-15	α (10^{-5}/K)

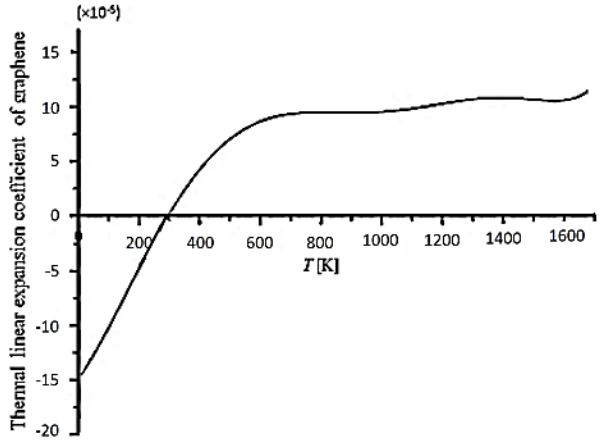


Fig. 4 The variation of thermal expansion coefficient diagram in different temperatures [20]

شکل 4 تغییرات ضریب انبساط حرارتی در دماهای مختلف [20]

نرخ کرنش 3.331 بر پیکوثانیه تحت آزمون کشش شبیه‌سازی شده و نمودار تنش-کرنش آن رسم می‌شود. شکل 5 نشان می‌دهد که نتایج شبیه‌سازی در روش تحقیق حاضر در توافق خوبی با نتایج روش تئوری تابع چگالی [22] و روش دینامیک مولکولی المان محدود [23] قرار دارد.

همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش کرنش در نانولوله‌ها پیوندها دچار کرنش محوری شده و زمانی که کرنش به 19% برسد دچار گسیختگی می‌شوند. با حذف چند پیوند مسیر گسیختگی مشخص شده و سپس با اعمال نیروی کمی باقی پیوندها نیز به کرنش حداکثر می‌رسند. این بدان معناست که با حذف چند پیوند اولیه می‌توان گفت که نانولوله‌ی کربنی دچار شکست شده است زیرا که برای حذف باقی پیوندها نیاز به نیروی زیادی نیست.

در این قسمت ابتدا اثر دمای محیط بر رفتار مکانیکی نانولوله‌ها مورد بحث و بررسی قرار می‌گیرد. ابتدا به منظور نشان دادن قابلیت اطمینان نتایج حاصله، مدول یانگ برای نانولوله‌های مختلف را در دمای 300 کلوین به‌دست آورده و با مقالات لی و چو [24]، سایو [2] و همچنین چن و یانگ [21] مقایسه می‌شود. همان‌طور که مشاهده می‌گردد، نتایج با مراجع ذکر شده مطابقت خوبی دارد.

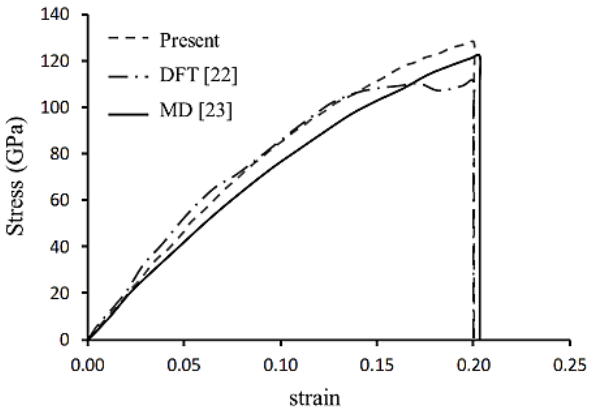


Fig. 5 Stress-Strain diagram in armchair nanotube (5,5) with current study in comparison to reference methods [22] & [23]

شکل 5 نمودار تنش-کرنش نانولوله‌ی آرمچیر (5,5) به‌دست آمده با روش تحقیق حاضر در مقایسه با روش‌های مراجع [22] و [23]

