



تعیین مدول های برشی و خمشی نانولوله های کربنی با ساختارهای کایرال

مهناز ذاکری^{۱*}، امید بصیری^۲

۱- استادیار دانشکده مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

۲- کارشناس ارشد مهندسی هوافضا، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران

* تهران، صندوق پستی ۳۳۸۱-۱۶۷۶۵، m.zakeri@kntu.ac.ir

چکیده- نانولوله های کربنی، فرم رول شده ورق گرافن هستند که به علت پیوندهای کووالانت موجود در بین اتم های کربن، خواص منحصر به فردی نشان می دهند. در این پژوهش ساختارهای مختلف نانولوله های کربنی با محدوده قطری و طولی گسترده ای مطالعه می شوند تا تاثیر زاویه کایرال بر مدول برشی و خمشی نانولوله ها مشخص شود. بر اساس روش مکانیک مولکولی و روش اجزای محدود، پیوندهای کووالانت بین اتم های کربن در نانولوله با المان تیر خطی شبیه سازی می شود. با انجام تحلیل اجزای محدود، تأثیر قطر، طول و زاویه کایرال نانولوله بر روی خواص مکانیکی تحت بارگذاری های پیچشی و خمشی بررسی می شود. نتایج نشان می دهند که نانولوله زیگزگ کمترین مدول برشی و خمشی را در مقایسه با نانولوله های آرمچیر و کایرال دارا می باشد. نانولوله های کایرال در زوایای کمتر از ۱۷ درجه مدول برشی کمتری نسبت به ساختار آرمچیر دارند، اما در زوایای بزرگتر از ۱۷ درجه، نانولوله های کایرال بیشترین مدول برشی را در مقایسه با دیگر ساختارها دارند. همچنین ساختارهای کایرال مدول خمشی بیشتری نسبت به ساختار آرمچیر و زیگزگ دارند.

کلیدواژگان: نانولوله های کربنی، زاویه کایرال، مکانیک مولکولی، مدول خمشی، مدول برشی.

Estimation of shear and bending moduli for carbon nanotubes with chiral structures

M. Zakeri^{1*}, O. Basiri²

1- Assist. Prof., Aerospace Eng., K. N. Toosi Univ. of Tech., Tehran, Iran

2- MSc, Aerospace Eng., K. N. Toosi Univ. of Tech., Tehran, Iran

* P.O.B. 16765-3381 Tehran, Iran. m.zakeri@kntu.ac.ir

Abstract- Carbon nanotubes (CNTs) are rolled form of graphene sheet with unique properties due to the covalent bonds between carbon atoms. In this research, different structures of CNTs are studied for a wide range of diameter and length to determine the influence of chiral angle on their shear and bending modulus. Covalent bands between carbon atoms are simulated using linear beam elements based on molecular mechanics and finite element method. By using finite element analysis, the effects of diameter, length and chiral angel of nanotubes on mechanical properties under torsional and bending loading conditions are studied. The results show that zigzag CNT has the least shear and bending modulus comparing the armchair and chiral structures. Chiral nanotubes with angles smaller than 17 degrees has less shear modulus comparing armchair ones. But, for larger angles, chiral nanotubes has the largest shear modulus. Also, bending modulus of chiral CNTs is larger than armchair and zigzag structures.

Keywords: Carbon Nanotubes, Chiral Angle, Molecular Mechanics, Bending Modulus, Shear Modulus.

۱- مقدمه

تحقیقاتی کروتو و همکارانش در سال ۱۹۸۵ در دانشگاه رایس جستجو نمود [۱]. ایجیما [۲] در سال ۱۹۹۱ موفق به فراوری نانولوله کربنی چند دیواره با روش تخلیه قوس گردید. حدود دو

نانولوله های کربنی یکی از معروف ترین آلوتروپ های کربن هستند. ریشه پیدایش نانولوله کربن را می توان در فعالیت

روش به علت پیچیدگی روابط و فرمول‌بندی حاکم و حجم بالای محاسبات آن، محدود به سیستم‌های مشتمل بر تعداد محدودی از اتم‌ها می‌گردد و تنها قابل اعمال به مقیاس‌های زمانی بسیار کوتاه در مرتبه پیکوثانیه خواهد بود [۸]. از این‌رو به منظور شبیه‌سازی سیستم‌های بزرگ‌تر و مقیاس زمانی طولانی‌تر، استفاده از مدل‌سازی محیط پیوسته که ریشه در روابط توسعه یافته در حوزه تئوری الاستیسیته دارد، مورد توجه محققان قرار گرفته است.

مدل‌سازی محیط پیوسته معادل^۳ یکی از پیشرفته‌ترین تکنیک‌های محیط پیوسته است که از ترکیب روش‌های مکانیک مولکولی^۴ و اجزای محدود^۵ ایجاد شده است. روش‌های مدل‌سازی محیط پیوسته معادل عمدتاً روش‌های مدل‌سازی نانولوله با استفاده از المان‌های پوسته، خرپا، فنر و تیر را شامل می‌شوند. این روش‌ها برای تعیین خواص استاتیکی و دینامیکی نانولوله‌ها قابل استفاده هستند. اگرچه نانولوله‌های کربنی را با المان پوسته نیز شبیه‌سازی کرده‌اند [۹، ۱۰]، ولی در این صورت خصوصیات اتمی را نادیده گرفته و تأثیر آن بر خصوصیات مکانیکی نانولوله را حذف می‌کنند. اشکال دیگر مدل‌سازی محیط پیوسته با استفاده از المان پوسته این است که نیروهای بین اتمی را در نظر نمی‌گیرد. مدل‌سازی محیط پیوسته با استفاده از المان خرپا نیز در مقابل اعوجاج و خمش پیوندهای کربن-کربن دچار مشکل می‌شود.

در سال ۲۰۰۳، لی و چو [۱۱] مدل اجزای محدودی با جایگزینی المان تیر بجای پیوند کربن-کربن ارائه کردند. ابعاد و مدل الاستیسیته المان تیر از ارتباط میان مکانیک مولکولی و مکانیک محیط پیوسته تعیین شد. آنها مدل الاستیسیته نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ را $1/0.33 - 0/995$ تراپاسکال و همچنین مدل برشی این نانولوله‌ها را بین $0/475 - 0/25$ تراپاسکال بدست آوردند که هم‌خوانی خوبی با مدل الاستیسیته و مدل برشی ورق گرافن داشت. تیسرپس و پاپانیوکوس [۱۲] با استفاده از روش محیط پیوسته معادل جایگزینی المان تیر برای پیوندهای کربن-کربن، مدل برشی نانولوله‌های آرمچیر، زیگزاگ و دو گروه از ساختارهای کایرال را محاسبه کردند. آنها مدل برشی این نانولوله‌ها را در محدوده $0/504 - 0/242$ تراپاسکال به دست آوردند.

سال بعد، وی توانست نانولوله تک دیواره را هم تولید کند. نانولوله‌های کربنی را می‌توان به صورت فرم رول شده ورق گرافن فرض کرد که به علت پیوندهای کووالانت موجود در بین اتم‌های کربن در ساختار اتمی آن، خواص منحصر به فردی دارند. این ویژگی باعث شده است که بررسی خواص مکانیکی و تغییر شکل این ساختارها تحت بارگذاری‌های مختلف اهمیت ویژه‌ای پیدا کند. برای مثال، یکی از کاربردهای صنعتی نانولوله‌های کربنی، استفاده از آنها در سنسورها و عملگرها است. در سال ۱۹۹۹، ناردلی و برنهولک [۳]، تأثیر تغییر شکل خمشی نانولوله‌ها را بر روی خواص الکتریکی آنها بررسی کرده و بیان داشتند که تغییر شکل خمشی، ساختار نواری^۱ نانولوله‌ها را که وابسته به کایرالیته آنها می‌باشد، تغییر می‌دهد. لی و کیم [۴]، یک عملگر الکترومکانیکی حاوی نانوانبرک^۲ طراحی کردند که در نانوانبرک آن از نانولوله کربنی استفاده می‌شود. در چنین کاربردهایی، شناخت رفتار خمشی نانولوله‌ها و تعیین مدل خمشی آنها حائز اهمیت زیادی است.

