بسم الله الرحمن الرحیم
الحمد لله رب العالمین الرحمن الرحیم مالک یوم الدین
اهدنا الصراط المستقیم صراط الذین انعمت علیهم غیر المغضوب علیهم ولا الضالین

دانشگاه بیرجند

دانشکده مهندسی

پایان‌نامه دوره کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک طراحی کاربردی

تحلیل دینامیکی نانولوله های چند جداره کربنی با استفاده از روش های عددی

حسین ملکیان بیلندی

استادراهنما:

دکتر سید یوسف احمدی بروغنی

تابستان 90

دانشگاه سیرجند
مدیریت تحصیلات تکمیلی

صورتجلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

فرم شماره ۱۰

با تاییدات خداوند متعال جلسه دفاع از پایان نامه تحصیلی کارشناسی ارشد آقای حسین ملکیان بیلندی

به شماره دانشجویی: ۸۷۱۳۳۲۲۰۸۰ رشته: مکانیک گرایش: طراحی کاربردی دانشکده: مهندسی

تحت عنوان : تحلیل دینامیکی نانولوله های کربنی چند جداره کربنی با استفاده از روش های عددی

به ارزش: ۶ واحد درساعت: ۱۷ روز: چهارشنبه مورخ: ۱۳۹۰/۴/۲۹

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

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

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: بسیار خوب و امتیاز: ۱۸٫۵) ☐ دفاع مجدد ☐ غیرقابل قبول

۱- عالی (۲۰-۱۹) ۲- بسیار خوب (۱۸/۹۹ – ۱۸) ۳- خوب (۱۷/۹۹ – ۱۶) ۴- قابل قبول (۱۵/۹۹ -۱۴)

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

اگر قابل تقدیم باشد

تقدیم به:

پدر و مادر فداکارم

که گوهر جوانی و عمر خویش را به پای فرزندانشان ریختند

رضایتشان، همه آرزویم است.

همسر مهربانم

که یار و یاورم بوده و هست.

برادران و خواهران گرامیم

که همیشه یاور و دلسوزم بوده اند.

دوستان عزیزم

که همه عمر وامدار مهربانی و محبت آنانم.

سپاسگزاری...

هر کس به من حرفی آموخت مرا بنده خود ساخته است. امام علی«ع»

خدای را شکر می‌کنم که به من توفیق کسب علم را عنایت فرمود و بر این بنده کمترین، منت گذارده و همواره هادی و راهنمایم بوده است. اکنون که به لطف و یاری خداوند متعال، مراحل نگارش و تدوین پایان‌نامه به اتمام رسیده است لازم می‌دانم مراتب امتنان و قدردانی فراوان خویش را تقدیم تمامی کسانی نمایم که ارائه پایان‌نامه حاضر مرهون مساعدت‌های بی‌شائبه آنان بوده است.

بدین وسیله از استاد بزرگوار جناب آقای دکتر سید یوسف احمدی بروغنی که بزرگوارانه و دلسوزانه با نظرات ارزشمند و مساعدت‌های بی‌دریغ خویش راه‌گشای انجام تحقیق شدند، کمال تشکر و قدردانی را دارم.

از جناب آقای دکتر سید حجت هاشمی و آقای دکتر راغبی که به عنوان استاد داور، قبول زحمت نموده و اینجانب را از نظرات ارزشمند خود بهره‌مند ساختند تشکر فراوان دارم.

از جناب آقای دکتر خلیل خلیلی که به عنوان نماینده تحصیلات تکمیلی دانشگاه در جلسه دفاع حضور یافتند کمال تشکر را دارم.

از مجموعه گروه مکانیک و زحمات اساتید عزیز گروه مکانیک، که در تمام طول تحصیلم چیزی برای دریغ نداشتند، مراتب تقدیر و تشکر خود را ابراز می‌دارم.

از خانواده ام مخصوصا پدر و مادرم که در تمام مدت تحصیل و زندگیم از هیچ فداکاری ای دریغ نکردند، کمال تشکر را دارم.

همچنین از برادرم که زحماتش در رسیدنم به این نقطه هیچ وقت فراموشم نخواهد شد کمال تشکر را دارم.

از دوستان عزیز و بزرگواری که در حد توانشان یاری و مساعدت‌های خود را از بنده حقیر دریغ ننموده‌اند مخصوصا آقای مهندس حامد خسروی، نهایت تشکر و قدردانی را می نمایم. همچنین از تمامی کسانی که در این مدت باعث رنجش خاطر آنها شده‌ام، عاجزانه تقاضا دارم به بزرگواری خود بنده حقیر را عفو نموده، آرزوی موفقیت و سربلندی تمامی عزیزان را از درگاه خداوند متعال خواهانم.

