



دانشگاه سوادکوه

دانشکده فنی و مهندسی
پایان نامه کارشناسی ارشد

پیش بینی رفتار کمانشی نانو لوله های برن نیترایدی بوسیله مدل مکانیک مولکولی

از

سینا ملک پور

استاد راهنمای اول

دکتر رضا انصاری

استاد راهنمای دوم

دکتر منصور درویزه

اسفند ۱۳۹۲

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

دانشکده فنی
گروه مکانیک
گرایش طراحی کاربردی

پیش‌بینی رفتار کمانشی نانو لوله‌های برن نیترایدی بوسیله مدل مکانیک مولکولی

از

سینا ملک‌پور

استاد راهنمای اول

دکتر رضا انصاری

استاد راهنمای دوم

دکتر منصور درویزه

اسفند ۱۳۹۲

تقدیم به:

پدر و مادر مهربانم

و

برادر دلسوزم

تشکر و قدردانی:

در آغاز لازم می‌دانم که از اساتید راهنمای گرامی جناب آقای دکتر رضا انصاری و جناب آقای دکتر منصور درویشه 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 و برادر مهربانم و تمامی دوستانم که با محبت‌های بی دریغشان همواره پشتیبانم بودند.

فهرست مطالب

شماره صفحه

عنوان

ژ	چکیده فارسی
س	چکیده انگلیسی
۱	فصل ۱: پیشگفتار
۲	۱-۱ مقدمه
۳	۲-۱ تاریخچه نانو تکنولوژی
۴	۳-۱ دسته بندی نانو مواد
۴	۳-۱-۱ نانو لایه ها
۵	۳-۱-۲ نانو پوشش ها
۵	۳-۱-۳ نانو خوشه ها
۵	۳-۱-۴ نانو سیم ها
۶	۳-۱-۵ نانو حفره ها
۶	۳-۱-۶ نانو ذرات
۶	۳-۱-۷ نانو لوله ها
۹	۴-۱ مروری بر کارهای انجام شده
۹	۵-۱ خواص مکانیکی نانو لوله ها
۱۱	۶-۱ رفتار مکانیکی نانو لوله های تک دیواره
۱۴	۷-۱ رفتار مکانیکی نانو لوله های چند دیواره
۱۷	۸-۱ اهداف پایان نامه
۱۹	فصل ۲: نانو لوله ها
۲۰	۱-۲ مقدمه
۲۰	۲-۲ نانولوله های برن نیترایدی
۲۰	۳-۲ خواص نانولوله های برن نیترایدی
۲۰	۳-۲-۱ خواص مکانیکی
۲۱	۳-۲-۲ خواص حرارتی
۲۲	۳-۲-۳ خواص الکترونیکی
۲۳	۳-۲-۴ خواص پیزوالکتریکی
۲۳	۳-۲-۵ خواص اپتیکی

