

## پیش بینی خواص مکانیکی و رفتار کمانشی اتصالات نانولوله‌های کربنی تک‌جداره/نانوصفحات گرافنی با استفاده از روش المان محدود

دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی مکانیک، موسسه آموزش عالی احرار، رشت، ایران  
 دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت، ایران  
 استاد، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت، ایران  
 استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی، لنگرود، ایران

حواً قربانی کهن فلاح  
 رضا انصاری خلخالی\*  
 ابوالفضل درویزه  
 سعید روحی گرکردی

### چکیده

در این مقاله مدل المان محدود اتمی برای مطالعه رفتار کمانشی و خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره متصل به نانوصفحات گرافنی با شرایط تکیه‌گاهی مختلف به‌کار گرفته شده است. با در نظر گرفتن نانولوله‌ها به صورت سازه قاب فضایی، روش‌های مکانیک سازه‌های کلاسیک می‌تواند برای مطالعه رفتارهای مکانیکی آن‌ها مورد استفاده قرار گیرد. برای مدل کردن پیوندها و اتم‌ها به ترتیب از المان‌های تیر و جرم استفاده می‌شود. به منظور تعیین خواص این المان‌های تیر از برابری مکانیک مولکولی و مکانیک سازه‌ای استفاده می‌شود. تحلیل حاضر اطلاعات سودمندی را در مورد قابلیت استفاده از مدل المان محدود در پیش‌بینی مدول الاستیسیته و نیروی کمانشی بحرانی اتصالات نانولوله‌های کربنی ارائه می‌کند. نتایج نشان می‌دهد که در نسبت منظری مشخص (نسبت طول به شعاع نانولوله)، با افزایش طول نانولوله، نیروی کمانش بحرانی کاهش می‌یابد. در حالی که مدول الاستیسیته ثابت است. به علاوه، با افزایش نسبت منظری، نیروی کمانش بحرانی کاهش و مدول الاستیسیته افزایش کمی می‌یابد. مقدار نیروی کمانش بحرانی برای نانولوله تحت شرط مرزی گیردار-گیردار بیشتر از سایر شرایط مرزی است. در نهایت، ده شکل مود اول نانولوله‌های صندلی و زیگزاگ در حالت یک‌طرفه و دوطرفه ترسیم شده و نشان داده می‌شود که شکل مدهای نانولوله‌های صندلی و زیگزاگ تقریباً مشابه هستند.

واژه‌های کلیدی: مدل‌سازی المان محدود، اتصالات نانولوله‌های کربنی تک‌جداره، نیروی کمانش بحرانی، مدول الاستیسیته.

## Predicting mechanical properties and compressive behavior of single-walled carbon nanotubes/graphene nanosheets connections using the finite element method

H. Ghorbani Kohan Fallah  
 R Ansari Khalkhali  
 A. Darvize  
 S. Rouhi Grakaroudi

Department of Mechanical Engineering, Ahrar Institute of Technology & Higher Education, Rasht, Iran.  
 Department of Mechanical Engineering, University of Guilan, Rasht, Iran  
 Department of Mechanical Engineering, University of Guilan, Rasht, Iran  
 Department of Mechanical Engineering, Langarud Branch, Islamic Azad University, Langarud, Iran

### Abstract

In this paper, the atomistic finite element model is used to study the compressive behavior and mechanical properties of single-walled carbon nanotubes-graphene nanosheets junctions with different boundary conditions. Considering nanotubes as space frame structure, classical structural mechanics approaches can be used to study their mechanical behaviors. The beam and mass elements are used to model the bonds and atoms, respectively. In order to determine the properties of the beam elements, the energy terms in molecular mechanics are equated to those in the structural mechanics. The present analysis provides useful data about the applicability of finite element model to predict the elastic modulus and critical compressive forces of carbon nanotube-graphene junctions. The results show that in a constant aspect ratio (the ratio of the length to the radius of nanotubes), increasing length of the nanotube leads to decreasing the critical compressive force. While the elastic modulus is constant. Moreover, increasing aspect ratio results in decreasing the critical compressive force negligible increasing in elastic modulus. The amount of critical compressive force of the nanotubes under clamped-clamped boundary condition is more than the other boundary conditions. Finally, the first ten mode shapes of the armchair and zigzag nanotubes are drawn for one-side and two-sided junctions, and it is shown that the mode shapes of the armchair and zigzag nanotubes are almost similar.

**Keywords:** Finite element modeling, Single-walled carbon nanotubes connections, Critical compressive force, Modulus of elasticity.

الاستیسیته<sup>۲</sup> بالا و استحکام کششی خوب از یک طرف و طبیعت کربنی بودن آن‌ها از طرف دیگر باعث شد که شاهد رشد تحقیق‌ها در این زمینه باشیم. خواص مکانیکی و حرارتی و الکتریکی غیرمعمول آن‌ها نتیجه حجم زیادی از کارهای تحقیقاتی است [۲ و ۴]. مدول

### ۱- مقدمه

نانولوله‌های کربنی<sup>۱</sup> ابتدا در سال ۱۹۹۱ توسط ایچیمایا [۱] معرفی شدند. خواص ویژه و منحصر به فرد نانولوله‌های کربنی از جمله مدول

<sup>2</sup>Modulus of elasticity

<sup>1</sup>Carbon nanotubes

الاستیسیته بالای نانولوله‌های کربنی تک‌جداره<sup>۱</sup>، یکی از مهم‌ترین دلایل علاقه به استفاده از نانولوله‌های کربنی در کامپوزیت‌های سازه‌ای سبک است [۵]. با توجه به هزینه‌های زیاد و مشکلات آزمایش در مقیاس نانو [۶-۹]، بسیاری از محققان بر روی توسعه ابزار نظری برای مدل‌سازی مواد نانو ساختار متمرکز شده‌اند. به طور کلی دو روش متفاوت برای مدل‌سازی مواد نانو ساختار موجود است: روش‌های مکانیک ذره‌ای<sup>۲</sup> و مکانیک محیط‌های پیوسته<sup>۳</sup>. اولین نوع به شبیه‌سازی دینامیک مولکولی<sup>۴</sup> [۱۰]، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تنگابست<sup>۵</sup> [۱۱] و نظریه تابع چگالی<sup>۶</sup> [۱۲] تقسیم شده است. این روش‌ها اغلب محاسباتی پرهزینه دارند، به ویژه برای نانولوله‌های کربنی با تعداد زیاد جداره در مقیاس بزرگ، به طوری که مدل‌های پیوسته جایگزین پیشنهاد شدند. ادگار و همکارانش از طریق ایجاد یک ارتباط بین مکانیک سازه‌ای و مکانیک مولکولی این کار را محقق ساختند [۱۳] و پس از آن این ایده توسط لی و چو کامل شد [۱۴]. آن‌ها مکانیک سازه‌های مولکولی را برای مدل‌سازی نانولوله‌های کربنی توسعه دادند. در این رابطه کابن و همکاران یک بررسی روی این روش‌ها ارائه کرده‌اند [۱۵]. روش‌های مکانیک محیط‌های پیوسته عمدتاً شامل اولر-برنولی / مدل‌های تیر تیموشنکو [۱۶-۱۸]، مدل‌های پوسته [۱۹-۲۱] و مدل‌های ساختار مولکولی [۱۳-۱۴، ۲۲-۲۴] است.

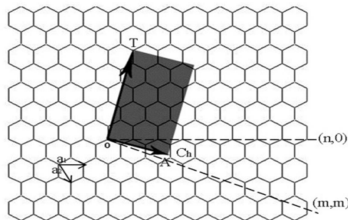
خواص فیزیکی مناسب نانولوله‌های کربنی (CNTs) به عنوان یک نانو ساختار یک‌بعدی و گرافن به عنوان یک نانو ساختار دوبعدی منجر به کاربرد گسترده آن‌ها در زمینه‌های مختلف از جمله: علم مواد، فیزیک، شیمی، پزشکی، زیست‌شناسی و غیره شده است. به تازگی اتصالات سه‌بعدی نانولوله/گرافن مورد مطالعه قرار گرفته است که در بردارنده مزایای استفاده از هر دو نانو ساختار دوبعدی و یک‌بعدی، به طور همزمان و دارنده خواص جدید مشترک با ساختارهای سه‌بعدی است [۲۵-۲۷].

استفاده از اتصال نانولوله تک‌جداره و چندجداره/گرافن دارای کاربرد بالقوه‌ای در ذخیره‌سازی انرژی [۲۸]، قالب حرارتی [۲۹-۳۰] و دستگاه‌های الکترونیکی [۳۱-۳۲] بوده است. به تازگی این مواد سه‌بعدی با موفقیت، تولید شده است [۳۳-۳۷]. اگرچه تاکنون کارهای متفاوتی بر روی خواص مکانیکی و کامنشی نانولوله‌ها و نانوصفحات به صورت مجزا انجام گرفته، با این وجود، مطالعه جامعی بر روی خواص مکانیکی اتصالات نانولوله/نانوصفحه صورت نگرفته است. از این رو، در این کار، خواص مکانیکی اتصالات نانولوله/نانوصفحه به صورت جامع مورد بررسی قرار گرفته است. اثرات طول و نسبت منظری<sup>۷</sup> و شرایط مرزی<sup>۸</sup> مختلف نانوصفحه و نانولوله بر روی نیروی کمناش بحرانی و مدول الاستیسیته نانولوله‌های کربنی زیگزاگ<sup>۹</sup> و صندلی<sup>۱۰</sup> یک‌طرفه و

دوطرفه متصل به صفحات گرافنی بررسی خواهد شد و شکل مدهای<sup>۱۱</sup> مربوط به آن‌ها نشان داده می‌شود. به این منظور روش اجزای محدود به کار گرفته خواهد شد.

