



Numerical Study of the Mechanical Behavior of Carbon Nanotubes in Large Tensile and Compressive Deformations Based on a Reduced Structural Model

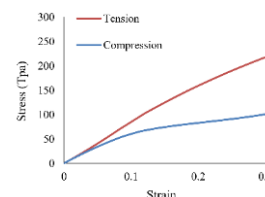
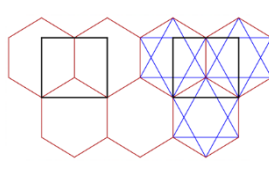
Ali Mohammad Naserian Nik^{*}

¹ Assistant Professor,, Quchan University of Technology, Quchan, Iran (*Correspondence: a.naserian@qiet.ac.ir)

HIGHLIGHTS

- Carbon nanotubes are modeled using a nonlinear elastic truss structure.
- A repeating unit in carbon nanotubes is identified and the stress-strain curve of the nanotube is extracted using it.
- A simple model for determining the mechanical behavior of carbon nanotubes is developed by integrating mechanical unit cell methods and numerical simulation.
- The method is capable to study large deformation of carbon nanotubes.

GRAPHICAL ABSTRACT



ARTICLE INFO

Article history:

Article Type: Research paper

Received: 18 September 2025

Received in revised form: 06 November 2025

Accepted: 26 November 2025

Available online: 22 December 2025

*Correspondence:

a.naserian@qiet.ac.ir

Keywords:

Carbon nanotube

Stress-strain curve

Mechanical properties

Numerical simulation

ABSTRACT

The mechanical behavior of nanomaterials, due to their very small dimensions, cannot be easily evaluated in experiments. Therefore, finding suitable and simple models to determine the mechanical properties of carbon nanotubes has always been of interest to researchers. In this paper, to investigate the mechanical behavior of carbon nanotubes, a spatial structure consisting of a unit cell was used. The mechanical unit cell is considered as a two-dimensional truss for the structure of the carbon nanotube wall. First, the carbon bonds in the nanotube is converted into a structural element and its properties is calculated. Then, by numerically simulating the structure in a finite element software, the stress-strain curves in tension and compression is extracted. The method presented in this article is a simple and novel method for obtaining the stress-strain curve of carbon nanotubes and other nanostructures. The results of presented in this article show that there is a good agreement with the results of other experimental and theoretical studies in this field.

Cite this article: Naserian Nik A. M[®]. Numerical Study of the Mechanical Behavior of Carbon Nanotubes in Large Tensile and Compressive Deformations Based on a Reduced Structural Model. Journal of Aerospace Mechanics. 2025; 21 (4): 17-26. DOI: <https://doi.org/10.47176/MAJ.2025.1521>

© Author(s) retain the copyright and full publishing rights

Publisher: Imam Hossein Comprehensive University.





مطالعه عددی رفتار مکانیکی نانولوله‌های کربنی در تغییر شکل‌های بزرگ کششی و فشاری بر اساس مدل کاهش‌یافته سازه‌ای

علی محمد ناصریان نیک^{۱*}

^۱ استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی قوچان، قوچان، ایران (نویسنده مسئول: a.naserian@qiet.ac.ir)

برجسته‌ها

- نانولوله کربنی با استفاده از یک سازه خریای کشسان غیرخطی مدل شده است.
- یک واحد تکرارشونده در نانولوله کربنی شناسایی و به کمک آن منحنی تنش-کرنش نانولوله استخراج شده است.
- با ادغام روش‌های سلول واحد مکانیکی و شبیه‌سازی عددی یک مدل ساده برای تعیین رفتار مکانیکی نانولوله کربنی ابداع شده است.
- روش ارائه شده امکان مطالعه تغییر شکل‌های بزرگ نانولوله کربنی، تحت بارگذاری مکانیکی، را فراهم آورده است.

مشخصات مقاله

تاریخچه مقاله:

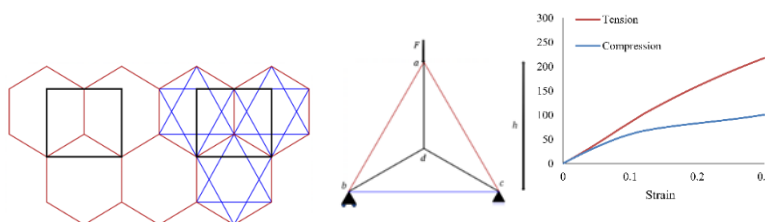
نوع مقاله: علمی پژوهشی
دریافت: ۲۷ شهریور ۱۴۰۴
بازنگری: ۱۵ آبان ۱۴۰۴
پذیرش: ۰۵ آذر ۱۴۰۴
ارائه آنلاین: ۰۱ دی ۱۴۰۴
نویسنده مسئول:

a.naserian@qiet.ac.ir

کلید واژه‌ها:

نانولوله کربنی
منحنی تنش-کرنش
خواص مکانیکی
شبیه‌سازی عددی

چکیده گرافیکی



چکیده

رفتار مکانیکی نانومواد، با توجه به ابعاد بسیار کوچک آنها، به سادگی در آزمایش‌ها قابل ارزیابی نیست. از این رو، یافتن مدل‌های مناسب و در عین حال ساده برای تعیین خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی همواره مورد توجه پژوهشگران بوده است. در این مقاله، با هدف بررسی رفتار مکانیکی نانولوله‌های کربنی، یک ساختار فضایی متشکل از یک سلول واحد به کار گرفته شده است. سلول واحد مکانیکی به صورت یک خریای دوبعدی برای ساختار دیواره نانولوله کربنی منظور شده است. ابتدا پیوندهای کربنی در نانولوله به یک المان سازه‌ای تبدیل و خواص آن محاسبه شده است. سپس با شبیه‌سازی عددی سازه در نرم‌افزار المان محدود، منحنی‌های تنش-کرنش در کشش و فشار استخراج شده و خواص مکانیکی نانولوله مورد بررسی قرار گرفته است. روش ارائه شده در این مقاله یک روش ساده و نوین برای به دست آوردن منحنی تنش-کرنش نانولوله کربنی و سایر نانو ساختارها است. بررسی نتایج مربوط به خواص مکانیکی نانولوله‌ها در این مقاله، نشان می‌دهد تطابق مناسبی با نتایج دیگر مطالعات تجربی و تئوری در این حوزه وجود دارد.

استناد: ناصریان نیک، علی محمد^۱. مطالعه عددی رفتار مکانیکی نانولوله‌های کربنی در تغییر شکل‌های بزرگ کششی و فشاری بر اساس مدل کاهش‌یافته سازه‌ای. مکانیک هوا فضا. (۱۴۰۴)؛ ۲۱ (۳): ۲۶-۱۷.

<https://doi.org/10.47176/MAJ.2025.1521>

© نویسنده(گان) حق نشر و حقوق کامل انتشار را برای خود محفوظ می‌دارند.

ناشر: دانشگاه جامع امام حسین (ع).



