



دانشگاه صنعتی شاہرود

دانشکده مکانیک



*Shahrood University of Technology
Faculty of Mechanical engineering*

A New Model for Prediction of Buckling Behavior of Carbon Nanotubes under Compressive and Torsional Loadings

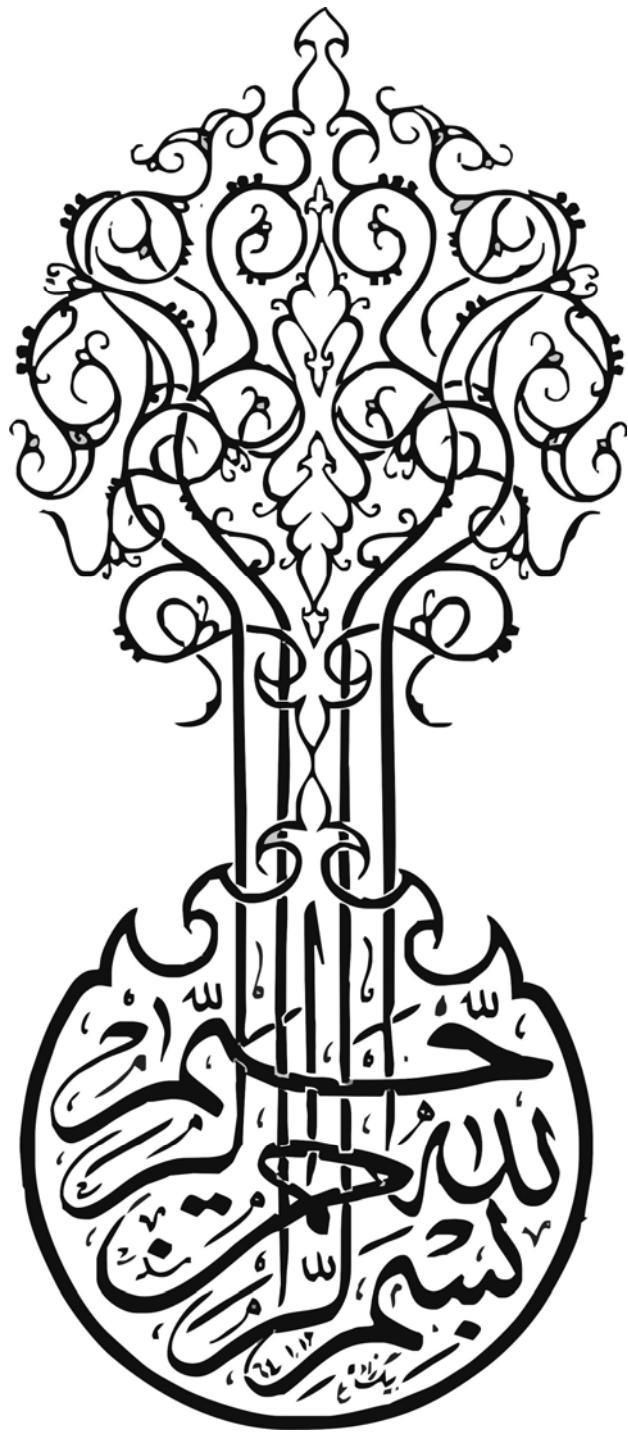
Amir Masood Majd Sabeti

Supervisors:

Dr. Mahmoud Shariati

Dr. Hmid Reza Epackchi

July.2009





دانشگاه
دانشکده مکانیک
گروه طراحی جامدات

دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده مکانیک

گروه طراحی جامدات

پایان نامه کارشناسی ارشد آفای امیر مسعود مجذ ثابتی

تحت عنوان:

معرفی یک مدل جدید به منظور پیش بینی رفتار تغییر شکل نانولوله های کربنی تحت بارگذاری های مختلف

در تاریخ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد ارزیابی و با درجه
مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	اساتید مشاور	امضاء	اساتید راهنما
	نام و نام خانوادگی :		دکتر محمود شریعتی
	نام و نام خانوادگی :		دکتر حمیدرضا ایپکچی

امضاء	نماینده تحصیلات تکمیلی	امضاء	اساتید داور
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :

چکیده:

در پایان نامه پیش رو کمانش نanolوله های کربنی تک دیواره تحت بارهای محوری فشاری و ممان پیچشی با استفاده از نرم افزار المان محدود ABAQUS مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین تأثیر انواع عیوب تهی جای بر بار بحرانی کمانش و جابه جایی متناظر آن و ممان پیچشی کمانش و زاویه پیچش متناظر آن مورد مطالعه قرار گرفته است. ضرورت فراهم آوردن شرایط خاص آزمایشگاهی و نیز زمان بر بودن شبیه سازی های اتمی عامل و محرك اصلی جهت ارائه این مدل ساختاری جدید می باشد؛ که علاوه بر داشتن دقت مناسب، محدودیت های روش های پیشین را ندارد. در حقیقت مدل ارائه شده ترکیبی از مدل های ساختاری دیگر می باشد که تا حد زیادی عیوب آنها را از بین برده است. به منظور مدل کردن بر هم کنش های کششی و پیچشی، اتصال دهنده های غیر خطی و جهت مدل کردن بر هم کنش های زاویه ای، فنر غیر خطی مورد استفاده قرار گرفته است. در ادامه نتایج حاصله با نتایج حاصل از مدل پیوسته مقایسه شده است و می توان نشان داد که رفتارهای کمانشی نanolوله های کربنی شباهت زیادی با رفتارهای کمانشی پوسته های استوانه ای (با ضخامت 0.066 nm و مدول یانگ $5/5\text{ Tpa}$) دارد. در پایان نیز نتایج بدست آمده با برخی از نتایج حاصل از مدل های دیگر مقایسه شده است. از مقایسه های انجام گرفته می توان نتیجه گرفت مدل ساختاری ارائه شده دارای دقت بالائی می باشد و علاوه بر آن دارای قابلیت هایی می باشد که مدل های ساختاری گذشته قادر آن می باشد.

کلمات کلیدی: کمانش، نanolوله های کربنی تک دیواره، بار محوری فشاری، ممان پیچشی، عیوب تهی جای

ارائهی مقاله در ژورنال بین‌المللی European Journal of Mechanics A/Solid با آدرس:

V. Parvaneh, M. Shariati, A.M. Majd Sabeti. (2009). “Investigation of vacancy defects effects on the buckling behavior of SWCNTs Via a structural mechanics approach”, *Euro. J. Mech. A/Solids.* 28, pp 1072-1078.

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
-------	------

فصل اول: مقدمه	۱
۱-۱- مقدمه	۲
فصل دوم: مروری بر روابط موجود و مطالعات پیشین	۷
۲-۱- انواع انرژی‌ها و برهمنکش‌های موجود بین اتم‌های کربن	۸
۲-۱-۱- برهمنکش‌های موجود بین اتم‌های کربن(غیر پیوندی)	۸
۲-۱-۲- پتانسیل‌های موجود در پیوند اتمی	۹
۲-۲- قطر نanolوله‌های کربنی	۱۳
۲-۳- کمانش نanolوله‌های کربنی تحت بار محوری فشاری	۱۴
۲-۴- کمانش نanolوله‌های کربنی تحت ممان پیچشی	۲۷
فصل سوم: شبیه‌سازی نanolوله‌های کربنی و مدل پیوسته	۳۳
۳-۱- نرم‌افزار ABAQUS	۳۴
۳-۱-۱- تحلیل Buckle	۳۴
۳-۲- شبیه‌سازی نanolوله‌های کربنی کامل	۳۵
۳-۲-۱- مرحله ایجاد اتم‌های کربن به صورت کره‌های تو خالی	۳۵
۳-۲-۲- مرحله‌ی تعیین خواص مکانیکی	۳۶
۳-۲-۳- مونتاژ اتم‌های کربن	۳۶
۳-۴- اعمال برهمنکش‌های بین اتمی	۳۷
۳-۵- بارگذاری و شرایط مرزی	۳۹
۳-۶- المان بندی اتم‌های مونتاژ شده	۴۰
۳-۷- بخش حل مسئله	۴۱

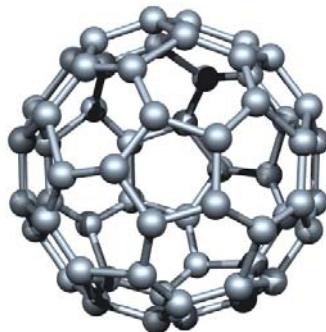
۳-۳- شبیه‌سازی نanolوله‌های کربنی معیوب	۴۱
۴-۴- شبیه سازی پوسته‌های استوانه‌ای سالم (مدل پیوسته)	۴۱
۵-۳- شبیه‌سازی پوسته‌های استوانه‌ای معیوب (مدل پیوسته)	۴۲
فصل چهارم: نتایج حاصل از مدل مکانیک ساختاری و مدل پیوسته	۴۳
۴-۱- نتایج حاصل از کمانش نanolوله‌های کربنی تحت فشار محوری	۴۴
۴-۱-۱- کمانش نanolوله‌های کربنی سالم	۴۴
۴-۱-۲- کمانش نanolوله‌های کربنی معیوب	۴۹
۴-۲- نتایج حاصل از کمانش نanolوله‌های کربنی تحت ممان پیچشی	۵۷
۴-۲-۱- کمانش پیچشی نanolوله‌های کربنی سالم	۵۷
۴-۲-۲- کمانش پیچشی نanolوله‌های کربنی معیوب	۶۵
۴-۳- نتایج حاصل از کمانش پوسته‌های استوانه‌ای (مدل پیوسته) تحت فشار محوری	۶۹
۴-۳-۱- کمانش پوسته‌های استوانه‌ای سالم	۶۹
۴-۳-۲- کمانش پوسته‌های استوانه‌ای معیوب	۷۲
۴-۴- نتایج حاصل از کمانش پوسته‌های استوانه‌ای (مدل پیوسته) تحت ممان پیچشی	۷۵
۴-۴-۱- کمانش پیچشی پوسته‌های استوانه‌ای کامل	۷۵
۴-۴-۲- کمانش پیچشی پوسته‌های استوانه‌ای دارای گشودگی	۷۸
فصل پنجم: مقایسه‌ی نتایج	۸۰
۵-۱- مقایسه‌ی نتایج حاصل از کمانش نanolوله‌های کربنی تحت فشار محوری	۸۱
۵-۲- مقایسه‌ی نتایج حاصل از کمانش نanolوله‌های کربنی تحت ممان پیچشی	۸۷
فصل ششم: نتیجه‌گیری و پیشنهادات	۹۶
۶-۱- نتیجه‌گیری	۹۵
۶-۲- پیشنهادات	۹۸
مراجع	

فصل اول

مقدمه

۱-۱- مقدمه

حرکت شتابان و رو به رشد استفاده از نانو تکنولوژی در جهان امروز، شاخه‌های علمی بسیار زیادی را پیش روی دانشمندان و محققین قرار داده است و می‌توان گفت نانولوله‌های کربنی از جمله مهمترین و اساسی‌ترین شاخه‌های نانو تکنولوژی می‌باشد که تحولی بزرگ را در این علم به وجود آورده است. کشف ساختار اتمی C_{60} (شکل(۱)) را می‌توان سر آغاز این تحول جدید در علم نانو دانست. در سال ۱۹۹۰ مقاله‌ای توسط دونالد هافمن^۱ از دانشگاه آریزونا و ول夫 گانگ کراشمر^۲ از مؤسسه ماکس پلانگ مبنی بر کشف ساختار جدیدی از کربن که دارای ۶۰ اتم کربن است، در نشریه نیچر^۳ به چاپ رسید. ساختاری که تا قبل از آن تنها به صورت تئوری پیش‌بینی شده بود.



شکل(۱) نمایی از ساختار اتمی C_{60}

این امر سبب باز شدن دریچه‌ای جدید به علوم نانو گردید و محققان بیشتری را به بررسی این اتم منحصر به فرد تشویق کرد[۱]؛ به طوری که در سال ۱۹۹۱ ساختار شگفت انگیز دیگری از اتم‌های کربن به نام نانولوله‌ی کربنی توسط ایجیما^۴[۲] کشف شد و توجه بسیاری از محققین و دانشمندان را به سمت خود معطوف نمود. خواص منحصر به فرد مکانیکی و الکتریکی این ساختار برای این محققین بسیار جالب و قابل توجه بود. مدول یانگ بیش از ۱ Tpa همراه با چگالی کم آن، این ماده جدید را از نظر خواص مکانیکی از بسیاری مواد دیگر متمایز می‌کرد. پس از کشف این ماده و

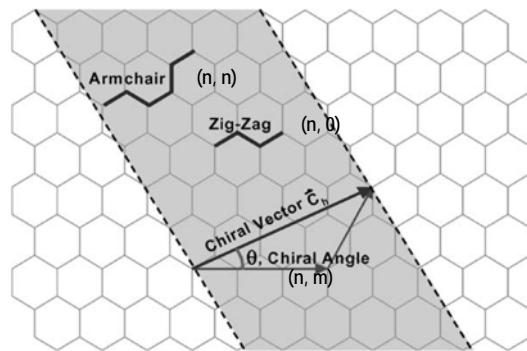
¹ - Donald Huffman

² - Wolfgang Kratschmer

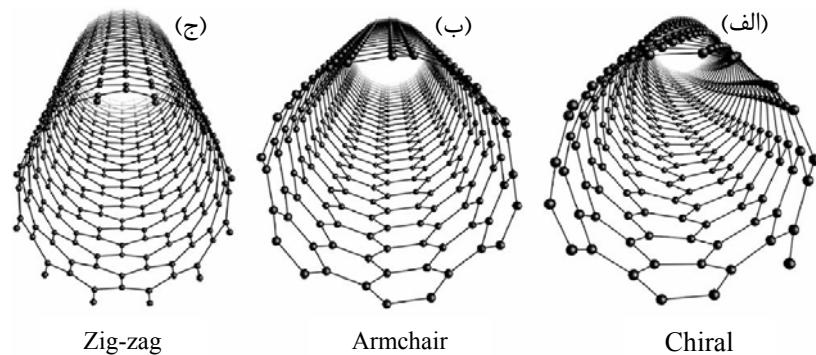
³ - Nature

⁴ - Iijima

بررسی های انجام شده وجود سه ساختار متفاوت از این ماده برای محققین به اثبات رسید که شامل ساختارهای زیگ-زاگ^۱، آرمچیر^۲ و کایرال^۳ (ساختار نامنظم) می‌شود که در شکل‌های (۲) و (۳) نشان داده شده‌اند. با توجه به شکل (۲) مشاهده می‌شود که نحوه‌ی چرخش صفحه‌ی گرافیت در جهات مختلف می‌تواند سبب ایجاد کایرالیتی‌های متفاوتی از نanolوله گردد. علاوه بر این انواع، محققین دریافتند که نanolوله‌های کربنی دارای ساختارهای تک دیواره و چند دیواره نیز می‌باشند. (شکل (۴))



شکل (۲-۲) نحوه‌ی شکل‌گیری نanolوله از نظر نوع کایرالیتی

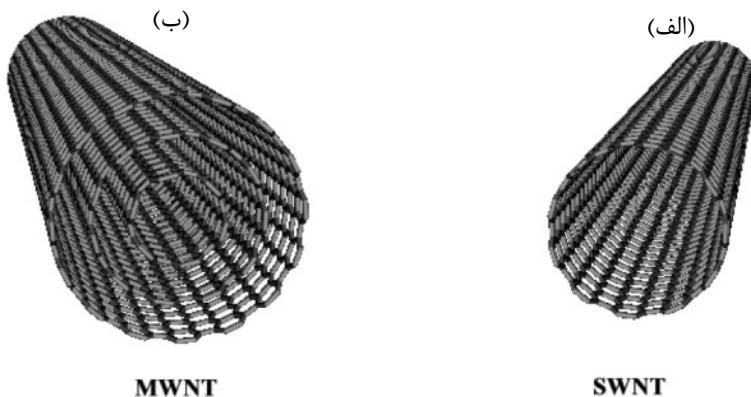


شکل (۱-۳) انواع اصلی نanolوله‌های کربنی از نظر نوع کایرالیتی، (الف): کایرال، (ب): آرمچیر، (ج): زیگ-زاگ

^۱ - Zig-zag

^۲ - Armchair

^۳ - Chiral



شکل(۴-۱) انواع نانولوله‌ها از نظر تعداد دیواره. (الف): تک دیواره، (ب): چند دیواره

دلایل اصلی توجه محققین به این ساختار جدید را می‌توان در خواص منحصر به فرد مکانیکی و الکتریکی آن مشاهده نمود، که در شرایط مختلف رفتارهای متفاوتی از خود نشان می‌دهد. این ساختار با توجه به کاربردهایی که در آینده از آن پیش بینی می‌شود، می‌تواند کاربردهای گسترده‌ای در صنایع و تجهیزات پزشکی، مکانیکی، نظامی و ... پیدا کند. از جمله‌ی این کاربردها می‌توان به استفاده از نانولوله‌های کربنی در سیستم‌های نانو الکترو-مکانیکی (NEMS) اشاره نمود. همانطور که گفته شد، این ساختار دارای خواص منحصر به فرد مکانیکی و الکتریکی می‌باشد؛ لذا بررسی این خواص با استفاده از روش‌های مختلف آزمایشگاهی و شبیه‌سازی‌های کامپیوتری از جمله مسائل مورد توجه برای محققین در سال‌های اخیر بوده است.

پس از کشف نانولوله‌های کربنی محققین به انجام آزمایش بر روی این ساختار روی آوردند؛ اما صرف هزینه‌های مالی بسیار زیاد برای انجام این آزمایش‌ها محققین را بر آن داشت تا با استفاده از روش‌های مختلف کامپیوتری به شبیه‌سازی رفتارهای این ماده بپردازند. از مهمترین این روش‌ها Tight binding و روش ab-initio، شبیه سازی دینامیک مولکولی (MD) و روش (ترکیبی از دو روش قبل) اشاره کرد. که البته در میان آنها روش ab-initio دقیق‌ترین روش می‌باشد. با توجه به اینکه این روش‌ها نیز مستلزم صرف هزینه و وقت زیادی می‌باشند، محققین بسیاری سعی

در ارائه‌ی روش‌های دیگری جهت شبیه‌سازی نانولوله‌های کربنی کردند. در سال ۲۰۰۱ ادگارد^۱ [۳] مدلی را ارائه کرد که در آن به وسیله‌ی شبیه‌سازی نیروها و انرژی‌های بین اتمی و با استفاده از اتصالات خرپایی مدول یانگ نانو لوله‌های کربنی را مورد بررسی قرار داد. در سال ۲۰۰۳ لی و چو^۲ [۴] با استفاده از روش المان محدود به بررسی نانولوله‌های کربنی تک دیواره پرداختند. آنها با در نظر گرفتن ساختار اتمی نانولوله به عنوان یک قاب، اتم‌های کربن را به عنوان نقاط اتصال تیرهای فرضی در نظر گرفتند و مدل خود را بر این اساس گسترش دادند. آنها با استفاده از ایجاد ارتباط بین مکانیک ساختاری و مکانیک مولکولی توانستند خواص مکانیکی تیر فرضی و از آنجا مدول یانگ نانولوله‌ها را بدست آورند. تی سرپز و پانیکوس^۳ [۵]، هو و همکارانش^۴ [۶] و کalamkarov^۵ [۷] نیز با استفاده از روش مکانیک ساختاری به شبیه‌سازی نانولوله‌های کربنی پرداختند. در روش‌های آنها سه المان شبه تیر بدون داشتن حرکت نسبی در یک نقطه (مرکز اتم) به یکدیگر پیوند داده شده‌اند. آنها با معادل کردن انرژی‌های مکانیک مولکولی با انرژی‌های کششی، خمشی و پیچشی تیر توانستند خواص مکانیکی و هندسی تیر مورد نظر را بدست آورند. در سال ۲۰۰۴ ناسدالا و همکارانش^۶ [۸] به ارائه مدل جدید دیگری پرداختند که در آن بر هم کنش‌های کششی، خمشی و پیچشی بین اتم‌ها با استفاده از فنرهای محوری، پیچشی و المان تیر مدل شده‌اند.

در تمامی مدل‌هایی که تاکنون ارائه شده است کاستی‌ها و معایبی وجود دارد. این امر سب شده تا محققین همچنان به دنبال روشی جامع و مطمئن باشند تا به وسیله‌ی آن بتوان نانولوله‌های کربنی را تحت بارگذاری‌ها و شرایط مرزی مختلف مورد بررسی قرار داد. البته باید اشاره کرد که روش دینامیک مولکولی از روش‌هایی می‌باشد که دارای قابلیت‌های بسیاری است؛ اما استفاده از آن نیاز به وقت و هزینه‌ی زیادی دارد و بکارگیری آن برای همه مقدور نمی‌باشد.

¹ - Odegard

² - Li and Chou

³ - Tserpes and Papanikos

⁴ - Hu et al.

⁵ - Kalamkarov

⁶ - Nasdala et al.

با توجه به توضیحات اشاره شده، در این پژوهه به دنبال ساخت مدلی بوده‌ایم که علاوه بر داشتن قابلیت‌های گوناگون، عیوب مدل‌های گذشته را نیز برطرف نماید. در نهایت با مطالعات بسیار و بررسی مدل‌های گوناگون موفق به ارائه مدلی شدیم که با استفاده از روش مکانیک ساختاری ایجاد گردید و می‌توان به وسیله‌ی آن کمانش نanolوله‌های کربنی تحت بار محوری فشاری و ممان پیچشی را مورد بررسی قرار داد.

بر این اساس در فصل‌های پیش رو ابتدا مروری بر تحقیقات صورت گرفته در سال‌های گذشته و تئوری‌های موجود در زمینه‌ی کمانش نanolوله‌های کربنی مرور شده است. در فصل دوم تئوری‌های مورد استفاده در ایجاد مدل ارائه شده و چگونگی شبیه‌سازی آن در نرم‌افزار ABAQUS [۹] به صورت مختصر بیان شده است. در فصل سوم کمانش نanolوله‌های کربنی و مدل پیوسته‌ی مورد نظر، تحت بار محوری فشاری و ممان پیچشی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. در فصل چهارم نیز مقایسه‌ای میان نتایج حاصل از مدل ساختاری ارائه شده و مدل پیوسته صورت گرفته است که در پایان نتایج حاصل از این دو مدل با نتایج حاصل از روش‌های دیگر نیز مقایسه شده است و نتیجه‌گیری‌های نهائی بدست آمده‌اند.

فصل اول

مروی بر روابط موجود و

مطالعات پیشین

در اینجا ابتدا به صورت مختصر به بیان برخی روابط و تئوری‌های موجود در زمینه‌ی نانولوله‌های کربنی می‌پردازیم. باید گفت در حال حاضر بسیاری از محققین از روابط موجود در صفحات گرافیت به منظور بررسی نانولوله‌های کربنی استفاده می‌کنند و همان پتانسیل‌ها و بر هم‌کنش‌هایی که در صفحات گرافیت وجود دارد، برای نانولوله‌های کربنی نیز در نظر می‌گیرند که در ادامه به آنها اشاره می‌کنیم.

۲-۱- انواع انرژی‌ها و برهم‌کنش‌های موجود بین اتم‌های کربن

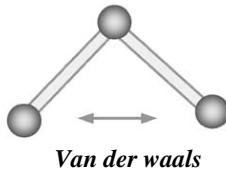
به طور کلی می‌توان انرژی‌های موجود بین اتم‌های کربن را به دو دسته تقسیم نمود.

۲-۱-۱- برهم‌کنش‌های موجود بین اتم‌های کربن(غیر پیوندی)

این برهم‌کنش‌ها شامل دو نوع برهم‌کنش واندروالس^۱ و الکترواستاتیک(کولومب)^۲ می‌گردند. در ادامه به توضیح این برهم‌کنش‌ها می‌پردازیم.

الف: برهم‌کنش واندروالس؛

این نوع از بر هم‌کنش به دلیل نزدیک شدن و یا دور شدن دو اتم کربن در فاصله‌ی فضائی ایجاد می‌شود (شکل (۲-۱)).



شکل (۲-۱) برهم‌کنش واندروالس در اتم‌های کربن

به منظور تعریف برهم‌کنش واندروالس روابط مختلفی ارائه شده است که معروفترین آنها پتانسیل لنارد-جونز^۳ می‌باشد و به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۰]:

¹ - Van der waals
² - Electrostatic(Coulomb)
³ - Lennard-Jones

$$U(R) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^6 \right] \quad (1-2)$$

که در آن R فاصله‌ی بین اتمی و ε و σ ثابت‌های لنارد-جونز می‌باشند. این ثابت‌ها برای اتم کربن به

شکل زیر تعریف می‌شوند [۱۱]:

$$\varepsilon = 3.8655 \times 10^{-4} \text{ nN}\cdot\text{nm} \quad \sigma = 0.34 \text{ nm}$$

نیروی لنارد-جونز نیز با استفاده از رابطه‌ی زیر تعیین می‌گردد [۱۱]:

$$F(R) = -\frac{dU(R)}{dR} = 24\frac{\varepsilon}{\sigma} \left[2\left(\frac{\sigma}{R}\right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^7 \right] \quad (2-2)$$

لازم به ذکر است که از این برهم‌کنش عموماً جهت مدل کردن نیروهای موجود بین اتم‌های کربن،

واقع در دو دیواره‌ی جداگانه استفاده می‌شود و برای اتم‌های واقع در یک دیواره و اتم‌های مجاور

یکدیگر از این پتانسیل در مقابل پتانسیل‌های دیگر صرفنظر می‌کنیم.

ب: برهم‌کنش الکترواستاتیک:

همانطور که از اسم این برهم‌کنش پیداست، این نوع از برهم‌کنش بر اثر به وجود آمدن نیروهای

الکترواستاتیکی بین الکترون‌های دو اتم مجاور یکدیگر ایجاد می‌شود و می‌توان آن را به صورت زیر

تعریف کرد:

$$E_{es} = \frac{I}{4\pi\varepsilon_0} \frac{I}{2} \sum_{i,j} \sum_{a \in i, b \in j'} \frac{q_{i,a} q_{j,b}}{|r_{i,a} - r_{j,b}|} \quad (3-2)$$

باید گفت که تأثیر این برهم‌کنش در مقایسه با دیگر پتانسیل‌ها بسیار ناچیز می‌باشد و لذا در هیچ

یک از تحلیل‌ها در نظر گرفته نمی‌شود.

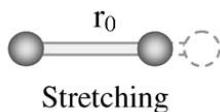
۲-۱-۲- پتانسیل‌های موجود در پیوند اتمی

این پتانسیل‌ها شامل چهار نوع متفاوت می‌شود که در زیر به آنها اشاره شده است.

الف: پتانسیل کشش بین پیوندی^۱:

این پتانسیل بر اثر تغییر فاصله‌ی بین اتم‌های کربن در یک پیوند اتمی ایجاد می‌شود(شکل(۲)

.(۲)



شکل(۲) پتانسیل کشش بین پیوندی در اتم‌های کربن

برای این پتانسیل روابط مختلفی ارائه شده است که از معروفترین آنها می‌توان به روابط مورس^۲ و برنر^۳ اشاره کرد. از میان این دو، رابطه‌ی برنر دقیق‌تر می‌باشد؛ اما رابطه‌ی مورس ساده‌تر است و لذا اکثر محققین از این رابطه در محاسبات خود استفاده کرده‌اند. می‌توان شکل غیر خطی رابطه‌ی مورس را به صورت زیر تعریف نمود[۱۲]:

$$U_r = D_e \left\{ \left[I - e^{-\beta(r-r_0)} \right]^2 - I \right\} \quad (4-2)$$

که در آن r فاصله‌ی بین دو اتم می‌باشد و مقادیر r_0 (فاصله‌ی بین دو اتم کربن در حالت تعادل)، D_e و β نیز در جدول(۱-۲) [۱۳] آورده شده‌اند. نیروی کشش بین پیوندی نیز به شکل زیر بدست می‌آید:

$$F(r-r_0) = 2\beta D_e \left[I - e^{-\beta(r-r_0)} \right] e^{-\beta(r-r_0)} \quad (5-2)$$

جدول(۱-۲) ثابت‌های مربوط به پتانسیل‌های مکانیک مولکولی[۱۳]

interaction	Parameters
u_r	$D_e = 0.6031nN.nm$, $\beta = 26.25nm^{-1}$, $r_0 = 0.142nm$
u_θ	$k_\theta = 1.42nN.nm / Rad^{-2}$, $k_{sextic} = 0.754Rad^{-4}$, $\theta_0 = 120^\circ$
u_ϕ	$k_\phi = 0.278nN.nm / Rad^{-2}$, $n = 2$, $\phi_0 = 180^\circ$
u_ω	$k_\omega = 0.278nN.nm / Rad^{-2}$, $n = 2$, $\omega_0 = 180^\circ$

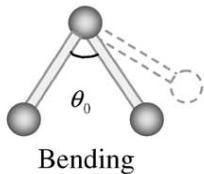
^۱ - Bond stretching

^۲ - Morse

^۳ - Brenner

ب: پتانسیل خمش زاویه‌ای^۱ بین پیوندی؛

این شکل از پتانسیل به دلیل تغییر زاویه در دو پیوند مجاور یکدیگر ایجاد می‌شود(شکل(۳-۲)).



شکل(۳-۳) پتانسیل خمش زاویه‌ای بین پیوندی در اتم‌های کربن

برای این پتانسیل نیز روابط مختلفی ارائه شده است که معروفترین آنها پتانسیل مورس می‌باشد که به

شکل زیر تعریف می‌گردد [۱۲]:

$$U_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 [1 + k_{sextic} (\theta - \theta_0)^4] \quad (6-2)$$

که در آن θ زاویه بین دو پیوند مجاور می‌باشد و مقادیر θ_0 (زاویه بین دو پیوند در حالت تعادل)،

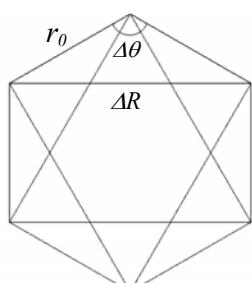
k_θ و k_{sextic} در جدول(۲-۱) آورده شده است. معادله ۶-۲ را می‌توان از طریق ایجاد رابطه‌ای بین

کشش و زاویه خمش بر حسب کشش به دست آورد. بر این اساس برای جابجایی‌های کوچک

می‌توان رابطه زیر را بدست آورد [۳]:

$$\Delta\theta \approx \frac{2(\Delta R)}{r_0}, r_0 = 0.142 nm \quad (7-2)$$

شکل(۴-۲) نشان دهنده موقعيت‌های مربوط به $\Delta\theta$ و ΔR می‌باشد.



شکل(۴-۲) موقعيت‌های مربوط به $\Delta\theta$ و ΔR

¹ - Angle variation or Bond bending

به این ترتیب رابطه‌ی ۶-۲ به شکل زیر در می‌آید:

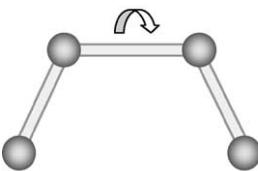
$$u_\theta = \frac{2}{r_0^2} k_\theta (R - R_0)^2 \left[1 + \frac{16}{r_0^4} k_{sextic} (R - R_0)^4 \right] \quad (8-2)$$

و در نهایت با استفاده از آن می‌توان نیروی خمش زاویه‌ای را به شکل زیر به دست آورد:

$$F(R - R_0) = \frac{4}{r_0^2} k_\theta (R - R_0) \left[1 + \frac{16}{r_0^4} \left(1 + \frac{4}{r_0^2} \right) k_{sextic} (R - R_0)^4 \right] \quad (9-2)$$

ج: پتانسیل پیچش زاویه‌ای دو سطحی^۱:

این پتانسیل بر اثر پیچش حول محور پیوند ایجاد می‌شود و در حقیقت بین چهار اتم تعریف می‌شود (شکل ۵-۲).



شکل (۵-۲) پتانسیل پیچش دو سطحی در اتم‌های کربن

پتانسیل پیچش دو سطحی را می‌توان به شکل زیر تعریف نمود [۱۳]:

$$U_\phi = \frac{1}{2} k_\phi \left[1 + \cos(n\phi - \phi_0) \right] \quad (10-2)$$

که در آن ϕ زاویه‌ی پیچش می‌باشد و مقادیر ϕ_0 (زاویه‌ی اولیه در حالت تعادل)، k_ϕ و n در جدول (۱-۲) آورده شده است. با استفاده از آن ممکن پیچشی دو سطحی به صورت زیر بدست می‌آید:

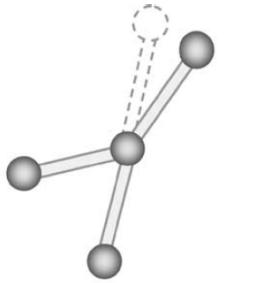
$$T(\phi - \phi_0) = \frac{1}{2} k_\phi n \sin(n\phi - \phi_0) \quad (11-2)$$

د: پتانسیل پیچش خارج صفحه‌ای^۲:

این پتانسیل بدلیل پیچش یک پیوند در صفحه‌ای خارج از صفحه‌ای دو پیوند دیگر بوجود می‌آید و این پتانسیل نیز بین چهار اتم تعریف می‌شود (شکل ۶-۲).

^۱ - Dihedral angle torsion

^۲ - Out-of-plane torsion



Out of plane torsion

شکل (۶-۲) پتانسیل پیچش خارج صفحه‌ای در اتم‌های کربن

پتانسیل پیچش خارج صفحه‌ای را می‌توان به شکل زیر تعریف نمود [۱۳]:

$$U_{\omega} = \frac{1}{2} k_{\omega} [1 + \cos(n\omega - \omega_0)] \quad (12-2)$$

که در آن ω زاویه‌ی پیچش می‌باشد و مقادیر ω_0 (زاویه‌ی اولیه در حالت تعادل)، k_{ω} و n در جدول (۱-۲) آورده شده است. با استفاده از آن ممکن پیچشی خارج صفحه‌ای به صورت زیر بدست

می‌آید:

$$T(\omega - \omega_0) = \frac{1}{2} k_{\omega} n \sin(n\omega - \omega_0) \quad (13-2)$$

به این ترتیب انرژی پتانسیل کل را می‌توان به شکل زیر نشان داد:

$$U_{total} = U_r + U_{\theta} + U_{\phi} + U_{\omega} + U_{vdw} + U_{el} \quad (14-2)$$

۲-۲- قطر نانولوله‌های کربنی

در اینجا یادآور می‌شویم که قطر نانولوله‌ها را می‌توان با توجه به جدول (۲-۲) بدست آورد [۷].

جدول (۲-۲) نحوه‌ی بدست آوردن قطر نانولوله با توجه به اندیس‌های آنها [۷].

Type of nanotube	Chiral indices: (m, n)	Chiral angle, θ	Tube diameter, D_{NT}
Zig-zag	$(m, 0)$	0	$\frac{a_0 m}{\pi}$
Armchair	(m, m)	30°	$\frac{\sqrt{3}a_0 m}{\pi}$
Chiral	$(m, n); m \neq n \neq 0$	$0 < \theta < 30^\circ$	$\frac{a_0 \sqrt{(m^2 + mn + n^2)}}{\pi}$

پس از مروری بر روابط و پتانسیل‌های موجود در نانولوله‌های کربنی، در ادامه برخی از مقالات ارائه

شده در زمینه‌ی کمانش آنها مورد بررسی قرار گرفته است که شامل دو نوع بارگذاری محوری فشاری و ممان پیچشی می‌شود.

۳-۲- کمانش نانولوله‌های کربنی تحت بار محوری فشاری

مقالات متعددی در زمینه کمانش نانولوله‌های کربنی تحت بار محوری فشاری ارائه شده است که در ادامه به برخی از آنها اشاره می‌شود.

- لی و چو (سال ۲۰۰۴)

در سال ۲۰۰۴ لی و چو [۱۱] با ارائه مقاله‌ای کمانش نانولوله‌های کربنی را تحت بار محوری فشاری مورد بررسی قرار گرفت. آنها در مقاله‌ای تحت عنوان کمانش الاستیک نانولوله‌های کربنی با استفاده از روش مکانیک ساختار مولکولی، به مطالعه این پدیده پرداختند. در این مقاله آنها تأثیر دو بار محوری فشاری و خمی بر روی نانولوله‌ها را مورد بررسی قرار دادند. نتایج آنها نشان می‌داد نیروی کمانشی در فشار محوری نسبت به خمی بزرگتر می‌باشد و همچنین برای هر دو نوع بارگذاری، با افزایش نسبت طولی (نسبت طول نانولوله به قطر آن) بار بحرانی کمانش کاهش می‌یابد. همچنین نتایج آنها حاکی از آن بود که الگوی تغییر در بارهای کمانش برای هر دو نوع نانولوله‌ی تک دیواره و دو دیواره به یک شکل می‌باشد. در زیر به روش کاری آنها به صورت مختصر اشاره شده است.

