بسم الله الرحمن الرحیم

دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

دانشکده مهندسی مکانیک

پایان‌نامه کارشناسی ارشد

تحلیل تاثیر عیوب ساختاری بر خواص مکانیکی نانولوله‌ها تحت بار کششی تک محوره

نگارش:

مهرداد ارجمند

استاد راهنما:

دکتر علی شکوه‌فر

بهمن 1389

تقدیم به

پدر و **مادر** مهربانم که در تمامی مراحل زندگی یار و همراه من بوده‌اند.

چکیده پایان نامه

هدف از انجام این تحقیق، تخمین مدول یانگ و روابط تنش-کرنش نانوتیوبهای تک دیواره کربن با ساختارهای سالم و دارای نقص جای خالی تحت بارگذاری کششی می‌باشد. این پایان نامه شامل محاسبات تئوری و شبیه سازی به روش دینامیک مولکولی می‌باشد. در این پایان‌نامه با معرفی روشی جدید بر پایه روشهای تحلیلی و تلفیق آنها با توابع پتانسیل اتمی موجود با استفاده از فرضیات حاکم بر مسئله تخمینی مناسب برای مدول الاستیک و روابط تنش-کرنش نانوتیوبهای کربن سالم و دارای نقص ارائه می‌گردد. نواقص ساختاری جای‌خالی، مخصوصاً زمانی که زیاد باشند، سبب کاهش خواص مکانیکی مانند مدول الاستیک، کرنش تسلیم و مقاومت کششی نانوتیوبهای کربن می‌شوند. اصول روش تلفیقی مطرح شده بر اساس استفاده از رابطه‌ی انرژی کرنشی می‌باشد. در ابتدا با یک تناسب ساده رابطه‌ای را برای مدول الاستیک به دست آورده و سپس با استفاده از توابع پتانسیل اتمی و به کمک تکنیک خطی سازی رابطه‌ای را برای تخمین مدول الاستیک نانولوله کربنی استخراج می‌نمائیم. همچنین برای بررسی اثرات نقص جای خالی در ساختار نانوتیوب کربن، آن را به بخشهای کوچک تری تقسیم خواهیم کرد که آنها را بخشهای واحد می‌نامیم و پس از به دست آوردن مدول برای هر یک از این بخشها، مدول یک نانوتیوب کامل را به دست خواهیم آورد. با استفاده از این روابط به بررسی تأثیرات تعداد نواقص جای‌خالی، تمرکز طولی نقص، انحنا و قطر نانوتیوب بر روی خواص مکانیکی آن خواهیم پرداخت. علاوه بر این، به بررسی تأثیر ضخامت بر روی مدول الاستیک نانوتیوب نیز اشاره خواهیم نمود.

واژه‌های کلیدی:

نانوتیوبهای کربن تک‌جداره، مدول الاستیک، روابط تنش-کرنش، نقص جای‌خالی تنها، مکانیک محیط پیوسته، مکانیک مولکولی

فهرست مطالب

عنوان **صفحه**

چکیده پایان نامه ..... **د**

فهرست اشکال ..... **ج**

فهرست جداول ..... **ه**

فصل اول : کلیات 1

1-1 **مقدمه** 2

1-2 **ساختار نانولولههای کربنی** 9

1-3 **بررسی تئوریهای موجود** 14

1-3-1 **مکانیک محیط پیوسته** 15

1-3-2 **دینامیک مولکولی** 16

1-3-3 **مکانیک کوانتوم** 20

1-3-4 **روش های ترکیبی** 20

1-4 **توابع پتانسیل بین اتمی** 21

1-4-1 **توابع پتانسیل بین دو ذره** 23

1-4-2 **توابع پتانسیل بین چند اتم** 23

1-4-3 **شعاع قطع کنندهی تابع پتانسیل** 24

1-4-4 **تابع پتانسیل لنارد-جونز** 24

1-4-5 **تابع پتانسیل ترسوف** 25

1-4-6 **تابع پتانسیل ترسوف-برنر** 26

1-4-7 **تابع پتانسیل** (*REBO*) 26

1-4-8 **تابع پتانسیل مورس** 27

1-5 **مروری بر پایان نامه** 28

فصل دوم : تخمین مدول الاستیک 30

2-1 **مقدمه** 31

2-2 **تئوری و فرمولاسیون** 32

2-2-1 **توابع پتانسیل** 34

2-2-2 **فرمولاسیون با استفاده از تابع پتانسیل مورس اصلاح شده** 35

2-2-3 **فرمولاسیون با استفاده از تابع پتانسیل ترسوف** 36

2-3 **مدل سازی** 37

2-3-1 **ساختار زیگزاگ** 37

2-3-2 **ساختار آرمچیر** 47

2-4 بحث و نتیجه گیری 56
2-4-1 بررسی مدول الاستیک ساختارهای زیگزاگ 56
2-4-2 بررسی مدول الاستیک ساختارهای آرمچیر 62

