



Presenting a Continuum Model for Analyzing the Oscillatory Behavior of Buckyball Molecule Inside Carbon Nanotorus

Fatemeh Sadeghi^{1*}, Meisam Sadeghi²

¹ Associate Professor, Department of Engineering Sciences, Faculty of Advanced Technologies, University of Mohaghegh Ardabili, Namin, Iran

² Assistant Professor, Department of Industrial Engineering, Faculty of Engineering, Roudehen Branch, Islamic Azad University, Roudehen, Iran

HIGHLIGHTS

- Gravitational force is negligible compared to van der Waals and centrifugal forces.
- The equilibrium position of buckyball depends on the tube radius of nanotorus.
- The frequency resulting from the rotation of buckyball molecule inside nanotorus is in the gigahertz range.

ARTICLE INFO

Article history:

Article Type: Research paper

Received: 20 July 2024

Received in revised form: 21 August 2024

Accepted: 1 September 2024

Available online: 1 September 2024

*Correspondence: f.sadeghi@uma.ac.ir

How to cite this article:

F. Sadeghi, M. Sadeghi. Presenting a continuum model for analyzing the oscillatory behavior of buckyball molecule inside carbon nanotorus. *Journal of Aerospace Mechanics*. 2025; 20(4):23-42.

Keywords:

Buckyball

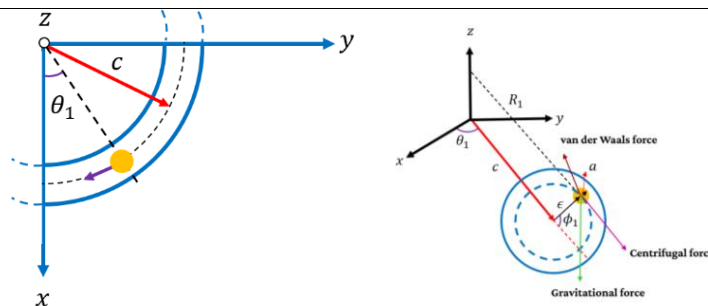
Nanotorus

Nano-oscillator

Continuum approximation method

Frequency

GRAPHICAL ABSTRACT



ABSTRACT

In this article, the oscillatory behavior of buckyball-carbon nanotorus nano-oscillator is investigated. The buckyball molecule is under the influence of three forces; namely van der Waals, centrifugal and gravity while rotating inside the nanotorus. To obtain the non-bonded interactions, the continuum approximation along with the Lennard-Jones potential function is used. Using this approach, semi-analytical expressions are presented to determine the potential energy and van der Waals force between buckyball and nanotorus. By deriving the equations of rotational motion of the buckyball inside the nanotorus based on the Newton's second law, a novel formula is introduced to attain the frequency of the nano-oscillator depending on the initial conditions and geometrical parameters of system. Numerical results show that gravitational potential energy is negligible compared to the van der Waals and centrifugal potential energies. Moreover, if the ring radius of nanotorus tends to infinity, the equilibrium position of buckyball inside nanotorus is completely consistent with that of buckyball inside infinite nanotube. The effect of tube and ring radii of nanotorus on the equilibrium position of buckyball inside nanotorus and also the frequency of the oscillations of the system is examined. The results presented in this article indicate that buckyball-carbon nanotorus nano-oscillator produces frequencies up to 1500 gigahertz. Furthermore, the frequency of this nano-oscillator is several times higher than that of buckyball-carbon nanotube nano-oscillator.

This is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution Non-Commercial (CC BY-NC) license.





ارائه مدل پیوسته برای تحلیل رفتار نوسانی مولکول باکی‌بال داخل نانوتورس کربنی

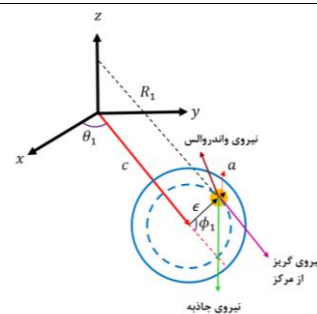
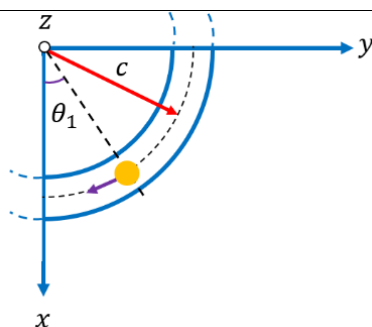
فاطمه صادقی^{۱*}، میثم صادقی^۲

^۱دانشیار، گروه علوم مهندسی، دانشکده فناوری‌های نوین، دانشگاه محقق اردبیلی، نمین، ایران
^۲استادیار، گروه مهندسی صنایع، دانشکده فنی مهندسی، واحد رودهن، دانشگاه آزاد اسلامی، رودهن، ایران

برجسته‌ها

- نیروی جاذبه در مقایسه با نیروهای واندروالس و گریز از مرکز قابل اغماض است.
- موقعیت تعادل مولکول باکی‌بال به شعاع لوله نانوتورس وابسته است.
- فرکانس حاصل از چرخش مولکول باکی‌بال داخل نانوتورس در مقیاس گیگاهرتز است.

چکیده گرافیکی



مشخصات مقاله

تاریخچه مقاله:
نوع مقاله: علمی پژوهشی
دریافت: ۱۴۰۳/۰۴/۳۰
بازنگری: ۱۴۰۳/۰۵/۳۱
پذیرش: ۱۴۰۳/۰۶/۱۱
ارائه برخط: ۱۴۰۳/۰۶/۱۱
*نویسنده مسئول:

f.sadeghi@uma.ac.ir

کلیدواژه‌ها:

باکی‌بال
نانوتورس
نانونوسانگر
روش تقریب پیوسته
فرکانس

چکیده

در این مقاله، رفتار نوسانی نانونوسانگر باکی‌بال-نانوتورس کربنی مورد مطالعه قرار گرفته است. مولکول باکی‌بال حین چرخش داخل نانوتورس تحت تأثیر سه نیروی واندروالس، گریز از مرکز و گرانشی قرار دارد. به منظور تعیین برهمکنش‌های غیرپیوندی، از رهیافت تقریب پیوسته به همراه تابع پتانسیل لنارد-جونز استفاده شده است. بر اساس این روش، روابط نیمه‌تحلیلی برای تعیین انرژی پتانسیل و نیروی واندروالس بین باکی‌بال و نانوتورس ارائه شده است. با استخراج معادلات حرکت چرخشی باکی‌بال داخل نانوتورس با استفاده از قانون دوم نیوتن، رابطه‌ای جدید برای محاسبه فرکانس نانونوسانگر برحسب شرایط اولیه و پارامترهای هندسی سیستم معرفی شده است. نتایج عددی نشان می‌دهند که انرژی پتانسیل گرانشی در مقایسه با انرژی‌های پتانسیل واندروالس و گریز از مرکز قابل اغماض است. همچنین، اگر شعاع حلقه نانوتورس به سمت بی‌نهایت میل کند، موقعیت تعادل مولکول باکی‌بال داخل نانوتورس با موقعیت تعادل آن نانولوله طویل کاملاً مطابقت خواهد داشت. تأثیر شعاع لوله و شعاع حلقه نانوتورس بر روی موقعیت تعادل باکی‌بال داخل نانوتورس و نیز فرکانس نوسانات سیستم بررسی شده است. نتایج ارائه شده در این مقاله حاکی از آن است که نانونوسانگر باکی‌بال-نانوتورس فرکانس‌هایی تا ۱۵۰۰ گیگاهرتز تولید می‌کند. همچنین، فرکانس این نانونوسانگر چندین برابر فرکانس نانونوسانگر باکی‌بال-نانولوله کربنی است.



۱- مقدمه

کششی مشاهده کردند که مقاومت برشی بین لایه‌ها کم است. کامینگز و زتل [۱۶] متعاقباً با بیرون کشیدن هسته داخلی و هل دادن آن به سمت لایه‌های خارجی نشان دادند که به دلیل نیروی بازگرداننده‌ای که بر اثر برهمکنش‌های واندروالسی^۷ ایجاد می‌شود، هسته داخلی به سرعت به داخل نانولوله بیرونی کشیده می‌شود و نیز نیروی اصطکاک بین لایه‌ای بسیار ناچیز است. پس از این تحقیق، ایده ایجاد نانوسانگرهای مبتنی بر نانولوله‌های کربنی که لایه داخلی درون لایه خارجی نوسان می‌کند، پیشنهاد داده شد [۱۷]. تعداد زیادی از مطالعات انجام شده بر اساس شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی^۸ نشان دادند که فرکانس نانوسانگرهای مبتنی بر نانولوله‌های کربنی در مقیاس گیگاهرتز است [۱۸ و ۱۹]. بر این اساس، لگوس و همکاران [۲۰] فرکانس‌هایی تا ۳۸ گیگاهرتز را برای نوسانگرهای نانولوله‌های کربنی گزارش کردند. همچنین، ژنگ و ژیانگ [۱۷] نشان دادند که کاهش طول هسته داخلی منجر به افزایش فرکانس نوسانگر می‌شود. این نتیجه محققان را بر آن داشت که از فلورن C₆₀ یا باکی‌بال^۹ برای افزایش فرکانس نانوسانگرها استفاده کنند [۲۱-۲۳].

نتایج مهم حاصله همراه با کشف مولکول‌های پی‌پاد^{۱۰} (باکی‌بال‌های کپسول‌شده داخل نانولوله‌های کربنی) [۲۴] منجر شد تا نوسانگرهای باکی‌بال-نانولوله کربنی پیشنهاد شوند که در این نوسانگرها، فلورن C₆₀ داخل نانولوله کربنی نوسان می‌کند [۲۵]. مطالعات دینامیک مولکولی نشان دادند که این نوع از نوسانگرها می‌توانند فرکانس‌هایی تا ۷۴ گیگاهرتز تولید کنند [۲۱] و نیز دامنه نوسان آن‌ها تقریباً ثابت است [۲۶]. این مطالعات همچنین بیان کردند که فرکانس نوسانگر هم به قطر و هم به مارپیچگی^{۱۱} نانولوله حساس است. هداک و جیریفالکو [۲۷] نشان دادند که انرژی پتانسیل سیستم زمانی کمینه می‌شود که اختلاف فاصله بین نانولوله و مولکول فلورن تقریباً برابر با فاصله بین لایه‌ای گرافیت^{۱۲} باشد. همچنین، آن‌ها گزارش دادند که

با کشف ایجیما در سال ۱۹۹۱ که نشان داد نانولوله‌های کربنی^۱ می‌توانند بدون نیاز به کنش‌یار^۲ ترکیب شوند، مسیری هموار برای ارائه پیشنهادها متعدد در زمینه ایجاد و ساخت دستگاه‌ها در مقیاس نانو فراهم شد [۱]. نانولوله‌های کربنی ساختارهایی استوانه‌ای شکل هستند که از لوله شدن صفحات گرافن^۳ [۲] ایجاد می‌شوند که این ساختارها می‌توانند به صورت تک‌جداره^۴ یا چندجداره^۵ باشند [۳]. نانولوله‌های کربنی دارای خواص جذاب و منحصر به فرد مکانیکی و الکترونیکی هستند که از آن جمله می‌توان به مقاومت بالا، انعطاف‌پذیری، چگالی کم و توانایی آن‌ها به عنوان رسانا یا نیمه‌رسانا اشاره کرد [۴]. نانولوله‌های کربنی تک‌جداره و چندجداره کاربردهای گسترده‌ای در زمینه دستگاه‌های نانوالکترومکانیکی پیدا کرده‌اند [۵]. استفاده بالقوه از نانولوله‌های کربنی به عنوان نانوسانگرهای فرکانس بالا^۶ نشانگر ویژگی‌های برجسته آن‌ها می‌باشد. میکرونوسانگرها قادر به ایجاد فرکانس در محدوده گیگاهرتز نیستند، در حالی که نانوسانگرها چنین فرکانسی را تولید می‌کنند و لذا به عنوان نانوسانگرهای گیگاهرتزی شناخته می‌شوند. از جمله کاربردهای نانوسانگرها می‌توان به فیلترهای نوری فوق سریع برای سیستم‌های فیبر نوری و نانواتن‌ها که حساس به سیگنال‌های الکترومغناطیسی با فرکانس بالا هستند، اشاره نمود [۶-۸]. همچنین، نانوسانگرهای فرکانس بالا برای استفاده در دستگاه‌های آشکارساز فوق حساس، پردازش سیگنال فرکانس رادیویی و به عنوان یک سیستم مدل برای کاوش پدیده‌های کوانتومی در سیستم‌های ماکروسکوپی پیشنهاد شده‌اند [۹-۱۱].

