

دانشگاه گیلان  
دانشکده فنی

## پیش بینی خواص مکانیکی نانو لوله های کربنی بوسیله مدل مکانیک مولکولی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته مهندسی مهندسی مکانیک، گرایش طراحی کاربردی

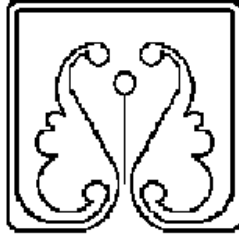
نام دانشجو

مهدی میرنژاد

استاد راهنما:

دکتر رضا انصاری

شهریور ماه ۱۳۹۰



دانشگاه گیلان  
دانشکده فنی

## پیش بینی خواص مکانیکی نانو لوله های کربنی بوسیله مدل مکانیک مولکولی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته مهندسی مکانیک گرایش طراحی کاربردی

نام دانشجو

مهدی میرنژاد

استاد راهنما:

دکتر رضا انصاری

اساتید مشاور:

دکتر ابوالفضل درویزه

دکتر منصور درویزه

شهریور ماه ۱۳۹۰



دانشگاه گاوپیران

دانشکده فنی

پایان نامه کارشناسی ارشد

# پیش بینی خواص مکانیکی نانو لوله های کربنی بوسیله مدل مکانیک مولکولی

از

مهدی میرنژاد

استاد راهنما

دکتر رضا انصاری

شهریور ماه ۱۳۹۰

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

دانشکده فنی

گروه مکانیک

گرایش طراحی کاربردی

پیش‌بینی خواص مکانیکی نانو لوله‌های کربنی بوسیله مدل مکانیک مولکولی

از:

مهدی میرنژاد

استاد راهنما:

دکتر رضا انصاری

اساتید مشاور:

دکتر ابوالفضل درویزه

دکتر منصور درویزه

شهریور ماه ۱۳۹۰

تقدیم به:

پدر و مادر مهربانم

و

خواهران دلسوزم

## تشکر و قدردانی:

در آغاز لازم می‌دانم که از استاد راهنمای گرامی جناب آقای دکتر رضا انصاری و نیز استادان مشاور ارجمند، جناب آقای دکتر ابوالفضل درویزه و جناب آقای دکتر منصور درویزه که با تلاش‌های وافر و خستگی ناپذیرشان، بنده را در این راه کمک و یاری نمودند، صمیمانه تشکر و قدردانی نمایم. نظارت و همراهی این اساتید گرانقدر را بزرگترین موهبت دوران تحصیل خود می‌دانم.

همچنین، با سپاس فراوان از پدر و مادر مهربانم و تمامی دوستانم که با محبت‌های بی دریغشان همواره پشتیبانم بودند.

## فهرست مطالب

چکیده فارسی ..... ز

چکیده انگلیسی ..... ژ

### فصل ۱ پیشگفتار

- ۱  
۱-۱- مقدمه ..... ۲  
۲-۱- تاریخچه نانو تکنولوژی ..... ۳  
۳-۱- دسته بندی نانو مواد ..... ۴  
۴-۱- مروری بر کارهای انجام شده ..... ۷  
۴-۱-۱- خواص مکانیکی ..... ۷  
۴-۱-۲- رفتار مکانیکی ..... ۱۳  
۵-۱- اهداف پایان نامه ..... ۲۰

### فصل ۲ نانو لوله های کربنی

- ۲۲  
۱-۲- مقدمه ..... ۲۳  
۲-۲- عنصر کربن ..... ۲۳  
۳-۲- گونه های مختلف کربن ..... ۲۳  
۴-۲- خواص و کاربردهای فلورن ها ..... ۲۸  
۵-۲- خواص نانو لوله های کربن ..... ۲۹  
۶-۲- ساختارهای غیر ایده آل ..... ۳۲  
۷-۲- کاربردهای نانو لوله های کربن ..... ۳۲  
۸-۲- روشهای ساخت فلورن ها ..... ۳۴  
۹-۲- روش های تولید نانو لوله های کربنی ..... ۳۵  
۹-۲-۱- روش تخلیه قوس الکتریکی ..... ۳۵  
۹-۲-۲- روش سایش لیزری ..... ۳۸  
۹-۲-۳- روش رسوب شیمیایی بخار ..... ۳۹  
۹-۲-۴- روش ته نشست بخار شیمیایی ..... ۴۰  
۱۰-۲- خالص سازی نانو لوله های کربنی ..... ۴۱  
۱۱-۲- هندسه صفحه گرافیتی ..... ۴۱  
۱۲-۲- هندسه نانو لوله های کربنی ..... ۴۵



