



دانشگاه صنعتی شاهرود  
دانشکده‌ی مکانیک  
گروه طراحی جامدات

:

:

دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده مکانیک

گروه طراحی جامدات

پایان نامه کارشناسی ارشد آقای امیر مسعود مجد ثابتی

تحت عنوان:

معرفی یک مدل جدید به منظور پیش بینی رفتار تغییر شکل نانولوله‌های کربنی تحت بارگذاری‌های مختلف

در تاریخ ..... توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد ارزیابی و با درجه ..... مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	اساتید مشاور	امضاء	اساتید راهنما
	نام و نام خانوادگی :		دکتر محمود شریعتی
	نام و نام خانوادگی :		دکتر حمیدرضا ایپکچی

امضاء	نماینده تحصیلات تکمیلی	امضاء	اساتید داور
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :

تقدیم به

# پدر و مادر عزیز و بزرگوارم

که همواره همدم و یار من بوده‌اند

با قدردانی و سپاس از

**همسر مهربانم، مریم،**

که بی‌شک موفقیت‌هایم را در طول این سال‌ها

مدیون او هستم

## چکیده:

در پایان نامه پیش‌رو کمانش نانولوله‌های کربنی تک دیواره تحت بارهای محوری فشاری و ممان پیچشی با استفاده از نرم‌افزار المان محدود ABAQUS مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین تأثیر انواع عیوب تهی‌جای بر بار بحرانی کمانش و جابه‌جایی متناظر آن و ممان پیچشی کمانش و زاویه پیچش متناظر آن مورد مطالعه قرار گرفته است. ضرورت فراهم آوردن شرایط خاص آزمایشگاهی و نیز زمان بر بودن شبیه‌سازی‌های اتمی عامل و محرک اصلی جهت ارائه‌ی این مدل ساختاری جدید می‌باشد؛ که علاوه بر داشتن دقت مناسب، محدودیت‌های روش‌های پیشین را ندارد. در حقیقت مدل ارائه شده ترکیبی از مدل‌های ساختاری دیگر می‌باشد که تا حد زیادی عیوب آنها را از بین برده است. به منظور مدل کردن برهم‌کنش‌های کششی و پیچشی، اتصال دهنده‌های غیر خطی و جهت مدل کردن برهم‌کنش‌های زاویه‌ای، فنر غیر خطی مورد استفاده قرار گرفته است. در ادامه نتایج حاصله با نتایج حاصل از مدل پیوسته مقایسه شده است و می‌توان نشان داد که رفتارهای کمانشی نانولوله‌های کربنی شباهت زیادی با رفتارهای کمانشی پوسته‌های استوانه‌ای (با ضخامت  $0.66 \text{ nm}$  و مدول یانگ  $5/5 \text{ Tpa}$ ) دارد. در پایان نیز نتایج بدست آمده با برخی از نتایج حاصل از مدل‌های دیگر مقایسه شده است. از مقایسه‌های انجام گرفته می‌توان نتیجه گرفت مدل ساختاری ارائه شده دارای دقت بالایی می‌باشد و علاوه بر آن دارای قابلیت‌هایی می‌باشد که مدل‌های ساختاری گذشته فاقد آن می‌باشد.

**کلمات کلیدی:** کمانش، نانولوله‌های کربنی تک دیواره، بار محوری فشاری، ممان پیچشی، عیوب تهی‌جای

ارائه‌ی مقاله در ژورنال بین‌المللی European Journal of Mechanics A/Solid با آدرس:

V. Parvaneh, M. Shariati, A.M. Majd Sabeti. (2009). "Investigation of vacancy defects effects on the buckling behavior of SWCNTs Via a structural mechanics approach", *Euro. J. Mech. A/Solids*. 28, pp 1072-1078.

