

تأثیر عیب استون-ولز بر استحکام نهایی نانولوله‌های کربنی

داود یزدانی* و سید یوسف احمدی بروغنی

گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه بیرجند

(دریافت مقاله: ۱۳۹۲/۱۰/۱۶ - دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۴/۰۳/۰۶)

چکیده - در این پژوهش، یک مدل سه‌بعدی اجزاء محدود برای نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره آرمچیر، زیگزاگ و کایرال پیشنهاد شده است. برای ایجاد مدل اجزاء محدود، گره‌ها در محل اتم‌ها جایگزین شده، پیوندها به‌عنوان جزء تیر الاستیک سه‌بعدی مدل‌سازی شده است. با استفاده از این مدل تأثیر کایرالیته و عیب استون-ولز بر استحکام نهایی (تنش نهایی و کرنش نهایی) نانولوله کربنی تک‌دیواره بررسی شده است. نتایج نشان می‌دهد که این عیب استحکام نهایی نانولوله آرمچیر را به‌شدت کاهش می‌دهد، اما تأثیر بسیار کمی بر استحکام نهایی نانولوله زیگزاگ می‌گذارد. بر اساس نتایج، مسیر رشد ترک در نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر به ترتیب دارای زاویه ۹۰ و ۴۵ درجه نسبت به محور طولی نانولوله است.

واژگان کلیدی: نانولوله کربنی، روش اجزاء محدود، عیب استون-ولز، استحکام نهایی

Effect of Stone-Wales Defect on Ultimate Strength of Carbon Nanotubes

D. Yazdani* and S.Y. Ahmadi Brooghani

Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, University of Birjand, Birjand, Iran

Abstract: *In this study, a three-dimensional finite element (FE) model for armchair, zigzag and chiral single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) is proposed. To create the FE models, nodes are placed at the locations of carbon atoms and the bonds between them are modeled using three-dimensional elastic beam elements. The FE model is used to investigate the influence of chirality and Stone-Wales defects on the ultimate strength (Ultimate stress and ultimate strain) of SWCNTs. Results indicate that Stone-Wales defect significantly reduces the ultimate stress and strain of armchair CNTs. But this defect has a negligible effect on the ultimate strength of zigzag nanotubes. Based on the results, the crack growth path in zigzag and armchair nanotubes have 90 and 45 degree angle to the long axis of the nanotube, respectively.*

Keywords: *Carbon nanotubes, Finite element method, Stone-Wales defect, Ultimate strength*

* مسئول مکاتبات پست الکترونیکی: d.yazdani@birjand.ac.ir

نیروی بین اتمی (N)	F	انرژی پتانسیل کل (Nm)	E
ضرایب ثابت پتانسیل اصلاح شده مورس (rad^{-4})	k_{secti}	انرژی پتانسیل کشش پیوندی (Nm)	E_{stretch}
ضرایب ثابت پتانسیل اصلاح شده مورس (Nm/rad^2)	k_{θ}	انرژی پتانسیل خمش پیوندی (Nm)	E_{angle}
ضرایب ثابت پتانسیل اصلاح شده مورس (m^{-1})	β	طول اولیه و ثانویه پیوند کربن-کربن (m)	r, r_0
ضرایب ثابت پتانسیل اصلاح شده مورس (Nm)	D_e	زاویه اولیه و ثانویه بین دو پیوند کربن-کربن (rad)	θ, θ_0
تنش (GPa)	σ	کرنش (%)	ϵ
مختصات صفحه گرافن	x, y	مختصات نانولوله	X, Y, Z
قطر پیوند کربن-کربن (Å)	d	شعاع نانولوله (m)	R
طول نانولوله (Å)	L	قطر نانولوله (Å)	D

