

بررسی اثر زاویه کایرال بر کمانش محوری و پیچشی نانولوله‌های کربنی تک جداره به کمک روش اجزا محدود

مهناز ذاکری^{۱*}، امید افضل نژاد^۲

اطلاعات مقاله	چکیده
دریافت مقاله: ۱۳۹۲/۰۸/۰۶	
پذیرش مقاله: ۱۳۹۳/۱۲/۰۶	
واژگان کلیدی:	
نانولوله کربنی،	در این پژوهش اثر زاویه کایرال بر رفتار کمانشی نانولوله‌های کربنی تک جداره بررسی می‌شود. برای اینکه اثر زاویه کایرال مستقل از اثر اندازه بررسی گردد از هندسه‌هایی با طول و قطر برابر اما زاویه کایرال متفاوت استفاده شده است. برای مدل کردن پیوندهای شیمیایی بین اتم‌های کربن، انرژی پتانسیل تئوری مکانیک مولکولی با انرژی کرنشی ذخیره شده در یک تیر سه بعدی که اتصال بین دو اتم کربن را مدل می‌کند، برابر قرار داده می‌شود. پس از تعیین خواص المان تیر جایگزین، مختصات گره‌ها (اتم‌های کربن) و المان‌ها به وسیله برنامه‌ای که در نرم افزار متلب تهیه شده است تعیین می‌شود. سپس به کمک نرم افزار انسیس اثر زاویه کایرال بر بار کمانش محوری و پیچشی، برای انواع ساختارها بررسی می‌شود. نتایج نشان می‌دهند که در کمانش محوری، زاویه کایرال بر بار کمانشی چندان تاثیر ندارد اما در حالت بارگذاری پیچشی زاویه کایرال یک پارامتر تأثیرگذار است. نانولوله با زاویه کایرال ۱۹/۱۱ درجه بیشترین مقدار گشتاور بحرانی را دارد. در حالت بارگذاری پیچشی پادساعت‌گرد، نانولوله با زاویه کایرال ۹/۶۴ درجه کمترین مقدار گشتاور بحرانی را دارد. هم‌چنین در حالت پیچشی جهت پیش نیز مهم است به طوری که برای ساختارهایی با زاویه کایرال ۱۵/۴۸ درجه اختلاف بین حالت ساعت‌گرد و پادساعت‌گرد به بیشترین مقدار خود می‌رسد.

کرد. نانولوله‌ها به خاطر هندسه و مشخصات منحصر به فردی که دارند برای کاربردهای مختلفی همچون تیرهای طره‌ای در نوک میکروسکوپ‌های اکتشافی و تجهیزات تشخیص ترک مناسب هستند. اما بار فشاری اعمال شده می‌تواند منجر به کمانش نانولوله شود. در این صورت دقت و کیفیت این وسایل کاهش می‌یابد و بر روی عمل کرد دستگاه هم اثر می‌گذارد. بنابراین نیاز است کمانش نانولوله‌ها با هندسه‌های مختلف تحت بار فشاری بررسی شود. از

۱- مقدمه

پس از کشف نانولوله‌های کربنی در سال ۱۹۹۱ [۱]، این ساختارها به علت خواص فیزیکی ارزشمندی از جمله خواص مکانیکی، گرمایی و الکتریکی ویژه، توجه بسیاری را به خود جلب کردند. از جمله کاربردهای سازه‌ای نانولوله‌های کربنی می‌توان به استفاده آن در نانو کامپوزیت‌ها به دلیل سفتی بسیار بالا و چگالی کم اشاره

* پست الکترونیک نویسنده مسئول: m.zakeri@kntu.ac.ir

۱. استادیار، دانشکده مهندسی هوافضا، قطب طراحی و شبیه‌سازی سامانه‌های فضایی، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی.

۲. کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی هوافضا، قطب طراحی و شبیه‌سازی سامانه‌های فضایی، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی.

بررسی اثرات طول، قطر و شرایط تکیه‌گاهی بر روی کمانش محوری و پیچشی نانولوله‌های کربنی تک جداره، موضوع بسیاری از پژوهش‌های گذشته بوده است، اما اثرات زاویه‌ی کایرال، مستقل از اثرات طول و قطر بر روی کمانش محوری و پیچشی تاکنون بررسی نشده است. در این مقاله، رفتار کمانشی انواع نانولوله‌ها با ساختارهای گوناگون، تحت شرایط بارگذاری محوری و پیچشی مطالعه می‌گردد. ساختارها به گونه‌ای انتخاب شده‌اند که دارای طول و قطر یکسان اما زاویه‌ی کایرال متفاوت از صفر تا ۳۰ درجه هستند. با استفاده از ارتباط بین مکانیک مولکولی و مکانیک محیط پیوسته و به عبارت دیگر با جایگزینی المان تیر به جای پیوندهای کربن-کربن، نانولوله‌های کربنی مدل می-شوند تا با انجام تحلیل عددی اجزای محدود، تاثیر زاویه‌ی کایرال بر پایداری نانولوله‌ها بررسی گردد.

۲- ساختار اتمی نانولوله

هندسه اصلی تشکیل‌دهنده یک نانولوله، بدنه استوانه‌ای آن است که از پیچیده شدن صفحه‌ی گرافیتی با اندازه و جهت معین بدست می‌آید. از آنجا که باید حاصل این پیچش تقارنی استوانه شکل باشد، برای بدست آوردن استوانه بسته فقط می‌توان صفحات را در جهتی خاص پیچاند. بدین منظور دو اتم گرافیت انتخاب می‌شوند، یکی به عنوان مبدا در نظر گرفته می‌شود، سپس صفحه پیچانده می‌شود تا اتم دوم روی اتم اول منطبق گردد. برداری که از اتم مبدا به جهت اتم دوم اشاره می‌کند، بردار کایرال نامیده و به صورت زیر تعریف می‌شود.

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

طول این بردار برابر محیط نانولوله بوده، محور نانولوله عمود بر بردار کایرال است. بیان فرایند لوله شدن از طریق بردارهای یک‌ه‌ی (a_1, a_2) است و (n, m) اعداد صحیحی هستند که ساختار نانولوله را مشخص می‌کنند. سایر اندازه‌های نانولوله مثل محیط، قطر D و زاویه کایرال θ را می‌توان به وسیله‌ی n و m محاسبه کرد. قطر و زاویه کایرال θ (۰ ≤ θ ≤ ۳۰) نانولوله به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$D = \frac{|\vec{C}_h|}{\pi} = \frac{a_c \sqrt{3(n^2 + m^2 + nm)}}{\pi} \quad (2)$$

$$\cos \theta = \frac{2n + m}{\sqrt{3(n^2 + m^2 + nm)}} \quad (3)$$

طرفی نانولوله‌های کایرال به علت ساختار نامتقارن و رفتار متفاوتی که در بارگذاری‌های پیچشی ساعت‌گرد و پاد ساعت‌گرد از خود نشان می‌دهند نیازمند بررسی کمانش پیچشی نیز هستند.