## فهرست مطالب

عنوان	صفحه
فصل اول: مقدمه .....	۱
۱-۱- مقدمه .....	۲
فصل دوم: مروری بر روابط موجود و مطالعات پیشین .....	۷
۱-۲- انواع انرژی‌ها و برهم‌کنش‌های موجود بین اتم‌های کربن .....	۸
۱-۱-۲- برهم‌کنش‌های موجود بین اتم‌های کربن (غیر پیوندی) .....	۸
۲-۱-۲- پتانسیل‌های موجود در پیوند اتمی .....	۹
۲-۲- قطر نانولوله‌های کربنی .....	۱۳
۲-۳- کمانش نانولوله‌های کربنی تحت بار محوری فشاری .....	۱۴
۲-۴- کمانش نانولوله‌های کربنی تحت ممان پیچشی .....	۲۷
فصل سوم: شبیه‌سازی نانولوله‌های کربنی و مدل پیوسته .....	۳۳
۱-۳- نرم‌افزار ABAQUS .....	۳۴
۱-۱-۳- تحلیل Buckle .....	۳۴
۲-۳- شبیه‌سازی نانولوله‌های کربنی کامل .....	۳۵
۱-۲-۳- مرحله ایجاد اتم‌های کربن به صورت کره‌های تو خالی .....	۳۵
۲-۲-۳- مرحله‌ی تعیین خواص مکانیکی .....	۳۶
۳-۲-۳- مونتاژ اتم‌های کربن .....	۳۶
۴-۲-۳- اعمال برهم‌کنش‌های بین اتمی .....	۳۷
۵-۲-۳- بار گذاری و شرایط مرزی .....	۳۹
۶-۲-۳- المان بندی اتم‌های مونتاژ شده .....	۴۰
۷-۲-۳- بخش حل مسئله .....	۴۱



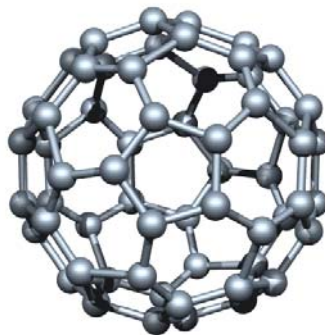
۳-۳	شبیه‌سازی نانولوله‌های کربنی معیوب	۴۱
۳-۴	شبیه‌سازی پوسته‌های استوانه‌ای سالم (مدل پیوسته)	۴۱
۳-۵	شبیه‌سازی پوسته‌های استوانه‌ای معیوب (مدل پیوسته)	۴۲
۴۳	فصل چهارم: نتایج حاصل از مدل مکانیک ساختاری و مدل پیوسته	
۴-۱	نتایج حاصل از کمانش نانولوله‌های کربنی تحت فشار محوری	۴۴
۴-۱-۱	کمانش نانولوله‌های کربنی سالم	۴۴
۴-۱-۲	کمانش نانولوله‌های کربنی معیوب	۴۹
۴-۲	نتایج حاصل از کمانش نانولوله‌های کربنی تحت ممان پیچشی	۵۷
۴-۲-۱	کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی سالم	۵۷
۴-۲-۲	کمانش پیچشی نانولوله‌های کربنی معیوب	۶۵
۴-۳	نتایج حاصل از کمانش پوسته‌های استوانه‌ای (مدل پیوسته) تحت فشار محوری	۶۹
۴-۳-۱	کمانش پوسته‌های استوانه‌ای سالم	۶۹
۴-۳-۲	کمانش پوسته‌های استوانه‌ای معیوب	۷۲
۴-۴	نتایج حاصل از کمانش پوسته‌های استوانه‌ای (مدل پیوسته) تحت ممان پیچشی	۷۵
۴-۴-۱	کمانش پیچشی پوسته‌های استوانه‌ای کامل	۷۵
۴-۴-۲	کمانش پیچشی پوسته‌های استوانه‌ای دارای گشودگی	۷۸
۸۰	فصل پنجم: مقایسه‌ی نتایج	
۵-۱	مقایسه‌ی نتایج حاصل از کمانش نانولوله‌های کربنی تحت فشار محوری	۸۱
۵-۲	مقایسه‌ی نتایج حاصل از کمانش نانولوله‌های کربنی تحت ممان پیچشی	۸۷
۹۶	فصل ششم: نتیجه‌گیری و پیشنهادات	
۶-۱	نتیجه‌گیری	۹۵
۶-۲	پیشنهادات	۹۸
	مراجع	

