

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه بیرجند
دانشکده مهندسی

پایان نامه دوره کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک – طراحی کاربردی

بررسی رشد ترک در صفحه ی گرافن

نگارش:

حسن حیرانی

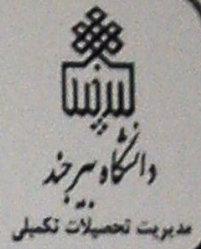
استاد راهنما:

دکتر سید یوسف احمدی بروغنی

مهر ۱۳۹۰

فرم شماره ۱۰

صورتحله دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد



با تاییدات خداوند متعال جلسه دفاع از پایان نامه تحصیلی کارشناسی ارشد آقای حسن حیرانی به شماره دانشجویی: ۸۸۱۳۳۲۲۰۱۱ رشته: مهندسی مکانیک گرایش: طراحی کاربردی دانشکده: مهندسی تحت عنوان:

بررسی رشد ترک در صفحه گرافن

به ارزش: ۶ واحد در ساعت: ۱۷ روز: شنبه مورخ: ۱۳۹۰/۷/۳۰

با حضور اعضای محترم جلسه دفاع و نماینده تحصیلات تکمیلی به شرح ذیل تشکیل گردید:

امضاء	رتبه علمی	نام و نام خانوادگی	سمت
	استادیار	سید یوسف احمدی بروغنی	استاد راهنمای اول
			استاد راهنمای دوم
			استاد مشاور اول
			استاد مشاور دوم
	دانشیار	سید حجت هاشمی	داور اول
	استادیار	سعید حدیدی مود	داور دوم
	استادیار	مهدی راغبی	نماینده تحصیلات تکمیلی

نتیجه ارزیابی دفاع که منوط به ارائه اصلاحات پیشنهادی توسط هیئت داوران حداکثر ظرف مدت یکماه پس از تاریخ دفاع می باشد، به شرح زیر مورد تایید قرار گرفت:

قبول (با درجه عالی) و امتیاز: (۱۹/۱۳) دفاع مجدد غیر قابل قبول
۱- عالی (۲۰-۱۹) ۲- بسیار خوب (۱۸-۱۸/۹۹) ۳- خوب (۱۷-۱۶/۹۹) ۴- قابل قبول (۱۵-۱۴/۹۹)

(بدیهی است عواقب آموزشی ناشی از عدم ارائه به موقع اصلاحات مزبور به عهده دانشجو می باشد)

تقدیم به

خانواده عزیزم

تشر و قدردانی

ضمن سپاس بیشمار آفریدگار بی همتا، بدین وسیله از جناب آقای دکتر سید یوسف احمدی بروغنی استاد راهنمای ارجمندم که زحمات زیادی در راستای انجام این پروژه متحمل شده و از مراحل آغازین تا پایان کار راهنمای اینجانب بوده اند تشر و قدردانی می کنم.

از خانواده عزیزم که نه تنها در به سرانجام رساندن این پروژه بلکه در تمامی مراحل زندگانی یاور و پشتیبانم بوده اند صمیمانه تشر می نمایم.

حسن حیرانی

چکیده

در این کار ابتدا یک مدل مکانیک محیط پیوسته برای بررسی خواص مکانیکی صفحات گرافن^۱ ارائه می شود. پایه ی مفهوم پیشنهادی این تصور است که صفحه ی گرافن یک سازه ی قاب-فضایی است، به این صورت که در نرم افزار انسیس مکان اتم های کربن در صفحه ی گرافن به عنوان گره و پیوند کوالانسی بین اتم های کربن با المان های BEAM23 تعریف شده است. خواص المان ها با برقراری یک ارتباط بین مدل مکانیک محیط پیوسته و ساختار اتمی مسئله پیدا می شود. ایجاد مدل در محیط نرم افزار انسیس با استفاده از قابلیت برنامه نویسی APDL^۲ نرم افزار انجام شده است. در قسمت های اولیه، تأثیر زاویه کایرال^۳ روی مدول کششی صفحه ی گرافن بررسی شده است. در تمامی مراحل کار از فرض تغییر شکل های بزرگ^۴ در نرم افزار استفاده گردیده است. محاسبات تغییر شکل الاستیک صفحات گرافن معلوم می کند که مدول کششی این صفحات مستقل از اندازه ی صفحه و تا حدودی وابسته به نوع صفحه و اندازه ی زاویه ی کایرالشان می باشد. مدول برشی صفحات گرافن وابسته به ابعادشان یافت شد. در ادامه تأثیر نقایص Stone-Wales (SW) و جای خالی^۵ بر خواص الاستیک گرافن بررسی شده است. نتایج اثرگذاری این نقایص بر تنش و کرنش شکست صفحات را نشان می دهد. در انتها، یک مدل شکست پیشرونده^۶ برای مدل سازی رشد ترک در صفحه ی گرافن ارائه شده است. ایجاد و شروع ترک در صفحه به دلیل وجود نقایص اتفاق می افتد. وجود نقایصی از قبیل نقص SW و نقص جای خالی در صفحات گرافن به اثبات رسیده است. بنابراین، این نقایص به عنوان نقایص اولیه در صفحه ی گرافن مدل شده، تا در حین بارگذاری ترک ایجاد گردد. مسیر پارگی و ترتیب شکست المان های صفحات گرافن مختلف در شکل هایی نشان داده شده است. نتایج توافق خوبی با کارهای پیشین نشان می دهند.