در زمینه بررسی رفتار کمانشی نانولوله‌های کربنی تحقیقات متعددی انجام شده است. هان و لو [۲] با استفاده از روش مکانیک محیط پیوسته کمانش پیچشی نانولوله‌های دوجداره را که در یک محیط الاستیک قرار گرفته بود بررسی کردند. وانگ و همکاران [۳] کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی چندجداره را مطالعه کردند. چانگ و همکاران [۴] میزان کرنش بحرانی را برای نانولوله‌های کربنی زیگزاگ و آرمچیر به دست آوردند. کائو و چن [۵] به کمک شبیه‌سازی اتمی اثرات طول و قطر و کایرالیته را بر رفتار و خواص مکانیکی نانولوله‌ها، بررسی کردند. وانگ و همکاران [۶] کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی را تحت بارگذاری ترکیبی محوری پیچشی مطالعه کردند. ژیاهاو و کیانگ [۷] رفتار کمانشی نانولوله‌های چندجداره و سان و لیو [۸] به کمک دینامیک مولکولی رفتار کمانش نانولوله را که تحت بارگذاری ترکیبی محوری و پیچشی و دارای فشار داخلی است بررسی کردند. یائو و همکاران [۹] رفتار کمانشی نانولوله‌های کربنی تک جداره، دوجداره و چند جداره را به کمک روش اجزا محدود، تحت بار خمشی بررسی کردند. قربان‌پور و همکاران [۱۰] از نرم‌افزار ANSYS کمک گرفته و با استفاده از المان پوسته، نانولوله‌های کربنی زیگزاگ و آرمچیر را مدل‌سازی کردند. کانگ و همکاران [۱۱] کمانش نانولوله‌های کربنی تحت بار فشاری محوری را به کمک دو روش مکانیک مولکولی و روش اجزا محدود محاسبه کردند. انصاری و روحی [۱۲] به کمک روش اجزا محدود تأثیر شرایط مختلف مرزی را بر بار کمانشی نانولوله‌های کربنی بررسی کردند. ساودرا و همکاران [۱۳] نیز به کمک روش اجزا محدود هایپر الاستیک کمانش نانولوله‌ی کربنی تک‌جداره را بررسی کردند. انصاری و همکاران [۱۴] نانولوله تک جداره را در محیطی تحت تاثیر شرایط دمایی و بار فشاری بررسی کردند. قوامیان و آکتر [۱۵] در بررسی خود اثرات عیوب را بر بار کمانشی نانولوله‌های کربنی تک جداره و چندجداره، برای دو نوع زیگزاگ و آرمچیر بررسی کردند. شیمشک و یورتسو [۱۶] به کمک نظریه تیر تیموشنکو غیر موضعی رفتار کمانشی و خمشی نانولوله‌ها را بررسی کردند.

۳- مبانی مکانیک مولکولی و شبیه‌سازی اجزای محدود

روش مدل‌سازی محیط پیوسته معادل (ECM) یکی از پیشرفته‌ترین روش‌های محیط پیوسته است. این روش به عنوان روشی کارآمد به خصوص برای شبیه‌سازی ساختارهای نانو در مقیاس بزرگ در نظر گرفته شده است. روش محیط پیوسته معادل از ترکیب روش‌های مکانیک مولکولی و اجزاء محدود ایجاد شده است.

در سطح مولکولی، برهم کنش بین اتم‌ها بر اساس انرژی‌های پتانسیل مولکولی توصیف می‌گردد. شکل ۳ تغییر شکل‌های ممکن بین پیوندهای کربنی را نمایش می‌دهد. برای مطالعه شبکه مولکولی تحت تغییر شکل‌های کوچک، انرژی پتانسیل پیوندی بین اتم‌ها را می‌توان با توابع پتانسیل غیرخطی و یا توابع خطی هارمونیک تخمین زد. با توجه به کوچک بودن تغییر شکل‌ها، در این پژوهش از توابع پتانسیل هارمونیک برای انرژی پتانسیل بین اتم‌ها استفاده می‌شود که براساس روابط زیر بیان می‌گردند [۱۹].

$$E_{total} = E_{bonded} + E_{nonbonded} \quad (۴)$$

$$E_{bonded} = E_s + E_b + E_t + E_l \quad (۵)$$

$$E_{nonbonded} = E_{vdw} + E_{es} + E_{hb} \quad (۶)$$

در روابط بالا E_l ، E_t ، E_b ، E_s ، $E_{nonbonded}$ ، E_{bonded} ، E_{vdw} ، E_{es} و E_{hb} به ترتیب عبارتند از؛ انرژی پیوندی، انرژی غیر پیوندی، انرژی پتانسیل کششی، خمشی، پیچشی، خارج صفحه‌ای، نیروهای واندروالس، نیروهای الکترواستاتیکی و پیوندهای هیدروژنی.

برای ساده‌سازی روابط، معمولاً از انرژی‌های $E_{nonbonded}$ که شامل انرژی نیروهای واندروالس، نیروهای الکترواستاتیکی و پیوندهای هیدروژنی و E_l صرف نظر می‌شود. در این صورت:

$$E_{tot} = E_s + E_b + E_t \quad (۷)$$

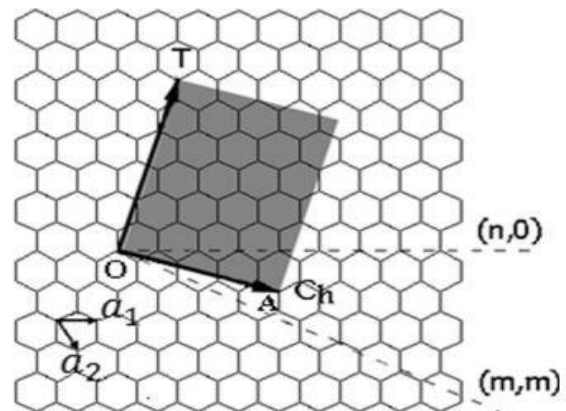
که در آن:

$$E_s = \frac{1}{V} k_r (\Delta r)^2 \quad (۸)$$

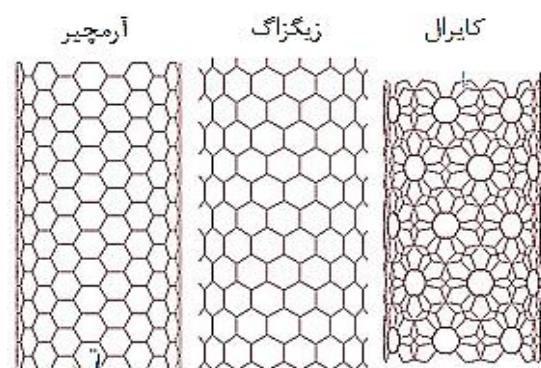
$$E_b = \frac{1}{V} k_\theta (\Delta \theta)^2 \quad (۹)$$