آنها انرژی پتانسیل کل را به شکل زیر در نظر گرفتند:

$$U = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum (U_\phi + U_\omega) + \sum U_{vdw}, \quad (15-2)$$

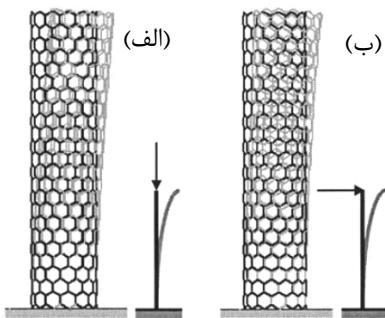
که در آن U_r , U_θ , U_ϕ , U_ω و U_{vdw} به ترتیب پتانسیل‌های کشش پیوندی، خمی زاویه‌ای پیوندی، پیچش زاویه‌ای دو سطحی، پیچش خارج صفحه‌ای و بر هم کنش‌های واندروالس می‌باشند. همچنین برای استفاده از مدل تیر، انرژی پتانسیل موجود در تیر را به صورت زیر در نظر گرفتند:

$$U = \sum U_A + \sum U_M + \sum U_T + \sum U_V, \quad (16-2)$$

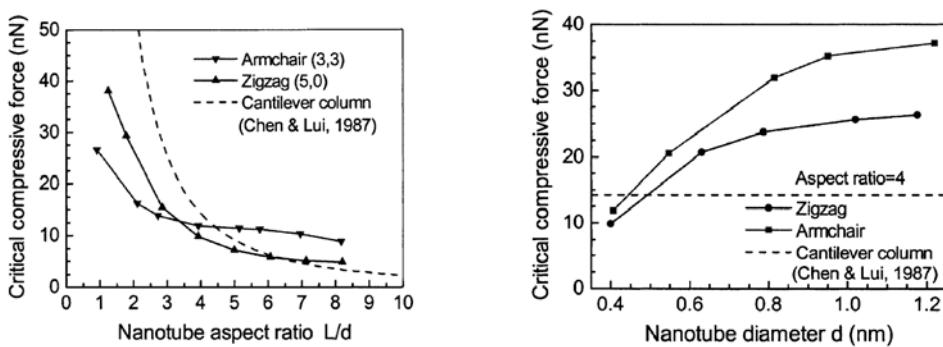
که در آن U_A , U_M , U_T و U_V به ترتیب انرژی‌های پتانسیل متناظر با کشش محوری، خمش، پیچش و نیروی برشی می‌باشند. با در نظر گرفتن تیرهایی با سطح مقطع دایروی تنها سه نوع سختی یعنی سختی کششی، خمشی و پیچشی جهت آنالیز تغییر شکل مورد نیاز می‌باشند. آنها با مدل کردن U_r با U_A , U_M با U_θ و $U_T = U_\varphi + U_\omega$ به بررسی کمانش نانولوله‌های کربنی پرداختند و ثابت‌های نیرویی را به شکل زیر تعریف کردند:

$$\frac{EA}{L} = k_r, \quad \frac{EI}{L} = k_\theta, \quad \frac{GJ}{L} = k_\tau, \quad (17-2)$$

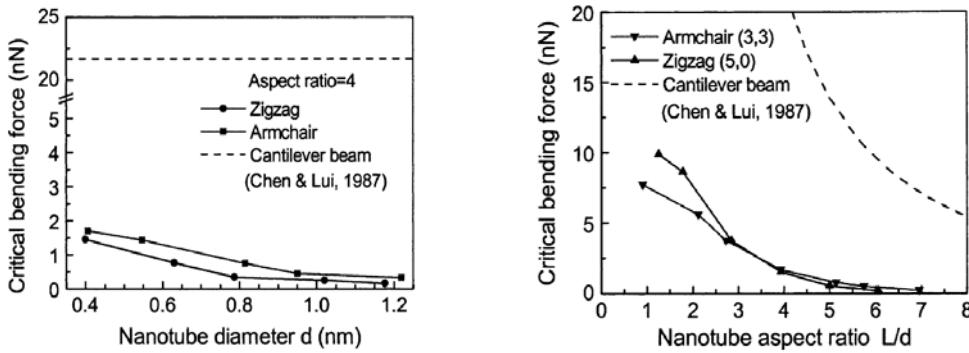
در نهایت آنها با معادل‌سازی انجام شده و حل معادلات مورد نظر با استفاده از روش مقدار ویژه بار بحرانی را بدست آوردند. برخی از نتایج آنها در زیر آمده است.



شکل (۷-۲) شکل مدهای کمانش متناظر با کمترین مقدار ویژه (الف) فشار محوری (ب) خمش (لی و چو- سال ۲۰۰۴)



شکل (۸-۲) تأثیرات ناشی از تغییر در نسبت طولی و قطر نانولوله بر بار بحرانی کمانش (لی و چو- سال ۲۰۰۴)



شکل (۹-۲) تأثیرات ناشی از تغییر در نسبت طولی و قطر نanolوله بر نیروی خمش بحرانی (لی و چو- سال ۲۰۰۴)

اگرچه نتایج آنها در برخی موارد روند تغییرات را به خوبی پیش بینی می کرد؛ اما با توجه به اینکه آنها نanolوله هایی با قطرهای بسیار کوچک را مورد بررسی قرار داده بودند، نتایج آنها در سالهای بعد به ندرت مورد توجه دیگر محققان قرار گرفت.

چنگ و همکارانش^۱ (۲۰۰۵)

در سال ۲۰۰۵ چنگ به همراه همکارانش [۱۴] به ارائه مقاله ای دیگر در زمینه کمانش نanolوله های کربنی پرداختند. آنها بر اساس مدل مکانیک مولکولی، حل تحلیلی برای کرنش بحرانی کمانشی نanolوله های تک دیواره بدست آوردند. نتایج آنها نشان می داد در قطرهای برابر، نanolوله های زیگ-زاگ رفتار پایدارتری نسبت به نanolوله های آرمچیر از خود نشان می دهند. آنها نتایج خود را با نتایج مدل مکانیک پوسه نیز مقایسه نمودند که این مقایسه نشان می داد مدل مکانیک پیوسته مقدار کرنش بحرانی کمتری را برای نانولوله های کوتاهتر تخمین می زند. آنها در ادامه با بررسی تأثیر نیروی واندروالس بر روی کرنش بحرانی کمانش، متوجه شدند که این نیرو تأثیر بسیار کمی بر روی کرنش بحرانی می گذارد. در روش آنها انرژی پتانسیل کل به شکل زیر تعریف می شود:

$$E_t = U_\rho + U_\theta + U_\omega + U_\tau + U_{vdW} + U_{es}, \quad (19-2)$$

که در آن U_ρ , U_θ , U_ω و U_τ به ترتیب انرژی های مربوط به کشش بین اتمی، خمشی بین اتمی، پیچش دو سطحی و خارج صفحه ای بین اتم ها می باشد و U_{vdW} و U_{es} بر هم کنش های واندروالس و

^۱ - Chang et al.

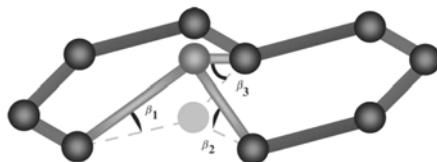
الکترواستاتیک بین اتم‌ها می‌باشند. از آنجا که برای ساده‌سازی مسئله و نیز با توجه به شرایط بارگذاری و مرزی می‌توان از برخی اجزاء معادله اصلی صرف‌نظر نمود. آنها نیز از U_{vnW} و U_{es} صرف‌نظر کرده و معادله را به شکل زیر ساده کردند:

$$E_t = \sum \frac{1}{2} K_\rho (dr)^2 + \sum \frac{1}{2} C_\theta (d\theta)^2 + \sum \frac{1}{2} C_\omega (\beta)^2 + \sum \frac{1}{2} K_{vdW} (ds)^2, \quad (20-2)$$

که در آن dr افزایش طول بین پیوندی، $d\theta$ تغییرات زاویه‌ی بین پیوندی و ds تغییر در فاصله‌ی فضایی بین دو اتم می‌باشد. β نیز عبارت است از:

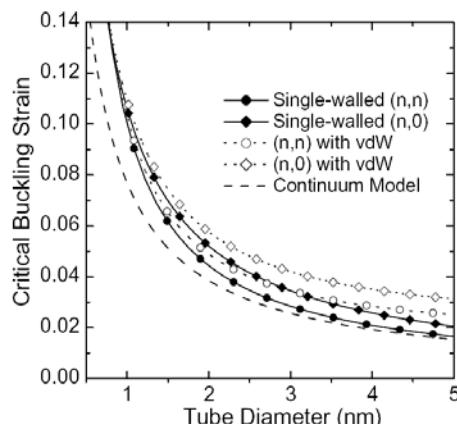
$$\beta = \frac{1}{3}(\beta_1 + \beta_2 + \beta_3) \quad (21-2)$$

و در آن β_1 ، β_2 و β_3 در شکل (۲۰-۲) نشان داده شده‌اند.



شکل (۲۰-۲) مقادیر مربوط به β_1 ، β_2 و β_3 در معادله (۲۰-۲)

ثابت‌های نیرویی متناظر با انرژی‌های کشش بین اتمی (K_ρ)، تغییر زاویه (C_θ)، پیچش بین اتمی (C_ω) و بر هم کنش‌های واندروالس (U_{vnW}) را می‌توان از طریق روش‌های تجربی یا عددی بدست آورد. در نهایت آنها با بدست آوردن معادلات موردنیاز توانستند معادلات کرنش را بدست آورده و آن را حل نمایند. شکل (۱۱-۲) یکی از نمودارهای بدست آمده از نتایج آنها را نشان می‌دهد.

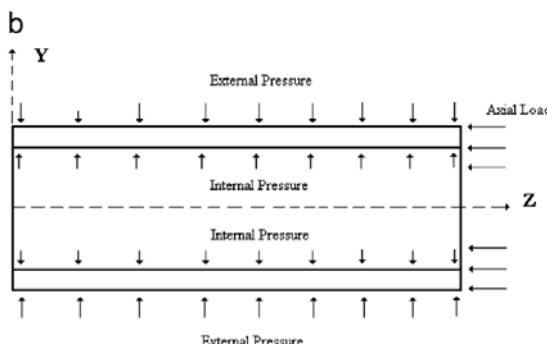


شکل (۱۱-۲) تأثیرات ناشی از تغییر در قطر نانولوله بر کرنش بحرانی کمانش (چنگ و همکارانش - سال ۲۰۰۵)

قربانپور و همکارانش (۲۰۰۷)

با ارائه مقاله‌ای، توسط قربانپور و همکارانش [۱۵]، کمانش نanolوله‌های کربنی برای اولین بار توسط یک نرمافزار عددی مورد بررسی قرار گرفت. آنها در مقاله خود کمانش نanolوله‌های کربنی تک دیواره و پوسته‌ی استوانه‌ای را تحت بارگذاری‌های محوری فشاری و ترکیبی مورد مطالعه قرار دادند. نتایج آنها با استفاده از نرمافزار عددی ANSYS بدست آمده که با نتایج حاصل از تنوری‌های کلاسیک (محلی) و پیوسته (غیر محلی) مقایسه شده است. شرایط بارگذاری آنها به صورت بار محوری فشاری و بارگذاری ترکیبی از بارهای محوری فشاری و فشارهای جانبی خارجی و داخلی می‌باشد. شکل (۱۲-۲) نشان دهنده شرایط بارگذاری آنها می‌باشد. نتایج کلاسیک آنها از معادله‌ی پایداری دالن حاصل شده است و به صورت زیر بیان می‌شود:

$$D\nabla^8 U_x + \frac{Et}{r^2} \frac{\partial^4 U_x}{\partial z^4} - \nabla^4 \left(N_z \frac{\partial^2 U_x}{\partial z^2} + \frac{1}{r^2} N_\theta \frac{\partial^2 U_x}{\partial \theta^2} \right) = 0, \quad (۲۲-۲)$$



شکل (۱۲-۲) شرایط بارگذاری در نظر گرفته شده (قربانپور و همکارانش-۲۰۰۷)

که در آن U_x , E , N_z و N_θ به ترتیب جابه‌جایی در جهت x , مدول یانگ، شدت نیروی عمودی درون صفحه‌ای و نیروی برشی می‌باشند. D نیز سختی خمشی بوده که به صورت زیر تعریف می‌شود:

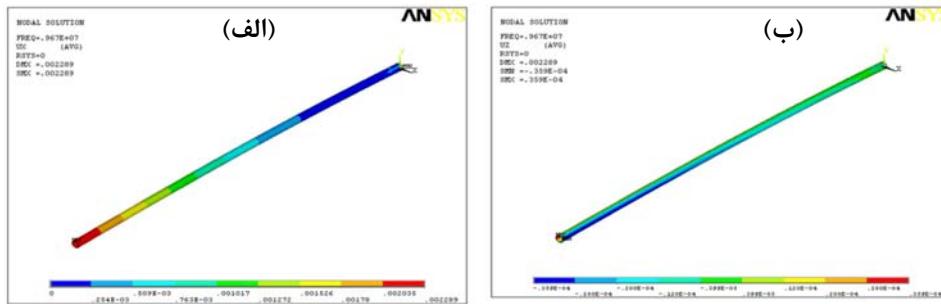
$$D = \frac{Et^3}{12(1-\nu^2)} \quad (۲۳-۲)$$

در واقع آنها با استفاده از مدل پوسته به ارائه‌ی مدلی جدید برای بررسی کمانش نanolوله‌های کربنی پرداختند و با استفاده از از المان ۸ گرهی shell93، نanolوله‌های تک دیواره را مدل کردند. مدول یانگ

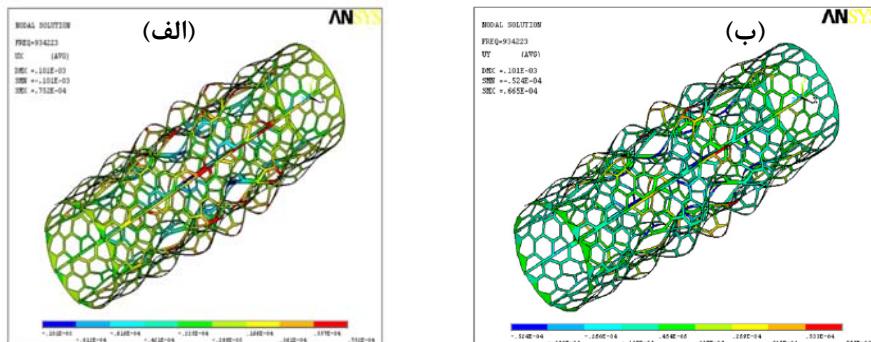
مورد استفاده آنها 200GPa و ضریب پواسون $\nu = 0.266$ nm می‌باشد. آنها برای مدل‌های متفاوتی از نanolوله نتایج خود را بدست آورده‌اند. در جدول (۱۳-۲) و شکل‌های (۱۳-۱) و (۱۴) می‌توان برخی از نتایج بدست آمده توسط آنها را مشاهده کرد.

جدول (۱۳-۲) نتایج حاصل از کمانش پوسته‌ای یک استوانه‌ی نازک (قربان‌پور و همکارانش-۲۰۰۷)

Loading	σ_{cr} (GPa)	$U_x (\times 10^{-3} \text{ m})$	$U_y (\times 10^{-3} \text{ m})$	$U_z (\times 10^{-3} \text{ m})$
Pure axial	1.547	2.29	0.034	0.036
Internal and axial	2.064	0.61	2.21	0.035
External and axial	0.791	0.176	0.176	0.0027



شکل (۱۳-۲) جابجایی‌های ایجاد شده در جهات (الف): x و (ب): y (قربان‌پور و همکارانش-۲۰۰۷)



شکل (۱۴-۲) جابجایی‌های ایجاد شده در جهات (الف): x و (ب): y (قربان‌پور و همکارانش-۲۰۰۷)

گرچه مدلی که توسط آنها ارائه شد، مدلی جدیدی بشمار می‌آمد؛ ولی نتایج آنها با هیچ مرجع دیگری که نشان دهنده صحت آنها باشد، مقایسه نشده است و لذا مقاله‌ی ارائه شده توسط آنها بندرت مورد توجه دیگر محققین قرار گرفته است. قابل ذکر است که نanolوله‌های کربنی مورد بررسی آنها بسیار طویل می‌باشد و در حال حاضر دسترسی به این طول از نanolوله‌ها امکان پذیر نیست.

هو و همکارانش^۱ (۲۰۰۷)

در سال ۲۰۰۷ هو به همراه همکارانش [۱۶] با ارائه مقاله‌ای به نام پیش‌بینی رفتارهای کمانشی نanolوله‌های کربنی، به بررسی کمانش نanolوله‌های کربنی با استفاده از روش‌های عددی پرداختند. آنها برای نشان دادن این رفتار از مدل تیر معادل استفاده کردند. در حقیقت آنها در این مدل، پتانسیل‌های مکانیکی و مولکولی موجود در پیوند کوالانسی بین اتم‌های C-C را به شکل انرژی کرنشی معادل در یک تیر مجازی سه بعدی بین دو اتم کربن در نظر گرفتند و سپس پارامترهای سختی معادل در تیر را از ثابت‌های نیرویی در تئوری مکانیک مولکولی بدست آوردند. آنها همچنین برای مدل کردن نanolوله‌های کربنی چند دیواره از المان‌های جدید میله‌ای که خود پیشنهاد کرده بودند، برای در نظر گرفتن تأثیرات بر هم کنش واندروالس استفاده نموند.

در نهایت آنها رفتار کمانشی نanolوله‌های کربنی را به وسیله‌ی این دو المان تیر و میله و با استفاده از روش المان محدود بدست آوردند. آنها نتایج خود را را با نتایج حاصله از دینامیک مولکولی که در سالهای قبل از آن انجام شده بود مقایسه نمودند که تطابق خوبی بین آنها وجود داشت. در ادامه به اختصار به روش آنها اشاره شده است.

انرژی‌های انرژی پتانسیل کل را به شکل زیر در نظر گرفتند:

$$E_{\text{pot}} = \underbrace{\sum_{\text{bonds}} V_s + \sum_{\text{angles}} V_a + \sum_{\text{dihedrals}} V_t}_{\text{bonded interactions}} + \underbrace{\sum_{\text{atoms}} V_v + \sum_{\text{atoms}} V_e}_{\text{non-bonded interactions}}, \quad (۳۴-۲)$$

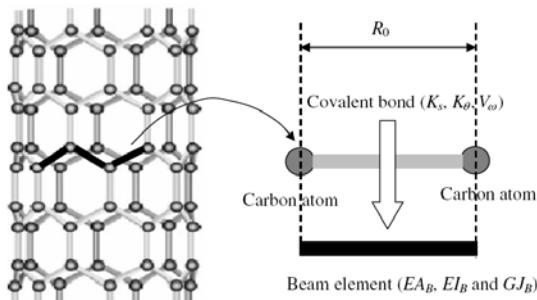
که در آن V_s ، V_a و V_t به ترتیب انرژی‌های مربوط به کشش بین اتمی، خمشی بین اتمی، پیچش دو سطحی و پیچش خارج از صفحه می‌باشد و V_v و V_e بر هم‌کنش‌های واندروالس و الکترواستاتیک بین اتم‌ها می‌باشند. آنها با صرفنظر از V_v و V_e رابطه را به شکل ساده‌تری درآورند. در شکل (۱۵-۲) نمایی از ساختمان المان تیر برای پیوند C-C نشان داده شده است. در این شکل، EA_B سفتی کششی، EI_B سفتی خمشی و GI_B سفتی پیچشی می‌باشد که به صورت‌های زیر معادل می‌شوند:

^۱ - Hu et al.

$$EA_B = K_s R_0 \quad (25-2)$$

$$EI_B = \frac{K_s R_0^3 (K_s R_0^2 + 3K_\theta)}{36(K_s R_0^2 - K_\theta)} \quad (26-2)$$

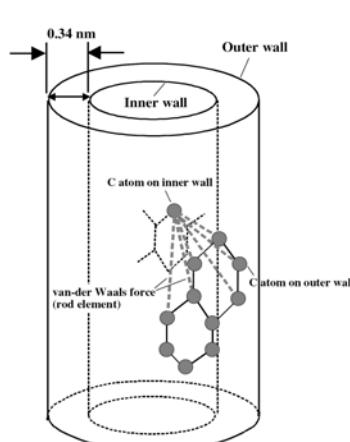
$$GJ_B = 2V_\omega R_0 \quad (27-2)$$



شکل(۲۵-۲) نمایی از ساختمان المان تیر به عنوان پیوند C-C (هو و همکارانش-۲۰۰۷)

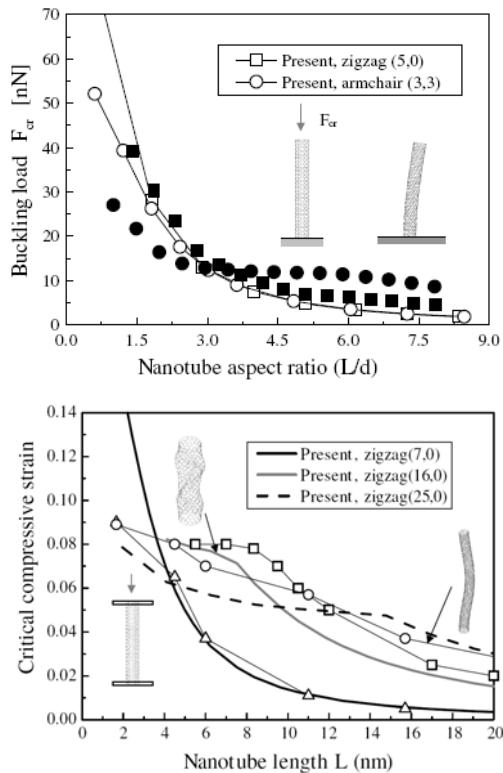
که در آن R_θ فاصله‌ی پیوند C-C در حال تعادل 0.142 nm ثابت نیرویی در کشش پیوند، K_θ ثابت نیرویی در خمش زاویه‌ای و V_θ ثابت پیچشی می‌باشد. مدول یانگ بدست آمده از نتایج آنها 106 GPa و نسبت پواسون 0.225 است.

در ادامه آنها بر همکنش‌های واندروالس را بین دیواره‌های نانولوله‌ها شبیه‌سازی کردند که در شکل (۱۶-۲) نمایش داده شده است. قابل ذکر است که آنها از پتانسیل لنارد-جونز برای مدل خود استفاده کردند.



شکل(۱۶-۲) شبیه‌سازی بر همکنش‌های واندروالس بین دیواره‌های نانولوله‌های کربنی (هو و همکارانش-۲۰۰۷)

برخی از نتایج آنها در ادامه آورده شده است:



شکل(۱۷-۲) مقایسه نتایج بدست آمده برای نانولوله‌های تک دیواره با روش‌های دیگر(هو و همکارانش - ۲۰۰۷)

اگرچه مدل ارائه شده توسط آنها مدلی جدید بود، اما در سالهای بعد با ارائه مدل‌های تکمیل شده‌ی دینامیک مولکولی، نتایج آنها دیگر مورد تأیید قرار نگرفت و قابل استفاده نبود. عیب اصلی مدل آنها تعریف تغییرات زاویه‌ای با استفاده از خمش تیر بود که با واقعیت تفاوت اساسی داشت.

زین و همکارانش^۱(۲۰۰۷)

از جمله مقدادات مهم در زمینه‌ی کمانش نانولوله‌های کربنی مقاله‌ی ارائه شده توسط زین و همکارانش [۱۷] می‌باشد. آنها با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، نانولوله‌های سالم و معیوب تک دیواره را تحت بار محوری فشاری مورد مطالعه قرار دادند. آنها برای شبیه‌سازی برهم‌کنش‌های بین اتمی پتانسیل‌های مورس، خمی، پتانسیل دو سطحی و پتانسیل لنارد-جونز(جهت مدل‌سازی برهم‌کنش‌های واندروالس) را مورد استفاده قرار دادند. با توجه به نتایج آنها مشاهده می‌شود که طول

^۱ - Xin et al.

نانولوله، کایرالیتی، دما و عیوب ساختاری اولیه بر روی کمانش و خواص فشاری نانولوله‌های تک دیواره تأثیر می‌گذارد. آنها همچنین دریافتند که در دمای معمولی فرمول اویلر می‌تواند بار بحرانی کمانشی را برای نسبت‌های طولی بلند پیش بینی کند.

در ادامه به روش کار آنها به صورت مختصر اشاره شده است. معادله‌ی انرژی را به شکل زیر تعریف

کردند:

$$\begin{aligned} U(r_{ij}, \theta_{ijk}, \phi_{ijkl}) &= U_r + U_\theta + U_\phi \\ &= K_r(1 - e^{-\beta(r_{ij}-r_0)})^2 + \frac{1}{2}K_\theta(\theta_{ijk} - \theta_0)^2 + \frac{1}{2}K_\phi[1 + \cos(n\phi_{ijkl} - \phi_0)], \end{aligned} \quad (28-2)$$

که در آن U_r , U_θ , U_ϕ به ترتیب پتانسیل‌های کششی پیوندی، خمش زاویه‌ای و پیچش زاویه‌ای دو سطحی می‌باشد و ثابت‌های K_r , K_θ , K_ϕ نیز ثابت‌های نیرویی هستند. همچنین به منظور در نظر گرفتن بر همکنش‌های واندروالس از رابطه‌ی لنارد-جونز استفاده نمودند که به شکل زیر تعریف می‌شود:

$$U_{vdw}(r_{ij}) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (29-2)$$

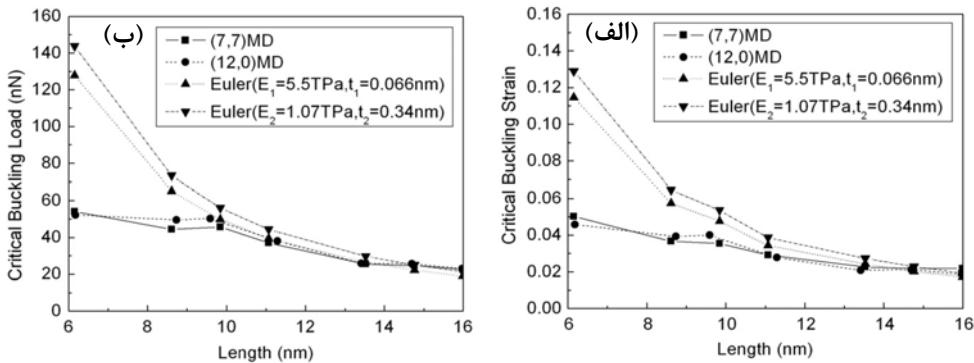
که در آن ε و σ ثابت‌های عمومی می‌باشند که مقادیر آنها در جدول (۵-۲) آورده شده است.

جدول (۴-۲) مقادیر مربوط به برهمکنش‌های بین اتمی در نانولوله‌های تک دیواره (زین و همکارانش - ۲۰۰۷)

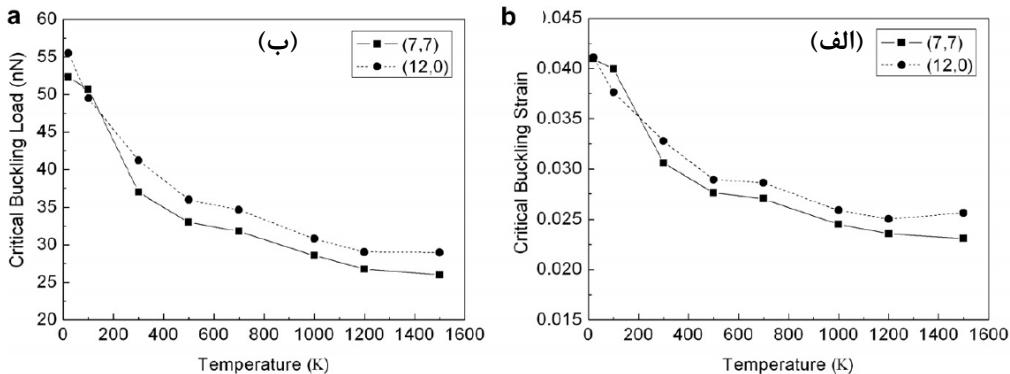
Types of interactions	Parameters
Bond	$K_r = 478.9 \text{ K J/mol}$, $\beta = 21.867 \text{ nm}^{-1}$, $r_0 = 1.418 \text{ nm}$
Angle	$K_\theta = 562.2 \text{ K J/mol}$, $\theta_0 = 120.00^\circ$
Dihedral	$K_\phi = 25.12 \text{ K J/mol}$, $n = 2$, $\phi_0 = 180^\circ$
L-J	$\varepsilon = 0.4396 \text{ K J/mol}$, $\sigma = 0.3851 \text{ nm}$

شکل (۱۸-۲) برخی از نتایج آنها را نشان می‌دهد که در آن تأثیرات طول نانولوله را بر روی بار بحرانی و کرنش بحرانی کمانش مورد بررسی قرار داده‌اند. در ادامه آنها به بررسی تأثیر دما بر روی بار و کرنش بحرانی کمانش نانولوله‌های کربنی پرداختند که در شکل (۱۹-۲) نشان داده شده است.

همان‌طورکه مشاهده می‌کنید با توجه به نتایج آنها با افزایش دما از میزان بار بحرانی و کرنش بحرانی نanolوله‌های (۱۲،۰) و (۷،۷) کاسته می‌شود.

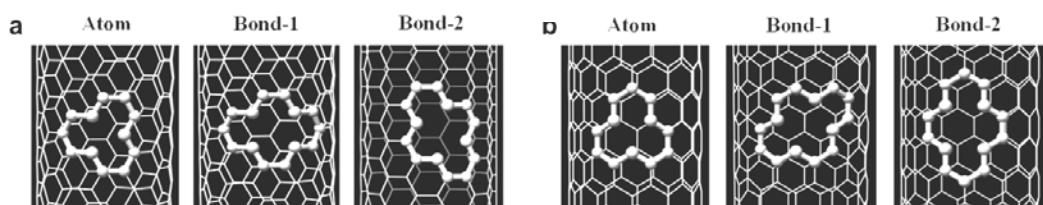


شکل(۱۸-۲) بار بحرانی کمانش(الف) و کرنش بحرانی کمانش(ب) بر حسب طول نanolوله (زین و همکارانش- ۲۰۰۷)

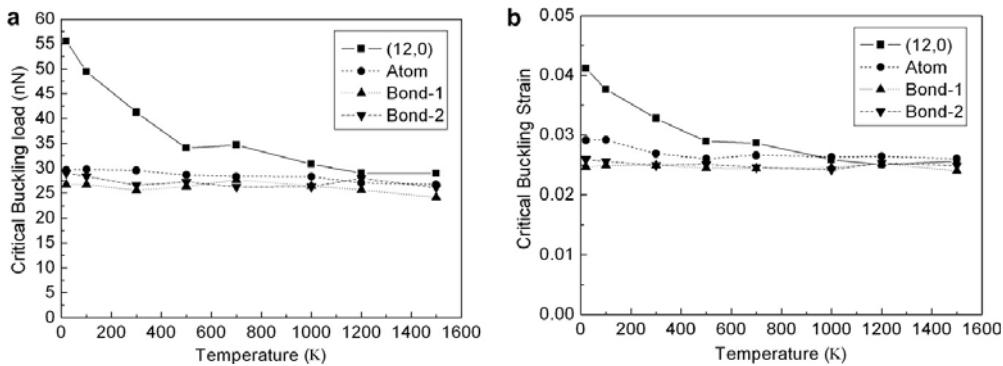


شکل(۱۹-۲) بار بحرانی کمانش(الف) و کرنش بحرانی کمانش(ب) بر حسب تغییر دما (زین و همکارانش- ۲۰۰۷)

آنها همچنین با بررسی ۳ نوع مختلف از عیوب تهی جای (شکل(۲۰-۲)), تأثیرات وجود این عیوب را بر بار بحرانی کمانش و کرنش بحرانی مورد بررسی قرار دادند. نتایج محاسبات آنها در شکل(۲۱-۲) آورده شده است و همانطورکه مشاهده می‌شود، با افزایش دما از تأثیر وجود عیوب در نanolوله کاسته می‌شود.



شکل(۲۰-۲) انواعی از عیوب تهی جای مورد بررسی (زین و همکارانش- ۲۰۰۷)



شکل(۲۱-۲) بار بحرانی (الف) و کرنش بحرانی کمانش(ب) بر حسب تغییر دما برای نanolوله‌های معیوب (زین و همکارانش - ۲۰۰۷)

به طور کلی آنها از بررسی‌های خود نتایج زیر را بدست آوردند:

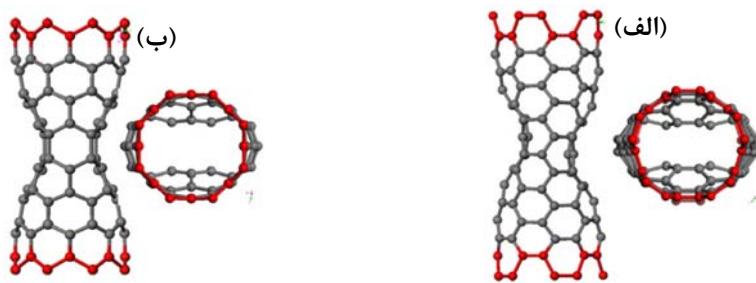
- ۱- در دمای اتفاق خواص الاستیک نanolوله‌های تک دیواره نه تنها به طول آنها وابسته است؛ بلکه به نوع کایرالیتی آنها نیز وابسته است (خصوصا برای نanolوله‌های کربنی با طول کوتاه).
- ۲- بار بحرانی کمانش و کرنش بحرانی کمانش با افزایش دما کاهش می‌یابند.
- ۳- عیوب تهی جای تأثیرات قابل ملاحظه‌ای بر بار کمانش و کرنش بحرانی می‌گذارند که این تأثیر به دما نیز وابستگی شدیدی دارد.

ونگ و همکارانش^۱ (۲۰۰۸)

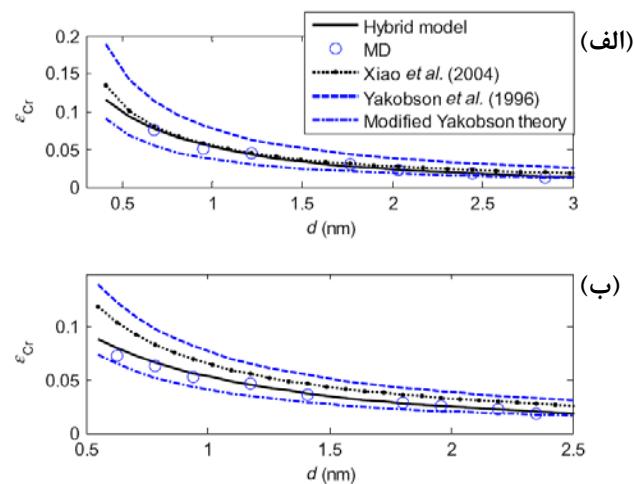
در سال ۲۰۰۸ ونگ به همراه همکارانش [۱۸] به بررسی کمانش نanolوله‌های تک دیواره با استفاده از روشی ترکیبی پرداختند. آنها با ترکیب دو مدل دینامیک مولکولی و مکانیک پیوسته توانستند مدل جدیدی را ارائه کنند و با استفاده از آن رفتار کمانشی غیرالاستیک نanolوله‌های کربنی، تحت فشار محوری را پیش‌بینی نمایند. آنها نتایج خود را با نتایج مدل‌های دینامیک مولکولی و همچنین مکانیک پیوسته که از محققین دیگر بدست آمده بود مقایسه کردند. آنها با استفاده از نتایج خود دریافتند که در کمانش نanolوله‌های کربنی قطر بهینه‌ای وجود دارد که در آن قطر بار بحرانی کمانش به مقدار ماکزیمم خود می‌رسد. آنها نتایج خود را با استفاده از نرمافزار تجاری Material Studio بدست

¹ - Wang et al.

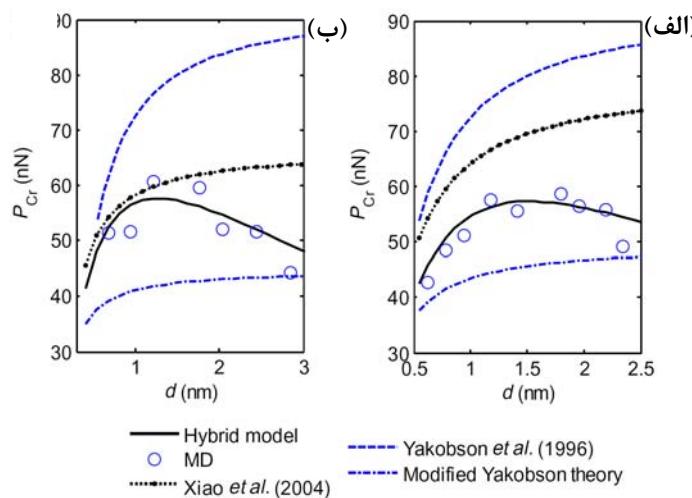
آورده‌ند. در زیر به برخی از نتایج آنها اشاره شده است.



