



مدل مکانیک مولکولی ساختاری اصلاح شده و تعمیم یافته برای تعیین خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی

سید هادی قادری*

استادیار، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه شاهرود

تاریخ دریافت: ۱۳۹۲/۰۹/۰۸؛ تاریخ بازنگری: ۱۳۹۳/۰۵/۲۵؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۳/۰۹/۱۹

چکیده

در این مقاله، یک مدل مکانیک مولکولی ساختاری (MSM) اصلاح شده و تعمیم یافته برای تحلیل نانولوله‌های کربنی (CNT) پیش روی نهاده شده است. در این روش برهم‌کنش بین اتم‌های CNT با استفاده از یک المان تیر معادل با مقطع عمومی مدل‌سازی می‌شود. برای تعیین جهت‌های محلی تیر یک روش قاعده‌مند ارائه شده است. بر خلاف مدل MSM اولیه، در روش ارائه شده اثر خمش زاویه‌ی پیوند و وارونگی به صورت مستقل از هم در نظر گرفته شده‌اند. برای کشش و خمش پیوند، رفتار غیر خطی منطبق بر پتانسیل مورس اصلاح شده و برای پیچش و وارونگی رفتار خطی در نظر گرفته شد. مدل ارائه شده، وابستگی مدول‌های الاستیک CNT به اندازه و دست‌سازي را پیش‌بینی می‌کند. به‌ویژه، با افزایش قطر لوله، نسبت پواسون نانولوله کاهش یافته و به مقدار $0/3$ میل می‌کند. به علاوه، رفتار غیر خطی نانولوله‌های زیگزاک و آرمچیر تحت اثر بار کششی تا نقطه‌ی شکست مورد مطالعه قرار گرفت. با مدل ارائه شده، می‌توان شکست پیش‌رونده‌ی پیوندها و خرابی CNT با عیب‌های اولیه‌ی استون-ویلز و تهی‌جای را مورد بررسی قرار داد. خواص الاستیک و رفتار کششی پیش‌بینی شده برای نانولوله‌ها تطابق بسیار نزدیکی با نتایج گزارش شده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی دارد.

کلمات کلیدی: نانولوله‌ی کربنی؛ مکانیک مولکولی ساختاری؛ خواص مکانیکی؛ عیب؛ شکست.

Mechanical properties of carbon nanotubes form a generalized modified molecular structural mechanics model

Seyed Hadi Ghaderi*

Asst. Prof., Dep. Mech. Eng., Shahrood Univ. Shahrood 3619995161, I.R. Iran

Abstract

In this paper, a generalized modified molecular structure mechanics (MSM) model for analysis of carbon nanotubes (CNTs) is put forward. In this method, the interactions between carbon atoms of CNT are modeled using an equivalent beam element of general section. A systematic approach is presented to specify the local directions of each of the beam elements. In contrast to the original MSM method, the contributions from bond angle bending and inversion interactions are distinguished in the present model. For deformation modes corresponding to bond stretching and bond angle bend, nonlinear behaviors according to the modified Morse potential are considered, and for torsion and inversion a linear form is adopted. The proposed model suggests a size and chirality dependence of elastic moduli for CNTs. In particular, with increasing the tube diameter, the Poisson's ratio of the nanotube decreases and approaches a value of 0.2. Moreover, the nonlinear response of armchair and zigzag CNTs subject to tensile load up to the fracture point is studied. The present model enables capturing the progressive bond breaking and failure of CNTs with Stone-Wales and vacancy defects. The predicted elastic properties and tensile behaviors of nanotubes are found to be very similar to the results reported from the time consuming molecular dynamics simulations.

Keywords: Carbon nanotube; Molecular structural mechanics; Mechanical properties; Defect; Fracture.

* نویسنده مسئول؛ تلفن: ۰۲۳۳۲۳۰۰۲۵۸؛ فکس: ۰۲۳۳۲۳۰۰۲۵۸

آدرس پست الکترونیک: s.h.ghaderi@shahroodut.ac.ir

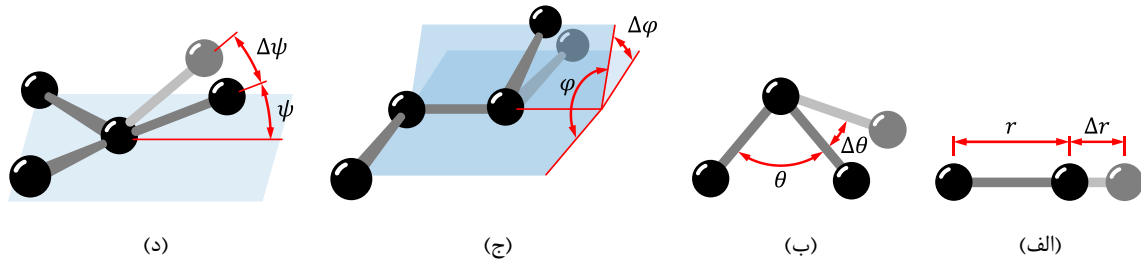
۱- مقدمه

نانولوله‌های کربنی (Carbon nanotubes, CNTs) [۱] ترکیبی از خواص فیزیکی و مکانیکی منحصر به فرد را از خود نشان می‌دهند. چگالی پایین، سفتی عالی، استحکام و خواص الکترونیکی، آنها را گزینه‌هایی بسیار خوب برای توسعه‌ی مواد مرکب سبک با استحکام بالا و سامانه‌های نانو-الکترو-مکانیکی نموده است. برای تحقق بخشیدن به کاربردهای بالقوه‌ی CNT، پژوهش‌های وسیعی بر روی خواص مکانیکی آنها انجام شده است. در این رابطه، پژوهش‌هایی با روش‌های تجربی و نظری که هرکدام دیدگاهی را برای شناسایی رفتار مکانیکی CNT به دست می‌دهد، در منابع موجود است. در مقایسه با روش‌های تجربی که بسیار گران و نیازمند ابزارهای ویژه اند، روش‌های محاسباتی برای درک خواص مکانیکی CNT کارآمدتر و ارزان‌تر می‌باشند. در یک سوی طیف روش‌هایی محاسباتی، روش از ابتدا (*ab initio*) و دینامیک مولکولی (Molecular dynamics, MD) قرار دارند که تنها برای سامانه‌های شامل تعداد اتم محدود کاربرد دارند. در دیگر سوی، مدل‌های مکانیک محیط پیوسته یافت می‌شود که از نظر عددی بازده بالایی دارند، اما دقت پایین‌تری داشته، اثرات عیوب هندسی در شبکه‌ی اتمی را در نظر نمی‌گیرند. محاسبات مکانیک مولکولی (Molecular mechanics, MM) فصل مشترک بین روش‌های دقیق و پرهزینه‌ی کوانتومی و روش‌های کمتر دقیق مکانیک محیط پیوسته می‌باشد.

