



## تخمین مدول یانگ نانوساختار فولرن با استفاده از مکانیک مولکولی و روش اجزا محدود

علی نایبی<sup>1\*</sup>، اسمعیل قوانلو<sup>2</sup>، نسترن حسینی<sup>3</sup>

1-دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه شیراز، شیراز

2-استادیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه شیراز، شیراز

3- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه شیراز، شیراز

\*شیراز، صندوق پستی 71963-16548، nayeabi@shirazu.ac.ir

### چکیده

### اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل

دریافت: 04 بهمن 1394

پذیرش: 06 اسفند 1394

ارائه در سایت: 07 فروردین 1395

کلید واژگان:

مدول یانگ

مکانیک مولکولی

نانوساختار فولرن

در این مقاله، یک مدل سه بعدی اجزا محدود جهت تعیین مدول یانگ نانوساختار فولرن ارائه گردید. این مدل براساس این فرض که رفتار فولرن تحت بارگذاری همانند یک سازه فضایی است، می باشد. پیوند بین اتم های کربن به عنوان اعضای به شکل تیر تحت بار محوری، خمشی و پیچشی در نظر گرفته شده اند که اتم های کربن این اعضا را به یکدیگر متصل نموده اند. به منظور ایجاد مدل المان محدود، گره ها در مکان اتم های کربن قرار داده شده است و پیوند بین آن ها با استفاده از المان تیر الاستیک سه بعدی مدل شده است. مدول الاستیک المان تیر به کمک ارتباط بین مکانیک مولکولی و مکانیک محیط های پیوسته تعیین شده است. به منظور تعیین مدول یانگ نانو ساختار فولرن، از تئوری پوسته کروی استفاده شده است. اثر قطر فولرن بر مدول الاستیک آن مطالعه شد و مشاهده گردید که با افزایش شعاع فولرن مدول یانگ آن ها کاهش می یابد. بعد از مطالعه مدول یانگ فولرن های بدون نقص، فولرن های معیوب نیز بررسی گردیدند و تغییر مدول یانگ آن ها براساس انواع مختلف عیب های فولرن بدست آمد.

## Young's modulus estimation of fullerene nanostructure by using molecular mechanics and finite element method

Ali Nayeabi\*, Esmaeel Ghavanloo, Nastaran Hosseini

School of Mechanical Engineering, Shiraz University, Shiraz, Iran

\*P.O.B. 71963-16548, Shiraz, Iran, nayeabi@shirazu.ac.ir

### ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper

Received 23 January 2016

Accepted 24 February 2016

Available Online 26 March 2016

### Keywords:

Young' modulus

Molecular mechanics

Fullerene nanostructure

### ABSTRACT

In this paper, a three-dimensional finite element model is proposed for estimating Young's modulus of fullerene nanostructures. The model is based on the assumption that the fullerenes, when subjected to loading, behave like space-frame structures. The bonds between carbon atoms are considered as connecting load-carrying members like beams under axial, bending and torsion loadings, while the carbon atoms are considered as joints of the members. To create the finite element models, nodes are placed at the locations of carbon atoms and the bonds between them are modeled using three-dimensional elastic beam elements. The elastic modulus of beam elements is determined by using a linkage between molecular mechanics and continuum mechanics. In order to evaluate the Young's modulus, the spherical shell theory is also utilized. Compression loading on the fullerene is considered and the load – displacement variation is obtained. The effect of diameter on the elastic modulus of fullerenes nanostructures has been studied and it is observed that by increasing the radius of fullerenes, their elastic modulus decreases. After studying the properties of perfect fullerenes, the Young's modulus of different defective fullerenes is also determined.

موجود در شبکه فولرن ذکر می شود. در شکل 1 ساختار مولکولی چند فولرن نشان داده شده است. ساختار مولکولی فولرن برای آن که بصورت یک شکل کروی بسته شود، باید دقیقاً 12 وجه پنج ضلعی داشته باشد، ولی تعداد وجه های شش ضلعی می تواند بطور گسترده ای تغییر کند.

مولکول  $C_{60}$  که دارای 60 اتم کربن می باشد، اولین مولکول از این مجموعه می باشد که موجب تحولی عظیم در زمینه فناوری نانو گردید. فولرن ها از نظر مکانیکی مولکول های بیش از حد مستحکم هستند و تحمل فشارهای بسیار زیاد را دارند، به طوری که پس از تحمل فشاری حدود 3000

### 1- مقدمه

فولرن یکی از مهم ترین انواع نانوساختارهای کربنی می باشند. در ساختار فولرن، اتم های کربن به صورت پنج و شش ضلعی های منتظم در کنار یکدیگر قرار گرفته و ساختاری سه بعدی از اتم های کربن ایجاد می کنند. به طور کلی با توجه به نحوه استقرار اتم های کربن می توان فولرن ها را به دو دسته کروی یا شبه کروی و غیر کروی یا شبه بیضوی تقسیم نمود. فولرن ها را با توجه به تعداد اتم های موجود در ساختارشان نام گذاری می کنند. برای نام گذاری فولرن ها از یک حرف C استفاده می شود و بعد از آن تعداد اتم های کربن

الکترونیکی آن ها می شود. بنابراین پرداختن به این عیوب و بررسی اثر آن ها بر خواص مواد از اهمیت خاصی برخوردار است.

تعیین خواص فولرن ها به خصوص با توجه به ابعاد بسیار کوچک آن ها مشکل بوده و با روش های معمول قادر به تعیین آن ها نمی باشیم. یکی از روش های مورد استفاده جهت تعیین خواص الاستیک مواد نانوساختار، روش مکانیک مولکولی و استفاده از روش المان محدود می باشد. روش مذکور نخستین بار در سال 2003 توسط لی و چو [12] ارائه گردید و پس از آن محققین زیادی با استفاده از روش پیشنهادی به محاسبه خواص و رفتارهای مکانیکی نانوساختارهای کربنی پرداختند [13-17]. در این پژوهش، ابتدا با استفاده از مکانیک مولکولی، روش اجزا محدود و تئوری پوسته های کروی، مدول یانگ فولرن های کروی بدون عیب محاسبه می شود. سپس مدول یانگ این مولکول ها با در نظر گرفتن انواع عیوب ساختاری تعیین خواهد شد.

