

## بررسی تأثیرات طول، قطر و کایرالیته بر خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی معیوب

در این مقاله با استفاده از روش‌های اجزاء محدود و مکانیک مولکولی، پیوندهای کووالانته بین اتم‌های کربن در نانولوله با المان تیر خطی شبیه‌سازی شد. نانولوله‌های کربنی دارای ساختارهای مختلف با محدوده قطری و طولی گسترده‌ای تحلیل گردید. تأثیر پارامترهای هندسی نانولوله‌های کربنی شامل قطر، طول و کایرالیته بر مدول‌های یانگ و برشی نانولوله‌ها، به‌طور مستقل بررسی گردید. همچنین میزان کاهش مدول نانولوله کربنی در اثر وجود عیب جای خالی و افزایش تعداد و مکان عیب تعیین شده است. نتایج نشان می‌دهد که قطر نانولوله، تأثیر بیشتری نسبت به طول نانولوله بر خواص الاستیک دارد. با مقایسه‌ی نتایج به‌دست‌آمده برای نانولوله‌های آرمچیر، زیگزاگ و کایرال، عیب جای خالی بیشترین تأثیر را بر مدول یانگ نانولوله کایرال داشت.

پویا محسن زاده مبارکه<sup>۱</sup>

دانشجوی کارشناسی ارشد

حسین گلستانیان<sup>۲</sup>

استاد

یعقوب طادی بنی<sup>۳</sup>

دانشیار

واژه‌های راهنما: نانولوله‌های کربنی، روش اجزاء محدود، مکانیک مولکولی، مدول یانگ، مدول برشی، عیب جای خالی

### ۱- مقدمه

نیاز به مواد سبک‌تر و مستحکم‌تر، پدیده‌ای است که مورد توجه روزافزون محققان علوم مهندسی واقع شده است. امروزه با ظهور و گسترش نانوفناوری، که فناوری تولید مواد با در دست گرفتن کنترل در سطح مولکولی و اتمی است، دستیابی به مواد جدیدی مانند نانو کامپوزیت‌ها به عنوان موادی با استحکام بیشتر و سبک‌تر میسر شده است. در نانو کامپوزیت‌ها غالباً نانولوله‌های کربنی به عنوان تقویت‌کننده استفاده می‌شوند. Iijima [۱] در سال (۱۹۹۱) موفق به فراوری نانولوله کربنی چند دیواره<sup>۴</sup> (MWCNT) با روش تخلیه قوس گردید. حدود دو سال بعد، وی توانست نانولوله کربنی تک دیواره<sup>۵</sup> (SWCNT) را هم تولید کند.

<sup>۱</sup> دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد Mohsenzadeh@stu.sku.ac.ir

<sup>۲</sup> نویسنده مسئول، استاد، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد Golestanian@eng.sku.ac.ir

<sup>۳</sup> دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد tadi@eng.sku.ac.ir

<sup>۴</sup> Multi-walled Carbon Nanotube

<sup>۵</sup> Single-walled Carbon Nanotube

نتایج تحقیقات آزمایشگاهی نشان می‌دهند که تنها با افزودن مقدار بسیار کمی از نانولوله کربنی به رزین‌های پلیمری، خواص مکانیکی رزین به میزان قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد [۳ و ۲]. میزان کارآمدی نانولوله‌های کربنی در تقویت پلیمر در مقیاس نانو به ساختار اتمی نانولوله کربنی و در مقیاس ماکرو به پدیده انتقال بار از رزین اطراف به نانولوله بستگی دارد [۴]. نانولوله‌ها مشابه گرافیت تماماً از هیبرید  $sp^2$  تشکیل شده‌اند. این ساختار هیبریدی، از هیبرید  $sp^3$  که در الماس وجود دارد قوی‌تر است و استحکام منحصر به فردی به این مولکول‌ها می‌دهد اما درعین حال از ایجاد پیوند قوی و مستحکم کووالانسی بین نانولوله و رزین ممانعت به عمل می‌آورد. لذا انتقال بار از رزین به نانولوله از طریق برهم‌کنش‌های ضعیف واندروالس صورت می‌پذیرد. برخی از محققان با استفاده از فرایند عامل‌دار کردن<sup>۱</sup> نانولوله کربنی، به ایجاد پیوند کووالانت بین نانولوله و رزین اطراف پرداخته‌اند [۵ و ۶]. البته این فرایند باعث ایجاد نواقصی در ساختار نانولوله می‌شود. مشابه هر ماده‌ی دیگری، وجود نواقص بر خواص نانولوله‌ها تأثیرگذار است.

نانولوله‌ها ساختارهای مختلفی دارند که باعث خواص مکانیکی متفاوت آن‌ها می‌گردد. شبیه‌سازی نانولوله‌ها با ساختارهای گوناگون پیچیدگی‌های خاصی داشته و مدل کردن این ساختارها برای به دست آوردن خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی توسط روش‌های تجربی و نظری و بررسی تأثیر عیوب هندسی بر خواص مکانیکی نانولوله کربنی همواره مورد علاقه پژوهشگران مهندسی مکانیک بوده است. Treacy و همکاران [۷] در سال (۱۹۹۶) مدول یانگ نانولوله کربنی چندجداره را با انجام آزمایش‌هایی تعیین کردند. این محققین با اندازه‌گیری ارتعاشات حرارتی ۱۱ نانولوله‌ی کربنی چندجداره، مقادیر مدول یانگ را در محدوده‌ی ۰/۴ تا ۴/۱۵ تراپاسکال با یک مقدار میانگین ۱/۸ TPa تعیین کردند. Krishnan و همکاران [۸] در سال (۱۹۹۸) خواص الاستیک و استحکام نانولوله کربنی با بازه‌ی قطری ۱/۵ - ۱/۰ nm را به صورت آزمایشگاهی تعیین کردند. آن‌ها، با استفاده از ۲۷ داده آزمایشگاهی در مقیاس نانو، امروزه شبیه‌سازی‌های عددی به دست آوردند. با توجه به پیچیدگی روش‌های آزمایشگاهی در مقیاس نانو، امروزه شبیه‌سازی‌های عددی به عنوان ابزاری قدرتمند برای پیش‌بینی خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی استفاده می‌شوند. این شبیه‌سازی‌ها را می‌توان به دو زیر گروه کلی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی<sup>۲</sup> و مدل‌سازی محیط پیوسته تقسیم نمود. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یکی از معتبرترین روش‌های موجود در شبیه‌سازی نانو ساختارهاست [۹]. در سال (۲۰۱۳) Kuwar و Kamal [۱۰] اثر عیب جای خالی و استون-ولز را بر خواص مکانیکی نانولوله کربنی بررسی کردند. این محققان از روش دینامیک مولکولی و میدان نیروی COMPASS استفاده کردند. طبق نتایج به دست آمده برای نانولوله (۶، ۶) و (۱۰، ۱۰) به طول ۴۲/۵۹ Å، استحکام نهایی به ترتیب ۲۳ و ۲۸ درصد برای ۴ عیب استون-ولز و ۴ عیب جای خالی کاهش داشت. همچنین کاهش مدول الاستیسیته نیز به ترتیب ۹ و ۱۱ درصد برای ۴ عیب استون-ولز و ۴ عیب جای خالی گزارش شده است. Kumar و همکاران [۱۱] با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تأثیر عیب جای خالی بر کامپوزیت‌های نانولوله کربنی-اپوکسی<sup>۳</sup> را مورد بررسی قرار دادند.

<sup>1</sup> Functionalization

<sup>2</sup> Molecular Dynamics

<sup>3</sup> epoxy

آن‌ها از نانولوله کربنی آرمچیر<sup>۱</sup> (۶،۶) تک دیواره با درصدهای مختلف عیوب از ۱ تا ۵ درصد و آرایش‌های مختلف متقارن، غیر متقارن و مختلط عیوب استفاده کردند. این محققین به این نتیجه رسیدند که با افزایش نسبت عیوب<sup>۲</sup> (DR)، در آرایش مختلط، سرعت کاهش مدول بیشتر از حالت‌های دیگر است. Sammalkorpi و همکاران [۱۲] در سال (۲۰۰۴) اثر عیب جای خالی یگانه، دوگانه و سه‌گانه را بر خواص مکانیکی الاستیک ۴ نانولوله کربنی زیگزاگ<sup>۳</sup> و آرمچیر با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و نظریه پیوستگی بررسی کردند. آن‌ها با تعریف تابعی به نام غلظت عیوب (یا  $\frac{1}{L_{CNT}}$  که معرف ۱ عیب در هر  $L_{CNT}$  آنگستروم طول نانولوله کربنی است) اعلام کردند که اساساً غلظت عیوب باید بسیار زیاد باشد تا باعث کاهش قابل ملاحظه‌ای در مدول یانگ شود. به عنوان مثال این محققین پیش‌بینی کردند که در غلظت‌های نسبتاً بالای عیوب کاهش مدول یانگ تنها در حدود ۳ درصد است.

علیرغم مزایای روش دینامیک مولکولی، استفاده از این روش به علت پیچیدگی روابط و فرمول‌بندی حاکم و حجم بالای محاسبات، محدود به طول بسیار کوچک و تعداد محدودی از اتم‌ها می‌گردد و تنها قابل اعمال به مقیاس‌های زمانی بسیار کوتاه در مرتبه پیکو ثانیه است [۱۳]. از این رو، به منظور شبیه‌سازی سیستم‌های بزرگ‌تر و مقیاس زمانی طولانی‌تر، استفاده از روش‌های مدل‌سازی محیط پیوسته رونق خاصی پیدا کرده است. پروانه و شریعتی [۱۴] اثر عیوب جای خالی و استون-والز بر مدول یانگ نانولوله‌های کربنی تک دیواره‌ای دارای چیدمان زیگزاگ و آرمچیر را با استفاده از یک مدل ساختاری بررسی کردند. مقایسه‌ی نتایج مدل‌های این محققین با نتایج آزمایشگاهی نشان داد که برای پیش‌بینی دقیق مدول یانگ نانولوله‌های کربنی تک دیواره، نیاز به بکار بردن شرایط بارگذاری و مرزی مناسب است. آن‌ها همچنین دریافتند، تأثیر عیوب بر نانولوله‌های کربنی با طول بلند بسیار کمتر از تأثیر عیوب بر نانولوله‌های کوتاه است.

قوامیان و همکاران [۱۵] تأثیر عیوب نانولوله‌های کربنی تک دیواره و چند دیواره (زیگزاگ و آرمچیر) را با استفاده از روش المان محدود مورد بررسی قرار دادند. آن‌ها با مقایسه بین خواص نانولوله‌های کربنی سالم و معیوب به روابط ساده‌ای برای پیش‌بینی تغییرات مدول یانگ به عنوان تابعی از درصد عیوب رسیدند.

گرچه تاکنون تحقیقات زیادی جهت تعیین خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی انجام شده، اما عمده این تحقیقات به بررسی مدول الاستیسیته اختصاص یافته و مدول برشی نانولوله‌ها به‌ندرت مورد بررسی قرار گرفته است. از سوی دیگر، در این تحقیقات تأثیر تغییر ساختار نانولوله بر روی این خواص به‌طور جامع مطالعه نشده و فقط به بررسی ساختارهای آرمچیر و زیگزاگ با ابعاد خاص و ساختار کایرال<sup>۴</sup> با یک زاویه مشخص، محدود شده است. همچنین در اکثر مدل‌سازی‌های انجام‌شده نانولوله سالم و بدون عیب فرض شده است. درحالی‌که در مشاهدات آزمایشگاهی جدید وجود عیوب در ساختار نانولوله کربنی تأیید شده است [۱۶]. از طرفی بین نتایج آزمایشگاهی و نتیجه شبیه‌سازی اجزای محدود یا دینامیک مولکولی بعضاً تفاوت‌های معناداری وجود دارد.

<sup>1</sup> Armchair

<sup>2</sup> Defect Ratio

<sup>3</sup> Zigzag

<sup>4</sup> Chiral

پژوهشگران بر این نکته تفاهم دارند که تفاوت در این گزارش‌ها را می‌توان به پدیده وابستگی خواص نانولوله‌های کربنی به متغیرهای اثرگذار بر آن از جمله تفاوت و تنوع در قطر، طول، کایرالیته<sup>۱</sup> و اثرات عیوب دانست. در این پژوهش، تأثیر پارامترهای هندسی نانولوله‌های کربنی شامل قطر، طول و همچنین کایرالیته بر مدول یانگ و مدول برشی آن‌ها به‌طور مستقل بررسی می‌شود. همچنین میزان کاهش مدول نانولوله‌های کربنی در اثر وجود عیب جای خالی و افزایش تعداد و اثر مکان این عیب مورد بررسی قرار گرفته است.