تحقیقات قابل توجهی برای درک بیشتر ویژگی‌های منحصر به فرد نانولوله‌های کربنی انجام شده است [۱۲-۱۴]. یو و همکاران [۱۵] با انجام آزمایش بر روی مقاومت و مکانیسم شکست نانولوله‌های کربنی چندجداره تحت بار

⁷ Van der Waals interactions

⁸ Molecular-dynamics simulations

⁹ Buckyball

¹⁰ Peapods

¹¹ Helicity

¹² Graphite

¹ Carbon nanotubes

² Catalyst

³ Graphene sheets

⁴ Single-walled

⁵ Multi-walled

⁶ High-frequency nano-oscillators

نانولوله‌های کربنی به ساختارهای حلقوی شکل یا با اتصال چندین بخش از نانولوله‌های کربنی تشکیل شوند که این حلقه‌ها هم از لحاظ شیمیایی و هم از لحاظ فیزیکی کاملاً پایدار هستند [۳۷]. قطر لوله این نانوتورس‌ها تقریباً ۱۰ تا ۱۲ آنگستروم و قطر حلقه آن‌ها در حدود ۳۰۰۰ تا ۵۰۰۰ آنگستروم تخمین زده شده است [۳۸]. نانوتورس‌های کربنی می‌توانند برای کاربردهای مختلف بیولوژیکی و زیست‌پزشکی استفاده شوند [۳۹ و ۴۰]. مارتل و همکاران [۴۱] با به هم پیوستن دو سر نانولوله‌های تک‌جداره به یکدیگر، نانوتورس‌هایی را پیشنهاد کردند که محیط حلقه آن‌ها دقیقاً برابر با طول اولیه نانولوله است. همچنین، مطالعات آن‌ها نشان داد که دو انتهای این حلقه‌ها تنها به کمک نیروی واندروالس پایدار می‌شوند [۴۲]. محققان دریافتند که احتمال تشکیل نانولوله‌های حلقوی از نانولوله‌های چندجداره بسیار کمتر است؛ زیرا نانولوله‌های چندجداره در مقایسه با نانولوله‌های تک‌جداره دارای قطر بزرگ‌تر و سفتی خمشی بیشتری هستند. همچنین، نتایج تحقیقات مارتل و همکاران [۴۲] نشان داد که شعاع حلقه بحرانی لازم برای تشکیل حلقه‌های پایدار از لحاظ ترمودینامیکی برابر با ۳۰۰ آنگستروم می‌باشد که چنین حلقه‌ای توسط یک نانولوله تک‌جداره به قطر ۱۴ آنگستروم ایجاد می‌شود. برخی از محققان با استفاده از شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی، پایداری نانولوله‌های حلقوی کربنی را بررسی کردند و دریافتند که می‌توان به قطرهای حلقه کوچک‌تری در مقایسه با مقادیر مشاهده‌شده از طریق مطالعات آزمایشگاهی دست یافت [۴۳ و ۴۴]. به‌عنوان مثال، هویتالا و همکاران [۴۳] نشان دادند که نانوتورسی با قطر حلقه ۲۲۰ آنگستروم باید قطر لوله‌ای کمتر از ۱۳ آنگستروم داشته باشد تا پایدار بماند. به‌طور مشابه، هان [۴۴] نشان داد برای اینکه نانوتورس‌های (۵ و ۵)، (۸ و ۸) و (۱۰ و ۱۰) از نظر انرژی پایدار بمانند، قطر حلقه آن‌ها باید به ترتیب بیشتر از ۱۰۰، ۲۰۰ و ۴۰۰ آنگستروم باشد.

در سال‌های اخیر، مطالعات بسیار محدودی در خصوص نانونوسانگرهای مبتنی بر نانوتورس‌های کربنی انجام شده است. در این خصوص، انصاری و همکاران [۴۵] با استفاده از روش تقریب پیوسته، نوسان نانوتورس را در امتداد بیرونی

حداقل شعاع نانولوله برای اینکه با مولکول باکی‌بال پر شود، ۶.۲۷ آنگستروم است. انصاری و همکاران [۲۸] گزارش کردند که با فرض صلب بودن مولکول‌های باکی‌بال و نانولوله کربنی، نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و مدل‌سازی روش تقریب پیوسته^۱ مطابقت بسیار خوبی با یکدیگر دارند. همچنین، مشاهدات تجربی نشان داده‌اند که رفتار مکانیکی مواد در مقیاس نانو به‌واسطه تأثیر مشخصه‌های ابعادی، وابسته به اندازه می‌باشد. از آنجایی که تئوری‌های کلاسیک مکانیک محیط پیوسته امکان در نظر گرفتن اثرات وابسته به اندازه را ندارند، استفاده از تئوری‌های غیرکلاسیک به‌منظور تحلیل رفتارهای مکانیکی نانسازه‌ها موردتوجه گسترده محققان قرار گرفته است [۲۹-۳۱]. در این خصوص، انصاری و همکاران [۳۲]، رفتار ارتعاشی نانولوله‌های کربنی را بر اساس تئوری گردایان کرنش موردبررسی قرار دادند و نشان دادند که نتایج حاصل از این تئوری با نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مطابقت دارد.

مطالعات قبلی انجام‌شده بر روی نوسانگر فلورن C₆₀- نانولوله‌های کربنی خاطر نشان کردند که مکش باکی‌بال تحت شرایطی خاص و به دلیل نیروی جاذبه قوی واندروالسی اتفاق می‌افتد و همه نانولوله‌ها قادر به جذب مولکول فلورن نمی‌باشند [۲۴ و ۲۶]. برای بررسی دقیق‌تر این پدیده، کاکس و همکاران [۳۳] با استفاده از روش تقریب پیوسته، مفاهیم مهمی مانند انرژی مکش^۲ و انرژی پذیرش^۳ را معرفی نمودند و سپس شرط پذیرش^۴ مولکول فلورن داخل نانولوله‌های کربنی را بررسی کردند. این شرط نشان می‌دهد که آیا هسته داخلی بدون کمک نیروهای خارجی و تنها به‌واسطه نیروهای واندروالسی می‌تواند جذب هسته خارجی شود یا خیر.

کشف نانولوله‌های کربنی حلقوی^۵ بسیاری از محققان را به بررسی ساختار و خواص منحصر به فرد این نانساختارها ترغیب نمود [۳۴-۳۶]. این مولکول‌های حلقوی که امروزه با نام نانوتورس^۶ شناخته می‌شوند، می‌توانند با خم کردن

¹ Continuum approximation

² Suction energy

³ Acceptance energy

⁴ Acceptance condition

⁵ Toroidal carbon nanotubes

⁶ Nanotorus

این نانوسانگر، مولکول باکی‌بال داخل نانوتورس حرکت چرخشی دارد. در گام نخست، سؤالی که مطرح می‌شود این است که چه راهکارهایی را می‌توان برای ایجاد این نوع از نانوسانگرها متصور شد؟ آیا ممکن است دو سر نانولوله‌ای که قبلاً حاوی باکی‌بال نوسانی است را به هم متصل کرد تا نانوتورسی ایجاد شود که باکی‌بال داخل آن می‌چرخد؟ یا راه‌حل جایگزین این است که درست قبل از متصل کردن دو سر نانولوله، مولکول باکی‌بال را باید به داخل نانوتورس تزریق نمود تا متعاقباً حرکت نوسانی خود را شروع کند. به‌عنوان مثال، آیا می‌توان این حرکت را با استفاده از یک میدان الکتریکی، یا از طریق یک میدان مغناطیسی متغیر یا با دوپینگ شیمیایی انجام داد؟ چنین روش‌هایی چالش‌های عملی زیادی را ایجاد می‌کنند که قبل از ساخت نوسانگر واقعی C₆₀-نانوتورس باید بر آن‌ها غلبه کرد. با توجه به نتایج ارائه‌شده توسط کامینگز و زتل [۱۶] در خصوص نقش ناچیز نیروهای اصطکاکی در نوسانگرهای نانولوله‌های کربنی، این احتمال وجود دارد که میزان نیروی اصطکاک در نوسانگر C₆₀-نانوتورس نیز بسیار ناچیز باشد و اگر چنین اتفاقی رخ دهد، مولکول باکی‌بال به‌طور پیوسته و بدون هیچ محدودیتی داخل نانوتورس نوسان می‌کند.

هدف اصلی در مقاله حاضر، ارائه مدلی پیوسته برای تحلیل حرکت چرخشی باکی‌بال داخل نانوتورس کربنی و نیز تعیین رابطه‌ای جدید برای فرکانس نانوسانگر مربوطه است. بدین منظور، ابتدا تابع پتانسیل لنارد-جونز^۴ که به‌طور گسترده برای تعیین نیروهای بین‌اتمی در مدل‌سازی برهمکنش‌های غیرپیوندی مورد استفاده قرار می‌گیرد، به‌همراه رهیافت تقریب پیوسته شرح داده می‌شود. سپس، نیروهای وارد بر مولکول باکی‌بال حین چرخش داخل نانوتورس کربنی معرفی می‌شوند که شامل نیروهای واندروالس، گریز از مرکز^۵ و جاذبه^۶ می‌باشند. همچنین، روابط مربوط به تعادل نیرویی برای چرخش مولکول باکی‌بال ارائه می‌شوند. با فرض اینکه مرکز باکی‌بال به اندازه مشخصی از مرکز لوله نانوتورس فاصله داشته باشد، یک

نانولوله کربنی ثابت مدل‌سازی کردند و بر طبق اصل پایستاری انرژی مکانیکی، رابطه‌ای نیمه‌تحلیلی برای محاسبه فرکانس نوسانگر تعیین کردند. آن‌ها دریافتند که فرکانس نوسانگر نانوتورس-نانولوله کربنی به پارامترهای هندسی و شرایط اولیه سیستم بستگی دارد. همچنین، در این تحقیق، انرژی مکش و شرایط پذیرش نانولوله موردبررسی قرار گرفت و شرایطی که منجر به بیشینه فرکانس سیستم می‌شود، محاسبه شد. با استفاده از رهیافت تقریب پیوسته، حسین زاده و همکاران [۴۶] موقعیت تعادل^۱ و نیز فرکانس نانوقطاعی^۲ که داخل نانوتورس می‌چرخد را تعیین کردند. نتایج تحقیقات آن‌ها نشان داد که فرکانس این نوسانگر در مقیاس گیگاهرتز است و مستقل از زاویه نانوقطاع می‌باشد. اخیراً، آجری و صادقی [۴۷] نیز با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نوسان نانولوله کربنی از میان نانوتورس ثابت را مدل‌سازی کردند. در این مطالعه، محققان امکان استفاده از نانو ساختارهای کربنی را به‌عنوان نانوسانگرهایی برای کاربردهای نانو الکترومکانیکی آینده مانند دستگاه‌های برداشت انرژی^۳ و حسگر ارتعاش بررسی کردند. همچنین، اثرات صلبیت، انعطاف‌پذیری، اندازه نانو ساختارها و نیز سرعت اولیه نانولوله بر روی پاسخ زمانی نوسانگر موردبررسی قرار گرفت. نتایج این مطالعه نشان داد که با افزایش نسبت قطر نانولوله به قطر نانوتورس، فرکانس نوسانگر در هر دو حالت مدل‌سازی صلب و انعطاف‌پذیر کاهش می‌یابد ولی توان تولیدی سیستم به‌صورت یکنواخت رفتار نمی‌کند. همچنین، نشان داده شد که فرکانس نوسانگر انعطاف‌پذیر به‌مراتب بیشتر از فرکانس نوسانگر صلب است.