## ۲- ساختار اتمی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره

نانولوله‌های کربنی ساختارهایی استوانه‌ای توخالی هستند که می‌توان آن‌ها را به شکل صفحات گرافنی<sup>۱۱</sup> لوله شده تصور نمود. نانولوله‌ها دو نوع تک‌جداره<sup>۱۲</sup> و چندجداره<sup>۱۳</sup> دارند. نانولوله‌های تک‌جداره بر حسب آرایش اتم‌های کربنی مقطع لوله به سه دسته صندلی، زیگزاگ و کایرال<sup>۱۴</sup> تقسیم می‌شوند. شبکه شش ضلعی نشان داده شده در شکل ۱ برای توضیح پارامترهای هندسی ساختار نانولوله-های کربنی استفاده می‌شود. جهت شبکه‌بندی نسبت به محور نانولوله، کایرالیته نانولوله نامیده شده و هندسه نانولوله توسط این پارامتر تعیین می‌شود. روابط (۱) تا (۶) به منظور توضیح ساختار نانوصفحه و نانولوله و نحوه ساخت نانولوله از نانوصفحه ارائه می‌گردند [۳۸].



شکل ۱- شبکه شش ضلعی صفحه گرافنی همراه با پارامترهای هندسی مورد استفاده برای توصیف نانولوله کربنی

برداری که دو نقطه‌ی هم ارز  $0$  و  $A$  را در سطح نانولوله به هم متصل می‌کند بردار کایرال<sup>۱۶</sup>  $\vec{C}_h$  نامیده می‌شود. یک روش معمول برای شناسایی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره، استفاده از این بردار است. معادله‌ی (۱) برای تعریف بردار کایرال استفاده می‌شود [۳۸]:

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad (1)$$

که  $\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$  بردارهای پایه بوده و هر جفت از اعداد صحیح  $(n, m)$  نوعی از ساختار نانولوله‌های کربنی را نشان می‌دهد.

با استفاده از شاخص‌های  $n$  و  $m$  می‌توان نانولوله‌های صندلی را به صورت  $(m, m)$  و نانولوله‌های زیگزاگ را به صورت  $(n, 0)$  تعریف کرد. نانولوله‌هایی که دارای ترکیب‌های دیگر  $n$  و  $m$  هستند، به نانولوله‌های کایرال موسومند. جهت بردار کایرال که زاویه کایرال نامیده می‌شود، از معادله‌ی (۲) تعیین می‌شود [۳۸]:

$$\theta = \cos^{-1} \frac{(2n + m)}{2\sqrt{(m^2 + mn + n^2)}} \quad (2)$$

با استفاده از معادله‌ی (۲) زاویه‌ی کایرال برای نانولوله‌های صندلی و زیگزاگ به ترتیب  $0^\circ$  و  $30^\circ$  درجه خواهند بود. اندازه‌ی بردار کایرال

<sup>1</sup> Single walled carbon nanotubes

<sup>2</sup> Atomistic mechanics

<sup>3</sup> Continuum mechanics

<sup>4</sup> Molecular dynamics

<sup>5</sup> The tight-binding molecular dynamics

<sup>6</sup> Density functional theory

<sup>7</sup> Aspect ratio

<sup>8</sup> Boundary conditions

<sup>9</sup> Zigzag

<sup>10</sup> Armchair

<sup>11</sup> Mode shapes

<sup>12</sup> Graphene sheets

<sup>13</sup> SWNT

<sup>14</sup> MWNT

<sup>15</sup> Chiral

<sup>16</sup> Chiral vector

خمشی، پیچشی، پیچشی خارج از صفحه و انرژي پیوند واندرالسی هستند.  $U_{vdw}, U_{\omega}, U_{\theta}, U_r$  به ترتیب انرژی‌های پیوند کششی،

در سیستم‌های کووالانسی، بخش اصلی انرژی کل در معادله‌ی (۷) از چهار جمله اول ناشی می‌شود. با پذیرش شکل‌های هارمونیک و تبدیل پیچش زاویه دوسطحی و پیچش خارج از صفحه به یک جمله معادل، انرژی‌های ناشی از برهم‌کنش اتم‌های کربن دارای پیوندهای کووالانسی را می‌توان به صورت معادلات (۸) تا (۱۰) نشان داده می‌شوند:

$$U_r = \frac{1}{2} K_r (r - r_0)^2 = \frac{1}{2} K_r (\Delta r)^2 \quad (8)$$

$$U_{\theta} = \frac{1}{2} K_{\theta} (\theta - \theta_0)^2 = \frac{1}{2} K_{\theta} (\Delta \theta)^2 \quad (9)$$

$$U_{\tau} = U_{\theta} + U_{\omega} = \frac{1}{2} K_{\tau} (\Delta \theta)^2 \quad (10)$$

$K_r$  و  $K_{\theta}$  و  $K_{\tau}$  به ترتیب ثابت‌های نیروی وابسته به کشش، خمش و پیچش باندها می‌باشند و  $\Delta r$ ،  $\Delta \theta$  و  $\Delta \theta$  به ترتیب عبارتند از تغییر طول باند، زاویه باند و زاویه دوسطحی نسبت به مکان تعادل. در مدل معادل از مکانیک سازه‌ای، به جای باندها، المان‌های تیر الاستیک با مدول الاستیسیته  $E$ ، طول  $L$ ، سطح مقطع  $A$  و ممان اینرسی  $I$  در نظر گرفته می‌شوند. انرژی کرنشی تحت کشش خالص  $N$  را می‌توان به صورت معادله‌ی (۱۱) بیان کرد:

$$U_N = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = \frac{1}{2} \frac{N^2 L}{EA} = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (\Delta L)^2 \quad (11)$$

که در آن  $\Delta L$  تغییر طول تیر است. انرژی کرنشی المان تیر تحت ممان خمشی خالص  $M$  از معادله‌ی (۱۲) به دست می‌آید:

$$U_M = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = \frac{2EI}{L} \alpha^2 = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (2\alpha)^2 \quad (12)$$

که در آن  $\alpha$  زاویه چرخش انتهای تیر است. به طور مشابه انرژی کرنشی المان تیر تحت ممان پیچشی خالص  $T$  با استفاده از معادله‌ی (۱۳) به دست می‌آید:

$$U_T = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{1}{2} \frac{T^2 L}{GJ} = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\Delta \beta)^2 \quad (13)$$

$J$ ،  $G$  و  $\Delta \beta$  به ترتیب ممان اینرسی قطبی، مدول برشی و چرخش نسبی دو انتهای تیر نسبت به هم هستند. مقادیر انرژی پتانسیل به دست آمده از معادلات (۸) تا (۱۰) و (۱۱) تا (۱۳) در دو سیستم متفاوت مکانیک سازه‌ای و مکانیک مولکولی هم‌ارزند. بنابراین پارامترهای مکانیک سازه‌ای  $EI$ ،  $EA$ ،  $GJ$  بر حسب ضرایب  $K_r$ ،  $K_{\theta}$  و  $K_{\tau}$  از معادله‌ی (۱۴) به دست می‌آید:

$$K_r = \frac{EA}{L}, K_{\theta} = \frac{EI}{L}, K_{\tau} = \frac{GJ}{L} \quad (14)$$

با فرض سطح مقطع دایره‌ای برای تیر معادله‌ی (۱۵) را خواهیم داشت:

$$A = \frac{\pi d^2}{4}, I = \frac{\pi d^4}{32}, J = \frac{\pi d^4}{64} \quad (15)$$

با قرار دادن معادله‌ی (۱۵) در معادله‌ی (۱۴) خصوصیات المان بر حسب ثابت‌های نیرو به صورت معادله‌ی (۱۶) به دست می‌آید:

$$d = 4 \sqrt{\frac{K_{\theta}}{K_r}}, E = \frac{k_{\tau}^2 I}{4\pi k_{\theta}}, G = \frac{k_{\tau}^2 k_{\tau}}{8\pi k_{\theta}^2} \quad (16)$$

برای محاسبه مدول الاستیسیته، یک انتهای نانولوله کاملاً گیردار شده و به انتهای مخالف آن جابجایی تحمیل می‌شود. مدول الاستیسیته نانولوله از معادله‌ی (۱۷) به دست می‌آید:

معادل محیط نانولوله است، بنابراین شعاع نانولوله از معادله‌ی (۳) به دست می‌آید [۳۸]:

$$R = \frac{\text{Lenght of } C_n}{2\pi} = \frac{a\sqrt{m^2 + mn + n^2}}{2\pi} \quad (3)$$