فصل سوم : تخمین رفتار مکانیکی 68

3-1 مقدمه 69
3-2 تئوری و فرمولاسیون 70
3-2-1 تخمین رفتار مکانیکی با استفاده از تقریب مرتبه دو در بسط تیلور 71
3-2-2 تخمین رفتار مکانیکی با استفاده از تقریب مرتبه بالا در بسط تیلور 77
3-3 بحث و نتیجه گیری 80
3-3-1 بررسی رفتار مکانیکی ساختارهای زیگزاگ 80
3-3-2 بررسی رفتار مکانیکی ساختارهای آرمچیر 83

فصل چهارم : شبیه سازی به روش دینامیک مولکولی 88

4-1 مقدمه 89
4-2 بحث و نتیجه گیری 91
4-2-1 ساختار زیگزاگ 93
4-2-2 ساختار آرمچیر 95

فصل پنجم : نتیجه گیری و پیشنهادات 98

5-1 مقدمه 99
5-2 نتیجهگیری 99
5-3 پیشنهادات برای توسعه آتی 100

منابع و مراجع 102

فهرست اشکال

عنوان **صفحه**

شکل 1-1 ساختارهای مختلف کربن 3

شکل 1-2 الگوی شماتیک مقایسهای میان روشهای مختلف شبیه سازی 6

شکل 1-3 ساختار اتمی صفحه گرافن 11

شکل 1-4 ساخت نانوتیوب کربن با استفاده از صفحه گرافن 12

شکل 1-5 چیدمانهای مختلف نانوتیوبهای کربن (زیگزاگ، آرمچیر و کایرال).....13

شکل 1-6 اتمهای موجود در دامنه 17

شکل 1-7 برهمکنش میان هسته و الکترون در روش مکانیک کوانتوم.....20

شکل 1-8 ترمهای انرژی پتانسیل بین اتمی 22

شکل 2-1 ساختار یک بخش واحد با چیدمان زیگزاگ.....37

شکل2-2 ساختار سلول واحد در چیدمان زیگزاگ سالم 38

شکل 2-3 تعادل پیوندهای کربن در ساختار سالم با چیدمان زیگزاگ.....39

شکل 2-4 ساختار یک بخش واحد با چیدمان زیگزاگ دارای نقص جایخالی 40

شکل 2-5 اتمهای قابل حذف در بخش واحد با چیدمان زیگزاگ.....41

شکل 2-6 ساختار سلول واحد در چیدمان زیگزاگ ناقص.....42

شکل 2-7-1 تعادل پیوندهای کربن در ساختار ناقص با چیدمان زیگزاگ.....43

شکل 2-7-2 تعادل پیوندهای کربن در ساختار ناقص با چیدمان زیگزاگ.....43

شکل 2-8 نانوتیوب با چیدمان زیگزاگ.....44

شکل 2-9 انحنا در نانوتیوب با چیدمان زیگزاگ 45

شکل 2-10 تأثیر انحنا بر تعادل نیرویی در نانوتیوب سالم با چیدمان زیگزاگ.....46

شکل 2-12 ساختار یک بخش واحد با چیدمان آرمچیر.....47

شکل2-13 ساختار سلول واحد در چیدمان آرمچیر سالم 48

شکل 2-14 تعادل پیوندهای کربن در ساختار سالم با چیدمان آرمچیر.....49

شکل 2-15 ساختار یک بخش واحد با چیدمان آرمچیر دارای نقص جایخالی 51
شکل 2-16 اتمهای قابل حذف در بخش واحد با چیدمان آرمچیر 51
شکل 2-17 ساختار سلول واحد در چیدمان آرمچیر ناقص 52
شکل 2-18 تعادل پیوندهای کربن در ساختار ناقص با چیدمان آرمچیر 52
شکل 2-19 نانوتیوب با چیدمان آرمچیر 54
شکل 2-20 انحنا در نانوتیوب با چیدمان آرمچیر 54
شکل 2-21 تأثیر انحنا بر تعادل نیرویی در نانوتیوب سالم با چیدمان آرمچیر 55
شکل 2-23 مقایسه مدول الاستیک گرافن و نانوتیوب کربن با چیدمان زیگزاگ 57
شکل 2-24 مقایسه مدول الاستیک گرافن سالم و ناقص با چیدمان زیگزاگ 58
شکل 2-25 مقایسه مدول الاستیک نانوتیوب سالم و ناقص با چیدمان زیگزاگ 58
شکل 2-26 مقایسه مدول الاستیک گرافن زیگزاگ با تمرکز نقص طولی مختلف 59
شکل 2-27 مقایسه مدول الاستیک نانوتیوب زیگزاگ با تمرکز نقص طولی مختلف 60
شکل 2-28 تأثیر تعداد نقص بر مدول الاستیک گرافن زیگزاگ 61
شکل 2-29-1 تأثیر ضخامت بر مدول الاستیک گرافن زیگزاگ 61
شکل 2-29-2 تأثیر ضخامت بر مدول الاستیک گرافن زیگزاگ (ضخامت 0/34 نانومتر)..... 62
30-2 مقایسه مدول الاستیک گرافن و نانوتیوب کربن با چیدمان آرمچیر 63
شکل 2-31 مقایسه مدول الاستیک گرافن سالم و ناقص با چیدمان آرمچیر 63
شکل 2-32 مقایسه مدول الاستیک نانوتیوب سالم و ناقص با چیدمان آرمچیر 64
شکل 2-33 مقایسه مدول الاستیک گرافن آرمچیر با تمرکز نقص طولی مختلف 65
شکل 2-34 مقایسه مدول الاستیک نانوتیوب آرمچیر با تمرکز نقص طولی مختلف 66
شکل 2-35 تأثیر تعداد نقص بر مدول الاستیک گرافن آرمچیر 66
شکل 2-36 تأثیر عکس ضخامت بر مدول الاستیک گرافن آرمچیر 67
شکل 3-1 مقایسه رابطه تنش-کرنش برای گرافن و نانوتیوب کربن با چیدمان زیگزاگ 82
شکل 3-2 استفاده از جملات با مراتب بالا در بسط تیلور برای نانوتیوبهای کربن با چیدمان زیگزاگ 82

