

## بررسی اثر مقیاس کوچک بر ارتعاشات نانولوله‌های کربنی تک جداره در حضور نانوذره متحرک

داود سلامت

دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی مکانیک، واحد اهواز، دانشگاه آزاد اسلامی، اهواز، ایران

حمید محمدصدیقی\*

استادیار، گروه مهندسی مکانیک، واحد اهواز، دانشگاه آزاد اسلامی، اهواز، ایران

### چکیده

در این مقاله به بررسی ارتعاشات آزاد نانولوله کربنی تک‌جداره و نیز پاسخ دینامیکی آن به ذره متحرک پرداخته شده است. از مدل پوسته استوانه‌ای غیرمحلّی با در نظر گرفتن فرضیه تغییر شکل مرتبه اول برشی برای مدل‌سازی نانولوله کربنی روی تکیه‌گاه ساده استفاده شده است. پس از حل معادلات، نتایج با نتایج حاصل از شبیه‌سازی نانولوله در نرم‌افزار اجزای محدود مقایسه شده و تطابق بسیار بالایی میان نتایج وجود دارد. در مرحله بعد پاسخ دینامیکی نانولوله به ذره متحرک بررسی می‌شود. برای ذره متحرک از مولکول  $C_{60}$  استفاده شده که با سرعت ثابت از میان نانولوله عبور می‌کند. فرض شده است نانولوله در بستر الاستیک قرار دارد. اثر مقیاس کوچک نیز به نیروی واندروالس میان ذره و نانولوله و همچنین سختی محیط اعمال شده است. از تابع دینامیکی گرین برای بررسی دینامیکی عبور ذره از میان نانولوله استفاده می‌شود. نتایج حاصل از این بخش بوسیله پژوهش‌های پیشین صحت‌سنجی شده که نشان دهنده صحت روابط بدست‌آمده است. نتایج نشان داد اثر غیرمحلّی باعث کاهش فرکانس طبیعی و جابجایی دینامیکی نانولوله می‌گردد.

واژه‌های کلیدی: نانولوله کربنی، اثر مقیاس کوچک، نانوذره متحرک، پوسته استوانه‌ای، دینامیک و ارتعاشات

## The Effect of Small Scale on the Vibrational Behavior of Single-walled Carbon Nanotubes with a Moving Nanoparticle

D. Salamat

Department of Mechanical Engineering, Ahvaz Branch, Islamic Azad University, Ahvaz, Iran

H. Mohammad-Sedighi

Department of Mechanical Engineering, Ahvaz Branch, Islamic Azad University, Ahvaz, Iran

### Abstract

In this paper, free and forced vibration of single-walled carbon nanotube under moving nanoparticle are studied. To this end, Eringen's nonlocal theory is applied to cylindrical shell equations with first order shear deformation effects. The SWCNT is assumed to be simply-supported at its ends. For validation of the theoretical results, the nanotube is simulated in the Ansys software for modal analysis. Comparison between the results of two methods shows good agreements. This means that the theoretical formulations are correct. In addition, the dynamic response of the SWCNT under moving nanoparticle is also studied. The  $C_{60}$  molecule is used as the nanoparticle to travel along the center of nanotube with constant velocity and the Van der Waals force between CNT and  $C_{60}$  molecule is considered. The CNT assumed to be lied on an elastic medium. The nonlocal effects applied to the foundation's stiffness equations. The dynamic response of the SWCNT under the effect of  $C_{60}$  molecule are obtained using dynamic Green's function and modal expansion. The obtained results show that nonlocal scale effect decreases the natural frequency and dynamic displacement of the CNT.

**Keywords:** SWCNT, Nonlocal scale effects, Moving nanoparticle, Cylindrical shell, Dynamic and vibration.

اندازه‌ی کوچک نانولوله‌های کربنی و همچنین خصوصیات فیزیکی

و شیمیایی بی‌نظیر آنها باعث شده کاربردهای بسیاری در زمینه‌های مختلف پیدا کنند. استفاده از آنها در ترانزیستورها، حسگرها، نمایشگرها، کامپوزیت‌ها و بسیاری از موارد دیگر گواه اهمیت بسیار زیاد نانولوله‌ها در صنعت است [۵]. دارورسانی یکی از گسترده‌ترین کاربردهای بررسی شده نانولوله‌ها در زیست پزشکی است. در سال‌های اخیر، راهکارهای گوناگونی برای بارگذاری مولکول‌های کوچک، مانند داروهای ضد سرطان شیمی درمانی بر روی نانولوله‌ها به صورت اتصالات کووالانسی یا جذب غیرکووالانسی ارائه شده است. همچنین مدل‌های نظری برای هدایت طراحی حامل‌های دارویی مبتنی بر نانولوله‌های کربنی مورد استفاده قرار گرفته‌اند. مولکول‌های دارویی که به‌صورت کووالانسی متصل شده‌اند معمولاً با پیوندهای قابل شکستن به گروه‌های عاملی سطحی نانولوله‌ها یا پلیمرهای پوشش داده شده بر روی نانولوله‌ها متصل می‌شوند [۶]. نانولوله‌های

