

# مدلسازی رفتار غیر الاستیک نانوتیوبهای کربنی توسط مکانیک محیط پیوسته

علیرضا چابکی خیابانی<sup>۱\*</sup>؛ سید امیرالدین صدرنژاد<sup>۲</sup>؛ محمود یحیایی<sup>۳</sup>

## چکیده

بر اساس نتایج آزمایشات بارگذاری بر روی نانوتیوبهای کربنی و کامپوزیتهای آن، شکل پذیری و جذب انرژی قابل توجهی در ورای حد الاستیک در این نانوسازه ها دیده شده است. با توجه به محدودیتهای محاسباتی روشهای تحلیلی (نظیر دینامیک مولکولی و مکانیک کوانتومی) برای شبیه سازی این رفتار، در این مقاله از روش مدلسازی مکانیک محیط پیوسته در قالب روش اجزای محدود استفاده شده است. به این صورت که ابتدا چگونگی بروز رفتار غیرالاستیک در نانوتیوبها و سپس شیوه های مدلسازی در این اندازه و اعتبار آنها در قالب روشهای مکانیک محیط پیوسته بررسی شده است. سپس رفتار غیر الاستیک نانوتیوبها به دو روش تحلیلی و عددی (بر پایه مدل الاستو-پلاستیک) و برای سنجش میزان دقت، نتایج هر دو مدل با نتایج آزمایشگاهی و روش دینامیک مولکولی مقایسه شده است. در پایان نیز محدودیتهای و امکانات این روش مورد بررسی قرار گرفت.

## کلمات کلیدی

نانوتیوب، محیط پیوسته، الاستیک، غیر الاستیک، استون-والس

## *Modeling of Non-elastic behavior of Carbon Nanotubes upon Continuum Mechanics*

A. Chaboki K.; S. A. Sadrnejad; M. Yahayei

### ABSTRACT

As experiments show, there is nonlinear behavior of carbon nanotubes after exceeding a certain boundary surface while loading continues. Avoiding being involved in molecular dynamics methods and quantum mechanics approach, a continuum macro mechanics based method is employed to predict the nonlinear behavior of bonding forces in carbon nanotubes. Both analytical and numerical approaches, assuming elasto-plastic behavior of tubes are considered in this research. The presented results are well compared with the test as well as molecular dynamics results. Finally, the limitation and advantages of the proposed method are pointed out.

### KEYWORDS

Nanotube, Continuum, Elastic, Inelastic, Stone-Wales

تاریخ دریافت مقاله: ۱۳۸۶/۷/۳۰

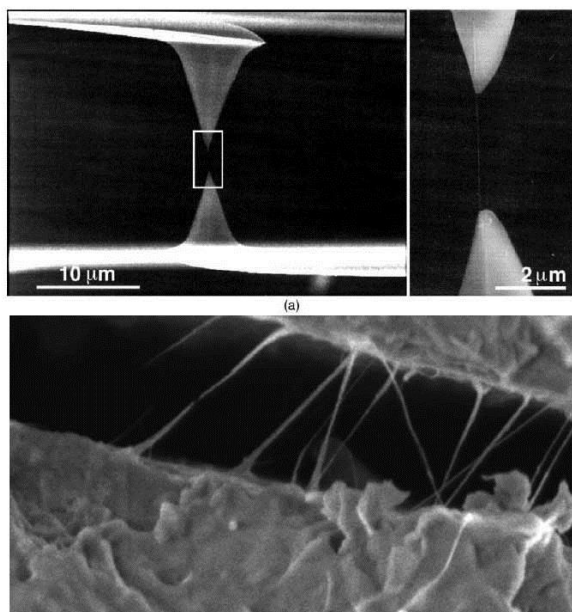
تاریخ اصلاحات مقاله: ۱۳۸۷/۴/۱

<sup>۱\*</sup> نویسنده مسئول و استادیار گروه مهندسی عمران دانشکده فنی، دانشگاه کردستان Email: a.chaboki@uok.ac.ir

<sup>۲</sup> استاد تمام دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی Email: sadrnejad@kntu.ac.ir

<sup>۳</sup> استادیار دانشکده مهندسی عمران، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی Email: m\_yahayei@kntu.ac.ir





شکل (۱): (بالا چپ و راست) گسیختگی کششی نانوتیوب در آزمایش کشش ساده [۵] (پایین) گسیختگی کششی نانوتیوب در کامپوزیت سیمان [۱۵]

با توجه به اهمیت کاربرد کامپوزیتهای نانوتیوب و ضرورت تبیین مدل رفتاری مناسب برای این مواد، در این مقاله تلاش شده است که چگونگی بروز رفتار غیر الاستیک و توسعه آن در این مواد، توسط روشهای مکانیک محیط پیوسته شبیه سازی و بررسی شود.