$$E_t = \frac{1}{V} k_\phi (\Delta \phi)^2 \quad (۱۰)$$

در رابطه ۲، a_{c-c} طول پیوند کربن-کربن است که برابر ۰/۱۴۲ نانومتر می‌باشد [۱۷]. از آنجا که نانولوله نتیجه پیچیده شدن ورق گرافن است، دیواره آن دارای یک تقارن محوری است که می‌تواند با یک حالت مارپیچی که کایرالیته نامیده می‌شود، همراه شود. در نانولوله‌ی زیگزاگ با زاویه کایرال ۰ درجه و نانولوله‌ی آرمچیر با زاویه کایرال ۳۰ درجه حالت مارپیچ وجود ندارد. اما سایر ساختارها که زاویه بین صفر و ۳۰ درجه دارند، حالت مارپیچ داشته و کایرال نامیده می‌شوند. نانولوله‌هایی با ساختار (n, n) با زاویه کایرال ۳۰ درجه، آرمچیر و با ساختار $(n, 0)$ با زاویه کایرال صفر درجه، زیگزاگ نامیده می‌شوند. نانولوله‌هایی با ساختارهای غیر منظم (n, m) که $n > m$ و زاویه مارپیچ $0 < \theta < 30$ را کایرال می‌نامند. شکل ۱ صفحه‌ی گرافن، بردار و زاویه کایرال و شکل ۲ نمونه‌هایی از انواع ساختار نانولوله‌ها شامل بر زیگزاگ، آرمچیر و کایرال را نشان می‌دهد.



شکل ۱- بردار و زاویه کایرال در یک صفحه گرافن [۱۸]



شکل ۲- انواع ساختارهای نانولوله‌های تک جداره

$$U_{Bending} = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = \frac{\nu EI}{L} \alpha^2 \quad (16)$$

$$U_{Torsion} = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{1}{2} \frac{T^2 L}{GJ} \quad (17)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\Delta\beta)^2$$

در روابط (۱۰-۸) و (۱۷-۱۵) ملاحظه می‌شود که E_s و $U_{Axial force}$ انرژی ناشی از کشش، E_b و $U_{Bending}$ انرژی ناشی از خمش و E_t و $U_{Torsion}$ انرژی ناشی از پیچش پیوندهای کربنی و المان تیر هستند. با معادل گرفتن ΔL با Δr ، α با θ و $\Delta\beta$ با $\Delta\varphi$ در این روابط، معادلات زیر بدست می‌آید.

$$k_r = \frac{EA}{L} \quad (18)$$

$$k_\theta = \frac{EI}{L} \quad (19)$$

$$k_\varphi = \frac{GJ}{L} \quad (20)$$

با فرض سطح مقطع دایروی به قطر d برای المان تیر مفروض و $L = a_{c-c} = 0.142 \text{ nm}$ و محاسبه مشخصات مقطع به صورت $A = \frac{\pi d^2}{4}$ ، $I = \frac{\pi d^4}{64} = \frac{J}{2}$ ، مشخصات مکانیکی و هندسی المان تیر جایگزین پیوندها برابر است با [۱۷]:

$$d = \sqrt[4]{\frac{k_\theta}{k_r}} = 0.14662 \text{ nm} \quad (21)$$

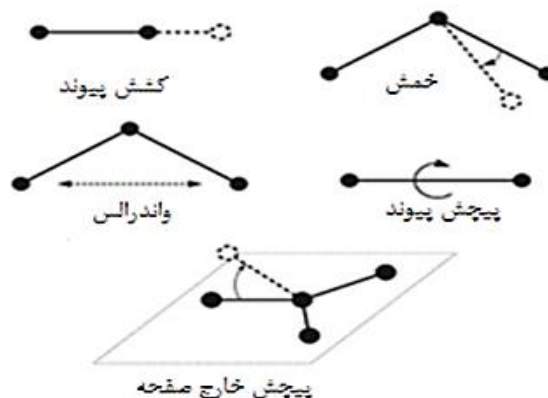
$$E = \frac{Lk_r}{\nu \pi k_\theta} = 5.488 \text{ TPa} \quad (22)$$

$$G = \frac{k_r k_\varphi L}{\lambda \pi k_\theta} = 0.871 \text{ TPa} \quad (23)$$

در این پژوهش برای مدل‌سازی پیوند میان اتم‌های کربن نانولوله از المان تیر خطی $^4\text{BEAM}$ در نرم افزار ANSYS استفاده شده است. این المان یک المان الاستیک سه بعدی و دو گرهی با قابلیت تحلیل بارهای کششی فشاری، پیچشی و خمشی است که در هر گره دارای شش درجه آزادی است [۲۱].

$$E_{tot} = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2 + \frac{1}{2} k_\theta (\Delta\theta)^2 + \frac{1}{2} k_\varphi (\Delta\varphi)^2 \quad (11)$$

در این روابط k_r ، k_θ و k_φ به ترتیب معرف ثوابت نیرویی کشش پیوند، خمش پیوند و پیچش پیوند هستند. $\Delta\theta$ ، Δr و $\Delta\varphi$ نیز به ترتیب نماینده تغییرات طول پیوند، زاویه داخل صفحه‌ای پیوند و پیچش خارج صفحه پیوند هستند.



شکل ۳- تغییر شکل‌های بین اتمی [۱۹]

برای ثوابت نیرویی فوق می‌توان از مقادیر زیر استفاده کرد [۱۷]:

$$k_r = 652 \frac{nN}{nm} \quad (12)$$

$$k_\theta = 0.876 \text{ nN} \frac{nm}{rad^2} \quad (13)$$

$$k_\varphi = 0.278 \text{ nN} \frac{nm}{rad^2} \quad (14)$$

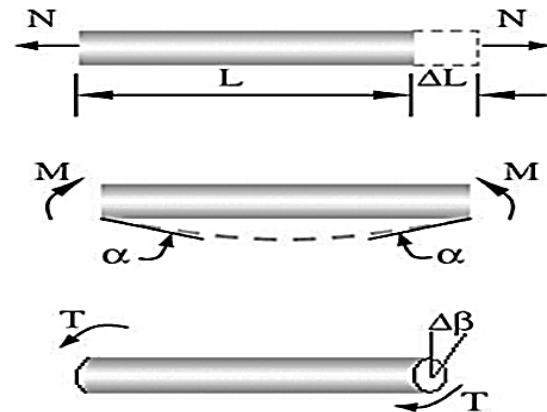
لی و چو [۲۰] تساوی بین انرژی پتانسیل بین مولکولی در محاسبات علم شیمی و انرژی کرنشی در مکانیک ساختاری را برقرار کردند. آنها با این روش، رابطه‌ای مستقیم بین پارامترهای مکانیک ساختاری و ثوابت میدان نیرویی مکانیک مولکولی ایجاد کردند. طبق تحقیقات ایشان روابط انرژی کرنشی ذخیره شده در تیر تحت بارگذاری‌های خالص کشش، خمش و پیچش (شکل ۴) عبارتند از [۲۰]:

$$U_{Axial force} = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = \frac{1}{2} \frac{N^2 L}{EA} \quad (15)$$