### ۱- مقدمه

پس از کشف نانولوله‌های کربنی توسط ایچیمایا [۱] این مواد کاربردهای بسیاری پیدا کردند. خواص ویژه و منحصر به فرد آن از جمله مدول یانگ بالا و استحکام کششی خوب [۲] از یک طرف و طبیعت کربنی بودن نانولوله‌ها (به خاطر این که کربن ماده‌ای است کم وزن، بسیار پایدار و ساده جهت انجام فرایندها که نسبت به فلزات برای تولید ارزان‌تر می‌باشد) باعث شده که در دهه گذشته تحقیقات مهمی در کارایی و پرباری روش‌های رشد نانولوله‌ها مشاهده شود [۳]. نانولوله‌ها به سه دسته تک جداره، دوجداره و چندجداره تقسیم می‌شوند. نانولوله‌های تک‌جداره نیز بر حسب آرایش اتم‌های کربنی مقطع لوله به سه دسته مهم دسته صندلی<sup>۱</sup> و کایرال<sup>۲</sup> که دارای خاصیت فلزی هستند و زیگزگ<sup>۳</sup> که خاصیت نیمه‌رسانایی دارد، تقسیم می‌شوند [۴].

<sup>1</sup> Armchair

<sup>2</sup> Chiral

<sup>3</sup> Zigzag

متصل به دئوکسی‌ریبونوکلئیک‌اسید<sup>۱</sup> نقش مهمی به عنوان یک بیوسنسور برای شناسایی نوکلئیک‌اسیدها اعمال می‌کنند. بطوری‌که اثر متقابل میان نوکلئیک‌اسیدها و نانولوله‌ها نه تنها سبب کاربرد گسترده آنها به عنوان یک بیوسنسور می‌شود، بلکه نقش مهمی در انتقال داروها و تشخیص‌های پزشکی نیز دارد [۷].

برای بررسی رفتار مکانیکی نانو لوله کربنی معمولاً از روش‌های مختلف مانند روش تجربی، شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی و مدل‌های محیط پیوسته الاستیک استفاده می‌شود. در روش تجربی با استفاده از روش‌های ساخت نانولوله در آزمایشگاه نانولوله ساخته شده و سپس با استفاده از ابزارهای دقیق اندازه‌گیری مثل میکروسکوپ نیروی اتمی<sup>۲</sup> و تصویر برداری مانند میکروسکوپ الکترونی روبشی<sup>۳</sup> و یا میکروسکوپ الکترونی عبوری<sup>۴</sup> بررسی می‌شوند. از این طریق توانسته‌اند مدول یانگ و استحکام و برخی خواص فیزیکی و شیمیایی نانولوله‌های کربنی را محاسبه نمایند. برای بررسی نانولوله‌های کربنی با روش دینامیک مولکولی بوسیله نرم‌افزار اجزای محدود، اتم‌های کربن تک تک به عنوان گره در نظر گرفته می‌شوند و پیوند میان اتم‌ها با استفاده از المان‌های مختلف شبیه‌سازی می‌شود. این روش با وجود اینکه جواب بسیار دقیقی می‌دهد اما بسیار پیچیده، وقت‌گیر و پرهزینه است، به همین دلیل کمتر مورد استفاده قرار می‌گیرد. مدل‌های الاستیک در محیط پیوسته زیادی از جمله مدل‌های تیر، پوسته استوانه ای و قاب - خرپای فضایی برای مطالعه خمش، کمانش و رفتارهای ارتعاشاتی نانولوله کربنی به کار برده شده‌اند.

تاکنون تلاش‌های قابل توجهی برای تعیین خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی صورت گرفته‌است، که شامل روش‌های تجربی، دینامیک مولکولی و همچنین محیط پیوسته می‌شود. ژانگ و همکاران [۸] در سال ۲۰۰۵ بوسیله اعمال تئوری پیوسته غیرمحلّی روی تیرها برای شبیه‌سازی رفتار نانولوله کربنی دوجداره، به این نتیجه رسیدند که اثر اندازه تاثیر قابل ملاحظه‌ای روی فرکانس طبیعی دارد. آنها فقط برای خمش از تئوری غیرمحلّی استفاده کردند و تنش را از روش کلاسیک محاسبه نمودند [۹]. وانگ و واردان نیز ارتعاشات نانولوله را با استفاده از تئوری غیرمحلّی و تیرهای اویلر-برنولی و تیموشنکو بررسی نمودند [۱۰]. وانگ و همکاران [۱۱] با بررسی تیر غیرمحلّی تیموشنکو معادلات حاکم را بدست آورده و آن را برای شرایط مرزی مختلف با استفاده از قانون همیلتون حل نمودند. نتایج نشان داد که نسب فرکانس با افزایش ضریب اندازه، کاهش می‌یابد. که این موضوع برای مودهای بالاتر قابل توجه‌تر است. همچنین برای نانولوله‌های کوتاه با نسبت طول به قطر کمتر، ضریب اندازه نقش پررنگ‌تری در تعیین فرکانس طبیعی دارد. انصاری و سهمانی [۱۲] به بررسی تیرهای غیرمحلّی اویلر-برنولی، تیموشنکو و ردی پرداختند و با بدست آوردن معادلات حاکم، آنها را برای شرایط مرزی مختلف حل کردند. سپس نتایج حاصل از این سه تئوری را با یکدیگر مقایسه نمودند.

