

## مطالعه خواص مکانیکی نانو مخروط‌های کربنی دو جداره تحت بارهای کششی و فشاری با استفاده از روش المان محدود

پارمیدا باقری

رضا انصاری خلخالی\*

مجید علی طاوولی

سعید روحی گرکردی

دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی مکانیک، موسسه آموزش عالی احرار، رشت، ایران

دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت، ایران

دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه گیلان، رشت، ایران

استادیار، گروه مهندسی مکانیک، واحد لنگرود، دانشگاه آزاد اسلامی، لنگرود، ایران

### چکیده

در این مقاله، روش المان محدود برای مطالعه رفتار کمانش و خواص مکانیکی نانو مخروط‌های کربنی دو جداره استفاده شده است. به این منظور، نانو مخروط‌های دو جداره با طول‌ها و زوایای مختلف و تحت شرایط تکیه‌گاهی متفاوت مورد بررسی قرار می‌گیرد. با توجه به شباهت بین ساختار نانوسازه‌ها و قاب فضایی برای ساختارهای نانو، از روش مکانیک سازه‌ای برای مطالعه رفتار مکانیکی نانومخروط‌ها استفاده می‌گردد. در این روش، نانو مخروط‌های کربنی به عنوان قاب فضایی در نظر گرفته می‌شوند و برای مدل کردن اتم‌ها و پیوندها به ترتیب از المان‌های تیر و جرم استفاده می‌شود. برای تعیین خواص المان‌های تیر از برابری مکانیک سازه‌ای و مکانیک مولکولی استفاده می‌شود. نتایج نشان می‌دهد که مدول الاستیسیته نانو مخروط‌های کربنی دو جداره با افزایش زاویه رأس و افزایش طول کاهش می‌یابد. همچنین با مقایسه تاثیر تغییرات در دو عامل طول و زاویه رأس، زاویه رأس تاثیر بیشتری را روی نیروی فشاری بحرانی می‌گذارد. نیروی فشاری بحرانی در نانو مخروط‌های کربنی دو جداره با افزایش زاویه رأس نانومخروط، افزایش و با افزایش طول کاهش می‌یابد. **واژه‌های کلیدی:** مدل‌سازی المان محدود، نانو مخروط کربنی دو جداره، مدول الاستیسیته، نیروی فشاری بحرانی.

## Investigating the Mechanical Properties of Double-Walled Carbon Nanocones under Tensile and Compressive loadings using the finite element method

P. Bagheri

Department of Mechanical Engineering, Ahrar Institute of Technology & Higher Education, Rasht, Iran

R. Ansari Khalkhali

Department of Mechanical Engineering, University of Guilan, Rasht, Iran

M. A. Tavoli

Department of Mechanical Engineering, University of Guilan, Rasht, Iran

S. Rouhi Grakaroudi

Department of Mechanical Engineering, Langarud Branch, Islamic Azad University, Langarud, Iran

### Abstract

In this paper, finite element method is employed to study the buckling behavior and mechanical properties of double-walled carbon nanocones. In this regard, double-walled nanocones with different geometries, including lengths and angles, and boundary conditions are investigated. Based on the similarity between the nanostructures and space frames, structural mechanics approach is employed to study the mechanical behavior of the nanocones. In this approach, the carbon nanocones are considered as space frame and beam and mass elements are utilized to model the atoms and bonds. The results show that the elastic modulus of the carbon nanocones decreases by increasing the apex angle and length. Besides, it is shown that the influence of the apex angle on the critical buckling force of the carbon nanocones is more significant than the length effect. Increasing apex angle and length of the carbon nanocones lead to increasing and decreasing of the critical buckling force, respectively.

**Keywords:** Finite element modeling, Double-walled carbon nanocones, Critical compressive force, Modulus of elasticity.

با توجه به کاربردهای مختلف نانو مخروط‌های کربنی در زمینه مختلف مثل: الکترون سرد و زمینه گسیلنده [۶]، حسگرهای مکانیکی [۷]، شناخت جامع از مشخصات مکانیکی، فیزیکی و الکتریکی واجب و ضروری است. تحقیقات در نانو مخروط‌های کربنی هم‌زمان با نانو تیوب‌های کربنی آغاز گردید. اما نانو مخروط‌های کربنی و خصوصیاتش کمتر مورد توجه قرار گرفت. مخروط با زاویه رأس‌های  $19/2^\circ$ ،  $38/9^\circ$ ،  $60^\circ$ ،  $84/6^\circ$ ،  $112/9^\circ$  بصورت تجربی توسط کریشنان<sup>۵</sup> تولید شده است [۸]. سپس نائس<sup>۶</sup> [۹] مطالعه ساختمان و

### ۱- مقدمه

در سال‌های اخیر، ساختارهای متفاوت نانو همانند: نانو لوله‌های کربنی<sup>۱</sup> [۱]، فولرین‌ها<sup>۲</sup> [۲]، نانورینگ‌های کربنی<sup>۳</sup> [۳]، و نانو مخروط‌های کربنی<sup>۴</sup> به دلیل خواص منحصر به فرد فیزیکی (مکانیکی، حرارتی و الکتریکی) و استحکام کششی بالا و طبیعت کربنی بودن تحقیقات فراوانی را به خود اختصاص داده است [۴ و ۵].

<sup>۱</sup>Carbon nanotubes

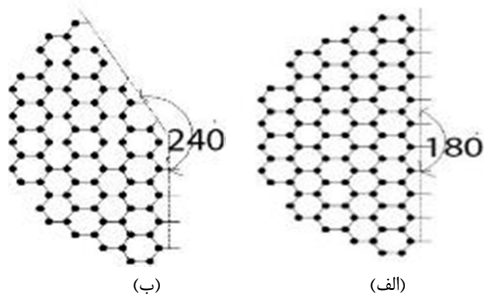
<sup>۲</sup>Fullerenes

<sup>۳</sup>Carbon nanorings

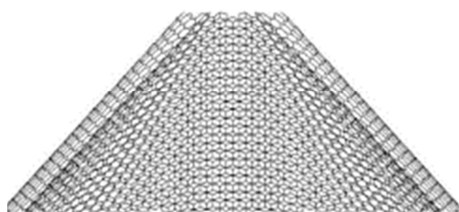
<sup>۴</sup>Carbon nanocones

<sup>۵</sup>Krishnan

<sup>۶</sup>Naess



شکل ۱- صفحات گرافن در زوایای مختلف  $d\theta$  (الف)  $180^\circ$ ، (ب)  $240^\circ$



(الف)



(ب)

شکل ۲- نانو مخروط کربنی دو جداره با زاویه رأس  $38/9^\circ$   
(الف) نمای فوقانی (ب) نمای مایل

### ۳- مدل‌سازی المان محدود نانو مخروط کربنی دو جداره

درمدلسازی سه بعدی تیر الاستیک، اتم‌های کربن به صورت المان‌های جرمی در نظر گرفته شده‌اند. جمع انرژی‌های اتمی با در نظر گرفتن از برهم کنش بین اعضای متصل و برهم کنش بین اعضای متصل و غیر متصل است. همچنین با در نظر نگرفتن برهم کنش‌های الکترواستاتیکی، انرژی پتانسیل برای نانو مخروط‌های کربنی از مجموع انرژی پتانسیل‌های مختلف به صورت رابطه (۱) حاصل می‌شود [۲۵]:

$$U = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum U_\omega + \sum U_{vdw} \quad (1)$$

که  $U_r$ ،  $U_\theta$ ،  $U_\omega$  و  $U_{vdw}$  به ترتیب انرژی‌های مربوط به کشش پیوند، خمش پیوند، پیچش زاویه‌ای دو سطحی، پیچش خارج از صفحه و برهم کنش‌های واندروالس می‌باشند. برای بدست آوردن انرژی کل سیستم کووانسی در رابطه (۱) از برهم کنش‌های واندروالسی

شکل ظاهری نانو مخروط‌های کربنی با زاویه رأس‌های مختلف را با استفاده از روش‌های انتقال الکترون<sup>۱</sup>، اشعه ایکس<sup>۲</sup> و شکست الکترون<sup>۳</sup> انجام داد.