## 2- مکانیک مولکولی

در روش مکانیک ساختاری-مولکولی، نانوساختارهای کربنی به شکل قاب فضایی در نظر گرفته می شوند که در این قاب، پیوند بین دو اتم کربن متصل مانند یک تیر و اتم ها مانند مفصل مدل سازی می شوند (شکل 2).

پارامترهای مدول الاستیک و سطح مقطع المان تیر مورد نیاز به وسیله برقراری ارتباطی بین مکانیک سازه ای و مکانیک مولکولی بدست می آید. پیوندهای کربن-کربن، خواصی مانند طول پیوند و زاویه پیوند در فضای سه بعدی دارند، بنابراین منطقی است که تغییر شکل فولرن را براساس مکانیک مولکولی بتوان شبیه سازی کرد. جایجایی اتم ها با برهم کنش های هسته-هسته و الکترون-هسته کنترل می شود. این میدان نیرو از طریق انرژی پتانسیل محلی بیان می شود که منحصر به محل و موقعیت نسبی هسته های تشکیل دهنده اتم بستگی دارد. انرژی پتانسیل کل ناشی از برهم کنش های پیوندی (کوالانسی) و غیرپیوندی (واندروالسی) و با صرف نظر از برهم کنش های الکترواستاتیکی به صورت معادله (1) بیان می شود [18]:

$$U_{\text{total}} = \sum_{i=1}^n U_r + \sum_{i=1}^n U_{\theta} + \sum_{i=1}^n U_{\phi} + \sum_{i=1}^n U_{\text{vdw}} \quad (1)$$

که در آن:

$U_r$ : انرژی مربوط به برهم کنش کشیدگی پیوندهای کربن-کربن

$U_{\theta}$ : انرژی مربوط به برهم کنش تغییر زاویه پیوندهای کربن-کربن

$U_{\phi}$ : انرژی مربوط به برهم کنش چرخش حول محور پیوند (پیچش)

$U_{\text{vdw}}$ : انرژی مربوط به پیوندهای واندروالسی است.

در حالت کلی برای سیستم های دارای پیوند کووالانسی، ترم های اصلی تشکیل دهنده انرژی پتانسیل سه مورد اول هستند. با فرض تغییر شکل های کوچک، تقریب هارمونیک برای توصیف انرژی مناسب است. جهت ساده سازی، اشکال هارمونیک معادله (2) انتخاب می شوند [18].

$$\begin{cases} U_r = \frac{1}{2} k_r (r - r_0)^2 = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2 \\ U_{\theta} = \frac{1}{2} k_{\theta} (\theta - \theta_0)^2 = \frac{1}{2} k_{\theta} (\Delta \theta)^2 \\ U_{\phi} = \frac{1}{2} k_{\phi} (\Delta \phi)^2 \end{cases} \quad (2)$$

که در آن  $r_0$  و  $\theta_0$  به ترتیب فاصله اولیه بین اتم ها و زاویه پیوند می باشد.

علاوه بر این،  $k_r$  و  $k_{\theta}$  به ترتیب ثابت نیروی کششی پیوند، ثابت نیروی خمشی پیوند و مقاومت پیچشی پیوند می باشند که مقادیر آن ها بایستی

اتم سفر به شکل اولیه خود باز می گردند [1]. همچنین این مولکول ها دارای چگالی کمی می باشند و اخیراً از آن ها در تولید نانوکامپوزیت ها استفاده شده است. به این ترتیب که فولرن ها را به عنوان ماده تقویت کننده وارد ماده زمینه کرده و استحکام کامپوزیت ها را بهبود می بخشند. این مولکول ها دارای کاربردهای مهم دیگری در حوزه های روان کاری در مقیاس نانومتری، فوتونیک، دارورسانی و غیره می باشند [1].

از این رو محققان مختلف با استفاده از روش های تجربی و تئوری به مطالعه خواص فیزیکی فولرن ها پرداخته اند. سیچت و همکاران [2] مشخصات ساختاری و الکترومکانیکی فولرن تک لایه را بررسی کردند. در تحقیقی دیگر، هو و همکاران [3] خواص ساختاری، بیولوژیکی و سایشی فولرن را مورد بررسی قرار دادند. همچنین خواص الکترونیکی و ارتعاشی فولرن توسط اولجنیزاک و همکاران [4] مطالعه شد. برخی تحقیقات دیگر بر بهینه سازی خواص فولرن متمرکز شده است. در این زمینه، خواص مکانیکی فشاری Si-C<sub>60</sub> توسط شن [5] بررسی شد. در این تحقیق روابط بین دما و کرنش در فولرن ها استخراج و نشان داده شد که دما در محدوده 300 الی 1100 درجه کلوین، اثر کمی بر خواص مکانیکی آن ها دارد. از جمله کاربردهای فولرن ها استفاده در نانویاتاقان ها می باشد. لگاس و همکاران [6]، روش دینامیک مولکولی را برای تحلیل سیستم های روان کاری با استفاده از مولکول فولرن C<sub>60</sub> استفاده نمودند. ارتعاشات متقارن فولرن C<sub>60</sub> با استفاده از پوسته کروی نازک توسط چادرتون مطالعه گردید [7]. بهفر و نقدآبادی [8] مدل-سازی در مقیاس نانو را برای یک فولرن چند لایه که در یک محیط الاستیک قرار گرفته است، انجام داده و کاربرد آن را در تحلیل ارتعاشی بررسی کردند. در آن تحقیق مدول یانگ و ضریب پواسون برای فولرن های مختلف ثابت در نظر گرفته شده است. سروی و احمدیان [9] تغییر فرم، تنش و فرکانس های طبیعی C<sub>60</sub> را به کمک سوپر المان کروی تعیین نمودند. آن ها نیز خواص مکانیکی فولرن را ثابت و معادل خواص الاستیک نانو لوله های کربنی فرض نمودند. جیانوپولوس و همکاران [10] با استفاده از روش مکانیک ساختاری اتمی و با استفاده از المان های فرنی، سختی الاستیک شعاعی را برای برخی فولرن ها محاسبه نمودند. جهت تعیین مدول یانگ شعاعی، فشار شعاعی بر روی تمامی گره های مدل اعمال شده و با محاسبه تنش و کرنش مدول یانگ شعاعی تخمین زده شده است. آن ها مشاهده کردند که با افزایش تعداد اتم های کربن در ساختار فولرن و در نتیجه افزایش شعاع فولرن، مدول الاستیسیته شعاعی کاهش می یابد. قوانلو و فاضل زاده [11] مدلی برای پیش بینی ارتعاشات متقارن در نانوساختارهای شبه پوسته کروی شامل فولرن های کروی و ویروس های کروی خالی ارائه کردند. با توجه به مطالعات صورت گرفته، مشاهده می شود که تاکنون تحقیقی سیستماتیک جهت تعیین مدول یانگ نانوساختارهای فولرن انجام نشده است. از سوی دیگر، وجود عیوب در ساختار مواد باعث تغییراتی در خواص مکانیکی، شیمیایی و