تاکنون بررسی‌های کمی بر روی دینامیک نانولوله‌های کربنی و اندرکنش آن با ذرات اطراف انجام شده است. در یکی از این بررسی‌ها، لی و چانگ [۱۳] به تحلیل دینامیکی عبور ذره از درون نانولوله (۱۰،۱۰) پرداختند. آنها از تیر غیرمحلّی اویلر-برنولی برای شبیه سازی نانولوله استفاده کرده و به عنوان ذره، مولکول C<sub>60</sub> را در نظر گرفتند. نانولوله را در بستری الاستیک قراردادده و نیروی واندروالس میان نانولوله و ذره را با نیروی فنر شبیه سازی کردند.

در این مقاله، برخلاف پژوهش‌های پیشین که از مدل تیر برای شبیه‌سازی رفتار دینامیکی نانولوله کربنی استفاده شده، از مدل پوسته استوانه‌ای استفاده می‌شود. اثرات فرضیه تغییر شکل مرتبه اول برشی و همچنین اثر مقیاس کوچک به پوسته اعمال می‌شود. اثر مقیاس کوچک علاوه بر روابط پوسته به روابط نیرو و همچنین سختی محیط اعمال می‌شود. در نهایت پاسخ دینامیکی نانولوله به ذره متحرک بررسی می‌گردد.

## ۲- معادلات حاکم

پیش از بدست آوردن معادلات حاکم بر مسئله، فرضیه غیر محلّی الاستیسیته بررسی می‌گردد.

### ۲-۱- فرضیه غیرمحلّی الاستیسیته

تئوری غیر محلّی الاستیسیته اولین بار توسط ارینگن معرفی شد [۱۴]. با استفاده از تئوری غیر محلّی در تحلیل نانو تیرها (نانولوله‌ها)، توانایی درک رفتار مکانیکی مواد در مقیاس‌های کوچک بیشتر می‌شود. تفاوت اصلی بین تئوری کلاسیک و تئوری غیر محلّی الاستیسیته در تعریف تنش است. بیشتر تئوری‌های کلاسیک مکانیک محیط‌های پیوسته، بر اساس روابط ساختاری هاپیرالاستیک استوار هستند، که فرض می‌کند تنش هر نقطه، به صورت تابعی از کرنش‌های همان نقطه است. تئوری غیر محلّی بیانگر این است که تنش هر نقطه نه تنها تابعی از میدان کرنش آن نقطه است، بلکه تابع کرنش همه نقاط محیط پیوسته است. ارینگن فرض کرد که تنش هر نقطه مورد بررسی (مرجع)، به صورت تابعی از میدان کرنش همه نقاط محیط پیوسته است. رابطه ساختاری ساده شده و به فرم دیفرانسیلی توسط ارینگن به صورت رابطه زیر بیان می‌شود:

$$(1 - (e_0 a)^2 \nabla^2) \sigma = \epsilon E \quad (1)$$

که در آن  $e_0 a$  ضریب اثر غیر محلّی،  $\nabla^2$  عملگر لاپلاسین،  $\sigma$  تنش در هر نقطه،  $\epsilon$  تانسور کرنش و همچنین  $E$  مدول یانگ است.

### ۲-۲- معادلات پوسته استوانه‌ای غیرمحلّی

با توجه به دستگاه مختصات اعمال شده به پوسته استوانه ای، جابجایی در راستای  $x$ ،  $\theta$  و  $z$  با توجه به فرضیه تغییر شکل مرتبه اول برشی به صورت زیر خواهد بود [۱۵]:

<sup>1</sup> DNA

<sup>2</sup> AFM

<sup>3</sup> SEM

<sup>4</sup> TEM

$$\begin{bmatrix} N_{xx} \\ N_{\theta\theta} \\ N_{x\theta} \\ Q_{xx} \\ Q_{\theta\theta} \end{bmatrix} = \int_{-\frac{h}{2}}^{+\frac{h}{2}} \begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{\theta\theta} \\ \sigma_{x\theta} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{\theta z} \end{bmatrix} dz, \quad \begin{bmatrix} M_{xx} \\ M_{\theta\theta} \\ M_{x\theta} \end{bmatrix} = \int_{-\frac{h}{2}}^{+\frac{h}{2}} \begin{bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{\theta\theta} \\ \sigma_{x\theta} \end{bmatrix} z dz \quad (5)$$

$$A = \frac{Eh}{1-\nu^2}$$

در این روابط  $h$  ضخامت پوسته استوانه‌ای،  $R$  شعاع پوسته و  $D$  سختی خمشی پوسته است.

بنابراین با توجه به روابطی که ارائه شد، و با اعمال تئوری غیر محلی اربینگن، روابط تعادل برای پوسته استوانه‌ای غیر محلی به صورت زیر خواهند بود؛

$$\begin{aligned} (1-(e_0a)^2 \nabla^2) \left( -R \frac{\partial N_{xx}}{\partial x} - \frac{\partial N_{\theta\theta}}{\partial \theta} + R \rho h \ddot{u} \right) &= (1-(e_0a)^2 \nabla^2) R q_x \\ (1-(e_0a)^2 \nabla^2) \left( -R \frac{\partial N_{x\theta}}{\partial x} - \frac{\partial N_{\theta\theta}}{\partial \theta} - k' Q_{\theta\theta} + R \rho h \ddot{v} \right) &= (1-(e_0a)^2 \nabla^2) R q_\theta \\ (1-(e_0a)^2 \nabla^2) \left( -R k \frac{\partial Q_{xx}}{\partial x} - k' Gh \frac{\partial Q_{\theta\theta}}{\partial \theta} + N_{\theta\theta} + R \rho h \ddot{w} \right) &= (1-(e_0a)^2 \nabla^2) R q_z \\ (1-(e_0a)^2 \nabla^2) \left( R \frac{\partial M_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial M_{\theta\theta}}{\partial \theta} - k' Q_{xx} - \frac{R \rho h^3}{12} \ddot{\psi}_x \right) &= 0 \\ (1-(e_0a)^2 \nabla^2) \left( R \frac{\partial M_{x\theta}}{\partial x} + \frac{\partial M_{\theta\theta}}{\partial \theta} - k' Q_{\theta\theta} - \frac{R \rho h^3}{12} \ddot{\psi}_\theta \right) &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

