



دانشگاه صنعتی امیرکبیر
(پلی تکنیک تهران)

دوره چهل و شش، شماره ۲، زمستان ۱۳۹۳، صفحه ۱ تا ۱۲
Vol. 46, No. 2, Winter 2014, pp. 1- 12



نشریه علمی - پژوهشی امیرکبیر (مهندسی مکانیک)
Amirkabir Journal of Science & Research (Mechanical Engineering)
(AJSR - ME)

تحلیل تغییر شکل نانولوله کربنی تک جداره: یک تئوری پوسته بر پایه پتانسیل بین اتمی

عاطفه علیپور^۱، رضا انصاری^{۲*}، ابوالفضل شهاب الدینی^۳

۱- کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشکده فنی، دانشگاه گیلان

۲- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشکده فنی، دانشگاه گیلان

۳- دانشجوی دکترا، مهندسی مکانیک، دانشکده فنی، دانشگاه گیلان

(دریافت ۱۳۹۱/۳/۱۸، پذیرش ۱۳۹۳/۷/۲۷)

چکیده

هدف از این مقاله، ارائه تئوری پوسته با تغییر شکل محدود بر پایه پتانسیل بین اتمی برای یک نانولوله تک جداره است. بدین منظور، با بکارگیری قانون کوشی - بورن، رابطه‌ای میان چگالی انرژی کرنشی سطح پیوسته و پتانسیل بین اتمی برقرار شده است. این تئوری با در نظر گرفتن برهم نهی چند اتمی غیرخطی و نوع ساختار نانولوله کربنی، اثرات مهم ممان خمشی و انحنای سطح خمیده را مورد بررسی قرار می‌دهد. با بکارگیری تئوری توسعه داده شده، روابط ساختاری که مستقل از ضخامت نانولوله و مدول یانگ هستند، میان تنش، گشتاور، کرنش، انحنای و پتانسیل بین اتمی استخراج می‌شود. مشاهده شد که نوع ساختار بر روی رفتار مکانیکی نانولوله تحت کشش و خمش مؤثر بوده و این تأثیر برای نانولوله‌های با شعاع بزرگتر تحت کرنش و انحنای کوچک، کمتر خواهد بود.

کلمات کلیدی

تئوری پوسته، پتانسیل بین اتمی، نانولوله کربنی، خمش، انحنای، مدل ساختاری.

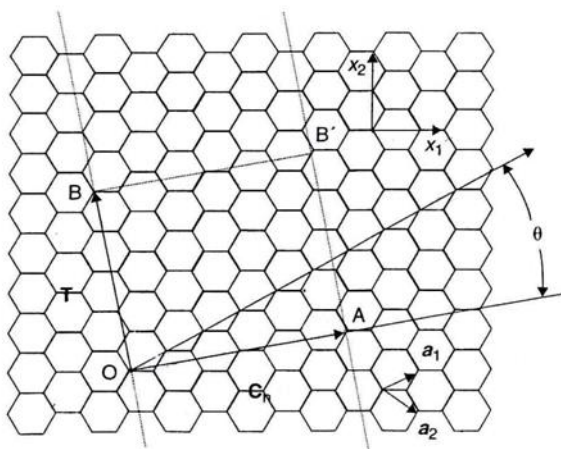
* نویسنده مسئول و عهده دار مکاتبات Email: r_ansari@guilan.ac.ir

۱- مقدمه

با رفتار الاستیک خطی مدل سازی می شود، تعاملات چند اتمی غیرخطی و اثرات مهم ساختاری (زیگزاگ و آرمچر) نادیده گرفته می شوند. همچنین این تئوری ها به پارامترهای مدول یانگ و ضخامت نانولوله که دارای مقدار دقیق و یکتایی نیستند وابسته هستند. همچنین در دیدگاه دوم تئوری های پیوسته که تاکنون مورد مطالعه قرار گرفتند، اثرات انحنا و خمش که از اهمیت زیادی در رفتار مکانیکی نانولوله ها برخوردار هستند، نادیده گرفته شده است. با انگیزه از این ملاحظات، در این مقاله، پس از توضیحات مختصری راجع به هندسه صفحه کربنی و نانولوله در بخش ۲، یک تئوری پیوسته بر مبنای اتمی در بخش ۳ توسعه داده شده که اثرات مهم انحنا و خمش را در نظر می گیرد. پتانسیل چند اتمی غیرخطی [5]، که در این بخش ارائه می شود، به طور مستقیم با این تئوری ترکیب می شود. در بخش ۴ تئوری غیرخطی پوسته با در نظر گرفتن یک تغییر شکل محدود ایجاد می شود که مستقل از مدول یانگ و ضخامت نانولوله است و در بخش ۵ چند مثال نمونه مورد بررسی قرار می گیرد.

۲- هندسه صفحه کربنی و نانولوله

هندسه یک صفحه گرافیتی دو بعدی که شامل دو محور x_1 و x_2 است، در شکل (۱) نشان داده شده است. محور x_1 و x_2 به ترتیب بیانگر محور آرمچر و محور زیگزاگ هستند و نقطه O نشان دهنده مرکز صفحه است. بردار C_h یک بردار شبکه بوده که دو نقطه معادل از صفحه مانند O و A را به هم وصل می کند. دو سر این بردار باید بر روی دو اتم درون صفحه (دو رأس از شش ضلعی ها) قرار گیرد. بردار C_h یک بردار مشخصه صفحه نامیده می شود.



شکل (۱): نمایش صفحه گرافیتی دو بعدی [21]

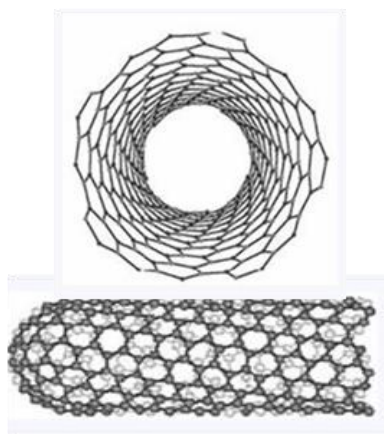
در شکل (۱)، زاویه بین بردار C_h و محور زیگزاگ با θ نشان داده شده است. همچنین بردارهای a_1 و a_2 بردارهای پایه اولیه

نانولوله های کربنی به علت دارا بودن خواص شیمیایی، الکتریکی و مکانیکی ممتاز کاربردهای فراوانی در تکنولوژی های نو دارند. مدول الاستیک تقریباً ۱ تراپاسکال و مقاومت کششی حدود ۶۰ گیگاپاسکال، این ساختار را از پرکاربردترین ساختارهای نانو قرار داده است [1-7].

این ساختارها توجه بسیاری از محققان را در دو شاخه اتمی و مکانیک محیط های پیوسته به خود جلب کرده اند. اخیراً با استفاده از مدلسازی اتمی، بیان تحلیلی از صلبیت خمشی و کششی نانولوله ها بدست آمده [8] که مستقیماً با پارامترهای پتانسیل بین اتمی رابطه دارد. همچنین با استفاده از همان روش، مدول یانگ نانولوله های کربنی محاسبه شد که با نتایج مدلسازی اتمی مستقیم مطابقت دارد. برای تحلیل نانولوله های کربنی در مکانیک پیوسته دو دیدگاه وجود دارد. دیدگاه اول نانولوله را بصورت یک پوسته نازک در نظر می گیرد که دارای رفتار الاستیک خطی است [9-11]. در نوع دیگر از مطالعات پیوسته نانولوله های کربنی، از تابع پتانسیل غیرخطی چند اتمی برای کربن استفاده می شود [5]، [12-15]. چگالی انرژی کرنشی پیوسته از پتانسیل بین اتمی طبق قانون کوشی - بورن قابل محاسبه است. این تئوری پیوسته (بر مبنای اتمی)، با در نظر گرفتن نوع ساختار نانولوله، با مدلسازی دینامیک مولکولی مطابقت خوبی دارد [12-16]. سانگ و همکاران [17] این تئوری ها را توسعه داده و به منظور مطالعه پارگی ناشی از نقص در نانولوله های کربنی به کار بردند.

در سال های اخیر محققین زیادی تغییر شکل نانولوله های کربنی را مورد بررسی قرار دادند. به عنوان مثال، ژانگ و همکارانش [18] تغییر شکل نانولوله های کربنی تک جداره تحت کرنش های محوری بزرگ را مطالعه کردند و دریافتند که تغییرات انرژی های کرنشی، مستقل از شعاع و وابسته به نوع ساختار است. وانگ و گو [19] یک مدل ساختاری پیوسته در مقیاس نانو با استفاده از قانون کوشی-بورن مرتبه بالا ایجاد کردند و رفتار نانولوله های کربنی تک جداره تحت تغییر شکل های بزرگ در دماهای محدود را شبیه سازی نمودند. با استفاده از یک مدلسازی پیوسته مبتنی بر تئوری پوسته نازک، شیما و همکارانش [20] تغییر شکل شعاعی نانولوله های کربنی چند جداره تحت فشار هیدرواستاتیکی را مورد مطالعه قرار دادند و با به کارگیری این تئوری، فشار بحرانی نانولوله را تخمین زدند.