# فصل اول

## مقدمه

## ۱-۱- مقدمه

حرکت شتابان و رو به رشد استفاده از نانو تکنولوژی در جهان امروز، شاخه‌های علمی بسیار زیادی را پیش روی دانشمندان و محققین قرار داده است و می‌توان گفت نانولوله‌های کربنی از جمله مهمترین و اساسی‌ترین شاخه‌های نانو تکنولوژی می‌باشد که تحولی بزرگ را در این علم به وجود آورده است. کشف ساختار اتمی  $C_{60}$  (شکل (۱)) را می‌توان سر آغاز این تحول جدید در علم نانو دانست. در سال ۱۹۹۰ مقاله‌ای توسط دونالد هافمن<sup>۱</sup> از دانشگاه آریزونا و ولف گانگ کراشمر<sup>۲</sup> از مؤسسه ماکس پلانگ مبنی بر کشف ساختار جدیدی از کربن که دارای ۶۰ اتم کربن است، در نشریه نیچر<sup>۳</sup> به چاپ رسید. ساختاری که تا قبل از آن تنها به صورت تئوری پیش بینی شده بود.



شکل (۱-۱) نمائی از ساختار اتمی  $C_{60}$

این امر سبب باز شدن دریچه‌ای جدید به علوم نانو گردید و محققان بیشتری را به بررسی این اتم منحصر به فرد تشویق کرد [۱]؛ به طوری که در سال ۱۹۹۱ ساختار شگفت انگیز دیگری از اتم‌های کربن به نام نانولوله‌ی کربنی توسط ایجیما<sup>۴</sup> [۲] کشف شد و توجه بسیاری از محققین و دانشمندان را به سمت خود معطوف نمود. خواص منحصر به فرد مکانیکی و الکتریکی این ساختار برای این محققین بسیار جالب و قابل توجه بود. مدول یانگ بیش از ۱ Tpa برای این ماده همراه با چگالی کم آن، این ماده جدید را از نظر خواص مکانیکی از بسیاری مواد دیگر متمایز می‌کرد. پس از کشف این ماده و

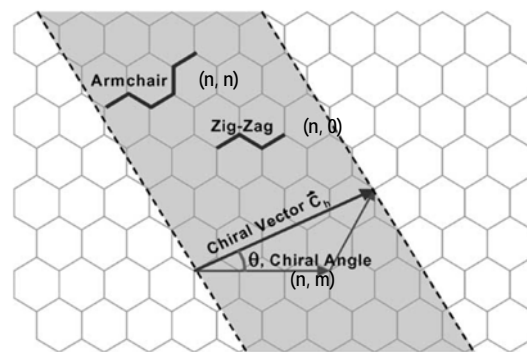
<sup>۱</sup> - Donald Huffman

<sup>۲</sup> - Wolfgang Kratschmer

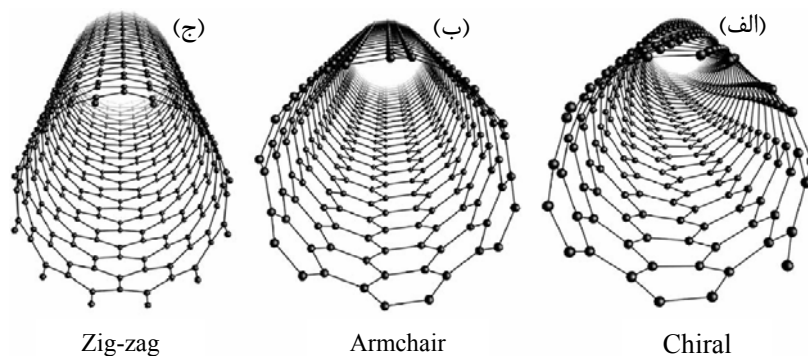
<sup>۳</sup> - Nature

<sup>۴</sup> - Iijima

بررسی های انجام شده وجود سه ساختار متفاوت از این ماده برای محققین به اثبات رسید که شامل ساختارهای زیگ-زاگ<sup>۱</sup>، آرمچیر<sup>۲</sup> و کایرال<sup>۳</sup> (ساختار نامنظم) می شود که در شکل های (۲) و (۳) نشان داده شده اند. با توجه به شکل (۲) مشاهده می شود که نحوه چرخش صفحه ی گرافیت در جهات مختلف می تواند سبب ایجاد کایرالیته های متفاوتی از نانولوله گردد. علاوه بر این انواع، محققین دریافتند که نانولوله های کربنی دارای ساختارهای تک دیواره و چند دیواره نیز می باشند. (شکل (۴))

