

مطالعه ارتعاش آزاد طولی نانولوله‌های کربنی مارپیچی تک‌جداره با روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

فرشید درویشی^۱، امید رحمانی^{۲*}

^۱دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران
^۲آزمایشگاه تحقیقاتی سازه‌های هوشمند و مواد پیشرفته، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران

تاریخچه داوری:

دریافت:

بازنگری:

پذیرش:

ارائه آنلاین:

کلمات کلیدی:

نانولوله‌های کربنی مارپیچی

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

ارتعاش طولی

پتانسیل ربو

چکیده: در این مقاله ارتعاش آزاد طولی نانولوله‌های کربنی مارپیچی تک‌جداره برای شرایط مرزی مختلف با روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفته است. تاکنون با بهره‌گیری از این روش، رفتار ارتعاشی طولی این شکل از نانولوله‌ها مورد مطالعه قرار نگرفته بود لذا در پژوهش حاضر با استفاده از روش مذکور فرکانس اصلی مربوط به ارتعاشات طولی نانولوله‌های کربنی مارپیچی تحت پتانسیل ربو و بدون در نظر گرفتن اثر گرمایی بدست آمده است. در ادامه، مطالعه پارامتریک مسئله مورد توجه قرار گرفت و تأثیر قطر لوله مارپیچ، تعداد گام فبری و نوع شرایط مرزی بر فرکانس اصلی ارزیابی شد. نتایج حاکی از آن بود که با افزایش قطر لوله و تعداد گام فبری (یا طول نانولوله مارپیچی) فرکانس اصلی طولی کاهش می‌یابد. همچنین در شرایط مرزی گیردار-گیردار، مقادیر فرکانس اصلی طولی نانولوله‌های کربنی مارپیچی نسبت به دو شرایط مرزی گیردار-تکیه‌گاه ساده و یکسر گیردار همواره بزرگتر می‌باشد. از نتایج پژوهش حاضر در آینده می‌توان در طراحی و تحلیل نانو-سگرها و نانومحرک‌هایی که در ساختار آن‌ها از نانولوله‌های کربنی مارپیچی استفاده می‌گردد، بهره برد.

۱- مقدمه

یکی از کاربردهای مهم نانولوله‌های کربنی مارپیچی، استفاده از آن به عنوان حسگر می‌باشد. از نانولوله‌های کربنی مارپیچی می‌توان به عنوان تشدیدکننده‌های مکانیکی خودحسگر و همچنین برای اندازه‌گیری نیروها و جرم‌های کوچک در محدوده فمتوگرم استفاده نمود [۶]. علاوه بر این می‌توان از آن‌ها به عنوان حسگرهای الکترومکانیکی به دلیل رفتار پیزومقاومتی [۷]

بعد از کشف نانولوله‌های کربنی توسط ایچیمیا [۱] در سال ۱۹۹۱، این نانومواد به دلیل داشتن خواص فوق‌العاده، به طور گسترده مورد توجه پژوهشگران و دانشمندان در حوزه نانو تکنولوژی قرار گرفته است. نانولوله‌های کربنی می‌توانند به فرم‌های مختلفی همچون مستقیم، خمیده، شاخدار و مارپیچی و غیره وجود داشته باشند [۲]. از میان این فرم‌ها، نانولوله‌های کربنی مارپیچی^۱ به دلیل داشتن هندسه مارپیچ و ویژگی‌های استثنایی، توجه محققان را به خود جلب کرده است.

نانولوله‌های کربنی مارپیچی تک‌جداره توسط آبهارا و همکاران [۳] در سال ۱۹۹۳ به طور تئوری پیش‌بینی شد در حالی که نخستین مشاهده آزمایشگاهی نانولوله‌های کربنی مارپیچی تک‌جداره توسط بایرو و همکاران [۴] با میکروسکوپ تونل‌زنی روبشی^۲ در سال ۲۰۰۰ میسر گردید. در شکل ۱ تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از رشد و شکل‌گیری نانولوله کربنی مارپیچی طی فرآیند سنتز با روش رسوب‌دهی شیمیایی بخار^۳ نشان داده شده است که فرم مارپیچی با بروز منظم نقص‌های خاص در نانولوله کربنی به وجود می‌آید [۵].



Fig. 1.

شکل ۱: تصویر میکروسکوپ الکترونی روبشی از رشد نانولوله کربنی مارپیچی طی فرآیند سنتز با روش رسوب‌دهی شیمیایی بخار [۵].

- 1 Coiled Carbon Nanotubes (CCNTs)
- 2 Scanning Tunneling Microscopy (STM)
- 3 Chemical Vapor Deposition (CVD)

نویسنده عهده‌دار مکاتبات: omid.rahmani@znu.ac.ir

پرداختند و کرنش کششی، مدول یانگ و ثابت فنری آن‌ها را تعیین کردند. وانگ و همکاران [۲۱] با روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و تحت میدان پتانسیل رِبو^۷ و لئونارد - جونز^۸ برای یک نمونه نانولوله کربنی ماریپیچی تک‌جداره، ثابت فنری و کرنش تسلیم کششی را محاسبه کردند. همچنین رفتار ویژه نانولوله‌های کربنی را در شرایط مختلف کششی و فشاری و بیرون کشیدن آن‌ها از یک نمونه ماتریسی پلی اتیلنی^۹ تحلیل نمودند. وو و همکاران [۲۲] با روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و تحت پتانسیل ایربو^{۱۰}، چند نمونه نانولوله کربنی ماریپیچی را مورد مطالعه قرار دادند و خاصیت کشش‌پذیری و برگشت‌پذیری فوق‌العاده بزرگ آن‌ها را در دماهای مختلف بررسی کردند و ثابت فنری و چقرمگی آن‌ها را تعیین نمودند. خانی و همکاران [۲۳] با تحلیل المان محدود بر پایه روش المان حجم نمونه^{۱۱} در نرم‌افزار انسیس، ویژگی‌های مکانیکی نانوکامپوزیت‌های پلیمری تقویت شده با نانولوله‌های کربنی ماریپیچی را پیش‌بینی کردند. در مجموع محققان نتیجه گرفتند که نانولوله‌های کربنی ماریپیچی می‌توانند کاندیدای بالقوه مناسبی برای نانوکامپوزیت‌های چقرمه و سبک وزن باشند.

در تحلیل ارتعاشاتی نانولوله‌های کربنی ماریپیچی تک‌جداره، تنها فخرآبادی و همکاران [۲۴] به مطالعه رفتار ارتعاشی این نوع نانوساختارها پرداخته‌اند. آن‌ها با روش المان محدود بر پایه مکانیک مولکولی و با المان تیر الاستیک تحت شرایط مرزی مختلف، رفتار ارتعاشی نانولوله‌های کربنی ماریپیچی را مورد بررسی قرار دادند و فرکانس‌های اصلی آن‌ها را تعیین نمودند.

در مطالعه رفتار ارتعاشی نانولوله‌های کربنی مستقیم کارهای متعددی با روش‌های مختلف انجام شده است. به چند مورد از کارهایی که شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در آن‌ها استفاده شده است در ذیل اشاره می‌شود.

کائو و همکاران [۲۵] با روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و تحت میدان پتانسیل فورس فیلد^{۱۲}، رفتار ارتعاشی گرمایی (بدون اعمال کرنش) نانولوله‌های کربنی تک‌جداره را مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها مدهای ارتعاشی و فرکانس‌های مربوط به نانولوله‌ها را در راستاهای طولی، جانبی و شعاعی تحت دماهای مختلف بررسی کردند. ژانگ و همکاران [۲۶] با استفاده از مدل تیر تیموشنکو و روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تحت پتانسیل رِبو، رفتار ارتعاشی عرضی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره با کایرالیته^{۱۳} مختلف را بررسی کردند و اثر نسبت طول به قطر، شرایط مرزی و کایرالیته بر فرکانس اصلی را ارزیابی نمودند و نتایج بدست آمده از مدل تیموشنکو و دینامیک مولکولی را با هم مقایسه کردند.