شکل(۲۲-۲) شکل مدهای کمانش برای (الف): نانولوله‌ی (۵,۵) و (ب): نانولوله‌ی (۸,۸)، (ونگ و همکارانش-۲۰۰۸)



شکل(۲۳-۲) کرنش‌های بحرانی بر حسب قطر برای نانولوله‌های(الف): زیگ-زاگ، (ب): آرمیچر(ونگ و همکارانش-۲۰۰۸)



شکل(۲۴-۲) بار بحرانی کمانش بر حسب قطر برای نانولوله‌های (الف): زیگ-زاگ و (ب) آرمیچر (ونگ و همکارانش-۲۰۰۸)

همان طور که دیده می‌شود آنها نتایج خود را با نتایج حاصل از دینامیک مولکولی، نتایج یاکوبسون و ژائو مقایسه کرده‌اند. مشاهده می‌گردد که نتایج آنها مطابقت بسیار خوبی با نتایج دینامیک مولکولی از خود نشان می‌دهد. همچنین می‌توان دید که یک قطر بهینه برای نanolوله‌های آرمیچر و زیگ-زاگ وجود دارد. این مقدار بهینه برای Nanololle‌های آرمیچر در قطر $1/356\text{nm}$ (نانولوله‌ی $10,10$) و برای Nanololle‌های زیگ-زاگ در قطر $1/176\text{nm}$ (نانولوله‌ی $15,0$) اتفاق می‌افتد.

مقالات دیگری در زمینه کمانش Nanololle‌های کربنی دو دیواره و چند دیواره ارائه شده است که در اینجا به بررسی آنها نمی‌پردازیم. علاقه‌مندان برای آشنائی با مقالات مربوطه می‌توانند به مراجع [۱۹-۲۰] مراجعه نمایند.

۴-۴- کمانش Nanololle‌های کربنی تحت ممان پیچشی

یائو و هان^۱ (۲۰۰۷)

در سال ۲۰۰۷ یائو و هان [۲۱] با استفاده از مکانیک پیوسته به بررسی پدیده غیر خطی کمانش در Nanololle‌های کربنی تک دیواره پرداختند. آنها با استفاده از تئوری لایه مرزی در کمانش پوسته‌ای و تکنیک انحراف خطی منفرد حل معادلات بدست آمده استفاده کردند. آنها از معادلات دیفرانسیل غیر خطی کارمان-دانل به منظور دستیابی به معادلات مورد نظر خود استفاده کردند. در حقیقت آنها به صورت تئوری معادلات بار بحرانی و پس‌کمانش را بدست آورده و با استفاده از روش‌های عددی به حل آنها پرداختند. در نهایت آنها برای Nanololle‌های تک دیواره زاویه‌ی پیچش، کوتاه شدگی انتهایی، تغییر شکل مقطعي و ممان را در حالت پس‌کمانش با در نظر گرفتن پارامترهای مختلف هندسی مورد بررسی قرار دادند. نتایج عددی آنها نشان می‌دهد که Nanololle‌های کربنی تک دیواره دارای رفتار کمانشی ناپایدار می‌باشند و طول مسیر پس‌کمانش برای Nanololle‌های نازک نسبت به Nanololle‌های ضخیم بلندتر است. آنها با استفاده از تئوری پوسته‌ی دانل^۲ و تئوری

¹ - Yao and Han

² - Donnell

جابه‌جایی‌های بزرگ فون کارمن، کرنش‌های غشایی کل را به صورت زیر در نظر گرفتند:

$$\varepsilon_x = \varepsilon_x^0 + \frac{\partial U}{\partial X} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial W}{\partial X} \right)^2, \quad (30-2)$$

$$\varepsilon_y = \varepsilon_y^0 + \frac{\partial V}{\partial Y} - \frac{W}{Y} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial W}{\partial Y} \right)^2, \quad (31-2)$$

$$\varepsilon_{xy} = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial U}{\partial Y} + \frac{\partial V}{\partial X} + \frac{\partial W}{\partial X} \frac{\partial W}{\partial Y} \right]. \quad (32-2)$$

که در آنها U , V و W اجزاء محوری، جانبی و شعاعی جابه‌جایی‌های افزوده‌ی صفحه میانی هنگام

کمانش می‌باشند. همچنین نیروهای غشائی کل مربوطه را به صورت زیر اعمال کردند:

$$N_x = \frac{Et}{1-\nu^2} (\varepsilon_x + \nu \varepsilon_y), \quad N_y = \frac{Et}{1-\nu^2} (\varepsilon_y + \nu \varepsilon_x), \quad N_{xy} = \frac{Et}{1+\nu} \varepsilon_{xy}. \quad (33-2)$$

که در آنها E و ν به ترتیب ضخامت، مدول یانگ و نسبت پواسون می‌باشند. همچنین $(\varepsilon_x, \varepsilon_y)$ و

(N_x, N_y) به عنوان کرنش و نیروهای غشائی هنگام فشار یکنواخت محوری و شعاعی، قبل از کمانش،

در نظر گرفته می‌شوند. در ادامه آنها با استفاده از یک تابع تنش $F(x,y)$ و معادله‌ی سازگاری مربوطه

روابط خود را گسترش داده و نتایج مورد نظر خود را بدست آورند. در زیر به برخی نتایج آنها اشاره

شده است.

که در آن λ_T کمیت بی‌بعد، τ_{cr} تنش برشی کمانش و T_{cr} بار بحرانی کمانش می‌باشد. لازم به ذکر

است مقدار λ_T به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\lambda_T = \frac{\tau_{xy}}{\tau_{cr}^a}, \quad (34-2)$$

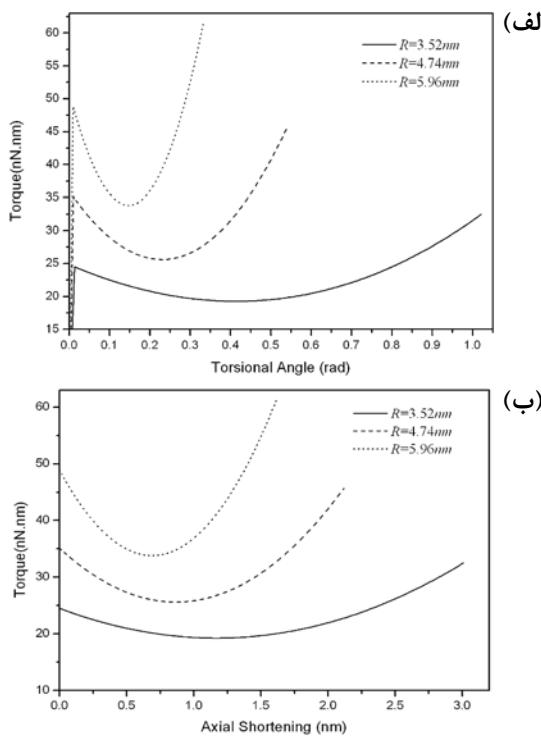
جدول (۵): مقایسه بار پیچشی کمانش برای نانولوله‌های کربنی

$\nu = 0.19$, $t = 0.066$ nm, $L/R = 10$, $E = 5.5$ TPa

Mean radius (nm)	m, n	λ_T	τ_{cr} (GPa)	T_{cr} (nN nm)
$R = 3.52$	1, 2	1.2080	4.7695	24.5075
$R = 4.74$	1, 2	1.4912	3.7678	35.1064
$R = 5.96$	1, 2	1.8506	3.3153	48.8362

همانطور که مشاهده می‌شود، نمودارهای مربوطه به صورت غیر خطی می‌باشند. قابل ذکر است که به

دلیل نبود نتایج مشابه، آنها نتوانستند نتایج خود را با نتایج دیگری مقایسه نمایند.



شکل (۲۵-۲) : رفتار کمانشی نانولوله‌های کربنی تک دیواره تحت بار پیچشی بر حسب
الف : زاویه پیچش ب : کوتاه شدگی (یائو و هان-۲۰۰۷)

ونگ و همکارانش^۱ (۲۰۰۷)

در سال ۲۰۰۷ ونگ به همراه همکارانش^[۲۲] به ارائه مدلی با استفاده از تئوری‌های مکانیک پیوسته پرداختند و با استفاده از آن کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی را مورد مطالعه قرار دادند. آنها به منظور نمایش قابلیت این مدل نتایج خود را برای نسبت‌های طولی متفاوت بدست آورده‌اند و آنها را با نتایج حاصل از مدل دینامیک مولکولی مقایسه نمودند. آنها با استفاده از دو مدل دونل و کرم^۲ به ارائه مدل پیوسته پرداختند که به ترتیب برای هر کدام تنش بحرانی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\tau_{S1} = \frac{Eh^2}{(1-\nu^2)L^2} \left(4.6 + \sqrt{7.8 + 1.67 \left(\sqrt{1-\nu^2} \frac{L^2}{dh} \right)^{\frac{3}{2}}} \right), \quad (35-2)$$

$$\tau_{S2} = \frac{4.39 Eh^2}{(1-\nu^2)L^2} \sqrt{1 + 0.0257 (1-\nu^2)^{\frac{3}{4}} \left(\frac{2L^2}{dh} \right)^{\frac{3}{2}}}, \quad (36-2)$$

¹ - Wang et al.
² - Kromm

زوایای پیچش متناظر نیز به صورت زیر نشان داده می‌شود:

$$\varphi_{S1} = \frac{4h^2}{(1-\nu)dL} \left(4.6 + \sqrt{7.8 + 1.67 \left(\sqrt{1 - \nu^2} \frac{L^2}{dh} \right)^{\frac{3}{2}}} \right), \quad (37-2)$$

$$\varphi_{S2} = \frac{17.56h^2}{(1-\nu)dL} \sqrt{1 + 0.0257(1-\nu^2)^{\frac{3}{4}} \left(\frac{2L^2}{dh} \right)^{\frac{3}{2}}} \quad (38-2)$$

لازم به ذکر است که معادلات آنها برای نسبت های طولی کوچکتر از R_2 قابل استفاده است که به

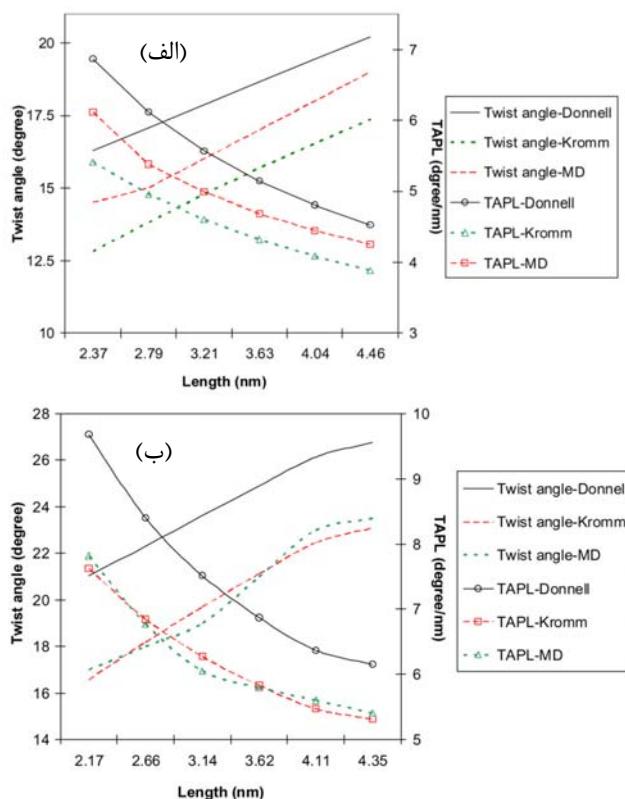
صورت زیر تعریف می‌شود:

$$R_2 = \sqrt{\frac{7.8d(1-\nu^2)^{0.5}}{h}}, \quad (38-2)$$

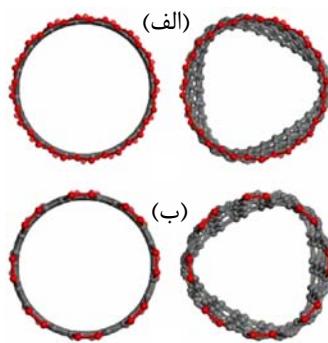
در زیر برخی از نتایج آنها آورده شده است:

با توجه به شکل (۲۶-۲) مشاهده می‌شود، نتایج بدست آمده توسط مدل‌های پیوسته تطابق خوبی با

مدل دینامیک مولکولی دارد که نشان از قابلیت این مدل‌ها در حالت کمانش پوسته‌ای می‌دهد.



شکل (۲۶-۲) : زاویه‌ی پیچشی و زاویه‌ی پیچش بر واحد طول هنگام کمانش، برای نانولوله‌های (الف): (۰، ۱۶) و (ب): (۸، ۸) (ونگ و همکارانش ۲۰۰۷)



شکل (۲۷-۲) : نمای مقطع شکل مدهای کمانش پیچشی برای (الف): نانولوله‌ی (۰،۱۶) nm با طول $L=۲/۹۸$ nm و (ب): نانولوله‌ی (۸،۸) nm با طول $L=۲/۲۱$ nm (ونگ و همکارانش-۲۰۰۷)

در اینجا از بررسی دیگر مقالات ارائه شده در زمینه‌ی کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی صرف نظر می‌شود؛ چرا که این مقالات عموماً کمانش نانولوله‌های دو دیواره و یا چند دیواره در نظر گرفته و یا با بارگذاری ترکیبی مورد مطالعه قرار داده‌اند. علاقه‌مندان می‌توانند جهت دست یابی به این مقالات به مراجع [۲۳-۲۴] مراجعه نمایند.

با دقت در مقالات ارائه شده، مشاهده می‌شود مدل‌هایی که نتایج قابل قبول و مطمئنی از خود نشان می‌دهند اکثرآ مریبوط به روش دینامیک مولکولی می‌باشند که روشی پیچیده، زمان بر و پر هزینه می‌باشد. به جز مدل ارائه شده توسط ونگ در سال ۲۰۰۷ باقی مدل‌ها نتایج چندان خوبی از خود نشان نمی‌دهند؛ که البته مدل ونگ در حین سادگی دارای پیچیدگی‌هایی نیز می‌باشد. با توجه به این مطالب در این پژوهه مدلی ارائه شده است که در حین سادگی دارای دقت و قابلیت‌های بالایی می‌باشد. در این مدل سعی شده است که از تمامی پتانسیل‌های مهم و تأثیرگذار بر رفتار کمانشی نانولوله‌ها استفاده نمائیم تا مدل جامع و قابل قبولی را ارائه کرده باشیم. از جمله قابلیت‌ها و فواید این مدل می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

- ۱- در نظر گرفتن تمامی پتانسیل‌های تأثیرگذار بر رفتار کمانشی نانولوله‌های کربنی که مدل‌های ساختاری قبلی آنها را در نظر نگرفته‌اند.
- ۲- این مدل را می‌توان برای طول‌ها و قطرهای بزرگ‌تر نیز گسترش داد.

- ۳- در این مدل می‌توان به راحتی شرایط مرزی و نوع بارگذاری را تغییر داده و مسأله را برای هر حالت حل نمود(در مسائل کمانش).
- ۴- با استفاده از این مدل می‌توان به راحتی عیب‌های تهی‌جای مورد نظر را در نانولوله ایجاد نمود و مسأله را با در نظر گرفتن این عیوب حل کرد.

فصل دوم

شبیه‌سازی نانولوله‌های

کربنی و مدل پیوسته

در این فصل ابتدا به صورت مختصر بخش‌های مورد استفاده از نرم‌افزار اجزای محدود ABAQUS به معرفی شده‌اند و سپس نحوه شبیه‌سازی نanolوله‌های کربنی سالم، نanolوله‌های کربنی معیوب، پوسته‌ی سالم و پوسته‌ی معیوب در این نرم‌افزار مورد بحث و بررسی قرار گرفته است.

۱-۳-۱- نرم‌افزار ABAQUS

نرم‌افزار ABAQUS یک مجموعه از برنامه‌های مدل‌سازی بسیار توانمند می‌باشد که مبتنی بر روش اجزاء محدود بوده و قابلیت حل مسائل مختلف از یک تحلیل خطی ساده تا پیچیده‌ترین مدل‌سازی‌های غیر خطی را دارد. این نرم‌افزار دارای مجموعه المان‌های بسیار گسترده‌ای است که هر نوع هندسه‌ای را می‌تواند به صورت مجازی توسط المان‌ها مدل می‌کند. همچنین این نرم‌افزار دارای انواع مواد مهندسی از جمله فلزات، لاستیک‌ها، پلیمرها، کامپوزیت‌ها، بتنهای ... می‌باشد.

محیط اصلی و گرافیکی این نرم‌افزار می‌باشد که در آن قابلیت‌های متنوعی جهت مدل‌سازی، حل مدل و نیز مشاهده نتایج در دسترس قرار گرفته است. این محیط به بخش‌های دهگانه‌ای تقسیم شده است که در هر یک از این بخش‌ها می‌توان فرآیندهای خاصی را بر روی مدل انجام داد. در این نرم‌افزار قابلیت وجود دارد که با استفاده از آن می‌توان یک فایل ورودی^۱ را از طریق بازخوانی کل مدل ایجاد کرده و سپس در صورت نیاز تغییراتی را که در محیط CAE امکان پذیر نمی‌باشد، بر روی این فایل اعمال نمود. با استفاده از این قابلیت می‌توان داده‌های مورد نیاز برای فرایندهای CAE نمی‌توان تعریف نمود در این فایل وارد کرده و مسئله را بعد از اعمال غیر خطی را که در محیط CAE مورد نیاز حل کرد.

۱-۳-۲- تحلیل Buckle

به منظور رسیدن به نتایج مورد نظر باید از فرآیند حل Buckle در نرم‌افزار ABAQUS استفاده کرد. این فرآیند حل، یک تحلیل خطی مقدار ویژه است و برای بدست آوردن مقادیر ویژه‌ی کمانش برای

¹ - Input file

سازه‌های الاستیک و سفت^۱ مورد استفاده قرار می‌گیرد. به عبارت دیگر بار بحرانی، تغییر شکل‌های بحرانی و نیز شکل مدهای کمانش را بدست می‌دهد. یک مثال ساده از سازه‌های سفت، ستون اویلر است. در یک مسئله مقدار ویژه، هدف تعیین بارهایی است که در این بارها ماتریس سختی مدل، تکین شود. بنابراین رابطه‌ی

$$K^{MN}v^M = 0 \quad (1-3)$$

حل‌های غیر صفر خواهد داشت. وقتی بار اعمال می‌شود K^{MN} ماتریس سختی است و v^M جابه‌جایی‌های مخالف صفر هستند. بارهای اعمال شده می‌توانند شامل فشار، نیروهای متumerکز، جابه‌جایی‌های غیر صفر و یا بارگذاری حرارتی باشند.

فرمول بندی مسئله مقدار ویژه به صورت زیر است:

$$(K_0^{MN} + \lambda_i K_{\Delta}^{MN})v_i^M = 0 \quad (2-3)$$

که در این رابطه K_0^{MN} ماتریس سفتی مربوط به حالت اولیه و شامل تأثیرات پیش بارها است. λ_i ها مقادیر ماتریس سفتی دیفرانسیلی بار و تنش اولیه‌ی ناشی از الگوی بارگذاری افزایشی است. v_i^M مدل ویژه و λ_i ها شکل مدهای کمانش (بردارهای ویژه) هستند. M و N مربوط به درجات آزادی کل مدل و آمشخص کننده مد کمانش آم است.

۲-۳- شبهه سازی نanolوله‌های کربنی سالم

مدل سازی نanolوله‌های سالم در نرم‌افزار ABAQUS طبق مراحل زیر صورت می‌پذیرد.

۱-۲-۳- مرحله ایجاد اتم‌های کربن به صورت کره‌های تو خالی

برای این منظور در بخش Part ، بر روی گزینه Creat part کلیک کرده و با انتخاب حالت Solid و Discrit Rigid کره‌ای را با قطری برابر با قطر یک اتم کربن (D=۰/۰۷۷ nm) ایجاد می‌نماییم. پس از انجام این کار نقطه مرجعی را در مرکز کره در نظر می‌گیریم که در حقیقت نماینده کل کره

^۱ - Stiff

می باشد.

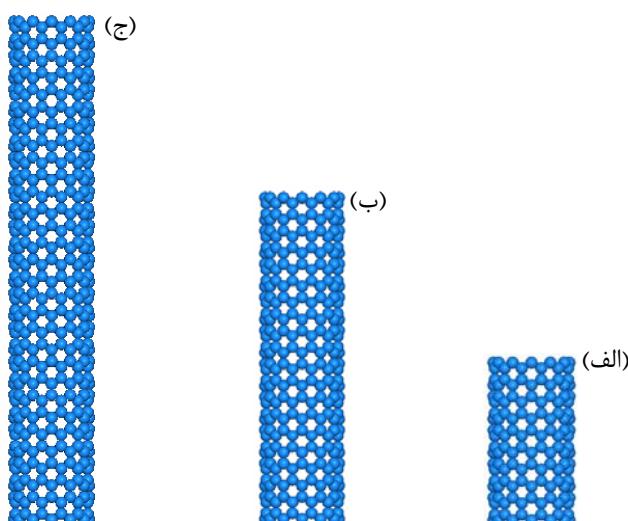
قابل ذکر است که را از این جهت Discrit Rigid انتخاب می کنیم که نیازی به تغییر شکل ندارد.

۲-۲-۳- مرحله‌ی تعیین خواص مکانیکی

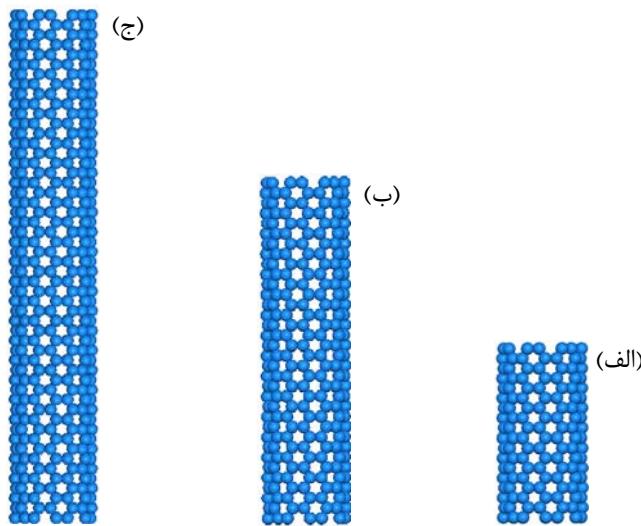
با ورود به بخش Property می‌توان برای ماده خواص مکانیکی مورد نظر را تعریف کرد. در این مدل نیازی به نسبت دادن هیچ گونه خاصیت مکانیکی به ماده نمی‌باشد؛ چرا که این برهمنش‌های بین انتها است که تعیین کننده رفتار کلی نanolوله می‌باشد. البته در صورت استفاده از مدل در تحلیل‌های دینامیکی می‌توان چگالی جرمی مورد نیاز (مطابق با چگالی جرمی اتم کربن) را برای آن در نقطه مرجع تعریف کرد.

۳-۲-۳- مونتاژ اتم‌های کربن

در این مرحله اتم‌های کربن مورد نیاز بر حسب تعداد و نوع کایرالیتی که می‌تواند آرمیچر و یا زیگ-زاگ باشد در موقعیت‌های مناسب قرار داده می‌شوند و در حقیقت مونتاژ می‌شوند. با توجه به شکل(۱-۳) و شکل(۲-۳) مشاهده می‌شود که نanolوله‌های با طول‌های متفاوت و با کایرالیتی متفاوت را می‌توان مدل نمود.



شکل(۱-۳) نanolوله‌های مونتاژ شده از نوع زیگ-زاگ، (الف): $L=۴/۱۱۸\text{ nm}$ (ب): $L=۱/۹۹۸\text{ nm}$ (ج): $L=۶/۲۴\text{ nm}$



شکل(۲-۳) نanolوله‌های مونتاژ شده از نوع آرمچیر، (الف): $L=۲/۰۹\text{ nm}$ (ب): $L=۴/۰۵۸\text{ nm}$ (ج): $L=۶/۲۷۲\text{ nm}$

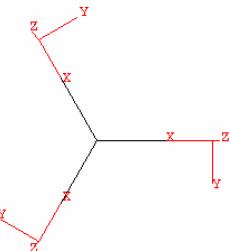
لازم به ذکر است که قطر Nanololleها را می‌توان با استفاده از روابطه موجود در جدول(۲-۲) بدست آورد.

۴-۲-۳- اعمال برهم‌کنش‌های بین اتمی

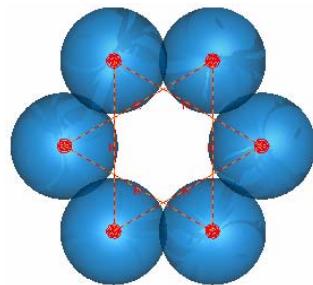
در بخش Interaction می‌توان برهم‌کنش‌های بین اتمی را تعریف نمود و برای این کار باید طبق روش زیر عمل کرد:

همانطور که گفته شد در مرکز هر اتم کربن یک نقطه مرجع قرار داده شده است. از این نقاط می‌توان برای ایجاد دستگاه مختصات محلی استفاده نمود. قابل ذکر است که در نرم‌افزار ABAQUS برای نسبت دادن برخی از انواع برهم‌کنش‌های بین اتصالات، باید برروی نقاط ابتدائی و انتهائی اتصال یک مختصات محلی تعریف نمود. مختصاتی که در اینجا تعریف شده است از نوع کارتزین می‌باشد که جهت محور X آن در جهت اتصال بین دو اتم بوده و جهت محور Z آن عمود بر محور مرکزی Nanolole در نظر گرفته شده است(شکل(۳-۳)). در بخش Interaction ابتدا این دستگاه‌های مختصات محلی را اعمال می‌نماییم؛ پس از آن فنرهایی را که نقش خمش بین اتم‌ها را ایفا می‌کنند، مطابق شکل(۴-۳) بین آنها قرار می‌دهیم. در این حالت فنرها را به صورت الاستیک در نظر می‌گیریم. لازم

به ذکر است که در محیط ABAQUS/CAE امکان ایجاد فنر غیر خطی وجود ندارد؛ لذا برای ایجاد فنر غیر خطی باید ابتدا فایل ورودی هر مدل را استخراج کرده و تغییرات مناسب را روی آن اعمال نمائیم. در پیوست(۱) می‌توان نمونه‌ای از فایل ورودی بدون تغییر و تغییر یافته را مشاهده نمود.



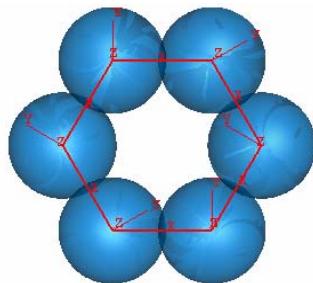
شکل(۳-۳) نحوه‌ی قرار گرفتن دستگاه مختصات محلی بر روی مرکز اتم‌های کربن.



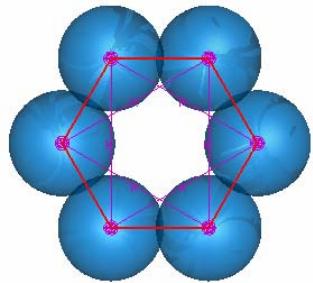
شکل(۳-۴) نحوه‌ی قرار گرفتن فنرهای خمسی بین اتم‌های کربن.

پس از اعمال فنرها در این بخش باید بین هر یک از اتم‌های کربن و اتم کربن مجاور آن یک اتصال ایجاد نمود و سپس برای آن اتصال یک رفتار مشخص را تعریف کرد. برای انجام این کار بروی آیکن Create wire در بخش Interaction کلیک کرده و اتصالات مورد نظر را با انتخاب مرکز اتم‌ها به عنوان نقاط ابتدائی و انتهائی تعریف می‌نماییم. بعد از آن بر روی گزینه Create connector section کلیک کرده و رفتار مورد نیاز را برای آن تعریف می‌نماییم. برای اعمال رفتارهای بین اتمی یعنی کشش بین اتم‌ها، پیچش زاویه‌ای دو سطحی و پیچش خارج صفحه‌ای، مطابق شکل بروی Basic type کلیک کرده و از قسمت Rotational type بر روی Translation type کلیک کرده و از قسمت Cartesian type add Rotation کلیک می‌کنیم و ادامه می‌دهیم. سپس در پنجره ظاهر شده بروی گزینه‌ی Nonlinear Definition را انتخاب کرده Elasticity را انتخاب می‌نماییم. در زیر بخش Nonlinear Definition را انتخاب کرده

و داده‌های مورد نیاز را وارد می‌نماییم. در شکل(۳-۵) می‌توان این اتصالات را بین اتم‌های کربن مشاهده کرد. بعد از تعریف رفتارهای مورد نیاز برروی آیکن Create connector assignment کلیک کرده و با انتخاب اتصالات مربوطه این رفتارها را به اتصالات نسبت می‌دهیم. در شکل(۳-۶) نیز می‌توان مجموع فنرهای خمثی و اتصالات را که در کنار یکدیگر قرار گرفته‌اند را مشاهده نمود.



شکل(۳-۵) نحوهی قرار گرفتن اتصالات بین اتم‌های کربن.



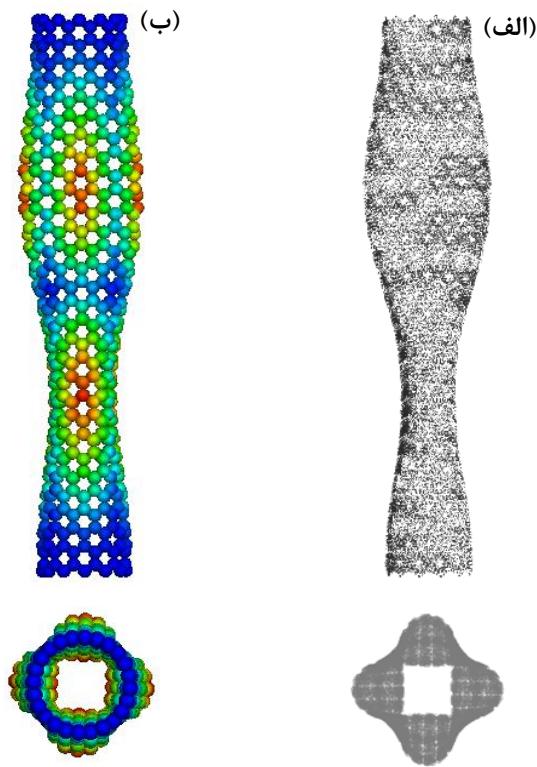
شکل(۳-۶) مجموع فنرهای خمثی و اتصالات بین اتم‌های کربن.

۳-۲-۵-۳- بار گذاری و شرایط مرزی

در بخش Condition شرایط مرزی و بارگذاری‌های مورد نیاز را اعمال می‌نماییم برای هر دو نوع بار گذاری یعنی فشاری و پیچشی یک طرف را کاملاً گیردار نموده و در طرف دیگر، برای حالت کمانش تحت فشار جابه‌جائی‌ها را تنها در جهت بارگذاری (در اینجا در جهت محور Z) باز می‌گذاریم و برای حالت کمانش پیچشی نیز جابه‌جائی را تنها در جهت اعمال ممان (در اینجا حول محور Z) باز می‌گذاریم.

۶-۲-۳- المان بندی اتم‌های مونتاژ شده

در بخش Mesh می‌توان اتم‌های کربن را که به صورت یک کره تعریف شده‌اند را المان‌بندی کرد. اگرچه می‌توان مدل ایجاد شده را بدون اینکه المان بندی کرده حل نمائیم. در این حالت مدل قابل حل است و مقادیر ویژه‌ی مربوطه را بدست می‌دهد؛ ولی شکل مدهای که از آن بدست می‌آید چندان قابل بررسی نمی‌باشد. دلیل اینکه مدل بدون المان‌بندی حل می‌شود، این است که رفتار ماده به برهم‌کنش‌های بین اتم‌ها برمی‌گردد و نه به خواص مکانیکی خود اتم. حل مدل بدون مش‌بندی زمان حل مسئله را بسیار کوتاه می‌کند که این کوتاه شدن زمان حل، یکی از قابلیت‌های خاص مدل ارائه شده می‌باشد. در شکل(۷-۳) نمونه‌ای از شکل مدهای ناشی از حل مسئله با المان‌بندی و بدون المان‌بندی آورده شده است.



شکل(۷-۳) نتایج حاصل از کمانش نمونه‌ای از نanolوله‌ها، (الف): بدون المان‌بندی، (ب) المان‌بندی شده

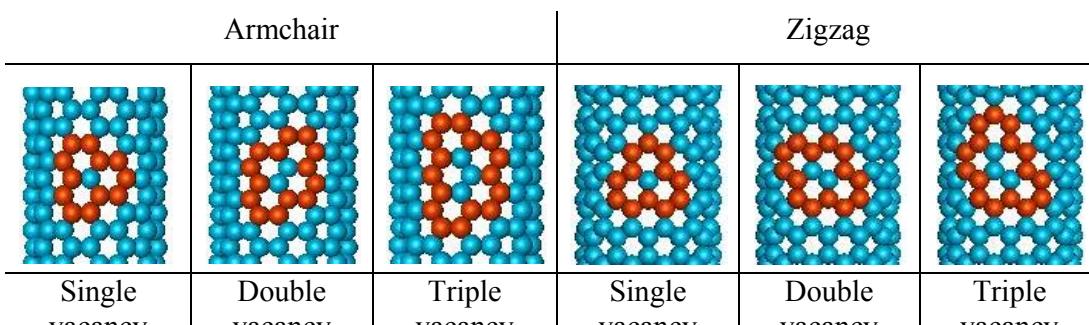
همانطور که در شکل مشاهده می‌شود در حالتی که نanolوله‌ها بدون المان‌بندی حل می‌شوند، تنها فنرهای خمی و اتصالات در نتایج دیده می‌شود.

۷-۲-۳- بخش حل مسئله

در بخش Job مدل ساخته شده را که پس از اعمال تغییرات مربوط به فنر غیر خطی مجدداً باز خوانی کرده ایم، حل کرده و نتایج مورد نظر رادر بخش Visualization مشاهده می کنیم.

۳-۳- شبیه‌سازی نanolوله‌های کربنی معیوب

جهت ایجاد عیب تهی جای کافی است که برای اتم کربن مشخص روی Nanololle، برهم‌کنش‌های مربوط به این اتم با اتم‌های اطرافش برداشته شود. در حقیقت برای اتم مورد نظر فرهای مرتبط با اتم و اتصالات مرتبط با آن برداشته شده و مسئله را بدون این فنرها و اتصالات حل می نمائیم. همان طور که قبلاً گفته شده با استفاده از این مدل می‌توان به راحتی عیوب تهی جای را در Nanololle ایجاد نمود و این یکی دیگر از قابلیت‌های مهم این مدل می‌باشد. در بررسی‌های انجام گرفته چهار نوع عیب تهی جای در نظر گرفته شده است که شامل عیوب تهی جای منفرد، تهی جای دوگانه، تهی جای سه‌گانه و دو تهی جای منفرد روبروی هم می‌شود. در شکل (۳-۸) می‌توان عیوب مورد نظر را مشاهده کرد.



شکل (۳-۸) انواع عیوب تهی جای در نظر گرفته شده در تحلیلها

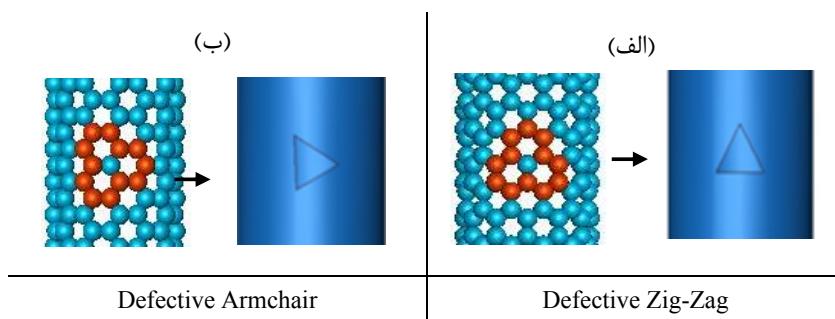
۴-۳- شبیه‌سازی پوسته‌های استوانه‌ای سالم (مدل پیوسته)

برای انجام این کار کافی است یک استوانه به صورت پوسته در نرم‌افزار ایجاد نمود و ضخامت آن را ۰/۰۶۶ nm در نظر گرفت. برای این مدل در بخش Property مدول یانگ Tpa را به عنوان خاصیت الاستیک ماده در نظر می‌گیریم.

طول و قطر استوانه نیز مطابق با طول نانولوله مورد مقایسه خواهد بود. شرایط مرزی و نوع بارگذاری نیز دقیقاً مانند شرایط مرزی و بارگذاری اعمال شده بر روی نانولوله میباشد. در تحلیل های مربوط به این استوانه ها از المان S8R5 استفاده شده است که یک المان ۸ گرهی با ۵ درجه آزادی در هر گره می باشد. لازم به ذکر است که این نوع المان بهترین نوع المان برای تحلیل پوسته های نازک در نرم افزار ABAQUS میباشد.