۲۴	۴-۲- سنتز نانولوله‌های برن نیترایدی
۲۴	۲-۴-۱- تخلیه‌ی قوس الکتریکی
۲۴	۲-۴-۲- روش‌های بر پایه‌ی لیزر
۲۴	۲-۵- تکنیک‌های دیگر سنتز
۲۴	۲-۵-۱- جریان مایع نانوذرات برآید آهن
۲۵	۲-۵-۲- رشد دما پایین نانولوله‌های برن نیترایدی
۲۶	۲-۵-۱- رشد موثر نانولوله‌های برن نیترایدی در کوره‌های لوله‌های افقی
۲۷	۲-۶- پتانسیل‌های کاربردی
۲۷	۲-۶-۱- ذخیره‌ی هیدروژن
۲۸	۲-۶-۲- عامل‌سازی
۲۸	۲-۶-۳- نانولوله‌های برن نیترایدی کامپوزیتی برای کاربردهای مکانیکی
۳۰	۲-۶-۴- عامل‌سازی برای کاربردهای بیولوژیکی مولکولی
۳۱	۲-۷- عنصر کربن
۳۱	۲-۷-۱- نانو لوله‌های کربن
۳۲	۲-۸- خواص نانو لوله‌های کربن
۳۲	۲-۸-۱- واکنش پذیری شیمیایی
۳۳	۲-۸-۲- خواص مکانیکی
۳۴	۲-۸-۳- خواص الکتریکی
۳۴	۲-۸-۴- خاصیت مغناطیسی
۳۴	۲-۸-۵- گسیل و جذب نور
۳۴	۲-۸-۶- حساسیت به تغییرات کوچک نیروهای اعمال شده
۳۵	۲-۸-۷- خواص حرارتی
۳۵	۲-۸-۸- چگالی سطحی بسیار بالا
۳۵	۲-۸-۹- خواص حرکتی
۳۵	۲-۹- کاربردهای نانو لوله‌های کربن
۳۵	۲-۹-۱- ذخیره انرژی
۳۶	۲-۹-۲- استحکام دهی کامپوزیتها
۳۶	۲-۹-۳- نمایشگرهای گسیل میدانی
۳۶	۲-۹-۴- حافظه‌های نانو لوله‌های
۳۶	۲-۹-۵- حسگرها
۳۷	۲-۹-۶- صنایع هوا فضا
۳۷	۲-۱۰- هندسه‌ی صفحه‌ی هگزاگونال برن نیترایدی
۴۱	۲-۱۱- هندسه نانو لوله‌های برن نیترایدی

۴۵.....	۱۲-۲- تشکیل نانولوله برن نیترایدی تک جداره از صفحه هگزاگونال برن نیترایدی
۴۶.....	۱۳-۲- خلاصه فصل
۴۷.....	فصل ۳: مکانیک مولکولی
۴۸.....	۱-۳- مقدمه
۴۹.....	۲-۳- مکانیک مولکولی
۵۱.....	۱-۲-۳- انرژی کشش پیوندی
۵۱.....	۲-۲-۳- انرژی‌های تغییر زاویه پیوندی و وارونگی پیوندی
۵۱.....	۳-۲-۳- انرژی پیچشی پیوندی
۵۲.....	۴-۲-۳- انرژی‌های غیر پیوندی
۵۳.....	۳-۳- ضرایب معادله مکانیک مولکولی
۵۴.....	۴-۳- نحوه بدست آوردن ضرایب معادله مکانیک مولکولی
۵۵.....	۱-۴-۳- محاسبات ساختار نواری
۵۶.....	۲-۴-۳- معادلات کوهن-شم
۵۶.....	۳-۴-۳- تقریب چگالی موضعی
۵۶.....	۴-۴-۳- تقریب شبه پتانسیل
۵۷.....	۵-۴-۳- مدول یانگ و نسبت پواسون:
۶۱.....	فصل ۴: خواص مکانیکی
۶۲.....	۱-۴- مقدمه
۶۲.....	۲-۴- محاسبه خواص مکانیکی نانو لوله‌های برن نیترایدی
۶۲.....	۳-۴- هندسه نانو لوله‌های تک دیواره
۶۳.....	۱-۳-۴- معادلات حاکم بر مدل میله‌ای-حلزونی
۶۷.....	۲-۳-۴- راه حل‌های کلی حل معادلات حاکم
۶۹.....	۴-۴- محاسبه خواص مکانیکی نانو لوله‌های برن نیترایدی روش دوم
۷۷.....	فصل ۵: رفتار مکانیکی
۷۸.....	۱-۵- مقدمه
۷۸.....	۲-۵- مدل مکانیک مولکولی
۸۰.....	۲-۲-۵- واندروالس
۸۱.....	۳-۵- بررسی کمانش نانو لوله‌های تک دیواره
۸۲.....	۱-۳-۵- تغییر شکل نانو لوله‌های برن نیترایدی قبل از کمانش برای بار گذاری محوری
۸۳.....	۲-۳-۵- تغییر شکل نانو لوله‌های برن نیترایدی قبل از کمانش برای بار گذاری پیچشی
۸۶.....	۳-۳-۵- بررسی تغییر شکل ساختار نانو لوله‌ها بعد از کمانش