۱- مقدمه

نانولوله‌های کربنی یکی از معروف‌ترین دگرشکل‌های^۱ کربنی هستند. این نانوساختارهای جذاب در فعالیت‌های تحقیقاتی در سال ۱۹۹۳، به طور جداگانه، توسط ایچیمیا و ایچیهایشی [۱] و بتهونه و همکاران [۲] کشف شدند. نانولوله‌های کربنی می‌توانند رسانایی الکتریکی قابل توجهی داشته باشند [۳]. آن‌ها همچنین به علت نانوساختار بودن و استحکام بالای پیوندهای بین اتم‌های کربن، دارای مقاومت کششی [۴] و رسانش گرمایی بالایی [۵] هستند. انتظار می‌رود این خصوصیات در بسیاری از حوزه‌های فناوری مانند الکترونیک، نورشناسی، مواد کامپوزیت (جایگزین یا تکمیل‌کننده الیاف کربن) و سایر کاربردهای علم مواد با ارزش باشد.

برای اندازه‌گیری ضریب کشسانی نانولوله‌های کربنی، در غالب مطالعات تجربی، ابزارهایی همچون میکروسکوپ نیروی اتمی (AMF)، میکروسکوپ الکترونی انتقالی (TEM) و میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) مورد استفاده قرار گرفته است. ضریب کشسانی در این تحقیقات در محدوده ۱ تراپاسکال گزارش شده است [۹-۶].

از شبیه‌سازی عددی نیز، به عنوان راهکاری قدرتمند برای پیش‌بینی رفتار مکانیکی ساختارهای نانولوله کربنی استفاده می‌شود. در این شبیه‌سازی‌ها غالباً یکی از دو ابزار روش دینامیک مولکولی^۲ [۱۰-۱۶ و ۲۲-۲۴] یا روش مکانیک تحلیلی-محاسباتی [۲۰، ۲۱ و ۲۵-۳۱] به کار گرفته می‌شود. هرناندز و همکاران [۱۰] به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، وابستگی ضریب کشسانی نانولوله‌های کربنی را به قطر و دست‌سازنی^۳ آن‌ها اثبات کردند. ونشینگ و همکاران [۱۱] نیز با استفاده از این روش دریافته‌اند که نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره خاصیت بازگشت‌پذیری بالایی دارند و ضریب کشسانی آن‌ها در قطرهای بزرگ به قطرشان وابسته نیست. تالکدا و میترا [۱۲] رفتار مکانیکی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره و چنددیواره را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مقایسه کردند. آن‌ها نشان دادند که الگوهای شکست و رفتار کمانش در انواع مختلف نانولوله‌ها تفاوت‌های قابل توجهی دارند. رفتار کشسان و خمیری نانولوله‌های کربنی با و بدون نقص ساختاری توسط لئو و همکاران [۱۳] مورد بررسی قرار گرفت. شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی انجام شده مقدار تنش تسلیم را، وابسته به تعداد دیواره‌های نانولوله، ۱۳۰-۱۴۰ گیگاپاسکال، پیش‌بینی کرده است. ناتسوکی و همکاران [۱۴] نیز خواص کشسان نانولوله‌های کربنی را در ابعاد اتمی بررسی و مقدار تنش بیشینه را برای حالات زیگزاگ^۴ و آرمچر^۵، به ترتیب، ۷۰ و ۸۶ گیگاپاسکال گزارش کردند. بلیچکو و

همکاران [۱۷] به مطالعه رفتار شکست نانولوله‌های کربنی و نقش نقص‌ها در کاهش تنش شکست، با روش مکانیک مولکولی، پرداخته‌اند. این پژوهش ضمن اشاره به شکست ترد نانولوله‌های کربنی، کرنش و تنش شکست را برای نانولوله‌های زیگزاگ، به ترتیب، ۱۵-۱۰ درصد و ۹۳-۶۵ گیگاپاسکال محاسبه کرده است. رفتار مکانیکی هاپیرالاستیک نانولوله‌های کربنی تک‌جداره و چندجداره به کمک مکانیک تحلیلی مورد بررسی قرار گرفته است [۱۸]. در پژوهش مذکور، رفتار غیرخطی پیوندهای کربن-کربن در کرنش‌های بزرگ با استفاده از مدل‌های هاپیرالاستیک، مانند اوگدن^۶، مونی-ریولین^۷ و یئو^۸، ارزیابی و نشان داده شده است که مدل اوگدن مرتبه دوم می‌تواند رفتار هاپیرالاستیک پیوندهای کربن-کربن را با دقت توصیف کند. اخیراً یک مطالعه تفصیلی درباره پیشرفت‌های رخ داده در زمینه روش‌های مکانیک محاسباتی نانولوله‌های کربنی انجام شده است [۱۹]. جیانگ و همکاران [۲۰]، به کمک رهیافت مکانیک مولکولی، نشان دادند که انحنای نانولوله کربنی تأثیر کمی بر رفتار مکانیکی نانولوله‌های کربنی تک دیواره تحت کشش ساده یا پیچش خالص دارد، در حالی که جهت‌گیری نانولوله تأثیرات تا حدودی بیشتری دارد. در پژوهشی دیگر، با استفاده از مکانیک تحلیلی، نشان داده شد در نانولوله‌های کربنی با قطر کوچک، ضریب کشسانی با افزایش قطر افزایش می‌یابد، اما در نانولوله‌های با قطر بزرگ، افزایش قطر نانولوله هیچ تأثیری بر ضریب کشسانی ندارد [۲۱]. نجمی و هو [۲۲] از دینامیک مولکولی برای مطالعه نانولوله‌های تک‌لایه در محدوده‌های مختلف دست‌سازنی، قطر و دما استفاده کردند و نشان دادند که قطرهای بزرگ‌تر، سفتی را کمی کاهش می‌دهند، دماهای بالا به طور قابل توجهی استحکام کششی را کاهش می‌دهند و کمانش فشاری در دماهای بالا برجسته‌تر است. ابن مالک و همکاران [۲۳] شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی نانولوله‌های تک‌لایه اولیه و معیوب را با یک مدل یادگیری ماشین جنگل تصادفی ترکیب کردند و نشان دادند که نقص‌های رایج به طور قابل توجهی استحکام را کاهش می‌دهند و مدل آموزش‌دیده، ضریب کشسانی و نسبت پواسون را با دقت مناسبی پیش‌بینی و یک جایگزین سریع برای شبیه‌سازی اتمی ارائه می‌کند. ژوانگ و همکاران [۲۴] یک ورق بافته شده از نانولوله کربنی را به کمک دینامیک مولکولی بررسی کردند و به رفتار کششی تقریباً همسانگرد، ضریب کشسانی و استحکام ویژه بالا دست یافتند. هر دسته از روش‌های مرسوم استخراج خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی دارای نقاط ضعف و قوتی هستند. به عنوان مثال، علی‌رغم مزایای روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، به علت پیچیدگی روابط و فرمول‌بندی، حجم بالای محاسبات و محدودیت‌های سخت‌افزاری و نرم‌افزاری مورد نیاز، این روش معمولاً فقط در

