



دانشگاه صنعتی شریف
دانشکده مهندسی مکانیک

پایان نامه کارشناسی ارشد
گرایش طراحی کاربردی

تحلیل پایداری نانوتیوب‌های هیبریدی بر اساس
تئوری‌های مبتنی بر مکانیک محیط‌های پیوسته غیرموضعی

نگارش:
یعقوب رافتی هروی

استاد راهنما:
دکتر محسن اصغری

۱۳۸۹ دی ماه



تقدیم به مادرم

چکیده

میدان جاذبه‌ی پتانسیل وان در والس بالای نانوتیوب‌های کربنی امکان محبوس سازی برخی نانوساختارها را درون فضای خالی داخل نانوتیوب مهیا می‌سازد که در شرایط خاصی منجر به تشکیل نانوساختارهای هیبریدی جدیدی می‌شود. از جمله مهم‌ترین نانوساختارهای هیبریدی شناخته شده نانوپیپادهای کربنی، نانوسیم‌های کربنی و هیبرید نانوتیوب و DNA می‌باشد. نانوساختارهای هیبریدی خواص منحصر به فرد و متفاوتی نسبت به نانوتیوب کربنی دارند. در نانوساختارها، فضای خالی بین اتم‌ها نسبت به ابعاد نانوساختار شایان توجه بوده و نمی‌توان از آن صرف‌نظر کرد. ضمناً، طول مشخصه داخلی نانوساختارها در مرتبه طول مشخصه خارجی آنها می‌باشد. بنابراین توجیه استفاده از تئوری مکانیک محیط پیوسته کلاسیک برای مدلسازی نانوساختارها که اساساً بر فرض پیوستگی استوار است، مبهم می‌باشد. برای رفع این ابهام، برخی محققین به جای تئوری کلاسیک از تئوری‌های کانتینیومی غیرکلاسیکی که می‌توانند تاثیرات ابعاد کوچک (در حد نانومتر) و ناپیوستگی ذاتی نانوساختارها را در نظر بگیرد، بهره می‌برند. تئوری کانتینیوم غیرموضعی، یکی از تئوری‌های کانتینیومی غیرکلاسیک است که تاثیرات مقیاس‌های کوچک و عدم پیوستگی محیط مادی در معادلات مشخصه این تئوری لحاظ شده است. در این پژوهش، ابتدا اندرکنش اتمی بین اجزا محبوس در نانوساختار هیبریدی با نانوتیوب کربنی، با توزیع فشار و نیرو مدل شده‌اند. سپس معادلات حاکم بر تعادل مدل‌های کمانشی نانوتیوب‌های هیبریدی تحت بارگذاری‌های عمومی مکانیکی (فشار، نیروی محوری و پیچش) با استفاده از مدل‌های کمانش نانوساختارهای هیبریدی موضعی مطالعه شده است. در نهایت، با ارائه چند مثال عددی برای کمانش نانوساختارهای هیبریدی خاص، نتایج مدل‌های غیرموضعی با نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مقایسه گردیده است. نتایج هر دو مدل نشان می‌دهد که در نانوساختارهای هیبریدی که خود به خود تشکیل می‌شوند، اجزای محبوس شده در نانوساختار هیبریدی، مقاومت کمانشی نانوتیوب کربنی را تحت بارگذاری‌های مختلف افزایش می‌دهند.

کلمات کلیدی:

۱. ناپایداری کمانشی
۲. نانوساختار هیبریدی نانوتیوب
۳. تئوری الاستیسیته غیرموضعی
۴. نانوپیپاد کربنی
۵. نانوسیم کربنی
۶. DNA
۷. تاثیر ابعاد کوچک

فهرست مطالب

IV	فهرست اشکال و جداول
<u>۱</u>	<u>فصل اول: مقدمه</u>
۱	۱-۱: کلیات
۲	۱-۲: مروری بر دبیره
۶	۱-۳: موضوع رساله و ساختار آن
<u>۸</u>	<u>فصل دوم: نانوساختارهای هیبریدی نانوتیوب</u>
۸	۲-۱: آلوتروپهای کربن
۸	۲-۱-۱: فولرین‌ها
۹	۲-۱-۲: نانوتیوبهای کربنی
۱۱	۲-۲: DNA
۱۴	۲-۳: نانوساختارهای هیبریدی نانوتیوبهای کربنی
۱۴	۲-۳-۱: نانوپیپادهای کربنی
۱۶	۲-۳-۲: نانوسیم‌های کربنی
۱۸	۲-۳-۳: نانوساختار هیبریدی نانوتیوب و DNA
<u>۱۹</u>	<u>فصل سوم: اندرکنش اجزای نانوساختارهای هیبریدی</u>
۱۹	۳-۱: پتانسیل‌های بین اتمی
۲۰	۳-۲: مدلسازی اندرکنش بین لایه‌های کربن در نانوتیوب چندلایه
۲۲	۳-۳: مدلسازی اندرکنش بین شبکه فولرین محبوس و نانوتیوب
۲۵	۳-۴: مدلسازی اندرکنش بین زنجیره‌ی کربنی محبوس و نانوتیوب
۲۸	۳-۵: مدلسازی اندرکنش بین DNA محبوس و نانوتیوب
<u>۳۰</u>	<u>فصل چهارم: مدل‌های کانتینیومی غیرموضعی</u>
۳۱	۴-۱: مبانی تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی
۳۲	۴-۲: مدل زنجیره‌ی غیرموضعی
۳۴	۴-۳: مدل تیر غیرموضعی
۳۷	۴-۴: مدل میله‌ی غیرموضعی
۴۱	۴-۵: مدل پوسته‌ی غیرموضعی
<u>۴۸</u>	<u>فصل پنجم: تحلیل ناپایداری نانوپیپادها</u>

۴۸	۱: معادلات حاکم بر پایداری نانوپیپادها
۵۰	۲: آنالیز کمانش نانوپیپادها
۵۰	۳-۱: ناپایداری نانوپیپاد تحت فشار خارجی
۵۳	۳-۲: ناپایداری نانوپیپاد تحت تورک پیچشی
۵۸	۳-۳: ناپایداری نانوپیپاد تحت نیروی محوری
۶۲	۳: نتایج عددی و بحث
۶۳	۱-۱: کمانش نانوپیپاد (10,10)@C ₆₀ تحت فشار خارجی
۶۵	۱-۲: کمانش نانوپیپاد (10,10)@C ₆₀ تحت تورک پیچشی
۷۰	۱-۳: کمانش نانوپیپاد (10,10)@C ₆₀ تحت نیروی محوری

فصل ششم: تحلیل ناپایداری نانوسیم‌ها

۷۲	۱: معادلات حاکم بر پایداری نانوسیم
۷۸	۲: آنالیز کمانش نانوسیم
۷۹	۳-۱: ناپایداری نانوسیم تحت فشار خارجی
۸۱	۳-۲: ناپایداری نانوسیم تحت تورک پیچشی
۸۵	۳-۳: ناپایداری نانوسیم تحت نیروی محوری
۸۹	۳: نتایج عددی و بحث
۸۹	۱-۱: کمانش نانوسیم تک لایه تحت فشار خارجی
۹۶	۱-۲: کمانش نانوسیم تک لایه تحت تورک پیچشی
۹۹	۱-۳: کمانش نانوسیم تک لایه تحت نیروی محوری

فصل هفتم: تحلیل ناپایداری ساختار هیبریدی نانوتیوب و DNA

۱۰۲	۱: معادلات حاکم بر پایداری نانوساختار هیبریدی نانوتیوب و DNA
۱۰۶	۲: کمانش نانوساختار هیبریدی نانوتیوب و DNA
۱۰۸	۳-۱: ناپایداری DNA@CNT تحت فشار خارجی
۱۱۲	۳-۲: ناپایداری DNA@CNT تحت تورک پیچشی
۱۱۶	۳-۳: ناپایداری DNA@CNT تحت نیروی محوری
۱۲۰	۳: نتایج عددی و بحث
۱۲۱	۱-۱: کمانش (ssDNA@10,10) تحت فشار خارجی
۱۲۳	۱-۲: کمانش (ssDNA@10,10) تحت تورک پیچشی
۱۲۶	۱-۳: کمانش (ssDNA@10,10) تحت نیروی محوری

فصل هشتم: نتیجه‌گیری، جمع‌بندی و پیشنهادات

۱۳۰	۱: نتیجه‌گیری
۱۳۷	۲: نوآوری‌های صورت گرفته در رساله
۱۳۹	۳-۱: پیشنهادات برای ادامه‌ی پژوهش

۱۴۰.....	مراجع
۱۴۸.....	پیوست: مقالات مستخرج از رساله

فهرست اشکال و جداول

..... شکل ۲-۱: ساختار اتمی سومین آلوتروپ کربن، فولرین C_{60}	۹
..... شکل ۲-۲: اولین نانوتیوب چندلایه مشاهده شده	۹
..... شکل ۲-۳: (الف): بردار مشخصه نانوتیوب، (ب): انواع نانوتیوب تک لایه	۱۰
..... شکل ۲-۴: شمای مارپیچی DNA دو رشته	۱۲
..... شکل ۲-۵: ساختار نوکلئوتید در هر رشته ssDNA	۱۲
..... شکل ۲-۶: ساختار DNA، آدنین و تیمین، گوانین و سیتیزین	۱۳
..... شکل ۲-۷: تصویر HRTEM نانوپیپاد $C_{60}@CNT$	۱۵
..... شکل ۲-۸: نانوتیوب هیبرید با یک زنجیره کربنی محبوس در میان آن	۱۶
..... شکل ۲-۹: عکس دقیقی از نانوسیم، نانوتیوب هیبرید با یک زنجیره کربنی محبوس در میان آن [۱۶]	۱۷
..... شکل ۲-۱۰: تصویر HRTEM از DNA محبوس در نانوتیوب کربنی	۱۸
..... شکل ۳-۱: مقطع نانوتیوب چندلایه	۲۰
..... شکل ۳-۲: ساختار اتمی نانوپیپاد تک لایه $C_{60}@(10,10)$	۲۳
..... شکل ۳-۳: ساختار اتمی یک نانوسیم چندلایه	۲۵
..... شکل ۳-۴: شکل شماتیک نانوسیم تک لایه	۲۶
..... شکل ۳-۵: ساختار اتمی نانوساختار هیبریدی ssDNA محبوس در نانوتیوب کربنی	۲۸
..... شکل ۴-۱: المانی از تیر، موقعیت دستگاه مختصات	۳۴
..... شکل ۴-۲: المانی از میله، موقعیت دستگاه مختصات، بارهای وارد	۳۷
..... شکل ۴-۳: مدل پوسته‌ای استوانه‌ای، موقعیت دستگاه مختصات	۴۱
..... شکل ۴-۴: المانی از پوسته‌ی استوانه‌ای، موقعیت دستگاه مختصات	۴۳

..... ۴۸	شکل ۱-۵: شکل شماتیک نانوپیپاد
..... ۶۳	شکل ۲-۵: فشار شعاعی بحرانی نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η
..... ۶۴	شکل ۳-۵: فشار شعاعی بحرانی نانوپیپاد $C_{60}@(10,10)$ و نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η
..... ۶۵	شکل ۴-۵: درصد افزایش فشار شعاعی بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن فولرین های C_{60} درون نانوتیوب به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .
..... ۶۶	شکل ۵-۵: تورک پیچشی بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 10\text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .
..... ۶۷	شکل ۵-۶: تورک پیچشی بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 12.62\text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η
..... ۶۸	شکل ۷-۵: تورک بحرانی نانوپیپاد $C_{60}@(10,10)$ و نانوتیوب (10,10) به طول $L = 10\text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η
..... ۶۹	شکل ۸-۵: درصد افزایش تورک پیچشی بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن فولرین های C_{60} درون نانوتیوب به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .
..... ۷۰	شکل ۹-۵: نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .
..... ۷۱	شکل ۱۰-۵: نیروی محوری بحرانی نانوپیپاد $C_{60}@(10,10)$ و نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η
..... ۷۳	شکل ۱-۶: شکل شماتیک یک نانوسیم
..... ۹۰	جدول ۶-۱: مشخصات و پارامترهای نانوسیمهای مورد مطالعه
..... ۹۰	شکل ۶-۲: فشار خارجی بحرانی نانوتیوبهای خالی (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η
..... ۹۱	جدول ۶-۲: فشار بحرانی مربوط به نانوتیوبها به روش MD و مدل پوسته‌ی غیرموضعی

- شکل ۶-۳: فشار خارجی بحرانی نانوسیم‌ها (نانوتیوب‌های میزبان (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) هیبرید با زنجیره‌ی کربنی) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ۹۲
- جدول ۶-۳: فشار بحرانی مربوط به نانوسیم‌ها به روش MD و مدل پوسته‌ی غیرموضعی ۹۳
- شکل ۶-۴: درصد افزایش فشار بحرانی نانوتیوب‌های میزبان (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) در اثر محبوس شدن زنجیره‌ی کربنی در هر نانوتیوب، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ۹۴
- جدول ۶-۴: درصد افزایش فشار بحرانی مربوط به نانوسیم‌ها به روش MD و مدل پوسته‌ی غیرموضعی ۹۵
- شکل ۶-۵: تورک پیچشی بحرانی نانوتیوب‌های خالی (5,5) و (9,0) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ۹۶
- شکل ۶-۶: تورک بحرانی نانوتیوب‌های (5,5) و (9,0) به همراه تورک بحرانی نانوسیم متناظر، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ۹۷
- شکل ۶-۷: درصد افزایش تورک بحرانی نانوتیوب‌های میزبان (5,5) و (9,0) در اثر محبوس شدن زنجیره‌ی کربنی در هر نانوتیوب، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ۹۸
- شکل ۶-۸: نیروی محوری بحرانی نانوتیوب‌های خالی (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ۹۹
- شکل ۶-۹: نیروی محوری بحرانی نانوسیم‌ها (نانوتیوب‌های میزبان (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) هیبرید با زنجیره‌ی کربنی) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ۱۰۰
- شکل ۶-۱۰: درصد افزایش نیروی محوری بحرانی نانوتیوب‌های میزبان (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) در اثر محبوس شدن زنجیره‌ی کربنی در هر نانوتیوب، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ۱۰۱
- شکل ۷-۱: فشار شعاعی بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9\text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ۱۲۱
- شکل ۷-۲: فشار شعاعی بحرانی نانوساختار هیبریدی (10,10) و نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ۱۲۲

- شکل ۷-۳: درصد افزایش فشار شعاعی بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن ssDNA به ازای پارامتر ابعاد کوچک η . ۱۲۳.....
- شکل ۷-۴: تورک پیچشی بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η . ۱۲۴.....
- شکل ۷-۵: تورک پیچشی بحرانی نانوساختار هیبریدی ssDNA@(10,10) و نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η . ۱۲۵.....
- شکل ۷-۶: درصد افزایش تورک بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن ssDNA به ازای پارامتر ابعاد کوچک η . ۱۲۵.....
- شکل ۷-۷: نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η . ۱۲۶.....
- شکل ۷-۸: نیروی محوری بحرانی نانوساختار هیبریدی ssDNA@(10,10) و نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η . ۱۲۷.....
- شکل ۷-۹: درصد افزایش نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن ssDNA به ازای پارامتر ابعاد کوچک η . ۱۲۸.....

فصل اول: مقدمه

۱-۱: کلیات

از زمان کشف فولرین^۱ توسط کروتو و همکاران [۱] و مشاهدهی نانوتیوب کربنی^۲ (CNT) توسط ایجیما [۲]، تحقیقات گستردۀای برای شناخت، سنتز و کاربرد این دو آلوتروپ جدید کربن انجام شده است. فضای داخل نانوتیوب خالی است و تحقیقات چندی به صورت تجربی و نظری امکان جذب بعضی مولکول‌ها و نانوساختارها^۳ به درون نانوتیوب را به خاطر میدان پتانسیل وان در والس^۴ (vdW) قوی نانوتیوب، پیش‌بینی کردند. امکان محبوس شدن^۵ خودبه‌خود اتم‌ها و مولکول‌هایی نظیر He^۶، H₂، CO₂، CO و CH₄ [۵] درون نانوتیوب گزارش شده است. همچنین تشکیل شبکه‌های منظم فولرین‌های C₆₀ درون نانوتیوب که منجر به ایجاد نانوساختارهای جدیدی به عنوان ساختارهای هیبریدی نانوتیوب کربنی می‌شود، توسط اسمیت و همکارانش [۶، ۷] مشاهده و گزارش شده است. به این ساختار هیبریدی جدید، نانوپیپاد کربنی^۸ (CNP) می‌گویند که خواص الکتریکی، شیمیایی و مکانیکی متفاوتی با نانوتیوب دارد [۸-۱۰]. ساختارهای هیبریدی زنجیره‌های کربنی احاطه شده توسط نانوتیوب که تحت عنوان نانوسیم کربنی^۹ (CNW) شناخته می‌شود، نیز توسط گروههای مختلف پژوهشگران مشاهده، شناسایی و آنالیز شده‌اند [۱۱-۱۶]. ویژگی‌های منحصر به فرد نانوسیم‌ها مانند خواص فرومغناطیسی و ابرسانایی بالا، امکان کاربرد این نانوساختارهای هیبریدی را در ساخت سنسورها و عملگرهای ویژه در

Fullerene^۱

Carbon nanotube (CNT)^۲

Nano-structures^۳

Van der Waals (vdW)^۴

Encapsulation^۵

Carbon nano-peapod (CNP)^۶

Carbon nanowire^۷

ابعاد نانو محتمل می‌سازد [۲۰-۱۷]. همچنین، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی^۸ (MD) قرارگیری مولکول‌های بیوارگانیک مثل DNA را درون نانوتیوب کربنی به خاطر برهم‌کنش vdW بین DNA و نانوتیوب پیش‌بینی می‌کند [۲۱، ۲۲].

ساختارهای هیبریدی مشتق شده از نانوتیوب خواص متفاوتی نسبت به نانوتیوب نشان می‌دهند، که این خود بیانگر مهم‌ترین ویژگی نانوتیوب یعنی نقش‌پذیری^۹ یا تنظیم‌پذیری^{۱۰} می‌باشد [۲۱]. با توجه به ویژگی‌های جالب و منحصر به فرد نانوساختارهای هیبریدی نانوتیوب و کاربرد احتمالی آن‌ها در مهندسی و تکنولوژی آینده، مطالعه، شناخت و مدل‌سازی این نانوساختارها بحث روز پژوهشگران حوزه‌های مختلف علوم و مهندسی شده است [۸، ۹، ۱۷، ۲۱، ۲۳]. شناخت رفتار مکانیکی، سازه‌ای و پایداری در مقابل بارهای مختلف یکی از مهم‌ترین حوزه‌های شناخت و مدل‌سازی این نانوساختارها می‌باشد. به عنوان مثال رفتار مکانیکی نانوپیپادها تحت بارگذاری‌های مختلف مکانیکی توسط گروههای مختلفی مطالعه و مدل‌سازی شده است [۳۴-۳۳]. در مورد مدل‌سازی و تحلیل رفتارهای پایداری نانوسیم‌ها نیز چندین کار پژوهشی انجام شده است [۳۵، ۳۴].

۱-۲: مروری بر دبیره

برای مطالعه خواص مکانیکی نانوساختارها، روش‌های مختلفی ارائه شده است، که متداول‌ترین آن‌ها روش‌های تجربی، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و مدل‌سازی مبتنی بر تئوری‌های مکانیک محیط پیوسته^{۱۱} (کانتینیوم) می‌باشد. در شرایط فعلی، انجام آزمایش و کارهای تجربی بر روی ساختارهایی از ابعاد نانومتر بسیار مشکل و پرهزینه می‌باشد. روش‌های دینامیک مولکولی، در شبیه‌سازی رفتار نانوساختارها نسبتاً دقیق می‌باشند. در اینجا مثال‌هایی از کاربرد شبیه‌سازی MD در مطالعه پایداری مکانیکی نانوپیپادها و نانوسیم‌ها ارائه می‌شود. نی و همکاران [۲۹] پایداری نانوپیپاد (C₆₀@(10,10)) را

Molecular dynamics (MD)^۸

Functionality^۹

Tunability^{۱۰}

Continuum mechanics^{۱۱}

تحت بارگذاری محوری با شبیه‌سازی MD مطالعه کرده‌اند. مطالعه آن‌ها نشان می‌دهد که نیروی لازم برای کمانش نانوپیپاد C_{60} بیشتر از نیروی بحرانی نانوتیوب (10,10) است، یعنی حضور فولرین‌های C_{60} درون نانوتیوب (10,10) باعث افزایش مقاومت در برابر ناپایداری محوری می‌شود. همچنین، وانگ [۳۰] و جئونگ و همکاران [۳۱] به صورت مجزا، با به کارگیری شبیه‌سازی MD افزایش مقاومت در برابر ناپایداری پیچشی نانوپیپاد C_{60} نسبت به نانوتیوب (10,10) را گزارش کرده‌اند. در مورد نانوسیم‌ها، سونگ و همکاران [۳۵] تاثیر حضور زنجیره‌ی کربنی درون نانوتیوب با اقطار مختلف را در رفتار پیچشی نانوتیوب کربنی با به کارگیری شبیه‌سازی MD مطالعه کرده‌اند. همچنین [۳۴] تاثیر هیبرید شدن زنجیره‌ی کربنی با نانوتیوب‌های مختلف را در مقدار فشار بحرانی نانوتیوب کربنی به روش MD مطالعه کرده‌اند. این شبیه‌سازی‌ها نشان می‌دهد که نانوتیوب در اثر حضور زنجیره‌ی کربنی محبوس، مقاوم‌تر می‌شود [۳۴، ۳۵].

هر چند، با استفاده از روش‌های شبیه‌سازی مولکولی می‌توان به نتایج نسبتاً دقیق و قابل اعتمادی دست یافت، ولی این روش‌ها بسیار وقت‌گیر و از لحاظ محاسباتی پر هزینه می‌باشند. از این‌رو، پژوهشگران حوزه‌ی علوم مهندسی، به مدل‌های مبتنی بر تئوری‌های کانتینیوم روی آورده‌اند. به عنوان مثال می‌توان به مقاله‌ی لی و چو [۳۶] اشاره کرد که در آن پیوندهای اتمی بین اتم‌های کربن نانوتیوب، توسط تیرهایی با مدول الاستیسیته کششی و پیچشی مناسب مدل شده‌اند و نانوتیوب مدل شده به روش اجزا محدود مورد بررسی قرار گرفته و خواص الاستیک نانوتیوب برای طول‌ها و قطرهای مختلف به دست آمده است. گروهی از محققین به منظور مطالعه رفتار کمانشی نانوتیوب از مدل‌های تیر کانتینیومی استفاده کرده‌اند [۳۷، ۳۸]. مدل‌های مذکور در عین اینکه رفتار کمانشی محوری نانوتیوب‌های بلند (ضریب رعنایی بزرگتر از ۱۰) را منطبق با مشاهدات تجربی و شبیه‌سازی MD پیش‌بینی می‌کنند، اما قادر به پیش‌بینی رفتار کمانش‌های موضعی نانوتیوب‌های کوتاه، نمی‌باشند [۳۹]. متداول‌ترین مدل کانتینیومی که رفتار کمانشی نانوتیوب را مشابه شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی توصیف می‌کند، مدل پوسته می‌باشد که محققین به کرار از این مدل برای آنالیز رفتار کمانشی نانوتیوب بهره جسته‌اند. رو [۴۰]

کیتیپونچای و همکاران [۴۱] با به کارگیری مدل پوسته‌های هم محور، ناپایداری محوری نانوتیوب‌های چندلایه را آنالیز کرده است. در این مقالات اندرکنش وان در والس بین لایه‌های مجاور نانوتیوب با توزیع فشار متناسبی مدل شده است. هم‌چنین، آنالیز کمانش نانوتیوب تحت بارگذاری فشار خارجی [۴۲، ۴۳] و پیچشی [۴۴، ۴۵] با استفاده از مدل کانتینیومی پوسته در مقالات متعددی بررسی شده است.

تحقیقات گسترده‌ای نشان داده است که DNA های طویل همچون کابل‌های دراز در اثر بارگذاری پیچشی و فقدان کشش دچار تابیدگی و تنبیدگی می‌شوند، در چند مرحله حلقه‌هایی تشکیل می‌شود، ابرتنیدگی رخ می‌دهد و در نهایت به صورت کروموزوم درون هسته‌ی سلول قرار می‌گیرد [۴۶-۵۲]. رفتار کانتینیومی DNA بسیار غیرخطی و پیچیده است [۵۲، ۵۴]. DNA از نظر ساختاری بار کششی، فشاری، پیچش و خمش را تحمل می‌کند و جدای از ساختار ناپیوسته در ابعاد اتمی، می‌توان رفتار کانتینیومی DNA را با مدل میله‌ی کشسان مطالعه کرد [۵۵، ۵۲]. پیچیدگی، تنبیدگی و تشکیل حلقه در DNA در اثر بارگذاری، در طول‌های کوچکتر از 50 nm مشاهده نمی‌شود، اما در هر صورت می‌توان DNA را با مدل کانتینیومی میله‌ی کشسان هم‌ابعاد مدلسازی نمود [۵۲].

از مدل‌های کانتینیومی پوسته برای نانوتیوب در آنالیز کمانشی نانوساختارهای هیبریدی نیز استفاده شده است. سوهی و نقدآبادی، با مدلسازی اندرکنش فولرین‌های C₆₀ با نانوتیوب محاط آن‌ها، با توزیع فشار شعاعی و در نظر گرفتن تابع فشار به‌دست آمده در معادلات پوسته، مدلی برای توصیف کمانش نانوپیپادها تحت فشار خارجی، ممان پیچشی و بار ترکیبی فشار خارجی و محوری ارائه کرده‌اند [۳۲، ۳۳، ۵۶].

در نانوساختارها، فضای خالی بین اتم‌ها نسبت به ابعاد نانوساختار شایان توجه بوده و نمی‌توان از آن صرف‌نظر کرد. ضمناً طول مشخصه داخلی نانوساختارها (طول پیوند اتمی و ...) در مرتبه طول مشخصه خارجی (طول موج و ابعاد نانوساختار...) می‌باشد. بنابراین توجیه استفاده از تئوری‌های مبتنی بر مکانیک محیط پیوسته کلاسیک برای مدلسازی نانوتیوب که اساساً بر فرض پیوستگی استوار است، زیر سوال می‌رود. به عبارت دیگر باید به جای کانتینیوم کلاسیک از تئوری‌های کانتینیومی غیرکلاسیک جدیدی که

می‌توانند تاثیرات ابعاد کوچک^{۱۲} (در حد نانومتر) و ناپیوستگی ذاتی نانوساختارها را در نظر بگیرد، بهره برد. تئوری کانتینیوم غیرموضعی^{۱۳} که توسط ارینگن [۵۷، ۵۸] معرفی شده است، یکی از تئوری‌های کانتینیومی غیرکلاسیک است که تاثیرات مقیاس‌های کوچک و فلسفه‌ی عدم پیوستگی محیط مادی و در نتیجه ناپیوستگی میدان‌های مکانیکی (تansورهای تنش و کرنش) در معادلات مشخصه^{۱۴} این تئوری لحاظ شده است. پدیسون و همکاران در سال ۲۰۰۳ [۵۹] برای اولین بار الزام استفاده از تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی برای مدلسازی نانوساختارها را مطرح کرد و فرمولاسیون مدل غیرموضعی تیر اویلر - برنولی را برای بحث کمانش ساختارهای کوچک ارائه نمود. سایر مدل‌های تیر غیرموضعی هم توسط محققین مختلف ارائه شده و کاربرد آن‌ها در آنالیز کمانش نانوتیوب مورد بحث قرار گرفته شده است [۶۰-۶۲].

مدل‌های پوسته غیرموضعی به عنوان مناسب‌ترین مدل کانتینیومی برای مدلسازی نانوساختارها به خصوص نانوتیوب برای آنالیز کمانشی، ارتعاشی و انتشار امواج^{۱۵} در دبیره مطرح شده‌اند. ژانگ و همکاران با ارائه فرمولاسیون پوسته غیرموضعی اثر ابعاد کوچک را بر روی کمانش نانوتیوب‌های چندلایه را تحت نیروی محوری [۶۳] و فشار شعاعی خارجی [۶۴] مطالعه کرده‌اند. همچنین کمانش پیچشی نانوتیوب‌های چندلایه با استفاده از مدل پوسته غیرموضعی توسط گروههای مختلفی بررسی شده و تاثیر ابعاد کوچک بر آنالیز ناپایداری پیچشی با اعمال معادلات ساختاری الاستیسیته‌ی غیرموضعی بررسی شده است. [۶۵، ۶۶]. لی و کارماتئوس از مدل پوسته غیرموضعی برای تحلیل کمانش نانوتیوب تحت بارگذاری حرارتی [۶۷] و همچنین تحلیل رفتار ارتعاشی نانوتیوب چندلایه استفاده کرده‌اند [۶۸]. اصغری و رافتی با اعمال روش‌های حساب تغییرات به مدل پوسته غیرموضعی، روابط تغییراتی و شرایط مرزی حاکم بر

^{۱۲} Small scales effects

^{۱۳} The nonlocal continuum theory

^{۱۴} Constitutive equation

^{۱۵} Wave propagation

تعادل نانوتیوب چندلایه را به دست آورده‌اند و روشی کلی برای تعیین بارهای بحرانی نانوتیوب چندلایه ارائه نموده‌اند [۶۹].

بهره‌گیری از مدل‌های پوسته‌ی غیرموضعی به آنالیز رفتار کمانشی نانوتیوب ختم نمی‌شود و کارایی این مدل در مطالعه‌ی انتشار امواج نانوتیوب‌های چندلایه و مطابقت نتایج عددی با نتایج موجود MD در مقالات متعددی تاکید شده است [۷۰، ۷۱].

۱-۳: موضوع رساله و ساختار آن

با مرور مقالات دبیره‌ی نانوتکنولوژی، متوجه فقدان کار پژوهشی در زمینه‌ی تحلیل پایداری نانوساختارهای هیبریدی نانوتیوب کربنی می‌شویم. با توجه به پتانسیل بالای این نانوساختارهای هیبریدی در کاربردهای مهندسی آینده، ایجاب می‌نماید تا با استفاده از مدل‌های معتبر کانتینیومی غیرکلاسیک (مثل تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی) که آثار ابعاد کوچک نانوساختارها را در نظر می‌گیرد، به مدل‌سازی و مطالعه‌ی پایداری نانوساختارهای هیبریدی مهم نانوتیوب کربنی، از جمله نانوپیپادهای کربنی، نانوسیم‌های کربنی و نانوساختار هیبریدی نانوتیوب و DNA، پرداخته شود.

بر این اساس، ارائه‌ی فرمولاسیون مدل‌های کانتینیومی غیرموضعی، مدل‌سازی اندرکنش بین اعضای نانوساختارهای هیبریدی، ارائه معادلات حاکم بر تعادل نانوساختارهای هیبریدی نانوتیوب کربنی و حل این معادلات به منظور تعیین بارهای بحرانی نانوساختار هیبریدی و همچنین بررسی تاثیر حضور نانوساختار محبوس در مقاومت پایداری نانوساختارهای هیبریدی هدف اصلی این رساله می‌باشد.

ساختار فصول بعدی این رساله به قرار زیر است:

در فصل دوم، نانوساختارهای هیبریدی مورد بررسی در این رساله یعنی، نانوپیپادهای کربنی، نانوسیم‌های کربنی و نانوساختار هیبریدی DNA و نانوتیوب کربنی، و همچنین، اجزای تشکیل دهنده‌ی نانوساختارهای هیبریدی، یعنی فولرین، نانوتیوب کربنی و DNA معرفی می‌شوند. در فصل سوم،

اندرکنش‌های اتمی بین اجزای تشکیل دهنده‌ی نانوساختارهای هیبریدی، با مفاهیم کانتینیومی توزیع نیرو و فشار مدلسازی شده است. توزیع فشار وان در لایه‌های نانوتیوب و توزیع نیرو در زنجیره‌ی کربنی و DNA در اندرکنش متقابل ارائه شده است. در فصل چهارم، ابتدا تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی را معرفی می‌کنیم. سپس فرمولاسیون مدل‌های زنجیره^{۱۶}، تیر، میله و پوسته را با فرضیات تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی برای مدلسازی زنجیره‌ی کربنی، DNA و نانوتیوب ارائه می‌کنیم. در فصل پنجم، معادلات حاکم بر تعادل نانوپیپادهای کربنی بر اساس تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی ارائه شده است. با استفاده از معادلات به دست آمده، کمانش نانوپیپاد تحت بارهای فشار، پیچش و نیروی محوری تحلیل گردیده است. سپس مدل به دست آمده با مثال‌های موجود در دبیره مقایسه گشته است.

فصل ششم، به مطالعه‌ی ناپایداری کمانشی نانوسیم‌های کربنی تحت بارگذاری مختلف بر اساس تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی می‌پردازد. پس از ارائه‌ی مدل کانتینیومی برای فرمولاسیون مسئله، به تحلیل دقیق کمانش نانوسیم‌های کربنی پرداخته شده است. سپس مدل غیرموضعی ارائه شده با مثال‌های موجود در دبیره مقایسه شده است. در فصل هفتم، پس از ارائه‌ی فرمولاسیون کوپل مدل‌های نانوتیوب و DNA، و نیز اعمال اندرکنش وان در والس بین اجزا، ناپایداری نانوساختار هیبریدی DNA و نانوتیوب کربنی با اعمال آثار ابعاد کوچک با استفاده از تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی آنالیز شده است. در ادامه بارهای بحرانی نانوساختار هیبریدی پیش‌بینی گردیده و تاثیر حضور DNA محبوس در مقاومت پایداری نانوساختار هیبریدی مطالعه شده است. در فصل هشتم نیز به جمع‌بندی و نتیجه‌گیری پرداخته خواهد شد.

^{۱۶} String

فصل دوم: نانوساختارهای هیبریدی نانوتیوب

در این فصل، نانوساختارهای هیبریدی مورد بررسی در این رساله یعنی، نانوپیپادهای کربنی، نانوسیم‌های کربنی و نانوساختار هیبریدی DNA و نانوتیوب کربنی، و همچنین، اجزای تشکیل دهندهٔ نانوساختارهای هیبریدی، یعنی فولرین، نانوتیوب کربنی و DNA معرفی می‌شوند.

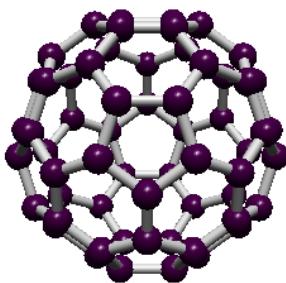
۲-۱: آلوتروپ‌های کربن

کربن اولین عنصر گروه ششم جدول تناوبی دارای 4α الکترون ظرفیت می‌باشد. ویژگی‌های کربن در مقایسه با سایر عناصر به خاطر تنوع ساختار، آلوتروپ و فرم آن، منحصر به فرد است. به جز الماس با پیوندهای هیبریداسیون sp^3 ، گرافیت، فولرین‌ها و نانوتیوب همگی هیبریداسیون sp^2 دارند.

۲-۱-۱: فولرین‌ها

در تحقیقات تجربی دههٔ ۸۰ میلادی، مربوط به آشکارسازی مکانیزم تشکیل زنجیره‌های کربنی خطی دراز در فضای بین ستاره‌ها، کروتو و همکاران [۱] در سال ۱۹۸۵ ساختار قفس‌مانندی از اتم‌های کربن کشف کردند. مولکول C_{60} کشف شده، در واقع به عنوان سومین آلوتروپ کربن، شبکه‌ی بسته‌ای متتشکل از ۶۰ اتم کربن بود که ساختاری نظیر توپ فوتبال (۲۰ حلقه ۶ اتمی و ۱۲ حلقه ۵ اتمی) داشت. ساختار آن، قبل از توسط مهندس معمار، باکمینستر فولر^{۱۷} پیش‌بینی شده بود. بنابراین C_{60} "باکمینستر فولرین"^{۱۸} یا فولرین نامیده می‌شود. در شکل ۱-۲ ساختار اتمی یک فولرین C_{60} ارائه شده است.

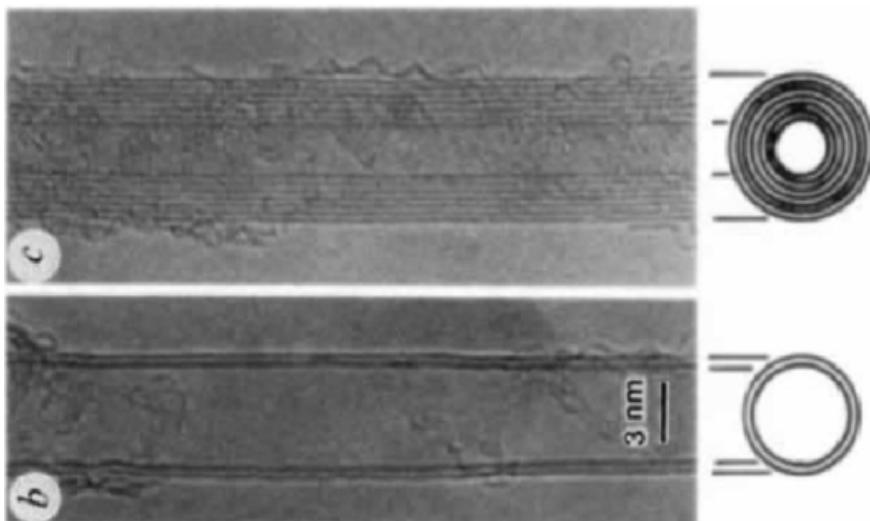
R. Buckminster Fuller^{۱۷}
Buckminsterfullerene^{۱۸}



شکل ۱-۲: ساختار اتمی سومین آلوتروپ کربن، فولرین C_{60}

۱-۲-۲: نانوتیوب‌های کربنی

نانوتیوب کربنی^{۱۹} (CNT)، چهارمین آلوتروپ کربن است که اولین بار توسط ایجیما [۲]، در سال ۱۹۹۱ مشاهده گردید. نانوتیوب‌های کربنی، استوانه‌های توخالی هستند که از یک یا چند لایه‌ی گرافنی که به صورت لوله پیچیده شده‌اند، تشکیل شده است. اولین نانوتیوب مشاهده شده، نانوتیوب کربنی چند لایه با قطر خارجی ۴-۳۰ نانومتر و طول نزدیک به ۱ میکرومتر بود (شکل ۲-۲).

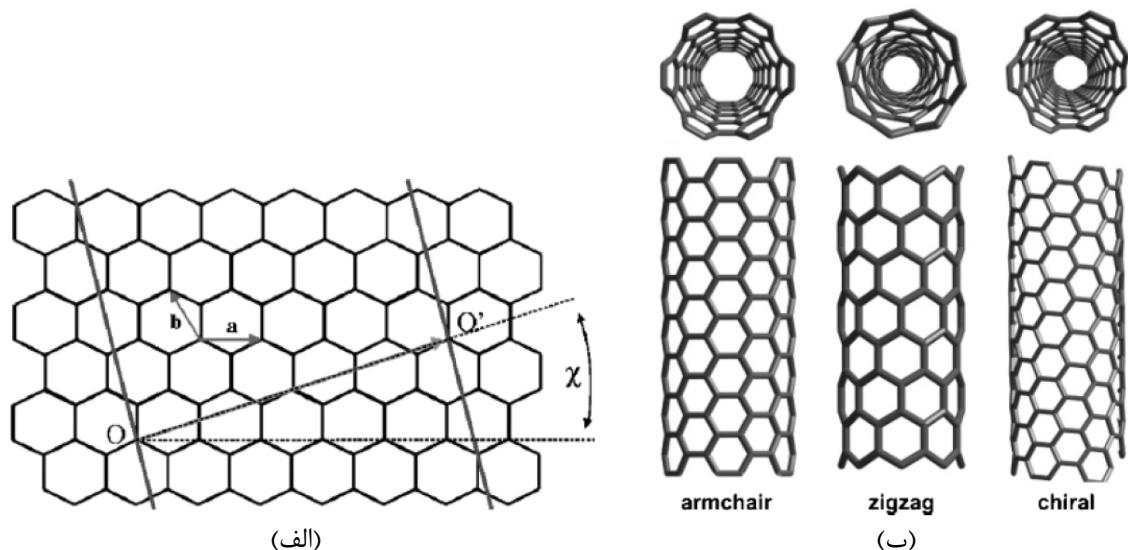


شکل ۲-۲: اولین نانوتیوب چندلایه مشاهده شده [۲]

ساختار نانوتیوب تک‌لایه را می‌توان با دو اندیس (r, s) مشخص کرد. از دید اتمی نانولوله‌های کربنی ساختارهای استوانه‌ای شکلی هستند که از رول کردن یک صفحه گرافین بدست می‌آیند (شکل ۲-۲)

^{۱۹} Carbon nanotube (CNT)

الف). بسته به جهت بردار فرضی رول کردن و مختصات بردار نسبت به شبکه‌ی اتمی گرافین $r\bar{a}+s\bar{b}$ ^{۲۰} به شرط $s=0$ ، آرمچیر^{۲۱} به شرط $r=s$ و کایرال^{۲۲} به شرط $r \neq s$ وجود دارد (شکل ۲-۲ ب). به بردار (r,s) که مشخصه نوع و ابعاد نانوتیوب است اندیس‌های هاما^{۲۳} می‌گویند [۷۲].



شکل ۲-۲: (الف): بردار مشخصه نانوتیوب، (ب): انواع نانوتیوب تک‌لایه [۷۱]

از لحاظ تعداد لایه‌ها، نانوتیوب کربنی به صورت نانوتیوب کربنی تک‌لایه^{۲۴} (SWCNT) یا به صورت نانوتیوب کربنی چند‌لایه^{۲۵} (MWCNT) وجود دارد. نانوتیوب دارای خواص ساختاری، مکانیکی و الکتریکی خارق‌العاده‌ای می‌باشد [۷۳-۷۵]، که به خاطر ویژگی‌های خاص پیوندهای کربنی، طبیعت منحصر به فرد مشابه تک‌بعدی و تقارن استوانه‌ای آن است.

Zigzag	^{۲۰}
Armchair	^{۲۱}
Chiral	^{۲۲}
Hamada indices	^{۲۳}
Single-walled carbon nanotube (SWCNT)	^{۲۴}
Multi-walled carbon nanotube (MWCNT)	^{۲۵}

مشاهدات میکروسکوپ الکترونی تفکیک بالا^{۷۶} (HRTEM)، آشکار می‌سازد که نانوتیوب کربنی دارای خواص ارجاعی فوق العاده بالایی است و لذا کرنش‌های بالایی را در بارگذاری‌های مختلف تحمل می‌کند [۷۶-۷۹] و محاسبات تئوریک هم این درجه از کشسانی را تایید می‌نمایند [۸۰-۸۳]. مدول یانگ نانوتیوب بزرگتر از 1TPa گزارش شده است که حتی بیشتر از 50 برابر مدول یانگ فولاد می‌باشد [۸۴]. [۸۵]

توپولوژی شبکه و ساختار اتمی نانوتیوب بر رفتار الکتریکی آن تاثیرگذار است، به طوری که نانوتیوب‌های آرمچیر خواص رسانایی و نانوتیوب‌های زیگزاگ خواص نیمه رسانایی از خود نشان می‌دهند [۷۲]. تغییر شکل‌های ساختاری و مکانیکی تاثیر شگرفی بر خواص الکتریکی نانوتیوب کربنی می‌گذارد. این خاصیت کوپل بودن الکترومکانیکی در نانوتیوب، امکان تنظیم خواص الکتریکی دلخواه را به واسطه‌ی تغییر شکل مناسب امکان‌پذیر می‌سازد [۸۶-۹۰]. در سال‌های گذشته، سازه‌هایی کاربردی بر پایه‌ی نانوتیوب از جمله ترانسیستور نانوتیوبی [۹۱]، نانودیود [۹۲] ساخته شده است. علاوه بر ویژگی‌های ذکر شده، نانوتیوب قابلیت هیبرید شدن با اکثر مولکول‌ها و نانوساختارها را داراست، که خود ویژگی‌های منحصر به فردی به نانوتیوب می‌افزاید (بخش ۲-۳).

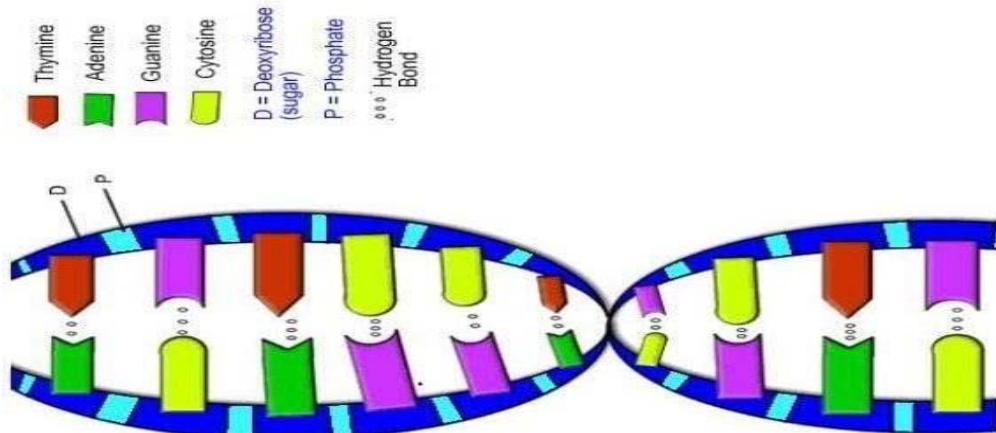
DNA : ۲-۲

دی‌اکسی ریبونوکلئیک اسید^{۷۷}، (DNA) ماده‌ی اصلی تشکیل دهنده‌ی کروموزوم‌ها، یک زنجیره‌ی بیopolymerی دراز است که به عنوان بنیادی‌ترین ماده‌ی زندگی در کره‌ی زمین از آن یاد می‌شود. DNA که در هسته‌ی سلول قرار دارد، حاوی کدهای ژنتیکی مورد نیاز برای تکثیر و سنتز پروتئین‌های لازم برای

High resolution transmission electron microscopy (HRTEM)^{۷۶}

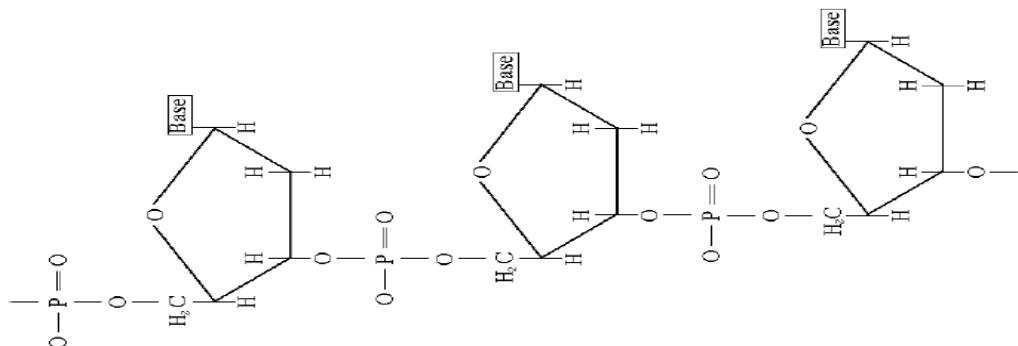
Deoxyribonucleic acid^{۷۷}

ادامه‌ی زندگی است. DNA از دو رشته مارپیچی تشکیل شده است (شکل ۴-۲) که در خلاف جهت هم به صورت راست‌گرد تابیده شده‌اند [۹۳، ۹۴].



شکل ۴-۲: شمای مارپیچی DNA دو رشته [۹۵]

هر رشته، زنجیره‌ای خطی است که از کنار هم قرارگرفتن واحدهای کوچکتر به نام نوکلئوتید ساخته می‌شوند [۹۵]. هر نوکلئوتید یک مولکول قند دارد که از یک سو به گروه فسفات و از سوی دیگر به مولکول پایه^{۲۸} که یک مولکول پورین یا پیریمیدین است متصل می‌شود (شکل ۴-۲ و ۵-۲). هر رشته را یک DNA تک رشته‌ای^{۲۹} می‌نامند (ssDNA).



شکل ۵-۲: ساختار نوکلئوتید در هر رشته‌ی ssDNA [۹۵]

Base^{۲۸}
Single strand DNA (ssDNA)^{۲۹}

قندی که در DNA وجود دارد، نوعی مولکول حلقوی به نام "دی اکسی ریبوز" است. خاصیت ژنتیکی مربوط به قرارگیری پایه‌ها، یعنی پورین‌ها و پیریمیدین‌ها است. دو نوع پورین به نام‌های "آدنین (A)" و "گوانین (G)" و دو نوع پیریمیدین به نام‌های "تیمین (T)" و "سیتیزین (C)" در DNA (شکل ۲-۶) وجود دارد [۹۵].



شکل ۲-۶: ساختار DNA، آدنین و تیمین، گوانین و سیتیزین [۹۵]

دو زنجیره‌ی نوکلئوتیدی ssDNA دور محور مشترکی پیچیده و به صورت مارپیچ تنیده‌ی هلیکالی تشکیل دو رشته‌ای ds-DNA (شکل ۲-۴). در ds-DNA هر پورین از یک رشته ssDNA با پیریمیدین رشته‌ی دیگر، یعنی آدنین با تیمین (A-T) و گوانین با سیتوزین (C-G) پیوند هیدروژنی برقرار می‌کنند. امکان تنوع قرارگیری جفت پایه‌ها^{۳۱} در ds-DNA، به عنوان کد ژنتیکی برای تولید پروتئین‌های ضروری بدن در زمان مشخص به کار می‌رود [۹۵]. استحکام زنجیره‌ی نوکلئوتیدی و پیوندهای هیدروژنی پایه‌ها باعث ایجاد استحکام و پایداری مکانیکی در DNA می‌شود. DNA های طویل همچون کابل‌های دراز در اثر بارگذاری پیچشی و فقدان کشش دچار تابیدگی و تنیدگی می‌شوند، در چند مرحله حلقه‌هایی تشکیل می‌شود، ابرتنیدگی رخ می‌دهد و در نهایت به صورت کروموزوم درون هسته‌ی سلول قرار می‌گیرد [۴۶-۵۲]. رفتار مکانیکی DNAهای دراز بسیار غیرخطی و پیچیده است [۵۳، ۵۴] ولی، در طول‌های کوچک DNA (کوچکتر از 50nm) پیچیدگی، تنیدگی و تشکیل حلقه دیده نمی‌شود و DNA صلبیت بیشتری در این ابعاد دارد [۲۱].

Double strand DNA (ds-DNA)^{۳۰}
Base pairs^{۳۱}

DNA، بسته به شرایطی که در آن قرار دارد، رفتار الکتریکی گوناگونی از خود نمایش می‌دهد، به طوری که DNA می‌تواند تحت شرایطی، رسانا [۹۶]، نارسانا [۹۷]، نیمه رسانا [۹۸] و حتی ابررسانا [۹۹] باشد. از نظر کاربردهای مهندسی، از DNA می‌توان برای اتصال نانوساختارها و نانوذرات به یکدیگر استفاده نمود. همچنین هیبرید DNA با نانوساختارها و از همه مهمتر نانوتیوب کربنی ویژگی‌های منحصر به فردی دارد که در بخش ۲-۳ بحث خواهد شد.

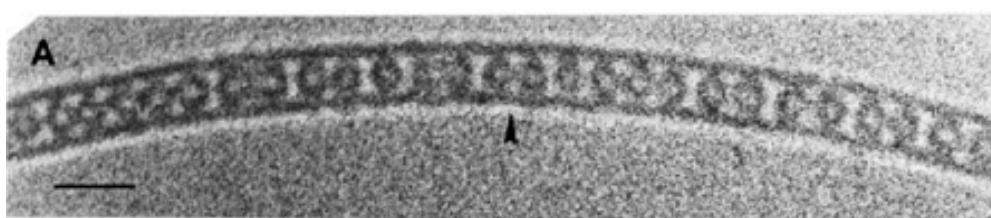
۲-۳: نانوساختارهای هیبریدی نانوتیوب‌های کربنی

فضای داخل نانوتیوب خالی است و تحقیقات چندی به صورت تجربی و نظری امکان جذب بعضی مولکول‌ها و نانوساختارها را در شرایط خاصی به درون نانوتیوب پیش‌بینی کرده‌اند. این فضای خالی می‌تواند به عنوان کanal انتقال جریان مایعات و گازها یا کanal‌های فیلتر ابعاد پایین استفاده شود. میدان پتانسیل وان در والس بالای بعضی نانوتیوب‌ها امکان محبوس سازی خودبه‌خود برخی از مولکول‌ها و ساختارها را درون نانوتیوب مهیا می‌کند. از جمله مهم‌ترین نانوساختارهای هیبریدی شناخته شده نانوپیپادهای کربنی، نانوسيم‌های کربنی و سيستم هیبریدی نانوتیوب با DNA می‌باشد، که هرکدام خواص ویژه‌ای دارند و مورد توجه جامعه‌ی علمی قرار گرفته‌اند.