## ۲- هندسه نانولوله کربنی تک دیواره و معرفی عیب

نانولوله‌های کربنی تک دیواره را می‌توان به صورت ورقه‌های بلند گرافن در نظر گرفت که به شکل استوانه پیچیده شده‌اند. خواص نانولوله‌های کربنی به طول، قطر و نوع مدور شدن صفحه‌ی گرافن بستگی دارد. ساختار اتمی نانولوله‌های کربنی توسط شاخص کایرالیته توصیف می‌شود، بدین منظور دو اتم گرافن انتخاب می‌شوند، یک اتم به عنوان مبدأ در نظر گرفته می‌شود، سپس صفحه گرافن را پیچانده تا اتم دوم روی اتم اول منطبق گردد. برداری که از اتم مبدأ به جهت اتم دیگر اشاره می‌کند بردار کایرال نامیده می‌شود (شکل (۱)). این بردار با رابطه‌ی (۱) تعریف می‌شود [۲]:

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

طول بردار کایرال برابر محیط نانولوله و محور نانولوله عمود بر بردار کایرال است. در رابطه‌ی (۱)،  $a_1$  و  $a_2$  بردارهای واحد هستند که با هم زاویه  $60^\circ$  درجه می‌سازند و  $n$  و  $m$  نیز اعداد صحیح که  $n$  بیانگر تعداد شش‌ضلعی‌ها در راستای  $a_1$  و  $m$  بیانگر تعداد شش‌ضلعی‌ها در راستای  $a_2$  است که در شکل (۱) نمایش داده شده‌اند. در شکل (۱)، زاویه  $\theta$ ، زاویه کایرال نامیده می‌شود و بین صفر تا  $30^\circ$  درجه تغییر می‌کند. از آنجا که هر زوج مرتب  $(n, m)$  به صورت منحصر به فرد نوع ساختار یک نانولوله‌ی را توصیف می‌کنند، با استفاده از مقادیر  $m$  و  $n$ ، دیگر پارامترهای نانولوله، مثل قطر  $D$  و زاویه‌ی کایرال  $\theta$  مطابق روابط (۲) و (۳) محاسبه می‌شوند [۱۷].

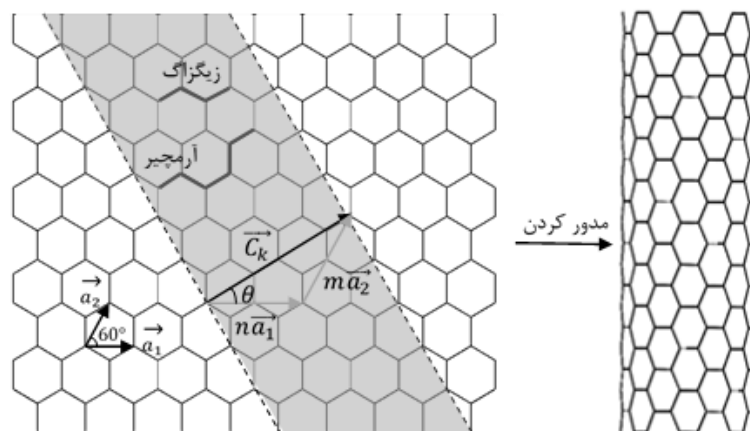
$$D = \frac{a_{c-c}\sqrt{3(n^2+m^2+nm)}}{\pi} \quad (2)$$

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

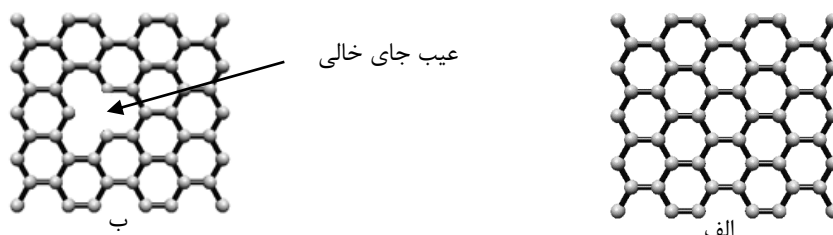
در رابطه‌ی (۲)،  $a_{c-c}$  طول پیوند کربن-کربن است که برابر با  $0.142$  نانومتر است [۱۷]. با توجه به مقادیر مختلف زاویه  $\theta$ ، سه نوع ساختار کلی نانولوله‌ی کربنی به نام‌های زیگزاگ، آرمچیر و کایرال وجود دارد که معمولاً نوع زیگزاگ و آرمچیر، به علت تقارن هندسی خود از دسته‌ی سوم (کایرال) متمایز می‌شوند. نانولوله‌هایی با ساختار  $(n, 0)$  با زاویه کایرال صفر درجه، زیگزاگ و با ساختار  $(n, n)$  با زاویه کایرال  $30^\circ$  درجه،

<sup>۱</sup> Chirality

آرمچیر نامیده می‌شوند. نانولوله‌هایی با ساختار غیرمنظم  $(n,m)$  که  $n > m$  و زاویه کایرال  $0 < \theta < 30$  می‌باشد را نیز کایرال می‌نامند.



شکل ۱- بردار کایرال، زاویه کایرال و نحوه مدور شدن صفحه گرافن برای تولید نانولوله کربنی [۱۸]



شکل ۲- الف) شبکه آرمچیر بدون عیب، ب) شبکه آرمچیر داری عیب جای خالی

نانولوله‌های کربنی دارای ساختار هندسی بسیار منظمی هستند، اما ساختار این مواد در اثر عامل دار کردن نانولوله که به منظور افزایش سطح انتقال بار از رزین به نانولوله انجام می‌شود، دچار تخریب می‌گردد. علاوه بر این موضوع، نانولوله‌ها در حین فرایند ساخت دچار اشکالاتی می‌شوند که خود را در قالب بی‌نظمی‌های هندسی نمایان می‌کنند. یکی از عیب‌های متداول هندسی در نانولوله‌ها، عیب جای خالی<sup>۱</sup> است. در عیب موسوم به جای خالی یک اتم کربن به همراه سه پیوند متصل به آن حذف می‌شود. این عیب در شکل (۲) نمایش داده شده است.

### ۳- مبانی مکانیک مولکولی و مدل‌سازی اجزا محدود نانولوله‌های کربنی

روش شبیه‌سازی محیط پیوسته معادل<sup>۲</sup> از ترکیب روش‌های مکانیک مولکولی<sup>۳</sup> و اجزاء محدود<sup>۱</sup> ایجاد شده است. آنچه در این روش حائز اهمیت است نوع المان (پیوسته، خرپا، فنر و تیر) به کار رفته برای مدل کردن

<sup>۱</sup> Vacancy

<sup>۲</sup> Equivalent-Continuum Modeling (ECM)

<sup>۳</sup> Molecular Mechanics (MM)

پیوند کووالانت کربن-کربن و تابع پتانسیل مورد استفاده برای مدل سازی این پیوند است. تعدادی از محققین نانولوله های کربنی را با المان پوسته شبیه سازی کرده اند [۱۹ و ۲۰]، ولی در این صورت نیروهای بین اتمی نادیده گرفته شده و تأثیر آن ها بر خواص مکانیکی نانولوله حذف می گردد. از طرفی، با توجه به گسسته بودن هندسه ی نانولوله، المان پوسته نمی تواند تقریب خوبی از رفتار نانولوله باشد. مدل سازی محیط پیوسته با استفاده از المان خرپا نیز انجام شده است [۲۱]. اما این نوع شبیه سازی به دلیل محدودیت در مدل سازی رفتار خمشی پیوندهای کربن-کربن، برای مطالعه ی رفتار نانولوله های کربنی مناسب نمی باشد. المان های پوسته و خرپا در مدل سازی نانولوله های کربنی به دلایل ذکر شده چندان دقت بالایی ندارند، اما به کمک المان های فنر و تیر می توان رفتار پیوندهای کربنی را به خوبی شبیه سازی کرد. برای مدل سازی نانولوله ها با استفاده از المان های فنر باید به طور همزمان از دو نوع فنر پیچشی و کششی استفاده کرد [۲۲]، که این در نانولوله های بزرگ باعث افزایش تعداد المان ها و هزینه ی محاسبات می شود. بنابراین المان های تیر جهت شبیه سازی تغییر شکل نانولوله های کربنی مناسب ترین گزینه است.

در سطح مولکولی، برهم کنش های بین اتم ها بر اساس انرژی های پتانسیل مولکولی توصیف می گردد. انواع اندرکنش های بین دو اتم کربن در شکل (۳) نشان داده شده است. اگر چه نانولوله های کربنی ساختارهایی با رفتار غیرخطی هستند اما با توجه به کوچک بودن تغییر شکل ها، در این مقاله از توابع پتانسیل هارمونیک برای تخمین انرژی پتانسیل بین اتم ها استفاده می شود که با روابط ۴ تا ۶ بیان می شود [۲۳].

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

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

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

در روابط بالا  $E_{bonded}$  و  $E_{nonbonded}$  به ترتیب معرف انرژی پیوندی و انرژی غیر پیوندی،  $E_s$ ،  $E_b$ ،  $E_t$ ،  $E_l$  به ترتیب معرف انرژی پتانسیل کششی، خمشی، پیچشی و خارج صفحه ای،  $E_{vdw}$ ،  $E_{es}$  و  $E_{hb}$  به ترتیب معرف نیروهای واندروالس، نیروهای الکترواستاتیکی و پیوندهای هیدروژنی هستند. برای ساده سازی روابط، معمولاً از انرژی های  $E_{nonbonded}$  و  $E_l$  صرف نظر می شود. در این صورت رابطه ی (۴) به شکل زیر ساده می شود:

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

در رابطه ی (۷):

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

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

$$E_t = \frac{1}{2} k_\varphi (\Delta\varphi)^2 \quad (10)$$

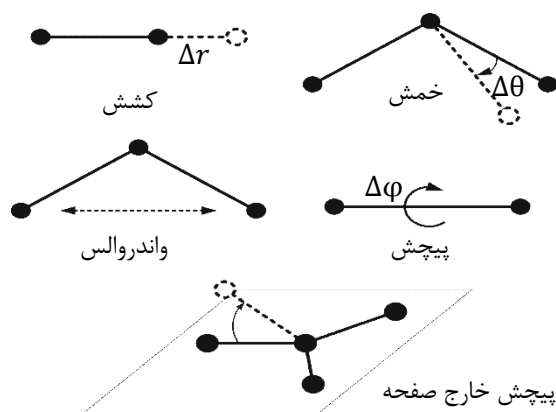
در این روابط  $k_r$ ،  $k_\theta$ ،  $k_\varphi$  به ترتیب معرف ثوابت نیرویی کشش پیوند، خمش پیوند و پیچش پیوند هستند. همچنین  $\Delta r$ ،  $\Delta\theta$  و  $\Delta\varphi$  به ترتیب تغییرات طول پیوند، زاویه‌ی داخل صفحه‌ای پیوند و پیچش خارج صفحه‌ی پیوند هستند. برای ثوابت نیرویی فوق می‌توان از روابط ۱۱ تا ۱۳ استفاده کرد [۲۴]:

$$k_r = 938 \frac{kcal}{mole.A^2} = 652 \frac{nN}{nm} \quad (11)$$

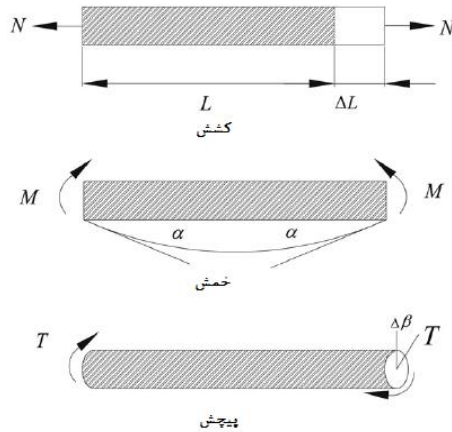
$$k_\theta = 126 \frac{kcal}{mole.rad^2} = 0.876 \frac{nN \cdot nm}{rad^2} \quad (12)$$

$$k_\varphi = 40 \frac{kcal}{mole.rad^2} = 0.278 \frac{nN \cdot nm}{rad^2} \quad (13)$$

Li و Chou [۲۵] 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 نمودند. این محققین، روابط انرژی کرنشی ذخیره شده در تیر تحت بارگذاری‌های خالص کشش، خمش و پیچش (شکل (۴)) را به شکل زیر ارائه دادند [۲۵]:



شکل ۳- انواع اندرکنش‌های بین دو اتم کربن دارای پیوند کووالانسی [۲۳]



شکل ۴- انواع تغییر شکل‌های المان تیر تحت بارگذاری

$$U_{Axial\ force} = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = \frac{N^2 L}{2EA} = \frac{EA}{2L} (\Delta L)^2 \quad (14)$$

$$U_{bending} = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = \frac{2EI}{L} \alpha^2 = \frac{EI}{2L} (2\alpha^2) \quad (15)$$

$$U_{torsion} = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{T^2 L}{2GJ} \alpha^2 = \frac{GJ}{2L} (\Delta\beta)^2 \quad (16)$$