مروری بر مطالعات انجام‌شده بر روی نانوسانگرها نشان می‌دهد که تحقیقات بسیار اندکی در خصوص نانوسانگرهای مبتنی بر نانوتورس‌ها با استفاده از روش تقریب پیوسته انجام‌شده است. بر این اساس، در این مقاله قصد داریم با استفاده از رهیافت پیوسته که جانشین بسیار خوبی برای شبیه‌سازی‌های زمان‌بر دینامیک مولکولی است، نانوسانگر باکی‌بال-نانوتورس کربنی را مدل‌سازی کنیم. در

⁴ Lennard-Jones

⁵ Centrifugal force

⁶ Gravitational force

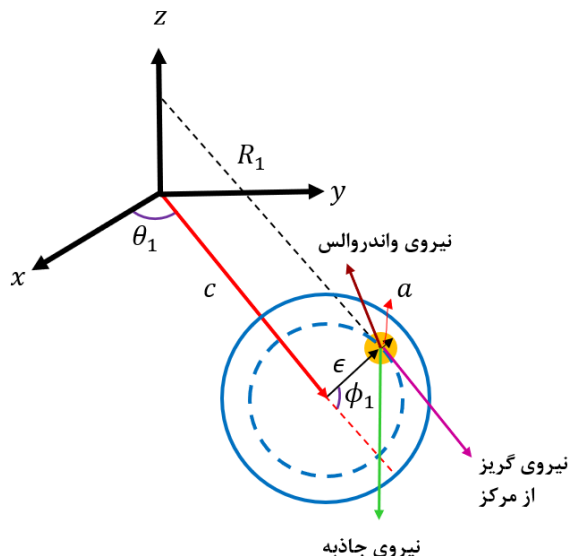
¹ Equilibrium position

² Nanosector

³ Energy harvesting

۳- تعادل نیرویی برای حرکت چرخشی

در شکل ۱، موقعیت مولکول باکی‌بال به شعاع a که با سرعت زاویه‌ای ω داخل نانوتورس می‌چرخد نشان داده شده است. بر طبق شکل، فاصله مرکز باکی‌بال تا مرکز لوله نانوتورس (موقعیت انحراف^۱) با ϵ نشان داده شده است. همچنین، دستگاه مختصات به همراه هندسه نانوتورس و شعاع لوله (b) و شعاع حلقه (c) در شکل ۲ معرفی شده‌اند.



شکل (۱): هندسه نانونوسانگر باکی‌بال-نانوتورس به همراه نیروهای اعمال شده به باکی‌بال.

بر طبق شکل ۱، باکی‌بال حین چرخش داخل نانوتورس تحت تأثیر سه نیرو قرار می‌گیرد: (۱) نیروی واندروالس، (۲) نیروی گریز از مرکز و (۳) نیروی جاذبه که هر یک از این نیروها دارای یک تابع انرژی پتانسیل متناظر هستند. در مدل‌سازی حرکت، از تأثیر نیروهای اصطکاک در مقایسه با سایر نیروها صرف نظر می‌شود [۱۶]. علاوه بر این، صفحه نانوتورس عمود بر جهت گرانش در نظر گرفته می‌شود و لذا زاویه انحراف^۲ صفر می‌باشد.

نیروی برهمکنش واندروالس از تابع پتانسیل لنارد-جونز به صورت $F_1 = -\nabla V_1(x, y, z)$ که (x, y, z) بیانگر مختصات مولکول باکی‌بال در مختصات دکارتی است.

رابطه نیمه‌تحلیلی برحسب انتگرال یگانه برای محاسبه برهمکنش‌های واندروالس بین مولکول باکی‌بال و نانوتورس بر اساس رهیافت تقریب پیوسته استخراج شده است. با تعیین نیروی واندروالس و استفاده از روابط تعادل نیرویی، رابطه‌ای جدید نیز برای محاسبه فرکانس نانونوسانگر باکی‌بال-نانوتورس ارائه شده است. با استفاده از این رابطه می‌توان فرکانس نوسانات سیستم را به ازای پارامترهای هندسی مختلف مانند شعاع لوله و شعاع حلقه نانوتورس به دست آورد.

۲- تابع پتانسیل لنارد-جونز و روش تقریب پیوسته

انرژی پتانسیل غیرپیوندی بین دو نانوساختار، با جمع کردن انرژی پتانسیل بین هر جفت از اتم‌ها در دو مولکول محاسبه می‌شود [۳۳]:

$$V_1 = \sum_i \sum_j v(\rho_{ij}) \quad (1)$$

که در آن $v(\rho_{ij})$ معرف تابع انرژی پتانسیل برای اتم‌های i و j است که در فاصله ρ_{ij} از یکدیگر قرار گرفته‌اند. در این مقاله، از انرژی پتانسیل لنارد-جونز به صورت زیر استفاده می‌شود [۴۸]:

$$v(\rho_{ij}) = -A\rho_{ij}^{-6} + B\rho_{ij}^{-12} \quad (2)$$

که در آن A و B به ترتیب معرف ثابت‌های جاذبه و دافعه سیستم هستند. فاصله تعادل بین هر جفت از اتم‌ها نیز از رابطه $\rho_0 = (2B/A)^{1/6}$ محاسبه می‌شود.

در روش تقریب پیوسته فرض می‌شود که اتم‌های کربن به صورت یکنواخت بر روی سطح دو مولکول توزیع شده‌اند. لذا با در نظر گرفتن چگالی میانگین سطحی برای هر یک از نانوساختارها، جمع دو گانه در رابطه (۱) را می‌توان با یک انتگرال دوگانه بر روی سطح دو مولکول جایگزین کرد [۳۳]:

$$V_1 = \eta_b \eta_t \iint v(\rho) d\Sigma_b d\Sigma_t \quad (3)$$

در رابطه (۳)، η_t و η_b به ترتیب معرف چگالی میانگین سطحی اتم‌های کربن بر روی باکی‌بال و نانوتورس هستند و ρ بیانگر فاصله بین دو امان سطح $d\Sigma_b$ و $d\Sigma_t$ است.

¹ Offset position

² Angle of inclination

داخل نانوتورس از رابطه $F_3 = -mg$ قابل محاسبه است که g شتاب گرانش می‌باشد. انرژی پتانسیل گرانشی نیز از رابطه $V_3 = -mgh$ محاسبه می‌شود که h بیانگر ارتفاع از سطح مبنا می‌باشد با فرض اینکه صفحه نانوتورس در یک صفحه افقی واقع شده است.

در نهایت، انرژی پتانسیل کل سیستم از طریق جمع‌زدن انرژی‌های پتانسیل واندروالس، گریز از مرکز و گرانشی تعیین می‌شود:

$$V = V_1 + V_2 + V_3 \quad (5)$$

با کمینه‌سازی انرژی پتانسیل کل سیستم، موقعیت تعادل مولکول باکی‌بال داخل نانوتورس تعیین می‌شود.

در ادامه، تعادل نیرویی برای حرکت دورانی مولکول باکی‌بال داخل نانوتورس به دست می‌آید. همان‌طور که در شکل ۱ نشان داده شده است، فرض می‌شود که مرکز باکی‌بال با شعاع a و چگالی میانگین سطحی η_b در فاصله ϵ از مرکز لوله نانوتورس قرار دارد و با سرعت زاویه‌ای ω حول محور Z می‌چرخد. در دستگاه مختصات استوانه‌ای (R_1, θ_1, z_1) ، معادلات حرکت طبق قانون دوم نیوتن به صورت زیر بیان می‌شوند:

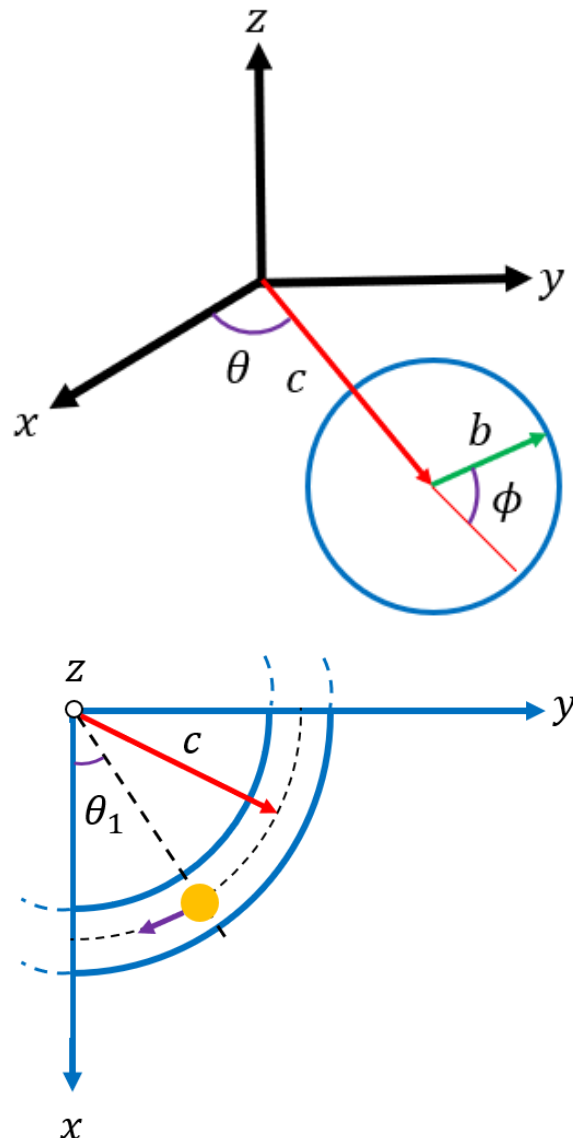
$$\begin{aligned} m(\ddot{R}_1 - R_1\dot{\theta}_1^2) &= -\frac{\partial V_1}{\partial R_1}, \\ m(R_1\ddot{\theta}_1 + 2\dot{R}_1\dot{\theta}_1) &= -\frac{1}{R_1}\frac{\partial V_1}{\partial \theta_1}, \\ m(\ddot{z}_1 - g) &= -\frac{\partial V_1}{\partial z_1} \end{aligned} \quad (6)$$

که در آن $\theta_1 = \omega t$ و نماد $\dot{\quad}$ بیانگر مشتق نسبت به زمان است. همچنین، طبق شکل ۱ داریم:

$$R_1 = c + \epsilon \cos \phi_1, \quad z_1 = \epsilon \sin \phi_1 \quad (7)$$

چون R_1 و z_1 مقادیری ثابت در فضا هستند، مشتقات آن‌ها نسبت به زمان برابر با صفر است. در نتیجه، با فرض اینکه سرعت زاویه‌ای ω است، رابطه (۶) به صورت زیر ساده می‌شود:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V_1}{\partial R_1} &= mR_1\omega^2, \\ \frac{\partial V_1}{\partial \theta_1} &= 0, \end{aligned} \quad (8)$$



شکل (۲): هندسه نانوتورس.

در نتیجه، سه مؤلفه نیروی واندروالس از رابطه زیر محاسبه می‌شوند [۳۳]:

$$F_{1x} = -\frac{\partial V_1}{\partial x}, \quad F_{1y} = -\frac{\partial V_1}{\partial y}, \quad F_{1z} = -\frac{\partial V_1}{\partial z} \quad (4)$$

هنگامی که مولکول باکی‌بال داخل نانوتورس می‌چرخد، یک نیروی گریز از مرکز را نیز تجربه می‌کند که این نیرو به سمت بیرون بر باکی‌بال دوار اعمال می‌شود. نیروی گریز از مرکز توسط رابطه $F_2 = -mR_1\omega^2$ محاسبه می‌شود که در آن m جرم باکی‌بال است. همچنین، انرژی پتانسیل متناظر از رابطه $V_2 = -mR_1^2\omega^2/2$ تعیین می‌شود. علاوه بر این، نیروی گرانشی اعمال شده بر مولکول باکی‌بال حین چرخش

در رابطه قبل، ρ بیانگر فاصله بین مرکز باکی‌بال تا یک نقطه بر روی سطح نانوتورس می‌باشد که از رابطه (۱۱) به دست می‌آید.

با استفاده از بسط دو جمله‌ای برای رابطه (۱۳) خواهیم داشت:

$$E_n = \frac{-2\pi a \eta_b}{\rho p} \times \left(\frac{\sum_{k=0}^p \binom{p}{k} \rho^k ((-a)^{p-k} - (a)^{p-k})}{(\rho^2 - a^2)^p} \right) \quad (14)$$

که در آن $p = n - 2$ است.

در رابطه قبل، اگر $p - k$ زوج باشد، انرژی پتانسیل صفر می‌شود. درحالی‌که اگر $p - k$ فرد باشد، دو عبارت داخل پرانتز با هم جمع می‌شوند. بنابراین، $p - k$ را می‌توان برابر با $2j + 1$ در نظر گرفت:

$$E_{2m} = \frac{2\pi a \eta_b}{\rho m (\rho^2 - a^2)^{2m}} \times \left(\sum_{j=0}^{m-1} \binom{2m}{2j+1} \rho^{2m-2j-1} a^{2j+1} \right) \quad (15)$$

که در آن $p = 2m$ است.