۳-۵- شبیه سازی پوسته های استوانه ای معیوب (مدل پیوسته)

به منظور مقایسه نانولوله های کربنی معیوب و مدل پوسته هی متناظر آن بر روی استوانه یک گشودگی ایجاد می نمائیم. از آنجا که زاویه عیوب در دو نوع نانولوله ای آرمیچر و زیگ-زاگ یکی نمی باشد؛ لذا برای مدل پیوسته نیز این تفاوت در نظر گرفته شده است که در شکل (۹-۳) می توان آنها را مشاهده کرد. لازم به ذکر است که مساحت گشودگی در مدل پیوسته، معادل مساحت کاسته شده از سطح دیواره های نانولوله های کربنی می باشد.



شکل (۹-۳) پوسته های دارای گشودگی با در گرفتن جهت عیوب تهی جای،
الف): متناظر با زیگ-زاگ، (ب): متناظر با آرمچیر

فصل سوم

نتایج حاصل از

مدل مکانیک ساختاری

و مدل پیوسته

۴-۱- نتایج حاصل از کمانش نانولوله‌های کربنی تحت فشار محوری

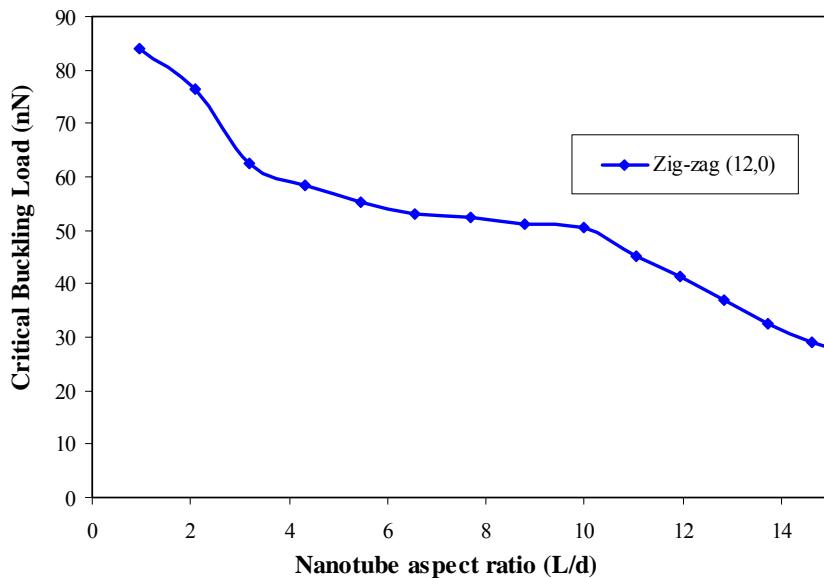
همان طور که قبلاً اشاره شد، نتایج عددی برای نانولوله‌های آرمیچر (۷,۷) و زیگ-زاگ (۰,۱۲) در طول‌های متفاوت بدست آمده‌اند که در ادامه مورد بررسی قرار گرفته‌اند. قبل از هر چیز باید اشاره گردد که در مباحث بعدی هر جا کلمه‌ی "کمانش" به تنهایی به کار برده شود، منظور کمانش تحت بار محوری فشاری می‌باشد.

در اکثر مدل‌های ارائه شده در زمینه‌ی رفتارهای مکانیکی نانولوله‌های کربنی، محققین برای آنکه صحت و درستی مدل خود را بهتر نشان دهند، به بررسی دو نوع خروجی از حل‌های خود پرداخته‌اند: یکی بار بحرانی کمانش و دیگری کرنش بحرانی متناظر با آن. لازم به ذکر است برخی از مدل‌های ارائه شده در این زمینه با آنکه بار بحرانی را به خوبی پیش‌بینی می‌کنند؛ ولی کرنش بحرانی را به درستی تخمین نمی‌زنند و یا برعکس و این خود ضعف این مدل‌ها را نشان می‌دهد؛ لذا در این پایان‌نامه به بیان دو نوع خروجی اشاره شده از حل‌های عددی پرداخته شده است (بار بحرانی کمانش و کرنش بحرانی). همچنین به منظور استنتاج بهتر از نمودارها آنها را به صورت بار بحرانی کمانش برحسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ و کرنش بحرانی کمانش برحسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ در نظر گرفته‌ایم.

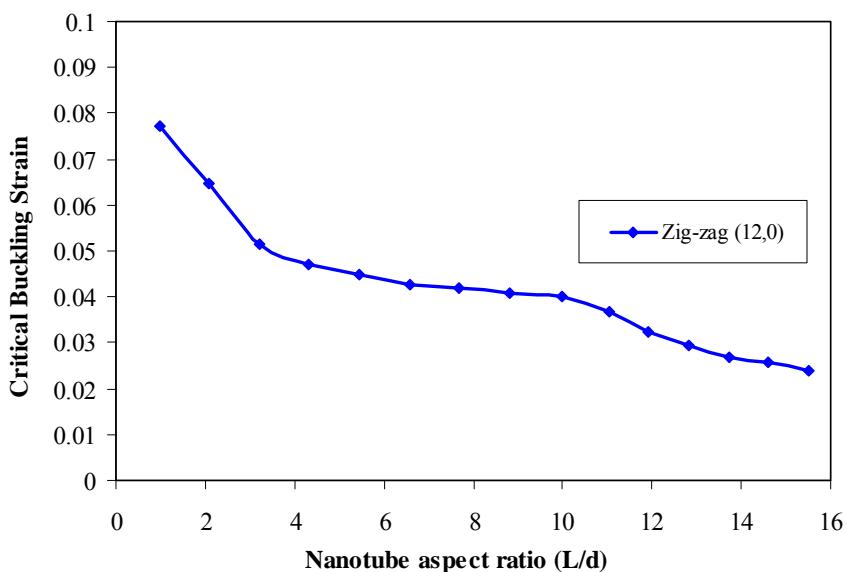
۴-۱-۱- کمانش نانولوله‌های کربنی سالم

در ابتدا به بررسی کمانش نانولوله‌های کربنی سالم (بدون عیب) می‌پردازیم. در شکل‌های (۱-۴) و (۴-۲) به ترتیب نمودارهای بار بحرانی کمانش و کرنش بحرانی برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۰,۱۲) آورده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود، با افزایش طول نانولوله‌ها از میزان بار بحرانی کمانش و کرنش بحرانی کمانش کاسته می‌شود. با توجه به شکل‌ها می‌توان دید که در نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برابر با ۳ و ۱۰ شیب‌های نمودار تغییر می‌کند که این امر به دلیل تغییر در شکل مدهای کمانش اتفاق می‌افتد. این تغییرات در شکل (۴-۳) نشان داده شده‌اند. همانطور که مشاهده می‌شود در طول‌های کوتاه نانولوله‌های کربنی دچار کمانش پوسته‌ای شده و با افزایش طول به سمت کمانش اویلر پیش

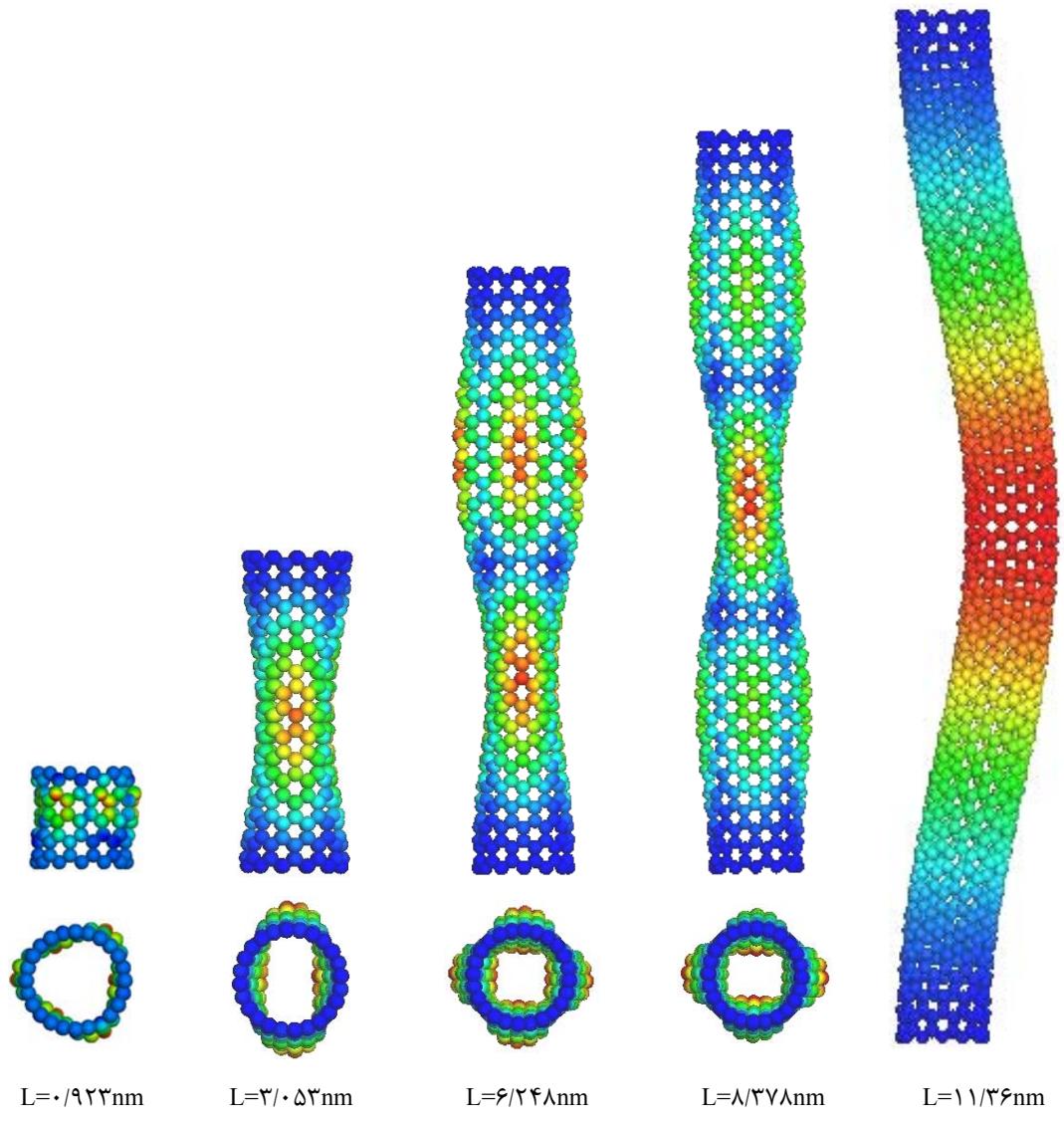
می‌روند. بر این اساس شکل مدها به ترتیب به صورت تک موج سه پهلو، تک موج دو پهلو، دو موج و سه موج ظاهر می‌شوند و در انتهای به صورت موج اویلر در می‌آیند.



شکل(۱-۴) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های زیگ-زاگ(۱۲،۰)

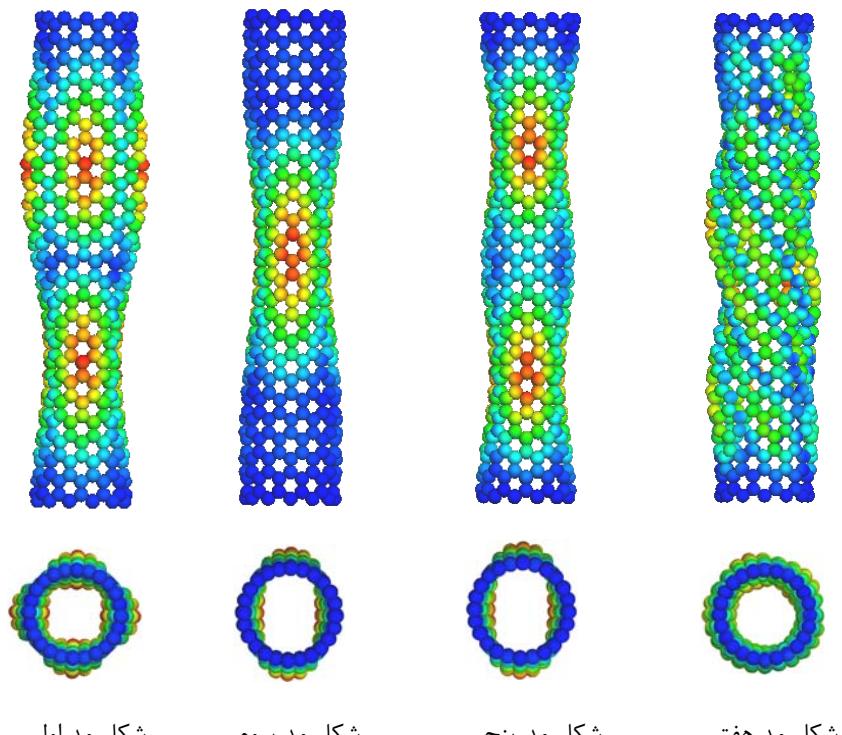


شکل(۲-۴) نمودار کرنش بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های زیگ-زاگ(۱۲،۰)



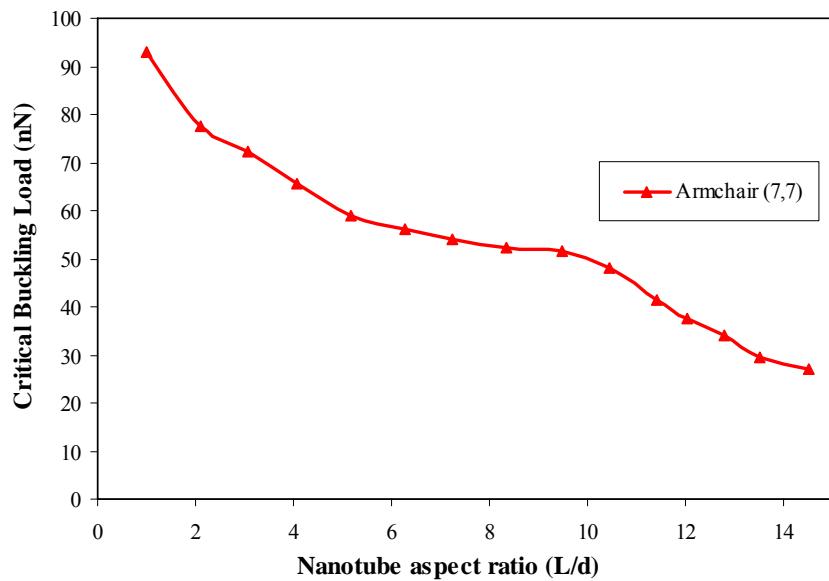
شکل(۳-۴) شکل مدهای ناشی از کمانش نانولوله‌های کربنی زیگ-زاگ(120°) در طول‌های مختلف

در شکل (۴-۴) نیز شکل مدهای اول، سوم، پنجم و هفتم ناشی از کمانش نانولوله‌های کربنی تحت بار محوری فشاری آورده شده است. مشاهده می‌شود که در شکل مد اول دیواره‌ی نانولوله به صورت دو موج مخالف هم در آمده است؛ در شکل مد سوم تنها یک موج در دیواره ایجاد شده و در شکل مد پنجم نیز دو موج شبیه به هم در طول نانولوله اتفاق افتاده است. در شکل مد هفتم نیز دیواره به خود حالت پیچش گرفته و موج‌های پیچشی روی آن ایجاد می‌شود. لازم به ذکر است که برای این نانولوله شکل مدهای اول و دوم، سوم و چهارم، پنجم و ششم و هفتم و هشتم مانند یکدیگر می‌باشند.

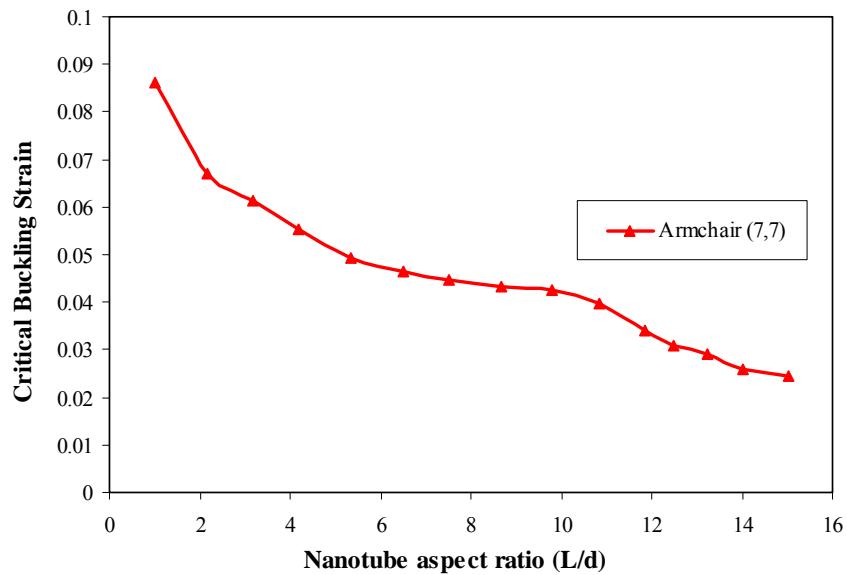


شکل(۴-۴) شکل مدهای اول، سوم، پنجم و هفتم ناشی از کمانش نانولوله‌های کربنی زیگ-زاگ(۱۲۰،۵ nm) در طول

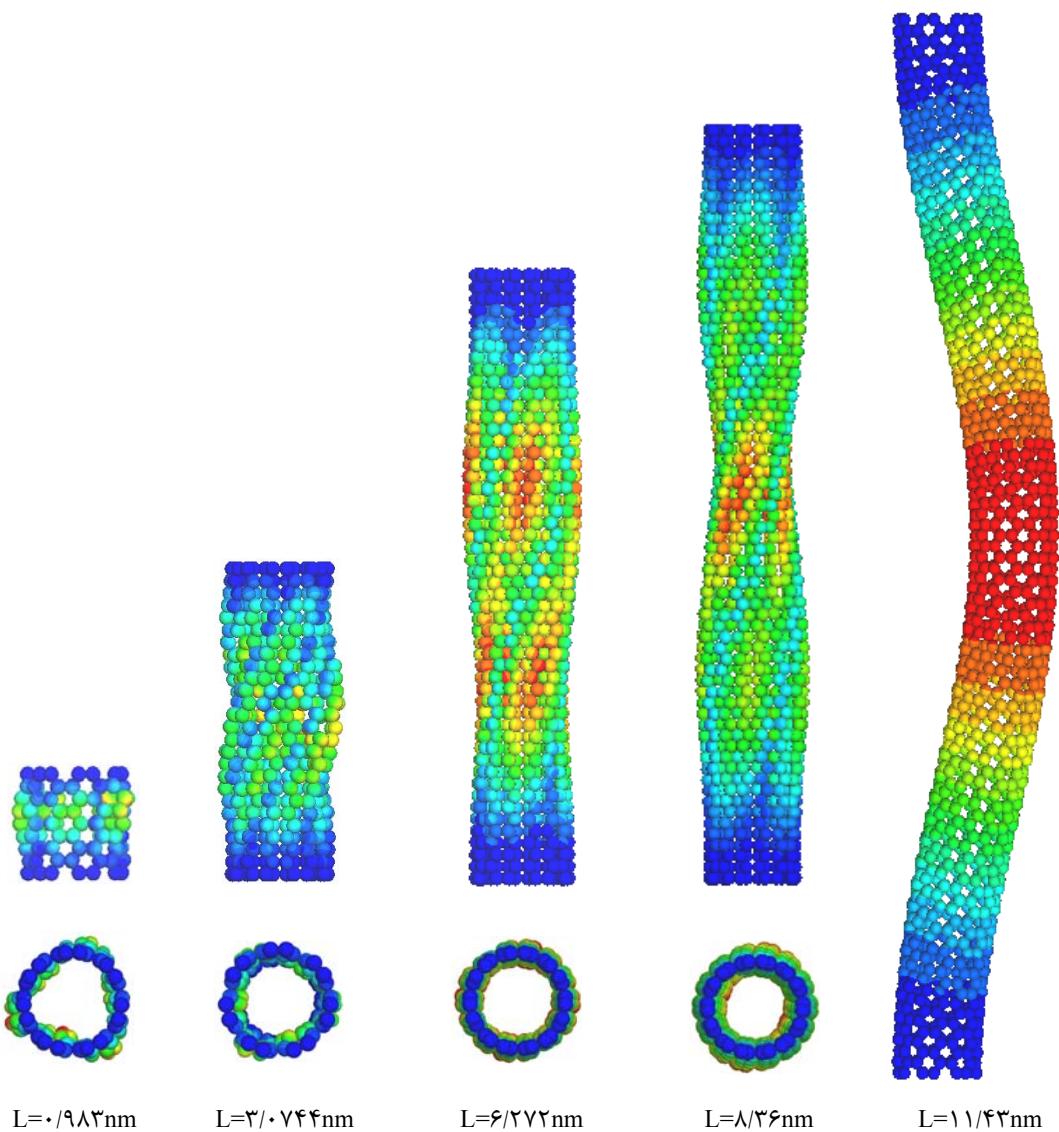
در ادامه نمودارهای بار بحرانی و کرنش بحرانی کمانش برای نانولوله‌های آرمچیر(۷,۷) در شکل‌های (۴-۵) و (۶-۴) آورده شده است. به طور کلی می‌توان گفت روند تغییرات بار و کرنش بحرانی مشابه روند تغییرات در نانولوله‌های زیگ-زاگ است. تفاوت اساسی در کمانش نانولوله‌های کربنی آرمچیر و زیگ-زاگ در شکل مدهای آنها می‌باشد. همانطور که در شکل(۴-۷) مشاهده می‌شود، هنگامی که نانولوله‌های آرمچیر دچار کمانش می‌شوند، دیواره‌ی آنها دچار پیچیدگی می‌گردد که این رفتار در نانولوله‌های زیگ-زاگ وجود ندارد. مشخص است که تفاوت در شکل مدهای آنها به دلیل تفاوت در ساختار دیواره‌های آنها می‌باشد. البته باید اشاره کرد که از نظر تعداد موج‌های ایجاد شده بر روی دیواره، رفتار نانولوله‌های آرمچیر مانند نانولوله‌های زیگ-زاگ است. به طور کلی با توجه به شکل مدهای بدست آمده می‌توان گفت که رفتار نانولوله‌های زیگ-زاگ به پوسته‌های استوانه‌ای پیوسته نزدیک‌تر است.



شکل(۴-۵) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های آرمچیر (۷,۷)



شکل(۴-۶) نمودار کرنش بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های آرمچیر (۷,۷)

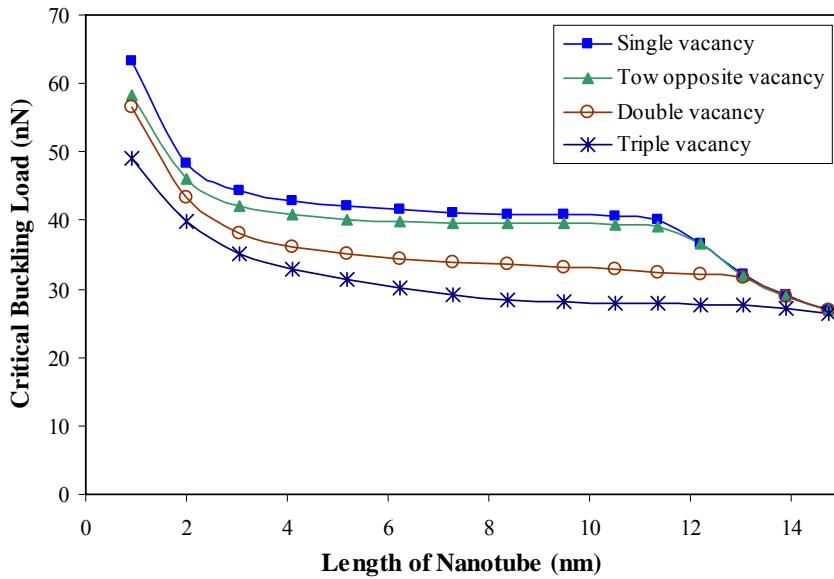


شکل(۷-۴) شکل مدهای ناشی از کمانش نانولوله‌های کربنی آرمچیر(۷،۷) در طول‌های متفاوت

۴-۱-۲- کمانش نانولوله‌های کربنی معیوب

در این بخش کمانش نانولوله‌های کربنی معیوب را مورد بررسی قرار می‌دهیم. همانطور که در فصل گذشته اشاره شده است؛ عیوب مورد بررسی از نوع تهی‌جای می‌باشند که شامل عیوب تهی‌جای منفرد، تهی‌جای دوگانه، تهی‌جای سه گانه و دو تهی‌جای منفرد روبروی هم می‌شوند (شکل(۳-۸)). در شکل(۴-۸) نتایج حاصل از کمانش نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ(۱۲،۰) برای نسبت‌های طولی مختلف آورده شده است. به طور کلی این عیوب تأثیرات قابل ملاحظه‌ای بر بار کمانش می‌گذارند و

می‌توان دید که با تغییر عیب از حالت منفرد به سه‌گانه از بار بحرانی کمانش کاسته می‌گردد و مشاهده می‌شود که در طول‌های بلند، نمودارهای آنها به یکدیگر رسیده و بر روی یک خط پیش می‌روند. این امر بدان معناست که تمامی عیوب در طول‌های بلند (برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰)، در طول‌های بیشتر از ۱۱/۳۶) تأثیر خود را از دست می‌دهند و می‌توان از وجود عیب در نانولوله صرف‌نظر نمود.

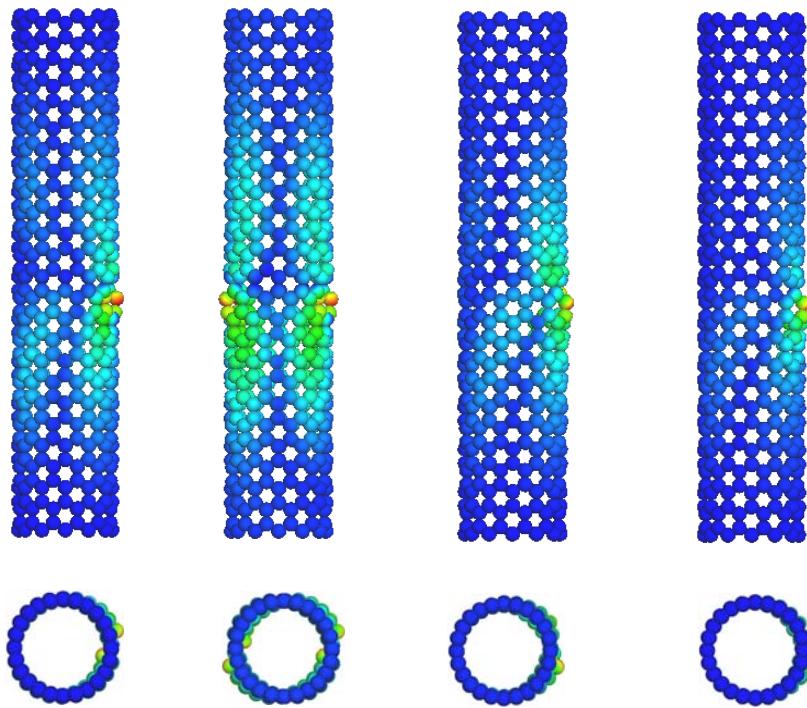


شکل (۴-۷) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ (۱۲،۰)

در شکل (۹-۴) شکل مدهای ناشی از کمانش نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ (۱۲،۰) در طول ۵/۱۸۳ nm نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که در تمامی آنها کمانش به صورت محلی^۱ و در اطراف عیب اتفاق می‌افتد. با توجه به شکل می‌توان نتیجه گرفت، تغییر شکل‌ها برای عیوب‌های تهی‌جایی منفرد و دو تهی‌جایی منفرد، شبیه به هم می‌باشد؛ با این تفاوت که برای دو عیب تهی‌جایی منفرد، در طرف دیگر نانولوله تغییر شکل متقارن دیگری ایجاد می‌شود. همانطور که دیده می‌شود در این دو حالت کمانش به صورت برآمدگی و تورفتگی متقارن اتفاق می‌افتد؛ ولی در دو حالت دیگر یعنی تهی‌جایی دوگانه و تهی‌جایی سه‌گانه، تغییر شکل، بیشتر خود را به صورت برآمدگی

^۱ - Local

در اطراف عیب نشان می‌دهد.

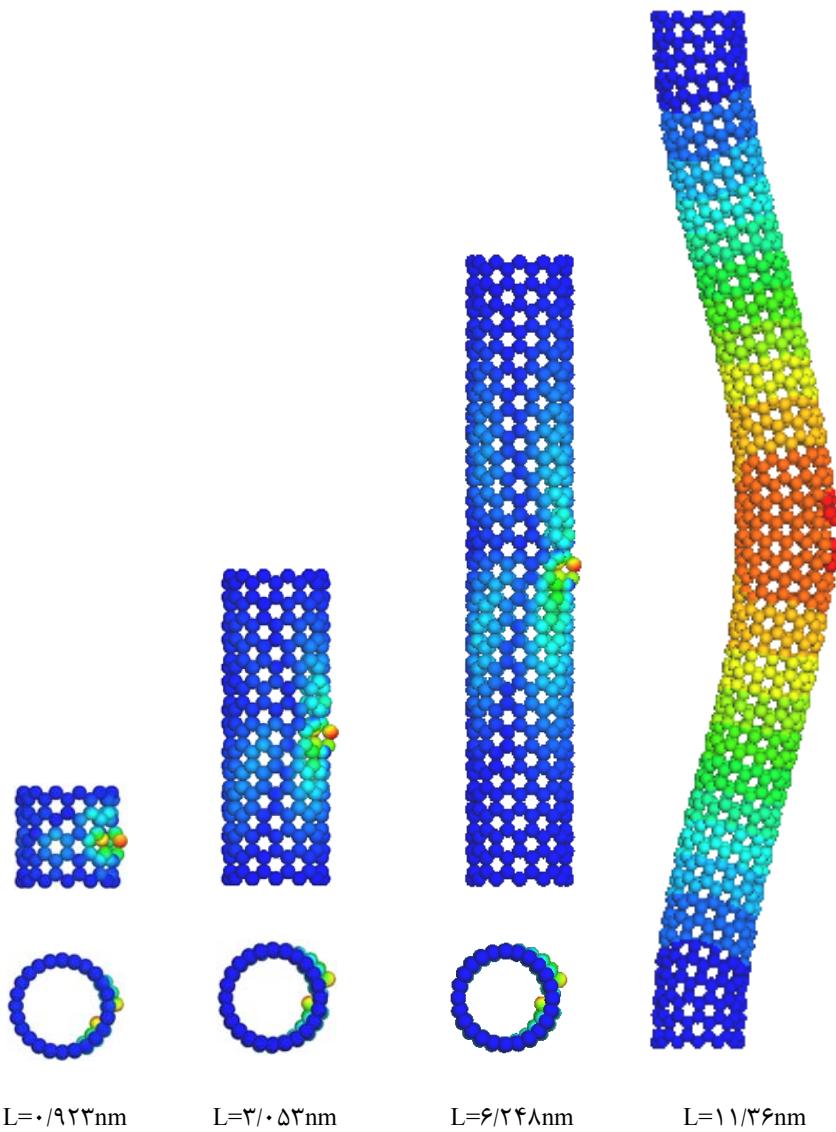


شکل(۹-۴) شکل مدهای ناشی از کمانش نانولوله‌های کربنی معیوب زیگ-زاگ(12.0 nm) با در نظر گرفتن نوع عیب

در شکل(۱۰-۴) نیز شکل مدهای مربوط به کمانش نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ برای طول‌های متفاوت آورده شده است. مشاهده می‌شود که در طول‌های کوتاه، کمانش به صورت محلی اتفاق می‌افتد. این شکل از کمانش برای هر کدام از عیوب اشاره شده تا طول مشخصی ادامه می‌یابد، تا اینکه این مدهای کمانشی به صورت ناگهانی از حالت محلی به کمانش کلی^۱(در اینجا مدد کمانشی اویلر) تغییر شکل می‌دهند. در حقیقت تغییر شکل‌های مربوط به این نانولوله‌ها قبل از آنکه به کمانش کلی برسد(برای نانولوله‌های کربنی زیگ-زاگ با عیب تهی جای منفرد، در طول $11/36\text{ nm}$) به صورت مشابهی در اطراف عیب ایجاد می‌شود. لازم به ذکر است که این تغییر برای نانولوله‌های آرمچیر دیرتر اتفاق می‌افتد. در شکل (۱۲-۴) می‌توان دید که برای این نانولوله‌ها در طول $12/0.5\text{ nm}$ همچنان مدد

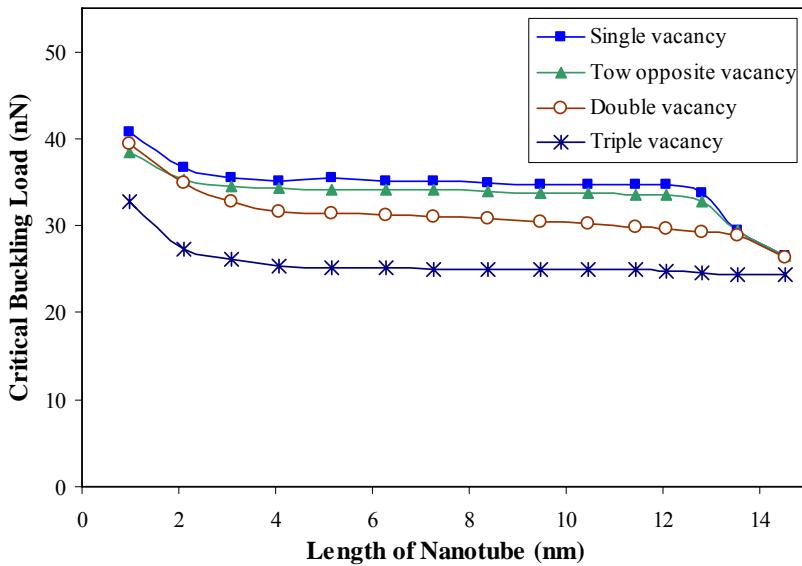
¹ - Global

کمانش به صورت محلی و در اطراف عیب اتفاق می‌افتد در حالی که در این طول نانولوله‌های زیگ-زاگ دچار مد کمانشی اویلر می‌گردند.



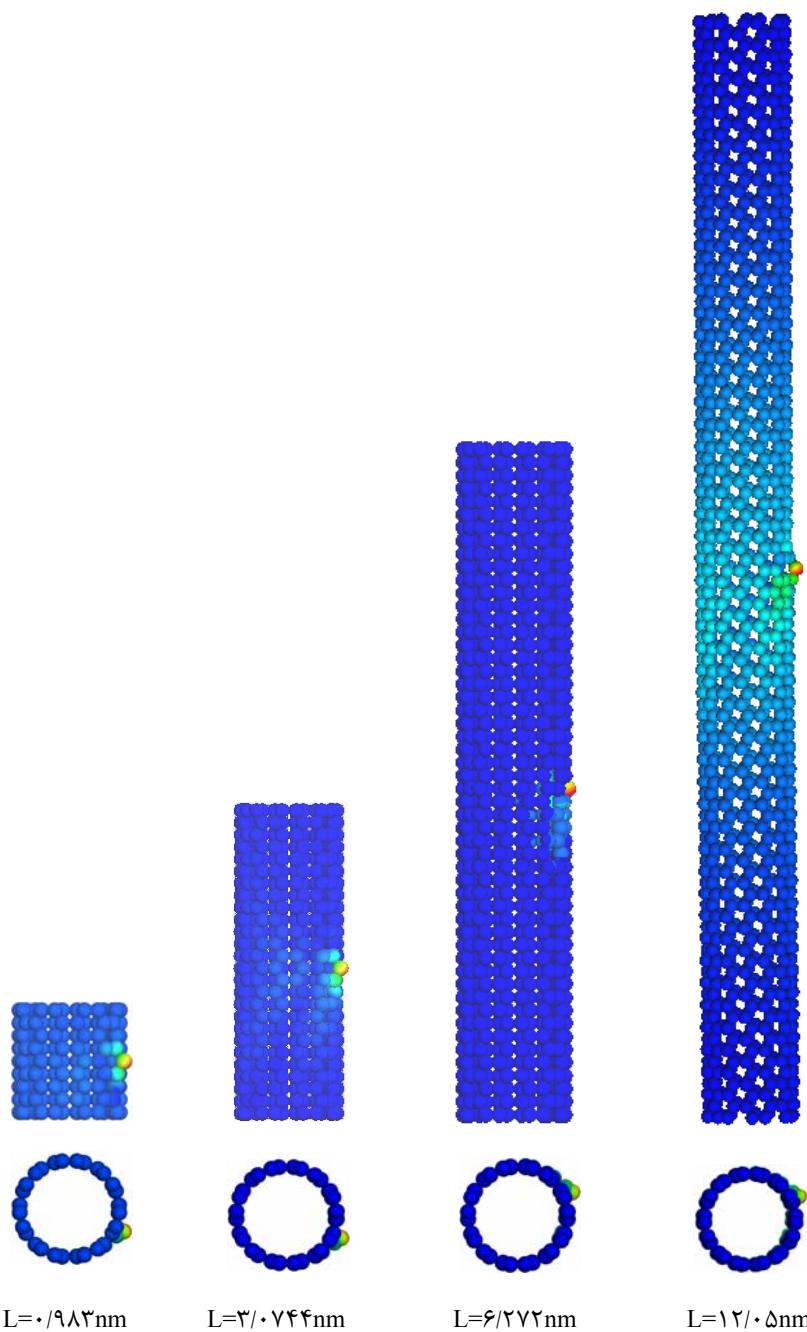
شکل(۱۰) شکل مدهای ناشی از کمانش نانولوله‌های کربنی معیوب زیگ-زاگ(۱۲۰) در طول‌های متفاوت

در شکل (۱۱-۴) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های معیوب آرمچیر آورده شده است. مشاهده می‌شود که در اینجا نیز روند تغییرات برای نانولوله‌های معیوب آرمچیر مانند نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ می‌باشد با این تفاوت که کمانش کلی برای نانولوله‌های آرمچیر دیرتر اتفاق می‌افتد. در فصل بعد با مقایسه‌ی نمودارهای آنها این مسئله به طور کامل مورد بررسی قرار می‌گیرد.