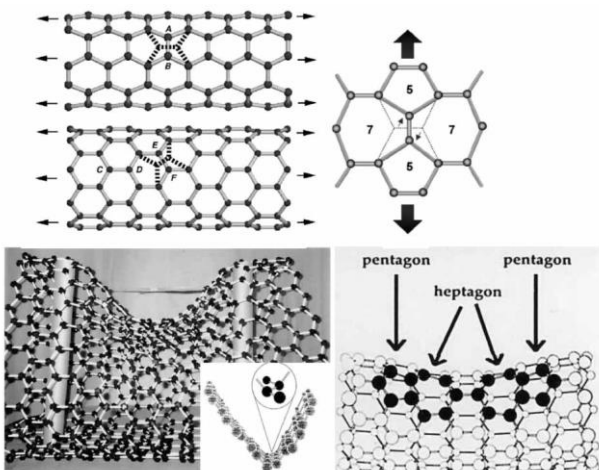
## ۲- سوابق مطالعاتی

طی چند سالی که از کشف نانوتیوبهای کربنی می‌گذرد، تحقیقاتی در زمینه مدلسازی رفتار غیر الاستیک نانوتیوبها انجام شده است که شامل بدست آوردن کرنش نهایی الاستیک و گسیختگی، محاسبه انرژی مورد نیاز برای گسیختگی پیوندها و میزان شکل پذیری این مواد توسط روشهای دینامیک مولکولی و مکانیک کوانتومی انجام شده است. طی نخستین گام، در سال ۱۹۹۷ یاکوبسن رفتار کششی نانوتیوبهای تک جداره را توسط روش دینامیک مولکولی و با استفاده از تابع پتانسیل برنر (Brenner ۱۹۹۰) شبیه سازی نمود و نتیجه گیری کرد که قبل از پارگی پیوندها و تشکیل عیب (استون - والس) در جداره این ماده، کرنش مشخصی وجود دارد که در تمام جداره نانوتیوب یکنواخت بوده و در ورای این کرنش، پارگی پیوند در جداره محتمل است. وی کرنش نهایی نانوتیوب را بسته به نوع آن بین ۲۵ تا ۵۵ درصد تخمین زد [۸]-[۶]. پس از آن نیز سایر محققان بوسیله روشهای گوناگون به بررسی مرز رفتار الاستیک و غیر الاستیک در این مواد پرداختند. زائو در سال

نانوتیوبهای کربنی با وجود استحکام فوق العاده، بسیار شکل پذیر بوده و در بارگذاریهای متفاوت، دامنه رفتاری الاستیک مناسبی را به نمایش می‌گذارند. به گونه ای که کرنش بیشینه الاستیک آنها، چند ده برابر مواد مهندسی نظیر فولاد گزارش شده است [۱]. اما در صورت بارگذاری بیش از حد الاستیک (این حد در ادامه توضیح داده می‌شود) بر این نانوسازه ها، تغییراتی برگشت ناپذیر در ساختار منظم اتمی آنها روی می‌دهد. در صورت ادامه بارگذاری، این تغییرات در ساختار اتمی تا گسیختگی ادامه یافته که با افزایش تغییر شکل و کاهش قابل ملاحظه سختی همراه است [۲]. رمز شکل پذیری قابل توجه نانوتیوبهای کربنی، در گسیختگی پیوندها و ایجاد پیوندهای جدید بین اتمهای آنها نهفته است [۳].

به علت تفاوت چشمگیر سختی نانوتیوب و سختی ماده پایه (ماتریس) در کامپوزیتهای این ماده، بار و تنش زیادی به نانوتیوب وارد می‌شود. این امر در موارد زیادی موجب رفتار غیر الاستیک در نانوتیوبها در کشش، فشار و یا بارهای ترکیبی می‌گردد [۴]. تصاویر میکروسکوپ الکترونی از نانوتیوبهای تحت اثر بار نیز بیانگر این واقعیت است که این نانوسازه ها نیز شبیه به سازه های مهندسی در بارهای کششی و برشی جاری شده و در پایان گسیخته می‌گردند به علاوه کماتش نیز در اثر بارهای فشاری گزارش شده است [۴] و [۵]. در شکل شماره ۱ علاوه بر گسیختگی نانوتیوب منفرد، گسیختگی نانوتیوب مدفون در کامپوزیت تحت بارهای کششی نیز نشان داده شده است.

بر اساس آزمایشات و نیز مطالعات تئوریک، ثابت شده است که رفتار غیر الاستیک نانوتیوبها به نوع بارگذاری، ساختار داخلی، دمای محیط، نرخ کرنش و میزان پخش عیوب در ساختار داخلی بستگی دارد.



شکل ۲: چگونگی تشکیل سلولهای ۵ و ۷ ضلعی (استون-والس) در در انواع نانو تیوب [۳]-[۶]

طی این فرایند، چهار سلول شش ضلعی مورد تاثیر قرار گرفته و به صورت دو زوج سلول پنج و هفت ضلعی تغییر شکل می‌دهند. با افزایش بارگذاری، فرایند گسستن پیوندها و ایجاد پیوندهای جدید گسترش می‌یابد.