۱- مقدمه

آورده‌اند. این روش‌های مدل‌سازی به‌طور کلی به دو دسته مدل‌سازی اتمی و مکانیک محیط پیوسته تقسیم می‌شوند. یکی از روش‌های مدل‌سازی اتمی، روش دینامیک مولکولی کلاسیک^۱ MD است. بلیشکو و همکاران [۲] از ترکیب این روش و پتانسیل اصلاح شده مورس برای شبیه‌سازی شکست نانولوله کربنی مرتبط با کشش محوری استفاده کردند. آن‌ها ثابت کردند که استحکام شکست نانولوله تنها به نقطه بیشینه منحنی انرژی پتانسیل بین اتمی بستگی دارد و از انرژی گسست مستقل است. آن‌ها با استفاده از روش دینامیک مولکولی و اصلاح ضرایب پتانسیل مورس، کرنش نهایی ۱۴/۳٪ و تنش نهایی ۹۷/۵ گیگاپاسکال را برای نانولوله (۱۲،۱۲) به‌دست آوردند. این پژوهشگران با روش مکانیک مولکولی که روشی نظری است کرنش نهایی را برابر ۱۰-۱۵٪ به‌دست آوردند که با نتایج آزمایشگاهی موافقت خوبی داشت، ولی تنش نهایی پیش‌بینی شده بین ۶۵ تا ۹۳ گیگاپاسکال بود که به‌طور محسوسی از مقادیر تجربی بیش‌تر بود.

بسیاری از پژوهشگران برای شبیه‌سازی نانولوله‌های کربنی و شکست آن‌ها از روش مکانیک محیط پیوسته استفاده کرده‌اند [۳-۶]. در این روش، با پذیرش این شرط اساسی که مواد مورد

از ابتدای کشف نانولوله‌های کربنی، پژوهشگران با آن به‌عنوان یک ماده جدید برخورد نمودند و شروع به استخراج اطلاعات اولیه آن کردند. به‌دست‌آوردن خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی توسط روش‌های تجربی و نظری، بررسی تأثیر عیوب هندسی در خواص مکانیکی نانولوله کربنی و بررسی مکانیزم رشد ترک در آن‌ها (مکانیک شکست) مورد علاقه پژوهشگران مهندسی مکانیک و فیزیک مکانیک بوده است. آن‌ها روش‌های بسیاری نیز برای این اهداف به‌کار گرفته‌اند که به آن‌ها اشاره می‌شود.

یو و همکاران [۱] طی آزمایش‌هایی رفتار مکانیکی نانولوله‌های مختلف را بررسی کردند. آن‌ها با انجام آزمایش‌هایی مقدار تنش نهایی ۶۳-۱۱ گیگاپاسکال و کرنش نهایی ۱۰-۱۳٪ را برای ۱۵ نانولوله به‌دست آوردند. آن‌ها دریافتند که به‌طور میانگین این نانولوله‌ها دارای تنش نهایی ۲۸ گیگاپاسکال بودند.

در کنار کارهای آزمایشگاهی بسیاری که بر روی نانولوله‌های کربنی صورت گرفته، تعدادی از پژوهشگران به بررسی نانولوله‌ها با استفاده از روش‌های مدل‌سازی نظری روی

بررسی به صورت پیوسته در حوزه مورد بررسی وجود دارد، مفاهیم تنش و کرنش تعریف و ارتباط بین آن‌ها بر اساس مدل‌های گوناگون و برای مواد مختلف بیان می‌شود.

ژانگ و همکاران [۳] یک نظریه محیط پیوسته در مقیاس نانو پیشنهاد کردند که انرژی کرنشی در محیط پیوسته با انرژی پیوندها در سطح اتمی، برای تمامی پیوندهای اتمی، با استفاده از قانون کوشی-بورن^۲ محاسبه می‌شود. این نظریه ابتدا برای بررسی مدول الاستیک نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره تحت کشش به کار گرفته شد. در این نظریه، یک جزء حجم معرف^۳ از ساختار شیمیایی گرافیت با یک خرابای معادل یا مدل‌های محیط پیوسته دیگر جایگزین می‌شود. لی و چو [۴] اولین پژوهشگرانی بودند که مدل شکست پیش‌رونده^۴ PFM را به عنوان یک دیدگاه پیشنهاد کردند. آن‌ها از روش ماتریس سختی برای مدل کردن نانولوله استفاده کردند که نانولوله را به عنوان قاب فضایی در نظر می‌گرفت. در این روش که بر پایه روش اجزاء محدود و مکانیک مولکولی بنا نهاده شده است، نیروی بین هر دو اتم کربن به عنوان یک جزء تیر، و خود اتم‌ها به عنوان گره شبیه‌سازی شده‌اند. آن‌ها برای به دست آوردن مشخصات مکانیکی مانند مدول یانگ اجزاء تیر، پیوندی بین مکانیک مولکولی و مکانیک ساختاری برقرار کردند.