دو روش برای مدلسازی مواد دارای ساختار نانو موجود است: روش‌های مکانیک اتمی<sup>۴</sup> و روش‌های مکانیک محیط‌های پیوسته<sup>۵</sup>. روش‌های مکانیک ذره‌ای عبارتند از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی<sup>۶</sup> [۱۰] و [۱۱] و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تنگابست<sup>۷</sup> [۱۲] و تئوری تابعی چگالی<sup>۸</sup> [۱۳]. روش‌های مکانیک محیط‌های پیوسته نیز عبارتند از: مدل‌های تیر اویلر-برنولی/تیموشنکو [۱۴ و ۱۵]، مدل‌های پوسته [۱۶ و ۱۷ و ۱۸] و مدل‌های ساختار مولکولی [۱۹ و ۲۰ و ۲۱]. هو و همکاران<sup>۹</sup> [۲۲] برای مطالعات عرضی ارتعاشات آزاد نانو مخروط‌های کربنی تک جداره از مدل تیر استفاده کردند. طبق گزارش نتایج حاصل از مدل تیر تیموشنکو قابل قبول تر از مدل تیر اویلر-برنولی است. یان و همکاران<sup>۱۰</sup> [۲۳] با استفاده از مرتبه بالاتر تئوری گرادیان پیوسته به مطالعه خواص مکانیکی<sup>۱۱</sup> نانو مخروط‌های کربنی پرداختند. نتایج حاصل از مطالعات نشان داد که افزایش و کاهش زاویه رأس روی خواص الاستیک و کشش بحرانی در نانو مخروط‌های کربنی تاثیر می‌گذارد.

فخرآبادی و همکاران [۲۴] به بررسی مدول الاستیسیته<sup>۱۲</sup> و نیروی کمانش بحرانی<sup>۱۳</sup> در نانو مخروط‌های کربنی تک جداره با زاویه رأس‌های مختلف و اعمال شرایط مرزی مختلف پرداختند. نتایج حاصل نشان داد که تغییرات زاویه رأس بر روی مدول الاستیسیته و نیروی فشاری بحرانی نانو مخروط‌های کربنی اثر می‌گذارد. در کار حاضر، نیروی فشاری بحرانی و مدول الاستیسیته نانو مخروط‌های کربنی دو جداره در زاویه رأس‌های  $19/2^\circ$ ،  $38/9^\circ$ ،  $60^\circ$  و اعمال ۴ حالت شرط مرزی مورد بررسی قرار خواهد گرفت. به علاوه اثر طول نانو مخروط دو جداره، بر مدول الاستیک و بار کمانش بحرانی نانو مخروط‌ها با زوایای رأس مختلف، بررسی می‌شود.

### ۲- ساختار اتمی نانو مخروط‌های کربنی دو جداره

به منظور ساخت یک نانو مخروط کربنی دو جداره باید بخشی از صفحه گرافن دایره‌ای شکل را حذف نماییم که زاویه  $d\theta$  به عنوان زاویه بخش حذف شده از گستره صفحه گرافن تعریف می‌شود. در شکل ۱ صفحه گرافن با زوایای مختلف  $d\theta$  نشان داده شده است، که هر کدام از این مقادیر نانو مخروط کربنی با زاویه رأس‌های مختلف را می‌سازد. سپس دو لبه از صفحات گرافن بهم متصل می‌شوند و مطابق شکل ۲ تشکیل نانو مخروط کربنی را می‌دهند.

<sup>1</sup>Transmission electron

<sup>2</sup>Synchrotron X-ray

<sup>3</sup>Electron diffraction

<sup>4</sup>Atomistic mechanics

<sup>5</sup>Continuum mechanics

<sup>6</sup>Molecular dynamics

<sup>7</sup>Tight-binding molecular dynamics

<sup>8</sup>Density functional theory

<sup>9</sup>Hu et al

<sup>10</sup>Yan et al

<sup>11</sup>Mechanical properties

<sup>12</sup>Modulus of elasticity

<sup>13</sup>Critical compressive force

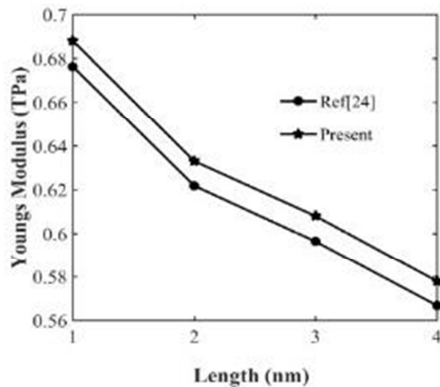
همچنین، پتانسیل واندروالسی بین دو نانو مخروط در مجاورت هم در نانو مخروط کربنی دوجداره وجود دارد. برای توصیف پتانسیل واندروالسی با استفاده از پتانسیل لنارد جونز<sup>۱</sup> داریم [۲۶]:

$$U(R) = 4\epsilon \left[ \left(\frac{\sigma}{R}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R}\right)^6 \right] \quad (8)$$

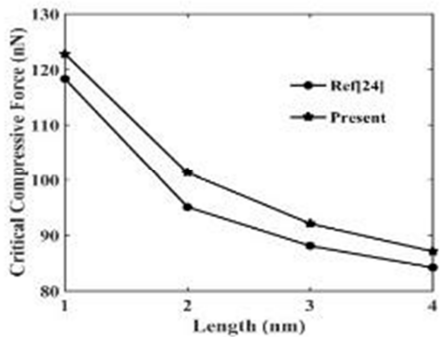
که  $\epsilon$  و  $\sigma$  مقادیر لنارد جونز و  $R$  فاصله بین اتم‌ها است. المان‌های فنر به کار گرفته شده در مدلسازی، پتانسیل واندروالسی هستند که مقدار سفتی این المان‌های فنر،  $k_{vdw}$ ، از مشتق دوم رابطه (۸) بدست می‌آید [۲۶]:

$$k_{vdw} = 24\epsilon \left( 26 \frac{\sigma^{12}}{R^{14}} - 7 \frac{\sigma^6}{R^8} \right) \quad (9)$$

در شکل ۳ مقدار مدول الاستیسیته و نیروی کماتش بحرانی نانو مخروط کربنی تک جداره مدلسازی شده با زاویه رأس  $38/9^\circ$  با نتایج حاصل از نانو مخروط کربنی تک جداره با زاویه رأس  $38/9^\circ$  در مرجع [۲۴] مقایسه شده‌است. ملاحظه می‌شود که نتایج حاصل برای مدول الاستیسیته و نیروی کماتش بحرانی نانو مخروط کربنی تک جداره با استفاده از روش مورد استفاده، دارای دقت قابل قبولی است. همچنین در جدول ۱ درصد خطای مدول الاستیسیته و در جدول ۲ درصد خطای نیروی کماتش بحرانی محاسبه شده‌است.