#### ۴-۱-۶- مدلسازی رفتار غیر الاستیک در محیط پیوسته

گرچه مدلسازی در محیط پیوسته برای یک سازه در مقیاس نانو، در مقایسه با روشهای مکانیک کوانتومی و دینامیک مولکولی امکانات کمتری را فراهم می‌آورد. ولی تنها روش ممکن برای مدلسازی نانوکریستالها، نانوکامپوزیتهایی است که به علت تعداد زیاد اتمها، امکان مدلسازی رفتار تک تک اتمهای آن میسر نیست. بر این اساس، برای مدلسازی رفتار غیر الاستیک نانو تیوب های تک جداره در قالب مکانیک محیط پیوسته، در این مقاله دو روش تحلیلی و روش مدل الاستو-پلاستیک به کار گرفته شده است.

در روش تحلیلی با فرض تابع پتانسیل در قالب محیط پیوسته و اعمال شرایط مرزی بر آن، شرایط رفتار الاستیک و پایدار بودن رفتار بدست آمده و کرنش متناظر آن محاسبه می‌گردد. در این مقاله از تابع پتانسیل تغییر یافته مورس استفاده شده و نتایج با نتایج ژانگ [۱۲] برگرفته از تابع پتانسیل برنر، مقایسه شده است. در روش مدل الاستو-پلاستیک، ابتدا با استفاده از روش مکانیک شکست، کرنش پلاستیک حدی محاسبه شده، سپس پارامترهای مدل با استفاده از روش انرژی بدست می‌آیند.

#### ۴-۱-۱- مدلسازی رفتار غیر الاستیک به روش تحلیلی

برای مدلسازی رفتار غیر الاستیک نانو تیوبها به روش

۲۰۰۱ با استفاده از روش دینامیک مولکولی، مرز کرنش الاستیک را ۷ الی ۱۰/۵ درصد برآورد کرد [۹]. ناردلی در سال ۲۰۰۲، این کرنش را ۶٪ تخمین زد [۱۰]. در تحقیقی که بلیتچکو (۲۰۰۲) با استفاده از تابع پتانسیل مورس انجام داد، این کرنش ۱۰ الی ۱۶ درصد برآورد شده است [۱۱]. در چند سال اخیر، از روشهای مکانیک شکست که بر پایه روش انرژی در این رابطه استفاده شده است. (زیلینگ و یاکوبسن [۱۳]) در توجیه اختلاف نتایج یاد شده می‌توان به عوامل تعداد لایه های جداره، قطر، ساختار داخلی، دما و نیز نرخ کرنش اشاره کرد.

#### ۳-۳- مرز رفتار الاستیک و غیر الاستیک در نانو تیوبها

بر اساس قانون کوشی- بورن می‌توان انرژی یک سازه در مقیاس نانو را با سیستم معادل آن در محیط پیوسته ارتباط داد و سپس این سیستم معادل محیط پیوسته را در مدلسازی رفتار نانو تیوبها به کار برد.

با توجه به اعتبار قانون کوشی- بورن در تمامی محدوده رفتاری مواد نانو مقیاس، از همین روش می‌توان در شبیه سازی رفتار غیر الاستیک نانو تیوبها یاری جست.

در سازه های مهندسی، برگشت پذیری به عنوان مرز رفتار الاستیک و غیر الاستیک تعریف می‌شود. به عبارت دیگر اگر در فرایند بارگذاری و باربرداری، تغییری در ساختار ماده صورت پذیرد که تغییر شکلهای ماندگار را در آن ایجاد کند، رفتار به صورت غیر الاستیک تعریف می‌شود. علت این فرایند، ایجاد و گسترش عیوب در ساختار ماده است. شیوه و سرعت گسترش این عیوب ایجاد حفرات و ترکها، سبب بروز رفتار شکل پذیر و یا ترد در ماده می‌گردد.

در ساختارهای اتمی در مقیاس نانو نظیر نانو تیوبها، رفتار مکانیکی بر پایه پیوندهای اتمی و مولکولی بین واحدهای در بر گرفته تعریف می‌شود که از نوع کوالانس و یا واندروالس هستند. با افزایش بارگذاری و تغییر شکل، پیوندها گسیخته شده و پیوندهای جدیدی ایجاد می‌گردند. مرز رفتار الاستیک و غیر الاستیک در مواد نانو مقیاس، با گسستن پیوندها و ایجاد پیوندهای جدید تعریف می‌شود. طی گسستن پیوند، انرژی آزاد شده و در صورت ایجاد پیوند جدید، انرژی مصرف می‌شود که تفاضل این دو از یکدیگر، انرژی تلف شده در سیستم است. این فرایند موجب کاهش سختی سازه اتمی شده و تغییر شکل سازه افزایش می‌یابد. رایج ترین تغییر هندسه پیوند در ساختار مولکول شش ضلعی نانو تیوب، فرایند تشکیل عیب استون-والس است. چگونگی ایجاد این عیب در شکل شماره ۲ نشان داده شده است.