در روابط ۸ تا ۱۰ و ۱۴ تا ۱۶ 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  $\Delta L$  با  $\Delta r$ ،  $2\alpha$  با  $\Delta\theta$  و  $\Delta\beta$  با  $\Delta\varphi$  در این روابط، معادلات ۱۷ تا ۱۹ به دست می‌آید:

$$k_r = \frac{EA}{L} \quad (17)$$

$$k_\theta = \frac{EI}{L} \quad (18)$$

$$k_\varphi = \frac{GJ}{L} \quad (19)$$

با فرض سطح مقطع دایروی به قطر  $d$  و طول  $0.142$  نانومتر برای المان تیر مفروض و محاسبه‌ی مشخصات مقطع به صورت زیر، مشخصات مکانیکی و هندسی المان تیر جایگزین پیوندها (شکل ۵) برابر است با [۲۴]:

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

$$d = 4 \sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}} = 0.14662 \text{ nm} \quad (20)$$

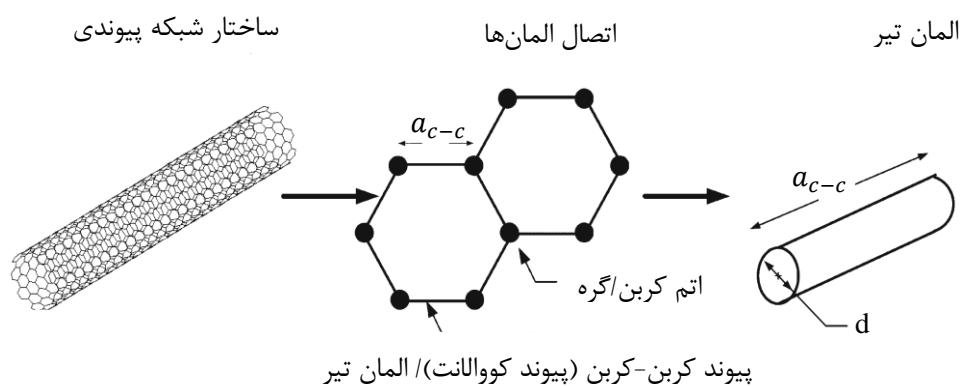
$$E = \frac{L k_r^2}{4\pi k_\theta} = 5.488 \text{ TPa} \quad (21)$$



$$G = \frac{k_r^2 k_\phi L}{8\pi k_\theta^2} = 0.871 \text{ TPa} \quad (22)$$

در این مقاله برای مدل سازی پیوند میان اتم های کربن از المان تیر از نوع B۳۳ در نرم افزار آباکوس استفاده شده است. این المان دو گره ای، الاستیک و در هر گره دارای شش درجه آزادی است.

مدل سازی نانولوله ها در سه مرحله انجام گرفت. در مرحله اول هندسه نانولوله با استفاده از نرم افزار نانو تیوب مدلر<sup>۱</sup> ایجاد شد. شایان ذکر است که به دلیل عدم امکان فراخوانی مستقیم فایل های خروجی این نرم افزار توسط نرم افزار آباکوس<sup>۲</sup>، در ابتدا فقط مختصات اتم های کربن به صورت یک فایل متنی ذخیره گردید. در مرحله دوم، این فایل به گونه ای که قابل فراخوانی توسط نرم افزار آباکوس باشد، ویرایش شد.



شکل ۵- جایگزینی پیوندها و اتم های کربن با اجزاء المان محدود [۲۳]

در مرحله سوم، فایل ویرایش شده در محیط نرم افزار آباکوس فراخوانی شده و ادامه مدل سازی شامل ایجاد عیوب بر روی نانولوله، اعمال شرایط مرزی و بارگذاری ها در محیط نرم افزار آباکوس انجام گردید. به این طریق تعداد زیادی از انواع نانولوله های کربنی سالم و معیوب که شامل ۱ یا ۲ عیب جای خالی در وسط نانولوله می باشد شبیه سازی شد و با انجام تحلیل استاتیکی، مدول یانگ و مدول برشی نانولوله ها تعیین شد. در بخش های بعدی روش محاسبه ی خواص مکانیکی نانولوله ها تشریح می گردد.

#### ۴- نحوه تعیین خواص مکانیکی

##### ۴-۱- تعیین مدول الاستیسیته در راستای طولی

برای محاسبه مدول الاستیسیته ی طولی، ابتدا باید شرایط مرزی و بارگذاری متناظر با آن به درستی روی نانولوله اعمال شود. بدین منظور، تمام درجات آزادی گره ها (اتم ها) در ابتدای نانولوله بسته می شود. سپس به اتم های انتهایی نانولوله جابجایی برابر با ۱ آنگستروم در راستای محور نانولوله اعمال می شود. شکل (۶)

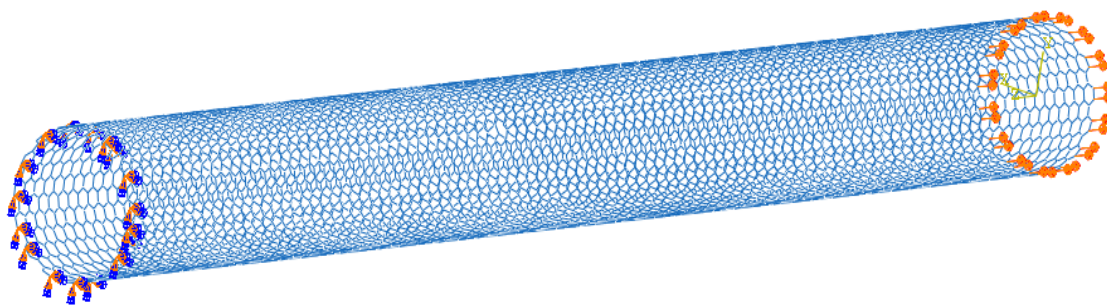
<sup>1</sup> Nanotube Modeler

<sup>2</sup> Abaqus

شرایط مرزی اعمال شده به گره‌های انتهایی و جابه‌جایی اعمال شده به گره‌های ابتدایی نانولوله آرمچیر (۱۵، ۱۵) را نشان می‌دهد. پس از اعمال جابه‌جایی، مقدار مجموع نیروی محوری وارد شده به نقاط انتهایی نانولوله که در محل تکیه‌گاه قرار دارند از نرم‌افزار استخراج می‌گردد.

مدول الاستیسیته در راستای طولی نانولوله‌های کربنی تحت کشش با استفاده از رابطه‌ی (۲۳) به دست می‌آید:

$$E_{CNT} = \frac{\sigma_z}{\varepsilon_z} = \frac{\frac{\sum f_z}{A_{NT}}}{\frac{\Delta L_{NT}}{L_{NT}^0}} = \frac{F_z \cdot L_{NT}^0}{\Delta L_{NT} \cdot A_{NT}} \quad (23)$$



شکل ۶- نحوه‌ی اعمال شرایط مرزی به گره‌های انتهایی و جابه‌جایی به گره‌های ابتدایی در نانولوله آرمچیر (۱۵ ، ۱۵)

که  $F_z$ ،  $L_{NT}^0$ ،  $\Delta L_{NT}$  و  $A_{NT}$  به ترتیب مجموع نیروی محوری وارد شده به نانولوله، طول اولیه، تغییرات طول و مساحت مقطع نانولوله می‌باشند. منظور از سطح مقطع، مساحتی است که تحت بار قرار می‌گیرد:

$$A_{NT} = \pi (r_o^2 - r_i^2), \quad r_o = \frac{D+t}{2}, \quad r_i = \frac{D-t}{2} \quad (24)$$

که در این رابطه  $D$  و  $t$  به ترتیب قطر و ضخامت دیواره‌ی نانولوله کربنی هستند. برای تعیین مقدار  $t$ ، دیواره‌ی نانولوله‌ها با ضخامتی معادل با قطر واندروالسی اتم کربن (۰/۳۴ نانومتر) در نظر گرفته شد [۲۶-۲۸].

#### ۲-۴- تعیین مدول برشی

برای محاسبه مدول برشی نانولوله کربنی، ابتدا باید ضریب پواسون نانولوله کربنی تعیین گردد. ضریب پواسون یک نانولوله کربنی از میزان کاهش قطر آن تحت بار کششی با استفاده از رابطه‌ی (۲۵) محاسبه می‌شود.

$$\nu_{CNT} = -\frac{\varepsilon_r}{\varepsilon_l} = -\frac{\Delta d_{NT}}{d_{NT}^0} \cdot \frac{L_{NT}^0}{\Delta L_{NT}} \quad (25)$$

در رابطه‌ی (۲۵)  $\Delta L_{NT}$  و  $L_{NT}^0$ ،  $d_{NT}^0$ ،  $\Delta d_{NT}$  به ترتیب میزان کاهش قطر، قطر اولیه، طول اولیه و میزان تغییر طول نانولوله می‌باشد. پس از تعیین ضریب پواسون، مدول برشی نانولوله‌های کربنی با استفاده از رابطه‌ی (۲۶) به دست می‌آید:

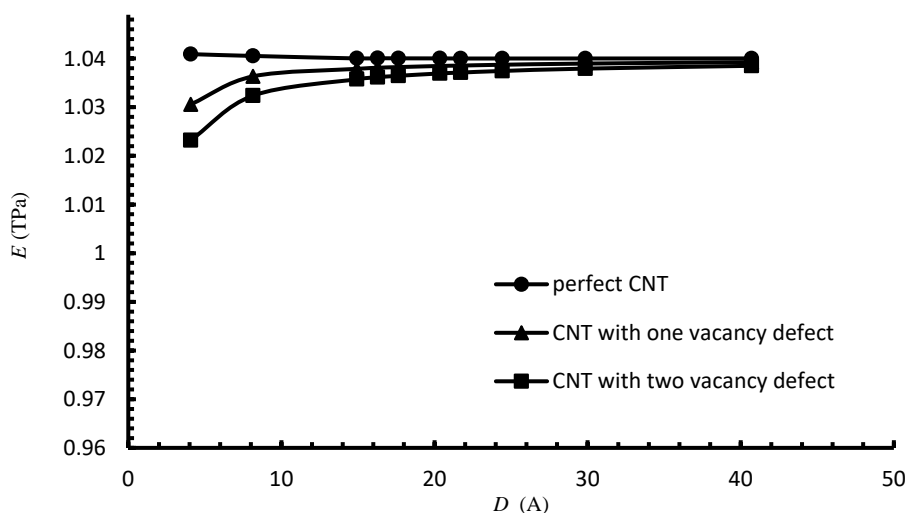
$$G_{CNT} = \frac{E_{CNT}}{2(1 + \nu_{CNT})} \quad (26)$$

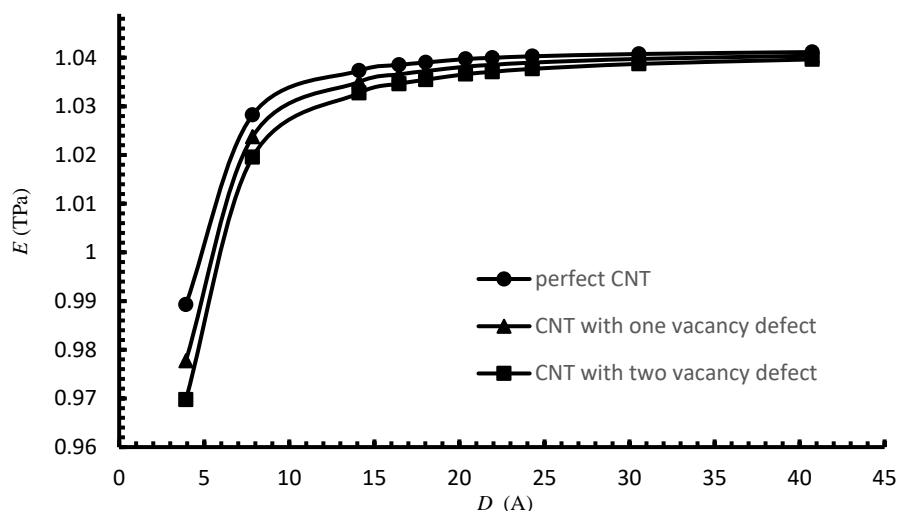
## ۵- نتایج و بحث

در این مطالعه، اثرات قطر، طول و کایرالیته نانولوله، همچنین اثر مکان عیب جای خالی بر خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی بررسی شده است. برای رسیدن به این هدف، مدل‌های اجزاء محدود از نانولوله‌های سالم و معیوب دارای قطر، طول و کایرالیته‌های مختلف در نرم‌افزار آباکوس ساخته و تحلیل شد. در مجموع تعداد ۱۸۶ نانولوله سالم و معیوب شبیه‌سازی و تحلیل گردید. نتایج این بررسی در این بخش ارائه شده است.