درجایی که  $q_i$  نیروی خارجی اعمال شده در راستای محور  $i$  است. در روابط بالا  $K'$  ضریب اصلاح گر برشی است و بنابر مرجع سودل [۱۵] برابر  $5/6$  است و همچنین  $\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{R^2 \partial \theta^2}$  خواهد بود.

### ۲-۳- ارتعاشات آزاد نانولوله کربنی

پس از بدست آوردن معادلات تعادل برای پوسته استوانه‌ای، ارتعاشات آزاد نانولوله با اعمال شرایط مرزی بررسی می‌گردد. سودل [۱۵] جواب زیر را برای جابجایی در راستاهای مختلف، برای پوسته استوانه‌ای روی تکیه‌گاه ساده و بر اساس بسط سری فوریه فرض نمود؛

$$\begin{aligned} u(x, \theta, t) &= U \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \cos(n\theta) e^{i\omega t} \\ v(x, \theta, t) &= V \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin(n\theta) e^{i\omega t} \\ w(x, \theta, t) &= W \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \cos(n\theta) e^{i\omega t} \\ \psi_x(x, \theta, t) &= \Psi_x \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \cos(n\theta) e^{i\omega t} \\ \psi_\theta(x, \theta, t) &= \Psi_\theta \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin(n\theta) e^{i\omega t} \end{aligned} \quad (7)$$

که در آن  $n$  و  $m$  عددهای موج محوری و محیطی هستند و  $L$  طول پوسته است. شرایط مرزی برای تکیه‌گاه ساده به صورت زیر است؛

$$\begin{aligned} v(0, \theta, t) = w(0, \theta, t) = M_{xx}(0, \theta, t) = N_{xx}(0, \theta, t) = \psi_\theta(0, \theta, t) \\ v(L, \theta, t) = w(L, \theta, t) = M_{xx}(L, \theta, t) = N_{xx}(L, \theta, t) = \psi_\theta(L, \theta, t) \end{aligned} \quad (8)$$

در نهایت با جایگذاری روابط (۷) در معادلات (۶) و حل مسئله مقدار ویژه حاصل، فرکانس طبیعی بدست می‌آید. ذکر این نکته ضروری است که در مدل پوسته استوانه‌ای به ازای هر  $n$  و  $m$  ۵ فرکانس ارتعاشی بدست می‌آید.

$$\begin{aligned} u_x(x, \theta, z, t) &= u(x, \theta, t) + z \psi_x(x, \theta, t) \\ u_\theta(x, \theta, z, t) &= v(x, \theta, t) + z \psi_\theta(x, \theta, t) \\ u_z(x, \theta, z, t) &= w(x, \theta, t) \end{aligned} \quad (2)$$

در این روابط  $u$ ،  $v$  و  $w$  به ترتیب جابجایی سطح مرجع در راستای  $x$ ،  $\theta$  و  $z$  هستند. همچنین  $\psi_x$  و  $\psi_\theta$  پیچش صفحه میانی حول محورهای  $x$  و  $\theta$  می‌باشند.

کرش‌های عمودی و برشی صفحه میانی و همچنین خمش‌های حول محورهای مختلف ( $k_{ii}$ ) به صورت زیر محاسبه می‌شود [۱۵]:

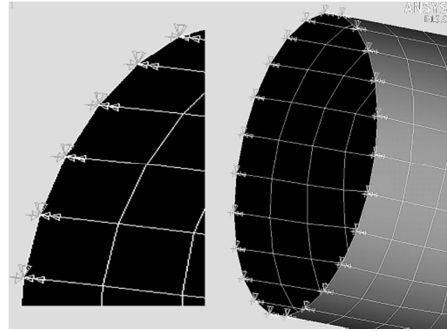
$$\begin{bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{\theta\theta} \\ \varepsilon_{x\theta} \\ k_x \\ k_\theta \\ k_{x\theta} \\ \gamma_{xz} \\ \gamma_{\theta z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{1}{R} & 0 & 0 \\ \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial x} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{\partial}{\partial x} \\ 0 & 0 & \frac{\partial}{\partial x} & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{R} & \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \\ \psi_x \\ \psi_\theta \end{bmatrix} \quad (3)$$