ژیانو و همکاران [۵] مدل تحلیلی مکانیک مولکولی را به منظور وارد کردن تابع پتانسیل مورس برای تخمین ثوابت الاستیک و پیش‌بینی روابط تنش و کرنش برای نانولوله‌های کربنی، تحت بارگذاری‌های کششی و پیچشی گسترش دادند. آن‌ها نیز با استفاده از مدل شکست پیش‌رونده مقادیری برای تنش و کرنش شکست نانولوله به دست آوردند. آن‌ها برای نانولوله آرمچیر (۱۲،۱۲) دارای عیب استون-ولز^۵، تنش شکست ۸۵/۹ گیگاپاسکال و کرنش شکست ۹/۸٪ و برای نانولوله زیگزاگ (۲۰،۰)، تنش شکست ۸۳/۳ گیگاپاسکال و کرنش شکست ۱۱٪ را به دست آوردند.

در یک مدل پیشنهاد شده در سال ۲۰۰۸ توسط مارکو روسی و همکاران [۶] مدل اجزاء محدودی برای تعیین خواص

مکانیکی نانولوله‌های کربنی تک‌دیواره از جمله مدول یانگ و تنش و کرنش نهایی، بر پایه نظریه مکانیک مولکولی به وجود آمد که در این مدل از اجزاء فنر کششی غیرخطی و فنر پیچشی برای مدل کردن اندرکنش‌های بین اتمی استفاده شده است. آن‌ها دریافتند که کایرالیته^۶ نانولوله‌ها نقش مهمی در شکست آن‌ها دارد. بررسی‌های آن‌ها برای نانولوله زیگزاگ (۹،۰)، تنش شکست ۹۴ گیگاپاسکال و کرنش شکست ۱۶/۴٪ و برای نانولوله آرمچیر (۵،۵)، تنش شکست ۱۲۳ گیگاپاسکال و کرنش شکست ۲۱/۶٪ را نشان می‌دهد.

تسرپس و همکاران [۷] نیز یک مدل اجزاء محدود را برای نانولوله کربنی دارای عیب استون-ولز توسعه دادند که رفتار پیوند C-C را غیرخطی فرض می‌کند. این مدل محدود به مواردی بود که تغییر شکل‌های کوچک در نانولوله اتفاق می‌افتاد. آن‌ها برای غلبه بر این تنگنا، مدل شکست پیش‌رونده را که قادر به شبیه‌سازی رفتار نانولوله تک‌جداره تحت شرایط بارگذاری مختلف مکانیکی است، پیشنهاد کردند. مدل شکست پیش‌رونده از یک مدل اجزاء محدود برای تحلیل ساختار نانولوله و یک پتانسیل بین اتمی برای تشریح رفتار غیرخطی پیوند C-C استفاده می‌کند. مدل شکست پیش‌رونده از پتانسیل اصلاح شده جفتی مورس استفاده می‌کند. بر اساس این مدل تنش و کرنش شکست برای نانولوله معیوب آرمچیر (۱۲،۱۲) به ترتیب ۱۱۲ گیگاپاسکال و ۱۶/۷۴٪ و برای نانولوله معیوب زیگزاگ (۲۰،۰) به ترتیب ۹۷/۶۸ گیگاپاسکال و ۱۵/۷۵٪ به دست آمده است.

ذاکری و شایان‌مهر [۸] نیز با استفاده از جزء تیر به مدل‌سازی نانولوله‌های کربنی پرداختند. آن‌ها با این روش، مدول الاستیک نانولوله‌های کربنی کایرال را محاسبه کردند. هم‌چنین محمد و همکاران [۹] با استفاده از جزء تیر، مدول الاستیک و مدول صلبیت نانولوله‌های کربنی زیگزاگ و آرمچیر را محاسبه کردند. لی و لی [۱۰] با استفاده از جزء تیر و اختصاص دادن جرم به نانولوله، به آنالیز مودال نانولوله‌های کربنی استوانه‌ای و هرمی پرداختند.