۸۸	۴-۵- بررسی کمانش نانولوله‌های چند دیواره
۸۹	۴-۵-۱- کمانش نانولوله‌های چند دیواره برن نیترایدی تحت بارگذاری فشاری محوری و پیچشی
۹۱	۵-۵- خلاصه فصل
۹۲	فصل ۶: محاسبات و نتیجه گیری
۹۳	۶-۱- خواص مکانیکی صفحات و بدست آوردن ضرایب معادله مکانیک مولکولی
۹۸	۶-۲- خواص مکانیکی
۹۸	۶-۳- مدل سازی خواص مکانیکی نانولوله‌های کایرال
۹۸	۶-۳-۱- مدول یانگ و نسبت پواسون طولی
۱۰۲	۶-۳-۲- نتیجه گیری
۱۰۲	۶-۴- مدل سازی خواص مکانیکی نانولوله‌های برن نیترایدی برای حالت‌های مختلف جذب شیمیایی اتم هیدروژن
۱۰۲	۶-۴-۱- بررسی خواص مکانیکی صفحه‌ی برن نیترایدی هگزاگونال با استفاده از تئوری تابعیت چگالی
۱۰۳	۶-۴-۲- مدول یانگ و نسبت پواسون
۱۰۴	۶-۴-۳- نتایج و نمودارها
۱۱۳	۶-۵- رفتار مکانیکی
۱۱۴	۶-۵-۱- رفتار کمانشی نانولوله‌های برن نیترایدی تک دیواره
۱۱۴	۶-۵-۲- رفتار کمانشی حاصل از بارگذاری محوری نانولوله‌های برن نیترایدی تک دیواره
۱۱۸	۶-۵-۳- نتیجه گیری
۱۱۸	۶-۶- رفتار کمانشی حاصل از بارگذاری پیچشی نانولوله‌های برن نیترایدی تک دیواره
۱۲۲	۶-۶-۲- شباهت و تفاوت‌های دو مبحث قبل
۱۲۲	۶-۶-۳- نتیجه گیری
۱۲۳	۶-۷- نتایج رفتار کمانشی نانولوله چند دیواره
۱۲۴	۶-۷-۱- رفتار کمانشی حاصل از بارگذاری محوری نانولوله‌های برن نیترایدی چند دیواره
۱۲۶	۶-۷-۲- نتیجه گیری
۱۲۷	۶-۸- رفتار کمانشی حاصل از بارگذاری پیچشی نانولوله‌های برن نیترایدی چند دیواره
۱۲۹	۶-۸-۲- نتیجه گیری
۱۳۰	فصل ۷: جمع‌بندی و پیشنهادات
۱۳۱	۷-۱- مقدمه
۱۳۱	۷-۲- جمع‌بندی
۱۳۱	۷-۲-۱- فصل اول
۱۳۲	۷-۲-۲- فصل دوم
۱۳۲	۷-۲-۳- فصل سوم
۱۳۲	۷-۲-۴- فصل چهارم

۱۳۲ فصل پنجم ۵-۲-۷
۱۳۳ فصل ششم ۶-۲-۷
۱۳۳ نتیجه گیری کلی ۳-۷
۱۳۴ نوآوری ۴-۷
۱۳۵ پیشنهاد ها ۵-۷
۱۳۶ دسته ی اول پیشنهادات ۱-۵-۷
۱۳۶ دسته ی دوم پیشنهادات ۲-۵-۷
۱۳۷ مراجع
۱۴۶ پیوست ها

فهرست جداول

شماره صفحه

جدول (۱-۶) مقادیر ضریب نیروی کشش پیوندی و ضریب نیروی تغییر زاویه پیوندی برای حالات مختلف جذب شیمیایی هیدروژن	۱۰۴
جدول (۲-۶) خواص مختلف صفحه‌ی برن نیترایدی متناظر با حالت‌های مختلف جذب هیدروژن	۱۱۳

