



بررسی کمانش و پس‌کمانش نانولوله‌های کربنی تک‌جداره با استفاده از شبیه‌سازی عددی

سیما بشارت فردوسی^۱، بهروز حسینی^{۲*}، آرمین دانش‌شور^۳^۱ دانشجو کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی، مشهد^۲ استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی، مشهد^۳ کارشناس ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی، مشهد

تاریخ دریافت: ۱۳۹۳/۱۰/۰۸؛ تاریخ بازنگری: ۱۳۹۳/۱۲/۱۹؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۴/۰۲/۳۰

چکیده

در این مقاله، به بررسی بار نهایی کمانش و رفتار پس‌کمانش نانولوله‌های کربنی تک‌جداره تحت بار فشاری محوری در شرایط دمایی مختلف پرداخته شده است. بار نهایی کمانش در شرایط مرزی یک‌سر آزاد- یک‌سر گیردار و دو سر مفصل، و رفتار پس‌کمانش در شرایط مرزی دو سر گیردار مورد مطالعه قرار گرفته است. در اینجا با بکارگیری مدل قاب فضایی، بار نهایی کمانش و مسیر پس‌کمانش برای نانولوله‌های آرمچیر و زیگ‌زاگ برای کاپرالیته‌ها و نسبت‌های طول به قطر مختلف محاسبه شده است. در این رهیافت پیوندهای بین اتم‌های کربن به مثابه عضو حامل نیرو توسط تیر الاستیک سه بعدی مدل می‌شود که خواص آن با ایجاد پیوند بین ساختار مولکولی و مکانیک محیط پیوسته بدست می‌آید. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که با افزایش نسبت طول به قطر و کاهش کاپرالیته، بار نهایی کمانش کاهش می‌یابد. همچنین مشاهده شده است که مسیر پس‌کمانش برای هر دو نانولوله آرمچیر و زیگ‌زاگ تقریباً یکسان است. در ادامه اثر دما روی بار نهایی کمانش مورد بررسی قرار گرفته است. ثوابت نیرویی و همچنین طول پیوند اتم‌های کربن در اثر تغییر دمای محیط، تغییر می‌کنند. همانطور که انتظار می‌رود، افزایش دما موجب کاهش بار نهایی کمانش می‌شود و مسیر پس‌کمانش نیز این روند کاهش را طی می‌کند.

کلمات کلیدی: نانولوله‌های کربنی، کمانش، پس‌کمانش، حرارتی، عیب هندسی، دما، شبیه‌سازی عددی، مکانیک ساختاری.

Numerical simulation of buckling and postbuckling of single wall carbon nanotubes

Sima Besharat Ferdowsi¹, Behrooz Hassani^{2*}, Armin Daneshvar³¹ M.Sc. Student, Mech. Eng., Ferdowsi Univ., Mashhad, Iran² Prof., Mech. Eng., Ferdowsi Univ., Mashhad, Iran³ M.Sc. Mech. Eng., Ferdowsi Univ., Mashhad, Iran

Abstract

Study of the critical buckling load as well as post-buckling behavior of single-walled nanotubes (SWNT) under various thermal conditions is the subject of this article. For finding critical buckling loads the clamped-free and simply supported conditions are considered and for post-buckling analysis the boundary conditions are assumed to be clamped. A space-frame model is here employed for the zigzag and armchair nanotubes with different chiralities and aspect ratios. In this approach, the linkage between carbon atoms is modeled as three dimensional elastic beam. By establishing a linkage between structural mechanics and molecular mechanics, the sectional property parameters of these beam members are obtained. The obtained results indicate that, as it is expected, by increasing the aspect ratio of the nanotubes as well as chirality, the critical buckling load decreases. Also, it is noticed that the post-buckling behavior of both armchair and zigzag nanotubes are quite similar. In addition, the effect of temperature on the critical buckling load is investigated. Due to the influence of temperature over the linkage length and force field constants it is shown that when the temperature increases a decline in the critical buckling loads is observed.

Keywords: Carbon nanotubes, buckling, postbuckling, thermal, imperfection, temperature, numerical simulation, structural mechanics.

۱- مقدمه

فناوری نانو را میتوان در ساده‌ترین حالت، بررسی مواد در ابعاد اتمی یا مولکولی در مقیاس یک میلیارد متر تعریف کرد. فناوری نانو توصیف همه جانبه فعالیت‌هایی است که با دست‌کاری در کوچک‌ترین جزء ماده یعنی اتم، باعث دستیابی به خواص خارق‌العاده آن می‌شود [۱]. نانولوله‌ها دارای خواص استثنایی (مکانیکی، الکتریکی و حرارتی) هستند. به خصوص هندسه منحصر به فرد و خواص مکانیکی آن‌ها باعث شده است که کاربردهای عملی زیادی در صنعت داشته باشند [۲]. نانولوله‌ها می‌توانند تک‌جداره یا چندجداره باشند. فاصله بین دو دیواره مجاور در نانولوله‌های چندجداره، 0.34nm است. طول پیوند دو اتم کربن مجاور در یک سلول شش ضلعی 0.142nm - 0.139nm می‌باشد [۳]. از نظر هندسی فرض می‌شود که نانولوله‌ها از طریق پیچیده شدن صفحات گرافن به دور خود تشکیل شده‌اند. بسته به اینکه محور پیچش چگونه باشد نانولوله‌ها به انواع گوناگون زیگ‌زاگ^۱، آرمچیر^۲ یا مارپیچی^۳ دسته‌بندی می‌شوند. در سال ۱۹۵۹ ریچارد فایمن^۴، برنده جایزه نوبل، در نطق مشهورش تحت عنوان «آن پایین فضای بسیاری وجود دارد» انقلاب نانو را آغاز کرد. در سال ۱۹۸۵ ریچارد اسمالی^۵ ساختار باکی‌بال را به کمک لیزر ساخت. در سال ۱۹۹۰ در مؤسسه تحقیقاتی ماکس پلانک، باکی‌بال با قوس تخلیه الکتریکی ساخته شد. و سرانجام در سال ۱۹۹۱ سومیو ایچیمای^۶ در مؤسسه ان ای سی ژاپن به نانولوله چند جداره دست یافت و آغازگر تحقیقات بر روی نانولوله‌ها شد [۴]. یکی از مسائل مهمی که در بحث نانولوله‌ها مطرح می‌شود، کمانش و پایداری آن‌ها در برابر انواع نیروها است. یوو وانگ و ژیوو وانگ^۷ در سال ۲۰۰۵ با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، مطالعاتی در زمینه تغییر شکل فشاری نانولوله‌های کربنی تک‌جداره انجام دادند [۵]. آنها نشان دادند که برای نانولوله‌های تک‌جداره با طول زیاد، حالت کمانش سراسری^۸ (کمانش ستونی) رخ