در پژوهش حاضر با استفاده از روش اجزاء محدود بر پایه مکانیک مولکولی، خواص مکانیکی و مکانیک شکست نانولوله‌های کربنی دارای عیب استون-ولز مورد بررسی قرار گرفته است. در این پژوهش از جزء تیر برای شبیه‌سازی رفتار پیوند کربن-کربن استفاده شده است که منحنی تنش-کرنش غیرخطی آن با استفاده از پتانسیل اصلاح‌شده مورس به دست آمده است. در این پژوهش به دلیل کوچک بودن نسبت طول به قطر جزء تیر (تقریباً برابر یک)، از نظریه تیر تیموشنکو که تغییرشکل‌های برشی را نیز در نظر می‌گیرد، برای تحلیل تغییرشکل جزء تیر استفاده شده است. این در حالی است که در پژوهش‌های پیش از این، با صرف نظر کردن از تغییرشکل‌های برشی که در مورد تیرهای ضخیم سهم عمده‌ای در میدان تغییر مکان دارند، از نظریه ساده تیر اویلر-برنولی استفاده شده است. به دلیل اینکه عیب هندسی استون-ولز در میانه نانولوله جای‌گذاری شده است، برای جلوگیری از تأثیر اثرات تکیه‌گاهی روی نتایج نقطه‌ی میانی (عیب هندسی)، نسبت طول به قطر نانولوله بیش از ۵ در نظر گرفته شده است. هم‌چنین به دلیل اینکه مکانیک شکست نانولوله‌ها که با تغییرشکل‌های بزرگ همراه است، مورد بررسی قرار می‌گیرد، این تغییرشکل‌های بزرگ در نظر گرفته شده است که به موجب آن ماتریس سختی نانولوله در هر مرحله بارگذاری تجدید (به‌روز) می‌شود که این امر در کنار افزایش دقت حل، باعث افزایش قابل‌توجه زمان پردازش مدل بارگذاری شده، می‌شود. در پژوهش‌های انجام‌شده پیشین، از این تغییرشکل‌های بزرگ صرف‌نظر شده است که این موجب شده است نتایج آن‌ها تنها برای حالت تغییرشکل‌های کوچک معتبر باشد. در این پژوهش برای تعیین نقش کایرالیته بر خواص مکانیکی و مکانیک شکست نانولوله‌ها، مدل‌سازی نانولوله‌های کایرال نیز صورت گرفته است که در پژوهش‌های پیشین، به دلیل دشواری تولید شبکه هندسی آن‌ها بررسی نشده است. به همین منظور یک نوع نانولوله زیگزاگ و آرمچیر و نیز نانولوله کایرالی که زوج مرتب آن بین دو نانولوله قبلی است، مدل‌سازی شده است. در پژوهش‌های پیشین، برای مدل‌سازی

ترک، از یک جزء تضعیف شده استفاده شده است ولی در این کار ترک از ابتدا در نانولوله به وجود نیامده است، بلکه در حین فرایند بارگذاری در محل عیب هندسی، با توجه به رسیدن تنش یک جزء به حد گسیختگی خود، شکست پیوند رخ می‌دهد و ترک حاصل از آن رشد می‌کند.