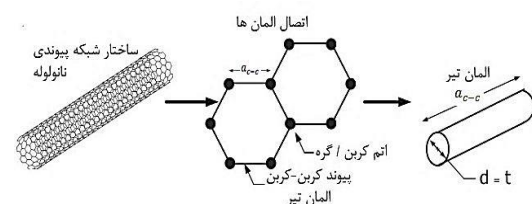
$$= \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (\Delta L)^2$$

جدول ۱- مشخصات ساختاری نانولوله‌های مدل شده

زاویه کایرال	نسبت منظری	طول (A)	قطر (A)	نوع ساختار
۰	۸/۰۰	۱۶۳	۲۰/۳۵	(۲۶،۰)
۱/۸۷	۷/۸۵	۱۶۳	۲۰/۷۵	(۲۶،۱)
۳/۸۱	۷/۹۹	۱۶۳	۲۰/۴۰	(۲۵،۲)
۵/۵۹	۷/۸۱	۱۶۳	۲۰/۸۴	(۲۵،۳)
۷/۵۸	۷/۹۴	۱۶۳	۲۰/۵۳	(۲۴،۴)
۹/۶۳	۸/۰۴	۱۶۳	۲۰/۲۴	(۲۳،۵)
۱۱/۳۰	۷/۸۵	۱۶۳	۲۰/۲۴	(۲۳،۶)
۱۳/۳۷	۷/۹۴	۱۶۳	۲۰/۵۲	(۲۲،۷)
۱۵/۴۸	۸/۰۲	۱۶۳	۲۰/۳۱	(۲۱،۸)
۱۷/۶۴	۸/۰۹	۱۶۳	۲۰/۱۲	(۲۰،۹)
۱۹/۱۰	۷/۸۶	۱۶۳	۲۰/۷۱	(۲۰،۱۰)
۲۱/۲۴	۷/۹۲	۱۶۳	۲۰/۵۷	(۱۹،۱۱)
۲۳/۴۱	۷/۹۶	۱۶۳	۲۰/۴۷	(۱۸،۱۲)
۲۵/۵۹	۷/۹۹	۱۶۳	۲۰/۴۰	(۱۷،۱۳)
۲۷/۷۹	۸/۰۰	۱۶۳	۲۰/۳۵	(۱۶،۱۴)
۳۰	۸/۰۱	۱۶۳	۲۰/۳۴	(۱۵،۱۵)



شکل ۴- تغییر شکل‌های المان تیر [۲۰]



شکل ۵- جایگزینی پیوندها و اتم‌های کربن با عناصر المان محدود [۱۹]

برای بررسی اثر زاویه کایرال بر کمانش محوری نانولوله‌های کربنی، تمام گره‌های یک طرف نانولوله را بسته و در طرف دیگر آن بر گره مرجعی که تعریف شده است بار فشاری به مقدار ۱ نانونیوتن وارد می‌شود. بارگذاری بر گره مرجع، که در شکل ۶ نشان داده شده است باعث می‌شود بار به صورت یکنواخت بر تمام گره‌ها اعمال و از ایجاد تمرکز تنش به علت تمرکز بار بر روی تک تک گره‌ها جلوگیری شود. شکل ۷ نمونه‌ای از مدل‌های نانولوله‌ای ایجاد شده در محیط انسیس را با شرایط مرزی و بارگذاری اعمالی نشان می‌دهد. پس از اینکه شرایط مورد نظر ساختارهای مختلف اعمال شد تحلیل عددی انجام شده و مقدار بار کمانش محوری ثبت می‌گردد. برای بررسی کمانش پیچشی نانولوله‌ها نیز از ساختارهای موجود در جدول ۱ استفاده می‌شود و هنگام بارگذاری بر گره مرجع به جای بار فشاری، گشتاور پیچشی به اندازه‌ی ۰/۱ نانونیوتن-نومتر اعمال می‌گردد. برای اعمال پیچش ساعت‌گرد، گشتاور به صورت مقدار منفی (۰/۱-) و برای جهت پادساعت‌گرد مقدار مثبت آن در نظر گرفته می‌شود.

۴- مدل‌سازی رفتار کمانشی انواع نانولوله‌های کربنی

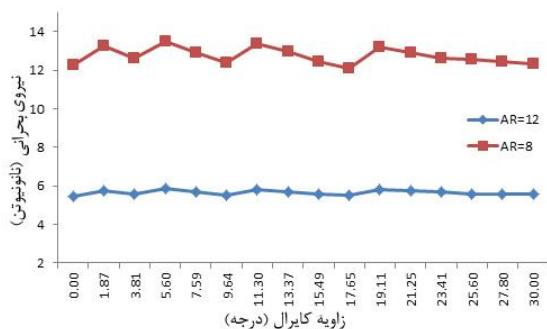
برای مدل‌سازی رفتار کمانشی نانولوله‌ها، ابتدا مدل هندسی شامل موقعیت گره‌ها (اتم‌های کربن) و المان‌های متصل به آنها در محیط نرم‌افزار MATLAB ایجاد شده و نتایج آن در محیط ANSYS فراخوانی شده و سپس بارگذاری و شرایط مرزی اعمال می‌گردد.

جدول ۱ مشخصات نانولوله‌های مدل شده در این پژوهش را نشان می‌دهد. تمام ساختارها طوری انتخاب شده‌اند که دارای طول و قطر یکسان باشند تا در مرحله تحلیل، اثرات طول و قطر حذف شده و فقط تاثیر زاویه کایرال مشخص گردد. در این بررسی از نانولوله‌های کوتاه، متوسط و بلند با نسبت‌های منظری ۳، ۸، ۱۲، به ترتیب با طول‌های ۶۲، ۱۶۳ و ۲۴۰ انگستروم متر استفاده شده است. برای افزایش نسبت منظری نانولوله‌ها، قطر نانولوله‌ها ثابت نگه داشته شده و فقط طول آن‌ها افزایش یافته است.

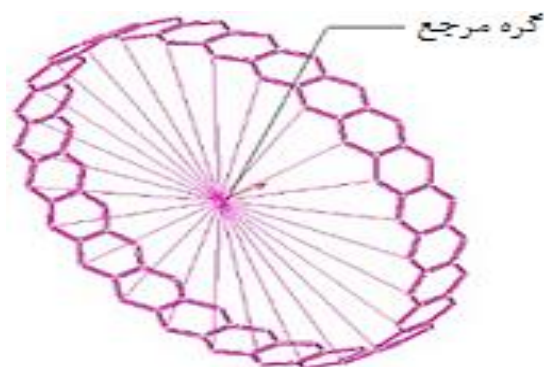
۵-۱- تأثیر زاویه کایرال بر کمانش محوری

همان‌طور که پیش از این بیان شد، برای اینکه تأثیر زاویه کایرال از اثر سایر پارامترها چون طول و قطر تفکیک شود، ساختارهایی انتخاب شده‌اند که همگی دارای طول و قطر-یکسان اما زاویه‌ی کایرال متغیر از صفر تا ۳۰ درجه هستند. نتایج تحلیل‌ها نشان می‌دهد که در کمانش محوری، نوع اولین مود کمانشی که اتفاق می‌افتد وابسته به نسبت منظری نانولوله است. برای نانولوله‌های بلند و متوسط مد کمانش کلی (اویلری) و برای نانولوله‌های کوتاه مد کمانش موضعی (مقارن یا غیر اویلری) اتفاق می‌افتد. شکل‌های ۸ و ۹ تغییرات نیروی بحرانی مربوط به هر یک از مدهای کلی و موضعی را برای نسبت‌های منظری مختلف با تغییر کایرالیته ساختارها نشان می‌دهند.