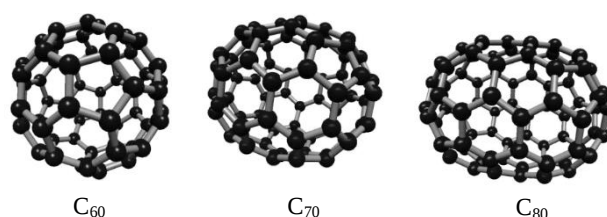


Fig. 1 Different Fullerene molecules [1].

شکل 1 ساختار مولکولی چند فولرن

مشخص گردد.

اتم‌های کربن از طریق پیوندها به هم مرتبط می‌باشند و تغییر شکل کل، نتیجه برهم‌کنش‌های پیوندها است. جهت ساده‌سازی از این فرض استفاده می‌شود که پیوندها مشابه استوانه هستند و ممان‌های سطح با هم برابرند  $I_y = I_z = I$ .

بنابراین جهت مدل‌سازی تیرها (پیوندها) تنها پارامترهای  $EI$  و  $GJ$  باید تعیین شوند. پارامترهای مذکور با تعیین قطر استوانه ( $D$ )، مدول یانگ معادل ( $E$ ) و مدول برشی معادل پیوند ( $G$ ) تعیین می‌شوند. با توجه به این‌که تغییر شکل یک قاب فضایی منجر به تغییر انرژی کرنشی می‌شود، انرژی پتانسیل محلی در مکانیک مولکولی و انرژی‌های کرنشی حاصل از تغییر شکل تیر معادل یکدیگر می‌باشند.

برای تیری که معادل پیوند کربن-کربن است، طول  $L$  و سطح  $A$  و ممان سطح مقطع  $I$  در نظر گرفته می‌شود. انرژی‌های کرنشی این تیر عبارتند از:

انرژی کرنشی تحت بار محوری خالص:

$$U_P = \int_0^L \frac{P^2}{2EA} dL = \frac{EA}{2L} (\Delta L)^2 \quad (3)$$

انرژی کرنشی تحت گشتاور خمشی خالص:

$$U_M = \int_0^L \frac{M^2}{2EI} dL = \frac{EI}{2L} (2\alpha)^2 \quad (4)$$

انرژی کرنشی تحت گشتاور پیچشی خالص:

$$U_T = \int_0^L \frac{T^2}{2GJ} dL = \frac{GJ}{2L} (\Delta\beta)^2 \quad (5)$$

با در نظر گرفتن معادلات (2) و (3)-(5)، مشاهده می‌گردد که  $U_P$  و  $U_T$  هر دو انرژی ناشی از تغییر شکل کششی،  $U_M$  و  $U_\theta$  هردو انرژی ناشی از خمش و  $U_\phi$  و  $U_T$  هر دو انرژی پیچشی هستند. بنابراین، با مقایسه معادلات، رابطه میان پارامترهای مکانیک سازه‌ای و مکانیک مولکولی بدست می‌آید:

$$\begin{cases} \frac{EA}{L} = k_r \\ \frac{EI}{L} = k_\theta \\ \frac{GJ}{L} = k_\phi \end{cases} \quad (6)$$

همان‌گونه که اشاره شد، با فرض سطح مقطع دایره‌ای برای المان تیر و با حل همزمان معادلات (6)-(2) برای سه مجهول  $E$ ،  $G$  و  $d$ ، این مقادیر به صورت معادله (7) حاصل می‌شود:

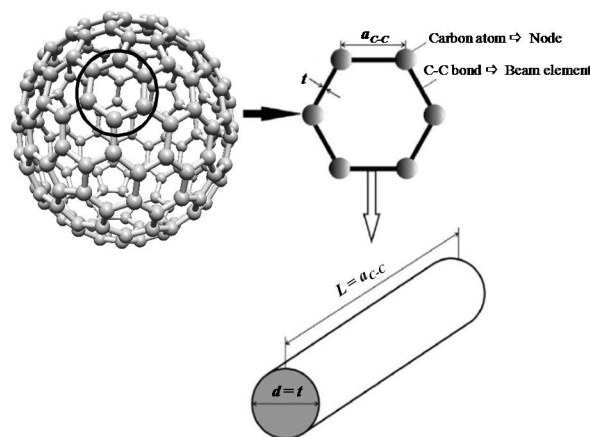


Fig. 2 Molecular Mechanics modeling of atomic links.

شکل 2 مدل‌سازی مکانیک مولکولی باندهای اتمی

$$\begin{cases} d_{\text{bond}} = 4 \sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}} \\ E = \frac{k_r^2 L}{4\pi k_\theta} \\ G = \frac{k_r^2 L k_\phi}{8\pi k_\theta^2} \end{cases} \quad (7)$$

لازم به ذکر است که مقادیر  $k_r$ ،  $k_\theta$  و  $k_\phi$  از مکانیک مولکولی به شرح زیر دست می‌آیند [12].

$$\begin{cases} k_r = 938 \text{ kcal. mole}^{-1} \text{A}^{-2} = 6.52 \times 10^{-7} \text{ N nm}^{-1} \\ k_\theta = 126 \text{ kcal. mole}^{-1} \text{rad}^{-2} = 8.76 \times 10^{-10} \text{ N nm rad}^{-2} \\ k_\phi = 40 \text{ kcal. mole}^{-1} \text{rad}^{-2} = 2.78 \times 10^{-10} \text{ N nm rad}^{-2} \end{cases} \quad (8)$$

با قرار دادن طول پیوند کربن-کربن،  $L$ ، در فولرن یعنی 0.1421 نانومتر، مشخصات مقطع المان تیر محاسبه خواهد شد. این مقادیر در جدول 1 ارائه شده‌اند.

### 3- عیوب ساختاری نانوساختار فولرن

همان‌گونه که پیش از این بیان گردید، انواع عیوب ساختاری ممکن است در فولرن‌های مختلف ایجاد گردد. در این بخش به معرفی انواع عیوب خواهیم پرداخت.