شکل 3-3 مقایسه رابطه تنش-کرنش برای گرافن و نانوتیوب کربن سالم و ناقص با چیدمان زیگزاگ.....83
شکل 3-4 مقایسه رابطه تنش-کرنش برای گرافن و نانوتیوب کربن با چیدمان آرمچیر 84
شکل 3-5 استفاده از جملات با مراتب بالا در بسط تیلور برای نانوتیوبهای کربن با چیدمان آرمچیر 85
شکل 3-6 مقایسه رابطه تنش-کرنش برای گرافن و نانوتیوب کربن سالم و ناقص با چیدمان آرمچیر 86
شکل 4-1 رابطه تنش-کرنش برای نانوتیوب کربن سالم با چیدمان زیگزاگ.....94
شکل 4-2 نانوتیوب کربن سالم با چیدمان زیگزاگ تحت کشش.....94
شکل 4-3 رابطه تنش-کرنش برای نانوتیوب کربن ناقص با چیدمان زیگزاگ 95
شکل 4-4 رابطه تنش-کرنش برای نانوتیوب کربن سالم با چیدمان آرمچیر.....96
شکل 4-5 نانوتیوب کربن سالم با چیدمان آرمچیر تحت کشش 97
شکل 4-6 رابطه تنش- کرنش برای نانوتیوب کربن ناقص با چیدمان آرمچیر 97

فهرست جداول

عنوان **صفحه**

جدول 1-1 مقایسه خواص مکانیکی نانولوله کربن در مقایسه با دیگر مواد 4
جدول 1-2 تاریخچه ای از مهمترین تحقیقات انجام شده جهت تخمین رفتار مکانیکی نانوتیوبهای کربن 9
جدول 1-3 ارتباط میان کایرالیتی و قطر 14

فصل اول

کلیات

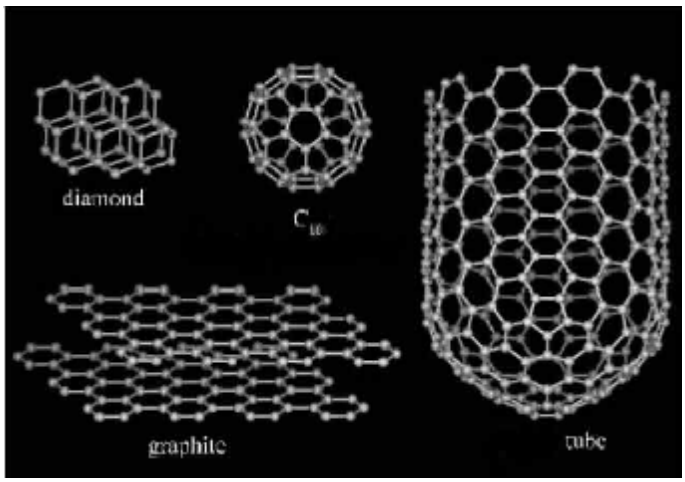
1-1 مقدمه

تا سال 1980 سه آلوتروپ کربن به نام های الماس، گرافیت و کربن بی‌شکل شناخته شده بودند، اما امروزه خانواده کاملی از سایر اشکال کربن وجود دارد .اولین آلوتروپ کربن که در سال 1985 کشف شد، باک مینستر فولرن[1] نام داشت که به نام‌های دیگر باکی بال[2] و فولرن نیز نامگذاری شده است. فولرن‌ها مولکول‌های کروی کربن هستند که به سبب شکل زیبا و خواص شگفت انگیز، توجه بسیاری از دانشمندان را به خود معطوف کرده‌اند.