۲-۳-۱: نانوپیپادهای کربنی

اسمیت و همکاران [۶، ۷] کشف کردند که مولکول‌های فولرین C_{60} می‌توانند درون نانوتیوب محبوس شوند و سيستم هیبریدی ویژه‌ای را تشکیل دهند. آنها با بهره‌گیری از تصاویر میکروسکوپ HRTEM گزارش کردند که مولکول‌های C_{60} بدون نیاز به انرژی فعال‌سازی درون نانوتیوب تک‌لایه با قطر تقریباً در بازه‌ی $1.3\text{--}1.4\text{ nm}$ محبوس می‌شوند (شکل ۷-۲). مناسب‌ترین فاصله بین سطوح خارجی فولرین‌های کروی C_{60} و سطوح داخلی نانوتیوب (يعنى حدود 0.3 nm) برای جذب و محبوس شدن فولرین‌ها در

میدان وان در والس درون نانوتیوب در بازه‌ی $1.3\text{--}1.4\text{ nm}$ از قطر نانوتیوب ایجاد می‌گردد. در این کار اولیه پیش‌بینی شده است که مقاومت مکانیکی نانوساختار هیبریدی حاصل از مقاومت نانوتیوب خالی، بیشتر می‌باشد [۷]. همچنین در مقاله‌ی [۹]، پیش‌بینی شده است که فرایند محبوس شدن فولرین C_{60} درون نانوتیوب (۱۰,۱۰) همراه با آزاد شدن انرژی است، در حالی‌که، برای همین فرایند درون نانوتیوب (۸,۸) یا (۹,۹) باید انرژی صرف شود. بنابراین کوچکترین شعاع نانوپیپادهای کربنی پایدار معادل شعاع نانوتیوب (۱۰,۱۰)، یعنی حدود 0.64 nm گزارش شده است [۹]. نانوساختار هیبریدی نانوتیوب و فولرین را نانوپیپاد کربنی^{۳۲} (CNP) می‌نامند [۱۰، ۱۰۰] که از محبوس شدن یک شبکه‌ی منظم فولرین داخل نانوتیوب به وجود می‌آید. نانوپیپادها را به صورت $C_k @ (r,s)$ مشخص می‌کنند [۱۰] که C_k بیانگر فولرین محبوس شده و (r,s) اندیس‌های هاما‌دا یا همان بردار ساختاری شبکه‌ی نانوتیوب محبوس کننده است.



[۷]: تصویر HRTEM نانوپیپاد $C_{60}@\text{CNT}$

مولکول‌های C_{60} در حالت پرشدن کامل نانوتیوب، شبکه‌ی تک‌بعدی با فاصله‌ی مراکز $C_{60}-C_{60}$ حدود 1 nm تشکیل می‌دهند [۶، ۷، ۲۵، ۱۰۱]. در فرایند کشف پیپادها، رفتارهای جالبی از فولرین‌های محبوس C_{60} در نانوتیوب تک‌لایه با قطر 1.4 nm در موقع پرتوفافکنی میکروسکوپ الکترونی از جمله، تشکیل کلونی‌های دوگانه^{۳۳} فولرین [۷، ۱۰۲]، پیوستن^{۳۴} گروه‌ها [۶، ۱۰۲]، و پخش^{۳۵} فولرین‌ها [۷] مشاهده گردید. این ویژگی‌ها نوید کاربردهای پیشرفته‌ی آینده‌ی نانوپیپادهای کربنی در نانوالکترونیک و بیوشیمی را می‌دهد [۱۰].

^{۳۲} Carbon nano-peapod (CNP)

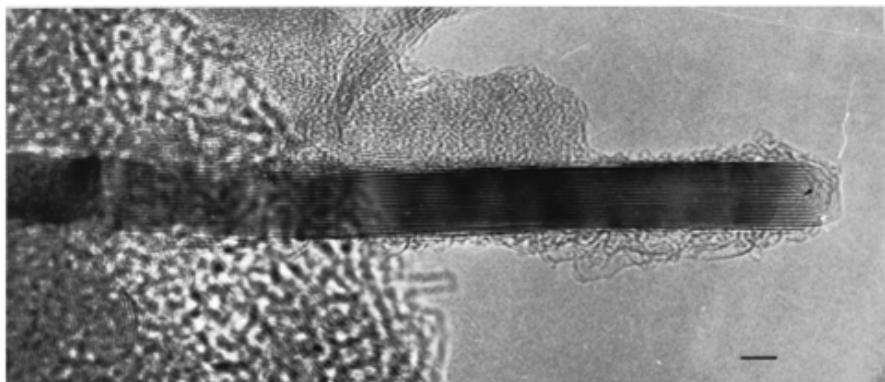
^{۳۳} Dimerization

^{۳۴} Coalescence

^{۳۵} Diffusion

۲-۳-۲: نانوسيم‌های کربنی

پس از کشف تصادفی فولرین C_{60} با هیبریداسيون پيوندی sp^2 -توسط کروتو و همکاران [۱] در سال ۱۹۸۵، اين اكتشاف مهم مقدمه‌اي برای تحقیقات گسترده‌ي جامعه‌ي علمی برای دست‌یافتن به فرم‌های جدیدی از کربن از جمله نانوتیوب کربنی [۲] در سال ۱۹۹۱ و فرم‌های هیبریدی آن مانند نانوپیپادکربنی [۷] در سال ۱۹۹۹ شد. در سال ۲۰۰۰ وانگ و همکاران [۱۵] برای اولین بار توسط میکروسکوپ HRTEM ساختار هیبریدی متفاوتی را مشاهده کردند، که احتمال دادند از هیبرید نانوتیوب کربنی و زنجیره‌ی بلند از اتم‌های کربن تشکیل شده باشد (شکل ۸-۲).

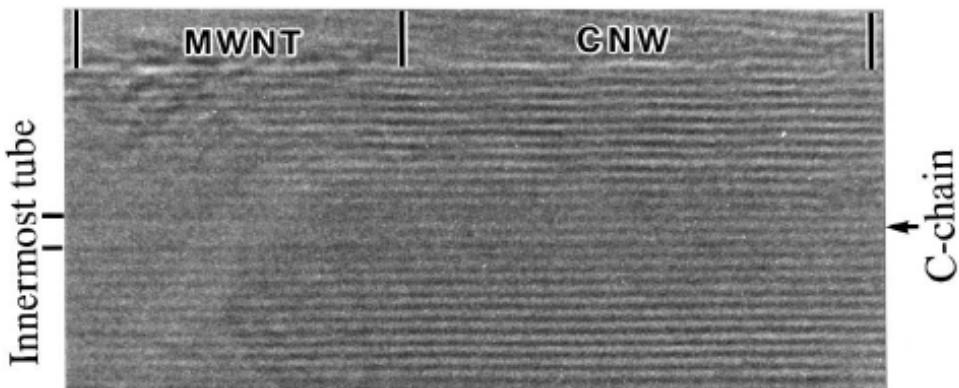


شکل ۸-۲: نانوتیوب هیبرید با یک زنجیره‌ی کربنی محبوس در میان آن [۱۵]

در سال ۳۰۰۳، ژائو و همکاران [۱۶]، با مطالعه‌ی دقیق‌تر HRTEM و روش پراکندگی رامان^{۳۶} اكتشاف آلوتروپ یک‌بعدی جدیدی از کربن به نام نانوسيم کربنی^{۳۷} (CNW) را گزارش کردند. مشاهدات HRTEM و پراکندگی رامان مشخص ساخت که نانوسيم از هیبرید شدن یک نانوتیوب کربنی با هیبریداسيون پيوندی sp^2 و یک زنجیره‌ی کربنی خطی با هیبریداسيون پيوندی sp^1 محبوس درون نانوتیوب تشکیل می‌شود (شکل ۹-۲). زنجیره‌ی کربنی در واقع، یک ساختار سوزنی شکل یک‌بعدی است

Raman scattering^{۳۶}
Carbon nanowire (CNW)^{۳۷}

که بیش از ۱۰۰ اتم کربن دارد. زنجیره‌ی کربنی به خاطر هیبریداسیون پیوندی sp^1 خارج از نانوتیوب بسیار ناپایدار است [۱۶].



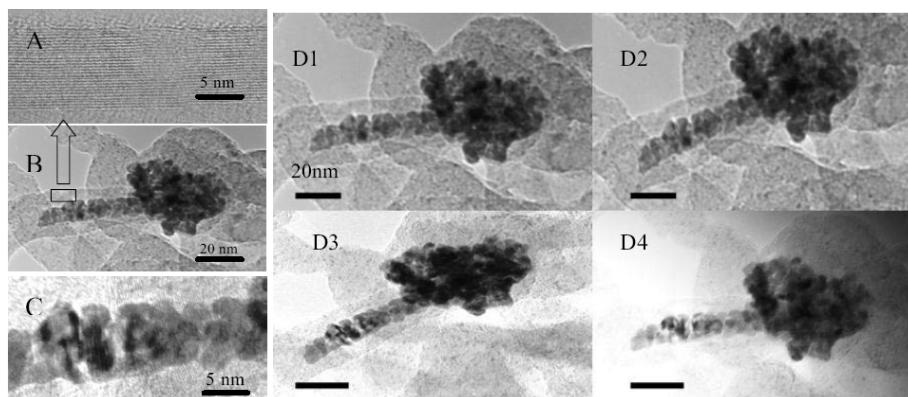
شکل ۹-۲: عکس دقیقی از نانوسیم، نانوتیوب هیبرید با یک زنجیره‌ی کربنی محبوس در میان آن [۱۶]

قطر نانوتیوب داخلی در نانوسیم که زنجیره‌ی کربنی را محاصره می‌کند، در حدود 0.7 nm گزارش شده است [۱۵، ۱۶]. مناسب‌ترین فاصله بین زنجیره‌ی کربنی و سطح درونی نانوتیوب برای تاثیر نیروهای غیرپیوندی و اندروالس جهت جذب و محبوس سازی زنجیره‌ی کربنی درون نانوتیوب می‌باشد حدود 0.3 nm می‌باشد که در قطر حدود 0.7 nm نانوتیوب ایجاد می‌گردد. حضور زنجیره‌ی کربنی محبوس درون نانوتیوب در نانوسیم کربنی، پیک رزونانسی رامان و چگالی انرژی فرمی را افزایش می‌دهد. این افزایش چگالی در سطوح پایه‌ی انرژی فرمی باعث تشدید رسانایی الکترونیکی نانوتیوب می‌گردد [۱۳، ۱۶، ۱۷]. حضور زنجیره‌ی کربنی با چگالی بالای الکترون آزاد به خاطر هیبریداسیون پیوندی sp^1 آن، درون نانوتیوب آرمچیر مانند (۵,۵)، خاصیت الکترونیکی آن را از رسانایی (فلزی) به ابررسانایی تبدیل می‌کند. همچنین خاصیت الکترونیکی نانوتیوب زیگزاگ مانند (۹,۰) در اثر محبوس شدن زنجیره‌ی کربنی در میان آن از نیمه‌رسانایی به رسانایی (فلزی) ارتقا می‌یابد [۱۳، ۱۶]. از نانوسیم‌ها می‌توان برای اتصال فلز-فلز، فلز-نیمه‌رسانا، نیمه‌رسانا-نیمه‌رسانا و نانوبدیود در کاربردهای نانوالکترونیک بهره‌مند شد. علاوه بر آن، در مورد رفتار مکانیکی نانوسیم‌ها، انتظار می‌رود نانوسیم‌ها با قطر نانوتیوب درونی 0.7 nm مدول یانگ بیشتر و مقاومت مکانیکی بالاتری داشته باشند [۱۶]. در نهایت با توجه به تحقیقات گستردۀ

در مورد نانوسیم‌ها، انتظار می‌رود فرم‌های هیبریدی نانوتیوب مانند نانوسیم‌ها از خود نانوتیوب پتانسیل بیشتری برای کاربرد داشته باشند [۱۷-۱۹].

۲-۳-۳: نانوساختار هیبریدی نانوتیوب و DNA

گائو و همکاران در سال ۲۰۰۳ [۱۰۳] با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی امکان محبوس‌سازی خود به خود و پایدار ssDNA را درون نانوتیوب (10,10)، پیش‌بینی کردند. این در حالی است که برای محبوس ساختن ssDNA درون نانوتیوب با قطر کمتر مثل (10,10) باید انرژی مصرف شود و ساختار حاصل ناپایدار خواهد بود. در راستای تایید پیش‌بینی مذکور، گروه تحقیقاتی گائو و همکاران، با انجام کار تجربی توسط XRTEM مشاهده کردند که رشته‌ی DNA که با پلاتین علامت گذاری شده بود، وارد نانوتیوب شده و در آن محبوس می‌شوند (شکل ۱۰-۲) [۱۰۴]. نیروی وان در والس بین DNA و نانوتیوب، عامل اصلی فرایند محبوس شدن DNA درون نانوتیوب می‌باشد [۱۰۴، ۲۲، ۲۱].



شکل ۱۰-۲: تصویر HRTEM از DNA محبوس در نانوتیوب کربنی [۱۰۴]

در اثر محبوس شدن DNA درون نانوتیوب، نانوساختار هیبریدی جدیدی تشکیل می‌شود که خواص مکانیکی و الکتریکی ویژه و متفاوتی نسبت به نانوتیوب و DNA دارد که می‌تواند کاربردهایی در نانوالکترونیک، نانوروباتیک و بیومهندسی داشته باشد [۱۰۵، ۲۱].

فصل سوم: اندرکنش اجزای نانوساختارهای هیبریدی

در این فصل، اندرکنش‌های اتمی بین اجزای تشکیل دهنده‌ی نانوساختارهای هیبریدی، با مفاهیم کانتینیومی توزیع نیرو و فشار مدلسازی شده است. لایه‌های کربن در نانوتیوب چندلایه و اجزای محبوس با لایه‌ی نانوتیوب مجاور اندرکنش وان در والس دارند. در اثر اندرکنش متقابل به لایه‌های نانوتیوب توزیع فشار و به اجزای محبوس (زنجیره‌ی کربنی و DNA) توزیع نیرو وارد می‌شود.

۳-۱: پتانسیل‌های بین اتمی

پیوند بین اتم‌های مجاور کربن در نانوتیوب از نوع کوولانسی است، و پیوند بین اتم‌های کربن با اتم‌های غیر مجاور و نیز پیوند با مولکول‌های محبوس (فولرین C_{60} ، زنجیره‌ی کربنی و DNA) در نانوساختارهای هیبریدی از نوع وان در والس^{۳۸} (vdW) می‌باشد. انرژی پیوندها توسط توابع پتانسیل بین اتمی تعیین می‌شوند [۱۰۶]. در این پژوهه برای محاسبه‌ی انرژی پیوندهای غیرکوولانت وان در والس بین اتم‌های کربن از تابع انرژی پتانسیل لنارد-جونز^{۳۹} (LJ) استفاده شده است. تابع پتانسیل LJ بین دو اتم کربن a و b که در فاصله‌ی r_{ab} قرار دارند، طبق رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود [۱۰۷، ۱۰۸]:

$$\varphi_{ab} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ab}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ab}} \right)^6 \right], \quad (1.3)$$

که در آن ϵ عمق موثر پتانسیل و σ پارامتری است که از فاصله‌ی تعادلی دو اتم a و b به دست می‌آید. نیروی vdW بین دو اتم F_{ab} از مشتق اول تابع انرژی پتانسیل LJ در معادله‌ی (۱.۳) به دست می‌آید:

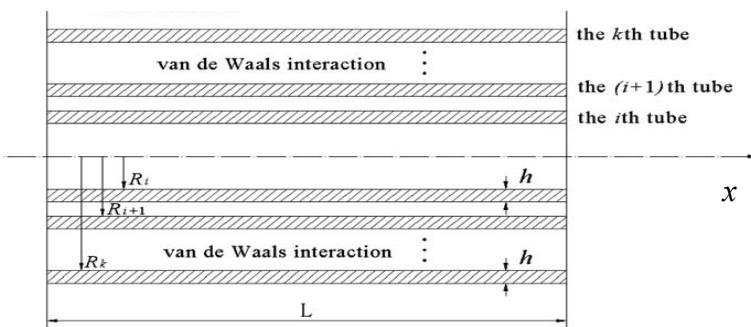
$$F_{ab} = -\frac{d\varphi_{ab}}{dr_{ab}} = \frac{24\epsilon}{\sigma} \left[2 \left(\frac{\sigma}{r_{ab}} \right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{r_{ab}} \right)^7 \right], \quad (2.3)$$

Van der Waals (vdW)^{۳۸}
Lennard-Jones^{۳۹}

که مقادیر منفی نیروی vdW نیروی جاذبه و مقادیر مثبت نیروی دافعه‌ی بین دو اتم را مشخص می‌سازند.

۳-۲: مدلسازی اندرکنش بین لایه‌های کربن در نانوتیوب چندلایه

یک نانوتیوب کربنی به طول L با k لایه در نظر بگیرید (شکل ۱-۳). ضخامت لایه‌ها h و شعاع میانی لایه‌ی i -ام را با R_i نشان می‌دهیم.



شکل ۱-۳: مقطع نانوتیوب چندلایه [۶۵]

انرژی پتانسیل واندر والس بین لایه‌ی i -ام و j -ام را که با U_{ij} نشان می‌دهیم، تابع فواصل لایه‌ها

می‌باشد، یعنی:

$$U_{ij} = U_{ij}(r_{ij}). \quad (۳.۳)$$

می‌توان، بسط تیلور انرژی پتانسیل در معادله‌ی (۳.۳) حول وضعیت اولیه $r_{ij}^0 = R_j - R_i$ را به صورت زیر نوشت

$$U_{ij} = U_{ij}(r_{ij}^0) + \frac{\partial U_{ij}}{\partial r_{ij}} \Bigg|_{r_{ij}^0} (r_{ij} - r_{ij}^0) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U_{ij}}{\partial r_{ij}^2} \Bigg|_{r_{ij}^0} (r_{ij} - r_{ij}^0)^2 + \dots \quad (۴.۳)$$

فشار معادل اندرکنش واندر والس واردہ بر لایه‌ی i -ام از سوی لایه‌ی j -ام یعنی پارامتر $p_{i \leftarrow j}$ ، از مشتق

تابع انرژی پتانسیل نسبت به r_{ij} در واحد سطح نانوتیوب i -ام قابل تعیین است:

$$p_{i \leftarrow j} = \frac{1}{2\pi R_i L} \frac{\partial U_{ij}}{\partial r_{ij}} = \frac{1}{2\pi R_i L} \left[\frac{\partial U_{ij}}{\partial r_{ij}} \Bigg|_{r_{ij}^0} + \frac{\partial^2 U_{ij}}{\partial r_{ij}^2} \Bigg|_{r_{ij}^0} (r_{ij} - r_{ij}^0) + \dots \right]. \quad (۵.۳)$$

با صرفنظر کردن از ترم‌های غیرخطی، $p_{i \leftarrow j}$ در معادله‌ی (۶.۳) را می‌توان به فرم زیر نوشت [۴۱، ۴۰]:

$$p_{i \leftarrow j} = \frac{1}{2\pi R_i L} \left[\frac{\partial U_{ij}}{\partial r_{ij}} \Bigg|_{r_{ij}^0} + \frac{\partial^2 U_{ij}}{\partial r_{ij}^2} \Bigg|_{r_{ij}^0} w_{ij} \right] = p_{ij}^0 + c_{ij}(w_j - w_i), \quad (6.3)$$

که در آن، w_i و $w_{ij} = r_{ij} - r_{ij}^0 = w_j - w_i$ ضریبی است

که به آن ضریب فشار وان در والس می‌گویند [۴۱] که به صورت زیر به دست می‌آید:

$$c_{ij} = \frac{1}{2\pi R_i L} \frac{\partial^2 U_{ij}}{\partial r_{ij}^2} \Bigg|_{r_{ij}^0}. \quad (7.3)$$

p_{ij}^0 در معادله‌ی (۶.۳) فشار اولیه‌ی وارد بر لایه‌ی i -ام به خاطر لایه‌ی j -ام در شرایط اولیه می‌باشد

که می‌توان آن را با استفاده از ضرایب c_{ij} به دست آورد:

$$p_{ij}^0 = \frac{1}{2\pi R_i L} \frac{\partial U_{ij}}{\partial r_{ij}} \Bigg|_{r_{ij}^0} = \frac{1}{2\pi R_i L} \int_{r_{ij}^s}^{r_{ij}^0} \frac{\partial^2 U_{ij}}{\partial r_{ij}^2} dr_{ij} = \int_{r_{ij}^s}^{r_{ij}^0} c_{ij} dr_{ij}, \quad (8.3)$$

که در آن، r_{ij}^s فاصله‌ی تعادلی دو لایه است. همچنین، فشار معادل اندرکنش وان در والس وارد بر لایه‌ی

j -ام از سوی لایه‌ی i -ام به روشهای مشابه از مشتق تابع انرژی پتانسیل نسبت به r_{ij} در واحد سطح

نانوتیوب j -ام به این صورت تعیین می‌شود:

$$p_{j \leftarrow i} = \frac{1}{2\pi R_j L} \frac{\partial U_{ij}}{\partial r_{ij}} = \frac{1}{2\pi R_j L} \left[\frac{\partial U_{ij}}{\partial r_{ij}} \Bigg|_{r_{ij}^0} + \frac{\partial^2 U_{ij}}{\partial r_{ij}^2} \Bigg|_{r_{ij}^0} w_{ij} \right] = p_{ji}^0 + c_{ji}(w_i - w_j). \quad (9.3)$$

با توجه به روابط (۶.۳) و (۹.۳) به رابطه‌ی تعادل بین فشار معادل اندرکنش وان در والس بین لایه‌ی i -ام

و لایه‌ی j -ام به صورت زیر می‌رسیم [۴۱، ۴۰]:

$$p_{i \leftarrow j} R_i = -p_{j \leftarrow i} R_j. \quad (10.3)$$

بنابراین با توجه به معادله‌ی (۱۰.۳)، فشار اولیه و ضرایب فشار vdW دو لایه با روابط زیر با هم مرتبط

هستند:

$$p_{ij}^0 R_i = -p_{ji}^0 R_j; \quad c_{ij} R_i = c_{ji} R_j \Rightarrow c_{ji} = c_{ij} R_i / R_j, \quad (11.3)$$

از آن جا که نیروی LJ در معادله (۲.۳) با توان ۷ به عکس فاصله بین اتم‌ها بستگی دارد، می‌توان فقط اندرکنش لایه‌های مجاور را در نظر گرفت و از برهمکنش بین لایه‌های غیرمجاور که دورتر هستند، صرفنظر کرد. بنابراین فشار کل وارد بر هر لایه‌ی نانوتیوب با مجموع فشارهای واردہ از لایه‌های مجاور برابر است. با فرض یکسان بودن ضریب $c_{(i)(i+1)} = c$ برای لایه‌های مجاور و با استفاده از معادلات (۱۱.۳)-(۱۲.۳) فشار کل واردہ بر هر لایه‌ی نانوتیوب به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} p_1 &= p_{1 \leftarrow 2} = p_{12}^0 + c(w_2 - w_1) \\ p_i &= p_{i \leftarrow i+1} + p_{i \leftarrow i-1} = p_{i(i+1)}^0 + c(w_{i+1} - w_i) \\ &\quad + p_{i(i-1)}^0 - c \frac{R_{i-1}}{R_i} (w_i - w_{i-1}); \quad i = 2, \dots, k-1 \\ p_k &= p_{k \leftarrow k-1} = p_{k(k-1)}^0 - c \frac{R_{k-1}}{R_k} (w_k - w_{k-1}). \end{aligned} \quad (12.3)$$

با روابط (۱۲.۳)، توزیع فشار معادل اندرکنش واندر والس در هر لایه به صورت توابعی از جابه‌جایی شعاعی لایه‌ها به دست می‌آید. معمولاً فاصله بین لایه‌های مجاور در نانوتیوب‌های چندلایه نزدیک فاصله‌ی تعادلی است و از فشارهای اولیه‌ی $p_{i(i+1)}^0$ صرفنظر می‌شود. بنابراین، مطابق رابطه‌ی (۱۲.۳) توزیع فشار در لایه‌های نانوتیوب بدین گونه ساده می‌شود [۴۰، ۴۱]:

$$\begin{aligned} p_1 &= p_{1 \leftarrow 2} = c(w_2 - w_1) \\ p_i &= p_{i \leftarrow i+1} + p_{i \leftarrow i-1} = c(w_{i+1} - w_i) - c \frac{R_{i-1}}{R_i} (w_i - w_{i-1}); \quad i = 2, \dots, k-1 \\ p_k &= p_{k \leftarrow k-1} = -c \frac{R_{k-1}}{R_k} (w_k - w_{k-1}). \end{aligned} \quad (13.3)$$

۳-۳: مدلسازی اندرکنش بین شبکه فولرین محبوس و نانوتیوب

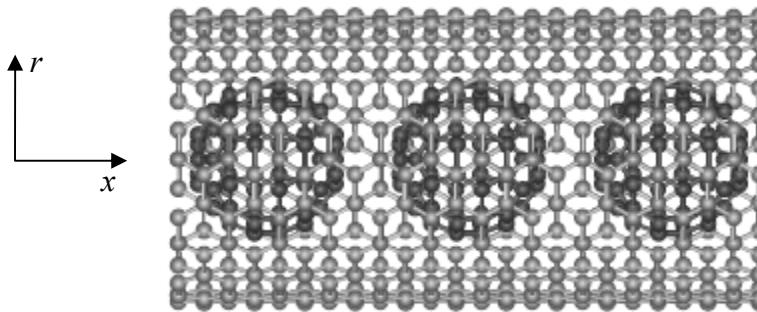
در مطالعه‌ی اندرکنش مربوط به اتم‌های C_{60} محبوس در نانوتیوب کربنی از نوع دیگری از پتانسیل $J-L$ استفاده می‌شود [۲۶]:

$$\varphi_{ab} = \frac{A}{\sigma^6} \left[\frac{1}{2} y_0^6 \left(\frac{\sigma}{r_{ab}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ab}} \right)^6 \right], \quad (14.3)$$

که در آن، $\sigma = 1.42 \text{ \AA}$ ، $A = 24.3 \times 10^{-79} \text{ Jm}^6$ و $y_0 = 2.7$ می‌باشد [۲۶]. انرژی کل مربوط به اندکنش وان در والس مولکول‌های C_{60} محبوس با نانوتیوب C_{60-CNT} ، از جمع اندیس a نانوتیوب در معادله‌ی (۱۴.۳) و b مولکول‌های فولرین C_{60} به دست می‌آید:

$$U_{C_{60-CNT}} = \sum_a \sum_b \varphi_{ab}. \quad (15.3)$$

مشاهده شده است که در نانوپیپاد $C_{60}@(10,10)$ ، مولکول‌های C_{60} در حالت پرشدن کامل نانوتیوب (۱۰,۱۰)، شبکه‌ی یکبعدی با فاصله‌ی مراکز $C_{60}-C_{60}$ حدود $D_f \approx 1 \text{ nm}$ تشکیل می‌دهند (شکل ۳)، [۱۰۱، ۲۵، ۶]



شکل ۳-۲: ساختار اتمی نانوپیپاد تک‌لایه (۱۰,۱۰)

با استفاده از معادله‌ی (۱۴.۳) نیروی وارد بر اتم a نانوتیوب از سوی اتم b فولرین C_{60} ، به صورت زیر به دست می‌آید:

$$F_{ab} = -\frac{d\varphi_{ab}}{dr_{ab}} = \frac{6A}{\sigma^5} \left[y_0^6 \left(\frac{\sigma}{r_{ab}} \right)^{13} - \left(\frac{\sigma}{r_{ab}} \right)^7 \right]. \quad (16.3)$$

نیروی کل وارد شده بر یک اتم خاص نانوتیوب F_{vdW} با جمع‌زدن مولفه‌ی شعاعی نیروهای وارد شده از سمت فولرین C_{60} در عمق تاثیر پتانسیل LJ به دست می‌آید. فشار معادل vdW وارد بر نانوتیوب $p_{vdW-C_{60}}$ ، با تقسیم کردن نیروی کل وارد شده بر مساحت موثر نیروی vdW به دست می‌آید [۳۳]،

یعنی

$$p_{vdW-C60} = F_{vdW} / \left(\frac{3\sqrt{3}}{4} d_{C-C}^2 \right) \quad (17.3)$$

که در آن، $d_{C-C} = 1.42 \text{ \AA}$ طول پیوند کووالانت کربن در نانوتیوب می‌باشد. با توجه به ترتیب قرارگیری منظم مولکول‌های محبوس C_{60} درون نانوتیوب به شکل شبکه‌ی یکبعدی، برای به دست آوردن تابع فشار پیوسته وارد شده از سمت C_{60} بر نانوتیوب، می‌توان تعداد کافی نقطه در یک دوره‌ی تناوبی شبکه‌ی مولکول‌های فولرین محبوس در نظر گرفته و نیرو و فشار متناظر داخلی شعاعی وارد بر نانوتیوب از سمت دو فولرین در یک فاصله‌ی تناوبی D_f را به دست آورد. از آنجا که شرایط متقارنی برای تمام فواصل تناوبی شبکه‌ی فولرین محبوس برقرار است، می‌توان از یک توزیع هارمونیک پیوسته در یک دوره‌ی تناوبی برای (x) $p_{vdW-C60}$ در جهت محور نانوتیوب x با دوره‌ی تناوبی D_f استفاده نمود [۳۳]:

$$p_{vdW-C60}(x) = a_0 + \sum_n \left[a_n \cos\left(\frac{2n\pi x}{D_f}\right) + b_n \sin\left(\frac{2n\pi x}{D_f}\right) \right], \quad (18.3)$$

a_n و b_n ضرایب سری فوریه^{۴۰} می‌باشند. با توجه به اینکه نیروهای وان در والسی نسبتاً ضعیف هستند، فقط اثر اندرکنش فولرین‌های محبوس با داخلی‌ترین لایه‌ی نانوتیوب در نظر گرفته می‌شود و از اندرکنش با لایه‌های دورتر صرفنظر می‌شود. بنابراین، با توجه به معادله‌ی (۱۳.۳) فشار معادل اندرکنش وان در والس در لایه‌های نانوپیپاد k -لایه عبارت است از [۳۳]:

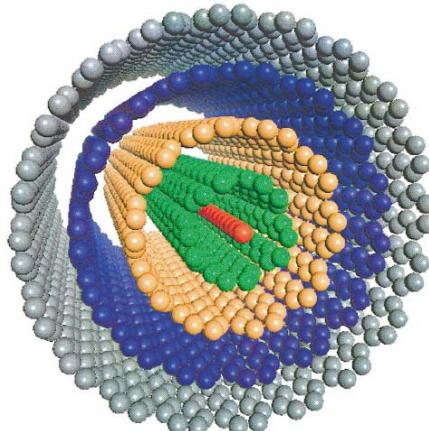
$$\begin{aligned} p_1 &= c(w_2 - w_1) + p_{vdW-C60}(x) \\ p_i &= c(w_{i+1} - w_i) - c \frac{R_{i-1}}{R_i} (w_i - w_{i-1}); \quad i = 2, \dots, k-1 \end{aligned} \quad (19.3)$$

$p_k = -c \frac{R_{k-1}}{R_k} (w_k - w_{k-1})$ ،
که در آن، p_j توزیع فشار معادل وان در والس در لایه‌ی j -ام، w_j تابع جابه‌جایی شعاعی لایه‌ی j -ام، R_j شعاع لایه‌ی j -ام و c ضریب فشار معادل وان در والس دو لایه‌ی مجاور نانوتیوب می‌باشد.

Fourier Series ^{۴۰}

۴-۳: مدلسازی اندرکنش بین زنجیره‌ی کربنی محبوس و نانوتیوب

یک نانوسیم چندلایه را که از محبوس شدن یک زنجیره‌ی کربنی دراز داخل یک نانوتیوب به طول L به وجود می‌آید، مطابق شکل ۳-۳ در نظر می‌گیریم. شعاع لایه‌ها را با R_j ، نشان می‌دهیم، که با این توضیح که اندیس 1 درونی‌ترین لایه‌ی محبوس کننده‌ی زنجیره‌ی کربنی را نشان $j = 1, \dots, k$ می‌دهد.



شکل ۳-۳: ساختار اتمی یک نانوسیم چندلایه [۱۶]

زنジره‌ی کربنی را در جهت محور نانوتیوب x در نظر می‌گیریم. ابتدا اندرکنش واندر والس بین زنجیره‌ی کربنی و نانوتیوب درونی را در نظر می‌گیریم. انرژی پتانسیل واندر والس بین زنجیره‌ی کربنی و نانوتیوب در نانوسیم U_{CNW} تابع فاصله‌ی زنجیره‌ی کربنی و لایه‌ی اول نانوتیوب r می‌باشد.

$$U_{CNW} = U_{CNW}(r). \quad (۲۰.۳)$$

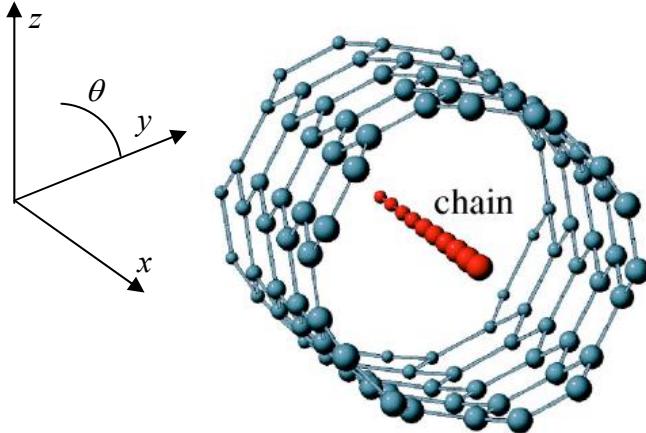
با نوشتن بسط تیلور انرژی پتانسیل در معادله‌ی (۲۰.۳) حول وضعیت اولیه $r = R_1$ داریم:

$$U_{CNW} = U_{CNW}(R_1) + \frac{\partial U_{CNW}}{\partial r} \Bigg|_{R_1} (r - R_1) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U_{CNW}}{\partial r^2} \Bigg|_{R_1} (r - R_1)^2 + \dots \quad (۲۱.۳)$$

فشار معادل اندرکنش واندر والس وارد بر نانوتیوب به خاطر حضور زنجیره‌ی کربنی، از مشتق تابع انرژی پتانسیل نسبت به r در واحد سطح نانوتیوب به دست می‌آید:

$$p_{vdW} = \frac{1}{2\pi R_1 L} \frac{\partial U_{CNW}}{\partial r} = \frac{1}{2\pi R_1 L} \left[\frac{\partial U_{CNW}}{\partial r} \Big|_{R_1} + \frac{\partial^2 U_{CNW}}{\partial r^2} \Big|_{R_1} (r - R_1) + \dots \right]. \quad (22.3)$$

جابه‌جایی نانوتیوب اول را در نقطه‌ی (x, θ) را با $w_1(x, \theta)$ نشان دهیم، همچنین جابه‌جایی عرضی زنجیره‌ی کربنی در نقطه‌ی x را با $v_0(x)$ نشان می‌دهیم که در آن مولفه‌ی $v_0(x)$ در راستای y و $w_0(x)$ در راستای y قرار دارد (شکل ۴-۳).



شکل ۴-۳: شکل شماتیک نانوسیم تک‌لایه [۱۳]

بنابراین در هر نقطه‌ی (x, θ) اختلاف جابه‌جایی زنجیره‌ی کربنی و نانوتیوب در راستای شعاعی برابر است با

$$r - R_1 = w_1(x, \theta) - v_0(x) \cos(\theta) - w_0(x) \sin(\theta). \quad (23.3)$$

با صرفنظر کردن از ترم‌های غیرخطی و با استفاده از معادله‌ی (۲۳.۳)، معادله‌ی (۲۲.۳) را می‌توان به فرم زیر نوشت

$$p_{vdW} = p_{01}^0 - c_0 [w_1(x, \theta) - v_0(x) \cos(\theta) - w_0(x) \sin(\theta)], \quad (24.3)$$

که در آن، c_0 ضریب فشار معادل اندرکنش وان در والس بین زنجیره‌ی کربنی و نانوتیوب است و از مشتق دومتابع پتانسیل بهازای شعاع اولیه‌ی نانوتیوب به دست می‌آید، یعنی

$$c_0 = \frac{1}{2\pi R_1 L} \frac{\partial^2 U_{CNW}}{\partial r^2} \Big|_{R_1}. \quad (25.3)$$

p_{01}^0 در معادله‌ی (۲۴.۳) فشار اولیه‌ی واردہ بر نانوتیوب است که به خاطر اختلاف شعاع اولیه‌ی نانوتیوب و شعاع تعادلی آن می‌باشد و طبق معادله‌ی زیر به دست می‌آید:

$$p_{01}^0 = \frac{1}{2\pi R_1 L} \left. \frac{\partial U_{vdW}}{\partial r} \right|_{R_1} = \int_{r_s}^{R_1} c_0 dr, \quad (26.3)$$

که در آن، r_s فاصله‌ی تعادلی نانوتیوب وزنجیره‌ی کربنی است. توجه شود که اندیس صفر (۰) در این رساله مربوط به پارامترهای زنجیره‌ی کربنی است. با توجه به اینکه نیروهای وان در والسی نسبتاً ضعیف هستند، فقط اثر اندرکنش زنجیره‌ی کربنی محبوس با داخلی‌ترین لایه‌ی نانوتیوب در نظر گرفته می‌شود و از اندرکنش زنجیره با لایه‌های دورتر صرفنظر می‌شود. بنابراین، با توجه به معادله‌ی (۱۲.۳) و (۲۴.۳) فشار معادل اندرکنش وان در والس در لایه‌های نانوسیم k -لایه عبارت است از:

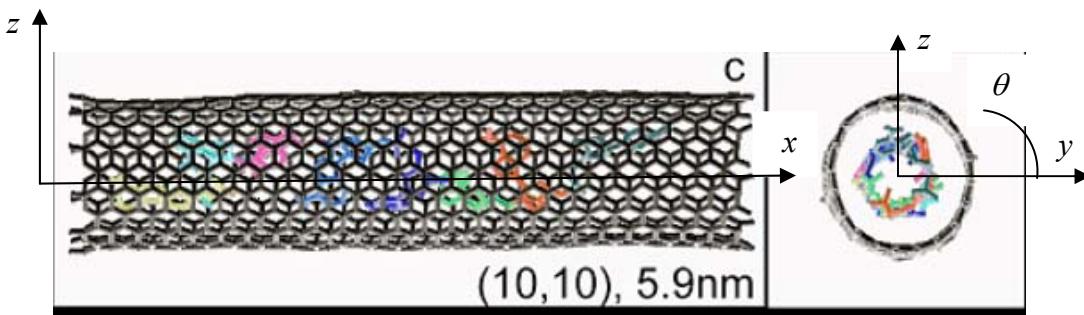
$$\begin{aligned} p_1 &= p_{1 \leftarrow 2} + p_{vdW} = c(w_2 - w_1) + p_{01}^0 - c_0 [w_1 - v_0(x) \cos(\theta) - w_0(x) \sin(\theta)], \\ p_i &= p_{i \leftarrow i+1} + p_{i \leftarrow i-1} = c(w_{i+1} - w_i) - c \frac{R_{i-1}}{R_i} (w_i - w_{i-1}); \quad i = 2, \dots, k-1 \\ p_k &= p_{k \leftarrow k-1} = -c \frac{R_{k-1}}{R_k} (w_k - w_{k-1}). \end{aligned} \quad (27.3)$$

که در آن، p_j توزیع فشار معادل وان در والس در لایه‌ی j -ام، w_j تابع جابه‌جایی شعاعی لایه‌ی j -ام، R_j شعاع لایه‌ی j -ام و c ضریب فشار معادل وان در والس دو لایه‌ی مجاور نانوتیوب می‌باشد. نیروی واکنشی از سمت نانوتیوب بر زنجیره‌ی کربنی در نقطه (x, θ) به خاطر اندرکنش متقابل وان در والس بین نانوتیوب و زنجیره‌ی کربنی، یعنی $\mathbf{f} = (f_y, f_z)$ که در دو راستای y و z وارد می‌شود به صورت زیر تعیین می‌گردد:

$$\begin{aligned} f_y(x) &= \int_0^{2\pi} R_l c_0 [w_l(x, \theta) - v_0(x) \cos(\theta) - w_0(x) \sin(\theta)] \cos(\theta) d\theta = \\ &= R_l c_0 \int_0^{2\pi} w_l(x, \theta) \cos(\theta) d\theta - \pi R_l c_0 v_0(x), \\ f_z(x) &= \int_0^{2\pi} R_l c_0 [w_l(x, \theta) - v_0(x) \cos(\theta) - w_0(x) \sin(\theta)] \sin(\theta) d\theta = \\ &= R_l c_0 \int_0^{2\pi} w_l(x, \theta) \sin(\theta) d\theta - \pi R_l c_0 w_0(x). \end{aligned} \quad (28.3)$$

۳-۵: مدلسازی اندرکنش بین DNA محبوس و نانوتیوب

نانوساختار هیبریدی ssDNA محبوس در نانوتیوب کربنی تک لایه به طول L و شعاع R_l را مطابق شکل ۳ در نظر می‌گیریم.



شکل ۳-۵: ساختار اتمی نانوساختار هیبریدی ssDNA محبوس در نانوتیوب کربنی [۲۲]

راستای طولی نانوتیوب و DNA را در جهت x در نظر می‌گیریم. انرژی پتانسیل واندر والس بین DNA محبوس و نانوتیوب در نانوساختار هیبریدی $U_{DNA-CNT}$ تابع فاصله‌ی شعاعی DNA و لایه‌ی درونی نانوتیوب r می‌باشد.

$$U_{DNA-CNT} = U_{DNA-CNT}(r). \quad (29.3)$$

با نوشتن بسط تیلور انرژی پتانسیل در معادله‌ی (۲۹.۳) حول وضعیت اولیه $r = R_l$ داریم:

$$U_{DNA-CNT} = U_{DNA-CNT}(R_l) + \frac{\partial U_{DNA-CNT}}{\partial r} \Bigg|_{R_l} (r - R_l) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 U_{DNA-CNT}}{\partial r^2} \Bigg|_{R_l} (r - R_l)^2 + \dots \quad (30.3)$$

فشارمعادل اندرکنش وان در والس واردہ بر نانوتیوب به خاطر حضور DNA، از مشتق تابع انرژی پتانسیل نسبت به r در واحد سطح نانوتیوب به دست می‌آید:

$$p_{vdW} = \frac{1}{2\pi R_l L} \frac{\partial U_{DNA-CNT}}{\partial r} = \frac{1}{2\pi R_l L} \left[\frac{\partial U_{DNA-CNT}}{\partial r} \Bigg|_{R_l} + \frac{\partial^2 U_{DNA-CNT}}{\partial r^2} \Bigg|_{R_l} (r - R_l) + \dots \right]. \quad (31.3)$$

جابه‌جایی نانوتیوب اول را در نقطه‌ی (x, θ) با $w_l(x, \theta)$ نشان دهیم، همچنین جابه‌جایی عرضی DNA در نقطه‌ی x را با $v_d(x)$ نشان می‌دهیم که در آن مولفه‌ی (x) در راستای y و $w_d(x)$ در

راستای y قرار دارد. بنابراین در هر نقطه‌ی (x, θ) اختلاف جابه‌جایی DNA و نانوتیوب در راستای شعاعی برابر است با:

$$r - R_1 = w_1(x, \theta) - v_d(x) \cos(\theta) - w_d(x) \sin(\theta). \quad (32.3)$$

با صرفنظر کردن از ترم‌های غیرخطی و با استفاده از معادله‌ی (32.3)، معادله‌ی (31.3) را می‌توان به فرم

زیر نوشت

$$p_{DNA-CNT} = p_{d1}^0 - c_d [w_1(x, \theta) - v_d(x) \cos(\theta) - w_d(x) \sin(\theta)], \quad (33.3)$$

که در آن، c_d ضریب فشار معادل اندرکنش وان در والس بین DNA و نانوتیوب است و از مشتق دوم تابع پتانسیل بهازای شعاع اولیه‌ی نانوتیوب به دست می‌آید، یعنی

$$c_d = \frac{1}{2\pi R_1 L} \left. \frac{\partial^2 U_{DNA-CNT}}{\partial r^2} \right|_{R_1}. \quad (34.3)$$

p_{d1}^0 در معادله‌ی (24.3) فشار اولیه‌ی وارده بر نانوتیوب به خاطر اختلاف شعاع اولیه‌ی نانوتیوب و شعاع تعادلی آن با DNA می‌باشد و طبق معادله‌ی زیر به دست می‌آید:

$$p_{d1}^0 = \frac{1}{2\pi R_1 L} \left. \frac{\partial U_{DNA-CNT}}{\partial r} \right|_{R_1} = \int_{r_s}^{R_1} c_d dr, \quad (35.3)$$

که در آن، r_s فاصله‌ی تعادلی نانوتیوب و DNA است. توجه شود که اندیس d در این رساله مربوط به پارامترهای DNA است. نیروی واکنشی از سمت نانوتیوب بر DNA در نقطه (x, θ) به خاطر اندرکنش متقابل وان در والس بین نانوتیوب و DNA، یعنی $\mathbf{f} = (f_y, f_z)$ که در دو راستای y و z وارد می‌شود به صورت زیر تعیین می‌گردد:

$$\begin{aligned} f_y(x) &= \int_0^{2\pi} R_1 c_d [w_1(x, \theta) - v_d(x) \cos(\theta) - w_d(x) \sin(\theta)] \cos(\theta) d\theta = \\ &= R_1 c_d \int_0^{2\pi} w_1(x, \theta) \cos(\theta) d\theta - \pi R_1 c_d v_d(x), \\ f_z(x) &= \int_0^{2\pi} R_1 c_d [w_1(x, \theta) - v_d(x) \cos(\theta) - w_d(x) \sin(\theta)] \sin(\theta) d\theta = \\ &= R_1 c_d \int_0^{2\pi} w_1(x, \theta) \sin(\theta) d\theta - \pi R_1 c_d w_d(x). \end{aligned} \quad (36.3)$$

فصل چهارم: مدل‌های کانتینیومی غیرموضعی

فرض بنیادی در تئوری‌های کلاسیک الاستیسیته، پیوستگی محیط مادی و میدان‌های تانسوری تنش و کرنش در این محیط می‌باشد. در نانوساختارها، فضای خالی بین اتم‌ها نسبت به ابعاد نانوساختار قابل توجه بوده و نمی‌توان از آن صرف‌نظر کرد. ضمناً طول مشخصه داخلی نانوساختارها a (طول پیوند اتمی و ...) در مرتبه طول مشخصه خارجی $/$ (طول موج و ابعاد نانوساختار ...) می‌باشد. لذا می‌تواند به نتایج با انحراف زیاد از واقعیت گردد. همچنین، در نانوساختارها، فرضیات پیوستگی محیط مادی دیگر اعتبار ندارد. بنابراین توجیه استفاده از تئوری‌های مبتنی بر مکانیک محیط پیوسته‌ی کلاسیک برای مدل‌سازی نانوساختارها که اساساً بر فرض پیوستگی استوار است، زیر سوال می‌رود. به عبارت دیگر باید به جای کانتینیوم کلاسیک از تئوری‌های کانتینیومی غیرکلاسیک که می‌توانند تاثیرات ابعاد کوچک^{۴۱} (در حد نانومتر) و ناپیوستگی ذاتی نانوساختارها را در نظر بگیرد، بهره برد.

تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی^{۴۲} که توسط ارینگن [۵۷، ۵۸] معرفی شده است، یکی از تئوری‌های کانتینیومی غیرکلاسیک است که تاثیرات مقیاس‌های کوچک و فلسفه‌ی عدم پیوستگی محیط مادی و در نتیجه ناپیوستگی میدان‌های مکانیکی (تانسورهای تنش و کرنش) در معادلات مشخصه^{۴۳} این تئوری لحاظ شده است.

در این فصل ابتدا مقدمه‌ای از مبانی تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی ارائه می‌دهیم، سپس به فرمولاسیون مدل‌های کانتینیومی زنجیره، تیر، میله و پوسته بر اساس فرضیات تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی می‌پردازیم.

Small scales effects^{۴۱}
The nonlocal elasticity theory^{۴۲}
Constitutive equation^{۴۳}

۴-۱: مبانی تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی

در الاستیسیته‌ی کلاسیک، تانسور تنش σ در نقطه‌ی مادی x ، تابعی از تانسور کرنش ϵ در همان نقطه‌ی مادی می‌باشد. در تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی که توسط ارینگن [۵۷، ۵۸] ارائه شده است، تانسور تنش σ در نقطه‌ی x از محیط مادی Ω ، توسط یک معادله‌ی انتگرالی به تانسور کرنش ϵ تمام نقاط محیط مادی بستگی دارد. به عبارت دیگر، معادله‌ی ساختاری تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی به صورت انتگرالی بیان می‌شود:

$$\sigma(x) = \iiint_{\Omega} \alpha(|x' - x|, \tau) C : \epsilon(x') dV(x'), \quad (1.4)$$

که در آن، $\alpha(|x' - x|, \tau)$ تابعی است که به مدول غیرموضعی مشهور است و در واقع نوعی تابع وزنی برای معادله‌ی انتگرالی (1.4) محسوب می‌شود، $|x' - x|$ فاصله‌ی نقطه‌ی موضعی x' و نقطه‌ی غیرموضعی x می‌باشد، C تانسور مرتبه‌ی چهار الاستیسیته است. τ در معادله‌ی (1.4) پارامتری است که با نسبت طول مشخصه داخلی نانوساختارها a و طول مشخصه خارجی l تعیین می‌شود و میزان اهمیت مقیاس‌های کوچک را در معادله‌ی ساختاری انتگرالی تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی (1.4) مشخص می‌سازد. در واقع τ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\tau = \frac{e_0 a}{l} = \frac{\eta}{l}, \quad (2.4)$$

که در آن، e_0 یک پارامتر مادی است که با تطابق نتایج نظریه‌ی الاستیسیته‌ی غیرموضعی با نتایج آزمایش یا شبیه‌سازی به دست تعیین می‌شود. پارامتر $\eta = \tau l = e_0 a$ در معادله‌ی (2.4) به پارامتر ابعاد کوچک مشهور است. در معادله‌ی انتگرالی ساختاری (1.4)، وقتی $0 \rightarrow \tau$ باید اثر انتگرال و غیرموضعی بودن تابعیت تنش و کرنش از بین رفته و معادله‌ی (1.4) به معادله‌ی ساختاری کلاسیک $\epsilon = C : \sigma$ میل کند [۵۸]. بنابراین مدول غیرموضعی $\alpha(|x' - x|, \tau)$ باید طوری باشد که وقتی $0 \rightarrow \tau$ ، به تابع دلتای کرونوکر میل کند، یعنی

$$\lim_{\tau \rightarrow 0} \alpha(|x' - x|, \tau) = \delta(|x' - x|). \quad (3.4)$$

همچنین تابع α باید مقدار حداکثر خود را در نقطه‌ی موضعی \mathbf{x} اختیار کند. با تعریف مدول غیرموضعی مناسبی که تمام شرایط لازم را ارضاء کند، می‌توان فرم دیفرانسیلی معادله‌ی ساختاری الاستیسیته‌ی غیرموضعی را از فرم انتگرالی معادله‌ی ساختاری استیسیته‌ی غیرموضعی به دست آورد

[۵۸]. با تعریف مدول غیرموضعی α به صورت

$$\alpha(|\mathbf{x}|, \tau) = \frac{K_0(|\mathbf{x}|/\eta)}{2\pi\eta^2}, \quad (4.4)$$

که در آن، K_0 تابع تعمیم یافته‌ی بسل است و با جایگذاری مدول α در معادله‌ی انتگرالی (۴.۴)، فرم دیفرانسیلی معادله‌ی ساختاری تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی به دست می‌آید [۵۸]:

$$(1 - \eta^2 \nabla^2) \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (5.4)$$

فرم مولفه‌ای معادله‌ی (۵.۴) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$(1 - \eta^2 \nabla^2) \sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}. \quad (6.4)$$

در صورتی که ابعاد کوچک قابل صرفنظر کردن باشد، $(\eta, \tau \rightarrow 0)$ معادله‌های (۵.۴) و (۶.۴) به معادله‌های ساختاری کلاسیک $\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\sigma}$ و $\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$ میل می‌کند.