حسین ملکیان بیلندی

مرداد 1390

چکیده

تحلیل ارتعاشی نانولوله های کربنی به دلیل کاربردهای آن دارای اهمیت می باشد. روش اجزا محدود[1] یکی از روش های تحلیل نانولوله ها می باشد، که با در نظر گرفتن قاب سه بعدی این تحلیل انجام می شود. در این قاب سه بعدی پیوند بین اتم های کربن به عنوان اعضایی نیرویی مدل شده و اتم های کربن مفاصل بین این اعضا است. برای تولید مدل اجزا محدود گره ها در محل اتم های کربن قرار می گیرند و پیوند بین اتم ها به وسیله ی المان های سه بعدی الاستیک تیر مدل می شوند. مدول الاستیک المان های تیر با استفاده از پیوند مکانیک مولکولی و محیط پیوسته ارائه شده در مقالات معرفی شده است. در این مدل نیروهای واندروالس بین لایه های نانولوله دو جداره در نظر گرفته شده است. خواص نانولوله های تک جداره و دوجداره در بعضی موارد با هم متفاوت است. با استفاده از نرم افزار انسیس[2] خواص مکانیکی نانولوله ها تحلیل شده است. المان تیر 4[3] که المانی سه بعدی با قابلیت های خمش، کشش، پیچش و فشار ، استفاده شده است. عکس العمل بین دو لایه از نانولوله های چند جداره، عکس العمل واندروالس، در محاسبه ی پارامترهای مکانیکی در نظر گرفته شده است. برای شبیه سازی نیروی واندروالس از المان فنر لینک11 [4] استفاده شده است. نتایج به دست آمده برای نانولوله های تک جداره و چندجداره نشان دهنده کاهش فرکانس با افزایش طول است در صورتی که با افزایش قطر نانولوله فرکانس طبیعی نانولوله افزایش می یابد. شکل مد فرکانس طبیعی نانولوله های تک جداره و چندجداره به دست آمده است. نتایج به دست آمده برای مد اول فرکانس طبیعی با نتایج تحلیلی تیر هماهنگی خوبی دارد. نتایج ارائه شده نشان دهنده این است که مدل اجزا محدود پیشنهادی ابزار ارزشمندی برای مطالعه ی رفتار مکانیکی نانولوله های کربنی است.

کلید واژه‌ها: اجزا محدود، شکل مد، فرکانس طبیعی، مدل قاب سه بعدی، نانولوله کربنی

[1] Finite element (FE)
[2] ANSYS
[3] Beam4
[4] Link11

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

فهرست علایم و نشانه‌ها ..... د
فهرست جدول‌ها ..... ه
فهرست شکل‌ها ..... ز

فصل 1- مقدمه ای بر نانولوله ها و مرور کارهای انجام شده 1
1-1- فناوری نانو 1
1-2- تاریخچه نانوتکنولوژی 1
1-3- نانولوله های کربنی 2
1-4- کشف نانولوله 3
1-5- مروری بر کارهای گذشته 5
1-6- جمع بندی 7

فصل 2- آشنایی با نانولوله ها 8
2-1- مقدمه 8
2-2- شکل پیوند در آلوتروپ های کربن 9
2-2-1- الماس 9
2-2-2- گرافیت 10
2-2-3- فولرن ها 11
2-3- ساختار نانولوله های کربنی 11
2-4- خواص نانولوله ها 17
2-4-1- واکنش پذیری شیمیایی 17
2-4-2- استحکام 17
2-4-3- خواص حرکتی 18
2-4-4- خواص الکتریکی 18
2-4-5- خواص حرارتی 18
2-4-6- نواقص 19
2-5- تولید طبیعی و اتفاقی 19
2-6- کاربردها 19
2-6-1- کابرد در ساختار مواد 19
2-6-2- کاربردهای الکترونیکی و مغناطیسی 20
2-6-3- کاربردهای شیمیایی 22

2-6-4- کاربردهای مکانیکی 22
2-6-5- کاربرد در مدارات الکتریکی 22
2-6-6- کاربرد به عنوان ریسمان (فیبر) و ورق 23
2-7- جمع بندی 24

فصل 3- ارتعاشات نانولوله ها 25
3-1- مدل های محیط پیوسته 25
3-2- تئوری های الاستیسیته محیط پیوسته برای ارتعاش میله 29
3-2-1- ارتعاشات موجی 30
3-2-2- ارتعاشات طولی 32
3-2-3- ارتعاشات پیچشی 33
3-2-4- ارتعاشات محیطی 34
3-3- مدل های اتمی و محیط پیوسته ی اتمی ترکیبی 34
3-4- جمع بندی 38

فصل 4- تحلیل اجزاء محدود نانولوله ها 39
4-1- ویژگی اصلی المان محدود 39
4-2- تحلیل نانولوله ها 41
4-2-1- تحلیل استاتیک، مدول یانگ نانولوله 41
4-2-2- تحلیل دینامیکی، تحلیل مودال نانولوله ها 41
4-3- شبیه سازی پیوندهای مولکولی 42
4-4- مدل سازی نانولوله 44
4-5- مدل سازی اجزا محدود نانولوله تک جداره 45
4-6- مدل سازی اجزا محدود نانولوله های چند جداره 47
4-7- مقیاس تشابه هندسی 48
4-7-1- خواص مکانیکی المان ها 50
4-8- جمع بندی 50

فصل 5- نتایج شبیه سازی دینامیکی نانولوله با استفاده از نرم افزار Ansys 51
5-1- بررسی تغییر خواص ارتعاشی نانولوله های تک جداره با تغییرات قطری و طولی 51
5-1-1- نانولوله زیگزاگ (5،0)و آرمچیر (5،5) 51
5-1-2- نانولوله های زیگزاگ (10،0) ، (15،0) ، (20،0) و (25،0) 55
5-1-3- نانولوله های آرمچیر (10،10) ، (15،15) ، (20،20) و (25،25) 59
5-1-4- مقایسه فرکانس نانولوله تک جداره آرمچیر و زیگزاگ با قطر مساوی 62
5-1-5- بررسی شکل مدهای مختلف فرکانس طبیعی نانولوله های تک جداره 65
5-2- فرکانس طبیعی نانولوله های دوجداره 93