#### • عیب پنج ضلعی‌های مجاور

به‌طور کلی در فولرن‌ها قانون پنج ضلعی‌های ایزوله شده وجود دارد که به معنای عدم وجود دو پنج ضلعی مجاور در ساختار فولرن است و تنها در تعداد محدودی از فولرن‌ها نقض می‌شود. در این فولرن‌ها که به غیر-ایزوله معروفند عیب پنج ضلعی‌های مجاور که به صورت 5-5 نوشته می‌شود، وجود دارد.

الف) شکست پیوند در عیب 5-5

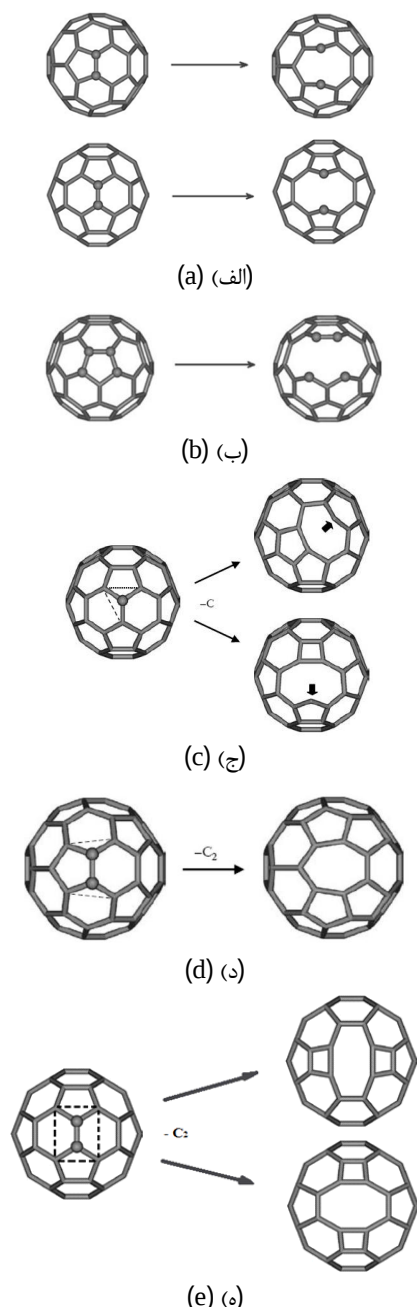
کم کردن پیوند  $C_2$  از یک عیب 5-5 می‌تواند ترکیب کروی شکل بسته‌ای از فولرن ایجاد کند، بدون این‌که عیب شبه‌پنجره‌ای ایجاد شود (شکل 3-الف). عکس این واکنش نیز امکان‌پذیر است که پیوند  $C_2$  وارد یک شش ضلعی شده و یک جفت 5-5 را بوجود می‌آورد.

ب) تبدیل استون-والز

عیب 5-5 همچنین می‌تواند با بازآرایی در قفس فولرن بدون تغییر در تعداد اتم‌های کربن یا حذف آن‌ها ایجاد شود که این فرایند به تبدیل استون-والز (SW) مشهور است. تبدیل استون-والز به‌طور کلی به‌صورت چرخش یک پیوند  $C_2$  به اندازه 90 درجه در مرکز جزئی شامل دو پنج ضلعی و دو شش ضلعی در یک فولرن تعریف می‌شود (شکل 3-ب). تحت تبدیل استون-والز، فولرن  $C_{60}$  می‌تواند مستقیماً به ایزومر غیرایزوله تبدیل شود که دارای دو عیب 5-5 می‌باشد.

ج) تبدیل استون-والز تعمیم یافته

همان‌طور که گفته شد تبدیل استون-والز برای پوشش دادن دوران  $C_2$  تعریف شده است اما می‌توان آن‌را به تبدیل چهار شش ضلعی به دو جفت پنج ضلعی - هفت ضلعی نیز تعمیم داد که تبدیل استون-والز تعمیم یافته نامیده می‌شود (شکل 3-ج). برهمین اساس عیوبی چون 5-7-7-5 اغلب عیوب استون-والز نامیده می‌شوند. این حالت در فولرن‌های کوچک‌تر اتفاق نمی‌افتد و مخصوص فولرن‌های بزرگ‌تر است.



**Fig. 4** Schematic representation of defective Fullerenes a) 5-6 and 6-6 bonds, b) 5-6 bond, c) 4-9 bond, d) 5-5-7 defect and e) 4-4-8(6) defect [19].

شکل 4 عیوب شبه پنجره ای فولرن: الف) پیوند 5-6 و 6-6، ب) عیب با شکستن دو پیوند 5-6، ج) حلقه 4-9، د) عیب 5-5-7 و ه) عیب 4-4-8(6) [19].

**جدول 1** خواص مکانیکی و هندسی جنس المان تیر

**Table 1** Section characteristics and material properties of the beam element.

|                                           |                                                     |
|-------------------------------------------|-----------------------------------------------------|
| 1.466 Å                                   | قطر پیوند (d)                                       |
| Å <sup>2</sup> 1.6879                     | سطح مقطع پیوند (A)                                  |
| 1.421 Å                                   | طول پیوند کربن-کربن (L)                             |
| 0.453456 Å <sup>4</sup>                   | ممان اینرسی قطبی (I <sub>xx</sub> )                 |
| 0.22682 Å <sup>4</sup>                    | ممان اینرسی (I <sub>zz</sub> = I <sub>yy</sub> = I) |
| 5.488 10 <sup>-8</sup> N/Å <sup>2</sup> × | مدول یانگ (E)                                       |
| 8.711 10 <sup>-9</sup> N/Å <sup>2</sup> × | مدول برشی (G)                                       |

#### • عیوب شبه پنجره‌ای

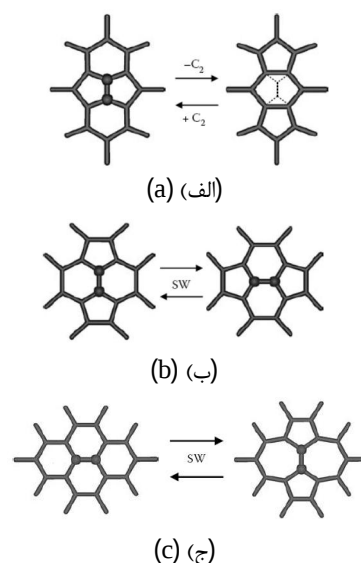
الف) اگر یک پیوند C-C که توسط یک جفت پنج ضلعی و شش ضلعی مجاور (اتصال 5-6) و یا توسط دو شش ضلعی مجاور در یک قفس فولرن به اشتراک گذاشته شده است، شکسته شود؛ عیب شبه پنجره‌ای به ترتیب شامل یک حلقه 9 یا 10 عضوی ایجاد می‌شود (شکل 4الف). عیوب شبه پنجره‌ای می‌توانند با شکسته شدن پیوند C-C دیگر گسترش یابند. به عنوان نمونه، با شکسته شدن پیوند دوم در فولرن معیوب، حلقه 9 عضوی که از شکستن اولین پیوند 5-6 بوجود آمده است، به حلقه 13 عضوی تبدیل خواهد شد (شکل 4ب).