که در آن  $R$  شعاع نانولوله است. نیروهای عمودی، برشی و خمشی نیز بر اساس تنش‌ها و با اعمال تئوری غیر محلی به صورت زیر محاسبه می‌گردند [۱۵]:

$$\begin{bmatrix} N_{xx} \\ N_{\theta\theta} \\ N_{x\theta} \\ M_{xx} \\ M_{\theta\theta} \\ M_{x\theta} \\ Q_{xx} \\ Q_{\theta\theta} \end{bmatrix} - (e_0a)^2 \nabla^2 \begin{bmatrix} N_{xx} \\ N_{\theta\theta} \\ N_{x\theta} \\ M_{xx} \\ M_{\theta\theta} \\ M_{x\theta} \\ Q_{xx} \\ Q_{\theta\theta} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A \frac{\partial}{\partial x} & Av \frac{\partial}{R \partial \theta} & Av \frac{1}{R} & 0 & 0 \\ Av \frac{\partial}{\partial x} & A \frac{\partial}{R \partial \theta} & A \frac{1}{R} & 0 & 0 \\ Gh \frac{\partial}{R \partial \theta} & Gh \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & D \frac{\partial}{\partial x} & D \frac{v}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ 0 & 0 & 0 & Dv \frac{\partial}{\partial x} & D \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{D(1-\nu)}{2} \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} & \frac{D(1-\nu)}{2} \frac{\partial}{\partial x} \\ 0 & 0 & Gh \frac{\partial}{\partial x} & Gh & 0 \\ 0 & -\frac{Gh}{R} & \frac{Gh}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} & 0 & Gh \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \\ \psi_x \\ \psi_\theta \end{bmatrix} \quad (4)$$

در جایی که:

به منظور صحت سنجی روابط بدست آمده، نانولوله در محیط نرم‌افزای اجزای محدود انسیس شبیه سازی شده و نتایج بدست آمده بوسیله دو روش مقایسه می‌شوند. برای شبیه سازی نانولوله کربنی در محیط نرم‌افزار انسیس از المان shell1181 استفاده می‌شود. نحوه اعمال شرایط مرزی به پوسته در نرم‌افزار انسیس در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱- شبیه سازی نانولوله کربنی تک‌جداره در نرم‌افزار انسیس و شرایط مرزی تکیه‌گاه ساده اعمال شده

بوسیله تابع دینامیکی گرین و بسط مودال و اعمال آنها به روابط تعادل پوسته استوانه‌ای، می‌توان جابجایی دینامیکی نانولوله در حضور ذره متحرک را محاسبه نمود. بدین منظور برای شرایط اولیه صفر، خواهیم داشت [۱۵]:

$$w(x, \theta, t) = \left[ \frac{F}{\rho h \omega N_k} W \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \cos(n\theta) \right] \times I_k \quad (10)$$

در رابطه بالا  $\rho$  چگالی نانولوله،  $h$  ضخامت جداره نانولوله و  $\omega$  فرکانس طبیعی است.  $F$  و  $N_k$  نیز برابرند با:

$$F = (1 - (e_0 a)^2 \nabla^2)(mg - K_{vdw} w) = \left\{ mg - [1 + (e_0 a)^2 \left( \left( \frac{n\pi x}{L} \right)^2 + \left( \frac{m}{R} \right)^2 \right)] K_{vdw} w \right\} \quad (11)$$

$$N_k = \frac{RL\pi}{2} (U^2 + V^2 + W^2 + \Psi_x^2 + \Psi_\theta^2)$$

که در رابطه نیرو، اثر مقیاس کوچک اعمال شده است.  $I_k$  نیز برای زمانی که ذره از پوسته عبور می‌کند، برای حالت بدون میرایی، از انتگرال زیر محاسبه می‌شود:

$$I_k = \int_0^t \sin \omega(t - t^*) \sin \frac{m\pi v}{L} t^* dt^* \quad (12)$$

که در آن  $t^*$  زمانی است که ذره در مکان  $x^*$  است. به منظور مقایسه بهتر، از پارامتر بی بعد سرعت  $a$ ، که برابر است با سرعت نانوذره نسبت به سرعت بحرانی، استفاده می‌شود. سرعت بحرانی در پوسته استوانه‌ای برای نیروی عبوری از محور طولی آن، حداکثر سرعتی است که در آن نیروی متحرک پوسته را در فرکانس تشدید طبیعی‌اش برانگیخته خواهد کرد. برابر است با:

$$v_{cr} = \frac{L\omega}{n\pi} \quad (13)$$

### ۳- نتایج

در این مقاله برای بررسی اثر دینامیکی عبور نانوذره بر نانولوله، از نانولوله (۱۰، ۱۰)، با شعاع ۰٫۶۸ نانومتر، طول ۴۰ نانومتر، ضخامت ۰٫۳۵ نانومتر و مدول یانگ ۱ تراپاسکال استفاده شده است [۱۷]. برای ذره متحرک نیز از مولکول  $C_{60}$  با جرم  $1.196 \times 10^{-24}$  کیلوگرم استفاده شده است. اثر واندوالس میان نانولوله و مولکول  $C_{60}$  برابر  $3.24 \text{ eV}$  در نظر گرفته می‌شود [۱۷].

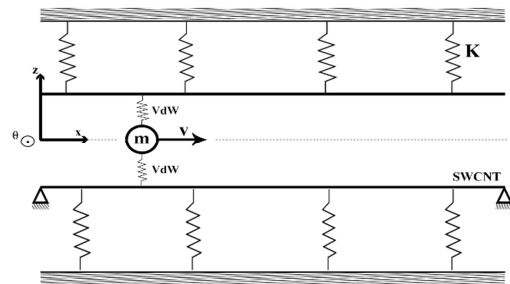
جدول ۱ نتایج حاصل از حل نظری و همچنین نتایج آنالیز مودال نرم‌افزار انسیس را نشان می‌دهد. به دلیل اینکه تحلیل‌های انسیس به صورت کلاسیکی انجام می‌شوند، به منظور مقایسه کامل‌تر، اثر مقیاس کوچک در روابط صفر قرار داده شده و به صورت کلاسیکی بررسی شده‌اند.