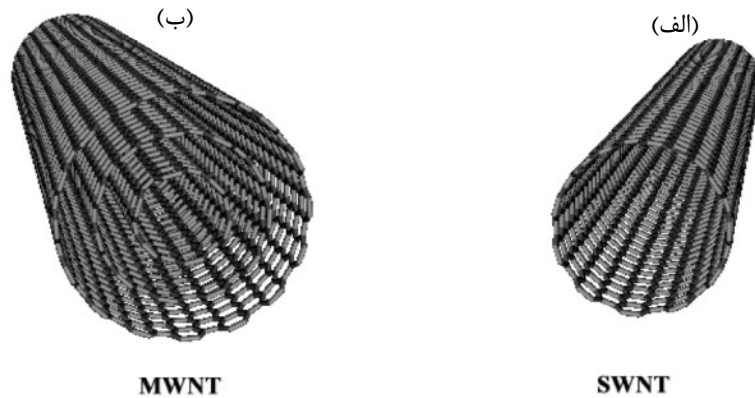


شکل (۲-۱) نحوه ی شکل گیری نانولوله از نظر نوع کایرالیته



شکل (۳-۱) انواع اصلی نانولوله های کربنی از نظر نوع کایرالیته، (الف): کایرال، (ب): آرمچیر، (ج): زیگ-زاگ

1 - Zig-zag  
2 - Armchair  
3 - Chiral



شکل (۴-۱) انواع نانولوله‌ها از نظر تعداد دیواره. (الف): تک دیواره، (ب): چند دیواره

دلایل اصلی توجه محققین به این ساختار جدید را می‌توان در خواص منحصر به فرد مکانیکی و الکتریکی آن مشاهده نمود، که در شرایط مختلف رفتارهای متفاوتی از خود نشان می‌دهد. این ساختار با توجه به کاربردهایی که در آینده از آن پیش بینی می‌شود، می‌تواند کاربردهای گسترده‌ای در صنایع و تجهیزات پزشکی، مکانیکی، نظامی و ... پیدا کند. از جمله‌ی این کاربردها می‌توان به استفاده‌ی گسترده از نانولوله‌های کربنی در سیستم‌های نانو الکترو-مکانیکی (NEMS) اشاره نمود. همانطور که گفته شد، این ساختار دارای خواص منحصر به فرد مکانیکی و الکتریکی می‌باشد؛ لذا بررسی این خواص با استفاده از روش‌های مختلف آزمایشگاهی و شبیه‌سازی‌های کامپیوتری از جمله مسائل مورد توجه برای محققین در سال‌های اخیر بوده است.

پس از کشف نانولوله‌های کربنی محققین به انجام آزمایش بر روی این ساختار روی آوردند؛ اما صرف هزینه‌های مالی بسیار زیاد برای انجام این آزمایش‌ها محققین را بر آن داشت تا با استفاده از روش‌های مختلف کامپیوتری به شبیه‌سازی رفتارهای این ماده بپردازند. از مهمترین این روش‌ها می‌توان به روش‌های *ab-initio*، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) و روش *Tight binding* (ترکیبی از دو روش قبل) اشاره کرد. که البته درمیان آنها روش *ab-initio* دقیق‌ترین روش می‌باشد. با توجه به اینکه این روش‌ها نیز مستلزم صرف هزینه و وقت زیادی می‌باشند، محققین بسیاری سعی

در ارائه‌ی روش‌های دیگری جهت شبیه‌سازی نانولوله‌های کربنی کردند. در سال ۲۰۰۱ ادگار<sup>۱</sup> [۳] مدلی را ارائه کرد که در آن به وسیله‌ی شبیه‌سازی نیروها و انرژی‌های بین اتمی و با استفاده از اتصالات خریایی مدول یانگ نانولوله‌های کربنی را مورد بررسی قرار داد. در سال ۲۰۰۳ لی و چو<sup>۲</sup> [۴] با استفاده از روش المان محدود به بررسی نانولوله‌های کربنی تک دیواره پرداختند. آنها با در نظر گرفتن ساختار اتمی نانولوله به عنوان یک قاب، اتم‌های کربن را به عنوان نقاط اتصال تیرهای فرضی در نظر گرفتند و مدل خود را بر این اساس گسترش دادند. آنها با استفاده از ایجاد ارتباط بین مکانیک ساختاری و مکانیک مولکولی توانستند خواص مکانیکی تیر فرضی و از آنجا مدول یانگ نانولوله‌ها را بدست آورند. تی‌سرپز و پاپانیکوس<sup>۳</sup> [۵]، هو و همکارانش<sup>۴</sup> [۶] و کالامکارف<sup>۵</sup> [۷] نیز با استفاده از روش مکانیک ساختاری به شبیه‌سازی نانولوله‌های کربنی پرداختند. در روش‌های آنها سه المان شبه تیر بدون داشتن حرکت نسبی در یک نقطه (مرکز اتم) به یکدیگر پیوند داده شده‌اند. آنها با معادل کردن انرژی‌های مکانیک مولکولی با انرژی‌های کششی، خمشی و پیچشی تیر توانستند خواص مکانیکی و هندسی تیر مورد نظر را بدست آورند. در سال ۲۰۰۴ ناسدالا و همکارانش<sup>۶</sup> [۸] به ارائه‌ی مدل جدید دیگری پرداختند که در آن بر هم کنش‌های کششی، خمشی و پیچشی بین اتم‌ها با استفاده از فنرهای محوری، پیچشی و المان تیر مدل شده‌اند.