$$\begin{aligned}
& (\sigma_{ZZ} \frac{\partial^2}{\partial Z^2} - \frac{1}{R^2} K_{\theta\theta\theta\theta} F_{\theta\theta}^2) \dot{U}_R - \frac{1}{R^2} K_{\theta\theta\theta\theta} F_{\theta\theta}^2 \frac{\partial \dot{U}_\theta}{\partial \theta} - \\
& - \frac{1}{R} K_{\theta\theta ZZ} F_{\theta\theta} F_{ZZ} \frac{\partial \dot{U}_Z}{\partial Z} = 0 \quad (5) \\
& \frac{1}{R} K_{\theta\theta ZZ} F_{\theta\theta} F_{ZZ} \frac{\partial \dot{U}_R}{\partial Z} + \frac{1}{R} (K_{\theta\theta ZZ} + K_{ZZ\theta\theta}) F_{\theta\theta} F_{ZZ} \frac{\partial^2 \dot{U}_\theta}{\partial \theta \partial Z} \\
& + [\frac{1}{R^2} K_{\theta\theta ZZ} F_{ZZ}^2 \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + (\sigma_{ZZ} + K_{ZZZZ} F_{ZZ}^2) \frac{\partial^2}{\partial Z^2}] \dot{U}_Z = 0 \\
& \frac{1}{R} K_{\theta\theta ZZ} F_{\theta\theta} F_{ZZ} \frac{\partial \dot{U}_R}{\partial Z} + \frac{1}{R} (K_{\theta\theta ZZ} + K_{ZZ\theta\theta}) F_{\theta\theta} F_{ZZ} \frac{\partial^2 \dot{U}_\theta}{\partial \theta \partial Z} \\
& + [\frac{1}{R^2} K_{\theta\theta ZZ} F_{ZZ}^2 \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + (\sigma_{ZZ} + K_{ZZZZ} F_{ZZ}^2) \frac{\partial^2}{\partial Z^2}] \dot{U}_Z = 0
\end{aligned}$$

در جداره نانوتیوب، با توجه به بارگذاری کششی ساده، برش صفر است. به علاوه در دو انتهای آن، تغییر شکل نیز صفر است. این شرایط حدی در دو انتها به صورت رابطه شماره ۶ نوشته می‌شود.

$$\dot{U}_Z = \frac{\partial \dot{U}_Z}{\partial Z} = \frac{\partial \dot{U}_\theta}{\partial Z} = 0, (Z = 0, z = L) \quad (6)$$

حل معادلات دیفرانسیل همگن شماره ۵ با در نظر گرفتن شرایط حدی شماره ۶، منجر به یافتن تغییرات تغییر مکان  $\dot{U}$  می‌شود. حل این معادله به دو نوع جواب متقارن و غیر متقارن منجر می‌شود. جوابهای متقارن با روابط  $\dot{U}_R(Z), \dot{U}_\theta = 0, \dot{U}_Z = \dot{U}_z(Z)$  مشخص شده که در آنها ناپایداری، تغییر متقارن است. در حل نامتقارن، علاوه بر محدودیت‌های حل متقارن، شرط  $\dot{U}_\theta \neq 0$  نیز برقرار است. در صورت فرض جوابهای متقارن برای تغییر مکانها، معادلات شماره ۴ به صورت معادلات شماره ۷ کاهش و تغییر می‌یابد.

$$\begin{aligned}
& (\sigma_{ZZ} \frac{\partial^2}{\partial Z^2} - \frac{1}{R^2} K_{\theta\theta\theta\theta} F_{\theta\theta}^2) \dot{U}_R - \frac{1}{R} K_{\theta\theta ZZ} F_{\theta\theta} F_{ZZ} \frac{\partial \dot{U}_Z}{\partial Z} = 0 \quad (7) \\
& (\sigma_{ZZ} + K_{ZZZZ} F_{ZZ}^2) \frac{\partial^2 \dot{U}_z}{\partial Z^2} + \frac{1}{R} K_{\theta\theta ZZ} F_{\theta\theta} F_{ZZ} \frac{\partial \dot{U}_z}{\partial Z} = 0
\end{aligned}$$

حل معادله دیفرانسیل شماره ۷، به تغییر مکانهای نشان داده شده در رابطه ۸ می‌انجامد.

$$[\dot{U}_R, \dot{U}_Z] = [\dot{U}_{Rm} \cos \frac{m\pi Z}{L}, \dot{U}_{Zm} \sin \frac{m\pi Z}{L}] \quad (8)$$

پس از انجام عملیات ریاضی و ساده سازی، رابطه شماره ۹ بدست می‌آید:

$$C_{\theta\theta\theta\theta} (C_{ZZZZ} + \frac{\sigma_{ZZ}}{F_{ZZ}^2}) - C_{\theta\theta ZZ}^2 + \frac{\sigma_{ZZ}}{F_{\theta\theta}^2} (C_{ZZZZ} + \frac{\sigma_{ZZ}}{F_{ZZ}^2}) (\frac{m\pi R}{L})^2 = 0 \quad (9)$$