که در آن  $a = a_0\sqrt{3}$  و  $a_0$  طول معادل باند اتم‌ها در صفحه گرافن است. بردار انتقال  $\vec{T}$  پارامتر هندسی مهم دیگر نانولوله‌های کربنی تک‌جداره است. جهت این بردار در جهت محور نانولوله بوده و عمود بر بردار کایرال است. بردار انتقال با استفاده از معادله‌ی (۴) به دست می‌آید [۳۸]:

$$\vec{T} = \frac{2m + n}{\text{gcd}(2m + n, 2n + m)} \vec{a}_1 - \frac{2n + m}{\text{gcd}(2m + n, 2n + m)} \vec{a}_2 \quad (4)$$

که در این معادله  $\text{gcd}$  بزرگترین مقسوم علیه مشترک آرگمان‌ها است. اندازه بردار انتقال به طول سلول واحد نانولوله (که در شکل ۱ با رنگ خاکستری مشخص شده) وابسته بوده و از معادله‌ی (۵) به دست می‌آید [۳۸]:

$$L = \frac{3a_0\sqrt{m^2 + mn + n^2}}{\text{gcd}(2m + n, 2n + m)} \quad (5)$$

برای محاسبه مکان اتم‌های کربن در نانولوله‌های کربنی به شعاع  $R$ ، نگاشت معادله‌ی (۶) به کار برده می‌شود. این نگاشت برای به دست آوردن آرایش نانولوله از شبکه شش ضلعی صفحه‌ای به کار می‌رود [۳۸].

$$x_1 = X_1, \quad (6)$$

$$x_2 = R \sin \frac{X_2}{R},$$

$$x_3 = R \cos \frac{X_2}{R} - R,$$

که در آن  $(X_1, X_2)$  مختصات نقاط در صفحه گرافن و  $(x_1, x_2, x_3)$  تصویر آن‌ها در نانولوله است.

### ۳- مدل سازی المان محدود اتصالات نانولوله‌های

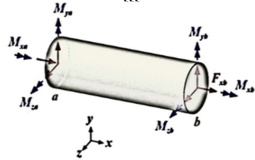
#### کربنی تک جداره

طبق شباهت بین نانولوله‌ها و سازه‌های قاب، با شبیه‌سازی نانولوله‌های کربنی تک‌جداره به عنوان سازه‌های قاب فضایی، روش‌های مکانیک سازه‌ای کلاسیک می‌تواند برای مطالعه رفتارهای مکانیکی آن‌ها مورد استفاده قرار گیرد. در این روش پیوندها و اتم‌ها توسط المان‌های تیر و جرم مدل می‌شوند. به منظور تعیین خواص این المان‌های تیر از برابری مکانیک مولکولی و مکانیک سازه‌ای استفاده می‌شود. برای ارائه وضوح بیشتر، پیوند بدین شرح است. نانولوله می‌تواند به عنوان یک مولکول متشکل از تعداد زیادی اتم کربن در نظر گرفته شود. موقعیت این اتم‌ها توسط یک میدان نیرویی که از برهم‌کنش‌های متقابل الکترون-هسته و هسته-هسته منشعب می‌شود، پیروی می‌کند. شکل انرژی پتانسیل فضایی که تابعی از موقعیت نسبی اتم‌های کربن است، برای حالت نیروی میدانی به کار می‌رود. با نادیده گرفتن برهم‌کنش‌های الکترواستاتیکی، مجموع برهم‌کنش‌های متقابل پیوندی و غیرپیوندی برای بیان انرژی پتانسیل کل نانولوله‌های کربنی تک جداره [۱۶] استفاده می‌شود که از معادله‌ی (۷) به دست می‌آید:

$$U_{\text{tot}} = \Sigma U_r + \Sigma U_{\theta} + \Sigma U_{\omega} + \Sigma U_{\tau} + \Sigma U_{vdw} \quad (7)$$

$$[K_{ij}]^g = \begin{bmatrix} -a & 0 & 0 & 0 & -n-o \\ 0 & -b & 0 & n-g-k & \\ 0 & 0 & -c & oh-g & \\ 0 & -d-e & -f-i-l & -ip-q & \\ d-gh & & & -lqr & \\ e-k-g & & & & \end{bmatrix} \quad (24)$$

$$[K_{ij}]^g = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & 0 & no \\ b & 0 & -ng-k & & \\ c & & -ohg & & \\ & & fil & & \\ \text{Sym.} & & & j & 0 \\ & & & & m \end{bmatrix} \quad (25)$$



شکل ۲- طرحواره نیروهای وارده بر المان تیر

با توجه به شکل ۲، می‌توان از روابط زیر برای به‌دست آوردن پارامترهای a تا r از معادلات (۲۲) تا (۲۴) استفاده کرد.

$$\begin{aligned} a &= \frac{F_{xb}}{L}, b = c = \frac{6F_{xb}}{5L} + \frac{12F_{xb}I}{AL^3}, \\ d &= \frac{M_{ya}}{L}, e = \frac{M_{za}}{L}, f = \frac{F_{xb}I}{AL}, g = \frac{M_{xb}}{L}, \\ h &= k = \frac{F_{xb}}{L} + \frac{6F_{xb}I}{AL^2}, i = \frac{M_{za} + M_{zb}}{L}, \\ j &= m = \frac{12F_{xb}}{15} + \frac{4F_{xb}I}{AL}, l = -\frac{M_{ya} + M_{yb}}{6}, \\ n &= \frac{M_{yb}}{L}, o = \frac{M_{zb}}{L}, p = r = -\frac{F_{xb}}{30} + \frac{2F_{xb}I}{AL}, \\ q &= -\frac{M_{xb}}{L}, \end{aligned} \quad (26)$$

ماتریس‌های سفتی کلی<sup>۱</sup> با سرهم‌بندی<sup>۲</sup> ماتریس‌های سفتی المان‌ها به‌دست می‌آیند. با در نظر گرفتن به  $\lambda$  و  $P^*$  به‌عنوان یک ثابت و بزرگی نیروی اعمال شده، بارگذاری خارجی به‌صورت زیر بیان می‌گردد:

$$P = \lambda P^* \quad (27)$$

به‌طور مشابه، ماتریس سفتی هندسی به‌صورت زیر بیان می‌شود:

$$K_G = \lambda K_G^* \quad (28)$$

که در آن  $K_G$  ماتریس سفتی هندسی برای بارگذاری اعمال شده است. با فرض ثابت بودن  $K^e$  می‌توان نوشت:

$$(K_E + \lambda K_G^*)U = \lambda P^* \quad (29)$$

برای به‌دست آوردن پاسخ، دترمینان عبارت درون پرانتز برابر با صفر قرار می‌گیرد:

$$|K_E + \lambda K_G^*| = 0 \quad (30)$$

برای حل مسئله مقدار ویژه فوق، حداقل مقدار به‌دست آمده از رابطه (۳۰) به عنوان  $\lambda_{cr}$  بحرانی در نظر گرفته می‌شود. نیروی کمانشی بحرانی را می‌توان با جایگزینی  $\lambda_{cr}$  در معادله (۲۷) به‌دست آورد:

$$P_{cr} = \lambda_{cr} P^* \quad (31)$$

### ۵- مدل شبیه‌سازی

به منظور انجام شبیه‌سازی‌های مختلف به روش المان محدود با نرم افزار Ansys، نانولوله‌های کربنی به صورت سازه‌های قاب فضایی در نظر گرفته شدند و برای مدل کردن اتصالات و اتهم‌ها به ترتیب از

$$E_{\text{elasticity}} = \frac{\sigma}{\epsilon} = \left(\frac{F_{tot}}{A_0}\right) \left(\frac{L_0}{\Delta L}\right) \quad (17)$$

$F_{tot}$  مجموع نیروهای عکس‌العمل تولید شده پس از جابجایی تحمیل شده،  $\Delta L$  جابجایی تحمیل شده،  $L_0$  طول نانولوله و  $A_0$  سطح مقطع نانولوله است که استوانه توخالی در نظر گرفته شده و از فرمول  $A_0 = \pi D_n t$  محاسبه می‌شود که در آن  $D_n$  قطر نانولوله و  $t$  ضخامت نانولوله است که برابر ۳/۴ آنگستروم می‌باشد (شکل ۲).