انرژی پتانسیل کل سیستم با انتگرال‌گیری از رابطه (۱۲) بر روی سطح نانوتورس به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$V_1 = -AK_4 + BK_{10} \quad (16)$$

که در آن

$$K_{2m} = \frac{2\pi a b \eta_b \eta_t}{m} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{1}{\rho (\rho^2 - a^2)^{2m}} \times \sum_{j=0}^{m-1} \binom{2m}{2j+1} \rho^{2m-2j-1} a^{2j+1} \times (c + b \cos \phi) d\theta d\phi \quad (17)$$

با بسط رابطه قبل برای مقادیر $m = 2$ و $m = 5$ خواهیم داشت:

$$V_1 = 4\pi a^2 b \eta_b \eta_t \quad (18)$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\frac{B(5\rho^4 + 10\rho^2 a^2 + a^4)(\rho^4 + 10\rho^2 a^2 + 5a^4)}{5(\rho^2 - a^2)^{10}} - \frac{A(\rho^2 + a^2)}{(\rho^2 - a^2)^4} \right) \times (c + b \cos \phi) d\phi d\theta$$

که به صورت زیر ساده می‌شود:

$$\frac{\partial V_1}{\partial z_1} = mg$$

روابط مربوط به انرژی پتانسیل و اندروالس بین مولکول باکی‌بال و نانوتورس در بخش بعدی بیان شده است.

۴- برهمکنش‌های واندروالس بین مولکول باکی‌بال و نانوتورس

در این بخش، با استفاده از رهیافت تقریب پیوسته، برهمکنش‌های واندروالس بین مولکول باکی‌بال و نانوتورس مدل‌سازی می‌شوند. طبق شکل ۱، مختصات مرکز باکی‌بال که به اندازه ϵ از مرکز لوله نانوتورس قرار گرفته است، در دستگاه مختصات دکارتی (x, y, z) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\begin{aligned} x_1 &= (c + \epsilon \cos \phi_1) \cos \theta_1, \\ y_1 &= (c + \epsilon \cos \phi_1) \sin \theta_1, \\ z_1 &= \epsilon \sin \phi_1 \end{aligned} \quad (9)$$

به طریق مشابه، موقعیت یک اتم کربن بر روی سطح نانوتورس برابر است با:

$$\begin{aligned} x_2 &= (c + b \cos \phi) \cos \theta, \\ y_2 &= (c + b \cos \phi) \sin \theta, \\ z_2 &= b \sin \phi \end{aligned} \quad (10)$$

بنابراین، فاصله بین مرکز فلورن تا یک اتم کربن بر روی سطح نانوتورس به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\begin{aligned} \rho &= \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_2 - z_1)^2} \\ &= \sqrt{(b - \epsilon)^2 + 4(c + b \cos \phi)(c + \epsilon \cos \phi_1) \sin^2 \left(\frac{\theta - \theta_1}{2} \right) + 4b\epsilon \sin^2 \left(\frac{\phi - \phi_1}{2} \right)} \end{aligned} \quad (11)$$

انرژی پتانسیل واندروالس بین باکی‌بال و یک اتم کربن که بر روی سطح نانوتورس قرار گرفته است به صورت زیر بیان می‌شود:

$$E = -AE_6 + BE_{12} \quad (12)$$

که در آن

$$E_n = \frac{2\pi a \eta_b}{\rho(2-n)} \left(\frac{1}{(\rho+a)^{n-2}} - \frac{1}{(\rho-a)^{n-2}} \right); \quad n = 6, 12 \quad (13)$$

$$I_n = \frac{4}{\alpha^n} \sum_{i=0}^{n-1} \binom{n-1}{i} \frac{1}{\beta^{2i+1}} \quad (24)$$

$$\times \int_0^{\pi/2} (\cos\psi)^{2i} (\sin\psi)^{2n-2i-2} d\psi$$

رابطه قبل را می‌توان به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$I_n = \frac{1}{\alpha^n} \sum_{i=1}^n \frac{G_i^{(n)}}{\beta^{2i-1}} \quad (25)$$

که در آن

$$G_i^{(n)} = 4 \binom{n-1}{i-1} \int_0^{\pi/2} (\cos\psi)^{2i-2} (\sin\psi)^{2n-2i} d\psi \quad (26)$$

نحوه محاسبه پارامتر $G_i^{(n)}$ در پیوست الف شرح داده شده است.

در نهایت، انرژی پتانسیل و اندروالس به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$V_1 = \lambda \int_0^{2\pi} M(\epsilon, \phi) (c + b \cos\phi) d\phi \quad (27)$$

که در آن $\lambda = 4\pi a^2 b \eta_b \eta_t$ و تابع $M(\epsilon, \phi)$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$M(\epsilon, \phi) = \sum_{\substack{n=3 \\ n \neq 5}}^{10} C_n I_n \quad (28)$$

همچنین، پارامترهای ثابت C_n به شرح زیر هستند:

$$\begin{cases} C_3 = -A, & C_4 = -2a^2 A, \\ C_6 = B, & C_7 = 16a^2 B, \\ C_8 = \frac{336}{5} a^4 B, & C_9 = \frac{512}{5} a^6 B, \\ C_{10} = \frac{256}{5} a^8 B \end{cases} \quad (29)$$

پس از محاسبه انرژی پتانسیل و اندروالس، نیروی و اندروالس به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$F_1(\epsilon) = \frac{\partial V_1}{\partial \epsilon} = \lambda \int_0^{2\pi} \frac{\partial M(\epsilon, \phi)}{\partial \epsilon} \times (c + b \cos\phi) d\phi \quad (30)$$

که در آن

$$\begin{aligned} V_1 = 4\pi a^2 b \eta_b \eta_t \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{B}{5} & \left(\frac{5}{(\rho^2 - a^2)^6} \right. \\ & + \frac{80a^2}{(\rho^2 - a^2)^7} \\ & + \frac{336a^4}{(\rho^2 - a^2)^8} \\ & + \frac{512a^6}{(\rho^2 - a^2)^9} \\ & + \frac{256a^8}{(\rho^2 - a^2)^{10}} \\ & - A \left(\frac{1}{(\rho^2 - a^2)^3} \right. \\ & + \frac{2a^2}{(\rho^2 - a^2)^4} \\ & \left. \left. \times (c + b \cos\phi) d\theta d\phi \right) \right) \quad (19) \end{aligned}$$

به منظور انتگرال‌گیری از رابطه قبل نسبت به متغیر θ ، انتگرال‌هایی به شکل زیر باید محاسبه شوند:

$$I_n = \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{(\rho^2 - a^2)^n}; \quad n = 3, 4, 6, 7, 8, 9, 10 \quad (20)$$

با فرض $\theta_1 = 0$ و اعمال تغییر متغیر $x = \frac{\theta}{2}$ و نیز تعریف

$$X = (b - \epsilon)^2 + 4b\epsilon \sin^2\left(\frac{\phi - \phi_1}{2}\right), \quad (21)$$

$$Y = 4(c + b \cos\phi)(c + \epsilon \cos\phi_1)$$

رابطه (۲۰) به صورت زیر بازنویسی می‌شود:

$$I_n = 4 \int_0^{\pi/2} \frac{dx}{(X + Y \sin^2 x - a^2)^n} \quad (22)$$

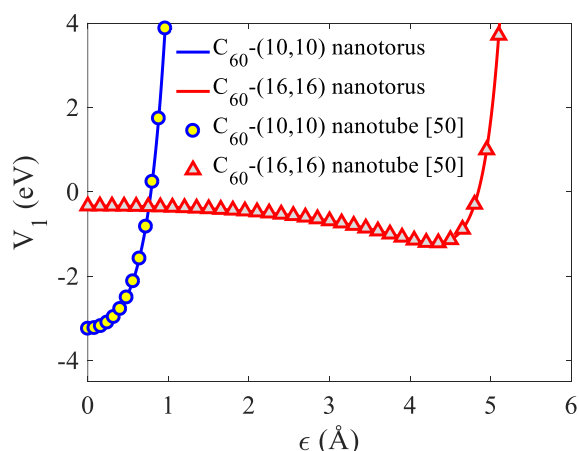
حال، با اعمال تغییر متغیر $u = \cot x$ در رابطه قبل خواهیم داشت:

$$I_n = \frac{4}{\alpha^n} \int_0^{\infty} \frac{(1 + u^2)^{n-1}}{(\beta^2 + u^2)^n} du \quad (23)$$

که در آن $\alpha = X - a^2$ و $\beta = \sqrt{1 + \frac{Y}{\alpha}}$ می‌باشند.

بار دیگر با اعمال تغییر متغیر $u = \beta \tan\psi$ در رابطه (۲۳) می‌توان نوشت:

می‌یابد، موقعیت تعادل باکی‌بال در $4/308 \text{ \AA}$ رخ می‌دهد. بنابراین، می‌توان نتیجه گرفت که با افزایش شعاع لوله نانوتورس، موقعیت تعادل مولکول باکی‌بال به دیواره لوله نزدیک‌تر می‌شود؛ فاصله بین جداره لوله نانوتورس و مولکول باکی‌بال برای نانولوله (۱۰ و ۱۰) برابر با $3/234 \text{ \AA}$ است که این فاصله برای نانولوله (۱۶ و ۱۶) به $2/998 \text{ \AA}$ کاهش می‌یابد.



شکل (۳): انرژی پتانسیل و اندروالس برحسب موقعیت انحراف مولکول باکی‌بال.

جدول (۱): مقادیر عددی ثابت‌های موردنیاز در مدل‌سازی [۲۳ و ۴۵].

$3/55 \text{ \AA}$	شعاع باکی‌بال
$4/071 \text{ \AA}$	شعاع نانولوله (۶ و ۶)
$6/784 \text{ \AA}$	شعاع نانولوله (۱۰ و ۱۰)
$10/856 \text{ \AA}$	شعاع نانولوله (۱۶ و ۱۶)
0.3789 \AA^{-2}	چگالی میانگین سطحی باکی‌بال*
0.3812 \AA^{-2}	چگالی میانگین سطحی نانوتورس
$1/196 \times 10^{-24} \text{ kg}$	جرم باکی‌بال
$9/81 \text{ m/s}^2$	شتاب گرانش
$17/4 \text{ ev} \times \text{Å}^6$	ثابت جاذبه
$29000 \text{ ev} \times \text{Å}^{12}$	ثابت دافعه

$$*\eta_b = \frac{60}{4\pi a^2}$$

به‌منظور صحت‌سنجی نتایج حاصله، انرژی پتانسیل و اندروالس مربوط به نانوسانگر باکی‌بال-نانوتورس با انرژی پتانسیل و اندروالس مربوط به نانوسانگر باکی‌بال-نانولوله طویل در مرجع [۵۰] مقایسه شده است. نتایج عددی حاکی

$$\frac{\partial M(\epsilon, \phi)}{\partial \epsilon} = \sum_{\substack{n=3 \\ n \neq 5}}^{10} \sum_{i=1}^n \frac{C_n G_i^{(n)}}{2\beta^{2i+1} \alpha^{n+2}} \times \left(\begin{aligned} &((2i-1)Y - 2n\alpha\beta^2) \frac{\partial \alpha}{\partial \epsilon} \\ &-(2i-1)\alpha \frac{\partial Y}{\partial \epsilon} \end{aligned} \right) \quad (31)$$

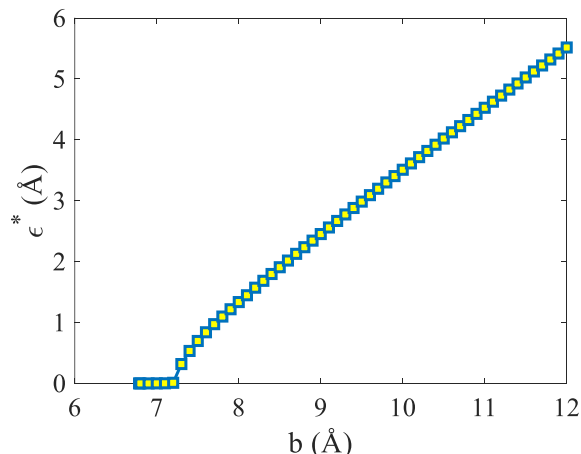
و

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \epsilon} = 2(\epsilon - b) + 4b \sin^2 \left(\frac{\phi - \phi_1}{2} \right) \quad (32)$$

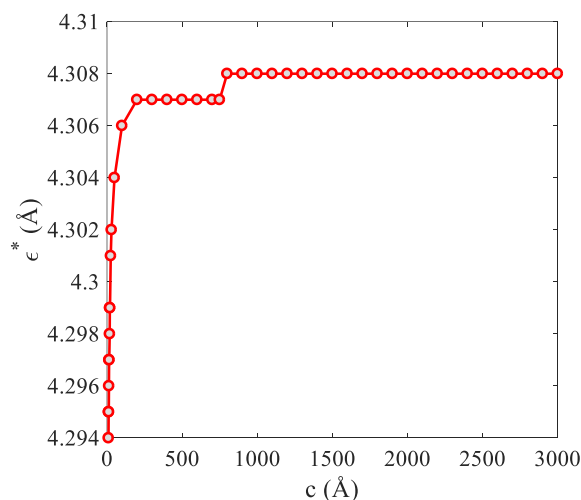
$$\frac{\partial Y}{\partial \epsilon} = 4(c + b \cos \phi) \cos \phi_1 \quad (33)$$