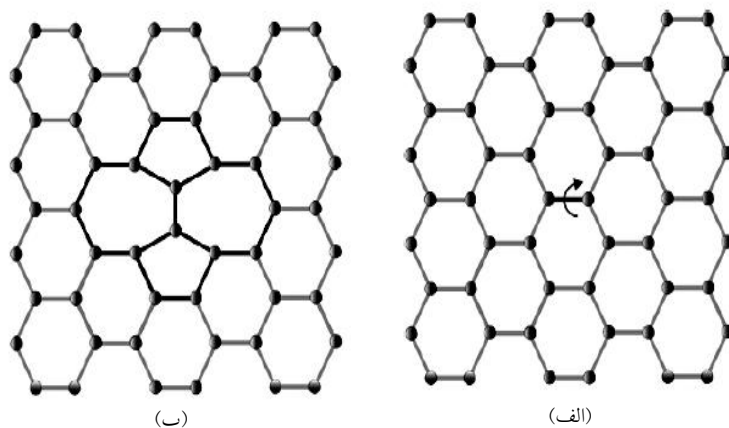
۱-۲- معرفی عیب

نانولوله‌ها دارای ساختار هندسی بسیار منظمی هستند. این مواد در حین فرایند تولید دچار اشکالاتی می‌شوند که خود را در قالب بی‌نظمی‌های هندسی نمایان می‌کنند. یکی از عیب‌های متداول هندسی در آن‌ها، عیب استون-ولز است. این عیب که در شکل ۱ قابل مشاهده است، به دلیل چرخش یک پیوند اتمی به وجود می‌آید که به همین دلیل در ساختار هندسی نانولوله دو پنج‌ضلعی متقابل و دو هفت‌ضلعی متقابل به وجود می‌آید. این عیب محل شروع شکست در بیشتر بارگذاری‌های مکانیکی محسوب می‌شود.

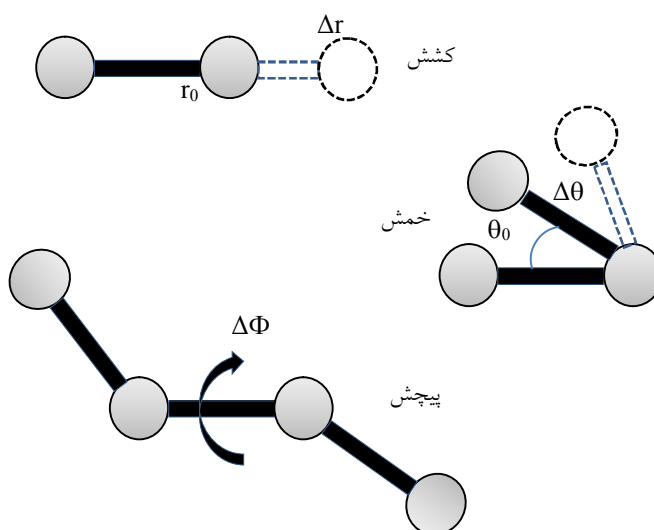
۲- تحلیل اجزاء محدود نانولوله کربنی

در ساختار نانولوله بین هر دو اتم کربن یک پیوند کوالانسی قوی برقرار است. زمانی که نانولوله تحت بارگذاری قرار می‌گیرد، اندرکنش‌های متفاوتی بین اتم‌های موجود در ساختار نانولوله اتفاق می‌افتد. عامل اصلی مقاومت نانولوله‌ها در برابر بارگذاری همین پیوندهای کوالانسی است که موجب به وجود آمدن عکس‌العمل‌های مختلفی در بین دو اتم کربن می‌شود. در شکل ۲ می‌توان سه نوع از این عکس‌العمل‌ها را مشاهده کرد.

همانطور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود سه نوع عکس‌العمل کششی، خمشی و پیچشی در پیوند کوالانسی به وجود می‌آید. برای شبیه‌سازی این اندرکنش‌ها به روش اجزاء محدود، جزء تیر انتخاب شده است که هر سه این ویژگی‌ها را داراست. البته باید خاطر نشان کرد که بین دو اتم کربنی که با یکدیگر پیوند کوالانسی ندارند، پیوند واندروالس برقرار است



شکل ۱- الف) شبکه آرمچیر بدون عیب و ب) شبکه آرمچیر دارای عیب استون-ولز



شکل ۲- اندرکنش‌های بین دو اتم کربن دارای پیوند کوالانسی

اتفاق می‌افتد که دو اتم گسسته شده زمانی برای ایجاد پیوند با دیگر اتم‌های غیرپیوندی را ندارند، می‌توان از پتانسیل اصلاح‌شده مورس، که در موارد دمایی بین صفر تا ۵۰۰ درجه کلونین معتبر است، استفاده کرد. بر اساس رابطه پتانسیل اصلاح‌شده مورس، انرژی پتانسیل بین دو اتم کربن در نانولوله کربنی به صورت رابطه ۱ بیان می‌شود [۱۲].