### ۴- کاربرد روش اجزای محدود در محاسبه نیروی کمانش بحرانی نانوساختارها

برای محاسبه نیروی کمانشی بحرانی نانوساختارها در مرحله اول، ماتریس سفتی المان باید محاسبه شود. برای مدل حاضر با المان‌های تیر، دو نوع ماتریس سفتی عنصری بدست می‌آید که شامل ماتریس سفتی کششی و ماتریس سفتی هندسی است [۳۹]. ماتریس سفتی کششی المان تیر به شرح زیر است:

$$[K]_b^e = \begin{bmatrix} [K_{ii}]_b^e & [K_{ij}]_b^e \\ [K_{ji}]_b^e & [K_{jj}]_b^e \end{bmatrix} \quad (18)$$

که در آن:

$$[K_{ii}]_b^e = \begin{bmatrix} EA/L & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12EI_x/L^3 & 0 & 0 & 0 & 6EI_x/L^2 \\ 0 & 0 & 12EI_y/L^3 & 0 & -6EI_y/L^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & GJ/L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -6EI_y/L^2 & 0 & 4EI_y/L & 0 \\ 0 & 6EI_x/L^2 & 0 & 0 & 0 & 4EI_x/L \end{bmatrix} \quad c$$

$$[K_{ij}]_b^e = \begin{bmatrix} -EA/L & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -12EI_x/L^3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -12EI_y/L^3 & 0 & -6EI_y/L^2 \\ 0 & 0 & 0 & -GJ/L & 0 \\ 0 & 0 & 6EI_y/L^2 & 0 & 2EI_y/L \\ 0 & -6EI_x/L^2 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (20)$$

$$[K_{jj}]_b^e = \begin{bmatrix} EA/L & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12EI_x/L^3 & 0 & 0 & -6EI_x/L^2 \\ 0 & 0 & 12EI_y/L^3 & 0 & 6EI_y/L^2 \\ 0 & 0 & 0 & GJ/L & 0 \\ 0 & 0 & 6EI_y/L^2 & 0 & 4EI_y/L \\ 0 & -6EI_x/L^2 & 0 & 0 & 4EI_x/L \end{bmatrix} \quad (21)$$

و  $[K_{ij}]_b^e = ([K_{ji}]_b^e)^T$

به علاوه، معادله زیر برای توصیف ماتریس سفتی هندسی استفاده می‌شود:

$$K^g = \begin{bmatrix} [K_{ii}]^g & [K_{ij}]^g \\ [K_{ji}]^g & [K_{jj}]^g \end{bmatrix} \quad (22)$$

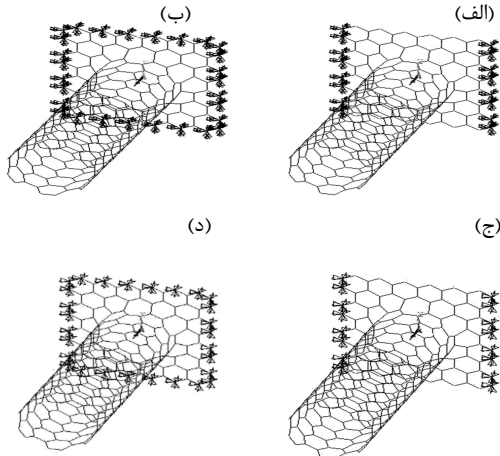
که در آن  $[K_{ij}]^g = ([K_{ji}]^g)^T$

$$[K_{ii}]^g = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & 0 & -d-e \\ b & 0 & & dgk & \\ & & 0 & ehg & \\ & & & fil & \\ \text{Sym.} & & & & j & 0 \\ & & & & & & m \end{bmatrix} \quad (23)$$

<sup>1</sup> General stiffness matrix

<sup>2</sup> Assembling

شرایط مرزی اعمال شده شامل گیردار-گیردار-گیردار-گیردار، گیردار-گیردار-آزاد-گیردار-آزاد، ساده-ساده-ساده-ساده و ساده-آزاد-ساده-آزاد است. در حالت گیردار جایجایی در راستای محورهای  $x$ ،  $y$  و  $z$  و چرخش حول این محورها صفر می‌شود و در شرط مرزی ساده تنها جایجایی در راستای محورهای  $x$ ،  $y$  و  $z$  صفر می‌شود (شکل ۶).



شکل ۶- انواع شرایط مرزی روی نانوصفحه

(الف) گیردار-آزاد-گیردار-آزاد (ب) گیردار-گیردار-گیردار-گیردار-  
گیردار (ج) ساده-آزاد-ساده-آزاد (د) ساده-ساده-ساده-ساده

## ۶- نتایج شبیه سازی

در ابتدا برای صحت‌گذاری روش مدلسازی، در جدول ۱، مدول ینگ محاسبه شده با استفاده از روش حاضر برای تعدادی از نانولوله‌های کربنی با مدول محاسبه شده از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی [۴۰] مورد مقایسه قرار گرفت. همان‌گونه که مشاهده می‌شود، مدل استفاده شده دارای درصد خطای حدود ۱۰٪ نسبت به روش دینامیک مولکولی می‌باشد. دلیل این خطا، می‌تواند به نادیده‌گرفتن انرژی‌های غیرپیوندی در رابطه (۷) و همچنین استفاده از شکل هارمونیک برای بیان انرژی‌های کشش، پیچش و خمش پیوند نسبت داده شود.

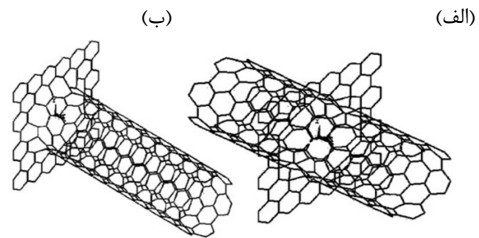
جدول ۱- صحت‌گذاری روش مدل‌سازی

Nanotube Chirality	R(Angs)	L(Angs)	Y(TPa) [۴۰]	Y(TPa) Recent work	error%
(۱۰,۱۰)	۰/۶۷۸	۸/۸۵۴	۰/۹۳۵	۱/۰۴۳	۱۱/۵۵
(۱۸,۱۸)	۱/۲۲	۱۳/۲۸۱	۰/۹۳۴	۱/۰۰۶	۷/۷۰
(۱۴,۰)	۰/۵۴۸	۶/۲۳	۰/۹۳۹	۱/۰۳۰	۹/۶۹
(۲,۰)	۰/۸۲۲	۹/۴۲۸	۰/۹۳۶	۱/۰۳۷	۱۰/۷۹
(۲۴,۰)	۰/۹۳۹	۱۰/۵	۰/۹۳۴	۰/۹۷۵	۴/۳۹

بر اساس مدل‌سازی توضیح داده شده، مدول الاستیسیته و رفتار کمانشی نانولوله‌های زیگزاگ و صندلی با شعاع‌ها و نسبت‌های منطقی (نسبت طول نانولوله به شعاع نانولوله) مختلف تحت شرایط مرزی روی نانوصفحه مورد بررسی قرار گرفت. در شکل ۷، مدول الاستیسیته نانولوله‌های زیگزاگ و صندلی یک‌طرفه و دوطرفه در مقابل افزایش طول نانوصفحه و نسبت منطقی نانولوله‌ها نشان داده شده است. طبق

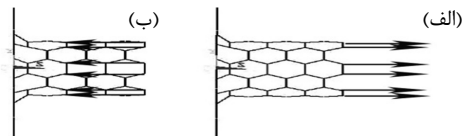
المان‌های تیر و جرم استفاده شده است. المان تیر شامل شش درجه آزادی بوده که شامل جایجایی در راستای  $x$ ،  $y$  و  $z$  چرخش حول این محورها می‌باشد. مکان‌ها با استفاده از روابط (۱) تا (۶) و کدنویسی در نرم‌افزار MATLAB محاسبه شده است.

نانولوله‌های کربنی تک‌جداره برحسب کایرالیته یا نسبت منطقی می‌توانند تعریف شوند. در این مطالعه نانولوله‌ها به نانوصفحه متصل شده‌اند و به صورت یک‌طرفه و دوطرفه مورد بررسی قرار گرفته‌اند (شکل ۳).



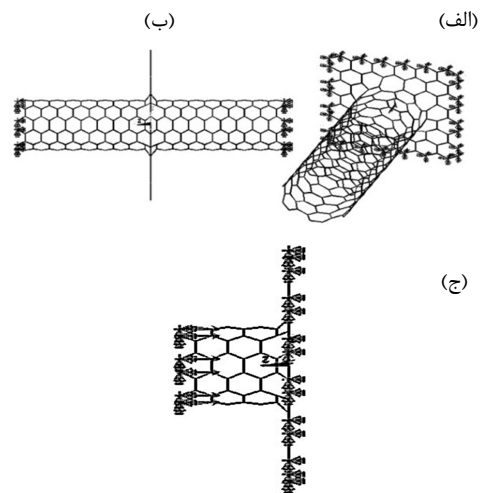
شکل ۳- نانولوله کربنی متصل با نانوصفحه  
(الف) نانولوله دوطرفه (ب) نانولوله یک‌طرفه

برای بررسی مدول الاستیسیته از بارگذاری کششی استفاده شده است و برای تحلیل کمانش الاستیک این اتصالات، نانولوله‌های کربنی تحت نیروی فشار محوری قرار گرفته‌اند (شکل ۴).



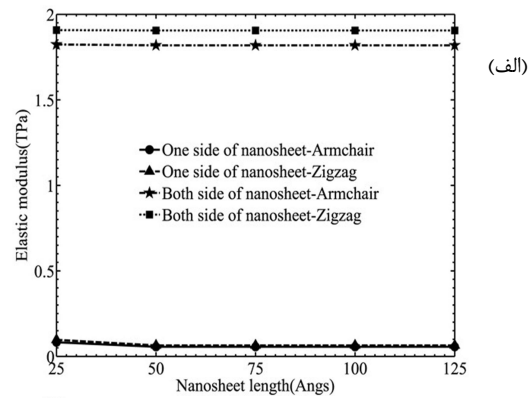
شکل ۴- بارگذاری نانولوله‌ها  
(الف) کششی (ب) فشاری

نحوه اعمال شرایط مرزی در شکل ۵ نشان داده شده است.