5-2-1- نانولوله های دوجداره زیگزاگ (10،0)-(5،0) ؛ (14،0)-(5،0)؛ (15،0)-(10،0) و (20،0)-(10،0) 93
5-2-2- تاثیر تغییرات قطر داخلی و خارجی بر فرکانس طبیعی نانولوله زیگزاگ دوجداره 97
5-2-3- نانولوله های دوجداره آرمچیر (10،10)-(5،5) ؛ (20،20)-(5،5) و (20،20)-(10،10) 99
5-2-4- تاثیر تغییرات قطر داخلی و خارجی بر فرکانس نانولوله آرمچیر دوجداره 102
5-2-5- بررسی شکل مدهای مختلف فرکانس طبیعی نانولوله های دوجداره 103
5-3- جمع بندی 118

فصل 6- نتیجه گیری و پیشنهادات 119
6-1- نانولوله های تک جداره 119
6-2- نانولوله های دوجداره 120
6-3- کارهای آینده 121

ضمیمه 122

فهرست مراجع 127

فهرست علایم و نشانه‌ها

عنوان	علامت اختصاری
اتمسفر	atm
بردار کایرال نانولوله	C_h
بردار یکه کایرال	a_1
بردار یکه کایرال	a_2
ترا هرتز (10^{12} هرتز)	THz
تعداد اتم کربن در هر واحد سلول نانولوله	n_c
ثابت شبکه	a
چگالی	ρ (kg/m^3)
سطح مقطع	A
ظرفیت گرمای ویژه	C_p
عدد طبیعی	m
عددی طبیعی	n
فرکانس طبیعی	ω_n , f_n
قطر نانولوله	d_t
گیگا هرتز (10^9 هرتز)	GHz
10^{-10} متر	Å
مدول برشی	G (N/m^2)
مدول یانگ	E (N/m^2)
ممان اینرسی	I

فهرست جدول‌ها

عنوان **صفحه**

جدول 1-1) مقایسه بین خواص نانولوله های کربنی و بعضی مواد [2] 3
جدول 2-1) خواص فیزیکی گرافیت [22] 10
جدول 2-2) مقادیر هندسی برای نانولوله های مختلف [22] 16
جدول 4-1) خواص المان های به کار رفته در شبیه سازی نانولوله کربنی [2، 63] 50
جدول 5-1) مشخصات انواع نانولوله های (5،0) 53
جدول 5-2) فرکانس سه مد اول خمشی ارتعاش نانولوله (5،0) بر حسب گیگاهرتز 53
جدول 5-3) مشخصات انواع نانولوله های (5،5) 53
جدول 5-4) مشخصات نانولوله های زیگزاگ (10،0) 55
جدول 5-5) مشخصات نانولوله زیگزاگ(15،0) 56
جدول 5-6) مشخصات نانولوله زیگزاگ(20،0) 56
جدول 5-7) مشخصات نانولوله زیگزاگ(25،0) 56
جدول 5-8) مقایسه مد اول فرکانس طبیعی (GHz) سه نانولوله زیگزاگ (15،0) ، (20،0) و (25،0) 57
جدول 5-9) مشخصات نانولوله های آرمچیر (10،10) 59
جدول 5-10) مشخصات نانولوله های آرمچیر (15،15) 60
جدول 5-11) مشخصات نانولوله آرمچیر(20،20) 60
جدول 5-12) مشخصات نانولوله آرمچیر(25،25) 60
جدول 5-13) مقایسه فرکانس طبیعی (GHz) مد اول خمشی چهار نانولوله آرمچیر(10،10) ، (15،15) ، (20،20) و (25،25) 61
جدول 5-14) مقایسه فرکانس طبیعی (GHz) مد اول نانولوله زیگزاگ(26،0) و آرمچیر (15،15) 62
جدول 5-15) مقایسه فرکانس طبیعی (GHz) مددوم نانولوله زیگزاگ(26،0) و آرمچیر (15،15) 63
جدول 5-16) مقایسه فرکانس طبیعی (GHz) مد سوم نانولوله زیگزاگ(26،0) و آرمچیر (15،15) 64
جدول 5-17) مدهای مختلف فرکانس طبیعی (GHz) نانولوله زیگزاگ (5،0) 68
جدول 5-18) مدهای مختلف فرکانس طبیعی (GHz) نانولوله آرمچیر(5،5) 71
جدول 5-19) مدهای مختلف فرکانس طبیعی (GHz) نانولوله زیگزاگ(10،0) 72
جدول 5-20) مدهای مختلف فرکانس طبیعی (GHz) نانولوله زیگزاگ(15،0) 73
جدول 5-21) مدهای مختلف فرکانس طبیعی (GHz) نانولوله زیگزاگ(20،0) 75
جدول 5-22) مدهای مختلف فرکانس طبیعی (GHz) نانولوله زیگزاگ(25،0) 77
جدول 5-23) مدهای مختلف فرکانس طبیعی (GHz) نانولوله زیگزاگ(26،0) 80
جدول 5-24) مدهای مختلف فرکانس طبیعی (GHz) نانولوله آرمچیر(10،10) 81
جدول 5-25) مدهای مختلف فرکانس طبیعی (GHz) نانولوله آرمچیر(15،15) 83