بهره گرفت. همچنین از نانولوله‌های کربنی ماریپیچی می‌توان در سیستم‌های نانوالکترومکانیکی^۱ [۸]، اجزای تشدیدکننده، نانو محرک، نانو بوبین^۲، نانو دریافت کننده و حافظه دسترسی تصادفی غیر فرّار^۳ استفاده کرد [۵]. کاربرد مهم دیگر نانولوله‌های کربنی ماریپیچی در تقویت کامپوزیت‌ها می‌باشد به طوری که چقرمگی بیشتری از نانوفیبرها دارند به همین دلیل می‌توانند چقرمگی شکست و همچنین استحکام مکانیکی کامپوزیت‌ها را به طور قابل توجهی بهبود دهند حتی اگر پیوند مستقیم بین ماتریس و نانولوله کربنی ماریپیچی وجود نداشته باشد [۹ و ۱۰].

برای بررسی ویژگی‌های مکانیکی نانولوله‌های کربنی ماریپیچی، تحقیقات محدودی انجام شده است. در تحقیقات آزمایشگاهی، وُلدین و همکاران [۱۱] و چن و همکاران [۱۲] با میکروسکوپ نیروی اتمی و هایاشیدا و همکاران [۱۳] با میکروسکوپ الکترونی روبشی مجهز به منیپولاتور، برای نانولوله‌های کربنی ماریپیچی ویژگی‌های مکانیکی همچون مدول یانگ، ثابت فنری و افزایش طول الاستیک را بدست آوردند.

در بخش تئوری، هوانگ [۱۴] با استفاده از تئوری اصلاحی گام و انحناء، که در برگرنده ممان پیچشی و بار محوری کششی/فشاری می‌باشد، توانست برای فنرهای ماریپیچی روابط صریح و دقیقتری استخراج نماید و سپس با استفاده از نتایج آزمایشگاهی بدست آمده از میکروسکوپ الکترونی روبشی برای نانولوله ماریپیچی دوتایی، ماکزیمم افزایش طول الاستیک، مدول برشی و ثابت فنری را تعیین کند. فونسکا و همکاران [۱۵ و ۱۶] با استفاده از مدل میله کیرشلف برای یک نمونه نانولوله کربنی ماریپیچی مدول یانگ، مدول برشی و ضریب پواسون را محاسبه نمودند. سانادا و همکاران [۱۷] با روش المان محدود در نرم‌افزار انسیس و با داده‌های هندسی آزمایشگاهی نانولوله کربنی ماریپیچی، توانستند مدول یانگ یک نمونه کامپوزیت اپوکسی/نانولوله کربنی ماریپیچی را بدست آورند. قادری و حاجی اسماعیلی [۱۸] با روش المان محدود بر پایه مکانیک مولکولی تحت میدان پتانسیل نیروی امیر^{۱۴} و المان تیر خطی در نرم‌افزار انسیس، برای نانولوله‌های کربنی ماریپیچی تک‌جداره آرمچر، رفتار الاستیک آن‌ها را مورد مطالعه قرار دادند و ثابت فنری و مدول برشی را تعیین نمودند. در مقاله دیگری، قادری و حاجی اسماعیلی [۱۹] با روش المان محدود دینامیک مولکولی تحت میدان پتانسیل نیروی دردینگ^{۱۵} و سه المان غیرخطی در نرم‌افزار آباکوس، برای نانولوله‌های کربنی ماریپیچی تک‌جداره آرمچر رفتار سوپرلاستیسته و شکست آن‌ها را بررسی نمودند و مقادیر ثابت فنری، کرنش شکست و بار شکست را برای این نانوساختارها بدست آوردند.

لیو و همکاران [۲۰] با شبیه‌سازی کوانتومی اتمی اتصال سخت^{۱۶} به بررسی رفتار سوپرلاستیک نانولوله‌های کربنی ماریپیچی تک‌جداره آرمچر

- 7 Reactive Empirical Bond Order (REBO)
- 8 Lennard-Jones (LJ) potential
- 9 Polyethylene (PE)
- 10 Adaptive Intermolecular Reactive Empirical Bond Order (AIREBO)
- 11 Representative Volume Element (RVE)
- 12 Force Field
- 13 Chirality

- 1 Nanoelectromechanical Systems (NEMS)
- 2 Solenoid
- 3 Non-volatile Random Access Memory (RAM)
- 4 Amber
- 5 Dreding
- 6 Tight-Binding

در نانولوله‌های ماریپچی پارامترهای هندسی مختلفی همچون طول گام فبری، قطر لوله، قطر داخلی و قطر خارجی حلقه‌های فبری دخیل می‌باشند که برای سهولت در مقایسه اثر این پارامترها بر ارتعاش آزاد، مطابق شکل ۲ سه نوع نانولوله کربنی ماریپچی تک‌جداره به گونه‌ای مدل‌سازی شدند که قطر داخلی حلقه‌ها و طول گام فبری برای هر سه نوع، تقریباً یکسان باشد. مشخصات این سه نوع نانولوله ماریپچی در جدول ۱ ذکر شده است.

۲-۲- شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ارتعاش طولی نانولوله‌های کربنی ماریپچی تک‌جداره

بعد از مدل‌سازی نانولوله‌های کربنی ماریپچی تک‌جداره مورد نظر، ارتعاش آزاد طولی آن‌ها با روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد بررسی قرار گرفت. برای انجام شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از بسته نرم‌افزاری متن باز لمپس^۵ استفاده شد.

در روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کلاسیک که یک روش نیمه تجربی می‌باشد، برهمکنش‌های بین ذرات با پتانسیل‌های تجربی توصیف می‌شود. در این روش، با در نظر گرفتن اتم‌ها به عنوان کره و صرف‌نظر از حرکت الکترون‌ها، مدل‌سازی مواد ساده‌تر می‌گردد. کره‌ها از طریق ترم‌های تابعی دافعه و جاذبه که در کل وابسته به فواصل و یا زوایای بین اتمی

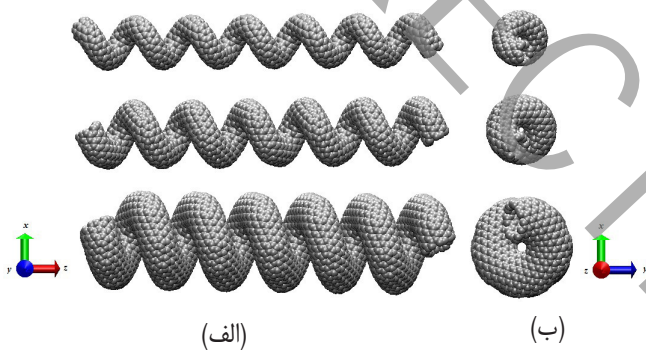


Fig. 2.

شکل ۲: نمایش سه نوع نانولوله کربنی ماریپچی تک‌جداره با ۶ گام فبری (الف) از نمای جانبی (ب) از نمای بالا.

جدول ۱: پارامترهای هندسی نانولوله‌های کربنی ماریپچی تک‌جداره (تمامی ابعاد بر حسب واحد انگستروم).

Table 1.