۴-۲: مدل زنجیره‌ی غیرموضعی

ساختارهایی که فقط یک بعد آن‌ها قابل توجه است و از ابعاد دیگر می‌توان صرفنظر کرد (مثل زنجیره کربنی در شکل ۳-۳) از نظر کانتینیومی متناظر با مدل زنجیره می‌باشند. مدل زنجیره، قادر به تحمل برش، ممان و پیچش نیست و تنها بار کششی F را تحمل می‌کند. یک زنجیره کربنی به طول L ، در نظر گرفته شود. مطابق شکل ۳-۳، تغییر شکل زنجیره کربنی با بردار جابه‌جایی (u_0, v_0, w_0) قابل بیان است، u_0 مولفه‌ی جابه‌جایی طولی در جهت x و مولفه‌های v_0 و w_0 به ترتیب در جهت عرضی y و z می‌باشد. تنها تنش غیر صفر در مدل زنجیره، تنش محوری σ_x است. معادله‌ی ساختاری با توجه به معادله‌ی (۶.۴) عبارتست از [۵۸]:

$$(1 - \eta^2 \nabla^2) \sigma_x = E_0 \varepsilon_x, \quad (7.4)$$

که در آن، $\varepsilon_x = u_{0,x}$ کرنش محوری است و E_0 نمایانگر مدول یانگ می‌باشد. تنها نیروی قابل تحمل در المان زنجیره، کشش $F = \sigma_x A_0$ در جهت محوری است، در نتیجه با توجه به معادله‌ی (7.4) داریم:

$$(1 - \eta^2 \nabla^2) F = E_0 A_0 \varepsilon_x, \quad (8.4)$$

با نوشتен معادلات تعادل نیرو برای یک المان زنجیره به طول dx خواهیم داشت:

$$F(x + dx) - F(x) = \rho A dx \ddot{u},$$

$$\left(F \frac{\partial v_0}{\partial x} \right)_{x+dx} - \left(F \frac{\partial v_0}{\partial x} \right)_x + f_y(x) dx = \rho_0 A_0 dx \ddot{v}_0, \quad (9.4)$$

$$\left(F \frac{\partial w_0}{\partial x} \right)_{x+dx} - \left(F \frac{\partial w_0}{\partial x} \right)_x + f_z(x) dx = \rho_0 A_0 dx \ddot{w}_0.$$

با ساده کردن روابط تعادلی، معادلات ارتعاشی طولی زنجیره در جهت x و عرضی در جهات y و z به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \rho_0 A_0 \ddot{u},$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(F \frac{\partial v_0}{\partial x} \right) + f_y(x) = \rho_0 A_0 \ddot{v}_0, \quad (10.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(F \frac{\partial w_0}{\partial x} \right) + f_z(x) = \rho_0 A_0 \ddot{w}_0.$$

با جایگذاری معادله‌ی (10.4) در معادله‌ی (7.4) برای حرکت طولی خواهیم داشت

$$E_0 \frac{\partial^2 u_0(x,t)}{\partial x^2} = \rho_0 (1 - \eta^2 \nabla^2) \frac{\partial^2 u_0(x,t)}{\partial t^2}, \quad (11.4)$$

برای زنجیره‌ی در حالت تعادل، یعنی، $\ddot{u}_0 = \ddot{v}_0 = \ddot{w}_0 = 0$ با توجه به معادله‌ی (10.4)، داریم $\partial F / \partial x = 0$ یعنی نیروی کششی F ثابت است، بنابراین با جایگذاری F در معادله‌ی (8.4) و نتیجه در معادله‌ی (10.4)، به معادلات حاکم بر تعادل زنجیره می‌رسیم:

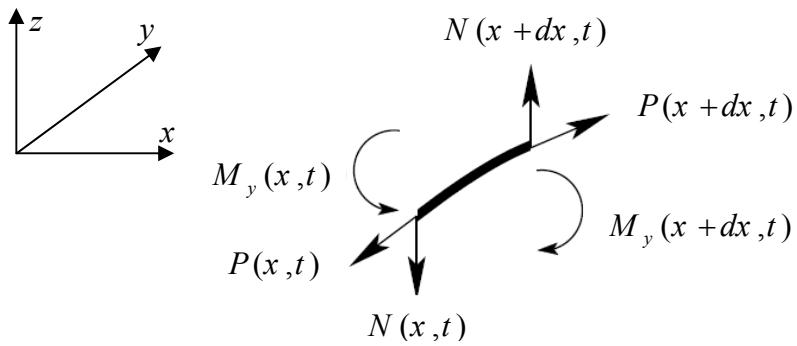
$$F = E_0 A u_{0,x}, \quad (12.4)$$

$$F \frac{\partial^2 v_0}{\partial x^2} + f_y(x) = 0,$$

$$F \frac{\partial^2 w_0}{\partial x^2} + f_z(x) = 0.$$

۳-۴: مدل تیر غیرموضعی

مدل تیر علاوه بر نیروی محوری (کشش و فشاری)، برش و خمش را نیز تحمل می‌کند. یک تیر صاف در جهت طولی x در نظر بگیرید (شکل ۱-۴).



شکل ۱-۴: المانی از تیر، موقعیت دستگاه مختصات

بر اساس فرضیات تیر اویلر-برنولی، میدان جابه‌جایی $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ در نقطه‌ی (x, y, z) عبارت است از [۶۱]:

$$u_1 = u(x, t) - y \frac{\partial w}{\partial z}, \quad (13.4)$$

$$u_2 = 0,$$

$$u_3 = w(x, t),$$

که در آن، u و w ، جابه‌جایی محوری و عرضی نقطه‌ی $(x, 0, 0)$ در صفحه‌ی میانی $y = 0$ می‌باشد. بارگذاری‌های موجود در المان، P در جهت محوری، برشی N_z در جهت z و ممان خمشی M_y در جهت y هستند. با نوشتن معادلات تعادل نیرو در جهت x و z و ممان در جهت y برای یک المان تیر به طول dx خواهیم داشت:

$$P(x+dx, t) - P(x, t) = \rho A dx \ddot{u},$$

$$N_z(x+dx) + \left(P \frac{\partial w}{\partial x} \right)_{x+dx} - N_z(x) - \left(P \frac{\partial w}{\partial x} \right)_x + f_z dx = \rho A dx \ddot{w}, \quad (14.4)$$

$$M_y(x+dx) - M_y(x) - N_y dx = 0.$$

که در آن، f_z نیروی گستردگی واحد طول در جهت z می‌باشد، ρ چگالی مادی و A سطح مقطع تیر است. معادلات حرکت تیر را به صورت زیر می‌توانیم مرتب کنیم:

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \rho A \ddot{u},$$

$$\frac{\partial N_z}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(P \frac{\partial w}{\partial x} \right) + f_z = \rho A \ddot{w}, \quad (15.4)$$

$$\frac{dM_y}{dx} - N_z = 0.$$

با جایگذاری معادلهٔ مربوط به تعادل ممان خمشی در معادلهٔ مربوط به تعادل بار برشی در (۱۵.۴)، معادلات دینامیکی تیر به صورت زیر به دست می‌آید [۶۱]:

$$\frac{\partial P}{\partial x} = \rho A \ddot{u},$$

$$\frac{\partial^2 M_y}{\partial x^2} + \frac{\partial}{\partial x} \left(P \frac{\partial w}{\partial x} \right) + f_z = \rho A \ddot{w}, \quad (16.4)$$

معادلهٔ ساختاری (رابطهٔ تنش و کرنش) بر اساس تئوری الاستیسیتهٔ غیرموضعی با توجه به معادلهٔ (۶.۴) به صورت زیر به دست می‌آید:

$$(1-\eta^2 \nabla^2) \sigma_x = E \varepsilon_x \quad (17.4)$$

که، E و G ، مدول یانگ و برشی هستند و $\nabla^2 = \partial^2 / \partial x^2$ ، اپراتور لابلائسین است. با توجه به تعریف کرنش‌های کوچک، در مورد مولفه‌های ε_{ij} داریم:

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}), \quad (18.4)$$

که در آن، $\varepsilon_{i,j}(\cdot)$ به معنی مشتق $(\cdot)_i$ نسبت به مختصه z است. ε_x در معادله (17.4) ، تنها مولفه غیرصفر کرنش است، که با توجه به میدان جابه‌جایی که در معادله (13.4) ارائه شده است، و تعریف کرنش‌های کوچک در معادله (18.4) به دست می‌آید:

$$\varepsilon_x = \frac{\partial u_1}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x} - z \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} = u_{,x} - zw_{,xx}. \quad (19.4)$$

با جایگذاری معادله (19.4) در (17.4) رابطه‌ی تنش σ_x و جابه‌جایی $u_{,x}$ به دست می‌آید:

$$(1-\eta^2\nabla^2)\sigma_x = E\varepsilon_x = E(u_{,x} - zw_{,xx}). \quad (20.4)$$

رابطه‌ی بین M_x و σ_z به صورت زیر است:

$$M_y = \int_A z\sigma_x dA \quad (21.4)$$

با اعمال $\int_A z(\cdot) dA$ به طرفین معادله (20.4) ، خواهیم داشت:

$$\int_A z(1-\eta^2\nabla^2)\sigma_x dA = \int_A zE(u_{,x} - zw_{,xx}) dA \quad (22.4)$$

با توجه به معادله (21.4) و با فرض تقارن حول محور y به رابطه‌ی زیر می‌رسیم:

$$(1-\eta^2\nabla^2)M_y = -EIw_{,xx}, \quad (23.4)$$

که در آن $I = \int_A z^2 dA$ ، لنگر خمشی تیر حول محور x می‌باشد. با اعمال اپراتور $(1-\eta^2\nabla^2)$ به طرفین

معادله (16.4) و جایگذاری معادله (23.4) ، معادلات دینامیکی غیرموضعی تیر به دست می‌آید [۶۱]:

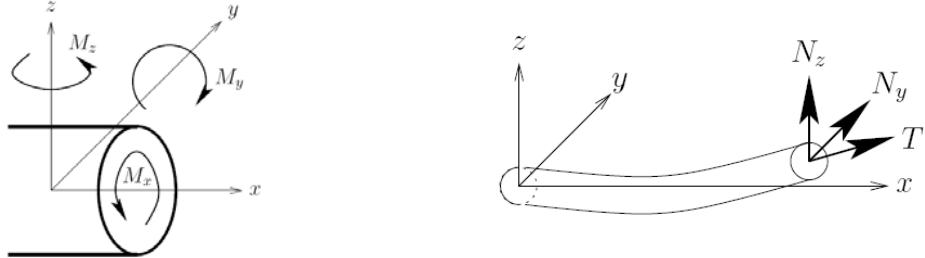
$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial x} &= \rho A \ddot{w}, \\ -EI \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \left(1-\eta^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \frac{\partial}{\partial z} \left(P \frac{\partial w}{\partial x}\right) + \left(1-\eta^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) f_z &= \left(1-\eta^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \rho A \ddot{w}, \end{aligned} \quad (24.4)$$

در شرایط تعادل استاتیکی $\ddot{w} = 0$ ، طبق معادله (24.4) نیروی محوری P_x ثابت است و معادله حاکم بر تعادل عرضی تیر اویلر-برنولی بر اساس تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی به صورت زیر ارائه می‌شود:

$$-EI \frac{d^4 w}{dx^4} + P \left(\frac{d^2 w}{dx^2} - \eta^2 \frac{d^4 w}{dx^4} \right) + \left(1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) f_z = 0. \quad (25.4)$$

۴-۴: مدل میله‌ی غیرموضعی

در ادامه، معادلات دینامیکی حاکم بر مدل میله‌ی کشسان^{۴۴} به دست می‌آید. میله، تمام بارگذاری‌های خمشی و پیچشی و محوری را تحمل می‌کند. بنابراین، میله مانند تیری است که می‌تواند در دو جهت خم‌شدن را تحمل کند و علاوه بر آن پیچش را نیز تحمل می‌کند. یک میله مطابق شکل ۲-۴، که محور میانی آن منطبق بر محور x می‌باشد، در نظر بگیرید.



شکل ۲-۴: المانی از میله، موقعیت دستگاه مختصات، بارهای وارد

حرکت میله با تعریف میدان جابه‌جایی (u_1, u_2, u_3) در نقطه‌ی (x, y, z) توصیف می‌شود:

$$\begin{aligned} u_1 &= u(x, t) + y \frac{\partial v}{\partial x} - z \frac{\partial w}{\partial x} = u + yv_{,x} - zw_{,x}, \\ u_2 &= v(x, t), \\ u_3 &= w(x, t), \end{aligned} \quad (26.4)$$

که در آن، (u, v, w) بردار جابه‌جایی نقاط محور میانی در جهت طولی x ، و جهات عرضی y و z هستند. جابه‌جایی‌های عرضی را یکجا با بردار $(v, w) = \mathbf{w}$ نشان می‌دهیم. معادله‌ی ساختاری (رابطه‌ی تنش و کرنش) بر اساس تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی با توجه به معادله‌ی (۱۷.۴) به دست می‌آید.

ε_x در معادله‌ی (۱۷.۴)، تنها مولفه غیرصفر کرنش است، که با توجه به میدان جابه‌جایی که در معادله‌ی

(۲۶.۴) ارائه شده است، و تعریف کرنش‌های کوچک در معادله‌ی (۱۸.۴) به دست می‌آید:

$$\varepsilon_x = \frac{\partial u_1}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x} + y \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} - z \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} = u_{,x} + y v_{,xx} - z w_{,xx}. \quad (۲۷.۴)$$

با جایگذاری معادله‌ی (۲۷.۴) در (۱۷.۴)، رابطه‌ی تنش σ_x و جابه‌جایی به دست می‌آید:

$$(1 - \eta^2 \nabla^2) \sigma_x = E \varepsilon_x = E(u_{,x} + y v_{,xx} - z w_{,xx}). \quad (۲۸.۴)$$

در المان میله علاوه بر نیروی محوری F ، بارهای عرضی $\mathbf{N} = (N_y, N_z)$ ، ممان‌های خمی

M_x و پیچش M_y, M_z وجود دارد. با نوشتن معادلات تعادل نیرو و گشتاور در تمام جهات برای

یک المان میله به طول dx خواهیم داشت:

$$F(x+dx) - F(x) = \rho A dx \ddot{u},$$

$$\begin{aligned} N_y(x+dx) + \left(F \frac{\partial v}{\partial x} \right)_{x+dx} - N_y(x) - \left(F \frac{\partial v}{\partial x} \right)_x + f_y dx &= \rho A dx \ddot{v}, \\ N_z(x+dx) + \left(F \frac{\partial w}{\partial x} \right)_{x+dx} - N_z(x) - \left(F \frac{\partial w}{\partial x} \right)_x + f_z dx &= \rho A dx \ddot{w}, \end{aligned} \quad (۲۹.۴)$$

$$M_x(x+dx) - M_x(x) = \rho J \dot{\varphi} dx$$

$$M_y(x+dx) - M_y(x) - N_z dx = 0.$$

$$M_z(x+dx) - M_z(x) - N_y dx = 0.$$

که در آن، $\mathbf{f} = (f_y, f_z)$ نیروی گسترده‌ی واحد طول در جهات عرضی می‌باشد، ρ چگالی مادی و A سطح مقطع میله و J ممان دورانی سطح A است، همچنین φ زاویه‌ی پیچش حول محور x می‌باشد.

معادلات حرکت میله را به صورت زیر می‌توان مرتب کرد:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x} &= \rho A \ddot{u}, \\ \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} N_y \\ N_z \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \left(F \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} v \\ w \end{bmatrix} \right) + \begin{bmatrix} f_y \\ f_z \end{bmatrix} &= \rho A \begin{bmatrix} \ddot{v} \\ \ddot{w} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (۳۰.۴)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} M_y \\ M_z \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} Q_z \\ Q_y \end{bmatrix} = 0.$$

$$\frac{\partial M_x}{\partial x} = \rho J \ddot{\varphi}$$

با جایگذاری معادلات مربوط به تعادل ممان خمشی در معادله مربوط به تعادل بارهای برشی در (۳۰.۴)، معادلات دینامیکی میله به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x} &= \rho A \ddot{u}, \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} \begin{bmatrix} M_z \\ M_y \end{bmatrix} + \frac{\partial}{\partial x} \left(F \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} v \\ w \end{bmatrix} \right) + \begin{bmatrix} f_y \\ f_z \end{bmatrix} &= \rho A \begin{bmatrix} \ddot{v} \\ \ddot{w} \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (31.4)$$

$$\frac{\partial M_x}{\partial z} = \rho J \ddot{\varphi}$$

رابطه‌ی بین (M_y, M_z) و σ_x به صورت زیر است:

$$\begin{bmatrix} M_y \\ M_z \end{bmatrix} = \int_A \begin{bmatrix} z \\ -y \end{bmatrix} \sigma_x dA \quad (32.4)$$

با محاسبه لنگر دوم سطحی حول محورهای عرضی x و y از طرفین معادله (۲۸.۴)، داریم:

$$(1 - \eta^2 \nabla^2) \sigma_x = E \varepsilon_x = E(u_{,x} + y v_{,xx} - z w_{,xx}). \quad (33.4)$$

با اعمال و $\int_A z(.) dA$ و $\int_A y(.) dA$ به طرفین معادله (۳۳.۴) داریم:

$$(1 - \eta^2 \nabla^2) \int_A \sigma_x \begin{bmatrix} -y \\ z \end{bmatrix} dA = \int_A \sigma_x (u_{,x} + y v_{,xx} - z w_{,xx}) \begin{bmatrix} -y \\ z \end{bmatrix} dA. \quad (34.4)$$

با ساده کردن معادله (۳۴.۴) داریم:

$$(1 - \eta^2 \nabla^2) \begin{bmatrix} M_y \\ M_z \end{bmatrix} = -E \mathbf{I} \begin{bmatrix} w_{,xx} \\ v_{,xx} \end{bmatrix}, \quad (35.4)$$

که در آن \mathbf{I} تانسور اینرسی سطح مقطع میله می‌باشد:

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} I_{yy} & I_{yz} \\ I_{zy} & I_{zz} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \int_A z^2 dA & -\int_A yz dA \\ -\int_A yz dA & \int_A y^2 dA \end{bmatrix}, \quad (36.4)$$

از آن جا که در این پروژه از مدل‌های میله‌ی با مقطع دایره استفاده خواهیم کرد، فرض می‌کنیم حول محورهای y و z تقارن وجود دارد، بنابراین لنگر اول سطوح همگی صفرند و در مورد لنگرهای دوم سطوح فقط حول محور اصلی y و z غیر صفر می‌باشند. با توجه به فرضیات فوق، معادله‌ی (35.4) به صورت زیر نوشته می‌شود

$$\begin{aligned} (1-\eta^2\nabla^2)M_y &= -EI_{yy}w_{,xx}, \\ (1-\eta^2\nabla^2)M_z &= -EI_{zz}v_{,xx}. \end{aligned} \quad (37.4)$$

با اعمال اپراتور $(1-\eta^2\nabla^2)$ به طرفین معادله‌ی (31.4) و جایگذاری معادله‌ی (37.4)، معادلات دینامیکی غیرموضعی تیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial x} &= \rho A i \ddot{u}, \\ -EI_{zz} \frac{\partial^4 v}{\partial x^4} + \left(1-\eta^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \frac{\partial}{\partial x} \left(F \frac{\partial v}{\partial x}\right) + \left(1-\eta^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) f_y &= \left(1-\eta^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \rho A \ddot{v}, \\ -EI_{yy} \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} + \left(1-\eta^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \frac{\partial}{\partial x} \left(F \frac{\partial w}{\partial x}\right) + \left(1-\eta^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) f_z &= \left(1-\eta^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) \rho A \ddot{w}, \end{aligned} \quad (38.4)$$

$$\frac{\partial M_x}{\partial x} = \rho J \ddot{\phi}.$$

در شرایط تعادل استاتیکی $\ddot{u} = \ddot{v} = \ddot{w} = \ddot{\phi} = 0$ ، با توجه به معادله‌ی (38.4) نیروی محوری F و گشتاور پیچشی M_x ثابت است، بنابراین معادلات حاکم بر تعادل عرضی میله‌ی کشسان بر اساس تئوری

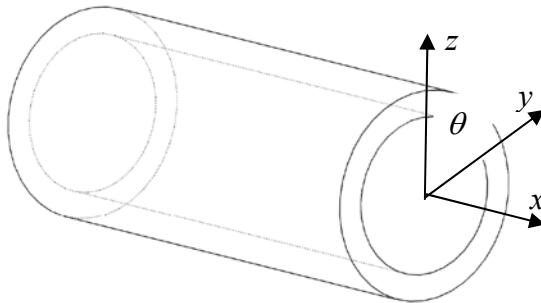
الاستیسیته‌ی غیرموضعی به صورت زیر ارائه می‌شود:

$$-EI_{zz} \frac{d^4 v}{dx^4} + F \left(\frac{d^2 v}{dx^2} - \eta^2 \frac{d^4 v}{dx^4} \right) + \left(1-\eta^2 \frac{d^2}{dx^2}\right) f_y = 0, \quad (39.4)$$

$$-EI_{yy} \frac{d^4 w}{dx^4} + F \left(\frac{d^2 w}{dx^2} - \eta^2 \frac{d^4 w}{dx^4} \right) + \left(1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) f_z = 0.$$

۴-۵: مدل پوسته‌ی غیرموضعی

مدل پوسته‌ای استوانه‌ای به طول L , ضخامت h و شعاع میانی R مطابق شکل ۳-۴ در نظر بگیرید.



شکل ۳-۴: مدل پوسته‌ای استوانه‌ای، موقعیت دستگاه مختصات

مختصات (x, θ, r) به ترتیب در جهت محوری، محیطی و شعاعی پوسته قرار دارند. مختصه θ زاویه‌ی محیطی است که از محور z در جهت پادساعتگرد سنجیده می‌شود. میدان جابه‌جایی پوسته با بردار $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ توصیف می‌شود. بردار جابه‌جایی \mathbf{u} بنا بر فرضیات دانل^{۴۵} به صورت زیر قابل بیان است

: [۱۰۹]

$$u_1(x, \theta, r, t) = u(x, \theta, t) - r' w_{,x}$$

$$u_2(x, \theta, r, t) = v(x, \theta, t) - r' \frac{w_{,\theta}}{R} \quad (40.4)$$

$$u_3(x, \theta, r, t) = w(x, \theta, t)$$

که در آن، (u, v, w) بردار جابه‌جایی صفحه‌ی میانی پوسته، در راستای محوری، محیطی و شعاعی است و $r' = r - R$, مختصه‌ی شعاعی از شعاع میانی است. توجه شود که با فرض ضخامت کم پوسته، می‌توان

Donnell^{۴۵}

از تغییرات شعاعی مولفه‌های (u, v, w) صرفنظر کرد. مولفه‌های تانسور کرنش با استفاده از بردار

جابه‌جایی (۴۰.۴) به صورت زیر تعیین می‌شود [۶۵، ۶۸]:

$$\begin{aligned}\varepsilon_x &= \frac{\partial u_1}{\partial x} = u_{,x} - r' w_{,xx} \\ \varepsilon_\theta &= \frac{1}{R} \frac{\partial u_2}{\partial \theta} + \frac{w}{R} = \frac{v_{,\theta}}{R} + \frac{w}{R} - r' \frac{w_{,\theta\theta}}{R^2} \\ \gamma_{x\theta} &= \frac{1}{R} \frac{\partial u_1}{\partial \theta} + \frac{\partial u_2}{\partial x} = \frac{u_{,\theta}}{R} + v_{,x} - 2r' \frac{w_{,x\theta}}{R}.\end{aligned}\quad (41.4)$$

در پوسته‌های نازک می‌توان از تنش‌های شعاعی σ_r صرفنظر کرد. معادله‌ی ساختاری حاکم بر رابطه‌ی تنش و کرنش بر اساس تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی با توجه به معادله‌ی (۶.۴) به صورت زیر ارائه می‌شود:

$$(1-\eta^2\nabla^2) \begin{Bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_\theta \\ \tau_{x\theta} \end{Bmatrix} = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{Bmatrix} \varepsilon_x + \nu \varepsilon_\theta \\ \varepsilon_\theta + \nu \varepsilon_x \\ \frac{(1-\nu)}{2} \gamma_{x\theta} \end{Bmatrix} \quad (42.4)$$

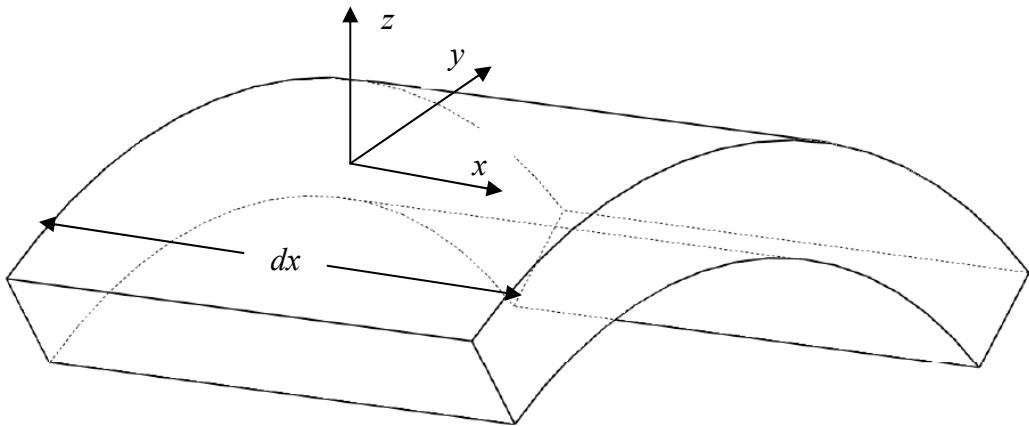
که در آن، E و ν ، بیانگر مدول یانگ و ضریب پواسون است، همچنین ∇^2 عملگر لاپلاسین است:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (43.4)$$

با جایگذاری معادله‌ی (۴۱.۴) در (۴۲.۴) رابطه‌ی تنش با مولفه‌های جابه‌جایی صفحه‌ی میانی به صورت زیر تعیین می‌شود:

$$(1-\eta^2\nabla^2) \begin{Bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_\theta \\ \tau_{x\theta} \end{Bmatrix} = \frac{E}{1-\nu^2} \begin{Bmatrix} u_{,x} - r' w_{,xx} + \nu \left(\frac{v_{,\theta}}{R} + \frac{w}{R} - r' \frac{w_{,\theta\theta}}{R^2} \right) \\ \frac{v_{,\theta}}{R} + \frac{w}{R} - r' \frac{w_{,\theta\theta}}{R^2} + \nu (u_{,x} - r' w_{,xx}) \\ \frac{(1-\nu)}{2} \left(\frac{u_{,\theta}}{R} + v_{,x} - 2r' \frac{w_{,x\theta}}{R} \right) \end{Bmatrix} \quad (44.4)$$

یک المان از پوسته‌ی مورد بحث را در نظر می‌گیریم (شکل ۴-۴).



شکل ۴-۴: الگانی از پوسته‌ی استوانه‌ای، موقعیت دستگاه مختصات

نیروهای واحد طول معادل^{۴۶} تنش‌ها به صورت زیر تعیین می‌شوند:

$$\begin{Bmatrix} N_x \\ N_\theta \\ N_{x\theta} \end{Bmatrix} = \int_{-h/2}^{h/2} \begin{Bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_\theta \\ \sigma_{x\theta} \end{Bmatrix} dr', \quad (45.4)$$

که در آن، N_x ، N_θ و $N_{x\theta}$ به ترتیب نیروهای واحد طول معادل σ_x ، σ_θ و $\tau_{x\theta}$ هم جهت با آنها هستند، توجه شود که $N_{\theta x}$ نیروی واحد طول معادل $\tau_{\theta x}$ است و از نظر اندازه برابر $N_{x\theta}$ است. با اعمال عملگر $(1 - \eta^2 \nabla^2)$ به طرفین معادله‌ی (45.4) و استفاده از معادله‌ی (44.4) داریم:

$$(1 - \eta^2 \nabla^2) \begin{Bmatrix} N_x \\ N_\theta \\ N_{x\theta} \end{Bmatrix} = K \begin{Bmatrix} u_{,x} + v \left(\frac{v_{,\theta}}{R} + \frac{w}{R} \right) \\ \frac{v_{,\theta}}{R} + \frac{w}{R} + vu_{,x} \\ \frac{(1-v)}{2} \left(\frac{u_{,\theta}}{R} + v_{,x} \right) \end{Bmatrix}. \quad (46.4)$$

که در آن، $K = Eh / (1 - v^2)$ مقاومت محوری معادل پوسته است. گشتاورهای واحد طول معادل تنش‌ها نیز به این صورت تعیین می‌شوند:

$$\begin{Bmatrix} M_x \\ M_\theta \\ M_{x\theta} \end{Bmatrix} = \int_{-h/2}^{h/2} \begin{Bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_\theta \\ \sigma_{x\theta} \end{Bmatrix} r' dr' \quad (47.4)$$

که در آن، M_x ، M_θ و $M_{x\theta}$ به ترتیب گشتاورهای واحد طول معادل σ_x ، σ_θ و $\tau_{x\theta}$ می‌باشد. توجه شود که $M_{\theta x}$ گشتاور معادل $\tau_{\theta x}$ است و از نظر اندازه برابر $M_{x\theta}$ است. با اعمال عملگر $(1 - \eta^2 \nabla^2)$ به طرفین معادله‌ی (47.4) و استفاده از معادله‌ی (44.4) داریم:

$$(1 - \eta^2 \nabla^2) \begin{Bmatrix} M_x \\ M_\theta \\ M_{x\theta} \end{Bmatrix} = -D \begin{Bmatrix} w_{xx} + \nu \frac{w_{\theta\theta}}{R^2} \\ \frac{w_{\theta\theta}}{R^2} + \nu w_{xx} \\ (1 - \nu) \frac{w_{x\theta}}{R} \end{Bmatrix}, \quad (48.4)$$

که در آن، $D = Eh^3 / 12(1 - \nu^2)$ ^{۴۸} مقاومت موثر خمشی پوسته است. نیروهای برشی شعاعی واحد طول $Q_{\theta z} = h\tau_{\theta z}$ و $Q_{xz} = h\tau_{xz}$ معادل با تنش‌های برشی شعاعی τ_{xz} و $\tau_{\theta z}$ تعریف می‌شوند. اکنون نوبت نوشتن معادلات حاکم بر دینامیک پوسته‌ی مورد بحث است. با نوشتن معادلات تعادل نیرو در تمام جهات برای المان پوسته در نقطه‌ی (x, θ, r) به ابعاد $dx \times Rd\theta$ در غیاب نیروهای حجمی، خواهیم

داشت:

$$Rd\theta [N_x(x + dx, \theta) - N_x(x, \theta)] + dx [N_{\theta x}(x, \theta + d\theta) - N_{\theta x}(x, \theta)] = \rho h R dx d\theta \ddot{u}, \quad (49.4)$$

$$dx [N_\theta(x, \theta + d\theta) - N_\theta(x, \theta)] + Rd\theta [N_{x\theta}(x + dx, \theta) - N_{x\theta}(x, \theta)] = \rho h R dx d\theta \ddot{v},$$

Effective flexural stiffness ^{۴۸}

$$\begin{aligned}
& Rd\theta [Q_{xz}(x+dx, \theta) - Q_{xz}(x, \theta)] + dx [Q_{\theta z}(x, \theta+d\theta) - Q_{\theta z}(x, \theta)] \\
& + Rd\theta \left[\left(N_x \frac{\partial w}{\partial x} \right) \Big|_{x+dx, \theta} - \left(N_x \frac{\partial w}{\partial x} \right) \Big|_{x, \theta} \right] \\
& + dx \left[\left(N_\theta \frac{1}{R} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right) \Big|_{x, \theta+d\theta} - \left(N_y \frac{1}{R} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right) \Big|_{x, \theta} \right] \\
& + Rd\theta \left[\left(N_{x\theta} \frac{1}{R} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right) \Big|_{x+dx, \theta} - \left(N_{x\theta} \frac{1}{R} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right) \Big|_{x, \theta} \right] \\
& + dx \left[\left(N_{\theta x} \frac{\partial w}{\partial x} \right) \Big|_{x, \theta+d\theta} - \left(N_{\theta x} \frac{\partial w}{\partial x} \right) \Big|_{x, \theta} \right] - p - \frac{N_y}{R} = \rho h R dxd\theta \ddot{w},
\end{aligned}$$

که در آن، p فشار خارجی واردہ بر سطح پوسته می باشد. همچنین معادلات تعادل گشتاورهای واردہ بر

المان به صورت زیر می باشد:

$$\begin{aligned}
& Rd\theta [M_x(x+dx, \theta) - M_x(x, \theta)] + dx [M_{\theta x}(x, \theta+d\theta) - M_{\theta x}(x, \theta)] - Q_{xz} R dxd\theta = 0, \\
& (50.4)
\end{aligned}$$

$$dx [M_\theta(x, \theta+d\theta) - M_\theta(x, \theta)] + Rd\theta [M_{x\theta}(x+dx, \theta) - M_{x\theta}(x, \theta)] - Q_{\theta z} R dxd\theta = 0,$$

می توانیم معادله (49.4) را به صورت زیر مرتب کنیم [۶۸]:

$$\begin{aligned}
& N_{x,x} + \frac{1}{R} N_{\theta x,y} = \rho h \ddot{u}, \\
& N_{x\theta,x} + \frac{1}{R} N_{\theta,\theta} = \rho h \ddot{v}, \\
& Q_{xz,x} + \frac{1}{R} Q_{\theta z,\theta} + \frac{\partial}{\partial x} \left(N_x \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial x} \left(N_{x\theta} \frac{\partial w}{\partial \theta} \right) \\
& + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(N_{\theta x} \frac{\partial w}{\partial x} \right) + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(N_\theta \frac{\partial w}{\partial \theta} \right) - \frac{N_y}{R} - p = \rho h \ddot{w}.
\end{aligned} \tag{51.4}$$

معادله (50.4) نیز، به صورت زیر قابل بازنویسی می باشد:

$$\begin{aligned}
& Q_{xz} = M_{x,x} + \frac{1}{R} M_{\theta x,\theta}, \\
& Q_{\theta z} = M_{x\theta,x} + \frac{1}{R} M_{\theta,\theta}.
\end{aligned} \tag{52.4}$$

با جایگذاری معادله (52.4) در معادله (51.4) معادلات دینامیکی زیر حاصل می شود:

$$N_{x,x} + \frac{1}{R} N_{x\theta,\theta} = \rho h \ddot{u},$$

$$N_{x\theta,x} + \frac{1}{R} N_{\theta,\theta} = \rho h \ddot{v},$$

$$M_{x,xx} + 2 \frac{1}{R} M_{x\theta,x\theta} + \frac{1}{R^2} M_{\theta,\theta\theta} + \Im[w] - \frac{N_\theta}{R} - p = \rho h \ddot{w}. \quad (53.4)$$

که در آن، عملگر \Im بدین صورت تعریف می‌شود:

$$\Im = \frac{\partial}{\partial x} \left(N_x \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial x} \left(N_{x\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(N_{\theta x} \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(N_\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad (54.4)$$

با اعمال عملگر $(1 - \eta^2 \nabla^2)$ به طرفین معادله‌ی (53.4) و (46.4) و (48.4) داریم:

$$K \left[u_{,xx} + \nu \frac{v_{,x\theta}}{R} + \nu \frac{w_{,x}}{R} + \frac{(1-\nu)}{2} \left(u_{,\theta\theta} + \frac{v_{,x\theta}}{R} \right) \right] = (1 - \eta^2 \nabla^2) \rho h \ddot{u},$$

$$K \left[\frac{(1-\nu)}{2} \left(\frac{1}{R} u_{,x\theta} + v_{,xx} \right) + v_{,\theta\theta} + \frac{w_{,\theta\theta}}{R^2} + \nu \frac{1}{R} u_{,x\theta} \right] = (1 - \eta^2 \nabla^2) \rho h \ddot{v},$$

$$-D \left[w_{,xxxx} + \nu \frac{1}{R^2} w_{,xx\theta\theta} + \frac{1}{R^4} w_{,\theta\theta\theta\theta} + \nu \frac{1}{R^2} w_{,xx\theta\theta} + 2(1-\nu) \frac{1}{R^2} w_{,xx\theta\theta} \right]$$

$$+ (1 - \eta^2 \nabla^2) \Im(w) - \frac{K}{R} \left(u_{,x} + \nu \frac{1}{R} v_{,\theta} + \nu \frac{w}{R} \right) - (1 - \eta^2 \nabla^2) p = (1 - \eta^2 \nabla^2) \rho h \ddot{w}. \quad (55.4)$$

رابطه‌ی (55.4)، در واقع معادلات دیفرانسیل کوپل حاکم بر دینامیک پوسته بر حسب مولفه‌های

جابه‌جایی است. در شرایط تعادل استاتیکی $\dot{u} = \dot{v} = \dot{w} = 0$ ، با انجام کمی عملیات جبری متغیرهای u و

v از معادله‌ی (55.4) حذف می‌شوند و در نهایت معادله‌ی حاکم بر تعادل استاتیکی پوسته استوانه‌ای

دانل غیرموضعی به صورت زیر حاصل می‌شود [۶۷]:

$$D \nabla^8 w + \frac{Eh}{R^2} \frac{\partial^4 w}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi[w] - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 p = 0. \quad (56.4)$$

که در آن همان عملگر \Im در شرایط برقراری تعادل استاتیکی است. در مورد عملگر \Im که در

معادله‌ی (54.4) تعریف شده است، داریم:

$$\begin{aligned} \mathfrak{I} = & N_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2N_{xy} \frac{1}{R} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} + N_y \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \\ & + \left(N_{x,x} + \frac{1}{R} N_{\theta x, \theta} \right) \frac{\partial}{\partial x} + \left(N_{x\theta,x} + \frac{1}{R} N_{\theta,\theta} \right) \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial \theta} \end{aligned} \quad (57.4)$$

با برقراری شرایط تعادل استاتیکی، با توجه به معادله‌ی (۵۳.۴) داریم:

$$N_{x,x} + \frac{1}{R} N_{\theta x, \theta} = 0, \quad (58.4)$$

$$N_{x\theta,x} + \frac{1}{R} N_{\theta,\theta} = 0.$$

بنابراین با جایگذاری معادله‌ی (۵۸.۴) در (۵۷.۴)، عملگر \mathfrak{I} را در حالت برقراری تعادل استاتیکی که از

این به بعد با ψ نشان می‌دهیم، به فرم زیر در می‌آید:

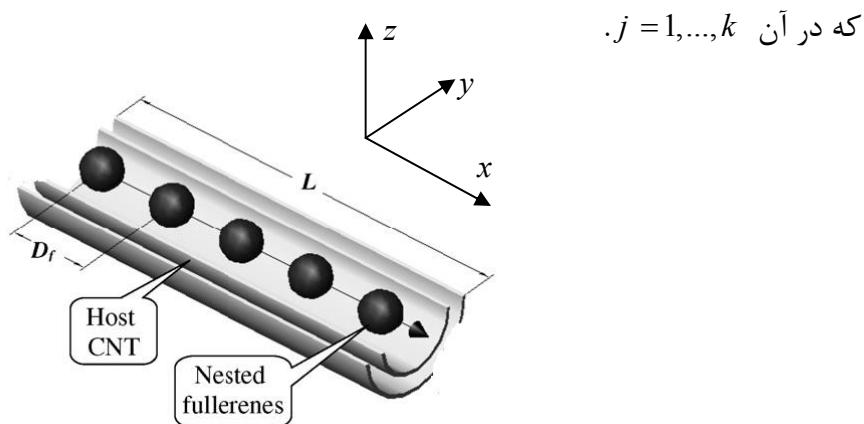
$$\psi = N_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2N_{x\theta} \frac{1}{R} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} + N_\theta \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (59.4)$$

فصل پنجم: تحلیل ناپایداری نانوپیپادها

در این فصل، پس از ارائهٔ معادلات حاکم بر پایداری نانوپیپادها بر اساس مدل‌های کانتینیومی غیرموضعی ارائه شده در فصل چهارم، کمانش نانوپیپادها را تحت بارگذاری‌های مختلف بررسی می‌کنیم.

۱-۵: معادلات حاکم بر پایداری نانوپیپادها

یک نانوپیپاد با k لایه به طول L متشکل از مجموعه‌ای از k پوسته‌ی استوانه‌ای هم محور به عنوان D_f نانوتیوب کربنی با یک شبکه محبوس از فولرین‌های کروی منطبق بر محور نانوپیپاد که به فاصله‌ی w_r نشان می‌دهیم، از هم قرار دارند مطابق شکل ۱-۵ در نظر بگیرید. جابه‌جایی شعاعی پوسته‌ها را با $j = 1, \dots, k$ نشان می‌دهیم،



شکل ۱-۵: شکل شماتیک نانوپیپاد [۳۳]

اندرکنش وان در والس بین لایه‌های نانوتیوب و همچنین بین فولرین‌های محبوس و داخلی‌ترین لایه‌ی نانوتیوب (که با شماره‌ی ۱ مشخص شده)، به صورت توزیع فشار در لایه‌های نانوپیپاد در معادله‌ی (۱۹.۳) در فصل سوم ارائه شده است:

$$p_1 = c(w_2 - w_1) + p_{vdW-C60}(x) \quad (1.5)$$

$$p_i = c(w_{i+1} - w_i) - c \frac{R_{i-1}}{R_i} (w_i - w_{i-1}); \quad i = 2, \dots, k-1$$

$$p_k = -c \frac{R_{k-1}}{R_k} (w_k - w_{k-1}).$$

که در آن، p_j توزیع فشار بر روی لایه‌ی j -ام، $p_{vdW-C60}(x)$ توزیع فشار واردہ بر داخلی‌ترین لایه‌ی نانوتیوب از سمت فولرین‌ها، c ضریب فشار وان در والس و R_j شعاع لایه‌ی j -ام می‌باشد. رابطه‌ی حاکم بر تعادل لایه‌ی j -ام نانوتیوب با استفاده از معادله‌ی (۵۶.۴) به این صورت، ارائه می‌شود [۶۷]:

$$D\nabla^8 w_j + \frac{Eh}{R_j^2} \frac{\partial^4 w_j}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_j [w_j] - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 p_j = 0. \quad (۲.۵)$$

که در آن، D مقاومت موثر خمشی و E مدول یانگ است. همچنین منظور از ψ در معادله‌ی (۲.۵) عملگر ψ در لایه‌ی j -ام است که در معادله‌ی (۵۹.۴) تعریف شده و بدین ترتیب تعیین می‌شود:

$$\psi = N_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2N_{x\theta} \frac{1}{R} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} + N_\theta \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (۳.۵)$$

که در آن، N_y و N_{xy} نیروهای معادل محوری، برشی و محیطی در لایه‌ی j -ام است. بنابراین، با توجه به معادله‌ی (۲.۵) روابط حاکم بر تعادل نانوپیپاد به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} D\nabla^8 w_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_1 [w_1] \\ - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 [c(w_2 - w_1) + p_{vdW-C60}(x)] = 0, \\ D\nabla^8 w_i + \frac{Eh}{R_i^2} \frac{\partial^4 w_i}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_i [w_i] \\ - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [w_{i+1} - w_i - (R_{i-1}/R_i)(w_i - w_{i-1})] = 0; \quad i = 2, \dots, k-1, \\ D\nabla^8 w_k + \frac{Eh}{R_k^2} \frac{\partial^4 w_k}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_k [w_k] \\ - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [(R_{k-1}/R_k)(w_{k-1} - w_k)] = 0, \end{aligned} \quad (۴.۵)$$

۲-۵: آنالیز کمانش نانوپیپادها

اگر توابع w_i تغییر شکل شعاعی لایه‌های نانوپیپاد در شرایط تعادل باشند و \tilde{w}_i اغتشاش وارد بر سیستم باشد، در محدوده‌ی پایداری سیستم، توابع $w_i + \tilde{w}_i$ در معادلات حاکم بر پایداری سیستم صدق می‌کنند. از آنجا که معادله‌ی (۴.۵) نسبت به w_i خطی است، در واقع توابع اغتشاش \tilde{w}_i هم به تنها می‌کنند. در معادله‌ی (۴.۵) صدق می‌کند، بنابراین:

$$\begin{aligned} D\nabla^8\tilde{w}_1 + \frac{Eh}{R_1^2}\frac{\partial^4\tilde{w}_1}{\partial x^4} - (1-\eta^2\nabla^2)\nabla^4\psi_1[\tilde{w}_1] - (1-\eta^2\nabla^2)\nabla^4[c(\tilde{w}_2 - \tilde{w}_1)] &= 0, \\ D\nabla^8\tilde{w}_i + \frac{Eh}{R_i^2}\frac{\partial^4\tilde{w}_i}{\partial x^4} - (1-\eta^2\nabla^2)\nabla^4\psi_i[\tilde{w}_i] \\ - (1-\eta^2\nabla^2)\nabla^4c[\tilde{w}_{i+1} - \tilde{w}_i - (R_{i-1}/R_i)(\tilde{w}_i - \tilde{w}_{i-1})] &= 0; \quad i = 2, \dots, k-1, \\ D\nabla^8\tilde{w}_k + \frac{Eh}{R_k^2}\frac{\partial^4\tilde{w}_k}{\partial x^4} - (1-\eta^2\nabla^2)\nabla^4\psi_k[\tilde{w}_k] \\ - (1-\eta^2\nabla^2)\nabla^4c[(R_{k-1}/R_k)(\tilde{w}_{k-1} - \tilde{w}_k)] &= 0. \end{aligned} \quad (5.5)$$

از روابط به دست آمده در معادله‌ی (۵.۵) می‌توان کمانش نانوپیپاد را تحت بارگذاری‌های مختلف بررسی نمود.

۲-۶: ناپایداری نانوپیپاد تحت فشار خارجی

با در نظر گرفتن نانوپیپاد تک‌لایه، تحت فشار خارجی، نیروی معادل تنش محوری، N_{x1} و نیروی معادل تنش پیچشی، $N_{x\theta 1}$ وجود ندارند. به خاطر فشار خارجی و فشار وان در والس فولرین‌های محبوس، فقط تنش محیطی در نانوتیوب وجود دارد. بنابراین، نیروهای واحد طول معادل در اثر اعمال فشار خارجی عبارت است از:

$$\begin{aligned} N_{x1} &= 0, \\ N_{x\theta 1} &= 0, \end{aligned} \quad (6.5)$$

$$N_{\theta_1} = R_1 \left[-p_{ext} + p_{vdw-C60}(x) \right].$$

با جایگذاری معادلات (۳.۵) در (۶.۵)، عملگر ψ به این صورت بدست می‌آید:

$$\psi_1 = R_1 \left[-p_{ext} + p_{vdw-C60}(x) \right] \frac{1}{R_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}, \quad (7.5)$$

اکنون با جایگذاری عملگر ψ از معادله (۷.۵) در (۵.۵) به معادلات حاکم بر تعادل نانوپیپاد در اثر

اعمال فشار خارجی می‌رسیم:

$$D\nabla^8 \tilde{w}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4 \tilde{w}_1}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left\{ R_1 \left[-p_{ext} + p_{vdW,C60}(x) \right] \frac{1}{R_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right\} \tilde{w}_1 = 0 \quad (8.5)$$

تابع آزمایشی اغتشاشی برای تغییرشکل شعاعی $\tilde{w}_1(x, y)$ را می‌توان به صورت توابع هارمونیک سینوسی

در نظر گرفت:

$$\tilde{w}_1 = \tilde{W}_1 \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin(n\theta), \quad (9.5)$$

که در آن، \tilde{W}_1 دامنه‌ی تابع تغییر شکل شعاعی اغتشاشی است، m و n دو عدد صحیح مثبت، بیانگر عدد موجی طولی و نیم‌موجی محیطی می‌باشند. برای ساده‌تر نوشتمن معادلات آتی α و β_1 را به

صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\alpha = \frac{m\pi}{L}, \quad \beta_1 = \frac{n}{R_1}, \quad (10.5)$$

با جایگذاری تابع آزمایشی اغتشاشی $\tilde{w}_1(x, y)$ معادله (۹.۵) در معادله (۸.۵) به معادله خطی جبری

زیر می‌رسیم:

$$\tilde{A}_1 \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin(n\theta) = 0, \quad (11.5)$$

$$\begin{aligned} \tilde{A}_1 &= D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 \tilde{W}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 \tilde{W}_1 + R_1 \beta_1^2 \left(\frac{d^4}{dx^4} - \eta^2 \frac{d^6}{dx^6} \right) p_{vdw-C60}(x) \tilde{W}_1 \\ &\quad + \left[1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2) \right] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 \left\{ R_1 \beta_1^2 \left[-p_{ext} + p_{vdw-C60}(x) \right] \right\} \tilde{W}_1 = 0 \end{aligned} \quad (12.5)$$

برای اینکه معادله‌ی (11.5) برای تمام x و θ ها صدق کند، باید ضریب \tilde{A}_1 محو شوند. یعنی داشته

باشیم:

$$\bar{A}_1(\alpha, \beta_1) = \int_0^L \tilde{A}(\alpha, \beta_1, x) dx = 0 \quad (13.5)$$

که نتیجه می‌دهد:

$$\begin{aligned} &\left\{ D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + \frac{R_1}{L} \beta_1^2 \left(\frac{d^3 p_{vdw-C60}(x)}{dx^3} - \eta^2 \frac{d^5 p_{vdw-C60}(x)}{dx^5} \right) \right\}_0^L \\ &\quad + R_1 \left[1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2) \right] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 \beta_1^2 \left(-p_{ext} + \frac{1}{L} \int_0^L p_{vdw-C60}(x) dx \right) \tilde{W}_1 = 0. \end{aligned} \quad (14.5)$$

با استفاده از معادله‌ی (14.5) می‌توان، فشار شعاعی بحرانی نانوپیپاد را به صورت عددی تعیین نمود. با

توجه به معادله‌ی (14.5)، فشار به دست آمده برای یک مود خاص اغتشاش (m, n) ، که با

نشان می‌دهیم، بدین ترتیب تعیین می‌شود:

$$\begin{aligned} p_{ext}|_{m,n} &= \frac{1}{L} \int_0^L p_{vdw-C60}(x) dx \\ &\quad + \frac{\left\{ D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 \right\} + \frac{R_1}{L} \beta_1^2 \left(\frac{d^3 p_{vdw-C60}(x)}{dx^3} - \eta^2 \frac{d^5 p_{vdw-C60}(x)}{dx^5} \right) \right\}_0^L}{R \left[1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2) \right] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 \beta_1^2} \end{aligned} \quad (15.5)$$

فشار شعاعی بحرانی در واقع از کمینه کردن $p_{ext}|_{m,n}$ در معادله‌ی (15.5) به ازای مودهای مختلف

کمانشی (m, n) به دست می‌آید.