در سال 1991 دانشمندی به نام Iijima به طور کاملاً اتفاقی، ساختار دیگری از کربن را کشف و تولید کرد که خواص منحصر به فردی دارد [1]. وی در ابتدا این ساختار را نوعی فولرن تصور نمود که در یک جهت کشیده شده است. اما بعدها متوجه شد که این ساختار، خواص متفاوتی از فولرن ها دارد و به همین دلیل آن را نانوتیوب کربنی [3] نامید. نانولوله بر اساس ساختمان گرافیت بنا می‌شوند. گرافیت از لایه‌های مجزایی متشکل از اتم‌های کربن تشکیل شده است که به‌صورت واحدهایی شش‌ضلعی که در شش رأس آن اتم کربن قرار دارد آرایش یافته‌اند. این لایه‌های کربنی بر روی یکدیگر انباشته می‌شوند و هر لایه از طریق پیوندهای ضعیف واندوالس به لایه زیرین متصل می‌شود. هنگامی که صفحات گرافیت در هم پیچیده می‌شوند، نانولوله‌های کربنی را تشکیل می-

[1] Buckminsterfullerene
[2] Bulky ball
[3] Carbon nanotube

دهند. در واقع نانولوله‌ی کربنی، گرافیتی است که به شکل لوله در آمده باشد. قطر نانولوله با توجه به چیدمان تغییر می‌کند و طول آن گاه تا چند میکرومتر نیز می‌رسد. انتهای هر دو سوی نانولوله‌ها می‌تواند با نیمه‌ای از یک فولرن مسدود باشد و لذا می‌تواند در انتهای خود علاوه بر اجزای شش‌ضلعی دارای اجزای پنج‌ضلعی نیز باشد. در شکل (1-1) انواع ساختارهای کربن نشان داده شده اند.



شکل 1-1 ساختارهای مختلف کربن

خواص ویژه و منحصربه فرد نانولوله‌ها از جمله مدول یانگ بالا در حدود ترا پاسکال[1] [8-2]، استحکام کششی عالی [13-9]، خواص حرارتی [15-14] و الکتریکی [16] خوب در مقابل وزن پایین باعث شده است که مورد توجه بسیاری از دانشمندان و محققان واقع شوند. یکی از خصوصیات برجسته نانو لوله‌های کربنی استحکام کششی بالای آنها است که در حدود 60-100 گیگا پاسکال[2] می‌باشد یعنی چندین برابر بیشتر از فولاد با بالاترین استحکام کششی در حالی که دارای وزنی حدود یک ششم وزن فولاد است. همچنین در مقایسه با دیگر فایبرها همانگونه که در جدول (1-1) آمده است نیز دارای خواص مکانیکی قابل ملاحظه‌ای می‌باشد.

[1] Tera Pascal
[2] Giga Pascal

نانولوله‌های کربنی دارای خواص الکتریکی مناسبی می‌باشند که بستگی به کایرالتی[1] (نحوه‌ی پیچش ساختارهای گرافیتی به دور نانولوله) دارد. آنها با توجه به چیدمان اتمی می‌توانند رسانا (نانولوله‌هایی با خاصیت فلزی) یا نیم رسانا باشند. نانولوله‌های کربنی سیم‌های مولکولی بزرگی هستند که الکترون می‌تواند آزادانه در آنها حرکت کند ولی رفتار آنها پیچیده است. در این راستا رفتار نانولوله‌های چند دیواره بسیار پیچیده تر از تک دیواره است زیرا لایه‌های کناری روی یکدیگر تأثیر می‌گذارند. در حال حاضر مدل سازی چنین اثراتی از موضاعات تحقیقاتی می‌باشد. محققان امیدوارند که ابعاد سیم‌ها یا قطعات را از طریق جایگزینی با نانولوله به حدود نانومتر یا کمتر برسانند. این قطعات در کنار مدارات الکترونیکی می‌توانند خیلی سریع تر و با توان کمتر از مدارات کنونی کار کنند.