جدول5-26) مدهای مختلف فرکانس طبیعی (GHz) نانولوله آرمچیر(20،20).....86
جدول5-27) مدهای مختلف فرکانس طبیعی (GHz) نانولوله آرمچیر(25،25).....92
جدول5-28) مشخصات نانولوله دوجداره (10،0)-(5،0).....93
جدول5-29) مشخصات نانولوله دوجداره (14،0)-(5،0).....94
جدول5-30) مشخصات نانولوله دوجداره (15،0)-(10،0).....94
جدول5-31) مشخصات نانولوله دوجداره (20،0)-(10،0).....94
جدول5-32) فرکانس طبیعی (GHz) مد اول نانولوله های زیگزاگ دوجداره با تغییر طول و قطر 97
جدول5-33) جدول مشخصات نانولوله آرمچیر (10،10)-(5،5).....99
جدول5-34) جدول مشخصات نانولوله آرمچیر (20،20)-(5،5).....99
جدول5-35) جدول مشخصات نانولوله آرمچیر (20،20)-(5،5).....100
جدول5-36) فرکانس طبیعی (GHz) مد اول نانولوله های آرمچیر دوجداره با تغییر طول و قطر 102
جدول5-37) فرکانس طبیعی (GHz) مدهای مختلف نانولوله زیگزاگ (10،0)-(5،0).....106
جدول5-38) فرکانس طبیعی (GHz) مدهای مختلف نانولوله زیگزاگ (15،0)-(5،0).....107
جدول5-39) فرکانس طبیعی (GHz) مدهای مختلف نانولوله زیگزاگ (15،0)-(10،0).....108
جدول5-40) مدهای مختلف فرکانس طبیعی (GHz) نانولوله زیگزاگ (20،0)-(10،0).....110
جدول5-41) مدهای مختلف فرکانس طبیعی (GHz) نانولوله آرمچیر(10،10)-(5،5).....112
جدول5-42) مدهای مختلف فرکانس طبیعی (GHz) نانولوله آرمچیر (20،20)-(5،5).....113
جدول5-43) فرکانس طبیعی (GHz) مدهای مختلف نانولوله آرمچیر(20،20)-(10،10).....118

فهرست شکل‌ها

عنوان **صفحه**

شکل2-1) الف) شکل شماتیکی گرافیت ب)شکل یک لایه گرافن [2] 12
شکل2-2) شماتیک انواع مختلفی از نانولوله های آرمچیر زیگزاگ و کایرال [24] 12
شکل2-3) شبکه شش گوش صفحه گرافنی و نمایش بردارهای یکه ی a_1 و a_2 [25] 13
شکل2-4) نحوه انتخاب محورهای x وy در صفحه گرافن 14
شکل 2-5) الف) نانولوله آرمچیر ب) نانولوله زیگزاگ ج) نانولوله کایرال د) صفحه گرافیت در حین لوله شدن [2] 16
شکل2-6) صفحه گرافن که به صورت استوانه ای لوله می شود [2] 17
شکل3-1) پنج دسته از مدهای ارتعاشی میله استوانه ای [51] 30
شکل3-2) عکس العمل های بین اتمی در ساختار مکانیک مولکولی (لی و چو[55]) 36
شکل 3-3) شکل مد نانولوله های تک جداره و دوجداره با استفاده از مکانیک مولکول لی و چو [56] ... 37
شکل3-4) شرایط مرزی برای تیر یک سرگیردار 38
شکل4-1) مدل تحلیل تنش برای یک صفحه سوراخ دار 39
شکل4-2) دسته بندی مسائل المان محدود[61] 41
شکل 4-3) مدل اجزا محدود یک نانولوله به صورت ساختاری شش وجهی[63] 43
شکل4-4) مش بندی المان محدود نانو لوله ی کربنی زیگزاگ (15،0) 44
شکل4-5) شماتیکی از مدل ایجاد شده برای نانولوله [71] 46
شکل4-6) نمای روبرویی و بالای مش اجزا محدود [71] 47
شکل4-7) نمای سه بعدی نانولوله دوجداره 48
شکل5-1) نمایی از نانولوله (5،0) با طول 52
شکل5-2) نمایی نانولوله آرمچیر (5،5) 52
شکل5-3) نمودار فرکانس طبیعی مد اول نانولوله زیگزاگ (5،0) 54
شکل5-4) نمودار فرکانس طبیعی مد اول نانولوله آرمچیر (5،5) 54
شکل5-5) مقایسه ی فرکانس طبیعی دو نانولوله زیگزاگ (5،0)و آرمچیر (5،5) 55
شکل5-6) نمودار فرکانس طبیعی نانولوله (10،0) 57
شکل5-7) نمودار فرکانس طبیعی مد اول نانولوله های زیگزاگ به طول Å 254/36 با افزایش قطر 58
شکل5-8) نمودار فرکانس طبیعی انواع نانولوله های زیگزاگ (15،0) 58
شکل5-9) نمودار فرکانس طبیعی انواع نانولوله های زیگزاگ (20،0) 59
شکل5-10) نمودار فرکانس طبیعی نانولوله آرمچیر مد اول به طول Å 146/444 با افزایش قطر 61
شکل5-11) نمودار فرکانس طبیعی مد اول نانولوله آرمچیر (10،10) 62
شکل5-12) نمودار مقایسه فرکانس طبیعی مد اول نانولوله آرمچیر (15،15) و زیگزاگ (26،0) 63