۵-۲-۲: ناپایداری نانوپیپاد تحت تورک پیچشی

در صورتی که تورک پیچشی T به نانوپیپاد وارد شود، این گشتاور بین تمام لایه‌ها تقسیم می‌شود، به طوری که داریم:

$$T = \sum_{j=1}^k T_j. \quad (16.5)$$

که در آن T_j تورک پیچشی وارد بر لایه‌ی زام است و رابطه‌ی آن با نیروی معادل برشی در لایه‌ی زام به صورت زیر است:

$$T_j = 2\pi R_j^2 N_{x\theta j} \quad (17.5)$$

نیروی معادل برشی وارد در هر لایه نسبت مستقیم با شعاع آن لایه دارد، یعنی

$$\frac{N_{xy1}}{R_1} = \frac{N_{xy2}}{R_2} = \dots = \frac{N_{xyj}}{R_j} = \dots = \frac{N_{xyk}}{R_k}, \quad (18.5)$$

با جایگذاری معادله‌ی (18.5) در (17.5)، نیروی معادل برشی وارد در هر لایه بدین ترتیب تعیین می‌گردد:

$$N_{xyj} = TR_j / 2\pi \sum_{m=1}^k R_m^3 \quad (19.5)$$

در حالتی که فقط بارگذاری پیچشی اعمال شود، نیروی معادل تنش‌های محوری، N_{xj} وجود ندارند. همچنین فقط در لایه‌ی اول به خاطر فشار وان در والس فولرین‌های محبوس، تنش محیطی در نانوتیوب وجود دارد. بنابراین، نیروهای واحد طول معادل در اثر بارگذاری پیچشی عبارت است از:

$$N_{xj} = 0,$$

$$N_{x\theta j} = TR_j / 2\pi \sum_{m=1}^k R_m^3; \quad j = 1, \dots, k, \quad (20.5)$$

$$N_{\theta i} = R_i p_i^0(x),$$

که در آن، p_i^0 فشار معادل اندرکنش vdW وارد از سوی فولرین‌های محبوس بر نانوتیوب است، که چنانچه قبل اظهار گردید، فقط اثر اندرکنش فولرین‌های محبوس با داخلی‌ترین لایه‌ی نانوتیوب در نظر گرفته می‌شود و از اندرکنش با لایه‌های دورتر صرفنظر می‌شود، یعنی:

$$p_1^0(x) = p_{vdW-C60}(x), \quad p_i^0(x) = 0; \quad i = 2, 3, \dots, k. \quad (21.5)$$

با جایگذاری معادلات (۱۸.۵) و (۲۰.۵) در (۳.۵)، عملگر ψ_j برای هر لایه به این صورت بدست می‌آید:

$$\psi_j = 2 \frac{R_j}{R_1} N_{x\theta 1} \frac{1}{R_j} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} + R_j p_j^0(x) \frac{1}{R_j^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (22.5)$$

اکنون با جایگذاری عملگر ψ_j از معادله (۲۲.۵) در (۵.۵) به معادلات حاکم بر تعادل نانوپیپاد در اثر

اعمال نیروی محوری می‌رسیم:

$$\begin{aligned} D\nabla^8 \tilde{w}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4 \tilde{w}_1}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[2N_{xy1} \frac{1}{R_1} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} + R_1 p_{vdW-C60}(x) \frac{1}{R_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \tilde{w}_1 \\ - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 [c(\tilde{w}_2 - \tilde{w}_1)] = 0, \\ D\nabla^8 \tilde{w}_i + \frac{Eh}{R_i^2} \frac{\partial^4 \tilde{w}_i}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[2 \frac{R_i}{R_1} N_{xy1} \frac{1}{R_i} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} \right] \tilde{w}_i \\ - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [\tilde{w}_{i+1} - \tilde{w}_i - (R_{i-1}/R_i)(\tilde{w}_i - \tilde{w}_{i-1})] = 0; \quad i = 2, \dots, k-1, \end{aligned} \quad (23.5)$$

$$\begin{aligned} D\nabla^8 \tilde{w}_k + \frac{Eh}{R_k^2} \frac{\partial^4 \tilde{w}_k}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[2 \frac{R_k}{R_1} N_{xy1} \frac{1}{R_k} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} \right] \tilde{w}_k \\ - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [(R_{k-1}/R_k)(\tilde{w}_{k-1} - \tilde{w}_k)] = 0. \end{aligned}$$

یک سری از توابع آزمایشی اغتشاشی برای تغییرشکل شعاعی $(\tilde{w}_j(x, \theta))$ را می‌توان به صورت توابع هارمونیک سینوسی در نظر گرفت:

$$\tilde{w}_j = \tilde{W}_j \sin \left(\frac{m\pi x}{L} - n\theta \right), \quad (24.5)$$

که در آن، \tilde{W}_j دامنه‌ی تابع تغییر شکل شعاعی اغتشاش j -ام است، m و n دو عدد صحیح مثبت، بیانگر عدد موجی طولی و نیم‌موجی محیطی می‌باشند. برای ساده‌تر نوشتتن معادلات آتی α و β_j را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\alpha = \frac{m\pi}{L}, \quad \beta_j = \frac{n}{R_j}, \quad (25.5)$$

با جایگذاری توابع آزمایشی اغتشاشی $\tilde{w}_j(x, \theta)$ در معادله‌ی (23.5) به معادلات خطی

کوپل جبری می‌رسیم:

$$\tilde{A}_1 \sin(\alpha x - \beta_1 R_1 \theta) = 0,$$

$$\tilde{A}_i \sin(\alpha x - \beta_i R_i \theta) = 0; \quad i = 2, \dots, k-1, \quad (26.5)$$

$$\tilde{A}_k \sin(\alpha x - \beta_k R_k \theta) = 0,$$

که در آن،

$$\begin{aligned} \tilde{A}_1 &= D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 \tilde{W}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 \tilde{W}_1 + R_1 \beta_1^2 \left(\frac{d^4}{dx^4} - \eta^2 \frac{d^6}{dx^6} \right) p_{vdw-C60}(x) \tilde{W}_1 \\ &\quad - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 [2N_{xy1} \alpha \beta_1 - R_1 p_{vdw-C60}(x) \beta_1^2] \tilde{W}_1 \\ &\quad - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 [c(\tilde{W}_2 - \tilde{W}_1)] = 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{A}_i &= D(\alpha^2 + \beta_i^2)^4 \tilde{W}_i + \frac{Eh}{R_i^2} \alpha^4 \tilde{W}_i - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 \left[2 \frac{R_i}{R_1} N_{xy1} \alpha \beta_i \right] \tilde{W}_i \\ &\quad - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 c [\tilde{W}_{i+1} - \tilde{W}_i - (R_{i-1}/R_i)(\tilde{W}_i - \tilde{W}_{i-1})]; \quad (27.5) \\ &\quad i = 2, \dots, k-1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{A}_k &= D(\alpha^2 + \beta_k^2)^4 \tilde{W}_k + \frac{Eh}{R_k^2} \alpha^4 \tilde{W}_k \\ &\quad - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_k^2)] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 \left[2 \frac{R_k}{R_1} N_{xy1} \alpha \beta_k \right] \tilde{W}_k \\ &\quad - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_k^2)] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 c [(R_{k-1}/R_k)(\tilde{W}_{k-1} - \tilde{W}_k)]. \end{aligned}$$

برای اینکه معادله‌ی (26.5) برای تمام x و y ها صدق کند، باید ضرایب \tilde{A}_j محو شوند. یعنی داشته

باشیم:

$$\bar{A}_j(\alpha, \beta_j) = \int_0^L \tilde{A}_j(\alpha, \beta_j, x) dx = 0 \quad (28.5)$$

که در نتیجه:

$$\begin{aligned} & \left\{ D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 - 2[1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 \alpha \beta_1 N_{x\theta 1} \right. \\ & + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta^2)^2 \beta^2 \left(\frac{R_1}{L} \int_0^L p_{vdw-C60}(x) dx \right) \\ & + \beta_1^2 \frac{R_1}{L} \left(\frac{d^3 p_{vdw-C60}(x)}{dx^3} - \eta^2 \frac{d^5 p_{vdw-C60}(x)}{dx^5} \right) \Big|_0^L \left. \right\} \tilde{W}_1 \\ & - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 [c(\tilde{W}_2 - \tilde{W}_1)] = 0. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & D(\alpha^2 + \beta_i^2)^4 \tilde{W}_i + \frac{Eh}{R_i^2} \alpha^4 \tilde{W}_i - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 \left[2 \frac{R_i}{R_1} N_{x\theta 1} \alpha \beta_i \right] \tilde{W}_i \\ & - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 c [\tilde{W}_{i+1} - \tilde{W}_i - (R_{i-1}/R_i)(\tilde{W}_i - \tilde{W}_{i-1})] = 0; \\ & i = 2, \dots, k-1. \end{aligned} \quad (39.5)$$

$$\begin{aligned} & D(\alpha^2 + \beta_k^2)^4 \tilde{W}_k + \frac{Eh}{R_k^2} \alpha^4 \tilde{W}_k - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_k^2)] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 \left[2 \frac{R_k}{R_1} N_{x\theta 1} \alpha \beta_k \right] \tilde{W}_k \\ & - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_k^2)] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 c [(R_{k-1}/R_k)(\tilde{W}_{k-1} - \tilde{W}_k)] = 0. \end{aligned}$$

با مرتب کردن روابط معادله‌ی (48.5) به فرم ماتریسی داریم:

$$[\mathbf{A}]_{k \times k} \{W\}_{k \times 1} - N_x [\mathbf{B}]_{k \times k} \{W\}_{k \times 1} = \mathbf{0}, \quad \text{or} \quad [\mathbf{A} - N_{x\theta 1} \mathbf{B}] \{W\}_{k \times 1} = \mathbf{0}, \quad (30.5)$$

که در آن، $\{W\}_{k \times 1}$ برداری از مولفه‌های (j = 1, 2, ..., k) است. مولفه‌های غیر صفر ماتریس مربعی

: از \mathbf{A} عبارتند.

$$\begin{aligned} A_{11} &= D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + \frac{R_1}{L} \beta_1^2 \left(\frac{d^3 p_{vdw-C60}(x)}{dx^3} - \eta^2 \frac{d^5 p_{vdw-C60}(x)}{dx^5} \right) \Big|_0^L \\ & + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 \left[c + \frac{R_1}{L} \beta_1^2 \int_0^L p_{vdw-C60}(x) dx \right], \\ A_{(i)(i-1)} &= -c [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 (R_{i-1}/R_i); \quad i = 2, \dots, k-1, \end{aligned} \quad (31.5)$$

$$A_{(i)(i)} = D(\alpha^2 + \beta_i^2)^4 + \frac{Eh}{R_i^2} \alpha^4 + c [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 [1 + (R_{i-1}/R_i)],$$

$$A_{(i)(i+1)} = -c [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2; \quad i = 2, \dots, k-1,$$

$$A_{(k)(k)} = D(\alpha^2 + \beta_k^2)^4 + \frac{Eh}{R_k^2} \alpha^4 + c \left[1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_k^2) \right] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 (R_{k-1}/R_k).$$

همچنین مولفه‌های ماتریس قطری \mathbf{B} عبارت است از:

$$B_{(j)(j)} = 2 \frac{R_j}{R_1} \left[1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_j^2) \right] (\alpha^2 + \beta_j^2)^2 \alpha \beta_j, \quad (32.5)$$

اکنون، به دنبال جواب‌های غیربیدیهی برای $\{W\}$ در معادله‌ی (۳۰.۵) هستیم، برای وجود چنین جوابی

باید دترمینان $[\mathbf{A} - N_{x\theta_1} \mathbf{B}]$ برابر صفر شود، یعنی

$$\det[\mathbf{A} - N_{x\theta_1} \mathbf{B}] = 0. \quad (33.5)$$

با استفاده از معادله‌ی (۳۳.۵) می‌توان، تورک پیچشی بحرانی نانوپیپاد را به صورت عددی تعیین نمود. در

واقع، به دنبال مقادیر ویژه‌ی $N_{x\theta_1}$ هستیم. برای مقادیر مشخص m و n ، k عدد جواب مختلف برای

وجود دارد. مقدار کمینه‌ی این جواب‌ها را با $N_{x\theta_1}|_{m,n}$ نشان می‌دهیم. تورک پیچشی مربوط به مود

کمانشی (m, n) از اختشاش، یعنی $T_{m,n}$ ، به کمک معادله‌ی (۱۹.۵) به دست می‌آید:

$$T_{m,n} = \frac{2\pi (N_{x\theta_1})_{m,n} \left(\sum_{j=1}^k R_j^3 \right)}{R_1} \quad (34.5)$$

تورک پیچشی بحرانی T_{cr} نانوپیپاد در واقع مقدار کمینه‌ی $T_{m,n}$ به ازای (m, n) های مختلف است.

برای حالت خاص نانوپیپاد تک‌لایه به راحتی از معادلات (۲۹.۵)-(۳۴.۵) به دست می‌آید:

$$T_{m,n} = \pi R_1^2 \frac{1}{\alpha \beta_1 (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 \left[1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_1^2) \right]} \times \\ \left(D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + \frac{R_1}{L} \beta_1^2 \left(\frac{d^3 p_{vdw-C60}(x)}{dx^3} - \eta^2 \frac{d^5 p_{vdw-C60}(x)}{dx^5} \right) \right)_0^L \\ + \left[1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_1^2) \right] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 \left[\frac{R_1}{L} \beta_1^2 \int_0^L p_{vdw-C60}(x) dx \right]. \quad (35.5)$$

۳-۲-۳: ناپایداری نانوپیپاد تحت نیروی محوری

در صورتی که نیروی محوری فشاری P به نانوپیپاد وارد شود، این بار بین تمام لایه‌ها تقسیم می‌شود، به طوری که داریم:

$$P = \sum_{j=1}^k P_j, \quad (36.5)$$

که در آن $P_j = -2\pi R_j N_{xj}$ اندازه‌ی نیروی محوری وارد بر لایه‌ی j -ام است. با فرض یکسان بودن نیروی واحد طول معادل N_{xj} در این شرایط بارگذاری، داریم:

$$N_{x1} = N_{x2} = \dots = N_{xj} = \frac{-P_j}{2\pi R_j} = \dots = N_{xk} := -N_x \quad (37.5)$$

که در آن N_x اندازه‌ی نیروی واحد طول معادل تنش‌های محوری نانوپیپاد بدین ترتیب تعیین می‌شود:

$$N_x = P / 2\pi \sum_{j=1}^k R_j. \quad (38.5)$$

در حالتی که فقط بارگذاری محوری اعمال شود، نیروی معادل تنش‌های برشی، N_{xyj} وجود ندارند. همچنین فقط در لایه‌ی اول به خاطر فشار وان در والس فولرین‌های محبوس، تنش محیطی در نانوتیوب وجود دارد. بنابراین، نیروهای واحد طول معادل در اثر بارگذاری نیروی محوری عبارت است از:

$$N_{xj} = -N_x = -P / 2\pi \sum_{j=1}^k R_j, \quad (39.5)$$

$$N_{x\theta j} = 0; \quad j = 1, \dots, k,$$

که در آن، p_i^0 فشار معادل اندرکنش vdW وارد از سوی فولرین‌های محبوس بر نانوتیوب است، که چنانچه قبل اظهار گردید، فقط اثر اندرکنش فولرین‌های محبوس با داخلی‌ترین لایه‌ی نانوتیوب در نظر گرفته می‌شود و از اندرکنش با لایه‌های دورتر صرفنظر می‌شود، یعنی:

$$p_1^0(x) = p_{vdW-C60}(x), \quad p_i^0(x) = 0; \quad i = 2, 3, \dots, k. \quad (40.5)$$

با جایگذاری معادله‌ی (۴۰.۵) در (۳۹.۵)، عملگر \mathcal{L} برای هر لایه به این صورت بدست می‌آید:

$$\psi_i = -N_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + R_i p_i^0(x) \left(\frac{1}{R_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right). \quad (41.5)$$

اکنون با جایگذاری عملگر ψ_i از معادله‌ی (41.5) در (5.5) به معادلات حاکم بر تعادل نانوپیپاد در اثر

اعمال نیروی محوری می‌رسیم:

$$D\nabla^8 \tilde{w}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4 \tilde{w}_1}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[-N_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + R_1 p_{vdW-C60}(x) \frac{1}{R_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \tilde{w}_1 - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 [c(\tilde{w}_2 - \tilde{w}_1)] = 0,$$

$$D\nabla^8 \tilde{w}_i + \frac{Eh}{R_i^2} \frac{\partial^4 \tilde{w}_i}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[-N_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \tilde{w}_i - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [\tilde{w}_{i+1} - \tilde{w}_i - (R_{i-1}/R_i)(\tilde{w}_i - \tilde{w}_{i-1})] = 0; \quad i = 2, \dots, k-1, \quad (42.5)$$

$$D\nabla^8 \tilde{w}_k + \frac{Eh}{R_k^2} \frac{\partial^4 \tilde{w}_k}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[-N_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \tilde{w}_k - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [(R_{k-1}/R_k)(\tilde{w}_{k-1} - \tilde{w}_k)] = 0.$$

یک سری از توابع آزمایشی اغتشاشی برای تغییرشکل شعاعی (x, y, \tilde{w}_j) را می‌توان به صورت توابع هارمونیک سینوسی در نظر گرفت:

$$\tilde{w}_j = \tilde{W}_j \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin(n\theta); \quad j = 1, 2, \dots, k, \quad (43.5)$$

که در آن، \tilde{W}_j دامنه‌ی تابع تغییر شکل شعاعی اغتشاش j -ام است، m و n دو عدد صحیح مثبت، بیانگر عدد موجی طولی و نیم-موجی محیطی می‌باشند. برای ساده‌تر نوشتتن معادلات آتی α و β_j را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\alpha = \frac{m\pi}{L}, \quad \beta_j = \frac{n}{R_j}, \quad (44.5)$$

با جایگذاری توابع آزمایشی اغتشاشی (x, y, \tilde{w}_j) معادله‌ی (42.5) در معادله‌ی (43.5) به معادلات خطی کوپل جبری می‌رسیم:

$$\tilde{A}_l \sin(\alpha x) \sin(\beta_l R_l \theta) = 0, \quad (45.5)$$

$$\tilde{A}_i \sin(\alpha x) \sin(\beta_i R_i \theta) = 0; \quad i = 2, \dots, k-1,$$

$$\tilde{A}_k \sin(\alpha x) \sin(\beta_k R_k \theta) = 0,$$

که در آن،

$$\begin{aligned} \tilde{A}_1 &= D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 \tilde{W}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 \tilde{W}_1 + R_1 \beta_1^2 \left(\frac{d^4}{dx^4} - \eta^2 \frac{d^6}{dx^6} \right) p_{vdw-C60}(x) \tilde{W}_1 \\ &\quad - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 [N_x \alpha^2 - R_1 p_{vdw-C60}(x) \beta_1^2] \tilde{W}_1 \\ &\quad - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 [c(\tilde{W}_2 - \tilde{W}_1)] = 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{A}_i &= D(\alpha^2 + \beta_i^2)^4 \tilde{W}_i + \frac{Eh}{R_i^2} \alpha^4 \tilde{W}_i - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 [N_x \alpha^2] \tilde{W}_i \\ &\quad - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 c [\tilde{W}_{i+1} - \tilde{W}_i - (R_{i-1}/R_i)(\tilde{W}_i - \tilde{W}_{i-1})]; \quad (46.5) \\ i &= 2, \dots, k-1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{A}_k &= D(\alpha^2 + \beta_k^2)^4 \tilde{W}_k + \frac{Eh}{R_k^2} \alpha^4 \tilde{W}_k \\ &\quad - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_k^2)] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 [N_x \alpha^2] \tilde{W}_k \\ &\quad - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_k^2)] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 c [(R_{k-1}/R_k)(\tilde{W}_{k-1} - \tilde{W}_k)]. \end{aligned}$$

برای اینکه معادله‌ی (45.5) برای تمام x و θ ها صدق کند، باید ضرایب \tilde{A}_j محو شوند. یعنی:

$$\bar{A}_j(\alpha, \beta_j) = \int_0^L \tilde{A}_j(\alpha, \beta_j, x) dx = 0 \quad (47.5)$$

که در نتیجه:

$$\begin{aligned} &\left\{ D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 \alpha^2 N_x \right. \\ &\quad + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 \beta^2 \left(\frac{R_1}{L} \int_0^L p_{vdw-C60}(x) dx \right) \\ &\quad + \beta_1^2 \frac{R_1}{L} \left(\frac{d^3 p_{vdw-C60}(x)}{dx^3} - \eta^2 \frac{d^5 p_{vdw-C60}(x)}{dx^5} \right) \Big|_0^L \Big\} \tilde{W}_1 \\ &\quad - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 [c(\tilde{W}_2 - \tilde{W}_1)] = 0. \quad (48.5) \end{aligned}$$

$$D(\alpha^2 + \beta_i^2)^4 \tilde{W}_i + \frac{Eh}{R_i^2} \alpha^4 \tilde{W}_i - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 \alpha^2 N_x \tilde{W}_i \\ - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 c [\tilde{W}_{i+1} - \tilde{W}_i - (R_{i-1}/R_i)(\tilde{W}_i - \tilde{W}_{i-1})] = 0; \\ i = 2, \dots, k-1.$$

$$D(\alpha^2 + \beta_k^2)^4 \tilde{W}_k + \frac{Eh}{R_k^2} \alpha^4 \tilde{W}_k - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_k^2)] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 \alpha^2 N_x \tilde{W}_k \\ - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_k^2)] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 c [(R_{k-1}/R_k)(\tilde{W}_{k-1} - \tilde{W}_k)] = 0.$$

با مرتب کردن روابط معادله‌ی (۴۸.۵) به فرم ماتریسی داریم:

$$[\mathbf{A}]_{k \times k} \{W\}_{k \times 1} - N_x [\mathbf{B}]_{k \times k} \{W\}_{k \times 1} = \mathbf{0}, \quad \text{or} \quad [\mathbf{A} - N_x \mathbf{B}] \{W\}_{k \times 1} = \mathbf{0}, \quad (49.5)$$

که در آن، $\{W\}_{k \times 1}$ برداری از مولفه‌های غیر صفر ماتریس مربعی

عبارتند از:

$$A_{11} = D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + \frac{R_1}{L} \beta_1^2 \left(\frac{d^3 p_{vdw-C60}(x)}{dx^3} - \eta^2 \frac{d^5 p_{vdw-C60}(x)}{dx^5} \right) \Big|_0^L \\ + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 \left[c + \frac{R_1}{L} \beta_1^2 \int_0^L p_{vdw-C60}(x) dx \right],$$

$$A_{(i)(i-1)} = -c [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 (R_{i-1}/R_i); \quad i = 2, \dots, k-1, \quad (50.5)$$

$$A_{(i)(i)} = D(\alpha^2 + \beta_i^2)^4 + \frac{Eh}{R_i^2} \alpha^4 + c [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 [1 + (R_{i-1}/R_i)],$$

$$A_{(i)(i+1)} = -c [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2; \quad i = 2, \dots, k-1,$$

$$A_{(k)(k)} = D(\alpha^2 + \beta_k^2)^4 + \frac{Eh}{R_k^2} \alpha^4 + c [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_k^2)] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 (R_{k-1}/R_k).$$

همچنین مولفه‌های ماتریس قطری \mathbf{B} عبارت است از:

$$B_{(j)(j)} = [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_j^2)] (\alpha^2 + \beta_j^2)^2 \alpha^2; \quad j = 1, \dots, k. \quad (51.5)$$

اکنون، به دنبال جواب‌های غیربدهی برای $\{W\}$ در معادله‌ی (۴۹.۵) هستیم، برای وجود چنین جوابی

باید دترمینان $[\mathbf{A} - N_x \mathbf{B}]$ برابر صفر شود، یعنی

$$\det[\mathbf{A} - N_x \mathbf{B}] = 0. \quad (52.5)$$

با استفاده از معادله‌ی (۵۲.۵) می‌توان، نیروی محوری بحرانی نانوپیپاد را به صورت عددی تعیین نمود. در واقع، به دنبال مقادیر ویژه‌ی N_x هستیم. برای مقادیر مشخص m و n ، k جواب مختلف برای N_x وجود دارد. مقدار کمینه‌ی این جواب‌ها را با $N_x|_{m,n}$ نشان می‌دهیم. نیروی محوری مربوط به مود کمانشی (m,n) از اختشاش، به کمک معادله‌ی (۳۸.۵) به دست می‌آید:

$$P_{m,n} = 2\pi \left(\sum_{j=1}^k R_j \right) N_x|_{m,n}. \quad (53.5)$$

نیروی محوری بحرانی P_{cr} نانوپیپاد در واقع مقدار کمینه‌ی $P_{m,n}$ به ازای (m,n) های مختلف است.

برای حالت خاص نانوپیپاد تک‌لایه به راحتی از معادلات (۵۰.۵)-(۵۳.۵) به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} P_{m,n} &= 2\pi R_i \frac{1}{\alpha^2(\alpha^2 + \beta_1^2)^2 [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)]} \times \\ &\left(D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_i^2} \alpha^4 + \frac{R_i}{L} \beta_1^2 \left(\frac{d^3 p_{vdw-C60}(x)}{dx^3} - \eta^2 \frac{d^5 p_{vdw-C60}(z)}{dx^5} \right) \right)_0^L \\ &+ [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 \left[\frac{R_i}{L} \beta_1^2 \int_0^L p_{vdw-C60}(x) dx \right]. \end{aligned} \quad (54.5)$$

۳-۵: نتایج عددی و بحث

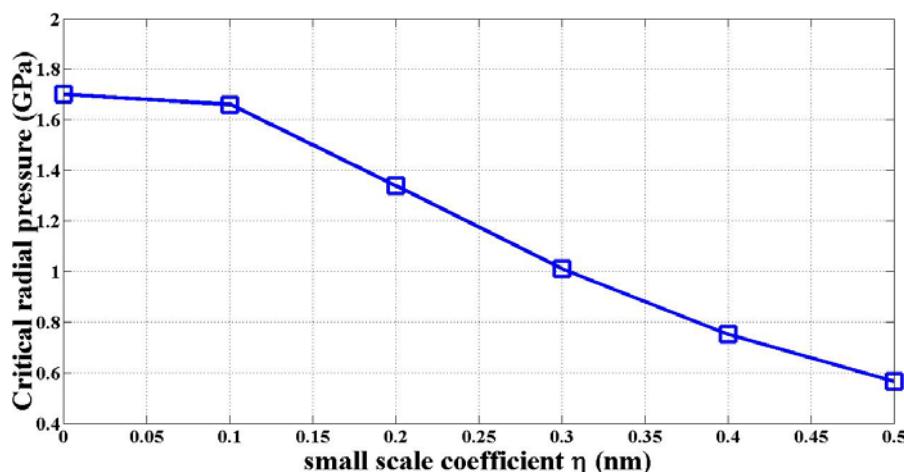
در این بخش، مثال‌هایی ارائه شده است که ناپایداری نانوپیپاد خاص $C_{60}@(10,10)$ را تحت بارگذاری‌های گوناگون (محوری، پیچشی و فشاری) بر اساس روابط به دست آمده‌ی (۳۵.۵)، (۵۴.۵) و (۱۵.۵) به صورت عددی بررسی می‌شود. تحلیل ناپایداری $C_{60}@(10,10)$ به عنوان یک نانوپیپاد تک‌لایه‌ی خاص در مقالات، با استفاده از آنالیز MD مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است. در این پژوهه نتایج به دست آمده برای بارهای بحرانی نانوپیپاد و همچنین تاثیر حضور فولرین‌های C_{60} بر مقادیر بارهای کمانشی و مقاومت نانوتیوب (۱۰.۱۰) بر اساس تئوری پوسته‌ی غیرموضعی به دست آمده و با نتایج گزارش شده‌ی MD موجود در مقالات مقایسه می‌شود.

مقادیر پارامترهایی که در تحلیل‌های عددی استفاده شده عبارت است از: $D = 0.85 \text{ eV}$ ، $Eh = 360 \text{ J m}^{-2}$ ، $R = 0.678 \text{ nm}$ و $h = 0.34 \text{ nm}$. در اینجا، برای تعیین ضرایب توزیع

فشار معادل اندرکنش فولرین‌های C_{60} بر روی نانوتیوب $(10,10)$ ، $p_{vdw-C_{60}}(x)$ در معادله‌ی (18.3) از داده‌های موجود در مقاله‌ی [۳۲] استفاده شده است.

۱-۳-۵ کمانش نانوپیپاد $C_{60}@{(10,10)}$ تحت فشار خارجی

در این بخش به تحلیل عددی ناپایداری نانوپیپاد $C_{60}@{(10,10)}$ تحت فشار شعاعی خارجی خواهیم پرداخت. ابتدا کمانش یک نانوتیوب خالی $(10,10)$ به طول $L = 14R = 9.5\text{ nm}$ را بررسی می‌کنیم، تا پس از بررسی ناپایداری نانوپیپاد $C_{60}@{(10,10)}$ ، تاثیر حضور فولرین‌های C_{60} در ناپایداری نانوتیوب $(10,10)$ تحت فشار خارجی به صورت کمی مشخص شود. با استفاده از معادله‌ی (15.5) فشار بحرانی نانوتیوب $(10,10)$ با جایگذاری $p_{vdw-C_{60}}(x) = 0$ در معادله‌ی (15.5) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η به دست می‌آید. در شکل ۲-۵ فشار بحرانی نانوتیوب $(10,10)$ به طول $L = 9.5\text{ nm}$ در یک بازه‌ی متداول پارامتر ابعاد کوچک η [۷۰، ۶۷] (برای نانوتیوب $<1\text{ nm}$) ارائه شده است.

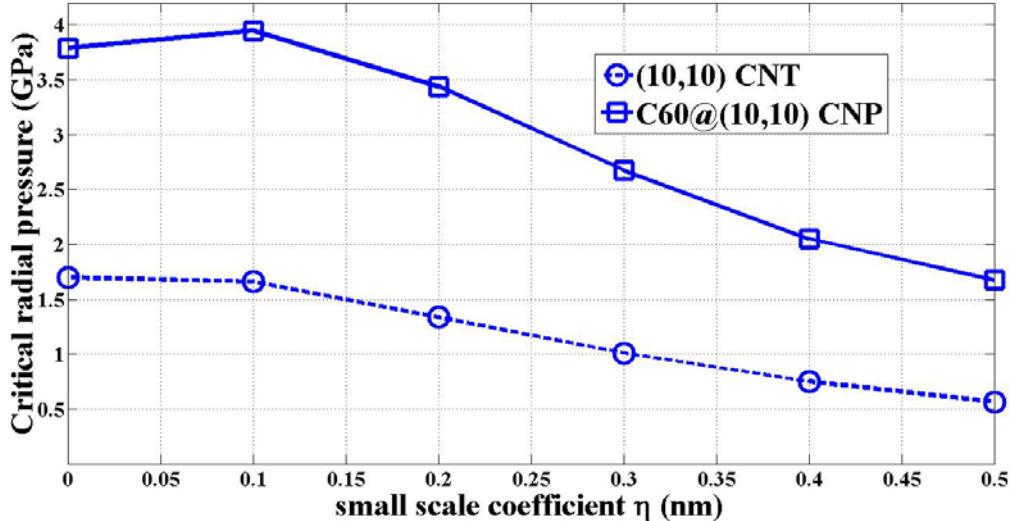


شکل ۲-۵: فشار شعاعی بحرانی نانوتیوب $(10,10)$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

از شکل ۲-۵، مشاهده می‌شود که مقادیر به دست آمده برای فشار بحرانی بر اساس مدل پوسته‌ی غیرموضعی کمتر از نتایج مدل پوسته‌ی کلاسیک ($\eta = 0$) می‌باشد. این مشاهده، اختلاف پیش‌بینی فشار بحرانی نانوتیوب $(10,10)$ توسط مدل پوسته‌ی کلاسیک 1.7 GPa و نتیجه‌ی شبیه‌سازی دینامیک

مولکولی MD (1.55GPa) را کاهش می‌دهد. با توجه به شکل ۵-۵، می‌بینیم که فشار بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 9.5\text{ nm}$ و به ازای پارامتر ابعاد کوچک η در حدود 0.15 nm به مقدار حاصل از شبیه‌سازی MD بسیار نزدیک می‌باشد و اختلاف پیشتر ذکر شده بین نتایج مدل پوسته‌ی کلاسیک و MD، دیگر مشاهده نمی‌شود. همچنین، اولین کمانش در مود $(m, n) = (1, 1)$ مشاهده می‌شود که به معنی تغییر شکل مقطع دایره‌ای به بیضی در زمان کمانش است، از این نظر نیز، تطابق مدل پوسته‌ی غیرموضعی با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی وجود دارد [۱۱۰].

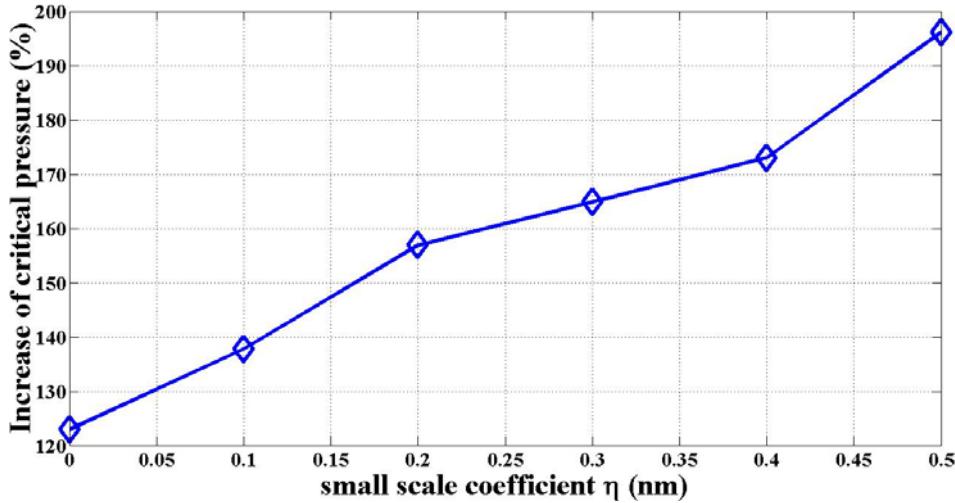
در مرحله‌ی بعد، تاثیر حضور مولکول‌های فولرین محبوس شده C_{60} با چگالی شبکه‌ی بالا ($D_f = 1\text{ nm}$) بر ناپایداری نانوتیوب (10,10) به طول $L = 9.5\text{ nm}$ تحت فشار خارجی، مورد بررسی قرار می‌گیرد. در شکل ۳-۵، نتایج حاصل برای مقادیر فشار شعاعی بحرانی نانوپیپاد $C_{60}@{(10,10)}$ در کنار نتایج مربوط به نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۳-۵: فشار شعاعی بحرانی نانوپیپاد $C_{60}@{(10,10)}$ و نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

مطابق شکل ۳-۵، مشاهده می‌شود حضور فولرین‌های C_{60} درون نانوتیوب (10,10) باعث افزایش فشار شعاعی بحرانی می‌شود. یعنی، نانوتیوب (10,10) که در آن فولرین‌های C_{60} محبوس شده‌اند، در مقابل ناپایداری شعاعی تحت فشار خارجی نسبت به نانوتیوب خالی با همان طول بسیار مقاوم‌تر است. فشار بحرانی نانوپیپاد $C_{60}@{(10,10)}$ به طول $L = 9.5\text{ nm}$ و به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.15\text{ nm}$ ، در

حدود 3.6 GPa پیش‌بینی می‌کنیم. در شکل ۴-۵، درصد افزایش فشار بحرانی نانوتیوب ($10,10$) در اثر محبوس شدن فولرین‌های C_{60} درون نانوتیوب با طول‌های $L = 9.5 \text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۴-۵: درصد افزایش فشار شعاعی بحرانی نانوتیوب ($10,10$) در اثر محبوس شدن فولرین‌های C_{60} درون نانوتیوب به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

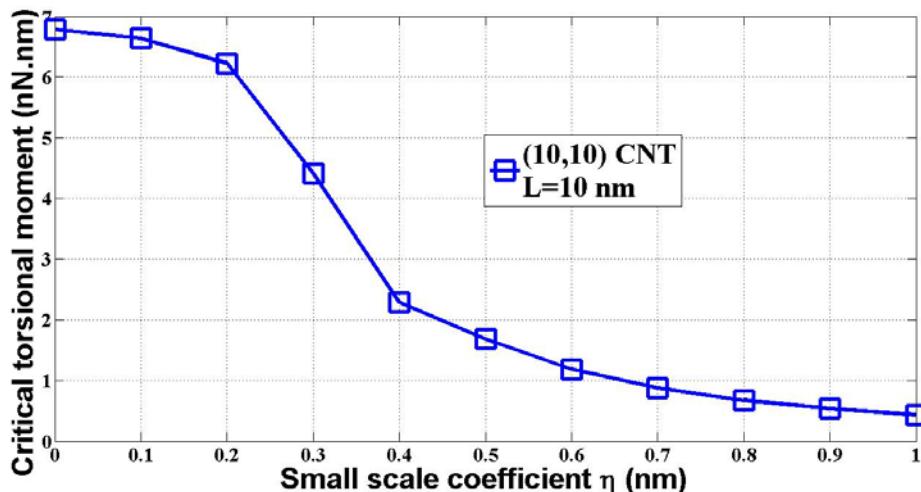
افزایش مقاومت مکانیکی نانوتیوب ($10,10$) در اثر حضور فولرین‌های C_{60} درون نانوتیوب در مقابل ناپایداری پیچشی، خمشی و محوری در مقالات توسط شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پیش‌بینی شده است [۳۱-۲۷]. در شکل ۴-۵، مشاهده می‌شود، در اثر حضور فولرین‌های C_{60} فشار بحرانی نانوپیپاد ($10,10$) به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.15 \text{ nm}$ ، در حدود 150% بیشتر از نانوتیوب ($10,10$) خالی به همان طول می‌باشد. با این حساب، پیش‌بینی افزایش مقاومت در مقابل ناپایداری تحت فشار شعاعی خارجی دور از انتظار نبوده و تطابق نتایج کیفی این بررسی را با نتایج مقالات MD به خوبی نشان می‌دهد.

۴-۳-۵: کمانش نانوپیپاد ($10,10$) تحت تورک پیچشی

در این بخش کمانش نانوپیپاد ($10,10$) تحت تورک پیچشی را به روش عددی بررسی خواهیم کرد. کمانش پیچشی نانوپیپاد ($10,10$) قبلاً توسط [۳۱] به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در

دبیره مطالعه شده است. در مقاله‌ی [۳۱]، تورک پیچشی بحرانی نانوتیوب خالی (10,10) و نانوپیپاد با چگالی پرشدگی بالای نانوتیوب (یعنی $D_f = 1\text{ nm}$) برای طول $L = 10\text{ nm}$ گزارش شده است. ابتدا کمانش پیچشی یک نانوتیوب خالی (10,10) به طول $L = 10\text{ nm}$ را بررسی می‌کنیم [۳۱]. با استفاده از معادله‌ی (۳۵.۵) تورک بحرانی نانوتیوب (10,10) با جایگذاری $p_{vdw-C60}(x) = 0$ در معادله‌ی (۳۵.۵) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η به دست می‌آید. در شکل ۵-۵، تورک پیچشی بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 10\text{ nm}$ برای یک بازه‌ی محدود پارامتر ابعاد کوچک η (برای نانوتیوب

[۷۰، ۶۷] $\eta < 1\text{ nm}$ رسم شده است.



شکل ۵-۵: تورک پیچشی بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 10\text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

با مقایسه‌ی مقادیر به دست آمده‌ی تورک بحرانی مربوط به اولین مود کمانشی نانوتیوب (10,10) در شکل ۵-۵ با مقادیر منتج از شبیه‌سازی MD در مقاله‌ی [۳۱]، می‌توان متوجه شد، که مقدار تورک بحرانی نانوتیوب (10,10) به ازای تمام مقادیر پارامتر ابعاد کوچک η ، از مقادیر گزارش شده در [۳۱] کمتر می‌باشد. در آن مقاله مقدار تورک بحرانی مربوط به اولین کمانش نانوتیوب (10,10) به روش MD تقریباً برابر 12 nN.nm گزارش شده است. در آنالیزهای MD، انتخاب نوع توابع پتانسیل، روش الگوریتم استفاده شده برای کدنویسی و تعداد گام‌های شبیه‌سازی MD به شدت روی مقادیر کمی نتایج آنالیز

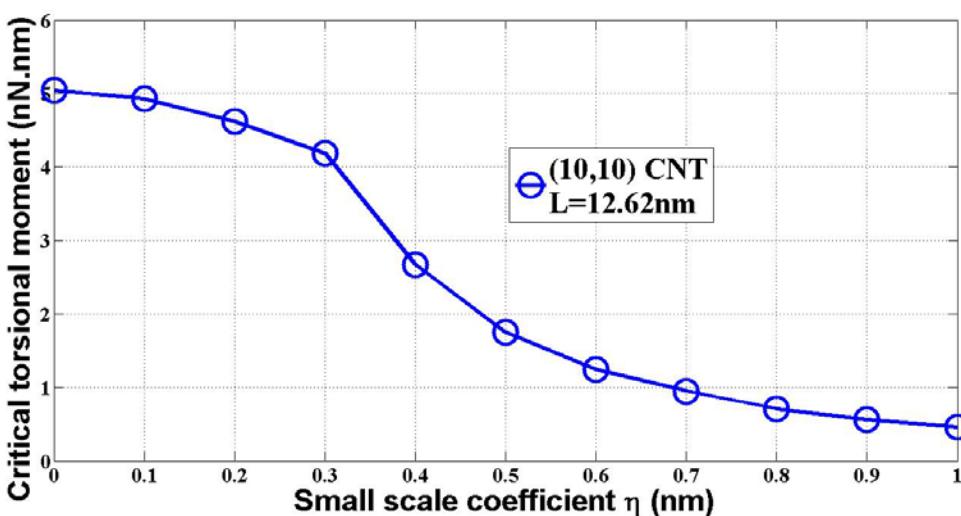
تاثیر می‌گذارد. به خاطر این نکته در ارزیابی و تطابق نتایج دو مدل در مقالات نانو، معمولاً به حفظ

محدوده^{۵۰} و مرتبه‌ی نتایج بسنده می‌شود.

در تایید بحث جاری، مقاله‌ی دیگری که کمانش پیچشی نانوتیوب به قطر هماندازه با (10,10) و طول

$L = 12.62\text{ nm}$ به روش MD مطالعه کرده است، را بررسی می‌کنیم. در شکل ۶-۵ تورک پیچشی

بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 12.62\text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۶-۵: تورک پیچشی بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 12.62\text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

در شکل ۶-۵، مشاهده می‌کنیم تورک بحرانی نانوتیوب به طول $L = 12.62\text{ nm}$ با استفاده از مدل

پوسته‌ی غیرموضعی به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.7\text{ nm}$ به نتیجه‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

۱ nN.nm بسیار نزدیک می‌باشد [۱۱۱]. توجه شود که مقدار گزارش شده برای تنش برشی τ_{xy} توسط

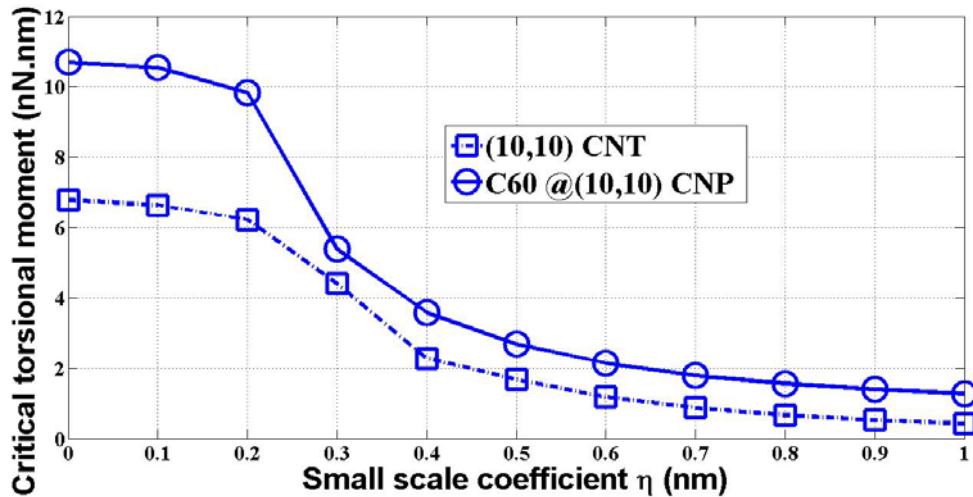
شبیه‌سازی MD برابر ۱ GPa است [۱۱۱] که منتج به مقدار ۱ nN.nm برای تورک بحرانی

$$T_{cr} = 2\pi R^2 h \tau_{xy} \text{ می‌شود.}$$

با توجه به شکل‌های ۵-۵ و ۶-۵، مشخص می‌شود که مقادیر مدل پوسته‌ی غیرموضعی به ازای پارامتر

ابعاد کوچک $\eta = 0.7\text{ nm}$ بین دو مقدار MD گزارش شده [۱۱۱، ۳۱] قرار می‌گیرد.

در مرحله‌ی بعد، تاثیر حضور مولکول‌های فولرین C_{60} محبوس درون نانوتیوب (10,10) با چگالی پرشدگی شبکه‌ی بالا ($D_r = 1\text{ nm}$) بر ناپایداری پیچشی نانوتیوب (10,10)، مورد بررسی قرار می‌گیرد. در شکل ۷-۵، نتایج حاصل برای مقادیر تورک بحرانی نانوپیپاد (10,10)@ C_{60} در کنار نتایج مربوط به نانوتیوب (10,10) به طول $L = 10\text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.

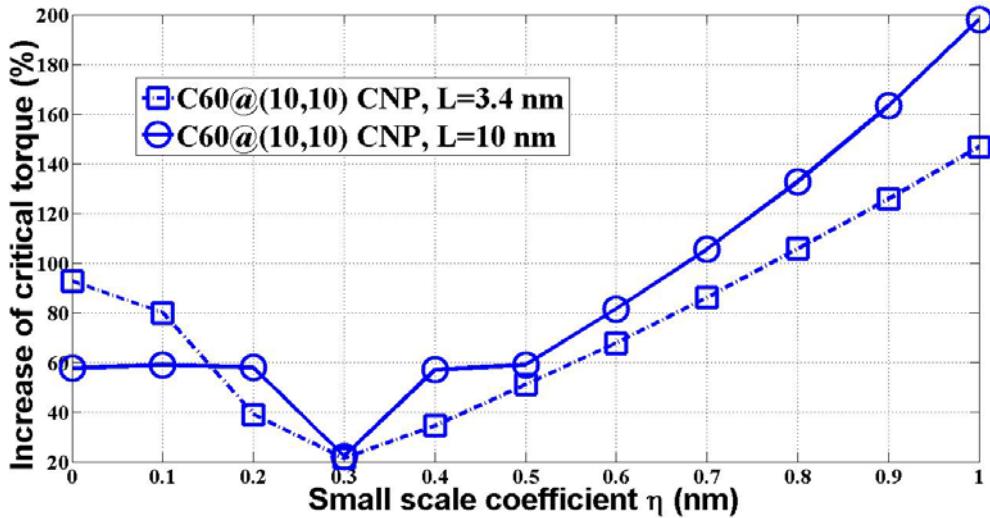


شکل ۷-۵: تورک بحرانی نانوپیپاد (10,10)@ C_{60} و نانوتیوب (10,10) به طول $L = 10\text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

از نتایج شکل ۷-۵، مشاهده می‌شود که مدل پوسته‌ی غیرموضعی پیش‌بینی می‌کند حضور فولرین‌های C_{60} درون نانوتیوب (10,10) باعث افزایش تورک پیچشی بحرانی می‌شود. یعنی، نانوپیپاد (10,10)@ C_{60} در مقابل ناپایداری پیچشی نسبت به نانوتیوب (10,10) خالی با همان طول بسیار مقاوم‌تر است. مقدار تورک پیچشی بحرانی نانوپیپاد (10,10)@ C_{60} ، منتج از مدل پوسته‌ی غیرموضعی در شکل ۷-۵ به ازای تمام مقادیر پارامتر ابعاد کوچک η از مقدار تورک بحرانی گزارش شده‌ی MD، یعنی $27\text{nN}\cdot\text{nm}$ کمتر است. اما مشاهده می‌شود هر دو مدل کانتینیومی پوسته‌ی غیرموضعی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، افزایش مقاومت نانوتیوب (10,10) در اثر حضور فولرین‌های C_{60} درون نانوتیوب در مقابل ناپایداری تحت تورک پیچشی را پیش‌بینی می‌کنند [۳۰، ۳۱]. در مقاله‌ی [۳۰، ۳۱]، افزایش زاویه‌ی پیچشی کمانشی

نانوتیوب (10,10) در اثر حضور فولرین‌های C_{60} درون نانوتیوب برای طول $L = 3.4\text{ nm}$ گزارش شده است.

در شکل ۸-۵، درصد افزایش تورک پیچشی بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن فولرین‌های C_{60} درون نانوتیوب با طول‌های $L = 3.4\text{ nm}$ و $L = 10\text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۸-۵: درصد افزایش تورک پیچشی بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن فولرین‌های C_{60} درون نانوتیوب به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

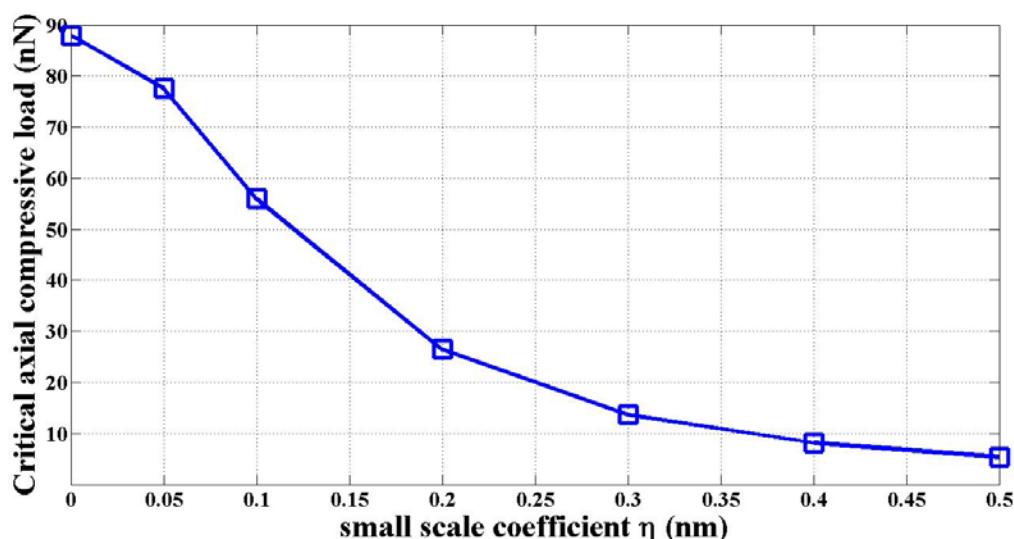
بر اساس نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در مقاله‌ی [۳۱]، میزان ۱۱۱.۲٪ افزایش در تورک بحرانی نانوتیوب (10,10) با طول $L = 10\text{ nm}$ در اثر محبوس شدن فولرین‌های C_{60} با شبکه‌ی چگالی بالا (درون نانوتیوب گزارش شده است. همچنین، در مقاله‌ی [۳۰]، میزان ۱۴۰٪ افزایش در زاویه‌ی پیچشی بحرانی نانوتیوب (10,10) پرشده از فولرین‌های C_{60} نسبت به نانوتیوب خالی با طول $D_f = 1\text{ nm}$) بر اساس نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در مقاله‌ی [۳۱]، میزان ۱۱۱.۲٪ افزایش در تورک بحرانی نانوتیوب (10,10) با طول $L = 3.4\text{ nm}$ گزارش شده است. با توجه به شکل ۸-۵، مشاهده می‌شود، میزان درصد افزایش تورک بحرانی بر اساس مدل پوسته‌ی غیرموضعی، برای طول $L = 10\text{ nm}$ در پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.7\text{ nm}$ مطابق با مقدار گزارشی مقاله‌ی [۳۱] برای افزایش تورک پیچشی بحرانی به روش MD است. همچنین، میزان درصد افزایش تورک بحرانی برای طول $L = 3.4\text{ nm}$ در پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.9\text{ nm}$ مطابق

با مقدار گزارشی مقاله‌ی [۳۰] برای افزایش زاویه‌ی پیچشی بحرانی (با فرض خطی بودن نمودار تورک-زاویه‌ی پیچشی تا مرز کمانش) است.

نتایج به دست آمده نشان دهنده‌ی تطابق مدل پوسته‌ی غیرموضعی با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در پیش‌بینی افزایش مقاومت کمانشی (۱۰,۱۰) در اثر حضور فولرین‌های C_{60} محبوس درون نانوتیوب می‌باشد [۳۱، ۳۰].