می‌دهد و این در حالی است با کاهش طول، حالت کمانش از سراسری به محلی^۹ (کمانش پوسته‌ای) تبدیل می‌شود. لی و چو^{۱۰} [۶] با استفاده از روش مکانیک ساختار مولکولی، کمانش نانولوله‌های کربنی تک‌جداره و چندجداره را برای شرایط مرزی یک‌سر آزاد-یک‌سر گیردار محاسبه کرده و با نتایج بدست آمده از فرمول کمانش اویلر برای ستون یک‌سر آزاد، مقایسه کرده‌اند. انصاری و روحی [۷] در سال ۲۰۱۰ بار نهایی کمانش نانولوله‌های تک‌جداره را با استفاده از روش مکانیک ساختار مولکولی مورد مطالعه قرار دادند و به این نتیجه رسیدند که با افزایش نسبت طول به قطر، بار نهایی کمانش نانولوله‌ها کاهش می‌یابد. سعیدی و قربان‌پور در سال ۲۰۰۹ مدل پوسته الاستیک را برای پیش‌بینی مسیر پس‌کمانش نانولوله‌های کربنی تک‌جداره، تحت فشار محوری ارائه دادند. آن‌ها از روش ریتز^{۱۱} برای حل معادلات تعادل حاکم بر مدل پوسته استوانه‌ای بر اساس معادلات دیفرانسیل غیرخطی وان-کارمن^{۱۲} استفاده کردند. نتایج عددی نشان دادند که نانولوله‌های تک‌جداره تحت فشار محوری بعد از کمانش رفتار ناپایداری دارند [۸]. در سال ۲۰۰۶ هان و یائو^{۱۳} با استفاده از مدل پوسته الاستیک و بر اساس حل معادلات دیفرانسیل غیرخطی کارمن-دونل^{۱۴} کمانش و پس‌کمانش نانولوله‌های کربنی دو‌جداره تحت فشار محوری را مورد بررسی قرار دادند. نتایج عددی بدست آمده حاکی از آن است که رفتار پس‌کمانش نانولوله‌های کربنی دو‌جداره کاملاً ناپایدار است [۹].

ژانگ و شن^{۱۵} در سال ۲۰۰۶ با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و بر اساس حل تابع پتانسیل لنارد-جونز^{۱۶}، کمانش و رفتار پس‌کمانش نانولوله‌های کربنی تک‌جداره آرمچیر و زیگ‌زاگ، تحت بار فشاری محوری، پیچش و فشار خارجی را مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها اثر نیروی واندروالس و تغییرات دما روی پس‌کمانش را مورد بررسی قرار داده و به این نتیجه رسیدند که می‌توان از اثرات

⁹ Local buckling¹⁰ Li & Chou¹¹ Ritz Method¹² Von-Karman¹³ Han & Yao¹⁴ Karman-Donnell¹⁵ Zhang & Shen¹⁶ Lennard-Jones¹ Zigzag² Armchair³ Chiral⁴ Richard Feynman⁵ Richard Smally⁶ Iijima⁷ Yu Wang & Xiu Wang⁸ Global buckling

مقطع المان تیر دایره‌ای و ثابت در نظر گرفته می‌شود [۱۲]. در مکانیک کلاسیک، انرژی کرنشی یک تیر با سطح مقطع یکنواخت A و طول L ، تحت یک نیروی محوری خالص F ، کوپل خمشی خالص M و کوپل پیچشی خالص T به ترتیب به صورت زیر است:

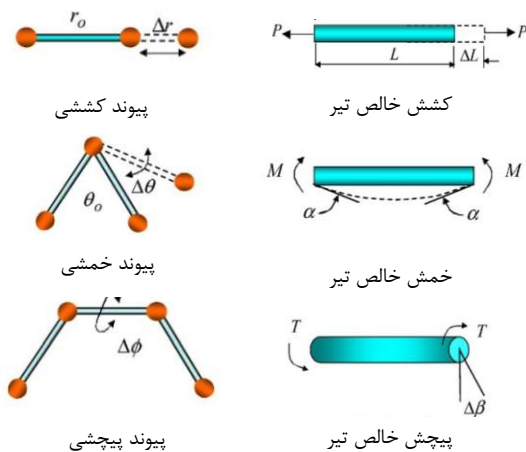
$$U_A = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{F^2}{EA} dL = \frac{1}{2} \frac{F^2 L}{EA} = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (\Delta L)^2 \quad (5)$$

$$U_M = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = \frac{2EI}{L} \alpha^2 = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (2\alpha)^2 \quad (6)$$

$$U_T = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\Delta\beta)^2 \quad (7)$$

در این روابط ΔL تغییر طول تیر، α زاویه چرخش و $\Delta\beta$ تغییر زاویه نسبی دو انتهای المان تیر است. همچنین E مدول یانگ، G مدول برشی، I ممان اینرسی و J ممان قطبی سطح مقطع المان تیر می‌باشد.

می‌توان بیان کرد که U_A و U_T انرژی‌های کششی، U_M و U_T انرژی‌های خمشی و U_T و U_T انرژی‌های پیچشی در دو سیستم مولکولی و ساختاری هستند. لذا با مقایسه معادلات (۲) تا (۴) با معادلات (۵) تا (۷) می‌توان روابط مستقیم بین پارامترهای مکانیک ساختاری EA ، EI و GJ با پارامترهای مکانیک مولکولی K_r ، K_θ و K_τ را مطابق با رابطه (۸) بدست آورد.



شکل ۱- هم ارزی پیوندهای کوالانس و غیر کوالانس بین اتم‌های کربن در ساختار مکانیک مولکولی با مکانیک سازه‌ای [۷].

نیروی و اندروالس روی رفتار پس‌کمانش نانولوله‌های کربنی تک‌جداره تحت بار فشاری محوری صرف‌نظر کرد [۱۰]. شریعتی و لشکری‌زاده [۱۱] در سال ۲۰۱۴ با استفاده از مدل مکانیک سازه‌ای، رفتار کمانش نانولوله کربنی را که از دسته کردن سه نانولوله کربنی تک‌جداره تشکیل شده است، مورد بررسی قرار دادند. در این مدل اثر نیروی و اندروالس بوسیله المان فنر غیرخطی مدل شده است.