شکل5-13) نمودار مقایسه فرکانس طبیعی مد دوم نانولوله آرمچیر (15،15) و زیگزاگ (26،0).....64
شکل5-14) نمودار مقایسه فرکانس طبیعی مد سوم نانولوله آرمچیر (15،15) و زیگزاگ (26،0).....65
شکل5-15) شکل مد اول خمشی نانولوله زیگزاگ (5،0).....66
شکل5-16) شکل مددوم خمشی نانولوله زیگزاگ (5،0).....67
شکل5-17) شکل مد سوم خمشی نانولوله زیگزاگ (5،0).....67
شکل5-18) شکل مد چهارم خمشی نانولوله زیگزاگ (5،0).....68
شکل5-19) نمودار فرکانس های مدهای مختلف نانولوله زیگزاگ (5،0).....69
شکل5-20) شکل مد سوم خمشی نانولوله آرمچیر (5،5).....70
شکل5-21) شکل مد اول پیچشی نانولوله آرمچیر (5،5).....70
شکل5-22) شکل مد اول پیچشی نانولوله زیگزاگ(10،0).....71
شکل5-23) شکل مد اول پیچشی نانولوله زیگزاگ(15،0).....72
شکل5-24) شکل مد اول خمشی نانولوله زیگزاگ(20،0).....73
شکل5-25) شکل مد دوم خمشی نانولوله زیگزاگ(20،0).....74
شکل5-26) شکل مد اول پیچشی نانولوله زیگزاگ(20،0).....74
شکل5-27) شکل مد سوم خمشی نانولوله زیگزاگ(20،0).....75
شکل5-28) شکل مد اول پیچشی نانولوله زیگزاگ(25،0).....76
شکل5-29) شکل مد اول تنفسی (شعاعی) نانولوله زیگزاگ(25،0).....76
شکل5-30) شکل مد اول تنفسی (شعاعی) نانولوله زیگزاگ(25،0).....77
شکل5-31) شکل مد اول پیچشی نانولوله زیگزاگ(26،0).....78
شکل5-32) شکل مد اول تنفسی (شعاعی) نانولوله زیگزاگ(26،0).....78
شکل5-33) شکل مد اول تنفسی (شعاعی) نانولوله زیگزاگ(26،0).....79
شکل5-34) شکل مد اول تنفسی (شعاعی) نانولوله زیگزاگ(26،0).....79
شکل5-35) شکل مد اول پیچشی نانولوله آرمچیر(10،10).....80
شکل5-36) شکل مد اول تنفسی (شعاعی) نانولوله آرمچیر(15،15).....81
شکل5-37) شکل مد اول تنفسی (شعاعی) نانولوله آرمچیر(15،15).....82
شکل5-38) شکل مد اول پیچشی نانولوله آرمچیر(15،15).....82
شکل5-39) شکل مد اول تنفسی (شعاعی) نانولوله آرمچیر(20،20).....83
شکل5-40) شکل مد اول تنفسی (شعاعی) نانولوله آرمچیر(20،20).....84
شکل5-41) شکل مد دوم تنفسی (ضربدری) نانولوله آرمچیر(20،20).....84
شکل5-42) شکل مد دوم تنفسی (ضربدری) نانولوله آرمچیر(20،20).....85
شکل5-43) شکل مد دوم تنفسی (ضربدری) نانولوله آرمچیر(20،20).....85
شکل5-44) شکل مد اول پیچشی نانولوله آرمچیر(20،20).....86
شکل5-45) شکل مد اول خمشی نانولوله آرمچیر(25،25).....87
شکل5-46) شکل مد اول تنفسی (شعاعی) نانولوله آرمچیر(25،25).....88

شکل5-47) شکل مد اول تنفسی (شعاعی) نانولوله آرمچیر(25،25) 88
شکل5-48) شکل مد دوم تنفسی (ضربدری) نانولوله آرمچیر(25،25) 89
شکل5-49) شکل مد دوم تنفسی (ضربدری) نانولوله آرمچیر(25،25) 89
شکل5-50) شکل مد دوم تنفسی (ضربدری) نانولوله آرمچیر(25،25) 90
شکل5-51) شکل مد دوم تنفسی (ضربدری) نانولوله آرمچیر(25،25) 90
شکل5-52) شکل مد سوم تنفسی (مثلثی) نانولوله آرمچیر(25،25) 91
شکل5-53) شکل مد سوم تنفسی (مثلثی) نانولوله آرمچیر(25،25) 91
شکل5-54) شکل مد اول پیچشی نانولوله آرمچیر(25،25) 92
شکل5-55) نمودار فرکانس طبیعی مد اول نانولوله دوجداره (10،0)-(5،0) 95
شکل5-56) نمودار فرکانس طبیعی مد اول نانولوله دوجداره (14،0)-(5،0) 95
شکل5-57) نمودار فرکانس طبیعی مد اول نانولوله دوجداره (15،0)-(10،0) 96
شکل5-58) نمودار فرکانس طبیعی مد اول نانولوله دوجداره (20،0)-(10،0) 96
شکل5-59) مقایسه فرکانس طبیعی مد اول دو نانولوله زیگزاگ دوجداره با قطرهای خارجی برابر 98
شکل5-60) مقایسه فرکانس طبیعی مد اول دو نانولوله زیگزاگ دوجداره با قطرهای داخلی برابر 98
شکل5-61) مقایسه فرکانس های طبیعی مد اول نانولوله دوجداره آرمچیر (10،10)-(5،5) 100
شکل5-62) مقایسه فرکانس های طبیعی مد اول نانولوله دوجداره آرمچیر (20،20)-(5،5) 101
شکل5-63) مقایسه فرکانس های طبیعی مد اول نانولوله دوجداره آرمچیر (20،20)-(10،10) 101
شکل5-64) مقایسه فرکانس طبیعی مد اول دو نانولوله آرمچیر دوجداره با قطرهای داخلی برابر 102
شکل5-65) مقایسه فرکانس طبیعی مد اول دو نانولوله آرمچیر دوجداره با قطرهای خارجی برابر 103
شکل5-66) شکل مد اول خمشی نانولوله زیگزاگ (10،0)-(5،0) 104
شکل5-67) شکل مد دوم خمشی نانولوله زیگزاگ (10،0)-(5،0) 104
شکل5-68) شکل مد سوم خمشی نانولوله زیگزاگ (10،0)-(5،0) 105
شکل5-69) شکل مد اول پیچشی نانولوله زیگزاگ (10،0)-(5،0) 105
شکل5-70) شکل مد اول پیچشی نانولوله زیگزاگ (15،0)-(5،0) 106
شکل5-71) شکل مد اول پیچشی نانولوله زیگزاگ (15،0)-(10،0) 107
شکل5-72) شکل مد اول پیچشی نانولوله زیگزاگ (20،0)-(10،0) 108
شکل5-73) شکل مد اول طولی نانولوله زیگزاگ (20،0)-(10،0) 109
شکل5-74) شکل مد دوم طولی نانولوله زیگزاگ (20،0)-(10،0) 109
شکل5-75) شکل مد اول پیچشی نانولوله آرمچیر(10،10)-(5،5) 111
شکل5-76) شکل مد دوم پیچشی نانولوله آرمچیر(10،10)-(5،5) 111
شکل5-77) شکل مد اول پیچشی نانولوله آرمچیر(20،20)-(5،5) 112
شکل5-78) شکل مد دوم طولی نانولوله آرمچیر (20،20)-(5،5) 113
شکل5-79) شکل مد اول تنفسی (شعاعی) نانولوله آرمچیر(20،20)-(10،10) 114
شکل5-80) شکل مد اول تنفسی (شعاعی) نانولوله آرمچیر(20،20)-(10،10) 114