در شکل‌های 6 و 7 مدول یانگ برای نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ بر حسب دمای محیط رسم شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود برای دماهای مختلف محیط، مدول یانگ نانولوله‌های زیگزاگ رابطه مستقیمی با قطر نانولوله دارد، این بدان معنی است که با افزایش قطر نانولوله مدول یانگ افزایش می‌یابد تا زمانی که به مقدار ثابت برسد؛ که این مقدار ثابت در دمای 300 کلوین 1.05 TPa و برای دمای 800 کلوین 0.9 TPa می‌باشد (زمانی که قطر نانولوله از 1 nm کمتر است)، در حالی که این رفتار در نانولوله‌های آرمچیر اتفاق نمی‌افتد. در نتیجه، زمانی که قطر نانولوله از 1 nm کمتر است، این ویژگی مدول یانگ (وابسته به اندازه بودن) که توسط برنیر [25] نشان داده شده بود، به وسیله‌ی مدل اجزای محدود در ابعاد نانو مشاهده می‌شود.

حساسیت مدول یانگ برای نانولوله‌های زیگزاگ به قطر لوله ممکن است به این دلیل باشد که هنگامی که قطر لوله کوچک است اعوجاج المان‌های تیر در نانولوله‌های زیگزاگ از آرمچیر بیشتر باشد. در شکل‌های 6 و 7 می‌توان مشاهده کرد که با افزایش دمای محیط، مدول الاستیسته به طرز قابل توجهی کاهش می‌یابد.

مدول یانگ به طول و قطر نانولوله بستگی دارد، از این رو شبیه‌سازی بر روی نانولوله‌هایی با قطر و طول یکسان، در شرایط دمایی مختلف انجام

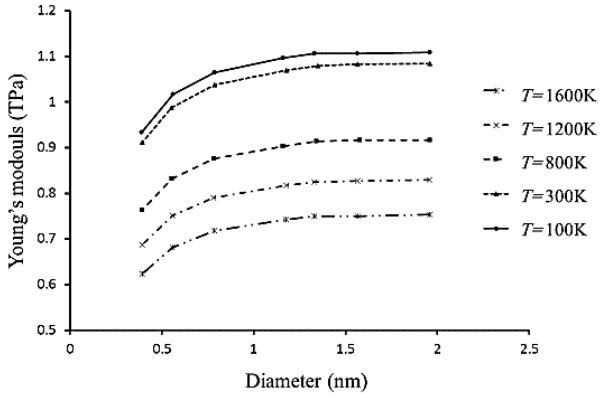


Fig. 6 Variations of Young's modulus in zigzag nanotubes with different diameters in different temperatures

شکل 6 تغییرات مدول یانگ در نانولوله‌های زیگزاگ با قطرهای مختلف در دماهای متفاوت

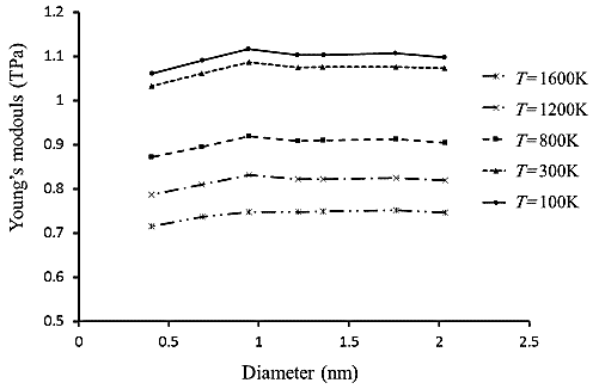


Fig. 7 Variations of Young's modulus in armchair nanotubes with different diameters in different temperatures

شکل 7 تغییرات مدول یانگ نانولوله‌های آرمچیر با قطرهای مختلف در دماهای مختلف

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-03-29]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1396.17.3.42.6]

می‌شود، تا رابطه‌ی بین دما و مدول یانگ به دست بیاید. نتایج نشان می‌دهد که در نانولوله‌ها با هر کایرالیتی می‌توان تأثیر دما را بر مدول یانگ از طریق یک رابطه دریافت. همان‌طور که در شکل‌های 6 و 7 مشاهده می‌شود، مدول یانگ را می‌توان تابعی از دمای محیط به صورت رابطه (10) نوشت.

$$E(T) = E_0 + AT + BT^2 + CT^3 \quad (10)$$

به طوری که A، B و C مقادیر ثابت هستند که وابسته به دمای محیط می‌باشند. طبق نتایج بدست آمده، در نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر، ثابت‌های معادله (10) به صورت جدول 3 تعریف می‌شوند که با نتایج به‌دست آمده در مراجع [22] نیز مقایسه شده‌اند.