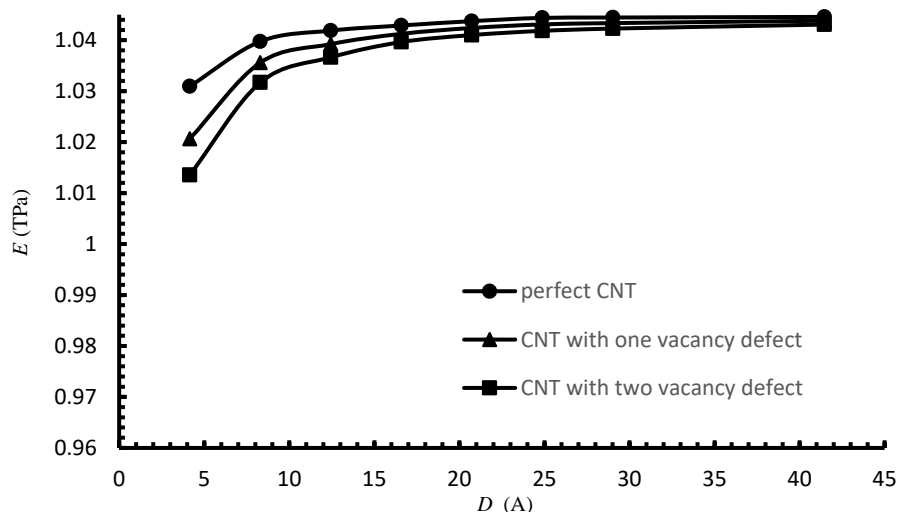
### ۵-۱- بررسی اثر قطر نانولوله بر مدول یانگ و مدول برشی

به‌منظور بررسی تأثیر قطر بر تغییرات مدول یانگ و مدول برشی، نانولوله‌های سالم و معیوب با طول و زاویه کایرال یکسان شبیه‌سازی شدند. به این منظور نانولوله‌های آرمچیر، زیگزاگ و ساختارهای کایرالی با زاویه ثابت ۱۹/۱۱ درجه، دارای طول‌های تقریباً برابر ۲۰۰/۵۹ آنگستروم، ۲۰۰/۳۶ آنگستروم و ۲۰۰/۶ آنگستروم با محدوده قطری ۴-۴۰ آنگستروم شبیه‌سازی شدند. با محاسبه مدول یانگ (طبق رابطه‌ی (۲۳)) برای نانولوله‌های ذکر شده، روند تأثیر قطر نانولوله بر مدول یانگ نانولوله‌های سالم و معیوب تعیین شد. نتایج این بررسی در شکل (۷) ارائه شده است.





ب



ج

شکل ۷- تغییرات مدول یانگ بر حسب قطر نانولوله‌ها؛ نانولوله‌های الف) آرمچیر، ب) زیگزگ، ج) کایرال

همان‌طور که در شکل (۷) مشاهده می‌شود در نانولوله‌های سالم آرمچیر با افزایش قطر مدول یانگ روند کاهشی جزئی دارد در حالی که در نانولوله‌های معیوب همین ساختار مدول یانگ روند افزایشی دارد. دلیل این پدیده را می‌توان تأثیر زیاد عیوب بر نانولوله‌ها با ساختار آرمچیر دانست. در دو ساختار زیگزگ و کایرال برای نانولوله‌های سالم و معیوب مشاهده می‌شود که در نانولوله‌هایی با قطر کوچک، افزایش قطر سبب افزایش مدول یانگ می‌شود. Chou و Li [۲۵] دلیل افزایش مدول یانگ و مدول برشی در قطرهای کوچک را اثر انحناء نانولوله‌ها بیان کرده‌اند. پیوندهای کربن-کربن در قطرهای کوچک‌تر نانولوله‌ها، اعوجاج بیشتری دارند و با افزایش قطر نانولوله‌ها، اثر انحناء به تدریج کاهش می‌یابد و مدول یانگ نانولوله‌ها به مدول یانگ ورقه‌ی گرافن (۱/۰۶ الی ۱/۰۴ [۲۹ و ۳۰]) که هیچ اثری از انحناء در آن وجود ندارد نزدیک می‌شود.

در هر سه ساختار آرمچیر، زیگزگ و کایرال برای نانولوله‌های سالم و معیوب از قطر ۲۰ آنگستروم به بعد، اثر قطر بسیار ناچیز بوده و تقریباً مدول یانگ ثابتی مشاهده می‌شود. چنین روندی برای نانولوله‌های سالم در مطالعات گذشته نیز گزارش شده است [۹]. این مشاهدات برای نانولوله‌های معیوب نیز صادق است. در بین نانولوله‌ها با ساختار آرمچیر، زیگزگ و کایرال، با تغییر قطر نانولوله بیشترین تغییرات مدول یانگ در نانولوله‌های زیگزگ مشاهده می‌شود. همچنین با افزایش قطر نانولوله، در تعداد عیب ثابت، تأثیر عیب جای خالی بر روی مدول یانگ در هر سه ساختار نانولوله کاهش می‌یابد. برای ارزیابی نتایج فوق می‌توان به مقالات موجود مراجعه کرد. Chen و همکاران [۳۱] اثرات سه مدل از عیب جای خالی را بر خواص الاستیک نانولوله‌های کربنی تک دیواره آرمچیر و زیگزگ با استفاده از روش مکانیک محیط پیوسته بررسی کردند. ایشان مدول یانگ نانولوله‌های سالم (۳۰،۳۰) و (۵۲،۰) به طول ۱۰۰ آنگستروم را به ترتیب ۱/۰۳۷۰ و ۱/۰۴۰۵ تراپاسکال محاسبه کردند که در صورت وجود یک عیب جای خالی در آن‌ها مدول یانگ این دو نانولوله به ترتیب به مقادیر ۱/۰۳۵۵۵ و ۱/۰۳۹۰ تراپاسکال کاهش می‌یابد.

در تحقیق حاضر، مقادیر مدول یانگ این دو نانولوله در حالت سالم به ترتیب ۱/۰۳۸۴۹ و ۱/۰۴۱۲۳ تراپاسکال و در حالتی که یک عیب جای خالی در آن‌ها وجود داشته باشد به ترتیب ۱/۰۳۶۹۷ و ۱/۰۳۹۷۱ تراپاسکال به دست آمد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج تحقیق حاضر به مقادیر مدول یانگ گزارش شده توسط Chen و همکاران [۳۱] بسیار نزدیک است. در جدول (۱) درصد کاهش مدول یانگ به دست آمده در اثر عیب جای خالی برای چهار نانولوله خاص، با نتایج پژوهش‌های پیشین مقایسه شده است. همچنین مقایسه مقادیر مدول یانگ به دست آمده در این پژوهش با نتایج دیگر محققان در جدول (۲) مقایسه شده است. اختلاف ناچیز بین نتایج ارائه شده در جدول‌های (۱) و (۲) مؤید صحت شبیه‌سازی انجام گرفته در این پژوهش است.

در مرحله‌ی بعد، مدول برشی نانولوله‌های کربنی با استفاده از رابطه‌ی (۲۶) محاسبه شده و نمودار تغییرات آن بر حسب قطر برای نانولوله‌های سالم و معیوب استخراج شد. شکل (۸) تأثیر قطر بر روی مدول برشی نانولوله‌های کربنی را نشان می‌دهد. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود، در بین نانولوله‌ها با ساختار آرمچیر، زیگزگ و کایرال، قطر نانولوله بیشترین تأثیر را بر روی مدول برشی نانولوله‌های کایرال دارد. برای انواع نانولوله‌های سالم و معیوب دارای قطر کم، مدول برشی با افزایش قطر افزایش می‌یابد، ولی برای نانولوله‌هایی با قطر بزرگ‌تر از ۲۰ آنگستروم اثر قطر تقریباً از بین می‌رود و مدول برشی ثابتی برای نانولوله‌هایی با ساختار یکسان مشاهده می‌شود. همچنین مشاهده می‌شود که با تغییر قطر نانولوله در هر سه ساختار آرمچیر، زیگزگ و کایرال اثر ۱ یا ۲ عیب جای خالی بر روی مدول برشی نانولوله‌ها ناچیز است.

**جدول ۱-** مقایسه درصد کاهش مدول یانگ به دست آمده در اثر عیب جای خالی با نتایج دیگر محققان

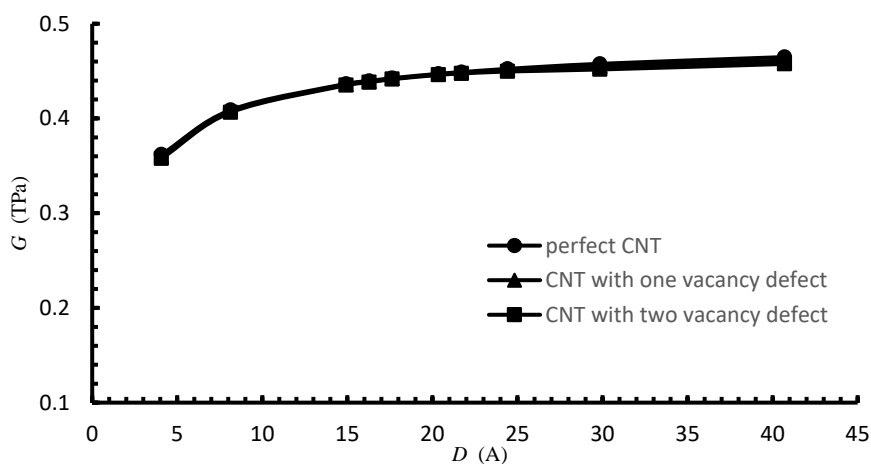
نام محقق	نوع نانولوله	طول (nm)	تعداد آسیب جای خالی	روش مطالعه	درصد کاهش مدول یانگ	درصد کاهش مدول در این پژوهش

۱/۸۸۵	۱/۹۶۰	دینامیک	۱	۵	آرمچیر (۵،۵)	Sammalkorpi و همکاران [۱۲]
۱/۸۶۸	۱/۷۶۸	مولکولی			زیگزاگ (۹،۰)	
۰/۱۴۶	۰/۱۴۴	اجزا	۱	۱۰	آرمچیر (۳۰،۳۰)	Chen و همکاران [۳۱]
۰/۱۴۶	۰/۱۴۴	محدود			زیگزاگ (۵۲،۰)	

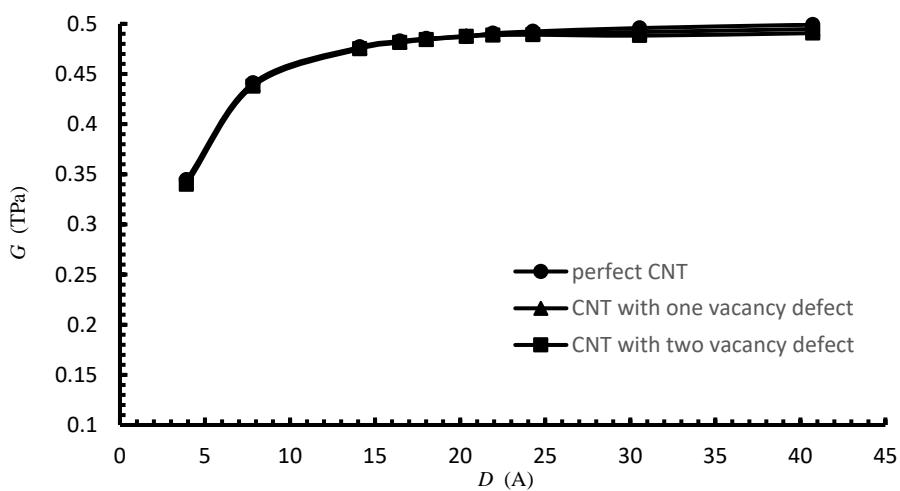
**جدول ۲ -** مقایسه مقادیر به دست آمده برای مدول یانگ با نتایج دیگر محققان

مدول یانگ (TPa)			روش	طول (nm)	قطر (nm)	محقق	نوع نانولوله بررسی شده
نانولوله دارای دو عیب جای خالی	نانولوله دارای یک عیب جای خالی	نانولوله سالم					
مقدار متوسط ۱/۲۵			آزمایشگاهی	---	۱ - ۱/۵	Krishnan و همکاران [۸]	۲۷ نوع نانولوله‌ی مختلف
---	---	~ ۰/۹۷	دینامیک مولکولی	---	۰/۶۸ - ۲۷	Lu [۲۶]	۱۰ نوع نانولوله‌ی مختلف
---	---	~ ۱/۲۴	دینامیک مولکولی	---	۰/۷۹۱ - ۲/۰۳۴	Hernandez و همکاران [۳۲]	۷ نوع نانولوله‌ی مختلف
---	---	۰/۸۹ - ۱/۰۴	اجزا محدود	---	۰/۴ - ۲	Chou و Li [۲۵]	زیگزاگ و آرمچیر
---	---	۰/۹۵۲ - ۱/۰۶۶	اجزا محدود	---	۰/۳۹۱ - ۲/۵۷	Tserpes و Papanikos [۲۴]	هر سه ساختار
---	---	۰/۹۷۸ - ۱/۰۳۷	اجزا محدود	~ ۲/۴	۰/۳۹۲ - ۱/۸	Ávila و Lacerda [۱۸]	۱۵ نوع نانولوله‌ی مختلف