۳-۳-۵: کمانش نانوپیپاد $C_{60}@(10,10)$ تحت نیروی محوری

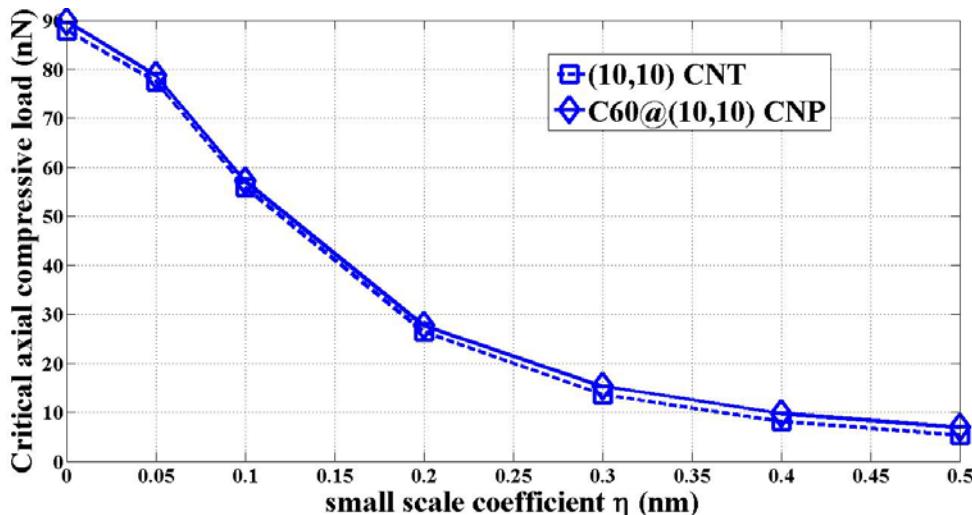
در این بخش ناپایداری نانوپیپاد $C_{60}@(10,10)$ تحت نیروی محوری بررسی می‌شود. ابتدا کمانش محوری یک نانوتیوب خالی (۱۰,۱۰) به طول $L = 10\text{ nm}$ را در نظر گرفته می‌شود [۲۹]. با استفاده از معادله‌ی (۵۴.۵) می‌توان نیروی محوری نانوتیوب (۱۰,۱۰) را با جایگذاری $p_{vdw-C_{60}}(x) = 0$ در معادله‌ی (۵۴.۵) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η را به دست آورد. در شکل ۹-۵ نیروی بحرانی نانوتیوب (۱۰,۱۰) به طول $L = 10\text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η برای یک بازه‌ی متداول [۶۷، ۷۰] (برای نانوتیوب به طول $L = 10\text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η برای یک بازه‌ی متداول [۶۷، ۷۰]) رسم شده است.



شکل ۹-۵ نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (۱۰,۱۰) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

از شکل ۹-۵، مشخص است که، مقادیر نیروی محوری بحرانی نانوتیوب به طول $L = 10\text{ nm}$ بر اساس مدل پوسته‌ی غیرموضعی کمتر از نتایج مدل پوسته‌ی کلاسیک ($\eta = 0$) می‌باشد. این پیش‌بینی کاهش نیروی محوری بحرانی، اختلاف موجود بین نیروی محوری حاصل مدل پوسته‌ی کلاسیک (88nN) و نتیجه‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی MD (75nN) [۲۹] را از بین می‌برد. از شکل ۹-۵ مشاهده می‌شود که نیروی محوری بحرانی به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.05\text{ nm}$ به مقدار تخمینی MD نزدیک است و اختلاف مذکور بین نتایج دیگر مشاهده نمی‌شود.

حال، تاثیر پرشدن نانوتیوب (10,10) به طول $L = 10\text{ nm}$ با مولکول‌های فولرین C_{60} با چگالی شبکه‌ی بالا ($D_f = 1\text{ nm}$), بر ناپایداری محوری نانوتیوب (10,10)، مورد بررسی قرار می‌گیرد. در شکل ۱۰-۵ نتایج حاصل برای نیروی محوری بحرانی نانوپیپاد $C_{60}@(10,10)$ در کنار نتایج مربوط به نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۱۰-۵: نیروی محوری بحرانی نانوپیپاد $C_{60}@(10,10)$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

همان‌طور که از شکل ۱۰-۵، مشخص است، حضور فولرین‌های محبوس درون نانوتیوب (10,10) باعث افزایش نیروی محوری بحرانی نانوتیوب می‌شود. نتیجه‌ی آنالیز MD برای نیروی بحرانی نانوپیپاد $C_{60}@(10,10)$ به طول $L = 10\text{ nm}$ ، مقدار 82nN گزارش شده است [۲۹] که معادل ۹% افزایش در نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن فولرین‌های C_{60} درون نانوتیوب (10,10)

می باشد. با توجه به شکل ۱۰-۵، بر اساس پیش‌بینی مدل پوسته‌ی غیرموضعی، نیروی محوری بحرانی حاصله برای نانوپیپاد $C_{60}@(10,10)$ به ازای $\eta = 0.05 \text{ nm}$ مقدار 79 nN به دست آمده است که به معنی ۴% افزایش در نیروی محوری بحرانی $C_{60}@(10,10)$ نسبت به نانوتیوب خالی $(10,10)$ می باشد. این پیش‌بینی توسط مدل پوسته‌ی غیرموضعی نشان دهنده‌ی مطابقت خوب و منطقی نتایج با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می باشد.

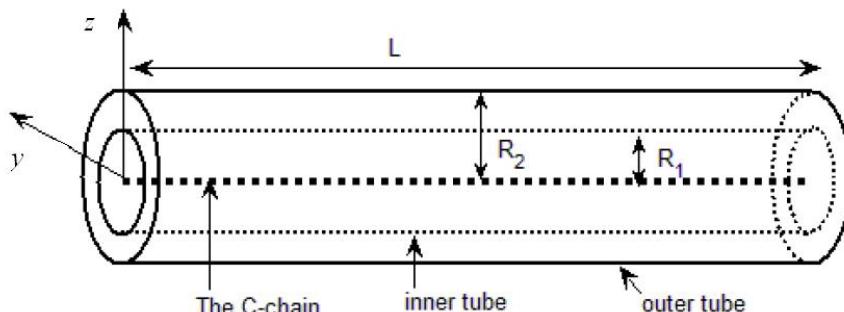
مشاهدات فوق، نتیجه می‌دهد که هر دو روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) و مدل پوسته‌ی غیر موضعی پیش‌بینی می‌کنند که حضور فولرین‌های C_{60} درون نانوتیوب $(10,10)$ باعث افزایش مقاومت مکانیکی نانوتیوب در مقابل ناپایداری محوری می‌شود [۲۹].

فصل ششم: تحلیل ناپایداری نانوسیم‌ها

در این فصل، پس از ارائهٔ معادلات حاکم بر پایداری نانوسیم‌ها بر اساس مدل‌های کانتینیومی غیرموضعی ارائه شده در فصل چهارم، کمانش نانوسیم‌ها را تحت بارگذاری‌های مختلف بررسی می‌کنیم.

۶-۱: معادلات حاکم بر پایداری نانوسیم

یک نانوسیم k -لایه به طول L مطابق شکل ۶-۱ که از مجموعه‌ای از k نانوتیوب هم محور و یک زنجیره‌ی کربنی محبوس منطبق بر محور مشترک لایه‌های نانوتیوب تشکیل شده است در نظر می‌گیریم. نانوسیم را با مجموعه‌ای از k پوسته‌ی استوانه‌ای هم محور به طول L و ضخامت h ، به عنوان لایه‌های نانوتیوب و یک زنجیره‌ی هم‌طول با لایه‌ها، منطبق بر محور پوسته‌ها، مدل می‌کنیم.



شکل ۶-۱: شکل شماتیک یک نانوسیم [۳۴]

جابه‌جایی شعاعی پوسته‌ها را با (w_j, u_0, v_0, w_0) و تغییر شکل زنجیره‌ی کربنی با بردار جابه‌جایی (u_0, v_0, w_0) نمادگذاری شده است، که در آن w_j ، مولفه‌ی جابه‌جایی طولی در جهت x ، u_0 و v_0 به ترتیب در جهت عرضی y و z می‌باشد. برای اندرکنش بین اتم‌های کربن در زنجیره‌ی کربنی و اتم‌های نانوتیوب از مدل توزیع فشاری که در معادلهٔ (۲۷.۳) فصل ۳ ارائه شده است، استفاده می‌کنیم:

$$p_1 = c(w_2 - w_1) + p_{01}^0 - c_0 [w_1 - v_0(x)\cos(\theta) - w_0(x)\sin(\theta)], \quad (1.6)$$

$$p_i = c(w_{i+1} - w_i) - c \frac{R_{i-1}}{R_i} (w_i - w_{i-1}); \quad i = 2, \dots, k-1$$

$$p_k = -c \frac{R_{k-1}}{R_k} (w_k - w_{k-1}).$$

که در آن، p_j توزیع فشار بر روی لایه‌ی j -ام، c ضریب فشار وان در والس بین لایه‌های مجاور نانوتیوب، c_0 ضریب فشار وان در والس بین زنجیره‌ی کربنی و داخلی‌ترین لایه‌ی نانوتیوب و R_j شعاع لایه‌ی j -ام می‌باشد.

نیروی واردہ از سمت نانوتیوب بر زنجیره‌ی کربنی در نقطه x که در معادله‌ی (۲۸.۳) از سمت نانوتیوب بر زنجیره‌ی کربنی در نقطه x که در معادله‌ی (۲۸.۳) آمده است، به صورت زیر می‌باشد:

$$\begin{aligned} f_y(x) &= R_l c_0 \int_0^{2\pi} w_l(x, \theta) \cos(\theta) d\theta - \pi R_l c_0 v_0(x), \\ f_z(x) &= R_l c_0 \int_0^{2\pi} w_l(x, \theta) \sin(\theta) d\theta - \pi R_l c_0 w_0(x). \end{aligned} \quad (۲.۶)$$

رابطه‌ی حاکم بر تعادل زنجیره‌ی کربنی که در معادله‌ی (۱۲.۴) ارائه شده است، بدین صورت می‌باشد:

$$F = E_0 A_0 u_{0,x},$$

$$\begin{aligned} F \frac{\partial^2 v_0}{\partial x^2} + f_y(x) &= 0, \\ F \frac{\partial^2 w_0}{\partial x^2} + f_z(x) &= 0. \end{aligned} \quad (۳.۶)$$

که در آن، F نیروی کششی واردہ بر زنجیره، E_0 مدول یانگ و A_0 سطح مقطع زنجیره‌ی کربنی است. با جایگذاری معادله‌ی (۳.۶) در (۲.۶) روابط حاکم بر تعادل زنجیره‌ی کربنی درون نانوتیوب، به صورت معادلات زیر ارائه می‌شود:

$$F = E_0 A u_{0,x},$$

$$\begin{aligned} F \frac{\partial^2 v_0}{\partial x^2} &= \pi R_l c_0 v_0(x) - R_l c_0 \int_0^{2\pi} w_l(x, \theta) \cos(\theta) d\theta, \\ F \frac{\partial^2 w_0}{\partial x^2} &= \pi R_l c_0 w_0(x) - R_l c_0 \int_0^{2\pi} w_l(x, \theta) \sin(\theta) d\theta. \end{aligned} \quad (۴.۶)$$

رابطه‌ی حاکم بر تعادل لایه‌ی j -ام نانوتیوب با استفاده از معادله‌ی (۵۶.۴) به این صورت، ارائه می‌شود:

$$D\nabla^8 w_j + \frac{Eh}{R_j^2} \frac{\partial^4 w_j}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_j [w_j] - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 p_j = 0. \quad (5.6)$$

که در آن، D مقاومت موثر خمشی و E مدول یانگ است. همچنین منظور از ψ_j در معادله‌ی (۵.۶)

عملگر ψ در لایه‌ی j -ام است که در معادله‌ی (۵۹.۴) تعریف شده و بدین ترتیب تعیین می‌شود:

$$\psi_j = N_{xj} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2N_{x\theta j} \frac{1}{R_j} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} + N_{\theta j} \frac{1}{R_j^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (6.6)$$

که در آن، $N_{\theta j}$ و $N_{x\theta j}$ نیروهای معادل محوری، برشی و محیطی در لایه‌ی j -ام است.

بنابراین، با جایگذاری روابط توزیع فشار در لایه‌های نانوتیوب، معادله‌ی (۱.۶) در (۵.۶)، رابطه‌ی حاکم بر

تعادل هر لایه‌ی پوسته‌ای نانوتیوب، روابط حاکم بر تعادل نانوسیم به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} D\nabla^8 w_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_1 [w_1] \\ - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left\{ c(w_2 - w_1) - c_0 [w_1 - v_0(x) \cos(\theta) - w_0(x) \sin(\theta)] \right\} = 0, \\ D\nabla^8 w_i + \frac{Eh}{R_i^2} \frac{\partial^4 w_i}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_i [w_i] \\ - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [w_{i+1} - w_i - (R_{i-1}/R_i)(w_i - w_{i-1})] = 0; \quad i = 2, \dots, k-1, \\ D\nabla^8 w_k + \frac{Eh}{R_k^2} \frac{\partial^4 w_k}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_k [w_k] \\ - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [(R_{k-1}/R_k)(w_{k-1} - w_k)] = 0. \end{aligned} \quad (7.6)$$

معادلات حاکم بر تعادل زنجیره‌ی کربنی محصور و نانوتیوب کربنی، مطابق معادلات (۴.۶) و (۷.۶) با همدیگر مزدوج (کوپل) می‌باشند. قبل از شروع بحث در مورد فرمولاسیون کمانش نانوسیم، باید نوع وابستگی متغیرهای مزدوج مربوط به میدان جابه‌جایی زنجیره‌ی کربنی و نانوتیوب کربنی در معادلات (۴.۶) و (۷.۶) یعنی، مولفه‌های جابه‌جایی عرضی (v_0, w_0) زنجیره‌ی کربنی و جابه‌جایی شعاعی لایه‌ی اول نانوتیوب w_1 مشخص شود. این وابستگی به خاطر اندرکنش وان در والس زنجیره‌ی کربنی و

داخلی ترین لایه‌ی نانوتیوب در معادلات فشار وارده بر نانوتیوب (۱.۶) و نیروی وارده بر زنجیره (۲.۶) به وجود می‌آید.

به زنجیره‌ی محصور داخل نانوتیوب به جز نیروهای گستردگی اندکنش $\text{vdW}(f_y, f_z)$ ، نیروی دیگری وارد نمی‌شود. بنابراین نیروی کشش در زنجیره‌ی کربنی $F = 0$ بوده که با جایگذاری این نیرو در معادله‌ی (۴.۶) نتیجه می‌دهد:

$$\begin{aligned}\pi v_0(x) &= \int_0^{2\pi} w_l(x, \theta) \cos(\theta) d\theta, \\ \pi w_0(x) &= \int_0^{2\pi} w_l(x, \theta) \sin(\theta) d\theta.\end{aligned}\quad (8.6)$$

جواب معادله‌ی (۷.۶) برای $w_l(x, \theta)$ ، جایه‌جایی لایه‌ی اول نانوتیوب، به صورت سری فوریه در نظر گرفته می‌شود:

$$\begin{aligned}w_l(x, \theta) &= \sum_{m,n} a_{mn} \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \cos(n\theta) + \sum_{m,n} b_{mn} \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin(n\theta) \\ &\quad + \sum_{m,n} c_{mn} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \cos(n\theta) + \sum_{m,n} d_{mn} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin(n\theta),\end{aligned}\quad (9.6)$$

که در آن، m و n دو عدد صحیح، بیانگر عدد موجی طولی و نیم-موجی محیطی می‌باشند، همچنین، $w_l(x, \theta)$ ضرایب سری فوریه هستند. با جایگذاری سری فوریه مربوط به $w_l(x, \theta)$ معادله‌ی (۹.۶) در (۸.۶) مولفه‌های جایه‌جایی عرضی (v_0, w_0) زنجیره بر حسب w_l به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$\begin{aligned}v_0(x) &= \sum_m a_{m1} \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) + \sum_m c_{m1} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right), \\ w_0(x) &= \sum_m b_{m1} \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) + \sum_m d_{m1} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right).\end{aligned}\quad (10.6)$$

با توجه به معادلات (۸.۶) و (۱۰.۶) مشخص می‌شود که مولفه‌های جایه‌جایی عرضی (v_0, w_0) زنجیره و جایه‌جایی شعاعی لایه‌ی اول نانوتیوب $w_l(x, \theta)$ ، فقط در مود محیطی $n=1$ مزدوج می‌باشند و در مودهای بالاتر این وابستگی وجود ندارد، یعنی برای $n \geq 2$ داریم، $w_0 = 0$. وابستگی موجود بین

مولفه‌های جابه‌جایی عرضی (v_0, w_0) زنجیره و جابه‌جایی شعاعی داخلی‌ترین لایه نانوتیوب ($w_1(x, \theta)$) در معادله‌ی حاکم بر تعادل نانوتیوب، معادله‌ی (۷.۶) به صورت ترم اختلاف جابه‌جایی زنجیره کربنی و نانوتیوب در راستای شعاعی به خاطر اندرکنش وان در والس زنجیره‌ی کربنی و داخلی‌ترین لایه نانوتیوب در معادلات فشار وارده بر نانوتیوب (۱.۶) ظاهر شده است:

$$\delta_r = w_1(x, \theta) - v_0(x) \cos(\theta) - w_0(x) \sin(\theta). \quad (11.6)$$

برای δ_r اختلاف جابه‌جایی زنجیره‌ی کربنی و نانوتیوب در راستای شعاعی در مودهای مختلف محیطی n با جایگذاری معادله‌ی (۱۰.۶) در (۱۱.۶) داریم:

$$\begin{aligned} \delta_r = & \left[\cos(\theta) \sum_m a_{m1} \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) + \sin(\theta) \sum_m b_{m1} \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \right. \\ & + \cos(\theta) \sum_m c_{m1} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) + \sin(\theta) \sum_m d_{m1} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \left. \right] \\ & - \cos(\theta) \left[\sum_m a_{m1} \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) + \sum_m c_{m1} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \right] \\ & - \sin(\theta) \left[\sum_m b_{m1} \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) + \sum_m d_{m1} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \right] = 0; \quad n=1, \end{aligned} \quad (12.6)$$

$$\delta_r = w_1(x, \theta); \quad n \geq 2.$$

برای مود محیطی $n=1$ روابط حاکم بر تعادل نانوسیم با جایگذاری معادله‌ی (۱۲.۶) در (۷.۶) بدین ترتیب به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} D\nabla^8 w_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_1 [w_1] - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 [c(w_2 - w_1)] &= 0, \\ D\nabla^8 w_i + \frac{Eh}{R_i^2} \frac{\partial^4 w_i}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_i [w_i] & \\ - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [w_{i+1} - w_i - (R_{i-1}/R_i)(w_i - w_{i-1})] &= 0; \quad i = 2, \dots, k-1, \\ D\nabla^8 w_k + \frac{Eh}{R_k^2} \frac{\partial^4 w_k}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_k [w_k] & \\ - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [(R_{k-1}/R_k)(w_{k-1} - w_k)] &= 0. \end{aligned} \quad (13.6)$$

نکته‌ی جالب توجه معادله‌ی (۱۳.۶) این است که، مشاهده می‌شود که مود اول محیطی کمانش نانوسیم و نانوتیوب حالی یکسان می‌باشد و در واقع زنجیره تاثیری در کمانش مود اول محیطی نانوتیوب ندارد. برای مودهای محیطی $n \geq 2$ ، با جایگذاری معادله‌ی (۱۲.۶) در (۷.۶) به روابط حاکم بر تعادل نانوسیم

می‌رسیم:

$$\begin{aligned} D\nabla^8 w_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_1 [w_1] - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 [c(w_2 - w_1) - c_0 w_1] &= 0, \\ D\nabla^8 w_i + \frac{Eh}{R_i^2} \frac{\partial^4 w_i}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_i [w_i] \\ - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [w_{i+1} - w_i - (R_{i-1}/R_i)(w_i - w_{i-1})] &= 0; \quad i = 2, \dots, k-1, \\ D\nabla^8 w_k + \frac{Eh}{R_k^2} \frac{\partial^4 w_k}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_k [w_k] \\ - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [(R_{k-1}/R_k)(w_{k-1} - w_k)] &= 0. \end{aligned} \quad (14.6)$$

همانطور که مشاهده می‌شود، اثر حضور زنجیره‌ی کربنی در کمانش نانوتیوب در مودهای محیطی $n \geq 2$ ظاهر شود. توجه شود که در این مودها، زنجیره‌ی کربنی در جهات عرضی تغییر شکلی ندارد

$$v_0 = w_0 = 0$$

۶-۲: آنالیز کمانش نانوسیم

در شرایط تعادل پایدار هر سازه‌ای، اگر تغییر شکل موجود در محدوده‌ی پایداری سیستم با یک جابه‌جایی اغتشاش یابد، این اغتشاش افزوده در سیستم میرا می‌شود. در مرز ناپایداری سیستم (مرز کمانش)، جابه‌جایی اغتشاشی، سیستم را به سمت ناپایداری بیشتر برده و کمانش رخ خواهد داد. اگر توابع w_j ($j = 1, \dots, k$) تغییر شکل شعاعی لایه‌های نانوسیم در شرایط تعادل باشند و \tilde{w}_j اغتشاش وارد بر لایه‌ی j -ام باشد، در محدوده‌ی پایداری سیستم، توابع $w_j + \tilde{w}_j$ در معادلات حاکم بر پایداری سیستم صدق می‌کنند. از آنجا که معادله‌ی (۱۴.۶) نسبت به w_j خطی است، در واقع توابع اغتشاش \tilde{w}_j هم به تنهایی در معادله‌ی (۱۴.۶) صدق می‌کند:

$$\begin{aligned}
D\nabla^8 \tilde{w}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4 \tilde{w}_1}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_1 [\tilde{w}_1] - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 [c(\tilde{w}_2 - \tilde{w}_1) - c_0 \tilde{w}_1] &= 0, \\
D\nabla^8 \tilde{w}_i + \frac{Eh}{R_i^2} \frac{\partial^4 \tilde{w}_i}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_i [\tilde{w}_i] & \\
- (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [\tilde{w}_{i+1} - \tilde{w}_i - (R_{i-1}/R_i)(\tilde{w}_i - \tilde{w}_{i-1})] &= 0; \quad i = 2, \dots, k-1, \\
D\nabla^8 \tilde{w}_k + \frac{Eh}{R_k^2} \frac{\partial^4 \tilde{w}_k}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_k [\tilde{w}_k] & \\
- (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [(R_{k-1}/R_k)(\tilde{w}_{k-1} - \tilde{w}_k)] &= 0.
\end{aligned} \tag{15.6}$$

۶-۲-۱: ناپایداری نانوسیم تحت فشار خارجی

در صورتی که نانوسیم در معرض فشار خارجی قرار گیرد، این فشار فقط به لایه‌ی خارجی تاثیر می‌کند، به همین منظور فقط تحلیل ناپایداری نانوسیم‌های تک‌لایه را در نظر می‌گیریم. در این حالت، نیروی معادل تنش محوری، N_{x1} و نیروی معادل تنش پیچشی، $N_{x\theta 1}$ وجود ندارند. به خاطر فشار خارجی و فشار وان در والس زنجیره‌ی محبوس، فقط تنش محیطی در نانوتیوب وجود دارد. بنابراین، نیروهای واحد طول معادل در اثر اعمال فشار خارجی عبارت است از:

$$\begin{aligned}
N_{x1} &= 0, \\
N_{x\theta 1} &= 0, \\
N_{\theta 1} &= R_1 \left[-p_{ext} + p_{01}^0 \right].
\end{aligned} \tag{16.6}$$

با جایگذاری معادله‌ی (۱۶.۶) در (۶.۶)، عملگر ψ_1 به این صورت بدست می‌آید:

$$\psi_1 = R_1 \left[-p_{ext} + p_{01}^0 \right] \frac{1}{R_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \tag{17.6}$$

اکنون با جایگذاری عملگر ψ_1 از معادله‌ی (۱۷.۶) در (۱۵.۶) به معادلات حاکم بر تعادل نانوسیم در اثر اعمال فشار خارجی می‌رسیم:

$$D\nabla^8\tilde{w}_l + \frac{Eh}{R_l^2} \frac{\partial^4\tilde{w}_l}{\partial x^4} - (1-\eta^2\nabla^2)\nabla^4 \left\{ R_l \left[-p_{ext} + p_{01}^0 \right] \frac{1}{R_l^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right\} \tilde{w}_l + (1-\eta^2\nabla^2) \nabla^4 c_0 \tilde{w}_l = 0. \quad (18.6)$$

توجه شود از آنجا که نانوسیم تک لایه را بررسی می‌کنیم، ترم مربوط به فشار vdW لایه‌ی اول و دوم نانوتیوب در (15.6)، در معادله‌ی (18.6) حذف شده است.تابع آزمایشی اغتشاشی برای تغییرشکل

شعاعی $(\tilde{w}_l(x,y))$ را می‌توان به صورت توابع هارمونیک سینوسی در نظر گرفت:

$$\tilde{w}_l = \tilde{W}_l \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin(n\theta), \quad (19.6)$$

که در آن، \tilde{W}_l دامنه‌ی تابع تغییر شکل شعاعی اغتشاشی است، m و n دو عدد صحیح مثبت، بیانگر عدد موجی طولی و نیم-موجی محیطی می‌باشند. برای ساده‌تر نوشتتن معادلات آتی α و β_l را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\alpha = \frac{m\pi}{L}, \quad \beta_l = \frac{n}{R_l}, \quad (20.6)$$

با جایگذاری تابع آزمایشی اغتشاشی $(\tilde{w}_l(x,y))$ در معادله‌ی (19.6) به معادله خطی جبری زیر می‌رسیم:

$$\tilde{A}_l \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin(n\theta) = 0, \quad (21.6)$$

که در آن،

$$\begin{aligned} \tilde{A}_l = D(\alpha^2 + \beta_l^2)^4 \tilde{W}_l + \frac{Eh}{R_l^2} \alpha^4 \tilde{W}_l \\ + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_l^2)] (\alpha^2 + \beta_l^2)^2 R_l \beta_l^2 \left[-p_{ext} + p_{01}^0 \right] \tilde{W}_l \\ + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_l^2)] (\alpha^2 + \beta_l^2)^2 c_0 \tilde{W}_l. \end{aligned} \quad (22.6)$$

برای اینکه معادله‌ی (21.6) برای تمام x و θ ها صدق کند، باید داشته باشیم:

$$\tilde{A}_l(\alpha, \beta_l) = 0 \quad (23.6)$$

بنابراین، فشار به دست آمده برای یک مود خاص اغتشاش (m, n) ، که با $p_{ext}|_{m,n}$ نشان می‌دهیم، بدین ترتیب تعیین می‌شود:

$$p_{ext}|_{m,n} = \frac{D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + Eh\alpha^4 / R_1^2}{[1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)](\alpha^2 + \beta_1^2)^2 R_1 \beta_1^2} + \left[p_{01}^0 + \frac{c_0}{R_1 \beta_1^2} \right] \quad (24.6)$$

فشار شعاعی بحرانی در واقع از کمینه کردن $p_{ext}|_{m,n}$ در معادله‌ی (۲۴.۶) نسبت به مودهای مختلف کمانشی (m, n) به دست می‌آید.

۶-۲-۲: ناپایداری نانوسیم تحت تورک پیچشی

در صورتی که تورک پیچشی T به نانوسیم وارد شود، این گشتاور بین تمام لایه‌ها تقسیم می‌شود، به طوری که داریم:

$$T = \sum_{j=1}^k T_j. \quad (25.6)$$

که در آن T_j تورک پیچشی وارد بر لایه‌ی j -ام است و رابطه‌ی آن با نیروی معادل برشی در لایه‌ی j -ام به صورت زیر است:

$$T_j = 2\pi R_j^2 N_{x\theta j} \quad (26.6)$$

نیروی معادل برشی وارد در هر لایه نسبت مستقیم با شعاع آن لایه دارد، یعنی

$$\frac{N_{xy1}}{R_1} = \frac{N_{xy2}}{R_2} = \dots = \frac{N_{xyj}}{R_j} = \dots = \frac{N_{xyk}}{R_k}, \quad (27.6)$$

با جایگذاری معادله‌ی (۲۵.۶) در (۲۷.۶)، نیروی معادل برشی وارد در هر لایه بدین ترتیب تعیین می‌گردد:

$$N_{xyj} = TR_j / 2\pi \sum_{m=1}^k R_m^3 \quad (28.6)$$

در حالتی که فقط بارگذاری پیچشی اعمال شود، نیروی معادل تنש‌های محوری، N_{xj} وجود ندارند. همچنین، تنش محیطی در نانوتیوب فقط در لایه‌ی اول به خاطر فشار اولیه‌ی زنجیره‌ی کربنی وجود دارد. بنابراین، نیروهای واحد طول معادل در اثر بارگذاری نیروی محوری عبارت است از:

$$N_{xj} = 0,$$

$$N_{x\theta j} = TR_j / 2\pi \sum_{m=1}^k R_m^3; \quad (29.6)$$

$$N_{\theta j} = R_j p_{0j}^0; \quad j = 1, \dots, k.$$

که در آن، p_{0j}^0 فشار اولیه‌ی معادل اندرکنش vdW واردہ از سوی زنجیره‌ی محبوس بر نانوتیوب است، که چنانچه قبل اظهار گردید، فقط اثر اندرکنش زنجیره با داخلی‌ترین لایه‌ی نانوتیوب در نظر گرفته می‌شود و از اندرکنش با لایه‌های دورتر صرفنظر می‌شود، با جایگذاری معادله‌ی (29.6) در (30.6)، عملگر ψ_j برای هر لایه به این صورت بدست می‌آید:

$$\psi_j = 2 \frac{R_j}{R_1} N_{x\theta 1} \frac{1}{R_j} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} + R_j p_{0j}^0(x) \frac{1}{R_j^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (30.6)$$

اکنون با جایگذاری عملگر ψ_j از معادله‌ی (30.6) در (15.6) به معادلات حاکم بر تعادل نانوسیم در اثر اعمال تورک پیچشی می‌رسیم:

$$D\nabla^8 \tilde{w}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4 \tilde{w}_1}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[2N_{xy1} \frac{1}{R_1} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} + R_1 p_{01}^0 \left(\frac{1}{R_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \right] \tilde{w}_1 - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 [c(\tilde{w}_2 - \tilde{w}_1) - c_0 \tilde{w}_1] = 0, \\ D\nabla^8 \tilde{w}_i + \frac{Eh}{R_i^2} \frac{\partial^4 \tilde{w}_i}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[2 \frac{R_i}{R_1} N_{xy1} \frac{1}{R_i} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} \right] \tilde{w}_i - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [\tilde{w}_{i+1} - \tilde{w}_i - (R_{i-1}/R_i)(\tilde{w}_i - \tilde{w}_{i-1})] = 0; \quad i = 2, \dots, k-1, \quad (31.6)$$

$$D\nabla^8 \tilde{w}_k + \frac{Eh}{R_k^2} \frac{\partial^4 \tilde{w}_k}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[2 \frac{R_k}{R_1} N_{xy1} \frac{1}{R_k} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} \right] \tilde{w}_k - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [(R_{k-1}/R_k)(\tilde{w}_{k-1} - \tilde{w}_k)] = 0.$$

یک سری از توابع آزمایشی اغتشاشی برای تغییرشکل شعاعی $(x, \theta) \tilde{w}_j$ را می‌توان به صورت تابع هارمونیک سینوسی در نظر گرفت:

$$\tilde{w}_j = \tilde{W}_j \sin\left(\frac{m\pi x}{L} - n\theta\right), \quad (32.6)$$

که در آن، \tilde{W}_j دامنه‌ی تابع تغییر شکل شعاعی اغتشاش j -ام است، m و n دو عدد صحیح مثبت، بیانگر عدد موجی طولی و نیم-موجی محیطی می‌باشند. برای ساده‌تر نوشتتن معادلات آتی α و β_j را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\alpha = \frac{m\pi}{L}, \quad \beta_j = \frac{n}{R_j}. \quad (33.6)$$

با جایگذاری توابع آزمایشی اغتشاشی $(x, \theta) \tilde{w}_j$ معادله‌ی (32.6) در معادله‌ی (31.6) به معادلات خطی کوپل جبری می‌رسیم:

$$\begin{aligned} \tilde{A}_1 \sin(\alpha x - \beta_1 R_1 \theta) &= 0, \\ \tilde{A}_i \sin(\alpha x - \beta_i R_i \theta) &= 0; \quad i = 2, \dots, k-1, \\ \tilde{A}_k \sin(\alpha x - \beta_k R_k \theta) &= 0, \end{aligned} \quad (34.6)$$

که در آن،

$$\begin{aligned} \tilde{A}_1 &= D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 \tilde{W}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 \tilde{W}_1 \\ &\quad - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 [2N_{xy1} \alpha \beta_1 - R_1 p_{01}^0 \beta_1^2] \tilde{W}_1 \\ &\quad - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 [c(\tilde{W}_2 - \tilde{W}_1) - c_0 \tilde{W}_1] = 0, \\ \tilde{A}_i &= D(\alpha^2 + \beta_i^2)^4 \tilde{W}_i + \frac{Eh}{R_i^2} \alpha^4 \tilde{W}_i - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 \left[2 \frac{R_i}{R_1} N_{xy1} \alpha \beta_i \right] \tilde{W}_i \\ &\quad - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 c [\tilde{W}_{i+1} - \tilde{W}_i - (R_{i-1}/R_i)(\tilde{W}_i - \tilde{W}_{i-1})]; \\ &\quad i = 2, \dots, k-1, \end{aligned} \quad (35.6)$$

$$\begin{aligned}\tilde{A}_k = & D(\alpha^2 + \beta_k^2)^4 \tilde{W}_k + \frac{Eh}{R_k^2} \alpha^4 \tilde{W}_k \\ & - \left[1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_k^2) \right] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 \left[2 \frac{R_k}{R_1} N_{xy1} \alpha \beta_k \right] \tilde{W}_k \\ & - \left[1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_k^2) \right] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 c \left[(R_{k-1}/R_k) (\tilde{W}_{k-1} - \tilde{W}_k) \right].\end{aligned}$$

برای اینکه معادله‌ی (۳۴.۶) برای تمام x و θ ها صدق کند، باید ضرایب $(\tilde{A}_j, j = 1, 2, \dots, k)$ محو شوند. یعنی:

$$\tilde{A}_j(\alpha, \beta_j) = 0; \quad j = 1, \dots, k. \quad (36.6)$$

با مرتب کردن روابط معادله‌ی (۳۶.۶) به فرم ماتریسی داریم:

$$[\mathbf{A}]_{k \times k} \{W\}_{k \times 1} - N_x [\mathbf{B}]_{k \times k} \{W\}_{k \times 1} = \mathbf{0}, \quad \text{or} \quad [\mathbf{A} - N_{x\theta 1} \mathbf{B}] \{W\}_{k \times 1} = \mathbf{0}, \quad (37.6)$$

که در آن، $\{W\}_{k \times 1}$ برداری از مولفه‌های غیر صفر ماتریس مربعی

عبارتند از:

$$\begin{aligned}A_{11} = & D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + R_1 \beta_1^2 p_{01}^0 \left[1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_1^2) \right] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 \\ & + \left[1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_1^2) \right] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 [c + c_0], \\ A_{(i)(i-1)} = & -c \left[1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_i^2) \right] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 (R_{i-1}/R_i); \quad i = 2, \dots, k-1, \\ A_{(i)(i)} = & D(\alpha^2 + \beta_i^2)^4 + \frac{Eh}{R_i^2} \alpha^4 + c \left[1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_i^2) \right] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 \left[1 + (R_{i-1}/R_i) \right], \\ A_{(i)(i+1)} = & -c \left[1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_i^2) \right] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2; \quad i = 2, \dots, k-1, \\ A_{(k)(k)} = & D(\alpha^2 + \beta_k^2)^4 + \frac{Eh}{R_k^2} \alpha^4 + c \left[1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_k^2) \right] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 (R_{k-1}/R_k).\end{aligned} \quad (38.6)$$

همچنین مولفه‌های ماتریس قطری \mathbf{B} در معادله‌ی (۳۷.۶) عبارت است از:

$$B_{(j)(j)} = 2 \frac{R_j}{R_1} \left[1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_j^2) \right] (\alpha^2 + \beta_j^2)^2 \alpha \beta_j, \quad (39.6)$$

اکنون، به دنبال جواب‌های غیربیدیهی برای $\{W\}$ در معادله‌ی (۳۷.۶) هستیم، برای وجود چنین جوابی

باید دترمینان $[\mathbf{A} - N_{x\theta 1} \mathbf{B}]$ برابر صفر شود، یعنی

$$\det[\mathbf{A} - N_{x\theta 1} \mathbf{B}] = 0. \quad (40.6)$$

با استفاده از معادله‌ی (40.6) می‌توان، تورک پیچشی بحرانی در آستانه‌ی ناپایداری نانوپیپاد را به صورت عددی تعیین نمود. در واقع، به دنبال مقادیر ویژه‌ی $N_{x\theta 1}$ هستیم. برای مقادیر مشخص m و n ، عدد جواب مختلف برای $N_{x\theta 1}$ وجود دارد. مقدار کمینه‌ی این جوابها را با $N_{x\theta 1|_{m,n}}$ نشان می‌دهیم. تورک پیچشی مربوط به مود کمانشی (m, n) از اختشاش، یعنی $T_{m,n}$ ، به کمک معادله‌ی (19.5) به دست می‌آید:

$$T_{m,n} = \frac{2\pi(N_{x\theta 1})_{m,n} \left(\sum_{j=1}^k R_j^3 \right)}{R_1} \quad (41.6)$$

تورک پیچشی بحرانی T_{cr} نانوپیپاد در واقع مقدار کمینه‌ی $T_{m,n}$ به ازای (m, n) های مختلف است. برای حالت خاص نانوسیم تک‌لایه به راحتی از معادله‌ی (40.6) به دست می‌آید:

$$T_{m,n} = \pi R_1^2 \left\{ \frac{D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + Eh\alpha^4 / R_1^2}{\alpha\beta_1(\alpha^2 + \beta_1^2)^2 [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)]} + \left[\frac{R_1\beta_1^2 p_{01}^0 + c_0}{\alpha\beta_1} \right] \right\}. \quad (42.6)$$

۶-۲-۳: ناپایداری نانوسیم تحت نیروی محوری

در صورتی که نیروی محوری فشاری P به لایه‌های نانوتیوب در نانوسیم وارد شود، این بار بین تمام لایه‌ها تقسیم می‌شود، به طوری که داریم:

$$P = \sum_{j=1}^k P_j. \quad (43.6)$$

که در آن $P_j = -2\pi R_j N_{xj}$ اندازه‌ی نیروی محوری وارد بر لایه‌ی j -ام است. با فرض یکسان بودن نیروی واحد طول معادل N_{xj} در این شرایط بارگذاری، داریم:

$$N_{x1} = N_{x2} = \dots = N_{xj} = \frac{-P_j}{2\pi R_j} = \dots = N_{xk} := -N_x \quad (44.6)$$

که در آن N_x اندازه‌ی نیروی واحد طول معادل تنش‌های محوری نانوسیم بدین ترتیب تعیین می‌شود:

$$N_x = P / 2\pi \sum_{j=1}^k R_j. \quad (45.6)$$

در حالتی که فقط بارگذاری محوری اعمال شود، نیروی معادل تنش‌های برشی، N_{xyj} وجود ندارند.

همچنین، تنش محیطی در نانوتیوب فقط در لایه‌ی اول به خاطر فشار اولیه‌ی زنجیره‌ی کربنی وجود

دارد. بنابراین، نیروهای واحد طول معادل در اثر بارگذاری نیروی محوری عبارت است از:

$$\begin{aligned} N_{xj} &= -N_x = -P / 2\pi \sum_{j=1}^k R_j; \\ N_{x\theta j} &= 0; \end{aligned} \quad (46.6)$$

$$N_{\theta j} = R_j p_{0j}^0; \quad j = 1, \dots, k.$$

که در آن، p_{0j}^0 فشار اولیه‌ی معادل اندرکنش vdW واردہ از سوی زنجیره‌ی محبوس بر نانوتیوب است،

که چنانچه قبل اظهار گردید، فقط اثر اندرکنش زنجیره با داخلی‌ترین لایه‌ی نانوتیوب در نظر گرفته

می‌شود و از اندرکنش با لایه‌های دورتر صرفنظر می‌شود، با جایگذاری معادله‌ی (46.6) در (46.6)، عملگر

ψ_j برای هر لایه به این صورت بدست می‌آید:

$$\psi_j = -N_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + R_j p_{0j}^0(x) \left(\frac{1}{R_j^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right). \quad (47.6)$$

اکنون با جایگذاری عملگر ψ_j از معادله‌ی (47.6) در (45.6) به معادلات حاکم بر تعادل نانوسیم در اثر

اعمال نیروی محوری می‌رسیم:

$$\begin{aligned} D\nabla^8 \tilde{w}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4 \tilde{w}_1}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[-N_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} + R_1 p_{01}^0 \left(\frac{1}{R_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right) \right] \tilde{w}_1 \\ - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 [c(\tilde{w}_2 - \tilde{w}_1) - c_0 \tilde{w}_1] = 0, \end{aligned} \quad (48.6)$$

$$\begin{aligned} D\nabla^8 \tilde{w}_i + \frac{Eh}{R_i^2} \frac{\partial^4 \tilde{w}_i}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[-N_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \tilde{w}_i \\ - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c [\tilde{w}_{i+1} - \tilde{w}_i - (R_{i-1}/R_i)(\tilde{w}_i - \tilde{w}_{i-1})] = 0; \quad i = 2, \dots, k-1, \end{aligned}$$

$$D\nabla^8\tilde{w}_k + \frac{Eh}{R_k^2} \frac{\partial^4\tilde{w}_k}{\partial x^4} - (1-\eta^2\nabla^2)\nabla^4 \left[-N_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \tilde{w}_k \\ - (1-\eta^2\nabla^2)\nabla^4 c [(R_{k-1}/R_k)(\tilde{w}_{k-1} - \tilde{w}_k)] = 0.$$

یک سری از توابع آزمایشی اغتشاشی برای تغییر شکل ساعی (x, y) را می‌توان به صورت تابع

هارمونیک سینوسی در نظر گرفت:

$$\tilde{w}_j = \tilde{W}_j \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin(n\theta); \quad j = 1, 2, \dots, k, \quad (49.6)$$

که در آن، \tilde{W}_j دامنه‌ی تابع تغییر شکل ساعی اغتشاش j -ام است، m و n دو عدد صحیح مثبت،

بیانگر عدد موجی طولی و نیم‌موجی محیطی می‌باشند. برای ساده‌تر نوشتند معادلات آتی α و β_j را به

صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\alpha = \frac{m\pi}{L}, \quad \beta_j = \frac{n}{R_j}, \quad (50.6)$$

با جایگذاری توابع آزمایشی اغتشاشی (x, y) معادله‌ی (43.5) در معادله‌ی (42.5) به معادلات

خطی کوپل جبری می‌رسیم:

$$\tilde{A}_1 \sin(\alpha x) \sin(\beta_1 R_1 \theta) = 0, \\ \tilde{A}_i \sin(\alpha x) \sin(\beta_i R_i \theta) = 0; \quad i = 2, \dots, k-1, \quad (51.6)$$

$$\tilde{A}_k \sin(\alpha x) \sin(\beta_k R_k \theta) = 0,$$

که در آن،

$$\tilde{A}_1 = D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 \tilde{W}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 \tilde{W}_1 \\ - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 [N_x \alpha^2 - R_1 p_{01}^0 \beta_1^2] \tilde{W}_1 \\ - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 [c(\tilde{W}_2 - \tilde{W}_1) - c_0 \tilde{W}_1] = 0, \quad (52.6)$$

$$\tilde{A}_i = D(\alpha^2 + \beta_i^2)^4 \tilde{W}_i + \frac{Eh}{R_i^2} \alpha^4 \tilde{W}_i - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 [N_x \alpha^2] \tilde{W}_i \\ - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 c [\tilde{W}_{i+1} - \tilde{W}_i - (R_{i-1}/R_i)(\tilde{W}_i - \tilde{W}_{i-1})]; \\ i = 2, \dots, k-1,$$

$$\begin{aligned}\tilde{A}_k = & D(\alpha^2 + \beta_k^2)^4 \tilde{W}_k + \frac{Eh}{R_k^2} \alpha^4 \tilde{W}_k \\ & - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_k^2)] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 [N_x \alpha^2] \tilde{W}_k \\ & - [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_k^2)] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 c [(R_{k-1}/R_k)(\tilde{W}_{k-1} - \tilde{W}_k)].\end{aligned}$$

برای اینکه معادله‌ی (۵۱.۶) برای تمام x و θ ها صدق کند، باید ضرایب $(j = 1, 2, \dots, k)$ محو

شوند. یعنی:

$$\tilde{A}_j(\alpha, \beta_j) = 0; \quad j = 1, \dots, k. \quad (53.6)$$

فرم ماتریسی روابط معادله‌ی (۵۳.۶) به صورت زیر می‌باشد:

$$[\mathbf{A}]_{k \times k} \{W\}_{k \times 1} - N_x [\mathbf{B}]_{k \times k} \{W\}_{k \times 1} = \mathbf{0}, \quad \text{or} \quad [\mathbf{A} - N_x \mathbf{B}] \{W\}_{k \times 1} = \mathbf{0}, \quad (54.6)$$

که در آن، $\{W\}_{k \times 1}$ برداری از مولفه‌های غیر صفر ماتریس مربعی

عبارتند از:

$$\begin{aligned}A_{11} = & D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + R_1 \beta_1^2 p_{01}^0 [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 \\ & + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 [c + c_0],\end{aligned}$$

$$A_{(i)(i-1)} = -c [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 (R_{i-1}/R_i); \quad i = 2, \dots, k-1, \quad (55.6)$$

$$A_{(i)(i)} = D(\alpha^2 + \beta_i^2)^4 + \frac{Eh}{R_i^2} \alpha^4 + c [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2 [1 + (R_{i-1}/R_i)],$$

$$A_{(i)(i+1)} = -c [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_i^2)] (\alpha^2 + \beta_i^2)^2; \quad i = 2, \dots, k-1,$$

$$A_{(k)(k)} = D(\alpha^2 + \beta_k^2)^4 + \frac{Eh}{R_k^2} \alpha^4 + c [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_k^2)] (\alpha^2 + \beta_k^2)^2 (R_{k-1}/R_k).$$

همچنین مولفه‌های ماتریس قطری \mathbf{B} در معادله‌ی (۵۴.۶) عبارت است از:

$$B_{(j)(j)} = [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_j^2)] (\alpha^2 + \beta_j^2)^2 \alpha^2; \quad j = 1, \dots, k. \quad (56.6)$$

اکنون، به دنبال جواب‌های غیربدیدهی برای $\{W\}$ در معادله‌ی (۵۴.۶) هستیم، برای وجود چنین جوابی

باید دترمینان $[\mathbf{A} - N_x \mathbf{B}]$ برابر صفر شود، یعنی

$$\det[\mathbf{A} - N_x \mathbf{B}] = 0. \quad (57.6)$$

با استفاده از معادله‌ی (۵۴.۶) می‌توان، نیروی محوری بحرانی در آستانه‌ی ناپایداری نانوسیم را به صورت عددی تعیین نمود. در واقع، به دنبال مقادیر ویژه‌ی N_x هستیم. برای مقادیر مشخص m و n ، جواب مختلف برای N_x وجود دارد. مقدار کمینه‌ی این جواب‌ها را با $N_x|_{m,n}$ نشان می‌دهیم. نیروی محوری مربوط به مود کمانشی (m,n) از اغتشاش، به کمک معادله‌ی (۴۵.۶) به دست می‌آید:

$$P_{m,n} = 2\pi \left(\sum_{j=1}^k R_j \right) N_x|_{m,n}. \quad (58.6)$$

نیروی محوری بحرانی P_{cr} نانوسیم در واقع مقدار کمینه‌ی $P_{m,n}$ به ازای (m,n) های مختلف است.

برای حالت خاص نانوسیم تک‌لایه به راحتی از معادله‌ی (۵۷.۶) به دست می‌آید:

$$P_{m,n} = 2\pi R_1 \left\{ \frac{D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + Eh\alpha^4 / R_1^2}{\alpha^2(\alpha^2 + \beta_1^2)^2 [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)]} + \left[\frac{R_1\beta_1^2 p_{01}^0 + c_0}{\alpha^2} \right] \right\} \quad (59.6)$$

۶-۳: نتایج عددی و بحث

در این بخش با ارائه‌ی مثال‌های عددی تلاش می‌کنیم تا کارآمدی مدل پوسته‌ی غیرموضعی را در آنالیز کمانش نانوسیم نشان دهیم. مثال‌هایی که در این بخش مطرح می‌شوند، مواردی هستند که ناپایداری آنها در مقالات به روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD) بررسی شده است. نانوسیم‌های تک‌لایه‌ای که در واقعیت مشاهده شده‌اند، قطری در حدود $0.6 - 0.7 \text{ nm}$ دارند [۳۴]. مقادیر پارامترهایی که به صورت عمومی در تحلیل‌های عددی استفاده شده عبارت است از: $D = 0.85 \text{ eV}$ و $Eh = 360 \text{ J m}^{-2}$ و [۸۳]

۶-۳-۱: کمانش نانوسیم تک‌لایه تحت فشار خارجی

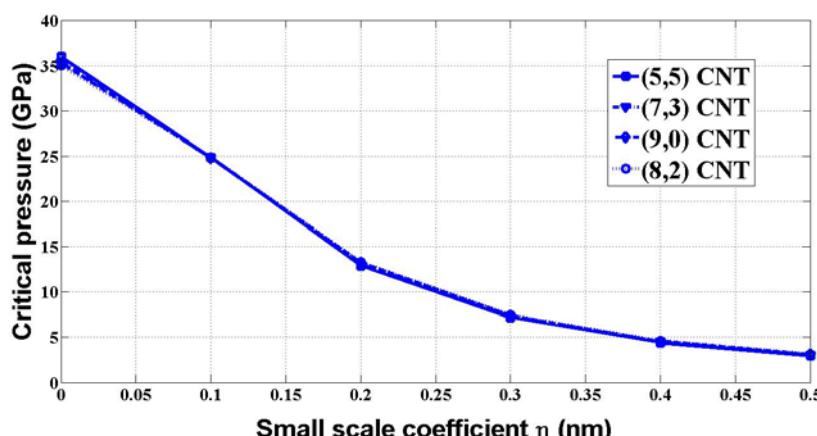
در اینجا، ناپایداری کمانشی تحت فشار خارجی نانوسیم‌های تک‌لایه‌ای که هر کدام از هیبرید نانوتیوب‌های (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) به عنوان میزبان با زنجیره‌ی کربنی محبوس در میان آنها تشکیل شده، با استفاده از مدل پوسته‌ی غیرموضعی مطالعه می‌کنیم. نانوسیم‌های مذکور قبلاً به روش

MD در مقاله‌ی [۳۴] بررسی شده است. طول تمام نانوسیم‌ها $L = 1\text{ nm}$ می‌باشد [۳۴]. مقادیر پارامترهایی که در تحلیل‌های عددی پیش رو به کار رفته‌اند بر اساس مقاله‌ی [۳۴] مطابق جدول ۱-۶ می‌باشد.

جدول ۱-۶: مشخصات و پارامترهای نانوسیم‌های مورد مطالعه [۳۴]

نوع نانوتیوب	شعاع نانوتیوب $R_l(\text{nm})$	فشار اولیه زنجیره $p_{01}^0(\text{GPa})$	ضریب فشار زنجیره $c_0(\text{GPa/nm})$
(5,5)	0.339	3	90.1
(7,3)	0.348	1	59.2
(9,0)	0.352	1	47.6
(8,2)	0.358	0.5	34.8

همانطور که از جدول ۱-۶، مشاهده می‌شود، برای نانوسیم‌های با شعاع کمتر، ضرایب فشار وان در والس و فشار اولیه زنجیره کربنی بزرگتر است و با بزرگتر شدن نانوتیوب در واقع، فاصله‌ی زنجیره و نانوتیوب افزایش یافته و اندرکنش آنها ضعیفتر می‌شود. بنابراین انتظار می‌رود برای نانوسیم‌های شعاع کوچکتر، تاثیر زنجیره کربنی بر کمانش نانوتیوب خالی، بیشتر باشد. با قراردادن $c_0 = 0$ و $p_{01}^0 = 0$ در معادله‌ی (۲۴.۶)، یعنی عدم حضور زنجیره کربنی، می‌توان فشار بحرانی نانوتیوب خالی را به دست آورد. در شکل ۲-۶، فشار بحرانی که منجر به کمانش شعاعی نانوتیوب‌های خالی (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) می‌شود، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۲-۶: فشار خارجی بحرانی نانوتیوب‌های خالی (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

همانطور که از شکل ۲-۶ مشاهده می‌شود، از آنجا که اختلاف شعاع بین نانوتیوب‌ها ناچیز است، اختلاف مشهودی در اندازه‌ی فشار بحرانی نانوتیوب‌ها مشاهده نمی‌شود. همچنین می‌بینیم، فشار بحرانی به ازای افزایش پارامتر ابعاد کوچک η ، کاهش می‌پابد. با مقایسه‌ی نتایج به دست آمده اندازه‌ی فشار بحرانی مربوط به اولین مود کمانشی نانوتیوب‌ها در شکل ۲-۶ با مقادیر منتج از شبیه‌سازی MD در مقاله‌ی [۳۴]، متوجه می‌شویم، اندازه‌ی فشار بحرانی نانوتیوب‌ها در شکل ۲-۶ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η در بازه‌ی $0.2 - 0.25 \text{ nm}$ ، به مقادیر گزارش شده در [۳۴] نزدیک می‌باشد. در جدول ۲-۶، مقادیر فشار بحرانی مربوط به نانوتیوب‌های خالی $(5,5)$, $(7,3)$, $(9,0)$ و $(8,2)$ گزارش شده‌ی [۳۴] به روش MD همراه با نتایج مدل پوسته‌ی غیرموضعی در شکل ۲-۶ به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.2 \text{ nm}$ و $\eta = 0.25 \text{ nm}$ ارائه شده است و همچنین η -ای که در آن نزدیک‌ترین نتیجه در مقایسه با MD حاصل می‌شود، تعیین شده است.