وابستگی مدول یانگ نانولوله‌های کربنی تک دیواره نسبت به دما در شکل 8 نشان داده شده است. در حال حاضر طی شبیه‌سازی انجام شده، مطابق با مقالات اخیر مشاهده [22]، مدول یانگ با دمای محیط رابطه دارد، به صورتی که با افزایش دما، مدول یانگ به صورت غیرخطی کاهش می‌یابد.

در شکل‌های 9 و 10 ضریب پواسون نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ در دماهای مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. در خصوص چگونگی به‌دست آمدن ضریب پواسون نانولوله‌ها، می‌توان گفت که در نانولوله‌ها به علت نسبت قطر به ضخامت زیاد، نانولوله مانند استوانه جدارنازک عمل کرده و نسبت پواسون آن با تقسیم کرنش در جهت شعاعی به کرنش طولی به دست می‌آید.

همچنین با مشاهده در شکل‌های 9 و 10، ضریب پواسون برای نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ با افزایش دما نیز افزایش می‌یابد. همچنین مشاهده می‌شود که برای یک دمای ثابت، ضریب پواسون با افزایش قطر نانولوله کاهش می‌یابد.

با مقایسه شکل‌های 9 و 10 مشاهده می‌شود که برای یک دمای ثابت، ضریب پواسون نانولوله‌های زیگزاگ از ضریب پواسون نانولوله‌های آرمچیر بزرگ‌تر است. در دماهای مختلف، تغییرات ضریب پواسون نانولوله‌های

جدول 3 مقادیر ثابت در رابطه مدول یانگ نسبت به دما

Table 3 Constant parameters in Young's modulus relationship in terms of temperature

C $(\times 10^{-11})$	B $(\times 10^{-8})$	A $(\times 10^{-4})$	E_0	
3.16	−4.13	−1.9	1.07	زیگزاگ
3.74	−3.98	−2.8	1.15	زیگزاگ [22]
3.88	−5.02	−2.2	1.05	آرمچیر
4.02	−4.67	−2.7	1.14	آرمچیر [22]
3.83	−4.08	−2.8	1.15	کایرال (زاویه 10)
3.97	−4.21	−2.8	1.15	کایرال (زاویه 15)

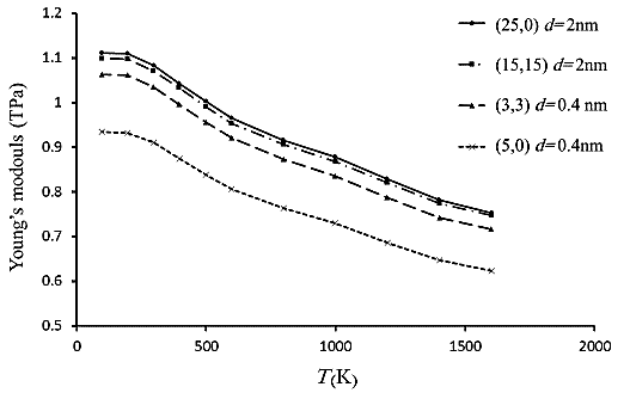


Fig. 8 Variations of Young's modulus for different chirality in terms of environment temperature