شکل5-81) شکل مد اول تنفسی (شعاعی) نانولوله آرمچیر(20،20)-(10،10)..... 115
شکل5-82) شکل مد اول پیچشی نانولوله آرمچیر(20،20)-(10،10)..... 115
شکل5-83) شکل مد دوم تنفسی (ضربدری) نانولوله آرمچیر(20،20)-(10،10)..... 116
شکل5-84) شکل مد دوم تنفسی (ضربدری) نانولوله آرمچیر(20،20)-(10،10)..... 116
شکل5-85) شکل مد دوم تنفسی (ضربدری) نانولوله آرمچیر(20،20)-(10،10)..... 117
شکل5-86) شکل مد دوم تنفسی (ضربدری) نانولوله آرمچیر(20،20)-(10،10)..... 117

فصل 1 - مقدمه ای بر نانولوله ها و مرور کارهای انجام شده

1 - 1 - فناوری نانو

فناوری نانو واژه‌ای است کلی که به تمام فناوری‌های پیشرفته در عرصه کار با مقیاس نانو اطلاق می‌شود. معمولاً منظور از مقیاس نانو ابعادی در حدود 1 نانومتر تا 100 نانو متر می باشد. (1 نانومتر یک میلیاردیم متر است). می توان به طور کلی تمام تعاریفی که از نانوتکنولوژی وجود دارد را در سه مورد زیر خلاصه کرد:

1- توسعه فناوری و تحقیقات در سطوح اتمی ، مولکولی و یا ماکرومولکولی در مقیاس اندازه ای 1 تا 100 نانومتر.

2 – خلق و استفاده از ساختارها و ابزار و سیستمهایی که به خاطر اندازه کوچک یا حد میانه آنها، خواص و عملکرد نوینی دارند .

3 – توانایی کنترل یا دستکاری در سطوح اتمی .

1 - 2 - تاریخچه نانوتکنولوژی

بیش از پنجاه سال پیش ریچارد فاینمن، متخصص کوانتوم نظری و دارنده ی جایزه ی نوبل، در هنگام گرفتن جایزه نوبل خود، نظریه‌ی جدیدی مطرح کرد. او در سخنرانی معروف خود در سال 1959 با عنوان «آن پایین فضای بسیاری هست»[1] به بررسی بعد رشد نیافته علم مواد پرداخت. وی درآن زمان اظهار داشت: «اصول فیزیک، تا آنجایی که من توانایی فهمش را دارم، مخالفتی با ساختن اتم به اتم چیزها ندارد.» او فرض را بر این قرار داد که اگر دانشمندان فرا گرفته‌اند که چگونه ترانزیستورها و دیگر سازه‌ها را با مقیاس‌های کوچک بسازند، پس می توان آنها را کوچک و کوچکتر کرد. در واقع آنها به مرزهای حقیقی شان در لبه‌های نامعلوم کوانتوم نزدیک خواهند بود، بطوری که یک اتم در مقابل دیگری به گونه‌ای قرار می گیرد که بتوان کوچکترین محصول ممکن را تولید کرد.

فاینمن در ذهن خود یک "دکتر مولکولی" تصور کرد که صدها بار از یک سلول منحصربه فرد کوچکتر است و می تواند به بدن انسان تزریق شود و درون بدن برای انجام کاری یا مطالعه و تایید سلامتی سلول‌ها و یا انجام اعمال ترمیمی و به طور کلی برای نگهداری بدن در سلامت کامل به سیر بپردازد. در بحبوحه سال‌های صنعتی کلمه "بزرگ" از اهمیت ویژه ای برخوردار بود. مثل علوم بزرگ، پروژه های مهندسی بزرگ و غیره حتی کامپیوترها در دهه 1950 تمام طبقات ساختمان را اشغال می کردند. ولی از وقتی فاینمن نظرات و منطق خود را بازگو کرد، جهان روندی به سوی کوچک شدن در پیش گرفت.