۴۸	..... ۱۳-۲- تشکیل نانو لوله کربن تک جداره از صفحه گرافیتی
۵۰	..... ۱۴-۲- خلاصه فصل

### فصل ۳ مکانیک مولکولی

۵۱	
۵۲	..... ۱-۳- مقدمه
۵۳	..... ۲-۳- مکانیک مولکولی
۵۴	..... ۲-۲-۳- انرژی کشش پیوندی
۵۵	..... ۳-۲-۳- انرژی های تغییر زاویه پیوندی و وارونگی پیوندی
۵۵	..... ۴-۲-۳- انرژی پیچشی پیوندی
۵۵	..... ۵-۲-۳- انرژی های غیر پیوندی
۵۷	..... ۳-۳- ضرایب معادله مکانیک مولکولی
۵۸	..... ۴-۳- نحوه بدست آوردن ضرایب معادله مکانیک مولکولی
۶۰	..... ۱-۴-۳- مواد و شرایط
۶۷	..... ۲-۴-۳- خواص
۶۹	..... ۵-۳- خلاصه فصل

### فصل ۴ خواص مکانیکی

۷۰	
۷۱	..... ۱-۴- مقدمه
۷۱	..... ۲-۴- محاسبه خواص مکانیکی نانو لوله های کربنی روش اول
۷۱	..... ۱-۲-۴- هندسه نانو لوله های تک دیواره
۷۲	..... ۲-۲-۴- معادلات حاکم بر مدل میلهای-حلزونی
۷۵	..... ۳-۲-۴- راه حل های کلی حل معادلات حاکم
	..... ۴-۲-۴- ویژگی های الاستیک وابسته به اندازه و کایرالیته نانو لوله های کربنی تک دیواره
۷۷	..... دیواره
۸۱	..... ۳-۴- محاسبه خواص مکانیکی نانو لوله های کربنی روش دوم
۸۶	..... ۴-۴- محاسبه خواص مکانیکی نانو لوله های کربنی روش سوم
۹۰	..... ۵-۴- خلاصه فصل

### فصل ۵ رفتار مکانیکی

۹۱	
۹۲	..... ۱-۵- مقدمه
۹۲	..... ۲-۵- مدل مکانیک مولکولی
۹۴	..... ۳-۵- واندروالس
۹۵	..... ۴-۵- بررسی کماتش نانو لوله های تک دیواره

۹۶	۱-۴-۵- تغییر شکل نانو لوله های کربنی قبل از کمانش برای بار گذاری محوری.....
۹۶	۲-۴-۵- تغییر شکل نانو لوله های کربنی قبل از کمانش برای بار گذاری پیچشی.....
۹۸	۳-۴-۵- بررسی تغییر شکل ساختار نانو لوله ها بعد از کمانش.....
۱۰۰	۴-۴-۵- معادله تعادل.....
۱۰۱	۵-۵- بررسی کمانش نانولوله های چند دیواره.....
۱۰۱	۱-۵-۵- کمانش نانولوله های چند دیواره تحت فشار محوری و با پیچشی.....
۱۰۳	۲-۵-۵- کمانش نانولوله چند دیواره تحت خمش.....
۱۰۴	۶-۵- خلاصه فصل.....