نوع نانولوله	قطر لوله d	طول گام فبری d	قطر میانی	
			سطح مقطع	ضخامت t
			فبری D	
CCNT-I	۵/۸۴	۱۸/۸۲۵	۹/۹۷	۳/۴
CCNT-II	۷/۵۷	۱۸/۸۸۰	۱۲/۲۷	۳/۴
CCNT-III	۹/۸۹	۱۷/۸۱۰	۱۵/۲۵	۳/۴

5 Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)

هو و همکاران [۲۷] رفتار ارتعاشی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره را با روش‌های مدل مکانیک پیوسته غیرموضعی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تحت پتانسیل ریبو با تحریک جداگانه کششی، خمشی و پیچشی مورد مطالعه قرار دادند و فرکانس اصلی طولی، عرضی و پیچشی را تحت شرایط مرزی مختلف بدست آورده و نتایج را با هم مقایسه نمودند. خادم‌الحسینی و همکاران [۲۸] رفتار ارتعاش آزاد پیچشی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره را با مدل مکانیک پیوسته غیرموضعی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تحت پتانسیل ایربو مورد بررسی قرار دادند و شکل مدهای طبیعی پیچشی و فرکانس‌های طبیعی مربوط به آن‌ها را استخراج کردند. انصاری و همکاران [۲۹] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تحت پتانسیل ترسوفبرنر^۱ و پتانسیل لئونارد-جونز، ارتعاش گرمایی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره و دو جداره را در دمای اتاق و برای شرایط مرزی مختلف بررسی کردند و اثر شرایط مرزی، طول نانولوله، تعداد لایه و کرنش اولیه اعمالی فشاری و کششی را بر روی فرکانس‌های تشدید مورد ارزیابی قرار دادند. چن و همکاران [۳۰] رفتار ارتعاشی گرمایی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره را با روش مدل‌سازی مکانیک ساختاری مولکولی اصلاح شده^۲ و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تحت پتانسیل ترسوفبرنر مورد مطالعه قرار دادند و شکل مدها و فرکانس‌های مربوط به آن‌ها را در دماهای مختلف تعیین نمودند.

ضروری است مقادیر فرکانس‌های طبیعی نانولوله‌های کربنی ماریپچی به منظور استفاده در سازه‌های کامپوزیتی و سیستم‌های نانوالکترومکانیکی، نانوحسگرها و به‌ویژه در اجزای تشدیدکننده تعیین شود. تاکنون رفتار ارتعاشی نانولوله‌های کربنی ماریپچی با روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار نگرفته است. بنابراین در مقاله حاضر، با استفاده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و پتانسیل ریبو، رفتار ارتعاش آزاد طولی این نانوساختارها تحت شرایط مرزی مختلف مطالعه خواهد شد و اثر پارامترهای هندسی همچون قطر لوله و تعداد گام فبری (یا طول نانولوله ماریپچی) و اثر شرایط مرزی بر فرکانس اصلی طولی نانولوله‌های کربنی ماریپچی مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

۲- روش پژوهش

۲-۱- مدل‌سازی نانولوله‌های کربنی ماریپچی تک‌جداره

نانولوله‌های کربنی از حلقه‌های شش ضلعی کربنی تشکیل شده‌اند، از قرار گرفتن حلقه‌های کربنی پنج ضلعی و هفت ضلعی^۳ به عنوان نقص در محل‌های مناسب. نانولوله‌ها دچار انحنای درونی و بیرونی شده و فرم ماریپچی به خود می‌گیرند. در این پژوهش، با استفاده از روش فضایی دوگانه^۴ [۳۱-۳۵] نانولوله‌های کربنی ماریپچی تک‌جداره مدل‌سازی و مختصات اتم‌ها استخراج شدند.

- 1 Tersoff- Brenner potential
- 2 Modified Molecular Structural Mechanics (MMSM)
- 3 Pentagonal and Heptagonal Rings
- 4 Dual Space Approach

جدول ۲: مقادیر پارامترهای پتانسیل ربو، برای اتم‌های کربن [۳۷].

Table 2.

مقدار	پارامتر
0/313460 (°A)	Q_{ij}
4/7465391 (°A ⁻¹)	α_{ij}
10953/544 (eV)	A_{ij}
12388/792 (eV)	$B_{ij}^{(1)}$
17/ 567065 (eV)	$B_{ij}^{(2)}$
30/714932 (eV)	$B_{ij}^{(3)}$
4/7204523 (°A ⁻¹)	$\beta_{ij}^{(1)}$
1/4332132 (°A ⁻¹)	$\beta_{ij}^{(2)}$
1/3826913 (°A ⁻¹)	$\beta_{ij}^{(3)}$
0/77	b_{ij}^{min}
0/81	b_{ij}^{max}

شعاع‌های قطع هستند که مقادیرشان برای پیوندهای کربن‌کربن به ترتیب ۱/۷ انگستروم و ۲/۰ انگستروم می‌باشد [۳۷]. البته برای تغییر شکل‌های بزرگ و شکست نانو ساختارهای کربنی، تابع قطع با شعاع‌های قطع پیش فرض می‌تواند موجب رفتار غیر فیزیکی شود [۳۸] به همین دلیل شعاع‌های قطع پیش‌فرض باید اصلاح گردد. ولی چون در شبیه‌سازی ارتعاشی تغییر شکل‌ها کوچک و در ناحیه الاستیک می‌باشد، این مقادیر شعاع‌های قطع پیش‌فرض مشکلی به وجود نمی‌آورد.

$$f_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1 & ; r_{ij} < R_{ij}^{(min)} \\ \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos \left[\frac{\pi(r_{ij} - R_{ij}^{(min)})}{R_{ij}^{(max)} - R_{ij}^{(min)}} \right] & ; r_{ij}^{(min)} < r_{ij} < R_{ij}^{(max)} \\ 0 & ; r_{ij} < R_{ij}^{(max)} \end{cases} \quad (۲)$$

با استفاده از الگوریتم سرعت ورله^۵ و گام زمانی ۱ فمتوثانیه از معادلات حرکت به طور عددی انتگرال‌گیری شد. شرایط مرزی غیرتناوبی در هر سه راستا لحاظ گردید. در ابتدای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، مرحله مینیمم‌سازی نانولوله‌های کربنی ماریچی با روش مزدوج گرادینان^۶ انجام شد به طوری که با تنظیم تکراری مختصات اتم‌ها، پیکربندی نانولوله‌های ماریچی به مینیمم انرژی پتانسیل محلی رسیدند. در شبیه‌سازی ارتعاش آزاد برای جلوگیری از تأثیر دما بر فرکانس اصلی نانولوله‌ها، دمای سیستم ۰/۱ کلوین لحاظ شد. از طرف دیگر انتخاب دمای پایین برای جلوگیری از کوپل شدن ارتعاشات عرضی و طولی می‌باشد [۲۶]. تحت انسامل کانونیکال^۷

هستند، با یکدیگر برهمکنش می‌کنند. این ترم‌ها شامل پارامترهای مناسبی می‌باشند که با تطبیق بر نتایج اب‌اینیشیو^۱ و داده‌های آزمایشگاهی بدست آمده‌اند.

مهم‌ترین بخش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، انتخاب نوع پتانسیل می‌باشد که بستگی به نوع اتم‌های سیستم مورد مطالعه دارد. دسته‌ای از پتانسیل‌ها معروف به پتانسیل‌های جفت‌جفت^۲، که دارای اثرات چند جسمی هستند و در آن‌ها موقعیت اتم‌های در حال برهمکنش‌کننده در طول زمان تغییر می‌کند، برای شبیه‌سازی سیستم‌های هیدروکربنی، نیمه‌رساناها، ساختارهای فلزات، یون‌ها، مایعات و غیره مناسب می‌باشند.