در تمامی مدل‌هایی که تاکنون ارائه شده است کاستی‌ها و معایبی وجود دارد. این امر سبب شده تا محققین همچنان به دنبال روشی جامع و مطمئن باشند تا به وسیله‌ی آن بتوان نانولوله‌های کربنی را تحت بارگذاری‌ها و شرایط مرزی مختلف مورد بررسی قرار داد. البته باید اشاره کرد که روش دینامیک مولکولی از روش‌هایی می‌باشد که دارای قابلیت‌های بسیاری است؛ اما استفاده از آن نیاز به وقت و هزینه‌ی زیادی دارد و بکارگیری آن برای همه مقذور نمی‌باشد.

---

<sup>1</sup> - Odegard

<sup>2</sup> - Li and Chou

<sup>3</sup> - Tserpes and Papanikos

<sup>4</sup> - Hu et al.

<sup>5</sup> - Kalamkarov

<sup>6</sup> - Nasdala et al.

با توجه به توضیحات اشاره شده، در این پروژه به دنبال ساخت مدلی بوده‌ایم که علاوه بر داشتن قابلیت‌های گوناگون، عیوب مدل‌های گذشته را نیز برطرف نماید. در نهایت با مطالعات بسیار و بررسی مدل‌های گوناگون موفق به ارائه‌ی مدلی شدیم که با استفاده از روش مکانیک ساختاری ایجاد گردید و می‌توان به وسیله‌ی آن کماتش نانولوله‌های کربنی تحت بار محوری فشاری و ممان پیچشی را مورد بررسی قرار داد.

بر این اساس در فصل‌های پیش رو ابتدا مروری بر تحقیقات صورت گرفته در سال‌های گذشته و تئوری‌های موجود در زمینه‌ی کماتش نانولوله‌های کربنی مرور شده است. در فصل دوم تئوری‌های مورد استفاده در ایجاد مدل ارائه شده و چگونگی شبیه‌سازی آن در نرم‌افزار ABAQUS [۹] به صورت مختصر بیان شده است. در فصل سوم کماتش نانولوله‌های کربنی و مدل پیوسته‌ی مورد نظر، تحت بار محوری فشاری و ممان پیچشی مورد بررسی قرار گرفته‌اند. در فصل چهارم نیز مقایسه‌ای میان نتایج حاصل از مدل ساختاری ارائه شده و مدل پیوسته صورت گرفته است که در پایان نتایج حاصل از این دو مدل با نتایج حاصل از روش‌های دیگر نیز مقایسه شده است و نتیجه‌گیری‌های نهائی بدست آمده‌اند.

## فصل دوم

مروری بر روابط موجود و

مطالعات پیشین



در اینجا ابتدا به صورت مختصر به بیان برخی روابط و تئوری‌های موجود در زمینه‌ی نانولوله‌های کربنی می‌پردازیم. باید گفت در حال حاضر بسیاری از محققین از روابط موجود در صفحات گرافیت به منظور بررسی نانولوله‌های کربنی استفاده می‌کنند و همان پتانسیل‌ها و برهم‌کنش‌هایی که در صفحات گرافیت وجود دارد، برای نانولوله‌های کربنی نیز در نظر می‌گیرند که در ادامه به آنها اشاره می‌کنیم.