## ۱۰۵ فصل ۶ نتایج و بحث

۱۰۶	۱-۶- مقدمه.....
۱۰۸	۲-۶- نتایج خواص مکانیکی صفحات و بدست آوردن ضرایب معادله مکانیک مولکولی.....
۱۱۳	۳-۶- نتایج خواص مکانیکی.....
۱۱۳	۱-۳-۶- نتایج مدل سازی خواص مکانیکی نانولوله های کایرال روش اول.....
۱۲۰	۲-۳-۶- نتایج مدل سازی خواص مکانیکی نانولوله های کایرال روش دوم.....
۱۲۵	۳-۳-۶- نتایج مدل سازی خواص مکانیکی نانولوله های کایرال روش سوم.....
۱۲۸	۴-۶- نتایج رفتار مکانیکی.....
۱۲۹	۱-۴-۶- نتایج رفتار کمانشی نانولوله های تک دیواره.....
۱۳۶	۲-۴-۶- نتایج رفتار کمانشی حاصل از بار گذاری پیچشی نانولوله های کربنی تک دیواره.....
۱۴۲	۳-۴-۶- نتایج رفتار کمانشی نانولوله چند دیواره.....
۱۵۳	۵-۶- خلاصه فصل.....

## ۱۵۴ فصل ۷ جمع بندی و پیشنهادها

۱۵۵	۱-۷- مقدمه.....
۱۵۶	۲-۷- جمع بندی.....
۱۵۶	۱-۲-۷- فصل اول.....
۱۵۶	۲-۲-۷- فصل دوم.....
۱۵۶	۳-۲-۷- فصل سوم.....
۱۵۷	۴-۲-۷- فصل چهارم.....
۱۵۷	۵-۲-۷- فصل پنجم.....
۱۵۷	۶-۲-۷- فصل ششم.....
۱۵۸	۳-۷- نتیجه گیری کلی.....

۱۵۹..... نوآوری ۴-۷

۱۶۰..... پیشنهادها ۵-۷

۱۶۰..... پیشنهادات اول ۱-۵-۷

۱۶۱..... پیشنهادات دوم ۲-۵-۷

۱۶۲

مراجع

۱۷۰

پیوست‌ها

## فهرست اشکال

- شکل (۱-۲) ساختار مکعبی شکل الماس ..... ۲۴
- شکل (۲-۲) ساختار لایه لایه ای گرافیت ..... ۲۵
- شکل (۳-۲) ساختار فلورن الف)  $C60$  ب)  $C70$  ..... ۲۶
- شکل (۴-۲) ساختار نانو لوله کربن الف) تک جداره ب) چند جداره ..... ۲۷
- شکل (۵-۲) ساختار مولکول نانو تورس ..... ۲۸
- شکل (۶-۲) دستگاه تخلیه قوس الکتریکی برای تولید نانو لوله های کربنی ..... ۳۷
- شکل (۷-۲) آرایش آزمایشگاهی برای سنتز نانو لوله های کربنی توسط تبخیر لیزری ..... ۳۹
- شکل (۸-۲) دستگاه تولید نانو لوله های کربنی به روش ته نشست بخار شیمیایی ..... ۴۰
- شکل (۹-۲) نمایش صفحه گرافیتی دو بعدی ..... ۴۲
- شکل (۱۰-۲) سلول واحد صفحه گرافیتی ..... ۴۳
- شکل (۱۱-۲) نمایش دیگری از سلول واحد صفحه گرافیتی ..... ۴۴
- شکل (۱۲-۲) الف) نانو لوله آرمچیر  $(n, n)$  ب) نانو لوله زیگزاگ  $(n, 0)$  ج) نانو لوله کایرال  $(n, m)$  ..... ۴۶
- شکل (۱-۳) تصویر شماتیک از مؤلفه های انرژی و ساختار پیوندی متناظر با سلول واحد گرافن ..... ۵۴
- شکل (۲-۳) سلول گرافن و نانو لوله کربنی برای سه حالت آرمچیر (A)، زیگزاگ (B) و کایرال (C) ..... ۶۱
- شکل (۳-۳) سلول صفحه بروم نیتراید و نانو لوله برم نیتراید برای سه حالت آرمچیر (A)، زیگزاگ (B) و کایرال (C) ..... ۶۴
- شکل (۴-۳) سلول صفحه سیلیکون کرید و نانو لوله سیلیکون کرید برای سه حالت آرمچیر (A)، زیگزاگ (B) و کایرال (C) ..... ۶۴
- شکل (۵-۳) سلول صفحه سولفید روی و نانو لوله سولفید روی برای سه حالت آرمچیر (A)، زیگزاگ (B) و کایرال (C) ..... ۶۵
- شکل (۶-۳) سلول اکسید روی و نانو لوله اکسید روی برای سه حالت آرمچیر (A)، زیگزاگ (B) و کایرال (C) ..... ۶۶
- شکل (۷-۳) صفحه گرافن تحت اثر جذب اکسیژن و نانو لوله کربنی برای حالت جذب اکسیژن ..... ۶۶
- شکل (۸-۳) صفحه گرافن تحت اثر جذب هیدروژن (گرافن) و نانو لوله کربنی برای حالت جذب هیدروژن ..... ۶۷