کلید واژه: المان محدود، ترک، کایرالیته، گرافن، نقص

¹ Graphene sheets

² ANSYS Parametric Design Language

³ Chiral

⁴ Large-deformation

⁵ Vacancy

⁶ Progressive fracture

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
ج	فهرست علایم و نشانه‌ها
ه	فهرست جدول‌ها
و	فهرست شکل‌ها
۱	فصل ۱- فناوری نانو، صفحات گرافن، خواص و کاربرد ها
۱	۱-۱- فناوری نانو چیست؟
۳	۲-۱- نانو ساختارهای کربنی
۳	۱-۲-۱- گرافن
۶	۲-۲-۱- گرافیت
۷	۳-۲-۱- نانولوله ی کربنی
۸	۴-۲-۱- فولرین ها
۱۰	۵-۲-۱- تروس (حلقه)
۱۰	۶-۲-۱- نانوبود
۱۱	۳-۱- کاربرد های فناوری نانو
۱۲	۴-۱- تاریخچه ی گرافن
۱۳	۵-۱- ابزارهای تشریح گرافن
۱۴	۱-۵-۱- میکروسکوپ نوری
۱۵	۲-۵-۱- میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM)
۱۵	۳-۵-۱- میکروسکوپ انتقال الکترون (TEM)
۱۶	۶-۱- روش های ساخت گرافن
۱۷	۱-۶-۱- ورقه ورقه کردن مکانیکی
۱۹	۲-۶-۱- رشد پشتیبانی شده
۲۱	۳-۶-۱- اکسید گرافن و رهیافت های شیمیایی مرطوب
۲۴	۴-۶-۱- روش فاز گازی بدون زیرلایه
۲۵	۷-۱- خواص متنوع گرافن
۲۵	۱-۷-۱- الکترونیک
۲۶	۲-۷-۱- اپتیک
۲۷	۳-۷-۱- مکانیک
۲۹	۸-۱- کاربرد های گرافن
۲۹	۱-۸-۱- تصویر برداری مستقیم از نانو مواد سخت و نرم
۳۰	۲-۸-۱- حسگرهای گرافن

۳۲	۳-۸-۱	نازک ترین روان کننده ی جامد.....
۳۲	۹-۱	پیشینه ی پژوهش.....
۳۹	فصل ۲	فرمولاسیون و روش های تحلیل صفحات گرافن.....
۳۹	۱-۲	ساختار اتمی و هندسه صفحه ی گرافن.....
۴۳	۲-۲	روش های مدل سازی صفحات گرافن.....
۴۳	۱-۲-۲	مدل های مولکولی.....
۴۵	۲-۲-۲	مدل مکانیک محیط پیوسته.....
۵۱	فصل ۳	روش اجزاء محدود.....
۵۱	۱-۳	مقدمه
۵۴	۲-۳	کمینه نمودن انرژی پتانسیل.....
۵۶	۳-۳	روش کاهش خطای معادلات دیفرانسیل حاکم.....
۵۷	3-3-1	روش حل گالرکین.....
۵۸	۴-۳	روابط حاکم بر صفحات گرافن.....
۶۰	فصل ۴	بررسی خواص الاستیک و رشد ترک در صفحات گرافن.....
۶۰	۱-۴	مقدمه
۶۱	۲-۴	خواص الاستیک صفحات گرافن.....
۶۱	۱-۲-۴	مدول کششی صفحات گرافن.....
۷۶	۲-۲-۴	مدول برشی صفحات گرافن.....
۸۴	۳-۲-۴	نسبت پواسون صفحات گرافن.....
۸۸	۳-۴	اثر نقایص هندسی بر خواص الاستیک صفحات گرافن.....
۸۹	۱-۳-۴	اثر بر مدول کششی صفحه.....
۹۴	۲-۳-۴	اثر بر مدول برشی صفحه.....
۹۷	۴-۴	رشد ترک در صفحات گرافن.....
۹۷	۱-۴-۴	صفحه ی آرمچیر.....
۱۱۰	۲-۴-۴	صفحه ی زیگزاگ.....
۱۲۳	۳-۴-۴	مقایسه ی مسیر پارگی.....
۱۲۷	فصل ۵	نتیجه گیری و پیشنهادات.....
۱۲۷	۱-۵	نتیجه گیری.....
۱۳۰	۲-۵	پیشنهادات.....
۱۳۱	فصل ۶	منابع.....