(الف)



(ب)

شکل ۳- صحنه گذاری نتایج حاضر برای نانو مخروط تک جداره با زاویه رأس  $38/9^\circ$  (الف) مدول الاستیسیته، (ب) نیروی فشاری بحرانی

صرفنظر می‌شود. با پذیرش شکل‌های هارمونیک و تبدیل پیچش زاویه دو سطحی و پیچش خارج از صفحه به یک جمله معادل، انرژی‌های ناشی از برهم کنش اتم‌های کربن دارای پیوندهای کوالانسی را می‌توان به صورت معادلات (۲) و (۳) و (۴) نشان داد:

$$U_r = \frac{1}{2} K_r (\Delta r)^2, \quad \frac{d^2 U_r}{d\Delta r^2} = k_r \quad (2)$$

$$U_\theta = \frac{1}{2} K_\theta (\Delta \theta)^2, \quad \frac{d^2 U_\theta}{d\Delta \theta^2} = k_\theta \quad (3)$$

$$U_\tau = U_\theta + U_\omega = \frac{1}{2} K_\theta (\Delta \theta)^2, \quad \frac{d^2 U_\tau}{d\Delta \theta^2} = k_\theta \quad (4)$$

که  $k_r$ ،  $k_\theta$  و  $k_\phi$  به ترتیب ثابت‌های نیروی وابسته به کشش، خمش و پیچش پیوندها می‌باشند و  $\Delta r$ ،  $\Delta \theta$  و  $\Delta \phi$  به ترتیب عبارتند از: تغییر طول پیوند، زاویه پیوند و زاویه دو سطحی نسبت به مکان تعادل. از برابری مکانیک سازه‌ای و مولکولی پارامترهای مکانیک سازه-ای  $EA$ ،  $EI$  و  $GJ$  بر حسب ضرایب به صورت روابط (۵) به دست می‌آیند [۲۵]:

$$\frac{EA}{l} = k_r, \quad \frac{EI}{l} = k_\theta, \quad \frac{GJ}{l} = k_\phi \quad (5)$$

که  $E$  و  $G$  به ترتیب مدول الاستیک و مدول برشی هستند. همچنین  $A$  و  $I$  و  $J$  به ترتیب سطح مقطع و طول و ممان اینرسی و ممان اینرسی قطبی المان تیر هستند. پس از ساده سازی ثابت‌های مکانیکی از این المان تیر سه بعدی با مقطع دایره که دارای قطر  $d$  است. معادلات به صورت روابط (۶) بدست می‌آید [۲۵]:

$$d = 4 \sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}}, \quad E = \frac{k_r^2 l}{4\pi k_\theta}, \quad G = \frac{k_r^2 k_\phi l}{8\pi k_\theta^2} \quad (6)$$

بر اساس مرجع [۲۶] داریم:

$$k_r = 6.52 \times 10^{-7} \frac{N}{nm} \quad (7)$$

$$k_\theta = 8.76 \times 10^{-10} \frac{Nnm}{rad^2}$$

$$k_\phi = 2.78 \times 10^{-10} \frac{Nnm}{rad^2}$$

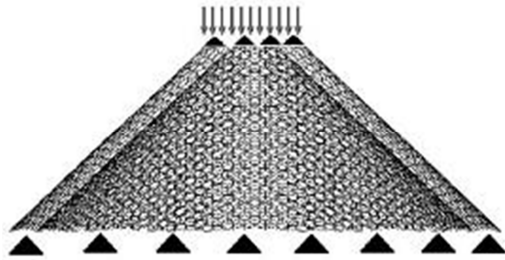
با جایگذاری مقادیر از رابطه (۷) در رابطه (۶) داریم:

$$d = 1.466 \text{ \AA}$$

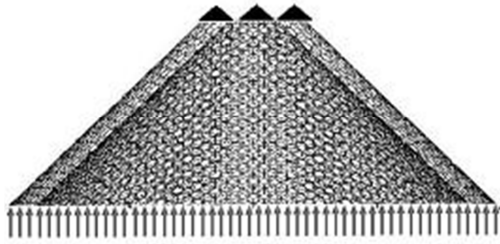
$$E = 5.488 \times 10^{-8} \frac{N}{\text{Å}^2}$$

$$G = 8.701 \times 10^{-9} \frac{N}{\text{Å}^2}$$

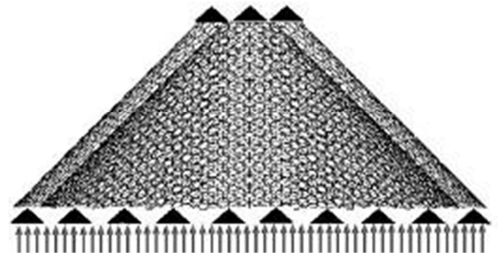
<sup>1</sup> Lennard-Jones



(ب)



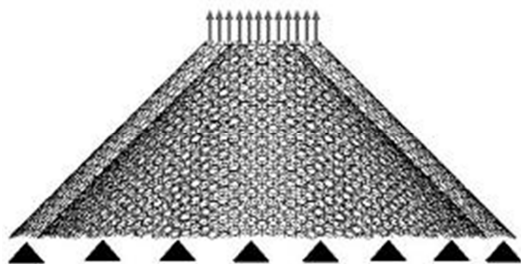
(ج)



(د)

شکل ۴- شرایط مرزی مختلف برای تجزیه و تحلیل کمانشی نانو مخروط های کربنی دو جداره (الف) گیردار از مقطع بزرگتر، (ب) گیردار از دو مقطع و بارگذاری از مقطع کوچکتر، (ج) گیردار از مقطع کوچکتر، (د) گیردار از دو مقطع و بارگذاری از مقطع بزرگتر

همچنین برای بررسی مدول الاستیسیته نانو مخروط های کربنی دو جداره، در طول و زاویه رأس های مختلف بارگذاری به صورت کششی و اعمال شرایط مرزی روی نانو مخروط مطابق شکل ۵، تعریف شده است.