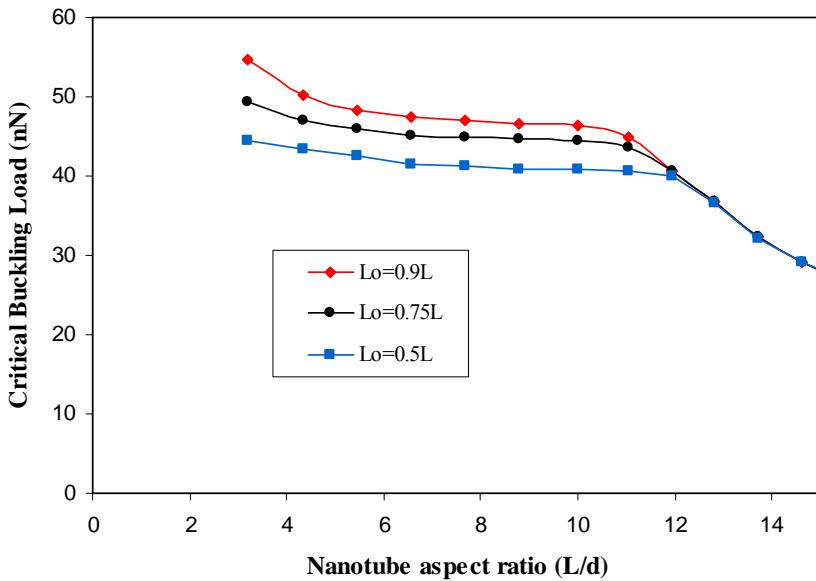


شکل (۱۱-۴) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های معیوب آرمچیر

در ادمه به منظور بررسی تأثیر وجود عیب در نقاط مختلف نانولوله، مکان آن را در فواصل $0/5L$ ، $0/75L$ و $0/9L$ از محل اعمال بار برای نانولوله‌های زیگ-زاگ در نظر گرفته‌ایم که در شکل (۱۳-۴) آورده شده است. با توجه به شکل می‌توان دید که تغییر در مکان عیب تأثیرات قابل توجهی بر بار کمانش می‌گذارد. همچنین مشاهده می‌شود با آنکه مکان عیب در طول نانولوله متفاوت است؛ اما با افزایش طول نانولوله، نمودارهای مربوط به هر یک در مکان مشخصی به یکدیگر می‌پیوندند. این نیز بدان معناست که در این طول (برای نانولوله‌های کربنی زیگ-زاگ با عیب تهی جای منفرد در طول $11/36\text{nm}$) عیوب تأثیر خود را از دست می‌دهند و می‌توان از وجود عیب در نانولوله صرف نظر نمود.

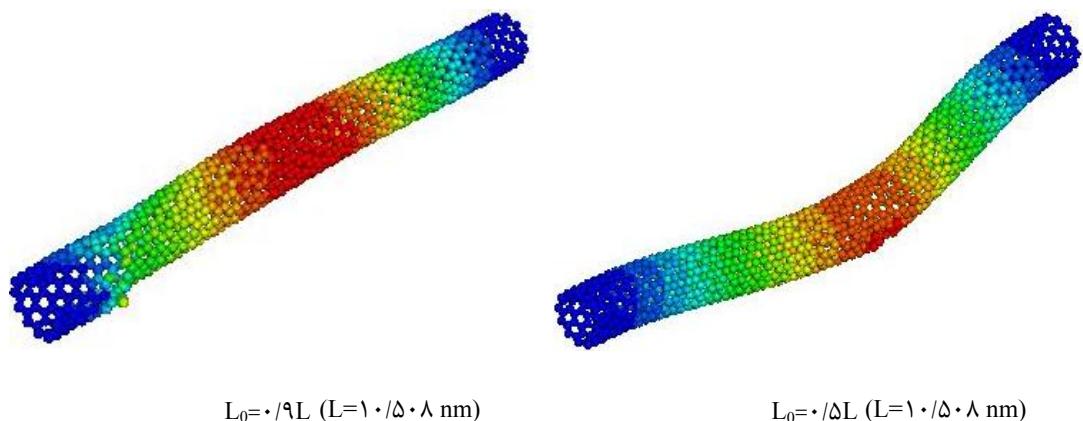


شکل(۱۲-۴) شکل مدهای ناشی از کمانش نانولله‌های کربنی معیوب آرمچیر(۷,۷) در طول‌های مختلف

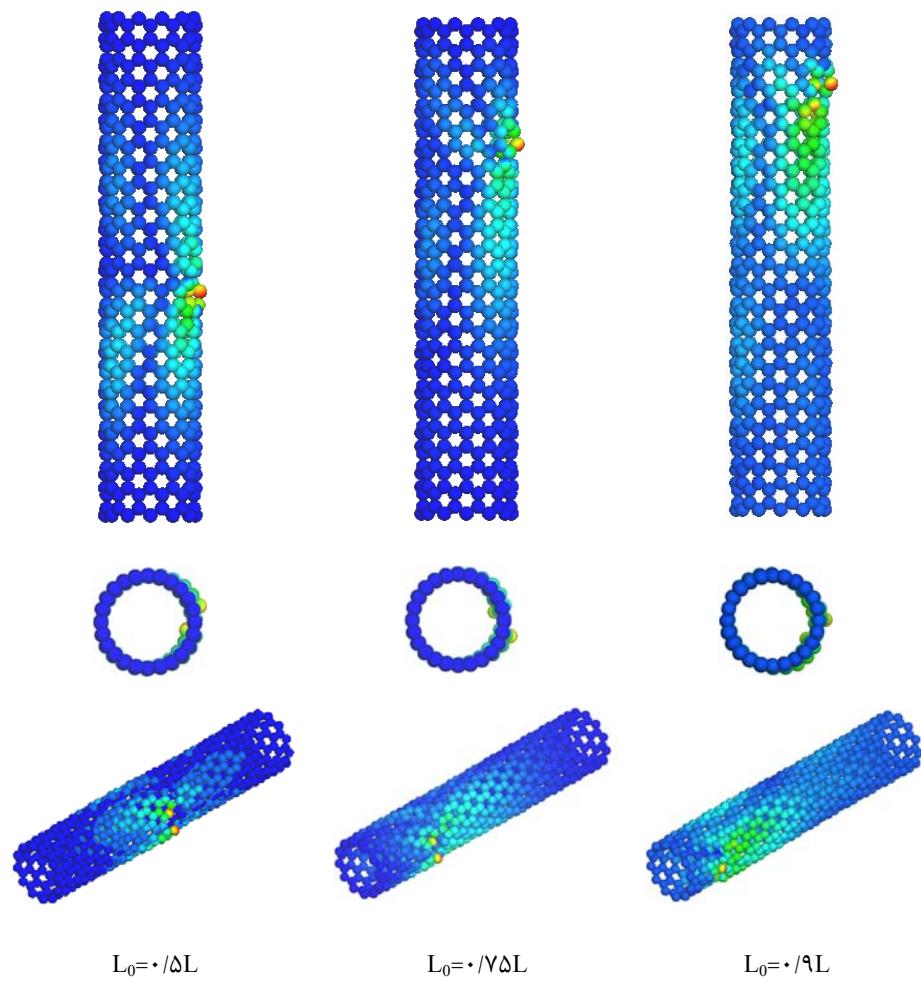


شکل(۱۳-۴) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نanolوله‌های معیوب زیگ-زاگ(۱۲،۰) با در نظر گرفتن مکان عیب

در شکل‌های (۱۴-۴) و (۱۵-۴) شکل مدهای مربوط به کمانش نanolوله‌های زیگ-زاگ با در نظر گرفتن مکان عیب برای دو طول مختلف از نanolوله‌ها آورده شده است. در شکل (۱۴-۴) مشاهده می‌گردد، که برای این طول از نanolوله($L=50.8\text{ nm}$) تغییر در مکان عیب سبب ایجاد تغییر در شکل مده کمانش می‌شود؛ به طوریکه با جابجا کردن ترک از مکان $L_0=5/9\text{ L}$ به $L_0=9/5\text{ L}$ شکل مده کمانش محلی در نanolوله اتفاق می‌افتد به صورتی که نanolوله هم دچار کمانش کلی می‌شود و هم دچار جدیدی در نanolوله اتفاق می‌افتد. لازم به ذکر است که این شکل مده کمانش تنها در این طول کمانش محلی، در اطراف عیب می‌گردد. نیز می‌توان دید که با جابجا از عیب به وجود می‌آید؛ در طول‌های کوتاه‌تر کمانش به صورت محلی و در طول‌های بزرگ‌تر به صورت مده کمانش اویر(کلی) اتفاق می‌افتد. در شکل (۱۵-۴) نیز می‌توان دید که با جابجا کردن مکان عیب تغییر محسوسی در شکل مدهای کمانش آنها ایجاد نمی‌شود و در تمامی آنها کمانش به صورت محلی اتفاق می‌افتد.



شکل(۱۴) مدهای ناشی از کمانش نانولوله‌های کربنی معیوب زیگ-زاگ(12,0) با در نظر گرفتن مکان عیب



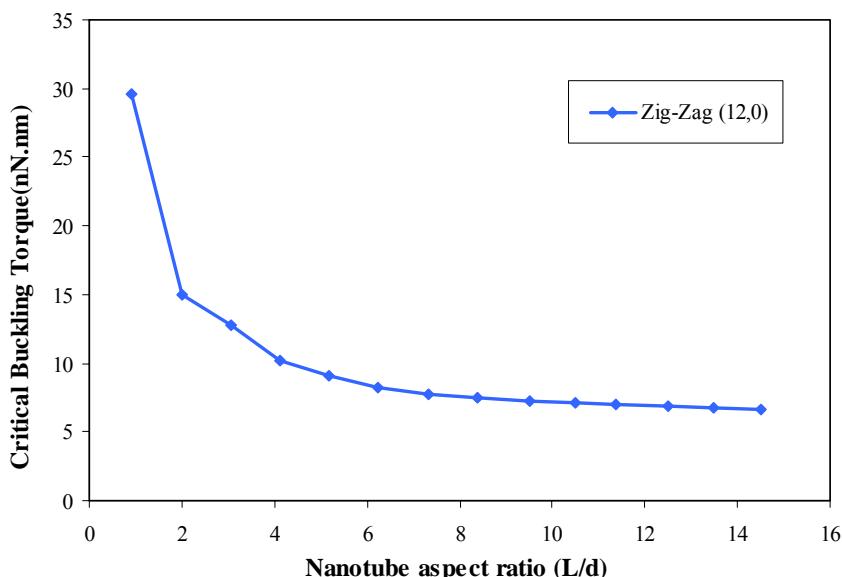
شکل(۱۵) مدهای ناشی از کمانش نانولوله‌های کربنی معیوب زیگ-زاگ(12,0) با در نظر گرفتن مکان عیب

۲-۴- نتایج حاصل از کمانش نانولوله‌های کربنی تحت ممان پیچشی

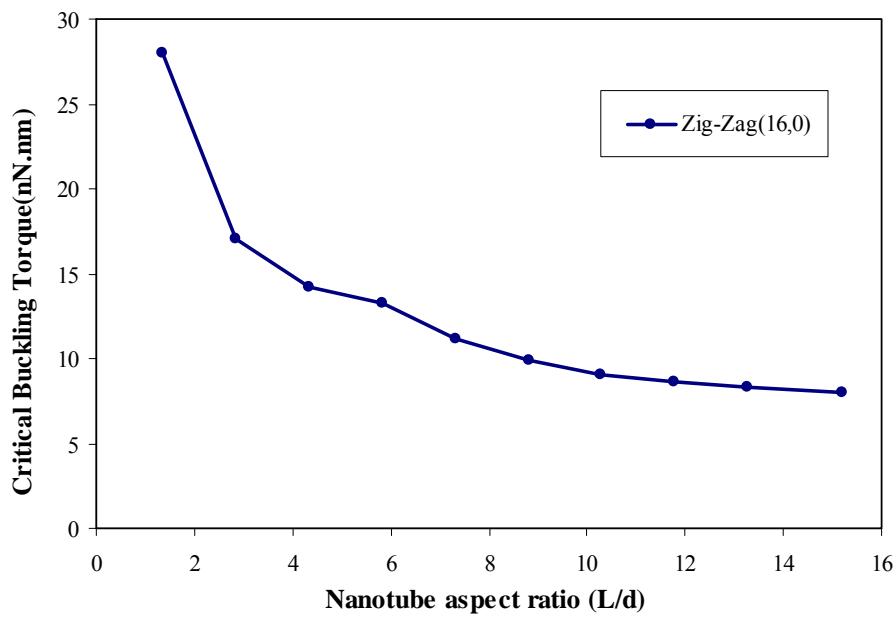
در این قسمت نیز به منظور نشان دادن صحت مدل ارائه شده، علاوه بر آنکه ممان پیچشی بحرانی در نمودارها آورده شده است، زاویه‌ی پیچش بحرانی متناظر با آن نیز مورد بررسی قرار گرفته است.

۱-۲-۴- کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی سالم

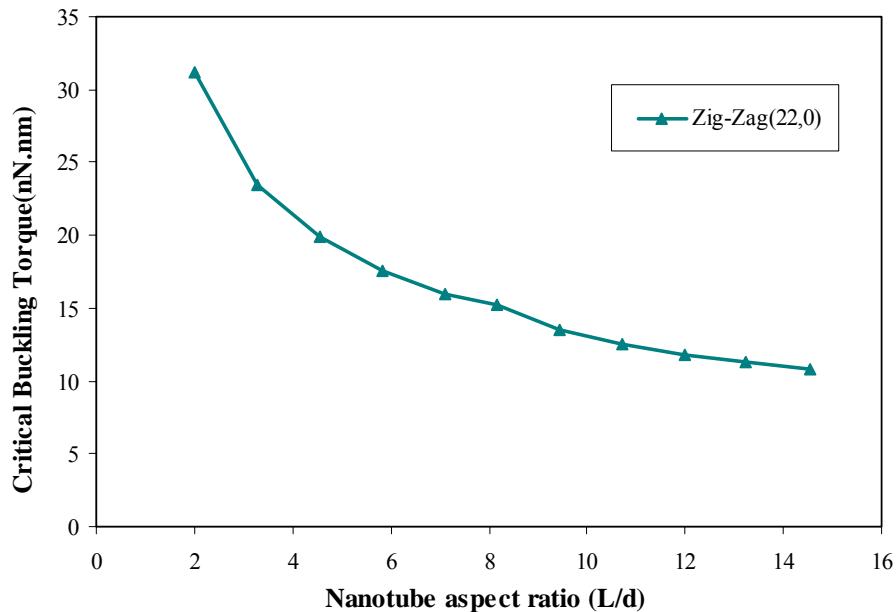
در شکل‌های (۱۶-۴)، (۱۷-۴) و (۱۸-۴) به ترتیب نمودارهای ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰)، (۱۶،۰) و (۲۲،۰) نشان داده شده است. همانطور که دیده می‌شود در تمامی آنها با افزایش طول نانولوله از میزان ممان بحرانی کاسته می‌شود که این میزان کاهش در طول‌های کوتاه محسوس‌تر می‌باشد. با افزایش طول نانولوله‌ها تغییر در مقدار ممان بحرانی برای هر یک از آنها به مقدار زیادی کاهش می‌یابد؛ به نحوی که نمودارها تقریباً به خط راست تبدیل می‌شوند. در شکل‌های (۱۹-۴)، (۲۰-۴) و (۲۱-۴) نیز نمودار زاویه‌ی پیچش بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای این نانولوله‌ها آورده شده است. با توجه به شکل‌ها می‌توان دید که برای همه‌ی آنها با افزایش طول نانولوله، زاویه‌ی پیچش نیز افزایش می‌یابد.



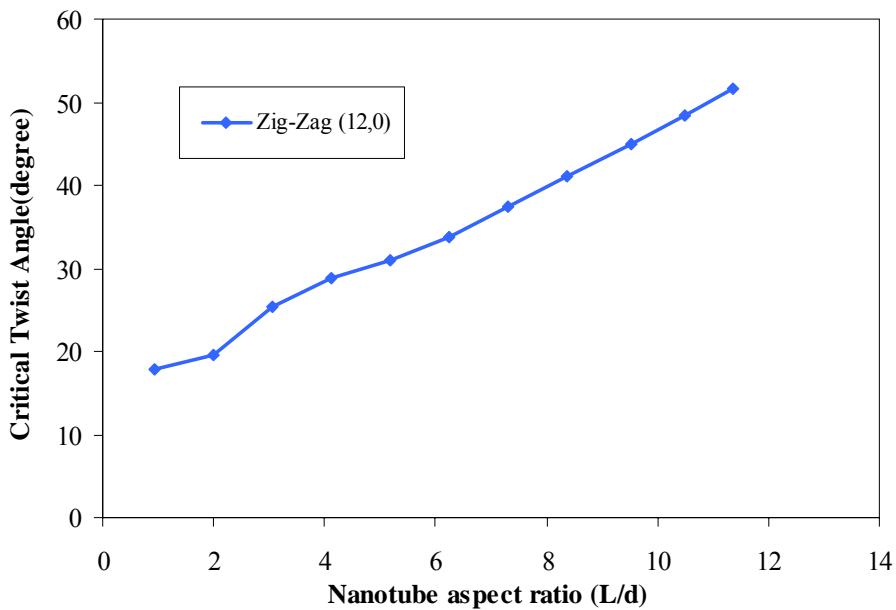
شکل(۱۶-۴) نمودار ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰)



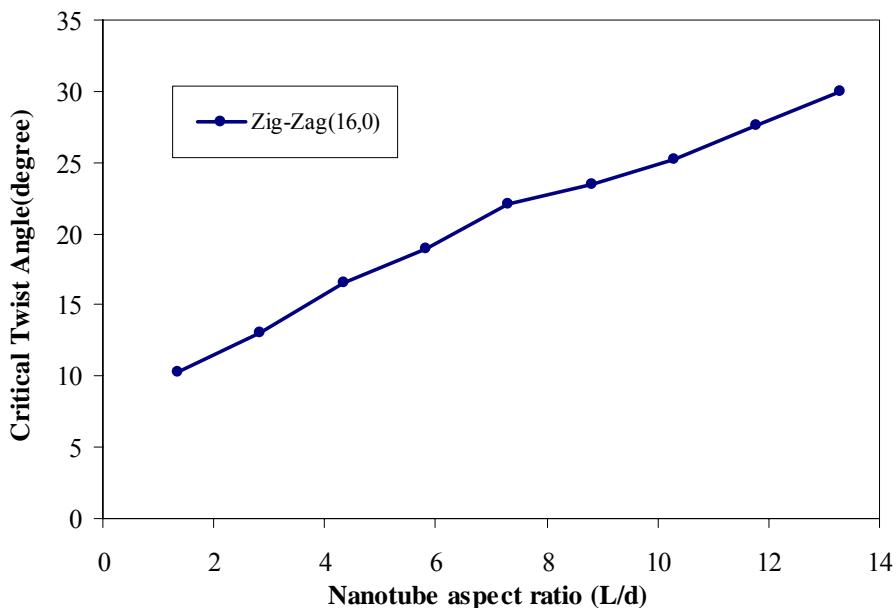
شکل(۱۷-۴) نمودار ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۶,۰)



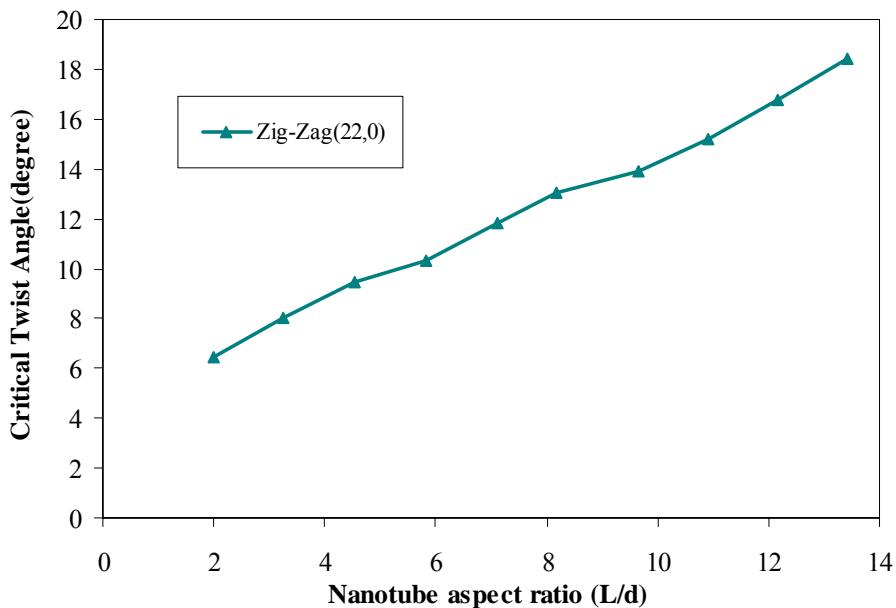
شکل(۱۸-۴) نمودار ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۲۲,۰)



شکل(۱۹-۴) نمودار زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۲،۰)

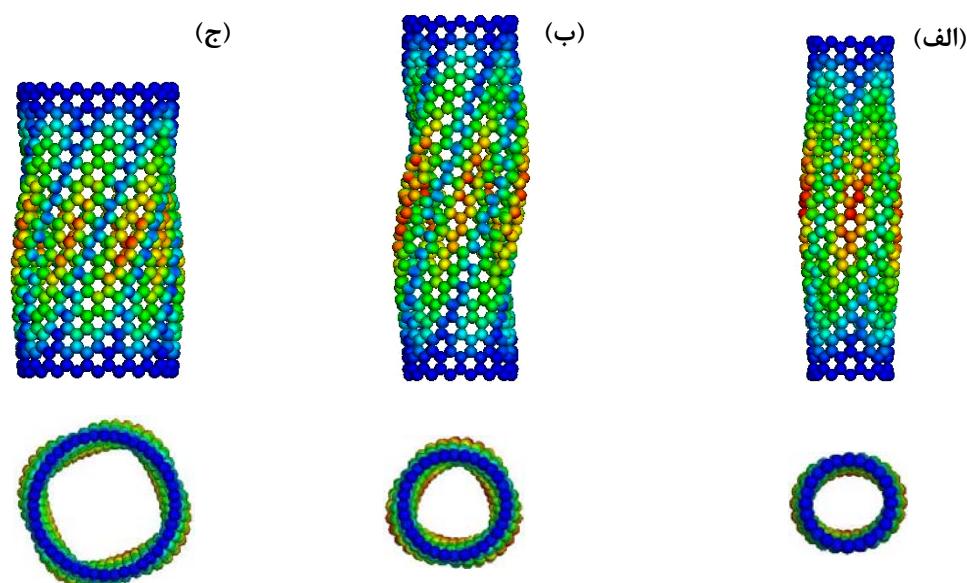


شکل(۲۰-۴) نمودار زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های زیگ-زاگ (۱۶،۰)



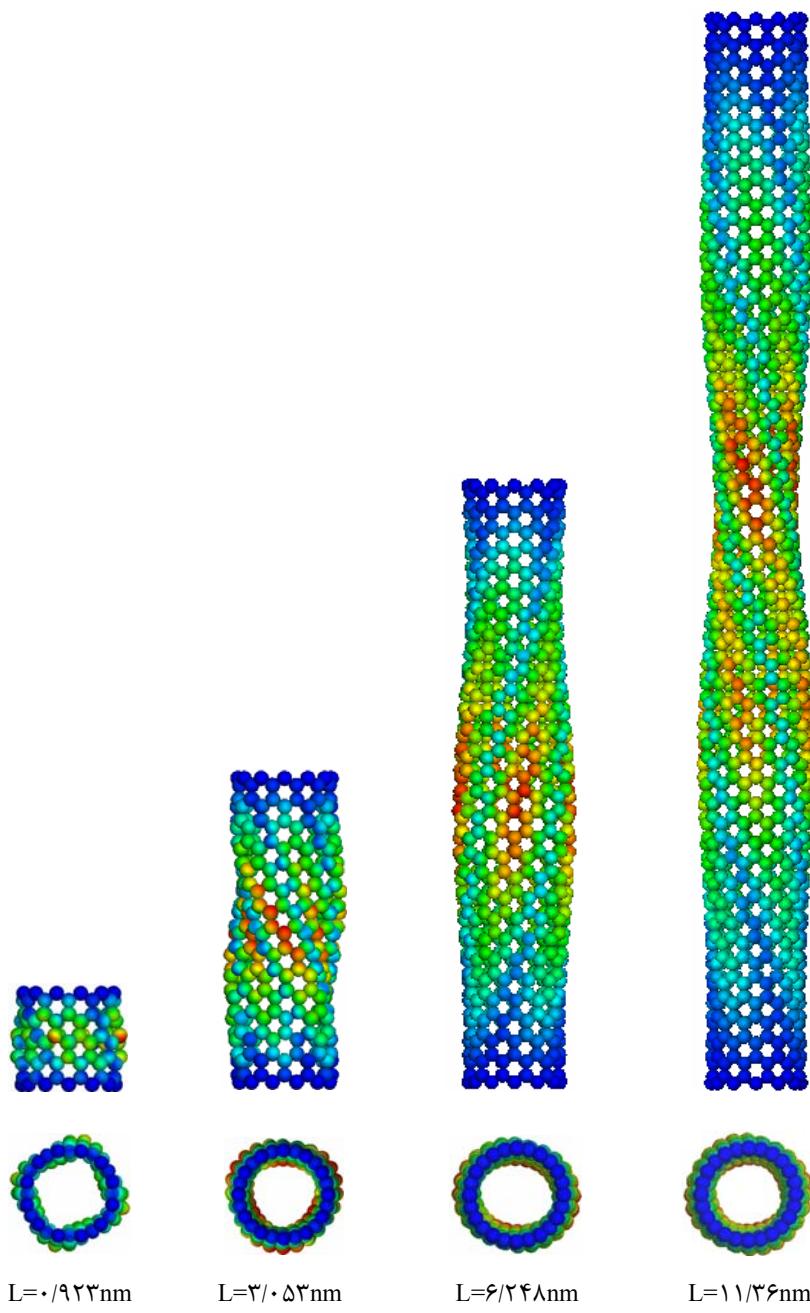
شکل(۲۱-۴) نمودار زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نanolله‌های زیگ-زاگ (۲۰۰).

به منظور مقایسه‌ی شکل مدهای کمانش پیچشی نanolله‌های کربنی در قطرهای مختلف، شکل(۴-۲۰) آورده شده است. می‌توان مشاهده نمود که با افزایش قطر بر تعداد موج‌های ایجاد شده روی دیواره‌ی نanolله افزوده شده و تعداد آن از دو موج به چهار موج تغییر پیدا کرده است.



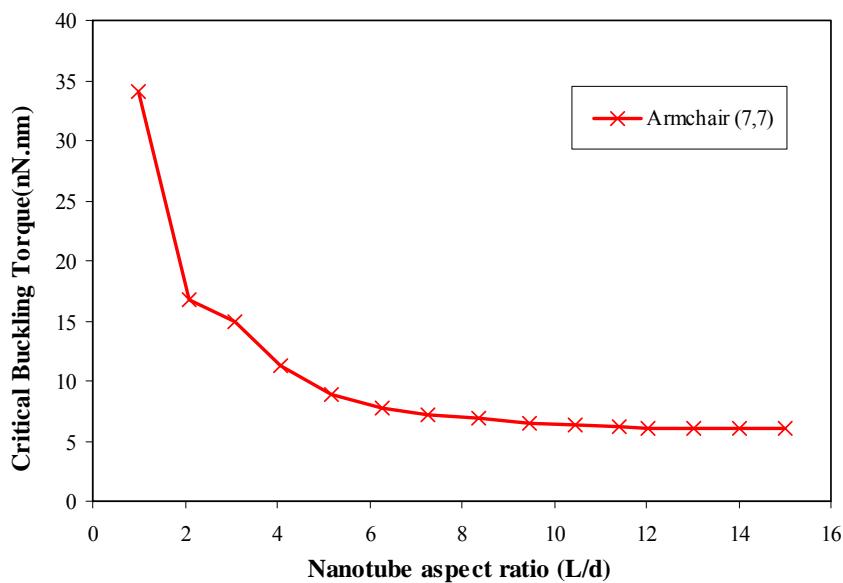
شکل(۲۲-۴) شکل مدهای ناشی از کمانش نanolله‌های کربنی زیگ-زاگ. الف: (۱۲,۰)، ب: (۱۶,۰)، ج: (۲۰,۰).

در شکل (۲۳-۴) می‌توان شکل مدهای مربوط به کمانش پیچشی نanolوله‌های کربنی زیگ-زاگ در طول‌های متفاوت را مشاهده نمود. مشاهده می‌گردد که با افزایش طول نanolوله از تعداد موج‌ها کاسته می‌شود ولی مقدار پیچیدگی در طول نanolوله افزایش می‌یابد.

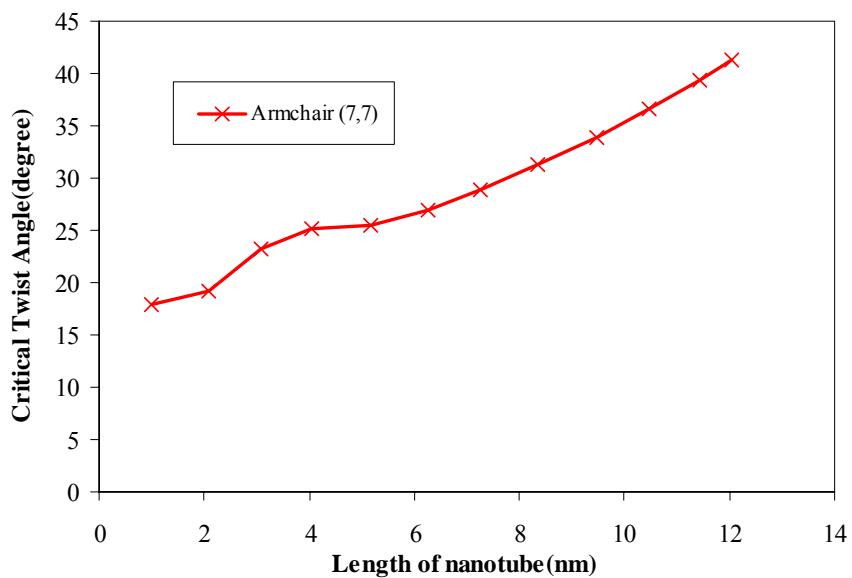


شکل (۲۳-۴) شکل مدهای ناشی از کمانش پیچشی نanolوله‌های کربنی زیگ-زاگ (۱۲،۰) در طول‌های متفاوت

شکل‌های (۲۴-۴) و (۲۵-۴) نیز نمودارهای مربوط به کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی آرمچیر را نشان می‌دهند. همانطور که مشاهده می‌شود روند تغییرات در این نانولوله‌ها مشابه تغییرات در نانولوله‌های زیگ-زاگ می‌باشد.

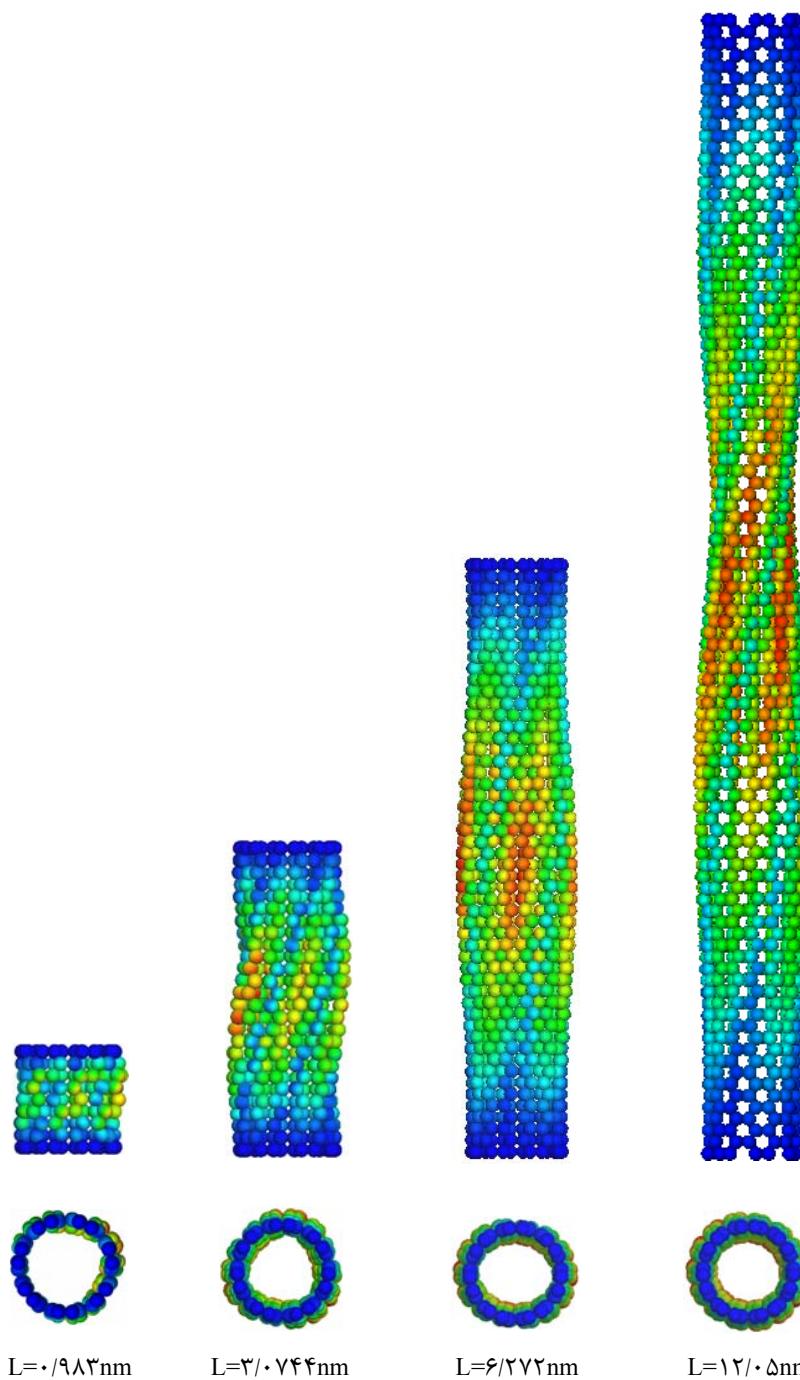


شکل(۲۴-۴) نمودار ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های آرمچیر(۷,۷)



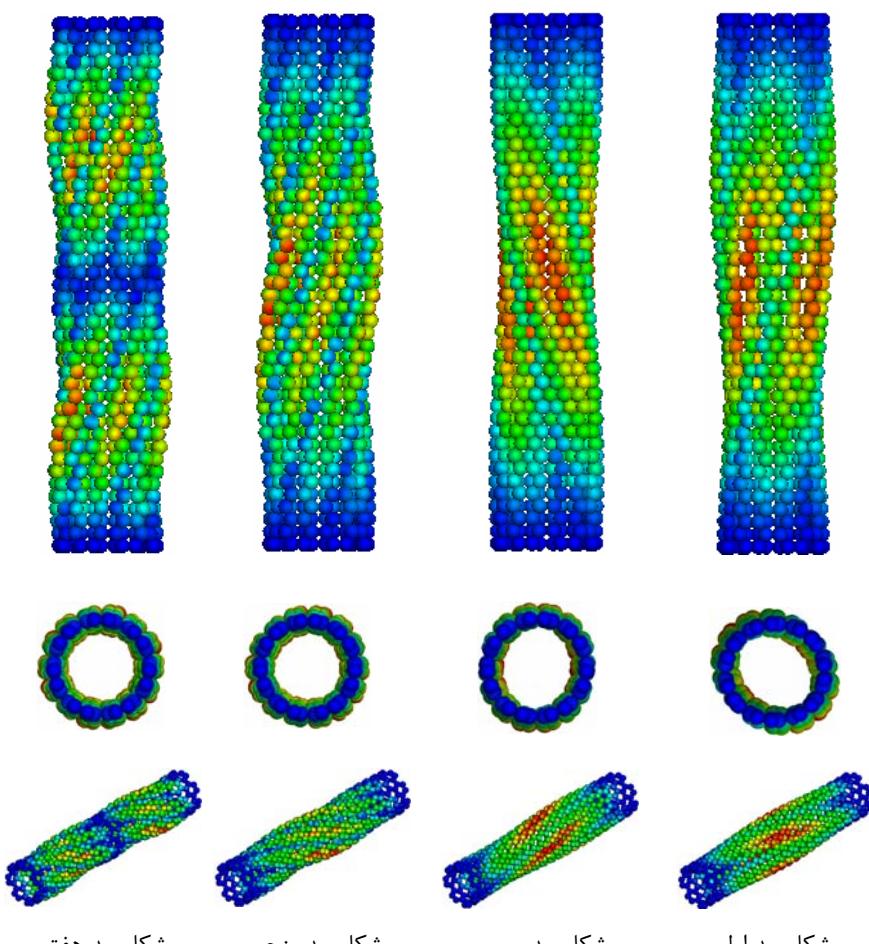
شکل(۲۵-۴) نمودار زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های آرمچیر(۷,۷)

شکل(۲۶-۴) شکل مدهای مربوط به کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی آرمچیر را در طول‌های مختلف نشان می‌دهد. در اینجا نیز مشاهده می‌گردد که با افزایش طول نانولوله از تعداد موج‌ها کاسته می‌شود و مقدار پیچیدگی در طول نانولوله افزایش می‌یابد.