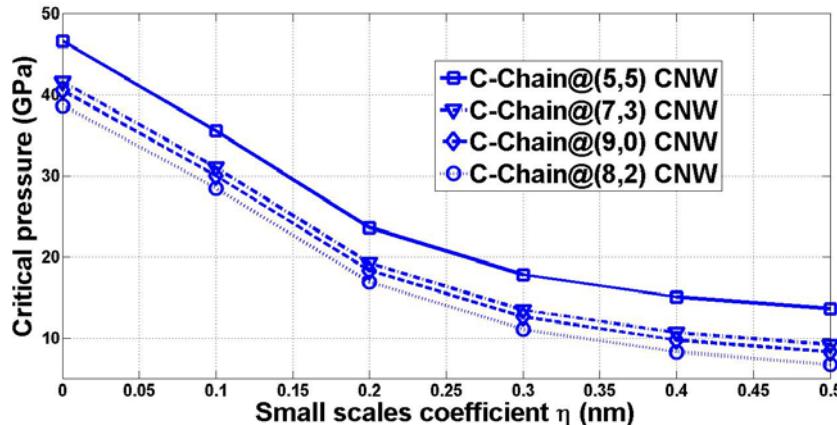
جدول ۲-۶: فشار بحرانی مربوط به نانوتیوب‌ها به روش MD و مدل پوسته‌ی غیرموضعی

نانوتیوب	فشار بحرانی نانوتیوب (GPa)			η -ی انطباق نتایج پوسته غیرموضعی و MD
	MD	پوسته‌ی غیرموضعی	پوسته‌ی غیرموضعی	
	[34]	$\eta = 0.2 \text{ nm}$	$\eta = 0.25 \text{ nm}$	
$(5,5)$	11.1	12.9	9.5	0.22 nm
$(7,3)$	11.4	13.1	9.6	0.22 nm
$(9,0)$	11.8	13.2	9.7	0.22 nm
$(8,2)$	10.9	13.3	9.8	0.23 nm

همانطور که از جدول ۲-۶ نتیجه می‌شود نتایج مدل پوسته‌ی غیرموضعی برای فشار بحرانی مربوط به نانوتیوب‌های خالی $(5,5)$, $(7,3)$, $(9,0)$ و $(8,2)$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.22 \text{ nm}$ با نتایج گزارش شده‌ی MD در مقاله‌ی [۳۴] منطبق می‌شود.

در ادامه، می‌خواهیم تاثیر حضور زنجیره‌ی کربنی محبوس داخل نانوتیوب‌های $(5,5)$, $(7,3)$, $(9,0)$ و $(8,2)$ را بر کمانش نانوتیوب‌های مورد بحث بررسی کنیم. با قراردادن c_0 و p_{01}^0 از جدول ۱-۶ در

معادله‌ی (۲۴.۶)، می‌توان فشار بحرانی نانوسيم‌ها را به دست آورد. در شکل ۳-۶، فشار بحرانی که منجر به کمانش شعاعی نانوسيم‌ها (نانوتیوب‌های ميزبان (۵,۵)، (۷,۳)، (۹,۰) و (۸,۲) هيبريد با زنجيره‌ي کربني) می‌شود، به‌ازاي پaramتر ابعاد کوچك η ارائه شده است.



شکل ۳-۶: فشار خارجی بحرانی نانوسيم‌ها (نانوتیوب‌های ميزبان (۵,۵)، (۷,۳)، (۹,۰) و (۸,۲) هيبريد با زنجيره‌ي کربني) به‌ازاي پaramتر ابعاد کوچك η .

مطابق نتایج شکل ۳-۶، همانطور که قبلاً پيش‌بینی کرده بوديم، مشاهده می‌شود که در نانوسيم‌های شعاع کوچکتر، تاثير زنجيره‌ي کربني بر کمانش نانوتیوب خالي، بيشتر می‌باشد. فشار بحرانی در نانوسيم Cchain@(5,5) به خاطر شعاع کوچکتر (۵,۵) و قوي‌تر بودن دافعه‌ي بين زنجيره و نانوتیوب، از ساير نانوسيم‌ها بيشتر است. نکته‌ي ديگر وقوع اولين کمانش نانوسيم‌ها در مود محيطي $n = 2$ می‌باشد که در بخش ۱-۶ قبلاً توضيح داده است.

با مقاييسه‌ي نتایج به دست آمده اندازه‌ي فشار بحرانی مربوط به اولين مود کمانشي نانوسيم‌ها، در شکل ۳-۶ با مقادير منتج از شبيه‌سازی MD در مقاله‌ي [۳۴]، متوجه می‌شويم، اندازه‌ي فشار بحرانی نانوسيم‌ها در شکل ۳-۶ به‌ازاي پaramتر ابعاد کوچك η در بازه‌ي $0.15 - 0.2 \text{ nm}$ ، به مقادير گزارش شده در [۳۴] نزديك می‌باشد.

در جدول ۳-۶، مقادير فشار بحرانی گزارش شده‌ي مربوط به نانوسيم‌های مورد بحث به روش MD در همراه با نتایج مدل پوسته‌ي غيرموضعی در شکل ۳-۶ به‌ازاي پaramتر ابعاد کوچك $\eta = 0.15 \text{ nm}$ و

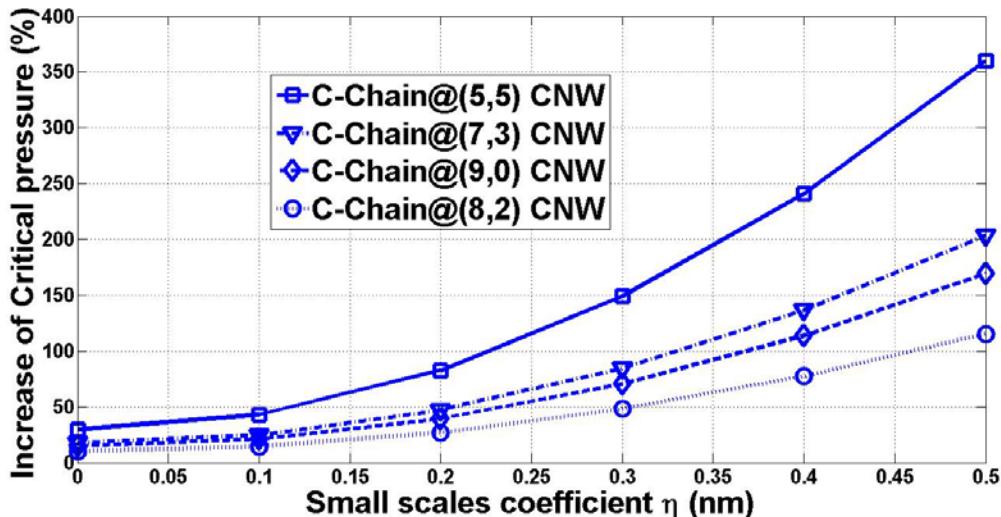
$\eta = 0.2 \text{ nm}$ ارائه شده است و همچنین η -ای که در آن نزدیکترین نتیجه در مقایسه با MD حاصل می‌شود، تعیین شده است.

جدول ۶-۳: فشار بحرانی مربوط به نانوسیم‌ها به روش MD و مدل پوسته‌ی غیرموضعی

نانوتیوب میزان	فشار بحرانی نانوسیم (GPa)			η -ی انطباق نتایج پوسته غیرموضعی و MD
	MD	پوسته‌ی غیرموضعی	پوسته‌ی غیرموضعی	
	[34]	$\eta = 0.15 \text{ nm}$	$\eta = 0.2 \text{ nm}$	
(5,5)	28.7	28.6	23.6	0.15 nm
(7,3)	21	24.2	19.2	0.18 nm
(9,0)	19.6	18.1	18.3	0.14 nm
(8,2)	17.6	21.8	16.9	0.19 nm

همانطور که از جدول ۶-۳ نتیجه می‌شود، نتایج مدل پوسته‌ی غیرموضعی برای فشار بحرانی مربوط به نانوسیم‌های متشكل از نانوتیوب‌های (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.17 \text{ nm}$ با نتایج گزارش شده‌ی MD در مقاله‌ی [۳۴] تطابق خوبی نشان می‌دهد. با مقایسه‌ی جداول ۲-۶ و ۳-۶، مشاهده می‌شود که علی‌رغم اختلاف جزیی بین مقادیر کمی، حضور زنجیره‌ی کربنی درون نانوتیوب باعث افزایش فشار بحرانی تمام نانوتیوب‌ها شده است. این نشان می‌دهد که دافعه‌ی اندرکنش وان در والس متقابل بین زنجیره‌ی کربنی و دیواره‌ی نانوتیوب باعث افزایش مقاومت در برابر ناپایداری کمانشی تحت فشار می‌شود. بررسی تاثیر شعاع نانوتیوب در افزایش مقاومت کمانشی نانوتیوب‌ها به خاطر حضور زنجیره‌ی کربنی در تکمیل بحث حائز اهمیت است.

در شکل ۴-۶، درصد افزایش فشار بحرانی نانوتیوب‌های میزان (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) در اثر محبوس شدن زنجیره‌ی کربنی در هر نانوتیوب، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۴-۶: درصد افزایش فشار بحرانی نانوتیوب‌های میزبان (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) در اثر محبوس شدن زنجیره‌ی کربنی در هر نانوتیوب، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

مطابق نتایج شکل ۴-۶ در نانوسیم‌های شعاع کوچکتر، تاثیر حضور زنجیره‌ی کربنی محبوس در نانوتیوب بر افزایش مقاومت کمانشی نانوتیوب بیشتر می‌باشد. تاثیر دافعه‌ی قوی بین زنجیره و نانوتیوب زنجیره‌ی کربنی در نانوسیم Cchain@(5,5) به خاطر شعاع کوچکتر (5) از سایر نانوسیم‌ها بیشتر است. با مقایسه‌ی نتایج به دست آمده درصد افزایش فشار بحرانی نانوتیوب‌های میزبان در اثر محبوس شدن زنجیره‌ی کربنی نانوسیم‌ها، در شکل ۴-۶ با مقادیر منتج از شبیه‌سازی MD در مقاله‌ی [۳۴]، متوجه می‌شویم، درصد افزایش فشار بحرانی به‌ازای پارامتر ابعاد کوچک η در بازه‌ی $0.3\text{--}0.35\text{ nm}$ ، به مقادیر گزارش شده در [۳۴] نزدیک می‌باشد. در جدول ۴-۶، درصد افزایش فشار بحرانی گزارش شده‌ی مربوط به نانوسیم‌های مورد بحث به روش MD در [۳۴] همراه با نتایج مدل پوسته‌ی غیرموضعی در شکل ۶-۴ به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.3\text{ nm}$ و $\eta = 0.35\text{ nm}$ ارائه شده است و همچنین η -ای که در آن نزدیک‌ترین نتیجه در مقایسه با MD حاصل می‌شود، تعیین شده است.

جدول ۶-۴: درصد افزایش فشار بحرانی مربوط به نانوسيمها به روش MD و مدل پوسته‌ی غیرموضعی

نانوتيوب ميزيبان	درصد افزایش فشار بحرانی (%)			۷-۱) انطباق نتایج پوسته غیرموضعی و MD
	MD	پوسته‌ی غیرموضعی	پوسته‌ی غیرموضعی	
	[34]	$\eta = 0.3 \text{ nm}$	$\eta = 0.35 \text{ nm}$	
(5,5)	157	149	191.4	0.31 nm
(7,3)	83.8	84.4	108.5	0.3 nm
(9,0)	66.9	70.5	90.6	0.29 nm
(8,2)	60.9	48.1	61.7	0.35 nm

همانطور که از جدول ۶-۴ می‌بینیم، درصد افزایش فشار بحرانی نانوتيوب‌ها به‌ازای پارامتر ابعاد کوچک

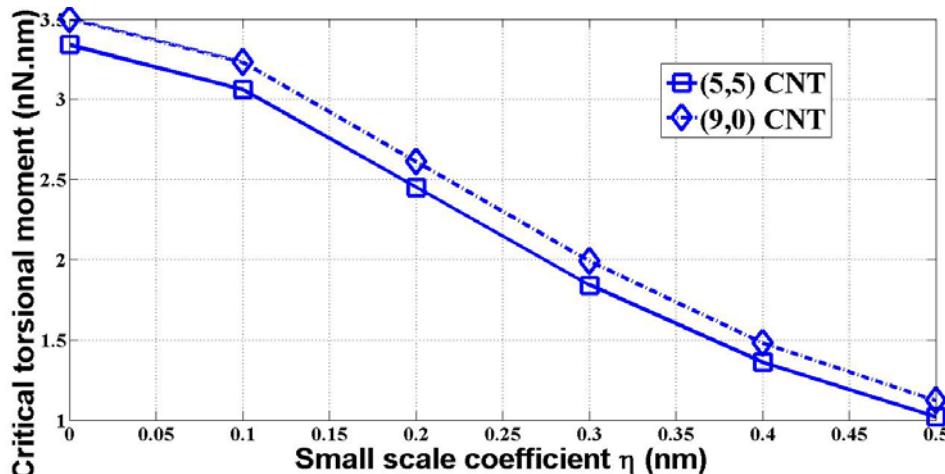
$\eta = 0.3 \text{ nm}$ ، با مقادیر گزارش شده در [۳۴] با تقریب خوبی مطابقت دارد.

هر چند با توجه به مثال بالا، تعیین ۷-۱) که در تمام موارد بین نتایج مدل کانتینیومی پوسته‌ی غیرموضعی و شبیه‌سازی MD تطابق ایجاد کند، عملی نمی‌باشد، ولی در این مورد با مقدار ۷ در بازه‌ی ۰.۱۵ – ۰.۲۵ nm اختلاف بین نتایج دو مدل قابل چشم‌پوشی است. با صرف‌نظر کردن از اختلافات جزئی نتایج، می‌بینیم که هر دو مدل MD و پوسته‌ی غیرموضعی به این نتیجه‌ی مشترک می‌رسند که حضور زنجیره‌ی کربنی محبوس داخل نانوتيوب‌های (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) باعث افزایش مقاومت در مقابل کمانش تحت فشار می‌شود. این افزایش مقاومت، در نانوسيم Cchain@(5,5) به خاطر نزدیک‌تر بودن زنجیره‌ی کربنی به اتم‌های کربن دیواره‌ی درونی نانوتيوب و در نتیجه، قوی‌تر بودن دافعه‌ی بین زنجیره و نانوتيوب بیشتر است. مشاهدات و پیش‌بینی‌های کیفی مدل پوسته‌ی غیرموضعی در اغلب موارد با پیش‌بینی‌های MD سازگاری خوبی نشان می‌دهد و این مطابقت‌ها کارآمدی مدل‌های کانتینیومی پوسته بالاخص غیرموضعی را در مدل‌سازی و آنالیز رفتارهای کمانشی نانوتيوب و نانوساختارهای هیبریدی نانوتيوب نشان می‌دهد.

۶-۳-۲: کمانش نانوسیم تک لایه تحت تورک پیچشی

در اینجا، ناپایداری پیچشی دو نانوسیم‌های تک لایه را که از هیبرید نانوتیوب‌های (5,5) و (9,0) با زنجیره‌ی کربنی محبوس در میان آنها تشکیل شده، با استفاده از مدل پوسته‌ی غیرموضعی مطالعه می‌کنیم. نانوسیم‌های مذکور قبلاً به روش شبیه‌سازی MD در مقاله‌ی [۳۵] بررسی شده است. طول تمام نانوسیم‌ها $L = 5\text{ nm}$ می‌باشد [۳۵]. مقادیر پارامترهایی که در تحلیل‌های عددی پیش رو به کار رفته‌اند بر اساس مقاله‌ی [۳۴] مطابق جدول ۱-۶ می‌باشند.

با قراردادن $c_0 = 0$ و $p_{01}^0 = 0$ در معادله‌ی (۴۲.۶) می‌توان تورک بحرانی نانوتیوب خالی را در غیاب زنجیره‌ی کربنی به دست آورد. در شکل ۶-۵، مقادیر تورک پیچشی بحرانی که منجر به کمانش پیچشی نانوتیوب‌های خالی (5,5) و (9,0) می‌شود، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



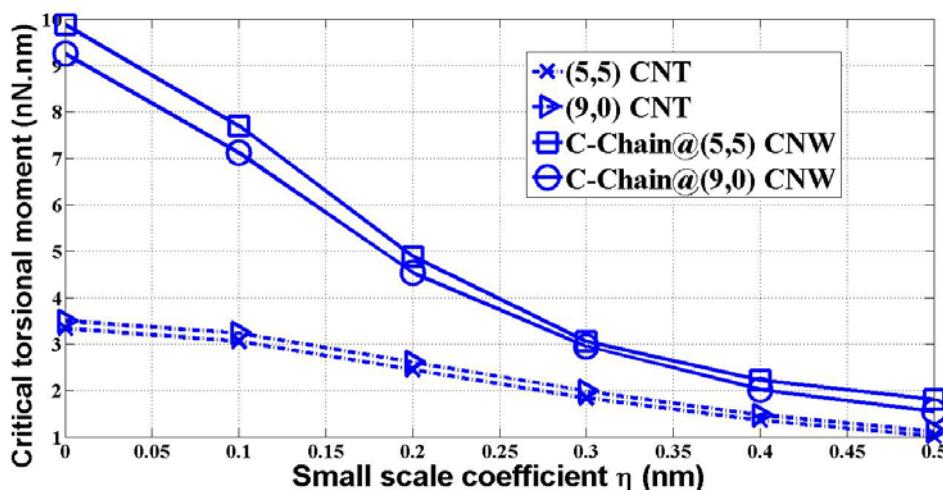
شکل ۶-۵: تورک پیچشی بحرانی نانوتیوب‌های خالی (5,5) و (9,0) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

همانطور که از شکل ۶-۵ مشاهده می‌شود، اختلاف چندانی بین مقادیر تورک بحرانی دو نانوتیوب (5,5) و (9,0) که شعاع نزدیک به هم دارند، دیده نمی‌شود. با مقایسه‌ی نتایج به دست آمده اندازه‌ی تورک بحرانی مربوط به اولین مود کمانشی نانوتیوب‌ها در شکل ۶-۵ با مقادیر منتج از شبیه‌سازی MD در مقاله‌ی [۳۵]، متوجه می‌شویم، که مقدار تورک بحرانی نانوتیوب‌ها به ازای تمام مقادیر پارامتر ابعاد

کوچک ۷، از مقادیر گزارش شده در [۳۵] کمتر می‌باشد. در این مقاله مقدار تورک بحرانی مربوط به اولین کمانش دو نانوتیوب (5,5) و (9,0) به روش MD برابر $8.36 \text{ nN} \cdot \text{nm}$ است. در آنالیزهای MD، انتخاب نوع توابع پتانسیل، روش الگوریتم استفاده شده برای کدنویسی و تعداد گام‌های شبیه‌سازی MD به شدت روی مقادیر کمی نتایج آنالیز تاثیر می‌گذارد، هر چند مرتبه‌ی نتایج عوض نمی‌شود. به خاطر این نکته در ارزیابی و تطابقت‌های نتایج دو مدل در مقالات نانو، معمولاً به حفظ محدوده و مرتبه‌ی نتایج بستنده می‌شود.

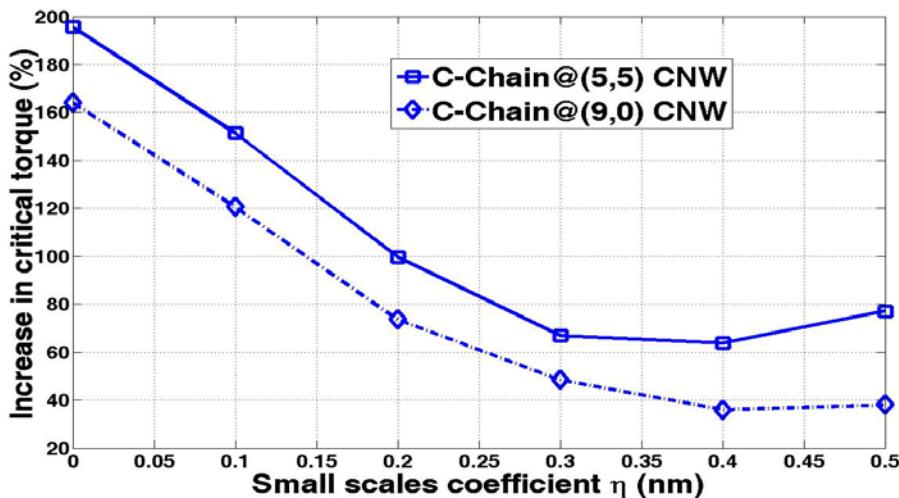
اختلاف مشاهده شده بین مقادیر تورک بحرانی مدل پوسته‌ی غیرموضعی و MD از کارآمدی مدل پوسته‌ی غیرموضعی نمی‌کاهد. چون همانطور که می‌بینیم نتایج شکل ۶-۵ از مرتبه‌ی ۱ $\text{nN} \cdot \text{nm}$ هستند که هم مرتبه با $8.36 \text{ nN} \cdot \text{nm}$ ، تورک بحرانی گزارش شده اولین کمانش دو نانوتیوب (5,5) و (9,0) به روش MD است [۳۵].

در ادامه، به بررسی تاثیر حضور زنجیره‌ی کربنی محبوس داخل نانوتیوب‌های (5,5) و (9,0) بر کمانش پیچشی نانوتیوب‌های می‌پردازم. با قراردادن c_0 و p_{01}^0 از جدول ۱-۶ در معادله‌ی (۴۲.۶)، می‌توانیم تورک بحرانی نانوسیم‌ها را به دست آوریم. در شکل ۶-۶، تورک بحرانی نانوتیوب‌های میزبان (5,5) و (9,0) به همراه تورک بحرانی نانوسیم متناظر، به ازای پارامتر ابعاد کوچک ۷ ارائه شده است.



شکل ۶-۶: تورک بحرانی نانوتیوب‌های (5,5) و (9,0) به همراه تورک بحرانی نانوسیم متناظر، به ازای پارامتر ابعاد کوچک ۷.

مطابق نتایج شکل ۶-۶، مشاهده می‌شود که تورک بحرانی در نانوسیم Cchain@(5,5) به خاطر شعاع کوچکتر (5,5) و قوی‌تر بودن دافعه‌ی بین زنجیره و نانوتیوب، از تورک بحرانی نانوسیم Cchain@(9,0) بیشتر است. مقدار تورک بحرانی گزارش شده به روش MD، مقدار 11.83 nN.nm برای نانوسیم Cchain@(5,5) و مقدار 10.80 nN.nm برای نانوسیم Cchain@(9,0) می‌باشد [۳۵]. هر چند مقادیر گزارش شده برای تورک بحرانی بیشتر از مقدادیر منتج از مدل کانتینیومی پوسته‌ی غیرموضعی در شکل ۶-۶ می‌باشد، اما این اختلاف برای مقادیر کوچک η بسیار ناچیز می‌باشد. برای تکمیل بحث، درصد افزایش تورک بحرانی نانوتیوب‌های میزان (5,5) و (9,0) در اثر محبوس شدن زنجیره‌ی کربنی در هر نانوتیوب، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η در شکل ۷-۶ ارائه شده است.

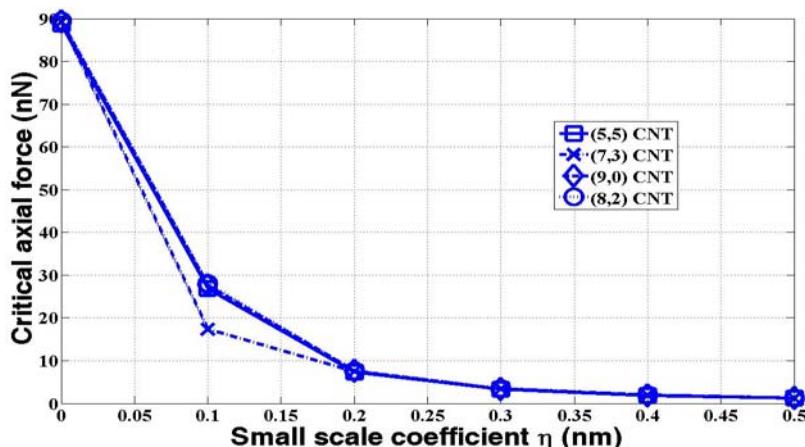


شکل ۷-۶: درصد افزایش تورک بحرانی نانوتیوب‌های میزان (5,5) و (9,0) در اثر محبوس شدن زنجیره‌ی کربنی در هر نانوتیوب، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

مقدار درصد افزایش تورک بحرانی گزارش شده به روش MD، معادل ۴۱.۵% برای نانوسیم Cchain@(5,5) و ۲۹.۲% برای نانوسیم Cchain@(9,0) می‌باشد [۳۵]. با مقایسه‌ی نتایج مدل پوسته‌ی غیرموضعی در شکل ۷-۶ با نتایج MD، می‌بینیم، هر دو روش به این نتیجه‌ی مشترک می‌رسند که حضور زنجیره‌ی کربنی محبوس داخل نانوتیوب‌های (5,5) و (9,0) باعث افزایش مقاومت در مقابل ناپایداری پیچشی می‌شود. این افزایش مقاومت، در نانوسیم Cchain@(5,5) به خاطر قوی‌تر بودن دافعه‌ی وان در والس بین زنجیره و نانوتیوب می‌باشد [۳۵].

۳-۳: کمانش نانوسیم تک لایه تحت نیروی محوری

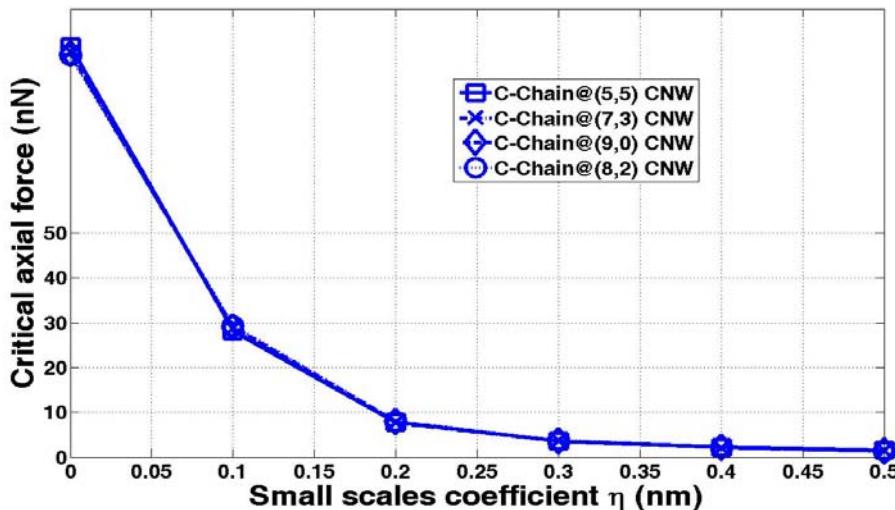
در اینجا، ناپایداری کمانشی نانوسیم‌های تک لایه تحت نیروی محوری که هر کدام از هیبرید نانوتیوب‌های (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) به عنوان میزبان با زنجیره‌ی کربنی محبوس در میان آنها تشکیل شده، با استفاده از مدل پوسته‌ی غیرموضعی مطالعه می‌کنیم. هر چند گزارشی از کمانش محوری نانوسیم‌های مذکور تا این زمان در دبیره موجود نیست، بررسی تاثیر حضور زنجیره‌ی کربنی بر کمانش نانوتیوب به صورت تئوری می‌تواند در تکمیل بحث جاری مفید باشد. طول تمام نانوسیم‌ها $L = 1\text{ nm}$ می‌باشد [۳۴]. مقادیر پارامترهایی که در تحلیل‌های عددی پیش رو به کار رفته‌اند مطابق جدول ۱-۶ می‌باشد. با قراردادن $c_0 = 0$ و $p_{01}^0 = 0$ در معادله‌ی (۵۹.۶)، می‌توان نیروی محوری بحرانی نانوتیوب را در غیاب زنجیره‌ی کربنی به دست آورد. در شکل ۶-۸، نیروی محوری بحرانی که منجر به کمانش نانوتیوب‌های خالی (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) می‌شود، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۶-۸: نیروی محوری بحرانی نانوتیوب‌های خالی (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

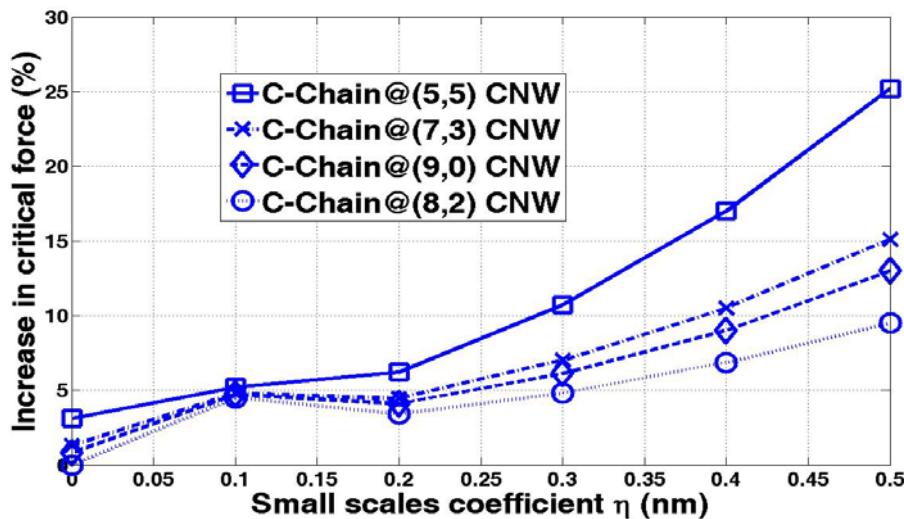
همانطور که از شکل ۶-۸ مشاهده می‌شود، از آنجا که اختلاف شعاع بین نانوتیوب‌ها ناچیز است، اختلاف مشهودی در اندازه‌ی نیروی محوری بحرانی نانوتیوب‌ها مشاهده نمی‌شود. در ادامه، می‌خواهیم تاثیر حضور زنجیره‌ی کربنی محبوس داخل نانوتیوب‌های (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) را بر کمانش نانوتیوب‌های مورد بحث بررسی کنیم. با قراردادن c_0 و p_{01}^0 از جدول ۱-۶ در

معادله‌ی (۵۹.۶)، می‌توان نیروی محوری بحرانی نانوسیم‌ها را به دست آورد. در شکل ۹-۶، نیروی محوری بحرانی که منجر به کمانش نانوسیم‌ها (نانوتیوب‌های میزبان (۵,۵)، (۷,۳)، (۹,۰) و (۸,۲) هیبرید با زنجیره‌ی کربنی) می‌شود، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۹-۶: نیروی محوری بحرانی نانوسیم‌ها (نانوتیوب‌های میزبان (۵,۵)، (۷,۳)، (۹,۰) و (۸,۲) هیبرید با زنجیره‌ی کربنی) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

بر خلاف نتایج حاصله برای کمانش نانوسیم‌ها تحت فشار خارجی در شکل ۳-۶ و تحت تورک بحرانی در شکل ۶-۶، مطابق نتایج شکل ۹-۶، اختلاف مشهودی در مقدار نیروی محوری بحرانی نانوسیم‌ها دیده نمی‌شود. همچنین، افزایش در مقدار نیروی محوری بحرانی نانوسیم‌ها در مقایسه با نانوتیوب در غیاب زنجیره‌ی کربنی بسیار ناچیز می‌باشد. در شکل ۱۰-۶، درصد افزایش نیروی محوری بحرانی نانوتیوب‌های میزبان (۵,۵)، (۷,۳)، (۹,۰) و (۸,۲) در اثر محبوس شدن زنجیره‌ی کربنی در هر نانوتیوب، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۶: درصد افزایش نیروی محوری بحرانی نانوتیوب‌های میزبان (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) در اثر محبوس شدن زنجیره‌ی کربنی در هر نانوتیوب، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

در اثر محبوس شدن زنجیره‌ی کربنی درون نانوتیوب‌های (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) و تشکیل سیستم هیبریدی نانوسیم، افزایش در نیروی محوری بحرانی نانوتیوب‌ها مطابق نتایج شکل ۱۰-۶ مشاهده می‌شود. این افزایش مقاومت پیش‌بینی شده در مقابل ناپایداری کمانشی محوری قبل از هم در بخش‌های پیشین در مورد کمانش تحت فشار نانوسیم در بخش ۱-۳-۶ و کمانش تحت تورک پیچشی نانوسیم در بخش ۲-۳-۶ گزارش شده است، که مطابقت کامل با نتایج شبیه‌سازی MD دارد [۳۴، ۳۵]. همچنان مانند مثال‌های پیشین، افزایش مقاومت در نانوسیم Cchain@(5,5) به خاطر قوی‌تر بودن دافعه‌ی وان در والس بین زنجیره و نانوتیوب بیشتر دیده می‌شود. با توجه به بحث‌های بخش‌های ۱-۳-۶ و ۲-۳-۶، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η در بازه‌ی $0.2 \pm 0.05 \text{ nm}$ می‌توان تقریب اولیه‌ی خوبی برای مقدار نیروی محوری نانوتیوب‌ها و ساختار هیبریدی نانوسیم‌ها به دست آوریم.

فصل هفتم: تحلیل ناپایداری ساختار هیبریدی نانوتیوب و DNA

در این فصل، پس از ارائهٔ معادلات حاکم بر پایداری نانوساختار هیبریدی DNA و نانوتیوب بر اساس مدل‌های کانتینیومی غیرموضعی ارائه شده در فصل چهارم، کمانش نانوساختار هیبریدی را تحت بارگذاری‌های مختلف بررسی می‌کنیم.

۷-۱: معادلات حاکم بر پایداری نانوساختار هیبریدی نانوتیوب و DNA

نانوساختار هیبریدی DNA محبوس در میان یک نانوتیوب تکلایه به طول L را در نظر می‌گیریم. شعاع نانوتیوب را با R_l ، جابه‌جایی شعاعی با w_l و ضخامت آن را با h نشان می‌دهیم. دستگاه مختصات استوانه‌ای (x, θ, r) را که در آن، x مختصهٔ محوری نانوتیوب، θ مختصهٔ محیطی و r مختصهٔ شعاعی می‌باشد را در نظر می‌گیریم. همچنین، تغییر شکل DNA را با بردار جابه‌جایی (u_d, v_d, w_d) نشان می‌دهیم، که در آن u_d ، مولفهٔ جابه‌جایی طولی در جهت x ، v_d و w_d به ترتیب در جهات عرضی y و z می‌باشد. برای مدلسازی فشار معادل اندرکنش وان در والس واردہ بر نانوتیوب p_1 از سوی DNA از مدل توزیع فشاری که در معادلهٔ (۳.۳.۳) فصل ۳ ارائه شده است، استفاده می‌کنیم:

$$p_1 = p_{d1}^0 - c_d [w_l(x, \theta) - v_0(x) \cos(\theta) - w_0(x) \sin(\theta)], \quad (1.7)$$

که در آن، p_{d1}^0 فشار داخلی اولیهٔ واردہ از سمت DNA محبوس به دیوارهٔ نانوتیوب و c_d ضریب فشار وان در والس بین DNA و نانوتیوب می‌باشد. نیروی واردہ از سمت نانوتیوب بر DNA در نقطه x یعنی، \mathbf{f} که در معادلهٔ (۳.۳.۶) آمده است، به صورت زیر می‌باشد:

$$\begin{aligned} f_y(x) &= R_l c_d \int_0^{2\pi} w_l(x, \theta) \cos(\theta) d\theta - \pi R_l c_d v_d(x), \\ f_z(x) &= R_l c_d \int_0^{2\pi} w_l(x, \theta) \sin(\theta) d\theta - \pi R_l c_d w_d(x). \end{aligned} \quad (2.7)$$

همانطور که در فصل اول ذکر شد، استفاده از مدل‌های میله‌ی کشسان برای مدلسازی رفتار مکانیکی DNA بسیار متداول می‌باشد، بنابراین را با یک میله‌ی کشسان استوانه‌ای با مقطع دایره‌ی توپر به طول L و شعاع R_d مدل می‌کنیم. در اینجا از مدل کانتینیومی غیرموضعی میله‌ی کشسان که در فصل ۴ ارائه نمودیم، برای مدلسازی DNA استفاده می‌کنیم. رابطه‌ی حاکم بر تعادل DNA با توجه به معادله‌ی (۳۹.۴) بدین ترتیب ارائه می‌شود:

$$\begin{aligned} -E_d I_{zz} \frac{d^4 v_d}{dx^4} + F \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \frac{d^2 v_d}{dx^2} + \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] f_y &= 0, \\ -E_d I_{yy} \frac{d^4 w_d}{dx^4} + F \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \frac{d^2 w_d}{dx^2} + \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] f_z &= 0. \end{aligned} \quad (۳.۷)$$

که در آن، F نیروی محوری واردہ بر DNA، E_d مدول یانگ و $I_{zz} = I_{yy} = \pi R_d^4 / 64$ ممان اینرسی مقطع دایره‌ای DNA حول محور y و z می‌باشد. با جایگذاری معادله‌ی (۲.۷) در (۳.۷) روابط حاکم بر تعادل DNA درون نانوتیوب، به صورت معادلات زیر ارائه می‌شود:

$$\begin{aligned} -E_d I_{zz} \frac{d^4 v_d}{dx^4} + F \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \frac{d^2 v_d}{dx^2} + \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ R_l c_d \int_0^{2\pi} w_l(x, \theta) \cos(\theta) d\theta - \pi R_l c_d v_d(x) \right\} &= 0, \\ -E_d I_{yy} \frac{d^4 w_d}{dx^4} + F \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \frac{d^2 w_d}{dx^2} + \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ R_l c_d \int_0^{2\pi} w_l(x, \theta) \cos(\theta) d\theta - \pi R_l c_d w_d(x) \right\} &= 0. \end{aligned} \quad (۴.۷)$$

رابطه‌ی حاکم بر تعادل نانوتیوب کربنی با استفاده از معادله‌ی (۵۶.۴) به این صورت، ارائه می‌شود:

$$D \nabla^8 w_l + \frac{Eh}{R_l^2} \frac{\partial^4 w_l}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_l [w_l] - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 p_l = 0. \quad (۵.۷)$$

که در آن، D مقاومت موثر خمثی و E مدول یانگ نانوتیوب است. همچنین عملگر ∇^4 در معادله‌ی (۵.۷) که در معادله‌ی (۵۹.۴) تعریف شده، بدین ترتیب تعیین می‌شود:

$$\psi_1 = N_{x1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2N_{x\theta 1} \frac{1}{R_1} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} + N_{\theta 1} \frac{1}{R_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (6.7)$$

که در آن، N_{x1} ، $N_{\theta 1}$ و $N_{x\theta 1}$ نیروهای معادل محوری، برشی و محیطی در نانوتیوب می‌باشند. با جایگذاری رابطه‌ی توزیع فشار واردہ بر نانوتیوب، یعنی معادله‌ی (۱.۷) در (۵.۷)، رابطه‌ی حاکم بر تعادل نانوتیوب کربنی در حضور DNA به دست می‌آید:

$$D \nabla^8 w_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4 w_1}{\partial x^4} - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_1 [w_1] + (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c_d [w_1 - v_d(x) \cos(\theta) - w_d(x) \sin(\theta)] = 0, \quad (7.7)$$

معادلات حاکم بر تعادل DNA محبوس و نانوتیوب کربنی، مطابق معادلات (۴.۷) و (۷.۷) به خاطر اندرکنش وان در والس متقابل DNA و نانوتیوب، با همدیگر مزدوج (کوپل) می‌باشند.

در اینجا باید نوع وابستگی متغیرهای مزدوج مربوط به میدان جابه‌جایی DNA و نانوتیوب کربنی در معادلات (۴.۷) و (۷.۷) یعنی، مولفه‌های (v_d, w_d) مربوط به جابه‌جایی عرضی DNA و جابه‌جایی شعاعی نانوتیوب w_1 مشخص شود. به DNA محبوس داخل نانوتیوب به جز نیروهای گستردگی اندرکنش وان در والس، (f_y, f_z)، نیروی دیگری وارد نمی‌شود. بنابراین نیروی محوری ثابت در DNA می‌باشد که با جایگذاری این نیرو در معادله‌ی (۴.۷) نتیجه می‌دهد:

$$\left[E_d I_{zz} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_1 c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_1 c_d \right] v_d = R_1 c_d \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ \int_0^{2\pi} w_1(x, \theta) \cos(\theta) d\theta \right\},$$

$$\left[E_d I_{yy} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_1 c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_1 c_d \right] w_d = R_1 c_d \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ \int_0^{2\pi} w_1(x, \theta) \sin(\theta) d\theta \right\}. \quad (8.7)$$

این وابستگی به خاطر اندرکنش وان در والس DNA و لایه‌ی نانوتیوب در معادلات فشار واردہ بر نانوتیوب (۱.۷) و نیروی واردہ بر DNA در رابطه‌ی (۲.۷) به وجود می‌آید.

فرض می‌کنیم، جواب معادلات (۷.۷) و (۸.۷) برای $w_1(x, \theta)$ ، جابه‌جایی لایه‌ی اول نانوتیوب به صورت سری فوریه زیر باشد:

$$w_1(x, \theta) = \sum_{m,n} a_{mn} \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \cos(n\theta) + \sum_{m,n} b_{mn} \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin(n\theta) \\ + \sum_{m,n} c_{mn} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \cos(n\theta) + \sum_{m,n} d_{mn} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \sin(n\theta), \quad (9.7)$$

که در آن، m و n دو عدد صحیح، بیانگر عدد موجی طولی و نیم-موجی محیطی می‌باشند، همچنین، $w_1(x, \theta)$ ضرایب سری فوریه مرتبه d_{mn} ، c_{mn} ، b_{mn} و a_{mn} باشند. با جایگذاری سری فوریه مرتبه (v_d, w_d) بر حسب معادله‌ی (9.7) در (8.7) معادلات حاکم بر مولفه‌های جابه‌جایی عرضی DNA (یعنی v_d, w_d) بر حسب جواب پیشنهادی (9.7) به صورت زیر حاصل می‌شود:

$$\left[E_d I_{zz} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_1 c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_1 c_d \right] v_d = \pi R_1 c_d \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ \sum_m a_{m1} \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) + \sum_m c_{m1} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \right\}, \quad (10.7)$$

$$\left[E_d I_{yy} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_1 c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_1 c_d \right] w_d = \pi R_1 c_d \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ \sum_m b_{m1} \cos\left(\frac{m\pi x}{L}\right) + \sum_m d_{m1} \sin\left(\frac{m\pi x}{L}\right) \right\}.$$

با توجه به معادلات (7.7) و (10.7) مشخص می‌شود که متغیرهای (v_d, w_d) مرتبه جابه‌جایی DNA زنجیره و جابه‌جایی شعاعی لایه‌ی اول نانوتیوب $w_1(x, \theta)$ ، فقط در ترم‌های محیطی $n=1$ مزدوج می‌باشند. در ترم‌های محیطی $n \neq 1$ با جایگذاری جواب پیشنهادی (9.7) برای w_1 در (8.7) داریم:

$$\left[E_d I_{zz} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_1 c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_1 c_d \right] v_d = 0, \quad (11.7)$$

$$\left[E_d I_{yy} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_1 c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_1 c_d \right] w_d = 0.$$

مشاهده می‌شود که در ترم‌های محیطی $n \neq 1$ نانوتیوب مرتبه جواب فرضی w_1 ، معادلات به دست آمده برای متغیرهای (v_d, w_d) جابه‌جایی عرضی DNA مستقل از w_1 می‌باشند. بنابراین، در بررسی کمانش نانوساختار هیبریدی DNA و نانوتیوب، روابط حاکم بر تعادل DNA و نانوتیوب، فقط در مود

محیطی $n=1$ نانوتیوب کوپل می‌باشد و در مودهای محیطی $1 \neq n$ نانوتیوب، معادله‌ی (۱۱.۷) صرفاً به عنوان یک جابه‌جایی ثابت در معادله‌ی (۷.۷) ظاهر می‌شود.

۷-۲: کمانش نانوساختار هیبریدی نانوتیوب و DNA

در شرایطی که تعادل پایداری بر سازه حاکم است، اگر تغییر شکلی که موجود است، در محدوده‌ی پایداری سیستم با یک جابه‌جایی کوچک اغتشاش یابد، این اغتشاش افزوده در سیستم میرا می‌شود. در مرز ناپایداری سیستم (مرز کمانش)، جابه‌جایی اغتشاشی، سیستم را به سمت ناپایداری بیشتر برده و کمانش رخ خواهد داد. در صورتی که توابع w_d ، v_d و \tilde{v}_d جابه‌جایی نانوساختار هیبریدی در شرایط تعادل باشند و w_1 ، \tilde{w}_1 اغتشاش‌های وارد بر DNA در محدوده‌ی پایداری سیستم باشند، توابع $w_d + w_1$ ، $v_d + \tilde{v}_d$ و \tilde{v}_d در معادلات حاکم بر پایداری نانوساختار هیبریدی، معادلات (۷.۷) و (۸.۷) صدق می‌کنند. با جایگذاری توابع اغتشاش یافته در معادلات (۷.۷) و (۸.۷) داریم:

$$\begin{aligned} & \left[E_d I_{zz} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_1 c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_1 c_d \right] (v_d + \tilde{v}_d) = \\ & R_1 c_d \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ \int_0^{2\pi} (w_1 + \tilde{w}_1) \cos(\theta) d\theta \right\}, \end{aligned} \quad (12.7)$$

$$\begin{aligned} & \left[E_d I_{yy} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_1 c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_1 c_d \right] (w_d + \tilde{w}_d) = \\ & R_1 c_d \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ \int_0^{2\pi} (w_1 + \tilde{w}_1) \sin(\theta) d\theta \right\}, \end{aligned} \quad (12.7)$$

$$\begin{aligned} & D \nabla^8 (w_1 + \tilde{w}_1) + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4}{\partial x^4} (w_1 + \tilde{w}_1) - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_1 [w_1 + \tilde{w}_1] \\ & + (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c_d [(w_1 + \tilde{w}_1) - (v_d + \tilde{v}_d) \cos(\theta) - (w_d + \tilde{w}_d) \sin(\theta)] = 0. \end{aligned}$$

با کم کردن معادلات (۷.۷) و (۸.۷) از دسته معادله‌ی (۱۲.۷) روابط حاکم بر توابع اغتشاشی کوچک وارد بر نانوساختار هیبریدی به صورت زیر می‌رسیم:

$$\begin{aligned} \left[E_d I_{zz} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_l c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_l c_d \right] \tilde{v}_d &= R_l c_d \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ \int_0^{2\pi} \tilde{w}_1 \cos(\theta) d\theta \right\}, \\ \left[E_d I_{yy} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_l c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_l c_d \right] \tilde{w}_d &= R_l c_d \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ \int_0^{2\pi} \tilde{w}_1 \sin(\theta) d\theta \right\}, \end{aligned} \quad (13.7)$$

$$\begin{aligned} D \nabla^8 \tilde{w}_1 + \frac{Eh}{R_l^2} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \tilde{w}_1 - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_1 [\tilde{w}_1] \\ + (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c_d [\tilde{w}_1 - \tilde{v}_d \cos(\theta) - \tilde{w}_d \sin(\theta)] = 0. \end{aligned}$$

با توجه به معادلات (11.7) و (13.7) برای مودهای محیطی $n \neq 1$ نانوتیوب، روابط حاکم بر \tilde{v}_d و \tilde{w}_d به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \left[E_d I_{zz} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_l c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_l c_d \right] \tilde{v}_d &= 0, \\ \left[E_d I_{yy} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_l c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_l c_d \right] \tilde{w}_d &= 0. \end{aligned} \quad (14.7)$$

در ادامه، توابع اغتشاشی مناسب برای \tilde{v}_d و \tilde{w}_d به صورت زیر پیشنهاد می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \tilde{v}_d &= \tilde{V}_d \sin(\alpha x), \\ \tilde{w}_d &= \tilde{W}_d \sin(\alpha x), \end{aligned} \quad (15.7)$$

که در آن، $\alpha = m\pi / L$ است، \tilde{V}_d و \tilde{W}_d دامنه‌های کوچک توابع اغتشاشی هستند. با جایگذاری توابع اغتشاشی پیشنهادی در معادله (14.7) خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \left[E_d I_{zz} \alpha^4 + \pi R_l c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_l c_d \right] \tilde{V}_d \sin(\alpha x) &= 0, \\ \left[E_d I_{yy} \alpha^4 + \pi R_l c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_l c_d \right] \tilde{W}_d \sin(\alpha x) &= 0. \end{aligned} \quad (16.7)$$

از آنجا که به ازای تمام مقادیر α در معادله (16.7) داریم:

$$\begin{aligned} \left(E_d I_{zz} \alpha^4 + \pi R_l c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_l c_d \right) &> 0, \\ \left(E_d I_{yy} \alpha^4 + \pi R_l c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_l c_d \right) &> 0, \end{aligned} \quad (17.7)$$

بنابراین برای اینکه معادله (16.7) برقرار باشد، باید داشته باشیم:

$$\tilde{V}_d = \tilde{W}_d = 0, \quad (18.7)$$

در نتیجه، با توجه به روابط (۱۵.۷) و (۱۸.۷) در مورد توابع اغتشاشی \tilde{v}_d و \tilde{w}_d برای مودهای محیطی در نتیجه، با جایگذاری رابطه‌ی (۱۹.۷) در (۱۳.۷) برای مودهای محیطی $n \neq 1$ ، معادله‌ی حاکم بر تعادل نانوتیوب داریم:

$$\tilde{v}_d = \tilde{w}_d = 0. \quad (19.7)$$

بنابراین، با جایگذاری رابطه‌ی (۱۹.۷) در (۱۳.۷) برای مودهای محیطی $n \neq 1$ ، معادله‌ی حاکم بر تعادل نانوتیوب در نanosاختار هیبریدی به این صورت ارائه می‌گردد:

$$D \nabla^8 \tilde{w}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \tilde{w}_1 - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \psi_1 [\tilde{w}_1] + (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c_d \tilde{w}_1 = 0. \quad (20.7)$$

با در دست داشتن معادلات (۱۳.۷) و (۲۰.۷) می‌توانیم کمانش نanosاختار هیبریدی را برای تمام مودهای کمانشی در بارگذاری‌های مختلف مطالعه کنیم.