امروزه شبیه‌سازی‌های محاسباتی به عنوان ابزاری قدرتمند برای پیش‌بینی خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی استفاده می‌شوند. این شبیه‌سازی‌ها را می‌توان به دو زیرگروه کلی مدل‌سازی اتمی یا شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و مدل‌سازی محیط پیوسته تقسیم نمود. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یکی از معتبرترین روش‌های موجود در شبیه‌سازی نانوساختارها است که توسط پژوهشگران زیادی به کار رفته است. برای مثال، هرناوندز و همکاران [۵] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، وابستگی مدل الاستیسیته نانولوله‌های کربنی را به قطر و کایرالیته آنها نشان داده‌اند. ون‌زینگ و همکاران [۶] نیز با استفاده از روش دینامیک مولکولی به مطالعه خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی پرداخته و بیان کردند که مدل الاستیسیته نانولوله‌ها در قطرهای بزرگ به قطر آنها وابسته نیست. شادلو و همکاران [۷] با استفاده از روش دینامیک مولکولی، رفتار شکست نانوکامپوزیت‌های پایه اپوکسی تقویت شده با نانولوله‌های کربنی را بررسی کردند. آنها بیان داشتند زمانی که نانولوله‌های کربنی در زاویه ۴۵ درجه قرار می‌گیرند، بیشترین مقدار انرژی شکست برای نانوکامپوزیت حاصل می‌آید. اما علی‌رغم مزایای روش دینامیک مولکولی، استفاده از این

3. Equivalent-Continuum Modeling (ECM)

4. Molecular Mechanics (MM)

5. Finite Element Method (FEM)

1. Band Structure

2. Nanotweezer

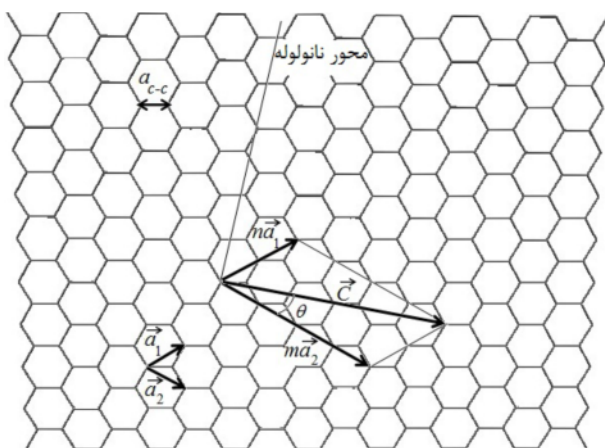
بر تفکیک اثرات اندازه (طول و قطر)، نقش زاویه کایرال نیز در رفتار نانولوله‌ها مشخص شود. در نهایت با نرمالیزه کردن نتایج حاصل، معادلاتی برای تعیین مدول برشی و مدول خمشی نانولوله‌های کایرال استخراج می‌شود.

۲- هندسه نانولوله کربنی تک دیواره

هندسه نانولوله کربنی تک دیواره را می‌توان با پیچیدن یک ورق مستطیل شکل از ورق گرافن مدل کرد تا در نهایت یک لوله استوانه‌ای توخالی به دست آید. به این منظور دو اتم از ورق گرافن انتخاب می‌شوند، یکی به عنوان اتم مبدأ در نظر گرفته شده و صفحه رول می‌شود تا اتم دوم روی اتم مبدأ منطبق شود. برداری که از اتم مبدأ به جهت اتم دیگر اشاره می‌کند، بردار کایرال نامیده می‌شود (شکل ۱). این بردار به صورت رابطه (۱) تعریف می‌شود:

$$\vec{C} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (1)$$

در رابطه فوق $\vec{a}_1$ و $\vec{a}_2$ بردارهای پایه در شبکه لانه زنبوری گرافن می‌باشند که با هم زاویه ۶۰ درجه می‌سازند و زوج مرتب (n, m) اعداد صحیح بوده، و معرف شاخص کایرال نانولوله هستند. با تعریف بردار کایرال که یک لبه مستطیل را تشکیل داده است، یک بردار دیگر برای تشریح کامل نانولوله احتیاج است. این بردار ثانویه، محور نانولوله می‌باشد که عمود بر بردار کایرال است.



شکل ۱ پارامترهای لازم برای تشکیل نانولوله از ورق گرافن [۱۷]

از آنجا که یک جفت عدد صحیح (n, m) ، به صورت منحصر به فرد، یک نانولوله تک دیواره را توصیف می‌کنند،

آویلا و لاکردا [۱۳] مدل المان محدود تیر را با استفاده از پتانسیل مورس اصلاح شده، گسترش دادند. شکریه و رفیعی [۱۴] از مدل الاستیک خطی برای مدل کردن نانولوله استفاده کردند و مدول الاستیسیته‌ای معادل ۱ TPa برای نانولوله‌های کربنی گزارش کردند. آیت الهی و همکاران [۱۵] برای مدل کردن نانولوله از پتانسیل غیرخطی مورس استفاده کردند. آنها اعلام داشتند که تا حدود کرنش ۵٪، نانولوله رفتاری کاملاً خطی داشته، اما پس از کرنش ۵٪ رفتار آن تغییر می‌کند. لو و هو [۱۶] با استفاده از روش محیط پیوسته معادل، خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی را محاسبه کردند. ایشان بیان کردند که با افزایش قطر، مدول الاستیسیته ساختارهای زیگزاگ و کایرال افزایش می‌یابد ولی در ساختارهای آرمچیر افزایش قطر اثر محسوسی بر روی مدول الاستیسیته ندارد.

گرچه تاکنون تحقیقات زیادی در مورد خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی انجام شده است، اما عمده این تحقیقات به بررسی مدول الاستیسیته اختصاص یافته و رفتار پیچشی و خمشی نانولوله‌ها به ندرت مورد بررسی قرار گرفته است. از سوی دیگر، در این تحقیقات تأثیر تغییر ساختار نانولوله بر روی این خواص بطور جامع مطالعه نشده و فقط به بررسی ساختارهای آرمچیر و زیگزاگ با ابعاد خاص و ساختار کایرال با یک زاویه مشخص، محدود شده‌اند. حال آن که جهت بررسی تأثیر ساختار نانولوله بر روی خواص مکانیکی آن، لازم است که تأثیر زاویه کایرال، مستقل از تأثیرات طول و قطر نانولوله بررسی شود.

در این پژوهش، تأثیر پارامترهای هندسی نانولوله‌های کربنی شامل قطر، طول و همچنین کایرالیته بر مدول برشی و مدول خمشی آنها، به طور مستقل بررسی می‌شود. مدل سازی نانولوله‌ها به روش اجزای محدود و بر اساس ارتباط بین مکانیک مولکولی و مکانیک محیط پیوسته، با جایگزینی المان تیر به جای پیوندهای کربن-کربن، انجام می‌گیرد. به این منظور، هندسه نانولوله‌ها در محیط نرم افزار متلب ایجاد شده و نتایج آن در یک فایل متنی ذخیره می‌شود. سپس این فایل در محیط نرم افزار انسیس فراخوانی شده و بارگذاری و شرایط مرزی اعمال می‌شود. به این طریق رفتار خمشی و پیچشی انواع نانولوله‌های کربنی شامل آرمچیر، زیگزاگ و کایرال در محدوده ابعادی گسترده شبیه سازی و تحلیل می‌شود تا علاوه

جدول ۱ ثوابت نیرویی پتانسیل هارمونیک مولکولی [۱۹]

ثوابت	k_r	k_θ	k_ϕ
نیروی	(nN·nm ⁻¹)	(nN·nm·rad ⁻²)	(nN·nm·rad ⁻²)
مقدار	۶۵۲	۰/۸۷۶	۰/۲۷۸

آنها با این روش، رابطه‌ای مستقیم بین پارامترهای مکانیک ساختاری و ثوابت میدان نیرویی مکانیک مولکولی ایجاد کردند. این روابط عبارتند از:

$$k_r = \frac{E_o A_o}{L_o}, \quad k_\theta = \frac{E_o I_o}{L_o}, \quad k_\phi = \frac{G_o J_o}{L_o} \quad (5)$$

در این رابطه G_o ، E_o ، J_o ، I_o ، A_o ، L_o به ترتیب طول، مساحت مقطع، ممان اینرسی، ممان اینرسی قطبی، مدول الاستیسیته و مدول برشی المان تیری با مقطع دایره‌ای به قطر d است که جایگزین پیوند کربن-کربن در نانولوله‌های کربنی می‌شود. طول المان تیر جایگزین، معادل طول پیوند کربن-کربن (۰/۱۴۲ نانومتر) می‌باشد. با استفاده از رابطه (۵) و مقادیر معین ضرایب انرژی پتانسیل مندرج در جدول ۱، مقادیر قطر، مدول الاستیسیته و مدول برشی المان تیر جایگزین بدست می‌آید که در جدول ۲ ذکر شده است. در این پژوهش، پیوند میان اتم‌های کربن نانولوله با استفاده از المان تیر از نوع Beam۱۸۸ در نرم‌افزار انسیس مدل می‌شود که دارای ۶ درجه آزادی در هر گره می‌باشد. خصوصیات هندسی و مکانیکی این المان طبق جدول ۲ در نظر گرفته شده‌اند.