شکل 8 تغییرات مدول یانگ برای کایرالیتی‌های مختلف نسبت به دمای محیط

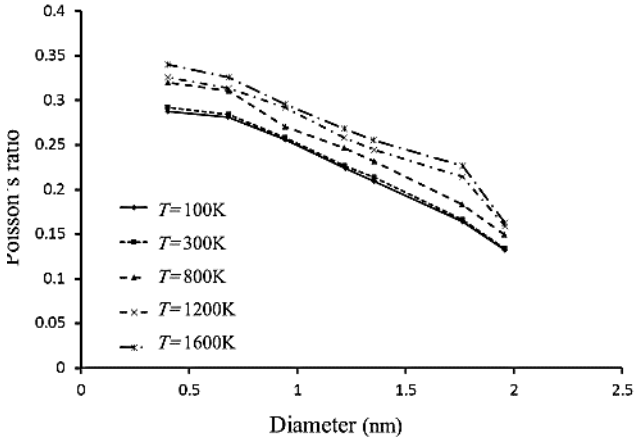


Fig. 9 Variations of Poisson's ratio in zigzag nanotubes with different diameters in different temperatures

شکل 9 تغییرات ضریب پواسون در نانولوله‌های زیگزاگ با قطرهای مختلف در دماهای متفاوت

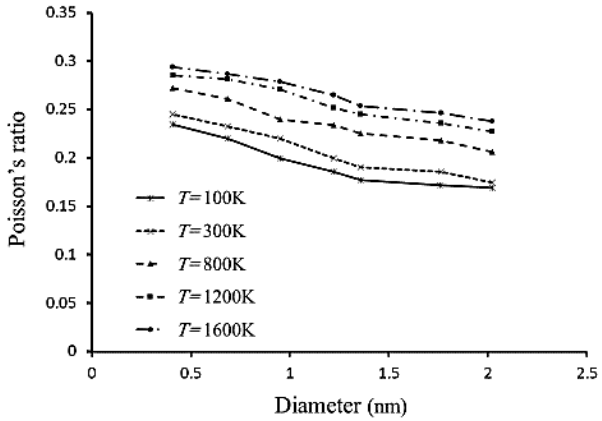


Fig. 10 The diagram of Poisson's ratio in armchair nanotubes with different diameters in different temperatures

شکل 10 تغییرات ضریب پواسون در نانولوله‌های آرمچیر با قطرهای مختلف در دماهای متفاوت

زیگزاگ از آمچیر بیشتر است. در حالی‌که برای قطرهای بیشتر از 1.4 nm تغییرات ضریب پواسون نسبت به دمای محیط در نانولوله‌ی زیگزاگ از آرمچیر کمتر می‌باشد.

شکل‌های 11 و 12 نمودار تنش–کرنش را در دماهای مختلف برای نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر برای قطر ثابت 0.8 nm (با کایرالیتی‌های (6,6) و (10,0)) نشان می‌دهد. همان‌طور که گفته شد تغییر دما بر رفتار پیوندهای بین هر دو اتم و مقاومت آن‌ها تأثیر می‌گذارد، به همین دلیل پیش‌بینی می‌شود با تغییر دما رفتار شکست نانولوله‌ها نیز تغییر کند. شیب خط مماس بر ابتدای نمودار تنش-کرنش مدول یانگ می‌باشد و همان‌طور که مشاهده می‌شود مدول یانگ در نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر با افزایش دما، کاهش می‌یابد. همچنین می‌توان دید که تنش و کرنش شکست با افزایش دما، کاهش یافته و این کاهش در نانولوله‌های آرمچیر بیشتر ازحالت زیگزاگ است. یعنی هرچه دمای محیط را افزایش دهیم نانولوله زودتر دچار گسیختگی و شکست خواهند شد.

5- نتیجه‌گیری

با توجه به اثر دما بر مقاومت کششی پیوندهای بین هر دو اتم کربن، مقاومت

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-03-29]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1396.17.3.42.6]

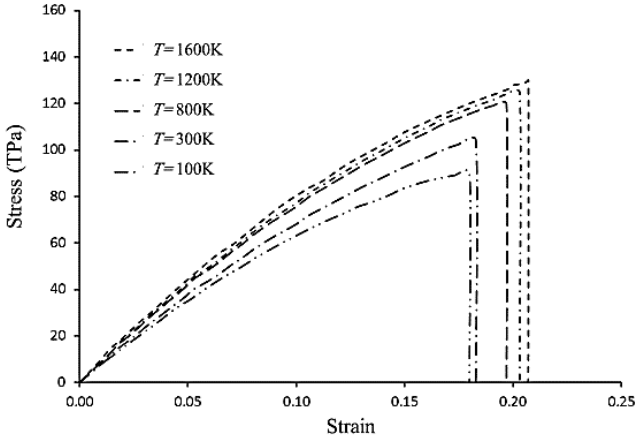


Fig. 11 Stress-Strain diagram in armchair nanotube with diameter of 0.8 nm in different temperatures