^۶ Ogden^۷ Mooney-Rivlin^۸ Yeoh^۱ Allotrop^۲ Molecular Dynamics^۳ Chirality^۴ Zigzag^۵ Armchair

در این رابطه، F_a نیروی محوری اتصال واقعی و A_0 و A ، به ترتیب، مساحت مقطع عرضی اتصال در حالت اولیه و پس از اعمال بار هستند. مساحت مقطع عرضی اتصال‌ها در حالت اولیه، 2Å^2 در نظر گرفته شده است [۲۵]. نیروی بین اتم‌های کربن روی اتصال واقعی، F_a ، با مشتق‌گیری از تابع پتانسیل مورس اصلاح شده^{۱۰} به دست می‌آید [۲۹]:

$$\begin{aligned} F_a &= 2\beta D_e(1 - e^{-\beta\Delta r})e^{-\beta\Delta r}; \\ \Delta r &= r - r_0; \\ D_e &= 1.807 \text{ eV}, \quad \beta = 38.43 \text{ nm}^{-1}. \end{aligned} \quad (3)$$

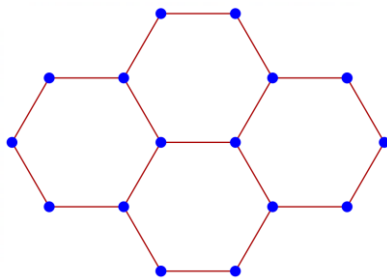
که در آن D_e و β ثوابت مدل مورس اصلاح شده هستند. به طریق مشابه، نیروی محوری اتصال‌های فرضی از رابطه زیر تعیین می‌شود:

$$F_n = \frac{4k_\theta\Delta b(r_0^4 + 48k_s\Delta b^4)}{r_0^5(\sqrt{3}\Delta b - r_0)}; \quad (4)$$

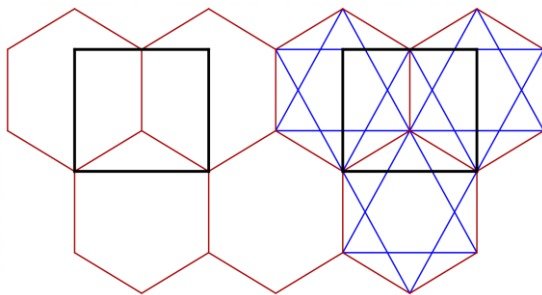
$$\Delta b = b - b_0 = \frac{1}{2} r_0 \Delta\theta;$$

$$k_\theta = 5.617 \text{ eV/rad}^2,$$

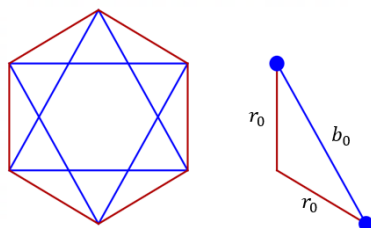
$$k_s = 0.754 \text{ rad}^{-4}.$$



شکل ۱: واحدهای شش ضلعی تشکیل دهنده نانو کربنی



شکل ۲: سلول واحد مکانیکی به شکل مستطیل



مقیاس‌های زمانی بسیار کوچک مورد استفاده می‌گیرد. هدف این پژوهش ارائه یک روش آسان برای بررسی رفتار مکانیکی انواع نانولوله، به کمک استخراج منحنی تنش-کرنش، است. با ترکیب راهکار مدل سازه‌ای کاهش‌یافته و شبیه‌سازی المان محدود، بنا به ادعای نویسنده، ساده‌ترین روش مکانیک مولکولی برای استخراج منحنی تنش-کرنش نانولوله‌ها معرفی شده است. مزیت دیگر روش ارائه شده امکان مطالعه رفتار کششی و فشاری نانولوله کربنی تحت تغییرشکل‌های بزرگ است.

۲- روش

۲-۱- سلول واحد مکانیکی^۹ نانولوله کربنی

نانولوله کربنی دارای شبکه‌هایی از آرایش شش ضلعی اتم‌ها هستند (شکل ۱ را ببینید). ساختار نانولوله‌های کربنی به نحوی است که هر لایه استوانه‌ای شکل، از شش ضلعی‌های پیوسته متناوب که همانند لانه زنبور کنار یکدیگر قرار می‌گیرند، تشکیل شده است. ساختار نانولوله‌های کربنی مورد بحث با تکرار شکل‌های هندسی دیگری به غیر از شش ضلعی نیز قابل فرض است. این گونه هندسه‌های واحد، سلول واحد مکانیکی نامیده می‌شوند. شکل ۲ یک نمونه سلول واحد مکانیکی را نمایش می‌دهد. میر و همکاران [۲۵]، برای به دست آوردن ضریب کشسانی نانولوله‌های کربنی، سلول واحد مکانیکی جدیدی را پیشنهاد کرده‌اند. این سلول واحد مکانیکی هندسه‌ای ساده به شکل مستطیل دارد و مساحتی که در بر می‌گیرد با مساحت شش ضلعی اتم‌ها برابر است. از این سلول‌های واحد مکانیکی مستطیلی می‌توان برای طراحی یک مدل خرد استفاده کرد و در نهایت، با تحلیل خرد یا نرم افزار المان محدود، خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی قابل محاسبه است.

۲-۲- تعیین خواص اعضای سلول واحد مکانیکی به

کمک منحنی تنش-کرنش

برای به دست آوردن منحنی تنش-کرنش هر یک از اتصال‌های تشکیل دهنده نانولوله، ابتدا باید نیروی اتصال‌ها محاسبه شود. این اتصال‌ها در شکل ۳ نشان داده شده است.

کرنش حقیقی در هر یک از شش اتصال واقعی (پیوند) نانولوله (اضلاع شش ضلعی در شکل ۳) از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

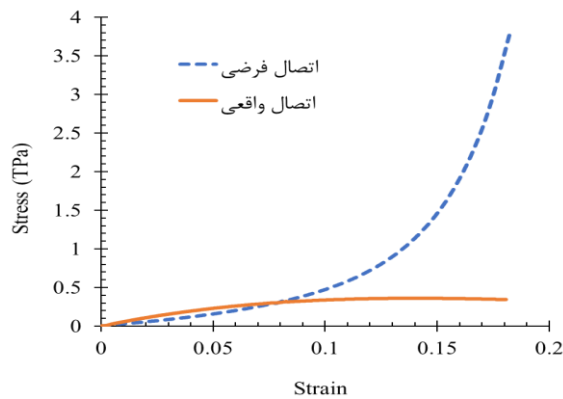
$$\varepsilon_a = \ln \frac{r}{r_0} \quad (1)$$

که در آن، r_0 طول اولیه پیوند کربن-کربن با مقدار $r_0 = 1.42 \text{ Å}$ و $r = r_0 e^{\varepsilon_a}$ طول پیوند کربن-کربن پس از اعمال نیرو است. همچنین، تنش حقیقی در هر یک از اتصال‌های واقعی از رابطه (۲) تعیین می‌شود.