فهرست علائم و نشانه‌ها

علائم اختصاری	عنوان
$W_{\text{body}} (j)$	انرژی بارگذاری حجمی
$W_{\text{surf}} (j)$	انرژی بارگذاری سطحی
$u_{\omega} (j)$	انرژی پیچش خارج از صفحه
$u_{\phi} (j)$	انرژی پیچش زاویه دو سطحی
$u_{\theta} (j)$	انرژی خمش پیوند
$u_r (j)$	انرژی کشش پیوند
$\Lambda^e (j)$	انرژی کرنشی در حالت سه بعدی
$u_{\text{vdw}} (j)$	انرژی نیروهای واندروالس
$P_i (N)$	بار سطحی در راستای i
\vec{C}	بردار کایرال
n	تعداد گره
$\Delta\beta (rad)$	تغییر زاویه ی نسبی دو انتهای تیر
$\tau (Pa)$	تنش برشی
$\sigma (Pa)$	تنش کششی
$m (kg)$	جرم
$\theta_0 (rad)$	زاویه ی اولیه ی پیوند
$\alpha (rad)$	زاویه ی چرخش انتهای تیر
$\theta (rad)$	زاویه ی کایرال
$k_{\tau} (N \text{ nm rad}^{-2})$	سختی پیچشی پیوند
$k_{\theta} (N \text{ nm rad}^{-2})$	سختی خمشی پیوند
$k_r (N \text{ nm}^{-1})$	سختی کششی پیوند
$A (m^2)$	سطح مقطع
$t (nm)$	ضخامت صفحه
$L (nm)$	طول المان تیر
$r_0 (nm)$	طول اولیه ی پیوند
$b (nm)$	طول صفحه
$r (nm)$	فاصله اتم کربن از اتم مجاور
$d (nm)$	قطر المان تیر
γ	کرنش برشی

ϵ_T	کرنش حرارتی
ϵ	کرنش طولی
T (N.m)	گشتاور پیچشی
M (N.m)	گشتاور خمشی
G (Pa)	مدول برشی
E (Pa)	مدول کششی
J (m ⁴)	ممان اینرسی قطبی
ν	نسبت پواسون
F (N)	نیرو

فهرست جدول‌ها

صفحه	عنوان
۶	جدول ۱-۱: خواص فیزیکی گرافیت
۱۷	جدول ۲-۱: مزایا و معایب روش‌های ساخت گرافن
۴۳	جدول ۱-۲: پارامترهای هندسی صفحه‌ی گرافن
۷۴	جدول ۱-۴: مقایسه‌ی مدول کششی
۷۶	جدول ۲-۴: مقایسه‌ی تنش و کرنش شکست
۸۴	جدول ۳-۴: مقایسه‌ی مدول برشی