[1] "There is plenty of room at the bottom"

دکتر مینسکی تفکرات بسیار باروری داشت که می توانست به اندیشه های فاینمن قوت ببخشد. مینسکی پدر یابنده هوشهای مصنوعی دهه 70-1960 جهان را در تفکراتی که مربوط به آینده می شد، رهبری می کرد.

در اواسط دهه 70، اریک درکسلر یک دانشجوی فارغ التحصیل بود، مینسکی را به عنوان استاد راهنما جهت تکمیل پایان نامه اش انتخاب کرد و او نیز این مسئولیت را بر عهده گرفت. درکسلر سخت به وسایل کوچک فاینمن علاقه مند شده بود و قصد داشت تا در مورد توانایی های آنها به کاوش بپردازد.

مینسکی نیز با وی موافقت کرد. درکسلر در اوایل دهه 80، درجه استادی خود را در رشته علوم کامپیوتر دریافت کرده بود و گروهی از دانشجویان را به صورت انجمنی به دور خود جمع نموده بود. او افکار جوان ترها را با یک سری ایده ها که خودش "نانوتکنولوژی" نامگذاری کرده، مشغول می داشت.

وی اولین مقاله علمی خود را در مورد" نانوتکنولوژی مولکولی "در سال 1981 ارایه داد. او کتاب Engine of Creation: The Coming Era of Nanotechnology را در سال 1986 به چاپ رساند. درکسلر درجه دکتری در نانوتکنولوژی را در سال 1991 از دانشگاه MIT دریافت داشت. او یک پیشرو در طرح نانوتکنولوژی است و هم اکنون رئیس انستیتو Foresight و Research Fellow می باشد.

1 - 3 - نانولوله های کربنی

نانولوله های کربنی (CNT)[1] نوعی آلوتروپ کربن هستند که در سال 1991 به دنیا معرفی شده اند. آن ها به شکل مولکول استوانه ای هستند و خواص شگفت انگیزی دارند که آن ها را برای به کار گیری در بسیاری از کاربردهای نانوفناوری، الکترونیک، اپتیک و حوزه های دیگر علم مواد مناسب می سازد. آن ها دارای استحکام خارق العاده ای بوده، خواص الکتریکی منحصر به فردی دارند، و هادی کارآمدی برای حرارت هستند.

نانولوله عضوی از خانواده فولرن[2] هاست، که باکیبال[3] ها را نیز شامل می شود. فولرن ها خوشه ی بزرگی از اتم های کربن در قالب یک قفس بسته می باشند و از ویژگی های خاصی برخوارند که پیش از این در هیچ ترکیب دیگری یافت نشده بودند. فولرن ها ساختارهای گوناگونی شامل کروی منظم، مخروطی، لوله ای و همچنین اشکال پیچیده و عجیب دیگر دارند. مهمترین و شناخته شده ترین فولرن ها باکیبال به شکل کره و نانولوله به شکل استوانه است که معمولا لااقل یک سر آن با درپوش نیم کروی از ساختار باکیبال پوشیده شده است. نام نانولوله از اندازه اش گرفته شده، زیرا قطر آن در ابعاد نانومتر است (تقریبا 50000 برابر کوچکتر از قطر موی سر انسان)، این در حالی است که طول آن می تواند به بلندی چند میلیمتر برسد. طول بلند چندین میکرونی و قطر کوچک چند نانومتری آنها نسبت طول به قطر بسیار بزرگی را نتیجه می دهد. لذا می توان آن ها را تقریبا فولرن های یک بعدی در نظرگرفت. بدین ترتیب انتظار می رود این مواد از خواص جالب الکترونیکی ، مکانیکی و مولکولی ویژه ای برخوردار باشند. مخصوصا در اوایل، تمام مطالعات تئوری نانولوله های کربنی به بررسی اثر ساختار تقریبا یک بعدی بر روی خواص مولکولی و الکترونیکی آن ها معطوف می شد.

[1] Carbon Nano Tube (CNT)
[2] Fullerene
[3] Buckyball

نانولوله ها در دو دسته ای اصلی وجود دارند: نانولوله های تک جداره (SWNTs) [1] و نانولوله های چند جداره (MWNTs)[2] . نانولوله ها مانند گرافیت تماما از پیوند sp^2 تشکیل شده اند. این ساختار پیوند، از پیوند sp^3 که در الماس وجود دارد قویتر است، و استحکام منحصر به فردی به این مولکول ها می دهد نانولوله ها معمولا تحت نیروهای واندروالس [3] به شکل ریسمان به هم می چسبند. تحت فشار زیاد، نانولوله ها می توانند با هم ممزوج و متصل شوند و این امکان به وجود می آید که بتوان سیم های به طول نامحدود و بسیار مستحکمی را تولید کرد[1].

نانولوله های کربنی مدول یانگ بالایی در جهت محوری دارند. مدول یانگ (مدول الاستیک) نانولوله های کربنی نزدیک 1TPa است. مدول یانگ، مقاومت کششی و چگالی نانولوله ها با دیگر مواد در جدول 1-1 مقایسه شده اند. همان طور که در این جدول دیده می شود نانولوله های تک جداره مدول یانگی به بزرگی مدول یانگ الماس دارند اما سفتی بالاتری داشته و 5 برابر از فولاد مستحکم ترند. مقاومت کششی نانولوله ها می تواند به بالاتر از 150 GPa برسد که 50 برابر بیشتر از بالاترین مقاومت نهایی فولاد است [2].