۲- مدل ساختار قاب‌فضایی برای نانولوله‌های کربنی

با در نظر گرفتن نانولوله‌های کربنی به شکل سازه‌ای با ساختار قاب فضایی، پیوندهای بین اتم‌های کربن به عنوان اعضای حامل نیرو توسط تیر الاستیک سه بعدی مدل می‌شود و محل اتصال اعضا دقیقاً در مرکز اتم‌های کربن در نظر گرفته می‌شوند [۱۲]. جمله عمومی انرژی پتانسیل، هنگامی که از اندرکنش‌های الکترواستاتیکی در رابطه انرژی صرف‌نظر شود به صورت زیر بیان می‌شود [۷]:

$$U = \sum u_r + \sum u_\theta + \sum u_\phi + \sum u_w + \sum u_{vdw} \quad (1)$$

در این رابطه، u_r انرژی کشش پیوند، u_θ انرژی خمش یا تغییر زاویه، u_ϕ انرژی پیچش یا تغییر زاویه دو سطحی، u_w پیچش خارج از صفحه و u_{vdw} انرژی نیروهای و اندروالس است. در نانولوله‌های تک‌جداره، چهار جمله اول که بیشترین تأثیر را دارند، در نظر گرفته می‌شوند. در حالت تغییر شکل‌های کوچک مطابق شکل ۱ داریم [۷]:

$$U_r = \frac{1}{2} K_r (r - r_0)^2 = \frac{1}{2} K_r (\Delta r)^2 \quad (2)$$

$$U_\theta = \frac{1}{2} K_\theta (\theta - \theta_0)^2 = \frac{1}{2} K_\theta (\Delta\theta)^2 \quad (3)$$

$$U_\tau = U_\phi + U_w = \frac{1}{2} K_\tau (\Delta\phi)^2 \quad (4)$$

که k_r سختی کششی پیوند، k_θ سختی خمشی و k_τ سختی پیچشی پیوند می‌باشد. در حالی که Δr تغییر طول پیوند، $\Delta\theta$ تغییر زاویه و $\Delta\phi$ تغییر زاویه پیچش پیوند را نمایش می‌دهد. شماتیکی از این هم‌ارزی در شکل ۱ نمایش داده شده است. برای بدست آوردن خواص الاستیک تیر باید ارتباط بین پارامترهای سختی در مکانیک سازه‌ای و ثوابت میدان نیرو در مکانیک مولکولی را بدست آید. برای سادگی

جدول ۱- تغییرات ضریب انبساط حرارتی گرافن در دماهای مختلف محیط

$T(C)$					
۱۱۲۷	۷۶۴	۵۲۷	۲۷	-۱۷۳	
۱۰/۶	۹/۹	۹/۳۵	۰	-۱۰	α
$= (10^{-5}/C)$					

ثوابت نیروی کششی پیوند K_r^T و خمشی زاویه پیوند K_θ^T در دمای محیطی T برحسب درجه سانتیگراد، از کلیات قانون باگر^۱ [۱۵] به شکل زیر بدست می‌آیند:

$$K_r^T = \frac{1}{(1+\alpha T)^3} K_r \quad (13)$$

$$K_\theta^T = \frac{1}{(1+\alpha T)^3} K_\theta \quad (14)$$

با بدست آوردن ثوابت میدان نیرو در دمای محیطی T بر حسب درجه سانتیگراد می‌توان با استفاده از روابط (۱۰) مقادیر مدول یانگ و مدول برشی را برای آن دما محاسبه کرد.

۴- بررسی کمانش و پس‌کمانش نانولوله‌های کربنی

در این مقاله از مدل قاب فضایی برای شبیه‌سازی نانولوله‌های کربنی استفاده شده است. نظر به ساختار نظام‌مند^۲ نانولوله‌ها، این امکان وجود دارد که با سهولت نسبی موقعیت گره‌های مدل قاب فضایی را محاسبه کرده و با شماره‌گذاری گره‌ها، اتصال^۳ بین آنها را نیز تعریف نمود. در این پژوهش برای این منظور از کد نوشته شده در زبان متلب استفاده شده است. لازم به ذکر است که شبیه‌سازی عددی انجام شده در مقیاس واقعی (ابعاد در حدود نانومتر) مدل شده‌اند.

شبیه‌سازی پیوندها با المان تیر الاستیک سه بعدی با قابلیت تحمل خمش، پیچش، کشش و فشار، که دارای شش درجه آزادی در هر گره شامل انتقال در جهت های α ، γ و z و دوران حول هر سه محور مختصات می‌باشد، صورت گرفته است. این المان در نرم‌افزار تجاری آباکوس بصورت B33 نامگذاری می‌شود. هندسه نانولوله‌ها با طول و کایرالیته آنها تعیین می‌گردد. در این مقاله بار بصورت یکنواخت روی

$$\frac{EA}{L} = K_r, \frac{EI}{L} = K_\theta, \frac{GJ}{L} = K_\tau \quad (8)$$

با در نظر گرفتن سطح مقطع دایروی برای تیر داریم:

$$A = \frac{\pi d^2}{4}, \quad I = \frac{\pi d^4}{64}, \quad J = \frac{\pi d^4}{32} \quad (9)$$

در نهایت با جایگذاری روابط (۹) در معادلات (۸) خواهیم داشت [۷]:

$$d = 4 \sqrt{\frac{K_\theta}{K_r}}, \quad E = \frac{K_r^2 L}{4\pi K_\theta}, \quad G = \frac{K_r^2 K_\tau^2 L}{8\pi K_\theta^2} \quad (10)$$

با داشتن ثوابت میدان نیرو در مکانیک مولکولی به صورت زیر [۷]:

$$K_r = 6.52 \times 10^{-7} \text{ N nm}^{-1}$$

$$K_\theta = 8.76 \times 10^{-10} \text{ N nm rad}^{-2}$$

$$K_\tau = 2.78 \times 10^{-10} \text{ N nm rad}^{-2}$$

مقادیر $E = 5/488 \text{ TPa}$ ، $G = 0/870/1 \text{ TPa}$ و $d = 0/147 \text{ nm}$ بدست می‌آیند.