تابع پتانسیل مرتبه پیوند تجربی برهمکنشی ربو که مختص سیستم‌های هیدروکربنی می‌باشد، اخیراً برای ارائه رفتار دقیق‌تر ویژگی‌های پر انرژی، الاستیک و ارتعاشی کربن جامد و هیدروکربن‌های کوچک توسعه یافته است [۳۶]. این پتانسیل در مقایسه با تابع پتانسیل ترسوف، توصیف بهتر و دقیق‌تری از انرژی‌های پیوندی، طول‌های پیوندی و مخصوصاً ثوابت نیرویی برای پیوندهای کربن‌کربن می‌دهد [۳۷]. بنابراین در شبیه‌سازی حاضر، برای توصیف برهمکنش‌های اتم‌های کربنی نانولوله‌ها از پتانسیل ربو استفاده گردید. در پتانسیل ربو، انرژی پتانسیل کل سیستم با رابطه (۱) بیان شده است. در این پتانسیل، ترم‌های U_{ij}^A و U_{ij}^R پتانسیل‌های برهمکنشی جفتی جمع‌پذیر^۳ می‌باشند که به ترتیب کل دافعه بین اتمی (هسته-هسته، غیره) و جاذبه الکترون‌های والانس را ارائه می‌کنند [۳۷].

$$U_{REBO} = \sum_i \sum_{i \neq j} f_c(r_{ij}) \left[U_{ij}^R(r_{ij}) - b_{ij} U_{ij}^A(r_{ij}) \right] \quad (۱-الف)$$

$$U_{ij}^R = \left[1 + \frac{Q_{ij}}{r_{ij}} \right] A_{ij} e^{-\alpha_{ij} r_{ij}} \quad (۱-ب)$$

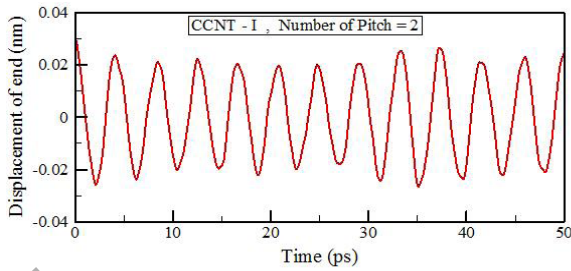
$$U_{ij}^A = \sum_{n=1}^3 B_{ij}^{(n)} e^{-\beta_{ij}^{(n)} r_{ij}} \quad (۱-ج)$$

r_{ij} فاصله بین زوج اتم‌های مجاور i و j که با هم پیوند کووالانسی تشکیل می‌دهند، می‌باشد. b_{ij} ترم مرتبه پیوند تجربی چند جسمی بین دو اتم i و j می‌باشد که سهم پیوندهای سیگما و پای را اصلاح می‌کند، این ترم از تئوری ساختار الکترونیکی هوکل^۴ استخراج شده است. α_{ij} ، A_{ij} ، Q_{ij} ، $\beta_{ij}^{(n)}$ و $B_{ij}^{(n)}$ پارامترهای ثابتی هستند که برای تطبیق ترم‌های جفتی استفاده شده‌اند. مقادیر این پارامترهای ثابت در جدول ۲ آمده است [۳۷].

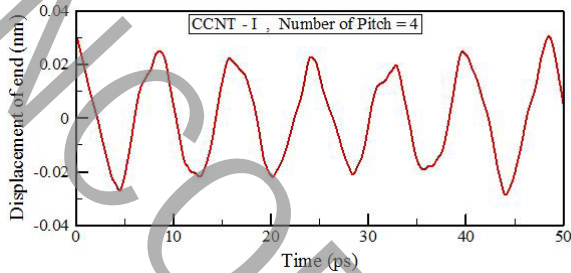
تابع قطع $f_c(r_{ij})$ در پتانسیل ربو، برهمکنش‌های کووالانسی بین اتم‌ها را برای تضمین برهمکنش بین نزدیک‌ترین همسایه‌های درگیر تا شعاعی مشخص محدود می‌کند که با رابطه (۲) بیان شده است. $R_{ij}^{(min)}$ و $R_{ij}^{(max)}$

- 1 Ab Initio
- 2 Pairwise
- 3 Pair-additive interactions
- 4 Huckel

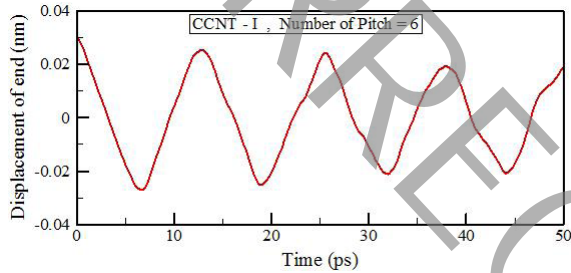
- 5 Velocity-Verlet algorithm
- 6 Conjugate Gradients (CG)
- 7 Canonical Ensemble



(الف)



(ب)



(ج)

Fig. 4.

شکل ۴: تاریخچه زمانی ارتعاش آزاد طولی نانولوله کربنی ماریچی نوع I یکسر گیردار (C-F) با (الف) ۲ گام (ب) ۴ گام (ج) ۶ گام فزنی.

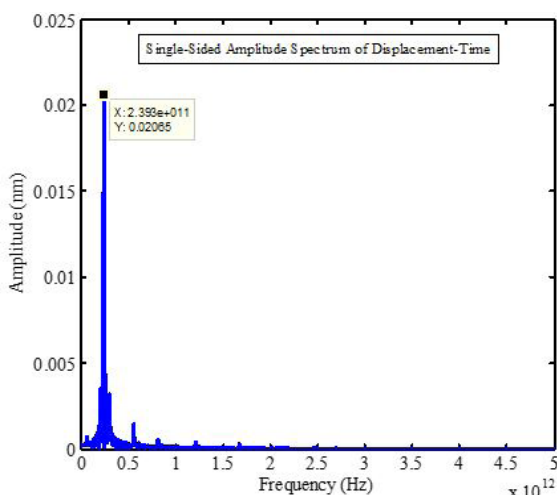
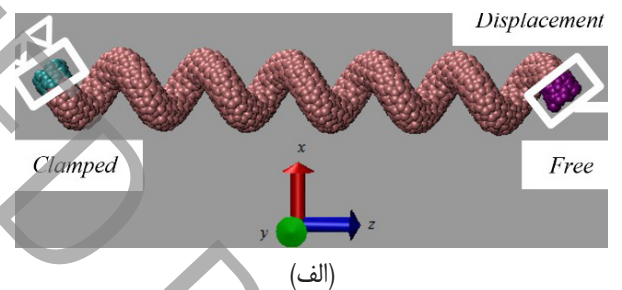


Fig. 5.

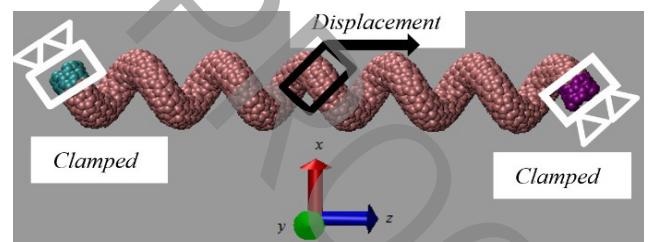
شکل ۵: فرکانس اصلی مربوط به نانولوله کربنی ماریچی نوع I یکسر گیردار با ۲ گام فزنی، حاصل از تبدیل سریع فوری از نمودار شکل ۳-الف.

و با ترموستات نوز-هور^۱ و در دمای ذکر شده مرحله متعادل سازی به مدت ۳۰ پیکوثانیه (معادل با ۳۰۰۰۰ گام زمانی) انجام شد تا نانولوله های ماریچی به پایداری برسند. در مرحله بعد، تحت انسامل میکروکانونیکال (حالت آدیاباتیک) شبیه سازی ارتعاش آزاد طولی برای سه نوع شرایط مرزی انجام شد. مطابق شکل ۳-الف برای شرایط مرزی یکسر گیردار (C-F) چهار لایه اتمی از سمت چپ در هر سه راستا ثابت نگه داشته شد و چهار لایه اتمی از سمت راست در راستای z جابجا شدند. برای شرایط مرزی گیردار-گیردار (C-C) مطابق شکل ۳-ب چهار لایه اتمی از سمت چپ و چهار لایه اتمی از سمت راست در هر سه راستا ثابت نگه داشته شد و چند لایه اتمی از وسط نانولوله در راستای z جابجا شدند. برای شرایط مرزی گیردار-تکیه گاه ساده (C-S) چهار لایه اتمی از سمت چپ در هر سه راستا ثابت و چهار لایه اتمی از سمت راست فقط در راستای طولی z ثابت نگه داشته شد و چند لایه اتمی از وسط نانولوله در راستای z جابجا شدند.