شکل(۲۶-۴) شکل مدهای ناشی از کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی آرمچیر(۷،۷) در طول‌های مختلف

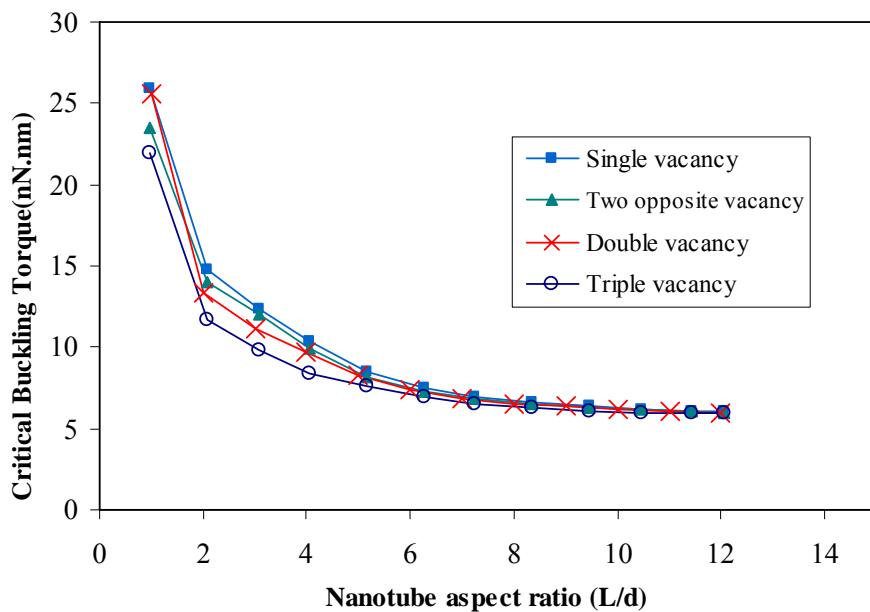
در شکل (۲۷-۴) نیز شکل مدهای اول، سوم، پنجم و هفتم برای نانولوله‌ی معیوب آرمچیر(۷,۷) با طول $5/165\text{nm}$ نشان داده شده است. از آنجا که شکل مدهای اول تا هشتم یکی درمیان با یکدیگر مشابه می‌باشند، از آوردن شکل مدهای دیگر صرف نظر شده است. با توجه به شکل مشاهده می‌گردد که روند تغییرات به صورتی است که در شکل مدهای بالاتر بر تعداد موج‌های روی دیواره‌ی نانولوله افزوده می‌گردد به صورتی که در شکل مد هفتم دو ردیف موج پیچشی مجزا بر روی دیواره ایجاد می‌گردد.



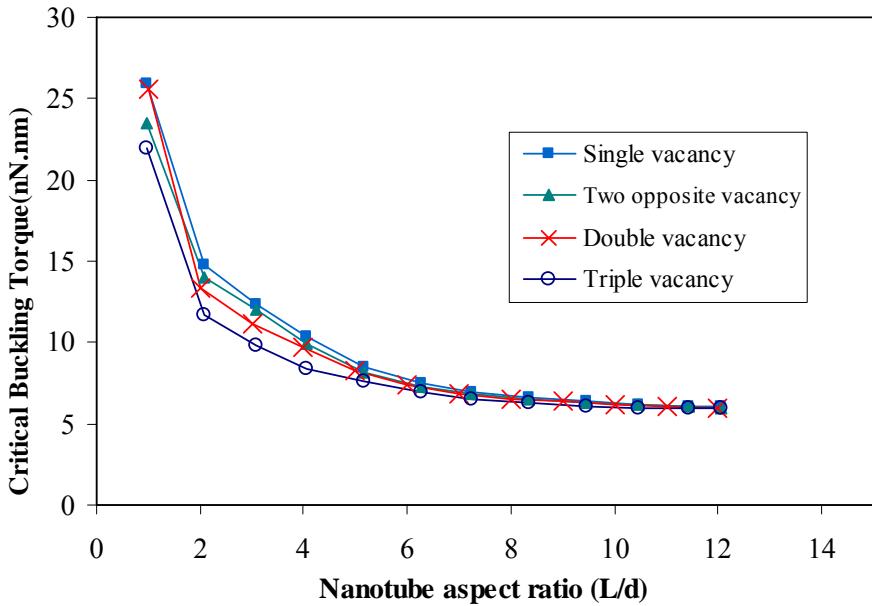
شکل (۲۷-۴) شکل مدهای اول، سوم، پنجم و هفتم ناشی از کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی آرمچیر(۷,۷) در طول $5/165\text{ nm}$

۴-۲-۲- کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی معیوب

در این بخش کمانش نانولوله‌های کربنی معیوب را تحت بار پیچشی مورد بررسی قرار می‌دهیم. همانطور که مشاهده می‌شود در شکل‌های (۲۸-۴) و (۲۹-۴) نمودارهای ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ و آرمچیر آورده شده است. با توجه به شکل‌ها می‌توان دید که عیب تهی جای سه گانه بیشترین تأثیر را بر ممان بحرانی می‌گذارد و با تغییر نوع عیب از تهی جای سه گانه به تهی جای منفرد بر مقدار ممان افزوده می‌شود که البته این افزایش ممان در طول‌های کوتاه محسوس‌تر است. با افزایش طول مقادیر ممان بحرانی به یکدیگر نزدیک شده و به سمت یک مقدار میل می‌کنند.



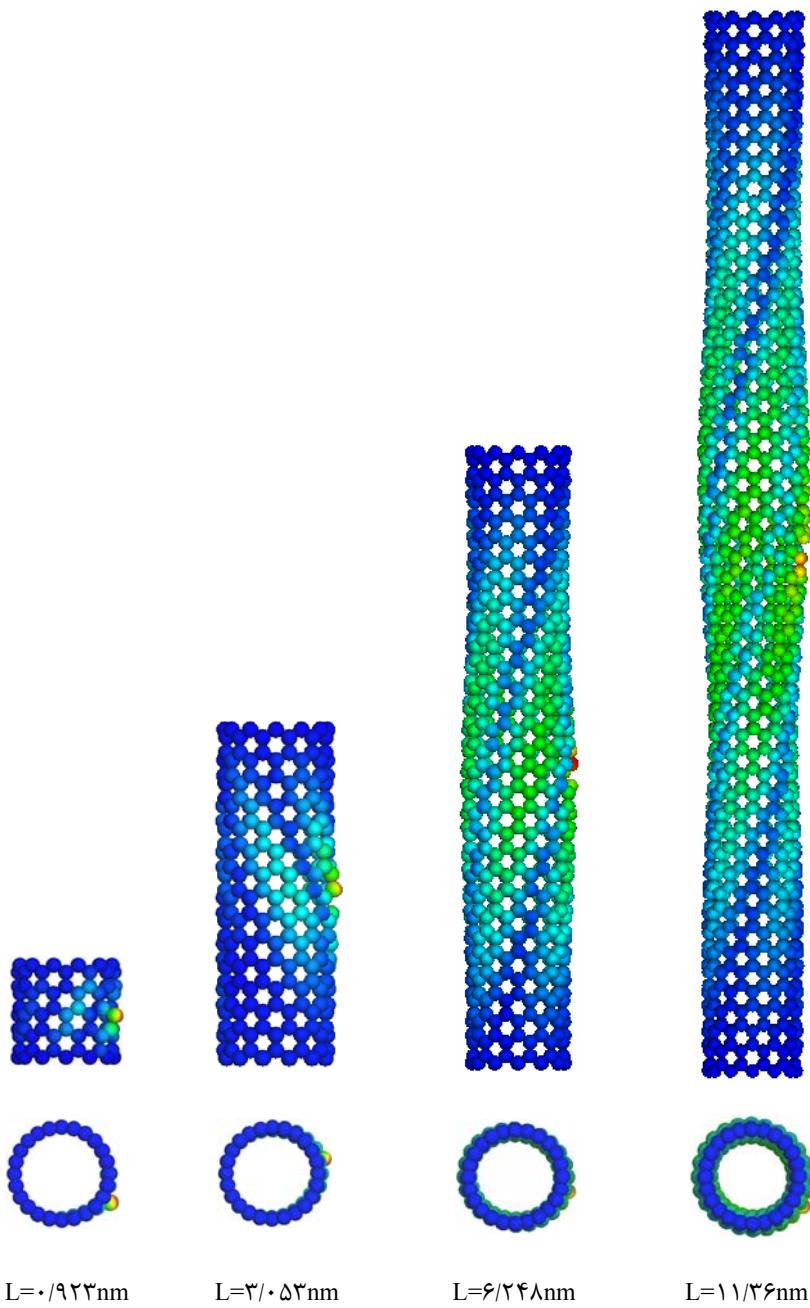
شکل (۲۸-۴) نمودار ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های معیوب زیگ-زاگ (۱۲۰،۰)



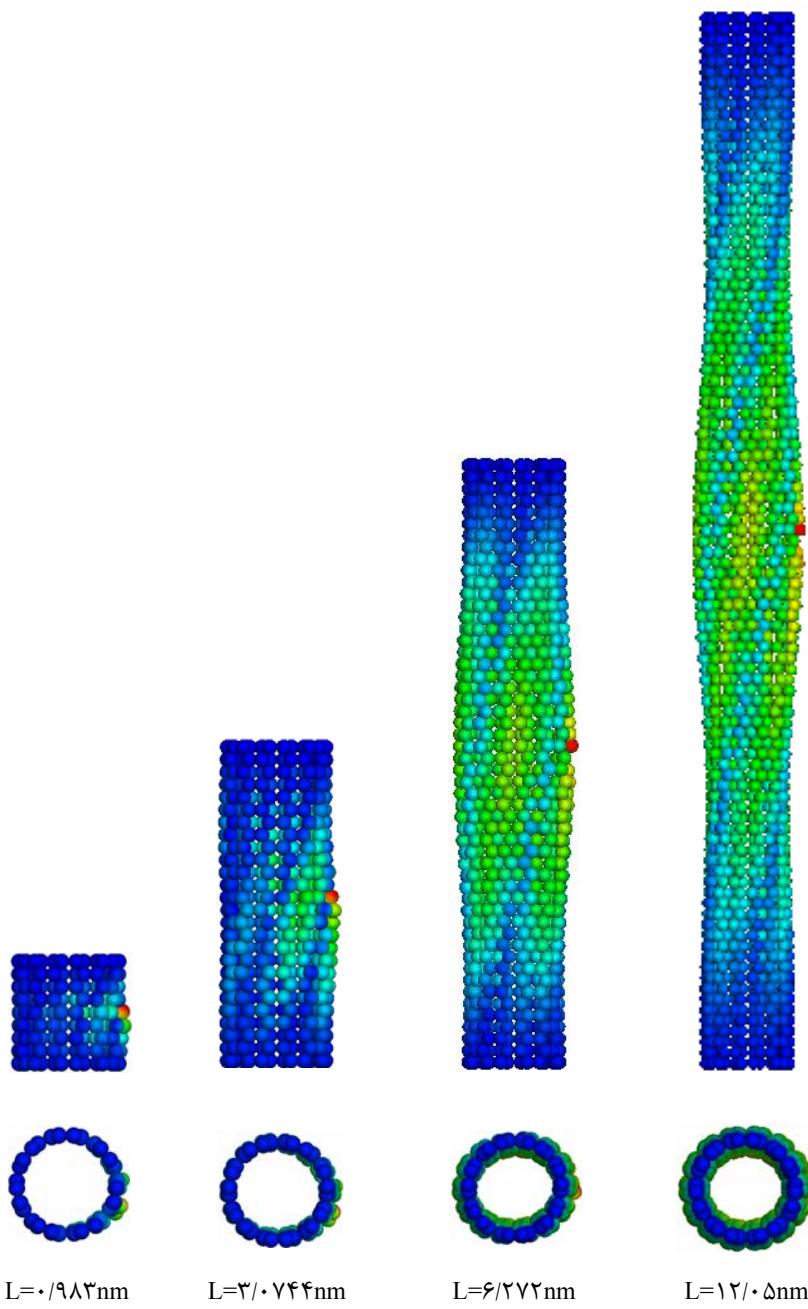
شکل(۴-۲۹) نمودار ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نanolوله‌های معیوب آرمچیر(۷،۷)

در شکل(۴-۳۰) شکل مدهای کمانش پیچشی برای طول‌های مختلف از نanolوله‌های معیوب زیگ-زاگ نشان داده شده است. لازم به ذکر است که عیب موجود در این نanolوله‌ها از نوع تهی جای منفرد می‌باشد. مشاهده می‌شود که در طول‌های کوتاه کمانش بیشتر به صورت محلی و در اطراف عیب اتفاق می‌افتد و با افزایش طول نanolوله مدد کمانش به سمت کمانش کلی پیش می‌رود که خود را به صورت پیچش در طول نanolوله نشان می‌دهد؛ البته با توجه به شکل مدهای بدست آمده می‌توان نتیجه گرفت که در تمامی طول‌ها هر دو مدد کمانش یعنی محلی و کلی اتفاق می‌افتد و با افزایش طول از اثرات وجود عیب در نanolوله کاسته شده و شکل مدها به صورت کلی پدیدار می‌شوند.

در شکل(۴-۳۱) نیز شکل مدهای کمانش پیچشی برای طول‌های مختلف از نanolوله‌های معیوب آرمچیر آورده شده است. مشاهده می‌گردد که در اینجا نیز روند تغییرات مانند نanolوله‌های زیگ-زاگ می‌باشد به این صورت که در طول‌های کوتاه کمانش بیشتر به طور محلی و در اطراف عیب اتفاق می‌افتد و با افزایش طول نanolوله مدد کمانش به سمت کمانش کلی پیش می‌رود و خود را به صورت پیچش در طول نanolوله نشان می‌دهد.



شکل (۴-۳۰) مدهای ناشی از کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی معیوب زیگ-زاگ (۱۲۰°) در طول‌های متفاوت



شکل(۳۱-۴) شکل مدهای ناشی از کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی معیوب آرمچیر(۷,۷) در طول‌های متفاوت

۳-۴- نتایج حاصل از کمانش پوسته‌های استوانه‌ای(مدل پیوسته) تحت فشار

محوری

۱-۳-۴- کمانش پوسته‌های استوانه‌ای سالم

در این بخش به بررسی کمانش مدل پیوسته می‌پردازیم که در حقیقت یک پوسته‌ی استوانه‌ای با ضخامت 0.066 nm و مدول یانگ $5/5\text{ Tpa}$ می‌باشد. در شکل‌های (۳۲-۴) و (۳۳-۴) به ترتیب نمودارهای بار و کرنش بحرانی کمانش برای این پوسته‌ها نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش طول پوسته، بار و کرنش بحرانی کمانش کاهش می‌یابند. با توجه به شکل می‌توان نتیجه گرفت که در طول‌های بلند از سرعت تغییرات در بار و کرنش بحرانی کاسته می‌گردد. همانطور که در شکل دیده می‌شود، علاوه بر نتایج حاصل از مدل پیوسته، نتایج حاصل از روابط اویلر نیز آورده شده است که با افزایش طول پوسته مقادیر بار و کرنش به سمت آنها میل می‌کند. روابط اویلر به صورت

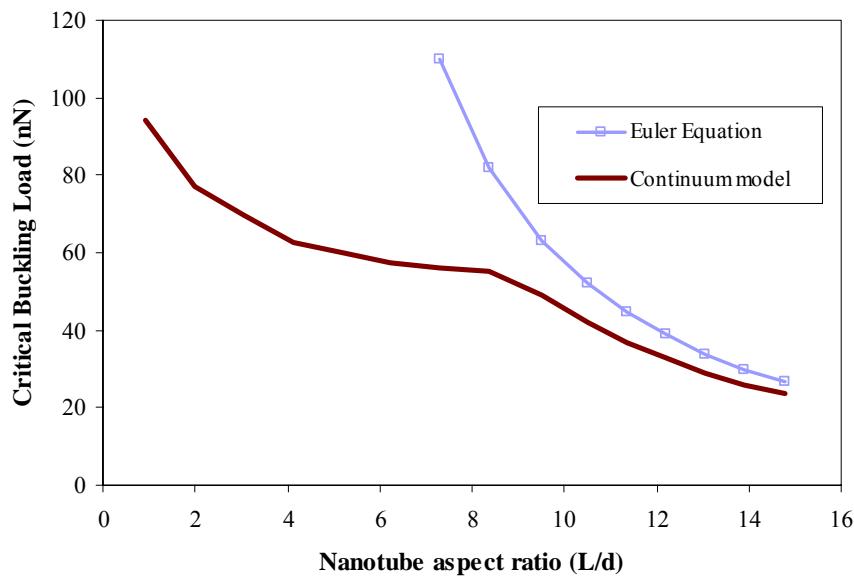
زیر تعریف می‌شوند:

$$P_{cr} = \frac{\pi^2 EI}{(\mu L)^2} \quad (1-5)$$

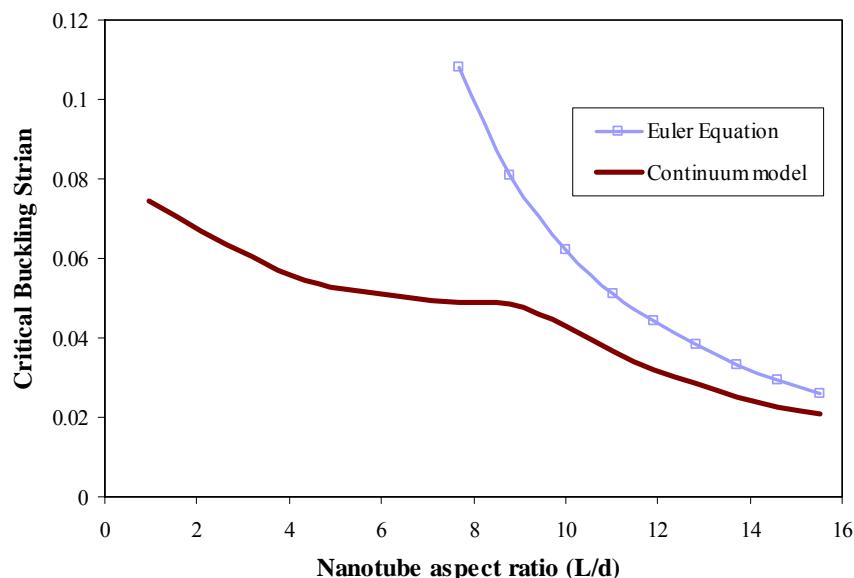
$$\varepsilon_{cr} = \frac{\pi I}{2rt(\mu L)^2} \quad (2-5)$$

که در آنها P_{cr} ، بار بحرانی کمانش و ε_{cr} ، کرنش بحرانی کمانش می‌باشد. مقادیر L ، E ، I ، μ ، r و t نیز به ترتیب مربوط به طول نanolوله، گشتاور لختی مقطع، مدول یانگ، ضریب اصلاح طول، شعاع سطح مقطع(0.475 nm) و ضخامت مؤثر نanolوله(0.34 nm) می‌باشند. لازم به ذکر است که مقادیر اشاره شده در بالا متعلق به خواص واقعی نanolوله‌های کربنی می‌باشد. همچنین باید اشاره کرد با توجه به شرایط مرزی در نظر گرفته شده برای نanolوله‌ها که به صورت دو سرگیردار تعریف شده است، مقدار μ برابر با 0.5 خواهد بود. یادآور می‌شود که مقادیر بار و کرنش بحرانی کمانش با استفاده از مدول یانگ $E=117\text{ Tpa}$ بدست می‌آیند.

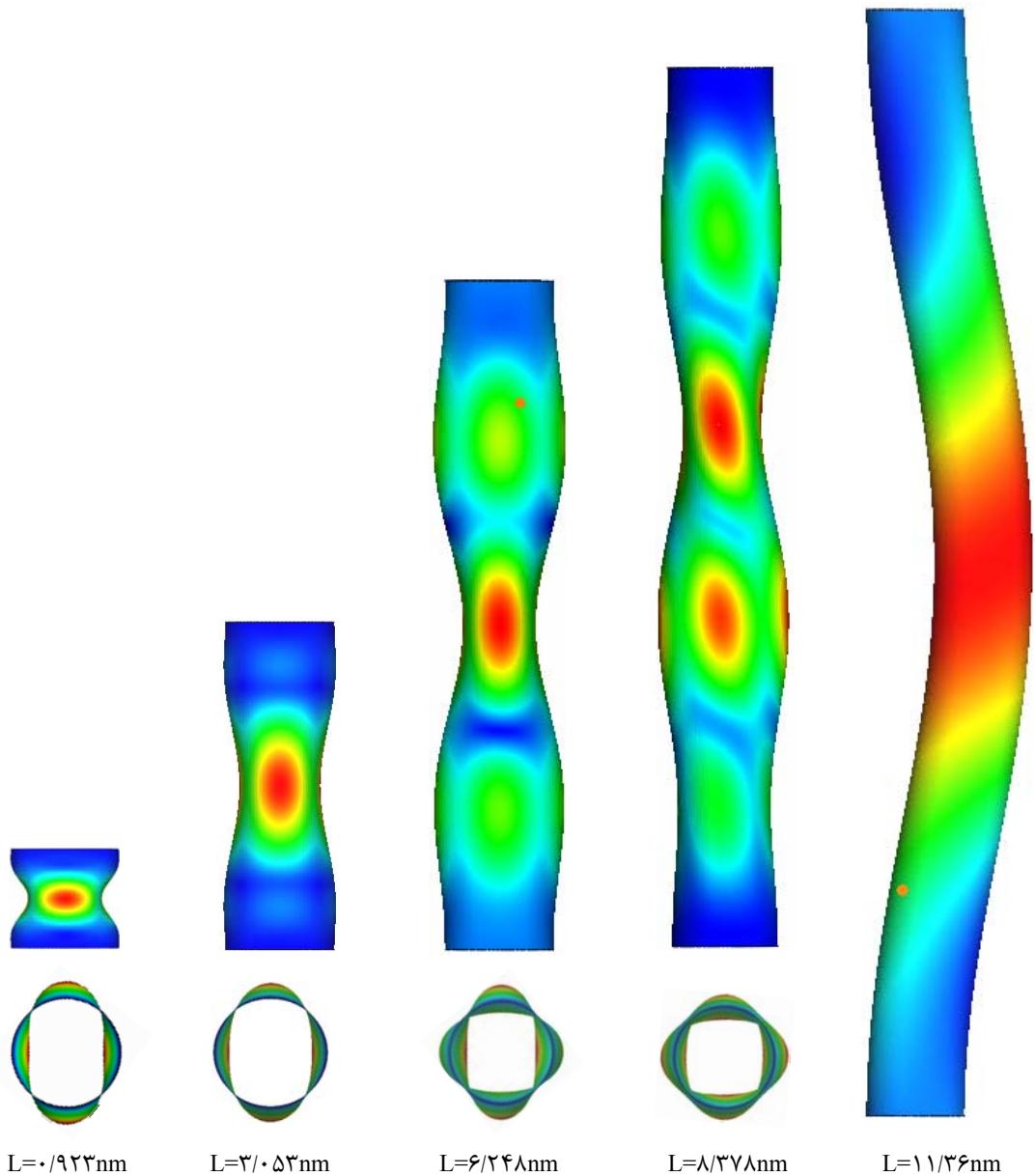
شکل(۳۴-۴) نیز شکل مدهای کمانشی مربوط به این پوسته‌ها را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که در اینجا نیز مانند نanolوله‌های کربنی برای طول‌های کوتاه، مدهای کمانشی خود را به صورت مد پوسته نشان می‌دهند و با افزایش طول نanolوله‌ها، شکل مد کمانش به سمت مد اویلر میل می‌کند.



شکل(۳۲-۴) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای پوسته‌های استوانه‌ای(مدل پیوسته)



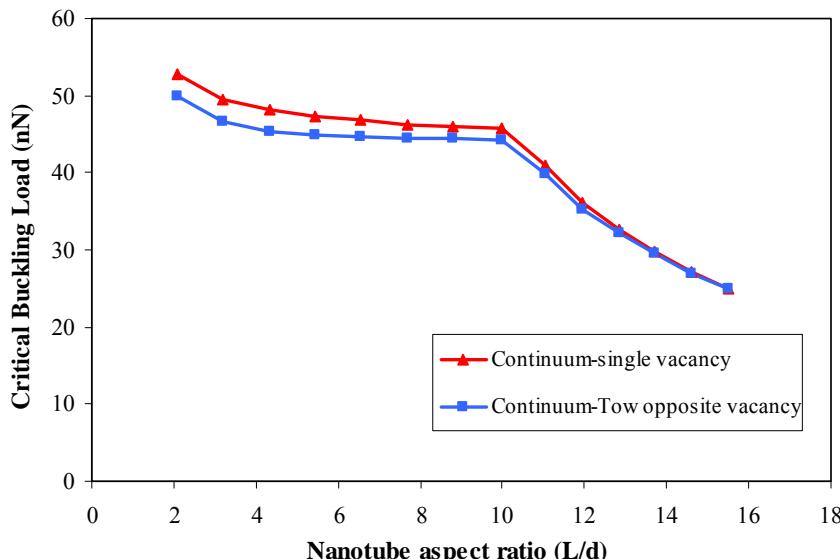
شکل(۳۳-۴) نمودار کرنش بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای پوسته‌های استوانه‌ای(مدل پیوسته)



شکل (۳۴-۴) شکل مدهای ناشی از کمانش پوسته‌های استوانه‌ای (مدل پیوسته) در طول‌های مختلف

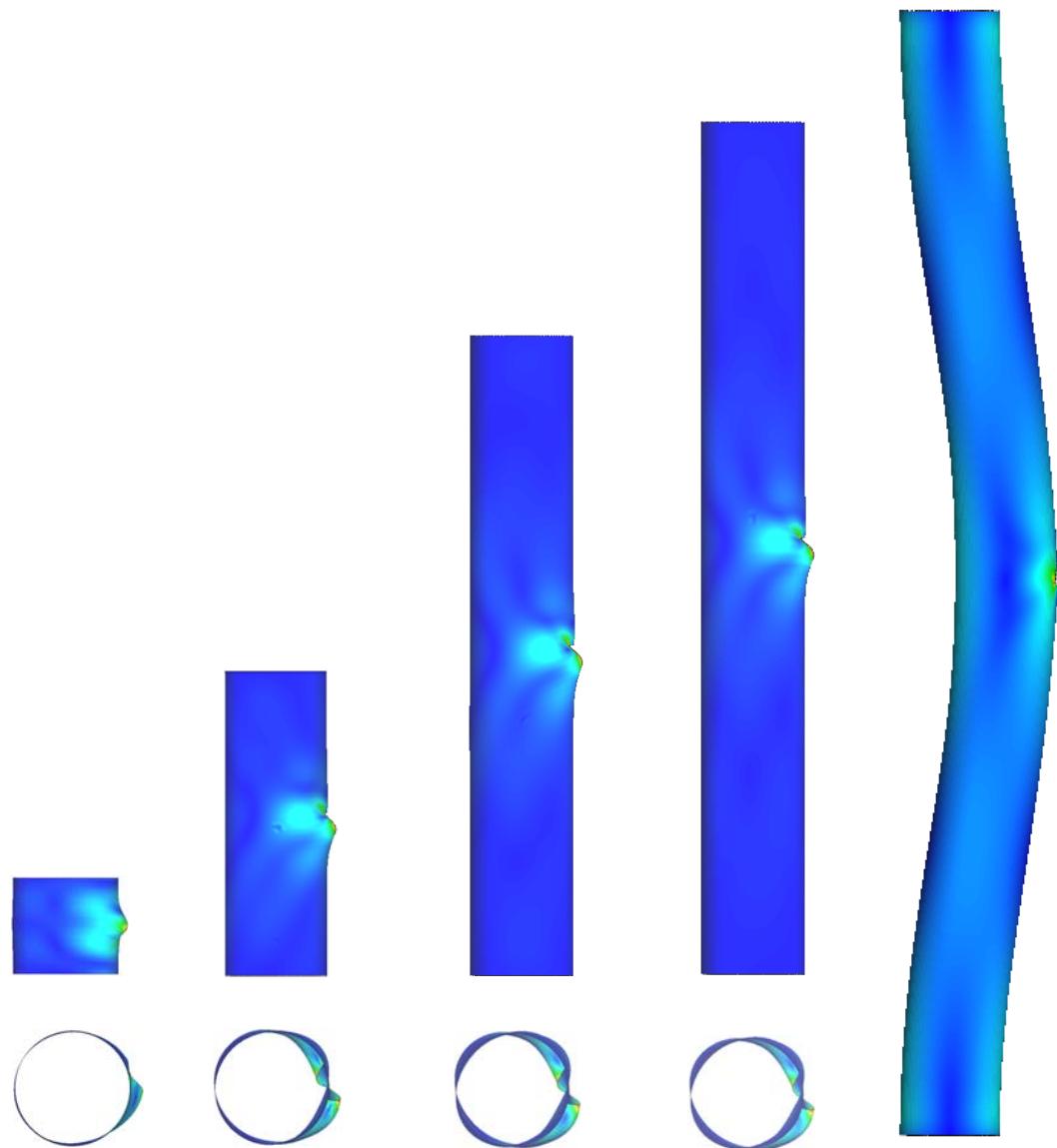
۴-۳-۲- کمانش پوسته‌های استوانه‌ای دارای گشودگی

در شکل (۳۵-۴) نتایج حاصل از کمانش مدل پیوسته، با در نظر گرفتن دو نوع عیب تهی جای منفرد و دو تهی جای منفرد روبروی هم، آورده شده است. همانطور که مشاهده می‌شود در اینجا نیز در نسبت طولی $\frac{L}{D}$ ، برابر با ۱۰، نمودار با شیب بیشتری نسبت به قبل از آن پیش می‌رود که این امر نشان می‌دهد در شکل مدهای کمانش آنها تغییری به وجود آمده است. با توجه به شکل (۳۶-۴) می‌توان دید که استوانه‌های مدل شده در طول‌های بلندتر دیگر دچار کمانش پوسته‌ای نمی‌شوند؛ بلکه مد کمانشی اویلر در آنها اتفاق می‌افتد. همچنین در طول‌های کوتاه، هنگامی که مد کمانشی پوسته اتفاق می‌افتد، کمانش به صورت محلی در مکان عیب، و هنگامی که به مد کمانشی اویلر تبدیل می‌شود دچار کمانش کلی می‌گردد. لازم به ذکر است که در فصل دوم و در شکل (۹-۳) اشاره شد که برای عیوب موجود در نانولوله‌های زیگ-زاگ و آرمچیر به صورت متناظر گشودگی‌های متفاوتی در نظر گرفته شده است؛ اما نتایج نشان می‌دهند که این اختلاف تغییر محسوسی در بار بحرانی آنها ایجاد نمی‌کند و تنها شکل مدهای آنها تا حدی با یکدیگر متفاوت‌اند که در شکل (۳۷-۴) نشان داده شده است.



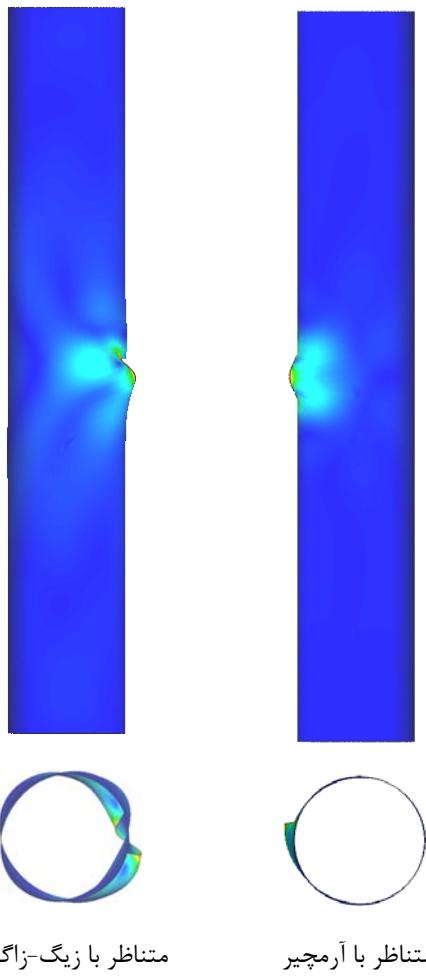
شکل (۳۵-۴) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای

پوسته‌های استوانه‌ای دارای گشودگی (مدل پیوسته)



شکل(۴) ۳۶(۴) شکل مدهای ناشی از کمانش پوسته‌های استوانه‌ای دارای گشودگی(مدل پیوسته) در طول‌های متفاوت

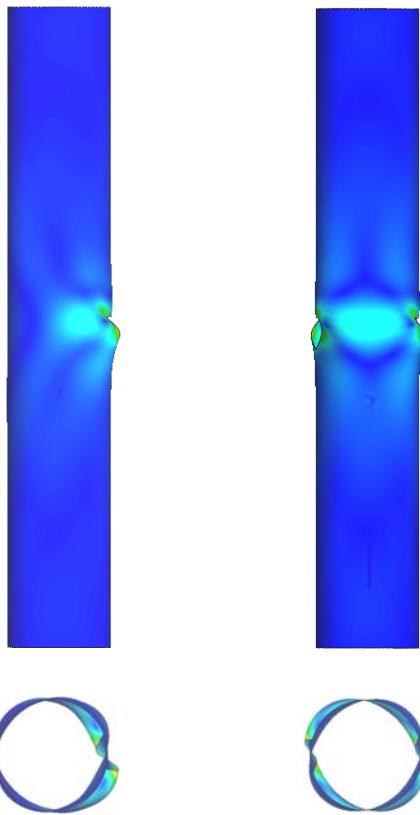
$$L=5/183\text{nm}$$



شکل(۳۷-۴) شکل مدهای ناشی از کمانش پوسته‌های استوانه‌ای دارای گشودگی(مدل پیوسته) با در نظر گرفتن جهت گشودگی

در شکل (۳۰-۴) نیز می‌توان شکل مدهای ناشی از کمانش مدل پوسته‌های استوانه‌ای را برای طول $5/183\text{ nm}$ با در نظر گرفتن دو نوع گشودگی مشاهده نمود. همانطور که از شکل پیداست، شکل مدهای آنها شباهت زیادی به یکدیگر دارند. در حالت تهی جای منفرد، کمانش به صورت متقارن در راستای شعاع افقی و برای حالت دو تهی جای منفرد رو به روی هم، کمانش به صورت متقارن در راستای دو شعاع افقی و عمودی نanolوله اتفاق می‌افتد.