شکل ۵- گیردار از مقطع بزرگتر و بارگذاری از مقطع کوچکتر

جدول ۱- صحه گذاری مدول الاستیسیته

طول (نانومتر)	مدول الاستیسیته (ترا پاسکال) [24]	مدول الاستیسیته کار حاضر (ترا پاسکال)	درصد خطا (%)
۱	۰/۶۷۸	۰/۶۸۶	۱/۲
۲	۰/۶۲۱	۰/۶۳۸	۲/۷
۳	۰/۵۹۹	۰/۶۰۸	۱/۵
۴	۰/۵۶۵	۰/۵۸۱	۲/۸

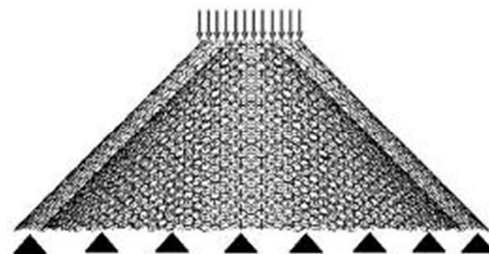
جدول ۲- صحه گذاری نیروی فشاری بحرانی

طول (نانومتر)	نیروی کمانش بحرانی (نانو نیوتون) [24]	نیروی کمانش بحرانی کار حاضر (نانو نیوتون)	درصد خطا (%)
۱	۱۱۸	۱۲۲	۴/۲
۲	۹۴	۱۰۳	۹/۵
۳	۹۰	۹۲	۲/۲
۴	۸۸	۸۹	۱/۱

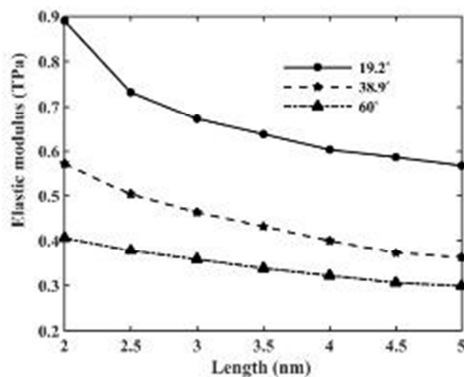
#### ۴- نتایج عددی

به منظور بررسی خواص مکانیکی و کمانشی نانو مخروط ها، ابتدا مدل های مورد نظر در نرم افزار متلب تولید می شوند. مدل خروجی از نرم افزار متلب که به عنوان ورودی نرم افزار ANSYS است، شامل مختصات گره ها و همچنین المانها می باشد. سپس مدل های تولید شده، به نرم افزار انسیس وارد می شوند. مدل المان محدود نانو مخروط های کربنی دو جداره به صورت قاب فضایی ایجاد می شود. هر یک از گره ها نانو مخروط کربنی دو جداره دارای ۶ درجه آزادی در راستای محورهای X و Y و Z و همچنین چرخش حول این محورها هستند. به منظور اعمال شرایط گیردار، کلیه درجات آزادی گره های واقع بر مرز مورد نظر، مقید می گردد. در این مطالعه نانو مخروط های کربنی دو جداره با زاویه رأس های  $19/2^\circ$ ،  $38/9^\circ$ ،  $60^\circ$  و همچنین طول های مختلف به منظور بررسی نیروی فشاری بحرانی و مدول الاستیسیته مدلسازی شده اند.

در بررسی نیروی فشاری بحرانی نانو مخروط های کربنی دو جداره، بارگذاری به صورت فشاری است. همچنین با اعمال شرایط مرزی مطابق شکل ۴ (الف) گیردار از مقطع بزرگتر، (ب) گیردار از دو مقطع و بارگذاری از مقطع کوچکتر، (ج) گیردار از مقطع کوچکتر، (د) گیردار از دو مقطع و بارگذاری از مقطع بزرگتر.



(الف)



شکل ۶- مدول الاستیسیته نانو مخروط‌های کربنی دو جداره در طول‌ها و زاویه راس‌های مختلف

مقدار مدول الاستیسیته نانو مخروط‌های کربنی در طول‌های بالاتر و زاویه راس‌های  $38.9^\circ$  و  $60^\circ$  با شیب ملایمی به سمت هم میل می‌کنند و نانو مخروط کربنی دو جداره با زاویه راس کوچکتر  $19.2^\circ$  در طول‌های بالاتر همچنان در اختلاف زیادی با دو زاویه راس  $38.9^\circ$  و  $60^\circ$  است.

#### ۴-۲- نیروی فشاری بحرانی

برای محاسبه نیروی فشاری بحرانی نانو مخروط‌های کربنی دو جداره از الگوریتم لَنکَزس<sup>۱</sup> در نرم‌افزار ANSYS استفاده می‌گردد. نیروی فشاری بحرانی برابر است با حاصلضرب مقدار ویژه به دست آمده از نرم افزار در تعداد گره‌هایی که بار فشاری بر آنها وارد شده است. نیروی فشاری بحرانی نانومخروط‌های دو جداره با زاویه راس‌های  $19.2^\circ$ ،  $38.9^\circ$  و  $60^\circ$  و در طول‌های مختلف در شکل ۷ نشان داده شده است. در مرحله اول ماتریس‌های سفتی ابتدایی به دست می‌آیند. ماتریس سفتی از دو زیرمجموعه متفاوت، از جمله ماتریس سفتی الاستیک و ماتریس سفتی هندسی تشکیل شده است. برای ماتریس سفتی الاستیک داریم [27]:

$$[K]^e = [K]_b^e + [K]_s^e \quad (14)$$

که  $[K]_s^e$  و  $[K]_b^e$  ماتریس‌های سفتی الاستیک مرتبط با تیر و فنر هستند. برای ماتریس سفتی مرتبط با تیر داریم:

$$[K]_b^e = \begin{bmatrix} [K_{ii}]_b^e & [K_{ij}]_b^e \\ [K_{ji}]_b^e & [K_{jj}]_b^e \end{bmatrix} \quad (15)$$

همچنین داریم:

#### ۴-۱- مدول الاستیسیته

برای محاسبه مدول الاستیسیته نانومخروط کربنی تک جداره داریم:

$$\delta = \int_0^L \frac{N dx}{EA(x)} \quad (10)$$

همچنین برای  $A(x) = 2\pi r h$  و  $r = x \tan \alpha$  روابط فوق برقرار است. برای محاسبه مدول الاستیسیته نانومخروط کربنی تک جداره داریم:

$$\delta = \frac{N}{E2\pi h \tan \alpha} \ln \left( \frac{R_2}{R_1} \right) \quad (11)$$

همچنین برای نانومخروط کربنی دو جداره داریم:

$$\begin{aligned} A(x) &= 2\pi r_1 h + 2\pi r_2 h \\ &= 2\pi(r_1 + r_2)h \\ &= 2\pi(r_1 + r_1 + h)h \\ &= 2\pi(2r_1 + h)h \end{aligned} \quad (12)$$

برای محاسبه مدول الاستیسیته نانو مخروط‌های کربنی دو جداره با بارگذاری کششی و اعمال شرایط مرزی شکل ۵ رابطه زیر مورد استفاده قرار می‌گیرد:

$$\delta = \frac{N}{4\pi E h \tan \alpha} \ln \left( \frac{R_2 + h}{R_1 + h} \right) \quad (13)$$

$\delta$  مقدار جابه‌جایی بعد از اعمال نیرو و شرایط مرزی،  $N$  مقدار نیروی اعمال شده،  $h$  طول نانو مخروط کربنی دو جداره،  $\tan \alpha$  بیانگر نصف زاویه راس نانو مخروط کربنی دو جداره  $R_1$  و  $R_2$  بترتیب شعاع کوچک و شعاع بزرگ نانو مخروط کربنی داخلی هستند. مدول الاستیسیته نانومخروط‌های دو جداره با زاویه راس‌های  $19.2^\circ$ ،  $38.9^\circ$  و  $60^\circ$  در طول‌های مختلف، در شکل ۶، ارائه شده است.