در هر سه نوع شرط مرزی، زمانی که اتم های جابجا شده به اندازه ۰/۰۲ نانومتر (دامنه ارتعاش) از وضعیت تعادلی شان منحرف شدند رها گردیدند تا نانولوله ماریچی آزادانه شروع به ارتعاش طولی نماید. سپس تاریخچه میانگین زمانی حرکت طولی اتم های جابجا شده در نانولوله به ازای هر ۱۰۰ گام زمانی به عنوان پاسخ دامنه زمانی ثبت گردید. شکل ۴ نمودارهای جابجایی طولی بر حسب زمان برای نانولوله ماریچی نوع I به ازای تعداد گام فزنی ۲، ۴ و ۶ را نمایش می دهد. در نهایت فرکانس اصلی با استفاده از تبدیل سریع فوری^۲ در نرم افزار متلب بدست آمدند (شکل ۵).



(الف)



(ب)

Fig. 3.

شکل ۳: نمایش جابجایی اتم ها جهت به ارتعاش در آوردن نانولوله های ماریچی در راستای z تحت شرایط مرزی مختلف (الف) یکسر گیردار (ب) گیردار - گیردار.

- 1 Nose-Hoover Thermostat
- 2 Fast Fourier transform (FFT)

۳- نتایج و بحث

برای ارزیابی صحت روش حاضر، ارتعاش آزاد طولی یک نمونه نانولوله کربنی مستقیم آرمچر (۵،۵) با طول‌های مختلف تحت شرایط مرزی گیردار گیردار و یکسر گیردار شبیه‌سازی شد و با کار هوو و همکارانش [۲۷] که با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به بررسی ارتعاش نانولوله‌های کربنی پرداخته بودند، مقایسه گردید. نمودار شکل ۶ نشان می‌دهد که روش حاضر توافق خوبی با نتایج کار هوو دارد.

در ادامه، ارتعاش آزاد طولی سه نوع نانولوله کربنی مارپیچی تحت شرایط مرزی مختلف شبیه‌سازی شدند و اثر قطر لوله و تعداد گام فنری بر فرکانس اصلی مورد بررسی قرار گرفتند که نتایج در این بخش ارائه گردید. شکل‌های ۷، ۸ و ۹ به ترتیب فرکانس‌های اصلی نانولوله‌های کربنی مارپیچی تحت شرایط مرزی گیردار-گیردار، گیردار-تکیه‌گاه ساده و یکسر گیردار را نشان می‌دهند. برای هر سه نوع شرایط مرزی، با افزایش تعداد گام فنری (یا طول) فرکانس اصلی طولی نانولوله‌های مارپیچی کاهش می‌یابد. چون با افزایش تعداد گام فنری، نانولوله کربنی مارپیچی نرم‌تر می‌شود. به عبارت دیگر سفتی فنر با تعداد گام فنری رابطه معکوس دارد و با افزایش تعداد گام فنری، سفتی کاهش یافته و در نتیجه فرکانس اصلی طولی کاهش می‌یابد. این روند نیز در نانولوله‌های کربنی مستقیم مشاهده شد (شکل ۶)، چون با افزایش طول نانولوله مستقیم، سفتی کاهش یافته و در نتیجه فرکانس اصلی طولی کاهش می‌یابد.

همچنین در شکل‌های ۷، ۸ و ۹ مشاهده می‌شود که با افزایش قطر نانولوله، فرکانس اصلی طولی نانولوله‌های مارپیچی کاهش می‌یابد. زیرا با افزایش قطر، سفتی نانولوله مارپیچی کاهش یافته و در نتیجه فرکانس اصلی کاهش می‌یابد. این نتیجه را می‌توان با نانولوله‌های کربنی مستقیم صحت‌سنجی کرد. در ارتعاشات عرضی نانولوله‌های کربنی مستقیم مشاهده

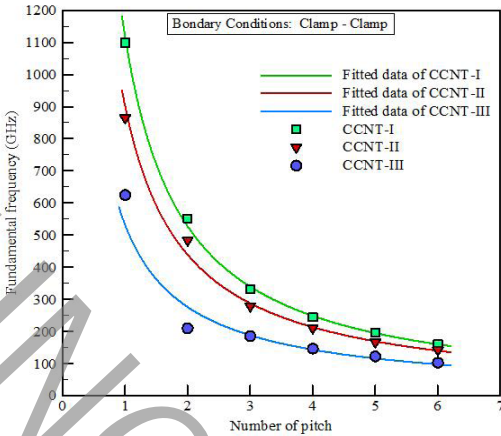


Fig. 7.

شکل ۷: فرکانس اصلی طولی سه نوع نانولوله کربنی مارپیچی با تعداد گام فنری مختلف تحت شرایط مرزی گیردار - گیردار (C-C).

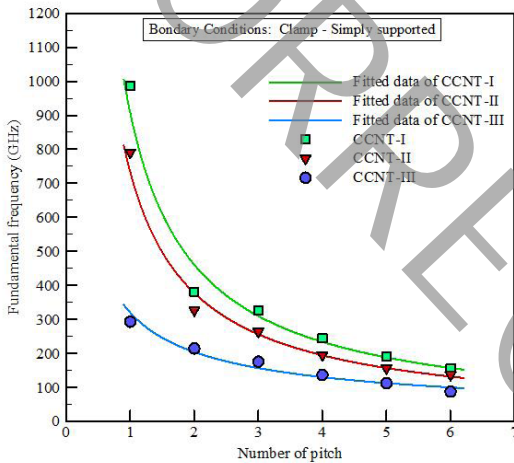


Fig. 8.

شکل ۸: فرکانس اصلی طولی سه نوع نانولوله کربنی مارپیچی با تعداد گام فنری مختلف تحت شرایط مرزی گیردار - تکیه‌گاه ساده (C-S).

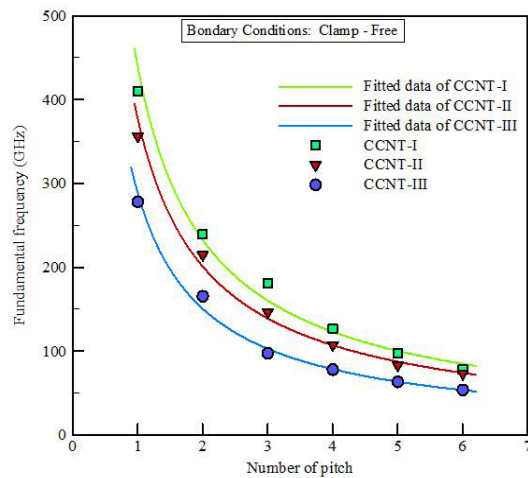


Fig. 9.

شکل ۹: فرکانس اصلی طولی سه نوع نانولوله کربنی مارپیچی با تعداد گام فنری مختلف تحت شرایط مرزی یکسر گیردار (C-F).