در تحقیقات انجام شده بر اساس تئوری های پیوسته بر روی نانولوله های کربنی که در آن ها نانولوله به عنوان یک پوسته نازک



شکل (۴): تصویر نمای روبرو و جانبی نانولوله کایرال

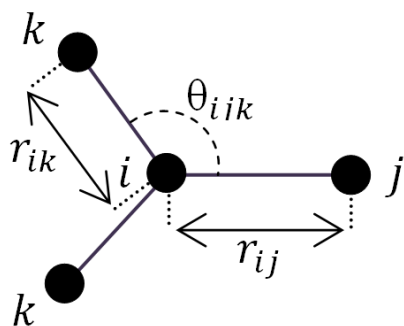
برای محاسبه قطر نانولوله ساخته شده می‌توان از رابطه (۲) استفاده کرد [21]:

$$d = \frac{|C_h|}{\pi} = \frac{a\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}{\pi} \quad (2)$$

که در آن a ثابت شبکه و دارای مقدار $2/46$ آنگستروم است.

۳- پتانسیل بین اتمی

شکل (۵) اتم کربن i را به همراه اتم‌های همسایه اول آن نشان می‌دهد. اگر یکی از اتم‌های اطراف را j بنامیم، بقیه اتم‌های همسایگی k خواهند بود. θ_{ijk} زاویه بین پیوندهای $i-j$ و $i-k$ است.



شکل (۵): اتم کربن مرکزی و سه اتم مجاور آن

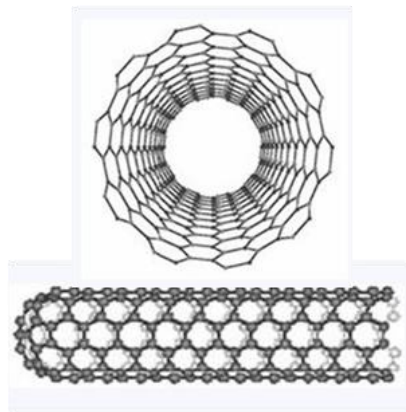
برنر و همکارانش [5]، در سال ۲۰۰۲ رابطه پتانسیل بین اتمی برای کربن را که توصیف خوبی از انرژی‌ها، طول‌ها و مخصوصاً ثوابت نیرو برای پیوندهای کربن - کربن ارائه می‌دهد بصورت رابطه (۳) توسعه دادند:

$$V(r_{ij}) = V_R(r_{ij}) - B_{ij} V_A(r_{ij}) \quad (3)$$

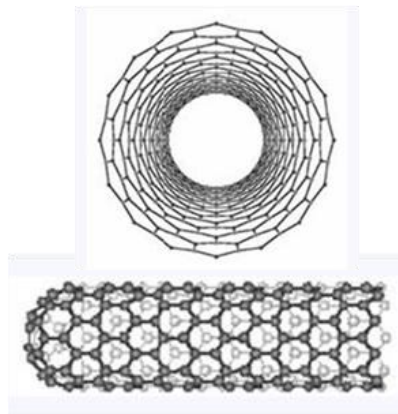
شبکه می‌باشند. بردار C_h را می‌توان به صورت ضرائب صحیحی از بردارهای a_1 و a_2 نوشت:

$$C_h = n\bar{a}_1 + m\bar{a}_2 \quad (1)$$

که در آن اعداد صحیح (m, n) را اندیس‌های بردار C_h می‌نامند. یک مفهوم اساسی و مهم در ساختار نانولوله‌های کربنی، جهت پیش‌تر صفحه کربنی حول محور برای تبدیل به نانولوله کربنی است. نانولوله‌های کربنی تک جداره به سه نوع؛ زیگزاگ، آرمچر و کایرال تقسیم بندی می‌شوند. اگر چرخش بردار C_h در امتداد محور $\theta = 0$ صورت گیرد، نانولوله زیگزاگ تشکیل می‌شود. نانولوله آرمچر، از چرخش بردار C_h در امتداد محور $\theta = \pi/6$ ایجاد می‌شود و با چرخش بردار C_h حول هر محوری که در آن زاویه بین صفر تا $\theta = \pi/6$ باشد نانولوله کایرال تشکیل می‌شود [21]. نانولوله زیگزاگ، آرمچر و کایرال به ترتیب به صورت $(m, 0)$ ، (m, m) و (m, n) نمایش داده می‌شوند که در شکل‌های (۲) تا (۴) نشان داده شده‌اند.



شکل (۲): تصویر نمای روبرو و جانبی نانولوله آرمچر



شکل (۳): تصویر نمای روبرو و جانبی نانولوله زیگزاگ

۴- تئوری غیرخطی پوسته با تغییر شکل محدود برای نانولوله‌های کربنی بر اساس پتانسیل بین اتمی

۴-۱- توصیف کلی یک سطح خمیده

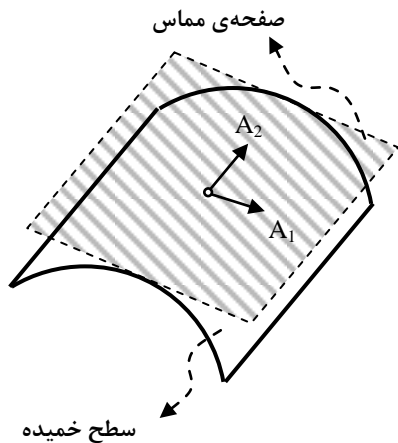
نقطه P روی سطح خمیده‌ای را در نظر بگیرید:

$$\mathbf{P} = \mathbf{P}(\xi^1, \xi^2) \quad (12)$$

که (ξ^1, ξ^2) ، مختصات استوانه‌ای این نقطه روی سطح هستند. (R, θ, Z) مختصات استوانه‌ای یک نانولوله کربنی با شعاع اولیه R قبل از بارگذاری است. طبق شکل (۶)، بردارهای پایه هموردا، $\mathbf{A}_\alpha = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \xi^\alpha}$ ، بردارهایی در صفحه مماس بر سطح

هستند که ضرایب فرم اساسی اول را نتیجه می‌دهند:

$$A_{\alpha\beta} = \mathbf{A}_\alpha \cdot \mathbf{A}_\beta \quad (13)$$



شکل (۶): شماتیک بردارهای پایه هموردا در صفحه مماس بر سطح

برداری نرمال (عمود بر سطح) و ضرایب فرم اساسی دوم، طبق روابط (۱۴) بدست می‌آیند:

$$\mathbf{N} = \frac{\mathbf{A}_1 \times \mathbf{A}_2}{|\mathbf{A}_1 \times \mathbf{A}_2|}, \quad B_{\alpha\beta} = \mathbf{N} \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial \xi^\alpha \partial \xi^\beta} \quad (14)$$

اگر روی همین سطح دو نقطه $\mathbf{P}(\xi^1, \xi^2)$ و $\mathbf{P} + \Delta \mathbf{P}(\xi^\alpha, \xi^\alpha + \Delta \xi^\alpha)$ در نظر گرفته شوند می‌توان از بسط سری تیلور رابطه (۱۵) را نتیجه گرفت:

$$\Delta \mathbf{P} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \xi^\alpha} \Delta \xi^\alpha + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial \xi^\alpha \partial \xi^\beta} \Delta \xi^\alpha \Delta \xi^\beta + \frac{1}{6} \frac{\partial^3 \mathbf{P}}{\partial \xi^\alpha \partial \xi^\beta \partial \xi^\gamma} \Delta \xi^\alpha \Delta \xi^\beta \Delta \xi^\gamma + O(|\Delta \xi|^4) \quad (15)$$

که $\frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \xi^\alpha} = \mathbf{A}_\alpha$ و نیز جملات سمت راست عبارت فوق تابعی

از $A_{\alpha\beta}, B_{\alpha\beta}$ می‌باشند. بنابراین:

که در آن r_{ij} بیانگر فاصله بین اتم‌های i و j است و V_A و V_R به ترتیب جمله‌های دفع و جذب جفت اتم را نشان می‌دهند که فقط به فاصله بین دو اتم وابسته هستند:

$$V_R(r) = \left(1 + \frac{Q}{r}\right) A e^{-\alpha r} f_c(r) \quad (4)$$

$$V_A(r) = \sum_{n=1}^3 B_n e^{-\beta_n r} f_c(r) \quad (5)$$

$$A = 10954, \quad \alpha = 47.465 \text{ nm}^{-1}, \quad Q = 0.03134 \text{ nm},$$

$$B_1 = 12389 \text{ eV}, \quad \beta_1 = 47.205 \text{ nm}^{-1}, \quad B_2 = 17.567 \text{ eV} \quad (6)$$

$$\beta_2 = 14.332 \text{ nm}^{-1}, \quad B_3 = 30.715 \text{ eV}, \quad \beta_3 = 13.827 \text{ nm}^{-1}$$