- شکل (۱-۴) توزیع نیرویی و پارامترهای ساختاری روی هندسه نانو لوله کربنی تک دیواره..... ۷۳
- شکل (۲-۴) نشان دهنده پارامترهای  $\theta_{ij}$ ،  $\beta_{ij}$  و  $\mathbf{rij}$  که بترتیب کشش پیوندی، زاویه پیوندی و وارونگی پیوندی  $\mathbf{ij}$  می باشند..... ۸۲
- شکل (۳-۴) نیروی محوری  $F$  اعمال شده به پیوند نانو لوله های تک دیواره کایرال..... ۸۳
- شکل (۴-۴) تعادل نیرویی کشش پیوندی در نانو لوله های تک دیواره کایرال..... ۸۴
- شکل (۱-۵) زوایه های وارونگی پیوندی  $\beta_1$  و  $\beta_2$  و  $\beta_3$ ..... ۹۳
- شکل (۲-۵) سلول نانو لوله کربنی تک دیواره تحت بار پیچشی..... ۹۷
- شکل (۳-۵) موقعیت اتم های در نظر گرفته شده از نانو لوله کربنی تک دیواره..... ۹۹
- شکل (۱-۶) انرژی کرنش برحسب کرنش در محدوده همساز..... ۱۰۹
- شکل (۲-۶) انرژی کرنشی و مشتق انرژی کرنشی برحسب کرنش..... ۱۰۹
- شکل (۳-۶) انرژی کرنشی برحسب انحنای خمشی تحت خمش آرمچیر..... ۱۱۱
- شکل (۴-۶) انرژی کرنشی برحسب انحنای خمشی تحت خمش زیگزاگ..... ۱۱۱
- شکل (۵-۶) انرژی کرنشی برحسب انحنای خمشی تحت خمش کایرال..... ۱۱۲
- شکل (۶-۶) تغییرات مدول یانگ نانو لوله های کربنی تک دیواره کایرال بر حسب قطر نانو لوله..... ۱۱۴
- شکل (۷-۶) تغییرات نسبت پوآسون نانو لوله های کربنی تک دیواره کایرال بر حسب قطر نانو لوله..... ۱۱۵
- شکل (۸-۶) تغییرات مدول برشی نانو لوله های کربنی تک دیواره کایرال بر حسب قطر نانو لوله..... ۱۱۷
- شکل (۹-۶) تغییرات مدول برشی جدید نانو لوله های کربنی تک دیواره کایرال بر حسب قطر نانو لوله..... ۱۱۸
- شکل (۱۰-۶) تغییرات مدول برشی به مدول برشی جدید نانو لوله های کربنی تک دیواره کایرال بر حسب قطر نانو لوله..... ۱۱۹
- شکل (۱۱-۶) تغییرات مدول یانگ نانو لوله های کربنی تک دیواره آرمچیر و زیگزاگ بر حسب قطر..... ۱۲۱
- شکل (۱۲-۶) تغییرات نسبت پوآسون نانو لوله های کربنی تک دیواره آرمچیر و زیگزاگ بر حسب قطر..... ۱۲۱
- شکل (۱۳-۶) تغییرات مدول یانگ نانو لوله های کربنی تک دیواره کایرال بر حسب قطر..... ۱۲۴
- شکل (۱۴-۶) تغییرات نسبت پوآسون نانو لوله های کربنی تک دیواره کایرال بر حسب قطر..... ۱۲۴
- شکل (۱۵-۶) مدول یانگ نانو لوله های کربنی کایرال بر حسب قطر نانو لوله..... ۱۲۶