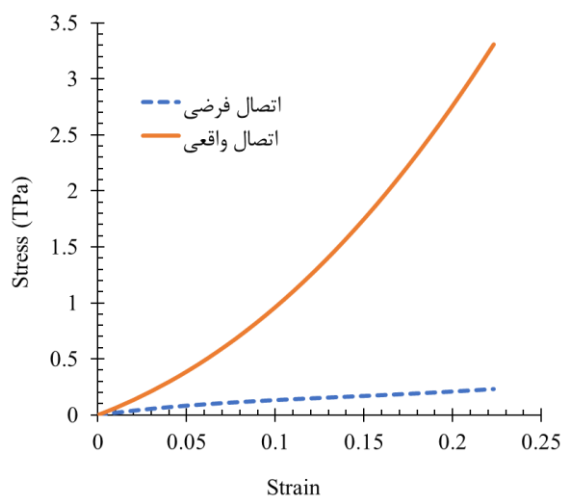
$$\sigma_a = \frac{F_a}{A} = \frac{rF_a}{r_0A_0} \quad (2)$$

¹⁰ Modified Morse Potential

⁹ Mechanical Unit Cell



شکل ۴: منحنی‌های تنش-کرنش اتصال‌های سلول واحد مکانیکی در حالت کششی



شکل ۵: منحنی‌های تنش-کرنش اتصال‌های سلول واحد مکانیکی در حالت فشاری

۳-۲- منحنی تنش-کرنش نانولوله‌های کربنی

برای پیدا کردن رفتار مکانیکی نانولوله‌های کربنی باید پاسخ مکانیکی یک سلول واحد از نانولوله را تحت تأثیر تنش بررسی نمود. برای به دست آوردن پاسخ مکانیکی سلول واحد، خرابیهایی که در واقع معادل یک سلول واحد هستند، در دو حالت آرچر و زیگزاگ [۱۴]، مورد استفاده قرار می‌گیرند. برای استخراج منحنی تنش-کرنش سلول واحد مکانیکی از نرم‌افزار آباکوس^{۱۱} کمک گرفته شده است. برای این منظور، بسته به نوع دست‌سازي نانولوله کربنی، یک خرابای ساده دوبعدی معادل سلول واحد مکانیکی مدل می‌شود (ساختارهای خراباهای مذکور در شکل‌های ۷ و ۹ قابل مشاهده هستند). در شبیه‌سازی عددی، المان T2D2 به کار گرفته شده است. شرایط مرزی مدل در شکل‌های ۷ و ۹ نمایش داده شده‌اند. ضمن منظور کردن تغییر شکل‌های بزرگ، توابع تنش (۷) و (۸) به عنوان ورودی، برای تعیین رفتار ماده، به نرم‌افزار داده می‌شود. برای رسم منحنی تنش-کرنش نانولوله، ابتدا منحنی نیرو-

شکل ۳: پارامترهای هندسی در نظر گرفته شده در شش ضلعی ساختار نانولوله

کرنش و تنش حقیقی در هر یک از اتصال‌های فرضی (قطرهای فرعی شش ضلعی در شکل ۳) به کمک روابط (۵) و (۶) محاسبه می‌شوند.

$$\varepsilon_n = \ln \frac{b}{b_0} \quad (5)$$

$$\sigma_n = \frac{F_n}{A} = \frac{bF_n}{b_0A_0} \quad (6)$$

در روابط فوق، b_0 طول اولیه هر یک از اتصال‌های فرضی و $b = b_0 e^{\varepsilon_n}$ طول آن‌ها پس از اعمال نیرو است. در این پژوهش، مقدار طول و مساحت مقطع عرضی اتصال‌های فرضی در حالت اولیه، به ترتیب، $2.46 \text{ \AA}$ و $2 \text{ \AA}^2$ منظور شده‌اند.

با جای گذاری روابط (۱) و (۳) در رابطه (۲) و جای گذاری روابط (۴) و (۵) در رابطه (۶)، به ترتیب، روابط تنش-کرنش برای اتصال‌های واقعی و فرضی، بر حسب تراپاسکال، به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$\sigma_a = 1.11(1 - e^{5.46 - 5.46e^{\varepsilon_a}})e^{\varepsilon_a - 5.46e^{\varepsilon_a} + 5.46} \quad (7)$$

$$\sigma_n = \frac{64.93(e^{\varepsilon_n} - 1)^2 e^{\varepsilon_n}}{(3e^{\varepsilon_n} - 4)} \quad (8)$$

با توجه به روابط (۷) و (۸)، منحنی‌های تنش-کرنش برای اتصال‌های واقعی و فرضی قابل رسم است. شکل‌های ۴ و ۵ منحنی‌های مذکور را، به ترتیب، تحت کشش و فشار نشان می‌دهند. لازم به ذکر است، از آنجایی که از یک طرف قطر (مساحت مقطع عرضی) نانولوله کربنی، با توجه به رابطه (۹)، به طول اتصال‌های واقعی و فرضی وابسته است [۳۲] و از طرف دیگر نیروهای محوری اتصال‌ها با توجه به روابط (۳) و (۴) به طول آنها وابسته هستند، اندازه منظور شده برای مساحت مقطع عرضی اتصال‌های واقعی و فرضی ($2 \text{ \AA}^2$) خطایی در محاسبه تنش نانولوله ایجاد نمی‌کند.

$$d = \frac{r_0 \sqrt{3(m^2 + mn + n^2)}}{\pi} \quad (9)$$

در رابطه فوق، d قطر و m و n مشخصه‌های بردار دست‌سازي نانولوله هستند.

با توجه به نمودارهای ۴ و ۵ ضریب کشسانی اتصال‌های واقعی و فرضی در حالت کششی، به ترتیب، برابر با $4/4$ و $3/3$ تراپاسکال و در حالت فشاری، به ترتیب، برابر با $9/5$ و $1/1$ تراپاسکال است.

^{۱۱} Abaqus

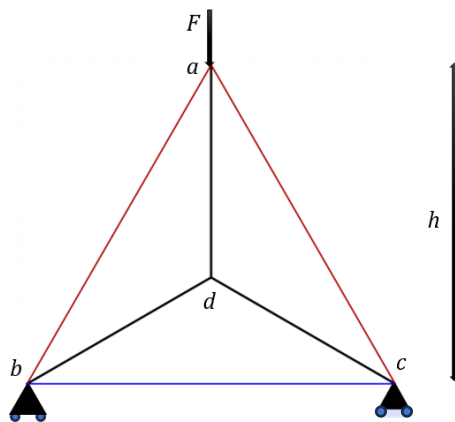
با توجه به نمودار نیرو-جابجایی به دست آمده برای خربای معادل حالت زیگزاگ، برای دو بارگذاری کششی و فشاری و با استفاده از رابطه‌های ۹ و ۱۰ و داده‌های جدول ۱ منحنی تنش- کرنش سلول واحد مکانیکی زیگزاگ به دست می‌آید.