این معادله به همراه شرط  $\sigma_{\theta\theta} = 0$  در معادله تعادل، دو معادله برای کرنشهای حدی  $\varepsilon_{\theta\theta}, \varepsilon_{zz}$  مقادیر ویژه رابطه ۹

تحلیلی، برای ساختار داخلی (شامل هندسه و زاویه های اتصال انتهایی کربن)، سیستم مختصات محلی در نظر گرفته شده سپس با تعریف تابع پتانسیل مناسب، تغییرات انرژی سیستم اتمی در حین تغییر شکل بدست می‌آید. با تبدیل این انرژی در سیستم گسسته به سیستم پیوسته بر اساس قانون کوشی-بورن و اعمال شرایط تعادل و حداقل بودن انرژی، پارامترهای مدل رفتار الاستیک محاسبه می‌شود. در گام بعد با اعمال روابط تعادل و اعمال شرایط مرزی، شرط وقوع کرنشهای غیرالاستیک کنترل می‌شود.

در رفتار الاستیک، کرنشها و مشتقات آن متعادل بوده و مولفه های تنش نیز با استفاده از روابط پیولا-کیرشهف به صورت رابطه شماره ۱، از تابع پتانسیل انرژی با توجه به شرایط حدی و شرایط تعادل بدست می‌آیند.

$$\begin{aligned}
\sigma_{\theta\theta} &= \frac{\partial W}{\partial \varepsilon_{\theta\theta}} = 0 \\
\sigma_{zz} &= \frac{\partial W}{\partial \varepsilon_{zz}}
\end{aligned} \quad (1)$$

هنگامی که کرنش به حد غیر الاستیک می‌رسد، دیگر فرضیات یکنواخت بودن کرنش و تابع گرادیان تغییر شکل برقرار نبوده و مشتقات آن صفر نیستند. این مشتقات با استفاده از دستگاه مختصات استوانه ای به صورت رابطه شماره ۲ نوشته می‌شوند:

$$\begin{aligned}
F_{R\theta} &= \frac{1}{R} \frac{\partial u_R}{\partial \theta} - \frac{u_\theta}{R} & F_{\theta\theta} &= \frac{u_R}{R} + \frac{1}{R} \frac{\partial U_\theta}{\partial \theta} \\
F_{Z\theta} &= \frac{1}{R} \frac{\partial u_Z}{\partial \theta} & F_{RZ} &= \frac{\partial u_R}{\partial \theta} \\
F_{RZ} &= \frac{\partial u_\theta}{\partial Z} & F_{ZZ} &= \frac{\partial u_Z}{\partial Z}
\end{aligned} \quad (2)$$

در این حالت، تغییرات مولفه های غیر صفر کرنش به صورت رابطه شماره ۳ محاسبه می‌شود:

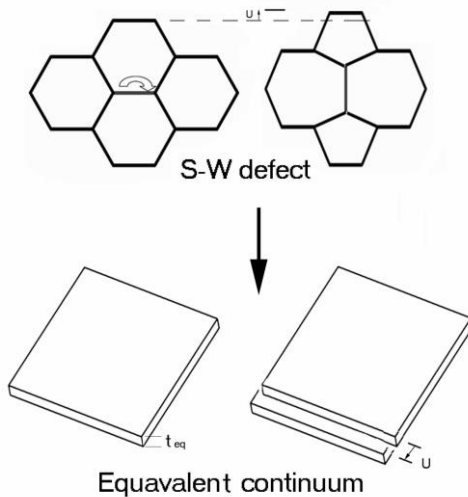
$$\begin{aligned}
\varepsilon_{\theta\theta} &= F_{\theta\theta} \dot{F}_{\theta\theta}, \varepsilon_{ZZ} = F_{ZZ} \dot{F}_{ZZ} \\
\varepsilon_{Z\theta} &= \dot{\varepsilon}_{Z\theta} = \frac{1}{2} (F_{\theta\theta} \dot{F}_{\theta Z} + F_{ZZ} \dot{F}_{Z\theta})
\end{aligned} \quad (3)$$

به علاوه تغییرات تنش از روابط شماره ۴ محاسبه می‌شوند.

$$\begin{aligned}
\dot{\sigma}_{\theta\theta} &= K_{\theta\theta\theta\theta} \dot{\varepsilon}_{\theta\theta} + K_{\theta\theta ZZ} \dot{\varepsilon}_{ZZ} \\
\dot{\sigma}_{ZZ} &= K_{ZZ\theta\theta} \dot{\varepsilon}_{\theta\theta} + K_{ZZZZ} \dot{\varepsilon}_{ZZ} \\
\dot{\sigma}_{\theta Z} &= \dot{\sigma}_{Z\theta} = 2K_{ZZ\theta\theta} \dot{\varepsilon}_{\theta Z}
\end{aligned} \quad (4)$$