فهرست شکل‌ها

عنوان	صفحه
شکل ۱-۱: آرایش شش ضلعی منظم صفحه ی گرافن	۴
شکل ۲-۱: شبکه ی گرافن شامل دو زیر شبکه ی مثلثی در هم نفوذ کرده	۴
شکل ۳-۱: باند $\pi - \pi^*$ سازه ی گرافن	۵
شکل ۴-۱: گرافن پایه ی تمام نانو ساختارها	۵
شکل ۵-۱: شکل شماتیک گرافیت (تشکیل شده از سه لایه گرافن)	۷
شکل ۶-۱: یک نانولوله ی کربنی تک دیواره با انتهای بسته	۸
شکل ۷-۱: باکی بال	۹
شکل ۸-۱: ساختار یک نانو بود پایدار	۱۰
شکل ۹-۱: تکنیک های عمده برای تشریح گرافن (a) میکروسکوپ نوری (b) میکروسکوپ نیروی اتمی (c) میکروسکوپ انتقال الکترون	۱۳
شکل ۱۰-۱: گرافن ورقه ورقه شده به صورت میکرو مکانیکی. تصاویر نوری (a) گرافیت نازک (b) گرافن کم لایه و گرافن تک لایه (کنتراست روشن تر) روی یک لایه ی SiO_2 با ضخامت 300 nm	۱۴
شکل ۱۱-۱: گرافن رشد یافته روی نیکل (a) تصویر نوری یک فیلم نیکل پیش-آراسته روی SiO_2/Si (b) تصویر نوری گرافن رشد یافته و منتقل شده از سطح نیکل به زیر لایه ای دیگر.	۲۱
شکل ۱۲-۱: فرایند برهمکنش- اکسیداسیون برای تهیه GO, FG, FGO و graphene	۲۴
شکل ۱۳-۱: تصویر با وضوح اتمی از یک صفحه ی گرافن با ساختار کامل و تمیز ساخته شده با روش فاز گازی بدون زیر لایه. اتم های کربن در تصویر سفید به نظر می رسند	۲۵
شکل ۱۴-۱: شفافیت نوری (a) تصویر میکروسکوپ نوری از کریستال های گرافن با ضخامت یک و دو اتم. (b) عبور در $550 \text{ nm} \sim \lambda$ به عنوان تابعی از ضخامت فیلم های نازک GO کاهش یافته.	۲۷
شکل ۱۵-۱: خواص مکانیکی (a) نانو تورفتگی شماتیک AFM روی گرافن معلق. (b) منحنی بارگذاری- باربرداری برای وسیله شکل a. (c) طرح شماتیک یک تشدید کننده گرافن. (d) منحنی دامنه در برابر فرکانس رزونانس برای مد بنیادی یک تشدید کننده ی گرافن تک لایه.	۲۸
شکل ۱۶-۱: یک تصویر با وضوح اتمی از یک نانو ذره ی طلا و سیترات در محیط اطرافش روی یک فیلم پشتیبانی گرافن	۳۰
شکل ۱۷-۱: حسگر زیستی دارای لایه ی گرافن	۳۲
شکل ۱-۲: بردارهای یکه ی a_1 و a_2 در مختصات گرافنی	۳۹
شکل ۲-۲: بردارهای کایرال $C = 4a_1 + 2a_2$ و $C = a_1 + 3a_2$ در صفحه ی مختصات گرافنی ...	۴۰
شکل ۳-۲: زاویه ی کایرال بین بردار $C = 4a_1 + 3a_2$ و محور مربوط به بردار یکه ی a_1	۴۰
شکل ۴-۲: دو بردار C_1 و C_2 با یکدیگر هم ارز هستند.	۴۱

- شکل ۲-۵: در ناحیه ی با رنگ تیره از صفحه، شرط $m \geq n$ برقرار است. ۴۱
- شکل ۲-۶: کوتاه ترین مسیر مربوط به بردارهای کایرال و واحد های تکرار شونده ی آنها ۴۲
- شکل ۲-۷: سه نوع صفحه ی گرافن زیگزاگ، آرمچیر و کایرال ۴۳
- شکل ۲-۸: شبیه سازی نانولوله به روش قاب فضایی ۴۶
- شکل ۲-۹: برهمکنش های بین اتمی در مکانیک مولکولی ۴۷
- شکل ۳-۱: یک المان یک بعدی ۵۲
- شکل ۳-۲: منحنی نیرو-کرنش پتانسیل مورس اصلاح شده. فقط تا کرنش ۱۹٪ (قسمت تیره) مدل شده است ۵۸
- شکل ۴-۱: نمونه ی یک صفحه ی گرافن زیگزاگ ایجاد شده در محیط انسیس ۶۰
- شکل ۴-۲: صفحه ی گرافن آرمچیر همراه با قیود و بارگذاری کششی ۶۱
- شکل ۴-۳: منحنی تنش-کرنش برای صفحه ی آرمچیر $2.4157 \times 1.7229 \text{ nm}$ ۶۳
- شکل ۴-۴: تغییرات نسبت تنش به کرنش، بر حسب کرنش طولی برای صفحه ی آرمچیر $2.4157 \times 1.7229 \text{ nm}$ ۶۳
- شکل ۴-۵: مقایسه ی منحنی تنش-کرنش برای سه صفحه ی آرمچیر با ابعاد مختلف ۶۴
- شکل ۴-۶: مقایسه ی نسبت تنش به کرنش برای سه صفحه ی آرمچیر با ابعاد مختلف ۶۵
- شکل ۴-۷: منحنی تنش-کرنش برای صفحه ی زیگزاگ $2.2151 \times 1.9894 \text{ nm}$ ۶۶
- شکل ۴-۸: تغییرات نسبت تنش به کرنش بر حسب کرنش برای صفحه ی زیگزاگ $2.2151 \times 1.9894 \text{ nm}$ ۶۶
- شکل ۴-۹: مقایسه ی منحنی تنش-کرنش برای سه صفحه ی زیگزاگ با ابعاد مختلف ۶۷
- شکل ۴-۱۰: مقایسه ی مدول کششی برای سه صفحه ی زیگزاگ با ابعاد مختلف ۶۷
- شکل ۴-۱۱: منحنی تنش-کرنش صفحه ی کایرال (۳و۱) با اندازه ی $3.3789 \times 1.8129 \text{ nm}$ ۶۸
- شکل ۴-۱۲: تغییرات نسبت تنش به کرنش بر حسب کرنش صفحه ی کایرال (۳و۱) با اندازه ی $3.3789 \times 1.8129 \text{ nm}$ ۶۹
- شکل ۴-۱۳: منحنی تنش-کرنش برای سه صفحه ی کایرال (۳و۱) با ابعاد مختلف ۷۰
- شکل ۴-۱۴: تغییرات نسبت تنش به کرنش بر حسب کرنش برای سه صفحه ی کایرال (۳و۱) با ابعاد مختلف ۷۰
- شکل ۴-۱۵: مقایسه ی منحنی تنش-کرنش برای دو صفحه با کایرالیته متفاوت ۷۱
- شکل ۴-۱۶: تغییرات نسبت تنش به کرنش بر حسب کرنش برای دو صفحه با کایرالیته متفاوت ۷۲
- شکل ۴-۱۷: مقایسه ی منحنی تنش-کرنش برای سه صفحه ی با کایرالیته متفاوت ۷۳
- شکل ۴-۱۸: تغییرات نسبت تنش به کرنش بر حسب کرنش برای سه صفحه با کایرالیته متفاوت ۷۳
- شکل ۴-۱۹: منحنی تنش-کرنش نانولوله ی آرمچیر و زیگزاگ تحت بارگذاری کششی ۷۵
- شکل ۴-۲۰: صفحه ی گرافن آرمچیر همراه با قیود و بارگذاری برشی به صورت جابجایی ۷۶
- شکل ۴-۲۱: منحنی تنش-کرنش برشی برای صفحه ی آرمچیر $2.4157 \times 1.7229 \text{ nm}$ ۷۸