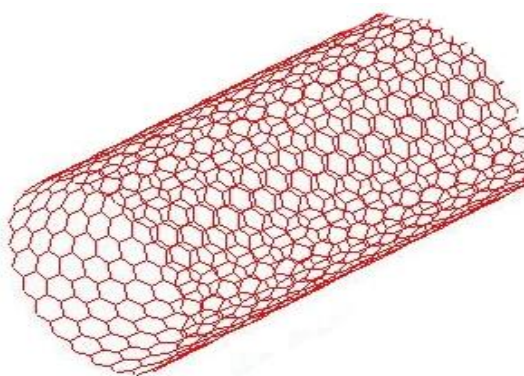
همان‌طور که از نمودار شکل‌های ۸ و ۹ مشخص می‌شود اثر زاویه کایرال بر بار کمانش محوری نانولوله‌های کربنی ناچیز و قابل نظر است به طوری که با تغییرات زاویه کایرال از ۰ تا ۳۰ درجه، بار بحرانی دچار تغییرات قابل توجهی نمی‌شود. از طرفی با دقت در شکل ۸ مشاهده می‌شود که با کاهش نسبت منظری (کاهش طول) مقدار بار بحرانی از مقدار تقریبی ۶ نانونیوتن برای نسبت منظری ۱۲ به مقدار تقریبی ۱۲ نانونیوتن برای نسبت منظری ۸ رسیده و تقریباً دو برابر شده است. هم‌چنین دیده می‌شود که با کاهش نسبت منظری، اثرات کایرالیته محسوس‌تر می‌گردد، طوری که تغییرات آن به حدود ۱۰ درصد می‌رسد. نکته قابل توجه دیگر این است که مد کمانش کلی تنها برای نانولوله‌ها با نسبت‌های منظری ۸ و ۱۲ مشاهده شده و برای نانولوله‌های کوتاه با نسبت منظری ۳، مد اویلری در مقادیر بالاتری از بار بحرانی اتفاق می‌افتد.



شکل ۸- نمودار تغییرات بار بحرانی با زاویه‌ی کایرال در اولین مد کمانش کلی



شکل ۶- استفاده از یک گره مرجع برای اعمال یکنواخت بارگذاری‌ها در انتهای نانولوله

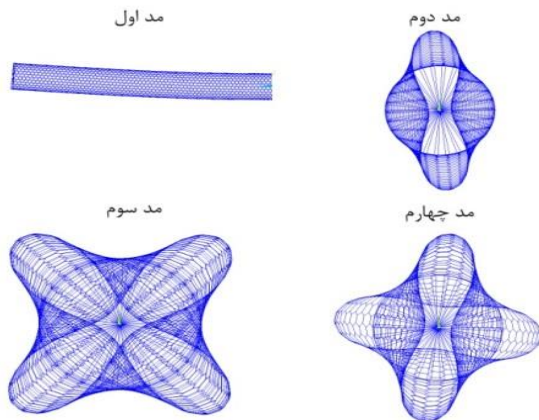


شکل ۷- مدل اجزا محدود نانولوله زیگزاگ (۲۶،۰) در نرم‌افزار انسیس

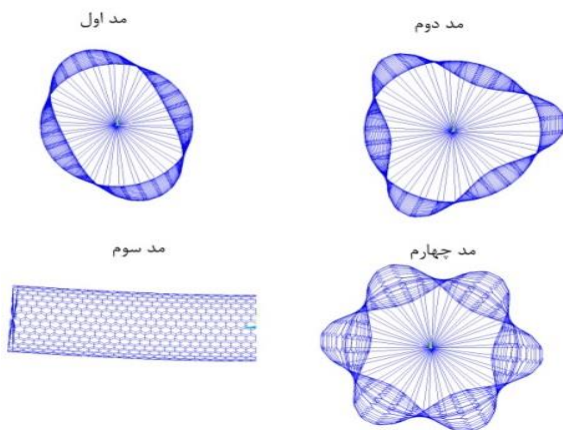
۵- بحث و بررسی نتایج

کمانش یک پدیده ناپایداری سازه است که در شرایط بارگذاری مختلف به وجود می‌آید. این پدیده زمانی اتفاق می‌افتد که بار اعمالی به سازه به میزان بحرانی برسد و باعث ایجاد تغییر شکل‌های بزرگ در سازه شود که این امر می‌تواند تأثیر زیادی بر روی رفتار سازه بگذارد. مقاومت کمانشی به عوامل زیادی بستگی دارد که این عوامل ممکن است مربوط به شرایط تکیه‌گاهی، شرایط بارگذاری و یا شرایط هندسی سازه باشد.

کمانش معمولاً در سازه‌های تحت بارگذاری فشاری اتفاق می‌افتد اما ممکن است در برخی از شرایط بارگذاری همچون بارهای پیچشی، خمشی و حتی حرارتی نیز رفتار کمانشی از سازه مشاهده شود. در این بخش به ارائه و بررسی نتایج بدست آمده برای کمانش نانولوله‌ها پرداخته می‌شود. در بخش اول اثر زاویه‌ی کایرال بر کمانش محوری و در بخش دوم تأثیر زاویه‌ی کایرال بر کمانش پیچشی بررسی می‌گردد.

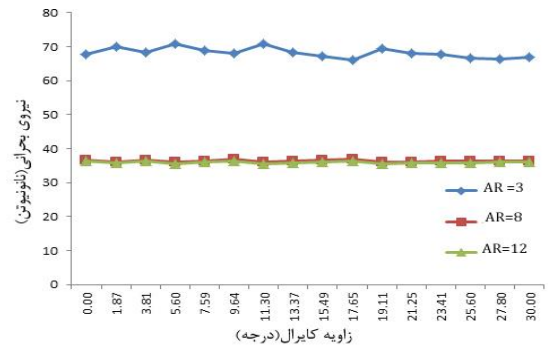


شکل ۱۱- چهار مد اول کمانش محوری نانولوله آرمچیر با نسبت منظری ۸



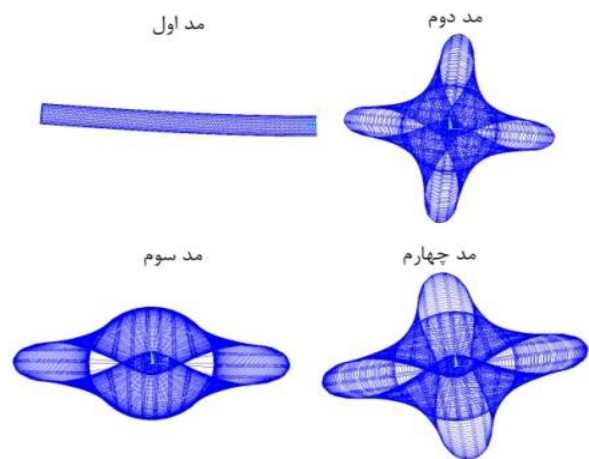
شکل ۱۲- چهار مد اول کمانش محوری نانولوله آرمچیر با نسبت منظری ۳