که $f_c(r)$ یک تابع قطع یکنواخت، است که میزان پتانسیل بین اتمی را محدود می‌کند و در رابطه (۷) ارائه شده است:

$$f_c(r) = \begin{cases} 1, & r < R^{(1)} \\ \frac{1}{2} \left[1 + \cos \left[\frac{\pi (r - R^{(1)})}{R^{(2)} - R^{(1)}} \right] \right], & R^{(1)} < r < R^{(2)} \\ 0, & r < R^{(1)} \end{cases} \quad (7)$$

که در آن $R^{(1)}$ و $R^{(2)}$ به ترتیب 0.17 و 0.2 نانومتر هستند. مؤلفه برهم نهی چند اتمی در رابطه (۳) به اتم‌های مجاور اتم i وابسته است. بطوری‌که:

$$B_{ij} = \left[1 + \sum_{k(\neq i, j)} G(\theta_{ijk}) f_c(r_{ik}) \right]^{0.5} \quad (8)$$

r_{ik} فاصله بین اتم‌های i, k و $(k \neq i, j)$ زاویه بین پیوندهای $i-k$ و $i-j$ بوده و رابطه G بصورت زیر معرفی می‌شود [5]:

$$G(\theta) = 0.27186 + 0.48922 \cos \theta - 0.43286 \cos^2 \theta - 0.56140 \cos^3 \theta + 1.2711 \cos^4 \theta - 0.03793 \cos^5 \theta \quad (9)$$

$$\text{for } 0 \leq \theta \leq 109.47^\circ$$

$$G(\theta) = 0.69669 + 5.5444 \cos \theta + 23.432 \cos^2 \theta + 55.948 \cos^3 \theta + 69.876 \cos^4 \theta + 35.312 \cos^5 \theta \quad (10)$$

$$\text{for } 109.47^\circ \leq \theta \leq 120^\circ$$

$$G(\theta) = 0.00260 - 1.0980 \cos \theta - 4.3460 \cos^2 \theta - 6.8300 \cos^3 \theta - 4.9280 \cos^4 \theta - 1.3424 \cos^5 \theta \quad (11)$$

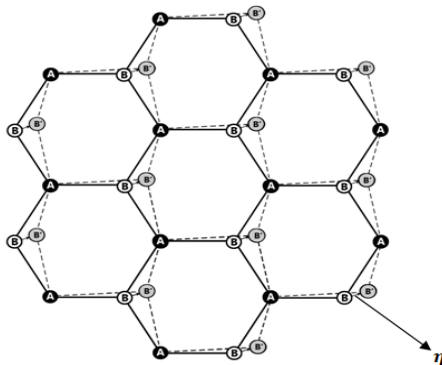
$$\text{for } 120^\circ \leq \theta \leq 180^\circ$$

قابل توجه است مقدار فاصله تعادلی با استفاده از این تابع پتانسیل $r_{ij}^{(0)} = 0.142 \text{ nm}$ می‌باشد. این مقدار کمتر از مقدار تعادلی محاسبه شده از برنر 1990 ($r_{ij}^{(0)} = 0.142 \text{ nm}$) مرجع [6] است.

$$|\Delta \mathbf{p}|^2 = (A_{\alpha\beta} + 2E_{\alpha\beta}) \Delta \xi^\alpha \Delta \xi^\beta - \frac{1}{12} [(B_{\alpha\beta} + K_{\alpha\beta}) \Delta \xi^\alpha \Delta \xi^\beta]^2 \quad (24)$$

۴-۳- تغییر شکل یک نانو لوله کربنی تک جداره

قانون کوشی - بورن [23]، چگالی انرژی کرنشی در سطح پیوسته را با انرژی ذخیره شده در پیوند میان اتمها مرتبط می کند. برای اعمال این قانون، می توان ساختار شش ضلعی صفحات کربنی را به دو زیر شبکه علامت گذاری شده توسط A و B در شکل (۷)، تجزیه کرد که هر زیر شبکه دارای یک ساختار مثلثی و متقارن مرکزی است.



شکل (۷): ساختار شش ضلعی تجزیه شده صفحات کربنی به دو زیر شبکه مثلثی

در تغییر شکل های محدود، دو زیر شبکه تحت یک بردار انتقالی η (شکل (۷)) نسبت به یکدیگر جابه جا می شوند و در این حالت تعادل اتمها برقرار خواهد شد. بردار $\Delta \mathbf{p}$ بین دو اتم از دو زیر شبکه متفاوت که قبل از تغییر شکل مختصات $\Delta \xi^\alpha$ را روی نانولوله دارند، پس از تغییر شکل به $\Delta \mathbf{p}$ با مختصات زیر تبدیل می شود:

$$\Delta \bar{\xi}^\alpha = \Delta \xi^\alpha + \eta^\alpha \quad (25)$$

از مینیمم کردن پتانسیل بین اتمی محاسبه می شود و طول پیوند و نیز زاویه بین پیوندها از روابط زیر بدست می آیند:

$$\Delta \mathbf{p}_1 \cdot \Delta \mathbf{p}_2 = (A_{\alpha\beta} + 2E_{\alpha\beta}) \Delta \bar{\xi}_1^\alpha \Delta \bar{\xi}_2^\beta + \frac{1}{12} (B_{\alpha\beta} + K_{\alpha\beta}) (B_{\gamma\lambda} + K_{\gamma\lambda}) \Delta \bar{\xi}_1^\alpha \Delta \bar{\xi}_2^\lambda \times (3\Delta \bar{\xi}_1^\beta \Delta \bar{\xi}_2^\lambda - 2\Delta \bar{\xi}_2^\beta \Delta \bar{\xi}_2^\gamma - 2\Delta \bar{\xi}_1^\beta \Delta \bar{\xi}_2^\gamma) \quad (26)$$

$$\cos \varphi = \frac{\Delta \mathbf{p}_1 \cdot \Delta \mathbf{p}_2}{|\Delta \mathbf{p}_1| |\Delta \mathbf{p}_2|} \quad (27)$$

$$\Delta \mathbf{p}_1 \cdot \Delta \mathbf{p}_2 = (A_{\alpha\beta} + 2E_{\alpha\beta}) \Delta \bar{\xi}_1^\alpha \Delta \bar{\xi}_2^\beta + \frac{1}{12} (B_{\alpha\beta} + K_{\alpha\beta}) (B_{\gamma\lambda} + K_{\gamma\lambda}) \Delta \bar{\xi}_1^\alpha \Delta \bar{\xi}_2^\lambda \times (3\Delta \bar{\xi}_1^\beta \Delta \bar{\xi}_2^\lambda - 2\Delta \bar{\xi}_2^\beta \Delta \bar{\xi}_2^\gamma - 2\Delta \bar{\xi}_1^\beta \Delta \bar{\xi}_2^\gamma) \quad (28)$$

$$\Delta \mathbf{P} = (\Delta \xi^\alpha - \frac{1}{6} B_{\beta\lambda} B_{\gamma u} A^{uu} \Delta \xi^\lambda \Delta \xi^\beta \Delta \xi^\gamma) \mathbf{A}_\alpha + \frac{1}{2} B_{\alpha\beta} \Delta \xi^\alpha \Delta \xi^\beta \mathbf{N} \quad (16)$$

که $A^{\alpha u}$ دارای رابطه زیر با $A_{\alpha u}$ است:

$$\begin{pmatrix} A^{11} & A^{12} \\ A^{21} & A^{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix}^{-1} \quad (17)$$

در نتیجه می توان رابطه زیر را برای طول $|\Delta \mathbf{P}|$ (فاصله بین دو نقطه) بدست آورد:

$$|\Delta \mathbf{P}|^2 = A_{\alpha\beta} \Delta \xi^\alpha \Delta \xi^\beta - \frac{1}{12} (B_{\alpha\beta} B_{\gamma\lambda} \Delta \xi^\alpha \Delta \xi^\beta)^2 \quad (18)$$

زاویه بین دو پیوند $\Delta \mathbf{P}_1, \Delta \mathbf{P}_2$ از رابطه (۱۹) محاسبه می شود:

$$\cos \varphi = \frac{\Delta \mathbf{P}_1 \cdot \Delta \mathbf{P}_2}{|\Delta \mathbf{P}_1| |\Delta \mathbf{P}_2|} \quad (19)$$

$$\Delta \mathbf{P}_1 \cdot \Delta \mathbf{P}_2 = A_{\alpha\beta} \Delta \xi_1^\alpha \Delta \xi_2^\beta + \frac{1}{12} B_{\alpha\beta} B_{\gamma\lambda} \Delta \xi_1^\alpha \Delta \xi_2^\lambda \times (3\Delta \xi_1^\beta \Delta \xi_2^\gamma - 2\Delta \xi_2^\beta \Delta \xi_2^\gamma - 2\Delta \xi_1^\beta \Delta \xi_2^\gamma) \quad (20)$$