طبق نمودار، با کاهش زاویه راس نانو مخروط‌های کربنی دو جداره مقدار مدول الاستیسیته افزایش می‌یابد. به عبارت دیگر، برای یک طول ثابت، نانو مخروط دارای کوچکترین زاویه راس، بزرگترین مدول یانگ را اختیار می‌کند. همچنین مقدار مدول الاستیسیته برای طول‌های بالاتر نانو مخروط کربنی دو جداره کاهش می‌یابد که این کاهش در نانو مخروط کربنی دو جداره با زاویه راس‌های کوچکتر با شیب بیشتری است.

اختلاف مقدار مدول الاستیسیته بین نانو مخروط‌های کربنی دو جداره با در نظر گرفتن طول ثابت و زاویه راس‌های  $19.2^\circ$  و  $38.9^\circ$  بیشتر از، اختلاف مقدار مدول الاستیسیته نانو مخروط‌های کربنی دو جداره در همان طول ثابت با زاویه راس‌های  $38.9^\circ$  و  $60^\circ$  است.

<sup>1</sup> Lanczos

برای بدست آوردن ماتریس سفتی کلی باید ماتریس سفتی ابتدایی اسمبل شود. با توجه به نیروی اعمال شده داریم:

$$P = \lambda P^* \quad (24)$$

که  $\lambda$  و  $P^*$  مقادیر ثابت هستند. ماتریس سفتی کلی به صورت زیر است:

$$K_G = \lambda K_G^* \quad (25)$$

که  $K_G$ ، ماتریس سفتی هندسی  $P^*$  است. و داریم:

$$(K_E + \lambda K_G^*)U = \lambda P^* \quad (26)$$

در اینجا فرض می‌شود که  $K_E$  ثابت است. برای  $u$  بردار جابه جایی به صورت زیر است:

$$U = \{u \quad v \quad w \quad \theta_x \quad \theta_y \quad \theta_z\} \quad (27)$$

$u, v, w$  و  $\theta_x, \theta_y, \theta_z$  جابه جایی در راستای محورهای  $x$  و  $y$  و  $z$  است. همچنین  $\theta_x, \theta_y, \theta_z$  بترتیب چرخش در راستای محورهای  $x$  و  $y$  و  $z$  است. با توجه به رابطه (26) داریم:

$$|K_E + \lambda K_G^*| = 0 \quad (28)$$

با حل رابطه (28) حداقل مقدار  $\lambda$  بدست می‌آید که به آن  $\lambda_{cr}$  بحرانی، می‌گویند. در نهایت نیروی فشاری بحرانی از طریق رابطه زیر بدست می‌آید:

$$P_{Cr} = \lambda_{cr} P^* \quad (29)$$

بر اساس نمودارهای شکل 7 مشاهده می‌شود که نیروی فشاری بحرانی در نانو مخروط‌های کربنی دو جداره با اعمال 4 حالت شرایط مرزی شکل 4، با افزایش طول نانو مخروط کربنی دو جداره، کاهش یافته است و با افزایش زاویه رأس نانو مخروط‌های کربنی دو جداره نیز نیروی فشاری بحرانی، افزایش یافته است. همچنین برای یک طول ثابت در زاویه رأس‌های  $19/2^\circ, 38/9^\circ, 60^\circ$  بیشترین مقدار نیروی فشاری بحرانی در هر 4 حالت شرط مرزی برای زاویه رأس بزرگتر یعنی  $60^\circ$  است. در نانو مخروط کربنی دو جداره با زاویه رأس  $19/2^\circ$  نیروی کماتش بحرانی در شرایط مرزی حالت (ب) بیشترین مقدار را دارد. نیروی فشاری بحرانی در نانو مخروط کربنی دو جداره با زاویه رأس  $19/2^\circ$  در شرایط مرزی حالت‌های (ب) و (ج) با افزایش طول با شیبی تند، در طول‌های پایین‌تر و با شیبی ملایم‌تر در طول‌های بالاتر نانو مخروط کربنی دو جداره کاهش می‌یابد. همچنین در شرایط مرزی حالت (الف) تغییرات طول تاثیر ناچیزی را در نیروی فشاری بحرانی نانو مخروط کربنی دو جداره دارد و در شرایط مرزی حالت (ج) با افزایش طول نیروی فشاری بحرانی در حال کاهش است.

بیشترین تاثیر تغییر طول به طور کاهشی، در مقدار نیروی فشاری بحرانی را در اعمال شرایط مرزی حالت‌های (ب) و (د) که نمودار با شیب نسبتاً تندی در حال کاهش است را مشاهده می‌کنیم و کمترین میزان تاثیر تغییر کاهشی طول، بر نیروی فشاری بحرانی را اعمال شرایط مرزی حالت (الف) دارا است. در نانو مخروط کربنی دو جداره با زاویه رأس  $38/9^\circ$  نیروی فشاری بحرانی در شرایط مرزی حالت (ب) بیشترین مقدار نیروی فشاری بحرانی را دارا است و نیروی فشاری بحرانی در دو حالت شرایط مرزی (ب) و (د) در ابتدا و طول‌های کمتر با شیبی تند و در طول‌های بالاتر با شیبی ملایم‌تر در حال کاهش هستند. تغییرات طول در نانو مخروط کربنی دو جداره با زاویه رأس  $38/9^\circ$  و شرایط مرزی حالت (الف) تاثیر بیشتری را بر نیروی فشاری بحرانی در مقایسه با نانو مخروط کربنی دو جداره با زاویه رأس  $19/2^\circ$

$$[K_{ii}]_b^e = \begin{bmatrix} EA/L & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12EI_x/L^3 & 0 & 0 & 0 & 6EI_x/L^2 \\ 0 & 0 & 12EI_y/L^3 & 0 & -6EI_y/L^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & GJ/L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -6EI_y/L^2 & 0 & 4EI_y/L & 0 \\ 0 & 6EI_x/L^2 & 0 & 0 & 0 & 4EI_x/L \end{bmatrix} \quad (16)$$

$$[K_{ij}]_b^e = \begin{bmatrix} -EA/L & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -12EI_x/L^3 & 0 & 0 & 0 & 6EI_x/L^2 \\ 0 & 0 & -12EI_y/L^3 & 0 & -6EI_y/L^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -GJ/L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6EI_y/L^2 & 0 & 2EI_y/L & 0 \\ 0 & -6EI_x/L^2 & 0 & 0 & 0 & 2EI_x/L \end{bmatrix} \quad (17)$$

$$[K_{ji}]_b^e = \begin{bmatrix} EA/L & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12EI_x/L^3 & 0 & 0 & 0 & -6EI_x/L^2 \\ 0 & 0 & 12EI_y/L^3 & 0 & 6EI_y/L^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & GJ/L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6EI_y/L^2 & 0 & 4EI_y/L & 0 \\ 0 & -6EI_x/L^2 & 0 & 0 & 0 & 4EI_x/L \end{bmatrix} \quad (18)$$

و  $[K_{ij}]_b^e = ([K_{ij}]_b^e)^T$  همچنین  $[K]_s^e$  به شرح زیر محاسبه می‌شود:

$$[K]_s^e = \begin{bmatrix} [K_{ii}]_s^e & [K_{ij}]_s^e \\ [K_{ji}]_s^e & [K_{jj}]_s^e \end{bmatrix} \quad (19)$$