۳- اثر تغییر دما روی ثوابت میدان نیرو

همانطور که قبلاً اشاره شد، انرژی پتانسیل یک ساختار مولکولی از رابطه (۱) بدست می‌آید. برای تحلیل نانولوله‌های کربنی در دماهای مختلف، تحت بارگذاری محوری، تمام جملات به غیر از دو جمله اول قابل صرف‌نظر کردن است [۱۳]. بنابراین انرژی پتانسیل سیستم نانولوله با پیوندهای کربن-کربن در دماهای محیطی متفاوت به شکل زیر نوشته خواهد شد. در واقع می‌توان رابطه (۱) را به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$U = \sum u_r + \sum u_\theta \quad (11)$$

دلیل این امر آن است که برای نانولوله‌ها تحت بارگذاری محوری، زاویه θ در دماهای مختلف محیط، مقدار ۱۲۰ درجه باقی می‌ماند و صرفاً فاصله بین دو اتم کربن با افزایش دمای محیط افزایش می‌یابد. تغییرات فاصله بین دو اتم کربن با تغییر دمای محیط از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$a_r = a(1 + \alpha T) \quad (12)$$

در این رابطه T دمای محیط بر حسب درجه سانتیگراد و

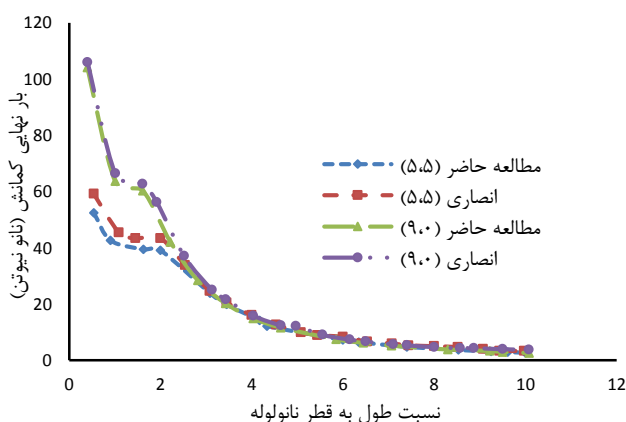
α ضریب انبساط حرارتی گرافن است که مطابق با جدول ۱ برای چند دمای مشخص آورده شده است [۱۴].

¹ badger Law

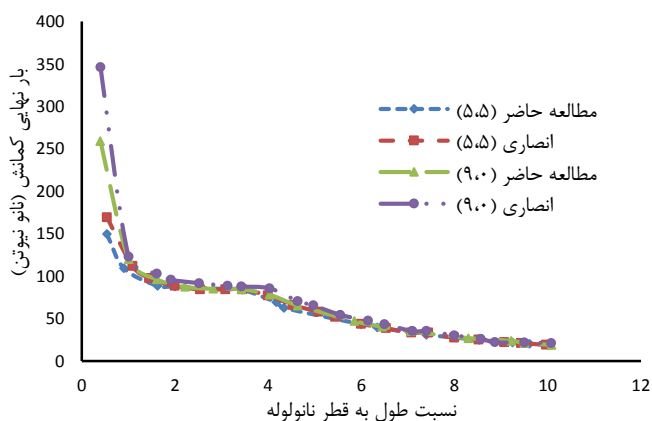
² Structured

³ Connectivity

سطح مقطع دایروی، بدست آورد [۶]. بدین منظور بار نهایی کمانش نانولوله‌های آرمچیر (۳,۳) با قطر 0.407 nm و زیگ‌زاگ (۵,۰) با قطر 0.392 nm را برای شرط مرزی یک‌سر آزاد-یک‌سر گیردار محاسبه کرده و با نتایج تحلیلی بدست آمده برای ستون یک‌سر آزاد [۶]، مقایسه کرده‌ایم. (شکل ۶). نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که در نسبت‌های طول به قطر پایین، بار نهایی کمانش اوپلر برای ستون یک‌سر آزاد بیشتر از مدل قاب فضایی است. این در حالی است که با افزایش نسبت طول به قطر اختلاف بین دو منحنی کم می‌شود.



شکل ۲- مقایسه کمانش نانولوله زیگ‌زاگ (۹,۰) با آرمچیر (۵,۵) در حالت یک‌سر گیردار-یک‌سر آزاد



شکل ۳- مقایسه کمانش نانولوله زیگ‌زاگ (۹,۰) با آرمچیر (۵,۵) در حالت دو سر مفصل

اتم‌های یک انتهای نانولوله اعمال می‌شود. در این بررسی اثرات طول، کایرالیته، شرایط مرزی و تغییرات دما روی کمانش و پس‌کمانش نانولوله‌های کربنی مورد بررسی قرار گرفته است.

۴-۱- بررسی کمانش نانولوله‌های کربنی در دمای محیط

در این قسمت به بررسی اثرات طول، کایرالیته و شرایط مرزی روی بار نهایی کمانش نانولوله‌ها در دمای 27°C سانتیگراد می‌پردازیم. بار نهایی کمانش نانولوله‌های آرمچیر (۵,۵) با قطر 0.678 nm و زیگ‌زاگ (۹,۰) با قطر 0.706 nm و همچنین نانولوله‌های آرمچیر (۱۵,۱۵) با قطر 2.034 nm و زیگ‌زاگ (۲۶,۰) با قطر 2.036 nm برای نسبت‌های طول به قطر مختلف^۱ و برای شرایط مرزی یک‌سر آزاد-یک‌سر گیردار و دوسر مفصل مورد مطالعه قرار گرفته و برای تاکید بر درستی مدل و تحلیل آن، با کار انصاری [۷] مقایسه شده است. (شکل‌های ۲ تا ۵).

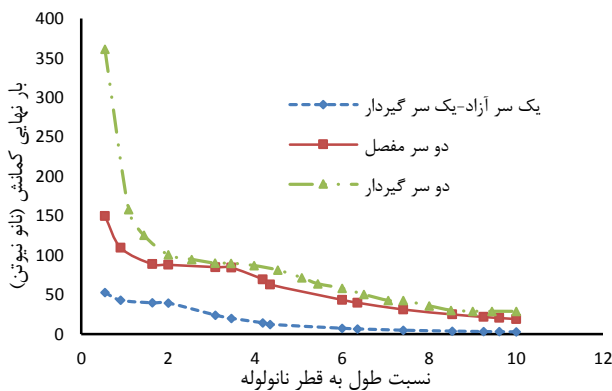
همانطور که در اشکال ۲ تا ۵ مشاهده می‌شود با افزایش نسبت طول به قطر بار نهایی کمانش کاهش می‌یابد. در نسبت‌های طول به قطر پایین، اثر افزایش نسبت طول به قطر روی میزان کاهش بار نهایی، بیشتر است. نمودارهای کمانش نانولوله‌های آرمچیر و زیگ‌زاگ با افزایش نسبت طول به قطر به یکدیگر نزدیک می‌شوند بطوری که در نانولوله‌های نسبتاً بلند، دو منحنی با هم منطبق شده و بار نهایی کمانش مستقل از کایرالیته می‌شود.