فهرست اشکال

عنوان

شماره صفحه

- شکل (۱-۱) نمایی از نانولوله‌ی برن نیترایدی در مقیاس آزمایشگاهی..... ۸
- شکل (۱-۲) الف) اسکن تصویر میکروسکوپ الکترونی از نانولوله‌های برن نیترایدی خالص رشد کرده در دمای ۱۵۰۰ درجه سلیسیوس و ب) تفاوت آنالیز حرارتی نمودارهای نانولوله‌های برن نیترایدی و کربنی ۲۲
- شکل (۲-۲) تصاویر SEM نانولوله‌های بسته‌ی برن نیترایدی (A) قطرهای کوچکتر (B) قطرهای بزرگتر (C) و (D) تصاویر رشد نانولوله‌های برن نیترایدی ۲۵
- شکل (۳-۲) یک تصویر منتخب شماتیک از رشد نانولوله‌های برن نیترایدی (A) ته نشست فیلم برن نیترایدی بر روی نانوذرات آهن در انحرافات کم زیرلایه (B) وقتی انحراف زیرلایه زیاد می شود، نرخ رشد شروع به کاهش پیدا کردن می کند (C) نمایی از رشد نانولوله‌ها ۲۶
- شکل (۴-۲) تنظیم آزمایشگاهی برای رشد نانولوله‌های برن نیترایدی با CVD حرارتی ۲۶
- شکل (۵-۲) تصاویر اسکن میکروسکوپ الکترونی برای رشد نانولوله‌های برن نیترایدی با (A) کیفیت پایین و (B) کیفیت بالا ۲۷
- شکل (۶-۲) ساختار بهینه سازی شده‌ی (A) $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_2\text{CO} - \text{BNNT}$ (B) $\text{C}_{10}\text{H}_7\text{CO} - \text{BNNT}$ [۸۷] ۲۹
- شکل (۷-۲) مقایسه‌ی طیف جذبی یو وی نانولوله‌ی برن نیترایدی عاملدارسازشده و نشده [۸۷] ۲۹
- شکل (۸-۲) هیبرید DNA - BNNT ۳۰
- شکل (۹-۲) ساختار نانولوله کربن الف) تک جداره (ب) چند جداره ۳۲
- شکل (۱۰-۲) نمایش صفحه هگزاگونال برن نیترایدی دو بعدی ۳۸
- شکل (۱۱-۲) سلول واحد صفحه برن نیترایدی ۳۹
- شکل (۱۲-۲) نمایش دیگری از سلول واحد صفحه گرافیتی ۴۰
- شکل (۱۳-۲) الف) نانولوله آرمیچر n, n (ب) نانولوله زیگزاگ $n, 0$ (ج) نانولوله کایرال (n, m) ۴۲
- شکل (۱-۳) تصویر شماتیک از مؤلفه‌های انرژی و ساختار پیوندی متناظر با سلول واحد برن نیتراید ۵۰
- شکل (۲-۳) اعمال میدان الکتریکی خارجی بر صفحه‌ی برن نیترایدی هگزاگونال در جهت‌های آرمیچر و زیگزاگ ۵۸
- شکل (۳-۳) تغییرات مدول یانگ با دما به ازای مقادیر مختلف میدان الکتریکی در جهت آرمیچر ۵۹
- شکل (۴-۳) تغییرات مدول یانگ با دما به ازای مقادیر مختلف میدان الکتریکی در جهت زیگزاگ ۶۰