۴-۲- تغییر شکل سطح خمیده (کرنش و انحنا)

فرض کنید نقطه $\mathbf{P}(\xi_1^1, \xi_2^2)$ روی سطح اولیه به نقطه $\mathbf{p}(\xi_1^1, \xi_2^2)$ تغییر شکل یافته است. بردارهای پایه، بردار نرمال و همچنین ضرایب فرم های اول و دوم برای سطح تغییر شکل بصورت زیر قابل محاسبه هستند:

$$\mathbf{a}_\alpha = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \xi^\alpha}, \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|}, \quad a_{\alpha\beta} = \mathbf{a}_\alpha \cdot \mathbf{a}_\beta, \quad b_{\alpha\beta} = \mathbf{n} \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{p}}{\partial \xi^\alpha \partial \xi^\beta} \quad (21)$$

اگر فرض کنیم دو نقطه \mathbf{P} و $\mathbf{P} + \Delta \mathbf{P}$ از سطح اولیه به نقاط \mathbf{p} و $\mathbf{p} + \Delta \mathbf{p}$ تغییر شکل یابند، می توان $\Delta \mathbf{p}$ را از رابطه (۱۸) با جایگذاری $\mathbf{n}, \mathbf{a}_\alpha, a_{\alpha\beta}, b_{\alpha\beta}$ بدست آورد. در این مرحله نیاز به محاسبه مؤلفه های تنسور کرنش گرین است که از تفاضل ضرایب فرم اساسی اول قبل و بعد از تغییر شکل نتیجه می شوند [22]:

$$E_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (a_{\alpha\beta} - A_{\alpha\beta}) \quad (22)$$

بطور مشابه مؤلفه های تنسور انحنا از تفاضل ضرایب فرم اساسی دوم قبل و بعد از تغییر شکل بدست می آیند [22]:

$$K_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} (b_{\alpha\beta} - B_{\alpha\beta}) \quad (23)$$

با توجه به روابط فوق و جایگذاری در (۱۸)، رابطه زیر برای فاصله بین دو نقطه بعد از تغییر شکل نتیجه می شود:

$$\mathbf{L} = \frac{D}{DE} \left(\frac{\partial w}{\partial \mathbf{E}} \right) = \frac{\partial^2 w}{\partial \mathbf{E} \partial \mathbf{E}} - \frac{\partial^2 w}{\partial \mathbf{E} \partial \boldsymbol{\eta}} \cdot \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \boldsymbol{\eta} \partial \boldsymbol{\eta}} \right)^{-1} \cdot \frac{\partial^2 w}{\partial \boldsymbol{\eta} \partial \mathbf{E}} \quad (35)$$

$$\mathbf{S} = \frac{D}{DK} \left(\frac{\partial w}{\partial \mathbf{K}} \right) = \frac{\partial^2 w}{\partial \mathbf{K} \partial \mathbf{K}} - \frac{\partial^2 w}{\partial \mathbf{K} \partial \boldsymbol{\eta}} \cdot \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \boldsymbol{\eta} \partial \boldsymbol{\eta}} \right)^{-1} \cdot \frac{\partial^2 w}{\partial \boldsymbol{\eta} \partial \mathbf{K}} \quad (36)$$

\mathbf{H}, \mathbf{H}^T نیز کشش بر خمش کوپل هستند به طوری که:

$$\mathbf{H} = \frac{D}{DK} \left(\frac{\partial w}{\partial \mathbf{E}} \right) = \frac{\partial^2 w}{\partial \mathbf{E} \partial \mathbf{K}} - \frac{\partial^2 w}{\partial \mathbf{E} \partial \boldsymbol{\eta}} \cdot \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \boldsymbol{\eta} \partial \boldsymbol{\eta}} \right)^{-1} \cdot \frac{\partial^2 w}{\partial \boldsymbol{\eta} \partial \mathbf{K}} \quad (37)$$

$$\mathbf{H}^T = \frac{D}{DE} \left(\frac{\partial w}{\partial \mathbf{K}} \right) = \frac{\partial^2 w}{\partial \mathbf{K} \partial \mathbf{E}} - \frac{\partial^2 w}{\partial \mathbf{K} \partial \boldsymbol{\eta}} \cdot \left(\frac{\partial^2 w}{\partial \boldsymbol{\eta} \partial \boldsymbol{\eta}} \right)^{-1} \cdot \frac{\partial^2 w}{\partial \boldsymbol{\eta} \partial \mathbf{E}} \quad (38)$$

۴-۵- مسائل

۴-۵-۱- تبدیل صفحه کرنی به نانولوله کرنی

فرض کنید ξ^1, ξ^2 مختصات دکارتی بر صفحه کرنی باشند که در امتداد ξ^1 به یک نانولوله تبدیل می‌شود. (ξ^2 محور طولی نانولوله است).

ضرایب فرم‌های اساسی اول و دوم قبل از تغییر شکل بصورت $A_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}$ و $B_{\alpha\beta}$ هستند. کرنش‌های مهندسی در جهات محیطی و محوری در تبدیل صفحه به نانولوله می‌باشند که باید محاسبه شوند.

نقطه $\mathbf{P}(\xi^1, \xi^2)$ روی صفحه به $\mathbf{p} = R\mathbf{e}_R + (1 + \varepsilon_2)\xi^2\mathbf{e}_Z$ روی نانولوله تبدیل می‌شود که شعاع نانولوله کرنی و بردارهای یکه به ترتیب در جهات محوری و شعاعی هستند. شکل (۸) شماتیک نانولوله کرنی و نقطه تبدیل یافته را نشان می‌دهد. زاویه قطبی $\Theta = (1 + \varepsilon_1)\xi^1 / R$ و بردارهای پایه پس از تغییر شکل بصورت $\mathbf{a}_1 = (1 + \varepsilon_1)\mathbf{e}_\Theta$ و $\mathbf{a}_2 = (1 + \varepsilon_2)\mathbf{e}_Z$ بردار پایه در جهت محیطی محاسبه می‌شوند در حالی که \mathbf{e}_Θ بردار پایه در جهت محیطی است.

بطور خلاصه، طول پیوند دو اتم، زاویه بین پیوندها و پتانسیل بین اتمی، به مؤلفه تنسورهای کرنش گرین، انحنا و همچنین به بردار انتقالی وابسته هستند:

$$r_{ij} = r_{ij}(E_{\alpha\beta}, K_{\alpha\beta}, \eta^\lambda), \quad \theta_{ijk} = \theta_{ijk}(E_{\alpha\beta}, K_{\alpha\beta}, \eta^\lambda) \\ , V = V(r_{ij}, \theta_{ijk}; k \neq i, j) \quad (29)$$

چگالی انرژی کرنشی که مجموع انرژی کرنشی ذخیره شده در پیوندهای بین اتمی درون یک سلول است طبق رابطه زیر بدست می‌آید:

$$w = w(E_{\alpha\beta}, K_{\alpha\beta}, \eta^\lambda(E_{\alpha\beta}, K_{\alpha\beta})) = \frac{\sum_{j=1,2,3} V(r_{ij}, \theta_{ijk}; k \neq i, j)}{2S_0}, \quad (S_0 = \frac{3\sqrt{3}}{4} r_{ij}^{(0)^2}) \quad (30)$$

در حالی که S_0 به میانگین مساحت پیرامون هر اتم در سلول اولیه قبل از تغییر شکل، اشاره می‌کند.

۴-۴- تحلیل تنسور تنش و ممان در یک نانولوله کرنی

تنسور کرنش گرین با مؤلفه‌های $E_{\alpha\beta}$ را بصورت $E = E_{\alpha\beta} \mathbf{A}^\alpha \mathbf{B}^\beta$ می‌توان نشان داد در حالی که \mathbf{A}^α بردار پایه ناهم‌مورد است که با رابطه $\mathbf{A}^\alpha = A_{\alpha\beta} \mathbf{A}^\beta$ به بردار پایه هم‌مورد، مرتبط می‌شود. بطور مشابه تنسور انحنا بصورت $K = K_{\alpha\beta} \mathbf{A}^\alpha \mathbf{B}^\beta$ نشان داده می‌شود.