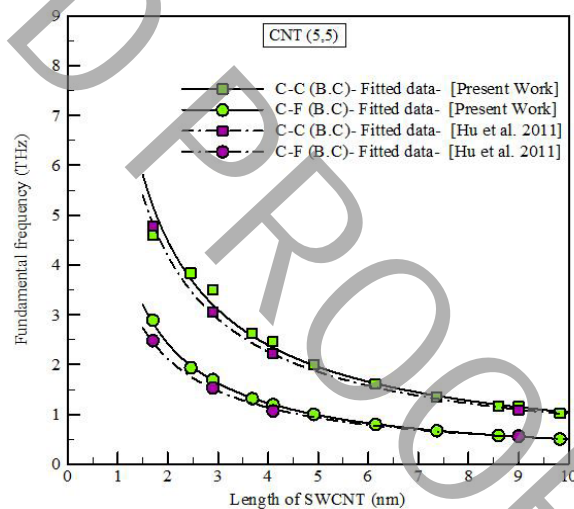


Fig. 6.

شکل ۶: مقایسه فرکانس‌های اصلی طولی حاصل از کار حاضر با نتایج کار [۲۷] برای نانولوله کربنی آرمچر (۵،۵) به ازای طول‌های مختلف و شرایط مرزی متفاوت.

نانولوله کربنی مستقیم سفتی آن کاهش یافته و در نتیجه فرکانس اصلی طولی کاهش می‌یابد. لذا این روند، نتایج بدست آمده در نانولوله‌های کربنی ماریچی را تأیید می‌کند.

شکل ۱۲ اثر شرایط مرزی مختلف را بر فرکانس اصلی طولی نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌شود شرایط مرزی تأثیر قابل ملاحظه‌ای بر فرکانس اصلی دارد. در شرایط مرزی گیردار-گیردار، مقادیر فرکانس اصلی طولی نانولوله‌های کربنی ماریچی نسبت به دو شرایط مرزی گیردار-تکیه‌گاه ساده و یکسرگیردار به ازای قطر و تعداد گام فنری یکسان (تا ۶ گام)، همواره بزرگتر می‌باشد. چون در شرایط مرزی گیردار-گیردار و نانولوله‌های کربنی ماریچی دارای درجه آزادی کمتری نسبت به شرایط مرزی گیردار-تکیه‌گاه ساده و یکسرگیردار بوده و اتم‌ها در نانولوله‌ها مقیدتر می‌باشند، لذا مقدار فرکانس‌های اصلی بزرگتری بدست می‌آید. نانولوله کربنی ماریچی نوع I قطر تقریباً یکسانی با نانولوله کربنی مستقیم آرچر (۵،۵) دارد، با بررسی شکل‌های ۱۰، ۱۱ و ۱۲ نتیجه می‌شود که به ازای هر دو شرایط مرزی گیردار-گیردار و یکسرگیردار، نانولوله‌های کربنی مستقیم همواره دارای فرکانس اصلی خیلی بزرگتری نسبت به نانولوله‌های کربنی ماریچی می‌باشند.

تا قبل از این پژوهش، تنها فخرآبادی و همکاران [۲۴] به مطالعه ارتعاشی نانولوله‌های کربنی ماریچی با روش المان محدود بر پایه مکانیک مولکولی تحت شرایط مرزی مختلف پرداخته بودند. شکل ۱۳ مقایسه نتایج پژوهش حاضر با نتایج فخرآبادی و همکاران را نشان می‌دهد، به طوری که پارامترهای هندسی نانولوله کربنی ماریچی نوع I در کار حاضر (قطر لوله ۵/۸۴ انگستروم - طول گام فنری ۱۸/۸ انگستروم - قطر میانی سطح مقطع فنری ۹/۹۷ انگستروم) با نانولوله کربنی ماریچی نوع III در کار فخرآبادی (قطر لوله ۵/۹۴ انگستروم - طول گام فنری ۱۸/۴ انگستروم - قطر میانی

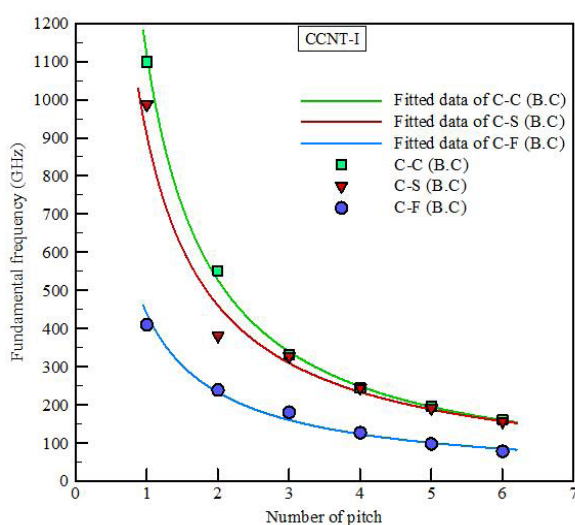


Fig. 12.

شکل ۱۲: فرکانس اصلی طولی نانولوله کربنی ماریچی نوع I با تعداد گام فنری و تحت شرایط مرزی مختلف.

شده بود که با افزایش قطر نانولوله، فرکانس اصلی عرضی افزایش می‌یابد [۲۹] ولی برای اثر قطر نانولوله بر فرکانس اصلی طولی گزارشی مشاهده نشده است.

بنابراین مطابق شکل‌های ۱۰ و ۱۱ اثر قطر بر فرکانس اصلی طولی نانولوله‌های کربنی مستقیم آرچر (۵،۵)، (۱۰،۱۰) و (۲۰،۲۰) به ترتیب با قطر ۶/۷۷ انگستروم، ۱۳/۵۴ انگستروم و ۲۷/۰۸ انگستروم و با نسبت منطری^۱ (نسبت طول به قطر l/d) بزرگتر از ۱/۴ مورد بررسی قرار گرفت. مشاهده می‌شود که با افزایش قطر، فرکانس اصلی طولی برای هر دو شرایط مرزی گیردار-گیردار و یکسرگیردار کاهش می‌یابد چون با افزایش قطر

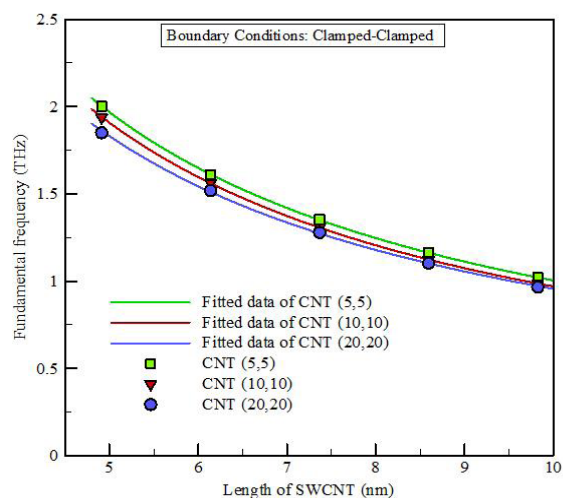


Fig. 10.

شکل ۱۰: فرکانس اصلی طولی برای نانولوله‌های کربنی مستقیم آرچر (۵،۵)، (۱۰،۱۰) و (۲۰،۲۰) با طول مختلف تحت شرایط مرزی گیردار-گیردار (C-C).

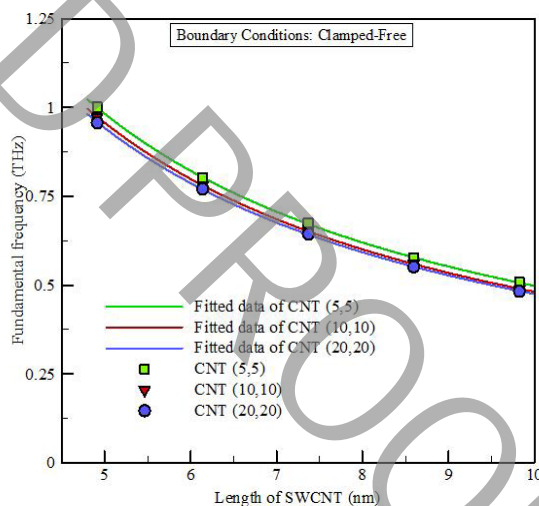


Fig. 11.