جدول ۱- مقایسه فرکانس طبیعی حاصل از مطالعه حاضر با نتایج نرم‌افزار انسیس (تراهرتز)

| طول نانولوله (نانومتر) | ۵       | ۱۰     | ۱۵      | ۲۰      |
|------------------------|---------|--------|---------|---------|
| حل نظری (THz)          | ۰٫۵۱۶۰۴ | ۰٫۱۴۸۴ | ۰٫۰۶۸۱۰ | ۰٫۰۳۸۷۶ |
| حل انسیس (THz)         | ۰٫۵۲۰۸۵ | ۰٫۱۴۸۸ | ۰٫۰۶۸۲۲ | ۰٫۰۳۸۸۰ |
| خطا (درصد)             | ۰٫۰۱    | ۰٫۳    | ۰٫۱۷    | ۰٫۱۲    |

### ۲-۴- تحلیل دینامیکی نانولوله کربنی در حضور ذره متحرک

هنگامی که مولکول  $C_{60}$  از درون نانولوله کربنی عبور می‌کند، با اتم‌های کربن نانولوله برهم‌کنش خواهد داشت. این برهم‌کنش باعث به‌وجود آمدن حرکت نوسانی برای مولکول می‌شود [۱۶]. نیرویی که بین این دو جسم به‌وجود می‌آید، نیروی واندروالس است. فرض می‌شود مولکول  $C_{60}$  با سرعت ثابت و از مرکز نانولوله عبور می‌کند. به طوری که فاصله مولکول تا جداره نانولوله برابر با شعاع نانولوله است. شکل ۲ شرایط مسئله را به صورت شماتیک نشان می‌دهد.



شکل ۲- نمای شماتیک مسئله مورد بررسی؛ شرایط مرزی و نحوه اعمال نیروهای خارجی

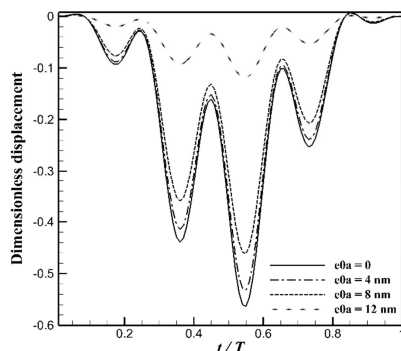
نیروی واندروالس میان دو جسم به صورت نیروی فنر در راستای عرضی شبیه‌سازی و اعمال می‌شود، بنابراین:

$$q_x = q_\theta = 0, \quad q_z = (mg - K_{vdw} w) \delta(x - vt) - Kw \quad (9)$$

در این رابطه ثابت واندروالس،  $mg$  نیروی ناشی از وزن ذره متحرک،  $K$  سختی بستر الاستیک،  $v$  سرعت نانوذره،  $\delta$  تابع دلتای دیراک و  $w$  جابجایی در راستای عمودی است.

تک‌جداره، این اثر را بر پاسخ دینامیکی نانولوله به ذره متحرک بررسی می‌کنیم. در نمودارهای زیر، جابجایی حاصل از پاسخ دینامیکی نانولوله بر جابجایی استاتیکی تقسیم شده‌است و کمیت جابجایی بدون بعد خواهد بود. جابجایی استاتیکی، جابجایی نانولوله است زمانی که نیروی برابر با نیروی وزن نانوذره به وسط نانولوله اعمال شود. همچنین کمیت بدون بعد  $\alpha$  که نسبت سرعت ذره بر سرعت بحرانی است، برای تعیین سرعت ذره در نظر گرفته شده است.

شکل ۳ جابجایی را برحسب زمان برای نانولوله (۱۰،۱۰) و طول ۴۰ نانومتر، در اثر حرکت ذره نشان می‌دهد. در این شکل جابجایی به ازای ضرایب اثر مقیاس کوچک متفاوت، رسم شده است. سختی بستر الاستیک ۰/۱ سختی واندروالس و  $\alpha$  نیز ۰/۱ در نظر گرفته شده است.

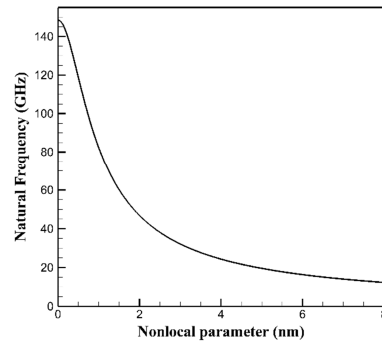


شکل ۳- جابجایی بدون بعد نانولوله تحت تاثیر نانوذره متحرک برای ضرایب اثر مقیاس کوچک متفاوت