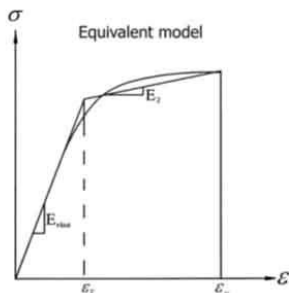
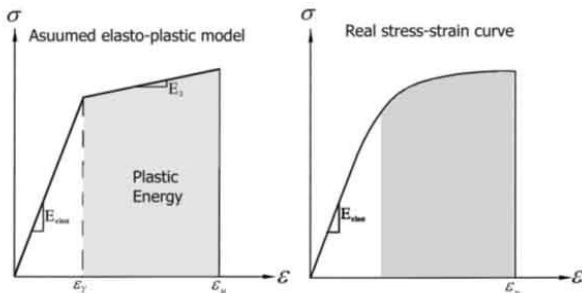
با جایگذاری روابط تنش، کرنش و نیز تابع گرادیان تغییر شکل در رابطه، سه معادله دیفرانسیل شماره ۵ بدست می‌آید:





شکل ۴: مفهوم تغییر مکان پلاستیک معادل در شبکه اتمی

در مدل الاستو-پلاستیک ایده آل رفتار تا کرنش تسلیم کاملاً الاستیک فرض شده و در ورای این کرنش رفتار پلاستیک فرض می‌شود. این رفتار در شکل شماره ۵ و رابطه شماره ۱۱ نشان داده شده است.

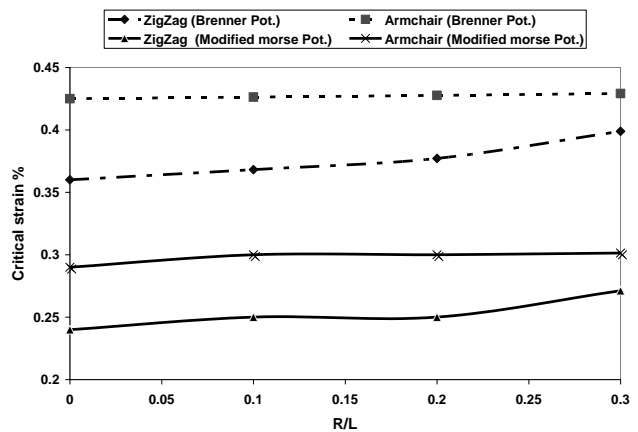


شکل ۵: (بالا-چپ) منحنی تنش-کرنش در مدل الاستو-پلاستیک (بالا راست) منحنی رفتاری واقعی نانوتیوب ایده آل (پایین) تلفیق دو مدل برای یافتن پارامترها

$$\sigma(\varepsilon) = \begin{cases} E_{elast} \varepsilon & \text{for } \varepsilon \leq \varepsilon_Y \\ E_2 \varepsilon_Y & \text{for } \varepsilon > \varepsilon_Y \end{cases} \quad (11)$$

بر اساس شکل شماره ۵، سطح زیر منحنی در قسمت بعد از

بدست می‌دهد. با توجه به روابط یاد شده و با استفاده از نرم افزار MATLAB، این معادلات دیفرانسیل برای جوابهای همگن تابع پتانسیل تغییر یافته مورس حل شده است که نتایج آن به صورت خلاصه در شکل شماره ۳ ارائه شده است. بر اساس این نتایج، کرنش حدی الاستیک محاسبه شده با نتایج با کار ژانگ (۲۰۰۴) (که از تابع پتانسیل برنر استفاده کرده است) مقایسه شده است [۱۲]. بر اساس این شکل دیده شد که کرنش نهایی در کشش با استفاده از توابع پتانسیل و در انواع جداره نانوتیوبها مختلف تفاوت دارد.



شکل ۳: کرنش نهایی (بحرانی) دو نوع نانوتیوب که توسط تابع پتانسیل تغییر یافته مورس و برنر محاسبه شده و با کار ژانگ [۱۲] مقایسه شده است.

#### ۴-۲- مدل رفتاری الاستوپلاستیک

مدلهای رفتاری با در نظر گرفتن چند عامل اساسی به نمایندگی تمامی عوامل موثر می‌توانند قوانین حاکم بر رفتار مواد را به صورت منظم و با دقت معینی نشان دهند. با توجه به نتایج آزمایشات انجام شده بر روی نانوتیوبها و نانوکامپوزیتها دو مدل (۱) الاستو-پلاستیک و (۲) مدل تغییرات کرنش می‌توانند تا حدی رفتار غیر الاستیک نانوتیوبها را بیان کنند. با توجه به سادگی و داشتن امکانات زیاد، در این مقاله برای مدلسازی رفتار غیر الاستیک نانوتیوب از مدل الاستو-پلاستیک استفاده شده است. برای تبیین این مدل، در شکل شماره ۴، مفهوم تغییر مکانهای پلاستیک در ساختار اتمی و مدل ساده الاستوپلاستیک نشان داده شده است.