در MM، یک سامانه‌ی اتمی، ذراتی که به طور موضعی با هم برهم‌کنش دارند در نظر گرفته می‌شود این اجازه می‌دهد که روش اجزای محدود را برای مدل‌سازی برهم‌کنش‌های اتمی مورد استفاده قرار داد. بر مبنای این دیدگاه، اجزای محدود استاندارد مختلفی مانند پوسته [۲]، خرپا [۳] و تیر [۴] و همچنین اجزای محدود با طراحی ویژه [۵] برای تحقیق بر روی خواص مکانیکی CNT به کار رفته‌اند. به ویژه، مکانیک مولکولی ساختاری (Molecular structural mechanics, MSM) که در کار برجسته‌ی لی و چو [۴] ارایه شد، تحقیقات زیادی در این حوزه را برانگیخته است. آنها CNT را به صورت ساختارهای قاب در نظر گرفتند که در آن هر دو اتم همسایه با یک المان تیر سه بعدی به هم متصل می‌شوند. پارامترهای سفتی مقطع جزء محدود تیر، بر مبنای معادل سازی انرژی کرنشی تیر و پتانسیل میدان

نیروی (Force field potential) بین اتمی و روابط هندسی حاکم، به دست آمد. مدل MSM به دلیل سادگی و دقت مناسب، در جامعه‌ی علمی توجه زیادی را به خود جلب کرد. این روش برای تخمین خواص مکانیکی نانولوله‌های یک و دو دیواره [۶-۸] و مارپیچ [۹، ۱۰] در تغییر شکل‌های کوچک به کار گرفته شد. این روش برای پیش‌بینی استحکام و رفتار خرابی CNT [۱۱، ۱۲] و شبکه‌های ابر CNT [۱۳، ۱۴] توسعه پیدا کرد. وجه مشترک همه‌ی این تحقیقات MSM مینا، یک جزء محدود تیر با مقطع دایره‌ای، با سفتی یکسانی حول همه‌ی محورهای شعاعی مقطع، بود. سفتی خمشی تیر بر مبنای پارامترهای خمش زاویه‌ی پیوند به دست آمد. حال آنکه، تنها خمش در صفحه‌ی تیر بر تغییرات زاویه‌ی پیوند منطبق می‌باشد و مولفه‌ی خمش خارج صفحه باید اثر وارونگی را مدل‌سازی نماید (شکل ۱).

برای حل این مشکل و تمایز بین انرژی خمش زاویه‌ی پیوند و وارونگی، مدل اولیه‌ی MSM با استفاده از تیری با مقطع مستطیلی اصلاح شد [۱۵، ۱۶]. این تیر گشتاورهای متفاوتی حول محورهای اصلی داشت. با این وجود، پارامترهای مقطع تیر باید متناسب با اندازه و دست‌سازنی (Chirality) نانولوله تنظیم می‌شد و نیز، مدل با فرض تغییر شکل‌های کوچک توسعه یافته بود. در این مقاله، یک مدل اصلاح شده و تعمیم یافته MSM که از تیر با مقطع عمومی استفاده می‌کند، ارایه شده است. در این روش محورهای اصلی و فرعی مقطع به وسیله‌ی یک گره افزوده در تعریف جزء محدود تعیین می‌شود. از آنجا که در روش ارایه شده، فرمول‌بندی تیر بر اساس مقطع عمومی است، برخلاف مقطع مستطیلی، در اینجا نیازی به تعیین گشتاورهای اینرسی اصلی مقطع برای هر تیر نیست. در عوض، با تعیین دو جهت اصلی مقطع، سفتی‌های خمشی حول هر محور به مقطع اختصاص داده می‌شود. مدل ارایه شده در تحلیل‌های خطی و غیر خطی CNT به کار گرفته شد. در تحلیل خطی، مدول یانگ و نسبت پواسون CNT محاسبه می‌شود. در تحلیل غیر خطی، CNT تحت اثر بار کششی، فراتر از نقطه‌ی شکست پیوند، کشیده می‌شود. علاوه بر این، توانایی مدل در بررسی اثر عیوب تهی‌جای و ۵-۷-۷-۵ استون-ویلز (SW) روی رفتار کششی CNT، نشان داده شده است.



شکل ۱- شماتیک برهم‌کنش‌های اتمی، (الف) کشش پیوند، (ب) خمش زاویه‌ی پیوند، (ج) پیچش و (د) وارونگی

۲- روش مدل‌سازی

از دیدگاه مکانیک مولکولی، ساختار اتمی CNT را می‌توان به صورت یک سامانه‌ی چند ذره‌ای که در آن ذرات به صورت محلی با هم اندرکنش دارند، در نظر گرفت. شکل ۱ نمایشی از این برهم‌کنش‌ها را نشان می‌دهد. برهم‌کنش‌های اتمی به وسیله‌ی پتانسیل‌های میدان نیرو، که تنها وابسته به مکان اتم‌های مورد نظر می‌باشند، توصیف می‌شوند. رابطه عمومی برای کل انرژی پتانسیل برهم‌کنش E_t با صرف‌نظر از برهم‌کنش‌های غیر پیوندی الکترواستاتیک و وندروالس به صورت زیر است:

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

که در آن E_r برای برهم‌کنش دو اتمی و بیانگر کشش پیوند، E_θ برای برهم‌کنش سه اتمی و مربوط به خمش زاویه‌ی پیوند و E_φ و E_ψ برای برهم‌کنش‌های چهار اتمی و به ترتیب مربوط به پیچش و وارونگی می‌باشد. پارامترهای سینماتیکی شامل طول پیوند r ، زاویه‌ی پیوند θ ، زاویه‌ی پیچش φ و زاویه‌ی وارونگی ψ در شکل ۱ نشان داده شده‌اند.

۲-۱- مدل اولیه و تصحیح شده‌ی MSM

سینماتیک و انرژی‌های پتانسیل در اندرکنش‌های اتمی می‌تواند به حالت‌های تغییر شکل (محوری، خمشی و پیچشی) و انرژی‌های کرنشی یک جزء محدود تیر سه‌بعدی مربوط شود. بر این اساس، مدل ساختاری CNT از به هم پیوستن اتم‌های مجاور با جزء محدود تیر با مقطع گرد توسعه یافت [۴]. شعاع مقطع و ثوابت الاستیک ماده‌ی تیر با معادل قرار دادن انرژی‌های تغییر شکل به دست آمد [۴].

اما، جزء محدود تیر با مقطع گرد الزاما حول تمامی جهت‌های شعاعی مقطع، سفتی یکسانی از خود نشان می‌دهد. به علت اینکه سفتی خمشی تنها بر اساس

پارامترهای انرژی خمش زاویه‌ی پیوند E_θ به دست آمد، هیچ تمایزی بین برهم‌کنش‌های خمش زاویه‌ی پیوند و وارونگی در نظر گرفته نشد. برای حل این مشکل و در نظر گرفتن این برهم‌کنش‌های متمایز، مدل‌های تصحیح شده‌ی MSM پیشنهاد شد [۱۵، ۱۶]. این مدل‌ها جزء محدود تیر با سطح مقطع مستطیلی را که گشتاورهای اینرسی مختلفی حول محورهای اصلی مقطع داشتند، در نظر گرفتند. در مدل MSM تصحیح شده‌ی لی و گو [۱۵]، پارامترهای تیر بر اساس برهم‌کنش‌های درون صفحه‌ای در گرافن با تحلیل کشش و خمش به دست آمد. اما روش تعریف جهت‌های محلی هر جزء محدود تیر در ساختار قاب سه‌بعدی CNT مشخص نشد.