- شکل (۴-۱) توزیع نیرویی و پارامترهای ساختاری روی هندسه نانو لوله برن نیترایدی تک دیواره. ۶۴
- شکل (۴-۲) نشان دهنده پارامترهای θ_{ij} ، β_{ij} و r_{ij} که بترتیب کشش پیوندی، زاویه پیوندی و وارونگی پیوندی اتم i می‌باشند ۷۱
- شکل (۴-۳) نیروی محوری F اعمال شده به پیوند نانو لوله‌های تک دیواره کایرال. ۷۲
- شکل (۴-۴) تعادل نیرویی کشش پیوندی در نانو لوله‌های تک دیواره کایرال ۷۳
- شکل (۵-۱) زوایه‌های وارونگی پیوندی β_1 و β_2 و β_3 ۷۹
- شکل (۵-۲) سلول نانو لوله برن نیترایدی تک دیواره تحت بار پیچشی ۸۴
- شکل (۵-۳) موقعیت اتم‌های در نظر گرفته شده از نانو لوله برن نیترایدی تک دیواره ۸۷
- شکل (۶-۱) انرژی کرنش برحسب کرنش در محدوده همساز ۹۳
- شکل (۶-۲) انرژی کرنشی و مشتق انرژی کرنشی برحسب کرنش ۹۴
- شکل (۶-۳) مقایسه‌ی طول پیوندی برای نانوساختارهای مختلف در شرایط جذب فیزیکی و شیمیایی ۹۵
- شکل (۶-۴) مقایسه‌ی مدول یانگ برای نانوساختارهای مختلف در شرایط جذب فیزیکی و شیمیایی ۹۵
- شکل (۶-۵) مقایسه‌ی نسبت پواسون برای نانوساختارهای مختلف در شرایط جذب فیزیکی و شیمیایی ۹۶
- شکل (۶-۶) مقایسه‌ی ضریب نیروی کشش پیوندی برای نانوساختارهای مختلف در شرایط جذب فیزیکی و شیمیایی ۹۶
- شکل (۶-۷) مقایسه‌ی ضریب نیروی تغییر زاویه پیوندی برای نانوساختارهای مختلف در شرایط جذب فیزیکی و شیمیایی ۹۷
- شکل (۶-۸) مقایسه‌ی ضریب نیروی وارونگی پیوندی برای نانوساختارهای مختلف در شرایط جذب فیزیکی و شیمیایی ۹۷
- شکل (۶-۹) تغییرات مدول یانگ نانو لوله‌های تک دیواره‌ی برن نیترایدی آرمیچر و زیگزاگ بر حسب قطر نانو لوله ۹۹
- شکل (۶-۱۰) تغییرات نسبت پواسون نانو لوله‌های تک دیواره‌ی برن نیترایدی آرمیچر و زیگزاگ بر حسب قطر نانولوله ۱۰۰
- شکل (۶-۱۱) تغییرات مدول یانگ نانولوله‌ی تک دیواره‌ی کایرال برن نیترایدی با قطر نانولوله در مقایسه با نانوصفحه‌ی هگزاگونال برن نیترایدی ۱۰۱
- شکل (۶-۱۲) تغییرات نسبت پواسون نانولوله‌ی تک دیواره‌ی کایرال برن نیترایدی با قطر نانولوله در مقایسه با نانوصفحه‌ی هگزاگونال برن نیترایدی ۱۰۱