همانطور که نشان داده شده است، اختلاف بین منحنی‌های کمانش نانولوله‌های آرمچیر و زیگ‌زاگ در حالت‌های یک‌سر آزاد-یک‌سر گیردار در نسبت طول به قطر پایین، بیشتر از حالت دو سر مفصل است. به بیانی دیگر اثر کایرالیته روی شرط مرزی یک‌سر آزاد-یک‌سر گیردار بیشتر از دو سر مفصل می‌باشد.

به دلیل فقدان روابط تحلیلی مناسب برای محاسبه بار نهایی کمانش نانولوله‌ها، با فرض نانولوله به صورت یک لوله پیوسته، با ضخامت 0.34 nm و مدول یانگ 1 Tpa ، می‌توان بار نهایی کمانش را بر اساس فرمول اوپلر، برای یک ستون با

^۱ Aspect ratio

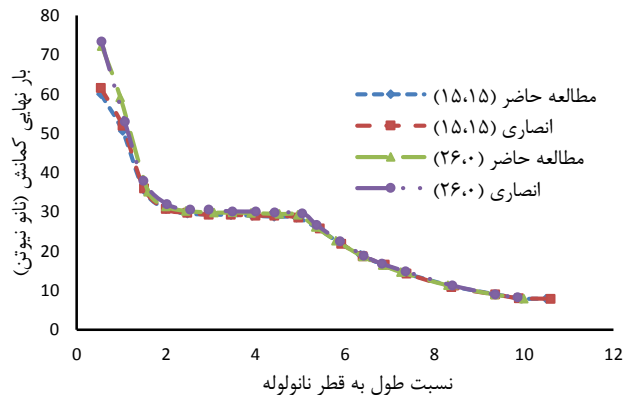
به منظور بررسی اثر شرایط مرزی روی بار بحرانی کمانش نانولوله‌های کربنی، نمودار بار بحرانی بر حسب نسبت‌های مختلف طول به قطر نانولوله‌ی آرمچیر (۵,۵) برای شرایط مرزی دوسر مفصل، یک‌سر آزاد-یک‌سر گیردار و دوسر گیردار در شکل ۷ آورده شده است. مشاهده می‌شود که بار نهایی کمانش برای حالت دو سر گیردار بیشتر از دو سر مفصل و برای حالت دو سر مفصل بیشتر از یک‌سر آزاد-یک‌سر گیردار می‌باشد. این در حالی است که با افزایش نسبت طول به قطر، منحنی‌ها با شرایط مرزی مختلف به سمت یکدیگر همگرا می‌شوند.



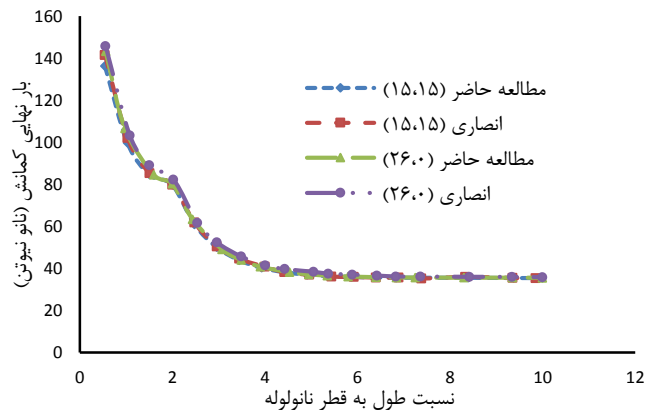
شکل ۷- مقایسه بار نهایی کمانش نانولوله آرمچیر (۵,۵) برای شرایط مرزی مختلف

۲-۴- اثر تغییرات دما روی بار بحرانی کمانش نانولوله‌های کربنی

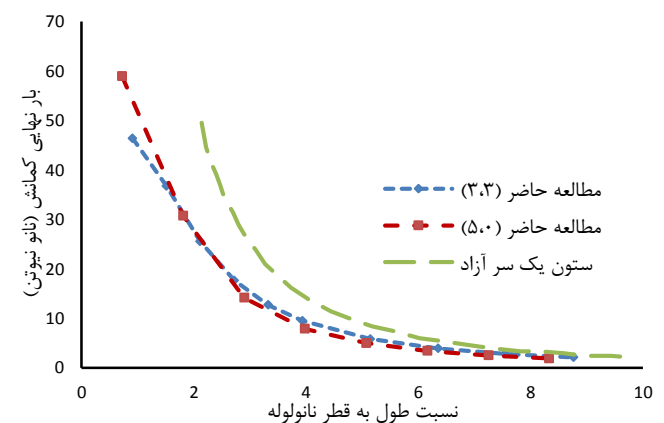
در شکل‌های ۸ و ۹ بار نهایی کمانش برای نانولوله‌های آرمچیر (۱۵,۱۵) و زیگ‌زاگ (۲۶,۰)، با شرط مرزی یک‌سر آزاد-یک‌سر گیردار در دماهای ۱۷۳-، ۲۷ و ۵۲۷ درجه سانتیگراد (۱۰۰، ۳۰۰ و ۸۰۰ درجه کلوین) مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاصل نشان می‌دهند که افزایش دما موجب کاهش بار نهایی کمانش نانولوله‌ها می‌شود و اثر دما روی هر دو نانولوله تقریباً یکسان است. به عنوان مثال برای نانولوله آرمچیر در نسبت طول به قطر حدود ۳، با افزایش دما از ۱۷۳- به ۲۷ درجه سانتیگراد، میزان کاهش بار نهایی کمانش ۲/۶٪ و با افزایش دما از ۲۷ به ۵۲۷ درجه سانتیگراد ۱۷/۶٪ می‌باشد. و به همان ترتیب میزان کاهش بار نهایی کمانش برای نانولوله زیگ‌زاگ به ترتیب ۳/۲٪ و ۱۷/۹٪ می‌باشد.