تنسور تنش پیولا - کیرشهف دوم، حاصل مشتق‌گیری کامل از چگالی انرژی کرنشی نسبت به تنسور کرنش گرین است.

$$\mathbf{T} = \frac{Dw}{DE} = \frac{\partial w}{\partial \mathbf{E}} + \frac{\partial w}{\partial \boldsymbol{\eta}} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial \mathbf{E}} = \frac{\partial w}{\partial \mathbf{E}} \quad (31)$$

در حالی که:

$$T^{\alpha\beta} = \frac{\partial w}{\partial E_{\alpha\beta}} \quad (32)$$

و بطور مشابه تنسور ممان از مشتق‌گیری کامل چگالی انرژی کرنشی نسبت به تنسور انحنا بدست می‌آید:

$$\mathbf{M} = \frac{Dw}{DK} = \frac{\partial w}{\partial \mathbf{K}} + \frac{\partial w}{\partial \boldsymbol{\eta}} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\eta}}{\partial \mathbf{K}} = \frac{\partial w}{\partial \mathbf{K}} \quad (33)$$

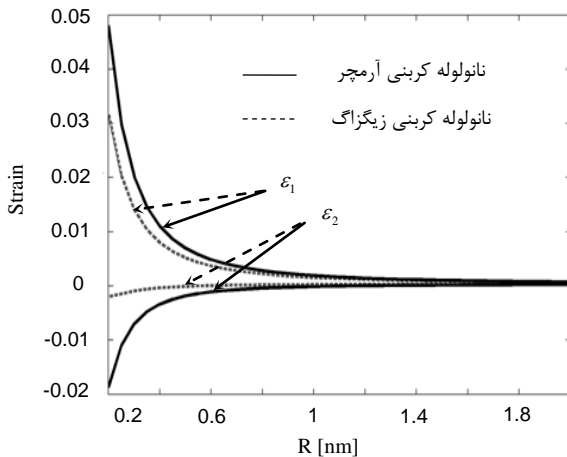
در حالی که:

$$M^{\alpha\beta} = \frac{\partial w}{\partial K_{\alpha\beta}} \quad (34)$$

\mathbf{S}, \mathbf{L} به ترتیب تنسورهای متقارن سفتی کششی و خمشی

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^T, \mathbf{L} = \mathbf{L}^T \text{ هستند}$$

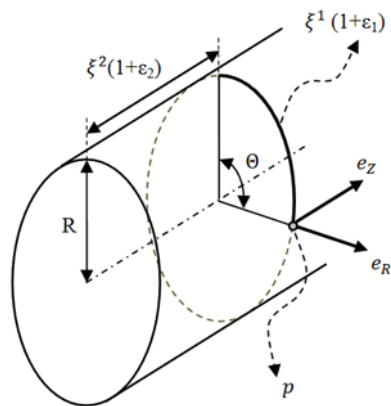
همچنین با افزایش شعاع نانولوله مشاهده می‌شود که اختلاف میان کرنش محیطی و شعاعی کاهش می‌یابد. در واقع در شعاع‌های بزرگ، انحنای نانولوله کمتر شده و به حالت صفحه کربنی نزدیک‌تر می‌شود.



شکل (۹): تغییرات کرنش محوری و محیطی بر حسب شعاع نانولوله هنگام تبدیل صفحه کربنی به نانولوله

یاکوبسان و همکارانش [24]، صلبیت خمشی صفحه کربنی را برای محاسبه ضخامت نانولوله مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها از دینامیک مولکولی برای بدست آوردن اختلاف انرژی هر اتم (ΔU) بین صفحه کربنی و نانولوله استفاده کردند. اگر EI را صلبیت خمشی برای صفحه و نانولوله در نظر بگیریم، این اختلاف انرژی با شعاع نانولوله بصورت $(\Delta U = EIS_0/2R^2)$ رابطه دارد که S_0 مساحت پیرامون هر اتم در صفحه کربنی است. برای اعتبارسنجی تئوری حاضر، اختلاف انرژی هر اتم مربوط به قبل و بعد از تغییر شکل، محاسبه شده و با رابطه بدست آمده از دینامیک مولکولی مقایسه شده است. شکل (۱۰) انرژی کرنشی به ازای هر اتم بر حسب شعاع نانولوله ساخته شده را نشان می‌دهد. رابطه ΔU از دینامیک مولکولی در همان شکل رسم شده است که در آن $EI = (\sqrt{3}/4) (\partial V / \partial \cos \theta_{ijk})_0$ است. تحلیل ارائه شده بخوبی با $\Delta U = EIS_0/2R^2$ مطابقت دارد. قابل مشاهده است با افزایش شعاع نانولوله، انرژی کرنشی ذخیره شده در آن کاهش می‌یابد. در واقع هر چه شعاع بزرگ‌تر شود انحنای نانولوله و در نتیجه کرنش ایجاد شده در آن کوچک‌تر می‌شود.

همان‌طور که در شکل (۹) نشان داده شد، کرنش‌های محوری و محیطی برای دو ساختار آرمچر و زیگزاگ یکسان نیستند. بطوری‌که در نانولوله‌های زیگزاگ این کرنش‌ها دارای



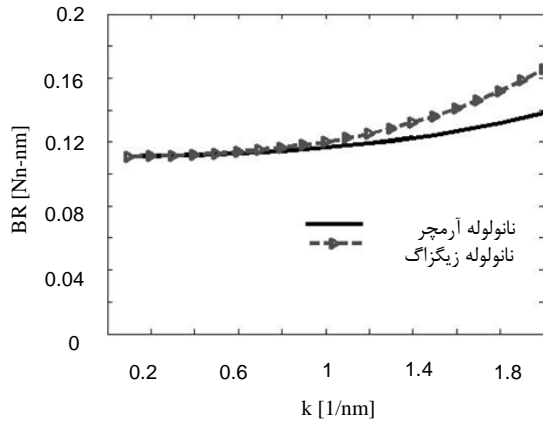
شکل (۸): نمای نانولوله کربنی و نقطه تبدیل یافته

ضرایب غیر صفر فرم‌های اساسی اول و دوم و نیز مؤلفه‌های غیر صفر تنسورهای کرنش گرین و انحنای پس از تغییر شکل بصورت زیر خواهند بود:

$$\begin{aligned} a_{11} &= (1 + \varepsilon_1)^2, & a_{22} &= (1 + \varepsilon_2)^2, \\ b_{11} &= \frac{-(1 + \varepsilon_1)^2}{R}, & E_{11} &= \varepsilon_1 + \frac{1}{2} \varepsilon_1^2, \\ E_{22} &= \varepsilon_2 + \frac{1}{2} \varepsilon_2^2, & K_{11} &= \frac{-(1 + \varepsilon_1)^2}{R} \end{aligned} \quad (39)$$

(محاسبه کلیه ضرایب فوق در بخش ضمیمه ارائه شده است). چگالی انرژی کرنشی w تابعی از $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ (و بردار انتقال) است. اگر نانولوله تحت هیچ‌گونه کرنش خارجی قرار نگیرد، $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ با مینیمم کردن انرژی کرنشی بدست می‌آیند $(\frac{\partial w}{\partial \varepsilon_1} = 0, \frac{\partial w}{\partial \varepsilon_2} = 0)$.

شکل (۹) کرنش‌های محیطی و محوری $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ را در حین تبدیل صفحه کربنی به نانولوله کربنی به شعاع R (در حالت آرمچر و زیگزاگ) نشان می‌دهد. گفتنی است کرنش محیطی ε_1 برای نانولوله‌های خیلی کوچک به ۵٪ می‌رسد در حالی که کرنش محوری ε_2 در مقایسه با کرنش محیطی کوچک است. این بدان معنی است که در تبدیل صفحه کربنی به نانولوله، طول آن در راستای محوری تغییر چندانی نمی‌کند. در صورتی که تغییر طول پیوندها در راستای محیطی، برای نانولوله‌هایی با شعاع کوچک، محسوس است. هر چه شعاع نانولوله کوچک‌تر باشد، بدلیل اثرات هندسی مانند انحنای طول پیوندها و زاویه بین آن‌ها اختلاف بیشتری نسبت به حالت صفحه کربنی دارند. بنابراین برای اینکه اتم‌ها در موقعیت انرژی کمینه خود قرار گیرند مجبور هستند که طوری تغییر مکان دهند تا طول پیوندها و زاویه بین آن‌ها، به فاصله تعادلی و زاویه تعادلی صفحه کربنی نزدیک‌تر شود.