شکل 11 نمودار تنش-کرنش نانولوله‌ی آرمچیر با قطر 0.8 nm در دماهای مختلف

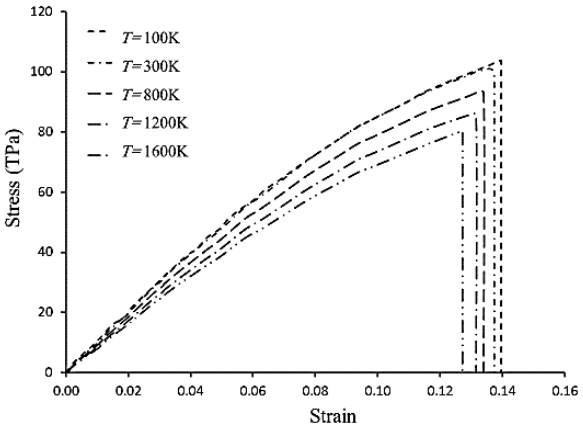


Fig. 12 Stress-Strain diagram in zigzag nanotube with diameter of 0.8 nm in different temperatures

شکل 12 نمودار تنش-کرنش نانولوله‌ی زیگزاگ با قطر 0.8 nm در دماهای مختلف

خمشی بین هر سه اتم و مقاومت پیچشی بین هم چهار اتم می‌توان گفت تغییر دما تأثیر به سزایی بر رفتار مکانیکی نانولوله‌ها دارد. همان‌طور که نشان داده شد رابطه‌ای غیرخطی بین مدول یانگ و دمای محیط برقرار است که نشان می‌دهد با افزایش دما، برای هر دو حالت نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر مدول یانگ کاهش می‌یابد. نتایج نشان داد که نانولوله‌ی آرمچیر از حالت زیگزاگ به تغییر دما حساس‌تر می‌باشد. همچنین می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش دما در انواع نانولوله‌ها علاوه بر کاهش مدول یانگ، تنش و کرنش شکست کاهش می‌یابد. بدین منظور برای بالا بردن تنش و کرنش شکست می‌توان از کاهش دما استفاده کرد. از طرفی می‌توان گفت ضریب پواسون نانولوله‌ها با افزایش دمای محیط، افزایش می‌یابد.