ماتریس سفتی هندسی به شرح زیر است [28]:

$$K^g = \begin{bmatrix} [K_{ii}]^g & [K_{ij}]^g \\ [K_{ji}]^g & [K_{jj}]^g \end{bmatrix} \quad (17)$$

و  $[K_{ij}]^g = ([K_{ij}]^g)^T$  داریم:

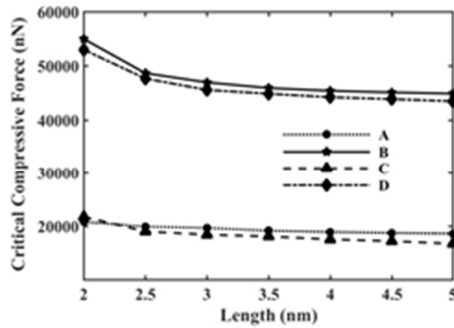
$$[K_{ii}]^g = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & 0 & -d & -e \\ & b & 0 & d & g & k \\ & & c & e & h & g \\ & & & f & i & l \\ & & & & j & 0 \\ & & & & & m \end{bmatrix} \quad (20)$$

$$[K_{ij}]^g = \begin{bmatrix} -a & 0 & 0 & 0 & -n & -o \\ 0 & -b & 0 & n & -g & k \\ 0 & 0 & -c & o & -h & -g \\ 0 & -d & -e & -f & -i & -l \\ d & -g & h & -i & p & -q \\ e & -k & -g & -l & q & r \end{bmatrix} \quad (21)$$

$$[K_{jj}]^g = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 & 0 & n & o \\ & b & 0 & -n & g & -k \\ & & c & -o & h & g \\ & & & f & i & l \\ & & & & j & 0 \\ & & & & & m \end{bmatrix} \quad (22)$$

برای پارامترهای  $a$  تا  $r$  داریم:

$$a = \frac{F_{xb}}{L}, b = c = \frac{6F_{xb}}{5L} + \frac{12F_{xb}I}{AL^3}, d = \frac{M_{ya}}{L}, e = \frac{M_{za}}{L}, f = \frac{F_{xb}J}{AL}, g = \frac{M_{xb}}{L}, h = \frac{F_{xb}}{10} + \frac{6F_{xb}I}{AL^2}, i = \frac{M_{za} + M_{zb}}{L}, j = m = \frac{12F_{xb}}{15} + \frac{4F_{xb}I}{AL}, l = -\frac{M_{ya} + M_{yb}}{6}, n = \frac{M_{yo}}{L}, o = \frac{M_{zb}}{L}, p = r = -\frac{F_{xb}}{30} + \frac{2F_{xb}I}{AL}, q = -\frac{M_{xb}}{L} \quad (23)$$



(ج)

شکل ۷- نیروی فشاری بحرانی برای نانو مخروط‌های کربنی دو جداره در زاویه رأس (الف) ۱۹/۳° (ب) ۳۸/۹° (ج) ۶۰°

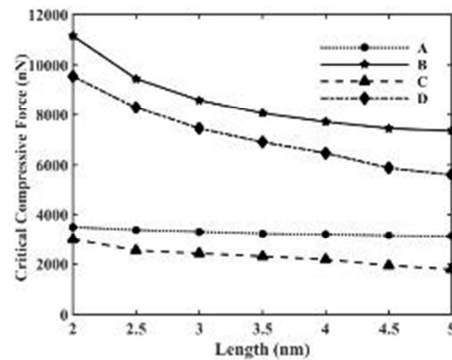
همچنین شش شکل مود اول نانو مخروط کربنی دو جداره با زاویه رأس ۳۸/۹° و طول ۳۰ نانومتر با اعمال حالات مختلف شرایط مرزی در شکل ۸ مورد بررسی قرار گرفته‌است.

در آخر نیز تغییرات نیروی کمانش بحرانی برای نانو مخروط کربنی با طول ۳۰ نانومتر و زاویه رأس ۳۸/۹° تحت شرایط مرزی مختلف (الف) گیردار از مقطع بزرگتر، (ب) گیردار از دو مقطع و بارگذاری از مقطع کوچکتر، (ج) گیردار از مقطع کوچکتر، (د) گیردار از دو مقطع و بارگذاری از مقطع بزرگتر به وسیله شش شکل‌های مود اول مورد مشاهده و بررسی قرار گرفت و بیشترین تغییرات شکل در نانو مخروط کربنی دو جداره، تحت اعمال شرایط مرزی (ب) و (د) که به ترتیب بیشترین مقادیر نیروی فشاری بحرانی را در هر سه راس نانو مخروط کربنی دو جداره مورد مطالعه به خود اختصاص داده بودند، کاملاً مشهود است.

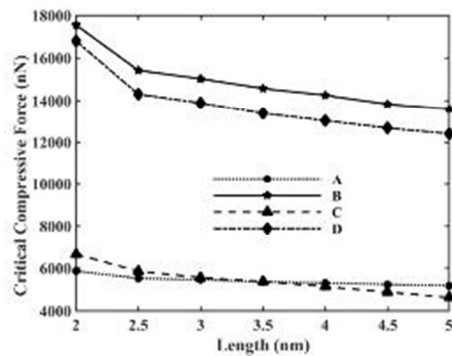
دارد. نیروی فشاری بحرانی در نانو مخروط کربنی دو جداره با زاویه رأس ۳۸/۹° و شرایط مرزی حالت (د) با افزایش طول، با شیبی ملایم در حال کاهش است و مقدار نیروی فشاری بحرانی در طول‌های بالا و شرایط مرزی حالت (ج) کمی بالاتر از شرایط مرزی حالت (الف) قرار دارد که با افزایش طول نانو مخروط کربنی دو جداره کاهش یافته است و در طول‌های پایین‌تر، خط نمودار با شرایط مرزی حالت (الف) را قطع کرده است و در زیر آن قرار گرفته‌است.

در نانو مخروط کربنی با زاویه رأس ۶۰° نیروی فشاری بحرانی در شرایط مرزی حالت (ب) همچنان بیشترین مقدار را دارا است و نیروی فشاری بحرانی در دو حالت شرایط مرزی (ب) و (د) با افزایش طول و کاهش نیروی فشاری بحرانی، با نزدیکی بسیار کم از هم نسبت به همین شرایط در نانو مخروط‌های کربنی دو جداره با زاویه رأس‌های ۳۸/۹° و ۱۹/۳° در حال کاهش است. افزایش طول در نیروی فشاری بحرانی با شرایط مرزی حالت (الف) تاثیر بسیار کم‌تری را نسبت به شرایط مرزی حالت (ج) داشته‌است.