انصاری و روحی [۱۲] به کمک روش اجزا محدود و نرم افزار انسیس کمانش نانولوله‌های کربنی را بررسی کردند. ایشان برای مدل‌سازی پیوندها از المان تیر و برای اتم‌های کربن از المان جرم متمرکز استفاده کردند. قوامیان و همکارش [۱۵] به کمک روشی بر پایه روش عددی اجزا محدود، و با استفاده از توابع غیر خطی و المان فنر نانولوله-های کربنی را مدل‌سازی کردند. چن و همکاران [۲۲] برای انجام مدل‌سازی خود از روش اجزا محدود استفاده و کمانش نانولوله‌ها را به کمک نرم افزار انسیس و با استفاده از المان تیر بررسی کرده‌اند. به منظور بررسی صحت این مدل‌سازی و نتایج حاصل از این پژوهش، در جدول ۲، مقادیر بار کمانش ساختارهای مختلف با نتایج قابل دسترس در پژوهش‌های پیشین مقایسه شده است. اختلاف ناچیز بین این نتایج، موید صحت مدل‌سازی انجام گرفته در این تحقیق است.



شکل ۹- نمودار تغییرات بار بحرانی با زاویه کایرال در اولین مود کمانش موضعی

شکل ۹ تغییرات بار بحرانی اولین مد کمانش موضعی با زاویه کایرال را نمایش می‌دهد. مشاهده می‌شود که بیشترین مقدار بار بحرانی به ازای نسبت منظری ۳ است و برای نسبت‌های منظری ۸ و ۱۲ مقدار بار اولین مد کمانش موضعی با هم برابر و بر یکدیگر منطبق شده است. شکل‌های ۱۰ تا ۱۲ چهار مد اول کمانش نانولوله آرمچیر را برای نسبت‌های منظری ۱۲، ۸ و ۳ نشان می‌دهد. همان طور که از شکل‌ها مشخص است اولین مود کمانشی که برای نسبت‌های منظری ۱۲ و ۸ اتفاق افتاده است از نوع اولی و برای نسبت منظری ۳ از نوع موضعی است.



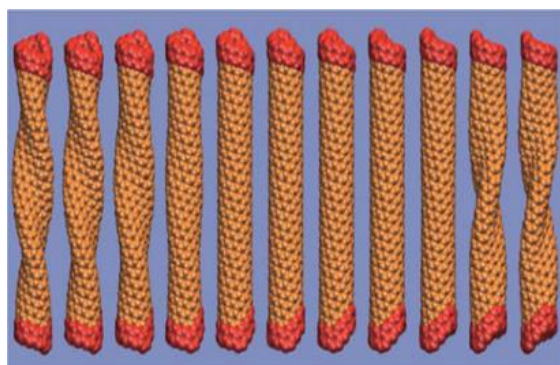
شکل ۱۰- چهار مد اول کمانش محوری نانولوله آرمچیر با نسبت منظری ۱۲

جدول ۲- مقایسه نتایج پژوهش حاضر با کارهای گذشته

نوع ساختار	نسبت منظری	مرجع [۲۲]	مرجع [۱۵]	مرجع [۱۲]	پژوهش حاضر
(۱۰،۱۰)	۱/۱۱	۱۴۱	---	---	۱۴۰/۹۴
(۱۰،۱۰)	۴/۰۶	۵۹	---	---	۵۸/۰۶
(۱۰،۱۰)	۱۲/۶۸	۴۰	---	---	۴۱/۳۱
(۵۰،۰)	۳/۲۴	۴۸	---	---	۴۶/۹۳
(۱۳،۰)	۵/۸۹	۶۹	---	---	۶۸/۹۳
(۶،۰)	۱۲/۷۷	۱۵	---	---	۱۴/۹۵
(۱۰،۱۰)	۱۱/۶	---	۳/۹۲	---	۳/۹۸۵
(۱۴،۰)	۱۴/۲۵	---	۲/۰۶۲	---	۲/۰۶۹
(۵،۵)	۲	---	---	۱۰۰	۱۰۶/۹۶
(۲۶،۰)	۷	---	---	۲۰	۲۲/۹۸
(۵۱،۰)	۷	---	---	۳۹	۳۷/۲

تحمل تنش‌های محیطی تغییر می‌یابد. بنابراین در هر زاویه کایرالی که المان‌ها در جهت محیطی موثرتر باشند، پایداری بیشتری وجود خواهد داشت.

از نمودارهای تغییرات گشتاور بحرانی با زاویه کایرال برای هر سه نسبت منظری مشاهده می‌شود گشتاور بحرانی به ازای ساختار ۹/۶۴ درجه در حالت بارگذاری پیچشی پاد ساعت‌گرد کمترین مقدار را در بین ساختارها دارد. این در حالیست که در حالت ساعت‌گرد کمترین مقدار گشتاور بحرانی مربوط به نانولوله‌های زیگزاگ می‌باشد. همچنین بیشترین مقدار گشتاور بحرانی در بین تمام ساختارها، به ازای زاویه کایرال ۱۹/۱۱ است و این ساختار در برابر پیچش پایداری بیشتری دارد.



شکل ۱۳- تغییر شکل نانولوله (۸و۳) تحت پیچش‌های راست-گرد و چپ‌گرد. [۲۳]

۵-۲- تأثیر زاویه کایرال بر کمانش پیچشی

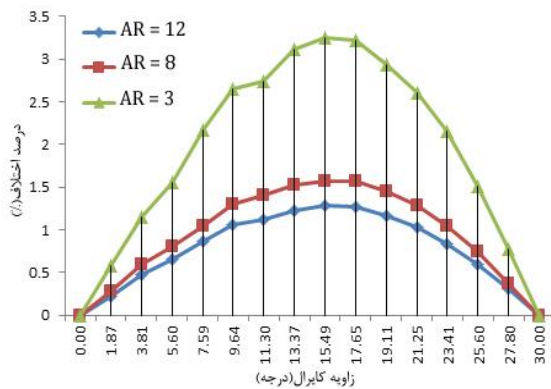
همانند شرایط بارگذاری محوری، نانولوله‌های کربنی تحت پیچش نیز دچار یک ناپایداری و تغییر شکل ناگهانی مارپیچی با محور مستقیم می‌شوند. اما تفاوت اساسی آن با سایر شرایط بارگذاری در این است که در حالت پیچش، گشتاور پیچشی بحرانی نانولوله به جهت بارگذاری که راست گرد یا چپ گرد باشد، وابسته است. این وابستگی به جهت بار به آن دلیل است که به علت ساختار کایرال نانولوله، تقارن پیچشی حول محور نانولوله از بین می‌رود. شکل ۱۳ تغییر شکل نانولوله (۸و۳) را تحت پیچش نشان می‌دهد. در این شکل با تغییر تدریجی مقدار پیچش راست‌گرد به چپ‌گرد از سمت چپ به سمت راست تصویر، تأثیر جهت پیچش بر تغییر شکل نانولوله در دو حالت ملاحظه می‌شود [۲۳]. در این بخش، تأثیر زاویه کایرال بر رفتار کمانش پیچشی نانولوله‌ها مورد بررسی قرار گرفته است. بدین منظور، از ساختارهای موجود در جدول ۱ استفاده شده است.