۵- نتایج عددی

در این بخش، با استفاده از روابط ارائه‌شده در بخش پیشین، رفتار نوسانی مولکول باکی‌بال داخل نانوتورس بررسی می‌شود و موقعیت تعادل سیستم با کمینه‌سازی انرژی پتانسیل به دست می‌آید. همچنین، با استفاده از روابط تعادل نیرویی، رابطه‌ای برای فرکانس نانونوسانگر باکی‌بال-نانوتورس ارائه می‌شود که با استفاده از آن می‌توان تأثیر شعاع لوله و شعاع حلقه نانوتورس را بر روی فرکانس نوسانات سیستم بررسی نمود. مقادیر عددی پارامترهای موردنیاز برای مدل‌سازی در جدول ۱ ارائه‌شده است. در شکل ۳، تغییرات انرژی پتانسیل و اندروالس برحسب موقعیت انحراف باکی‌بال داخل نانوتورس نشان داده شده است. در این شکل، انرژی پتانسیل و اندروالس به ازای نانوتورس‌هایی با شعاع لوله $6/784 \text{ \AA}$ و $10/856 \text{ \AA}$ که به ترتیب متناظر با نانولوله (۱۰ و ۱۰) و (۱۶ و ۱۶) هستند، ترسیم شده است. شعاع حلقه نانوتورس نیز 1500 \AA در نظر گرفته شده است [۴۹]. مشاهده می‌شود که انرژی پتانسیل و اندروالس در یک موقعیت انحراف مشخص به مقدار کمینه خود می‌رسد که این موقعیت را موقعیت تعادل باکی‌بال (ϵ^*) می‌نامیم. طبق شکل، موقعیت تعادل مولکول باکی‌بال به شعاع لوله نانوتورس وابسته است. بر طبق نتایج عددی، به ازای نانوتورسی با شعاع لوله $6/784 \text{ \AA}$ ، مولکول باکی‌بال در $R_1 = c$ به تعادل می‌رسد که معادل است با: $\epsilon = 0$ (مرکز باکی‌بال بر روی محور نانوتورس قرار می‌گیرد). این در حالی است که وقتی شعاع لوله نانوتورس به $10/856 \text{ \AA}$ افزایش



شکل (۴): موقعیت تعادل مولکول باکی‌بال برحسب شعاع لوله نانوتورس.



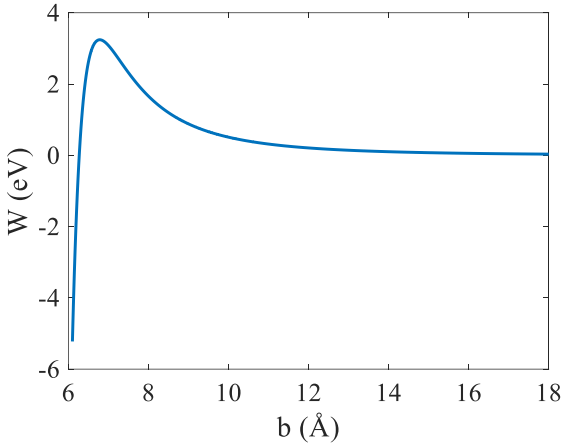
شکل (۵): موقعیت تعادل مولکول باکی‌بال برحسب شعاع حلقه نانوتورس.

در شکل ۶، انرژی پتانسیل گریز از مرکز برحسب زاویه انحراف و به ازای موقعیت‌های انحراف مختلف باکی‌بال ترسیم شده است. در این شکل، شعاع لوله و شعاع حلقه نانوتورس به ترتیب برابر با $6/784 \text{ \AA}$ و 1500 \AA در نظر گرفته شده است. مطابق با بخش ۳، انرژی پتانسیل گریز از مرکز از رابطه $-mR_1^2\omega^2/2$ تعیین می‌شود که در آن $R_1 = c + \epsilon \cos\phi_1$ و ω سرعت زاویه‌ای باکی‌بال است. برای محاسبه سرعت زاویه‌ای، ϵ را مساوی با صفر قرار می‌دهیم و لذا خواهیم داشت: $R_1 = c$. همچنین، سرعت زاویه‌ای از رابطه $\omega = V_0/R_1$ محاسبه می‌شود که در آن V_0 سرعت اولیه باکی‌بال است. برای محاسبه سرعت اولیه، ابتدا

از آن است که اگر شعاع حلقه نانوتورس به سمت بی‌نهایت میل کند، انرژی پتانسیل مکانیسم باکی‌بال-نانوتورس دقیقاً منطبق بر انرژی پتانسیل مکانیسم باکی‌بال-نانولوله با طول بی‌نهایت خواهد بود. در نتیجه، موقعیت تعادل باکی‌بال داخل نانوتورس برابر با موقعیت تعادل آن داخل نانولوله خواهد شد.

با فرض $c = 1500 \text{ \AA}$ ، تأثیر شعاع لوله نانوتورس بر روی موقعیت تعادل مولکول باکی‌بال در شکل ۴ مورد بررسی قرار گرفته است. بر طبق شکل، به ازای $b \leq 7/06 \text{ \AA}$ موقعیت تعادل باکی‌بال دقیقاً بر روی محور نانوتورس قرار می‌گیرد ($\epsilon = 0$) و به ازای $b > 7/06 \text{ \AA}$ موقعیت تعادل باکی‌بال به صورت تقریباً خطی افزایش می‌یابد.

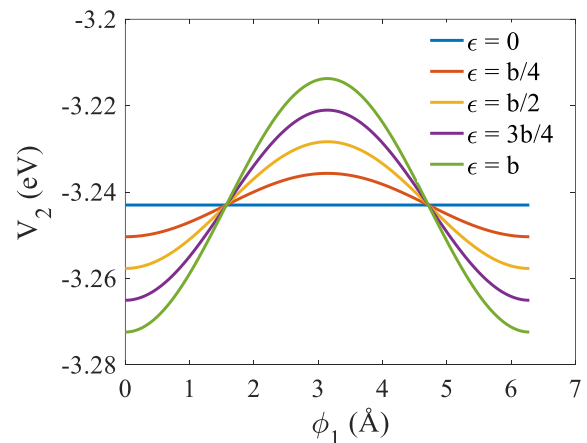
با فرض $b = 10/856 \text{ \AA}$ ، تأثیر شعاع حلقه نانوتورس بر روی موقعیت تعادل مولکول باکی‌بال در شکل ۵ مورد ارزیابی قرار گرفته است. با مقایسه شکل‌های ۴ و ۵ می‌توان نتیجه گرفت که وابستگی موقعیت تعادل باکی‌بال به شعاع حلقه نانوتورس در مقایسه با شعاع لوله نانوتورس بسیار کمتر است. با توجه به شکل ۵ مشاهده می‌شود که موقعیت تعادل مولکول باکی‌بال با افزایش شعاع حلقه نانوتورس به تدریج افزایش می‌یابد و به ازای $c \geq 800 \text{ \AA}$ ، به مقدار ثابت $4/308 \text{ \AA}$ میل می‌کند. همان‌طور که پیش‌تر ذکر شد، نانوتورس‌ها مولکول‌های حلقوی شکل هستند که از به هم پیوستن دو انتهای نانولوله‌ها به یکدیگر ایجاد می‌شوند. از آنجایی که طول اولیه نانولوله را می‌توان معادل با محیط نانوتورسی به شعاع حلقه c در نظر گرفت، در نتیجه نانوتورس با شعاع حلقه بسیار بزرگ معادل است با نانولوله‌ای به طول بی‌نهایت. در این صورت، موقعیت تعادل مولکول باکی‌بال داخل نانوتورس با موقعیت تعادل آن داخل نانولوله طویل کاملاً مطابقت خواهد داشت (مطابق با شکل ۳). همچنین، کاکس و همکاران [۵۰] نشان دادند برای تعیین موقعیت تعادل باکی‌بال داخل نانولوله، طول نانولوله باید به سمت بی‌نهایت میل کند که در این صورت، موقعیت تعادل باکی‌بال فقط تابع شعاع نانولوله یا شعاع لوله نانوتورس خواهد شد (مطابق با شکل ۴).



شکل (۷): انرژی مکش مولکول باکی‌بال برحسب شعاع نانولوله [۵۱].

بر طبق شکل ۶، مقدار انرژی پتانسیل گریز از مرکز به ازای $\epsilon = 0$ ، ثابت و برابر با $3/243 \text{ eV}$ است که این مقدار دقیقاً برابر با بیشینه انرژی مکش باکی‌بال داخل نانوتورس است. این در حالی است که به ازای سایر مقادیر ϵ ، انرژی پتانسیل گریز از مرکز به مقدار زاویه انحراف وابسته می‌باشد. با توجه به رابطه V_2 ، مقدار کمینه انرژی پتانسیل گریز از مرکز به ازای $\phi_1 = 0$ و $\phi_1 = 2\pi$ و مقدار بیشینه آن به ازای $\phi_1 = \pi$ اتفاق می‌افتد. همچنین، در یک زاویه انحراف مشخص، مقدار انرژی پتانسیل گریز از مرکز با افزایش موقعیت انحراف مولکول باکی‌بال، افزایش می‌یابد. در شکل ۸، انرژی پتانسیل گرانشی برحسب زاویه انحراف و به ازای موقعیت‌های انحراف مختلف مولکول باکی‌بال نشان داده شده است. مشابه با شکل ۶، شعاع لوله و شعاع حلقه نانوتورس به ترتیب برابر با $6/784 \text{ \AA}$ و 1500 \AA است. طبق بخش ۳، انرژی پتانسیل گرانشی از رابطه $-mgh$ به دست می‌آید که در آن $h = \epsilon \sin \phi_1$ است. همان‌طور که انتظار می‌رود انرژی پتانسیل گرانشی به ازای $\epsilon = 0$ برابر با صفر است و به ازای سایر مقادیر ϵ ، به مقدار زاویه انحراف بستگی دارد به طوری که به ازای $\phi_1 = \frac{\pi}{2}$ انرژی پتانسیل گرانشی کمینه و به ازای $\phi_1 = \frac{3\pi}{2}$ انرژی پتانسیل گرانشی بیشینه می‌شود. همچنین مشاهده می‌شود که انرژی پتانسیل گرانشی با افزایش موقعیت انحراف مولکول باکی‌بال افزایش می‌یابد. با مقایسه شکل‌های ۳، ۶ و ۸ نیز می‌توان نتیجه گرفت که انرژی پتانسیل گرانشی در مقایسه با انرژی پتانسیل

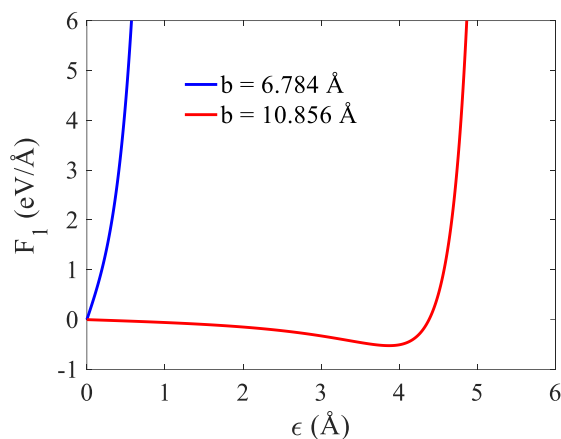
انرژی مکش مولکول باکی‌بال داخل نانوتورس را محاسبه می‌کنیم که این انرژی دقیقاً معادل با انرژی مکش (تغییرات انرژی جنبشی) باکی‌بال داخل نانولوله طویل است. اگر انرژی مکش مثبت باشد، یعنی شرایط برای مکش هسته داخلی توسط غلاف خارجی مساعد است. در واقع، به‌منظور ایجاد نانونوسانگر باکی‌بال - نانوتورس ابتدا فرض می‌کنیم که مولکول باکی‌بال تحت نیروی جاذبه واندروالس به داخل نانولوله مکیده می‌شود و سپس با بستن دو سر نانولوله به یکدیگر، هسته داخلی درون نانوتورس حاصله حرکت چرخشی خواهد داشت.