مدل‌سازی نانولوله‌ها در دو مرحله انجام می‌گیرد. در مرحله اول با تعیین مختصات اتم‌های کربن، مدل هندسی در محیط نرم‌افزار متلب ایجاد شده و نتایج آن در یک فایل متنی ذخیره می‌شود. در مرحله دوم، این فایل در محیط نرم‌افزار انسیس فراخوانی شده، شرایط مرزی و بارهای پیچشی و خمشی بر نانولوله‌ها اعمال می‌شود. به این طریق تعداد زیادی از انواع نانولوله‌های کربنی شامل آرمچیر، زیگزاگ و کایرال شبیه‌سازی شده و با انجام تحلیل استاتیکی، خواص مکانیکی شامل بر مدول پیچشی و مدول خمشی استخراج می‌شود. در ادامه، نحوه محاسبه این پارامترها بیان می‌شود.

جدول ۲ خواص هندسی و مکانیکی المان تیر در مدل اجزاء محدود

پارامتر	d	E_o	G_o
	(nm)	(nN·nm ⁻²)	(nN·nm ⁻²)
مقدار	۰/۱۴۶۶۲	۵۴۸۸	۸۷۱/۱

دیگر اندازه‌های نانولوله، مثل قطر D و زاویه کایرال θ به وسیله m و n مطابق روابط (۲) و (۳) محاسبه می‌شوند [۱۷].

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

$$\cos(\theta) = \frac{n + 2m}{2\sqrt{n^2 + m^2 + nm}} \quad (3)$$

که a_{c-c} طول پیوند کربن-کربن با مقدار ۰/۱۴۲ نانومتر در شش ضلعی‌ها می‌باشد (شکل ۱). با توجه به این که میزان زاویه و بردار کایرال چه مقدار باشند، نانولوله‌هایی با ساختارهای مختلف آرمچیر، زیگزاگ و کایرال به وجود می‌آیند. معمولاً نوع زیگزاگ و آرمچیر، به علت تقارن هندسی خود از دسته سوم (کایرال) متمایز می‌شوند. نانولوله‌هایی با ساختار (n,n) با زاویه کایرال ۳۰ درجه، آرمچیر و با ساختار $(n,0)$ با زاویه کایرال صفر درجه، زیگزاگ نامیده می‌شوند. نانولوله‌هایی با ساختارهای غیرمنظم (n,m) که $n > m$ و زاویه کایرال $0 < \theta < 30$ می‌باشد را کایرال می‌نامند.

۳- مبانی مکانیک مولکولی و مدل‌سازی اجزای محدود

در سطح مولکولی، برهم کنش بین اتم‌ها بر اساس انرژی‌های پتانسیل مولکولی توصیف می‌شود. نانولوله‌های کربنی ساختارهایی با رفتار غیرخطی هستند. برای مطالعه شبکه مولکولی تحت تغییر شکل‌های کوچک، انرژی پتانسیل پیوندی را می‌توان مطابق رابطه (۴) توسط توابع ساده هارمونیک به خوبی تخمین زد [۱۸].

$$E_{\text{total}} = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2 + \frac{1}{2} k_\theta (\Delta \theta)^2 + \frac{1}{2} k_\phi (\Delta \phi)^2 \quad (4)$$

در این رابطه k_r ، k_θ و k_ϕ به ترتیب معرف ثوابت نیرویی کشش پیوند، خمش پیوند و پیچش پیوند هستند و Δr ، $\Delta \theta$ و $\Delta \phi$ نیز به ترتیب نماینده تغییرات طول پیوند، زاویه داخل صفحه‌ای پیوند و پیچش خارج صفحه‌ای پیوند می‌باشند. مقادیر ثوابت نیرویی که توسط کرنل و همکاران [۱۹] محاسبه شده‌اند در جدول ۱ آمده است.

لی و چو [۱۱] تساوی بین انرژی پتانسیل بین مولکولی در محاسبات علم شیمی و انرژی کرنشی در مکانیک ساختاری را برقرار کردند.

۴- نحوه محاسبه خواص مکانیکی

۴-۱- مدول برشی

برای محاسبه هر یک از خواص مکانیکی، ابتدا باید شرایط مرزی و بارگذاری یا تغییر شکلی متناظر با آن به درستی اعمال شود. به منظور محاسبه مدول برشی نانولوله‌های کربنی به روش اجزای محدود، تمام درجات آزادی گره‌ها (اتم‌ها) در ابتدای نانولوله بسته می‌شود. با توجه به کایرالیته هر نانولوله، تعداد این گره‌ها برابر با $n+m$ است.

برای اعمال شرایط پیچشی، مختصات از کارتیزین به استوانه-ای تغییر یافته و پیچشی به مقدار ۱ درجه حول محور نانولوله در اتم‌های انتهای آزاد نانولوله اعمال می‌شود. شکل ۲ نمونه‌ای از شرایط مرزی اعمال شده به گره‌های ابتدایی و پیچش اعمال شده به گره‌های انتهایی در نانولوله کایرال (۱۶و۸) را نشان می‌دهد.

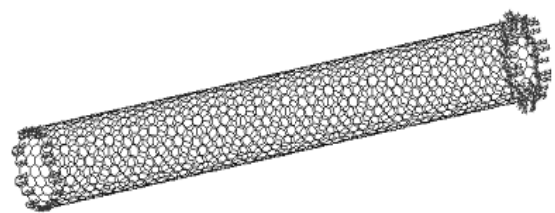
پس از اعمال پیچش، مقدار مجموع گشتاور در اتم‌های انتهایی نانولوله توسط نرم‌افزار محاسبه می‌شود. مدول برشی (G) نانولوله‌های کربنی تحت پیچش با استفاده از رابطه (۶) به دست می‌آید:

$$G = \frac{TL}{\theta J} \quad (6)$$

در رابطه فوق T ، θ و J به ترتیب بیانگر برآیند گشتاور اعمالی بر اتم‌های انتهایی نانولوله، طول، میزان پیچش و ممان اینرسی قطبی نانولوله می‌باشد. ممان اینرسی قطبی نانولوله با استفاده از رابطه (۷) محاسبه می‌شود.

$$J = \frac{\pi}{32} \left((D+t)^4 - (D-t)^4 \right) \quad (7)$$

که در این رابطه D و t به ترتیب بیانگر قطر و ضخامت دیواره نانولوله کربنی هستند. برای تعیین مقدار t ، دیواره نانولوله‌ها با ضخامتی معادل با قطر واندروالسی اتم کربن (۰/۳۴ نانومتر) در نظر گرفته می‌شود [۲۰-۲۲].



شکل ۲ نحوه اعمال شرایط مرزی و پیچش در دو انتهای نانولوله کایرال (۱۶و۸)

۴-۲- مدول خمشی

برای محاسبه مدول خمشی، ابتدا تمام درجات آزادی اتم‌ها در ابتدای نانولوله بسته می‌شود. سپس به اتم‌های انتهایی نانولوله جابجایی به مقدار ۱ آنگستروم در راستای عمود بر محور نانولوله اعمال می‌شود. پس از اعمال خمش، مقدار مجموع نیروی عمود بر محور نانولوله در نقاط انتهایی نانولوله توسط نرم‌افزار محاسبه می‌شود. مدول خمشی (E_b) نانولوله‌های کربنی تحت خمش با استفاده از رابطه (۸) محاسبه می‌شود [۱۵].

$$E_b = \frac{F_y L^3}{3 \delta I} \quad (8)$$

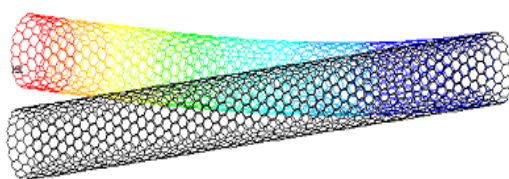
در رابطه δ ، L ، F_y ، I به ترتیب مقدار مجموع نیروی عمود بر محور در اتم‌های انتهایی نانولوله، طول اولیه نانولوله، جابجایی ایجاد شده در راستای عمود بر محور در اتم‌های انتهایی نانولوله و ممان اینرسی نانولوله می‌باشد. ممان اینرسی نانولوله نیز با استفاده از رابطه (۹) محاسبه می‌شود.

$$I = \frac{\pi}{64} \left((D+t)^4 - (D-t)^4 \right) \quad (9)$$

همان طور که قبلاً ذکر شد D و t به ترتیب بیانگر قطر و ضخامت نانولوله هستند. شکل ۳ خمش ایجاد شده در نانولوله (۱۸و۰) را نمایش می‌دهد.