شکل‌های ۱۴ تا ۱۶ نمودارهای حاصل از بررسی اثر زاویه کایرال بر گشتاور پیچشی بحرانی را برای نسبت‌های منظری ۱۲، ۸ و ۳ نشان می‌دهد. ملاحظه می‌شود که در نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر مقادیر پیچش بحرانی در دو جهت مختلف با هم برابر است. این امر به علت تقارن هندسی دو ساختار است. اما در مورد کمانش پیچشی نانولوله‌های کایرال، تغییرات گشتاور بحرانی با افزایش زاویه کایرال روند یکنواختی را نشان نمی‌دهد. در واقع با تغییر زاویه کایرال، جهت‌گیری المان‌ها تغییر یافته و تأثیر آنها در

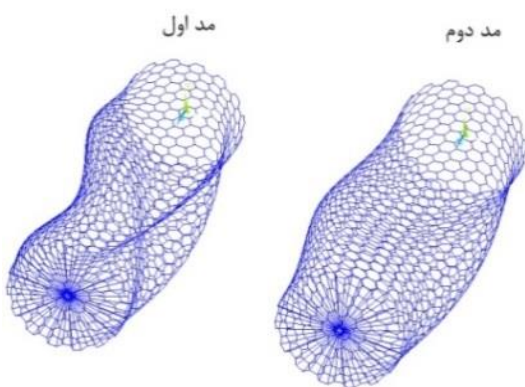
قرارگیری المان‌های بیشتر در راستای محیطی نانولوله در این ساختارها دانست.

در شکل ۱۷ اختلاف بین گشتاور پیچشی بحرانی در دو حالت بارگذاری راست‌گرد و چپ‌گرد برای هر سه نسبت منظری بررسی شده است. ملاحظه می‌شود که هر چه نسبت منظری افزایش پیدا می‌کند میزان اختلاف گشتاور بحرانی راست‌گرد و چپ‌گرد کاهش می‌یابد. زیرا در طول‌های بلند، تاثیرات طول بر کایرالیته غلبه کرده و همین امر باعث کاهش اختلاف دو حالت است.

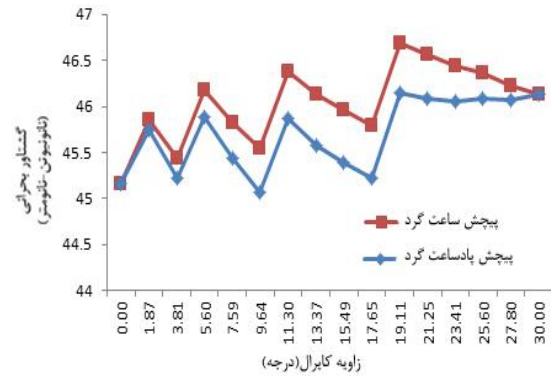
شکل‌های ۱۸ تا ۲۰ تغییر مد کمانشی اول و دوم نانولوله آرمچیر با تغییر نسبت منظری را نشان می‌دهند. از طرفی به ازای هر سه نسبت منظری، در زاویه ۱۵/۴۹ بیشترین میزان اختلاف وجود دارد که علت این امر را می‌توان به جهت‌گیری المان‌ها در ساختاری با این زاویه کایرال مرتبط دانست.



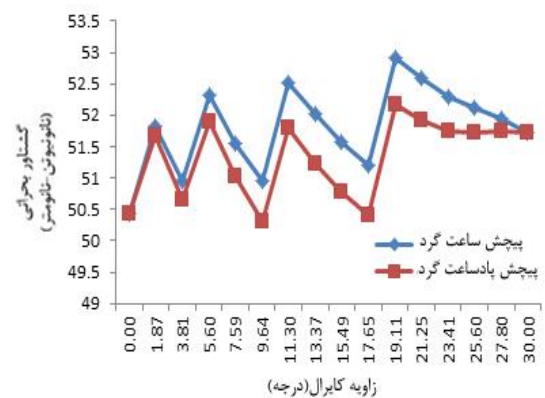
شکل ۱۷- نمودار اختلاف بین گشتاور پیچشی بحرانی در دو حالت بارگذاری راست‌گرد و چپ‌گرد برای سه نسبت منظری



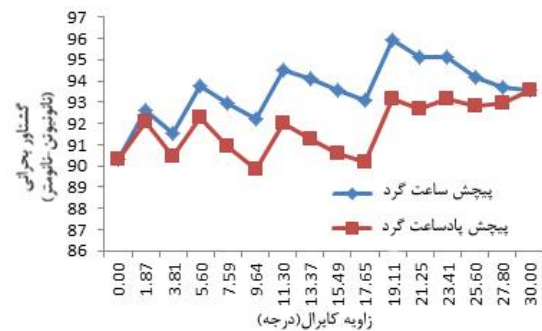
شکل ۱۸- مدهای کمانش پیچشی نانولوله آرمچیر با نسبت منظری ۳



شکل ۱۴- نمودار تغییرات گشتاور بحرانی با زاویه کایرال (نسبت منظری ۱۲)



شکل ۱۵- نمودار تغییرات گشتاور بحرانی با زاویه کایرال (نسبت منظری ۸)

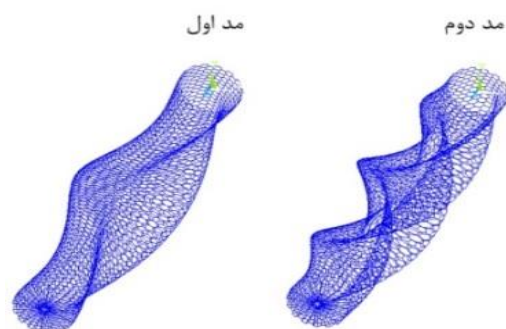


شکل ۱۶- نمودار تغییرات گشتاور بحرانی با زاویه کایرال (نسبت منظری ۳)