#### ب) جای خالی یگانه

حذف یک یا چند اتم کربن در فولرن‌ها نیز می‌تواند باعث ایجاد عیب شبه پنجره‌ای شود. ساختار چنین فولرن‌های معیوبی، علاوه بر تعداد اتم‌های حذف شده و موقعیت آن‌ها، به چگونگی تشکیل پیوند بعدی حول جای خالی اتم‌ها نیز بستگی دارد. به عنوان مثال، حذف یک اتم از فولرن C<sub>60</sub> دو ساختار مختلف از C<sub>59</sub> را نتیجه می‌دهد. همان‌طور که در شکل (4ج) مشاهده می‌شود، دو اتم از سه اتمی که پیوندشان شکسته شده است با هم ترکیب شده و دو حلقه 5 و 8 عضوی (5-8) و یا 4 و 9 عضوی (4-9) تشکیل می‌دهند و اتم سوم به صورت غیراشباع باقی می‌ماند.

#### ج) جای خالی دوگانه

ممکن است تعدادی زوجی از اتم‌های کربن مخصوصاً C-C فرایند شکست حذف شوند. در این حالت به عنوان مثال، سه ساختار ممکن برای فولرن C<sub>58</sub> معیوب، با فرض حذف یک جفت از اتم‌های کربن مجاور که پیوند 5-6 یا 6-6 را در فولرن C<sub>60</sub> تشکیل می‌داده‌اند، پیشنهاد شده است. همان‌طور که در شکل (4د) مشاهده می‌شود، اگر شکست در پیوند C-C مشترک در حلقه 5-6 اتفاق بیافتد، اتم‌های کربن در مجاورت جای خالی C-C با هم ترکیب



**Fig. 3** Schematic representation of defective Fullerenes a) 5-5 bond, b) Stone-Wales, c) generalized Stone-Wales [17].

شکل 3 عیب پنج ضلعی های مجاور در فولرن الف) شکست پیوند در عیب 5-5، ب) تبدیل استون- والز و ج) تبدیل استون- والز تعمیم یافته [13].

پوسته‌ها، این ضریب فنریت با استفاده از مکانیک مولکولی و روش اجزا محدود نیز محاسبه می‌گردد. با برابر قراردادن نتایج دو روش، مقدار مدول الاستیک فولرن حاصل می‌گردد. در این تحقیق مقدار ضریب پواسون برابر 0.3 [7] و ضخامت پوسته 1.86 آنگستروم [21] در نظر گرفته شده است.

## 6- نتایج

### 6-1- مدول الاستیک فولرن‌های بدون عیب

جهت تعیین مدول الاستیک فولرن‌های بدون عیب، یک پوسته کروی فرض شده است که بین دو صفحه صلب بارگذاری می‌شود. برای محاسبه میزان جابجایی ناشی از بارگذاری، میزان جابجایی دو صفحه صلب نسبت به یکدیگر در راستای بار اعمالی در نظر گرفته می‌شود. پس از محاسبه میزان جابجایی ناشی از بارگذاری، نمودار نیرو جابجایی رسم می‌گردد. نمودار نیرو-جابجایی برای فولرن  $C_{60}$  و  $C_{720}$  به ترتیب در شکل های 6 و 7 نشان داده شده است. سپس شیب نمودار محاسبه می‌شود که همان ضریب فنریت مدول می‌باشد. این مقدار  $k = 236.272 \text{ N/m}$  محاسبه می‌شود و به کمک رابطه (13) مدول یانگ  $E = 1.98039 \text{ TPa}$  برای فولرن  $C_{60}$  بدست می‌آید.

مدل سازی سایر فولرن‌ها شامل  $C_{80}$ ،  $C_{180}$ ،  $C_{240}$ ،  $C_{260}$ ،  $C_{320}$  و  $C_{720}$  نیز به روش مشابه انجام گردید. مدول یانگ فولرن‌های مختلف تعیین شده و در جدول 2 نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با افزایش شعاع فولرن‌ها مدول الاستیک آن‌ها کاهش می‌یابد. با توجه به این که فولرن‌ها به صورت پوسته‌های کروی در نظر گرفته می‌شوند و این پوسته‌ها دارای ضخامت ثابت و یکسان هستند، بدیهی است که با افزایش شعاع کره و ثابت باقیماندن ضخامت و همچنین میزان بار وارده بر آن، پوسته ضعیف‌تر شده و مقاومت آن کاهش یابد. در نتیجه مدول الاستیک فولرن‌ها با افزایش شعاع آن‌ها کاهش خواهد یافت. انتظار می‌رود در شعاع بی‌نهایت که کره به سطحی تخت تبدیل می‌شود که مشابه صفحه گرافن می‌باشد، مدول یانگ به حدود یک تراپاسکال میل کند که این مقدار در برخی مراجع به‌عنوان مدول یانگ گرافن گزارش شده است [22].

### 6-2- مدول الاستیک فولرن‌های معیوب

در شبیه‌سازی عموماً مواد به صورت کامل مدل می‌شوند در صورتی که در طبیعت غالباً مواد به‌صورت کامل و بدون عیب وجود ندارند و وجود این عیوب موجب تغییراتی در ساختار و خواص ماده خواهد شد. از این‌رو در این بخش فولرن‌های معیوب مدل‌سازی می‌شوند و مقادیر مدول الاستیک آن‌ها گزارش می‌شود. با کاربرد روش المان محدود و معادل‌سازی با یک پوسته کروی مدول یانگ فولرن‌های معیوب همانند روش تعیین مدول الاستیک فولرن‌های بدون عیب بدست آمدند. به‌عنوان مثال، در شکل 8 تغییر مدول یانگ فولرن  $C_{60}$  به ازای عیوب مختلف نشان داده است.