شکل (۱۱): صلبیت خمشی نانولوله بر حسب انحنا

۴-۵-۲- نانولوله کربنی تحت کشش

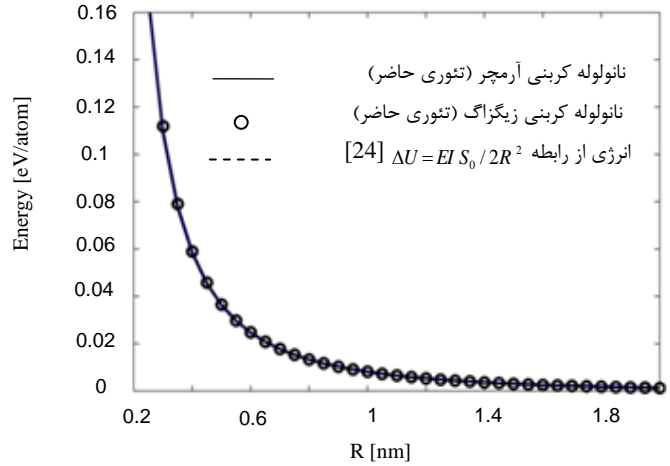
در این بخش، هدف تحلیل کرنش‌های ایجاد شده در یک نانولوله کربنی (زیگزاگ و آرمچر) تحت کشش ساده است. فرض کنید ε_{axial} و $\varepsilon_{lateral}$ به ترتیب کرنش‌های مهندسی محیطی و محوری ایجاد شده در نانولوله باشند. $\xi^1 = R\Theta$ ، $\xi^2 = Z$ در نظر گرفته می‌شوند در حالی که Θ, Z بیانگر مختصات استوانه‌ای و شعاع نانولوله قبل از تغییر شکل است. ضرایب فرم‌های اساسی اول و دوم قبل از تغییر شکل بصورت $\mathbf{P} = R\mathbf{e}_R + Z\mathbf{e}_Z$ و $B_{11} = -1/R$ ، $A_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}$ بردارهای پایه پس از تغییر شکل به ترتیب بصورت $\mathbf{a}_1 = (1 + \varepsilon_{lateral})\mathbf{e}_\theta$ و $\mathbf{p} = R(1 + \varepsilon_{lateral})\mathbf{e}_R + (1 + \varepsilon_{axial})Z\mathbf{e}_Z$ و $\mathbf{a}_2 = (1 + \varepsilon_{axial})\mathbf{e}_z$ نوشته می‌شوند و نیز ضرایب غیرصفر فرم-های اساسی اول و دوم و مؤلفه‌های غیر صفر تنسورهای کرنش گرین و انحنا بصورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$\begin{aligned} a_{11} &= (1 + \varepsilon_{lateral})^2, \quad a_{22} = (1 + \varepsilon_{axial})^2, \\ b_{11} &= \frac{-(1 + \varepsilon_{lateral})^2}{R}, \quad E_{11} = \varepsilon_{lateral} + \frac{1}{2}\varepsilon_{lateral}^2, \\ E_{22} &= \varepsilon_{axial} + \frac{1}{2}\varepsilon_{axial}^2, \quad K_{11} = \frac{-(1 + \varepsilon_{lateral})^2}{R} \end{aligned} \quad (41)$$

چگالی انرژی کرنشی w تابعی از $\varepsilon_{lateral}$ ، ε_{axial} (و بردار انتقال) است. اگر نانولوله فقط در جهت محوری تحت کشش قرار گیرد کرنش $\varepsilon_{lateral}$ در جهت محیطی را می‌توان بر حسب

$$\left(\frac{\partial w}{\partial \varepsilon_{lateral}} = 0 \right) \varepsilon_{axial}$$

مقدار کمتری هستند. اما در شکل (۱۰) منحنی انرژی کرنشی برای دو ساختار زیگزاگ و آرمچر، برخلاف برابر نبودن کرنش‌ها، روی هم قرار گرفته‌اند.



شکل (۱۰): تغییرات انرژی بر حسب شعاع نانولوله

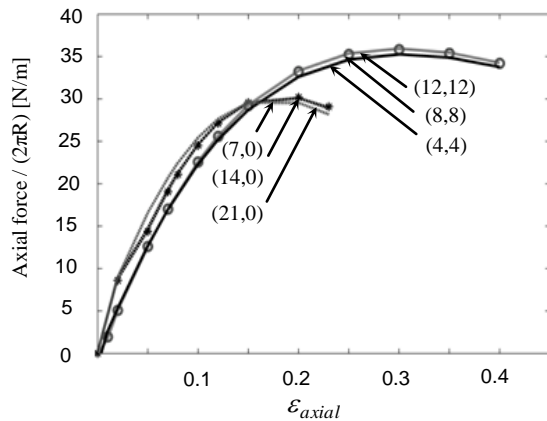
همچنین می‌توان صلبیت خمشی نانوله ساخته شده (BR) را با در نظر گرفتن انحنا ایجاد شده $k = 1/R$ ، طبق رابطه (۴۰) بدست آورد [25]:

$$BR = \frac{\partial^2 w}{\partial k^2} \quad (40)$$

که شعاع نانولوله می‌باشد.

شکل (۱۱) مقدار صلبیت خمشی را برای نانولوله‌های آرمچر و زیگزاگ نشان می‌دهد. همانطور که در این شکل می‌توان دید، در انحناهای کوچک صلبیت خمشی نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچر یکسان بوده، در حالی که با افزایش انحنا مقدار صلبیت خمشی در نانولوله‌های زیگزاگ نسبت به آرمچر افزایش بیشتری دارد. نتیجه مذکور با نتایج ارائه شده در مرجع [25] کاملاً منطبق می‌باشد. بطوری که در انحناهای کوچک مقدار صلبیت خمشی در مرجع گفته شده ۰/۱۱۰ نانونیوتن نانومتر (معادل با ۰/۶۹ الکترون ولت) و در مقاله حاضر ۰/۱۱۱ نانونیوتن نانومتر است.

خوبی دارد.



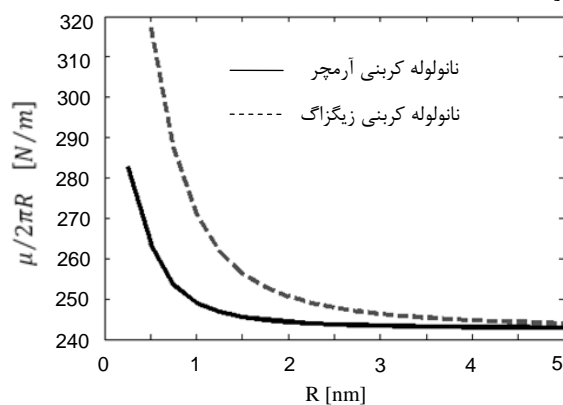
شکل (۱۲): نسبت نیروی محوری اعمال شده بر محیط نانولوله بر حسب کرنش محوری

در حالتی که کرنش ها نزدیک به صفر باشند، نسبت نیرو به کرنش بطور تحلیلی از روابط (۴۸) و (۴۹) بدست می آید [27]:

$$\mu = 2\pi[R(L_{ZZZZ} - \nu L_{ZZ\theta\theta}) + \nu H_{ZZ\theta\theta}] \quad (48)$$

$$\nu = \frac{(R^2 L_{\theta\theta ZZ} - R H_{ZZ\theta\theta})}{R^2 L_{\theta\theta\theta\theta} - 2R H_{\theta\theta\theta\theta} + S_{\theta\theta\theta\theta}} \quad (49)$$

که ν معرف ضریب پواسون است. شکل (۱۳) نسبت نیرو به کرنش بر حسب شعاع نانولوله آرمچر و زیگزاگ را نشان می دهد. می توان گفت نیرو برای شعاع های بزرگتر از حدود ۲ نانومتر ثابت می شود.



شکل (۱۳): نسبت نیرو به کرنش بر حسب شعاع نانولوله در کرنش های نزدیک به صفر

همچنین سفتی کششی الاستیک خطی (حاصل ضرب مدول یانگ در ضخامت)، در جهت محوری نانولوله برای تغییر شکل های کوچک (کرنش کوچک)، از رابطه زیر پیروی می کند:

$$\left[\gamma = L_{ZZZZ} - \frac{L_{ZZ\theta\theta}^2}{L_{\theta\theta\theta\theta}} \right]_{E=0, \eta=0} \quad (50)$$

مقدار نیروی موثر از روابط تعادل نانولوله بطور تحلیلی مطابق رابطه زیر بدست می آید:

$$(\mathbf{F} \cdot \mathbf{T}) \cdot \nabla = 0 \quad (42)$$

اگر فرض شود که روی سطح داخلی و خارجی نانولوله کششی وجود نداشته باشد:

$$(\mathbf{F} \cdot \mathbf{T}) \cdot \mathbf{e}_R = 0 \quad (43)$$

بنابراین سه رابطه زیر از (۴۲) و (۴۳) بدست می آیند:

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{T})_{R\theta} - \frac{1}{R} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{T})_{\theta\theta} + \frac{\partial}{\partial Z} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{T})_{RZ} = 0 \quad (44)$$

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{T})_{\theta\theta} + \frac{1}{R} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{T})_{R\theta} + \frac{\partial}{\partial Z} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{T})_{\theta Z} = 0 \quad (45)$$

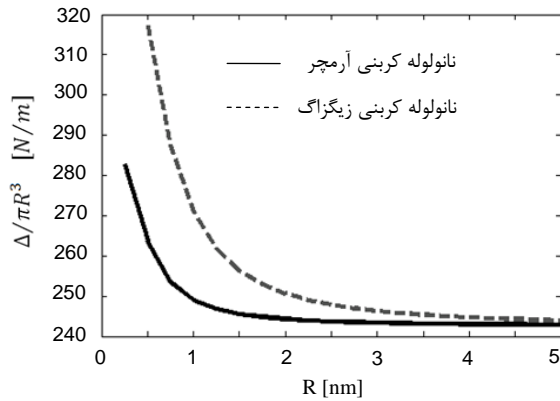
$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{T})_{Z\theta} + \frac{\partial}{\partial Z} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{T})_{ZZ} = 0 \quad (46)$$

در کشش ساده تنش برشی را صفر فرض می کنیم $(T_{\theta Z} = T_{Z\theta} = 0)$. بنابراین نیروی محوری از انتگرال گیری تنش عمودی روی سطح مقطع $(\mathbf{e}_Z \cdot (\mathbf{F} \cdot \mathbf{T}) \cdot \mathbf{e}_Z)$ نتیجه می شود:

$$P = 2\pi R F_{ZZ} T_{ZZ} = 2\pi R \sqrt{1 + 2E_{ZZ}} T_{ZZ} \quad (47)$$

شکل (۱۲) نسبت نیروی محوری اعمال شده بر محیط نانولوله بر حسب کرنش محوری برای چند نوع نانولوله آرمچر $[(4,4), (8,8), (12,12)]$ و زیگزاگ $[(7,0), (14,0), (21,0)]$ را نشان می دهد. منحنی ها وابستگی چندانی به شعاع نانولوله ندارند اما نوع ساختار نانولوله تأثیر زیادی بر روند نمودارها می گذارد.