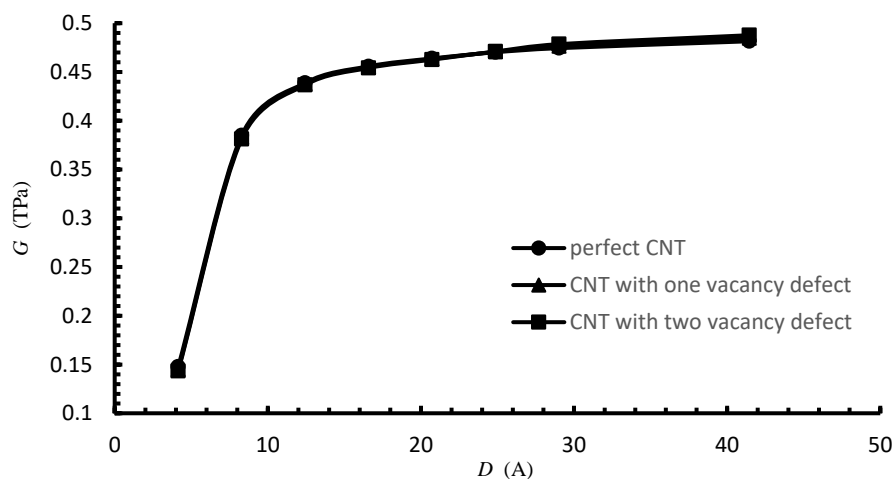
---	۱/۰۰۲ - ۱/۰۳۵	۱/۰۲ - ۱/۰۴	اجزا محدود	---	۱/۱ - ۴/۱	Chen و همکاران [۳۱]	۵ نوع نانولوله‌ی زیگزاگ و آرمچیر
---	---	۰/۹۸۹ - ۱/۰۵۸	اجزا محدود	۱۲/۶	۰/۳۷۵ - ۱/۸	Hu و Lu [۳۳]	۱۷ نوع نانولوله‌ی مختلف
۰/۹۶۹ - ۱/۰۴۳	۰/۹۷۷ - ۱/۰۴۴	۰/۹۸۹ - ۱/۰۴۵	اجزا محدود	~ ۲۰/۰۵	۰/۳۹۲ - ۴/۱۵	تحقیق حاضر	۲۸ نوع نانولوله‌ی مختلف



الف



ب



ج

شکل ۸- تغییرات مدول برشی بر حسب قطر نانولوله‌ها؛ نانولوله‌های الف) آرمچیر، ب) زیگزگ، ج) کایرال

برای اعتبارسنجی این نتایج می‌توان از محدود نتایج موجود در مراجع استفاده کرد. Chen و همکاران [۳۱] درصد کاهش مدول برشی نانولوله‌های کربنی تک دیواره آرمچیر و زیگزگ در اثر عیب جای خالی را با استفاده از روش مکانیک محیط پیوسته بررسی کردند. ایشان درصد کاهش مدول برشی نانولوله‌ی (۳۰،۳۰) به طول ۱۰۰ آنگستروم که یک عیب جای خالی در آن وجود داشت را  $0.409$  TPa گزارش نمودند. در پژوهش حاضر درصد کاهش مدول برشی این نانولوله در اثر وجود یک عیب جای خالی  $0.431$  TPa به دست آمده است که به درصد کاهش مدول برشی Chen و همکاران [۳۱] بسیار نزدیک است. در جدول (۳) مقادیر مدول برشی به دست آمده در این پژوهش با نتایج دیگر محققان مقایسه شده است. در مراجع [۲۴ و ۲۵ و ۳۱ و ۳۳] مقدار مدول برشی برای ساختارهای مختلف نانولوله‌های کربنی به عدد  $0.5$  تراپاسکال همگرا می‌شود.

جدول ۳- مقایسه مقادیر به دست آمده برای مدول برشی با نتایج دیگر محققان

مدول برشی (TPa)			روش	طول (nm)	قطر (nm)	محقق	نوع نانولوله‌های بررسی شده
نانولوله دارای دو عیب جای خالی	نانولوله دارای یک عیب جای خالی	نانولوله سالم					
---	---	$\sim 0.450$	دینامیک مولکولی	---	$0.68 - 27$	[۲۶] Lu	۱۰ نوع نانولوله‌ی مختلف
---	---	$\sim 0.422$	دینامیک مولکولی	---	$0.791 - 2/0.34$	Hernandez و همکاران [۳۲]	۷ نوع نانولوله‌ی مختلف



---	---	۰/۲۲۵ - ۰/۴۸۵	اجزا محدود	---	۰/۴ - ۲	Chou و Li [۲۵]	زیگزاگ و آرمچیر
---	---	۰/۲۴۲ - ۰/۵۰۴	اجزا محدود	---	۰/۳۹۱ - ۲/۵۷	Tserpes و Papanikos [۲۴]	هر سه ساختار
---	۰/۴۲۲ - ۰/۴۸۲	۰/۴۹۲ - ۰/۴۴۰	اجزا محدود	---	۱/۱ - ۴/۱	Chen و همکاران [۳۱]	۵ نوع نانولوله‌ی زیگزاگ و آرمچیر
---	---	۰/۲۳۷ - ۰/۴۶۹	اجزا محدود	۱۲/۶	۰/۳۹۱ - ۲/۰۷	Hu و Lu [۳۳]	۱۷ نوع نانولوله‌ی مختلف
۰/۱۴۳ - ۰/۴۹۰	۰/۱۴۵ - ۰/۴۹۵	۰/۱۴۸ - ۰/۴۹۹	اجزا محدود	~ ۲۰/۰۵	۰/۳۹۲ - ۴/۱۵	تحقیق حاضر	۲۸ نوع نانولوله‌ی مختلف

با توجه به اختلاف ناچیز مقادیر مدول برشی به دست آمده در این پژوهش با نتایج دیگر محققان و همچنین همگرا شدن مدول برشی نانولوله‌ها به عدد مورد نظر، صحت مدل‌سازی انجام گرفته در این پژوهش تأیید می‌گردد. قابل ذکر است که اختلاف جزئی نیز ناشی از تفاوت در بازه طول و قطر نانولوله‌های مورد بررسی می‌باشد. همان‌طور که در شکل‌های (۷) و (۸) ملاحظه می‌شود با افزایش ۱۰۰ درصدی قطر نانولوله از  $\text{\AA}$  تا  $40 \text{\AA}$  مدول یانگ و مدول برشی تغییرات بسیار اندکی داشته و بیشترین تغییرات مدول یانگ و مدول برشی به ترتیب ۰/۲۹ درصد و ۳/۹۵ درصد می‌باشد. این امر حاکی از حذف اثر قطر بر تغییرات مدول یانگ و برشی برای نانولوله‌هایی با قطر بزرگ‌تر از ۲۰ آنگستروم می‌باشد.

## ۲-۵- بررسی اثر طول نانولوله بر مدول یانگ و مدول برشی

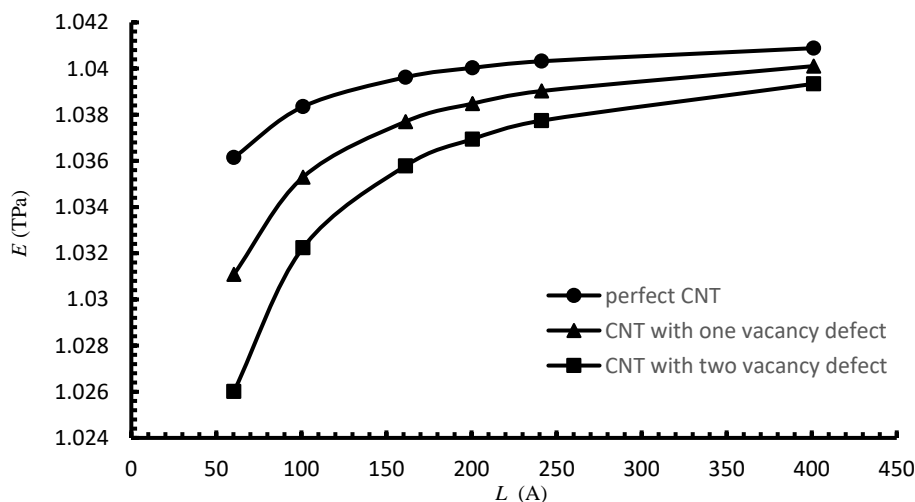
جهت بررسی تأثیر طول نانولوله‌های سالم و معیوب بر تغییرات مدول یانگ و مدول برشی، نانولوله‌هایی با ساختار و قطر مشابه شبیه‌سازی شدند. به این منظور ساختارهای آرمچیر (۱۵، ۱۵)، زیگزاگ (۰، ۲۶) و کایرال (۸، ۲۱) با زاویه کایرال ۱۵/۴۹ درجه که به ترتیب قطری برابر با ۲۰/۳۵۴، ۲۰/۳۶۹ و ۲۰/۳۲۴ آنگستروم دارند در محدوده طولی ۴۰۰-۶۰ آنگستروم شبیه‌سازی شد.

با محاسبه مدول یانگ و مدول برشی این نانولوله‌ها می‌توان اثر طول نانولوله را بر تغییرات خواص مکانیکی تعیین کرد. نتایج این تحلیل‌ها به ترتیب در شکل‌های (۹) و (۱۰) ارائه شده است. همان‌طور که در شکل (۹) مشاهده می‌شود در دو نانولوله آرمچیر و زیگزاگ با افزایش طول، مدول یانگ افزایش می‌یابد در حالی که در نانولوله‌ی نوع کایرال با افزایش طول، مدول یانگ کاهش می‌یابد. همچنین مشاهده می‌شود که در هر سه ساختار آرمچیر، زیگزاگ و کایرال از طول ۲۴۰ آنگستروم به بعد اثر طول بر مدول یانگ نانولوله‌های سالم و معیوب کاملاً ناچیز است.

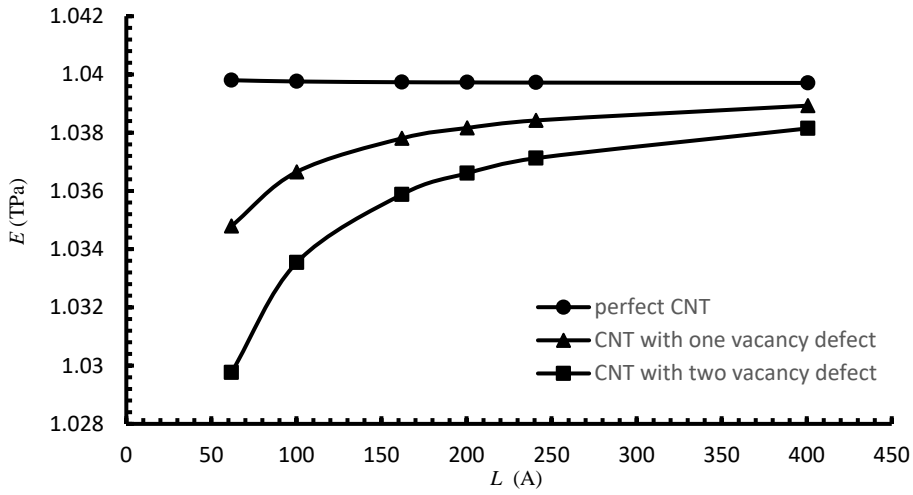
در شکل (۱۰) اثر طول بر تغییرات مدول برشی نانولوله ارائه شده است. ملاحظه می‌شود که در تمام انواع نانولوله‌های سالم و معیوب آرمچیر، زیگزاگ و کایرال، با افزایش طول نانولوله مدول برشی افزایش می‌یابد. ولی از طول  $240 \text{ \AA}$  به بعد اثر طول ناچیز بوده و مدول برشی برای هر سه ساختار تقریباً مقدار ثابتی دارد. با افزایش طول نانولوله، در تعداد عیب ثابت، تأثیر عیب جای خالی بر مدول یانگ در هر سه ساختار نانولوله کاهش می‌یابد. به‌طور کلی در مقایسه با قطر نانولوله، طول آن تأثیر نسبتاً کمتری بر خواص الاستیک دارد، به‌ویژه بر مدول یانگ نانولوله.