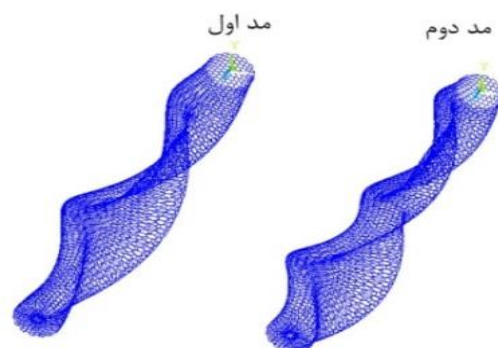
نمودار گشتاور بحرانی به ازای هر سه نسبت منظری نشان می‌دهد که میزان گشتاور بحرانی برای نانولوله‌های آرمچیر بیشتر از زیگزاگ است. به عبارت دیگر ساختار آرمچیر در برابر پیچش پایدارتر است که این امر را می‌توان متأثر از

در مطالعه رفتار کمانش پیچشی مشاهده شد که تغییر پایداری نانولوله با تغییرات کایرالیته روند یکنواختی ندارد اما نانولوله‌ی آرمچیر از زیگزاگ قوی‌تر بوده است. بیشترین مقدار گشتاور بحرانی به ازای زاویه کایرال ۱۹/۱۱ است که نشان دهنده پایداری بیشتر آن در بین انواع ساختارها است. همچنین در حالت بارگذاری پادساعت‌گرد، کمترین مقدار گشتاور پیچشی بحرانی مربوط به نانولوله با زاویه کایرال ۹/۶۴ درجه است.

بیشترین اختلاف بین دو حالت بارگذاری پیچشی راست گرد و چپ‌گرد نیز مربوط به ساختار کایرال ۱۵/۴۹ درجه است که می‌توان این ساختار را ساختاری مناسب برای ساخت سنسورها و المان‌های پیچشی دانست.



شکل ۱۹- مدهای کمانش پیچشی نانولوله آرمچیر با نسبت منظری ۸



شکل ۲۰- مدهای کمانش پیچشی نانولوله آرمچیر نسبت منظری ۱۲

۶- نتیجه‌گیری و جمع بندی

در این مقاله با استفاده از روش اجزای محدود به بررسی رفتار کمانش محوری و پیچشی نانولوله‌های کربنی پرداخته شد. برای شبیه‌سازی نانولوله‌ها، المان تیر خطی به عنوان جایگزین پیوندهای کربن-کربن به کار برده شد. در بررسی اثرات زاویه کایرال بر رفتار کمانش محوری و پیچشی نانولوله‌ها این نتیجه حاصل شد که در کمانش محوری پارامترهای طول و قطر بیشترین تاثیر را بر بار بحرانی دارند و تغییرات کایرالیته اثر قابل توجهی بر روی نانولوله‌ها در نسبت‌های منظری بالا ندارد. اما در نسبت‌های منظری پایین، اثرات کایرالیته محسوس‌تر می‌شود. همچنین مشاهده شد که به ازای نسبت‌های منظری پایین مد کمانشی موضعی و برای نسبت‌های منظری بالا مد کمانش کلی (اویلری) اولین مد کمانشی است که اتفاق می‌افتد.

۷- مراجع

- [1] Iijima, S. (1991). "Helical microtubules of graphitic carbon". *Nature* 354, 56-58.
- [2] Han, Q., and Lu, G. (2003). "Torsional buckling of a double-walled carbon nanotube embedded in an elastic medium". *European Journal of Mechanics-A/Solids* 22, 875-883
- [3] Wang, X., Yang, H., and Dong, K. (2005). "Torsional buckling of multi-walled carbon nanotubes". *Materials Science and Engineering: A* 404, 314-322.
- [4] Chang, T., Li, G., and Guo, X. (2005). "Elastic axial buckling of carbon nanotubes via a molecular mechanics model". *Carbon* 43, 287-294.
- [5] Cao, G., and Chen, X. (2007). "The effects of chirality and boundary conditions on the mechanical properties of single-walled carbon nanotubes". *International Journal of Solids and Structures* 44, 5447-5465
- [6] Wang, X., Lu, G., and Lu, Y. (2007). "Buckling of embedded multi-walled carbon nanotubes under combined torsion and axial loading". *International journal of solids and structures* 44, 351-336.
- [7] Xiaohu, Y., and Qiang, H. (2007). "Investigation of axially compressed buckling of a multi-walled carbon nanotube under temperature field". *Composites science and technology* 67, 125-134
- [8] Sun, C., and Liu, K. (2008). "Combined torsional buckling of multi-walled carbon nanotubes coupling with axial loading and radial pressures". *International journal of solids and structures* 45, 2128-2139.
- [9] Yao, X., Han, Q., and Xin, H. (2008). "Bending buckling behaviors of single-and multi-walled carbon nanotubes". *Computational Materials Science* 43, 579-590.
- [10] Ghorbanpour Arani, A., Rahmani, R., and Arefmanesh, A. (2008). "Elastic buckling analysis of single-walled carbon nanotube under combined loading by using the ANSYS software". *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 40, 2390-2395.
- [11] Kang, Z., Li, M., and Tang, Q. (2010). "Buckling behavior of carbon nanotube-based intramolecular junctions under compression: Molecular dynamics simulation and finite element analysis". *Computational Materials Science* 50, 253-259.
- [12] Ansari, R., and Rouhi, S. (2010). "Atomistic finite element model for axial buckling of single-walled carbon nanotubes". *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 43, 58-69.
- [13] Saavedra Flores, E., Adhikari, S., Friswell, M., and Scarpa, F. (2011). "Hyperelastic axial buckling of single wall carbon nanotubes". *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 44, 525-529.
- [14] Ansari, R., Sahmani, S., and Rouhi, H. (2011). "Axial buckling analysis of single-walled carbon nanotubes in thermal environments via the Rayleigh–Ritz technique". *Computational Materials Science* 50, 3050-3055.
- [15] Ghavamian, A., and Öchsner, A. (2012). "Numerical investigation on the influence of defects on the buckling behavior of single-and multi-walled carbon nanotubes". *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 46, 241-249.
- [16] Şimşek, M., and Yurtcu, H. (2013). "Analytical solutions for bending and buckling of functionally graded nanobeams based on the nonlocal Timoshenko beam theory". *Composite Structures* 97, 378-386.
- [17] Tserpes, K., and Papanikos, P. (2005). "Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes". *Composites Part B: Engineering* 36, 468-477.
- [18] Lu, X., and Hu, Z. (2012). "Mechanical property evaluation of single-walled carbon nanotubes by finite element modeling". *Composites Part B: Engineering* 43, 1902-1913.
- [19] Wernik, J., and Meguid, S. (2011). "Multiscale modeling of the nonlinear response of nano-reinforced polymers". *Acta Mechanica* 217, 1-16.
- [20] Li, C., and Chou, T.W. (2003). "A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes". *International Journal of Solids and Structures* 40, 2488-2499.
- [21] Ansys Software Help, 2012.
- [22] Chen, L., Zhao, Q., and Zhang, H. (2010). Axial buckling behavior of single-walled carbon nanotubes with finite element modeling. In *Nano/Micro Engineered and Molecular Systems (NEMS)*, 2010 5th IEEE International Conference, pp. 276-279.
- [23] Shima, H. (2012). "Buckling of carbon nanotubes: a state of the art review". *Material* 5, 47-84.