شکل ۴- مقایسه کمانش نانولوله زیگ‌زاگ (۲۶,۰) با آرمچیر (۱۵,۱۵) در حالت یک‌سر گیردار-یک‌سر آزاد



شکل ۵- مقایسه کمانش نانولوله زیگ‌زاگ (۲۶,۰) با آرمچیر (۱۵,۱۵) در حالت دو سر مفصل

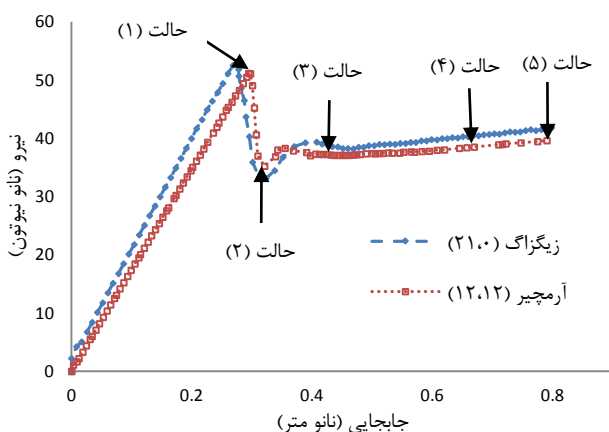


شکل ۶- مقایسه کمانش نانولوله زیگ‌زاگ (۵,۰) و آرمچیر (۳,۳) در حالت یک‌سر گیردار-یک‌سر آزاد با ستون یک‌سر آزاد

حالت تحلیل غیرخطی هندسی نرم‌افزار استفاده می‌شود. همچنین یادآور می‌شود که این قسمت در محیط اصلی نرم‌افزار موجود نمی‌باشد و ارتباط بین دو قسمت کمانش و پس‌کمانش توسط کاربر برقرار می‌گردد.

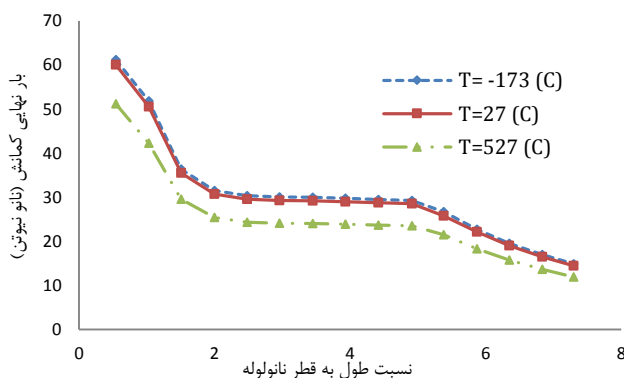
در این بررسی نانولوله‌های آرمچیر (۱۲،۱۲) با شعاع nm ۰/۸۱۳ و طول nm ۱۱/۲ و زیگ‌زاگ (۲۱،۰) با شعاع nm ۰/۸۲۲ و طول nm ۱۱/۳۷، با اعمال جابجایی محوری و با شرط مرزی دو سر گیردار مورد مطالعه قرار گرفته است. نمودار نیرو بر حسب جابجایی، به منظور نشان دادن تأثیر کایرالیته روی مسیر پس‌کمانش نانولوله‌های کربنی، در شکل ۱۰ ترسیم شده است.

مشاهده می‌شود که نمودار سیر صعودی یکنواختی را تا رسیدن به بار بحرانی طی می‌کند. با ورود به منطقه غیرخطی پس‌کمانش با افزایش ناچیز جابجایی، افت ناگهانی در نیرو رخ می‌دهد. پس از افت شدید نیرو، با افزایش جابجایی مقدار تغییرات نیرو ناچیز و قابل صرف‌نظر کردن است.

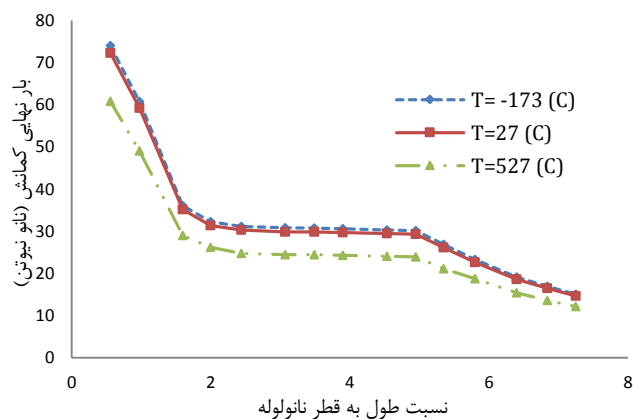


شکل ۱۰- اثر کایرالیته روی رفتار پس‌کمانش نانولوله‌های آرمچیر (۱۲،۱۲) و زیگ‌زاگ (۲۱،۰) با شرط مرزی دوسر گیردار

پس از مشاهده تأثیر کایرالیته روی رفتار پس‌کمانش، به بررسی تأثیر طول روی آن می‌پردازیم. بدین منظور تحلیل پس‌کمانش را برای نانولوله آرمچیر (۱۲،۱۲) با طول‌های nm ۷/۲۶، nm ۱۱/۲ و nm ۱۴/۶۴ و نانولوله زیگ‌زاگ (۲۱،۰) با طول‌های nm ۷/۱۰۵، nm ۱۱/۳۷ و nm ۱۴/۳۵، در شرایط مرزی دوسرگیردار مورد مطالعه قرار داده‌ایم. (اشکال ۱۱ و



شکل ۸- مقایسه کمانش نانولوله آرمچیر (۱۵،۱۵) در دماهای مختلف در حالت یک‌سر گیردار-یک‌سر آزاد



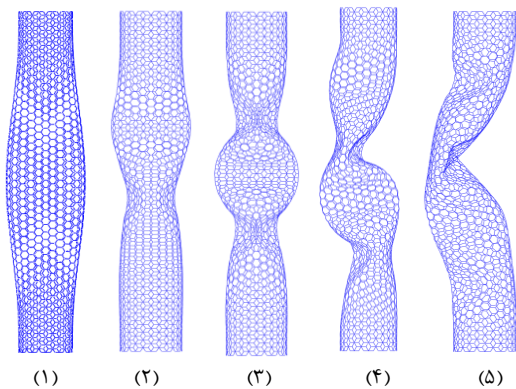
شکل ۹- مقایسه کمانش نانولوله زیگ‌زاگ (۲۶،۰) در دماهای مختلف در حالت یک‌سر گیردار-یک‌سر آزاد

۴-۳- بررسی رفتار پس‌کمانش نانولوله‌های کربنی در دمای محیط

در این بخش به بررسی تأثیر عواملی نظیر کایرالیته و طول بر روی پدیده غیرخطی پس‌کمانش در دمای محیطی ۲۷ درجه سانتیگراد می‌پردازیم. در نرم‌افزار آباکوس برای مدل‌کردن پدیده پس‌کمانش ابتدا مودهای کمانش را محاسبه کرده و سپس با استفاده از روش عیب هندسی^۱، بصورت اعمال برآیند تغییر مکان‌های ناشی از مودهای کمانش به مختصات گره‌ها، مسیر پس‌کمانش را بدست می‌آوریم. لازم به ذکر است که برای تحلیل پس‌کمانش از