- شکل ۲۲-۴: تغییرات نسبت تنش به کرنش برشی بر حسب کرنش برای صفحه ی آرمچیر $2.4157 \times 1.7229 \text{ nm}$ ۷۸
- شکل ۲۳-۴: مقایسه ی منحنی تنش-کرنش برشی برای سه صفحه ی آرمچیر با ابعاد مختلف ۷۹
- شکل ۲۴-۴: تغییرات نسبت تنش به کرنش برشی بر حسب کرنش برای سه صفحه ی آرمچیر با ابعاد مختلف ۸۰
- شکل ۲۵-۴: منحنی تنش-کرنش برشی برای صفحه ی زیگزاگ با اندازه $2.2151 \times 1.9894 \text{ nm}$ ۸۱
- شکل ۲۶-۴: تغییرات نسبت تنش به کرنش برشی بر حسب کرنش برای صفحه ی زیگزاگ با اندازه $2.2151 \times 1.9894 \text{ nm}$ ۸۱
- شکل ۲۷-۴: مقایسه ی منحنی تنش-کرنش برشی برای دو صفحه ی زیگزاگ با ابعاد مختلف ۸۲
- شکل ۲۸-۴: تغییرات نسبت تنش به کرنش برشی بر حسب کرنش برای دو صفحه ی زیگزاگ با ابعاد مختلف ۸۳
- شکل ۲۹-۴: نسبت پواسون بر حسب کرنش طولی برای صفحه ی آرمچیر $2.4157 \times 1.7229 \text{ nm}$ ۸۵
- شکل ۳۰-۴: مقایسه ی نسبت پواسون سه صفحه ی آرمچیر با ابعاد متفاوت ۸۶
- شکل ۳۱-۴: نسبت پواسون بر حسب کرنش طولی برای صفحه ی زیگزاگ $2.2151 \times 1.9894 \text{ nm}$ ۸۷
- شکل ۳۲-۴: مقایسه ی نسبت پواسون برای سه صفحه ی زیگزاگ با ابعاد مختلف ۸۸
- شکل ۳۳-۴: مدل صفحه ی آرمچیر با نقص SW ۸۹
- شکل ۳۴-۴: مدل صفحه ی زیگزاگ با نقص جای خالی ۸۹
- شکل ۳۵-۴: منحنی تنش-کرنش برای سه صفحه ی آرمچیر متفاوت ۹۰
- شکل ۳۶-۴: تغییرات نسبت تنش به کرنش برای سه صفحه ی آرمچیر مختلف ۹۱
- شکل ۳۷-۴: تأثیر نقص جای خالی بر نانولوله ی آرمچیر ۹۲
- شکل ۳۸-۴: منحنی تنش-کرنش برای سه صفحه ی زیگزاگ متفاوت ۹۳
- شکل ۳۹-۴: تغییرات نسبت تنش به کرنش بر حسب کرنش برای سه صفحه ی زیگزاگ متفاوت ۹۳
- شکل ۴۰-۴: منحنی تنش-کرنش برشی برای سه صفحه ی آرمچیر متفاوت ۹۴
- شکل ۴۱-۴: تغییرات نسبت تنش به کرنش برشی برای سه صفحه ی آرمچیر متفاوت ۹۵
- شکل ۴۲-۴: منحنی تنش-کرنش برشی سه صفحه ی زیگزاگ متفاوت ۹۶
- شکل ۴۳-۴: تغییرات نسبت تنش به کرنش برشی برای سه صفحه ی زیگزاگ متفاوت ۹۶
- شکل ۴۴-۴: مسیر پارگی صفحه ی گرافن آرمچیر با یک نقص SW و اعمال بارگذاری به صورت جابجایی ۹۸
- شکل ۴۵-۴: ترتیب شکست المان ها در صفحه با نقص SW و بارگذاری به صورت جابجایی ۹۹
- شکل ۴۶-۴: مسیر پارگی صفحه ی گرافن آرمچیر با یک نقص SW و اعمال بارگذاری به صورت نیرویی ۱۰۰