### ۵-۳- بررسی اثر زاویه کایرال بر مدول یانگ و مدول برشی نانولوله

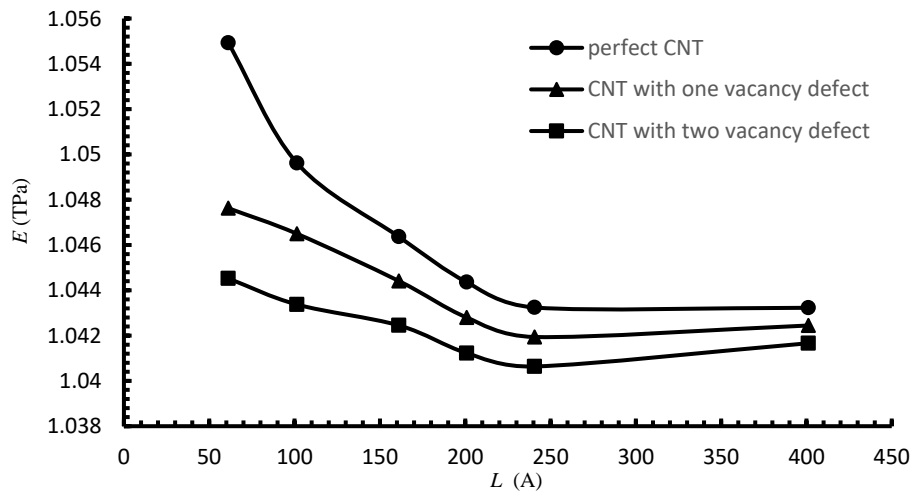
با توجه به نتایج حاصل از این پژوهش برای نانولوله‌هایی با قطر بزرگ‌تر از  $20 \text{ \AA}$  آنگستروم و طول بزرگ‌تر از  $240 \text{ \AA}$  آنگستروم، تأثیر ابعاد نانولوله بر مدول یانگ و برشی بسیار ناچیز است و تأثیر این پارامترها بر روی خواص مکانیکی حذف می‌شود. لذا تنها عامل مؤثر بر خواص مکانیکی برای این دسته از نانولوله‌های سالم و معیوب، کایرالیته یا نوع ساختار نانولوله می‌باشد. در این بخش، جهت بررسی اثر زاویه کایرال بر خواص مکانیکی، نانولوله‌هایی با زاویه کایرال در محدوده  $0-30^\circ$  درجه با قطر حدود  $20 \text{ \AA}$  و طول حدود  $240 \text{ \AA}$  شبیه‌سازی شدند. مشخصات نانولوله‌های شبیه‌سازی شده در جدول (۴) ارائه شده است.



الف

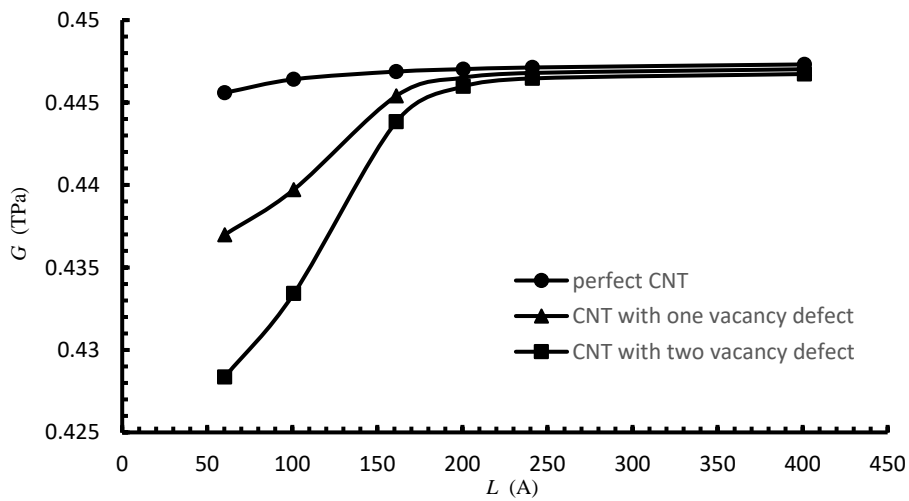


ب

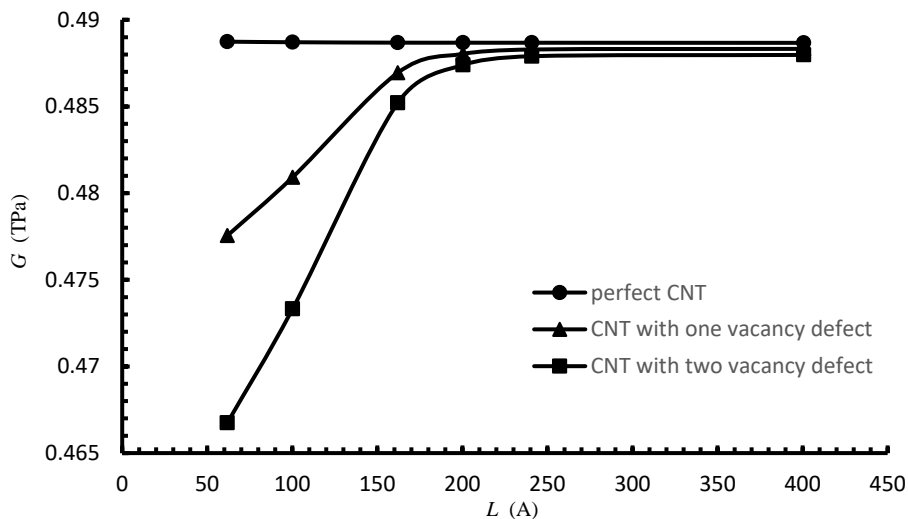


ج

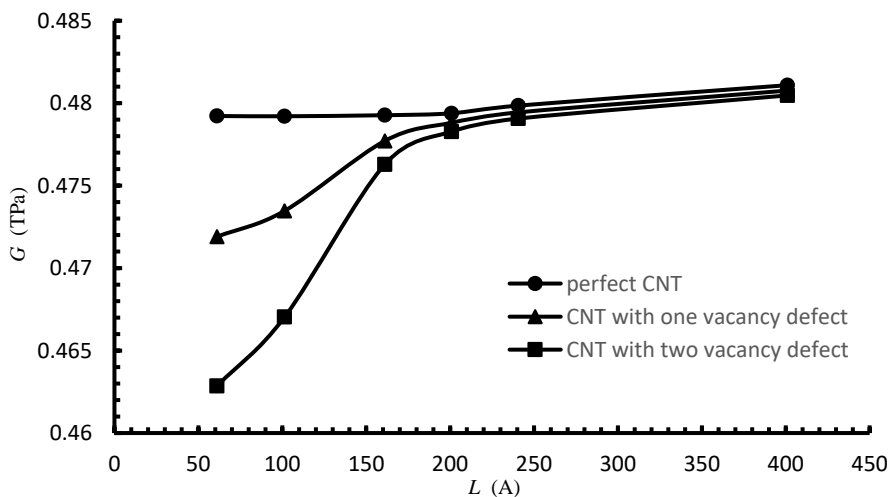
شکل ۹- تغییرات مدول یانگ بر حسب طول نانولوله‌ها؛ نانولوله‌های الف) آرمچیر، ب) زیگزاگ، ج) کایرال



الف



ب



ج

شکل ۱۰- تغییرات مدول برشی بر حسب طول نانولوله‌ها؛ نانولوله‌های الف) آرمچیر، ب) زیگزاگ، ج) کایرال

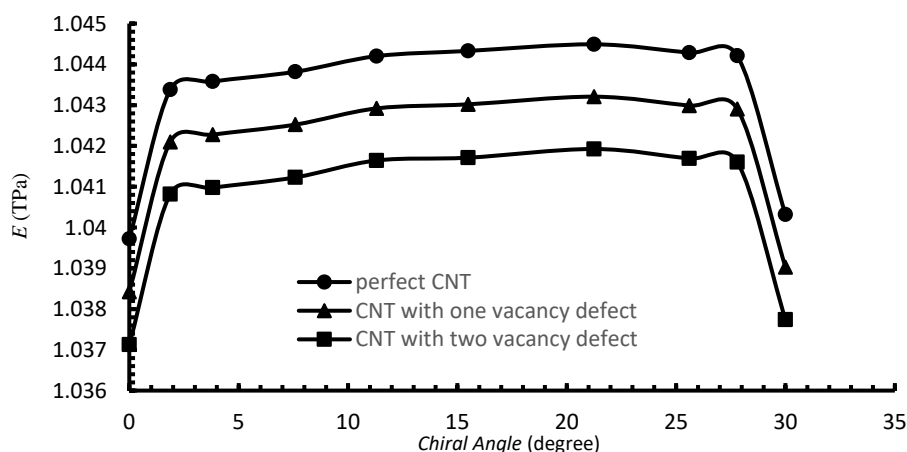
جدول ۴- مشخصات نانولوله‌های مدل شده برای بررسی تأثیر زاویه کایرال

زاویه کایرال (degree)	طول (Å)	قطر (Å)	تعداد لینک	تعداد اتم کربن	نوع ساختار (n,m)
۰	۲۴۰/۸۶	۲۰/۳۶۹	۸۸۱۴	۵۹۰۲	(۲۶,۰)
۱/۸۷۱۸	۲۴۱/۰۱	۲۰/۷۷۲	۸۹۷۰	۶۰۰۴	(۲۶,۱)
۳/۸۱۱۳	۲۴۱/۳۹	۲۰/۴۱۵	۸۸۳۰	۵۹۱۰	(۲۵,۲)
۷/۵۸۹۱	۲۴۰/۸۶	۲۰/۵۴۹	۸۸۶۸	۵۹۳۶	(۲۴,۴)
۱۱/۳۰۱۸	۲۴۰/۹۳	۲۰/۷۷۲	۸۹۶۸	۶۰۰۲	(۲۳,۶)
۱۵/۴۸۹۵	۲۴۰/۶۶	۲۰/۳۲۴	۸۷۶۵	۵۸۶۶	(۲۱,۸)

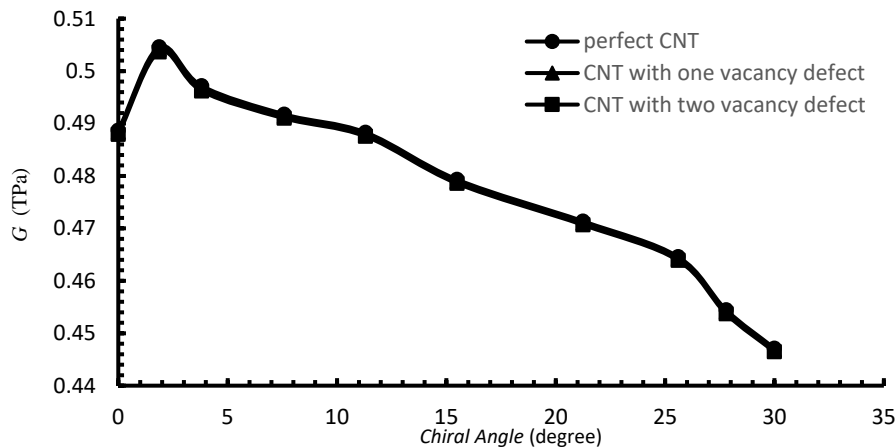
۲۱/۲۴۷۵	۲۴۱/۵۸	۲۰/۵۹۴	۸۹۱۸	۵۹۶۷	(۱۹،۱۱)
۲۵/۵۹۸۱	۲۴۰/۷۴	۲۰/۴۱۵	۸۸۰۹	۵۸۹۴	(۱۷،۱۳)
۲۷/۷۹۵۸	۲۴۰/۱۵	۲۰/۳۶۹	۸۷۶۸	۵۸۶۶	(۱۶،۱۴)
۳۰	۲۴۱/۲	۲۰/۳۵۴	۸۸۳۵	۵۹۱۰	(۱۵،۱۵)

در شکل (۱۱) تغییرات مدول یانگ با زاویه کایرال نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می‌شود، نانولوله زیگزاگ کمترین مدول یانگ را در مقایسه با نانولوله‌های آرمچیر و کایرال دارد. همچنین در بین نانولوله‌ها با ساختار آرمچیر، زیگزاگ و کایرال، عیب جای خالی بیشترین تأثیر را بر روی مدول یانگ نانولوله کایرال، با زاویه کایرال ۱۵/۴۹ درجه دارد. برای نانولوله‌های سالم کایرال با افزایش زاویه کایرال، مدول یانگ از ۱/۰۴۳ TPa تا ۱/۰۴۴ TPa تغییر می‌کند.