در [۱۶]، یک تیر مربعی با ثوابت مادی مشابه مدل اولیه‌ی MSM [۴] به علاوه‌ی یک ثابت وارونگی استفاده شد. با این حال، به کار گرفتن روش آنها سراسر نبود و پارامترهای هندسی جزء محدود تیر باید بر مبنای قطر نانولوله تعیین می‌شد. علاوه بر این در مدل اولیه و تصحیح شده‌ی MSM، برای تمامی عبارت‌های انرژی در معادله‌ی (۱)، شکل ساده‌ی هارمونیک مورد استفاده قرار گرفت و در نتیجه جزء محدود تیر تنها برای تحلیل‌های خطی قابل استفاده بود.

۲-۲- مدل تعمیم یافته و تصحیح شده‌ی MSM

در مدل ارائه شده در این مقاله، یک تیر دو-گره‌ی با مقطع عمومی که جهت‌های محلی آن به صورت قاعده‌مند تعیین می‌شود، استفاده شده است. تعریف تیر نیاز به استخراج ثوابت مادی ندارد. در مقابل، برای هر حالت تغییر شکل محوری، خمشی و پیچشی، سفتی‌ها و نیروها یا گشتاورهای گره‌ی مستقلی که از پتانسیل میدان نیرو منتج شده‌اند، اختصاص داده می‌شود.

خمش غیر خطی پیوند در تغییر شکل‌های بزرگ، در این مقاله پتانسیل مورس اصلاح شده [۱۷] مورد استفاده قرار گرفت. نیز، توابع ساده‌ی هارمونیک برای انرژی‌های پیچش و وارونگی در نظر گرفته شد. نیروی محوری F_r ، گشتاور M_1 حول \mathbf{n}_1 ، گشتاور M_2 حول \mathbf{n}_2 و گشتاور پیچشی T حول محور \mathbf{t} ، که به ترتیب منطبق بر اندرکنش‌های کشش پیوند، خمش زاویه‌ی پیوند، پیچش و وارونگی می‌باشند، از مشتق اول توابع پتانسیل به دست می‌آید:

$$F_r = -2\beta D_e [e^{-2\beta(\Delta r)} - e^{-\beta(\Delta r)}], \quad (۴)$$

$$M_1 = k_\theta(\Delta\theta)[1 + 3k_{sextic}(\Delta\theta)^4], \quad (۵)$$

$$M_2 = K_I(\Delta\psi), \quad (۶)$$

$$T = K_T(\Delta\varphi). \quad (۷)$$

از معادله‌ی (۶) و (۷) واضح است که سفتی پیچش و وارونگی ثابت است. در نتیجه، سفتی تیر در خمش حول \mathbf{n}_2 و پیچش حول \mathbf{t} ، به ترتیب $c_2 = K_I$ و $c_t = K_T$ خواهد بود. برای تحلیل‌هایی که در این مقاله با آن سر و کار داریم، تغییر زاویه‌ی خمش خارج صفحه و وارونگی ناچیز است و بنا بر این پتانسیل هارمونیک برگزیده شد. سفتی‌های غیر خطی تیر در راستای محوری و خمش حول \mathbf{n}_1 از مشتق معادلات (۴) و (۵) به دست می‌آید.

$$k_r = 2\beta^2 D_e [e^{-\beta(\Delta r)} - 2e^{-2\beta(\Delta r)}], \quad (۸)$$

$$c_1 = k_\theta [1 + 15k_{sextic}(\Delta\theta)^4]. \quad (۹)$$

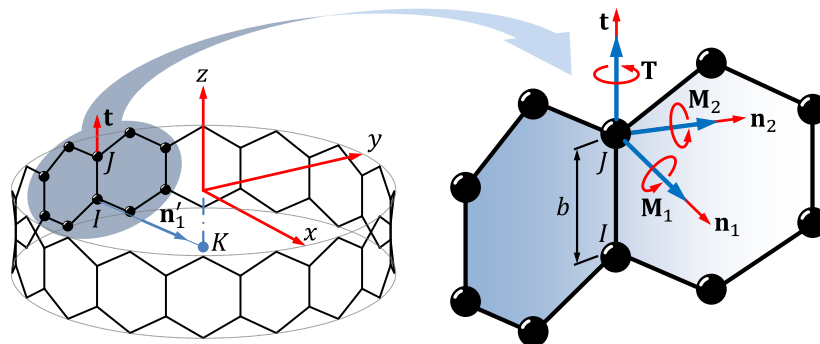
همانگونه که در شکل ۲ نشان داده شده است، برای یک جزء محدود تیر به طول b که دو اتم I و J را به هم متصل می‌کند مختصات محلی راست‌گرد $(\mathbf{t}, \mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$ تعریف می‌شود. \mathbf{t} مماس بر محور تیر و از گره I به سمت گره J است. \mathbf{n}_1 و \mathbf{n}_2 عمود بر \mathbf{t} بوده، محورهای اصلی اول و دوم مقطع تیر را نشان می‌دهند. در مدل‌سازی یک لایه‌ی گرافن، \mathbf{n}_1 عمود بر صفحه‌ی گرافن خواهد بود. در مورد CNT، \mathbf{n}_1 و \mathbf{n}_2 با روش پیش رو به دست می‌آیند. در نظر آورید که مبدا سیستم مختصات گلوبال (global) بر محور نانولوله منطبق باشد (شکل ۲). برای تعریف \mathbf{n}_1 و \mathbf{n}_2 از یک گره افزوده‌ی K استفاده می‌شود. این گره افزوده، در مرکز نانو لوله در $(0, 0, z_K)$ قرار دارد که $z_K = z_I$. بردار \mathbf{n}'_1 از سمت I به سمت K تعریف می‌شود. حال می‌توان بردارهای \mathbf{n}_1 و \mathbf{n}_2 را از ضرب برداری زیر یافت.

$$\mathbf{n}_2 = \mathbf{t} \times \mathbf{n}'_1, \quad (۲)$$

$$\mathbf{n}_1 = \mathbf{n}_2 \times \mathbf{t}. \quad (۳)$$

به عنوان نمونه، شکل ۲ مختصات $(\mathbf{t}, \mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$ را برای یک المان موازی محور نانو لوله زیگزاگ نشان می‌دهد. روشن است که برای تمامی تیرها همواره \mathbf{n}_2 در I مماس بر دیواره‌ی استوانه‌ای لوله و \mathbf{n}_1 عمود بر آن و به سمت مرکز CNT خواهد بود. در نتیجه، خمش حول \mathbf{n}_1 و \mathbf{n}_2 به ترتیب، با خمش درون صفحه‌ای و خمش بیرون صفحه‌ای متناظر خواهد بود.