با توجه به نتایج ارائه شده، در اکثر موارد کاهش مدول الاستیک نسبت به حالت بدون عیب مشاهده می‌شود که به‌دلیل حذف پیوند و اتم در ساختار ماده است. همچنین مشاهده می‌گردد که کمترین مقدار مدول الاستیک مربوط به حالت شکسته شدن دو پیوند 5-6 است که دلیل آن حذف دو پیوند کربن-کربن و ایجاد حفره‌ای نسبتاً بزرگ در ساختار ماده است.

در فولرن دارای عیب 4-4-8(5)، مدول یانگ نسبت به حالت بی‌عیب افزایش یافته است که با توجه به راستای بارگذاری و هم راستا بودن آن با جهت اتصالات دوران یافته می‌تواند توجیه گردد.

شده و دو حلقه پنج ضلعی و یک هفت ضلعی ایجاد می‌کنند که به صورت 5-5-7-5 نوشته می‌شود.

از طرف دیگر اگر پیوند 6-6 شکسته شود بسته به طریقه بازسازی دو ساختار مختلف ممکن است اتفاق بیافتد. یک ساختار با دو جفت چهارضلعی و پنج ضلعی مجاور بوجود می‌آید که به صورت 4-4-8(5) نوشته می‌شود و یک ساختار که شامل چهارضلعی‌ها احاطه شده با شش ضلعی می‌باشد و به صورت 4-4-8(6) نشان داده می‌شود (شکل 4ه).

## 4- مدل سازی روش المان محدود

پس از تعیین مختصات محل قرارگیری اتم‌های کربن در نرم‌افزار نانوتیوب مدلر، آن‌ها را در نرم‌افزار المان محدود وارد می‌کنیم و مدل‌سازی را آغاز می‌نماییم. بار اعمالی می‌تواند بر روی یک شش ضلعی و یا یک پنج ضلعی اعمال گردد. از سوی دیگر بار اعمالی بایستی کاملاً روبروی چند ضلعی انتخاب شده جهت تکیه‌گاه باشد. تعداد پنج ضلعی‌ها در مولکول‌های فولرن محدود می‌باشد و قرارگیری در یک راستا امکان‌پذیر نمی‌باشد. لذا اعمال بار بر روی شش ضلعی به‌عنوان روش بارگذاری انتخاب گردید. در این حالت اضلاع شش ضلعی به هم متصل شده و ایجاد یک صفحه صلب می‌کنند. سپس در مرکز این صفحه، نیروی مورد نظر اعمال می‌گردد. نحوه بارگذاری فولرن در نرم‌افزار اجزا محدود آباکوس در شکل 5 نشان داده شده است. شرط مرزی در نظر گرفته شده به‌صورت تکیه‌گاه با جابجایی صفر در راستای خلاف اعمال نیرو لحاظ شده است.

## 5- تعیین مدول الاستیک فولرن

جهت تعیین مدول الاستیک نانوساختار فولرن، این نانوساختار که یک سیستم گسسته است می‌تواند به‌عنوان یک پوسته‌ی کروی به شعاع  $R$  و با ضخامت ثابت  $h$  فرض شود. با این معادل‌سازی، می‌توان ضریب فنریت پوسته کروی را با استفاده از تئوری پوسته‌ها محاسبه نموده و برابر با ضریب فنریت حاصل از مکانیک مولکولی قرار داد. ضریب فنریت خطی برای یک نیروی شعاعی نقطه‌ای به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$k = -\frac{1}{\Delta} \frac{\partial U}{\partial \Delta} \quad (9)$$

در رابطه فوق  $U$  انرژی کرنشی ایجاد شده ناشی از اعمال نیرو و  $\Delta$  جابجایی در محل اعمال نیرو می‌باشد. در مرجع [20] با استفاده از تئوری پوسته‌های کروی رابطه (10) جهت محاسبه ضریب فنریت برحسب عدد فویل-فون-کارمن پیشنهاد شده است.

$$k = 3.99 \frac{k_b}{R^2} \sqrt{\gamma} \quad (10)$$

که در آن پارامترها  $\gamma$  و  $k_b$  به صورت معادلات (11) و (12) تعریف می‌گردد.

$$\gamma = 12(1 - \nu^2) \left( \frac{R}{h} \right)^2 \quad (11)$$

$$k_b = \frac{Eh^3}{12(1 - \nu^2)} \quad (12)$$

باجای‌گذاری معادلات (11) و (12) در معادله (10)، ضریب فنریت برحسب مدول الاستیک ( $E$ ) و ضریب پواسون ( $\nu$ ) به دست می‌آید.

$$k = \frac{3.99Eh^2}{\sqrt{12(1 - \nu^2)} R} \quad (13)$$

پس از استخراج ضریب فنریت معادل فولرن با استفاده از تئوری

Table 2 Radius, stiffness constant and elastic modulus of Fullerenes.

| نام فولرن        | شعاع (آنگسترم) | ضریب فنریت $k$ (N/m) | مدول الاستیسیته $E$ (TPa) |
|------------------|----------------|----------------------|---------------------------|
| C <sub>60</sub>  | 3.5            | 272.236              | 1.98039                   |
| C <sub>80</sub>  | 4.08           | 190.889              | 1.86514                   |
| C <sub>180</sub> | 6.15           | 110.506              | 1.62755                   |
| C <sub>240</sub> | 7.07           | 93.2528              | 1.57889                   |
| C <sub>260</sub> | 7.34           | 89.2495              | 1.56882                   |
| C <sub>320</sub> | 8.15           | 78.2806              | 1.52786                   |
| C <sub>540</sub> | 10.59          | 55.0469              | 1.39605                   |
| C <sub>720</sub> | 12.28          | 46.1754              | 1.35794                   |

مدل سازی سایر فولرن های معیوب نیز به همین روش انجام گردید. کلیه نتایج

حاصل در جدول 3 ارائه شده است. با نگاهی به نتایج مشاهده می شود که در اکثر موارد، به استثنای تبدیل استون-والز در فولرن های کوچک تر، وجود عیب در ساختار فولرن باعث کاهش مدول الاستیک می شود. میزان کاهش مدول الاستیک ناشی از وجود عیوب، در فولرن های بزرگ تر با افزایش قطر کاهش می یابد. به طوری که در فولرن C<sub>720</sub> در حالت شکست شدن دو پیوند 5-6 که دارای بیشترین کاهش مدول الاستیک است، کمترین 0.2% اختلاف نسبت به حالت بدون عیب مشاهده می گردد.