## ۲-۱- انواع انرژی‌ها و برهم‌کنش‌های موجود بین اتم‌های کربن

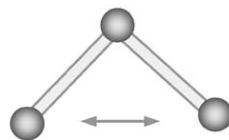
به طور کلی می‌توان انرژی‌های موجود بین اتم‌های کربن را به دو دسته تقسیم نمود.

### ۲-۱-۱- برهم‌کنش‌های موجود بین اتم‌های کربن (غیر پیوندی)

این برهم‌کنش‌ها شامل دو نوع برهم‌کنش واندروالس<sup>۱</sup> و الکترواستاتیک (کولومب)<sup>۲</sup> می‌گردند. در ادامه به توضیح این برهم‌کنش‌ها می‌پردازیم.

#### الف: برهم‌کنش واندروالس؛

این نوع از برهم‌کنش به دلیل نزدیک شدن و یا دور شدن دو اتم کربن در فاصله‌ی فضائی ایجاد می‌شود (شکل (۲-۱)).



*Van der waals*

شکل (۲-۱) برهم‌کنش واندروالس در اتم‌های کربن

به منظور تعریف برهم‌کنش واندروالس روابط مختلفی ارائه شده است که معروفترین آنها پتانسیل لنارد-جونز<sup>۳</sup> می‌باشد و به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۰]:

<sup>۱</sup> - Van der waals

<sup>۲</sup> - Electrostatic(Coulomb)

<sup>۳</sup> - Lennard-Jones

$$U(R) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{R} \right)^6 \right] \quad (1-2)$$

که در آن  $R$  فاصله‌ی بین اتمی و  $\varepsilon$  و  $\sigma$  ثابت‌های لنارد-جونز می‌باشند. این ثابت‌ها برای اتم کربن به شکل زیر تعریف می‌شوند [۱۱]:

$$\varepsilon = 3.8655 \times 10^{-4} \text{ nN}\cdot\text{nm} \quad \sigma = 0.34 \text{ nm}$$

نیروی لنارد-جونز نیز با استفاده از رابطه‌ی زیر تعیین می‌گردد [۱۱]:

$$F(R) = -\frac{dU(R)}{dR} = 24 \frac{\varepsilon}{\sigma} \left[ 2 \left( \frac{\sigma}{R} \right)^{13} - \left( \frac{\sigma}{R} \right)^7 \right] \quad (2-2)$$

لازم به ذکر است که از این برهم‌کنش عموماً جهت مدل کردن نیروهای موجود بین اتم‌های کربن، واقع در دو دیواره‌ی جداگانه استفاده می‌شود و برای اتم‌های واقع در یک دیواره و اتم‌های مجاور یکدیگر از این پتانسیل در مقابل پتانسیل‌های دیگر صرف‌نظر می‌کنیم.

### ب: برهم‌کنش الکترواستاتیکی؛

همانطور که از اسم این برهم‌کنش پیداست، این نوع از برهم‌کنش بر اثر به وجود آمدن نیروهای الکترواستاتیکی بین الکترون‌های دو اتم مجاور یکدیگر ایجاد می‌شود و می‌توان آن را به صورت زیر تعریف کرد:

$$E_{es} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{1}{2} \sum_{i,j} \sum_{a \in i, b \in j} \frac{q_{i,a} q_{j,b}}{|r_{i,a} - r_{j,b}|} \quad (3-2)$$

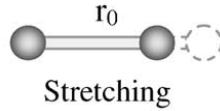
باید گفت که تأثیر این برهم‌کنش در مقایسه با دیگر پتانسیل‌ها بسیار ناچیز می‌باشد و لذا در هیچ یک از تحلیل‌ها در نظر گرفته نمی‌شود.

### ۲-۱-۲- پتانسیل‌های موجود در پیوند اتمی

این پتانسیل‌ها شامل چهار نوع متفاوت می‌شود که در زیر به آنها اشاره شده است.