جدول 1-1 مقایسه خواص مکانیکی نانولوله کربن در مقایسه با دیگر مواد

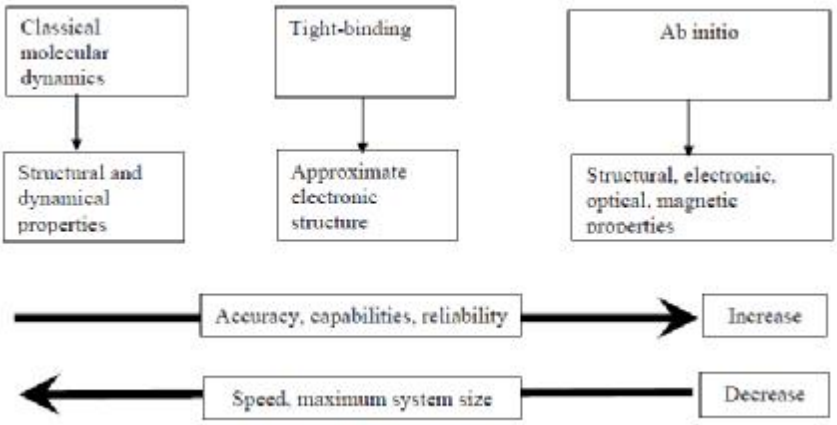
فایبرها	مدول الاستیک (GPa)	استحکام کششی(GPa)	دانسیته(g/cc)
S- Glass	81.3	3.44	2.62
E- Glass	88.9	4.58	2.5
C- Glass	-	3.31	2.56
کربن	230-320	3.3-6.8	1.7-1.9
کولار	83-190	2.8-4.1	1.45
SiC	400	3.9	3.0
بورون	400	3.6	2.5
اکسید سرامیک	69-380	1.38-3.4	2.5-4.0
نانوتیوب کربن	1000	60	1.3

بطور کلی روشهای تخمین خواص مکانیکی نانولوله‌های کربن را می‌توان در پنج دسته کلی طبقه بندی کرد. روشهای تئوری[2]، روشهای تجربی و آزمایشگاهی[3]، روشهای نیمه تجربی[4]، شبیه سازی‌های کامپیوتری[5] و روشهای ترکیبی[6].

[1] Chirality
[2] Theoretical methods
[3] Experimental methods
[4] Semi-empirical methods
[5] Computational simulations
[6] Multi-scale methods

از میان روشهای تئوری می‌توان به مکانیک کوانتوم[1]، مکانیک و دینامیک مولکولی[2] و مکانیک محیط پیوسته[3] اشاره نمود. در تخمین خواص مکانیکی نانو لوله‌های کربن، بسیاری از محققین از مدل‌های محیط پیوسته از جمله تئوری ورق پوسته[4] و تئوری کوشی-بورن[5] استفاده نموده اند. در این میان، استفاده از تئوری ورق و پوسته به دلیل سادگی روابط و تطابق خوبی که این تئوری با ساختار هندسی نانوتیوب‌ها دارد، مورد توجه خاص قرار گرفته است. اگر چه این روشهای تئوری محدودیت‌هایی را نیز در تخمین خواص مکانیکی به همراه دارند، اما بکار گیری روشهای آسان تر و پیش بینی مناسب خواص مکانیکی آنها را در مقایسه با روشهای تجربی و آزمایشگاهی و شبیه سازی‌های کامپیوتری در جایگاه مناسبی قرار می‌دهد. بطور کلی محاسبه خواص مکانیکی نانولوله-های کربن به صورت عملی و آزمایشگاهی در ابعاد نانو کاری بسیار دشوار و پر هزینه می‌باشد. پیدایش و پیشرفت شبیه سازی‌های کامپیوتری در سالهای اخیر یک ابزار بسیار قوی جهت تخمین و بررسی خواص مکانیکی نانولوله‌ها با دقت بسیار بالا را در اختیار محققان قرار داده است. شبیه سازی به روش مکانیک و دینامیک مولکولی یکی از این روشهاست. دقت بسیار بالا در مقایسه با شبیه سازیهای مکانیک پیوسته و سرعت محاسباتی بسیار بالاتر در مقایسه با شبیه سازیهای مکانیک کوانتوم و شبیه سازی TB[6] در کنار رها شدن از دشواری‌های روش تجربی و امکان بررسی اثرات مختلف محیطی و هندسی در مقایسه با روشهای تئوری، نشان از اهمیت فوق العاده شبیه سازیهای مکانیک و دینامیک مولکولی دارد. در شکل (1-2) یک الگوی شماتیک مقایسه ای میان روشهای مختلف شبیه سازی را نشان می‌دهد.

[1] Quantum mechanics
[2] Molecular dynamics
[3] Continuum mechanics
[4] Plate and Shell theory
[5] Couchy-born theory
[6] Tight-bonding



شکل 1-2 الگوی شماتیک مقایسه‌ای میان روشهای مختلف شبیه سازی

نواقص ساختاری را می‌توان به عنوان مهمترین دلیل کاهش و افت خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی نامید. نقص جای خالی[1]، نقص چرخش پیوندی[2] و نقص اضافه شدن اتم دیگر[3] از مهمترین نواقص مکانیکی در ساختار نانولوله کربنی می‌باشند. از میان این عیوب ساختاری، نقص جای خالی دارای بیشترین فراوانی در میان نواقص مکانیکی می‌باشد. این نقص بر اثر تابش[4]، مراحل خالص سازی[5] و یا تحت کرنشهای مکانیکی ایجاد می‌شود.