لازم به ذکر است که عیوب ناشی از بازسازی جای خالی دوگانه از میان فولرن های بررسی شده تنها در فولرن C<sub>60</sub> اتفاق می افتد که دلیل آن به نحوه قرارگیری پنج ضلعی ها در ساختار مولکول مربوط می شود. برای رخ دادن این

Table 3 Elastic modulus of defectives Fullerenes in Tera Pascal.

| نوع عیب                                    | شکل مربوطه | C <sub>60</sub> | C <sub>80</sub> | C <sub>180</sub> | C <sub>240</sub> | C <sub>260</sub> | C <sub>320</sub> | C <sub>540</sub> | C <sub>720</sub> |
|--------------------------------------------|------------|-----------------|-----------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|------------------|
| حالت بدون عیب                              |            | 1.98039         | 1.86514         | 1.62775          | 1.57889          | 1.56882          | 1.52786          | 1.39605          | 1.35794          |
| تبدیل استون-والز 5-5                       |            | ---             | 1.89124         | ---              | ---              | ---              | ---              | ---              | ---              |
| تبدیل استون-والز چرخش پیوند C <sub>2</sub> |            | 2.02177         | ---             | ---              | ---              | ---              | ---              | ---              | ---              |
| تبدیل استون-والز 5-7-5                     |            | ---             | ---             | 1.62761          | 1.57814          | 1.56565          | 1.52624          | 1.39486          | 1.35772          |
| عیب شبه پنجره ای پیوند 6-5                 |            | 1.89007         | 1.82036         | 1.61376          | 1.57062          | 1.5636           | 1.52574          | 1.39463          | 1.35748          |
| عیب شبه پنجره ای پیوند 6-6                 |            | 1.83451         | 1.77415         | 1.6165           | 1.568            | 1.55934          | 1.52441          | 1.39431          | 1.35728          |
| عیب شبه پنجره ای دو پیوند 6-5              |            | 1.60839         | 1.65428         | 1.57426          | 1.55373          | 1.53799          | 1.51448          | 1.39013          | 1.35529          |
| جای خالی یگانه با حلقه 8-5                 |            | 1.90619         | 1.82465         | 1.61616          | 1.57208          | 1.56302          | 1.52505          | 1.39458          | 1.35731          |
| جای خالی یگانه با حلقه 9-4                 |            | 1.83885         | 1.77254         | 1.6047           | 1.56771          | 1.55205          | 1.52203          | 1.39368          | 1.35647          |
| عیب 7-7-5                                  |            | 1.89457         | ---             | ---              | ---              | ---              | ---              | ---              | ---              |
| عیب 4-8 (5)4                               |            | 2.00802         | ---             | ---              | ---              | ---              | ---              | ---              | ---              |
| عیب 4-8 (6)4                               |            | 1.82081         | ---             | ---              | ---              | ---              | ---              | ---              | ---              |

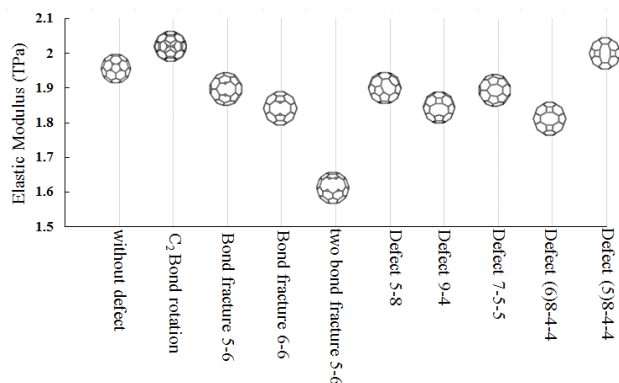


Fig. 8 Young's modulus variation of different defectives Fullerenes of  $C_{60}$ .

شکل 8 تغییرات مدول الاستیک فولرن های معیوب  $C_{60}$ .

فولرن های دارای عیوب ساختاری با استفاده از مکانیک مولکولی تعیین گردید. نتایج نشان داد که در اکثر فولرن های معیوب، مدول الاستیک کاهش می یابد و با افزایش شعاع فولرن این تغییر مدول الاستیک به سمت مدول الاستیک فولرن بی عیب میل می کند.