## الف: پتانسیل کشش بین پیوندی<sup>۱</sup>؛

این پتانسیل بر اثر تغییر فاصله‌ی بین اتم‌های کربن در یک پیوند اتمی ایجاد می‌شود (شکل ۲-۲).  
 ((۲)



شکل (۲-۲) پتانسیل کشش بین پیوندی در اتم‌های کربن

برای این پتانسیل روابط مختلفی ارائه شده است که از معروفترین آنها می‌توان به روابط مورس<sup>۲</sup> و برنر<sup>۳</sup> اشاره کرد. از میان این دو، رابطه‌ی برنر دقیق‌تر می‌باشد؛ اما رابطه‌ی مورس ساده‌تر است و لذا اکثر محققین از این رابطه در محاسبات خود استفاده کرده‌اند. می‌توان شکل غیر خطی رابطه‌ی مورس را به صورت زیر تعریف نمود [۱۲]:

$$U_r = D_e \{ [ 1 - e^{-\beta(r-r_0)} ]^2 - 1 \} \quad (۴-۲)$$

که در آن  $r$  فاصله‌ی بین دو اتم می‌باشد و مقادیر  $r_0$  (فاصله‌ی بین دو اتم کربن در حالت تعادل)،  $D_e$  و  $\beta$  نیز در جدول (۱-۲) [۱۳] آورده شده‌اند. نیروی کشش بین پیوندی نیز به شکل زیر بدست می‌آید:

$$F(r-r_0) = 2\beta D_e [ 1 - e^{-\beta(r-r_0)} ] e^{-\beta(r-r_0)} \quad (۵-۲)$$

جدول (۱-۲) ثابت‌های مربوط به پتانسیل‌های مکانیک مولکولی [۱۳]

interaction	Parameters
$u_r$	$D_e = 0.6031 nN.nm$ , $\beta = 26.25 nm^{-1}$ , $r_0 = 0.142 nm$
$u_\theta$	$k_\theta = 1.42 nN.nm / Rad^{-2}$ , $k_{sextic} = 0.754 Rad^{-4}$ , $\theta_0 = 120^\circ$
$u_\phi$	$k_\phi = 0.278 nN.nm / Rad^{-2}$ , $n = 2$ , $\phi_0 = 180^\circ$
$u_\omega$	$k_\omega = 0.278 nN.nm / Rad^{-2}$ , $n = 2$ , $\omega_0 = 180^\circ$

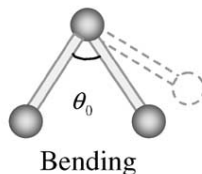
<sup>۱</sup> - Bond stretching

<sup>۲</sup> - Morse

<sup>۳</sup> - Brenner

ب: پتانسیل خمش زاویه‌ای<sup>۱</sup> بین پیوندی؛

این شکل از پتانسیل به دلیل تغییر زاویه در دو پیوند مجاور یکدیگر ایجاد می‌شود (شکل (۳-۲)).



شکل (۳-۲) پتانسیل خمش زاویه‌ای بین پیوندی در اتم‌های کربن

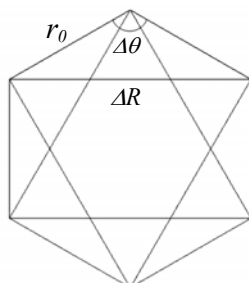
برای این پتانسیل نیز روابط مختلفی ارائه شده است که معروفترین آنها پتانسیل مورس می‌باشد که به شکل زیر تعریف می‌گردد [۱۲]:

$$U_{\theta} = \frac{1}{2} k_{\theta} (\theta - \theta_0)^2 [ 1 + k_{sextic} (\theta - \theta_0)^4 ] \quad (۶-۲)$$

که در آن  $\theta$  زاویه‌ی بین دو پیوند مجاور می‌باشد و مقادیر  $\theta_0$  (زاویه‌ی بین دو پیوند در حالت تعادل)،  $k_{\theta}$  و  $k_{sextic}$  در جدول (۱-۲) آورده شده است. معادله‌ی ۶-۲ را می‌توان از طریق ایجاد رابطه‌ی بین کشش و زاویه‌ی خمش بر حسب کشش به دست آورد. بر این اساس برای جابجائی‌های کوچک می‌توان رابطه‌ی زیر را بدست آورد [۳]:

$$\Delta\theta \approx \frac{2(\Delta R)}{r_0}, r_0 = 0.142 \text{ nm} \quad (۷-۲)$$

شکل (۴-۲) نشان دهنده‌ی موقعیت‌های مربوط به  $\Delta\theta$  و  $\Delta R$  می‌باشد.



شکل (۴-۲) موقعیت‌های مربوط به  $\Delta\theta$  و  $\Delta R$

<sup>۱</sup> - Angle variation or Bond bending