L=5/183nm



نهیجای

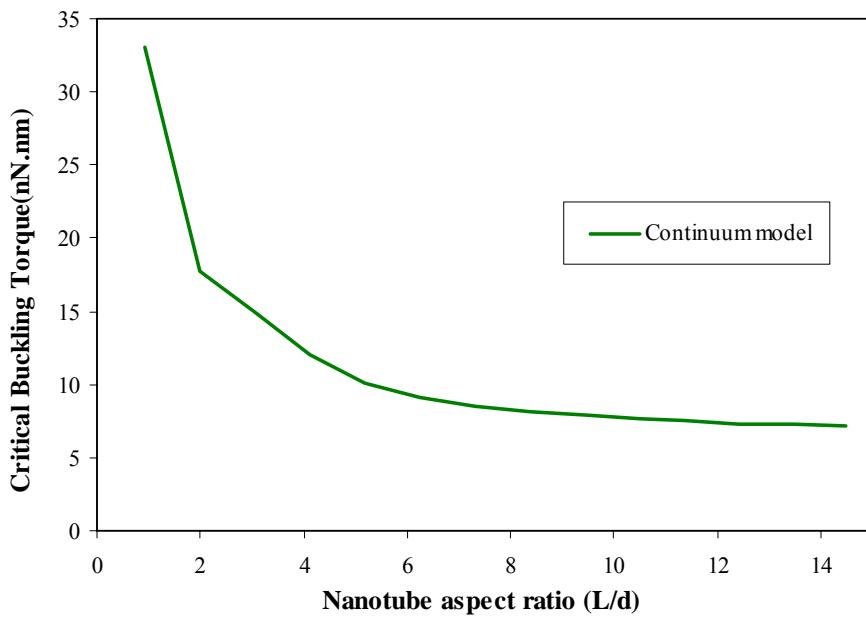
دو نهیجای منفرد رو بروی هم

شکل(۳۸-۴) شکل مدهای ناشی از کمانش پوسته‌های استوانه‌ای دارای گشودگی(مدل پیوسته) با در نظر گرفتن نوع گشودگی

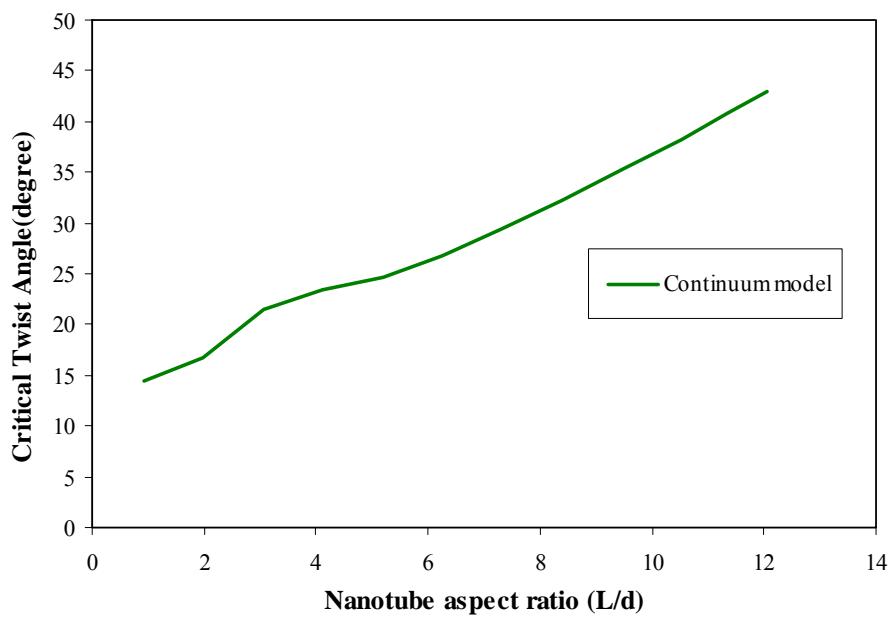
۴-۵- نتایج حاصل از کمانش پوسته‌های استوانه‌ای(مدل پیوسته) تحت ممان پیچشی

۱-۵-۴- کمانش پیچشی پوسته‌های استوانه‌ای سالم

در این قسمت کمانش پوسته‌های استوانه‌ای سالم را تحت بار پیچشی مورد بررسی قرار می‌دهیم. در شکل (۳۹-۴) و (۴۰-۴) به ترتیب نمودارهای ممان و پیچش بحرانی کمانش برای این پوسته‌ها آورده شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش طول از مقدار ممان کاسته شده و بر مقدار پیچش بحرانی افزوده می‌گردد. در اینجا نیز می‌توان دید که برای طول‌های بلند نمودار تقریباً به صورت یک خط راست درآمده و تغییر محسوسی در مقادیر ممان دیده نمی‌شود.

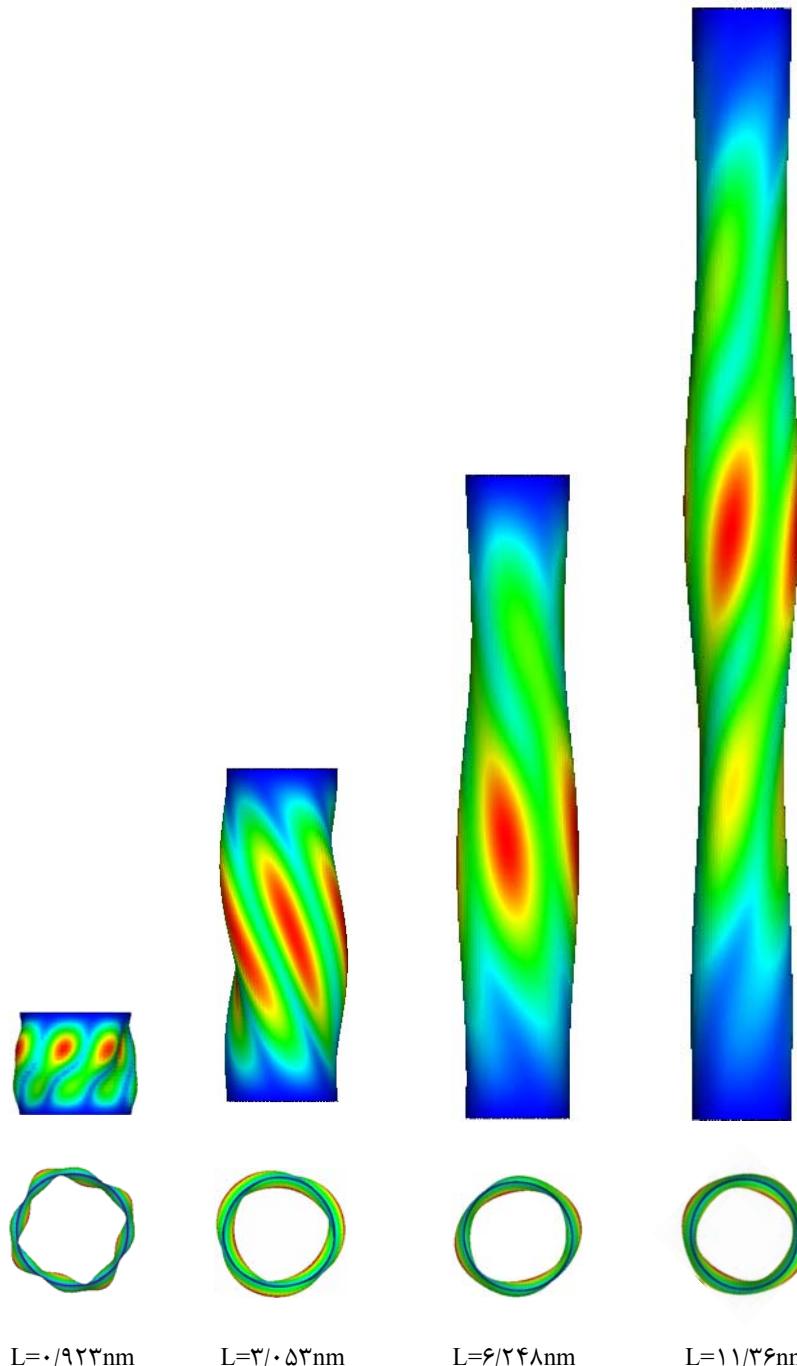


شکل(۴-۳۹) نمودار ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای پوسته‌های استوانه‌ای(مدل پیوسته)



شکل(۴-۴۰) نمودار زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای پوسته‌های استوانه‌ای(مدل پیوسته)

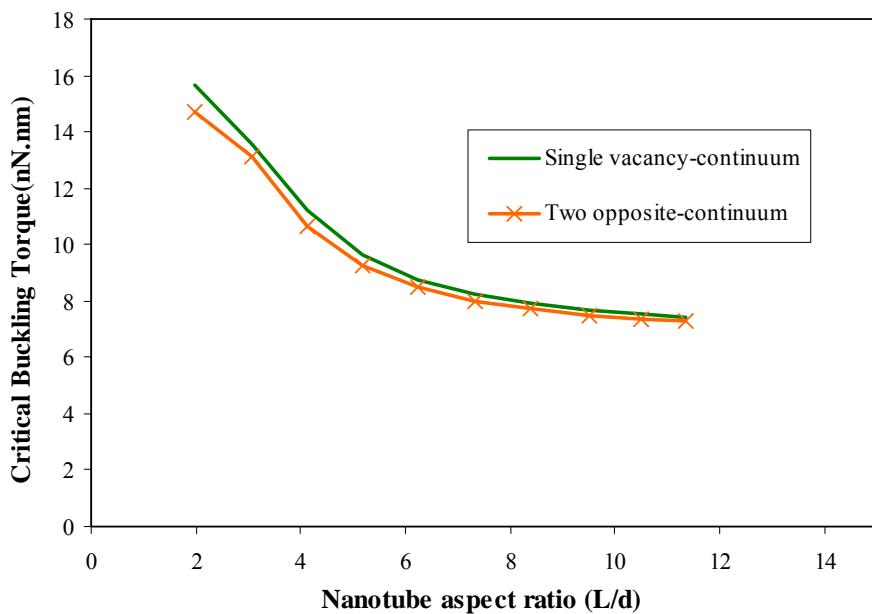
در شکل (۴۱-۴) شکل مدهای مربوط به کمانش پوسته‌های استوانه‌ای تحت ممان پیچشی آورده شده است. مشاهده می‌گردد که برای این پوسته‌ها مانند نانولوله‌های کربنی با افزایش طول از تعداد موج‌های دیواره کم شده و در طول‌های بلند بر مقدار پیچیدگی آن افزوده می‌گردد.



شکل (۴۱-۴) شکل مدهای ناشی از کمانش پیچشی پوسته‌های استوانه‌ای (مدل پیوسته) در طول‌های متفاوت

۴-۵-۲- کمانش پیچشی پوسته‌های استوانه‌ای دارای گشودگی

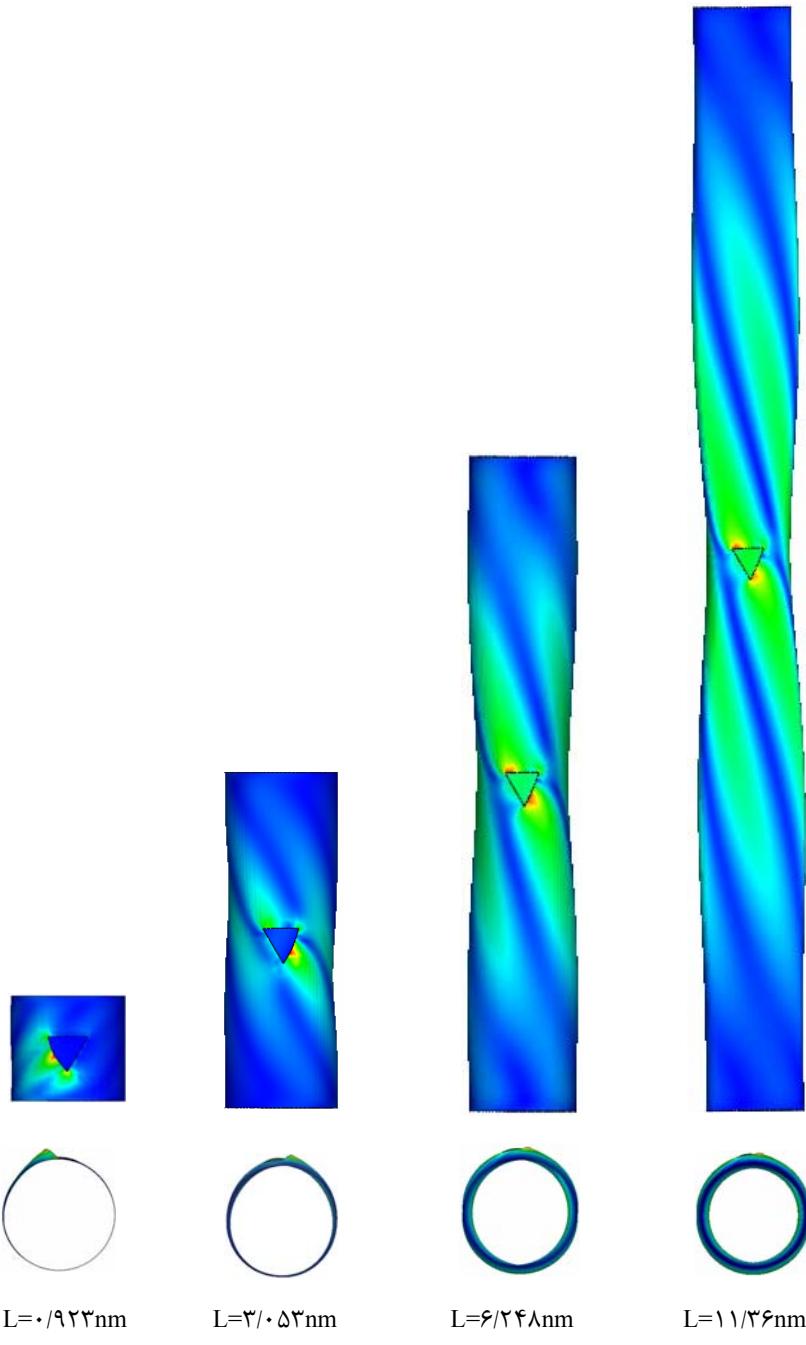
در شکل (۴۲-۴) نتایج حاصل از کمانش پوسته‌های استوانه‌ای با در نظر گرفتن عیوب تهی جای منفرد و دو تهی جای منفرد روبروی هم نشان داده شده است. مشاهده می‌گردد که با افزایش نسبت طول از میزان ممان بحرانی کمانش کاسته شده و در نسبت‌های بزرگ نمودارهای مربوط به این دو نوع پوسته به یکدیگر نزدیک شده و در حقیقت عیوب تأثیر خود را از دست می‌دهند.



شکل (۴۲-۴) نمودار ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای

پوسته‌های استوانه‌ای دارای گشودگی (مدل پیوسته)

در شکل (۴۳-۴) نیز شکل مدهای مربوط به کمانش پوسته‌های استوانه‌ای معیوب با عیوب تهی جای منفرد، در طول‌های مختلف آورده شده است. مشاهده می‌گردد که در اینجا نیز مانند نانولوله‌های کربنی، در طول‌های کوتاه کمانش بیشتر به صورت محلی اتفاق می‌افتد و با افزایش طول مدد کمانش به سمت کمانش کلی پیش می‌رود که این نیز به این معناست که تأثیر وجود عیوب در پوسته در حال از بین رفتن می‌باشد.



شکل(۴-۴۳) شکل مدهای ناشی از کمانش پیچشی پوسته‌های استوانه‌ای دارای گشودگی(مدل پیوسته)
در طول‌های متفاوت

فصل چهارم

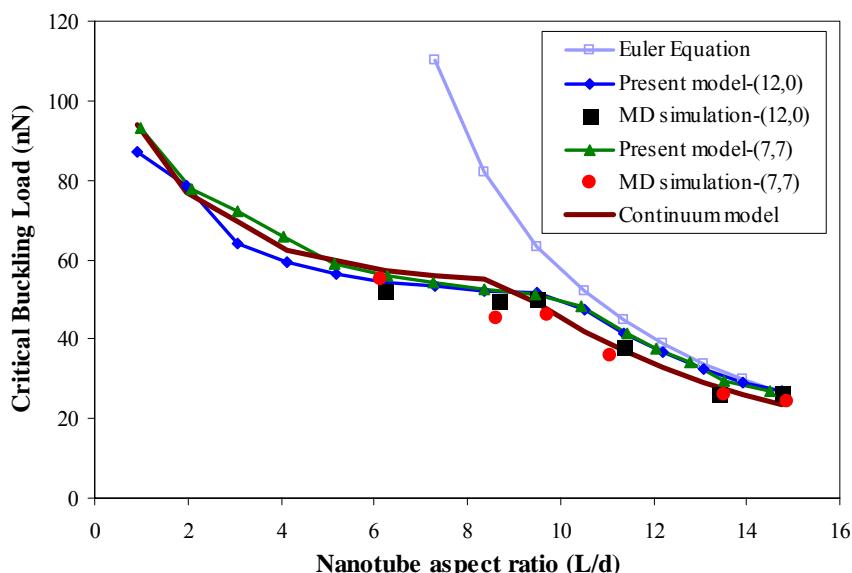
مقایسه‌ی نتایج و

نتیجه‌گیری

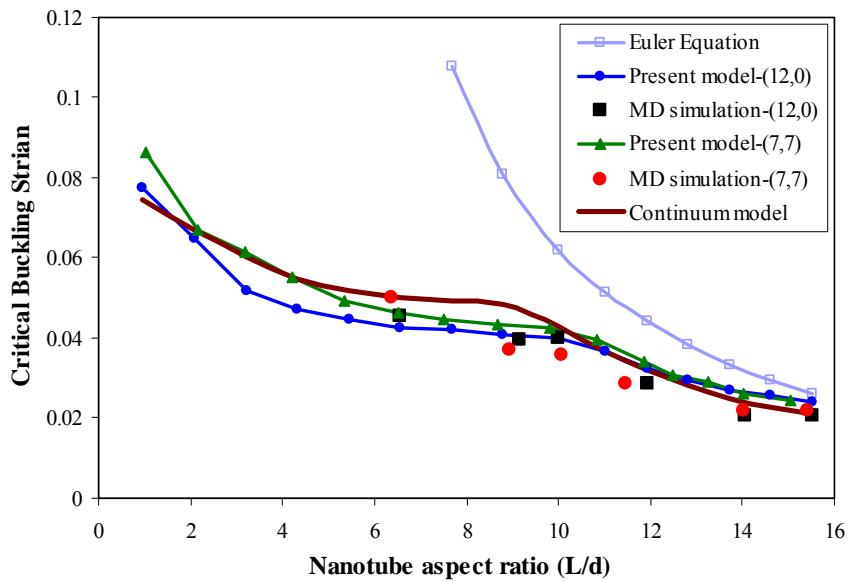
همانطور که قبلاً اشاره شد برای آنکه صحت و درستی مدل ارائه شده مشخص شود، باید نتایج بدست آمده از آن را با نتایج دیگر مدل‌ها مقایسه نمود؛ لذا در این فصل به مقایسه نتایج حاصل از مدل ارائه شده و مدل‌های دیگر می‌پردازیم و در ادامه نتایج حاصل از کمانش نانولوله‌های سالم و معیوب را با یکدیگر مقایسه می‌نماییم.

۵-۱- مقایسه نتایج حاصل از کمانش نانولوله‌های کربنی تحت فشار محوری

در شکل‌های (۱-۵) و (۲-۵) نمودارهای بار و کرنش بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ ، برای نانولوله‌های کربنی زیگ-زاگ و آرمچیر آورده شده است. مشاهده می‌شود که نتایج بدست آمده از مدل ارائه شده تطابق قابل قبولی با نتایج حاصل از مدل دینامیک مولکولی و مدل پیوسته دارد. با توجه به شکل‌ها می‌توان نتیجه گرفت، با افزایش طول نانولوله از مقدار بار و کرنش بحرانی کمانش کاسته شده و در نسبت‌های طولی بیشتر از ۱۲ همه‌ی مقادیر به سمت داده‌های بدست آمده از روابط اویلر میل می‌کنند. این امر بدان معناست که در طول‌های بلند، در این قطر از نانولوله‌ها، می‌توان به جای شبیه‌سازی نانولوله‌های کربنی از روابط ساده‌ی اویلر جهت بدست آوردن بار و کرنش بحرانی کمانش استفاده نمود.

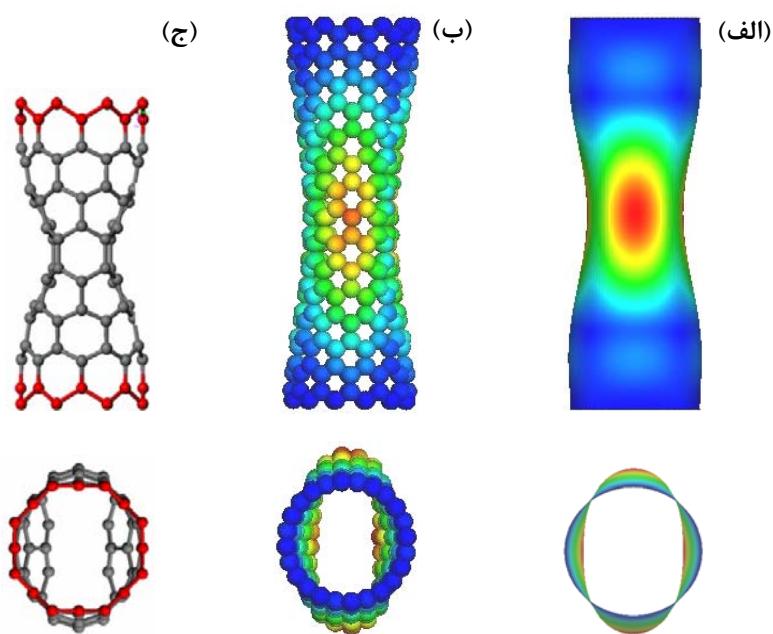


شکل(۱-۵) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ (مقایسه با دیگر مدل‌ها)



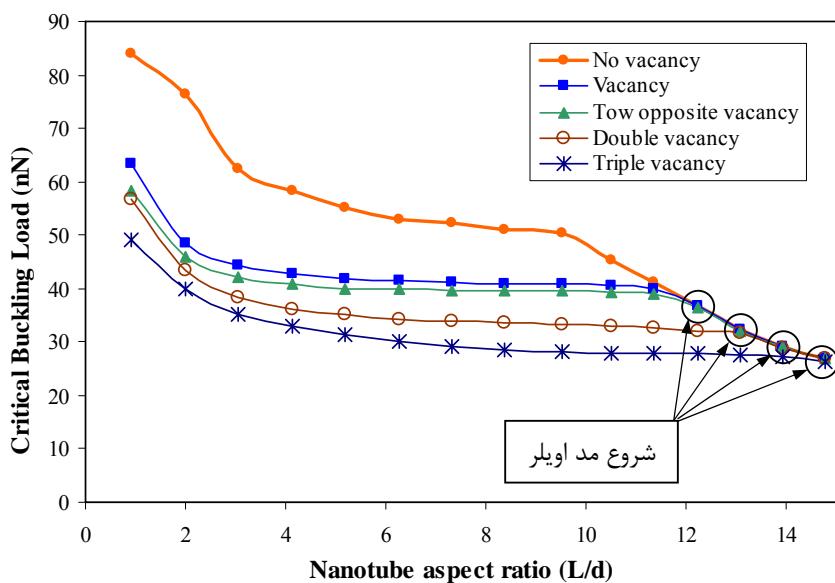
شکل(۳-۵) نمودار کرنش بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ (مقایسه با دیگر مدل‌ها)

در شکل(۳-۵) شکل‌مدهای بدستآمده از مدل ارائه شده، مدل پیوسته و مدل ونگ [۱۸] آورده شده است. مشاهده می‌شود که شکل‌مدهای آنها مشابه یکدیگر می‌باشد.

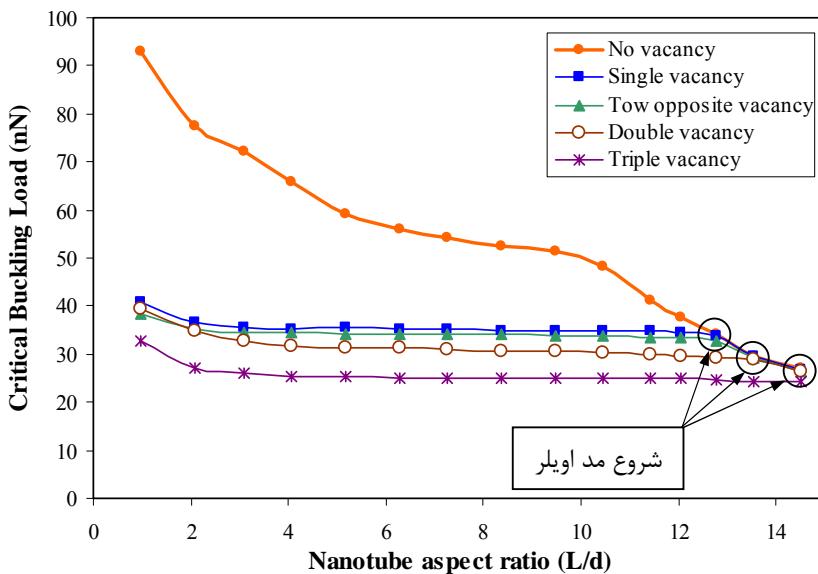


شکل (۳-۵) شکل‌مدهای بدست آمده از مدل‌های (الف): پیوسته، (ب): ارائه شده(مکانیک ساختاری) و (ج): ونگ

شکل‌های (۴-۵) و (۵-۵) به ترتیب نمودارهای بار بحرانی کمانش را بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نanolوله‌های سالم و معیوب زیگ-زاگ و آرمچیر نشان می‌دهند. با توجه به این شکل‌ها مشاهده می‌شود که عیوب ایجاد شده بر روی دیوارهای nanolوله‌ها تأثیرات قابل ملاحظه‌ای بر بار کمانش می‌گذارند و با افزایش طول از اثرات آنها کاسته می‌شود به صورتی که برای هر یک از عیوب در نسبت‌های طولی مشخصی نمودارهای آنها بر نمودار nanolوله‌های سالم منطبق می‌شود. در حقیقت در این طول‌ها شکل‌مدهای کمانش از حالت محلی به حالت کلی تغییر شکل داده و به مد اویلر تبدیل می‌شوند. در هر یک از شکل‌ها نقاط شروع مد اویلر مشخص شده‌اند. همچنین با توجه به شکل‌ها می‌توان نتیجه گرفت که عیوب تهی جای سه‌گانه و تهی جای منفرد به ترتیب بیشترین و کمترین تأثیر را بر بار کمانش می‌گذارند. به عنوان مثال برای nanolوله‌های زیگ-زاگ در طول $6/248$ nm، عیوب تهی جای سه‌گانه 43 درصد و تهی جای منفرد 22 درصد بار بحرانی کمانش را کاهش می‌دهند. نکته‌ی قابل ذکر دیگری که با توجه به شکل‌ها می‌توان نتیجه گرفت این است که عیوب تهی جای دوگانه نسبت به دو تهی جای منفرد روبروی هم بار کمانش را به میزان بیشتری کاهش می‌دهد و این امر بدان معناست که تراکم عیوب در یک مکان اثرات مخربتری را بر بار کمانش می‌گذارد.

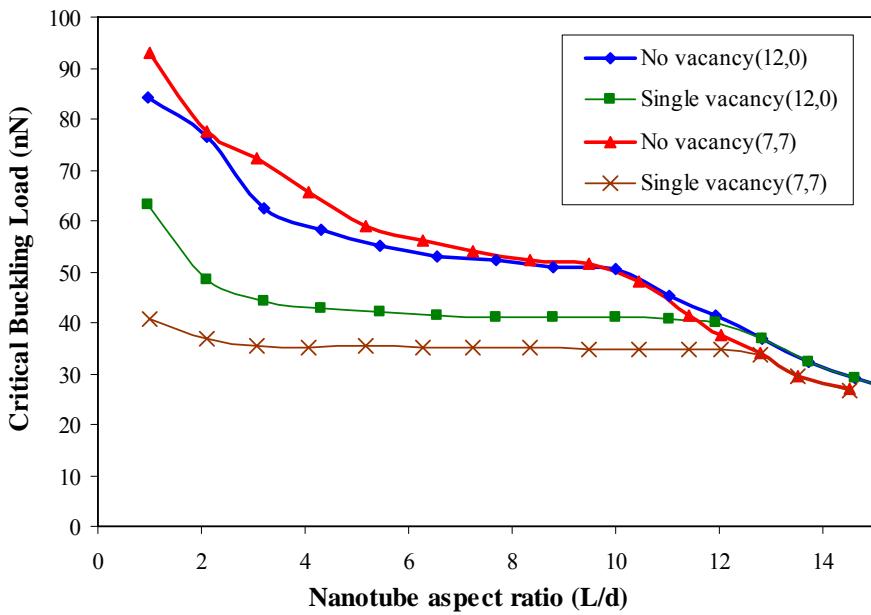


شکل(۴-۵) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای nanolوله‌های سالم و معیوب زیگ-زاگ(۱۲۰۰)

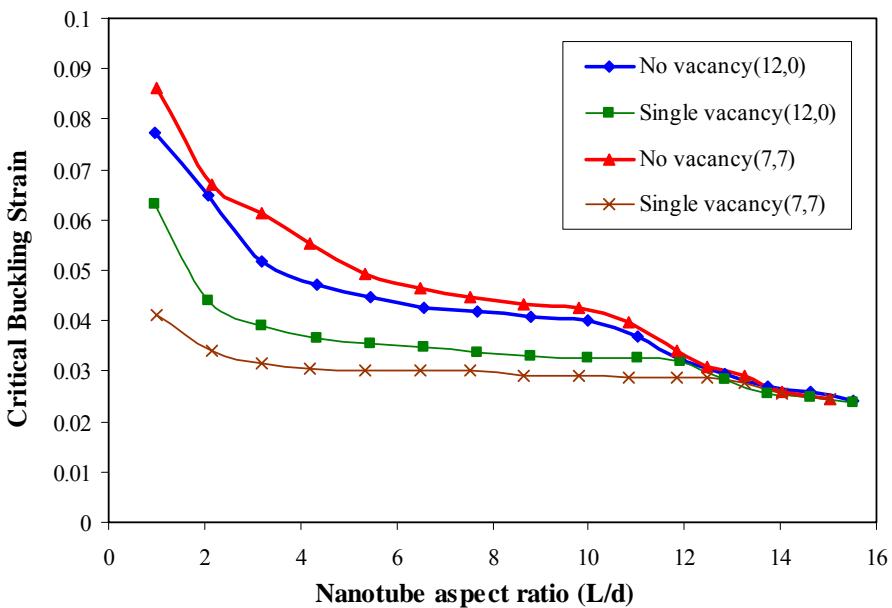


شکل(۵) نمودار کرنش بحرانی کمانش بحسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نanolوله‌های سالم و معیوب آرمچیر(۷،۷)

به منظور مقایسه‌ی نanolوله‌های زیگ-زاگ و آرمچیر و تأثیر عیوب بروی آنها شکل (۶-۵) آورده شده است. مشاهده می‌شود که در نسبت‌های طولی کوچکتر از ۱۰ بار بحرانی کمانش برای نanolوله‌های آرمچیر نسبت به نanolوله‌های زیگ-زاگ بیشتر است و برای نسبت‌های طولی بزرگتر از آن، کوچکتر می‌باشد. همچنین می‌توان نتیجه گرفت که به صورت کلی حساسیت نanolوله‌های آرمچیر نسبت به وجود عیوب بیشتر می‌باشد؛ به عنوان مثال در نسبت طولی ۶، مقدار کاهش بار بحرانی برای نanolوله‌های معیوب آرمچیر و زیگ-زاگ در مقایسه با نanolوله‌ای سالم، به ترتیب ۳۳درصد و ۲۳درصد می‌باشد. در شکل (۶-۵) نیز نمودارهای کرنش بحرانی برای این نanolوله‌ها نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که روند تغییرات برای کرنش بحرانی شباهت بسیار زیادی با روند تغییرات در بار بحرانی دارد. تفاوت قابل توجه در نمودارهای آنها در نسبت‌های طولی بلند آشکار می‌شود به نحوی که برای نسبت‌های بزرگتر از ۱۲، کرنش‌های بحرانی بر یکدیگر منطبق می‌شوند؛ ولی بارهای بحرانی آنها همچنان با یکدیگر تفاوت دارد.



شکل(۶) نمودار بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های سالم و معیوب



شکل(۷) نمودار کرنش بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های سالم و معیوب

در ادامه به منظور مقایسه‌ی بهتر نانولوله‌های سالم و معیوب و نشان دادن تأثیر عیب در نانولوله‌ها،

نمودارها را به صورت بی‌بعد نمایش می‌دهیم. این نمودار بر اساس ضریب بار بحرانی کمانش(k) بر

$$\text{حسب نسبت طولی } \frac{L}{D} \text{ نمایش داده شده است که مقدار } k \text{ را می‌توان به صورت زیر تعریف کرد:}$$

$$k = \frac{P_d}{P_p} \quad (1-5)$$

در این رابطه P_d و P_p به ترتیب بار بحرانی کمانش برای نانولوله‌ی سالم و معیوب می‌باشند. همانطور

که در شکل(۸-۵) مشاهده می‌شود، برای نانولوله‌های آرمچیر و زیگ-زاگ با افزایش طول نانولوله از

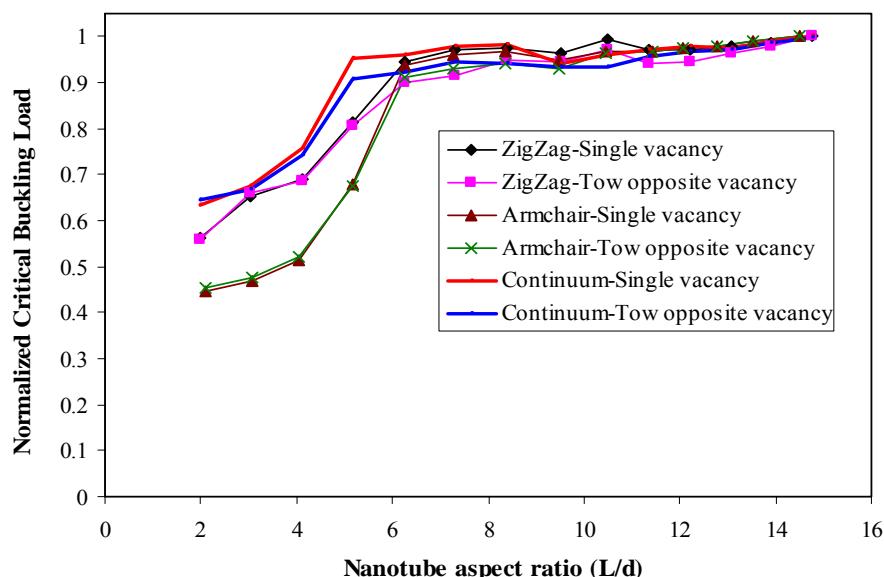
تأثیر وجود عیب کاسته شده و مقدار ضریب بار بحرانی کمانش به سمت یک میل می‌کند. همانطور

که قبلاً نیز اشاره شد، حساسیت نانولوله‌های آرمچیر به عیوب بیشتر از نانولوله‌های زیگ-زاگ می‌باشد

و این مسئله در شکل (۸-۵) کاملاً مشهود است. روند تغییرات برای پوسته‌های استوانه‌ای معیوب نیز

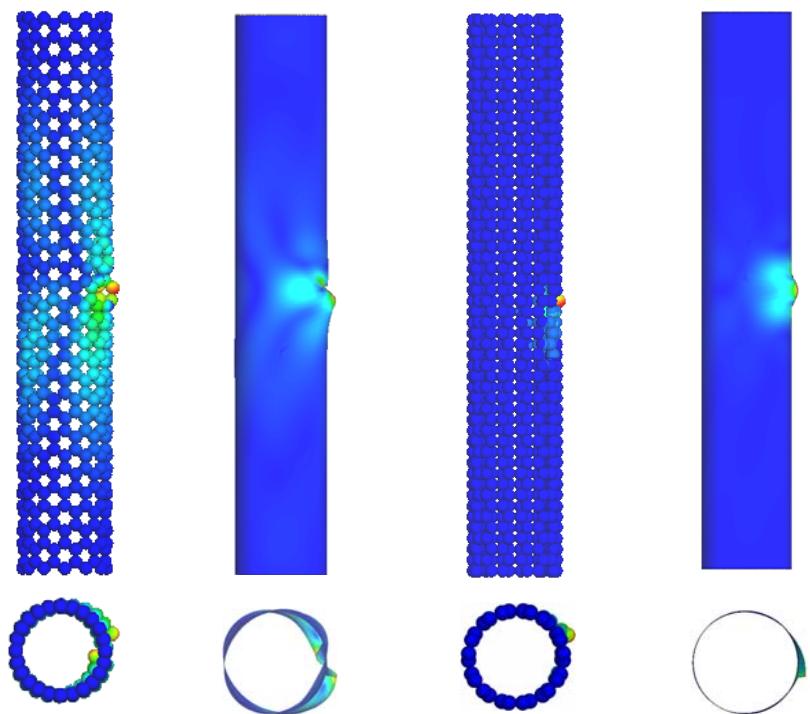
مانند نانولوله‌های کربنی می‌باشد و پیداست که رفتار و مقادیر ضریب بار بحرانی برای این پوسته‌ها به

نانولوله‌های زیگ-زاگ نزدیک‌تر است.