همانگونه که در نمودار شکل ۳ مشخص است، با افزایش اثر مقیاس کوچک، میزان جابجایی عرضی کاهش می‌یابد. این کاهش جابجایی در ضرایب اثر کوچک قابل چشم پوشی است اما در مقادیر بزرگتر اثر اندازه، تاثیر قابل توجهی بر پاسخ دینامیکی نانولوله خواهد داشت. باید توجه داشت که افزایش ضریب اثر مقیاس کوچک باعث افزایش سختی نانولوله شده و به همین دلیل فرکانس طبیعی نانولوله و همچنین جابجایی دینامیکی آن نیز کاهش می‌یابد. جابجایی نانولوله برحسب زمان بی بعد عبور ذره از نانولوله رسم گردیده است. نکته قابل بیان دیگر در این نمودار این است که، در پاسخ دینامیکی نانولوله، بیشینه جابجایی در میان طول آن قرار ندارد. مکان بیشینه جابجایی به میزان سرعت ذره بستگی خواهد داشت. نمودار شکل ۳ برای ضرایب اثر ۰، ۴، ۸ و ۱۲ نانومتر رسم شده است. نتایج حاصل از این بخش با نتایج بررسی لی و چانگ [۱۳] که این شبیه‌سازی را با مدل تیر غیرمحللی اویلر-برنولی انجام داده‌اند، همخوانی بسیار بالایی دارد.

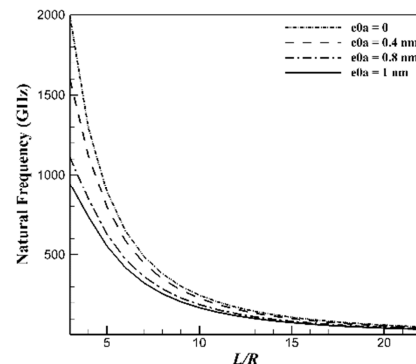
شکل ۴ میزان جابجایی دینامیکی نانولوله را برای مقادیر مختلف سرعت نشان می‌دهد. مطابق نمودار با افزایش سرعت ذره تا نصف سرعت بحرانی، جابجایی نانولوله افزایش می‌یابد. افزایش بیشتر سرعت باعث کاهش جابجایی شده و در سرعت بحرانی به صفر می‌رسد. زیرا همانگونه که در تعریف سرعت بحرانی بیان شد، در این سرعت ذره دیگر نانولوله را تحت تاثیر قرار نمی‌دهد. همانگونه که قبلاً بیان شد، محل قرار گرفتن بیشینه جابجایی با توجه به سرعت ذره تغییر می‌کند. شکل ۴ برای  $\alpha$ های ۰/۵، ۰/۱ و ۰/۰۵ رسم شده است.

نتایج جدول ۱ نشان می‌دهد که با افزایش طول نانولوله فرکانس طبیعی کاهش می‌یابد. به منظور مشاهده کامل‌تر رفتار فرکانسی نانولوله با افزایش طول آن، نمودار شکل ۳ نشان دهنده اثر مقیاس کوچک بر فرکانس طبیعی نانولوله است. هنگامی که مقدار ضریب غیرمحللی (مقیاس کوچک) برابر صفر است، مسئله به صورت کلاسیکی بررسی شده و فرکانس طبیعی بیشترین مقدار را خواهد داشت. با افزایش مقدار مقیاس کوچک تا ۲ نانومتر، فرکانس طبیعی با شیب بالایی کاهش می‌یابد. با افزایش بیشتر مقدار غیرمحللی به تدریج شیب کاهش فرکانسی کمتر خواهد شد.



شکل ۱- فرکانس طبیعی نانولوله برحسب اثر غیرمحللی (مقیاس کوچک)

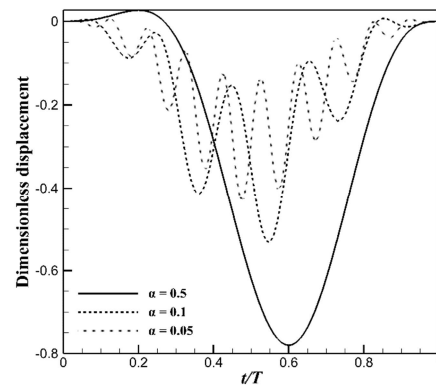
برای درک بهتر اثر مقیاس کوچک بر ارتعاشات نانولوله کربنی، شکل ۲ فرکانس طبیعی را برای نانولوله (۱۰،۱۰) برای ضرایب اثر متفاوت نشان می‌دهد. مطابق نمودار، در طول‌های پایین‌تر اثر مقیاس کوچک تاثیر قابل توجهی بر فرکانس طبیعی نانولوله دارد. با افزایش طول نانولوله اثر مقیاس کوچک کم می‌شود. هنگامی که طول نانولوله بیشتر از ۲۰ برابر شعاع آن می‌شود، نتایج کلاسیکی و نتایج حاصل از اعمال تئوری غیرمحللی به هم نزدیک می‌شوند. هنگامی که طول نانولوله برابر ۴۰ نانومتر است، فرکانس کلاسیکی ۷ گیگاهرتز بوده و با اعمال اثر غیرمحللی ۴ نانومتر، فرکانس طبیعی برابر ۱/۷ گیگاهرتز می‌شود. در صورتی که در طول‌های پایین این اختلاف تا ۹۰۰ گیگاهرتز افزایش می‌یابد.