نیروهای گره‌ی و سفتی تیر در کشش در راستای \mathbf{t} ، خمش حول \mathbf{n}_1 و \mathbf{n}_2 و پیچش حول \mathbf{t} از پتانسیل‌های میدان نیرو حاصل می‌شود. برای در نظر گرفتن کشش و



شکل ۲- محور مختصات محلی راست‌گرد $(\mathbf{t}, \mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$ تعریف شده برای جزء محدود تیر که اتم‌های I و J را به هم متصل می‌کند. K یک گره افزوده برای مشخص کردن محورهای اصلی مقطع تیر، \mathbf{n}_1 و \mathbf{n}_2 می‌باشد

شایان ذکر است که در مدل‌سازی MSM، طول و زاویه‌های طبیعی پیوند به وسیله‌ی جزء محدود تیر یادآوری نمی‌شوند. هرگونه تغییر در انرژی کرنشی جزء محدود تیر بر مبنای تغییرات پارامترهای سینماتیکی Δr ، $\Delta\theta$ ، $\Delta\varphi$ و $\Delta\psi$ از مقدار اولیه و نه مقادیر تعادلی آنها محاسبه می‌شود. با وجود این محدودیت، مدل MSM می‌تواند اغلب مسایل را با دقت خوبی حل کند. به ویژه، بر خلاف روش‌های مبتنی بر اجزای محدود خاص [۵، ۱۹]، با داشتن هندسه‌ی تعادلی ساختار اتمی، شبیه‌سازی‌ها بر مبنای MSM می‌تواند با استفاده از اجزای محدود کتابخانه‌ی نرم‌افزارهای اجزای محدود به صورت سراسر انجام شود.

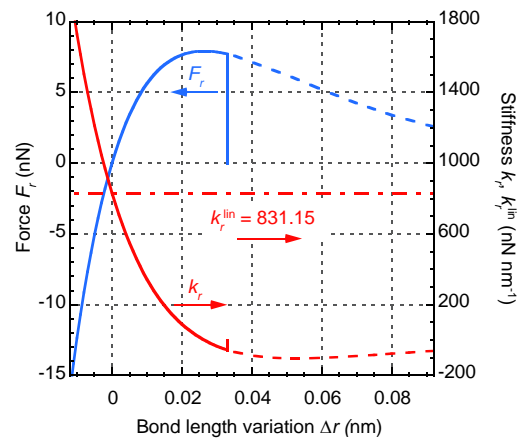
۳- نتایج و بحث

مدل MSM تعمیم یافته و تصحیح شده که در بخش پیشین ارائه شد، در تحلیل خطی و غیر خطی CNT آرمچیر و زیگزاگ تحت اثر بار کششی به کار گرفته شد. معادلات اجزای محدود با استفاده از حل گر ضمنی آباکوس ۶.۱۲ حل شد. فایل‌های ورودی (Input file) به آباکوس به وسیله‌ی یک کد متلب اختصاصی تولید شد. در تحلیل خطی، مدول یانگ E و نسبت پواسون ν برای نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ محاسبه شد. در تحلیل‌های غیر خطی، CNT فراتر از نقطه‌ی شکست پیوندها کشیده شد و منحنی تنش-کرنش آنها به دست آمد. سیستم معادلات غیر خطی با روش نیوتن-رافسون حل شد. در تمامی شبیه‌سازی‌ها شرایط مرزی جابجایی پیش رو اعمال شد. درجات آزادی دو ردیف اتم در هر انتهای CNT بسته شده، تنها اجازه‌ی حرکت در راستای محوری به آنها داده شد. با اعمال یک جابجایی محوری به این اتم‌ها، نانولوله کشیده می‌شود.

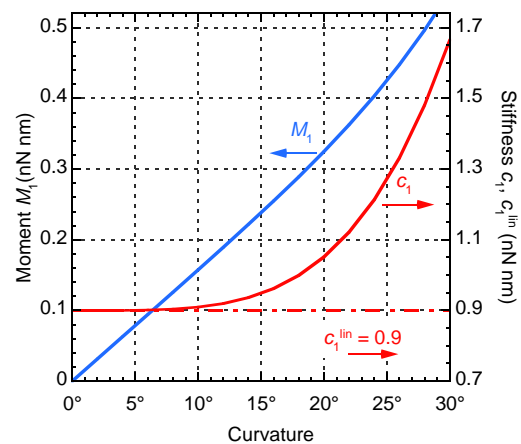
در محاسبات، CNT به صورت یک استوانه‌ی جدار نازک با قطر $D = (b/\pi)\sqrt{3(m^2 + mn + n^2)}$ در نظر گرفته می‌شود که در آن m و n شاخص‌های جابجایی شبکه و تعیین کننده‌ی دست‌سازنی CNT می‌باشند. با فرض ضخامت $t = 0.34$ nm، سطح مقطع لوله به صورت $A = \pi Dt$ به دست می‌آید. تنش σ و کرنش ε کششی از $\sigma = F/A$ و $\varepsilon = \delta/L_0$ به دست می‌آید. در اینجا، F نیروی کششی، δ افزایش طول و L_0 طول تحت بار نانولوله می‌باشد (شکل ۴ الف).

در تحلیل‌های خطی، تنها سفتی‌های ثابت k_r^{lin} و c_1^{lin} که رفتار تیر در راستای محوری و خمش حول \mathbf{n}_1 را توصیف می‌کنند، مورد نیاز می‌باشند. این مقادیر از شکل غیر خطی در معادلات (۸) و (۹) با فرض تغییر شکل‌های کوچک به دست می‌آیند؛ یعنی $\Delta r \rightarrow 0$ و $\Delta\theta \rightarrow 0$ که نتیجه می‌دهد $c_1^{\text{lin}} = k_\theta$ و $k_r^{\text{lin}} = 2\beta^2 D_e$.

شکل ۳ نشان‌دهنده‌ی رفتارهای غیر خطی تیر در جهت‌های محوری و خمش حول \mathbf{n}_1 می‌باشد. طول پیوند b کربن-کربن (C-C) به همراه توابع معادلات (۴)-(۹) عبارت است از [۴، ۱۷، ۱۸]: $b = 0.142$ nm، $D_e = 0.6031$ aJ، $\beta = 26.25$ nm⁻¹، $k_\theta = 0.9$ nN nm، $k_{\text{sextic}} = 0.754$ ، $K_I = 0.278$ nN nm، $K_T = 0.278$ nN nm.