۵- عوامل مؤثر بر خواص مکانیکی نانولوله‌ها

برای بررسی تأثیر زاویه کایرال بر خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی تحت بارگذاری‌های خمشی و پیچشی، باید نقش سایر عوامل تأثیرگذار بر رفتار مکانیکی آنها نیز مطالعه و تفکیک شود. این عوامل شامل اندازه قطر و طول نانولوله می‌باشد. در این بخش با استفاده از تحلیل‌های عددی اجزای محدود، ابتدا به بررسی تأثیر عوامل ذکر شده بر تغییرات مدول برشی و خمشی پرداخته می‌شود و سپس تأثیر زاویه کایرال بصورت مستقل از اثرات اندازه، تحلیل می‌شود.



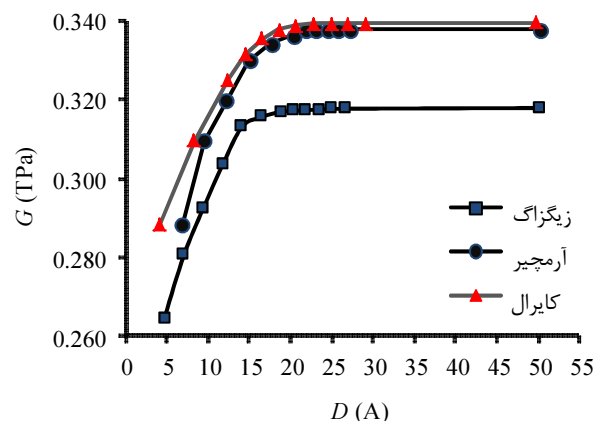
شکل ۳ نمونه تغییر شکل خمشی در نانولوله (۱۸و۰)

۵-۱- تأثیر قطر نانولوله بر مدول برشی و خمشی

به منظور بررسی تأثیر قطر بر تغییرات مدول برشی و مدول خمشی، باید نانولوله‌هایی با طول و زاویه کایرال یکسان مدل شوند. به این منظور نانولوله‌های آرمچیر، زیگزگ و ساختارهای کایرالی با زاویه ثابت ۱۹/۱۱ درجه، که به ترتیب طول ثابتی برابر با ۱۲۶/۶۶ آنگستروم، ۱۲۶/۳۸ آنگستروم و ۱۲۶/۶۶ آنگستروم دارند با محدوده قطری ۵۰ - ۵ آنگستروم مدل‌سازی می‌شوند. با محاسبه مدول برشی (طبق رابطه ۶) برای نانولوله‌های ذکر شده، روند تأثیر قطر بر مدول برشی مطابق شکل ۴ به دست می‌آید.

شکل ۴ نشان می‌دهد در هر سه ساختار آرمچیر، زیگزگ و کایرال در نانولوله‌هایی با قطر کوچک، افزایش قطر سبب افزایش مدول برشی می‌شود ولی از قطر ۲۰ آنگستروم به بعد، اثر قطر کاملاً ناچیز بوده و تقریباً مدول برشی ثابتی مشاهده می‌شود. چنین روندی در مطالعات گذشته نیز مشاهده شده است. لی و چو [۱۱] دلیل افزایش مدول الاستیسیته و مدول برشی با افزایش قطر در نانولوله‌های کربنی با قطر کوچک را اثر انحناء نانولوله‌ها بیان کرده‌اند. در قطرهای کوچک‌تر نانولوله‌ها، پیوندهای کربن-کربن اعوجاج بیشتری دارند و با افزایش قطر نانولوله‌ها، اثر انحناء به تدریج کاهش می‌یابد.

مدول برشی نانولوله‌های مدل‌سازی شده در این پژوهش از TPa ۰/۲۶۵ تا TPa ۰/۳۳۹ تغییر می‌کند. نانولوله کایرال با زاویه ۱۹/۱۱ درجه مدول برشی تقریباً بیشتری نسبت به نانولوله آرمچیر دارد و می‌توان گفت بیشترین مدول برشی را نسبت به ساختارهای آرمچیر و زیگزگ دارد و نانولوله زیگزگ نیز مدول برشی کمتری نسبت به دو ساختار دیگر دارد.



شکل ۴ تغییرات مدول برشی بر حسب قطر نانولوله‌ها

برای ارزیابی نتایج فوق می‌توان به مقالات موجود مراجعه کرد. لو و هو [۱۶] با استفاده از روش محیط پیوسته معادل، محدوده‌ای از نانولوله‌های کربنی را مدل‌سازی کردند. آنها مدول برشی را برای نانولوله‌هایی که قطر آنها از ۰/۳۹۱ nm تا ۲/۰۷ nm تغییر می‌کرد محاسبه کرده و بیان کردند که با افزایش قطر، مدول برشی انواع ساختارهای نانولوله افزایش پیدا می‌کند که روند نتایج آنها مطابقت خوبی با نتایج حاصل از این پژوهش دارد. ورنیک و مگنید [۲۳] برای نانولوله‌های آرمچیر مدول برشی میانگین TPa ۰/۳۴۳ را محاسبه کردند که توافق خوبی با نتایج این پژوهش دارد. گیانوپلوس و همکاران [۲۴] که اثر قطر نانولوله بر روی تغییرات مدول برشی نانولوله‌های آرمچیر و زیگزگ را بررسی کرده‌اند، بیان داشتند که مدول برشی نانولوله‌های کربنی با افزایش شعاع افزایش یافته و به مدول برشی ورق گرافن میل می‌کند. لو و چن [۲۵] نیز با استفاده از مدل المان پیوند شیمیایی^۱ نانولوله‌های کربنی را شبیه‌سازی کردند. آنها مدول برشی نانولوله‌های آرمچیر و زیگزگ را محاسبه و بیان کردند که در قطرهای کوچک، مدول برشی با افزایش قطر افزایش می‌یابد ولی در قطرهای بزرگ‌تر، اثر قطر بر تغییرات مدول برشی بسیار اندک و قابل چشم‌پوشی است. بررسی مراجع مختلف نشان می‌دهد که در اکثر موارد، نتایج حاصل از روش دینامیک مولکولی اختلاف بیشتری در مقایسه با نتایج سایر روشهای محاسباتی نشان می‌دهند. برای مثال، جین و یان [۲۶] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، مدول الاستیسیته و مدول برشی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره را به ترتیب TPa ۱/۲۳۶ و TPa ۰/۴۹۲ بدست آوردند. در صورتی‌که سایر روش‌های محاسباتی و حتی برخی نتایج آزمایشگاهی، مدول الاستیسیته نانولوله‌ها را در حدود TPa ۱ نشان داده است.

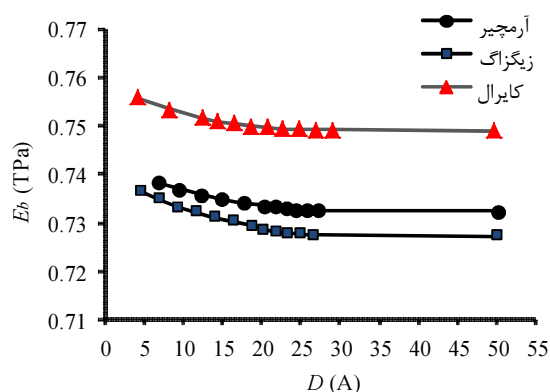
در جدول ۳ مقادیر مدول برشی برای سه نانولوله خاص، با مقادیر مدول برشی قابل دسترس در پژوهش‌های پیشین مقایسه شده است. همچنین در جدول ۴ مقدار متوسط مدول برشی حاصل از این پژوهش (این مقدار حاصل از مدول برشی ۳۷ نوع نانولوله می‌باشد که در شکل ۴ نشان داده شده است) با مقدار متوسط مدول برشی در مراجع مقایسه شده است. اختلاف ناچیز بین نتایج موجود در جدول‌های ۳ و ۴ مؤید صحت مدل‌سازی انجام گرفته در این تحقیق است.