- شکل (۶-۱۶) تغییرات مدول یانگ نانو لوله های کربنی تک دیواره کایرال بر حسب قطر در  
 ۱۲۷..... زوایای کایرال مشخص
- شکل (۶-۱۷) تغییرات مدول یانگ نانو لوله های کربنی تک دیواره کایرال بر حسب زاویه  
 ۱۲۷..... کایرال در قطر های مشخص
- شکل (۶-۱۸) کرنش کمانشی نانو لوله های تک دیواره کایرال بر حسب تغییرات مود کمانشی  
 ۱۲۹.....  $\pi\xi$  تحت بار گذاری فشاری محوری
- شکل (۶-۱۹) کرنش کمانشی نانو لوله های تک دیواره آرمچیر بر حسب تغییرات مود کمانشی  
 ۱۳۰.....  $\pi\xi$  تحت بار گذاری فشاری محوری
- شکل (۶-۲۰) کرنش کمانشی نانو لوله های تک دیواره زیگزاگ بر حسب تغییرات مود کمانشی  
 ۱۳۰.....  $\pi\xi$  تحت بار گذاری فشاری محوری
- شکل (۶-۲۱) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله های کربنی تک دیواره آرمچیر بر حسب قطر نانو  
 لوله تحت بار گذاری فشاری محوری..... ۱۳۱
- شکل (۶-۲۲) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله های کربنی تک دیواره کایرال بر حسب قطر  
 نانولوله تحت بار گذاری فشاری محوری..... ۱۳۵
- شکل (۶-۲۳) کرنش کمانشی نانو لوله های تک دیواره کایرال بر حسب تغییرات مود کمانشی  
 ۱۳۷.....  $\pi\xi$  تحت بار گذاری پیچشی
- شکل (۶-۲۴) کرنش کمانشی نانو لوله های تک دیواره آرمچیر بر حسب تغییرات مود کمانشی  
 ۱۳۸.....  $\pi\xi$  تحت بار گذاری پیچشی
- شکل (۶-۲۵) کرنش کمانشی نانو لوله های تک دیواره زیگزاگ بر حسب تغییرات مود کمانشی  
 ۱۳۸.....  $\pi\xi$  تحت بار گذاری پیچشی
- شکل (۶-۲۶) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله های کربنی تک دیواره آرمچیر بر حسب قطر نانو  
 لوله تحت بار گذاری پیچشی..... ۱۳۹
- شکل (۶-۲۷) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله های کربنی تک دیواره کایرال بر حسب قطر  
 نانولوله تحت بار گذاری پیچشی..... ۱۴۱
- شکل (۶-۲۸) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله های کربنی چند دیواره آرمچیر بر حسب تعداد  
 دیواره تحت بار گذاری محوری..... ۱۴۴
- شکل (۶-۲۹) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله های کربنی چند دیواره آرمچیر بر حسب تعداد  
 دیواره تحت بار گذاری محوری..... ۱۴۵

- شکل (۳۰-۶) کرنش کمانشی بحرانی نانولوله های کربنی چند دیواره زیگزاگ بر حسب تعداد دیواره تحت بارگذاری محوری ..... ۱۴۶
- شکل (۳۱-۶) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله های کربنی چند دیواره کایرال بر حسب تعداد دیواره تحت بارگذاری محوری ..... ۱۴۶
- شکل (۳۲-۶) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله های کربنی چند دیواره آرمچیر بر حسب تعداد دیواره تحت بارگذاری پیچشی ..... ۱۴۸
- شکل (۳۳-۶) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله های کربنی چند دیواره زیگزاگ بر حسب تعداد دیواره تحت بارگذاری پیچشی ..... ۱۴۸
- شکل (۳۴-۶) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله های کربنی چند دیواره کایرال بر حسب تعداد دیواره تحت بارگذاری پیچشی ..... ۱۴۹
- شکل (۳۵-۶) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله های کربنی چند دیواره آرمچیر بر حسب تعداد دیواره تحت بارگذاری خمشی ..... ۱۵۰
- شکل (۳۶-۶) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله های کربنی چند دیواره زیگزاگ بر حسب تعداد دیواره تحت بارگذاری خمشی ..... ۱۵۱
- شکل (۳۷-۶) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله های کربنی چند دیواره کایرال بر حسب تعداد دیواره تحت بارگذاری پیچشی ..... ۱۵۱