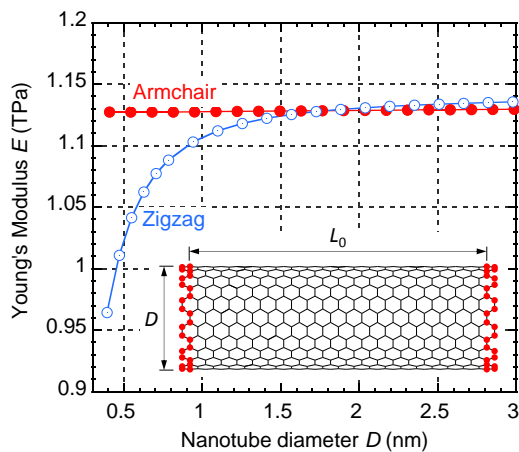
(الف)



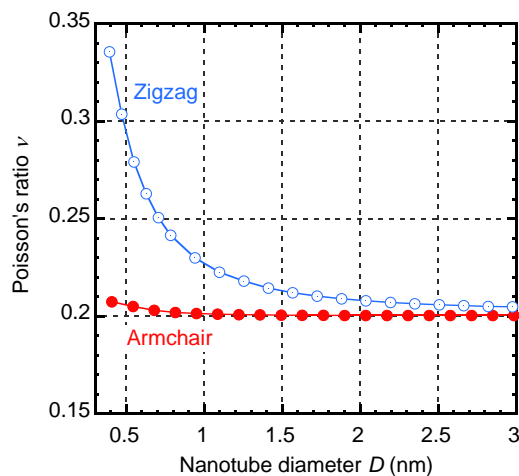
(ب)

شکل ۳- رفتارهای غیر خطی تیر در جهت محوری و (ب) خمش حول محور محلی \mathbf{n}_1

حدی $\nu = 0.1$ برای قطرهای بزرگ، نسبتاً کوچک بود. نتایج ارائه شده در [۱۵] با مقادیر ارائه شده در این مقاله در مورد لوله‌ی زیگزاگ روند یکسان و برای لوله‌ی آرمچیر روند متفاوتی دارد.



(الف)



(ب)

شکل ۴- مدول یانگ و نسبت پواسون بر حسب قطر نانولوله‌ی کربنی زیگزاگ و آرمچیر

وابستگی پیش‌بینی شده برای نسبت پواسون به اندازه و دست‌سازنی در این مدل اصلاح شده‌ی MSM، شباهت بسیار زیادی به نتایج مدل MSM تحلیلی [۲۱] دارد. به علاوه، مقدار ثابت $\nu = 0.2$ برای قطرهای بزرگ که در این مقاله ارائه شد بر نتایج به دست آمده از محاسبات دینامیک شبکه توسط پوپوف و همکاران [۲۳] منطبق است. جین و یان

۳-۱- مدول یانگ و نسبت پواسون CNT
مدول یانگ و نسبت پواسون از تحلیل خطی برای CNT از تحلیل خطی به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon} \quad (10)$$

$$\nu = -\frac{\varepsilon'}{\varepsilon} \quad (11)$$

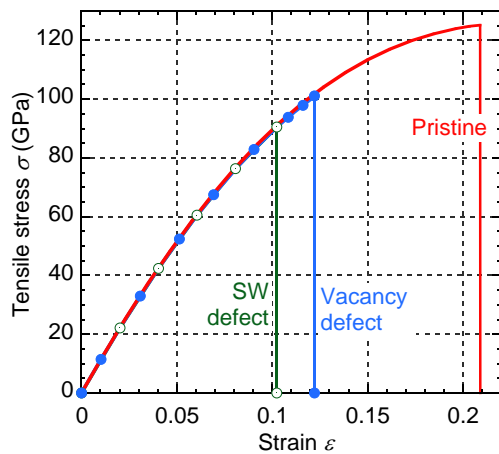
که در آن $\varepsilon' = \delta'/D$ کرنش جانبی ایجاد شده در مقطع وسط CNT تحت اثر بار محوری می‌باشد (δ' تغییر قطر است).

شکل ۴ تغییرات مدول یانگ و نسبت پواسون را بر حسب قطر نانولوله نشان می‌دهد. از نتایج برمی‌آید که برای نانولوله‌ی آرمچیر، مدول یانگ تقریباً مستقل از قطر لوله است. در مورد CNT زیگزاگ با قطر کمتر از ۲ nm، وابستگی مدول یانگ به قطر مشاهده می‌شود. مدول‌های یانگ که با استفاده از روش MSM اصلاح شده در این مقاله به دست آمده، با آنچه از تحلیل MSM اولیه‌ی حاصل شد (GPa) (۰/۹-۱/۰۴) [۴]، همسان است. سهم برهم‌کنش‌های پیچش و وارونگی در خواص مکانیکی محوری برای تغییر شکل‌های کوچک ناچیز است [۲۰]. بنابراین، دلیل بیشتر پیش‌بینی شدن جزیی E در این کار نسبت به نتایج روش MSM اولیه [۴]، باید به خاطر تفاوت در مقادیر k_1^{lin} و c_1^{lin} در دو روش باشد. مدول‌های یانگ به دست آمده همچنین همانند نتایج به دست آمده از حل فرم بسته‌ی MM [۲۱، ۲۲] و برای نانولوله‌های آرمچیر روند مشابهی با نتایج شبیه‌سازی MD [۲۰] دارد. با افزایش قطر لوله، این مقادیر به ۱/۱۳ TPa همگرا می‌شود که خیلی نزدیک به مقدار تجربی ۱/۰۶ TPa برای گرافن [۲۳] می‌باشد.

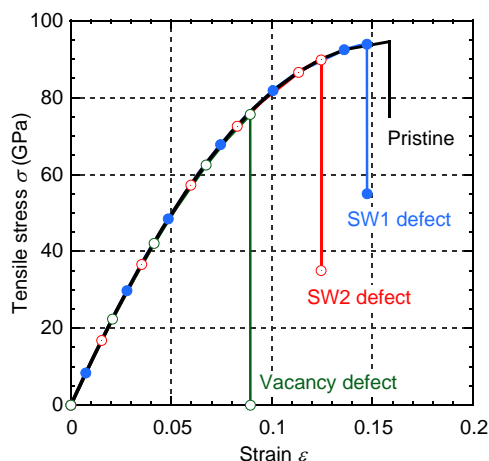
مطابق شکل ۴، برای CNT زیگزاگ در قطرهای کوچک، وابستگی نسبت پواسون به دست‌سازنی و اندازه قابل توجه است. مدل MSM اولیه مقادیر بسیار پایینی (۰/۰۶-۰/۰۸) را برای نسبت پواسون به دست داد [۴]. این به دلیل سفتی بالای مقطع تیر حول همه‌ی محوهای شعاعی، شامل محور منطبق بر وارونگی، بود.