۰/۱ تراپاسکال تغییر می‌کند. نتایج حاصل از این پژوهش نیز در همین محدوده قرار دارد. همچنین آیت‌الهی و همکاران [۱۵] با استفاده از روش مکانیک مولکولی و اجزای محدود، صلبیت خمشی نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ را محاسبه کردند. ایشان صلبیت خمشی ($E_b I$) نانولوله آرمچیر (۱۰ و ۱۰) را 260 nN nm^2 محاسبه کردند که با توجه به ممان اینرسی نانولوله (۱۰ و ۱۰)، مدول خمشی آن برابر با 0.7348 TPa بدست می‌آید. در پژوهش حاضر مدول خمشی ساختار (۱۰ و ۱۰)، 0.7355 TPa بدست آمده است که به مقدار مدول خمشی بدست آمده توسط آیت‌الهی و همکاران [۱۵] بسیار نزدیک است.

برای اطمینان از حذف اثر قطر بر تغییرات مدول برشی و خمشی، نانولوله‌ها تا قطر $50 \text{ \AA}$ مدل‌سازی و تحلیل شده‌اند. همانطور که در شکل‌های ۴ و ۵ ملاحظه می‌شود با افزایش قطر از $20 \text{ \AA}$ تا $50 \text{ \AA}$ مدول برشی و خمشی تغییرات بسیار اندکی داشته و بیشترین تغییرات 0.43% درصد می‌باشد. این امر حاکی از حذف اثر قطر بر تغییرات مدول برشی و خمشی برای نانولوله‌هایی با قطری بزرگتر از $20 \text{ \AA}$ آنگستروم می‌باشد.

۵-۲- تأثیر طول نانولوله بر مدول برشی و خمشی

برای این که تأثیر طول نانولوله‌ها بر تغییرات مدول برشی و خمشی مشخص شود باید نانولوله‌هایی با ساختار و قطر مشابه مدل شوند. به این منظور ساختارهای آرمچیر (۱۵ و ۱۵)، زیگزاگ (۲۶ و ۲۶) و کایرال (۲۱ و ۸) با زاویه کایرال $15/49^\circ$ درجه که به ترتیب قطر ثابتی برابر با $20/34$ ، $20/35$ و $20/31$ آنگستروم دارند در محدوده طولی $60 - 500 \text{ \AA}$ آنگستروم مدل‌سازی می‌شوند.



شکل ۵ تغییرات مدول خمشی بر حسب قطر نانولوله‌ها

جدول ۳ مقایسه مقادیر مدول برشی سه نوع ساختار با مقادیر حاصل از پژوهش‌های پیشین (برحسب TPa)

ساختار	تحلیل حاضر	گیانولوس و همکاران [۲۴]	لو و چن [۲۵]
(۵ و ۵)	۰/۲۸۸	۰/۳۰۹۵	۰/۳۰۲
(۱۵ و ۱۵)	۰/۳۳۶۳	---	۰/۳۴۶
(۲۸ و ۲۸)	۰/۳۱۷۳	---	۰/۳۴۱

جدول ۴ مقایسه مقدار متوسط مدول برشی محاسبه شده با مقادیر مشابه حاصل از پژوهش‌های پیشین

مرجع	$G (\text{TPa})$
گوپتا و همکاران [۲۷]	۰/۳۲۸۱
گیانولوس و همکاران [۲۴]	۰/۳۲۴۵
لو و چن [۲۵]	۰/۳۳۰۷
لو و هو [۱۶]	۰/۳۷۴۶
تحلیل حاضر	۰/۳۲۱۵

در مرحله بعد، مدول خمشی با استفاده از رابطه ۸ محاسبه شده و نمودار تغییرات آن بر حسب قطر نانولوله استخراج می‌شود. شکل ۵ تأثیر تغییر قطر بر روی مدول خمشی را نشان می‌دهد.

با افزایش قطر، مدول خمشی برای انواع ساختارهای نانولوله‌ها کاهش می‌یابد، ولی این کاهش در نانولوله‌هایی با قطر کوچکتر از $10 \text{ \AA}$ محسوس‌تر است. با افزایش قطر به تدریج اثر این پارامتر بر تغییرات مدول خمشی کاهش یافته و برای نانولوله‌هایی با قطر بزرگتر از $20 \text{ \AA}$ آنگستروم اثر قطر تقریباً از بین می‌رود و مدول خمشی ثابتی برای نانولوله‌هایی با ساختار یکسان مشاهده می‌شود. نانولوله کایرال با زاویه $19/11^\circ$ درجه مدول خمشی بیشتری نسبت به نانولوله آرمچیر و زیگزاگ دارد و نانولوله زیگزاگ نیز مدول خمشی کمتری نسبت به دو ساختار دیگر دارد.

مدول خمشی نانولوله‌های مدل‌سازی شده در این پژوهش از 0.727 تا 0.756 تراپاسکال تغییر می‌کند. برای اعتبارسنجی این نتایج می‌توان از معدود نتایج موجود در مراجع استفاده کرد. پنچرال و همکاران [۲۸] با استفاده از روش تجربی میکروسکوپ الکترون عبوری^۱، مدول خمشی نانولوله‌های کربنی را محاسبه کرده و بیان کردند که با افزایش قطر نانولوله‌ها از 8 تا 40 نانومتر، مدول خمشی بطور کلی بین 1 تا

1. Transmission Electron Microscope (TEM)

در شکل ۷ اثر طول بر تغییرات مدول خمشی آمده است. ملاحظه می‌شود که در تمام انواع نانولوله‌های آرمچیر، زیگزاگ و کایرال با افزایش طول، مدول خمشی افزایش می‌یابد. ولی از طول $365 \text{ \AA}$ به بعد اثر طول ناچیز بوده و مدول خمشی برای هر ساختار، تقریباً مقدار ثابتی خواهد داشت. نانولوله کایرال (۲۱و۸) بیشترین مدول خمشی را نسبت به ساختارهای آرمچیر و زیگزاگ دارد. نانولوله‌های زیگزاگ نیز کمترین مدول خمشی را نسبت به دو ساختار دیگر دارا می‌باشند.

در جدول ۵ تغییرات مدول برشی و خمشی برای سه ساختار آرمچیر (۱۵و۱۵)، زیگزاگ (۲۶و۰) و کایرال (۲۱و۸) با افزایش طول نانولوله از مقدار تقریبی $366 \text{ \AA}$ تا مقدار تقریبی $610 \text{ \AA}$ ارائه شده است. تغییر این خواص مکانیکی با افزایش طول بسیار ناچیز و کمتر از ۰/۱ درصد است. این امر نشان دهنده بی‌تاثیر بودن طول نانولوله بر تغییرات مدول برشی و خمشی در نانولوله‌هایی با طول بیش از $365 \text{ \AA}$ آنگستروم است.

۵-۳- تأثیر زاویه کایرال بر مدول برشی و خمشی نانولوله

با توجه به نتایج حاصل از این پژوهش برای نانولوله‌هایی با قطر بزرگتر از $20 \text{ \AA}$ آنگستروم و طول بزرگتر از $365 \text{ \AA}$ آنگستروم، تأثیر ابعاد نانولوله بر مدول برشی و خمشی بسیار ناچیز است و تأثیر این پارامترها بر روی خواص مکانیکی حذف می‌شود. لذا تنها عامل مؤثر بر خواص مکانیکی برای این دسته از نانولوله‌ها، کایرالیته یا نوع ساختار نانولوله می‌باشد. در این بخش از پژوهش برای بررسی تأثیر زاویه کایرال بر خواص مکانیکی، نانولوله‌هایی با زاویه کایرال در محدوده $30^\circ - 0^\circ$ درجه با قطر حدود $20 \text{ \AA}$ و طول حدود $366 \text{ \AA}$ مدل می‌شوند. مشخصات نانولوله‌های مدل شده در جدول ۶ ذکر شده است.