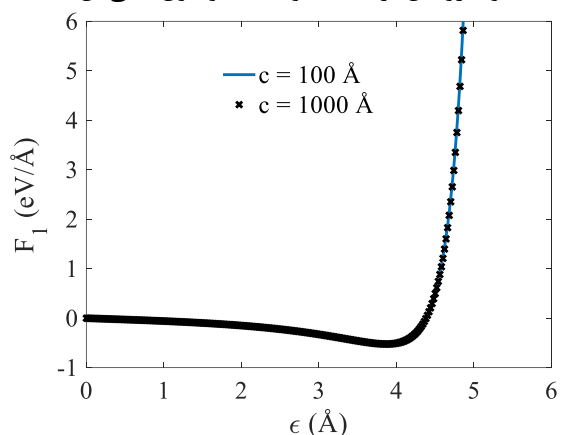
شکل (۶): انرژی پتانسیل گریز از مرکز برحسب زاویه انحراف و به ازای موقعیت‌های مختلف مولکول باکی‌بال.

با استفاده از مرجع [۵۱]، نمودار تغییرات انرژی مکش باکی‌بال برحسب شعاع نانولوله در شکل ۷ ترسیم شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، انرژی مکش وابستگی زیادی به شعاع نانولوله دارد و به ازای یک شعاع مشخص، انرژی مکش به بیشینه مقدار خود می‌رسد (W^*). با استفاده از این انرژی و قانون پایستگی انرژی مکانیکی، سرعت اولیه باکی‌بال از رابطه $V_0 = \sqrt{\frac{2W^*}{m}}$ محاسبه می‌شود (پیوست ب). با استفاده از مقادیر عددی شکل ۷، بیشترین مقدار انرژی مکش $3/243 \text{ eV}$ به دست می‌آید و لذا سرعت اولیه و سرعت زاویه باکی‌بال به ترتیب برابر با $932/082 \text{ m/s}$ و $6/239 \times 10^9 \text{ rad/s}$ خواهند بود.

شعاع لوله نانوتورس تأثیر بسیار کمی بر روی نیروی واندروالس دارد به طوری که با ۱۰ برابر کردن شعاع حلقه نانوتورس، نیروی واندروالس ثابت می ماند.



شکل (۹): تأثیر شعاع لوله نانوتورس بر توزیع نیروی واندروالس بر حسب موقعیت مولکول باکی بال.

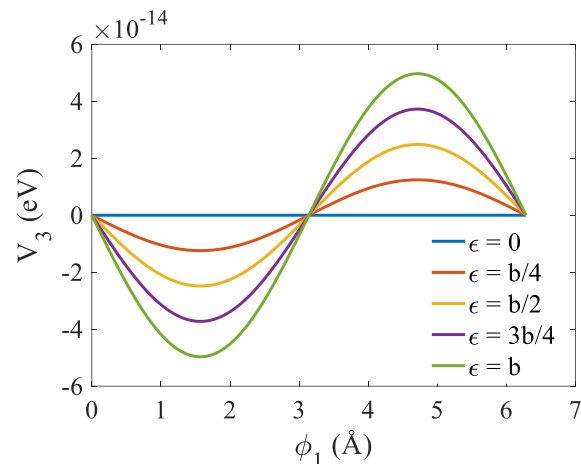


شکل (۱۰): تأثیر شعاع حلقه نانوتورس بر توزیع نیروی واندروالس بر حسب موقعیت مولکول باکی بال.

در ادامه، رابطه‌ای به منظور محاسبه سرعت زاویه‌ای مولکول باکی بال داخل نانوتورس ارائه می شود که با استفاده از آن می توان فرکانس نانوسانگر را به دست آورد. همان طور که پیش تر شرح داده شد، انرژی پتانسیل گرانشی در مقایسه با انرژی های پتانسیل واندروالس و گریز از مرکز قابل اغماض است و لذا مولکول باکی بال به دلیل انرژی پتانسیل گریز از مرکز در $\phi_1 = 0$ قرار می گیرد و در نتیجه: $R_1 = c + \epsilon$. بر این اساس، معادله حرکت سیستم طبق رابطه (۸) به صورت زیر ساده می شود:

$$\frac{\partial V_1}{\partial R_1} = mR_1\omega^2 \quad (34)$$

واندروالس و انرژی پتانسیل گریز از مرکز بسیار ناچیز بوده و قابل صرف نظر کردن است.

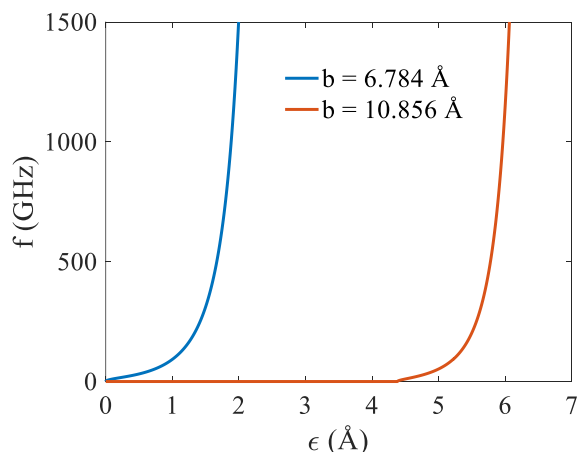


شکل (۸): انرژی پتانسیل گرانشی بر حسب زاویه انحراف و به ازای موقعیت های مختلف مولکول باکی بال.

در شکل ۹، تأثیر شعاع لوله نانوتورس بر توزیع نیروی واندروالس بر حسب موقعیت انحراف باکی بال بررسی شده است. در این شکل، نانوتورس هایی با شعاع لوله متناظر با نانولوله های (۱۰ و ۱۰) و (۱۶ و ۱۶) در نظر گرفته شده اند که شعاع حلقه آن ها برابر با 1500 \AA است. همان طور که نشان داده شده است، برای نانولوله (۱۰ و ۱۰)، نیروی جاذبه واندروالس با افزایش موقعیت انحراف باکی بال افزایش می یابد و مقدار کمینه نیروی واندروالس بر روی محور نانوتورس و به ازای $\epsilon = 0$ رخ می دهد. در حالی که برای نانولوله (۱۶ و ۱۶)، نیروی واندروالس با افزایش موقعیت انحراف مولکول باکی بال به تدریج کاهش می یابد به طوری که در $\epsilon = 3/88 \text{ \AA}$ ، به مقدار کمینه خود می رسد و سپس با فاصله گرفتن بیشتر مولکول باکی بال از محور نانوتورس، مقدار نیروی واندروالس افزایش می یابد. همچنین، برای نانولوله (۱۶ و ۱۶)، نیروی واندروالس وابسته به موقعیت مولکول باکی بال می تواند از نوع جاذبه یا دافعه باشد.

در شکل ۱۰، تأثیر شعاع حلقه نانوتورس بر توزیع نیروی واندروالس بر حسب موقعیت انحراف مولکول باکی بال بررسی شده است. در این شکل، نانوتورس هایی با شعاع حلقه 1000 \AA و 100 \AA در نظر گرفته شده اند که شعاع لوله آن ها برابر با $10/856 \text{ \AA}$ است. با مقایسه شکل های ۹ و ۱۰ می توان نتیجه گرفت که شعاع حلقه نانوتورس در مقایسه با

در شکل ۱۲، فرکانس نانوسانگر برحسب موقعیت انحراف باکی‌بال و به ازای مقادیر مختلفی از شعاع حلقه نانوتورس محاسبه شده است و شعاع لوله نانوتورس $10/856 \text{ \AA}$ است. همان‌طور که در شکل ۵ نشان داده شد، شعاع حلقه نانوتورس تأثیر اندکی بر موقعیت تعادل باکی‌بال دارد. لذا، به ازای شعاع‌های حلقه در نظر گرفته شده در شکل ۱۲، موقعیت تعادل مولکول باکی‌بال را می‌توان تقریباً ثابت در نظر گرفت که فرکانس سیستم تا این نقطه برابر با صفر است. در یک موقعیت انحراف مشخص که مقدار آن بیشتر از موقعیت تعادل باکی‌بال است، مشاهده می‌شود که فرکانس نوسانات سیستم با افزایش شعاع حلقه نانوتورس کاهش می‌یابد؛ زیرا افزایش شعاع حلقه نانوتورس منجر به افزایش مسافت طی شده توسط مولکول باکی‌بال در هر دور چرخش داخل نانوتورس می‌شود و لذا دوره تناوب سیستم افزایش و به دنبال آن، فرکانس نانوسانگر کاهش می‌یابد. به‌عنوان مثال، به ازای $\epsilon = 5 \text{ \AA}$ ، فرکانس نانوسانگر متناظر با شعاع حلقه 50 \AA ، برابر با 280 GHz است و اگر شعاع حلقه نانوتورس 10 برابر شود، فرکانس نانو نوسانگر $67/71\%$ کاهش می‌یابد.



شکل (۱۱): تأثیر شعاع لوله نانوتورس بر فرکانس نانوسانگر باکی‌بال-نانوتورس.

۶- نتیجه‌گیری

در این مقاله، یک مدل پیوسته برای تحلیل رفتار دینامیکی نانوسانگر باکی‌بال-نانوتورس کربنی ارائه شد. با استفاده از رهیافت تقریب پیوسته بر مبنای تابع پتانسیل لنارد-جونز،

از آنجایی که $F_1(\epsilon) = \frac{\partial V_1}{\partial R_1}$ خواهیم داشت:

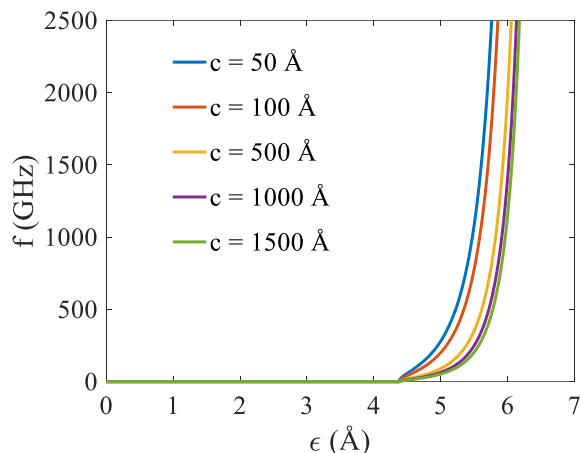
$$\omega = \sqrt{\frac{F_1(\epsilon)}{m(c + \epsilon)}} \quad (35)$$

در نتیجه، فرکانس نانوسانگر باکی‌بال-نانوتورس به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$f = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{F_1(\epsilon)}{m(c + \epsilon)}} \quad (36)$$

در شکل ۱۱، فرکانس نانوسانگر برحسب موقعیت انحراف باکی‌بال و به ازای مقادیر مختلفی از شعاع لوله نانوتورس نشان داده شده است. در این شکل، نانوتورس‌هایی با شعاع لوله متناظر با نانولوله‌های (۱۰ و ۱۰) و (۱۶ و ۱۶) در نظر گرفته شده‌اند که شعاع حلقه آن‌ها برابر با 1500 \AA است. با توجه به نتایج ارائه شده در شکل ۳، برای نانوتورسی با شعاع لوله $6/784 \text{ \AA}$ باکی‌بال روی محور نانوتورس به تعادل می‌رسد و برای نانوتورسی با شعاع لوله $10/856 \text{ \AA}$ ، موقعیت تعادل باکی‌بال در فاصله $4/308 \text{ \AA}$ از محور نانوتورس اتفاق می‌افتد. با مقایسه شکل‌های ۳ و ۱۱ می‌توان نتیجه گرفت که باکی‌بال به صورت خودکار و بدون هیچ سرعت زاویه اعمالی به سمت موقعیت تعادل خود حرکت می‌کند. در نتیجه، هیچ سرعت زاویه‌ای و فرکانسی تا موقعیت تعادل سیستم وجود ندارد، اما به منظور حرکت دادن مولکول باکی‌بال از موقعیت تعادل خود، به سرعت زاویه‌ای نیاز داریم. مثلاً، برای نانوتورسی با شعاع لوله $10/856 \text{ \AA}$ ، اگر باکی‌بال $0/5 \text{ \AA}$ از موقعیت تعادل خود فاصله بگیرد یا به همین اندازه به دیواره لوله نانوتورس نزدیک شود، فرکانس نوسانات آن مطابق با شکل ۱۱ برابر با $28/38 \text{ GHz}$ خواهد بود. همان‌طور که در این شکل نشان داده شده است، هر چه قدر مولکول باکی‌بال از موقعیت تعادل خود فاصله بگیرد و به دیواره لوله نانوتورس نزدیک‌تر شود، فرکانس نوسانات آن داخل نانوتورس افزایش خواهد یافت. نتایج حاصله گواه این مطلب است که نانوسانگر باکی‌بال-نانوتورس توانایی تولید فرکانس‌هایی تا محدوده 1500 GHz را دارد که این فرکانس‌ها به مراتب بیشتر از فرکانس تولیدی توسط نانوسانگر باکی‌بال-نانولوله است [۵۰].