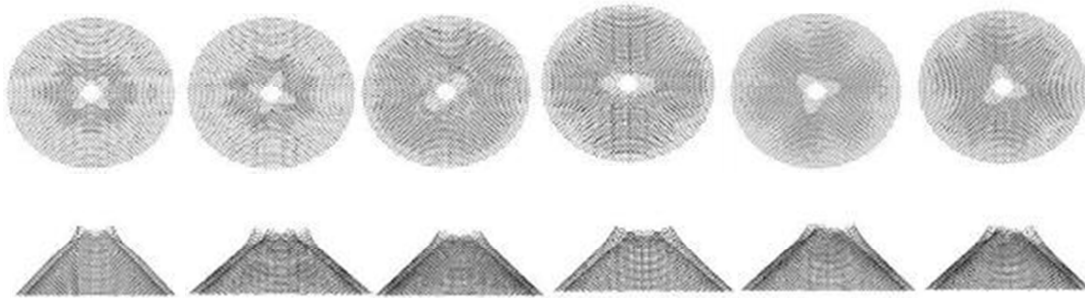
بنابراین، در حالت کلی در یک طول ثابت، بیشترین زاویه رأس نانو مخروط‌های کربنی دو جداره، بیشترین مقدار نیروی بحرانی کمانش را دارا است. همچنین افزایش طول نانو مخروط‌های کربنی باعث کاهش مقدار نیروی فشاری بحرانی می‌شود. طبق بررسی‌های صورت گرفته در این مطالعه نیروی فشاری بحرانی وابستگی بیشتری را نسبت به تغییرات زاویه رأس نانو مخروط کربنی دو جداره، در مقایسه با تغییرات افزایش طول را دارد. در تمامی زاویه راس‌های نانو مخروط کربنی دو جداره شرایط مرزی حالت (ب)، بیشترین مقادیر نیروی فشاری بحرانی را به خود اختصاص داده‌است.



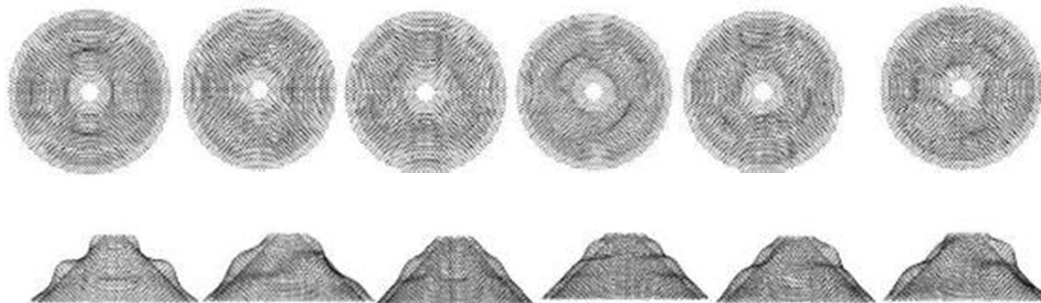
(الف)



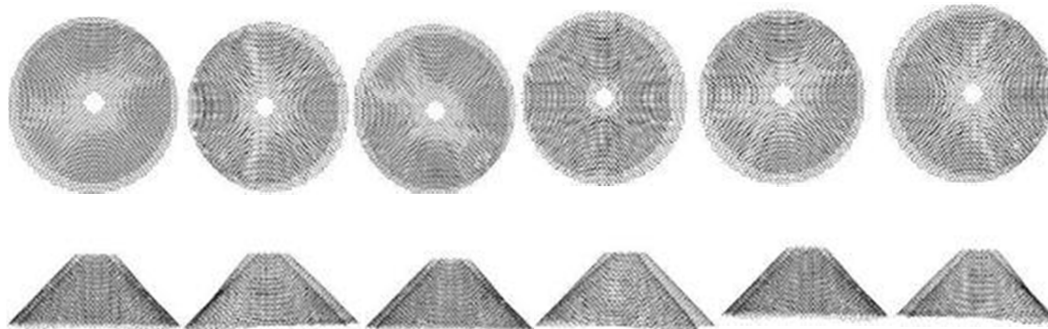
(ب)



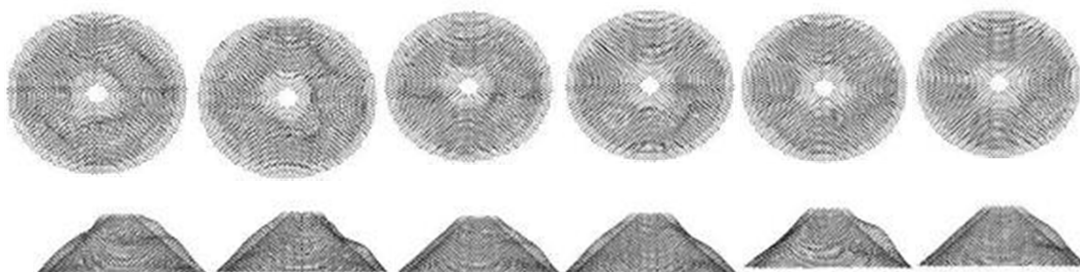
(الف)



(ب)



(ج)



(د)

شکل ۸- بررسی ۶ مود اول نانو مخروط کربنی دو جداره با زاویه راس  $38/9^\circ$  و تحت شرایط مرزی (الف) گیردار از مقطع بزرگتر، (ب) گیردار از دو مقطع و بارگذاری از مقطع کوچکتر، (ج) گیردار از مقطع کوچکتر، (د) گیردار از دو مقطع و بارگذاری از مقطع بزرگتر



1. [4] Lijima S., Ichihashi T. and Ando Y., Pentagons, heptagons and negative curvature in graphite microtubule growth, *Chemical Physics Letters*, Vol. 356, No. 6372, pp. 776-778, 1992.
1. [5] Iijima S. and Ichihashi T., Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter, *Synthetic Metals*, Vol. 363, No. 6430, pp. 603-605, 1993.
1. [6] Yu S.-S. and Zheng W.-T., Effect of N/B doping on the electronic and field emission properties for carbon nanotubes, carbon nanocones, and graphenenanoribbons, *Physics Letters A Nanoscale*, Vol. 2, No. 7, pp. 1069-1082, 2010.
- [7] Yan J. W., Liew K. M. and He L. H., Ultra-sensitive analysis of a cantilevered single-walled carbon nanocone-based mass detector, *Nanotechnology*, Vol. 24, No. 12, Article ID 125703, 2013.
1. [8] Krishnan A., Dujardin E., Treacy M. M. J., Hugdahl J., Lynum S. and Ebbesen T. W., Graphitic cones and the nucleation of curved carbon surfaces, *Thin Solid Films*, Vol. 388, No. 6641, pp. 451-454, 1997.
- [9] Naess S. N., Elgsaeter A., Helgesen G. and Knudsen K. D., Carbon nanocones: wall structure and morphology, *Science and Technology of Advanced Materials*, Vol. 10, No. 6, Article ID 065002, 2009.
- [10] Iijima S., Brabec C., Maiti A. and Bernholc J., Structural flexibility of carbon nanotubes, *Journal of Chemical Physics*, Vol. 104, No. 5, pp. 2089-2092, 1996.
- [11] Yakobson B. I., Campbell M. P., Brabec C. J. and Bernholc J., High strain rate fracture and C-chain unraveling in carbon nanotubes, *Computational Materials Science*, Vol. 8, No. 4, pp. 341-348, 1997
- [12] Hernandez E., Goze C., Bernier P., Rubio A., Elastic properties of C and BxCyNz composite nanotubes, *Physical Review Letters*, Vol. 80, No. 20, pp. 4502-4505, 1998.
- [13] C. M. Wang, V. B. C. Tan, Y. Y. Zhang, Timoshenko beam model for vibration analysis of multi-walled carbon nanotubes, *Journal of Sound and Vibration*, Vol. 294, No. 4, pp. 1060-1072, 2006.
- [14] Hsu J. C., Chang R. P., Chang W. J., Resonance frequency of chiral single-walled carbon nanotubes using Timoshenko beam theory, *Physics Letters A*, Vol. 372, No. 16, pp. 2757-2759, 2008.
- [15] Zhang Y. Y., Wang C. M., Tan V. B. C., Assessment of Timoshenko beam models for vibrational behavior of single-walled carbon nanotubes using molecular dynamics, *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*, Vol. 1, No. 1, pp. 89-106, 2009.
- [16] Yakobson B. I., Brabec C. J., Bernholc J., Nanomechanics of carbon tubes, instabilities beyond linear response, *Physical Review Letters*, Vol. 76, No. 14, pp. 2511-2514, 1996.
- [17] Ru C. Q., Effective bending stiffness of carbon nanotubes, *Physical Review B*, Vol. 62, No. 15, pp. 9973-9976, 2000.
- [18] Ru C. Q., Elastic buckling of single-walled carbon nanotube ropes under high pressure, *Physical Review B*, Vol. 62, No. 15, pp. 10405-10408, 2000.
- [19] Ansari R., Rouhi S., Atomistic finite element model for axial buckling of single-walled carbon nanotubes, *Physica E, Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, Vol. 43, No. 1, pp. 58-69, 2010.
- [20] Rouhi S., Ansari R., Atomistic finite element model for axial buckling and vibration analysis of single-layered graphene sheets, *Physica E*, Vol. 44, No. 4, pp. 764-772, 2012.
- [21] Rappe A. K., Casewit C. J., Colwell K. S., Goddard Iii W. A., Skiff W. M., UFF, a full periodic table force field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations, *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 114, No. 25, pp. 10024-10035, 1992.