۷-۲-۱: ناپایداری DNA@CNT تحت فشار خارجی

در صورتی که نanosاختار هیبریدی تحت فشار خارجی شعاعی p_{ext} قرار گیرد، این فشار فقط به لایه‌ی بیرونی نانوتیوب وارد می‌شود. در این حالت، نیروی معادل تنش محوری، N_{x1} و نیروی معادل تنش پیچشی، $N_{x\theta 1}$ وجود ندارند. به خاطر فشار خارجی و فشار اولیه‌ی وان در والس DNA محبوس، فقط تنش محیطی در نانوتیوب ایجاد می‌شود. بنابراین، نیروهای واحد طول معادل نانوتیوب در اثر اعمال فشار خارجی عبارت است از:

$$N_{x1} = 0, \\ N_{x\theta 1} = 0, \quad (21.7)$$

$N_{\theta 1} = R_1 (-p_{ext} + p_{d1}^0).$ با جایگذاری معادله‌ی (۲۱.۷) در (۲۱.۶)، عملگر ψ_1 به این صورت بدست می‌آید:

$$\psi_1 = R_1 (-p_{ext} + p_{d1}^0) \frac{1}{R_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (22.7)$$

با جایگذاری عملگر \mathcal{L} از معادله (۲۲.۷) در معادلات (۱۳.۷) و (۲۰.۷) به روابط حاکم بر تعادل نانوساختار هیبریدی تحت فشار خارجی می‌رسیم. برای مود کمانشی محیطی $n=1$ که معادلات حاکم بر تعادل DNA و نانوتیوب کوپل هستند، از معادله (۱۳.۷) داریم:

$$\begin{aligned} \left[E_d I_{zz} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_1 c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_1 c_d \right] \tilde{v}_d &= R_1 c_d \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ \int_0^{2\pi} \tilde{w}_1 \cos(\theta) d\theta \right\}, \\ \left[E_d I_{yy} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_1 c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_1 c_d \right] \tilde{w}_d &= R_1 c_d \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ \int_0^{2\pi} \tilde{w}_1 \sin(\theta) d\theta \right\}, \\ D \nabla^8 \tilde{w}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \tilde{w}_1 - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[R_1 (-p_{ext} + p_{d1}^0) \frac{1}{R_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \tilde{w}_1 \\ + (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c_d [\tilde{w}_1 - \tilde{v}_d \cos(\theta) - \tilde{w}_d \sin(\theta)] &= 0. \end{aligned} \quad (۲۳.۷)$$

همچنین برای مودهای محیطی دیگر نانوتیوب، یعنی $n \neq 1$ از معادله (۲۰.۷) داریم:

$$\begin{aligned} D \nabla^8 \tilde{w}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \tilde{w}_1 - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[R_1 (-p_{ext} + p_{d1}^0) \frac{1}{R_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \tilde{w}_1 \\ + (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c_d \tilde{w}_1 = 0. \end{aligned} \quad (۲۴.۷)$$

توابع اغتشاشی مناسبی برای \tilde{w}_1 , \tilde{v}_d و \tilde{w}_d به صورت زیر پیشنهاد می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \tilde{w}_1 &= \tilde{W}_1 \sin(\alpha x) \sin(n\theta), \\ \tilde{v}_d &= \tilde{V}_d \sin(\alpha x), \\ \tilde{w}_d &= \tilde{W}_d \sin(\alpha x), \end{aligned} \quad (۲۵.۷)$$

که در آن، \tilde{W}_d , \tilde{W}_1 و \tilde{V}_d دامنه‌های کوچک توابع اغتشاشی هستند، m و n دو عدد صحیح مثبت، α در معادله (۲۵.۷) و پارامتر بیانگر عدد موجی طولی و نیم‌موجی محیطی می‌باشند. همچنین، α در استفاده از معادله (۲۵.۷) برای این توابع اغتشاشی می‌باشد.

جدید β_1 را برای استفاده در معادلات آتی به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\alpha = \frac{m\pi}{L}, \quad \beta_1 = \frac{n}{R_1}, \quad (۲۶.۷)$$

با جایگذاری توابع اغتشاشی پیشنهادی (۲۵.۷) در (۲۳.۷) برای مود کمانشی محیطی $n=1$ داریم:

$$\begin{aligned}
& \left(E_d I_{zz} \alpha^4 + \pi R_1 c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_1 c_d \right) \tilde{V}_d \sin(\alpha x) = 0, \\
& \left(E_d I_{yy} \alpha^4 + \pi R_1 c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_1 c_d \right) \tilde{W}_d \sin(\alpha x) = \pi R_1 c_d \left(1 + \eta^2 \alpha^2 \right) \tilde{W}_1 \sin(\alpha x) \\
& \left\{ D \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 R_1 \beta_1^2 \left(-p_{ext} + p_{d1}^0 \right) \tilde{W}_1 \right. \\
& \quad \left. + \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 c_d \left(\tilde{W}_1 - \tilde{W}_d \right) \right\} \sin(\alpha x) \sin(\theta) \\
& \quad - \left\{ \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 c_d \right\} \tilde{V}_d \sin(\alpha x) \cos(\theta) = 0.
\end{aligned} \tag{27.7}$$

با توجه به معادله‌ی (17.7) نتیجه می‌شود $\tilde{V}_d = 0$, بنابراین، روابط (27.7) به صورت زیر به دست

می‌آید:

$$\begin{aligned}
& \left(E_d I_{yy} \alpha^4 + \pi R_1 c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_1 c_d \right) \tilde{W}_d \sin(\alpha x) = \pi R_1 c_d \left(1 + \eta^2 \alpha^2 \right) \tilde{W}_1 \sin(\alpha x) \\
& \left\{ D \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 R_1 \beta_1^2 \left(-p_{ext} + p_{d1}^0 \right) \tilde{W}_1 \right. \\
& \quad \left. + \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 c_d \left(\tilde{W}_1 - \tilde{W}_d \right) \right\} \sin(\alpha x) \sin(\theta) = 0.
\end{aligned} \tag{28.7}$$

برای اینکه معادله‌ی (28.7) برای تمام مقادیر $0 \leq \theta \leq 2\pi$ و $0 \leq x \leq L$ صدق کند، باید داشته باشیم:

$$\begin{aligned}
& \left(E_d I_{yy} \alpha^4 + \pi R_1 c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_1 c_d \right) \tilde{W}_d - \pi R_1 c_d \left(1 + \eta^2 \alpha^2 \right) \tilde{W}_1 = 0 \\
& \left\{ D \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 R_1 \beta_1^2 \left(-p_{ext} + p_{d1}^0 \right) \right\} \tilde{W}_1 \\
& \quad + \left\{ \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 c_d \left(\tilde{W}_1 - \tilde{W}_d \right) \right\} = 0.
\end{aligned} \tag{29.7}$$

از معادله‌ی (19.7) می‌دانیم در مودهای کمانشی محیطی $n \neq 1$ معادلات حاکم بر اغتشاشات DNA و

نانوتیوب در نانوساختار هیبریدی دیگر کوپل نیستند و با جایگذاری توابع اغتشاشی (25.7) در (24.7) به

معادله‌ی حاکم بر کمانش نانوتیوب در مودهای محیطی $n \neq 1$ می‌رسیم:

$$\begin{aligned}
& \left\{ D \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 R_1 \beta_1^2 \left(-p_{ext} + p_{d1}^0 \right) \right. \\
& \quad \left. + \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 c_d \right\} \tilde{W}_1 \sin(\alpha x) \sin(\theta) = 0.
\end{aligned} \tag{30.7}$$

برای اینکه معادله‌ی (۳۰.۷) نیز برای تمام مقادیر $0 \leq x \leq L$ و $0 \leq \theta \leq 2\pi$ صدق کند، باید داشته

باشیم:

$$\left\{ D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 R_1 \beta_1^2 (-p_{ext} + p_{d1}^0) + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 c_d \right\} \tilde{W}_1 = 0. \quad (31.7)$$

با مرتب کردن روابط جبری (۲۹.۷) در فرم ماتریسی داریم:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{W}_1 \\ \tilde{W}_d \end{Bmatrix} - p_{ext} \begin{bmatrix} b_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{W}_1 \\ \tilde{W}_d \end{Bmatrix} = 0, \quad (32.7)$$

که در آن، مولفه‌های a_{ij} و b_{11} برای مود محیطی $n=1$ بدین ترتیب تعیین می‌شوند:

$$\begin{aligned} a_{11} &= D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 (R_1 \beta_1^2 p_{d1}^0 + c_d), \\ a_{12} &= -[1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 c_d, \\ a_{21} &= -\pi R_1 c_d (1 + \eta^2 \alpha^2), \\ a_{22} &= E_d I_{yy} \alpha^4 + \pi R_1 c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_1 c_d, \\ b_{11} &= [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 R_1 \beta_1^2. \end{aligned} \quad (33.7)$$

برای داشتن جواب غیر بدیهی در معادله‌ی (۳۲.۷) که معادله‌ی جبری حاکم بر کمانش نانوتیوب در مودهای محیطی $n=1$ است، باید شرط زیر ارضا شود:

$$p_{ext} = \frac{a_{11}}{b_{11}} - \frac{a_{12} a_{21}}{a_{22} b_{11}}, \quad n=1. \quad (34.7)$$

همچنین رابطه‌ی جبری به دست آمده برای مودهای $n \neq 1$ در معادله‌ی (۳۱.۷) به صورت ساده زیر می‌نویسیم:

$$(a_{11} - p_{ext} b_{11}) \tilde{W}_1 = 0, \quad (35.7)$$

که در آن، a_{11} و b_{11} قبله در (۳۳.۷) تعریف شده‌اند. برای داشتن جواب غیر بدیهی در معادله‌ی (۳۵.۷) که رابطه‌ی حاکم بر کمانش در مودهای محیطی $n \neq 1$ است، شرط زیر را داریم:

$$p_{ext} = \frac{a_{11}}{b_{11}}; \quad n \neq 1. \quad (36.7)$$

فشار بحرانی نانوساختار هیبریدی در واقع مقدار کمینه‌ی p_{ext} در معادلات (۳۴.۷) و (۳۶.۷) به ازای تمام مودهای کمانشی (m, n) می‌باشد.

۲-۲-۲: ناپایداری DNA@CNT تحت تورک پیچشی

در مورد نانوساختار هیبریدی که در معرض تورک پیچشی قرار می‌گیرد، فرض می‌کنیم، این گشتاور فقط به نانوتیوب وارد می‌شود. در این حالت، نیروی معادل تنش محوری، N_{x1} وجود ندارند. تنش برشی به خاطر تورک پیچشی و تنش محیطی به خاطر فشار اولیه‌ی اندرکنش وان در والس DNA محبوس، در نانوتیوب ایجاد می‌شود. بنابراین، نیروهای واحد طول معادل نانوتیوب در اثر اعمال تورک پیچشی عبارت است از:

$$N_{x1} = 0,$$

$$N_{x\theta 1} = \frac{T}{2\pi R_1^2} \quad (37.7)$$

$$N_{\theta 1} = R_1 p_{d1}^0.$$

با جایگذاری معادله‌ی (۳۷.۷) در (۶.۷)، عملگر \mathcal{L}_1 به این صورت بدست می‌آید:

$$\psi_1 = 2N_{x\theta 1} \frac{1}{R_1} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} + R_1 p_{d1}^0 \frac{1}{R_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (38.7)$$

با جایگذاری عملگر \mathcal{L}_1 از معادله‌ی (۳۸.۷) در معادلات (۱۳.۷) و (۲۰.۷) به روابط حاکم بر تعادل نانوساختار هیبریدی تحت بارگذاری تورک پیچشی می‌رسیم. برای مود کمانشی محیطی $n=1$ که معادلات حاکم بر تعادل DNA و نانوتیوب کوپل هستند، از معادله‌ی (۱۳.۷) داریم:

$$\left[E_d I_{zz} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_1 c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_1 c_d \right] \tilde{v}_d = R_1 c_d \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ \int_0^{2\pi} \tilde{w}_1 \cos(\theta) d\theta \right\}, \quad (39.7)$$

$$\left[E_d I_{yy} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_l c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_l c_d \right] \tilde{w}_d = R_l c_d \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ \int_0^{2\pi} \tilde{w}_1 \sin(\theta) d\theta \right\},$$

$$D \nabla^8 \tilde{w}_1 + \frac{Eh}{R_l^2} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \tilde{w}_1 - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[2 N_{x\theta l} \frac{1}{R_l} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} + R_l p_{d1}^0 \frac{1}{R_l^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \tilde{w}_1 \\ + (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c_d [\tilde{w}_1 - \tilde{v}_d \cos(\theta) - \tilde{w}_d \sin(\theta)] = 0.$$

همچنین برای مودهای محیطی دیگر نانوتیوب، یعنی $n \neq 1$ از معادله‌ی (۴۰.۷) داریم:

$$D \nabla^8 \tilde{w}_1 + \frac{Eh}{R_l^2} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \tilde{w}_1 - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[2 N_{x\theta l} \frac{1}{R_l} \frac{\partial^2}{\partial x \partial \theta} + R_l p_{d1}^0 \frac{1}{R_l^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \tilde{w}_1 \\ + (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c_d \tilde{w}_1 = 0. \quad (40.7)$$

توابع اغتشاشی مناسبی برای \tilde{w}_1 , \tilde{v}_d و \tilde{w}_d به صورت زیر پیشنهاد می‌کنیم:

$$\tilde{w}_1 = \tilde{W}_1 \sin(\alpha x + n\theta), \quad (41.7)$$

$$\tilde{v}_d = \tilde{V}_d \sin(\alpha x), \quad (41.7)$$

$$\tilde{w}_d = \tilde{W}_d \cos(\alpha x), \quad (41.7)$$

که در آن، \tilde{W}_d و \tilde{V}_d دامنه‌های کوچک توابع اغتشاشی هستند، m و n دو عدد صحیح مثبت،

بیانگر عدد موجی طولی و نیم-موجی محیطی می‌باشند. همچنین، α در معادله‌ی (۴۱.۷) و پارامتر

جدید β_1 را برای استفاده در معادلات آتی به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\alpha = \frac{m\pi}{L}, \quad \beta_1 = \frac{n}{R_l}, \quad (42.7)$$

با جایگذاری توابع اغتشاشی پیشنهادی (۴۱.۷) در (۳۹.۷) برای مود کمانشی محیطی $n = 1$ داریم:

$$(E_d I_{zz} \alpha^4 + \pi R_l c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_l c_d) \tilde{V}_d \sin(\alpha x) = \pi R_l c_d (1 + \eta^2 \alpha^2) \tilde{W}_1 \sin(\alpha x), \quad (43.7)$$

$$(E_d I_{yy} \alpha^4 + \pi R_l c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_l c_d) \tilde{W}_d \cos(\alpha x) = \pi R_l c_d (1 + \eta^2 \alpha^2) \tilde{V}_1 \cos(\alpha x) \quad (44.7)$$

$$\left\{ D (\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_l^2} \alpha^4 + [1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 (-2 N_{xyl} \alpha \beta_1 + p_{d1}^0 R_l \beta_1^2) \right\} \times \\ \tilde{W}_1 \sin(\alpha x + n\theta) + [1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 c_d \times \\ \{ \tilde{W}_1 \sin(\alpha x + n\theta) - \tilde{V}_d \sin(\alpha x) \cos(\theta) - \tilde{W}_d \cos(\alpha x) \sin(\theta) \} = 0. \quad (45.7)$$

با توجه به اینکه معادله‌ی (۴۳.۷) و (۴۴.۷) باید برای تمام مقادیر x ، صدق کنند داریم:

$$(E_d I_{zz} \alpha^4 + \pi R_l c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_l c_d) \tilde{V}_d - \pi R_l c_d (1 + \eta^2 \alpha^2) \tilde{W}_1 = 0, \quad (46.7)$$

$$(E_d I_{yy} \alpha^4 + \pi R_l c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_l c_d) \tilde{W}_d - \pi R_l c_d (1 + \eta^2 \alpha^2) \tilde{V}_1 = 0, \quad (47.7)$$

از آنجا که DNA را با میله‌ی مقطع دایروی مدل کرده‌ایم، ممان‌های سطحی مقطع حول y و z برابرند،

یعنی $I_{yy} = I_{zz}$ ، بنابراین می‌توانیم بنویسیم:

$$(E_d I_{zz} \alpha^4 + \pi R_l c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_l c_d) (\tilde{V}_d - \tilde{W}_d) = 0. \quad (48.7)$$

با توجه نکته‌ی ذکر شده در معادله‌ی (۱۷.۷)، معادله‌ی (۴۸.۷) نتیجه می‌دهد:

$$\tilde{V}_d = \tilde{W}_d. \quad (49.7)$$

با جایگذاری معادله‌ی (۴۵.۷) در (۴۹.۷) داریم:

$$\begin{aligned} & \left\{ D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_l^2} \alpha^4 + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 (-2N_{xy1} \alpha \beta_1 + p_{d1}^0 R_l \beta_1^2) \right\} \times \\ & \tilde{W}_1 \sin(\alpha x + n\theta) + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 c_d \times \\ & \{\tilde{W}_1 \sin(\alpha x + n\theta) - \tilde{V}_d [\sin(\alpha x) \cos(\theta) + \cos(\alpha x) \sin(\theta)]\} = 0. \end{aligned} \quad (50.7)$$

معادله‌ی (۵۰.۷) باید برای تمام مقادیر x ، صدق کنند، در نتیجه داریم:

$$\begin{aligned} & D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_l^2} \alpha^4 + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 (-2N_{xy1} \alpha \beta_1 + R_l \beta_1^2 p_{d1}^0) \\ & + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 c_d (\tilde{W}_1 - \tilde{V}_d) = 0. \end{aligned} \quad (51.7)$$

از آنجا که مطابق (۴۹.۷) داریم $\tilde{V}_d = \tilde{W}_d$ ، معادلات (۴۶.۷) و (۴۷.۷) از نظر ریاضی یکی هستند، بنابراین معادلات (۴۶.۷) و (۵۱.۷) باهم، روابط جبری حاکم بر کمانش پیچشی نانوساختار هیبریدی در مودهای $n=1$ می‌باشند. از معادله‌ی (۱۹.۷) می‌دانیم در مودهای کمانشی محیطی $n \neq 1$ معادلات حاکم بر اغتشاشات DNA و نانوتیوب در نانوساختار هیبریدی دیگر کوپل نیستند و با جایگذاری توابع اغتشاشی (۴۱.۷) در (۳۹.۷) به معادله‌ی حاکم بر کمانش نانوتیوب در مودهای محیطی $n \neq 1$ می‌رسیم:

$$\begin{aligned} & \left\{ D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + [1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 (-2N_{xy1} \alpha \beta_1 + p_{d1}^0 R_1 \beta_1^2) \right. \\ & \quad \left. + [1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 c_d \right\} \tilde{W}_1 \sin(\alpha x + n\theta) = 0. \end{aligned} \quad (52.7)$$

برای اینکه معادله‌ی (۳۰.۷) نیز برای تمام مقادیر $0 \leq \theta \leq 2\pi$ و $0 \leq x \leq L$ صدق کند، باید داشته

باشیم:

$$\begin{aligned} & \left\{ D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + [1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 (-2N_{xy1} \alpha \beta_1 + p_{d1}^0 R_1 \beta_1^2) \right. \\ & \quad \left. + [1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 c_d \right\} \tilde{W}_1 = 0. \end{aligned} \quad (53.7)$$

با مرتب کردن دستگاه معادلات (۴۶.۷) و (۵۱.۷) و جایگذاری (۳۷.۷) برای مود محیطی $n=1$ در فرم

ماتریسی داریم:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{W}_1 \\ \tilde{V}_d \end{Bmatrix} - T \begin{bmatrix} b_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \tilde{W}_1 \\ \tilde{V}_d \end{Bmatrix} = 0, \quad (54.7)$$

که در آن، مولفه‌های a_{ij} و b_{11} بدین ترتیب تعیین می‌شوند:

$$\begin{aligned} a_{11} &= D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + [1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 (R_1 \beta_1^2 p_{d1}^0 + c_d), \\ a_{12} &= -[1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 c_d, \\ a_{21} &= -\pi R_1 c_d (1 + \eta^2 \alpha^2), \\ a_{22} &= E_d I_{yy} \alpha^4 + \pi R_1 c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_1 c_d, \\ b_{11} &= \frac{1}{\pi R_1^2} [1 + \eta^2 (\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 \alpha \beta_1. \end{aligned} \quad (55.7)$$

برای داشتن جواب غیر بدیهی در (۵۴.۷) که معادله‌ی جبری حاکم بر کمانش نانوتیوب در مودهای

محیطی $n=1$ است، باید شرط زیر ارضاء شود:

$$T = \frac{a_{11}}{b_{11}} - \frac{a_{12} a_{21}}{a_{22} b_{11}}, \quad n = 1. \quad (56.7)$$

همچنین رابطه‌ی جبری به دست آمده برای مودهای $n \neq 1$ در معادله‌ی (۳۱.۷) به صورت ساده زیر

می‌نویسیم:

$$(a_{11} - Tb_{11})\tilde{W}_1 = 0, \quad (57.7)$$

که در آن، a_{11} و b_{11} ، قبلا در (۵۵.۷) تعریف شده اند. برای داشتن جواب غیر بدیهی در معادله‌ی (۵۷.۷)

که رابطه‌ی حاکم بر کمانش در مودهای محیطی $n \neq 1$ است، شرط زیر را داریم:

$$T = \frac{a_{11}}{b_{11}}; \quad n \neq 1. \quad (58.7)$$

تورک بحرانی نانوساختار هیبریدی در واقع مقدار کمینه‌ی T در معادلات (۵۶.۷) و (۵۸.۷) به ازای تمام

مودهای کمانشی (m, n) می‌باشد.

۲-۳: ناپایداری DNA@CNT تحت نیروی محوری

نانوساختار هیبریدی را تحت نیروی محوری فشاری P در نظر بگیرید، فرض می‌کنیم، این نیرو فقط به نانوتیوب وارد می‌شود. در این حالت، نیروی معادل تنش برشی $N_{x\theta 1}$ ، وجود ندارد. تنش محوری به خاطر نیروی محوری فشاری P و تنش محیطی به خاطر فشار اولیه‌ی اندرکنش وان در والس DNA محبوس، در نانوتیوب ایجاد می‌شود. بنابراین، نیروهای واحد طول معادل نانوتیوب در اثر اعمال نیروی محوری P عبارت است از:

$$N_{x1} = \frac{P}{2\pi R_1}, \quad N_{x\theta 1} = 0, \quad N_{\theta 1} = R_1 p_{\theta 1}^0. \quad (59.7)$$

با جایگذاری معادله‌ی (۵۹.۷) در (۶.۷)، عملگر ψ_1 به این صورت بدست می‌آید:

$$\psi_1 = N_{x1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + R_1 p_{\theta 1}^0 \frac{1}{R_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2}. \quad (60.7)$$

با جایگذاری عملگر \mathcal{L} از معادله (۶۰.۷) در معادلات (۱۳.۷) و (۲۰.۷) به روابط حاکم بر تعادل

نانوساختار هیبریدی تحت نیروی محوری می‌رسیم. برای مود کمانشی محیطی $n=1$ که معادلات حاکم

بر تعادل DNA و نانوتیوب کوپل هستند، از معادله (۱۳.۷) داریم:

$$\begin{aligned} \left[E_d I_{zz} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_1 c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_1 c_d \right] \tilde{v}_d &= R_1 c_d \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ \int_0^{2\pi} \tilde{w}_1 \cos(\theta) d\theta \right\}, \\ \left[E_d I_{yy} \frac{d^4}{dx^4} - \pi R_1 c_d \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} + \pi R_1 c_d \right] \tilde{w}_d &= R_1 c_d \left[1 - \eta^2 \frac{d^2}{dx^2} \right] \left\{ \int_0^{2\pi} \tilde{w}_1 \sin(\theta) d\theta \right\}, \\ D \nabla^8 \tilde{w}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \tilde{w}_1 - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[N_{x1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + R_1 p_{d1}^0 \frac{1}{R_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \tilde{w}_1 \\ &\quad + (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c_d [\tilde{w}_1 - \tilde{v}_d \cos(\theta) - \tilde{w}_d \sin(\theta)] = 0. \end{aligned} \quad (61.7)$$

همچنین برای مودهای محیطی دیگر نانوتیوب، یعنی $n \neq 1$ از معادله (۲۰.۷) داریم:

$$\begin{aligned} D \nabla^8 \tilde{w}_1 + \frac{Eh}{R_1^2} \frac{\partial^4}{\partial x^4} \tilde{w}_1 - (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 \left[N_{x1} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + R_1 p_{d1}^0 \frac{1}{R_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] \tilde{w}_1 \\ + (1 - \eta^2 \nabla^2) \nabla^4 c_d \tilde{w}_1 = 0. \end{aligned} \quad (62.7)$$

توابع اغتشاشی مناسبی برای \tilde{w}_1 , \tilde{v}_d و \tilde{w}_d به صورت زیر پیشنهاد می‌کنیم:

$$\begin{aligned} \tilde{w}_1 &= \tilde{W}_1 \sin(\alpha x) \sin(n\theta), \\ \tilde{v}_d &= \tilde{V}_d \sin(\alpha x), \\ \tilde{w}_d &= \tilde{W}_d \sin(\alpha x), \end{aligned} \quad (63.7)$$

که در آن، \tilde{W}_d , \tilde{W}_1 و \tilde{V}_d دامنه‌های کوچک توابع اغتشاشی هستند، m و n دو عدد صحیح مثبت،

بیانگر عدد موجی طولی و نیم-موجی محیطی می‌باشند. همچنین، α در معادله (۲۵.۷) و پارامتر

جدید β_1 را برای استفاده در معادلات آتی به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\alpha = \frac{m\pi}{L}, \quad \beta_1 = \frac{n}{R_1}, \quad (64.7)$$

با جایگذاری توابع اغتشاشی پیشنهادی (۲۵.۷) در (۲۳.۷) برای مود کمانشی محیطی $n=1$ داریم:

$$\begin{aligned}
& \left(E_d I_{zz} \alpha^4 + \pi R_1 c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_1 c_d \right) \tilde{V}_d \sin(\alpha x) = 0, \\
& \left(E_d I_{yy} \alpha^4 + \pi R_1 c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_1 c_d \right) \tilde{W}_d \sin(\alpha x) = \pi R_1 c_d \left(1 + \eta^2 \alpha^2 \right) \tilde{W}_1 \sin(\alpha x) \\
& \left\{ D \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 \left(N_{x1} \alpha^2 + R_1 \beta_1^2 p_{d1}^0 \right) \tilde{W}_1 \right. \\
& \quad \left. + \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 c_d \left(\tilde{W}_1 - \tilde{W}_d \right) \right\} \sin(\alpha x) \sin(\theta) \\
& - \left\{ \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 c_d \right\} \tilde{V}_d \sin(\alpha x) \cos(\theta) = 0.
\end{aligned} \tag{65.7}$$

با توجه به معادله‌ی (17.7) نتیجه می‌شود $\tilde{V}_d = 0$, بنابراین، روابط (65.7) به صورت زیر به دست

می‌آید:

$$\begin{aligned}
& \left(E_d I_{yy} \alpha^4 + \pi R_1 c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_1 c_d \right) \tilde{W}_d \sin(\alpha x) = \pi R_1 c_d \left(1 + \eta^2 \alpha^2 \right) \tilde{W}_1 \sin(\alpha x) \\
& \left\{ D \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 \left(N_{x1} \alpha^2 + R_1 \beta_1^2 p_{d1}^0 \right) \tilde{W}_1 \right. \\
& \quad \left. + \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 c_d \left(\tilde{W}_1 - \tilde{W}_d \right) \right\} \sin(\alpha x) \sin(\theta) = 0.
\end{aligned} \tag{66.7}$$

برای اینکه معادله‌ی (66.7) برای تمام مقادیر $0 \leq \theta \leq 2\pi$ و $0 \leq x \leq L$ صدق کند، باید داشته باشیم:

$$\begin{aligned}
& \left(E_d I_{yy} \alpha^4 + \pi R_1 c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_1 c_d \right) \tilde{W}_d - \pi R_1 c_d \left(1 + \eta^2 \alpha^2 \right) \tilde{W}_1 = 0 \\
& \left\{ D \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 \left(N_{x1} \alpha^2 + R_1 \beta_1^2 p_{d1}^0 \right) \right\} \tilde{W}_1 \\
& + \left\{ \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 c_d \left(\tilde{W}_1 - \tilde{W}_d \right) \right\} = 0.
\end{aligned} \tag{67.7}$$

از معادله‌ی (19.7) می‌دانیم در مودهای کمانشی محیطی $n \neq 1$ معادلات حاکم بر اغتشاشات DNA و

نانوتیوب در نانوساختار هیبریدی دیگر کوپل نیستند و با جایگذاری تابع \tilde{w}_1 از (63.7) در (24.7) به

معادله‌ی حاکم بر کمانش نانوتیوب در مودهای محیطی $n \neq 1$ می‌رسیم:

$$\begin{aligned}
& \left\{ D \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 \left(N_{x1} \alpha^2 + R_1 \beta_1^2 p_{d1}^0 \right) \right. \\
& \quad \left. + \left[1 + \eta^2 \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right) \right] \left(\alpha^2 + \beta_1^2 \right)^2 c_d \right\} \tilde{W}_1 \sin(\alpha x) \sin(\theta) = 0.
\end{aligned} \tag{68.7}$$

برای اینکه معادله‌ی (۶۸.۷) نیز برای تمام مقادیر $0 \leq x \leq L$ و $0 \leq \theta \leq 2\pi$ صدق کند، باید داشته

باشیم:

$$\left\{ D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 (N_{x1}\alpha^2 + R_1\beta_1^2 p_{d1}^0) + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 c_d \right\} \tilde{W}_1 = 0. \quad (69.7)$$

با مرتب کردن روابط جبری (۶۷.۷) و جایگذاری (۵۹.۷) در فرم ماتریسی داریم:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{W}_1 \\ \tilde{W}_d \end{bmatrix} - P \begin{bmatrix} b_{11} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{W}_1 \\ \tilde{W}_d \end{bmatrix} = 0, \quad (70.7)$$

که در آن، مولفه‌های a_{ij} و b_{11} بدین ترتیب تعیین می‌شوند:

$$\begin{aligned} a_{11} &= D(\alpha^2 + \beta_1^2)^4 + \frac{Eh}{R_1^2} \alpha^4 + [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 (R_1\beta_1^2 p_{d1}^0 + c_d), \\ a_{12} &= -[1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 c_d, \\ a_{21} &= -\pi R_1 c_d (1 + \eta^2 \alpha^2), \\ a_{22} &= E_d I_{yy} \alpha^4 + \pi R_1 c_d \eta^2 \alpha^2 + \pi R_1 c_d, \\ b_{11} &= \frac{1}{2\pi R_1} [1 + \eta^2(\alpha^2 + \beta_1^2)] (\alpha^2 + \beta_1^2)^2 \alpha^2. \end{aligned} \quad (71.7)$$

برای داشتن جواب غیر بدیهی در معادله‌ی (۷۰.۷) که معادله‌ی جبری حاکم بر کمانش نانوتیوب در

مودهای محیطی $n = 1$ است، باید شرط زیر ارضا شود:

$$P = \frac{a_{11}}{b_{11}} - \frac{a_{12}a_{21}}{a_{22}b_{11}}; \quad n = 1. \quad (72.7)$$

همچنین رابطه‌ی جبری به دست آمده برای مودهای $n \neq 1$ در معادله‌ی (۶۹.۷) به صورت ساده زیر

می‌نویسیم:

$$(a_{11} - Pb_{11}) \tilde{W}_1 = 0, \quad (73.7)$$

که در آن، a_{11} و b_{11} قبلاً در (۷۱.۷) تعریف شده‌اند. برای داشتن جواب غیر بدیهی در معادله‌ی (۷۳.۷) که رابطه‌ی حاکم بر کمانش در مودهای محیطی $n \neq 1$ است، شرط زیر را داریم:

$$P = \frac{a_{11}}{b_{11}}; \quad n \neq 1. \quad (74.7)$$

نیروی بحرانی نانوساختار هیبریدی در واقع مقدار کمینه‌ی P در معادلات (۷۲.۷) و (۷۴.۷) به ازای تمام مودهای کمانشی (m, n) می‌باشد.

۷-۳: نتایج عددی و بحث

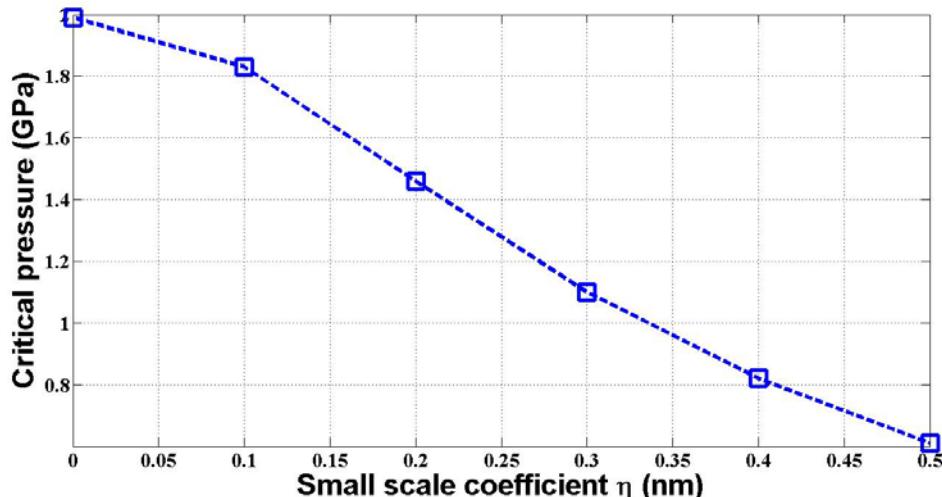
در این بخش می‌خواهیم، با ارائه‌ی چند مثال، مدل غیرموضعی ارائه شده این فصل را که برای آنالیز کمانش نانوساختار هیبریدی DNA و نانوتیوب به صورت عددی بررسی نماییم. در مورد این نوع نانوساختار هیبریدی، بسیار کم در مقالات کارشده است. در تنها کار ارائه شده، انرژی اندرکنش وان در والس یک ssDNA تک رشته) درون نانوتیوب به طول $L = 5.9\text{ nm}$ برای اقطار مختلف با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی ارائه شده است [۲۱]. همچنین اظهار شده که محبوس شدن ssDNA درون نانوتیوب (۱۰,۱۰) خود به خود است [۲۲، ۲۱]. به همین منظور، در مثال‌های این بخش تاثیر محبوس شدن یک رشته‌ی ssDNA را بر کمانش نانوتیوب (۱۰,۱۰) تحت بارگذاری‌های مختلف بررسی می‌کنیم.

مقادیر پارامترهایی که به صورت عمومی در تحلیل‌های عددی برای نانوتیوب (۱۰,۱۰) استفاده شده‌اند، عبارتند از: $R_l = 0.678\text{ nm}$ ، $Eh = 360\text{ J m}^{-2}$ ، $D = 0.85\text{ eV}$ DNA. همچنین، مدول یانگ ssDNA برابر $E_d = 100\text{ MPa}$ و شعاع $R_d = 0.4\text{ nm}$ می‌باشد [۲۲]. فشار اولیه اندکنش وان در والس $c_d = 0.3\text{ GPa}$ و ضریب فشار وان در والس $p_{d1}^0 = 0.1\text{ GPa}$ از داده‌های مقاله‌ی از [۲۱] استخراج شده‌اند.

از آنجا که مقادیری برای مقایسه نتایج در مقالات موجود نیست، در این بخش مقادیری برای بار بحرانی نانوساختار هیبریدی به ازای پارامتر ابعاد کوچک η مناسب که در فصل پنجم تعیین شده است، پیش‌بینی می‌کنیم.

۱-۳-۷: کمانش ssDNA@(10,10) تحت فشار خارجی

در این قسمت به تحلیل عددی ناپایداری نانوساختار هیبریدی CNT ssDNA@(10,10) تحت فشار شعاعی خارجی خواهیم پرداخت. ابتدا کمانش یک نانوتیوب خالی (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ را بررسی می‌کنیم. با استفاده از معادلات (۳۴.۷) و (۳۶.۷) فشار بحرانی نانوتیوب خالی (10,10) با جایگذاری $p_{d1}^0 = c_d = 0$ ، به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = e_0 a$ به دست می‌آید. در شکل ۱-۷ فشار بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ در یک بازه‌ی متداول پارامتر ابعاد کوچک η [۰.۶۷، ۰.۷۰] ارائه شده است.

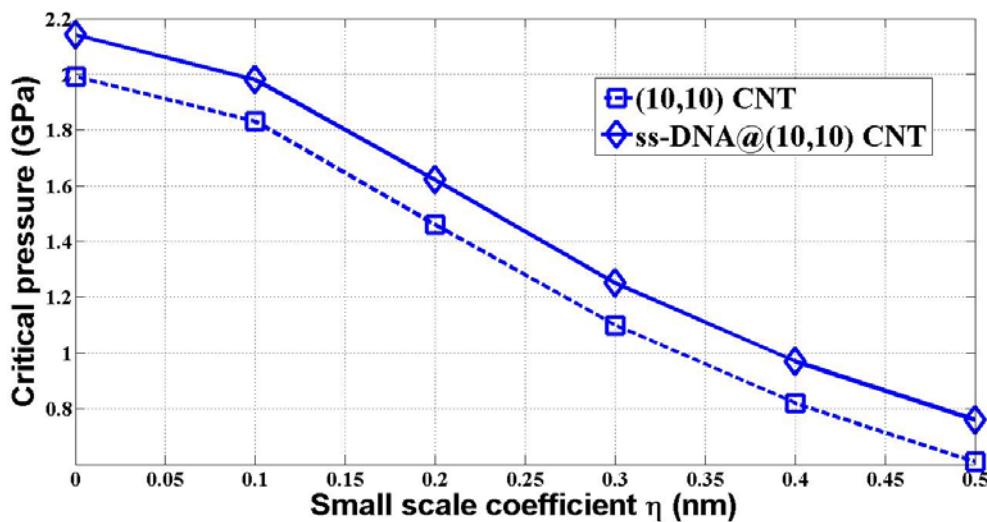


شکل ۱-۷: فشار شعاعی بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

از شکل ۱-۷، مشاهده می‌شود که مقادیر به دست آمده برای فشار بحرانی نانوتیوب به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ بر اساس مدل پوسته‌ی غیرموضعی کمتر از نتایج مدل پوسته‌ی کلاسیک ($\eta = 0$) می‌باشد. مطابق نتایج بخش ۱-۳-۵، مقدار مناسب برای پارامتر ابعاد کوچک η ، در کمانش نانوتیوب (10,10) تحت فشار

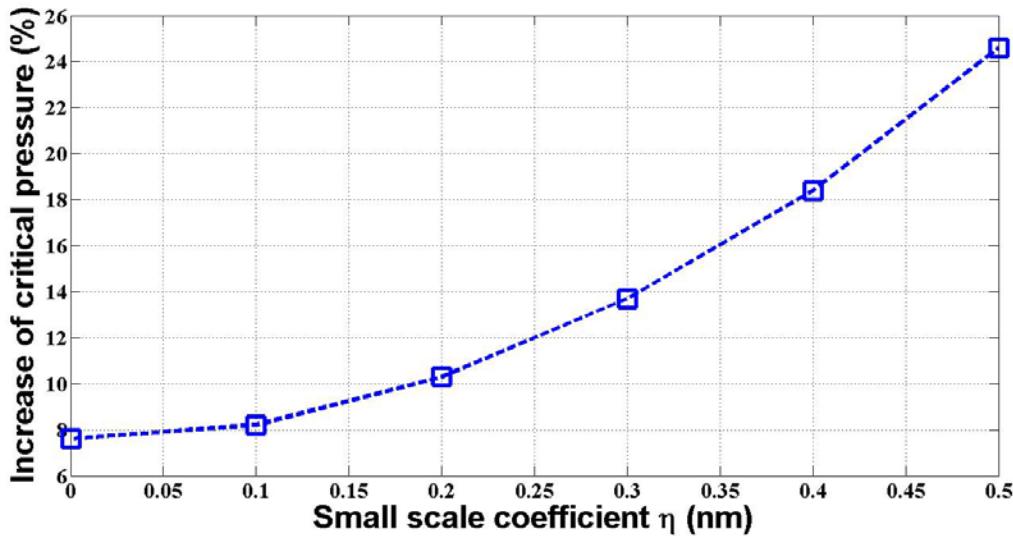
خارجی، $\eta = 0.15 \text{ nm}$ به دست آمده است. مطابق شکل ۷-۱، فشار بحرانی نانوتیوب (10,10) با استفاده از مدل غیرموضعی مقدار 1.6 GPa پیش‌بینی می‌شود.

در مرحله‌ی بعد، تاثیر حضور DNA محبوس بر ناپایداری نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ تحت فشار خارجی، مورد بررسی قرار می‌گیرد. در شکل ۷-۲، نتایج حاصل برای مقادیر فشار شعاعی بحرانی نانوساختار هیبریدی ssDNA@(10,10) در کنار نتایج مربوط به نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۷-۲: فشار شعاعی بحرانی نانوساختار هیبریدی ssDNA@(10,10) و نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

مطابق شکل ۷-۲، مشاهده می‌شود حضور ssDNA محبوس درون نانوتیوب (10,10) باعث افزایش فشار شعاعی بحرانی می‌شود. یعنی، نانوساختار هیبریدی ssDNA@(10,10) در مقابل ناپایداری شعاعی تحت فشار خارجی نسبت به نانوتیوب خالی با همان طول مقاوم‌تر است. مطابق شکل ۷-۲، فشار بحرانی نانوساختار هیبریدی ssDNA@(10,10) به ازای $\eta = 0.15 \text{ nm}$ با استفاده از مدل غیرموضعی مقدار 1.8 GPa پیش‌بینی می‌شود. در شکل ۷-۳، درصد افزایش فشار بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن DNA درون نانوتیوب با طول‌های $L = 5.9 \text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



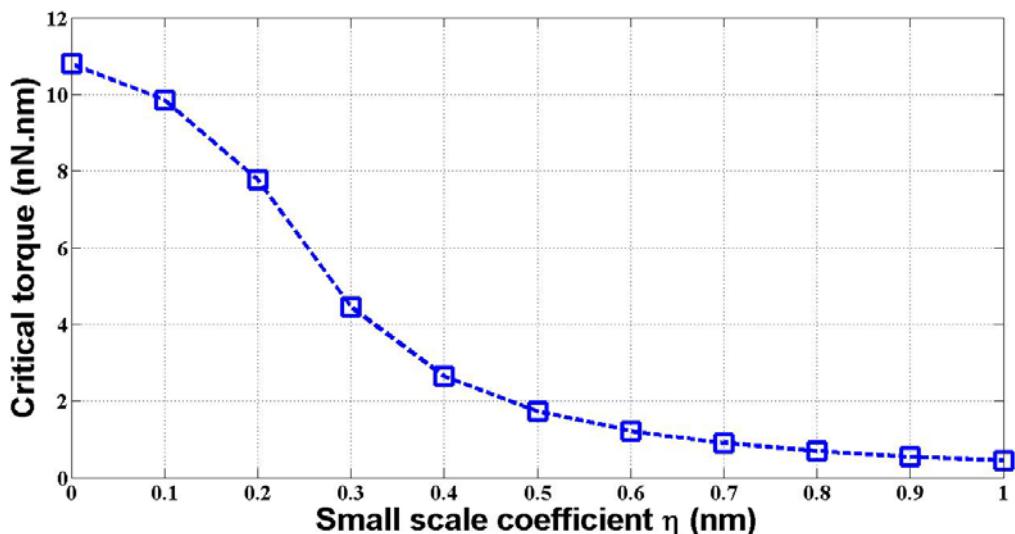
شکل ۷-۳: درصد افزایش فشار شعاعی بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن ssDNA به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

درصد افزایش فشار شعاعی بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر حضور ssDNA محبوس برای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.15 \text{ nm}$ حدود 10% پیش‌بینی می‌شود.

۷-۳-۲: کمانش ssDNA@(10,10) تحت تورک پیچشی

در اینجا ناپایداری نانوساختار هیبریدی ssDNA@(10,10) را تحت تورک پیچشی با استفاده از مدل غیرموضعی به صورت عددی بررسی می‌کنیم. ابتدا کمانش پیچشی یک نانوتیوب خالی (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ را بررسی می‌کنیم.

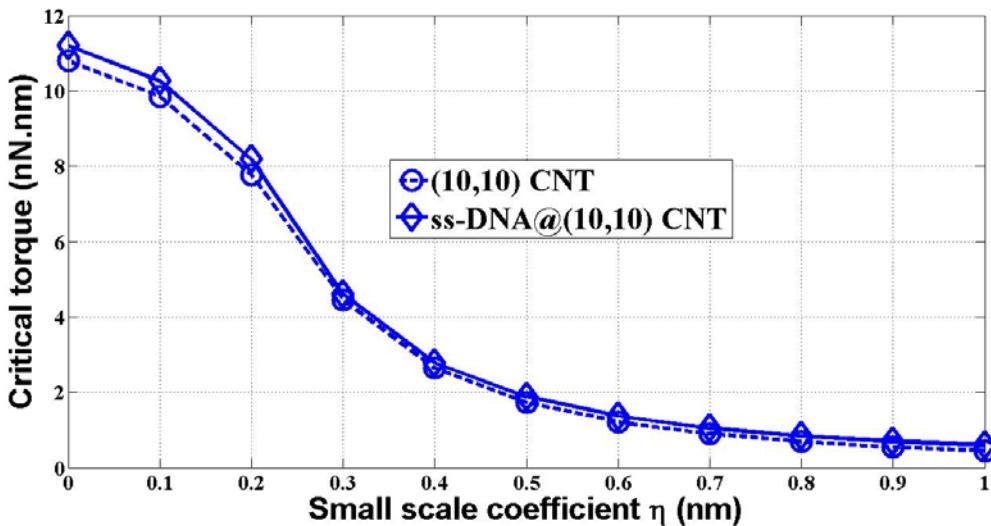
با استفاده از معادلات (۵۶.۷) و (۵۸.۷) تورک بحرانی نانوتیوب خالی (10,10) با جایگذاری $p_{d1}^0 = c_d = 0$ ، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η به دست می‌آید. در شکل ۷-۴ تورک پیچشی بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ در یک بازهٔ متداول پارامتر ابعاد کوچک $\eta \leq 1 \text{ nm}$ ، [۶۷، ۷۰] ارائه شده است.



شکل ۷-۴: تورک پیچشی بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9\text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

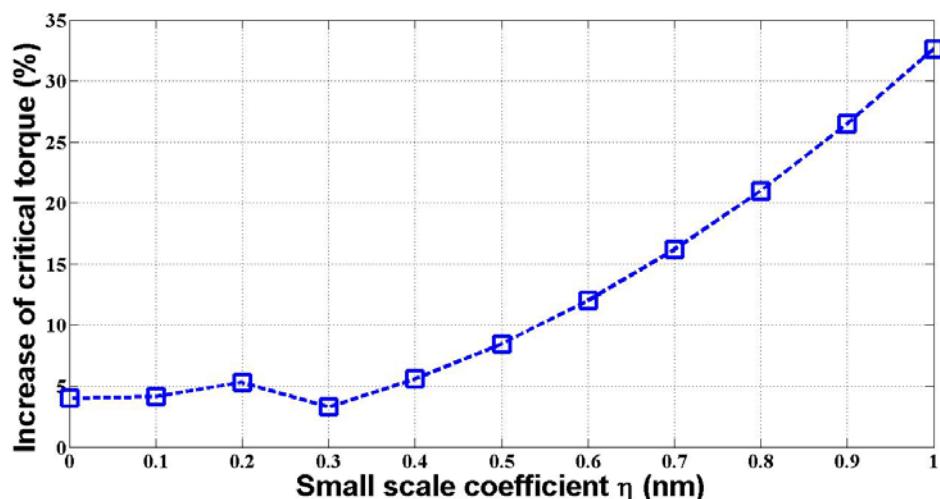
از شکل ۷-۴، مشاهده می‌شود که مقادیر به دست آمده برای تورک بحرانی نانوتیوب به طول $L = 5.9\text{ nm}$ بر اساس مدل پوسته‌ی غیرموضعی کمتر از نتایج مدل پوسته‌ی کلاسیک ($\eta = 0$) می‌باشد. مطابق نتایج بخش ۳-۵، مقدار مناسب برای پارامتر ابعاد کوچک، در کمانش نانوتیوب (10,10) تحت تورک پیچشی، $\eta = 0.7\text{ nm}$ به دست آمده است. مطابق شکل ۷-۴، مقدار تورک بحرانی نانوتیوب (10,10) با استفاده از مدل غیرموضعی 1 nN.nm پیش‌بینی می‌شود.

در مرحله‌ی بعد، تاثیر حضور DNA محبوس بر ناپایداری نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9\text{ nm}$ تحت تورک پیچشی، مورد بررسی قرار می‌گیرد. در شکل ۷-۵، نتایج حاصل برای مقادیر تورک بحرانی نانوساختار هیبریدی ssDNA@ (10,10) در کنار نتایج مربوط به نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۷-۵: تورک پیچشی بحرانی نانوساختار هیبریدی ssDNA@(10,10) و نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

مطابق شکل ۷-۵، مشاهده می‌شود حضور ssDNA محبوس درون نانوتیوب (10,10) باعث افزایش تورک بحرانی (هر چند کم) می‌شود. یعنی، نانوساختار هیبریدی ssDNA@(10,10) در مقابل ناپایداری پیچشی نسبت به نانوتیوب خالی با همان طول مقاوم‌تر است. مطابق شکل ۷-۶، تورک بحرانی نانوساختار ssDNA@(10,10) به ازای $\eta = 0.7 \text{ nm}$ با استفاده از مدل غیرموضعی مقدار 1.1 nN.nm هیبریدی (10,10) در صد افزایش تورک بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن پیش‌بینی می‌شود. در شکل ۷-۶، درصد افزایش تورک بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن DNA درون نانوتیوب با طول‌های $L = 5.9 \text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۷-۶: درصد افزایش تورک بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن ssDNA به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

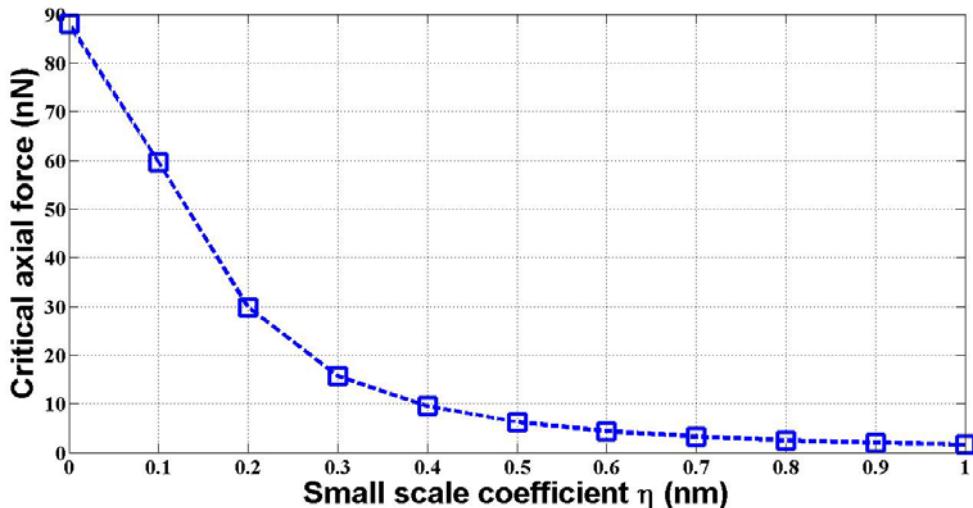
در صد افزایش تورک بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر حضور ssDNA محبوس برای پارامتر ابعاد کوچک η حدود 15% پیش‌بینی می‌کنیم.