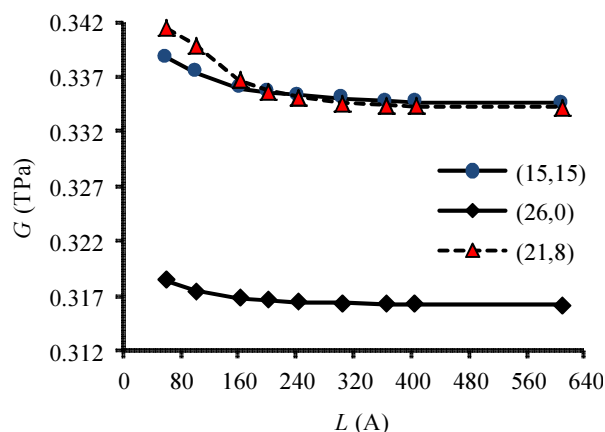
جدول ۵ حذف اثر طول بر تغییرات مدول برشی و خمشی

ساختار	طول (Å)	G (TPa)	E _b (TPa)
(۱۵و۱۵)	۳۶۶/۴۷	۰/۳۳۴۸	۰/۷۴۰۴
	۶۰۹/۹۶	۰/۳۳۴۶	۰/۷۴۱۱
	۳۶۷/۰۷	۰/۳۱۶۲۳	۰/۷۳۱۷
(۲۶و۰)	۶۰۹/۸۹	۰/۳۱۶۲۱	۰/۷۳۲۳
	۳۶۵/۵۶	۰/۳۳۴۴۳	۰/۷۵۶۱
	۶۰۹/۹۸	۰/۳۳۴۲۶	۰/۷۵۶۷

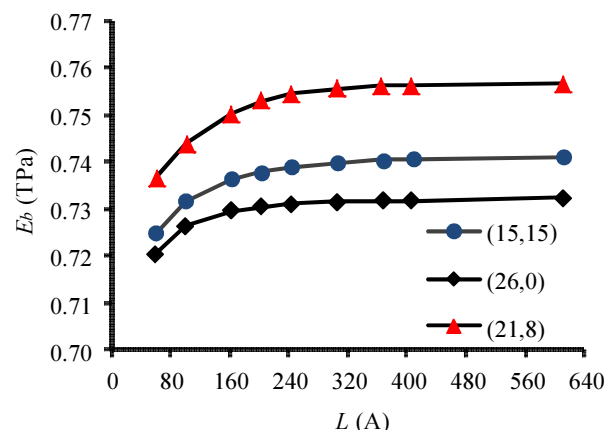
با محاسبه مدول برشی و خمشی این نانولوله‌ها می‌توان اثر طول بر تغییرات این خواص مکانیکی را تعیین کرد. نتایج این تحلیل‌ها به ترتیب در شکل‌های ۶ و ۷ ارائه شده است.

همان طور که در شکل ۷ مشاهده می‌شود در هر سه نوع نانولوله آرمچیر، زیگزاگ و کایرال با افزایش طول، مدول برشی کاهش می‌یابد. ولی از طول $365 \text{ \AA}$ آنگستروم به بعد اثر طول کاملاً ناچیز بوده و مدول برشی برای هر ساختار، تقریباً مقدار ثابتی خواهد داشت.

نانولوله کایرال (۲۱و۸) در طول‌های کوچکتر از $203 \text{ \AA}$ آنگستروم بیشترین مدول برشی را نسبت به ساختارهای آرمچیر و زیگزاگ دارا می‌باشند. ولی این نانولوله‌ها برای طول بزرگتر از $203 \text{ \AA}$ آنگستروم به تدریج مدول برشی اندکی کمتر از ساختار آرمچیر پیدا می‌کنند. همچنین نانولوله‌های زیگزاگ، کمترین مدول برشی را نسبت به دو ساختار دیگر دارند.



شکل ۶ تغییرات مدول برشی بر حسب طول نانولوله



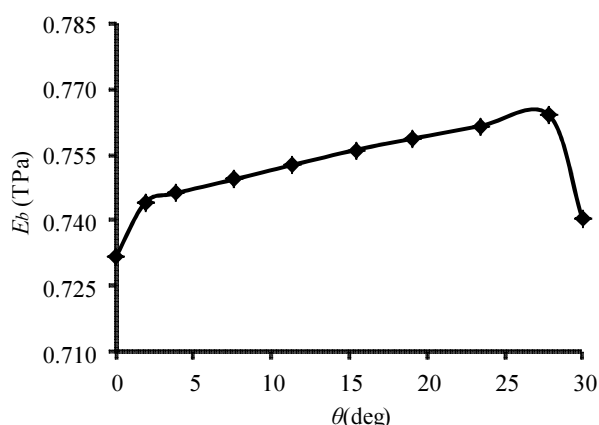
شکل ۷ تغییرات مدول خمشی بر حسب طول نانولوله

طبق این نتایج، مدول برشی نانولوله‌های کایرال در زوایای کمتر از ۱۷ درجه اندکی کمتر از ساختار آرمچیر است، اما در زوایای بزرگتر از آن، نانولوله‌های کایرال بیشترین مدول برشی را در مقایسه با دیگر ساختارها خواهند داشت. برای نانولوله‌های کایرال با افزایش زاویه کایرال، مدول برشی از ۰/۳۳۱۰۲ TPa تا ۰/۳۳۷۲۵ TPa تغییر می‌کند.

در شکل ۹ تغییر مدول خمشی با زاویه کایرال برای نانولوله‌ها ارائه شده است. ملاحظه می‌شود که نانولوله زیگزاگ کمترین مدول خمشی را در مقایسه با سایر ساختارها دارد که دلیل آن می‌تواند به چیدمان پیوندها و مقاومت کمتر آنها در برابر تغییر شکل‌های عرضی مربوط باشد. همچنین با افزایش زاویه کایرال، مدول خمشی افزایش می‌یابد و همه ساختارهای کایرال مدول خمشی بیشتری نسبت به ساختار آرمچیر و زیگزاگ دارند.

۴-۵- استخراج روابط مدول برشی و خمشی با زاویه کایرال

در بخش قبل تغییرات مدول برشی و خمشی نانولوله‌های کایرال با تغییر زاویه ساختاری آنها بررسی شد. برای استخراج معادله‌ای مناسب برای تغییر مدول برشی برحسب زاویه کایرال، می‌توان از مدول برشی نرمالیزه شده (G_C/G_A) استفاده کرد که در آن، G_A و G_C به ترتیب مدول برشی ساختارهای کایرال و آرمچیر هستند. تغییرات مدول برشی نرمالیزه شده با زاویه θ مطابق شکل ۱۰ خواهد بود.



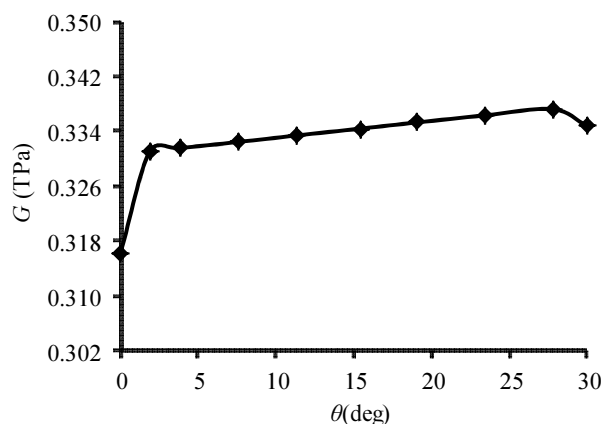
شکل ۹ تغییرات مدول خمشی نانولوله برحسب زاویه کایرال آن

به همین ترتیب، تغییرات مدول خمشی نرمالیزه شده

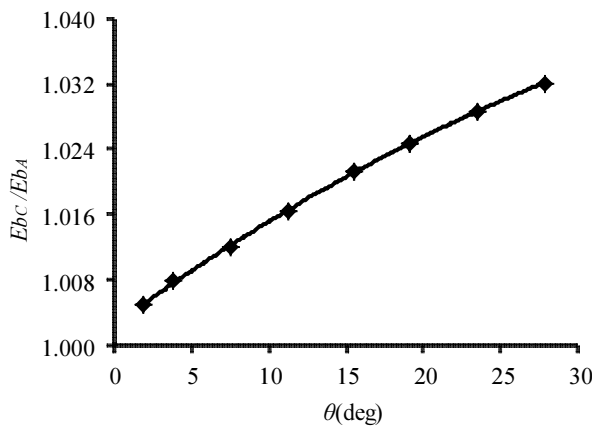
در شکل ۸ تغییرات مدول برشی با زاویه کایرال نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می‌شود نانولوله زیگزاگ کمترین مدول برشی را در مقایسه با نانولوله‌های آرمچیر و کایرال دارد. در توضیح این پدیده می‌توان گفت که در شرایط بارگذاری پیچشی، تنشهای برشی مماسی و تغییر شکل‌های زاویه‌ای در هر مقطع از نانولوله‌ها ایجاد می‌شوند. از سوی دیگر بر اساس راستای پیوندها در شبکه ساختاری، بخشی از انرژی کرنشی ناشی از پیچش می‌تواند صرف اعوجاج و حرکت اتم‌ها در راستای محور نانولوله شود. این پدیده در ساختارهای نامتقارن کایرال تأثیر بیشتری خواهد داشت، اما در مورد نانولوله‌های زیگزاگ با توجه به جهت‌گیری پیوندها در آن، تأثیر کمتری داشته و بخش بزرگ‌تری از انرژی کرنشی سبب تغییر شکل‌های زاویه‌ای می‌شود.