در شکل (۱۲) تغییر مدول برشی با زاویه کایرال برای نانولوله‌های تحت بررسی ارائه شده است. ملاحظه می‌شود که نانولوله آرمچیر (با زاویه کایرال ۳۰ درجه) کمترین مدول برشی را در مقایسه با سایر ساختارها دارد. همچنین با افزایش زاویه کایرال، مدول برشی کاهش می‌یابد و طبق این نتایج، مدول برشی نانولوله‌های کایرال (با زاویه کایرال  $0 < \theta < 30$ ) در زاویه‌های کمتر از ۱۱ درجه اندکی بیشتر از ساختار زیگزاگ (با زاویه کایرال صفر درجه) است، این در حالی است که در زاویه‌های بزرگ‌تر از ۱۱ درجه، نانولوله‌های کایرال مدول برشی کمتری را از ساختار زیگزاگ دارد. همان طور که مشاهده می‌شود با تغییر زاویه کایرال در هر سه ساختار آرمچیر، زیگزاگ و کایرال اثر ۱ یا ۲ عیب جای خالی بر مدول برشی نانولوله‌ها ناچیز است.



شکل ۱۱- تغییرات مدول یانگ بر حسب زاویه کایرال نانولوله



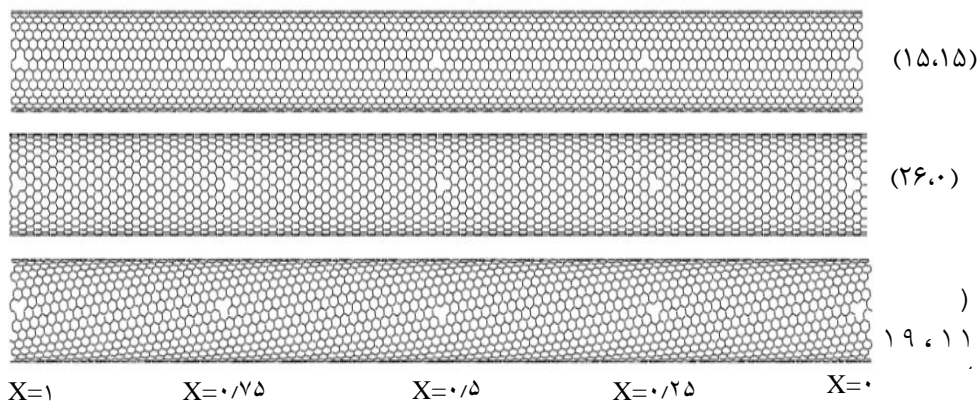
شکل ۱۲- تغییرات مدول برشی بر حسب زاویه کایرال نانولوله

#### ۴-۵- بررسی اثر مکان عیب جای خالی بر مدول یانگ و مدول برشی نانولوله

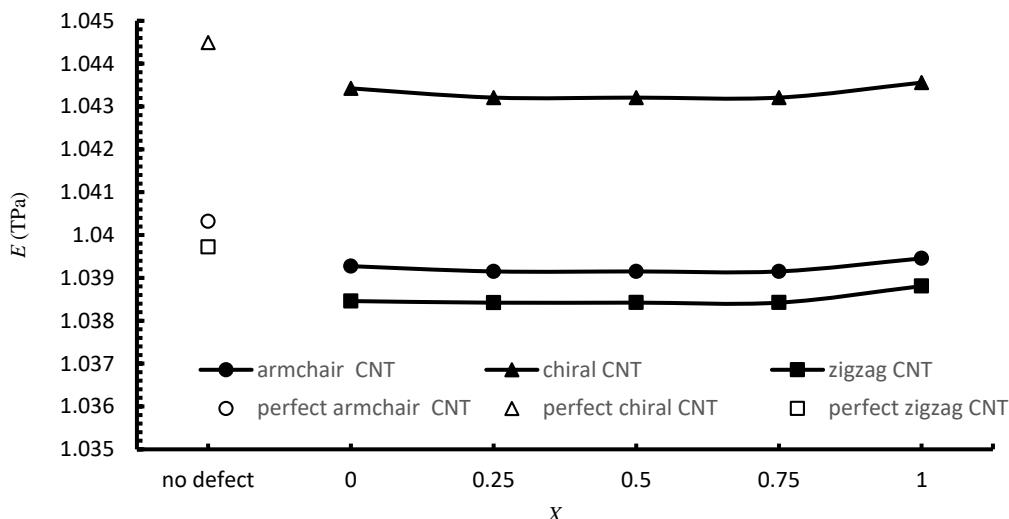
در این بخش به بررسی تأثیر مکان عیب بر مدول یانگ و برشی نانولوله‌های کربنی تحت بررسی پرداخته می‌شود. در این راستا عیب جای خالی یگانه را از ابتدا تا انتهای نانولوله جابه‌جا کرده و مدول های یانگ و برشی نانولوله‌های معیوب را تعیین می‌کنیم. در این بخش پارامتر بی‌بعد  $X$  معرفی می‌شود که با رابطه‌ی (۲۷) تعریف می‌شود:

$$X = \frac{x}{L_{NT}^0} \quad (27)$$

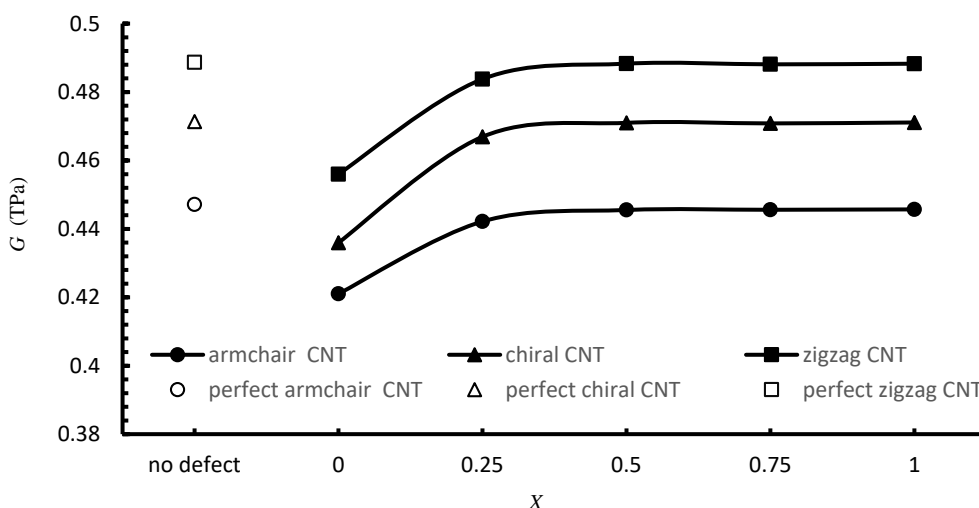
در رابطه‌ی (۲۷)،  $x$  فاصله قرارگیری عیب از سر نانولوله (سمت راست)،  $L_{NT}^0$  طول اولیه نانولوله و  $X$  هم عددی بی‌بعد می‌باشد که بین صفر تا یک متغیر است. در شکل (۱۳) مکان‌های در نظر گرفته شده برای عیب در طول نانولوله‌های مورد بررسی نشان داده شده است. در شکل‌های (۱۴) و (۱۵) نتایج این بررسی ارائه شده است. همچنین در این شکل‌ها مقادیر مدول یانگ و برشی برای نانولوله‌های سالم با استفاده از علائم نشان داده شده است.



شکل ۱۳- مکان‌های عیب در طول نانولوله



شکل ۱۴- تأثیر مکان عیب جای خالی بر مدول یانگ نانولوله‌ها



شکل ۱۵- تأثیر مکان عیب جای خالی بر مدول برشی نانولوله‌ها

همان‌طور که در شکل‌های (۱۴) و (۱۵) مشاهده می‌شود، با تغییر مکان عیب جای خالی در طول نانولوله، مدول یانگ و برشی تغییرات قابل ملاحظه‌ای ندارد. شایان‌ذکر است که در شکل (۱۵) اختلاف به وجود آمده در مدول برشی، در  $X=0$  متأثر از این می‌باشد که عیب دقیقاً در محل اعمال جابه‌جایی به نانولوله، جهت تعیین خواص قرار دارد و می‌توان گفت این اختلاف غیرواقعی است.

### ۵-۵- بررسی اثر جهت بارگذاری بر مدول یانگ نانولوله های کربنی

در تمامی شبیه‌سازی‌های صورت گرفته در قسمت‌های قبل، مدول یانگ نانولوله‌ی تحت کشش مورد بررسی قرار گرفته شده است. در این بخش هدف بررسی اثر جهت بارگذاری بر مدول یانگ نانولوله های کربنی است. به این منظور، با اعمال بار فشاری روی نانولوله ها مدول یانگ فشاری هر سه نوع ساختار تعیین و با مدول

کششی مقایسه گردید. نتایج این بررسی درجدول (۵) ارائه شده است. سه نانولوله، که هر کدام به عنوان نماینده‌ی یکی از سه ساختار نانولوله‌ها می‌باشد، مورد بررسی قرار گرفت. مقایسه‌ی نتایج ارائه شده در جدول (۵) حاکی از این است که مدول یانگ کششی و فشاری نانولوله‌های کربنی کاملاً برابر است. در نتیجه، جهت بارگذاری روی نتایج تأثیری ندارد.

## ۶- نتیجه‌گیری

در این مقاله به شبیه‌سازی انواع ساختارهای نانولوله کربنی با استفاده از روش اجزای محدود بر مبنای روش مکانیک مولکولی پرداخته شد. تأثیر پارامترهای هندسی نانولوله‌های کربنی شامل قطر، طول و کایرالیته بر مدول یانگ و مدول برشی آن‌ها، به‌طور مستقل بررسی شد. همچنین میزان کاهش مدول نانولوله کربن در اثر به وجود آمدن عیب جای خالی و افزایش تعداد و اثر مکان جای این عیب مورد بررسی قرار گرفت. نتایج این پژوهش را می‌توان به صورت زیر خلاصه کرد:

در هر سه نوع نانولوله‌ی معیوب دارای قطر کم، مدول یانگ و برشی با افزایش قطر نانولوله افزایش می‌یابد. همچنین در هر سه نوع ساختار، از قطر ۲۰ آنگستروم به بعد اثر قطر نانولوله به مقدار بسیار قابل توجهی کاهش یافته و مدول یانگ و برشی به مدول یانگ و برشی ثابت ورقه‌ی گرافن که هیچ اثری از انحنا در آن وجود ندارد نزدیک می‌شود. مدول یانگ نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ معیوب با افزایش طول نانولوله افزایش می‌یابد درحالی‌که در نانولوله‌ی معیوب کایرال با افزایش طول، مدول یانگ کاهش می‌یابد.

## جدول ۵- بررسی اثر مدول یانگ فشاری هر سه نوع ساختار نسبت به مدول کششی

نوع ساختار (n,m)	قطر (Å)	طول (Å)	زاویه کایرال (degree)	مدول یانگ کششی (TPa)	مدول یانگ فشاری (TPa)
(۲۶,۰)	۲۰/۳۶۹	۲۴۰/۸۶	۰	۱/۰۳۹۷۲	۱/۰۳۹۷۲
(۲۱,۸)	۲۰/۳۲۴	۲۴۰/۶۶	۱۵/۴۸۹۵	۱/۰۴۴۳۳	۱/۰۴۴۳۳
(۱۵,۱۵)	۲۰/۳۵۴	۲۴۱/۲	۳۰	۱/۰۴۰۳۲	۱/۰۴۰۳۲

همچنین، در هر سه ساختار معیوب آرمچیر، زیگزاگ و کایرال با افزایش طول نانولوله، مدول برشی افزایش می‌یابد. ولی از طول ۲۴۰ آنگستروم به بعد اثر طول ناچیز بوده و مدول یانگ و مدول برشی برای هر سه ساختار تقریباً مقدار ثابتی دارد. قطر نانولوله، تأثیر بیشتری نسبت به طول نانولوله بر خواص الاستیک دارد، به‌ویژه بر مدول یانگ. همچنین برای نانولوله‌هایی با قطر بزرگ‌تر از ۲۰ آنگستروم و طول بزرگ‌تر از ۲۴۰ آنگستروم، تأثیر ابعاد نانولوله بر مدول‌های یانگ و برشی بسیار ناچیز است و تنها عامل مؤثر بر خواص مکانیکی برای این دسته از نانولوله‌های سالم و معیوب، کایرالیته یا نوع ساختار نانولوله است. نانولوله زیگزاگ کم‌ترین مدول یانگ را در مقایسه با نانولوله‌های آرمچیر و کایرال دارد و در نانولوله کایرال با افزایش زاویه کایرال، مدول یانگ افزایش می‌یابد. در بین نانولوله‌ها با ساختار آرمچیر، زیگزاگ و کایرال، عیب جای خالی بیشترین تأثیر را بر روی مدول یانگ نانولوله کایرال، با زاویه کایرال ۱۵/۴۹ درجه دارد. همچنین، به‌طور کلی



با افزایش قطر و یا طول نانولوله، در تعداد عیب ثابت، تأثیر عیب جای خالی بر مدول یانگ در هر سه ساختار نانولوله کاهش می‌یابد.