^۱ Imperfection

داده شده در حالت (۲) مربوط به نقطه مینیمم نمودار در قسمت پس‌کمانش می‌باشد، یعنی نقطه‌ای که معرف کمترین مقدار نیرو بعد از مرحله کمانش است، که در جابجایی 0.321 رخ می‌دهد. حالت‌های (۳)، (۴) و (۵) به ترتیب معرف تغییرشکل در جابجایی‌های 0.437 nm، 0.657 nm و 0.803 nm در قسمت افقی نمودار پس‌کمانش است. موقعیت حالات ذکر شده در نمودار بار-جابجایی مربوطه نشان داده شده است (شکل ۱۰). در محل گلوئی شدن، تغییرشکل‌های محلی زیادی در ساختار نانولوله مشاهده می‌شود. با دقت در المان‌های تیر تغییرشکل یافته (که با بزرگنمایی سازه تغییرشکل یافته می‌توان آن را مشاهده کرد) ملاحظه می‌شود که این اشکال صرفاً با تغییرشکل‌های الاستیک تیرها بوجود آمده‌اند و هیچگونه درهم‌پیچیدگی در تیر مشاهده نمی‌شود. شایان توجه است که نتایج بدست آمده تطابق قابل توجهی با شبیه‌سازی‌های دینامیک ملکولی گزارش شده در مراجع [۱۰ و ۱۶] دارند که این امر خود دلیل بر اعتبار روش مکانیک ساختاری مورد استفاده در این روش است. به عبارت دیگر هندسه و نیروهای استخراج شده از توابع پتانسیل مورد استفاده در این مقاله به واقعیت نزدیک است.

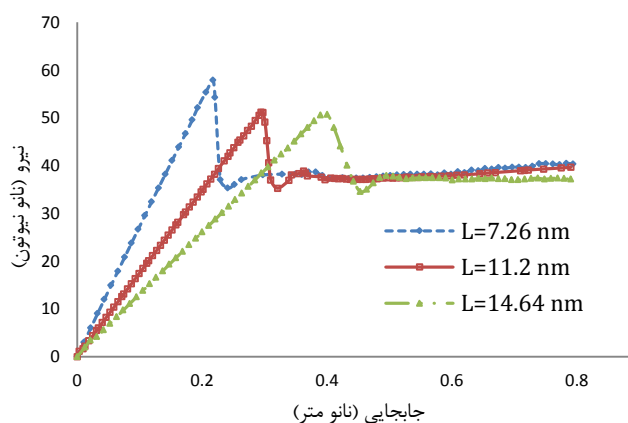


شکل ۱۳- تغییر شکل ناشی از کمانش برای نانولوله آرمچیر (۱۲،۱۲) با اعمال جابجایی محوری برای حالت دو سر گیردار

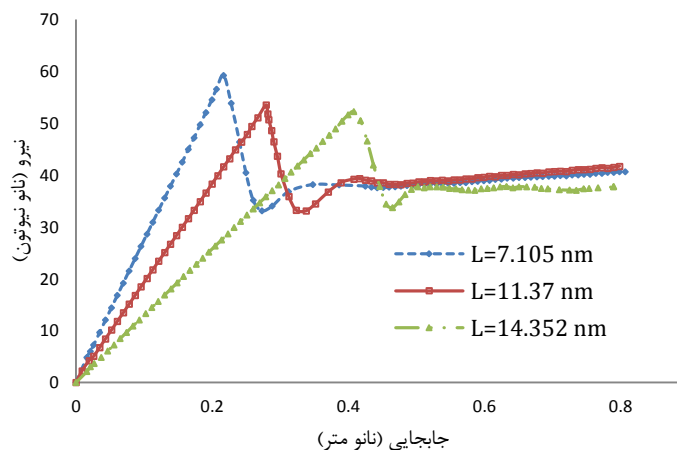
۴-۴- اثر تغییرات دما روی رفتار پس‌کمانش نانولوله‌های کربنی

به منظور بررسی اثر تغییرات دما روی رفتار پس‌کمانش نانولوله‌های آرمچیر و زیگ‌زاگ، رفتار پس‌کمانش نانولوله‌ها را دماهای 173 ، 27 و 527 درجه سانتیگراد مورد مطالعه قرار

(۱۲). مشاهده می‌شود که با افزایش طول، بار نهایی کمانش کاهش می‌یابد. همچنین با افزایش طول، بار نهایی کمانش نانولوله‌ها در جابجایی بزرگ‌تری رخ می‌دهد. دلیل این امر آن است که وقوع ناپایداری در نانولوله‌ای با طول بیشتر، مستلزم جابجایی بیشتری می‌باشد. با مقایسه دو نمودار ۱۱ و ۱۲ برای دو نانولوله آرمچیر و زیگ‌زاگ نتیجه می‌گیریم که اثر افزایش طول روی هر دو نانولوله یکسان است.



شکل ۱۱- اثر تغییر طول روی نانولوله آرمچیر (۱۲،۱۲) با شرط مرزی دو سر گیردار



شکل ۱۲- اثر تغییر طول روی نانولوله زیگ‌زاگ (۲۶،۰) با شرط مرزی دو سر گیردار

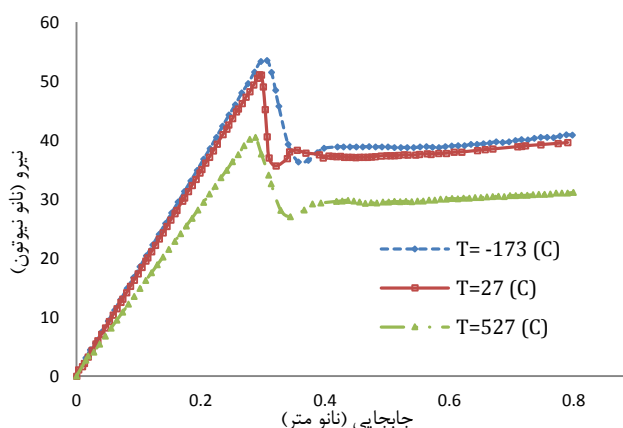
شکل ۱۳، تغییرشکل‌های ناشی از کمانش، برای نانولوله آرمچیر (۱۲،۱۲) با طول $11/2$ nm را برای حالت دوسر گیردار را نشان می‌دهد. حالت (۱) نقطه شروع کمانش است که در جابجایی 0.294 nm رخ می‌دهد. تغییرشکل نشان