- شکل (۶-۱۳) جذب اتم‌های هیدروژن روی اتم برن (وضعیت ۱) ۱۰۵
- شکل (۶-۱۴) جذب اتم‌های هیدروژن روی اتم نیتروژن (وضعیت ۲) ۱۰۵
- شکل (۶-۱۵) جذب اتم‌های هیدروژن روی اتم‌های نیتروژن و برن در جهات مختلف (وضعیت ۳) ۱۰۶
- شکل (۶-۱۶) جذب اتم‌های هیدروژن روی اتم‌های نیتروژن و برن به صورت هم جهت (وضعیت ۴) ۱۰۶
- شکل (۶-۱۷) تغییرات انرژی کرنشی با کرنش در محدوده‌ی همساز در وضعیت ۱ ۱۰۷
- شکل (۶-۱۸) تغییرات انرژی کرنشی با کرنش در محدوده‌ی همساز در وضعیت ۲ ۱۰۷
- شکل (۶-۱۹) تغییرات انرژی کرنشی با کرنش در محدوده‌ی همساز در وضعیت ۳ ۱۰۸
- شکل (۶-۲۰) تغییرات انرژی کرنشی با کرنش در محدوده‌ی همساز در وضعیت ۴ ۱۰۸
- شکل (۶-۲۱) تغییرات مدول یانگ با قطر نانولوله برای وضعیت جذب ۱ ۱۰۹
- شکل (۶-۲۲) تغییرات مدول یانگ با قطر نانولوله برای وضعیت جذب ۲ ۱۰۹
- شکل (۶-۲۳) تغییرات مدول یانگ با قطر نانولوله برای وضعیت جذب ۳ ۱۱۰
- شکل (۶-۲۴) تغییرات مدول یانگ با قطر نانولوله برای وضعیت جذب ۴ ۱۱۰
- شکل (۶-۲۵) تغییرات نسبت پواسون با قطر نانولوله برای وضعیت جذب ۱ ۱۱۱
- شکل (۶-۲۶) تغییرات نسبت پواسون با قطر نانولوله برای وضعیت جذب ۲ ۱۱۱
- شکل (۶-۲۷) تغییرات نسبت پواسون با قطر نانولوله برای وضعیت جذب ۳ ۱۱۲
- شکل (۶-۲۸) تغییرات نسبت پواسون با قطر نانولوله برای وضعیت جذب ۴ ۱۱۲
- شکل (۶-۲۹) کرنش کمانشی نانو لوله‌های تک دیواره کایرال بر حسب تغییرات مود کمانشی $\pi\xi$ ، تحت بار گذاری فشاری محوری ۱۱۴
- شکل (۶-۳۰) کرنش کمانشی نانو لوله‌های تک دیواره آرمچیر بر حسب تغییرات مود کمانشی $\pi\xi$ ، تحت بارگذاری فشاری محوری ۱۱۵
- شکل (۶-۳۱) کرنش کمانشی نانو لوله‌های تک دیواره زیگزاگ بر حسب تغییرات مود کمانشی $\pi\xi$ ، تحت بارگذاری فشاری محوری ۱۱۵
- شکل (۶-۳۲) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله‌های برن نیترایدی تک دیواره کایرال بر حسب قطر نانولوله تحت بار گذاری فشاری محوری ۱۱۶
- شکل (۶-۳۳) کرنش کمانشی نانو لوله‌های تک دیواره کایرال بر حسب تغییرات مود کمانشی $\pi\xi$ ، تحت بار گذاری پیچشی ۱۱۹

- شکل (۶-۳۴) کرنش کمانشی نانو لوله‌های تک دیواره آرمچیر بر حسب تغییرات مود کمانشی $\pi\xi$ ، تحت بار گذاری پیچشی ۱۲۰
- شکل (۶-۳۵) کرنش کمانشی نانو لوله‌های تک دیواره زیگزاگ بر حسب تغییرات مود کمانشی $\pi\xi$ ، تحت بار گذاری پیچشی ۱۲۰
- شکل (۶-۳۶) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله‌های برن نیترایدی تک دیواره کایرال بر حسب قطر نانولوله تحت بار گذاری پیچشی ۱۲۱
- شکل (۶-۳۷) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله‌های برن نیترایدی چند دیواره آرمچیر بر حسب تعداد دیواره تحت بارگذاری محوری ۱۲۴
- شکل (۶-۳۸) کرنش کمانشی بحرانی نانولوله‌های برن نیترایدی چند دیواره زیگزاگ بر حسب تعداد دیواره تحت بارگذاری محوری ۱۲۵
- شکل (۶-۳۹) کرنش کمانشی بحرانی نانولوله‌های برن نیترایدی چند دیواره کایرال بر حسب تعداد دیواره تحت بارگذاری محوری ۱۲۶
- شکل (۶-۴۰) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله‌های برن نیترایدی چند دیواره آرمچیر بر حسب تعداد دیواره تحت بارگذاری پیچشی ۱۲۷
- شکل (۶-۴۱) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله‌های برن نیترایدی چند دیواره زیگزاگ بر حسب تعداد دیواره تحت بارگذاری پیچشی ۱۲۸
- شکل (۶-۴۲) کرنش کمانشی بحرانی نانو لوله‌های برن نیترایدی چند دیواره کایرال بر حسب تعداد دیواره تحت بارگذاری پیچشی ۱۲۹