$$\varepsilon = \frac{\Delta h}{h} \quad (9)$$

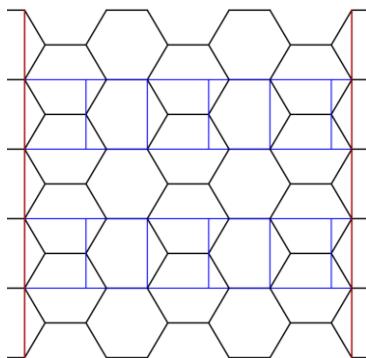
$$\sigma = \frac{F}{A} = \frac{F}{b_0 t} \quad (10)$$

۳-۲-۳- حالت آرمچر

شکل ۸ یک نانولوله آرمچر باز شده به صورت یک ورق با شش سلول واحد مکانیکی را نشان می‌دهد. سلول واحد مکانیکی نانولوله در حالت آرمچر، مشابه با حالت زیگزاگ می‌باشد. خرپا سه‌عضوی معادل در حالت آرمچر نسبت به حالت زیگزاگ، از لحاظ هندسی، ۹۰ درجه دوران دارد. در شکل ۹ مدل خرپا برای حالت آرمچر نشان شده است. مشابه حالت زیگزاگ، جابجایی اولیه به اندازه یک-سوم ارتفاع خرپا ($h/3$ در شکل ۹) به رأس خرپا حالت آرمچر اعمال و نمودار نیرو-جابجایی حاصله استخراج می‌شود. سپس، با کمک رابطه‌های (۹) و (۱۰) و داده‌های جدول ۱ می‌توان منحنی تنش-کرنش نانولوله کربنی حالت آرمچر تحت بارگذاری‌های کششی و فشاری را به دست آورد.



شکل ۷: خربای مدل شده حالت زیگزاگ در نرم‌افزار آباکوس



شکل ۸: ساختار نانولوله کربنی باز شده با دست‌ساز آرمچر

جابجایی آن استخراج می‌شود. با این هدف، بسته به نوع دست‌ساز نانولوله کربنی، یک جابجایی اولیه به اندازه یک-سوم ارتفاع کل خربای سلول واحد مکانیکی به گره رأس آن اعمال می‌شود. پس از محاسبه نیروی P متناظر این جابجایی در محل تکیه‌گاه، منحنی نیرو-جابجایی تعیین می‌شود. از تقسیم نیروی P بر سطح مقطع نانولوله (πr_0^2) مقدار تنش و از تقسیم جابجایی محوری اعمالی به طول اولیه سلول واحد مکانیکی (ارتفاع خرپا)، کرنش عمودی محاسبه می‌شود. t ضخامت دیواره نانولوله (ضخامت سلول واحد) است. از رسم مقادیر تنش حاصله در کنار کرنش، منحنی تنش-کرنش نانولوله ایجاد می‌شود. داده‌های مورد نیاز جهت استخراج منحنی تنش-کرنش نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچر در جدول ۱ آمده است [۲۵].

جدول ۱: داده‌های مورد نیاز برای تعیین تنش-کرنش نانولوله‌ها

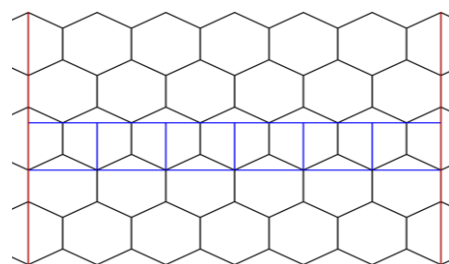
نوع	$b_0(\text{\AA})$	$r_0(\text{\AA})$	$h(\text{\AA})$	$t(\text{\AA})$
زیگزاگ	۲/۴۶	۱/۴۲	۲/۴۶	۳/۴
آرمچر	۲/۴۶	۱/۴۲	۱/۱۳	۳/۴

۳-۲-۱- تشابه هندسی (قانون مقیاس)

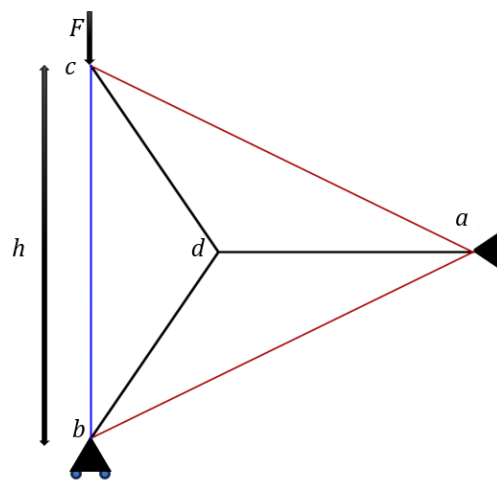
ابعاد نانولوله‌ها در بازه نانومتر است که بسیار کوچک‌تر از حد کمینه اندازه‌ها در نرم‌افزار آباکوس است. سلول‌های واحد مکانیکی اندازه‌هایی با واحد آنگسترم ($\text{\AA}$) دارند. بنابراین، در شبیه‌سازی طول ضلع‌های کربن-کربن 10^{10} برابر بزرگ‌تر شده است. با این حال، می‌توان پارامتر ضخامت را به اندازه‌ی واقعی آن در نرم‌افزار مدل کرد. در قسمت تحلیل نتایج نرم‌افزار، تمام جابجایی‌ها به اندازه‌ی واقعی خود تبدیل می‌شوند و پس از آن محاسبات برای بدست آمدن تنش-کرنش انجام می‌شود.

۳-۲-۲- حالت زیگزاگ

در شکل ۶ یک نانولوله کربنی باز شده با جهت‌گیری زیگزاگ، به صورت یک ورق با دست‌ساز (۰،۶)، نشان داده شده است. در شکل، یک نوار افقی با ۶ سلول واحد مکانیکی قابل تشخیص است. خربای معادل هر یک از ۶ سلول واحد نیز در شکل ۶ مشاهده می‌شود. شکل ۷ خربای مدل شده حالت زیگزاگ را در نرم‌افزار آباکوس نشان می‌دهد.



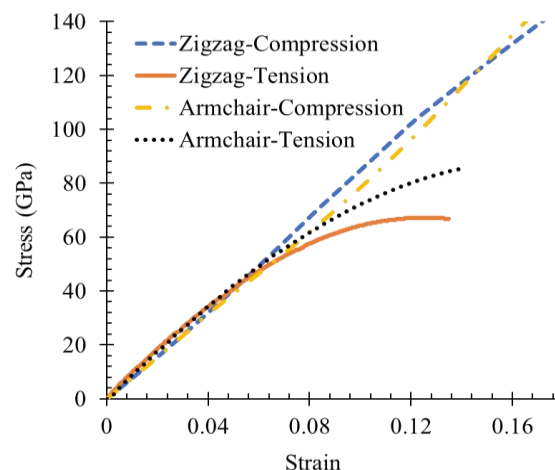
شکل ۶: ساختار نانولوله کربنی باز شده با دست‌ساز زیگزاگ