شکل ۴-۴۷: ترتیب شکست المان ها در صفحه با نقص SW و بارگذاری به صورت نیرویی ۱۰۱

شکل ۴-۴۸: مسیر پارگی صفحه ی گرافن آرمچیر با یک نقص جای خالی و اعمال بارگذاری به صورت جابجایی ۱۰۲

شکل ۴-۴۹: ترتیب شکست المان ها در صفحه با نقص جای خالی و بارگذاری به صورت جابجایی ۱۰۴

شکل ۴-۵۰: مسیر پارگی صفحه ی گرافن آرمچیر با یک نقص جای خالی و اعمال بارگذاری به صورت نیرویی ۱۰۵

شکل ۴-۵۱: ترتیب شکست المان ها در صفحه با نقص جای خالی و بارگذاری به صورت نیرویی ۱۰۷

شکل ۴-۵۲: مسیر پارگی صفحه ی گرافن آرمچیر طویل با یک نقص جای خالی و اعمال بارگذاری به صورت نیرویی ۱۰۸

شکل ۴-۵۳: ترتیب شکست المان ها در صفحه ی طویل با نقص جای خالی و بارگذاری به صورت نیرویی ۱۱۰

شکل ۴-۵۴: شکست در صفحه ی زیگزاگ دارای نقص SW و بارگذاری به صورت نیرویی ۱۱۱

شکل ۴-۵۵: مسیر پارگی در صفحه ی زیگزاگ دارای نقص SW و بارگذاری به صورت جابجایی ۱۱۲

شکل ۴-۵۶: ترتیب شکست المان ها در صفحه ی زیگزاگ با نقص SW و بارگذاری به صورت جابجایی ۱۱۳

شکل ۴-۵۷: مسیر پارگی صفحه ی زیگزاگ با نقص جای خالی رو به پایین و بارگذاری به صورت جابجایی ۱۱۴

شکل ۴-۵۸: ترتیب شکست المان های صفحه ی زیگزاگ با نقص جای خالی رو به پایین و بارگذاری به صورت جابجایی ۱۱۶

شکل ۴-۵۹: مسیر پارگی صفحه ی زیگزاگ با نقص جای خالی رو به بالا و بارگذاری به صورت جابجایی ۱۱۷

شکل ۴-۶۰: ترتیب شکست المان های صفحه ی زیگزاگ با نقص جای خالی رو به بالا و بارگذاری به صورت جابجایی ۱۱۸

شکل ۴-۶۱: مسیر پارگی صفحه ی زیگزاگ با نقص جای خالی رو به پایین و بارگذاری به صورت نیرویی ۱۱۹

شکل ۴-۶۲: ترتیب شکست المان های صفحه ی زیگزاگ با نقص جای خالی رو به پایین و بارگذاری به صورت نیرویی ۱۲۰

شکل ۴-۶۳: مسیر پارگی صفحه ی زیگزاگ با نقص جای خالی رو به بالا و بارگذاری به صورت نیرویی ۱۲۱

شکل ۴-۶۴: ترتیب شکست المان های صفحه ی زیگزاگ با نقص جای خالی رو به بالا و بارگذاری به صورت نیرویی ۱۲۲