6- مراجع

[1] S. Iijima, Helical microtubules of graphitic carbon, Nature, Vol. 354, No. 6348, pp. 56-58, 1991.
[2] J. Xiao, B. Gama, J. Gillespie, An analytical molecular structural mechanics model for the mechanical properties of carbon nanotubes, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 42, No. 11, pp. 3075-3092, 2005.
[3] S. H. Ghaderi, E. Hajiesmaili, Nonlinear analysis of coiled carbon nanotubes using the molecular dynamics finite element method, *Materials Science and Engineering*: A, Vol. 582, pp. 225-234, 2013.
[4] L. Z. Liu, H. L. Gao, J. J. Zhao, J. P. Lu, Superelasticity of carbon nanocoils from atomistic quantum simulations, *Nanoscale research letters*, Vol. 5, No. 3, pp. 478, 2010.
[5] B. I. Yakobson, C. Brabec, J. Bernholc, Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear response, *Physical review letters*, Vol. 76, No. 14, pp. 2511, 1996.
[6] Y.-R. Jeng, P.-C. Tsai, T.-H. Fang, Effects of temperature and vacancy defects on tensile deformation of single-walled carbon nanotubes, *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Vol. 65, No. 11, pp. 1849-1856, 2004.
[7] P. M. Agrawal, B. S. Sudalayandi, L. M. Raff, R. Komanduri, A comparison of different methods of Young's modulus determination for single-wall carbon nanotubes (SWCNT) using molecular dynamics (MD) simulations, *Computational materials science*, Vol. 38, No. 2, pp. 271-281, 2006.
[8] P. Zhang, Y. Huang, P. Geubelle, P. Klein, K. Hwang, The elastic modulus of single-wall carbon nanotubes: a continuum analysis incorporating interatomic potentials, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 39, No. 13, pp. 3893-3906, 2002.
[9] S. H. Rubaiyat, S. C. Chowdhury, Study of pristine carbon nanotube under tensile and compressive loads using molecular dynamics simulation, *Journal of Mechanical Engineering*, Vol. 40, No. 2, pp. 72-78, 2010.
[10] M. B. Nardelli, B. I. Yakobson, J. Bernholc, Brittle and ductile behavior in carbon nanotubes, *Physical Review Letters*, Vol. 81, No. 21, pp. 4656, 1998.
[11] A. J. Stone, D. J. Wales, Theoretical studies of icosahedral C 60 and some related species, *Chemical Physics Letters*, Vol. 128, No. 5, pp. 501-503, 1986.
[12] P. Zhang, P. E. Lammert, V. H. Crespi, Plastic deformations of carbon nanotubes, *Physical Review Letters*, Vol. 81, No. 24, pp. 5346, 1998.
[13] K. Tserpes, P. Papanikos, The effect of Stone–Wales defect on the tensile behavior and fracture of single-walled carbon nanotubes, *Composite Structures*, Vol. 79, No. 4, pp. 581-589, 2007.
[14] J. Xiao, J. Staniszewski, J. Gillespie, Tensile behaviors of graphene sheets and carbon nanotubes with multiple Stone–Wales defects, *Materials Science and Engineering*: A, Vol. 527, No. 3, pp. 715-723, 2010.
[15] M. Arroyo Balaguer, T. Belytschko, Finite element methods for the non-linear mechanics of crystalline sheets and nanotubes, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 59, No. 3, pp. 419-456, 2004.
[16] T. Belytschko, S. Xiao, G. C. Schatz, R. Ruoff, Atomistic simulations of nanotube fracture, Physical Review B, Vol. 65, No. 23, pp. 235430, 2002.
[17] K. I. Tserpes, Strength of graphenes containing randomly dispersed vacancies, *Acta Mechanica*, Vol. 223, No. 4, pp. 669-678, 2012.
[18] M. B. Nardelli, B. I. Yakobson, J. Bernholc, Mechanism of strain release in carbon nanotubes, *Physical Review B*, Vol. 57, No. 8, pp. R4277, 1998.
[19] Y.-K. Kwon, S. Berber, D. Tománek, Thermal contraction of carbon fullerenes and nanotubes, *Physical Review Letters*, Vol. 92, No. 1, pp. 015901, 2004.
[20] R. M. Badger, The relation between the internuclear distances and force constants of molecules and its application to polyatomic molecules, *The Journal of Chemical Physics*, Vol. 3, No. 11, pp. 710-714, 1935.
[21] J. Kołoczek, Y.-K. Kwon, A. Burian, Characterization of spatial correlations in carbon nanotubes-modelling studies, *Journal of Alloys and Compounds*, Vol. 328, No. 1, pp. 222-225, 2001.
[22] X. Chen, X. Wang, B. Liu, Effect of temperature on elastic properties of single-walled carbon nanotubes, *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, Vol. 28, No. 5, pp. 551-569, 2009.
[23] H. Mori, Y. Hirai, S. Ogata, S. Akita, Y. Nakayama, Chirality dependence of mechanical properties of single-walled carbon nanotubes under axial tensile strain, *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 44, No. 10L, pp. L1307, 2005.
[24] Li, T.-W. Chou, A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 40, No. 10, pp. 2487-2499, 2003.
[25] C. Goze, L. Vaccarini, L. Henrard, P. Bernier, E. Hemandez, A. Rubio, Elastic and mechanical properties of carbon nanotubes, *Synthetic Metals*, Vol. 103, No. 1, pp. 2500-2501, 1999.

[Downloaded from mme.modares.ac.ir on 2024-03-29]
[DOR: 20.1001.1.10275940.1396.17.3.42.6]