آن در نسبت طول به قطر پایین، بیشتر است. منحنی کمانش در نانولوله‌های زیگ‌زاگ بالاتر از آرمچیر است ولی با افزایش طول نانولوله‌ها بار نهایی کمانش نیز مستقل از کایرالیته شده و دو منحنی بر هم منطبق می‌شوند. اثر کایرالیته روی شرط مرزی یک‌سر آزاد- یک‌سر گیردار، بیشتر از دو سر مفصل می‌باشد. با مقایسه نمودارها بر اساس کایرالیته نتیجه می‌گیریم که افزایش کایرالیته روی کاهش اختلاف بین بار نهایی کمانش نانولوله‌ها اثر دارد. مشاهده می‌شود که بار نهایی کمانش برای حالت دو سر گیردار بیشتر از دو سر مفصل، و برای حالت دو سر مفصل بیشتر از یک‌سر آزاد- یک‌سر گیردار است. در ادامه اثرات عواملی مانند کایرالیته، تغییرات طول و تغییرات دما روی مسیر پس‌کمانش نانولوله‌های آرمچیر و زیگ‌زاگ، با اعمال جابجایی محوری و برای شرایط مرزی یک‌سر آزاد- یک‌سر گیردار مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که رفتار پس‌کمانش، غیرخطی است. همچنین مشاهده می‌شود که با افزایش طول، بار نهایی کمانش کاهش می‌یابد بطوری که بار نهایی کمانش نانولوله‌ها با طول بیشتر در جابجایی بزرگ‌تری رخ می‌دهد. در ادامه با بررسی اثر تغییرات دما روی مسیر پس‌کمانش نانولوله‌های کربنی به این نتیجه می‌رسیم که با افزایش دما، بار بحرانی کمانش کاهش می‌یابد. مسیر پس‌کمانش نیز این روند کاهشی را طی می‌کند که برای هر دو نانولوله آرمچیر و زیگ‌زاگ یکسان است.

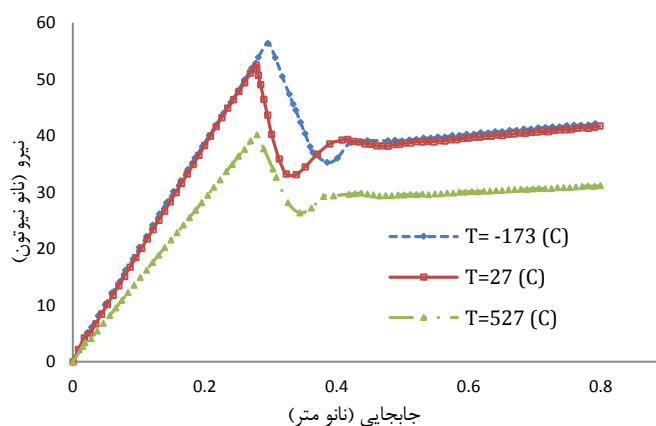
مراجع

- [1] رحمانی ر، قربان‌پور ع (۱۳۸۶) مقدمه‌ای بر نانو مکانیک. نشر کتاب دانشگاهی: ۱-۱۰.
- [2] Akita S, Nishijima H, Kishida T, Nakayama Y (2000) Nano-indentation of polycarbonate using carbon nanotube tip. *J. Appl. Phys.* 39: 7086-7089.
- [3] Haile J (1997) *Molecular dynamics simulation-Elementary Methods*. Wiley Inter Science, New York.
- [4] Iijima S (1991) Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature (London)*, 354: 56-8.
- [5] Wang Y, Wang X (2005) Simulation of the elastic response and the buckling modes of single walled carbon nanotubes. *Materials Science* 32: 141-146.
- [6] Li C, Chou T (2004) Modeling of elastic buckling of carbon nanotubes by molecular

داده‌ایم. با بررسی نمودار ۱۴ و ۱۵ برای نانولوله‌های آرمچیر و زیگ‌زاگ به این نتیجه می‌رسیم که با افزایش دما از ۱۷۳- به ۵۲۷ درجه سانتیگراد بار بحرانی کمانش کاهش می‌یابد و مسیر پس‌کمانش نیز این روند کاهشی را طی می‌کند که برای هر دو نانولوله یکسان است.



شکل ۱۴- اثر تغییرات دما روی نانولوله آرمچیر (۱۵،۱۵) با شرط مرزی دو سر گیردار



شکل ۱۵- اثر تغییرات دما روی نانولوله زیگ‌زاگ (۲۶،۰) با شرط مرزی دو سر گیردار

۵- نتایج

بار نهایی کمانش نانولوله‌های آرمچیر و زیگ‌زاگ تحت بار فشاری محوری، برای دماهای مختلف محیطی و با شرایط مرزی مختلف با استفاده از مدل قاب فضایی مورد مطالعه قرار گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش نسبت‌های طول به قطر، بار نهایی کمانش کاهش می‌یابد و میزان کاهش

- [12] Tserpes K, Papanikos P (2005) Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes. *Composites*, 36: 468-477.
- [13] Kwon Y, Berber S, Tomanek D (2004) Thermal Contraction of Carbon Fullerenes and Nanotubes. *Phys. Rev. Lett.* vol. 92: 01590-1-01590-4.
- [14] Badger R (1935) The relation between internuclear distances and force constants of molecules and its application to polyatomic molecules. *J. Chem. Phys.*, vol. 3: 710-714.
- [15] Chen X, Wang X, Liu B (2008) Effect of temperature on elastic properties of single-walled carbon nanotubes. *Journal of Reinforced Plastics and Composites*, pp. 551-3.
- [16] Silvestre N, Faria B (2012) A molecular dynamics study on the thickness and post-critical strength of carbon nanotubes. *Composite Structure*. Vol 94:1352-1358.
- structural mechanics approach. *Applied Mechanics of Materials*. 36: 1047-1055.
- [7] Ansari R, Rouhi S (2010) Atomistic finite element model for axial buckling of single walled nanotube. *Phys. E*, vol. 43: 58-69.
- [8] Saidi A, Gorbanpour A (2010) Postbuckling equilibrium path of a long thin-walled cylindrical shell (single-walled carbon nanotube) under axial compressive using energy method. *Archive of sid*, vol. 24, No. 1: 79-86.
- [9] Han Q, Yao X (2006) Postbuckling prediction of double-walled carbon nanotubes under axial compression. *Eur. J. Mech - A/Solid*, pp. 1-13.
- [10] Shen H, Zhang C (2006) Buckling and postbuckling analysis of single-walled carbon nanotube in thermal environment via molecular dynamics simulation. *Carbon* 44: 2608-2616.
- [11] Lashkari_Zadeh A, Shariati M, Torabi H (2014) Buckling analysis of carbon nanotube bundles under axial compressive bending and torsional loadings via structural mechanics model. *Journal of physics and chemistry of solids*, Vol. 73: 1282-89.