جایگزین کردن مقطع مستطیلی با مقطع دایروی اولیه [۱۵، ۱۶] باعث بهبود در مقادیر پیش‌بینی شده برای نسبت پواسون CNT شد. در [۱۶] نتایج با افزایش قطر از ۰/۸ تا ۳/۲ در محدوده‌ی ۰/۲۲ تا ۰/۱ تغییر می‌کرد. اما، مقدار

نشان داده شده است. این دو نانولوله قطر تقریباً یکسان و برابر $D = 1/9 \text{ nm}$ دارند. مشاهده می‌شود که تنش تا رسیدن به استحکام کششی افزایش یافته، پس از آن به صورت ناگهانی بدون تغییر شکل بیشتر کاهش می‌یابد که این نشانگر شکست ترد است. تنش و کرنش شکست CNT آرمچیر ($125/2 \text{ GPa}$ و $20/9\%$) بیشتر از مقادیر مشابه برای نوع زیگزاگ ($94/5 \text{ GPa}$ و $15/8\%$) پیش‌بینی شد. این وابستگی رفتار کششی به دست‌سازنی لوله به دلیل تفاوت در جهت‌گیری حلقه‌های شش‌گوش و در نتیجه پیوندهای C-C نسبت به محور بارگذاری است.



شکل ۵- منحنی‌های تنش-کرنش برای نانولوله‌ی کربنی (۱۴، ۱۴) آرمچیر سالم و معیوب



شکل ۶- منحنی‌های تنش-کرنش برای نانولوله‌ی کربنی (۰، ۲۴) زیگزاگ سالم و معیوب

[۲۰] مقدار $0.26/r$ را بر مبنای شبیه‌سازی MD گزارش کردند اما آنها مقدار سفتی پیچشی را خیلی کوچک در نظر گرفتند. تحقیقات در مورد اثر ثوابت سفتی پیچش و وارونگی بر خواص الاستیک نشان می‌دهد که نسبت پواسون و در نتیجه سفتی شعاعی به این پارامترها وابستگی مستقیم دارند، در حالی که مدول یانگ تنها به صورت جزئی از آنها تاثیر می‌پذیرند [۱۶]. پرداختن به روش‌های تعیین پارامترها برای افزایش دقت محاسبات خارج از حیطه‌ی این مقاله است.

۳-۲- رفتار غیر خطی CNT در کشش

منحنی تنش-کرنش نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر با قطرهای مختلف تحت اثر بار محوری تا نقطه‌ی شکست به دست آمد. جزء محدود تیر با رفتار غیر خطی مطابق با معادلات (۴)-(۷) برای متصل کردن اتم‌های کربن مجاور مورد استفاده قرار گرفت. چنانکه در شکل ۳(الف) نشان داده شده است، با افزایش طول باند نیرو افزایش یافته، در $\Delta r = 0.264/r$ به مقدار بیشینه‌ی خود می‌رسد. این نقطه منطبق بر سفتی صفر تیر در راستای محوری می‌باشد. چنانکه بلیتشکو و همکاران [۱۷] گزارش داده‌اند، استحکام شکست CNT به این نقطه وابسته است و شکل منحنی پس از این نقطه بر رفتار شکست تاثیرگذار نیست. به علاوه، بررسی اثر فاصله‌ی برش (cut-off) با مقادیر مختلف ($0.168/r$ ، $0.175/r$ و $0.185/r$) نشان داد که رفتار کششی CNT تقریباً مستقل از این متغیر است [۲۴]. در محاسبات، مطابق با [۲۴]، معیار شکست پیوند $\Delta r = 0.33 \text{ nm}$ در نظر گرفته شد و نیرو سفتی خمشی در ازدیاد طول بیش از این مقدار برابر صفر در نظر گرفته شد.

شایان ذکر است، در مدل‌سازی MSM شکست، پدیده‌های پس‌چیده‌ای چون آرایش مجدد پیوندها و استحاله‌های ساختاری قابل بررسی نیست. بنابراین، نتایج می‌تواند برای دماهای پایین تصویر درستی از شکست را ارائه دهد. در ادامه، نتایج به دست آمده از تحلیل غیر خطی برخی از نانولوله‌ها ارائه می‌شود.

۳-۲-۱- CNT سالم

منحنی تنش-کرنش به دست آمده برای نانولوله‌های آرمچیر (۱۴، ۱۴) و زیگزاگ (۰، ۲۴) به ترتیب در شکل‌های ۵ و ۶

۳-۲-۱- شکست پیش‌روندهی CNT معیوب

برای CNT سالم، محاسبات استحکام شکست را در محدوده‌ی ۹۴-۱۲۶ GPa پیش‌بینی می‌کند. اما، CNT به صورت تجربی از نظر ساختاری بی‌عیب نیست و خواص مکانیکی آنها به دلیل وجود عیوب محدود می‌شود. دو دسته عیب مهم، عیوب تهی‌جای و استون-ویلز (Stone-Wales, SW) می‌باشند. عیب SW مربوط به چرخش یک پیوند C-C حول مرکز خود و تشکیل عیب هندسی ۵-۷-۷-۵ (یک جفت هفت ضلعی که با یک جفت پنج ضلعی مرز مشترک دارد) می‌شود (شکل ۸ را ببینید). این عیوب می‌تواند در حین رشد و تیمار CNT و یا به دلیل کرنش‌های مکانیکی ایجاد شود [۲۵].

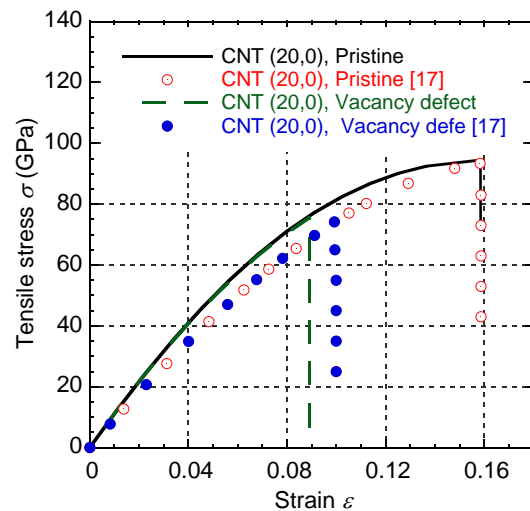
با استفاده از مدل اصلاح شده و تعمیم یافته‌ی MSM در این مقاله، اثر وجود عیب اولیه‌ی تهی‌جای و SW بر رفتار شکست و تنش و کرنش نهایی CNT مورد مطالعه قرار گرفت. به دلیل آنکه استحاله‌ی SW در کرنش محوری ۵٪-۶٪ اتفاق می‌افتد [۲۵]، در کرنش‌های فراتر از این مقدار منحنی تنش-کرنش CNT سالم می‌تواند با منحنی نانولوله با عیب SW جایگزین شود.

شکل ۸ نشان‌دهنده‌ی شکست پیش‌روندهی CNT آرمچیر (۱۴، ۱۴) با عیب SW و تهی‌جای تحت اثر بار محوری است. منحنی‌های تنش-کرنش متناظر در مقایسه با نانولوله‌ی بی‌عیب در شکل ۵ آورده شده‌اند. مشاهده می‌شود که وجود یک تک عیب سفتی نانولوله را چندان تغییر نمی‌دهد. با این وجود، استحکام نانولوله‌های معیوب به مقدار قابل توجهی می‌یابد. این نتایج در جدول ۱ خلاصه شده است.