شکل ۹: خرابای مدل شده حالت آرمچر در نرم‌افزار آباکوس

با بررسی شکل ۱۰ و جدول ۲ می‌توان اثر آرایش ساختار و نحوه بارگذاری را بر رفتار مکانیکی نانولوله کربنی مشاهده کرد. ضریب کشسانی نانولوله وابستگی اندکی به نوع دست‌سازنی و بارگذاری دارد. با این وجود، به‌طور کلی شرایط بارگذاری فشاری دارای ضریب کشسانی بزرگ‌تری است. اساساً، صرف نظر از پدیده کماتش، نانولوله‌ها تحت نیروی محوری فشاری در مقایسه با نیروی کششی مقاومت بیش‌تری از خود نشان می‌دهند. بیش‌ترین ضریب کشسانی و مقاومت تسلیم برای آرایش زیگزاگ تحت بارگذاری فشاری محاسبه شده است. در مقایسه با ضریب کشسانی، مقاومت تسلیم بیش‌تر مؤثر از نوع دست‌سازنی و بارگذاری است. در این بین، نقش نوع بارگذاری محسوس‌تر است. کم‌ترین مقدار تنش تسلیم متعلق به نانولوله با دست‌سازنی آمچر، تحت کشش است. با توجه به شکل ۱۰، به‌طور کلی، رفتار مکانیکی نانولوله کربنی تحت بارگذاری محوری، به‌ازای تغییرشکل‌های کوچک، تقریباً مستقل از نوع دست‌سازنی و فشاری یا کششی بودن بار است. اما به‌ازای کرنش‌های بزرگ‌تر از حدود ۰/۰۸ اثر نوع دست‌سازنی و بارگذاری محسوس‌تر می‌شود. در این شرایط، بیش‌ترین اختلاف بین رفتار مکانیکی نانولوله با دست‌سازنی زیگزاگ تحت بارگذاری‌های کششی و فشاری مشاهده می‌شود. علاوه بر این، شکل ۱۰ نشان می‌دهد رفتار نانولوله تحت بارگذاری فشاری تقریباً خطی است. اما تحت بارگذاری کششی، به‌ویژه در تغییرشکل‌های بزرگ، نانولوله رفتار غیرخطی از خود نشان می‌دهد.

در شکل‌های ۱۱ تا ۱۴ منحنی تنش-کرنش نانولوله‌های کربنی آرمچر و زیگزاگ، تحت نیروهای فشاری و کششی، در کنار منحنی‌های ارائه شده سایر مراجع نشان داده شده است. منحنی‌های استخراج شده در این مراجع با استفاده از روش‌های تحلیلی و دینامیک مولکولی به‌دست آمده‌اند. تمامی این روش‌ها دارای پیچیدگی و یا هزینه محاسباتی بالایی می‌باشند. با توجه به نمودارهای تنش-کرنش برای حالات آرمچر و زیگزاگ، می‌توان دریافت که نتایج به‌دست آمده توسط روش به‌کار رفته در این پژوهش، علی‌رغم عدم پیچیدگی در مقایسه با سایر تحقیقات، تطابق مناسبی با آنها دارد. در واقع، مهم‌ترین مزیت این روش، ساده بودن آن است که با داشتن خطای کم، نتایج قابل قبول و نزدیک به نتایج واقعی را ارائه می‌دهد. از نتایج به‌دست آمده در این روش، به‌طریق مشابه، می‌توان برای به‌دست آوردن منحنی تنش-کرنش در دیگر نانولوله‌ها نیز استفاده نمود. سلول واحد مکانیکی، با دارا بودن یک هندسه ساده، این قابلیت را دارد که به صورت یک مدل ریاضی مورد تحلیل قرار گیرد. از تکرار این المان کل ساختار نانولوله تشکیل می‌شود، بنابراین مسئله اصلی تحلیل کردن همین المان است. بدیهی است که استفاده کردن از سلول واحد مکانیکی برای هندسه‌های پیچیده راه حل مناسبی است و هزینه‌های محاسباتی را کاهش می‌دهد.



شکل ۱۰: منحنی تنش-کرنش سلول واحد مکانیکی در حالت زیگزاگ و آرمچر تحت نیروهای فشاری و کششی

جدول ۲: مقادیر تنش تسلیم و ضریب کشسانی نانولوله‌های کربنی

آرمچر (کششی)	آرمچر (فشاری)	زیگزاگ (کششی)	زیگزاگ (فشاری)	تنش تسلیم (GPa)
۷۵	۹۵	۶۵	۱۱۵	
۰/۷۹	۰/۸۱	۰/۷۹	۰/۸۴	ضریب کشسانی (TPa)

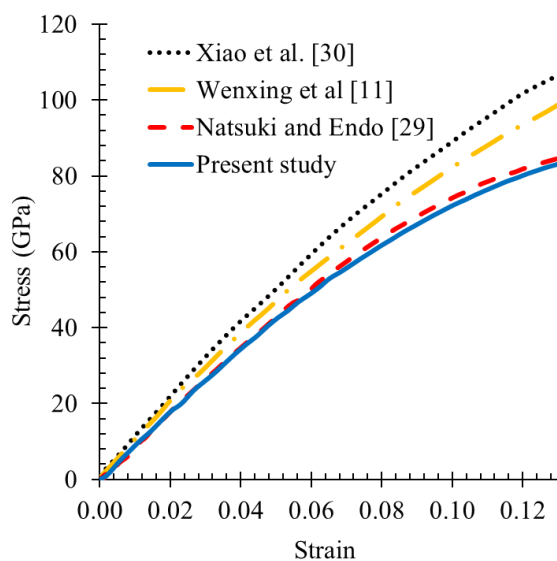
۳- نتایج

در بخش قبلی منحنی تنش-کرنش برای نانولوله کربنی در حالت زیگزاگ و آرمچر تحت بارگذاری کششی و فشاری به‌دست آمد. در شکل ۱۰ منحنی تنش-کرنش حاصله برای سلول واحد مکانیکی با دست‌سازنی‌های زیگزاگ و آرمچر تحت نیروهای فشاری و کششی با هم مقایسه شده‌اند. با داشتن این منحنی‌ها، می‌توان خواص مکانیکی نانولوله کربنی، مانند ضریب کشسانی و تنش تسلیم، را محاسبه نمود.