شکل ۲- فرکانس طبیعی نانولوله کربنی تک‌جداره برحسب نسبت طول به شعاع آن برای ضرایب اثر متفاوت

پس از بررسی اثر مقیاس کوچک بر ارتعاشات آزاد نانولوله کربنی

- [4] Meyyappan M., Carbon Nanotubes Science & Applications: CRC Press, 2005.
- [5] Popov V. N., Carbon nanotubes: properties and application, Materials Science and Engineering R, Vol. 43, pp. 61–102, 2004.
- [6] Rao C. N. R., Cheetham A. K., Science and technology of nanomaterials: current status and future prospects, Journal of Materials Chemistry, Vol. 11, pp. 2887–2894, 2001.
- [7] Sawano T. A. S., Akita S., Carbon nanotube resonator in liquid, Nano Letters, Vol. 10, pp. 3395–3398, 2010.
- [8] Zhang L. G. R. Y. Q., Xie X. Y., Free transverse vibrations of double-walled carbon nanotubes using a theory of nonlocal elasticity, Phys Rev B, Vol. 71, pp. 195404, 2005.
- [9] WANG YiZe L. F., Dynamical properties of nanotubes with nonlocal continuum theory: A review, Sci China-Phys Mech Astron, Vol. 55, pp. 1210–1224, 2012.
- [10] Wang V. V. K. Q., Vibration of carbon nanotubes studied using nonlocal continuum mechanics, Smart Mater Struct, Vol. 15, pp. 659–666, 2006.
- [11] Wang Z. Y. Y. C. M., He X. Q., Vibration of nonlocal Timoshenko beams, Nanotechnology, Vol. 18, pp. 105401, 2007.
- [12] Sahmani A. S., Ansari R., Small scale effect on vibrational response of single-walled carbon nanotubes with different boundary conditions based on nonlocal beam models, Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation, 2012.
- [13] Lee H. L., Chang W. J., Dynamic modelling of a single-walled carbon nanotube for nanoparticle delivery, Proc. R. Soc. A, Vol. 476, pp. 860–868, 2010.
- [14] Eringen A. C., On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves, J. Appl. Phys., Vol. 54, pp. 4703, 1983.
- [15] Soedel W., vibration of shells and plates, pp. 333-336, New York, USA: Marcel Dekker Inc., 2004.
- [16] Liu P., Zhang Y. W., Lu C., "Oscillatory behavior of C60-nanotube oscillators: A molecular-dynamics study", Journal of Applied Physics, Vol. 97, No. 9, pp. 094313, 2005.
- Cox B. J., N. T., Hill J. M., Mechanics of atoms and fullerenes in single-walled carbon nanotubes. I. Acceptance and suction energies, Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, Vol. 463, No. 2078, pp. 461-477, 2007.



شکل ۴- جابجایی بدون بعد نانولوله تحت تاثیر نانوذره متحرک برای نسبت سرعت‌های متفاوت

#### ۴- بحث و نتیجه گیری

در مقاله حاضر تاثیر اثر مقیاس کوچک بر رفتار ارتعاشی و دینامیکی نانولوله کربنی تک‌جداره بررسی گردید. از مدل پوسته استوانه‌ای سودل با اعمال اثر فرضیه تغییر شکل مرتبه اول برشی برای شبیه‌سازی نانولوله استفاده شد. اثر مقیاس کوچک بر روابط پوسته اعمال گردید و به منظور حل روابط کد مربوطه در برنامه متلب نوشته شد. همچنین نانولوله در محیط نرم‌افزار انسیس شبیه‌سازی شده و با انجام آنالیز مودال فرکانس طبیعی محاسبه شد. نتایج حاصل از دو روش برای نانولوله به طول‌های مختلف ارائه و مقایسه شده است؛ که نشان دهنده صحت روابط استخراج شده دارد. نتایج نشان می‌دهد افزایش ضریب اثر مقیاس کوچک باعث کاهش فرکانس طبیعی نانولوله می‌شود. همچنین افزایش طول نانولوله نیز موجب کاهش فرکانس طبیعی آن خواهد شد.

در قسمت دوم پاسخ دینامیکی نانولوله کربنی تک‌جداره به ذره متحرک مطالعه گردید. از مولکول C<sub>60</sub> به عنوان ذره متحرک استفاده شد و اندرکنش و اندروالس میان ذره و نانولوله توسط نیروی فنر شبیه‌سازی گردید. نانولوله در بستری الاستیک با سختی ثابت فرض شده است. ذره با سرعت ثابت از میان نانولوله عبور می‌کند. جابجایی دینامیکی نانولوله به مولکول C<sub>60</sub> ارائه شد و نتایج حاصل از این بخش با نتایج بررسی لی و چانگ مقایسه گردید. این مقایسه نشان دهنده تطابق بسیار بالایی میان نتایج دارد که صحت روابط استخراج شده را اثبات می‌کند. نتایج نشان می‌دهد که افزایش ضریب مقیاس کوچک جابجایی دینامیکی نانولوله را کاهش می‌دهد. همچنین افزایش سختی بستر الاستیک و کاهش سرعت نانوذره، موجب کاهش جابجایی دینامیکی نانولوله کربنی تک‌جداره خواهد شد.

#### ۵- مراجع

- [1] Iijima S., Helical microtubules of graphitic carbon, Nature Vol. 354, pp. 56 - 58, 1991.
- [2] Yakobson B. I., Avouris P., Mechanical Properties of Carbon Nanotube", Topics in Applied Physics Vol. 80, pp. 287-327 2001.
- [3] Salvétat J. P., Bonard J. M., Thomson N.H., Kulik A.J., Forró L., Benoit W., Zuppiroli L., Mechanical properties of carbon nanotubes, Applied Physics A, Vol. 69, No. 3, pp. 255-260, 1999.