در عیب ۵-۷-۷-۵ روی CNT (۱۴، ۱۴)، پیوند C-C دوران یافته به موازات راستای محوری قرار داشته، و تحت اثر یک بار مستقیم قرار می‌گیرد. ترک از این نقطه جوانه می‌زند و در راستای $\pm 45^\circ$ انتشار می‌یابد. استحکام و الگوی شکست پیش‌بینی شده با نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بلیتشکو و همکاران [۱۷] و مدل جزء محدود ژیاو و همکاران [۱۷] مطابقت دارد. به صورت مشابه، در مورد عیب تهی‌جای ابتدا پیوندهای نزدیک‌تر به راستای محوری می‌شکنند و سپس ترک در جهت $\pm 45^\circ$ در راستای محیط CNT رشد می‌کند.

در مورد نوع زیگزاگ، جهت‌گیری یک سوم پیوندها موازی محور لوله است و عمده‌ی بار محوری به وسیله‌ی آنها تحمل می‌شود. در مقابل در نوع آرمچیر، دو سوم پیوندها تغییر شکل محوری نانولوله را به عهده می‌گیرند. بررسی بیشتر بر روی نانولوله‌ها با قطرهای مختلف نشان می‌دهد که برای دست‌سازنی یکسان، تنش و کرنش شکست تقریباً مستقل از قطر است.

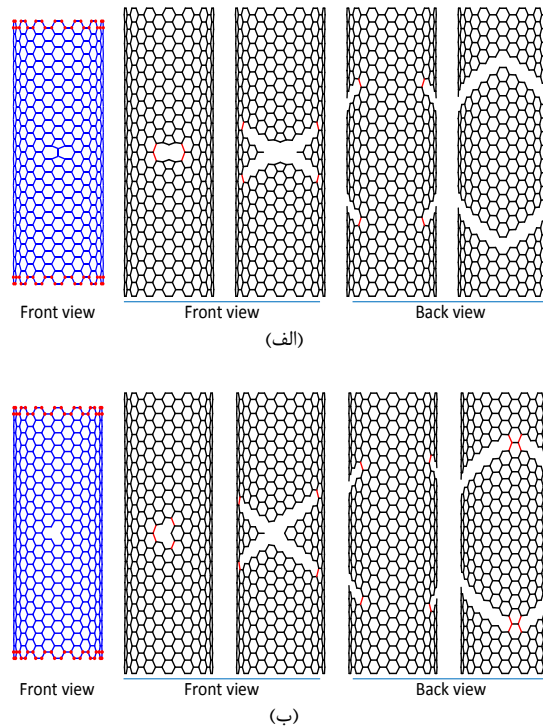
پیش‌بینی‌های این مدل برای نقطه‌ی شکست CNT سالم (Pristine) در تطابق نزدیک با نتایج حاصل از مدل‌سازی تحلیلی MSM به وسیله‌ی ژیاو و همکاران [۲۱] و محاسبات MM بلیتشکو و همکاران [۱۷] است. شکل ۷ منحنی‌های تنش-کرنش به دست آمده در این مقاله را با نتایج محاسبات MM انجام شده به وسیله‌ی بلیتشکو و همکاران [۱۷] برای CNT سالم و معیوب (۰، ۲۰) مقایسه می‌کند. تفاوت جزئی در این نتایج می‌تواند به دلیل نظر گرفتن ترم‌های انرژی بیشتر در این مطالعه باشد. به علاوه، مدل جزء محدود MSM اولیه به همراه الگوریتم بروزرسانی گام به گام سفتی که توسط تسرپس و پاپانیوکوس [۱۱] به کار گرفته شد، نتایج بسیار مشابهی در مورد تنش و کرنش شکست CNT سالم تحت بار کششی به دست داد.



شکل ۷- منحنی‌های تنش-کرنش برای نانولوله‌ی کربنی سالم و معیوب (۰، ۲۰) در مقایسه نتایج مکانیک مولکولی گزارش شده در [۱۷]

شود؛ نوع ۱ (SW1) و نوع ۲ (SW2). در عیب نوع SW1 پیوند دوران یافته عمود بر راستای محور CNT، و عیب متقارن است. در عیب نوع SW2، شش‌گوش و هفت‌گوش نامتقارن‌اند.

منحنی تنش- کرنش این نانولوله‌های معیوب به همراه نانولوله‌های سالم در شکل ۶ نشان داده شده است. به علاوه، اثر هر عیب بر تنش و کرنش شکست از داده‌های جدول ۱ قابل دسترسی است. برای تمام انواع عیوب ذکر شده، تغییر شکل موضعی شدید و شکست پیوند در ناحیه‌ی عیب اتفاق می‌افتد و به اتم‌های مجاور منتشر می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که وجود یک عیب تهی‌جای باعث درصد کاهش یکسان در استحکام نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر می‌شود. در مورد عیب SW، با توجه به جهت‌گیری عیب، رفتار تغییر می‌کند. در عیب نوع SW1، پیوند دوران یافته به اندازه‌ی 90° ، اکنون بر راستای بارگذاری عمود است. در نتیجه، تغییر شکل روی چهار پیوند عمودی حلقه‌های هفت‌ضلعی متمرکز شده، ترک از این ناحیه در راستای محیطی منتشر می‌شود. در عیب نامتقارن نوع SW2، کرنش ابتدا روی دو پیوند عمودی هفت‌ضلعی متمرکز شده، پس شکسته شدن آنها، به اطراف منتشر می‌شود. برای عیب نامتقارن SW2، کاهش استحکام و کرنش شکست بزرگتر از مقادیر متناظر برای عیب نوع SW1 است. از شکل‌های ۵ تا ۹ مشاهده می‌شود که در تمامی نانولوله‌های معیوب پس از شکست اولین پیوند، تنش به شدت کاهش می‌یابد و شکست ترد است.



شکل ۸- شکست پیش‌رونده‌ی نانولوله‌ی (۱۴، ۱۴) شامل عیب (الف) استون-ویلز و (ب) تهی‌جای. شکل‌های سمت چپ نانولوله را در حالت بدون کرنش نشان می‌دهد

در شکل ۹ الگوی شکست پیش‌بینی شده برای نانولوله‌ی کربنی (۰، ۲۴) شامل عیب SW و تهی‌جای نشان داده شده است. در نانولوله‌ی زیگزاگ، چنانکه در شکل ۹ (الف) و (ب) نشان داده شده است، عیب SW به دو صورت می‌تواند ظاهر

جدول ۱- تنش و کرنش شکست پیش‌بینی شده برای نانولوله‌های کربنی با و بدون عیب

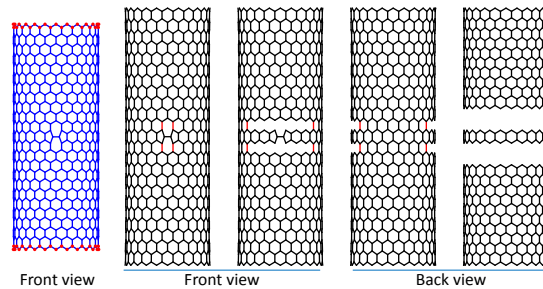
(24, 0)				(14, 14)			نوع نانولوله
تهی‌جای	SW2	SW1	سالم	تهی‌جای	SW	سالم	$D = 1/9 \text{ nm}$ $L = 5 \text{ nm}$
							تنش شکست (GPa)
75.6	89.8	93.9	94.5	101.1	90.5	125.2	
(20)	(5)	(1)	-	(19)	(28)	-	(درصد کاهش)*
							کرنش کششی (%)
8.92	12.5	14.7	15.8	12.2	10.0	20.9	
(44)	(18)	(7)	-	(42)	(52)	-	(درصد کاهش)*

* بر مبنای نانولوله‌ی سالم محاسبه شده است.