شکل(۸-۵) نمودار ضریب بار بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌ها و پوسته‌های استوانه‌ای معیوب

در شکل(۹-۵) مقایسه‌ای میان شکل مدهای بدست آمده از کمانش نanolوله‌ها و مدل پیوسته‌ی معیوب صورت گرفته است. مشاهده می‌شود که شکل مدهای آنها نیز تطابق قابل قبولی با یکدیگر دارند.

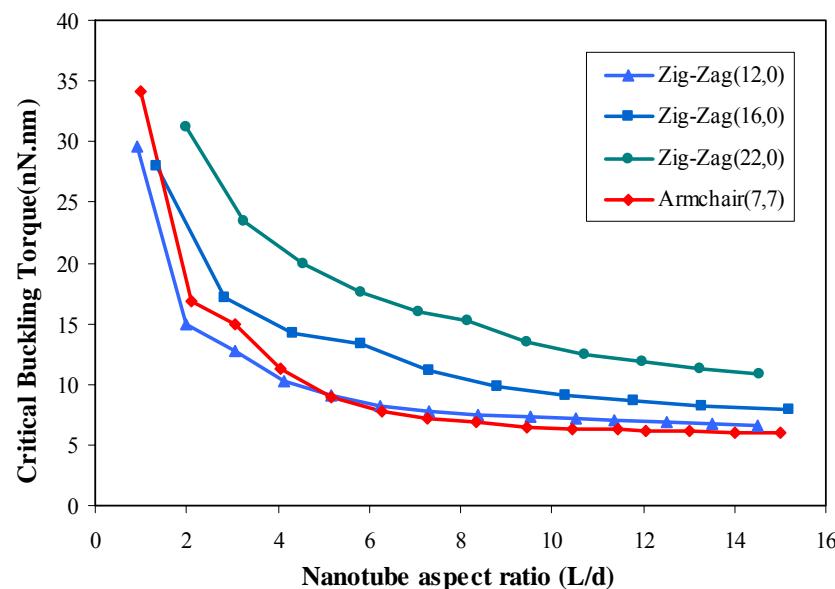


شکل(۹-۵) شکل مدهای بدست آمده بر اثر کمانش نanolوله‌ها و پوسته‌های استوانه‌ای معیوب

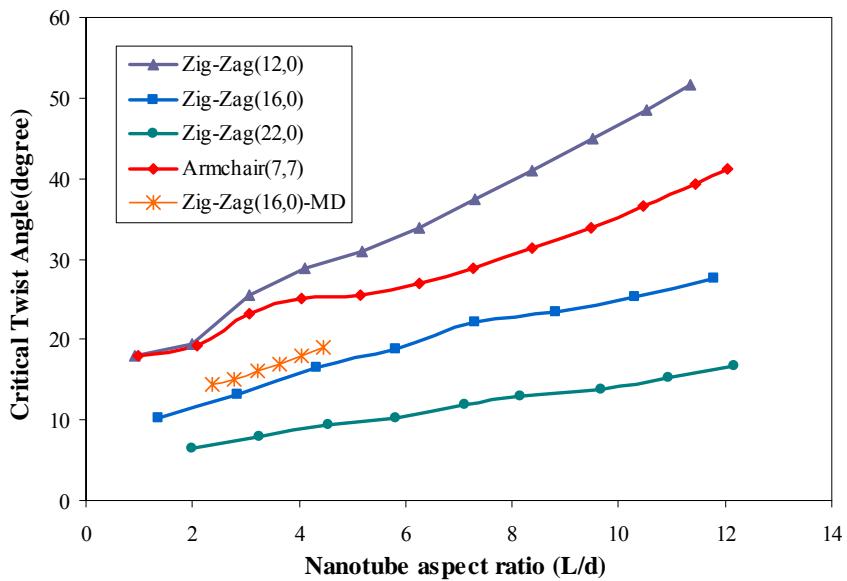
۲-۵- مقایسه‌ی نتایج حاصل از کمانش نanolوله‌های کربنی تحت ممان پیچشی

همانطور که در فصل‌های گذشته اشاره شد، مقالات بسیار کمی در زمینه‌ی کمانش نanolوله‌های کربنی تحت پیچش ارائه شده است و از این رو امکان مقایسه‌ی نتایج بدست آمده از مدل ارائه شده با مدل‌های دیگر وجود ندارد؛ خصوصاً در زمینه‌ی کمانش نanolوله‌های معیوب که تا حال مقاله‌ای در این مورد ارائه نشده است. تنها یک مورد برای مقایسه با نتایج حاصل از مدل ارائه شده وجود که توسط ونگ [۲۲] بدست آمده است.

در شکل های (۱۰-۵) و (۱۱-۵) مقایسه ای میان کمانش نانولوهای کربنی زیگ-زاگ، در قطرهای متفاوت و نانولوهای آرمچیر صورت گرفته است. در شکل (۱۰-۵) مشاهده می شود که مقادیر ممان بحرانی کمانش برای نانولوهای زیگ-زاگ (۱۲,۰) و آرمچیر (۷,۷) بسیار به هم نزدیک می باشد و با افزایش نسبت طول مقادیر آنها به هم نزدیک تر می گردد. همچنین می توان نشان داد که با افزایش قطر بر ممان پیچشی کمانش افزوده می گردد به طوری که برای نانولوهای (۲۲,۰) بیشترین مقادیر ممان بحرانی کمانش بدست آمده است. از شکل (۱۱-۵) می توان نتیجه گرفت، با آنکه مقادیر ممان بحرانی کمانش برای دو نوع نانولوهای زیگ-زاگ و آرمچیر به هم نزدیک است، ولی زوایای پیچش آنها تنها در نسبت های طولی بسیار کوچک (کوچک تر از ۳) به هم نزدیک می باشد. به طور کلی می توان گفت که نانولوهای کربنی زیگ-زاگ در زوایای پیچشی بزرگ تری دچار کمانش می شوند. در شکل (۱۱-۵) همچنین مقایسه ای بین نتایج بدست آمده از مدل ارائه شده و مدل ونگ [۲۲] برای نانولوهای زیگ-زاگ (۱۶,۰) انجام گرفته است و مشاهده می شود که نتایج حاصل از این دو روش تطابق قابل قبولی با یکدیگر دارند.

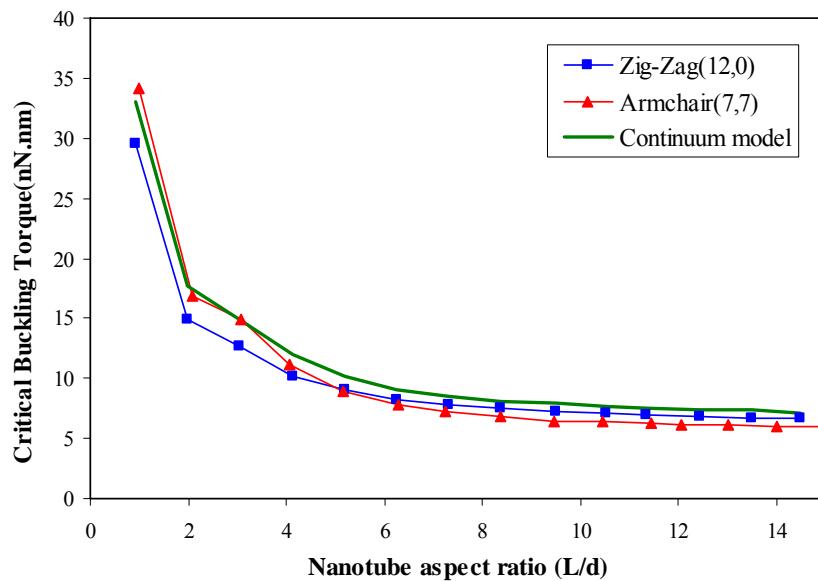


شکل (۱۰-۵) نمودارهای ممان پیچشی بحرانی بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوهای کربنی زیگ-زاگ و آرمچیر



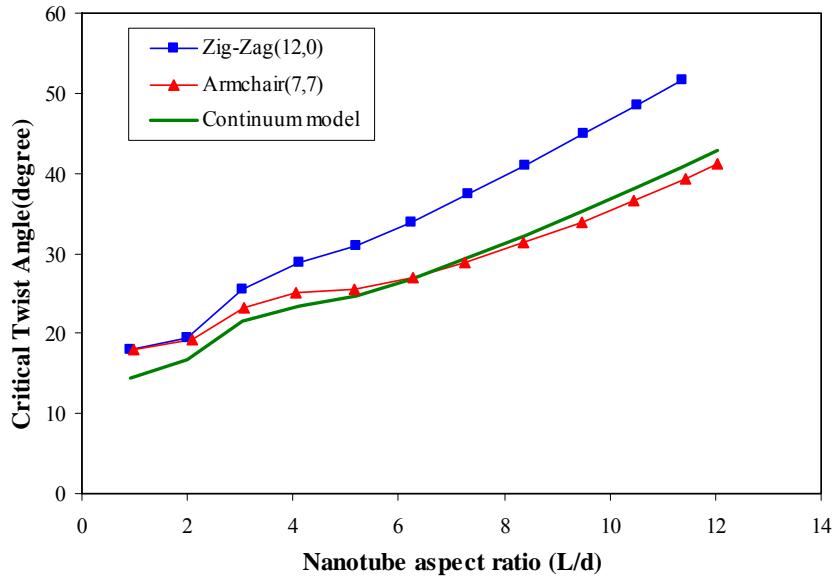
شکل (۱۱-۵) نمودارهای زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نانولوله‌های کربنی زیگ-زاگ و آرمچیر

در شکل (۱۲-۵) نمودارهای ممان پیچشی بحرانی بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ ، برای مدل ارائه شده و مدل پیوسته آورده شده است. مشاهده می‌شود که نتایج حاصل از دو مدل تطابق قابل قبولی با یکدیگر دارند و البته در نسبت‌های طولی کوچک، برای ممان پیچشی، نتایج حاصل از مدل پیوسته با نتایج بدست آمده برای نانولوله‌های آرمچیر مطابقت بیشتری دارد.



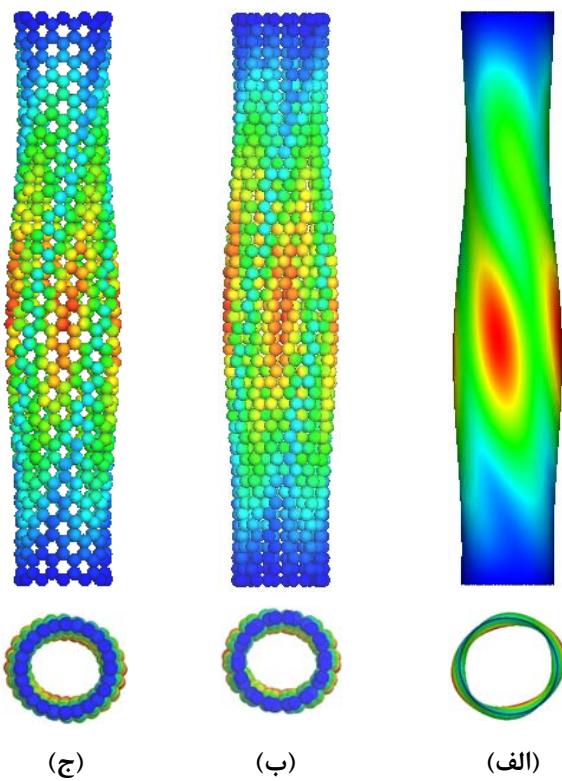
شکل (۱۲-۵) نمودارهای ممان پیچشی بحرانی بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$

همچنین در شکل (۱۳-۵) نمودارهای زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای دو مدل مورد بررسی نشان داده شده‌اند. می‌توان دید که نتایج حاصل از دو مدل تطابق قابل قبولی با یکدیگر دارند و البته در نسبت‌های طولی بزرگ، برای زاویه‌ی پیچش، نتایج حاصل از مدل پیوسته با نتایج بدست آمده برای نانولوله‌های آرمچیر مطابقت بیشتری دارد. به طور کلی با توجه به این دو شکل می‌توان نتیجه گرفت که در کمانش تحت ممان پیچشی، مدل پیوسته با نانولوله‌های آرمچیر تطابق بیشتری دارد.

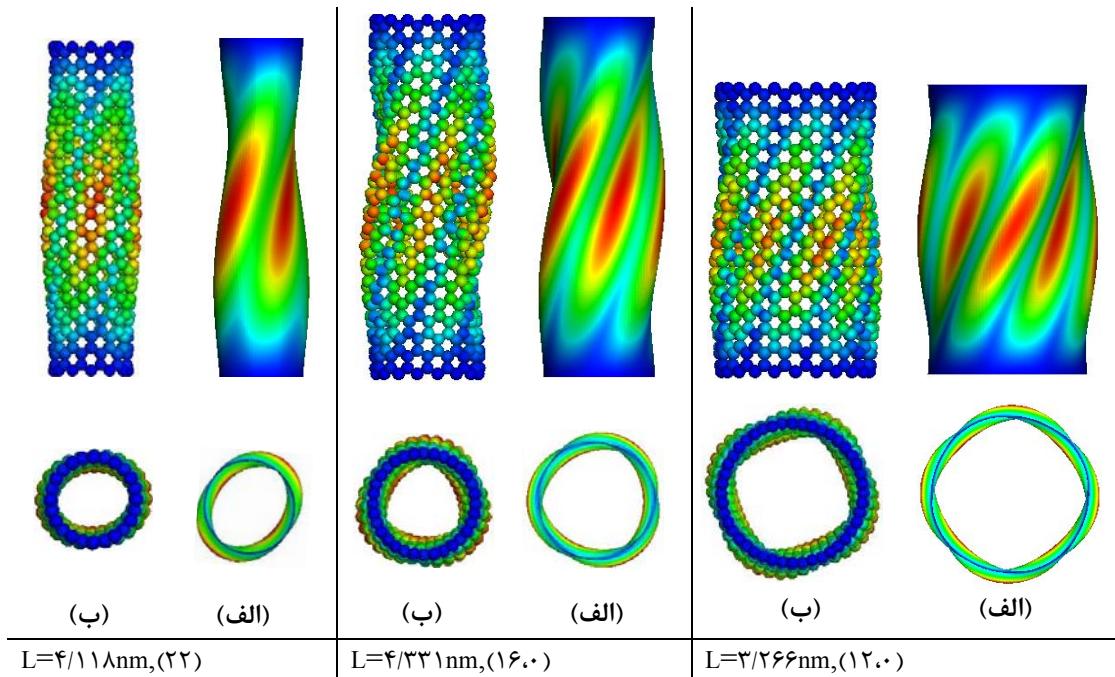


شکل (۱۳-۵) نمودارهای زاویه‌ی پیچش بحرانی بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$

در ادامه شکل مدهای بدست آمده از این دو روش با یکدیگر مقایسه شده‌اند. با توجه به شکل (۱۴-۵) می‌توان نتیجه گرفت که اولاً شکل مدهای بدست آمده برای نانولوله‌های زیگ-زاگ(۱۲۰) و آرمچیر(۷،۷) بسیار به هم نزدیک می‌باشند و ثانیاً شکل مدهای بدست آمده از دو روش بسیار به یکدیگر شبیه می‌باشند. همچنین با توجه به شکل (۱۵-۵) نیز می‌توان نشان داد که برای طول‌های بزرگتر، شکل مدهای بدست آمده از دو روش تطابق قابل قبولی با هم دارند.



شکل(۱۴-۵) شکل مدهای بدست آمده برای نسبت‌های طولی ۶
(الف): مدل پیوسته، (ب): آرمچیر(۷،۰) و (ج): زیگ-زاگ (۱۲،۰)



شکل(۱۵-۵) شکل مدهای بدست آمده برای قطرهای متفاوت از (الف): مدل پیوسته و (ب): مدل ارائه شده(زیگ-زاگ)

به منظور بررسی تأثیر عیب بر ممان بحرانی کمانش نمودارهای بی بعد آنها رسم شده است. برای این

منظور از ضریب ممان بحرانی کمانش استفاده شده که می‌توان آن را به صورت زیر تعریف نمود:

$$k = \frac{T_d}{T_p} \quad (2-5)$$

که در آن T_p و T_d به ترتیب مقادیر ممان پیچشی بحرانی برای نanolوله‌های سالم و معیوب می‌باشد.

در شکل‌های (۱۶-۵) و (۱۷-۵) به ترتیب نمودارهای ضریب ممان بحرانی بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$

نشان داده شده‌اند. همانطور که مشاهده می‌شود با افزایش نسبت طولی بر مقدار این ضریب افزوده

می‌شود. این امر بدان معناست که با افزایش طول از میزان ممان بحرانی کمانش کاسته می‌شود و

برای طول‌های بلند می‌توان از وجود عیب در نanolوله چشم‌پوشی کرد. همچنین مشاهده می‌شود که

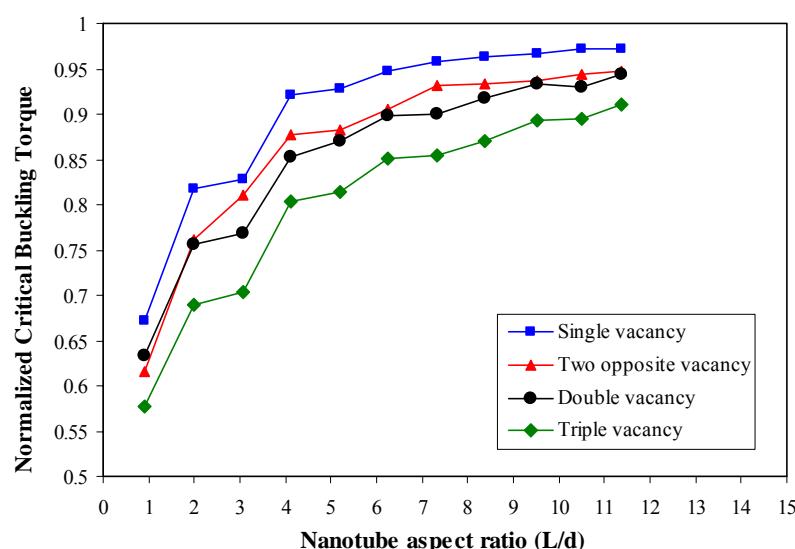
عیب تهی جای سه‌گانه و عیب تهی جای منفرد به ترتیب بیشترین و کمترین تأثیر را بر ممان بحرانی

کمانش می‌گذارند. همچنین در این نمودارها می‌توان دید که عیوب تهی جای دوگانه و دو تهی جای

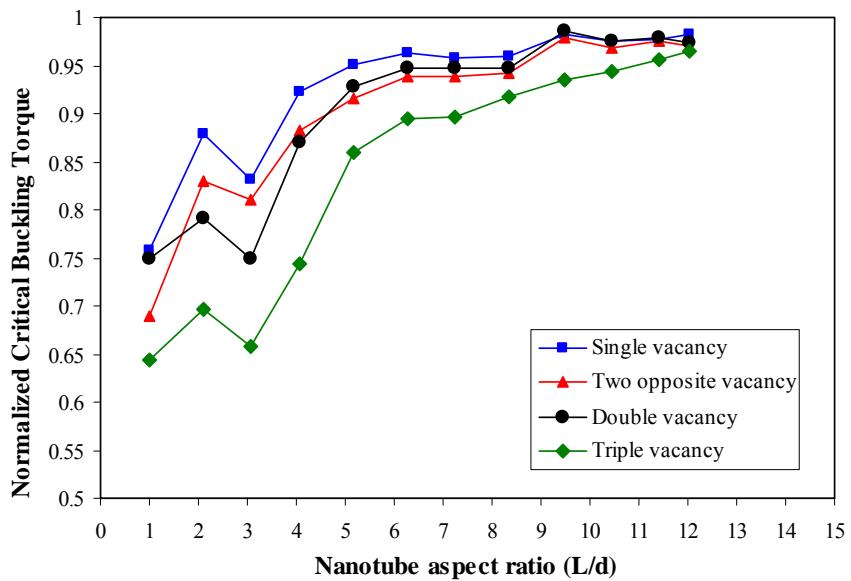
منفرد روبروی هم تأثیرات بسیار نزدیکی را بر ممان بحرانی کمانش می‌گذارند و این امر به معنای

آنست که در کمانش تحت پیچش بر خلاف کمانش تحت فشار محوری، تراکم و یا عدم تراکم عیوب

بر روی دیواره‌ی nanololle، تفاوت چندانی با یکدیگر نمی‌کنند.

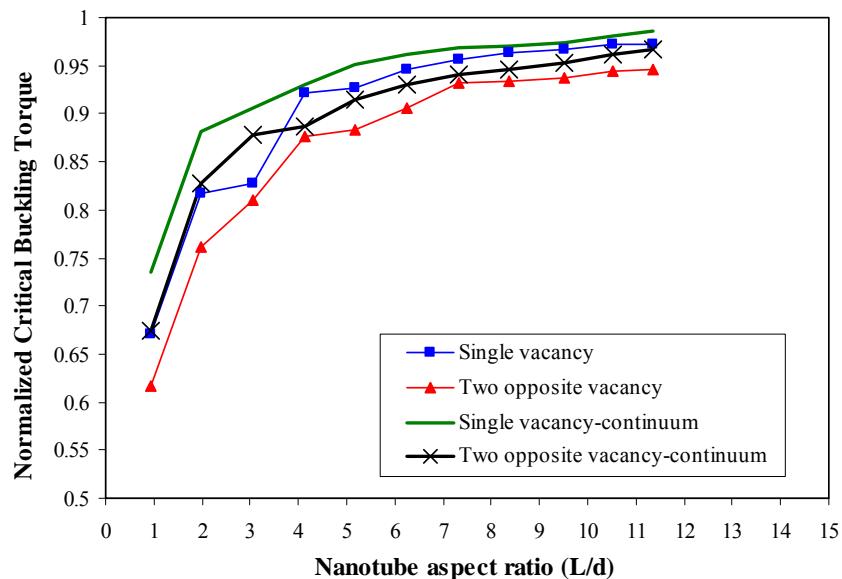


شکل(۱۶-۵) نمودار ضریب ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای nanololle‌های معیوب زیگ-زاگ

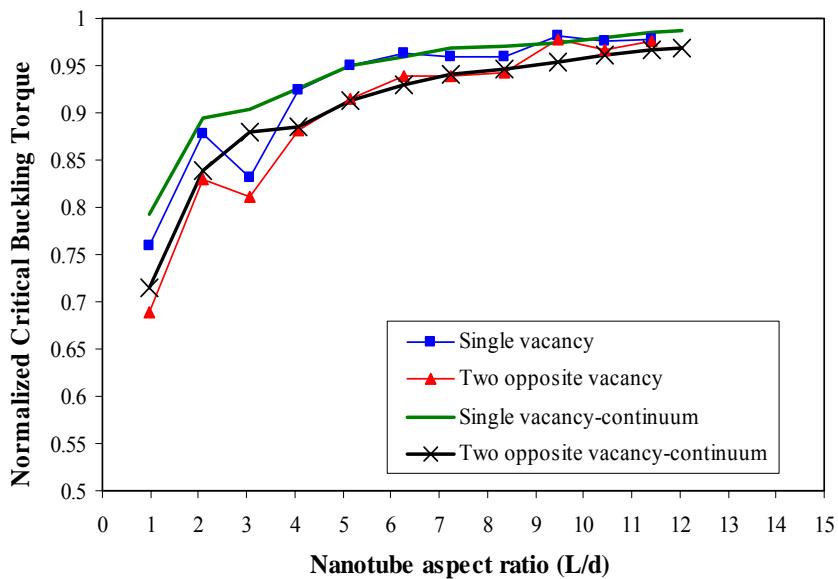


شکل(۱۷-۵) نمودار ضریب ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نanolوله‌های معیوب آرمچیر

در نهایت به منظور مقایسه‌ی تأثیر عیب بر روی نanolوله‌های کربنی و مدل پیوسته شکل‌های (۱۸-۵) و (۱۹-۵) آورده شده‌اند که به ترتیب متعلق به نanolوله‌های زیگ-زاگ و آرمچیر می‌باشند. مشاهده می‌گردد که نتایج بدست آمده از دو روش تطابق قابل قبولی با یکدیگر دارند و این تطابق با افزایش طول نیز بیشتر می‌شود.

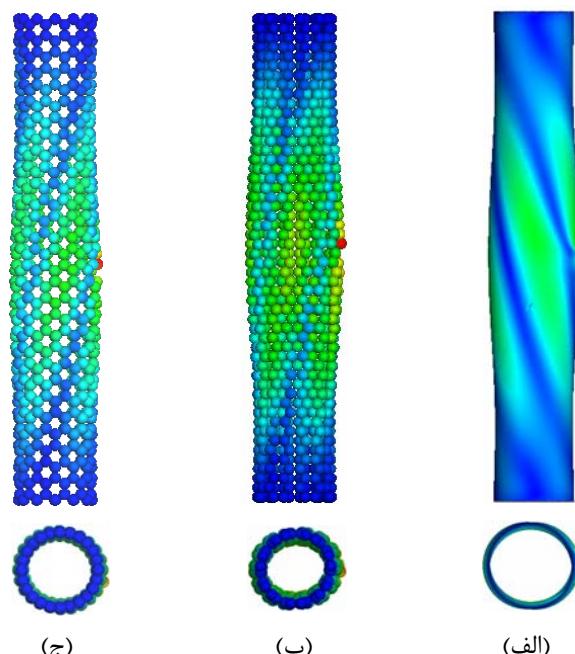


شکل(۱۸-۵) نمودار ضریب ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نanolوله‌های معیوب زیگ-زاگ



شکل (۱۹-۵) نمودار ضریب ممان بحرانی کمانش بر حسب نسبت طولی $\frac{L}{D}$ برای نanolوله‌های معیوب آرمچیر

در شکل (۲۰-۵) نیز شکل‌مداهای مربوط به کمانش نanolوله‌ها و مدل پیوسته‌ی معیوب تحت ممان پیچشی نشان داده شده است. مشاهده می‌گردد که در اینجا نیز تطابق قابل قبولی بین شکل‌مداهای آنها وجود دارد.



شکل (۲۰-۵) شکل‌مداهای کمانشی بدست آمده، تحت ممان پیچشی، برای نسبت‌های طولی ۶ (الف): مدل پیوسته، (ب): آرمچیر (۷,۷) و (ج): زیگ-زاگ (۱۲,۰)

فصل ششم

نتیجه‌گیری و پیشنهادات

۶- نتیجه گیری

با توجه به مباحث مطرح شده در این پایان‌نامه نتایج مهمی در زمینه‌ی کمانش نانولوله‌های کربنی،

تحت بار محوری فشاری و ممان پیچشی بدست آمده‌اند که در زیر به آنها اشاره شده است:

۱- مدل ارائه شده که با استفاده از روش مکانیک ساختاری ایجاد شده است می‌تواند به خوبی بار

بحرانی و کرنش بحرانی را در کمانش تحت فشار محوری و ممان بحرانی و زاویه‌ی پیچش

بحرانی را برای کمانش تحت پیچش نشان دهد.

۲- نتایج بدست آمده از مدل ارائه شده مطابقت قابل قبولی با نتایج حاصل از مدل دینامیک

مولکولی و مدل پیوسته دارند.

۳- مقادیر بار بحرانی و کرنش بحرانی کمانش برای نانولوله‌های آرمچیر و زیگ-زاگ نزدیک به

هم می‌باشد ولی شکل مدهای آنها با یکدیگر متفاوتند.

۴- نتایج حاصل از مدل پیوسته، در کمانش تحت فشار محوری، به نتایج حاصل از مدل ارائه

شده برای نانولوله‌های کربنی زیگ-زاگ نزدیک‌تر است.

۵- در طول‌های بلند مقادیر بار بحرانی و کرنش بحرانی کمانش برای نانولوله‌های آرمچیر و زیگ

-زاگ به هم نزدیک‌تر می‌شوند و در نهایت به داده‌های بدست آمده از روابط اویلر می-

کنند.

۶- عیوب تهی‌جای تأثیرات قابل ملاحظه‌ای بر بار بحرانی کمانش می‌گذارند و از میان عیوب

مورد بررسی عیب تهی‌جای سه‌گانه، بیشترین و عیب تهی‌جای منفرد کمترین تأثیر را بر بار

بحرانی کمانش می‌گذارند.

۷- تأثیر دو عیب تهی‌جای دوگانه و دو تهی‌جای منفرد روی هم، در کمانش تحت فشار با

یکدیگر متفاوت بوده و می‌توان نتیجه گرفت که تراکم عیوب در یک مکان (تهی‌جای دوگانه)

اثرات مخربتری بر بار بحرانی کمانش می‌گذارد.

-۸- تغییر مکان در طول نanolوله موجب تغییر در بار بحرانی کمانش می‌شود و نتایج نشان می-

دهند که وجود عیب در مرکز نanolوله بیشترین تأثیر را بر بار بحرانی می‌گذارد.

-۹- نتایج حاصل از کمانش تحت پیچش نشان می‌دهند ممان بحرانی کمانش برای Nanololleهای

آرمچیر و زیگ زاگ بسیار به هم نزدیک می‌باشد.

-۱۰- مقادیر زاویه‌ی پیچش بحرانی برای Nanololleهای آرمچیر و زیگ-زاگ تنها در نسبت‌های

طولی کوچک به هم نزدیک‌اند و با افزایش نسبت طول تفاوت بین مقادیر آنها بیشتر می‌شود.

به طور کلی می‌توان گفت که Nanololleهای کربنی زیگ-زاگ در زوایای پیچشی بزرگتری دچار

کمانش می‌شوند.

-۱۱- با افزایش قطر Nanololleهای کربنی، بر میزان ممان بحرانی کمانش افزوده شده و از مقدار

زاویه‌ی پیچش بحرانی کاسته می‌گردد.

-۱۲- نتایج بدست آمده از کمانش پیچشی مدل پیوسته نشان می‌دهد که در این بارگذاری مقادیر

بدست آمده برای ممان و زاویه پیچش بحرانی، با مقادیر بدست آمده برای Nanololleهای آرمچیر

نزدیک‌تر است و مطابقت خوبی با آن دارد.

-۱۳- تأثیر عیوب تهی‌جای بر ممان بحرانی کمانش قابل توجه می‌باشد و از میان عیوب مورد

بررسی عیب تهی‌جای سه‌گانه، بیشترین و عیب تهی‌جای منفرد کمترین تأثیر را بر ممان

بحرانی کمانش می‌گذارند.

-۱۴- تأثیر دو عیب تهی‌جای دوگانه و دو تهی‌جای منفرد روبه روی هم مشابه به یکدیگر بوده و

تراکم و یا عدم تراکم عیب در یک مکان تأثیر متفاوتی بر ممان بحرانی کمانش نمی‌گذارد.

-۱۵- به صورت کلی می‌توان گفت که هنگام کمانش تحت فشار محوری، Nanololleهای آرمچیر و در

زمان کمانش تحت ممان پیچشی Nanololleهای زیگ-زاگ، نسبت به وجود عیوب حساس‌تر

هستند.

۶- پیشنهادات

در انتهای این پایان‌نامه برخی از پیشنهادات در رابطه با مباحث مربوط به نانولوله‌های کربنی و همچنین مدل ارائه شده قابل ذکر است که به شرح زیر می‌باشد:

۱- از جمله مباحث قابل توجه خمس نانولوله‌های کربنی می‌باشد که با اصلاح مدل ارائه شده،

این امر با استفاده از این روش امکان‌پذیر است.

۲- کمانش نانولوهای کربنی تحت بارگذاری‌های ترکیبی را نیز با استفاده از مدل ارائه شده می‌توان انجام داد.

۳- با اصلاح مدل ارائه شده می‌توان تحلیل‌های دینامیکی مختلف را با در نظر گرفتن قابلیت‌های نرم‌افزار ABAQUS مورد بررسی قرار داد.

۴- ممکن است بتوان با اصلاح این مدل کمانش نانولوله‌های کربنی را تحت بارگذاری محوری کششی مورد مطالعه قرار داد؛ که می‌تواند به عنوان یک کار کاملاً جدید به آن اشاره نمود.

۵- با استفاده از مدل ارائه شده می‌توان کمانش نانولوله‌های چند دیواره را نیز مورد بررسی قرار داد.

۶- در نهایت نیز باید اشاره کرد که با این مدل می‌توان نانوکامپوزیت‌های کربنی را شبیه‌سازی نمود.

مراجع

- [1] Poole, Jr C. P. and Owens F. J.(2003) “Introduction to nanotechnology”, A John Wiley & Sons, Inc., Publication, Canada, pp.114.
- [2] Iijima S. (1991). “Helical microtubes of graphitic carbon” *Nature* , 354, pp 56-58.
- [3] Odegard G.M., Gates T.S., Nicholson L.M. and Wise K.E. (2002). “Equivalent-continuum modeling with application to carbon nanotubes” *NASA/TM*, pp 211454.
- [4] Li C.Y. and Chou T.S. (2003a). “A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes” *Int. J. Solids Struct*, 40, pp 2487–2499.
- [5] Tserpes K.I. and Papanikos P. (2005). “Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes” *Comp: P. B*, 36, pp 468-477.
- [6] Hu N., Fukunaga H., Lu C., Kameyama M. and Yan, B. (2005). “Prediction of elastic properties of carbon nanotube-reinforced composites” *Proc. Royal So. Series A*, 461, pp 1685–1710.
- [7] Kalamkarov A.L., Georgiades A.V., Rokkam S.K., Veedu V.P. and Ghasemi-Nejhad, M.N. (2006). “Analytical and numerical techniques to predict carbon nanotubes properties” *Int. J. Solids Struct*, 43, pp 6832-6854.
- [8] Nasdala L. and Ernst G., (2005). “Development of a 4-node finite element for the computation of nanostructured materials” *Comput. Mater. Sci*, 33, pp 443–458.
- [9] ABAQUS, (2006). ABAQUS 6.6 User’s Manual, Hibbit, Karlson and Sorenson, Inc.
- [10] Li C.Y. and Chou T.W., (2003b). “Elastic moduli of multi-walled carbon nanotubes and the effect of van der Waals forces”. *Compus. Sci. Technol*, 63, pp 1517–1524.
- [11] Li C.Y. and Chou T.W., (2004). “Modeling of elastic buckling of carbon nanotubes by molecular structural mechanics approach” *Mech. Mater*, 36, pp 1047–55
- [12] Belytschko T., Xiao S. P., Schatz G. C. and Ruoff R. S. (2002). “Atomistic simulations of nanotube fracture” *Phys. Rev. B*, 65, pp 235–430.
- [13] Cornell W. D., Cieplak P., Bayly C. I. et al. (1995). “A second generation force-field for the simulation of proteins, nucleic-acids, and organic-molecules” *J. Amer. Chem. Soci*, 117, pp 5179–5197.
- [14] Chang T., Li G. and Guo X. (2005). “Elastic axial buckling of carbon nanotubes via a molecular mechanics model” *Carbon*, 43, pp 287–294.

- [15] Ghorbanpour Arani A., Rahmani R. and Arefmanesh A. (2007). “Elastic buckling analysis of single-walled carbon nanotube under combined loading by using the ANSYS software” *Physica E*, 40, 7, pp 2390-2395
- [16] Hu N., Nunoya K., Pan D., Okabe T. and Fukunaga H. (2007). “Prediction of buckling characteristics of carbon nanotubes” *Int. J. Solids Struct*, 44, pp 6535-6550.
- [17] Xin H., Han Q. and Yao X.H. (2007). “Buckling and axially compressive properties of perfect and defective single-walled carbon nanotubes” *Carbon* , 45, pp 2486-2495.
- [18] Wang Q., Liew K.M. and Duan W.H. (2008). “Modeling of the mechanical instability of carbon nanotubes” *Carbon* , 46, pp 285-290.
- [19] Xin H., Han Q. and Yao X.H. (2007). “Buckling of defective single-walled and double-walled carbon nanotubes under axial compression by molecular dynamics simulation” *Compus. Sci. Technol*, 68, 7-8, pp 1809-1814
- [20] Cao G. and Chen X. (2007). “The effects of chirality and boundary conditions on the mechanical properties of single-walled carbon nanotubes” *Int. J. Solids Struct*, 44, pp 5447–5465.
- [21] Yao X. and Han Q. (2008). “A continuum mechanics nonlinear postbuckling analysis for single-walled carbon nanotubes under torque” *Euro. J. Mech. A/Solids*, 27, pp 796–807.
- [22] Wang Q., Quek S.T. and Varada V.K. (2007). “Torsional buckling of carbon nanotubes” *Phys. Lett. A*, 367, pp 135–139
- [23] Lu Y.J. and Wang X. (2006). “Combined torsional buckling of multi-walled carbon nanotubes” *J. Phys. D: Appl. Phys*, 39, pp 3380–3387.
- [24] Yao X. and Han Q. (2008). “ Torsional buckling and postbuckling equilibrium path of double-walled carbon nanotubes” *Compus. Sci. Technol*, 68, pp 113–120.