چکیده:

پیش بینی رفتار کمانشی نانولوله های برن نیترایدی بوسیله مدل مکانیک مولکولی

سینا ملک پور

نانولوله های برن نیترایدی موضوع مطالعات بسیاری برای سالهای زیادی بوده اند. نانولوله های برن نیترایدی به عنوان مواد نیمه رسانا با مقدار باند گپ بزرگ (۵/۵ الکترون ولت) که اساسا مستقل از کایرالیته (مشخصات ساختاری) و مرفولوژی نانولوله است، (برخلاف نانولوله های کربنی) شناخته می شوند. آنها همچنین دارای خواص جالبی مثل سختی زیاد، هدایت حرارتی بالا و خواص پیزو الکتریکی و مکانیکی ممتاز هستند و از نظر شیمیایی و حرارتی نسبت به نانولوله های کربنی پایدارتر می باشند. از آنجایی که نانولوله های برن نیترایدی خواص نیمه رسانایی یکنواختی از خود نشان می دهند که می توانند به صورت محتمل بر اساس نیازهای خاصی هماهنگ شوند، انتظار می رود که آنها جایگزین خوبی برای نانولوله های کربنی برای کاربردهای ممکن در نانوالکترونیک و نانومکانیک باشند. مدل سازی محاسباتی نانوسازه ها می تواند به طور گسترده در دو دسته اصلی طبقه بندی شود: مدل های اتمی و مدل های محیط پیوسته. مدل های اتمی دقیق تر ولی ایجاد و اجرای آن ها پر هزینه و زمان بر می باشند. مدل های محیط پیوسته از نظر محاسباتی کارآمدترند اما ماهیت گسسته ی نانومواد را لحاظ نمی کنند. این رساله درصدد ارائه ی یک مدل مکانیک مولکولی جامع می باشد که مزایای دو مدل بیان شده برای تحلیل رفتار مکانیکی و خواص مکانیکی نانولوله های برن نیترایدی کایرال شامل رفتار کمانشی تحت بارگذاری های مختلف و مدول یانگ طولی و نسبت پواسون را در بر داشته باشد. بدین منظور، ابتدا مدول یانگ و نسبت پواسون برن نیتراید هگزاگونال به عنوان المان پایه ی نانولوله های برن نیترایدی، 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 نانولوله های برن نیترایدی کایرال محاسبه شده اند و رفتار کمانشی نانولوله های برن نیترایدی کایرال تک دیواره و چند دیواره تحت بارهای محوری و پیچشی مورد بررسی قرار گرفته اند. نتایج بدست آمده از تحلیل ارائه شده، بیانگر تطابق بسیار خوب آن با داده های موجود در دبیره می باشد.

واژه های کلیدی: مکانیک مولکولی، مکانیک کوانتوم، نانولوله ی برن نیترایدی، برن نیتراید هگزاگونال، کمانش،

خواص مکانیکی.

Abstract

Prediction of buckling behavior of boron nitride nanotubes via a molecular mechanics model

Sina Malakpour

Boron nitride nanotubes (BNNTs) have been the subject of extensive studies for many years. The BNNTs are known as semiconductor materials with large band gap (5.5 eV), basically independent of the chirality (Structural specifications) and morphology of the tube (despite CNTs). They also possess interesting properties such as strong hardness, high thermal conductivity, excellent pizelectrical and mechanical properties, and being more chemically and thermally stable than carbon nanotubes (CNTs). As the BNNTs present uniform semiconducting properties which can be possibly tuned according to specific needs, they are expected to be good alternatives to CNTs for possible applications in nanoelectronics and nanomechanics. 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 boron nitride nanotubes including buckling behavior under different loadings and longitudinal Young's moduli and Poisson's ratio. To this end, Young's modulus, Poisson's ratio of hexagonal boron nitride as the basic element of boron nitride nanotubes is 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 and the buckling behavior of single- and multi-walled chiral boron nitride nanotubes under the action of axial and torsional loads is 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; Boron nitride nanotubes; Hexagonal boron nitride; Buckling; Mechanical properties.