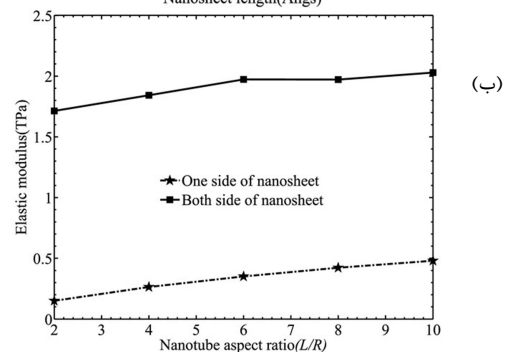


شکل ۵- اعمال شرایط مرزی روی  
(الف) نانوصفحه (ب) نانولوله (ج) نانوصفحه و نانولوله هم‌زمان

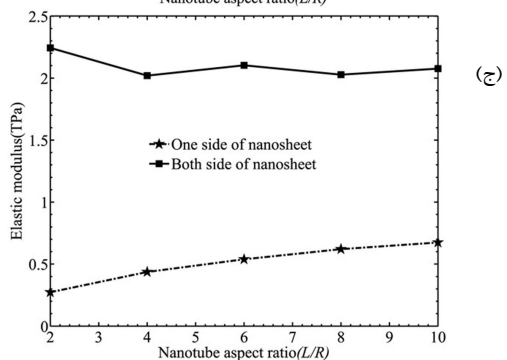
شکل ۷ در نسبت منطری ثابت، افزایش طول نانولوله اثری بر مدول الاستیسیته ندارد و در نانولوله یک‌طرفه تاثیر کایرالیته ناچیز است. در



(الف)



(ب)



(ج)

شکل ۷- مدول الاستیسیته اتصالات نانولوله/گرافنی با نانولوله‌های یک‌طرفه و دوطرفه

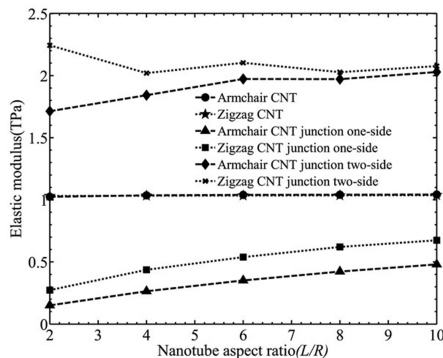
(الف) نانولوله صندلی (۶و۶) و زیگزاگ (۱۲و۰)، طول ضلع نانوصفحه=۲۵ (انگستروم)، نسبت منطری نانولوله=۶ (ب) نانولوله صندلی (۱۲و۱۲)، نسبت‌های منطری مختلف نانولوله متصل به نانوصفحه‌ای با ابعاد ۲۴×۲۴ (انگستروم مربع) (ج) نانولوله زیگزاگ (۲۴و۰)، نسبت‌های منطری مختلف نانولوله متصل به نانوصفحه‌ای با ابعاد ۲۴×۲۴ (انگستروم مربع)

نانولوله‌های دوطرفه، مقدار مدول الاستیسیته در حالت زیگزاگ بالاتر از صندلی می‌باشد. در نسبت‌های منطری مختلف در نانولوله‌های صندلی و زیگزاگ با افزایش این نسبت مدول الاستیسیته نیز اندکی افزایش می‌یابد که مقدار مدول الاستیسیته در نانولوله زیگزاگ بیشتر از صندلی است و در هر دو، در حالت دوطرفه بیشتر از یک‌طرفه می‌باشد. اما در نانولوله زیگزاگ دوطرفه با افزایش نسبت منطری روند منظمی از

افزایش یا کاهش مشاهده نمی‌شود و تقریباً مقدار مدول الاستیسیته ثابت می‌باشد.

برای درک بهتر تفاوت میان نانولوله‌های کربنی با نانولوله‌های کربنی متصل به صفحات گرافنی، مدول الاستیسیته نانولوله‌های کربنی صندلی (۱۲و۱۲) و زیگزاگ (۲۴و۰) یک‌طرفه و دوطرفه با نسبت‌های منطری مختلف نانولوله با همین نانولوله‌های کربنی متصل به نانوصفحه‌ای با ابعاد ۲۴×۲۴ (انگستروم مربع) تحت شرط مرزی گیردار-گیردار در شکل ۸ آورده شده است.

(ج)



شکل ۸- مدول الاستیسیته نانولوله کربنی تک‌جداره و نانولوله کربنی تک‌جداره متصل به نانوصفحه

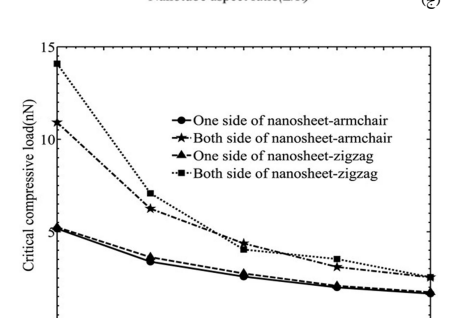
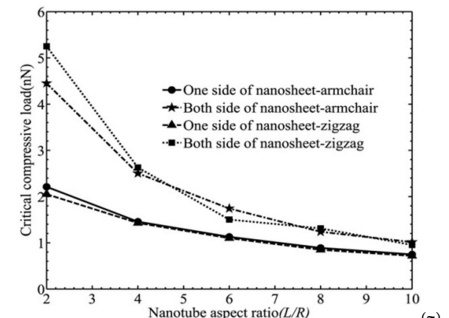
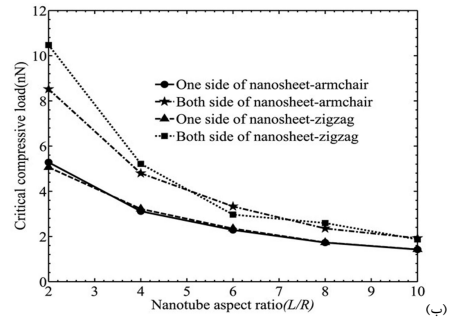
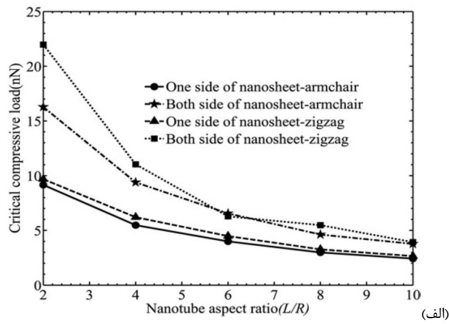
(د)

طبق شکل ۸ بالاترین مدول الاستیسیته مربوط به نانولوله کربنی زیگزاگ دوطرفه متصل به نانوصفحه می‌باشد. پس از آن بالاترین مدول الاستیسیته مربوط به نانولوله صندلی دوطرفه متصل به نانوصفحه می‌باشد. نمودارهای مدول الاستیسیته برای نانولوله بدون اتصال به نانوصفحه صندلی و زیگزاگ بر هم منطبق شدند که نشان دهنده اثر ناچیز کایرالیته در نانولوله‌های بدون اتصالات است. پایین‌ترین مدول الاستیسیته مربوط به نانولوله کربنی صندلی متصل به نانوصفحه می‌باشد. به طور کلی با افزایش نسبت منطری نانولوله مدول یانگ اتصالات نانولوله/نانوصفحه روندی صعودی دارد.

نیروی کمانش بحرانی برای نانولوله‌های صندلی (۶و۶) و زیگزاگ (۱۲و۰) یک‌طرفه و دوطرفه با نسبت منطری ۶ متصل به نانوصفحه‌ای با عرض ۴۵ (انگستروم) و طول متغیر تحت شرایط مرزی مختلف در شکل ۹ نشان داده شده است.

از این نمودارها مشاهده می‌شود که در نسبت منطری ثابت، با افزایش طول نانوصفحه، نیروی کمانش بحرانی در ابتدا کاهش می‌یابد و بعد به مقدار ثابتی می‌رسد. برای نانولوله‌های یک‌طرفه، اثر کایرالیته نانولوله بر روی نیروی کمانش بحرانی ناچیز است. همچنین مشاهده می‌شود مقدار این نیرو در حالت دوطرفه بیشتر از یک‌طرفه می‌باشد که برای نانولوله‌های دوطرفه، در حالت صندلی بالاتر از زیگزاگ می‌باشد و مقدار این نیروی کمانش بحرانی تحت شرط مرزی گیردار-گیردار بیشتر از ساده-ساده و در حالت گیردار-آزاد بیشتر از ساده-آزاد است.