شکل ۱۱: فرکانس اصلی طولی برای نانولوله‌های کربنی مستقیم آرچر (۵،۵)، (۱۰،۱۰) و (۲۰،۲۰) با طول مختلف تحت شرایط مرزی یکسرگیردار (C-F).

جزء دسته‌ای از پتانسیل‌ها محسوب می‌شود که در آن موقعیت اتم‌های در حال برهمکنش‌کننده در طول زمان ثابت می‌مانند. بنابراین احتمال دارد پیکربندی نانولوله کربنی مارپیچی در وضعیتی قرار گیرد که تمامی پیوندها که با امان‌های تیر مدل شده‌اند دارای مدول یانگ و مدول برشی یکسانی نباشند لذا نتایج با خطا همراه بود. از طرف دیگر، این روش امان محدود در کل یک روش کانتینیومی می‌باشد و نمی‌تواند برای مقیاس نانو خیلی دقیق باشد.

همچنین در کار حاضر تمرکز فقط بر روی ارتعاش طولی نانولوله‌های کربنی مارپیچی بود (مشابه کار هوو و همکاران [۲۷] برای نانولوله‌های مستقیم)، بنابراین بارگذاری تحریکی کششی به گونه‌ای صورت گرفت که کوپلینگ ارتعاشی طولی، خمشی و پیچشی رخ ندهد و نانولوله مارپیچی فقط دچار ارتعاش طولی شده و فرکانس‌های اصلی طولی بدست آید. ولی در کار فخرآبادی و همکاران نوع ارتعاش (طولی یا عرضی بودن) ذکر نشده است و با توجه به شکل‌های ارائه شده در مقاله‌شان به نظر می‌رسد کوپلینگ ارتعاش طولی و عرضی رخ داده باشد که این مسئله به شدت بر مقادیر فرکانسی تأثیرگذار است، بنابراین می‌تواند دلیلی بر اختلاف در نتایج باشد.

۴- نتیجه‌گیری

در این مقاله رفتار ارتعاشی طولی سه نوع نانولوله کربنی مارپیچی با قطر لوله و تعداد گام فزنی مختلف، تحت سه نوع شرایط مرزی گیردار-گیردار، گیردار-تکیه‌گاه ساده و یکسر گیردار مورد مطالعه قرار گرفت. از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای تعیین مقادیر فرکانس اصلی طولی نانولوله‌های کربنی مارپیچی استفاده شد. نتایج نشان داد که فرکانس اصلی طولی با افزایش قطر لوله و تعداد گام فزنی (طول نانولوله مارپیچی) کاهش می‌یابد. همچنین در نانولوله‌های کربنی مارپیچی برای شرایط مرزی گیردار-گیردار نسبت به دو شرایط مرزی گیردار-تکیه‌گاه ساده و یکسر گیردار، مقادیر فرکانس اصلی طولی بزرگ‌تری نتیجه شد. علاوه بر این مشاهده شد که به ازای قطر و طول یکسان، فرکانس اصلی طولی نانولوله‌های کربنی مارپیچی خیلی کمتر از نانولوله‌های کربنی مستقیم می‌باشد.

منابع

- [1] S. Iijima, Helical microtubules of graphitic carbon, Nature, 354(6348) (1991) 56-58.
- [2] M. Zhang, J. Li, Carbon nanotube in different shapes, Materials Today, 12(6) (2009) 12-18.
- [3] S. Ihara, S. Itoh, J.-i. Kitakami, Helically coiled cage forms of graphitic carbon, Physical Review B, 48(8) (1993) 5643-5647.
- [4] L.P. Biró, S.D. Lazarescu, P.A. Thiry, A. Fonseca, J.B. Nagy, A.A. Lucas, L. Ph, Scanning tunneling microscopy observation of tightly wound, single-wall coiled carbon nanotubes, EPL (Europhysics Letters), 50(4) (2000) 494.

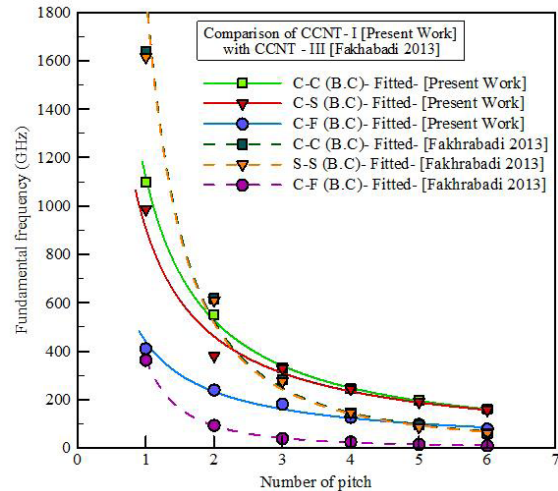


Fig. 13.

شکل ۱۳: مقایسه فرکانس‌های اصلی نانولوله‌های کربنی مارپیچی نوع I حاصل از کار حاضر با نتایج کار مرجع [۲۴] برای نوع III

سطح مقطع فزنی ۸/۷۷ انگستروم تقریباً یکسان هستند. مشاهده می‌شود نتایج بدست آمده در پژوهش حاضر، برای تأثیر گام فزنی (طول) و شرایط مرزی بر فرکانس اصلی نانولوله‌های کربنی مارپیچی در مقایسه با کار فخرآبادی و همکاران [۲۴] مورد تأیید می‌باشد. نکته قابل ذکر که در رابطه با شرایط مرزی می‌توان به آن اشاره کرد، این است که در کار حاضر اختلاف در فرکانس اصلی برای شرایط مرزی گیردار-تکیه‌گاه ساده نسبت به شرایط مرزی گیردار-گیردار قابل ملاحظه است در حالی که در کار فخرآبادی و همکاران برای شرایط مرزی دو سر تکیه‌گاه ساده نسبت به شرایط مرزی گیردار-گیردار اختلاف ناچیز و تقریباً بر هم منطبق می‌باشند. در مقایسه مقادیر فرکانس‌های اصلی بدست آمده در کار حاضر با کار فخرآبادی و همکاران [۲۴]، اختلاف قابل ملاحظه‌ای مشاهده می‌شود که می‌تواند ناشی از تفاوت روش استفاده شده در کار حاضر با کار فخرآبادی باشد. شایان ذکر است که کار فخرآبادی و همکاران فاقد صحت سنجی می‌باشد و تنها مقاله‌ای که می‌شد نتایج را با آن مقایسه نمود، همین مقاله بود.

این اختلاف در نتایج را می‌توان این‌گونه توجیه نمود، روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده شده در پژوهش حاضر یک روش نیمه تجربی به حساب می‌آید بنابراین می‌تواند در مقیاس نانو جواب‌های دقیق‌تری دهد. در این روش کل پیکربندی نانولوله مستقیماً تحت پتانسیل ربو شبیه‌سازی شده است، همان‌طور که گفته شد پتانسیل ربو یک پتانسیل جفت جفت می‌باشد که دارای اثرات چند جسمی بوده و در آن موقعیت اتم‌های در حال برهمکنش در طول زمان تغییر می‌کند. ولی در روش امان محدود بر پایه مکانیک مولکولی که فخرآبادی و همکاران استفاده نمودند، پیوند بین اتم‌های کربنی با امان تیر معادل می‌شود و خواص امان تیر همچون مدول یانگ، مدول برشی با استفاده از ثوابت حاصل انرژی‌های کششی، خمشی و پیچشی تحت میدان پتانسیل امبر بدست می‌آید. پتانسیل امبر