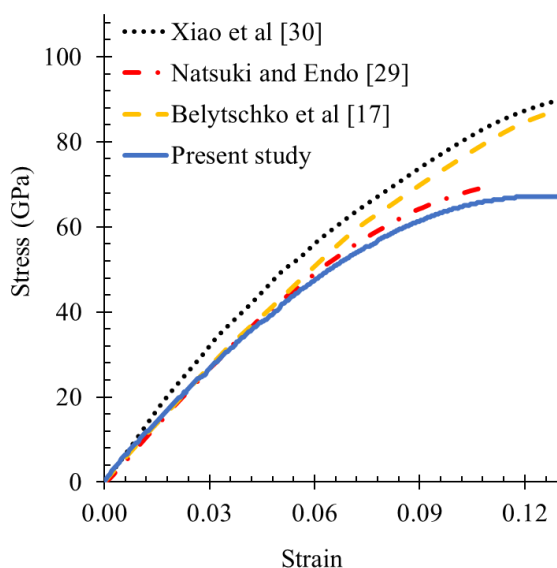
جدول ۲ مقادیر تنش تسلیم و ضریب کشسانی نانولوله‌های آرمچر و زیگزاگ را ارائه می‌دهد. مقادیر تقریبی تنش تسلیم با استفاده از روش آفست^۱ ۰/۲ درصد [۳۳] محاسبه شده است. با مقایسه مقادیر محاسبه شده ضریب کشسانی و تنش تسلیم نانولوله‌های کربنی با مقادیر گزارش شده در ادبیات [۲۷، ۲۹ و ۳۴]، می‌توان دریافت مطابقت خوبی با نتایج پژوهش‌های قبلی وجود دارد. از نظر تئوری، مقادیر تنش تسلیم به محدوده ۹۰ تا ۱۰۰ گیگا پاسکال نزدیک است و تنش‌های تسلیم تجربی مشاهده‌شده اغلب در محدوده ۵۰ تا ۶۰ گیگا پاسکال است. در ارزیابی‌های تئوری، اغلب تسلیم باعث ایجاد کرنش‌های کششی تسلیم در حدود ۹ درصد می‌شود [۳۴].

¹ Offset

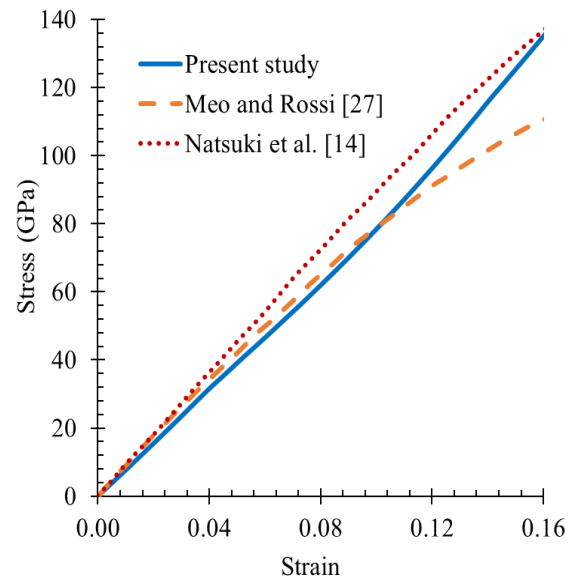
منحنی تنش-کرنش نانولوله‌های کربنی به دست‌سازنی و نحوه قرارگیری سلول‌های واحد مکانیکی در کنار یکدیگر، وابسته است. تطابق خوبی بین نتایج به‌دست‌آمده برای هر دو حالت دست‌سازنی آرمچر و زیگزاگ و نتایج ارائه شده در سایر مراجع در این حوزه وجود دارد. روش ارائه شده در پژوهش حاضر قابلیت استفاده برای بررسی رفتار مکانیکی سایر نانولوله‌ها، با آرایش و بارگذاری‌های مختلف، را دارد. به عنوان مثال، این روش به راحتی برای نانولوله‌های غیر کربنی دارای دو اتم (نظیر نانولوله‌های BN) نیز قابل اجرا است. برای این منظور، کافی است تابع‌های پتانسیل پیوندهای اصلی و فرضی کربن-کربن با تابع‌های پتانسیل اتم‌های غیر کربن (به عنوان مثال، بور-نیتروژن) جای‌گزین شوند.



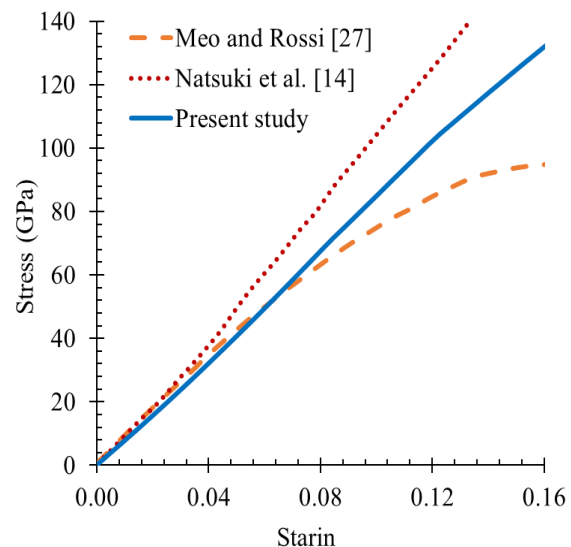
شکل ۱۳: منحنی تنش-کرنش نانولوله حالت آرمچر تحت نیروی کششی



شکل ۱۴: منحنی تنش-کرنش نانولوله حالت زیگزاگ تحت نیروی کششی



شکل ۱۱: منحنی تنش-کرنش نانولوله حالت آرمچر تحت نیروی فشاری



شکل ۱۲: منحنی تنش-کرنش نانولوله حالت زیگزاگ تحت نیروی فشاری

۴- جمع‌بندی

با کمک روش مکانیک مولکولی و نرم‌افزار آباکوس، روشی ساده و سراسر برای شبیه‌سازی رفتار مکانیکی ساختارهای نانولوله ابداع شده است. وجه تمایز این روش در مقایسه با روش‌های مشابه، ساده‌تر بودن، امکان مطالعه تغییرشکل‌های بزرگ و استخراج منحنی تنش-کرنش است. پس از مدل‌سازی یک سلول واحد مکانیکی نانولوله کربنی به شکل یک خرابی سه عضوی، با استفاده از شبیه‌سازی المان محدود، منحنی‌های تنش-کرنش در حالت بارگذاری‌های محوری کششی و فشاری استخراج شده است. در واقع، تکرار سلول‌های واحد مکانیکی، نانولوله کربنی را تشکیل می‌دهد. نتایج پژوهش نشان می‌دهد تغییرات