همچنین، فرکانس این نوسانگرها چندین برابر فرکانس نوسانگر باکی‌بال-نانولوله کربنی است.



شکل (۱۲): تأثیر شعاع حلقه نانوتورس بر فرکانس نانوونسانگر باکی‌بال-نانوتورس.

۷- پیوست الف

برای حل انتگرال رابطه (۲۶) از تغییر متغیر $u = \sin^2 \psi$ استفاده می‌کنیم. بنابراین:

$$G_i^{(n)} = 2 \binom{n-1}{i-1} \int_0^1 u^{n-i-\frac{1}{2}} (1-u)^{i-\frac{3}{2}} du \quad (\text{الف-۱})$$

با توجه به تعریف تابع بتا خواهیم داشت:

$$G_i^{(n)} = 2 \binom{n-1}{i-1} B\left(n-i+\frac{1}{2}, i-\frac{1}{2}\right) \quad (\text{الف-۲})$$

با استفاده از رابطه بین تابع بتا و گاما، رابطه قبل به صورت زیر بازنویسی می‌شود:

$$G_i^{(n)} = 2 \binom{n-1}{i-1} \frac{\Gamma\left(n-i+\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(i-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(n)} \quad (\text{الف-۳})$$

پس از عملیات جبری خواهیم داشت:

$$G_i^{(n)} = 2 \frac{\Gamma\left(n-i+\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(i-\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(n-i+1)\Gamma(i)} \quad (\text{الف-۴})$$

با توجه به روابط $\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$ و $\Gamma(n) = (n-1)!$ مقادیر عددی $G_i^{(n)}$ به دست می‌آیند.

پس از جایگذاری مقادیر n داریم:

$$G_i^{(n)} = \pi g_i^{(n)} \quad (\text{الف-۵})$$

که در آن

روابطی نیمه‌تحلیلی جدیدی برای تعیین برهمکنش‌های واندروالسی بین مولکول باکی‌بال و نانوتورس به دست آمد. با استفاده از قانون دوم نیوتن، معادلات حرکت چرخشی باکی‌بال داخل نانوتورس استخراج گردید و به کمک آن‌ها، رابطه‌ای جدید برای تعیین فرکانس نانوونسانگر بر اساس پارامترهای هندسی و شرایط اولیه سیستم معرفی شد. تأثیر پارامترهای مختلف سیستم بر روی انرژی‌های واندروالسی، گریز از مرکز و جاذبه و نیز موقعیت تعادل باکی‌بال و فرکانس حاصل از چرخش آن داخل نانوتورس کربنی به‌طور جامع مورد بررسی قرار گرفت. با توجه به نتایج عددی، مهم‌ترین یافته‌های پژوهش حاضر به‌صورت زیر خلاصه می‌شوند:

- انرژی پتانسیل گرانشی در مقایسه با انرژی‌های پتانسیل گریز از مرکز و واندروالسی قابل‌اغماض است.
- برای نانوتورس‌هایی با شعاع حلقه بزرگ، موقعیت تعادل باکی‌بال به ازای $b \leq 71.06 \text{ \AA}$ دقیقاً بر روی محور نانوتورس قرار می‌گیرد و به ازای $71.06 \text{ \AA} < b$ به‌صورت تقریباً خطی افزایش می‌یابد.
- برای نانوتورس با شعاع لوله (۱۶ و ۱۶)، موقعیت تعادل باکی‌بال با افزایش شعاع حلقه نانوتورس به تدریج افزایش می‌یابد و به ازای $c \geq 800 \text{ \AA}$ به مقدار ثابت $4/308 \text{ \AA}$ میل می‌کند.
- تا قبل از رسیدن باکی‌بال به نقطه تعادل خود، فرکانس تولیدی برابر با صفر است و با افزایش فاصله آن از نقطه تعادل و نزدیک‌تر شدن به دیواره لوله نانوتورس، فرکانس به‌صورت نمایی افزایش می‌یابد.
- با افزایش شعاع حلقه نانوتورس، فرکانس نوسانگر، به دلیل افزایش مسافت طی‌شده توسط باکی‌بال در هر سیکل، کاهش می‌یابد. همچنین، با نزدیک‌تر شدن شعاع حلقه به بی‌نهایت، میزان حساسیت فرکانس سیستم به شعاع حلقه کاهش می‌یابد و تقریباً ثابت می‌ماند.
- نوسانگر باکی‌بال-نانوتورس توانایی ایجاد فرکانس‌هایی تا محدوده ۱۵۰۰ گیگاهرتز را دارد.

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}mV_{-\infty}^2 + E^{(tot)}(-\infty) \\ = \frac{1}{2}mV_{\infty}^2 + E^{(tot)}(\infty) \end{aligned} \quad (\text{ب-۲})$$

که در آن، m معرف جرم هسته داخلی است. رابطه اخیر با استفاده از تعریف انرژی مکش به صورت زیر بازنویسی می‌شود:

$$W = \frac{1}{2}mV_{\infty}^2 - \frac{1}{2}mV_{-\infty}^2 = \Delta K \quad (\text{ب-۳})$$

در این رابطه، ΔK تغییرات انرژی جنبشی سیستم است. در نتیجه، انرژی مکش را می‌توان به صورت تغییرات انرژی جنبشی سیستم در طی حرکت هسته داخلی از $Z = -\infty$ به $Z = \infty$ تعریف کرد. همچنین، اگر فرض شود هسته داخلی بدون سرعت اولیه باشد، آنگاه میزان افزایش سرعت آن به صورت زیر به دست می‌آید:

$$V_{\infty} = \sqrt{\frac{2W}{m}} \quad (\text{ب-۴})$$

طبق مرجع [۵۱]، انرژی مکش مولکول باکی‌بال داخل نانولوله کربنی طویل از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$W = -\pi G_1 \quad (\text{ب-۵})$$

که ثابت G_1 عبارت است از:

$$\begin{aligned} G_1 = & \frac{3}{8}\mu_3 + \frac{5}{16}\mu_4 + \frac{63}{256}\mu_6 \\ & + \frac{231}{1024}\mu_7 + \frac{429}{2048}\mu_8 \\ & + \frac{6435}{32768}\mu_9 + \frac{12155}{65536}\mu_{10} \end{aligned} \quad (\text{ب-۶})$$

که در آن $\mu_i = \frac{C_i}{(R_C^2 - R_F^2)^{\frac{2i-1}{2}}}$ است و ثابت‌های C_i به شرح زیر هستند [۵۱]:

$$\begin{cases} C_3 = -4AK, & C_4 = 2R_F^2 C_3, \\ C_6 = 5K', & C_7 = 80R_F^2 K', \\ C_8 = 336R_F^4 K', & C_9 = 512R_F^6 K', \\ C_{10} = 256R_F^8 K', & K = 2\pi^2 R_C R_F^2 \eta_F \eta_C, \\ K' = \frac{4B}{5}K \end{cases} \quad (\text{ب-۷})$$

در رابطه قبل، A و B به ترتیب ثابت‌های جاذبه و دافعه بین باکی‌بال و نانولوله کربنی هستند و R_C ، R_F ، η_C و η_F به ترتیب بیانگر شعاع باکی‌بال، شعاع نانولوله، چگالی سطحی باکی‌بال و چگالی سطحی نانولوله کربنی هستند.

$$g_1^{(3)} = \frac{3}{4}, g_2^{(3)} = \frac{2}{4}, g_3^{(3)} = \frac{3}{4},$$

$$g_1^{(4)} = \frac{5}{8}, g_2^{(4)} = \frac{3}{8}, g_3^{(4)} = \frac{3}{8}, g_4^{(4)} = \frac{5}{8},$$

$$g_1^{(6)} = \frac{63}{128}, g_2^{(6)} = \frac{35}{128}, g_3^{(6)} = \frac{30}{128},$$

$$g_4^{(6)} = \frac{30}{128}, g_5^{(6)} = \frac{35}{128}, g_6^{(6)} = \frac{63}{128},$$

$$g_1^{(7)} = \frac{231}{512}, g_2^{(7)} = \frac{126}{512}, g_3^{(7)} = \frac{105}{512}, g_4^{(7)} = \frac{100}{512},$$

$$g_5^{(7)} = \frac{105}{512}, g_6^{(7)} = \frac{126}{512}, g_7^{(7)} = \frac{231}{512},$$

$$g_1^{(8)} = \frac{429}{1024}, g_2^{(8)} = \frac{231}{1024}, g_3^{(8)} = \frac{189}{1024},$$

$$g_4^{(8)} = \frac{175}{1024}, g_5^{(8)} = \frac{175}{1024}, g_6^{(8)} = \frac{189}{1024},$$

$$g_7^{(8)} = \frac{231}{1024}, g_8^{(8)} = \frac{429}{1024},$$

$$g_1^{(9)} = \frac{6435}{16384}, g_2^{(9)} = \frac{3432}{16384}, g_3^{(9)} = \frac{2772}{16384},$$

$$g_4^{(9)} = \frac{2520}{16384}, g_5^{(9)} = \frac{2450}{16384}, g_6^{(9)} = \frac{2520}{16384},$$

$$g_7^{(9)} = \frac{2772}{16384}, g_8^{(9)} = \frac{3432}{16384}, g_9^{(9)} = \frac{6435}{16384},$$

$$g_1^{(10)} = \frac{12155}{32768}, g_2^{(10)} = \frac{6435}{32768}, g_3^{(10)} = \frac{5148}{32768},$$

$$g_4^{(10)} = \frac{4620}{32768}, g_5^{(10)} = \frac{4410}{32768}, g_6^{(10)} = \frac{4410}{32768},$$

$$g_7^{(10)} = \frac{4620}{32768}, g_8^{(10)} = \frac{5148}{32768}, g_9^{(10)} = \frac{6435}{32768},$$

$$g_{10}^{(10)} = \frac{12155}{32768}$$

۸- پیوست ب

انرژی مکش عبارت است از کار انجام‌شده توسط نیروی واندروالس بین دو نانوساختار برای انتقال هسته داخلی از $Z = -\infty$ به $Z = \infty$. این انرژی با W نشان داده می‌شود و تعریف آن چنین است [۳۳]:

$$W = \int_{-\infty}^{\infty} F_z^{(tot)}(Z) dZ \quad (\text{ب-۱})$$

$$= E^{(tot)}(-\infty) - E^{(tot)}(\infty)$$

اگر هسته داخلی در $Z = -\infty$ و $Z = \infty$ به ترتیب دارای سرعت‌های $V_{-\infty}$ و V_{∞} باشد، آنگاه با استفاده از اصل پایستگی انرژی مکانیکی می‌توان نوشت:

[3] Aftab S, Iqbal MZ, Rim YS. Recent advances in rolling 2D TMDs nanosheets into 1D TMDs nanotubes/nanoscrolls. *Small*. 2023;19(1):2205418. DOI: <https://doi.org/10.1002/sml.202205418>.

[4] Shoukat R, Khan MI. Carbon nanotubes: a review on properties, synthesis methods and applications in micro and nanotechnology. *Microsystem Technologies*. 2021;27:4183. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00542-021-05211-6>.

[5] Huang K, Xu Q, Ying Q, Gu B, Yuan W. Wireless strain sensing using carbon nanotube composite film. *Composites Part B: Engineering*. 2023;256:110650. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2023.110650>.

[6] Dieny B, Prejbeanu IL, Garello K, Gambardella P, Freitas P, Lehndorff R, Raberg W, Ebels U, Demokritov SO, Akerman J, Deac A. Opportunities and challenges for spintronics in the microelectronics industry. *Nature Electronics*. 2020;3(8):446. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41928-020-0461-5>.

[7] Al Misba W, Mavikumbure HS, Rajib MM, Marino DL, Cobilean V, Manic M, Atulasimha J. Spintronic physical reservoir for autonomous prediction and long-term household energy load forecasting. *IEEE Access*. 2023;11:124725. DOI: <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2023.3326414>.

[8] Fiorelli R, Peralías E, Méndez-Romero R, Rajabali M, Kumar A, Zahedinejad M, Åkerman J, Moradi F, Serrano-Gotarredona T, Linares-Barranco B. CMOS front end for interfacing spin-hall nano-oscillators for neuromorphic computing in the GHz Range. *Electronics*. 2023;12(1):230. DOI: <https://doi.org/10.3390/electronics12010230>.