- Engineering, 2(12) (2008) 1517-1527.
- [18] S.H. Ghaderi, E. Hajiesmaili, Molecular structural mechanics applied to coiled carbon nanotubes, *Computational Materials Science*, 55(0) (2012) 344-349.
- [19] S.H. Ghaderi, E. Hajiesmaili, Nonlinear analysis of coiled carbon nanotubes using the molecular dynamics finite element method, *Materials Science and Engineering: A*, (2013) 225-234.
- [20] L. Liu, H. Gao, J. Zhao, J. Lu, Superelasticity of Carbon Nanocoils from Atomistic Quantum Simulations, *Nanoscale Res Lett*, 5(3) (2010) 478-483.
- [21] J. Wang, T. Kemper, T. Liang, S.B. Sinnott, Predicted mechanical properties of a coiled carbon nanotube, *Carbon*, 50(3) (2012) 968-976.
- [22] J. Wu, J. He, G.M. Odegard, S. Nagao, Q. Zheng, Z. Zhang, Giant Stretchability and Reversibility of Tightly Wound Helical Carbon Nanotubes, *Journal of the American Chemical Society*, 135(37) (2013) 13775-13785.
- [23] N. Khani, M. Yildiz, B. Koc, Elastic properties of coiled carbon nanotube reinforced nanocomposite: A finite element study, *Materials & Design*, 109 (2016) 123-132.
- [24] M.M.S. Fakhrabadi, A. Amimi, F. Reshadi, N. Khani, A. Rastgoo, Investigation of buckling and vibration properties of hetero-junctioned and coiled carbon nanotubes, *Computational Materials Science*, 73 (2013) 93-112.
- [25] G. Cao, X. Chen, J.W. Kysar, Thermal vibration and apparent thermal contraction of single-walled carbon nanotubes, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 54(6) (2006) 1206-1236.
- [26] Y.Y. Zhang, C.M. Wang, V.B.C. Tan, Assessment of timoshenko beam models for vibrational behavior of single-walled carbon nanotubes using molecular dynamics, *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*, 1(1) (2009) 89-106.
- [27] Y.-G. Hu, K.M. Liew, Q. Wang, Nonlocal Continuum Model and Molecular Dynamics for Free Vibration of Single-Walled Carbon Nanotubes, *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, 11(12) (2011) 10401-10407.
- [28] F. Khademolhosseini, A.S. Phani, A. Nojeh, N. Rajapakse, Nonlocal Continuum Modeling and Molecular Dynamics Simulation of Torsional Vibration of Carbon Nanotubes, *IEEE Transactions on Nanotechnology*, 11(1) (2012) 34-43.
- [29] R. Ansari, S. Ajori, B. Arash, Vibrations of single- and double-walled carbon nanotubes with layerwise boundary conditions: A molecular dynamics study, *Current Applied Physics*, 12(3) (2012) 707-711.
- [5] J.H. Chang, W. Park, Nano elastic memory using carbon nanocoils *Journal of Nano and Bio Tech*, 3(1) (2006) 30-35.
- [6] A. Volodin, D. Buntinx, M. Ahlskog, A. Fonseca, J.B. Nagy, C. Van Haesendonck, Coiled Carbon Nanotubes as Self-Sensing Mechanical Resonators, *Nano Letters*, 4(9) (2004) 1775-1779.
- [7] D.J. Bell, Y. Sun, L. Zhang, L.X. Dong, B.J. Nelson, D. Grutzmacher, Three-dimensional nanosprings for electromechanical sensors, in: *Solid-State Sensors, Actuators and Microsystems*, 2005. Digest of Technical Papers. TRANSDUCERS '05. The 13th International Conference on, 2005, pp. 15-18.
- [8] D. Xu, L. Zhang, L. Dong, B. Nelson, Nanorobotics for NEMS Using Helical Nanostructures, in: B. Bhushan (Ed.) *Encyclopedia of Nanotechnology*, Springer Netherlands, 2012, pp. 1715-1721.
- [9] K.T. Lau, M. Lu, D. Hui, Coiled carbon nanotubes: Synthesis and their potential applications in advanced composite structures, *Composites Part B: Engineering*, 37(6) (2006) 437-448.
- [10] K. Hernadi, L. Thiên-Nga, L. Forró, Growth and Microstructure of Catalytically Produced Coiled Carbon Nanotubes, *The Journal of Physical Chemistry B*, 105(50) (2001) 12464-12468.
- [11] A. Volodin, M. Ahlskog, E. Seynaeve, C. Van Haesendonck, A. Fonseca, J.B. Nagy, Imaging the Elastic Properties of Coiled Carbon Nanotubes with Atomic Force Microscopy, *Physical Review Letters*, 84(15) (2000) 3342-3345.
- [12] X. Chen, S. Zhang, D.A. Dikin, W. Ding, R.S. Ruoff, L. Pan, Y. Nakayama, Mechanics of a Carbon Nanocoil, *Nano Letters*, 3(9) (2003) 1299-1304.
- [13] T. Hayashida, L. Pan, Y. Nakayama, Mechanical and electrical properties of carbon tubule nanocoils, *Physica B: Condensed Matter*, 323(1-4) (2002) 352-353.
- [14] W.M. Huang, Mechanics of coiled nanotubes in uniaxial tension, *Materials Science and Engineering: A*, 408(1-2) (2005) 136-140.
- [15] A.F. da Fonseca, D.S. Galvão, Mechanical Properties of Nanosprings, *Physical Review Letters*, 92(17) (2004) 175502.
- [16] F.d.F. Alexandre, C.P. Malta, D.S. Galvão, Mechanical properties of amorphous nanosprings, *Nanotechnology*, 17(22) (2006) 5620.
- [17] K. Sanada, Y. Takada, S. Yamamoto, Y. Shindo, Analytical and Experimental Characterization of Stiffness and Damping in Carbon Nanocoil Reinforced Polymer Composites, *Journal of Solid Mechanics and Materials*

- genus Fullerenes, and Other Exotic Graphitic Materials, *Procedia Engineering*, 14(0) (2011) 2373-2385.
- [35] C. Chuang, Y.-C. Fan, B.-Y. Jin, On the structural rules of helically coiled carbon nanotubes, *Journal of Molecular Structure*, 1008(0) (2012) 1-7.
- [36] S.J. Stuart, A.B. Tutein, J.A. Harrison, A reactive potential for hydrocarbons with intermolecular interactions, *The Journal of Chemical Physics*, 112(14) (2000) 6472-6486.
- [37] W.B. Donald, A.S. Olga, A.H. Judith, J.S. Steven, N. Boris, B.S. Susan, A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 14(4) (2002) 783.
- [38] O.A. Shenderova, D.W. Brenner, A. Omeltchenko, X. Su, L.H. Yang, Atomistic modeling of the fracture of polycrystalline diamond, *Physical Review B*, 61(6) (2000) 3877-3888.
- [30] W.-H. Chen, C.-H. Wu, Y.-L. Liu, H.-C. Cheng, A theoretical investigation of thermal effects on vibrational behaviors of single-walled carbon nanotubes, *Computational Materials Science*, 53(1) (2012) 226-233.
- [31] C. Chuang, Y.-C. Fan, B.-Y. Jin, Dual Space Approach to the Classification of Toroidal Carbon Nanotubes, *Journal of Chemical Information and Modeling*, 49(7) (2009) 1679-1686.
- [32] C. Chuang, Y.-C. Fan, B.-Y. Jin, Generalized Classification Scheme of Toroidal and Helical Carbon Nanotubes, *Journal of Chemical Information and Modeling*, 49(2) (2009) 361-368.
- [33] C. Chuang, B.-Y. Jin, Hypothetical toroidal, cylindrical, and helical analogs of C₆₀, *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 28(3) (2009) 220-225.
- [34] C. Chuang, Y.C. Fan, B.Y. Jin, Systematics of Toroidal, Helically-Coiled Carbon Nanotubes, High-