شکل ۴-۶۵: مسیر پارگی در صفحه ی گرافن زیگزاگ ۱۲۳

شکل ۴-۶۶: مسیر پارگی در صفحه ی گرافن زیگزاگ با دو نوع نقص جای خالی ۱۲۳

شکل ۴-۶۷: مسیر پارگی در صفحه ی گرافن زیگزاگِ دارای یک پیوند ضعیف ۱۲۴

شکل ۴-۶۸: ترتیب شکست المان ها در صفحه ی گرافن زیگزاگِ دارای یک پیوند ضعیف ۱۲۵

شکل ۴-۶۹: رشد ترک در نانولوله ی زیگزاگ همراه با یک پیوند ضعیف ۱۲۶

شکل ۴-۷۰: رشد ترک در نانولوله ی زیگزاگ همراه با یک پیوند ضعیف ۱۲۶

فصل ۱ - فناوری نانو، صفحات گرافن، خواص و کاربردها

۱-۱ - فناوری نانو چیست؟

نانو از لغت یونانی Nanos یعنی کوچک مشتق شده و به معنی یک میلیاردم هر چیز است. بشر از همان ابتدای تاریخ به مقیاس های خیلی بزرگ و خیلی کوچک در طبیعت توجه داشته که این توجه بیشتر در محدوده ی نیاز های روزمره اش بوده است. با رشد جمعیت کره ی خاکی و محدود شدن منابع انرژی توجه به منابع جدید زیاد شده و با رشد دانش بشری توجه به مقیاس های بسیار کوچک، افزایش یافته است. فناوری نانو و ساختارهای تولید شده از آن، سال ها است که در طبیعت وجود داشته و در حال حاضر نیز ساختارهایی در مقیاس نانو در طبیعت شکل گرفته و می گیرد. فناوری نانو به فناوری اطلاق می شود که امکان ساخت و تولید مواد و ترکیبات مصنوعی در آزمایشگاه را برای انسان مقدور می سازد.

با توجه به اینکه در مقیاس نانو خواص مواد تغییر می کند و باعث تولید مواد جدیدی با عملکرد بهتر می گردد، لذا این فناوری توانسته است توجه کشورهای بزرگ و قدرتمند اقتصادی را به خود جلب کند. فناوری نانو امکان دست کاری و آرایش دوباره ی اتم ها را در اختیار انسان ها قرار داده است تا آنها بتوانند با تغییر در چیدمان اتم ها علاوه بر امکان تولید مواد جدید با خواص دلخواه خود، موادی با ساختار ساده و ارزان تولید نمایند. به دلیل اینکه قوانین فیزیک کلاسیک در ابعاد نانو، تغییر می کند و قوانین فیزیک کوانتوم حاکم می شود، مواد در مقیاس نانو از خود خصوصیات جدیدی نشان می دهند.

فناوری نانو که به فناوری مادون ریز معروف است، در آینده ای نزدیک تمام جنبه های زندگی بشر را متأثر خواهد نمود. علم مهندسی دگرگون خواهد شد و همچنین خواص مکانیکی، شیمیایی، الکتریکی، مغناطیسی، نوری و دیگر خواص مواد در ابعاد نانومتری قابل درک، شناسایی و تحلیل خواهد شد و تولید با هزینه، صرف وقت و انرژی کمتر انجام می گیرد. در آینده ای نه چندان دور به کمک این فناوری، محصولات با خواص بهتر، مطلوب تر، دوام بیشتر و هزینه ی تولید و نگهداری کمتری تولید خواهند شد.

به طور کلی فناوری نانو با دیگر علوم در تمامی گرایش ها هم راستا بوده و در واقع این فناوری مکملی برای علوم و فناوری های دیگر و نه رقیبی برای آنهاست. تجربه های گذشته ی توسعه ی فناوری های مختلف نشان داده است که نداشتن دور اندیشی در زمینه ی فناوری های در حال توسعه و نداشتن آمادگی کافی برای مواجهه با گسترش آنها لطمه های جبران ناپذیری به دولت ها و ملت ها زده است، بنابراین در دنیای کنونی که سرعت تحولات و پیشرفت ها به بیشترین مقدار خود تا به حال رسیده است، داشتن دور اندیشی برای مواجهه با آینده، در همه ی زمینه ها ضروری است.

دور اندیشی، آمادگی برای آینده است تا با شناخت فرصت ها و تهدید های احتمالی، شرایط لازم برای دستیابی هر چه بهتر به سود رقابتی، بهبود کیفیت زندگی و توسعه ی پایدار مشخص شود. در حقیقت دور اندیشی ابزاری لازم برای بقا در آینده و دفع خطرات و تهدید ها و استفاده از فرصت های آتی است. فناوری نانو یکی از فناوری های جدید است که آینده ی بسیار روشنی برای آن پیش بینی می شود. گستردگی دامنه ی تأثیر این فناوری بسیار زیاد بوده و گفته می شود این فناوری می تواند بیشتر جنبه های زندگی بشر را تحت تأثیر قرار دهد. از این جهت به کارگیری شیوه ی برخوردی مناسب با این پدیده و داشتن شناخت کافی از زمینه های مختلف آن، بسیار مهم است.

برای دور اندیشی فناوری نانو، در مرحله ی اول باید شناخت خوبی از عناصر تشکیل دهنده ی این فناوری به دست آورد. بدیهی است که هر چه این شناخت کامل تر باشد، دور اندیشی بر اساس آن ساده تر و دقیق تر خواهد بود. برای این شناخت کافی است تقسیم بندی مناسبی از اجزای این فناوری داشته باشیم، به گونه ای که رابطه ی بین قسمت های مختلف مشخص باشد. داشتن این تقسیم بندی به شناخت ابعاد مختلف این فناوری کمک می کند [۱].