[9] Wittrock S, Perna S, Lebrun R, Ho K, Dutra R, Ferreira R, Bortolotti P, Serpico C, Cros V. Non-hermiticity in spintronics: oscillation death in coupled spintronic nano-oscillators through emerging exceptional points. *Nature Communications*. 2024;15(1):971. DOI: <https://doi.org/10.5281/zenodo.10058698>.

[10] Leroux N, De Riz A, Sanz-Hernández D, Marković D, Mizrahi A, Grollier J. Convolutional neural networks with radio-frequency spintronic nano-devices. *Neuromorphic Computing and Engineering*. 2022;2(3):034002. DOI: <https://doi.org/10.1088/2634-4386/ac77b2>.

[11] Pontin A, Bullier NP, Toroš M, Barker PF. Ultranarrow-linewidth levitated nano-oscillator

۹- فهرست علائم

شعاع باکی‌بال	a
ثابت جاذبه	A
شعاع لوله نانوتورس	b
ثابت دافعه	B
شعاع حلقه نانوتورس	c
فرکانس	f
نیروی واندروالس	F_1
نیروی گریز از مرکز	F_2
نیروی گرانش	F_3
جرم مولکول باکی‌بال	m
تابع پتانسیل لنارد-جونز	v
انرژی پتانسیل کل	V
انرژی پتانسیل واندروالس	V_1
انرژی پتانسیل گریز از مرکز	V_2
انرژی پتانسیل گرانشی	V_3
انرژی مکش	W
بیشینه انرژی مکش	W^*
موقعیت انحراف مولکول باکی‌بال	ϵ
موقعیت تعادل مولکول باکی‌بال	ϵ^*
چگالی سطحی باکی‌بال	η_b
چگالی سطحی نانوتورس	η_t
فاصله تعادل بین هر جفت از اتم‌ها	ρ_0
ز و فاصله بین دو اتم	ρ_{ij}
زاویه انحراف	ϕ_1
سرعت زاویه‌ای	ω

۱۰- مراجع

[1] Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*. 1991;354(6348):56. DOI: <https://doi.org/10.1038/354056a0>.

[2] Ajori S, Sadeghi F. A Molecular dynamics study on the buckling analysis of functionalized graphene with nylon 6, 6 in aqueous environment. *Journal of Aerospace Mechanics*. 2023;19(4):1-10. DOI: <https://dor.isc.ac/dor/20.1001.1.26455323.1402.19.4.1.2>.

- [20] Legoas SB, Coluci VR, Braga SF, Coura PZ, Dantas SO, Galvao DS. Molecular-dynamics simulations of carbon nanotubes as gigahertz oscillators. *Physical Review Letters*. 2003;90(5):055504. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.055504>.
- [21] Liu P, Zhang Y, Lu C. Oscillatory behavior of C60-nanotube oscillators: a molecular-dynamics study. *Journal of Applied Physics*. 2005;97(9):094313. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.1890451>.
- [22] Vaezi M. Programmable oscillation of C60 inside carbon nanotubes subjected to strain gradient. *Journal of Applied Physics*. 2023;134(23):234301. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0180180>.
- [23] Ansari R, Sadeghi F, Motevalli B. A comprehensive study on the oscillation frequency of spherical fullerenes in carbon nanotubes under different system parameters. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2013;18(3):769. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cnsns.2012.08.011>.
- [24] Girifalco LA, Hodak M, Lee RS. Carbon nanotubes, buckyballs, ropes, and a universal graphitic potential. *Physical Review B*. 2000;62(19):13104. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.62.13104>.
- [25] Bubenchikov AM, Bubenchikov MA, Mamontov DV, Chelnokova AS, Chumakova SP. Movement of fullerenes and their dimers inside carbon nanotubes. *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*. 2021;29(10):803. DOI: <https://doi.org/10.1080/1536383X.2021.1900122>.
- [26] Qian D, Liu WK, Ruoff RS. Mechanics of C60 in nanotubes. *The Journal of Physical Chemistry B*. 2001;105(44):10753. DOI: <https://doi.org/10.1021/jp0120108>.
- [27] Hodak M, Girifalco LA. Fullerenes inside carbon nanotubes and multi-walled carbon nanotubes: optimum and maximum sizes. *Chemical Physics Letters*. 2001;350(5-6):405. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(01\)01339-2](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(01)01339-2).
- [28] Ansari R, Sadeghi F, Ajori S. Continuum and molecular dynamics study of C60 fullerene-carbon nanotube oscillators. *Mechanics Research Communications*. 2013;47:18.
- for testing dissipative wave-function collapse. *Physical Review Research*. 2020;2(2):023349. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.023349>.
- [12] Merneedi A, Natrayan L, Kaliappan S, Veeman D, Angalaeswari S, Srinivas C, Paramasivam P. Experimental investigation on mechanical properties of carbon nanotube-reinforced epoxy composites for automobile application. *Journal of Nanomaterials*. 2021;2021(1):4937059. DOI: <https://doi.org/10.1155/2021/4937059>.
- [13] Zhang X, Lu W, Zhou G, Li Q. Understanding the mechanical and conductive properties of carbon nanotube fibers for smart electronics. *Advanced Materials*. 2020;32(5):1902028. DOI: <https://doi.org/10.1002/adma.201902028>.
- [14] Imanassra IW, Manasrah AD, Al-Mubaiyedh UA, Al-Ansari T, Malaibari ZO, Atieh MA. An experimental study on stability and thermal conductivity of water/CNTs nanofluids using different surfactants: A comparison study. *Journal of Molecular Liquids*. 2020;304:111025. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2019.111025>.
- [15] Yu MF, Lourie O, Dyer MJ, Moloni K, Kelly TF, Ruoff RS. Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load. *Science*. 2000;287(5453):637. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.287.5453.637>.
- [16] Cumings J, Zettl A. Low-friction nanoscale linear bearing realized from multiwall carbon nanotubes. *Science*. 2000;289(5479):602. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.289.5479.602>.
- [17] Zheng Q, Jiang Q. Multiwalled carbon nanotubes as gigahertz oscillators. *Physical Review Letters*. 2002;88(4):045503. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.88.045503>.
- [18] Ajori S, Ansari R, Sadeghi F. Molecular dynamics study of gigahertz nanomechanical oscillators based on an ion inside a series of electrically charged carbon nanotubes. *European Journal of Mechanics-A/Solids*. 2018;69:45. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2017.12.001>.
- [19] Liu R, Zhao Y, Sui C, Sang Y, Hao W, Li J, Wu J, He X, Wang C. Molecular dynamics simulations of Carbyne/Carbon nanotube gigahertz oscillators. *Computational Materials Science*. 2023;222:112105. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2023.112105>.

- [37] Sano M, Kamino A, Okamura J, Shinkai S. Ring closure of carbon nanotubes. *Science*. 2001;293(5533):1299. DOI: <https://doi.org/10.1126/science.1061050>.
- [38] Sarapat P, Hill JM, Baowan D. A review of geometry, construction and modelling for carbon nanotube. *Applied Sciences*. 2019;9(11):2301. DOI: <https://doi.org/10.3390/app9112301>.
- [39] Yasri S, Wiwanitkit V. Carbon nanotubes for advanced therapeutic applications. *Carbon Nanostructures in Biomedical Applications*. Cham: Springer International Publishing. 2023;123. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-031-28263-8_5.
- [40] Naseh MF, Ansari JR, Alam MS, Javed MN. Sustainable nanotubes for biosensing and therapeutic applications. *Handbook of Green and Sustainable Nanotechnology: Fundamentals, Developments and Applications*. Cham: Springer International Publishing. 2023;1985. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-031-16101-8_47.
- [41] Martel R, Shea HR, Avouris P. Rings of single-walled carbon nanotubes. *Nature*. 1999;398(6725):299. DOI: <https://doi.org/10.1038/18589>.
- [42] Martel R, Shea HR, Avouris P. Ring formation in single-wall carbon nanotubes. *The Journal of Physical Chemistry B*. 1999;103(36):7551. DOI: <https://doi.org/10.1021/jp991513z>.
- [43] Huhtala M, Kuronen A, Kaski K. Computational studies of carbon nanotube structures. *Computer Physics Communications*. 2002;147(1-2):91. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0010-4655\(02\)00223-0](https://doi.org/10.1016/S0010-4655(02)00223-0).
- [44] Han J, Chancellor MK. Toroidal single wall carbon nanotubes in fullerene crop circles. 1997;NAS-97-015.
- [45] Ansari R, Sadeghi F, Ajori S. Oscillation characteristics of carbon nanotube molecules along carbon nanotubes under various system parameters. *European Journal of Mechanics-A/Solids*. 2017;62:67. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2016.11.004>.
- [46] Hosseinzadeh M, Sadeghi F, Ansari R. Perfect position and oscillation frequency of nanosectors orbiting inside carbon nanotube. *Computations and Simulations in Mechanical Science*. 2018;1(1):42.
- [47] Ajori S, Sadeghi F. Design of high-frequency carbon nanotube-carbon nanotube oscillators for energy harvesting: A molecular dynamics study. *Langmuir*. 2024;40(9):4811. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.3c03702>.
- DOI:** <https://doi.org/10.1016/j.mechrescom.2012.11.002>.
- [29] Ansari R, Gholami R. Dynamic stability analysis of multi-walled carbon nanotubes with arbitrary boundary conditions based on the nonlocal elasticity theory. *Mechanics of Advanced Materials and Structures*. 2017;24(14):1180-1188. DOI: <https://doi.org/10.1080/15376494.2016.1227489>.
- [30] Ansari R, Gholami R, Sahmani S, Norouzzadeh A, Bazdid-Vahdati M. Dynamic stability analysis of embedded multi-walled carbon nanotubes in thermal environment. *Acta Mechanica Sinica*. 2015;28(6):659-667. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0894-9166\(16\)30007-6](https://doi.org/10.1016/S0894-9166(16)30007-6).
- [31] Ansari R, Gholami R, Rouhi H. Size-dependent nonlinear forced vibration analysis of magneto-electro-thermo-elastic Timoshenko nanobeams based upon the nonlocal elasticity theory. *Composite Structures*. 2015;126:216-226. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.compstruct.2015.02.008>.
- [32] Ansari R, Gholami R, Ajori S. Torsional vibration analysis of carbon nanotubes based on the strain gradient theory and molecular dynamic simulations. *Journal of Vibration and Acoustics*. 2013;135(5):051016. DOI: <https://doi.org/10.1115/1.4024208>.
- [33] Cox BJ, Thamwattana N, Hill JM. Mechanics of atoms and fullerenes in single-walled carbon nanotubes. I. Acceptance and suction energies. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2007;463(2078):461. DOI: <https://doi.org/10.1098/rspa.2006.1771>.
- [34] Sarapat P, Hill JM, Baowan D. A review of geometry, construction and modelling for carbon nanotube. *Applied Sciences*. 2019;9(11):2301. DOI: <https://doi.org/10.3390/app9112301>.
- [35] Taha-Tijerina J, Aviña K, Martínez JM, Arqueta-Guillén PY, González-Escobedo M. Carbon nanotube structures for thermal transport applications on lubricants. *Nanomaterials*. 2021;11(5):1158. DOI: <https://doi.org/10.3390/nano11051158>.
- [36] Taha-Tijerina JJ, Martínez JM, Euresi D, Arqueta-Guillén PY. Carbon nanotube reinforced lubricants in plastic deformation processes. *Lubricants*. 2022;10(5):74. DOI: <https://doi.org/10.3390/lubricants10050074>.

[48] Jones JE. On the determination of molecular fields.—I. From the variation of the viscosity of a gas with temperature. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character. 1924;106(738):441-462.

DOI: <https://doi.org/10.1098/rspa.1924.0081>.

[49] Liu J, Dai H, Hafner JH, Colbert DT, Smalley RE, Tans SJ, Dekker C. Fullerene 'crop circles'. Nature. 1997;385(6619):780.

DOI: <https://doi.org/10.1038/385780b0>.

[50] Cox BJ, Thamwattana N, Hill JM. Mechanics of atoms and fullerenes in single-walled carbon nanotubes. II. Oscillatory behaviour. Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. 2007;463(2078):477. **DOI:** <https://doi.org/10.1098/rspa.2006.1772>.

[51] Ansari R, Sadeghi F. Mechanics of nested spherical fullerenes inside multi-walled carbon nanotubes. European Journal of Mechanics-A/Solids. 2015;49:283. **DOI:**

<https://doi.org/10.1016/j.euromechsol.2014.08.003>.