کرنش حدی نمایانگر انرژی پلاستیک (غیر الاستیک) مورد نیاز برای ایجاد رفتار غیر الاستیک می باشد که میزان این انرژی با در نظر گرفتن شکل شماره ۵، به صورت رابطه شماره ۱۲ تعریف می گردد.

$$\Pi_{plastic} = t_{eq} \cdot [(\varepsilon - \varepsilon_Y) * \sigma_Y + \frac{1}{2} E_2 \cdot (\varepsilon - \varepsilon_Y)^2] \quad (12)$$

این انرژی در مدل برابر با انرژی مورد نیاز برای ایجاد عیب استون-والس در ناحیه متناظر در نظر گرفته شده است و به این روش، مدول پلاستیک  $E_2$  بدست می آید.

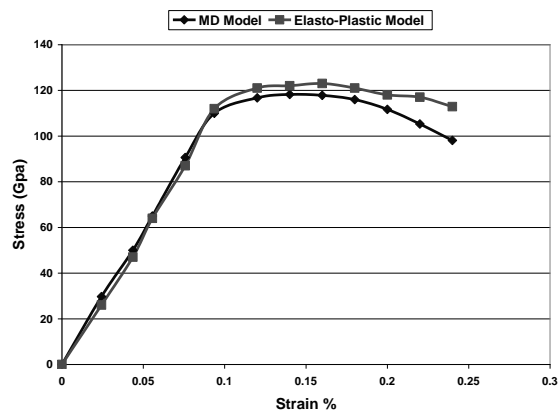
نکته مهم در این روش، کرنش شروع رفتار پلاستیک است که کرنش شروع تسلیم هشت درصد فرض شده است. با استفاده از این پارامترها و یکسان قرار دادن انرژی غیر الاستیک در ورای کرنش پلاستیک، می توان شیب دوم منحنی رفتار  $E_2$  را به صورت رابطه ۱۳ بدست آورد.

$$\begin{aligned} \Pi_{W-V} &= 5.5ev \\ E_2 &= 2.37Tpa \end{aligned} \quad (13)$$

با استفاده از این روابط، کشش ساده نانوتیوب تک جداره به کمک روش اجزای محدود شبیه سازی شده است. در این مدل، جداره نانوتیوب به صورت پوسته جدار نازک با مشخصات رابطه ۱۴ شبیه سازی شده است که در یک سر تغییر مکانهای آن محدود شده و در سوی دیگر، بارهای کششی به آن اعمال می گردد.

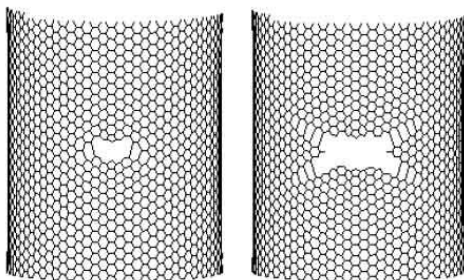
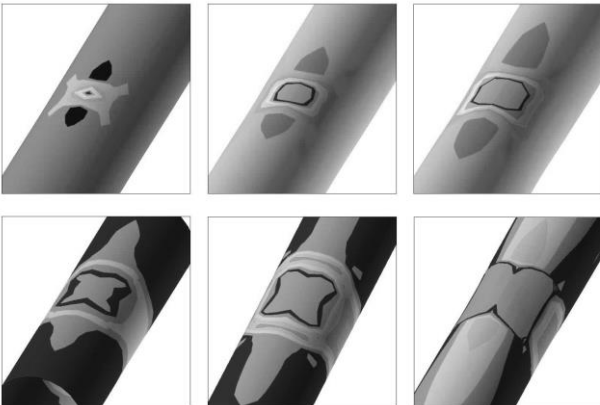
$$\begin{aligned} E_{elast} &= 5.5Tpa \\ t_{eq} &= 0.066nm \end{aligned} \quad (14)$$

بارگذاری تا مرحله گسیختگی به صورت استاتیکی به مدل اجزای محدود اعمال شده است. برای آغاز رفتار غیر الاستیک یک عیب کوچک در جداره ایجاد شده است تا محل آغاز رفتار غیر الاستیک باشد. منحنی تنش-کرنش این مدلسازی با نتایج حاصل از مدلسازی دینامیک مولکولی مقایسه شده و در شکل شماره ۶ ارائه شده است.



شکل ۶: مقایسه نتایج مدلسازی بوسیله مدل الاستو-پلاستیک و مدلسازی دینامیک مولکولی در نانوتیوب (۹۰ و ۱۸)

در شکل شماره ۷ نیز، چگونگی ایجاد و گسترش ناحیه پلاستیک در مدل نشان داده شده است. ناحیه مشخص شده در این شکل، نواحی هستند که در آنها کرنشهای غیر الاستیک بزرگ رخ داده و رفتار الاستیک نیست. بر اساس شکل ۷ با افزایش بارگذاری، ابعاد ناحیه غیر الاستیک بزرگتر می شود. همچنین در این تصویر، چگونگی این گسترش با نتایج حاصل از دینامیک مولکولی بلیچکو مقایسه شده است. بر اساس این شکل، مدل الاستوپلاستیک در تخمین ابعاد ناحیه غیر الاستیک و فرم گسترش آن نیز جوابهای مناسبی را بدست می دهد.