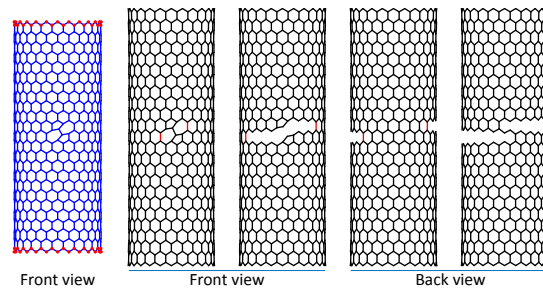
تیر که به ترتیب منطبق بر محورهای خمش زاویه‌ی پیوند و وارونگی‌اند استفاده شد. در مقابل روش MSM اولیه، در مدل کنونی، سهم برهم‌کنش‌های خمش زاویه‌ی پیوند و وارونگی از هم تفکیک می‌شود. این امر با در نظر گرفتن رفتارهای متفاوت برای خمش حول محورهای اصلی مقطع تیر حاصل شد. مدل‌های الاستیک CNT محاسبه گردید و نشان داده شد که مدل حاضر در مقایسه به مدل‌های تیر با مقطع مستطیلی، تخمین‌های بهتری برای نسبت پواسون ارائه می‌دهد. همچنین، تحلیل رفتار تغییر شکل بزرگ و شکست نانولوله‌های سالم و معیوب بر مبنای مدل حاضر با موفقیت به انجام رسید. نتایج نشان داد که الگوی شکست و تنش و کرنش نهایی نانولوله با جهت‌گیری عیب هندسی تحت تاثیر قرار می‌گیرد.

مراجع

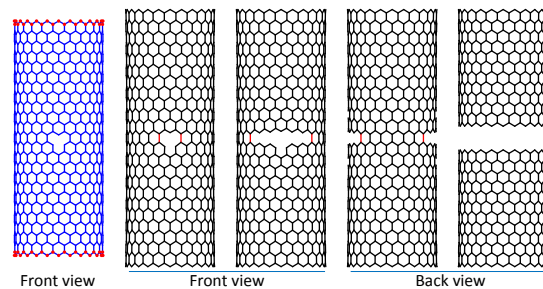
- [1] Iijima S (1991) Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature* 354(6348): 56–58.
- [2] Yakobson BI, Brabec C, Bernholc J (1996) Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear response. *Phys Rev Lett* 76(14): 2511–2514.
- [3] Odegard GM, Gates TS, Nicholson LM, Wise KE (2002) Equivalent-continuum modeling of nanostructured materials. *Compos Sci Technol* 62(14): 1869–1880.
- [4] Li C, Chou T-W (2003) A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes. *Int J Solids Struct* 40(10): 2487–2499.
- [5] Nasdala L, Kempe A, Rolfes R (2010) The molecular dynamic finite element method (MDFEM). *Computers, Materials and Continua* 19(1): 57–104.
- [6] Li C, Chou T-W (2004) Modeling of elastic buckling of carbon nanotubes by molecular structural mechanics approach. *Mechanics of Materials* 36(11): 1047–1055.
- [7] Li C, Chou T-W (2003) Elastic moduli of multi-walled carbon nanotubes and the effect of van der Waals forces. *Composites Science and Technology* 63(11): 1517–1524.
- [8] Tserpes KI, Papanikos P (2005) Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes. *Composites Part B* 36(5): 468–477.
- [9] Ghaderi SH, Hajiesmaili E (2012) Molecular structural mechanics applied to coiled carbon nanotubes. *Computational Materials Science* 55: 344–349.
- [10] Fakhraabadi MMS, Amini A, Reshadi F, Khani N, Rastgoo A (2013) Investigation of buckling and vibration properties of hetero-junctioned and



(الف)



(ب)



(ج)

شکل ۸- الگوی شکست نانولوله‌ی (۰، ۲۴) شامل عیب (الف) استون-ویلز نوع ۱، (ب) استون-ویلز نوع ۲، و (ج) تهی‌جای، شکل‌های سمت چپ نانولوله را در حالت بدون کرنش نشان می‌دهد

۳- جمع‌بندی

مدل اولیه‌ی مکانیک مولکولی ساختاری برای پیش‌بینی ثوابت الاستیک و نیز رفتار تغییر شکل بزرگ و شکست نانولوله‌های کربنی اصلاح شد و تعمیم یافت. مدل ساختاری CNT با اتصال اتم‌های کربن مجاور به وسیله‌ی یک جزء محدود تیر با مقطع عمومی ساخته شد. یک روش قاعده‌مند برای تعریف جهت محورهای اصلی اولیه و ثانویه‌ی مقطع

- walled super carbon nanotubes via a generalized molecular structure mechanics method. *Comp. Mater. Sci.* 61(0): 27–33.
- [15] Li H, Guo W (2008) Transversely isotropic elastic properties of single-walled carbon nanotubes by a rectangular beam model for the C-C bonds. *J Appl Phys* 103(10): 103501.
- [16] Chen W-H, Cheng H-C, Liu Y-L (2010) Radial mechanical properties of single-walled carbon nanotubes using modified molecular structure mechanics. *Computational Materials Science* 47(4): 985–993.
- [17] Belytschko T, Xiao S, Schatz G, Ruoff R (2002) Atomistic simulations of nanotube fracture. *Physical Review B* 65(23): 235430.
- coiled carbon nanotubes. *Comp Mater Sci* 73: 93–112.
- [11] Tserpes KI, Papanikos P (2007) The effect of Stone–Wales defect on the tensile behavior and fracture of single-walled carbon nanotubes. *Composite Structures* 79(4): 581–589.
- [12] Tserpes KI, Papanikos P, Tsirkas SA (2006) A progressive fracture model for carbon nanotubes. *Composites Part B* 37(7–8): 662–669.
- [13] Liu X, Yang Q, He X, Mai Y (2011) Molecular mechanics modeling of deformation and failure of super carbon nanotube networks. *Nanotechnology* 22(47): 475701.
- [14] Liu X, Yang Q, He X, Liew KM (2012) Size- and shape-dependent effective properties of single-