خواص فوق العاده ی نانو لوله‌های کربن باعث شده است که پژوهشهای متنوع و متعددی به منظور پیدا کردن خواص مکانیکی آنها صورت پذیرد. محققان مختلف در اقصی نقاط جهان همواره سعی نموده اند که با استفاده از تئوری‌های جدید و در عین حال روش‌های ساده تر به نتایج دقیق تری دست پیدا کنند. بر همین اساس خصوصیاتی چون مدول یانگ روابط تنش-کرنش ، ضریب پواسون، تنش ماکزیمم، کرنش ماکزیمم و کرنش شکست ودیگر خواص همواره مد نظر محققین بوده است. Treacy در سال 1996 مدول الاستیسیته در نانو تیوب کربن چند دیواره را 0/9 ± 1/8 TPa بدست آورد [2]. همزمان با تحقیقات بر روی نانوتیوبهای سالم Yakobson و گروهش در سال 1996 وجود

[1] Vacancy defect
[2] SW defect
[3] Doping
[4] Radiation
[5] Purification

نواقص ساختاری را در نانوتیوبها تحت تابش بررسی کردند [17]. در سال 1997 Wong مقدار مدول الاستیک را کمی کمتر از آنچه Treacy پیش بینی کرده بود، یعنی 0/59 ± 1/28 TPa گزارش کرد [3]. در همان سال Lu با انجام آزمایش ثوابت الاستیک و مدول یانگ گرافیت پرداخت. او برای مدول یانگ مقدار 1TPa و برای ضریب پواسون مقدار 0/16 را پیشنهاد کرد [6]. Krishnan نیز در سال 1998 مدول الاستیک نانوتیوب کربن تک دیواره در محدوده ی قطر 1/5-1 نانومتر را در حدود 1/25 TPa اندازه گرفت [5]. Hernández و گروهش در سال 1998 با استفاده از یک روش تئوری مدول یانگ را 1/22-1/26 TPa بدست آوردند [18, 7]. در سال 1998 Yakobson و گروهش با استفاده از شبیه سازیهای کامپیوتری به این نتیجه رسیدند که نواقص ساختاری باعث بوجود آمدن تغییر شکل و شکست غیر خطی در نانولوله‌های کربنی می‌شوند [19]. Poncharal در سال 1999 مقدار 1/26 GPa را برای مدول خمشی نانوتیوب کربن پیشنهاد کرد [4]. Yu در سال 2000 با استفاده از روش آزمایشگاهی به بررسی مقاومت کششی نانوتیوب کربن تک دیواره را 63-11 GPa و مدول یانگ آن را 0/95- 0/27 TPa به دست آورد [8]. در سال 2001 Yakobson و گروهش با استفاده از روش آزمایشگاهی موفق شدند تغییرات مدول نسبت به قطر را بدست آورند. آنها مدول الاستیک نانوتیوب تک دیواره را 0/9 TPa و مدول الاستیک نانوتیوب چند دیواره را 1 TPa تخمین زدند [12]. Natsuki در سال 2004 با پیشنهاد یک روش تئوری مقادیری بین 0/5-0/7 TPa را برای مدول الاستیک نانوتیوبهای کربن بدست آورد [20]. در همین سال، Sammalkorpi با ارائه یک روش تلفیقی اولین گام اساسی برای بدست آوردن مدول الاستیک نانوتیوبهای کربن را برداشت. او 0/7 TPa را به عنوان مدول الاستیک پیشنهاد نمود. نتیجه تحقیقات وی بیان می‌کند که تاثیر تعداد کمی جای خالی بر مدول یانگ نانولوله کربن قابل صرفنظر می-باشد، حال اینکه با افزایش تعداد جاهای خالی مدول با شدت کمتر و تنش نهایی با شدت بیشتری کاهش پیدا می‌کنند[21].