جدول ۶ مشخصات نانولوله‌های مدل شده برای بررسی تأثیر

زاویه کایرال					
ساختار (n,m)	زاویه کایرال (درجه)	قطر (Å)	طول (Å)	تعداد گره	تعداد امان
(۲۶,۰)	۰	۲۰/۳۵	۳۶۷/۰۷	۸۹۹۶	۱۳۴۶۸
(۲۶,۱)	۱/۸۷	۲۰/۷۶	۳۶۶/۵۵	۹۱۰۵	۱۳۴۴۲
(۲۵,۲)	۳/۸۱	۲۰/۴۰	۳۶۷/۱۶	۸۹۷۰	۱۳۴۲۸
(۲۴,۴)	۱۱/۵۹	۲۰/۵۳	۳۶۶/۹۴	۹۰۲۶	۱۳۵۱۱
(۲۳,۶)	۱۱/۳۰	۲۰/۷۶	۳۶۷/۰۲	۹۱۲۸	۱۳۶۶۳
(۲۱,۸)	۱۵/۴۹	۲۰/۳۱	۳۶۵/۵۶	۸۸۹۸	۱۳۳۱۸
(۲۰,۱۰)	۱۹/۱۱	۲۰/۷۱	۳۶۶/۵۷	۹۱۰۲	۱۳۶۲۳
(۱۸,۱۲)	۲۳/۴۱	۲۰/۴۷	۳۶۶/۱۷	۹۰۰۰	۱۳۴۷۰
(۱۶,۱۴)	۲۷/۸	۲۰/۳۵	۳۶۶/۲۵	۸۹۴۲	۱۳۳۸۳
(۱۵,۱۵)	۳۰	۲۰/۳۴	۳۶۶/۴۷	۸۹۷۰	۱۳۴۲۵



شکل ۸ تغییرات مدول برشی نانولوله برحسب زاویه کایرال آن



شکل ۱۱ تغییرات مدول خمشی نرمالیزه شده با زاویه کایرال

به منظور اطمینان از درستی این معادلات، مقادیر مدول مدول برشی و مدول خمشی برای چند ساختار دلخواه شامل (۲۰ و ۹)، (۲۸ و ۶) و (۲۱ و ۵) با استفاده از روابط فوق و همچنین به روش اجزاء محدود محاسبه شده و نتایج حاصل از دو روش در جدول ۷ مقایسه شده‌اند. در این جدول، G_{FEM} و G_C به ترتیب مدول برشی حاصل از روش اجزای محدود و رابطه (۱۰)، E_{bC} و E_{bFEM} به ترتیب مدول خمشی حاصل از روش اجزای محدود و رابطه (۱۱) می‌باشند. Δ_{E_b} و Δ_G به ترتیب درصد خطای نسبی مقادیر مدول برشی و مدول خمشی محاسبه شده به دو روش هستند که براساس روابط (۱۲) و (۱۳) به شکل زیر محاسبه شده‌اند.

$$\Delta_G = (|G_C - G_{FEM}| \times 100) / G_{FEM} \quad (12)$$

$$\Delta_{E_b} = (|E_{bC} - E_{bFEM}| \times 100) / E_{bFEM} \quad (13)$$

همانطور که در جدول ۷ مشاهده می‌شود بیشترین مقادیر درصد خطای نسبی برای مدول برشی و مدول خمشی ۰/۰۶ درصد می‌باشد که حاکی از دقت بالای معادلات (۱۰) و (۱۱) برای پیش‌بینی خواص مکانیکی نانولوله‌های کایرالی با قطر بزرگتر از ۲۰ Å و طول بیش از ۳۶۵ Å می‌باشد.

(E_{bC}/E_{bA}) نانولوله‌ها با تغییر زاویه کایرال، مطابق شکل ۱۱

به دست می‌آید که در آن، E_{bC} و E_{bA} به ترتیب مدول خمشی ساختارهای کایرال و آرمچیر می‌باشد.

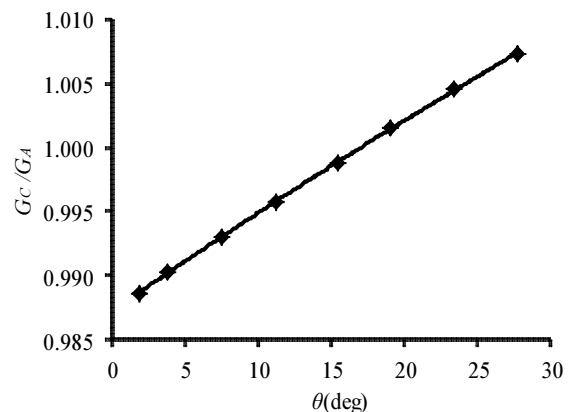
با استفاده از منحنی‌های شکل‌های ۱۰ و ۱۱، برای تعیین مدول برشی و مدول خمشی ساختارهای کایرال معادلاتی به صورت روابط (۱۰) و (۱۱) به دست می‌آید.

$$G_C = (-0.023\theta^2 + 7.89\theta + 9872.12) \times 10^{-4} G_A \quad (10)$$

$$E_{bC} = (-0.112\theta^2 + 13.77\theta + 10025.14) \times 10^{-4} E_{bA} \quad (11)$$

با توجه به حذف اثر قطر بر خواص مکانیکی نانولوله‌ها طبق نمودارهای شکل ۴ و ۵ و نیز حذف اثر طول طبق نمودارهای شکل‌های ۶ و ۷، در روابط (۱۰) و (۱۱) برای G_A و E_{bA} می‌توان از مقادیر خواص مکانیکی نانولوله آرمچیر (۱۵ و ۱۵) با قطر ۲۰/۳۴ Å و طول ۳۶۶/۴۷ Å استفاده کرد. G_A و E_{bA} به ترتیب برابر ۰/۳۳۴۸ TPa و ۰/۷۴۰۴ TPa می‌باشند.

معادلات (۱۰) و (۱۱) را می‌توان برای تعیین خواص مکانیکی نانولوله‌های کایرال در الگوریتم‌های طراحی و بهینه‌سازی به کار برد.



شکل ۱۰ تغییرات مدول برشی نرمالیزه شده با زاویه کایرال

جدول ۷ مقایسه مقادیر مدول برشی و مدول خمشی حاصل از معادلات (۱۰) و (۱۱)، با مقادیر حاصل از روش اجزای محدود

Δ_{E_b} (%)	E_{bC} (TPa)	E_{bFEM} (TPa)	Δ_G (%)	G_C (TPa)	G_{FEM} (TPa)	طول (Å)	قطر (Å)	زاویه کایرال (درجه)	ساختار (n,m)
۰/۰۶	۰/۷۵۱۱۸	۰/۷۵۰۷۶	۰/۰۳	۰/۳۳۲۹۷	۰/۳۳۲۸۸	۴۰۵/۱۴۵	۲۴/۶۱۰	۹/۵۱۵	(۲۸ و ۶)
۰/۰۵	۰/۷۵۷۶۴	۰/۷۵۷۲۶	۰/۰۲	۰/۳۳۴۹۵	۰/۳۳۴۸۹	۴۰۵/۴۲۰	۲۰/۱۲۸	۱۷/۶۴۷	(۲۰ و ۹)
۰/۰۲	۰/۷۶۲۲۳	۰/۷۶۲۴۰	۰/۰۵	۰/۳۳۶۵۴	۰/۳۳۶۶۹	۴۰۵/۳۲۷	۲۴/۵۲۱	۲۴/۵۰۴	(۲۱ و ۵)

۶- جمع‌بندی و نتیجه‌گیری

در این مقاله به مدل‌سازی انواع ساختارهای نانولوله کربنی با استفاده از روش اجزای محدود بر مبنای روش مکانیک مولکولی پرداخته شد و تأثیرات اندازه (قطر و طول) و همچنین زاویه کایرال نانولوله‌ها بر روی مدول برشی و خمشی بررسی شد. نتایج این پژوهش را می‌توان به صورت زیر خلاصه کرد:

- در هر سه ساختار آرمچیر، زیگزگ و کایرال در نانولوله‌هایی با قطر کوچک، با افزایش قطر، مدول برشی افزایش و مدول خمشی کاهش می‌یابد. همچنین در هر سه نوع ساختار، از قطر ۲۰ آنگستروم به بعد اثر قطر به مقدار بسیار قابل توجهی کاهش یافته و تقریباً مدول برشی و خمشی ثابتی مشاهده می‌شود.