۵- مراجع

- [14] Natsuki T, Tantrakarn K, Endo M. Prediction of elastic properties for single-walled carbon nanotubes. *Carbon*. 2004;4(1):39-45. DOI 10.1016/j.carbon.2003.09.011
- [15] Arab B, Vaziri SA, Khodarahmi H. Molecular Dynamics Simulation of Carbon Nanotube-Reinforced Polymer Nanocomposites. *Journal of Aerospace Mechanics*. 2017;14(1):55-64 (in Persian). DOR 20.1001.1.26455323.1397.14.1.5.5
- [16] Yang H, Zhang D, Song Y, Yang L, Zhang D, Liang R, Liu A. Molecular dynamic study of heterocyclic compounds and carbon nanotube. *Applied Physics A*. 2024;130:377. DOI 10.1007/s00339-024-07555-y
- [17] Belytschko T, Xiao S, Schatz G, Ruoff R. Atomistic simulations of nanotube fracture. *Physical Review B*. 2002;65(23):235430. DOI 10.1103/PhysRevB.65.235430
- [18] Rashidi M, Narooei K. Structural Mechanics Approach to Investigate the Hyperelastic Mechanical Behavior of Single and Multi-wall Carbon Nanotubes. *Iranian Journal of Materials Forming*. 2020;7(2):88-103. DOI 10.22099/ijmf.2020.37930.1163
- [19] Wang L, Tricard N, Chen Z, Deng S. Progress in computational methods and mechanistic insights on the growth of carbon nanotubes. *The Royal Society of Chemistry*. 2025;17(19):11812-11863. DOI 10.1039/D4NR05487C
- [20] Jiang H, Zhang P, Liu B, Huang Y, Geubelle PH, Gao H, Hwang KC. The effect of nanotube radius on the constitutive model for carbon nanotubes. *Computational Materials Science*. 2003;28(3-4):429-442. DOI 10.1016/j.commatsci.2003.08.004
- [21] Shen Z, Li W, Ma J, Zhang X, Dong P, Wang S, Xu J, Zhang X. Theoretical predictions of size-dependent Young's and shear moduli of single-walled carbon nanotubes. *Physica B: Condensed Matter*. 2021;613():412994. DOI 10.1016/j.physb.2021.412994
- [22] Najmi L, Hu Zh. Molecular Dynamics Simulations of Effects of Geometric Parameters and Temperature on Mechanical Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes. *Journal of Composites Science*. 2024;8(8):293. DOI 10.3390/jcs8080293
- [23] Ibn Malek I, Sarkar K, Zubair A. Predicting the mechanical properties of pristine and defective carbon nanotubes using a random forest model. *Nanoscale Advances*. 2024; 6(20): 5112-5132. DOI 10.1039/d4na00405a
- [24] Zhuang Zh, Chang J, Fan J, Li M, Dumitrică T, Xu H. Mechanical properties of knitted carbon nanotube sheet: A molecular dynamics study. *Diamond and Related Materials*. 2025;152, 112005. DOI 10.1016/j.diamond.2025.112005
- [25] Mir M, Tahani M, Hassani B. Analytical prediction of Young's modulus of carbon nanotubes using a variational method. *Applied Mathematical Modelling*. 2017;45:1031-43. DOI 10.1016/j.apm.2017.01.038
- [26] Ebrahimi F, Habibi S. Nonlinear Low-Velocity Impact Response of CFRP Enhanced with CNT in Hygrothermal environments. *Journal of Aerospace Mechanics*. 2018;14(1): 65-80 (in Persian). DOR 20.1001.1.26455323.1397.14.1.6.6
- [1] Iijima S, Ichihashi T. Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter. *nature*. 1993;363(6430):603-5. DOI 10.1038/363603a0
- [2] Bethune DS, Kiang CH, De Vries M, Gorman G, Savoy R, Vazquez J, et al. Cobalt-catalysed growth of carbon nanotubes with single-atomic-layer walls. *Nature*. 1993;363(6430):605-7. DOI 10.1038/363605a0
- [3] Mintmire JW, Dunlap BI, White CT. Are fullerene tubules metallic? *Physical review letters*. 1992;68(5):631. DOI 10.1103/PhysRevLett.68.631
- [4] Yu M-F, 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):637-40. DOI 10.1126/science.287.5453.637
- [5] Berber, S., Kwon, Y.-K., & Tománek, D. (2000). Unusually High Thermal Conductivity of Carbon Nanotubes. In *Physical Review Letters* (Vol. 84, Issue 20, pp. 4613-4616). American Physical Society (APS). DOI 10.1103/PhysRevLett.84.4613
- [6] Wong EW, Sheehan PE, Lieber CM. Nanobeam mechanics: elasticity, strength, and toughness of nanorods and nanotubes. *science*. 1997;277(5334):1971-5. DOI 10.1126/science.277.5334.1971
- [7] Treacy MJ, Ebbesen TW, Gibson JM. Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes. *nature*. 1996;381(6584):678-80. DOI 10.1038/381678a0
- [8] Yu M, Dyer MJ, Skidmore GD, Rohrs HW, Lu X, Ausman KD, et al. Three-dimensional manipulation of carbon nanotubes under a scanning electron microscope. *Nanotechnology*. 1999;10(3):244. DOI 10.1088/0957-4484/10/3/304
- [9] Lourie O, Wagner H. Evaluation of Young's modulus of carbon nanotubes by micro-Raman spectroscopy. *Journal of Materials Research*. 1998;13(9):2418-22. DOI 10.1557/JMR.1998.0336
- [10] Hernandez E, Goze C, Bernier P, Rubio A. Elastic properties of C and B_xC_yN_z composite nanotubes. *Physical review letters*. 1998;80(20):4502. DOI 10.1103/PhysRevLett.80.4502
- [11] WenXing B, ChangChun Z, WanZhao C. Simulation of Young's modulus of single-walled carbon nanotubes by molecular dynamics. *Physica B: Condensed Matter*. 2004;352(1-4):156-63. DOI 10.1016/j.physb.2004.07.005
- [12] Talukdar K, Mitra AK. A molecular dynamics simulation study for the mechanical properties of different types of carbon nanotubes. *Applied Nanoscience*. 2012;2(3):77-383 DOI 10.1007/s13204-012-0110-z
- [13] Liew KM, He XQ, Wong CH. On the study of elastic and plastic properties of multi-walled carbon nanotubes under axial tension using molecular dynamics simulation. *Acta Materialia*. 2004; 52(9):2521-2527. DOI 10.1016/j.actamat.2004.01.043

- [27] Meo M, Rossi M. Tensile failure prediction of single wall carbon nanotube. *Engineering Fracture Mechanics*. 2006;73(17): 2589-99. DOI 10.1016/j.engfracmech.2006.05.005
- [28] Zandi-Baghche-Maryam A, Hosseini M. Analytical Analysis for Free Vibration of Different Arrangements of BNNTs under Initially Stress. *Journal of Aerospace Mechanics*. 2018;15(3): 33-46 (in Persian). DOR 20.1001.1.26455323.1398.15.3.3.4
- [29] Natsuki T, Endo M. Stress simulation of carbon nanotubes in tension and compression. *Carbon*. 2004;42(11):2147-51. DOI 10.1016/j.carbon.2004.04.022
- [30] Xiao J, Gama B, Gillespie Jr J. An analytical molecular structural mechanics model for the mechanical properties of carbon nanotubes. *International Journal of Solids and Structures*. 2005; 42(11-12): 3075-92. DOI 10.1016/j.ijsolstr.2004.10.031
- [31] Kalamkarov AL, Georgiades A, Rokkam S, Veedu V, Ghasemi-Nejhad M. Analytical and numerical techniques to predict carbon nanotubes properties. *International journal of Solids and Structures*. 2006;43(22-23):6832-6854. DOI 10.1016/j.ijsolstr.2006.02.009
- [32] Beer FP, Johnston Jr ER, DeWolf JT, Mazurek DF. *Mechanics of Materials*. 7th edition; 2015, McGraw-Hill.
- [33] Wei Ch, Cho K, Srivastava D. Tensile strength of carbon nanotubes under realistic temperature and strain rate. *Physical Review B*. 2003;67: 115407. DOI 10.1103/PhysRevB.67.115407