در سال 2005 Tserpes با بررسی اثر ضخامت بر مدول الاستیک نانولوله‌های کربنی بیان کرد که مقادیر مختلف بدست آمده بین 0/5 تا 5 گیگاپاسکال نوسان دارند [22]. در سال 2006 Meo و گروه تحقیقاتی اش به بررسی مدول یانگ با استفاده از یک روش تلفیقی بر پایه المان محدود و دینامیک مولکولی پرداخت. بر اساس تحقیقات آنها مدول الاستیک نانولوله کربنی در حدود 0/9 TPa می‌باشد [23]. در همان سال Kalamkarov روشی تئوری برای محاسبه خواص مکانیکی نانوتیوبهای کربن بیان نمود. او مقدار میانگین 1 TPa را به عنوان مدول پیشنهاد کرد [24]. در سال 2007 Pugno با استفاده از مکانیک شکست به بررسی مدول یانگ پرداخت [25]. در سال 2008 Huq به بررسی تأثیر متقابل نواقص ساختاری بر یکدیگر و بر خواص مکانیکی نانوتیوب پرداخت [26]. در سال 2009 Xiao به همراه گروه خود به بررسی شکست نانولوله‌های کربن و صفحات گرافیتی و همچنین بررسی خواص مکانیکی آنها از جمله مدول یانگ، نسبت پواسون و رابطه کرنش و نیرو پرداختند. آنها نشان دادند که مدول الاستیک نسبت به قطر تغییر می‌کند که این تغییر برای نانولوله‌های با قطر کوچکتر بیشتر است [27]. در سال 2010 نیز Xiao و گروهش با استفاده از مدل ارائه شده در سال گذشته به بررسی دقیق عوامل موثر بر مدول یانگ نانوتیوبهای کربنی و صفحات گرافیت پرداختند. بررسی‌های انجام شده نشان می‌دهند که طول، قطر، تعداد نواقص و حتی زاویه آنها نسبت به یکدیگر بر مقدار مدول الاستیک تأثیر می‌گذارد [28]. در همان سال Wong با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی نشان داد که چگونه نواقص ساختاری مختلف باعث کاهش میزان مدول الاستیک و استحکام نهایی نانوتیوب کربن می‌شوند. او همچنین نشان داد که این کاهشها در نانوتیوبهای کوچکتر بیشتر است [29].

در جدول (1-2) تاریخچه ای از مهمترین تحقیقات انجام شده برای بدست آوردن مدول الاستیک و نسبت پواسون نانوتیوبهای کربن همراه با روشهای بدست آودرن آنها نشان داده شده است. همانطور که نشان داده شده است، در این تحقیقات از روشهای مختلف استفاده شده است. با در نظر گرفتن

0/34نانومتر به عنوان ضخامت صفحه گرافیتی و همچنین نانوتیوب کربن، مشاهده می‌شود که به صورت میانگین می‌توان بیان نمود که مدول یانگ نانوتیوب کربن در حدود TPa 0/8 می‌باشد.

جدول 1-2 تاریخچه ای از مهمترین تحقیقات انجام شده جهت تخمین رفتار مکانیکی نانوتیوبهای کربن

نویسنده	سال	روش	مدول الاستیک (TPa)
Hernandez	1998	TB	1.22-1.26
Halicioglu	1998	MD	0.5
Dong Qian	2001	روش تئوری/گرافن	0.989
Xia	2002	MD-Ab initio	0.85
Zhou	2000	LDA	0.764
Lu	1997	EFC	0.971-0.975
Molina	1995	TB	1.4
Krishnan	1998	روش تجربی	1.25
Yakobson	2001	CM	5.5
Demczyk	2002	روش تجربی	0.91
Yu	2002	روش تجربی	0.32-1.47
Tu	2002	LDA	4.7
Lier	2000	Ab initio	0.72-1.12
Treacy	1996	روش تجربی	1.81
Salveta	1999	روش تجربی	1.0
Yao	1998	MD	1.0
Comwell	1997	MD	0.-2.0

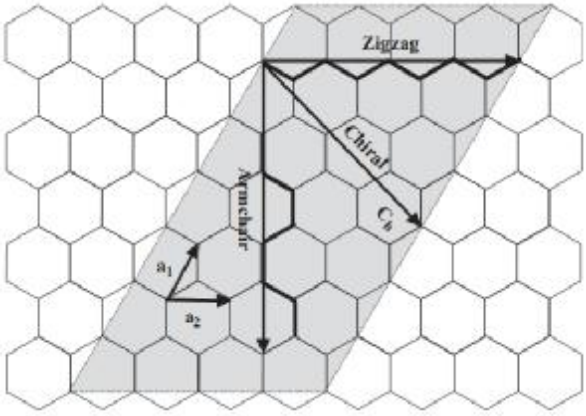
2-1 ساختار نانولوله‌های کربنی

همانطور که می‌دانید، اتم‌های کربن در ساخت ترکیبات مهمی شرکت دارند و پایه و اساس فناوری‌های مختلفی هستند. این اتم‌ها علاوه بر ترکیب شدن با عناصر دیگر، می‌توانند با اتم‌های کربن نیز پیوند دهند. اتم‌های کربن دارای چهار الکترون آزاد می‌باشند که امکان تشکیل چهار پیوند را برای این اتم‌ها مهیا می‌سازد. پیوندهایی که این اتم‌ها تشکیل می‌دهند، در ترکیبات گوناگون به شکل‌های متفاوتی دیده می‌شود و بنابراین خواص متفاوتی نیز ایجاد می‌کند. این اتم‌ها در ساختار الماس چهار پیوند یگانه‌ی کوالانس ایجاد می‌کنند .یعنی هر اتم کربن با چهار اتم کربن دیگر پیوند می‌دهد. بنابراین از تمام چهار ظرفیت خود برای تشکیل پیوند استفاده کرده است. در ساختار

گرافیت، نانولوله و فولرن نیز پیوندهای یگانه‌ای بین اتم‌های کربن وجود دارد. با این تفاوت که هر اتم تنها با سه اتم دیگر پیوند می‌دهد و در نتیجه سه پیوند یگانه کوالانسی دارد. در این ساختارها اتم کربن یکی از ظرفیت‌های خود را مصرف نمی‌کند. این ظرفیت خالی که در واقع یک الکترون اضافی است، به شکل یک پیوند آزاد در خارج از صفحه‌ای که دیگر اتم‌ها در آن قرار دارند قرار می‌گیرد. این پیوند آزاد یا معلق می‌تواند در شرایطی با گروه‌های عاملی یا دیگر اتم‌های رادیکالی موجود در محیط پیوند دهد.