جدول 1-1) مقایسه بین خواص نانولوله های کربنی و بعضی مواد [2]

نوع ماده	مدول یانگ (GPa)	مقاومت کششی (GPa)	چگالی (g/cm^3)
نانولوله تک جداره	1054	150	1/3-1/4
نانولوله چند جداره	1200	150	2/6
فولاد	208	0/4	7/8
اپوکسی[4]	3/5	0/005	1/25
چوب	16	0/008	0/6

1 - 4 - کشف نانولوله

در سال 2006 مارک مونتیوکس[5] و ولادیمیر کوزنشف[6] در مقاله ای در ژورنال کربن به بیان مبدا و منشا جالب، واغلب تحریف شده ی نانولوله ها پرداخته اند[3]. اغلب مقالات معروف و علمی، کشف لوله های نانومتری توخالی کربنی را به سومیو ایجیما[7] از NEC در سال 1991 نسبت می دهند.

اما تاریخ لوله های نانومتری کربن گرافیتی به گذشته ای دور در سال 1952 بر می گردد. در آن سال رادشکویچ[8] و لوکیانویچ[9] تصاویر واضحی از لوله های 50 نانومتری کربنی را در مجله ی روسی "شیمی فیزیک" [10] به چاپ رساندند. ممکن است نانولوله های کربنی حتی قبل از آن سال هم ساخته شده بودند

[1] Single-Walled Nanotubes (SWNTs)
[2] Multi-Walled Nanotubes (MWNTs)
[3] Van der waals
[4] Epoxy
[5] Marc Monthioux
[6] Vladimir Kuznetsov
[7] Sumio Iijima
[8] Radushkevich
[9] Lukyanovich
[10] Russian journal of physical chemistry

ولی تا زمان اختراع TEM[1] امکان مشاهده ی مستقیم این ساختارها فراهم نبوده است. دانشمندان در غرب متوجه این کشف نشده بودند زیرا در زمان جنگ سرد، تبادل اطلاعاتی بین شرق و غرب بسیار ضعیف بود، و نیز مقاله به زبان روسی به چاپ رسیده بود.

قبل از اولین تولید مصنوعی و یافتن فولرن های کوچکتر C_{60} و C_{70} این باور وجود داشت که این مولکول های کروی بزرگ عموما ناپایدار هستند. اما، محاسبات چند دانشمند روسی [4 و 5] نشان داد که مولکول C_{60} در حالت گازی پایدار است. مشابه اغلب کشفیات بزرگ علمی دیگر، فولرن ها نیز به طور تصادفی کشف شدند. در سال 1985 ریچارد اسمالی[2]، رابرت کرل[3] و هارلد کروتو[4] [6] با نتایج عجیبی در طیف جرمی کربن تبخیر یافته روبرو شدند در پی این حادثه فولرن ها کشف شدند و پایداری آن ها در حالت گازی اثبات گشت. فولرن ها گروهی از آلوتروپ های کربن هستند که به نام معمار بزرگ ریچارد باک مینیستر فولر[5] نام گذاری شده است. آن ها مولکول های تمام کربنی هستند که به شکل کره ، بیضی گون یا لوله توخالی وجود دارند. اولین مشاهدات فولرن ها در طیف نگاری جرمی غیر منتظره بود [6]، و اولین روش تولید انبوه توسط کرچمر[6] و هافمن [7] برای سال ها، قبل از پی بردن به آن که این روش، فولرن تولید می کند، استفاده می شده است[7].

جستجو برای دیگر فولرن ها نیز آغاز شد و در سال 1991 نانولوله های کربنی توسط ایجیما[8] و همکارانش کشف شدند. کشف نانولوله های کربنی توسط ایجیما در ماده ی حل نشدنی لوله های گرافیتی سوخته شده [8] در دوده ی حاصله از تخلیه ی قوس الکتریکی دو میله ی کربنی، سرچشمه ی همه مباحث امروزی در مورد نانولوله های کربنی است. این یک کشف اتفاقی دیگر در ارتباط با فولرن ها بود؛ هر چند برای تولید فولرن های باکمینستر، روش تخلیه ی قوس الکتریکی به خوبی شناخته شده بود[7]. از آن پس محققین زیادی در سرتاسر جهان به مطالعه و بررسی این نانولوله ها پرداختند.

می توان گفت نانولوله ها به طور اتفاقی کشف شده اند، ولیکن در یک مقاله که توسط ابرلین[9] ، اندو[10] و کویاما[11] در سال 1976 چاپ شد، فیبرهای توخالی کربنی در ابعاد نانومتری به روش رشد بخار، به وضوح نشان داده شده بودند[9]. همچنین، درسال 1987، در آمریکا یک اختراع به نام جورج تنت[12] برای تولید "فیبرهای مجزای استوانه ای کربن" [13] با قطری بین 3/5 تا 70 نانومتر و طولی حدود 102 برابر قطر آن ثبت شد[10]. اخیرا، اغلب، اعتبار کشف نانولوله های کربنی را به اندو[14] می دهند واعتبار شفاف سازی ساختار نانولوله ها به ایجیما داده می شود. یک منظر از ساختار نانولوله های کربنی ساختار یک بعدی و درون تهی آن ها است. ساختار یک بعدی آن ها بسیار مورد توجه فیزیکدانها است، زیرا امکان

[1] Transmission Electron Microscope (TEM)
[2] Richard Smalley
[3] Robert Cuurl
[4] Harold Kroto
[5] Richard Buckminster fuller
[6] Kratchmer
[7] Huffman
[8] Sumio Iijima
[9] Oberlin
[10] Endo
[11] Koyama
[12] George Tennent
[13] Cylindrical discrete carbon fibrils
[14] Endo