- در هر سه نوع نانولوله آرمچیر، زیگزگ و کایرال با افزایش طول، مدول برشی کاهش و مدول خمشی افزایش می‌یابد. ولی از طول ۳۶۵ آنگستروم متر به بعد اثر طول کاملاً ناچیز بوده و مدول برشی و خمشی برای هر ساختار، مقدار ثابتی خواهد داشت.

- در مقایسه مدول برشی بین سه نوع ساختار آرمچیر، زیگزگ و کایرال مشاهده می‌شود که نانولوله زیگزگ کمترین مدول برشی را در مقایسه با نانولوله‌های آرمچیر و کایرال دارد. همچنین در نانولوله‌های کایرال، با افزایش زاویه کایرال، مدول برشی افزایش می‌یابد ولی همه ساختارهای کایرال مدول برشی بیشتری نسبت به ساختار آرمچیر نخواهند داشت. نانولوله‌های کایرال در زوایای کمتر از ۱۷ درجه مدول برشی کمتری نسبت به ساختار آرمچیر دارند، اما در زوایای بزرگتر از ۱۷ درجه، نانولوله‌های کایرال بیشترین مدول برشی را در مقایسه با دیگر ساختارها دارند.

- نانولوله زیگزگ کمترین مدول خمشی را در مقایسه با نانولوله‌های آرمچیر و کایرال دارا می‌باشد. همچنین در نانولوله‌های کایرال، با افزایش زاویه کایرال، مدول خمشی افزایش می‌یابد و همه ساختارهای کایرال مدول خمشی بیشتری نسبت به ساختار آرمچیر و زیگزگ دارند.

- با نرمالیزه کردن نتایج این مقاله، رابطه‌ای درجه ۲ برای تعیین مدول برشی و مدول خمشی نانولوله‌های کایرال با قطر بزرگ‌تر از ۲۰ Å و طول بیش از ۳۶۵ Å استخراج و ارائه شد.

۷- مراجع

- [1] Dai H., "Carbon nanotubes: opportunities and challenges", *Surface Science*, Vol. 500, No. 1-3, 2002, pp. 218-241.
- [2] Iijima S., "Helical microtubules of graphitic carbon", *Nature*, Vol. 354, No. 63, 1991, pp. 56-58.
- [3] Nardelli M.B., Bernholc J., "Mechanical deformations and coherent transport in carbon nanotubes", *Physical Review B*, Vol. 60, No. 24, 1999, pp. 16338-41.
- [4] Lee J., Kim S., "Manufacture of a nanotweezer using a length controlled CNT arm", *Sensors and Actuators A: Physical*, Vol. 120, No. 1, 2005, pp. 193-8.
- [5] Hernandez E., Goze C., Bernier P., Rubio A., "Elastic properties of C and BxCyNz composite nanotubes", *Physical Review Letters*, Vol. 80, No. 20, 1998, pp. 4502-5.
- [6] WenXing B., ChangChun Z., WanZhao C., "Simulation of Young's modulus of single-walled carbon nanotubes by molecular dynamics", *Physica B*, Vol. 352, No. 1-4, 2004, pp. 156-63.
- [7] Shadlou, S., Ayatollahi, M.R., Shokrieh, M.M., "Fracture behavior of epoxy/DWNT nanocomposites using molecular dynamics simulation", *Polymer Science and Technology*, Vol. 25, No. 4, 2012, pp. 315-322 (in Persian).
- [8] Rafiee, R., *Prediction of engineering properties of CNT/epoxy composites using stochastic modeling*, PhD. Thesis, Iran University of Science and Tech., 2010. (In Persian)
- [9] Yakobson B.I., Brabec C.J., Bernholc J., "Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear response", *Physical Review Letters*, Vol. 76, No. 14, 1996, pp. 2511-4.
- [10] Ru C.Q., "Effective bending stiffness of carbon nanotubes", *Physical Review B*, Vol. 62, No. 15, 2000, pp. 9973-6.
- [11] Li C., Chou T.W., "A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 40, No. 10, 2003, pp. 2487-99.
- [12] Tserpes K.I., Papanikos P., "Finite element modelling of single-walled carbon nanotubes", *Composites Part B: Engineering*, Vol. 36, No. 5, 2005, pp. 468-477.
- [13] Ávila A.F., Lacerda G.S.R., "Molecular mechanics applied to single-walled carbon nanotubes", *Materials Research*, Vol. 11, No. 3, 2008, pp. 325-333.
- [14] Shokrieh M.M., Rafiee R., "On the tensile behavior of an embedded carbon nanotube in polymer matrix with nonbonded interphase region", *Composite Structures*, Vol. 92, No. 3, 2010, pp. 647-652.

- [22] Jin Y., Yuan F.G., "Simulation of elastic properties of single-walled carbon nanotubes", *Composites Science and Technology*, Vol. 63, No. 11, 2003, pp. 1507-15.
- [23] Wernik J.M., Meguid S.A., "Multiscale modeling of the nonlinear response of nano reinforced polymers", *Acta Mechanica*, Vol. 217, No. 1-2, 2011, pp. 1-16.
- [24] Giannopoulos G.I., Kakavs P.A., Anifantis N.K., "Evaluation of the effective mechanical properties of single walled carbon nanotubes using a spring based finite element approach", *Computational Materials Science*, Vol. 41, No. 4, 2008, pp. 561-69.
- [25] Lu J.N., Chen H.B., "Analysis of single-walled carbon nanotubes using a chemical bond element model", *Chinese Journal of Chemical Physics*, Vol. 21, No. 4, 2008, pp. 353-360.
- [26] Jin Y., Yuan F.G., "Simulation of elastic properties of single-walled carbon nanotubes", *Composites Science and Technology*, Vol. 63, No. 11, 2003, pp. 1507-1515.
- [27] Gupta S., Dharamvir K., Jindal V.K., "Elastic moduli of single-walled carbon nanotubes and their ropes", *Physical Review B*, Vol. 72, No. 16, 2005, pp. 165428.1-165428.16.
- [28] Poncharal P., Wang Z.L., Ugarte D., Heer W.A., "Electrostatic deflections and electromechanical resonances of carbon nanotubes", *Science*, Vol. 283, No. 5407, 1999, pp. 1513-6.
- [15] Ayatollahi M.R., Shadlou S., Shokrieh M.M., "Multiscale modeling for mechanical properties of carbon nanotube reinforced nanocomposites subjected to different types of loading", *Composite Structures*, Vol. 93, No. 9, 2011, pp. 2250-2259.
- [16] Lu X., Hu Zh., "Mechanical property evaluation of single-walled carbon nanotubes by finite element modeling", *Composites: Part B*, Vol. 43, No. 4, 2012, pp. 1902-1913.
- [17] Gogotsi Y., Ed., *Nanomaterials Handbook*, CRC Press, part of the Taylor & Francis imprint, London & New York, 2006.
- [18] Gelin, B.R., *Molecular modeling of polymer structures and properties*, Verlag, Munich, 1994.
- [19] Cornell W.D., Cieplak P., Bayly C.I., Gould I.R., Merz K.M., Ferguson D.M., Spellmeyer D.C., Fox T., Caldwell J.W., Kollman P.A., "A second generation force field for the simulation of proteins, nucleic acids, and organic molecules", *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 117, No. 19, 1995, pp. 5179-97.
- [20] Lu J.P., "Elastic properties of carbon nanotubes and nanoropes", *Physical Review Letters*, Vol. 79, No. 7, 1997, pp. 1297-1300.
- [21] Hernandez E., Goze C., Bernier P., Rubio A., "Elastic properties of single-wall nanotubes", *Applied Physics A*, Vol. 68, No. 3, 1999, pp. 287-292.