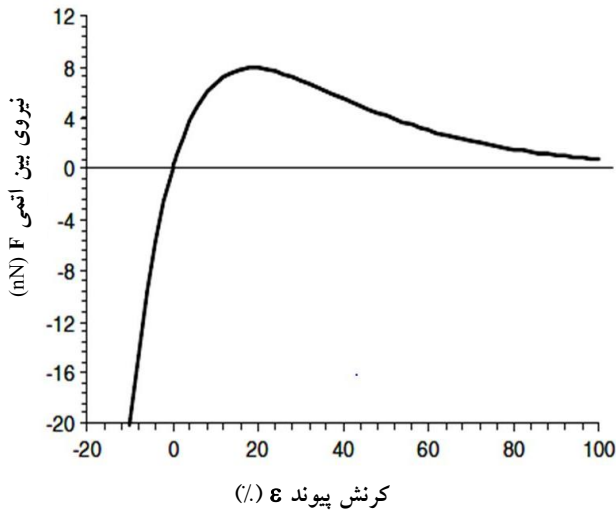
$$E = E_{\text{stretch}} + E_{\text{angle}} \quad (1)$$

$$E_{\text{stretch}} = D_e \left\{ \left[1 - e^{\beta(r-r_0)} \right]^2 - 1 \right\} \quad (2)$$

که به مراتب از پیوند کوالانسی ضعیف‌تر است و می‌توان از اثر آن صرف‌نظر کرد [۱۱].

۱-۲- به‌دست آوردن مشخصات جزء تیر

برای به‌دست آوردن خصوصیات مکانیکی جزء بین دو گره از مکانیک ساختاری استفاده شده است. بلیشکو [۱۲] نشان می‌دهد که شکست نانولوله‌ها وابسته به نقطه بیشینه نمودار انرژی پیوندی بین اتمی است و از انرژی شکست (جدایش) مستقل است. بنابراین چون بیشینه کرنش بین دو اتم زمانی



شکل ۳- نمودار نیروی بین اتمی بر حسب کرنش
برای پتانسیل اصلاح شده مورس [۷]

به شرح جزئیات روش مدل‌سازی اجزاء محدود نانولوله‌ها پرداخته می‌شود.

برای تحلیل اجزاء محدود از نرم‌افزار تجاری آنسیس^۷ استفاده شده است. برای شروع ابتدا شبکه هندسی نانولوله تولید می‌شود، برای این کار برنامه رایانه‌ای به زبان فرترن^۸ نوشته شده است که هر سه نوع نانولوله آرمچیر، کایرال و زیگزاگ را تولید می‌کند. برنامه به این صورت عمل می‌کند که با وارد کردن مقادیر زوج مرتب (n, m) و تعداد تکرار سلول واحد نانولوله، ابتدا مختصات نقاط یا اتم‌های صفحه گرافن را تولید می‌کند، سپس هر نقطه را به سه نقطه دیگر متصل می‌کند تا جزء بین دو گره تولید شود. به عبارتی، فرایند مش‌بندی توسط کد رایانه‌ای انجام می‌شود. پس از تولید صفحه گرافن، با استفاده از تبدیل مختصات زیر (رابطه ۷) می‌توان نانولوله حاصل از لوله کردن صفحه گرافن را به دست آورد.

$$(X, Y, Z) = \left[R \cos\left(\frac{X}{R}\right), R \sin\left(\frac{X}{R}\right), y \right] \quad (7)$$

در رابطه ۷ مقادیر X، Y و Z مختصات نانولوله، x و y مختصات گرافن و R شعاع نانولوله است. تولید مدل اجزاء محدود در نرم‌افزار آنسیس با استفاده از فایل خروجی برنامه رایانه‌ای انجام می‌شود.

$$E_{\text{angle}} = \frac{1}{2} k_{\theta} (\theta - \theta_0)^2 \left[1 + k_{\text{sextic}} (\theta - \theta_0)^4 \right] \quad (3)$$

در رابطه ۱، E_{stretch} انرژی پیوندی ناشی از کشش و E_{angle} انرژی پیوندی ناشی از خمش پیوند است. در رابطه ۲، r_0 و r به ترتیب طول فعلی و اولیه پیوند کربن-کربن است و در رابطه ۳، θ_0 و θ به ترتیب زاویه فعلی و اولیه بین دو پیوند مجاور هم است. پارامترهای ثابت این روابط به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۲].