نانولوله آرمچیر کمترین مدول برشی را در مقایسه با سایر ساختارها دارد. همچنین، با افزایش زاویه کایرال، مدول برشی کاهش می‌یابد. مدول برشی نانولوله‌های کایرال در زاویه‌های کمتر از ۱۱ درجه اندکی بیشتر از ساختار زیگزاگ است. این در حالی است که در زاویه‌های بزرگ‌تر از ۱۱ درجه، نانولوله‌های کایرال مدول برشی کمتری از ساختار زیگزاگ دارند. بالاخره، مکان عیب جای خالی در طول نانولوله بر مدول یانگ و مدول برشی اثر قابل ملاحظه‌ای ندارد و می‌توان از آن صرف نظر کرد. همچنین مدول‌های یانگ کششی و فشاری نانولوله‌های کربنی هیچ تفاوتی نداشت، لذا جهت بارگذاری اثری روی نتایج ندارد.

## مراجع

- [1] Iijima, S., "Helical Microtubules of Graphitic Carbon", *Nature*, Vol. 354, No. 6348, pp. 56–58, (1991).
- [2] Belin, T., and Epron, F., "Characterization Methods of Carbon Nanotubes: A Review", *Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology*, Vol. 119, No. 2, pp. 105–118, (2005).
- [3] Li, F., Cheng, H. M., Bai, S., and Su, G., "Tensile Strength of Single-walled Carbon Nanotubes Directly Measured from Their Macroscopic Ropes", *Applied Physics Letters*, Vol. 77, No. 2000, pp. 3161–3163, (2000).
- [۴] رفیعی، ر. و پورعزیزی، ر. "بررسی تأثیر آسیب ساختاری بر روی خواص مکانیکی نانولوله کربن"، *مجله علمی پژوهشی مهندسی مکانیک مدرس*، ج ۱۳، ش ۱۳، ص ۱۶۵–۱۷۵، (۱۳۹۲).
- [5] Sinnott, S. B., "Chemical Functionalization of Carbon Nanotubes", *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, Vol. 2, No. 2, pp. 113–123, (2002).
- [6] Bahr, J. L., and Tour, J. M., "Covalent Chemistry of Single-wall Carbon Nanotubes", *Journal of Materials Chemistry*, Vol. 12, No. 7, pp. 1952–1958, (2002).
- [7] Treacy, M. M. J., Ebbesen, T. W., and Gibson, J. M., "Exceptionally High Young's Modulus Observed for Individual Carbon Nanotubes", *Nature*, Vol. 381, No. 6584, pp. 678–680, (1996).
- [8] Krishnan, A., Dujardin, E., Ebbesen, T. W., Yianilos, P. N., and Treacy, M. M. J., "Young's Modulus of Single-walled Nanotubes", *Physical Review B*, Vol. 58, No. 20, pp. 14013–14019, (1998).
- [۹] ذاکری، م. و بصیری، ا. "تعیین مدول‌های برشی و خمشی نانولوله‌های کربنی با ساختارهای کربنی کایرال"، *مجله علمی پژوهشی مهندسی مکانیک مدرس*، ج ۱۳، ش ۱۴، ص ۵۶–۶۷، (۱۳۹۲).
- [10] Kuwar, M., and Kamal, S., "Molecular Dynamics Simulation Study of Novel Properties of Defect Full Single Walled Carbon Nanotubes", *International Journal of Application or*

- Innovation in Engineering & Management (IJAIEEM), Vol. 2, No. 2, pp. 77–81, (2013).
- [11] Kumar, A., Sharma, K., Singh, P. K., and Dwivedi, V. K., “Mechanical Characterization of Vacancy Defective Single-walled Carbon Nanotube/epoxy Composites”, *Materials Today: Proceedings*, Vol. 4, No. 2, pp. 4013–4021, (2017).
- [12] Sammalkorpi, M., Krashennnikov, A., Kuronen, A., Nordlund, K., and Kaski, K., “Mechanical Properties of Carbon Nanotubes with Vacancies and Related Defects”, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, Vol. 70, No. 24, pp. 1–8, (2004).
- [13] Rafiee, R., “Prediction of Engineering Properties of CNT/epoxy Composites using Stochastic Modeling”, Ph.D. Thesis, Department of Mechanical Engineering, Iran University of Science and Tech, (2010).
- [14] Parvaneh, V., and Shariati, M., “Effect of Defects and Loading on Prediction of Young’s Modulus of SWCNTs”, *Acta Mechanica*, Vol. 216, No. 1–4, pp. 281–289, (2011).
- [15] Ghavamian, A., Rahmandoust, M., and Öchsner, A., “A Numerical Evaluation of the Influence of Defects on the Elastic Modulus of Single and Multi-walled Carbon Nanotubes”, *Computational Materials Science*, Vol. 62, pp. 110–116, (2012).
- [16] Ouyang, M., “Atomically Resolved Single-walled Carbon Nanotube Intramolecular Junctions”, *Science*, Vol. 291, No. 5501, pp. 97–100, (2001).
- [17] Gogotsi, Y., “*Nanomaterials Handbook*”, CRC Press/Taylor & Francis, London & New York, (2006).
- [18] Ávila, A. F., and Lacerda, G. S. R., “Molecular Mechanics Applied to Single-walled Carbon Nanotubes”, *Materials Research*, Vol. 11, No. 3, pp. 325–333, (2008).
- [19] Ru, C. Q., “Effective Bending Stiffness of Carbon Nanotubes”, *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, Vol. 62, No. 15, pp. 9973–9976, (2000).
- [20] Pantano, A., Parks, D. M., and Boyce, M. C., “Mechanics of Deformation of Single and Multi-wall Carbon Nanotubes”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 52, No. 4, pp. 789–821, (2004).
- [21] Odegard, G. M., Gates, T. S., Nicholson, L. M., and Wise, K. E., “Equivalent-Continuum Modeling of Nano-structured Materials”, *Composites Science and Technology*, Vol. 62, No. 14, pp. 1869–1880, (2002).
- [22] Meo, M., and Rossi, M., “Prediction of Young’s Modulus of Single Wall Carbon Nanotubes by Molecular-mechanics Based Finite Element Modelling”, *Composites Science and Technology*, Vol. 66, No. 11–12, pp. 1597–1605, (2006).
- [23] Wernik, J. M., and Meguid, S. A., “Multiscale Modeling of the Nonlinear Response of Nano-reinforced Polymers”, *Acta Mechanica*, Vol. 217, No. 1–2, pp. 1–16, (2011).
- [24] Tserpes, K. I., and Papanikos, P., “Finite Element Modeling of Single-walled Carbon Nanotubes”, *Composites Part B: Engineering*, Vol. 36, No. 5, pp. 468–477, (2005).

- [25] Li, C., and 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).
- [26] Lu, J. P., "Elastic Properties of Carbon Nanotubes and Nanoropes", *Physical Review Letters*, Vol. 79, No. 7, pp. 1297–1300, (1997).
- [27] Hernández, E., Goze, C., Bernier, P., and A, R., "Elastic Properties of Single-wall Nanotubes", *Applied Physics A*, Vol. 292, pp. 287–292, (1999).
- [28] Jin, Y., and Yuan, F. G., "Simulation of Elastic Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes", *Composites Science and Technology*, Vol. 63, No. 11, pp. 1507–1515, (2003).
- [29] Shokrieh, M. M., and Rafiee, R., "Prediction of Young's Modulus of Graphene Sheets and Carbon Nanotubes using Nanoscale Continuum Mechanics Approach", *Materials & Design*, Vol. 31, No. 2, pp. 790–795, (2010).
- [30] Chang, T., and Gao, H., "Size-dependent Elastic Properties of a Single-walled Carbon Nanotube via a Molecular Mechanics Model", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 51, No. 6, pp. 1059–1074, (2003).
- [31] Chen, L., Zhao, Q., Gong, Z., and Zhang, H., "The Effects of Different Defects on the Elastic Constants of Single-walled Carbon Nanotubes", 2010 IEEE 5th International Conference on Nano/Micro Engineered and Molecular Systems, Xiamen, China, No. 50605039, pp. 777–780, (2010).
- [32] Hernandez, E., Goze, C., Bernier, P., and Rubio, A., "Elastic Properties of C and BxCyNz Composite Nanotubes", *Physical Review Letters*, Vol. 80, No. 20, pp. 4502–4505, (1998).
- [33] Lu, X., and Hu, Z., "Mechanical Property Evaluation of Single-walled Carbon Nanotubes by Finite Element Modeling", *Composites Part B: Engineering*, Vol. 43, No. 4, pp. 1902–1913, (2012).

### فهرست نمادهای انگلیسی

$A$ : مساحت سطح مقطع المان تیر

$A_{NT}$ : مساحت سطح مقطع نانولوله

$\vec{a}_1$  و  $\vec{a}_2$ : بردارهای واحد که با هم زاویه ۶۰ درجه می‌سازند

$a_{c-c}$ : طول پیوند کربن-کربن

$\vec{C}_h$ : بردار کایرال

$D$ : قطر نانولوله کربنی

$d$ : قطر المان تیر

- $d_{NT}^{\circ}$  : قطر اولیه نانولوله
- $E_{bonded}$  : انرژی پیوندی
- $E_{nonbonded}$  : انرژی غیر پیوندی
- $E_s$  : انرژی پتانسیل کششی
- $E_b$  : انرژی پتانسیل خمشی
- $E_t$  : انرژی پتانسیل پیچشی
- $E_l$  : انرژی پتانسیل خارج صفحه‌ای
- $E_{vdw}$  : نیروهای واندروالس
- $E_{es}$  : نیروهای الکترواستاتیکی
- $E_{hb}$  : نیروهای پیوندهای هیدروژنی
- $E$  : مدول یانگ المان تیر
- $E_{CNT}$  : مدول یانگ نانولوله کربنی
- $F_z$  : مجموع نیروی محوری وارد شده به نانولوله
- $G$  : مدول برشی المان تیر
- $G_{CNT}$  : مدول برشی نانولوله کربنی
- $I$  : ممان اینرسی المان تیر
- $J$  : ممان اینرسی قطبی المان تیر
- $k_r$  : ثوابت نیرویی کشش پیوند
- $k_{\theta}$  : ثوابت نیرویی خمش پیوند
- $k_{\varphi}$  : ثوابت نیرویی پیچش پیوند
- $L_{CNT}$  : طول نانولوله کربنی
- $L$  : طول المان تیر
- $L_{NT}^{\circ}$  : طول اولیه نانولوله
- $m$  : بیانگر تعداد شش ضلعی‌ها در راستای  $a_2$
- $n$  : بیانگر تعداد شش ضلعی‌ها در راستای  $a_1$
- $r_0$  : شعاع خارجی نانولوله کربنی
- $r_i$  : شعاع داخلی نانولوله کربنی
- $t$  : ضخامت دیواره‌ی نانولوله کربنی
- $U_{Axialforce}$  : انرژی ناشی از کشش پیوندهای کربنی
- $U_{bending}$  : انرژی ناشی از خمش پیوندهای کربنی
- $U_{torsion}$  : انرژی ناشی از پیچش پیوندهای کربنی
- $X$  : عددی بی‌بعد بین صفر تا یک متغیر
- $x$  : فاصله قرارگیری عیب از سر نانولوله

**نمادهای یونانی** $2\alpha$  : تغییرات زاویه‌ی داخل صفحه‌ای المان تیر $\varepsilon_r$  : کرنش عرضی نانولوله $\varepsilon_l$  : کرنش طولی نانولوله $\varepsilon_z$  : کرنش محوری نانولوله $\nu_{CNT}$  : ضریب پواسون نانولوله کربنی $\theta$  : زاویه‌ی کایرال $\Delta\beta$  : تغییرات پیچش خارج صفحه‌ای المان تیر $\Delta L$  : تغییرات طول المان تیر $\Delta r$  : تغییرات طول پیوند $\Delta\theta$  : تغییرات زاویه‌ی داخل صفحه‌ای پیوند $\Delta\varphi$  : تغییرات پیچش خارج صفحه‌ای پیوند $\Delta d_{NT}$  : میزان کاهش قطر نانولوله $\Delta L_{NT}$  : تغییرات طول نانولوله $\sigma_z$  : تنش محوری نانولوله

**Abstract**

Carbon nanotubes are obtained from rolling a graphene sheet of a given size and at a specific direction. Due to the strong carbon-carbon covalent bonds, nanotubes have unique mechanical and electrical properties. In this paper, using finite element and molecular mechanics methods, the covalent bonds between the carbon atoms in the nanotube have been modeled using linear beam element. Carbon nanotubes with different diameter and length ranges have been analyzed. The effects of nanotube length, diameter and chirality on nanotubes Young's and shear Modulus have been investigated, independently. Also, the decrease in nanotube modulus due to the number and position of vacancy defects has been determined. The results show that, nanotube diameter has a larger effect, compared to nanotube length, on elastic properties, especially Young's modulus. Comparing the results obtained for armchair, zigzag, and chiral nanotubes, vacancy defect had the most effect on chiral nanotube Young's modulus, with a chiral angle of 49.15 degrees.