در ابعاد نانومتر، چند پارامتر مهم وجود دارد که تاثیر بسیاری بر خواص مواد می‌گذارد. اندازه و شکل فیزیکی نانومواد و چگونگی پیوندهای بین اتمی آنها از قبیل این پارامترها هستند. در مورد نانولوله‌های کربنی پارامترهایی مانند طول، قطر، نحوه‌ی چینش اتم‌ها در ساختار نانولوله، تعداد دیواره‌ها، نقص‌های ساختاری و گروه‌های عاملی موجود بر روی نانولوله از جمله خواص فیزیکی و شیمیایی هستند که در تعیین خواص نقش دارند. در اینجا به نحوه‌ی چینش اتم‌ها در نانولوله‌های کربنی می‌پردازیم. برای این منظور نانولوله‌های کربنی را بر اساس ظاهر فیزیکی دسته‌بندی می‌کنیم. این قبیل دسته‌بندی‌ها، موجب سهولت بررسی این مواد می‌گردد .

یک نانولوله، همانطور که از نامش برمی‌آید، یک استوانه‌ی تو خالی با قطری در حد نانومتر است. طول هر نانولوله می‌تواند از چند نانومتر تا چند میکرومتر باشد. اگر یک نانولوله‌ی تک دیواره را در نظر بگیریم، با برش دادن دیواره‌ی آن در راستای طول نانولوله، یک صفحه از اتم‌های کربن به نام گرافن به دست می‌آید. صفحات گرافن با کنار هم قرار گرفتن اتم‌های کربن تشکیل می‌شوند. در یک صفحه گرافن، هر اتم کربن با سه اتم کربن دیگر پیوند داده است. این سه پیوند در یک صفحه قرار دارند و زوایای بین آن‌ها با یکدیگر مساوی و برابر با 120° است. در این حالت، اتم‌های کربن در وضعیتی قرار می‌گیرند که شبکه‌ای از شش ضلعی‌های منتظم را ایجاد می‌کنند (شکل1-3). البته این ایده‌آل‌ترین حالت یک صفحه‌ی گرافن است. در برخی مواقع، شکل این صفحه به گونه‌ای تغییر می‌کند که در آن پنج‌ضلعی‌ها و هفت‌ضلعی‌هایی نیز ایجاد می‌شود.



شکل 1-3 ساختار اتمی صفحه گرافن

در یک صفحه گرافن، هر اتم کربن یک پیوند آزاد در خارج از صفحه دارد. این پیوند مکان مناسبی برای قرارگیری برخی گروه‌های عاملی و هم چنین اتم‌های هیدروژن است. پیوند بین اتم‌های کربن در اینجا کوالانسی بوده و بسیار محکم است. بنابراین گرافن استحکام بسیار زیادی دارد و انتظار می‌رود که نانولوله‌های کربنی نیز استحکام زیادی داشته باشند. گرافیت نیز که یک ماده‌ی کربنی پر مصرف و شناخته شده است، از روی هم قرار گرفتن لایه‌های گرافن و تشکیل یک ساختار منظم تشکیل می‌شود. اما همانطور که می‌دانیم، گرافیت بسیار نرم است. آنچه لایه‌های گرافن را روی یکدیگر نگه می‌دارد، پیوندهای واندروالس بین آن‌هاست و این پیوند بسیار ضعیف است. بنابراین لایه‌های گرافن به راحتی می‌توانند روی هم بلغزند.

از نظر ساختاری نانو تیوب‌های کربن در حالت کلی به دو دسته تقسیم می‌شوند که عبارتند از نانو لوله‌های کربن تک دیواره[1] و نانو لوله‌های کربن چند دیواره[2]. نانولوله‌های کربنی تک دیواره از لوله کردن صفحات گرافنی به دست می‌آیند. البته این گفته تنها برای درک ساختار نانولوله‌هاست و در عمل، ساخت نانولوله‌ها با روش‌های پیچیده شیمیایی انجام می‌شود. در این روش‌ها، نانولوله با قرار گرفتن تک به تک اتم‌های کربن در کنار هم ساخته می‌شود و نه از طریق لوله کردن یک صفحه‌ی

[1] Single-walled carbon nanotubes
[2] Multi-walled carbon nanotubes