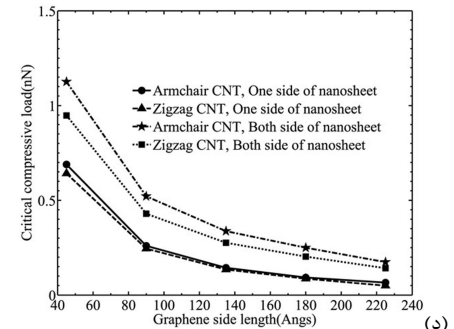
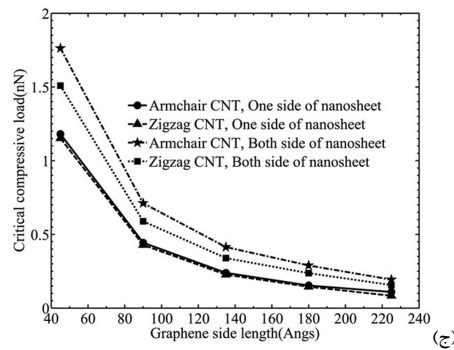
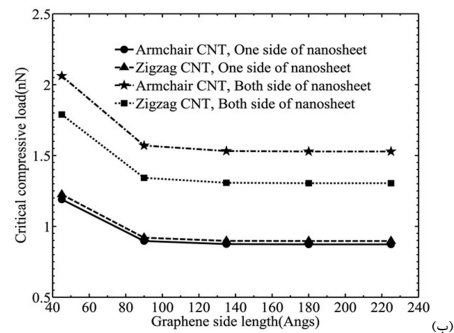
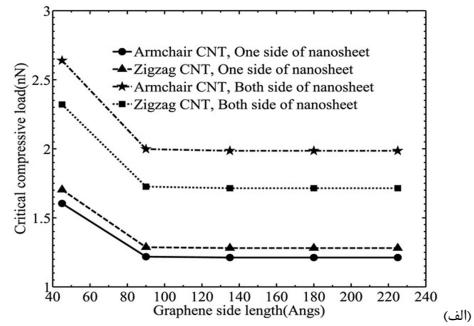
افزایش زاویه کایرال از ۰ تا ۳۰ درجه، نیروی بحرانی را در حالت دوطرفه کاهش می‌دهد و در حالت یک‌طرفه تاثیر ناچیزی دارد. با افزایش طول نانوصفحه از ۲۲۰ انگستروم به بالا، در دو شرط مرزی گیردار-آزاد و ساده-آزاد اثر تغییر زاویه کایرال و یک‌طرفه یا دوطرفه بودن اتصالات از بین می‌رود. نیروی کمانش بحرانی برای نانولوله‌های



شکل ۱۰- نیروی کماتش بحرانی اتصالات نانولوله/گرافنی با نانولوله‌های صندلی یک‌طرفه و دوطرفه با نسبت‌های منظری مختلف تحت شرایط مرزی نانو صفحه: (الف) گیردار-گیردار (ب) ساده-ساده (ج) گیردار-آزاد (د) ساده-آزاد

طبق نمودارهای شکل ۱۰ با ثابت بودن ابعاد نانوصفحه و افزایش نسبت منظری نانولوله، نیروی کماتش بحرانی کاهش می‌یابد. بیشترین مقدار نیروی کماتش بحرانی متعلق به نانولوله‌های دوطرفه می‌باشد که در زیگزاگ بالاتر از صندلی است. نمودار نانولوله‌های یک‌طرفه بر هم منطبق شده‌اند که نشان می‌دهد اثر کایرالیتهی نانولوله در این حالت ناچیز است. نیروی کماتش بحرانی تحت شرط مرزی گیردار-گیردار بیشتر از ساده-ساده و در گیردار-آزاد بیشتر از ساده-آزاد است. با

صندلی (۶و) و زیگزاگ (۱۲و) با نسبت منظری مختلف در حالت یک‌طرفه و دوطرفه با نانوصفحه‌ای با ابعاد ۲۴×۲۴ (آنگستروم مربع) تحت شرایط مرزی مختلف روی نانوصفحه در شکل ۱۰ نشان داده شده است.



شکل ۹- نیروی کماتش بحرانی اتصالات نانولوله/گرافنی با نانولوله-های زیگزاگ و صندلی یک‌طرفه و دوطرفه تحت شرایط مرزی روی نانوصفحه: (الف) گیردار-گیردار (ب) ساده-ساده (ج) گیردار-آزاد (د) ساده-آزاد

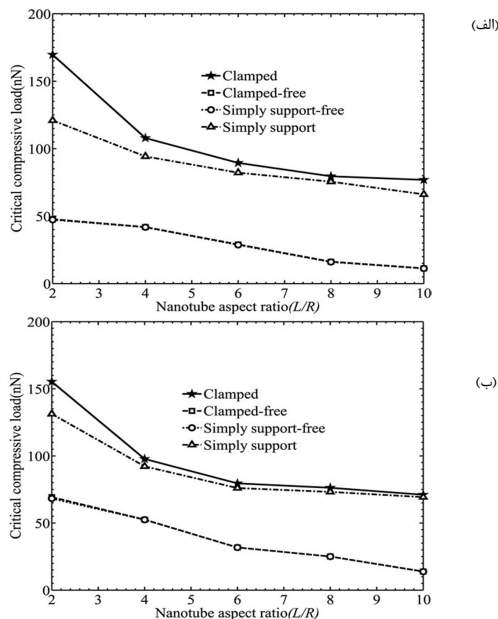
افزایش این نسبت، نمودارهای یک‌طرفه و دوطرفه زیگزگ و صندلی همگرا و بر هم منطبق می‌شوند. تغییرات کایرالیته و یک‌طرفه یا دوطرفه بودن اتصالات، اثر قابل توجهی بر روی اتصالاتی با نسبت منظری ندارد اما در نسبت منظری پایین (نسبت منظری=۲) اثر کایرالیته در حالت دوطرفه محسوس‌تر است و برای زاویه کایرال ۳۰ بالاتر می‌باشد.

با توجه به شکل‌های ۹ و ۱۰ درمی‌یابیم که در شرایط مرزی گیردار-گیردار و ساده-ساده، افزایش طول نانوصفحه تغییری در نیروی کمانش بحرانی ایجاد نمی‌کند اما افزایش نسبت منظری نانولوله‌ها تاثیر زیادی بر نیروی کمانش بحرانی دارد و با افزایش این نسبت و ثابت نگه‌داشتن ابعاد نانوصفحه، مقدار این نیرو کاهش می‌یابد. درصد کاهش این نیرو در شرط مرزی گیردار-گیردار بیشتر از ساده-ساده و در گیردار-آزاد بیشتر از ساده-آزاد است.

برای درک بهتر تفاوت میان نانولوله‌های کربنی با نانولوله‌های کربنی متصل به صفحات گرافنی، نیروی کمانش بحرانی نانولوله‌های کربنی صندلی (۶۶) و زیگزگ (۱۲۰) یک‌طرفه با نسبت منظری مختلف با همین نانولوله‌های کربنی متصل به نانوصفحه‌ای با ابعاد ۲۴×۲۴ (آنگستروم مربع) تحت دو شرط مرزی گیردار-آزاد و ساده-آزاد در شکل ۱۱ آورده شده است.

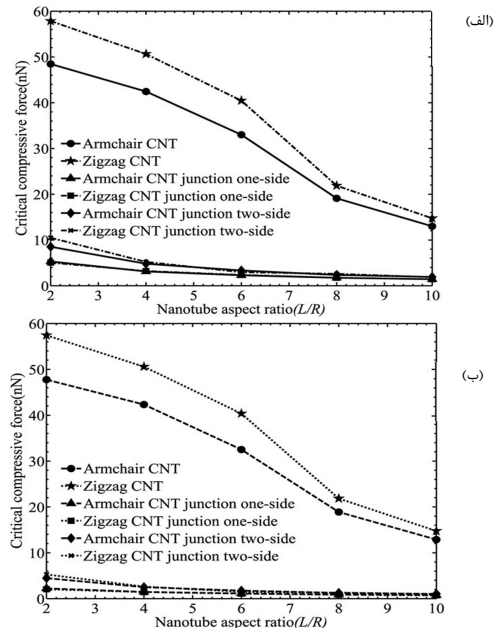
نسبت منظری نیروی کمانش بحرانی کاهش می‌یابد و نمودارهای زیگزگ و صندلی به عدد مشخصی همگرا می‌شوند که نشان دهنده‌ی کاهش وابستگی رفتار کمانشی نانولوله‌های کربنی با اتصالات و بدون اتصالات به کایرالیته در نسبت منظری‌های بالا می‌باشد. متصل کردن صفحه گرافنی به نانولوله کربنی در نسبت منظری ۲ تقریباً باعث کاهش ۸۲ درصدی نیروی بحرانی شد اما با افزایش نسبت منظری تا مقدار ۱۰، کاهش این نیرو به کمتر از ۶۷ درصد رسید. مقدار نیروی کمانش بحرانی در نانولوله‌های بدون اتصال به نانوصفحه تحت هر دو شرط مرزی بسیار نزدیک به هم می‌باشد اما در نانولوله‌های متصل به نانوصفحه مقدار این نیرو تحت شرط مرزی گیردار-آزاد بیشتر از ساده-آزاد است.

نیروی کمانش بحرانی برای نانولوله‌های دوطرفه صندلی (۶۶) و زیگزگ (۱۲۰) با نسبت منظری مختلف و متصل به نانوصفحه‌ای با ابعاد ۲۴×۲۴ (آنگستروم مربع) تحت شرایط مرزی مختلف بر روی نانولوله در شکل ۱۲ نشان داده شده است.