## فهرست جداول

جدول (۱-۶) خواص مکانیکی و ضرایب مکانیک مولکولی برای نانو ساختار های مختلف در شرایط متفاوت .....	۱۱۳
جدول (۲-۶) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله های کربنی تک دیواره آرمچیر با استفاده از مدل سازی اتمی تحت شرایط شبیه سازی مختلف و تحت بارگذاری محوری فشاری .....	۱۳۲
جدول (۳-۶) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله های کربنی تک دیواره آرمچیر با استفاده از مدل سازی اتمی تحت بارگذاری پیچشی .....	۱۴۰



## چکیده:

پیش بینی خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی بوسیله مدل مکانیک مولکولی

مهدی میرنژاد

دو دهه‌ی گذشته شاهد پیشرفت بی سابقه‌ای در زمینه‌ی علم و فناوری نانو بوده است همانگونه که تعداد فزاینده نشریات مختص به ساخت، توصیف ویژگی‌ها و کاربردهای نانولوله‌های کربنی گویای این امر است. این به دلیل خصوصیات ممتاز مکانیکی، الکترونیکی و سایر خصوصیات فیزیکی و شیمیایی نانولوله‌های کربنی نسبت به دیگر مواد موجود است. مدل‌سازی محاسباتی نانوسازه‌ها می‌تواند به طور گسترده در دو دسته‌ی اصلی طبقه بندی شود: مدل‌های اتمی و مدل‌های محیط پیوسته. مدل‌های اتمی دقیق‌تر ولی ایجاد و اجرای آن‌ها پر هزینه و زمان بر می‌باشند. مدل‌های محیط پیوسته از نظر محاسباتی کارآمدترند اما ماهیت گسسته‌ی نانو-مواد را لحاظ نمی‌کنند. این رساله درصدد ارائه‌ی یک مدل مکانیک مولکولی جامع می‌باشد که مزایای دو مدل بیان شده برای تحلیل خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی کایرال شامل مدول‌های یانگ محیطی و طولی، نسبت پواسون و مدول برشی را در بر داشته باشد. بدین منظور، ابتدا مدول یانگ، نسبت پواسون و سختی خمشی گرافن به عنوان المان پایه‌ی نانولوله‌های کربنی، با استفاده از تئوری تابع چگالی تعیین شده است. سپس با برقراری پیوندی بین مکانیک مولکولی و تئوری تابع چگالی، ثوابت نیرویی مدل مکانیک مولکولی برای نانولوله‌های کربنی کایرال محاسبه شده‌اند. همچنین، رفتار کمانشی نانولوله‌های کربنی کایرال تک‌دیواره و چنددیواره تحت بارهای محوری و پیچشی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. نتایج بدست آمده از تحلیل ارائه شده، بیانگر تطابق بسیار خوب آن با داده‌های موجود در دبیره می‌باشد.

**واژه‌های کلیدی:** مکانیک مولکولی، مکانیک کوانتوم، نانو لوله کربنی، گرافن، خواص مکانیکی، کمانش.

## Abstract

### **Prediction of mechanical properties of carbon nanotubes via a molecular mechanics model**

**Mahdi Mirnezhad**

The past two decades have witnessed an unprecedented progress in the area of nanoscience and nanotechnology, as reflected by increasing number of publications devoted to the synthesis, characterization, and applications of carbon nanotubes. This is due to the superior mechanical, electronic and other physical and chemical properties of carbon nanotubes over other existing materials. The computational modeling of nanostructured materials can be broadly classified into two main categories: atomistic models and continuum models. Atomistic models are more accurate but are costly and time-consuming to construct. Continuum models provide a much more computationally efficient alternative, but they do not take the discrete nature of nanomaterials into consideration. The present dissertation aims to develop a comprehensive molecular mechanics model that takes the advantage of the two described models for analysis of mechanical properties of chiral carbon nanotubes including longitudinal and circumferential Young's moduli and Poisson's ratio and shear modulus. To this end, Young's modulus, Poisson's ratio and bending stiffness of graphene as the basic element of carbon nanotubes are determined using the density functional theory first. The force constants in the molecular mechanics model are then computed by establishing a linkage between the molecular mechanics and the density functional theory. The buckling behavior of single- and multi-walled chiral carbon nanotubes under the action of axial and torsional loads is also investigated. The results from the present analysis are indicated to be in excellent agreement with the existing data from the literature.