شکل ۷: (شش تصویر بالا) شبیه سازی چگونگی ایجاد و گسترش ناحیه پلاستیک در نانوتیوب توسط مدل الاستوپلاستیک بوسیله روش اجزای محدود. (دو تصویر پایین) نتایج مدلسازی رفتار نهایی نانوتیوب در کشش به روش دینامیک مولکولی بلیچکو [۱۱]

## ۵- نتیجه گیری

در این مقاله چگونگی بروز رفتار غیر الاستیک در نانوتیوبها و شیوه های مدلسازی آن در قالب مکانیک محیط پیوسته به دو روش تحلیلی و عددی بر پایه مدل الاستو-پلاستیک بررسی شد. بر اساس نتایج نشان داده شده مشخص گردید که نتایج روش تحلیلی با نتایج دقیق آزمایشگاهی تفاوت زیادی داشته و نیازمند تحقیق بیشتر برای سازگاری بهتر با

نتایج است.

## ۶- تقدیر و تشکر

نویسندگان مقاله حاضر بر خود لازم می‌دانند که از کمکهای جناب آقای پروفسور رفیعی تبار ریاست محترم پژوهشکده نانو و از چهره های ماندگار قدردانی نمایند.

در مدل الاستو- پلاستیک بر اساس نتایج ارائه شده، دیده شد که با استفاده از این مدلسازی می‌توان با دقت مناسب، شرایط آغاز و گسترش رفتار غیر الاستیک را شبیه سازی نمود. اما با مقایسه نتایج دیده می‌شود که برابری نتایج این مدل با آزمایشات عددی در کرنشهای زیاد کاهش می‌یابد و سختی سازه نانو را بیش از میزان واقعی برآورد می‌کند.

## ۷- مراجع

- [۹] Zhao Q.; Nardelli M. B.; Bernholc J.; "Ultimate strength of carbon nanotubes: A theoretical study", Physics Review B, vol. 65, p.p 144105-144110, 2002.
- [۱۰] Nardelli M. B.; Yakobson B. I.; Bernholc J.; "Mechanism of strain release in carbon nanotubes"; Physics Review, B, vol. 57, p.p. 4277-80, 1998.
- [۱۱] Belytschko T.; Xiao S. P.; Schatz G. C.; Ruoff R. S.; "Atomistic simulations of nanotube fracture" Physics Review B, vol. 65, p.p. 2354301- 8, 2002,
- [۱۲] Zhang P.; Jiang H.; Huang Y.; "An atomistic-based continuum theory for carbon nanotubes: analysis of fracture nucleation", Journal of the Mechanics and Physics of Solids, vol. 52, p.p. 977-998, 1999.
- [۱۳] Li Z.; Dharap P.; Sharma P.; Nagarajaiah S.; Yakobson B. I.; "Continuum field model of defect formation in carbon nanotubes", Journal of applied physics, 97, p.p. 743031-8, 2005.
- [۱۴] Kuzumaki T.; Hayashi T.; Ichinose H.; Miyazawa K.; Ito K.; Ishida Y.; "In-situ observed deformation of carbon nanotubes", Philosophical Magazine , Vol. 77, NO. 6, p.p. 1461-1469, 1998.
- [۱۵] Makar j.; Margeson J.; "carbon nanotube/cement composites, early results and potential application", 3rd international conference of construction material, p.p. 1-10, 2005.
- [۱] Tomanek D.; Enbody R.J.; Science and Applications of Nanotubes, 1st edition, Kluwer Academic, 2000.
- [۲] Srivastava, D.; Menon, M.; Cho, K.J.; "Computational nanotechnology with carbon nanotubes and fullerenes", Computational Science Engineering, no 4, vol. 3, p.p. 42-55, 2001.
- [۳] Bower C.; Rosen R.; Jin L.; Han J.; Zhou O.; "Deformation of carbon nanotubes in nanotube-polymer composites", Applied Physics Letter, No 22, vol. 74, p.p. 3317-3319, 1999.
- [۴] Nardelli M. B.; Yakobson B. I.; Bernholc J.; "Brittle and Ductile Behavior in Carbon Nanotubes", Physical Review Letter, no 21, vol. 81, p.p. 675-695, 1998
- [۵] Ruoff R. S.; Calabri L.; Pugno M. N; "experimental test on fracture strength of nanotube", Reviews on advanced materials science, No 10, p.p. 110-117, 2005.
- [۶] Yakobson B.I.; Brabec C.J.; Bernholc J.; "Structural mechanics of carbon nanotubes: From continuum elasticity to atomistic fracture", Journal of Computer-Aided Materials Design, no 3, p.p. 173-182, 1996
- [۷] Yakobson, B.I.; Brabec, C.J.; Bernholc, J.; "Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear response". Physical Review Letters no 76, p.p. 2511-2514, 1996.
- [۸] Yakobson, B.I.; Campbell, M.P.; Brabec, C.J.; Bernholc, J.; "High strain rate fracture and C-chain unraveling in carbon nanotubes", Computational Material science, no 8, p.p. 341-348, 1997.