$$\begin{aligned} r_0 &= 1.421 \times 10^{-10} \text{ m} & D_e &= 6.03105 \times 10^{-19} \text{ Nm} \\ \beta &= 2.625 \times 10^{-10} \text{ m}^{-1} & \theta_0 &= 2.094 \text{ rad} \\ k_{\theta} &= 0.9 \times 10^{-18} \text{ Nm / rad}^2 & k_{\text{sextic}} &= 0.754 \text{ rad}^{-4} \end{aligned} \quad (4)$$

چون کشش پیوندی در شکست نانولوله‌ها تأثیرگذار است و اثر پتانسیل خمش پیوندی در آن بسیار کم است، فقط پتانسیل کشش پیوندی در نظر گرفته می‌شود [۱۲]. با توجه به اینکه رابطه ۲ به صورت تابع پتانسیل تعریف شده است، می‌توان با مشتق گرفتن از آن نیروی کشش اتمی بین دو اتم کربن را به دست آورد که نمودار آن در شکل ۳ قابل مشاهده است:

$$F = 2\beta D_e (1 - e^{\beta(r-r_0)}) e^{-\beta(r-r_0)} \quad (5)$$

همان‌طور که در شکل ۳ مشاهده می‌شود، نیروی پیوند بین اتمی در کرنش ۱۹٪ به بیشینه مقدار خود می‌رسد و پس از آن به شدت کاهش پیدا می‌کند و به صورت مجانبی به عدد صفر میل می‌کند. رابطه نیرو- تغییر مکان پتانسیل اصلاح شده مورس با فرض مقطع دایره‌ای ($d=1.46618 \text{ \AA}$) برای اجزاء و استفاده از روابط کرنش- تغییر مکان و تنش- نیرو به رابطه تنش-کرنش زیر تبدیل می‌شود.

$$\sigma = 1.875834 \times 10^{12} (1 - e^{-3.730125}) e^{-3.730125} \quad (6)$$

رابطه ۶ به عنوان مبنای مدل‌سازی پیوند کربن-کربن در مدل اجزاء محدود نانولوله کربنی مورد استفاده قرار می‌گیرد.

۲-۲- الگوریتم مدل‌سازی و تحلیل اجزاء محدود

پس از به دست آوردن رابطه تنش-کرنش برای هر پیوند، کل هندسه نانولوله به روش اجزاء محدود تحلیل می‌شود. در ادامه

سپس نوع جزء مورد استفاده در نرم افزار آنسیس انتخاب می شود. رفتار جزء بین دو گره که تحت کشش، فشار، خمش و پیچش قرار می گیرد، مانند جزء تیر است، اما نکاتی باید در این انتخاب رعایت شود. همان طور که در بخش قبلی بیان شد، رابطه بین تنش و کرنش در یک پیوند کرن-کرن غیرخطی است، بنابراین جزء انتخاب شده نیز باید قابلیت رفتار غیرخطی ماده را داشته باشد. همچنین به دلیل کوچکی نسبت طول T_0 به قطر d جزء که تقریباً برابر یک است، تغییر شکل های برشی جزء اهمیت پیدا می کنند. به همین خاطر باید از جزئی استفاده شود که از معادلات نظری تیر تیموشنکو، پیروی کند. همچنین به دلیل اینکه در هنگام گسیختگی نانولوله، تغییر شکل های بزرگی در اجزا به وجود می آید، باید اجزایی مورد استفاده قرار گیرد که قابلیت تحلیل تغییر شکل های بزرگ را نیز داشته باشد. جزء BEAM188 هر سه قابلیت یاد شده را دارد، لذا از این جزء برای شبیه سازی رفتار پیوند کرن-کرن استفاده می شود. البته باید به این نکته توجه شود که هر سه مورد نام برده در بالا، باعث افزایش ویژگی غیرخطی بودن و به دنبال آن افزایش زمان پردازش مدل می شود. به عنوان مثال برای پردازش نانولوله (۸، ۸) با ۱۱۸۴ جزء توسط یک سامانه پردازشی با قدرت ۲/۸ گیگاهرتز، زمانی بالغ بر ۷۲ ساعت سپری شده است.