همچنین مشاهده می شود برای کرنش های کوچک تر روند این منحنی خطی است در حالی که در کرنش های بزرگ تر دارای روندی غیرخطی خواهد بود، بطوری که با افزایش کرنش، شیب این نمودار در حال کاهش است و این بدان معنی است که سفتی کششی یا مدول یانگ نانولوله در بارگذاری کششی، به تدریج کاهش می یابد که این نتیجه با مرجع [26] سازگاری دارد. بطوری که با در نظر گرفتن ضخامت گفته شده در مرجع [26]، مقدار حاصل ضرب تنش محوری و ضخامت، در کرنش محوری ۲٪ برای نانولوله (۱۲ و ۱۲)، حدود ۳۴،۱۷ نیوتن بر متر بوده که با مقدار ۳۳،۶ نیوتن بر متر بدست آمده در شکل (۱۲)، هم خوانی



شکل (۱۵): نسبت ممان خمشی به انحنا بر حسب شعاع نانولوله در انحنا نزدیک به صفر

با توجه به نتایج بدست آمده، مشاهده شد که نوع ساختار بر روی نتایج تأثیرگذار بوده است و به این دلیل است که تغییرات زاویه منجر به تغییر در برهم‌نهی چند اتمی و تعاملات میان اتم‌ها می‌شود. بنابراین، تحت تغییر شکل‌های مختلف رفتار نانولوله‌های آرمچر و زیگزاگ متفاوت خواهد بود.

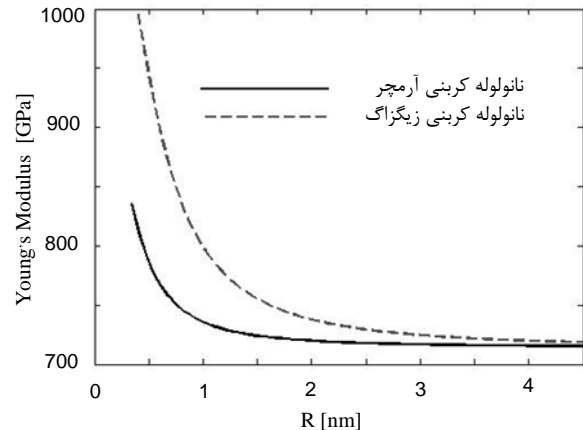
۵- نتیجه‌گیری

در این مقاله، رفتار یک نانولوله تک جداره تحت تغییر شکل‌های مختلف با استفاده از یک تئوری پوسته با تغییر شکل محدود مورد بررسی قرار گرفت. این تئوری پتانسیل بین اتمی را به طور مستقیم با تئوری‌های غشایی ترکیب نموده و اثرات خمش و انحنا را در نظر می‌گیرد. همچنین مدل ساختاری حاضر با مقادیر پراکنده، مستقل از مدول یانگ و ضخامت نانولوله بوده و تعاملات چند اتمی غیرخطی را شامل می‌شود. با بررسی اثرات نوع ساختار دیده شد که نانولوله‌های آرمچر و زیگزاگ تحت کشش و خمش، رفتار متفاوتی از خود نشان می‌دهند و در محدوده کرنش و انحنا کوچک این تفاوت برای نانولوله‌های با شعاع بزرگتر کمتر خواهد بود. به علاوه تئوری توسعه داده شده، محدود به نانولوله‌های تک جداره کربنی نبوده و قابل کاربرد برای سایر نانوساختارها (یا به عبارتی سایر توابع پتانسیل بین اتمی) است.

۶- ضمیمه

نقطه $P(\xi^1, \xi^2)$ را روی سطح قبل از تغییر شکل در نظر بگیرید. بردار پایه هموردا، بردار عمود بر سطح و ضرایب فرم اساسی اول و دوم بصورت زیر محاسبه می‌شوند:

شکل (۱۴) مقدار مدول یانگ نانولوله‌های کربنی آرمچر و زیگزاگ را بر حسب شعاع آن‌ها نشان می‌دهد. مقدار ضخامت نانولوله‌ها، طبق مرجع [28]، 0.34 نانومتر در نظر گرفته شده است. در این شکل، با افزایش شعاع نانولوله مقدار مدول یانگ آن کاهش می‌یابد که این روند نزولی با مرجع [28] کاملاً مطابقت دارد. قابل ذکر است که در شعاع‌های کوچک با انحنا زیاد، همواره مقدار مدول یانگ نانولوله‌های کربنی زیگزاگ از آرمچر بیشتر می‌باشد.



شکل (۱۴): مدول یانگ بر حسب شعاع نانولوله

۴-۵-۳- نانولوله کربنی تحت خمش

در خمش نانولوله، سطح مقطع آن پس از تغییر شکل بصورت دایره‌ای باقی نمی‌ماند. استفاده از یک روش عددی (مانند روش المان محدود) برای بررسی و تحلیل ممان بر حسب انحنا در این تغییر شکل نیاز است. فقط زمانی که انحنا سطح بسیار کوچک باشد، می‌توان آن را بصورت تحلیلی بیان کرد. برای یک نانولوله آرمچر یا زیگزاگ با فرض انحنا کوچک κ ، نسبت ممان خمشی به انحنا از رابطه زیر بدست می‌آید [27]:

$$\Delta = \pi R^2 [RL_{zzzz} - \lambda RL_{zz\theta\theta} + 2\lambda H_{zzzz}] \quad (51)$$

$$\lambda = \frac{(R^2 L_{\theta\theta zz} - RH_{\theta\theta zz} - 2RH_{zz\theta\theta} + 2S_{\theta\theta zz})}{(R^2 L_{\theta\theta\theta\theta} - 4RH_{\theta\theta\theta\theta} + 4S_{\theta\theta\theta\theta})} \quad (52)$$

شکل (۱۵) این نسبت را بر حسب شعاع نانولوله در حالی که بر πR^3 تقسیم شده است، نشان می‌دهد. به راحتی می‌توان نتیجه گرفت نسبت ممان خمشی به انحنا برای شعاع‌های بزرگتر از حدود 2 نانومتر ثابت می‌شود. با توجه به شکل‌های (۱۳) و (۱۵)، مادامی که شعاع زیاد می‌شود تأثیر نوع ساختار نانولوله (آرمچر و زیگزاگ)، بر روی نسبت‌های نیرو به کرنش و ممان به انحنا کاهش می‌یابد.