## ۵- نتیجه گیری

در این مقاله، نانو مخروط‌های کربنی دو جداره تحت شرایط مرزی و زاویه راس و طول‌های مختلف به منظور بررسی خواص مکانیکی و رفتار کماتشی با استفاده از روش اجزای المان محدود مدل‌سازی شدند. نتایج نشان می‌دهند که، با افزایش زاویه راس و افزایش طول نانو مخروط دو جداره مقدار مدول الاستیسیته کاهش می‌یابد که این مقدار روند نزولی در نانو مخروط‌های کربنی دو جداره با زاویه راس کمتر، با شیب تندتری ادامه می‌یابد. نتایج حاصل از مدول الاستیسیته نانو مخروط‌های کربنی تک جداره در مرجع [۲۴] نیز با افزایش طول کاهشی و در یک طول ثابت زاویه راس‌های کوچکتر مدول الاستیسیته بزرگتری را دارا هستند.

بررسی نتایج نیروی فشاری بحرانی نانو مخروط‌های کربنی دو جداره تحت شرایط مرزی (الف) گیردار از مقطع بزرگتر، (ب) گیردار از دو مقطع و بارگذاری از مقطع کوچکتر، (ج) گیردار از مقطع کوچکتر، (د) گیردار از دو مقطع و بارگذاری از مقطع بزرگتر و زاویه راس و طول‌های مختلف نشان می‌دهد، که نیروی فشاری بحرانی با افزایش زاویه راس افزایش می‌یابد. در زوایای کوچکتر زاویه راس، مقدار نیروی فشاری بحرانی نانو مخروط‌های کربنی دو جداره کاهش می‌یابد. همچنین اعمال شرایط مرزی مختلف نیز اثر خاص خود را بر مقدار نیروی فشاری بحرانی نانو مخروط‌های کربنی می‌گذارد و متغیری مهم محسوب می‌شود.

در بررسی اثر طول‌های مختلف بر روی مقدار نیروی فشاری بحرانی نتایج نشان می‌دهد که، افزایش طول باعث کاهش مقدار نیروی فشاری بحرانی می‌شود. در بین متغیرهای شرایط مرزی و زاویه راس و طول، دو متغیر اول تاثیر بیشتری را بر روی مقدار نیروی فشاری بحرانی نانو مخروط‌های کربنی دو جداره دارد.

بررسی حاصل از مرجع [۲۴] بر روی نیروی فشاری بحرانی نانو مخروط کربنی تک جداره با اعمال شرایط مرزی یکسان نتایج نشان می‌دهد که در نانو مخروط‌های کربنی تک جداره با کاهش زاویه راس نانو مخروط، مقدار نیروی فشاری بحرانی نیز افزایش می‌یابد و نتایج حاضر در این مطالعه بر روی نیروی فشاری بحرانی نانو مخروط کربنی دو جداره نشان می‌دهد که با کاهش زاویه راس، نیروی فشاری بحرانی کاهش می‌یابد به عبارتی افزایش زاویه راس در نانو مخروط‌های کربنی دو جداره، افزایش نیروی فشاری بحرانی را در پی دارد. همچنین در اعمال شرایط مرزی یکسان بر روی نانو مخروط کربنی تک جداره و دو جداره نیز اختلاف مشاهده شد

## ۶- مراجع

- [1] Iijima S., Helical microtubules of graphitic carbon, *Transactions of Nonferrous Metals Society*, Vol. 354, No. 6348, pp. 56-58, 1991.
- [2] Kroto H. W., Heath J. R., O'Brien S. C., Curl R. F. and Smalley R. E., C60: Buckminsterfullerene, *Nature*, Vol. 318, No. 6042, pp. 162-163, 1985.
- [3] Kong X. Y., Ding Y., Yang R. and Wang Z. L., Single-crystal nanorings formed by epitaxial self-coiling of polar nanobelts,

- [22] Hu Y., Liew K. M., He X. Q., Li Z. and Han J., Free transverse vibration of single-walled carbon nanocones, *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 50, No. 12, pp. 4418–4423, 2012.
- [23] Yan J. W., Liew K. M. and He L. H., *Ultra-sensitive analysis of a cantilevered single-walled carbon nanocone-based mass detector*, *Nanotechnology*, Vol. 24, No. 12, Article ID 125703, 2013.
- [24] Fakhrebadi M. M. S., Khani N., Omidvar R. and Rastgoo A., *Investigation of elastic and buckling properties of carbon nanocones using molecular mechanics approach*, *Computational Materials Science*, Vol. 61, pp. 248–256, 2012
- [25] Ansari R. and Rouhi S., Atomisticfinite element model for axial buckling of single-walled carbonnanotubes, *PhysicaE:Low-Dimensional System sand Nanostructures*, Vol.43, No.1, pp.58–69, 2010.
- [26] Ansari R., Rouhi S. and Aryayi M., On the vibration of double-walled carbon nanotubes using molecular structural and cylindrical shell models, *International Journal of Modern Physics*, Vol. 30 (2016) 1650007 (20 pages).
- [27] Shahnazari A., Ansari R. and Rouhi S., On the stability characteristics of zigzag phosphorene nanotubes: A finite element investigation, *J. Alloys Compd*, Vol. 702, pp. 388–398, 2017.
- [28] Yeong-Bin Yang and Shyh-Rong Kuo, *Theory and analysis of nonlinear framed structures*, *Prentice Hall, United States of America*, 1994.