**Keywords:** Molecular mechanics; Quantum mechanics; Carbon nanotubes; Graphene; Mechanical properties; Buckling.

**فصل ۱:**

**پیشگفتار**

## ۱-۱- مقدمه

نانوتکنولوژی محدوده‌ای از تکنولوژی می‌باشد که در این محدوده، انسان قادر است انواع ترکیبات، آلیاژها، وسایل و ابزارها و به طور کلی سیستم‌ها و سازه‌های گوناگون را در مقیاس اتمی و مولکولی و در ابعاد نانومتری<sup>۱</sup> طراحی کرده و به مرحله ساخت برساند. روش ساخت در اکثر موارد، به صورت جابجا نمودن اتم‌ها و مولکول‌ها و قرار دادن آنها در موقعیت‌های مناسب است. محدوده ابعادی مورد بحث در نانوتکنولوژی عبارت است از ابعادی بین ۱ تا ۱۰۰ نانومتر که این محدوده، بخش زیادی از محدوده ابعادی علوم مختلف را شامل می‌شود. همچنین، می‌توان نانو-تکنولوژی را بر اساس اجزاء تشکیل دهنده این نام گذاری، یعنی نانو و تکنولوژی تعریف کرد. تکنولوژی در کل به معنی ساخت ابزارهای کاربردی با استفاده از قوانین علمی می‌باشد و نانومتر به معنی یک میلیارد متر است. بنابراین، نانو تکنولوژی به معنی ساخت ابزارهای کاربردی در اندازه‌های یک میلیارد متر می‌باشد. به طور خلاصه، نانوتکنولوژی شامل دستکاری مواد در حوزه اتم‌ها بوده که با قرار دادن اتم‌ها در جای خاص خود، اجازه می‌دهد تا موادی سبک‌تر، محکم‌تر، ارزان‌تر، تمیزتر و با دقت ابعادی بالاتر ساخته شوند [۱].

به بیان ساده تر علم نانو مطالعه اصول اولیه حاکم بر رفتار مولکول‌ها و ساختارهایی با ابعاد بین ۱ تا ۱۰۰ نانومتر است، این ساختارها را نانو ساختار می‌نامیم. نانوتکنولوژی کاربرد این ساختارها در دستگاه‌هایی با اندازه نانومتری است. تعریف دیگری که می‌توان از نانو تکنولوژی ارائه نمود این است که نانو تکنولوژی شکل جدیدی از ساخت مواد به وسیله کنترل و دستکاری واحدهای ساختمانی آنها در مقیاس نانو می‌باشد. به عبارت دیگر نانو تکنولوژی تولید کارآمد مواد و دستگاهها با کنترل ماده در مقیاس طولی نانو متر و بهره‌برداری از خواص و پدیده‌های نو ظهوری است که در مقیاس نانو توسعه یافته‌اند.

شاید این سوال در ذهن پدید آید که چه چیزی در مقیاس نانومتری وجود دارد که یک تکنولوژی برپایه آن بنا نهاده شده است. آنچه باعث ظهور نانو تکنولوژی شده نسبت سطح به حجم بالای نانومواد است. این موضوع یکی از مهمترین خصوصیات مواد تولید شده در مقیاس نانو است. در این مقیاس، مواد شروع به تغییر رفتاری می‌کنند و رفتار سطوح بر رفتار توده‌ای ماده غلبه می‌کنند. در این مقیاس، برخی روابط فیزیکی که برای مواد معمولی کاربرد دارند، نقض می‌شوند و بعنوان نمونه خواص مکانیکی (مثل سفتی خیره کننده و مقاومت کششی و خواص حرارتی و الکترونیکی عالی)، در این مقیاس بطور کلی متفاوت از خواص در مقیاس ماکرو خواهد بود.

<sup>۱</sup> Nanometer