۳-۳-۷: کمانش ssDNA@(10,10) تحت نیروی محوری

اکنون، ناپایداری نانوساختار هیبریدی (10,10) ssDNA را تحت نیروی محوری با استفاده از مدل غیرموضعی به صورت عددی بررسی می‌کنیم. ابتدا کمانش یک نانوتیوب خالی (10,10) به طول

$$L = 5.9 \text{ nm}$$

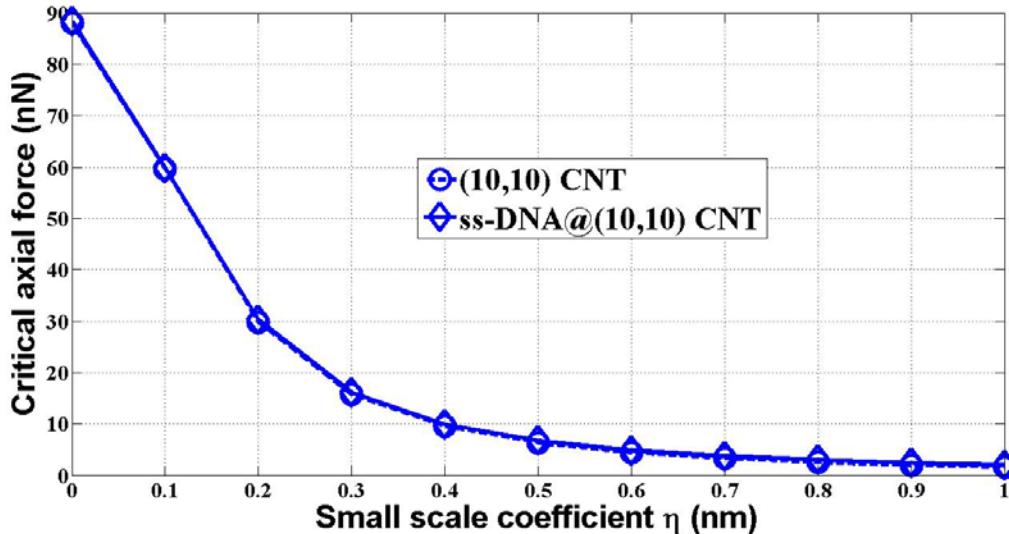
با استفاده از معادلات (۷۴.۷) و (۷۲.۷) نیروی محوری بحرانی نانوتیوب خالی (10,10) را با جایگذاری $p_{d1}^0 = c_d = 0$ ، به ازای پارامتر ابعاد کوچک η به دست می‌آوریم. در شکل ۷-۷ نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۷-۷: نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

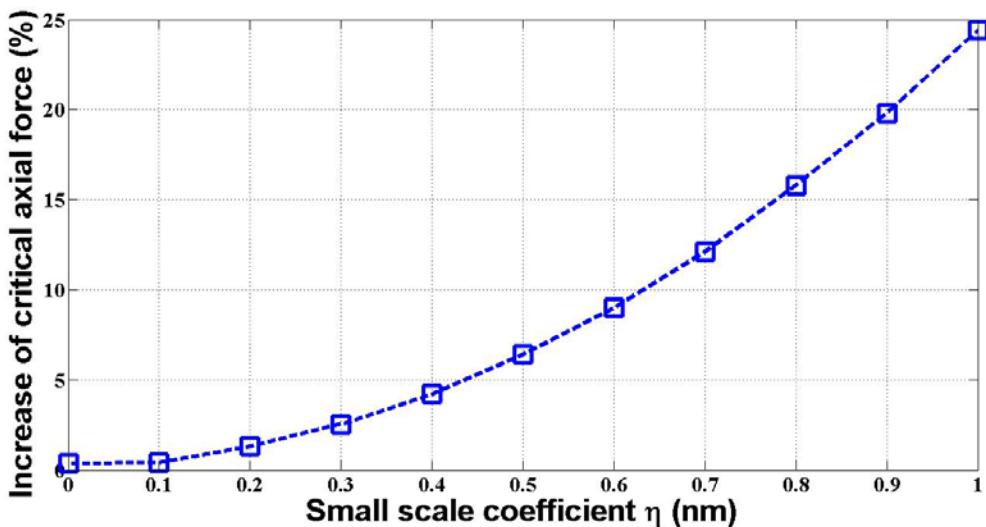
مطابق نتایج بخش ۳-۳-۵، مقدار مناسب برای پارامتر ابعاد کوچک، در کمانش نانوتیوب (10,10) تحت نیروی محوری، $\eta = 0.05 \text{ nm}$ به دست آمده است. مطابق شکل ۷-۷، نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (10,10) با استفاده از مدل غیرموضعی، مقدار 75 nN پیش‌بینی می‌شود.

در مرحله‌ی بعد، تاثیر حضور DNA محبوس بر ناپایداری نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ تحت نیروی محوری فشاری، مورد بررسی قرار می‌گیرد. در شکل ۷-۸، نتایج حاصل برای مقادیر نیروی بحرانی نانوساختار هیبریدی ssDNA@ (10,10) در کنار نتایج مربوط به نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۷-۸: نیروی محوری بحرانی نانوساختار هیبریدی ssDNA@ (10,10) و نانوتیوب (10,10) به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

مطابق شکل ۷-۸، مشاهده می‌شود حضور ssDNA محبوس درون نانوتیوب (10,10) باعث افزایش نیروی محوری بحرانی می‌شود (هر چند خیلی کم!). یعنی، نانوساختار هیبریدی ssDNA@ (10,10) در مقابل ناپایداری محوری نسبت به نانوتیوب خالی با همان طول مقاوم‌تر است. مطابق شکل ۷-۸، نیروی بحرانی نانوساختار هیبریدی ssDNA@ (10,10) به ازای $\eta = 0.05 \text{ nm}$ با استفاده از مدل غیرموضعی مقدار ۸۰ nN پیش‌بینی می‌شود. در شکل ۹-۷، درصد افزایش نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن DNA درون نانوتیوب با طول‌های $L = 5.9 \text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک η ارائه شده است.



شکل ۷-۹: درصد افزایش نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن ssDNA به ازای پارامتر ابعاد کوچک η .

درصد افزایش نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر حضور ssDNA محبوس برای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.05 \text{ nm}$ حدود ۰.۴٪ پیش‌بینی می‌شود.

فصل هشتم: نتیجه‌گیری، جمع‌بندی و پیشنهادات

در این رساله، پایداری مکانیکی نانوساختارهای هیبریدی تحت بارگذاری‌های مختلف (فشار، پیچش و نیروی محوری) بر اساس مدل‌های کانتینیومی غیرموضعی مطالعه شده است. فرض بنیادی در تئوری‌های کلاسیک الاستیسیته، پیوستگی محیط مادی و میدان‌های تانسوری تنش و کرنش در این محیط می‌باشد. در نانوساختارها، فضای خالی بین اتم‌ها نسبت به ابعاد نانوساختار قابل توجه بوده و نمی‌توان از آن صرف‌نظر کرد. ضمناً طول مشخصه داخلی نانوساختارها a (طول پیوند اتمی و ...) در مرتبه طول مشخصه خارجی l (طول موج و ابعاد نانوساختار ...) می‌باشد. به عبارت دیگر فرضیات پیوستگی محیط مادی دیگر اعتبار ندارد. بنابراین توجیه استفاده از تئوری‌های مبتنی بر مکانیک محیط پیوسته کلاسیک برای مدلسازی نانوساختارها که اساساً بر فرض پیوستگی استوار است، زیر سوال می‌رود. به عبارت دیگر باید به جای کانتینیوم کلاسیک از تئوری‌های کانتینیومی غیرکلاسیک جدیدی که می‌توانند تاثیرات ابعاد کوچک (در حد نانومتر) و ناپیوستگی ذاتی نانوساختارها را در نظر بگیرد (مانند الاستیسیته غیرموضعی)، بهره برد. مدل‌های کانتینیومی زنجیره، تیر، میله و پوسته، با استفاده از فرضیات تئوری غیرموضعی ارائه شده‌اند. اندرکنش وان در والس بین لایه‌های مجاور نانوتیوب و بین اجزای محبوس درون نانوتیوب (مثل زنجیره کربنی و DNA) با نانوتیوب به صورت توزیع فشار بر لایه‌ی وان در والس مدلسازی شده است. همچنین توزیع نیروی واکنشی از نانوتیوب بر اجزای محبوس ارائه شده است. نانوساختارهای هیبریدی مهم نانوتیوب کربنی که در این رساله مطالعه شده‌اند، نانوپیپادهای کربنی، نانوسیم‌های کربنی و نانوساختار هیبریدی نانوتیوب و DNA، می‌باشند. پس از ارائه معادلات کوپل حاکم بر تعادل نانوساختار هیبریدی، با در نظر گرفتن آثار ابعاد کوچک ناشی از ناپیوستگی، چند مثال به منظور تعیین بارهای بحرانی نانوساختارها و بررسی چگونگی تاثیر حضور اجزای محبوس بر کمانش نانوساختار هیبریدی به روش عددی ارائه گردیده است.

۱-۸: نتیجه‌گیری

در اینجا خلاصه‌ای از نتایج به دست آمده در این رساله ارائه می‌گردد:

(۱) مدل پوسته‌ی غیرموضعی نسبت مدل پوسته‌ی کلاسیک ($\eta = 0$) مقدار کمتری برای اندازه‌ی

فشار بحرانی نانوتیوب ($10,10$) به طول $L = 9.5\text{ nm}$ پیش‌بینی می‌نماید. در واقع، مدل پوسته‌ی

غیرموضعی اختلاف پیش‌بینی فشار بحرانی نانوتیوب ($10,10$) توسط مدل پوسته‌ی کلاسیک

(1.7 GPa) و نتیجه‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (1.55 GPa) [110] را کاهش می‌دهد.

(۲) فشار بحرانی نانوتیوب ($10,10$) به طول $L = 9.5\text{ nm}$ بر اساس مدل پوسته‌ی غیرموضعی به ازای

پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.15\text{ nm}$ به مقدار تخمینی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (1.55 GPa)

بسیار نزدیک می‌باشد [110].

(۳) پیش‌بینی می‌شود، اولین کمانش نانوتیوب بر اساس مدل پوسته‌ی غیرموضعی در مود

($m, n = (1, 1)$) مشاهده شود که به معنی تغییر شکل مقطع دایره‌ای به بیضی در زمان کمانش

است، که مطابق نتیجه‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌باشد [110].

(۴) بر اساس مدل پوسته‌ی غیرموضعی، فشار بحرانی نانوپیپاد ($C_{60}@10,10$) به طول $L = 9.5\text{ nm}$

و به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.15\text{ nm}$ در حدود 3.6 GPa پیش‌بینی می‌گردد.

(۵) حضور شبکه‌ی فولرین‌های C_{60} محبوس درون نانوتیوب ($10,10$) باعث افزایش فشار شعاعی

بحرانی می‌شود. یعنی، نانوتیوب ($10,10$) که در آن فولرین‌های C_{60} محبوس شده‌اند، در مقابل

ناپایداری شعاعی تحت فشار خارجی نسبت به نانوتیوب خالی با همان طول بسیار مقاوم‌تر است.

(۶) در اثر محبوس شدن فولرین‌های C_{60} فشار بحرانی نانوپیپاد ($C_{60}@10,10$) به طول

$L = 9.5\text{ nm}$ و به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.15\text{ nm}$ در حدود 150% بیشتر از نانوتیوب

($10,10$) خالی به همان طول می‌باشد.

(۷) تورک بحرانی نانوتیوب به طول $L = 12.62 \text{ nm}$ بر اساس مدل پوسته‌ی غیرموضعی به ازای $\eta = 0.7 \text{ nm}$ به نتیجه‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی یعنی $1 \text{nN} \cdot \text{nm}$ پارامتر ابعاد کوچک بسیار نزدیک می‌باشد [۱۱۱].

(۸) مدل کانتینیومی پوسته‌ی غیرموضعی در توافق کامل با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، افزایش مقاومت در مقابل ناپایداری پیچشی نانوتیوب (۱۰,۱۱) را در اثر حضور فولرین‌های C_{60} محبوس درون نانوتیوب، به خوبی پیش‌بینی می‌کند [۳۰, ۳۱].

(۹) بر اساس نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی [۳۱]، میزان ۱۱۱.۲٪ افزایش در تورک بحرانی نانوتیوب (۱۰,۱۱) با طول $L = 10 \text{ nm}$ در اثر محبوس شدن فولرین‌های C_{60} با شبکه‌ی چگالی بالا ($D_r = 1 \text{ nm}$) درون نانوتیوب گزارش شده است. میزان درصد افزایش تورک بحرانی بر اساس مدل پوسته‌ی غیرموضعی، برای طول $L = 10 \text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.7 \text{ nm}$ مطابق با مقدار گزارشی مقاله‌ی [۳۱] می‌باشد.

(۱۰) در مقاله‌ی [۳۰]، میزان ۱۴۰٪ افزایش در زاویه‌ی پیچشی بحرانی نانوتیوب (۱۰,۱۱) پرشده از فولرین‌های C_{60} نسبت به نانوتیوب خالی با طول $L = 3.4 \text{ nm}$ گزارش شده است. همچنین، درصد افزایش تورک بحرانی نانوتیوب (۱۰,۱۱) به طول $L = 3.4 \text{ nm}$ بر اساس نتایج مدل پوسته‌ی غیرموضعی، به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.9 \text{ nm}$ مطابق با مقدار گزارشی مقاله‌ی [۳۰] برای افزایش زاویه‌ی پیچشی بحرانی می‌باشد.

(۱۱) مدل پوسته‌ی غیرموضعی، نسبت به مدل پوسته‌ی کلاسیک ($\eta = 0$) نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (۱۰,۱۱) به طول $L = 10 \text{ nm}$ را مقدار کمتری پیش‌بینی می‌کند. این پیش‌بینی، اختلاف موجود بین نیروی محوری حاصل مدل پوسته‌ی کلاسیک (۸۸nN) و نتیجه‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (۷۵nN) [۲۹] را کاهش می‌دهد.

(۱۲) نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (10,10) بر اساس نتایج مدل پوسته‌ی غیرموضعی، به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.05 \text{ nm}$ به مقدار تخمینی (75nN) توسط شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بسیار نزدیک می‌شود [۲۹].

(۱۳) بر اساس مدل پوسته‌ی غیرموضعی، نتایج حضور فولرین‌های محبوس درون نانوتیوب (10,10) باعث افزایش نیروی محوری بحرانی نانوتیوب می‌شود. نتیجه‌ی آنالیز MD برای نیروی بحرانی نانوپیپاد (10,10)@C₆₀ به طول $L = 10 \text{ nm}$ ، مقدار 82nN گزارش شده است [۲۹] که معادل ۹٪ افزایش در نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر محبوس شدن فولرین‌های C₆₀ درون نانوتیوب (10,10) می‌باشد.

(۱۴) بر اساس پیش‌بینی مدل پوسته‌ی غیرموضعی، نیروی محوری بحرانی حاصله برای نانوپیپاد (10,10)@C₆₀ به ازای $\eta = 0.05 \text{ nm}$ به دست آمده است که به معنی ۴٪ افزایش در نیروی محوری بحرانی (10,10)@C₆₀ نسبت به نانوتیوب خالی (10,10) می‌باشد. نزدیک بودن نتایج مدل پوسته‌ی غیرموضعی و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی نشان دهنده‌ی مطابقت خوب این دو مدل در آنالیز کمانش می‌باشد.

(۱۵) تاثیر حضور فولرین‌های C₆₀ محبوس در نانوساختار هیبریدی نانوپیپاد (10,10)@C₆₀ در افزایش مقاومت در مقابل ناپایداری کمانشی نانوتیوب خالی (10,10) به ترتیب از بارگذاری فشاری، پیچشی و محوری کاهش می‌یابد. یعنی حضور فولرین‌های C₆₀ درون نانوتیوب، در کمانش فشاری نانوتیوب بیشترین تاثیر را دارد و در کمانش نانوتیوب تحت بار محوری تاثیر بسیار جزئی دارد.

(۱۶) به خاطر اندرکنش وان در والس زنجیره‌ی کربنی محبوس و نانوتیوب کربنی در نانوساختار هیبریدی نانوسیم، معادلات حاکم بر تعادل زنجیره‌ی کربنی و نانوتیوب فقط در مود محیطی $n = 1$ مزدوج می‌باشند و در مودهای محیطی $n \geq 2$ این وابستگی وجود ندارد.

(۱۷) در نانوسيمها، اثر حضور زنجيره‌ی کربنی در کمانش نانوتیوب در مودهای محیطی

$n \geq 2$ ظاهر شود. در اين مودها، زنجيره‌ی کربنی در جهات عرضی تغيير شکلی ندارد.

(۱۸) مود اول محیطي کمانش نانوسيم و نانوتیوب خالي يكسان می‌باشد و در واقع زنجيره

تاثيري در کمانش مود اول محیطي $1 = n$ نانوتیوب ندارد.

(۱۹) برای نانوسيمهاي با شعاع کمتر، ضرائب فشار وان در والس و فشار اوليه‌ی زنجيره

کربنی بر روی نانوتیوب بيشتر است و با بزرگتر شدن نانوتیوب در واقع، فاصله‌ی زنجيره و

نانوتیوب افزایش يافته و اندرکنش آنها ضعيف‌تر می‌شود. بنابراین انتظار می‌رود برای نانوسيمهاي

شعاع کوچکتر، تاثير زنجيره‌ی کربنی بر کمانش نانوتیوب خالي، بيشتر باشد.

(۲۰) برای نانوتیوب‌هاي خالي $(5,5)$, $(7,3)$, $(9,0)$ و $(8,2)$ به طول $L = 1\text{ nm}$ ، از آنجا که

اختلاف شعاع بين نانوتیوب‌ها ناچيز است، اختلاف مشهودی در اندازه‌ی فشار بحرانی نانوتیوب‌ها

طبق پيش‌بیني شبیه‌سازی دیناميك مولکولي [۳۴] و مدل پوسته‌ی غیرموضعی مشاهده

نمی‌شود. همچنین می‌بینیم، فشار بحرانی به ازاي افزایش پaramتر ابعاد کوچک η ، کاهش

مي‌يابد.

(۲۱) در مقایسه با فشار بحرانی به دست آمده برای نانوتیوب‌هاي خالي $(5,5)$, $(7,3)$, $(9,0)$ و

$L = 1\text{ nm}$ $(8,2)$ از نتایج مدل پوسته‌ی غیرموضعی مربوط به اولین مود کمانشی نانوتیوب‌ها با

مقادير منتج از شبیه‌سازی دیناميك مولکولي در مقاله‌ی [۳۴]، متوجه می‌شويم، اندازه‌ی فشار

بحرانی نانوتیوب‌ها به‌ازاي پaramتر ابعاد کوچک $\eta = 0.22\text{ nm}$ ، به مقادير گزارش شده در [۳۴]

نزديك می‌باشد.

(۲۲) نتایج مدل پوسته‌ی غیرموضعی برای فشار بحرانی مربوط به نانوسيمهاي متشكل از

نانوتیوب‌هاي $(5,5)$, $(7,3)$, $(9,0)$ و $(8,2)$ به ازاي پaramتر ابعاد کوچک $\eta = 0.17\text{ nm}$ با نتایج

گزارش شده‌ی دیناميك مولکولي در مقاله‌ی [۳۴] تطابق خوبی نشان می‌دهد.

(۲۳) در نانوسيم‌های شعاع کوچکتر، تاثير زنجيره‌ی کربنی بر کمانش نانوتیوب خالي، بيشتر

مي باشد. فشار بحراني در نانوسيم Cchain@(5,5) به خاطر شعاع کوچکتر (5,5) و قوي‌تر بودن

دافعه‌ی بين زنجيره و نانوتیوب، از ساير نانوسيم‌ها بيشتر است. نكته‌ی ديگر وقوع اولين کمانش

نانوسيم‌ها در مود محطي $n=2$ مي باشد.

(۲۴) هر دو مدل شبيه‌سازی ديناميک مولکولي و پوسته‌ی غيرموضعی به اين نتيجه

مشترك مي‌رسند که حضور زنجيره‌ی کربنی محبوس داخل نانوتیوب‌های (5,5)، (7,3)، (9,0) و

(8,2) باعث افزايش مقاومت در مقابل کمانش تحت فشار مي‌شود. اين افزايش مقاومت، در

نانوسيم Cchain@(5,5) به خاطر نزديك‌تر بودن زنجيره‌ی کربنی به اتم‌های کربن ديواره‌ی

دروني نانوتیوب و در نتيجه، قوي‌تر بودن دافعه‌ی بين زنجيره و نانوتیوب بيشتر است.

(۲۵) على رغم اختلاف جزيي بين مقادير کمي، حضور زنجيره‌ی کربنی درون نانوتیوب باعث

افزايش فشار بحراني تمام نانوتیوب‌های (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) مي‌شود. اين نشان مي‌دهد

كه دافعه‌ی اندرکنش وان در والس متقابل بين زنجيره‌ی کربنی و ديواره‌ی نانوتیوب باعث افزايش

مقاومت در برابر ناپايداري کمانشي تحت فشار مي‌شود.

(۲۶) درصد افزايش فشار بحراني نانوتیوب‌های (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) به‌ازاي پaramتر

ابعاد کوچک π در بازه‌ی $0.3-0.35\text{ nm}$ ، به مقادير منتج از شبيه‌سازی ديناميک مولکولي در

مقاله‌ی [۳۴] نزديك مي‌باشد.

(۲۷) هر دو مدل شبيه‌سازی ديناميک مولکولي و پوسته‌ی غيرموضعی به اين نتيجه

مشترك مي‌رسند که، اندازه‌ی تورک بحراني مربوط به اولين مود کمانشي نانوتیوب‌های (5,5) و

(9,0) که شعاع نزديك به هم دارند، بسيار نزديك هم هستند [۳۵].

(۲۸) مشاهده مي‌شود که تورک بحراني در نانوسيم Cchain@(5,5) به خاطر شعاع کوچکتر

Cchain@(9,0) و قوي‌تر بودن دافعه‌ی بين زنجيره و نانوتیوب، از تورک بحراني نانوسيم (5,5)

بيشتر است. مقدار تورک بحراني گزارش شده به روش ديناميک مولکولي، مقدار $11.83\text{ nN}\cdot\text{nm}$

- برای نانوسیم Cchain@(5,5) و مقدار 10.80 nN.nm برای نانوسیم Cchain@(9,0) می‌باشد [۳۵]. هر چند مقادیر MD گزارش شده برای تورک بحرانی بیشتر از مقادیر منتج از مدل کانتینیومی پوسته‌ی غیرموضعی اما این اختلاف برای مقادیر کوچک η بسیار ناچیز می‌باشد.
- هر دو روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و پوسته‌ی غیرموضعی به این نتیجه‌ی (۲۹) مشترک می‌رسند که حضور زنجیره‌ی کربنی محبوس داخل نانوتیوب‌های (5,5) و (9,0) باعث افزایش مقاومت در مقابل ناپایداری پیچشی می‌شود. این افزایش مقاومت، در نانوسیم Cchain@(5,5) به خاطر قوی‌تر بودن دافعه‌ی وان در والس بین زنجیره و نانوتیوب می‌باشد [۳۵].
- در اثر محبوس شدن زنجیره‌ی کربنی درون نانوتیوب‌های (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) و (۳۰) تشکیل سیستم هیبریدی نانوسیم، افزایش بسیار ناچیز در نیروی محوری بحرانی نانوتیوب‌ها مشاهده می‌شود.
- تأثیر حضور زنجیره‌ی کربنی محبوس در نانوساختار هیبریدی نانوسیم کربنی در افزایش مقاومت در مقابل ناپایداری کمانشی نانوتیوب‌های خالی (5,5)، (7,3)، (9,0) و (8,2) به ترتیب از بارگذاری فشاری، پیچشی و محوری کاهش می‌یابد. یعنی حضور زنجیره‌ی کربنی محبوس درون نانوتیوب، در کمانش فشاری نانوتیوب بیشترین تأثیر را دارد و در کمانش نانوتیوب تحت بار محوری تأثیر بسیار جزئی دارد.
- روابط حاکم بر تعادل DNA و نانوتیوب، فقط در مود کمانش محیطی $n = 1$ کوپل (۳۲) می‌باشند و در مودهای محیطی $n \neq 1$ ، معادلات تعادل DNA و نانوتیوب مستقل هستند.
- فشار بحرانی نانوتیوب (10,10) بر اساس مدل غیرموضعی به ازای پارامتر ابعاد کوچک (۳۳) $\eta = 0.15 \text{ nm}$ مقدار 1.6 GPa پیش‌بینی می‌شود.
- تثوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی، پیش‌بینی می‌کند، حضور ssDNA محبوس درون نانوتیوب (10,10) باعث افزایش فشار شعاعی بحرانی نانوتیوب خالی (10,10) شود. یعنی،

نانوساختار هیبریدی ssDNA@(10,10) در مقابل ناپایداری شعاعی تحت فشار خارجی نسبت به نانوتیوب خالی با همان طول مقاوم‌تر است.

(۳۵) بر اساس مدل غیرموضعی، فشار بحرانی نانوساختار هیبریدی ssDNA@(10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.15 \text{ nm}$ حدود 1.8 GPa پیش‌بینی می‌شود.

(۳۶) بر اساس مدل غیرموضعی، درصد افزایش فشار شعاعی بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ در اثر حضور ssDNA محبوس به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.15 \text{ nm}$ حدود 10% پیش‌بینی می‌شود.

(۳۷) تورک بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ بر اساس مدل غیرموضعی به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.7 \text{ nm}$ مقدار $1 \text{nN} \cdot \text{nm}$ پیش‌بینی می‌شود.

(۳۸) حضور ssDNA محبوس درون نانوتیوب (10,10) باعث افزایش تورک بحرانی می‌شود. یعنی، نانوساختار هیبریدی ssDNA@(10,10) در مقابل ناپایداری پیچشی نسبت به نانوتیوب خالی با همان طول مقاوم‌تر است.

(۳۹) مقدار تورک بحرانی نانوساختار هیبریدی ssDNA@(10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ بر اساس نتایج مدل غیرموضعی به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.7 \text{ nm}$ حدود $1.1 \text{nN} \cdot \text{nm}$ پیش‌بینی می‌شود.

(۴۰) درصد افزایش تورک بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ در اثر حضور ssDNA محبوس بر اساس نتایج مدل غیرموضعی به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.7 \text{ nm}$ حدود 15% پیش‌بینی می‌شود.

(۴۱) حضور ssDNA محبوس درون نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ باعث افزایش ssDNA@(10,10) بسیار ناچیز در نیروی محوری بحرانی می‌شود. یعنی، نانوساختار هیبریدی ssDNA@(10,10) در مقابل ناپایداری محوری نسبت به نانوتیوب خالی با همان طول مقاوم‌تر است.

(٤٢) مقدار نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (10,10) به طول $L = 5.9 \text{ nm}$ بر اساس نتایج

مدل غیرموضعی به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.05 \text{ nm}$ حدود 75 nN پیش‌بینی می‌شود.

(٤٣) نیروی بحرانی نانوساختار هیبریدی (10,10)@ssDNA@(10,10) ssDNA بر اساس نتایج مدل غیرموضعی

به ازای پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.05 \text{ nm}$ حدود 80 nN پیش‌بینی می‌شود.

(٤٤) درصد افزایش نیروی محوری بحرانی نانوتیوب (10,10) در اثر حضور ssDNA محبوس

بر اساس نتایج مدل غیرموضعی پارامتر ابعاد کوچک $\eta = 0.05 \text{ nm}$ حدود 0.4% پیش‌بینی می‌شود.

(٤٥) تاثیر حضور ssDNA محبوس در نانوساختار هیبریدی (10,10) ssDNA در افزایش

مقاومت در مقابل ناپایداری کمانشی نانوتیوب خالی (10,10) به ترتیب از بارگذاری فشاری، پیچشی و محوری کاهش می‌یابد. یعنی حضور ssDNA محبوس درون نانوتیوب، در کمانش فشاری نانوتیوب بیشترین تاثیر را دارد و در کمانش نانوتیوب تحت بار محوری تاثیر بسیار جزئی دارد.

(٤٦) هر دو روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و تئوری الاستیسته غیرموضعی منطبق با

هم، پیش‌بینی می‌کنند که در نانوساختارهای هیبریدی که خود به خود تشکیل می‌شوند، اجزای محبوس شده در نانوساختار هیبریدی، مقاومت کمانشی نانوتیوب کربنی را تحت بارگذاری‌های مختلف افزایش می‌دهد.

۲-۸: نوآوری‌های صورت گرفته در رساله

کارهای انجام شده برای اولین بار و نوآوری‌های صورت گرفته در رساله، به ترتیب به قرار زیر می‌باشد:

(۱) تعریف و ارائه‌ی جامع مدل‌سازی توزیع فشار و نیرو در نانوساختارهای هیبریدی در اثر اندرکنش

وان در والس اتمی بین اجزای سیستم هیبریدی.

(۲) ارائه‌ی معادلات حاکم بر ارتعاش و پایداری زنجیره بر اساس تئوری الاستیسته غیرموضعی.

- (۳) ارائهٔ معادلات حاکم بر ارتعاش و پایداری میله بر اساس تئوری الاستیسیتهٔ غیرموضعی.
- (۴) ارائهٔ معادلات حاکم بر پایداری نانوپیپادهای کربنی بر اساس تئوری الاستیسیتهٔ غیرموضعی.
- (۵) بررسی کمانش نانوپیپادهای کربنی تحت فشار خارجی بر اساس تئوری الاستیسیتهٔ غیرموضعی.
- (۶) بررسی کمانش نانوپیپادهای کربنی تحت تورک پیچشی بر اساس تئوری الاستیسیتهٔ غیرموضعی.
- (۷) بررسی کمانش نانوپیپادهای کربنی تحت نیروی محوری بر اساس تئوری الاستیسیتهٔ غیرموضعی.
- (۸) ارائهٔ معادلات حاکم بر پایداری نانوسیم‌های کربنی بر اساس تئوری الاستیسیتهٔ غیرموضعی.
- (۹) بررسی کمانش نانوسیم‌های کربنی تحت فشار خارجی بر اساس تئوری الاستیسیتهٔ غیرموضعی.
- (۱۰) بررسی کمانش نانوسیم‌های کربنی تحت تورک پیچشی بر اساس تئوری الاستیسیتهٔ غیرموضعی.
- (۱۱) بررسی کمانش نانوسیم‌های کربنی تحت نیروی محوری بر اساس تئوری الاستیسیتهٔ غیرموضعی.
- (۱۲) ارائهٔ معادلات حاکم بر پایداری نانوساختار هیبریدی DNA و نانوتیوب کربنی بر اساس تئوری الاستیسیتهٔ غیرموضعی.
- (۱۳) بررسی کمانش نانوساختار هیبریدی DNA و نانوتیوب کربنی تحت فشار خارجی بر اساس تئوری الاستیسیتهٔ غیرموضعی.
- (۱۴) بررسی کمانش نانوساختار هیبریدی DNA و نانوتیوب کربنی تحت تورک پیچشی بر اساس تئوری الاستیسیتهٔ غیرموضعی.

(۱۵) بررسی کمانش نانوساختار هیبریدی DNA و نانوتیوب کربنی تحت بار محوری بر اساس

تئوری الاستیسیته‌ی غیرموضعی.

۳-۸ پیشنهادات برای ادامه‌ی پژوهش

موارد زیر برای تکمیل یا ادامه‌ی کار حاضر پیشنهاد می‌گردد:

(۱) مدلسازی المان محدود و مکانیک مولکولی نانوپیپادها و انجام آنالیزهای کمانشی تحت فشار،

پیچش و نیروی محوری و مقایسه با نتایج این رساله.

(۲) مدلسازی المان محدود و مکانیک مولکولی نانوسیم‌ها و انجام آنالیزهای کمانشی تحت فشار،

پیچش و نیروی محوری و مقایسه با نتایج این رساله.

(۳) مدلسازی المان محدود و مکانیک مولکولی نانوساختار هیبریدی DNA و نانوتیوب کربنی و انجام

آنالیزهای کمانشی تحت فشار، پیچش و نیروی محوری و مقایسه با نتایج این رساله.

(۴) انجام شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای آنالیزهای کمانشی نانوسیم‌ها تحت نیروی محوری و

مقایسه با نتایج این رساله.

(۵) انجام شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای آنالیزهای کمانشی نانوساختار هیبریدی DNA و

نانوتیوب کربنی تحت فشار، پیچش و نیروی محوری و مقایسه با نتایج این رساله.

(۶) آنالیز کمانش نانوساختارهای هیبریدی دیگر بر اساس مدل‌های کانتینیومی غیرموضعی این

رساله.

(۷) مدلسازی نانوساختارهای هیبریدی با سایر تئوری‌های غیرکلاسیک از جمله، تئوری میکروپولار،

گرادیان کرنش، تئوری میکرومorfیک و تئوری کوسرات و آنالیز کمانش نانوساختارهای

هیبریدی.

(۸) اعمال کرنش‌های بزرگ و غیرخطی به تئوری‌های غیرموضعی، تئوری میکروپولار، گرادیان

کرنش، تئوری میکرومorfیک و تئوری کوسرات و آنالیز کمانش نانوساختارهای هیبریدی.

مراجع

- [1] Kroto HW, Heath JR, O'Brein SC, Curl RF, Smalley RE. C₆₀ buckminsterfullerene. Nature. 1985;318:162-3.
- [2] Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon. Nature. 1991;354(6348):56-8.
- [3] Cole MW, Crespi VH, Stan G, Ebner C, Hartman JM, Moroni S, et al. Condensation of helium in nanotube bundles. Phys Rev Lett. 2000;84(17):3883.
- [4] Dresselhaus MS, Williams KA, Eklund PC. Hydrogen adsorption in carbon materials. MRS Bulletin. 1999;24(11):45-50.
- [5] Kuznetsova A, Mawhinney DB, Naumenko V, Yates Jr JT, Liu J, Smalley RE. Enhancement of adsorption inside of single-walled nanotubes: Opening the entry ports. Chem Phys Lett. 2000;321(3-4):292-6.
- [6] Smith BW, Monthioux M, Luzzi DE. Encapsulated C₆₀ in carbon nanotubes. Nature. 1998;396(6709):323-4.
- [7] Smith BW, Monthioux M, Luzzi DE. Carbon nanotube encapsulated fullerenes: a unique class of hybrid materials. Chem Phys Lett. 1999;315(1-2):31-6.
- [8] Chen J, Dong J. Electronic properties of peapods: effects of fullerene rotation and different type of tube. J Phys: Condens Matter. 2004;16:1401-8.
- [9] Osaka S, Saito S, Oshiyama A. Energetics and electronic structures of encapsulated C₆₀ in a carbon nanotube. Phys Rev Lett. 2001;86:3835-8.
- [10] Monthioux M. Filling single-wall carbon nanotubes. Carbon. 2002;40(10):1809-23.
- [11] Cazzanelli E, Caputi L, Castriota M, Cupolillo A, Giallombardo C, Papagno L. Carbon linear chains inside multiwalled nanotubes. Surf Sci. 2007;601(18):3926-32.
- [12] Hayashi T, Muramatsu H, Kim YA, Kajitani H, Imai S, Kawakami H, et al. TEM image simulation study of small carbon nanotubes and carbon nanowire. Carbon. 2006;44(7):1130-6.
- [13] Liu Y, Jones RO, Zhao X, Ando Y. Carbon species confined inside carbon nanotubes: A density functional study. Phys Rev B. 2003;68(12):1254131-7.
- [14] Scuderi V, Scalese S, Bagiante S, Compagnini G, D'Urso L, Privitera V. Direct observation of the formation of linear C chain/carbon nanotube hybrid systems. Carbon. 2009;47(8):2134-7.

- [15] Wang Z, Ke X, Zhu Z, Zhang F, Ruan M, Yang J. Carbon-atom chain formation in the core of nanotubes. *Phys Rev B*. 2000;61(4).
- [16] Zhao X, Ando Y, Liu Y, Jinno M, Suzuki T. Carbon Nanowire Made of a Long Linear Carbon Chain Inserted Inside a Multiwalled Carbon Nanotube. *Phys Rev Lett*. 2003;90(18):187401.
- [17] Chen J, Yang L, Yang H, Dong J. Electronic and transport properties of a carbon-atom chain in the core of semiconducting carbon nanotubes. *Phys Lett A*. 2003;316(1-2):101-6.
- [18] Jinno M, Ando Y, Bandow S, Fan J, Yudasaka M, Iijima S. Raman scattering study for heat-treated carbon nanotubes: The origin of $\approx 1855\text{ cm}^{-1}$ Raman band. *Chem Phys Lett*. 2006;418(1-3):109-14.
- [19] Rusznyák Á, Zólyomi V, Kürti J, Yang S, Kertesz M. Bond-length alternation and charge transfer in a linear carbon chain encapsulated within a single-walled carbon nanotube. *Phys Rev B*. 2005;72(15):1-6.
- [20] Zhao J, Xie RH. Electronic and photonic properties of doped carbon nanotubes. *J Nanosci Nanotechnol*. 2003;3(6):459-78.
- [21] Gao H, Kong Y. Simulation of DNA-nanotube interactions. *Annu Rev Mater Res* 2004;123-50.
- [22] Gao H, Kong Y, Cui D, Ozkan CS. Spontaneous insertion of DNA oligonucleotides into carbon nanotubes. *Nano Lett*. 2003;3(4):471-3.
- [23] Kang JW, Hwang HJ. Schematic and simulations of nanomemory device based on nanopeapods. *Mater Sci Eng C*. 2005;25:843-7.
- [24] Kawasaki S, Matsuoka Y, Yokomae T, Nojima Y, Okino F, Touchara H. XRD and TEM study of high pressure treated single-walled carbon nanotubes and C_{60} -peapods. *Carbon*. 2005;43:37-45.
- [25] Melle-Franco M, Kuzmany H, Zerbetto F. Mechanical interactions in all carbon peapods. *J Chem B*. 2003;107:6986-90.
- [26] Qian D, Liu WK, Ruoff RS. Mechanics of C_{60} in nanotubes. *J Phys Chem B*. 2001;105(44):10753-8.
- [27] Zhou L, Zhu BE, Pan ZY, Wang YX, Zhu J. Reduction of the buckling strength of carbon nanotubes resulting from encapsulation of C_{60} fullerenes. *Nanotechnology*. 2007;18(27):275709.

- [28] Zhu J, Pan ZY, Wang YX, Zhou L, Jiang Q. The effects of encapsulating C₆₀ fullerenes on the bending flexibility of carbon nanotubes. *Nanotechnology*. 2007;18(27):275702.
- [29] Ni B, Sinnott S, Mikulski P, Harrisson J. Compression of carbon nanotubes filled with C₆₀, CH₄, or Ne: Predictions from molecular dynamics simulations. *Phys Rev Lett*. 2002;88:205505-8.
- [30] Wang Q. Torsional instability of carbon nanotubes encapsulating C₆₀ fullerenes. *Carbon*. 2009;47:507-12.
- [31] Jeong B-W, Lim J-K, Sinnott SB. Elastic torsional responses of carbon nanotube systems. *J Appl Phys*. 2007;101(8):084309-7.
- [32] Sohi AN, Naghdabadi R. Stability of C₆₀-peapods under hydrostatic pressure. *Acta Mater*. 2007;55(16):5483-8.
- [33] Sohi AN, Naghdabadi R. Torsional buckling of carbon nanopeapods. *Carbon*. 2007;45(5):952-7.
- [34] Hu ZL, Guo XM, Ru CQ. Enhanced critical pressure for buckling of carbon nanotubes due to an inserted linear carbon chain. *Nanotechnology*. 2008;19(30):305703.
- [35] Song HY, Li LF, Feng F. Torsional behaviour of carbon nanotubes with abnormal interlayer distances. *J Phys D*. 2009;42(5):055414.
- [36] Li CY, Chou TW. A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes. *Int J Solids Struct*. 2003;40:2487–99.
- [37] Harik VM. Mechanics of carbon nanotubes: Applicability of the continuum-beam models. *Comput Mater Sci*. 2002;24(3):328-42.
- [38] Zhang YY, Wang CM, Tan VBC. Buckling of multi-walled carbon nanotubes using Timoshenko column model. *J Eng Mech*. 2006;132:952-8.
- [39] Ranjbartoreh AR, Ghorbanpour A, Soltani B. Double-walled carbon nanotube with surrounding elastic medium under axial pressure. *Physica E*. 2007;39(2):230-9.
- [40] Ru CQ. Degraded axial buckling strain of multiwalled carbon nanotubes due to interlayer slips. *J Appl Phys*. 2000;89:3425-33.
- [41] Kitipornchai S, He XQ, Liew KM. Buckling analysis of triple-walled carbon nanotubes embedded in an elastic matrix. *J Appl Phys*. 2005;97(11):1-7.
- [42] Ru CQ. Elastic buckling of single-walled carbon nanotube ropes under high pressure. *Phys Rev B*. 2000;62:10405-58.

- [43] Wang CY, Ru CQ, Mioduchowski A. Elastic buckling of multiwall carbon nanotubes under high pressure. *J Nanosci Nanotechnol.* 2003;3(1-2):199-208.
- [44] Han Q, Lu G. Torsional buckling of a double-walled carbon nanotube embedded in an elastic medium. *Eur J Mech A-Solids.* 2003;22(6):875-83.
- [45] Wang X, Yang HK, Dong K. Torsional buckling of multi-walled carbon nanotubes. *Mater Sci Eng A.* 2005;404(1-2):314-22.
- [46] Benham CJ. Onset of writhing in circular elastic polymers. *Phys Rev A.* 1989;39(5):2582-6.
- [47] Manning RS, Maddocks JH, Kahn JD. A continuum rod model of sequence-dependent DNA structure. *J Chem Phys.* 1996;105(13):5626-46.
- [48] Ramachandran G, Schlick T. Buckling transitions in superhelical DNA: Dependence on the elastic constants and DNA size. *Biopolymers.* 1997;41(1):5-25.
- [49] Rey S, Maddocks JH. Buckling of an Elastic Rod with High Intrinsic Twist. *16th IMACS World Congress* 2000.
- [50] Stump DM, Fraser WB, Gates KE. The writhing of circular cross-section rods: undersea cables to DNA supercoils. *Proc Roy Soc.* 1998;454(1976):2123-56.
- [51] van der Heijden GHM, et al. Instability and self-contact phenomena in the writhing of clamped rods. *Int J Mech Sci.* 2003;45(1):161-96.
- [52] Goyal S. A dynamic rod model to simulate mechanics of cables and DNA [Ph.D]. Michigan city: University of Michigan; 2006.
- [53] Goyal S, Perkins NC. Looping mechanics of rods and DNA with non-homogeneous and discontinuous stiffness. *Int J Non-Lin Mech.* 2008;43(10):1121-9.
- [54] Goyal S, Perkins NC, Lee CL. Nonlinear dynamics and loop formation in Kirchhoff rods with implications to the mechanics of DNA and cables. *J Comput Phys.* 2005;209(1):371-89.
- [55] Stump DM, Champneys AR, van der Heijden GHM. The torsional buckling and writhing of a simply supported rod hanging under gravity. *Int J Solids Struct.* 2001;38(5):795-813.
- [56] Sohi AN, Naghdabadi R. Stability of single-walled carbon nanopeapods under combined axial compressive load and external pressure. *Physica E.* 2009;41(3):513-7.
- [57] Eringen AC. Nonlocal polar elastic continua. *Int J Eng Sci.* 1972;10(1):1-16.
- [58] Eringen AC. On differential equations of nonlocal elasticity and solutions of screw dislocation and surface waves. *J Appl Phys.* 1983;54:4703.

- [59] Peddieson J, Buchanan GR, McNitt RP. Application of nonlocal continuum models to nanotechnology. *Int J Eng Sci.* 2003;41:305–12.
- [60] Aydogdu M. A general nonlocal beam theory: Its application to nanobeam bending, buckling and vibration. *Physica E.* 2009;41(9):1651-5.
- [61] Reddy JN. Nonlocal theories for bending, buckling and vibration of beams. *Int J Eng Sci.* 2007;45(2-8):288-307.
- [62] Murmu T, Pradhan SC. Buckling analysis of a single-walled carbon nanotube embedded in an elastic medium based on nonlocal elasticity and Timoshenko beam theory and using DQM. *Physica E.* 2009;41(7):1232-9.
- [63] Zhang YQ, Liu GR, Han X. Small-scale effects on buckling of multiwalled carbon nanotubes under axial compression. *Phys Rev B.* 2004;70(20):1-7.
- [64] Zhang YQ, Liu GR, Han X. Effect of small length scale on elastic buckling of multiwalled carbon nanotubes under radial pressure. *Phys Lett A.* 2006;349(5):370-6.
- [65] Hao MJ, Guo XM, Wang Q. Small-scale effect on torsional buckling of multi-walled carbon nanotubes. *Eur J Mech A-Solids.* 2009;29(1):49-55.
- [66] Mohammadimehr M, Saidi AR, Arani AG, Arefmanesh A, Han Q. Torsional buckling of a DWCNT embedded on winkler and pasternak foundations using nonlocal theory. *J Mech Sci Tech.* 2010;24(6):1289-99.
- [67] Li R, Kardomateas GA. Thermal buckling of multi-walled carbon nanotubes by nonlocal elasticity. *ASME J Appl Mech.* 2007;74:399-405.
- [68] Li R, Kardomateas GA. Vibration characteristics of multiwalled carbon nanotubes embedded in elastic media by a nonlocal elastic shell model. *J Appl Mech-T ASME.* 2007;74(6):1087-94.
- [69] Asghari M, Rafati J. Variational principles for stability analysis of multi-walled carbon nanotubes based on a nonlocal shell model. 10th Biennial ASME Conference on Engineering Systems Design and Analysis (ESDA2010); 2010; Istanbul, Turkey; 2010.
- [70] Hu Y-G, Liew KM, Wang Q, He XQ, Yakobson BI. Nonlocal shell model for elastic wave propagation in single- and double-walled carbon nanotubes. *J Mech Phys Solids.* 2008;56(12):3475-85.
- [71] Xie GQ, Han X, Long SY. Effect of small size on dispersion characteristics of wave in carbon nanotubes. *Int J Solids Struct.* 2007;44(3-4):1242-55.
- [72] Hamada N, Sawada S-i, Oshiyama A. New one-dimensional conductors: Graphitic microtubules. *Phys Rev Lett.* 1992;68(10):1579-981.

- [73] Bernholc J, Brenner D, Buongiorno Nardelli M, Meunier V, Roland C. Mechanical and electrical properties of nanotubes. *Annu Rev Mater Sci.* 2002;32:347-75.
- [74] Odom TW, Huang JL, Lieber CM. STM studies of single-walled carbon nanotubes. *Journal of Physics Condensed Matter.* 2002;14(6).
- [75] Terrones H, Terrones M. Curved nanostructured materials. *New J Phys.* 2003;5.
- [76] Ajayan PM, Stephan O, Colliex C, Trauth D. Aligned carbon nanotube arrays formed by cutting a polymer resin-nanotube composite. *science.* 1994;265(5176):1212-4.
- [77] Chopra NG, Benedict LX, Crespi VH, Cohen ML, Louie SG, Zettl A. Fully collapsed carbon nanotubes. *Nature.* 1995;377(6545):135-8.
- [78] Iijima S, Brabec C, Maiti A, Bernholc J. Structural flexibility of carbon nanotubes. *J Chem Phys.* 1996;104(5):2089-92.
- [79] Ruoff RS, Lorents DC. Mechanical and thermal properties of carbon nanotubes. *Carbon.* 1995;33(7):925-30.
- [80] Overney G, Zhong W, Tománek D. Structural rigidity and low frequency vibrational modes of long carbon tubules. *Zeitschrift für Physik D.* 1993;27(1):93-6.
- [81] Robertson DH, Brenner DW, Mintmire JW. Energetics of nanoscale graphitic tubules. *Physical Review B.* 1992;45(21):12592-5.
- [82] Tersoff J. Energies of fullerenes. *Phys Rev B.* 1992;46(23):15546-9.
- [83] Yakobson BI, Brabec CJ, Bernholc J. Nanomechanics of Carbon Tubes: Instabilities beyond linear response. *Phys Rev Lett.* 1996;76(14):2511-4.
- [84] Treacy MMJ, Ebbesen TW, Gibson JM. Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes. *Nature.* 1996;381(6584):678-80.
- [85] Wong EW, Sheehan PE, Lieber CM. Nanobeam mechanics: Elasticity, strength, and toughness of nanorods and nanotubes. *science.* 1997;277(5334):1971-5.
- [86] Cao J, Wang Q, Dai H. Electromechanical properties of metallic, quasimetallic, and semiconducting carbon nanotubes under stretching. *Phys Rev Lett.* 2003;90(15).
- [87] Heyd R, Charlier A, McRae E. Uniaxial-stress effects on the electronic properties of carbon nanotubes. *Phys Rev B.* 1997;55(11):6820-4.
- [88] Minot ED, Yaish Y, Sazonova V, Park JY, Brink M, McEuen PL. Tuning carbon nanotube band gaps with strain. *Phys Rev Lett.* 2003;90(15).
- [89] Tombler TW, Zhou C, Alexseyev L, Kong J, Dai H, Liu L, et al. Reversible electromechanical characteristics of carbon nanotubes under local-probe manipulation. *Nature.* 2000;405(6788):769-72.

- [90] Yang L, Han J. Electronic structure of deformed carbon nanotubes. *Phys Rev Lett.* 2000;85(1):154-7.
- [91] Tans SJ, Verschueren ARM, Dekker C. Room-temperature transistor based on a single carbon nanotube. *Nature.* 1998;393(6680):49-52.
- [92] Antonov RD, Johnson AT. Subband Population in a Single-Wall Carbon Nanotube Diode. *Phys Rev Lett.* 1999;83(16):3274-6.
- [93] Watson JD, Crick FHC. Molecular structure of nucleic acids: A structure for deoxyribose nucleic acid. *Nature.* 1953;171(4356):737-8.
- [94] Bloomfield VA, Crothers DM, Tinoco I, Jr., Saenger W. Principles of Nucleic Acid Structure. *Phys Chem Nucl Acids.* 1974.
- [95] Calladine CR, Drew HR. Understanding DNA: The Molecule and How It Works. 2nd ed. ed. San Francisco: Morgan Kaufmann 1997.
- [96] Fink HW, Schönenberger C. Electrical conduction through DNA molecules. *Nature.* 1999;398(6726):407-10.
- [97] De Pablo PJ, Moreno-Herrero F, Colchero J, Gómez Herrero J, Herrero P, Baró AM, et al. Absence of dc-conductivity in λ -DNA. *Phys Rev Lett.* 2000;85(23):4992-5.
- [98] Porath D, Bezryadin A, De Vries S, Dekker C. Direct measurement of electrical transport through DNA molecules. *Nature.* 2000;403(6770):635-8.
- [99] Kasumov AY, Kociak M, Guéron S, Reulet B, Volkov VT, Klinov DV, et al. Proximity-induced superconductivity in DNA. *science.* 2001;291(5502):280-2.
- [100] Burteaux B, Claye A, Smith BW, Monthioux M, Luzzi DE, Fischer JE. Abundance of encapsulated C_{60} in single-wall carbon nanotubes. *Chem Phys Lett.* 1999;310:21-4.
- [101] Troche KS, Coluci VR, Braga SF, Chinellato DD, Sato F, Legolas SB. Prediction of ordered phases of encapsulated C_{60} , C_{70} and C_{78} inside carbon nanotubes. *Nano Lett.* 2005;5:349-55.
- [102] Luzzi DE, Smith BW. Carbon cage structures in single wall carbon nanotubes: A new class of materials. *Carbon.* 2000;38(11):1751-6.
- [103] Gao H, Kong Y, Cui D, Ozkan CS. Spontaneous insertion of DNA oligonucleotides into carbon nanotubes. *Nano Letters.* 2003;3(4):471-3.
- [104] Cui D, Ozkan CS, Ravindran S, Kong Y, Gao H. Encapsulation of pt-labelled DNA molecules inside carbon nanotubes. *Mech chem biosys: MCB.* 2004;1(2):113-21.
- [105] Hamdi M, Ferreira A. DNA nanorobotics. *Microelec J.* 2008;39(8):1051-9.

- [106] Erkoc S. Empirical potential energy function used in the simulations of material properties. *Annu Rev Comput Phys.* 2001;9:1-103.
- [107] Girifalco LA. Interaction potential for C₆₀ molecules. *J Phys Chem.* 1991;95:5370-1.
- [108] Lennard-Jones JE. The determination of molecular fields: from the variation of the viscosity of a gas with temperature. *Proc Roy Soc.* 1924;106:441.
- [109] Donnell LH. Beams, Plates, and Shells. New York: McGraw-Hill 1976.
- [110] Zang J, Aldás-Palacios O, Liu F. MD Simulation of Structural and Mechanical Transformation of Single-Walled Carbon Nanotubes Transformation of Single-Walled Carbon Nanotubes. *Commun Comput Phys.* 2007;2(3):451-65.
- [111] Shibutani Y, Ogata S. Mechanical integrity of carbon nanotubes for bending and torsion. *Model Simul Mater Sci Eng.* 2004;12:599-610.
- [112] Morii T, Mizuno R, Haruta H, Okada T. An AFM study of the elasticity of DNA molecules. *Thin Solid Films.* 2004;464-465:456-8.
- [113] Munteanu MG, Vlahovicek K, Parthasarathy S, Simon I, Pongor S. Rod models of DNA: sequence-dependent anisotropic elastic modelling of local bending phenomena. *Trends Biochem Sci.* 1998;23(9):341-7.

پیوست: مقالات مستخرج از رساله

- 1) Asghari M, Rafati J (2010). Variational principles for stability analysis of multi-walled carbon nanotubes based on a nonlocal shell model. 10th Biennial ASME Conference on Engineering Systems Design and Analysis (ESDA2010), Istanbul, Turkey.
- 2) Asghari M, Naghdabadi R, Rafati-Heravi J. Small scale effects on the stability of carbon nano-peapods under radial pressure. *Submitted to Phisca E*.
- 3) Asghari M, Rafati-Heravi J, Naghdabadi R. Torsional instability of carbon nano-peapods based on the nonlocal elastic shell theory. *Submitted to Carbon*.