## 8- مراجع

- [1] A. Hirsch, M. Brettreich, *Fullerenes: chemistry and reactions*: John Wiley & Sons, New York, 2006.
- [2] F. Cecchet, S. Rapino, M. Margotti, T. Da Ros, M. Prato, F. Paolucci, P. Rudolf, Structural and electrochemical characterization of fullerene-based surfaces of  $C_{60}$  mono-or bis-adducts grafted onto self-assembled monolayers, *Carbon*, Vol. 44, No. 14, pp. 3014-3021, 2006.
- [3] X. Hou, C. X. Shan, K. L. Choy, Microstructures and tribological properties of PEEK-based nanocomposite coatings incorporating inorganic fullerene-like nanoparticles, *Surface and Coatings Technology*, Vol. 202, No. 11, pp. 2287-2291, 2008.
- [4] I. Olejniczak, A. Graja, A. Bogucki, M. Golub, P. Hudhomme, A. Gorgues, M. Cariou, Vibrational and electronic properties of  $C_{60}$  fullerene—tetrafulvalenes (TTFs) cyclohexene fused polyads, *Synthetic metals*, Vol. 126, No. 2-3, pp. 263-268, 2002.
- [5] H. Shen, The compressive mechanical properties of  $C_{60}$  and endohedral  $M@C_{60}$  ( $M = Si, Ge$ ) fullerene molecules, *Materials Letters*, Vol. 60, pp. 2050-2054, 2006.
- [6] S. B. Legoas, R. Giro, D. S. Galvão, Molecular dynamics simulations of  $C_{60}$  nanobearings, *Chemical physics letters*, Vol. 386, No. 4-6, pp. 425-429, 2004.
- [7] L. T. Chadderton, Axisymmetric vibrational modes of fullerene  $C_{60}$ , *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Vol. 54, No. 9, pp. 1027-1033, 1993.
- [8] K. Behfar, and R. Naghdabadi, Nanoscale modeling of an embedded multi-shell fullerene and its application to vibrational analysis, *International Journal of Engineering Science*, Vol. 44, No. 17, pp. 1156-1163, 2006.
- [9] M. N. Sarvi, M. T. Ahmadian, Design and implementation of a new spherical super element in structural analysis, *Applied Mathematics and Computation*, Vol. 218, No. 14, pp. 7546-7561, 2012.
- [10] G. I. Giannopoulos, S. K. Georgantzinos, P. A. Kakavas, and N. K. Anifantis, Radial stiffness and natural frequencies of fullerenes via a structural mechanics spring-based method, *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*, Vol. 21, No. 3, pp. 248-257, 2013.
- [11] E. Ghavanloo, S. A. Fazelzadeh, Nonlocal shell model for predicting axisymmetric vibration of spherical shell-like nanostructures, *Mechanics of Advanced Materials and Structures*, Vol. 22, No. 7, pp. 597-603, 2015.
- [12] C. 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.
- [13] R. Ansari, S. Rouhi, Atomistic finite element model for axial buckling of single-walled carbon nanotubes, *Physica E*, Vol. 43, No. 1, pp. 58-69, 2010.
- [14] R. Ansari, S. Rouhi, M. Aryayi, M. Mirzeshad, On the buckling behavior of single-walled silicon carbide nanotubes, *Scientia Iranica*, Vol. 19, No. 6, pp. 1984-1999, 2012.
- [15] R. Ansari, S. Rouhi, M. Mirzeshad, M. Aryayi, Stability characteristics of single-layered silicon carbide nanosheets under uniaxial compression, *Physica E*, Vol. 53, No. 9, pp. 22-28, 2013.
- [16] R. Ansari, S. Rouhi, M. Mirzeshad, and M. Aryayi, Stability characteristics of single-walled boron nitride nanotubes, *Archives of Civil and Mechanical Engineering*, Vol. 15, No. 1, pp. 162-170, 2015.
- [17] R. Ansari, S. Rouhi, and A. Momen, Predicting mechanical properties and buckling behavior of single-walled silicon carbide nanocones using a finite element method, *Applied Physics A*, Vol. 119, No. 3, pp. 1039-1045, 2015.

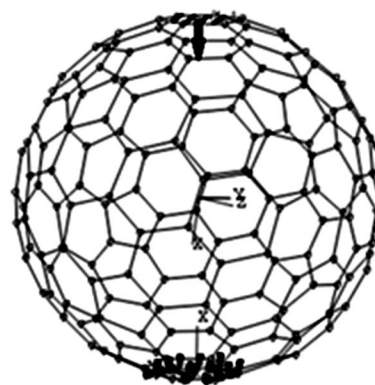


Fig. 5 Loading of Fullerene in finite element modeling.

شکل 5 نحوه بارگذاری فولرن در مدل سازی به روش المان محدود.

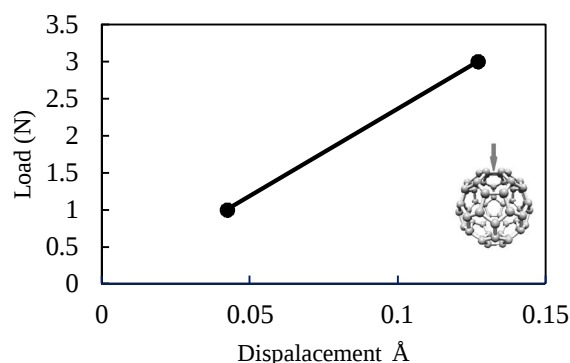


Fig. 6 Variation of force – displacement under compression of  $C_{60}$ .

شکل 6 تغییرات نیرو-جابجایی فولرن  $C_{60}$  تحت نیروی فشاری

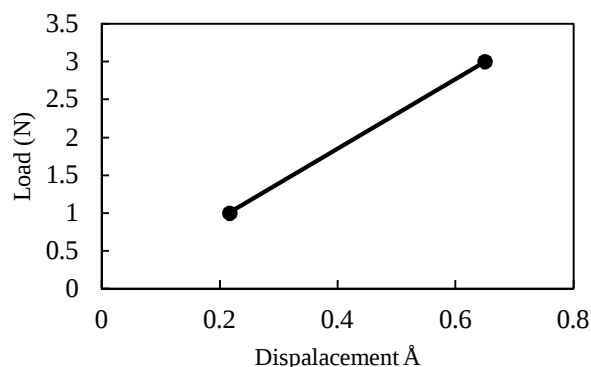


Fig. 7 Variation of force – displacement under compression of  $C_{720}$

شکل 7 تغییرات نیرو-جابجایی فولرن  $C_{720}$  تحت نیروی فشاری

عیب، باید دو پنج ضلعی و دو شش ضلعی به صورت یک در میان کنار هم قرار گیرند که این حالت تنها در فولرن  $C_{60}$  وجود دارد.

## 7- نتیجه گیری و جمع بندی

در این تحقیق به بررسی مدول یانگ نانوساختار فولرن پرداخته شد. با استفاده از مکانیک مولکولی و روش المان محدود تغییر شکل این مولکول مدل سازی گردید. سپس با استفاده از معادل سازی با ضریب فنریت یک پوسته کروی مدول یانگ آن ها تعیین گردید. این روش برای فولرن های مختلف اعمال و مدول یانگ آن ها محاسبه گردید. در نهایت مدول یانگ

- [21] D. Kahn, K. W. Kim, M. A. Strosio, Quantized vibrational modes of nanospheres and nanotubes in the elastic continuum model. *Journal of Applied Physics*, Vol. 89, No. 9, pp. 5107-5111, 2001.
- [22] M. M. Shokrieh, R. Rafiee, Prediction of Young's modulus of graphene sheets and carbon nanotubes using nanoscale continuum mechanics approach, *Materials & Design*, Vol. 31, No. 2, pp. 790-795, 2010.
- [18] A. F. Ávila, G. S. R. Lacerda, Molecular mechanics applied to single-walled carbon nanotubes, *Materials Research*, Vol. 11, No. 3, pp. 325-333, 2008.
- [19] K. D. Sattler, *Handbook of Nanophysics: Clusters and Fullerenes*: CRC press, USA, 2010.
- [20] M. Bünnemann, *Mechanical Properties and DNA Organization of Viruses and Bacteria*, PhD thesis, Philipps-Universität Marburg, Germany, 2008.