شکل ۱۲- نیروی کمانش بحرانی اتصالات نانولوله/گرافنی با نانولوله‌های دوطرفه تحت شرایط مرزی مختلف روی نانولوله: (الف) صندلی (۶۶) (ب) زیگزگ (۱۲۰)

با اعمال شرایط مرزی روی نانولوله مقدار عددی نیروی کمانش بحرانی هم در صندلی و هم در زیگزگ نسبت به زمانی که شرط مرزی روی نانوصفحه اعمال می‌شود، افزایش قابل توجهی پیدا کرد. به عنوان نمونه در نسبت منظری ۲، تقریباً به ۱۰ برابر افزایش می‌یابد. طبق نمودارهای شکل ۱۲ هم در نانولوله صندلی و هم زیگزگ با افزایش نسبت منظری، نیروی کمانش بحرانی کاهش می‌یابد و بالاترین مقدار آن در شرط مرزی گیردار-گیردار اتفاق می‌افتد. نمودارهای گیردار-آزاد و ساده-آزاد چه در صندلی و چه زیگزگ کاملاً بر هم منطبق شده‌اند و با افزایش نسبت منظری به عدد مشخصی همگرا شده‌اند که نشان دهنده‌ی اثر ناچیز کایرالیته نانولوله در این شرایط مرزی می‌باشد. همچنین نمودارهای گیردار-گیردار و ساده-ساده با افزایش نسبت



شکل ۱۱- نیروی کمانش بحرانی نانولوله کربنی تک‌جداره و نانولوله کربنی تک‌جداره متصل به نانوصفحه تحت شرایط مرزی مختلف: (الف) گیردار-آزاد (ب) ساده-آزاد

طبق نمودارهای شکل ۱۱ نیروی کمانش بحرانی تحت هر دو شرط مرزی برای نانولوله‌های کربنی بدون اتصالات همواره بیشتر از نانولوله‌های کربنی متصل به صفحه گرافنی است. با دوطرفه کردن نانولوله‌های کربنی متصل به صفحه گرافنی نیروی کمانش بحرانی مقدار کمی افزایش می‌یابد، که در دو حالت بدون اتصالات و با اتصالات مقدار این نیرو در نانولوله‌های کربنی زیگزگ بیشتر است و با افزایش

ناچیز است. همچنین در حالتی که طول نانوصفحه متغیر است، مشاهده می‌شود برای نانولوله‌های دوطرفه، نیروی کماتش بحرانی در حالت صندلی بالاتر از زیگزاگ می‌باشد و مقدار این نیروی کماتش بحرانی تحت شرط مرزی گیردار-گیردار بیشتر از ساده-ساده و در حالت گیردار-آزاد بیشتر از ساده-آزاد است.

در نانولوله‌های صندلی و زیگزاگ یک‌طرفه و دوطرفه با افزایش نسبت منظری نانولوله، نیروی کماتش بحرانی کاهش می‌یابد و مقدار آن در حالت زیگزاگ بیشتر از صندلی و در دوطرفه بیشتر از یک‌طرفه است. نیروی کماتش بحرانی تحت شرط مرزی گیردار-گیردار بیشتر از ساده-ساده و در گیردار-آزاد بیشتر از ساده-آزاد است. با افزایش این نسبت، نمودارهای یک‌طرفه و دوطرفه همگرا و برهم منطبق می‌شوند. بنابراین در نسبت‌های منظری بالا، یک‌طرفه یا دوطرفه بودن نانولوله تاثیر ناچیزی بر روی نیروی کماتش بحرانی دارد. همچنین نمودارهای گیردار-گیردار و ساده-ساده هم با افزایش نسبت منظری برهم منطبق شدند و عدد همگرایی آن‌ها در صندلی و زیگزاگ تقریباً مشابه می‌باشد. این مسئله حاکی از این است برای شرایط مرزی گیردار-گیردار و ساده-ساده، اثر کایرالیته نانولوله بر نیروی کماتش بحرانی ناچیز است. به طور کلی ملاحظه گردید که با اعمال شرایط مرزی روی نانوصفحه یا نانولوله، با افزایش نسبت منظری یا طول نانوصفحه، نیروی کماتش بحرانی آن‌ها کاهش می‌یابد.

با اعمال شرایط مرزی به طور همزمان روی نانوصفحه و نانولوله می‌توان به بالاترین مقدار نیروی کماتش بحرانی رسید که در حالت دوطرفه بیشتر از یک‌طرفه است و به دلیل منطبق شدن نمودارها، اثر کایرالیته ناچیز می‌باشد.

همچنین نمودارها نشان دادند که با ثابت نگه‌داشتن ابعاد نانوصفحه و افزایش نسبت منظری نانولوله و اعمال شرایط مرزی بر روی نانولوله و نانوصفحه به طور همزمان می‌توان به مقدار بالاتری از نیروی کماتش بحرانی رسید.

در نسبت منظری ثابت، افزایش طول نانوصفحه اثر ناچیزی بر مدول الاستیسیته دارد و در نانولوله یک‌طرفه، اثر کایرالیته ناچیز می‌باشد. در نانولوله‌های دوطرفه، مقدار مدول الاستیسیته در حالت زیگزاگ بالاتر از صندلی می‌باشد. در نسبت منظری مختلف در نانولوله‌های صندلی و زیگزاگ با افزایش این نسبت، مدول الاستیسیته نیز اندکی افزایش می‌یابد که مقدار مدول الاستیسیته در نانولوله دوطرفه زیگزاگ بیشتر از دوطرفه صندلی می‌باشد. با متصل کردن نانولوله کربنی به نانوصفحه در حالت یک‌طرفه، مدول الاستیسیته کاهش چشم‌گیری می‌یابد اما با دوطرفه کردن نانولوله متصل به نانوصفحه مقدار مدول الاستیسیته زیاد می‌شود و تقریباً دو برابر مدول الاستیسیته نانولوله کربنی بدون اتصال به نانوصفحه می‌گردد.

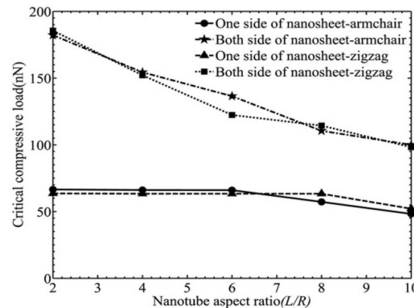
## ۸- مراجع

- [1] Iijima S., Brabec C., Maiti A., and Bernholc J., Structural flexibility of carbon nanotubes, *Journal of Chemical Physics*, Vol. 104, No. 5, pp. 2089-2092, 1996.
- [2] Gibson R. F., Adorned E. O., Wen Y. F., Vibrations of carbon nanotubes and their composites, *A review Composites Science and Technology*, Vol. 67, pp. 1-28, 2007.
- [3] Dresselhaus M. S., Dresselhaus G., Jorio A., Unusual properties and structure of carbon nanotubes, *Annual Review of Materials Research*, Vol. 34, No. 1, pp. 247-278, 2004.

منظری برهم منطبق شدند و عدد همگرایی آن‌ها در صندلی و زیگزاگ تقریباً مشابه می‌باشد. این مسئله حاکی از این است که برای شرایط مرزی گیردار-گیردار و ساده-ساده، اثر کایرالیته نانولوله ناچیز است.

از مقایسه نمودارهای شکل ۹ تا شکل ۱۲ می‌توان دریافت که با اعمال شرایط مرزی روی نانوصفحه یا نانولوله، با افزایش نسبت منظری یا طول نانوصفحه‌ها، نیروی کماتش بحرانی آن‌ها کاهش می‌یابد. همچنین می‌توان با ثابت نگه‌داشتن ابعاد نانوصفحه و افزایش نسبت منظری نانولوله و اعمال شرایط مرزی روی نانولوله به نیروی کماتش بحرانی بزرگ‌تری دست یافت.

نیروی کماتش بحرانی برای نانولوله‌های صندلی (۶ و ۶) و زیگزاگ (۱۲ و ۱۲) یک‌طرفه و دوطرفه با نسبت منظری مختلف و متصل به نانوصفحه‌ای با ابعاد ۲۴×۲۴ (آنگستروم مربع) تحت شرایط مرزی چهار طرف گیردار بر روی نانوصفحه و گیردار-گیردار بر روی نانولوله به طور همزمان در شکل ۱۳ نشان داده شده است.



شکل ۱۳- نیروی کماتش بحرانی اتصالات نانولوله/گرافنی تحت شرط مرزی گیردار روی نانولوله و نانوصفحه به طور همزمان

با اعمال شرایط مرزی هم روی نانولوله و هم روی نانوصفحه به طور همزمان، می‌توان به مقدار عددی بالاتری برای نیروی کماتش بحرانی دست یافت. همچنین با افزایش نسبت منظری، نیروی کماتش بحرانی هم در صندلی و هم در زیگزاگ کاهش می‌یابد. نمودارهای صندلی و زیگزاگ در حالت دوطرفه دارای بیشترین مقادیر و در حالت یک‌طرفه دارای کمترین مقادیر هستند که با افزایش نسبت منظری همگرا و بر هم منطبق شده‌اند. این مسئله حاکی از این است که، زمانی که شرط مرزی به طور همزمان روی نانولوله و نانوصفحه اعمال می‌گردد، اثر کایرالیته نانولوله ناچیز است و تنها یک‌طرفه یا دوطرفه بودن نانولوله اهمیت دارد.