۷- مراجع

- [۱] A. Krishnan., E. Dujardin., T.W. Ebbesen., P.N. Yianilos., M.M.J. Treacy, "Young's modulus of single-walled nanotubes", Phys. Rev. B, vol, 58, pp. 14013- 14019, 1998.
- [۲] O. Lourie., H.D. Wagner, "Evaluation of Young's modulus of carbon nanotubes by micro-Raman spectroscopy", J. Mater. Res, vol, 13, pp. 2418- 2422, 1998.
- [۳] B.I. Yakobson., P. Avouris, "Mechanical properties of carbon nanotubes", In: Dresselhaus, M.S., Dresselhaus, G., Avouris, P. (Eds.), Carbon Nanotubes. Topics in Applied Physics, vol, 80, pp. 287- 329, 2001.
- [۴] D. Qian., G.J. Wagner., W.K. Liu., M.F. Yu., R.S. Ruoff, "Mechanics of carbon nanotubes", Appl. Mech. Rev, vol, 55, pp. 495- 533, 2002.
- [۵] D.W. Brenner., O.A. Shenderova., J.A. Harrison., S.J. Stuart., B. Ni., S.B. Sinnott, "A second-generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons", J. Phys.- Condens. Matter, vol, 14, pp. 783- 802, 2002.
- [۶] D.W. Brenner, "Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films", Phys Rev. B, vol, 42, pp. 9458- 9471, 1990.
- [۷] G.G. Samsonidze., B.I. Yakobson, "Energetics of Stone-Wales defects in deformations of monoatomic hexagonal layers", Comput. Mater. Sci, vol, 23, pp. 62- 72, 2002.
- [۸] Y. Huang., J. Wu., K.C. Hwang, "Thickness of graphene and single-wall carbon nanotubes", Phys. Rev. B, vol, 74, pp. 245- 413, 2006.
- [۹] C.Q. Ru, "Axially compressed buckling of a doublewalled carbon nanotube embedded in an elastic medium", J. Mech. Phys. Solids, vol, 49, pp. 1265- 1279, 2001.
- [۱۰] Z. Tu., Z. Ou-Yang, "Single-walled and multiwalled carbon nanotubes viewed as elastic tubes with the effective Young's moduli dependent on layer number", Phys. Rev. B, vol, 65, pp. 233- 407, 2002.
- [۱۱] A. Pantano., D.M. Parks., M.C. Boyce, "Mechanics of deformation of single- and multi-wall carbon nanotubes", J. Mech. Phys. Solids, vol, 52, pp. 789- 821, 2004.
- [۱۲] P. Zhang., Y. Huang., H. Gao., K.C. Hwang, "Fracture nucleation in single-wall carbon nanotubes under tension: a continuum analysis incorporating interatomic potentials", J. Appl. Mech, vol, 69, pp. 454- 458, 2002.

$$\mathbf{A}_\alpha = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial \xi^\alpha} \rightarrow \mathbf{A}_1 = \mathbf{e}_\theta, \quad \mathbf{A}_2 = \mathbf{e}_z \quad (53)$$

$$\mathbf{N} = \frac{\mathbf{A}_1 \times \mathbf{A}_2}{|\mathbf{A}_1 \times \mathbf{A}_2|} \rightarrow \mathbf{N} = \mathbf{e}_R, \quad \mathbf{A}_{\alpha\beta} = \mathbf{A}_\alpha \cdot \mathbf{A}_\beta$$

$$\Rightarrow \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (54)$$

$$B_{\alpha\beta} = \mathbf{N} \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{P}}{\partial \xi^\alpha \partial \xi^\beta} \rightarrow B_{\alpha\beta} = 0 \quad (55)$$

موقعیت نقطه بعد از تغییر شکل:

$$\varepsilon_2 = \frac{\Delta Z}{Z} = \frac{Z_2 - \xi^2}{\xi^2} \rightarrow Z_2 = (1 + \varepsilon_2) \xi^2 \quad (56)$$

$$\varepsilon_1 = \frac{\Delta \theta}{\theta} = \frac{R\theta - \xi^1}{\xi^1} \rightarrow \Theta = (1 + \varepsilon_1) \xi^1 \quad (57)$$

در نتیجه پس از تغییر شکل این ضرایب بصورت روابط (۵۸) تا (۶۰) تغییر می کنند:

$$\mathbf{a}_\alpha = \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \xi^\alpha} \rightarrow \mathbf{a}_1 = \frac{\partial \left(R(1 + \varepsilon_1) \frac{\xi^1}{R} \right)}{\partial \xi^1} = (1 + \varepsilon_1) \mathbf{e}_\theta$$

$$\mathbf{a}_2 = (1 + \varepsilon_2) \mathbf{e}_z \quad (58)$$

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{|\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|} \rightarrow \mathbf{n} = \mathbf{e}_R, \quad a_{\alpha\beta} = \mathbf{a}_\alpha \cdot \mathbf{a}_\beta$$

$$\Rightarrow \mathbf{a} = \begin{bmatrix} (1 + \varepsilon_1)^2 & 0 \\ 0 & (1 + \varepsilon_2)^2 \end{bmatrix} \quad (59)$$

$$b_{\alpha\beta} = \mathbf{n} \cdot \frac{\partial^2 \mathbf{p}}{\partial \xi^\alpha \partial \xi^\beta}$$

$$b_{11} = \mathbf{e}_R \cdot \left[(1 + \varepsilon_1) \frac{\mathbf{e}_R}{\Theta} \right] = \frac{-R}{\xi^{1^2}} = \frac{-(1 + \varepsilon_1)^2}{R}$$

$$b_{22} = \mathbf{e}_R \cdot \left[\frac{\partial(1 + \varepsilon_2) \mathbf{e}_z}{\partial \xi^2} \right] = 0 \quad (60)$$

با استفاده از روابط (۲۲) و (۲۳):

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 + \frac{1}{2} \varepsilon_1^2 & 0 \\ 0 & \varepsilon_2 + \frac{1}{2} \varepsilon_2^2 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \frac{-(1 + \varepsilon_1)^2}{R} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (61)$$

- H. Shima., S. Ghosh., M. Arroyo., K. Liboshi., M. Sato., "Thin-shell theory based analysis of radially pressurized multiwall carbon nanotubes", *Compt. Mater. Sci*, vol, 52, pp. 90- 94, 2012. [۲۰]
- B.J. Cox., J.M. Hill., "Exact and approximate geometric parameters for carbon nanotubes incorporating curvature", *Carbon*, vol, 45, pp. 1453, 2007. [۲۱]
- Y.C. Fung., "A first course in continuum mechanics". Englewood Cliffs, N.J., Prentice-Hall, Inc., 1977. [۲۲]
- M. Born., K. Huang, "Dynamical Theory of Crystal Lattices", Oxford University Press, Oxford, 1954. [۲۳]
- B.I. Yakobson., C.J. Brabec., J. Bernholc, "Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear response", *Phys. Rev. Lett*, vol, 76, pp. 2511- 2514, 1996. [۲۴]
- Q. Lu., M. Arroyo., R. Huang, "Elastic bending modulus of monolayer graphene", *J. Phys. D: Appl. Phys*, vol, 42, pp. 102002- 102022, 2009. [۲۵]
- K.M. Liew., X.Q. He., C.H. Wong, "On the study of elastic and plastic properties of multi-walled carbon nanotubes under axial tension using molecular dynamics simulation", *Acta Materialia*, vol, 52, pp. 2521- 2527, 2004. [۲۶]
- J. Wu., K.C. Hwang., Y. Huang., "An atomistic-based finite-deformation shell theory for single-wall carbon nanotubes", *J. Mech. Phys. Solids*, vol, 56, pp. 279- 292, 2008. [۲۷]
- S. Xiao., W. Hou., "Studies of size effects on carbon nanotubes' mechanical properties by using different potential functions", *Fullerenes, Nanotubes and carbon nanostructures*, vol, 14, pp. 9- 16, 2006. [۲۸]
- P. Zhang., Y.G. Huang., P.H. Geubelle., K.C. Hwang, "On the continuum modeling of carbon nanotubes", *Acta Mech. Sin*, vol, 18, pp. 528- 536, 2002. [۱۳]
- P. Zhang., Y. Huang., P.H. Geubelle., P.A. Klein., K.C. Hwan, "The elastic modulus of single-wall carbon nanotubes: a continuum analysis incorporating interatomic potentials", *Int. J. Solids Struct*, vol, 39, pp. 3893- 3906, 2002. [۱۴]
- H. Jiang., P. Zhang., B. Liu., Y. Huang., P.H. Geubelle., H. Gao., K.C. Hwang, "The effect of nanotube radius on the constitutive model for carbon nanotubes", *Comput. Mater. Sci*, vol, 28, pp. 429- 442, 2003. [۱۵]
- P. Zhang., H. Jiang., Y. Huang., P.H. Geubelle., K.C. Hwang, "An atomistic-based continuum theory for carbon nanotubes: analysis of fracture nucleation", *J. Mech Phys. Solids*, vol, 52, pp. 977- 998, 2004. [۱۶]
- J. Song., H. Jiang., D.L. Shi., X.Q. Feng., Y. Huang., M.F. Yu., K.C. Hwang., "Stone- Wales transformation: precursor of fracture in carbon nanotubes", *Int. J. Mech. Sci*, vol, 48, pp. 1464- 1470, 2006. [۱۷]
- H.W. Zhang., K. Cai., L. Wang., "Deformation of single- walled carbon nanotubes under large axial strains", *Mater. Lett*, vol, 62, pp. 3940- 3943, 2008. [۱۸]
- X. Wang., X. Guo., "Numerical simulation for finite deformation of single-walled carbon nanotubes at finite temperature using temperature-related higher order Cauchy-Born rule based quasi-continuum model", *Compt. Mater. Sci*, vol, 55, pp. 273- 283, 2012. [۱۹]

۸- زیرنویس ها

^۱ Armchair^۲ Zigzag^۳ Chairal vector^۴ Smooth cutoff function^۵ Multi-body coupling^۶ Covariant base vectors^۷ First fundamental form^۸ Second fundamental form^۹ Contravariant base vector^{۱۰} Second Piola-Kirchhoff stress tensor^{۱۱} Coupled tension/bending