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^۱ 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 نانوتکنولوژی را بر اساس اجزاء تشکیل دهنده این نام گذاری، یعنی نانو و تکنولوژی تعریف کرد. تکنولوژی در کل به معنی ساخت ابزار-های 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 وساختارهایی 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 به طور کلی متفاوت از خواص در مقیاس ماکرو خواهد بود.

^۱ Nanometer

۲-۱- تاریخچه نانوتکنولوژی

استفاده از نانوتکنولوژی توسط انسان، برخلاف تصور عمومی دارای سابقه تاریخی طولانی می‌باشد. در این رابطه، شواهدی مبنی بر نانو ساختاری بودن رنگ آبی به کار برده شده توسط قوم مایا وجود دارد [۲]. پس از آن، رومی‌ها از این مواد در ساخت جام‌های با رنگ‌های زنده استفاده کردند، به این صورت که آن‌ها از ذرات طلا برای رنگ آمیزی این جام‌ها بهره می‌گرفتند. نمونه‌ای از این جام‌ها که برای نخستین بار کشف گردید، جام لیکورگوس^۱ می‌باشد که متعلق به قرن چهارم قبل از میلاد بوده و دارای ذرات نانومتری طلا و نقره است که در هنگام قرار گرفتن در نورهای مختلف، رنگ‌های گوناگونی را از خود نشان می‌دهد [۱].

در میان شاخه‌های مختلف علمی، بیولوژی اولین شاخه‌ای بود که وارد این حوزه علمی گردید. اساس کار ماشین‌های بیولوژیکی بر اساس واکنش‌های در ابعاد نانومتری می‌باشد. از مورچه، مگس و پشه می‌توان به عنوان نمونه-ای از نانوماشین‌های طبیعی نام برد. با این وجود، داستان علمی نانوتکنولوژی چیز دیگری است. یکی از نخستین گزارش‌های علمی در این رابطه، گزارش ساخت کلویید ذرات طلا در سال ۱۸۵۷ توسط مایکل فارادی^۲ می‌باشد. بعدها از کربن سیاه به عنوان یک ماده افزودنی برای رنگ کردن و استحکام بخشی به لاستیک استفاده شد. استفاده از کاتالیست‌های با ساختار نانومتری، از ۷۰ سال پیش آغاز گردید. در اوایل دهه ۱۹۴۰، ذرات نانومتری تبخیر و ته نشین شده سیلیکا ساخته شد و در آمریکا و آلمان به عنوان جایگزینی برای ذرات ریز کربن سیاه برای مقاوم سازی لاستیک به مصرف رسید. ذرات آمورف^۳ سیلیکا، کاربردهای وسیعی را در محصولات تجاری روزمره پیدا کردند. اینگونه محصولات دارای محدوده وسیعی هستند. از پودرهای شیر خشک بدون شیر مخصوص قهوه گرفته تا لاستیک اتومبیل و فیبرهای نوری در این محدوده قرار دارند [۱]. در دهه‌های ۱۹۶۰ و ۱۹۷۰، پودرهای نانومتری فلزات برای ذخیره اطلاعات بر روی نوار ساخته شد. در سال ۱۹۷۶، کریستال‌های نانومتری توسط گرانکوویت^۴ و بورمن^۵، با استفاده از روش تبخیر گاز کامل تولید گردید [۳].

ریچارد فاینمن برنده جایزه نوبل فیزیک در سال ۱۹۶۵ و یکی از مشهورترین فیزیکدانان دهه ۶۰ میلادی که ملقب به پدر علم نانو تکنولوژی است در سال ۱۹۶۰ در همایش جامعه فیزیک آمریکا طی یک سخنرانی، پیش بینی انقلابی و جذابی را بیان نمود. وی بیان کرد «فضای زیادی در پایین وجود دارد.» همین جمله پایه علم نانو تکنولوژی

^۱ Lycurgus

^۲ Michael Faraday

^۳ Amorf

^۴ Granqvist

^۵ Buhrman