واژه ی فناوری نانو اولین بار توسط نوریو تاینگوچی^۱ استاد دانشگاه علوم توکیو در سال ۱۹۷۴ مورد استفاده قرار گرفت. وی این واژه را برای توصیف ساخت مواد دقیقی که تکرانس ابعادی آنها در حد نانومتر

^۱ Norio Taniguchi

می باشد، به کار برد. در سال ۱۹۸۶ این واژه توسط اریک درکسلر^۱ در کتابی تحت عنوان: " موتور آفرینش: آغاز دوران فناوری نانو " تعریف مجدد شد. او این واژه را به شکل عمیق تری در رساله ی دکتری خود مورد بررسی قرار داده و بعد ها آنرا در کتابی به عنوان " نانو مجموعه ها، ماشین های مولکولی، چگونگی ساخت و محاسبات آنها " توسعه داد. هدف فناوری نانو تولید مولکولی یا ساخت اتم به اتم و مولکول به مولکول مواد و ماشین ها توسط بازوهای روبات برنامه ریزی شده، در مقیاس نانومتر است [۲].

حدود نیم قرن پیش ریچارد فاینمن^۲، متخصص کوانتوم نظری و دارنده ی جایزه ی نوبل، در هنگام گرفتن جایزه ی خود نظریه ی جدیدی مطرح کرد. او در سخنرانی خود در سال ۱۹۵۹ عنوان کرد: " آن پایین فضای بسیاری هست. اصول فیزیک، تا جایی که من توانایی فهمش را دارم، مخالفتی با ساختن اتم به اتم چیزها ندارد".

۱-۲- نانو ساختارهای کربنی

ساختارهای کربنی مقیاس نانو را می توان بر اساس شکل هندسی شان به دسته های مختلفی تقسیم بندی کرد. در اینجا چند مورد از مهم ترین این ساختارها معرفی می شوند.

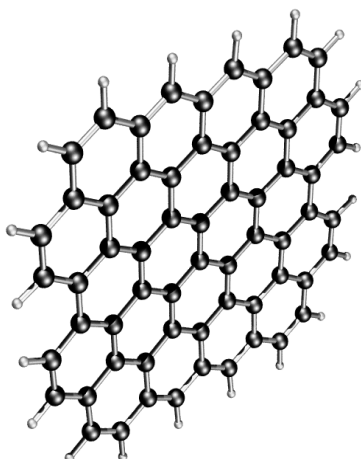
۱-۲-۱- گرافن

گرافن از اتم های کربن با پیوند sp^2 ، آرایش یافته در یک شبکه ی لانه زنبوری^۳ دو بعدی ساخته شده است (شکل ۱-۱). شبکه می تواند به صورت ترکیب دو زیر شبکه ی مثلثی دیده شود که اتم های یک زیر شبکه در مرکز مثلث تعریف شده با طول پیوند بین اتمی کربن-کربن، $a_{c-c} = 1.421 \text{ \AA}$ ، می باشند (شکل ۱-۲). سلول واحد شامل دو اتم کربن بوده و تحت چرخش 120° حول هر اتم ناوردا است.

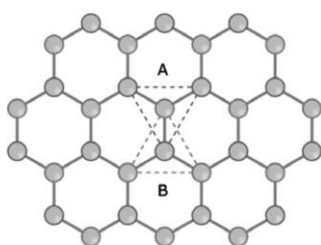
¹ Eric Drexler

² Richard Feynman

³ Honey comb



شکل ۱-۱: آرایش شش ضلعی منظم صفحه ی گرافن



شکل ۱-۲: شبکه ی گرافن شامل دو زیر شبکه ی مثلثی در هم نفوذ کرده [۳]

هر اتم یک اوربیتال s و دو اوربیتال درون صفحه ای p دارد که در پایداری مکانیکی صفحه ی کربن مشارکت دارند. اوربیتال p باقیمانده به صورت عمود بر صفحه ی مولکولی آرایش می یابد. در محدوده ی کم انرژی، در همسایگی نقاط k و k' ، آن دو پیوند به هم رسیده و دره های مخروطی شکل^۱ به وجود می آورند (شکل ۱-۳). در این محدوده ی کم انرژی، رابطه ی پراکندگی مومنتوم-انرژی خطی است. در محدوده ی انرژی بالا رابطه ی مومنتوم-انرژی خطی خیلی معتبر نیست و باند ها در معرض یک اعوجاج ناشی از ناهمسانگردی^۲ هستند، که همچنین به عنوان اعوجاج سه گوش^۳ شناخته می شوند. به محض انباشتن تک لایه های گرافن روی همدیگر، ابتدا گرافن دو لایه بدست می آید، که مجموعه ی خواص

¹ Conical-shaped

² Anisotropy

³ Trigonal warping