## ۷- نتیجه‌گیری

در این مقاله نانولوله‌های صندلی و زیگزاگ یک‌طرفه و دوطرفه متصل به نانوصفحه تحت شرایط مرزی و نسبت‌های منظری و طول‌های مختلف، به منظور بررسی خواص مکانیکی و رفتار کماتشی با استفاده از نرم‌افزار المان محدود Ansys شبیه‌سازی شدند. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش نسبت منظری نانولوله‌ها و یا ابعاد نانوصفحه‌ها، نیروی کماتش بحرانی در ابتدا کاهش می‌یابد و بعد به مقدار ثابتی می‌رسد. همان طور که نشان داده شد نمودارهای نانولوله یک‌طرفه زیگزاگ و صندلی با افزایش طول نانوصفحه برهم منطبق می‌شوند که نشان می‌دهد برای نانولوله‌های یک‌طرفه، اثر کایرالیته نانولوله بر نیروی کماتش بحرانی

- [24] Rappe A. K., Casewit C. J., Colwell K. S., Goddard Iii W. A., Skiff W. M., UFF, a full periodic table force field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations, *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 114, No. 25, pp. 10024-10035, 1992.
- [25] Wesolowski R. P., Terzyk A. P., Pillared graphene as a gas separation membrane, *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 13, pp. 17027-17029, 2011.
- [26] Bae S. H., Karthikeyan K., Lee Y. S., Oh I. K., Microwave self-assembly of 3D graphene-carbon nanotube-nickel nanostructure for high capacity a node material in lithium ion battery, *Carbon* Vol. 64, PP. 527-536, 2013.
- [27] Kang C., Baskaran R., Hwang J., Ku B. C., Choi W., Large scale patternable 3-dimensional carbon nanotube-graphene structure for flexible Li-ion battery, *Carbon* Vol. 68, PP. 493-500, 2014.
- [28] Dimitrakakis G. K., Tylisanakis E., Froudakis G. E., Pillared graphene: a new 3-D network nanostructure for enhanced hydrogen storage, *Nano letters*, Vol. 8, pp. 3166-3170, 2008
- [29] Varshney V., Patnaik S., Roy A. K., Froudakis G., Farmer B. L., Modeling of thermal transport in pillared-graphene architectures, *ACS nano* Vol. 4, PP. 1153-1161, 2010.
- [30] Xu L., Wei N., Zheng Y., Fan Z., Wang H. Q., Zheng J. C., Graphene-nanotube 3D networks: intriguing thermal and mechanical properties, *Journal of Materials Chemistry*, Vol. 22, PP. 1435-1444, 2012.
- [31] Du F., Yu D., Dai L., Ganguli S., Varshney V., Roy A. K., Preparation of tunable 3D pillared carbon nanotube-graphene networks for high-performance capacitance, *Chemistry of Materials*, Vol. 23, PP. 4810-4816, 2011.
- [32] Kim Y. S., Kumar K., Fisher F. T., Yang E. H., Out-of-plane growth of CNTs on graphene for super capacitor applications, *Nanotechnology*, Vol. 23, PP. 015301, 2011.
- [33] Nguyen D. D., Tai N. H., Chen S. Y., Chueh Y. L., Controlled growth of carbon nanotube-graphene hybrid materials for flexible and transparent conductors and electron field emitters, *Nanoscale*, Vol. 4, PP. 632-638, 2012.
- [34] Yu F., Zhou H., Zhang Z., Wang G., Yang H., Chen M., Tao L., Tang D., He J., Sun L., Controlled Fabrication of Intermolecular Junctions of Single-Walled Carbon Nanotube/Graphene Nanoribbon, *Small*, Vol. 9, PP. 2405-2409, 2013.
- [35] Wen J., Li Y., Yang W., Facile fabrication of three-dimensional graphene/carbon nanotube sandwich structures, *Vacuum*, Vol. 101, PP. 271-274, 2014.
- [36] Tang C., Zhang Q., Zhao M. Q., Huang J. Q., Cheng X. B., Tian G. L., Peng H. J., Wei F., Nitrogen-doped aligned carbon nanotube/graphene sandwiches: facile catalytic growth on bi functional natural catalysts and their applications as scaffolds for high-rate lithium-sulfur batteries, *Advanced Materials*, Vol. 26, PP. 6100-6105, 2014.
- [37] Wu J., Yu K., Jia K. Q. Y., One Step Fabrication of Multi-walled Carbon Nanotubes/Graphene Nano platelets Hybrid Materials with Excellent Mechanical Property, *Fibers and Polymers*, Vol. 16, PP. 1540-1546, 2015.
- [38] Ansari R., Rouhi S., Atomistic finite element model for axial compressive of single-walled carbon nanotubes, *Physica E, Condensed Matter*, Vol. 43, PP. 58-69, 2010.
- [39] Shahnazari A., Ansari R., Rouhi S., On the stability characteristics of zigzag phosphorene nanotubes: A finite element investigation, *Journal of Alloys and Compounds*, Vol. 702, 388-398, 2017.
- [40] Wen Xing B., Chang Chun Z., Wan Zhao C., Simulation of Young's modulus of single-walled carbon nanotubes by molecular dynamics, *Physica B, Condensed Matter*, Vol. 352, No. 1-4, PP. 156-163, 2004.
- [4] Saito K., Nakamura J., Natori A., Ballistic thermal conductance of a graphene sheet, *Physical Review B*, Vol. 76, No. 11, pp. 115409, 2007.
- [5] J. Robertson, Realistic, application of CNTs, *Mater Today*, Vol. 7, No. 10, pp. 46-52, 2004.
- [6] Li X., Bhushan B., A review of nano indentation continuous stiffness measurement technique and its applications, *Materials Characterization*, Vol. 48, No. 1, pp. 11-36, 2002.
- [7] Li X., Bhushan B., Micro/nano mechanical and tribological characterization of ultrathin amorphous carbon coatings, *Journal of Materials Research*, Vol. 14, No. 6, pp. 2328-2337, 1999.
- [8] Li X., Gao H., Murphy C. J., Caswell K. K., Nanoindentation of Silver Nanowires, *Nano Letters*, Vol. 3, No. 11, pp. 1495-1498, 2003.
- [9] Li X., Chang W. C., Chao Y. J., Wang R., Chang M., Nanoscale structural and mechanical characterization of a natural nanocomposite material, the shell of red abalone, *Nano Letters*, Vol. 4, No. 4, pp. 613-617, 2004.
- [10] Yakobson B. I., Campbell M. P., Brabec C. J., Bernholc J., High strain rate fracture and C-chain unraveling in carbon nanotubes, *Computational Materials Science*, Vol. 8, No. 4, pp. 341-348, 1997.
- [11] Hernandez E., Goze C., Bernier P., Rubio A., Elastic properties of C and BxCyNz composite nanotubes, *Physical Review Letters*, Vol. 80, No. 20, pp. 4502-4505, 1998.
- [12] S'anchez-Portal D., Artacho E., Soler J. M, Rubio A., Ordej'on P., Ab initio structural, elastic, and vibrational properties of carbon nanotubes, *Physical Review B*, Vol. 59, No. 19, pp. 12678-12688, 1999.
- [13] Odegard G. M., Gates T. S., Nicholson L. M., Wise K. E., Equivalent-continuum modeling of nano-structured materials, *Composites Science and Technology*, Vol. 62, No. 14, pp. 1869-1880, 2002.
- [14] Li C., Chou T. W., A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 40, No. 10, pp. 2487-2499, 2003.
- [15] Qian D., Wagner G. J., Liu W. K., Yu M. F., Ruoff R. S., Mechanics of carbon nanotubes, *Applied Mechanics Reviews*, Vol. 55, No. 6, pp. 495-533, 2002.
- [16] Wang C. M., Tan V. B. C., Zhang Y. Y., Timoshenko beam model for vibration analysis of multi-walled carbon nanotubes, *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 294, No. 4, pp. 1060-1072, 2006.
- [17] Hsu J. C., Chang R. P., Chang W. J., Resonance frequency of chiral single-walled carbon nanotubes using Timoshenko beam theory, *Physics Letters A*, Vol. 372, No. 16, pp. 2757-2759, 2008.
- [18] Zhang Y. Y., Wang C. M., Tan V. B. C., Assessment of Timoshenko beam models for vibrational behavior of single-walled carbon nanotubes using molecular dynamics, *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*, Vol. 1, No. 1, pp. 89-106, 2009.
- [19] Yakobson B. I., Brabec C. J., Bernholc J., Nanomechanics of carbon tubes, instabilities beyond linear response, *Physical Review Letters*, Vol. 76, No. 14, pp. 2511-2514, 1996.
- [20] Ru C. Q., Effective bending stiffness of carbon nanotubes, *Physical Review B*, Vol. 62, No. 15, pp. 9973-9976, 2000.
- [21] Ru C. Q., Elastic compressive of single-walled carbon nanotube ropes under high pressure, *Physical Review B*, Vol. 62, No. 15, pp. 10405-10408, 2000.
- [22] Ansari R., Rouhi S., Atomistic finite element model for axial compressive of single-walled carbon nanotubes, *Physica E, Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, Vol. 43, No. 1, pp. 58-69, 2010.
- [23] Rouhi S., Ansari R., Atomistic finite element model for axial compressive and vibration analysis of single-layered graphene sheets, *Physica E*, Vol. 44, No. 4, pp. 764-772, 2012.