در مدل سازی فرایند شکست نانولوله، به دلیل کاهش شدید نیروی بین اتمی پس از کرنش ۱۹٪، در مدل اجزاء محدود فرض شده است که پس از این مقدار کرنش، جزء قادر به تحمل بار نیست. از این رو نمودار تنش-کرنش برای هر جزء تا کرنش ۲۰٪ با ۲۱ نقطه به صورت جدول به عنوان خصوصیات ماده جزء تیر در نرم افزار آنسیس وارد شده است. مقدار تنش متناظر با کرنش شکست، برابر ۴۶۶/۴۵ گیگاپاسکال است. برای مدل سازی فرایند شکست نانولوله نیز برنامه رایانه ای به زبان برنامه نویسی طراحی پارامتریک آنسیس^۹ که ویژه نرم افزار آنسیس است، نوشته شده است. در این برنامه پس از شروع بارگذاری، به طور خودکار تنش هر جزء نمایه می شود و مقدار تنش در هر جزء نانولوله بررسی می شود. در صورت تجاوز

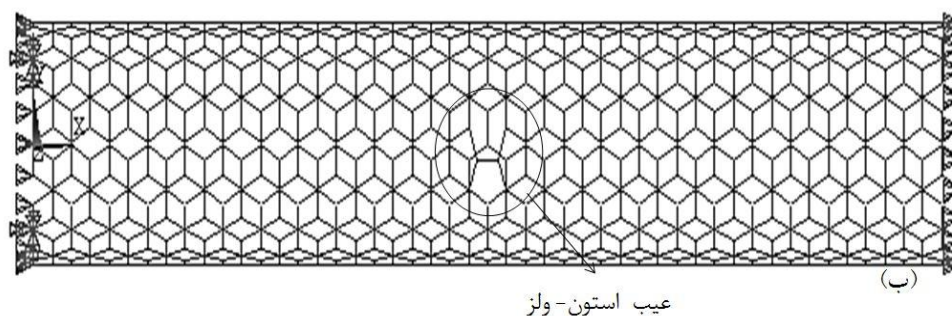
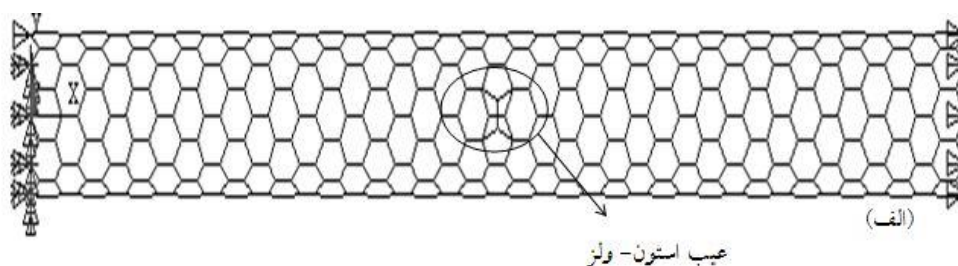
تنش یک جزء از مقدار تنش نهایی اشاره شده، آن جزء از مدل حذف می شود و بارگذاری ادامه پیدا می کند. این روند به طور خودکار تا زمان گسیختگی کامل نانولوله ادامه پیدا می کند. برای بارگذاری نانولوله، گره های یک انتهای آن در جهت x کاملاً مقید شده است و برای جلوگیری از حرکت صلب وار چند گره آن به صورت کامل با تمام درجات آزادی مقید شده است. گره های انتهای دیگر نیز به صورت اعمال جابجایی در جهت x بارگذاری شده اند. با توجه به اصل سن ونانت، برای جلوگیری از تأثیر تکیه گاه بر نتایج در منطقه میانی نانولوله که مورد بررسی است، نسبت طول به قطر همه نانولوله های مورد بررسی بیش از ۵ در نظر گرفته شده است. مشخصات هندسی نانولوله هایی که در این پژوهش مورد بررسی قرار گرفته اند، در جدول ۱ آورده شده است. در شکل ۴ مش بندی و بارگذاری نانولوله آرمچیر و زیگزاگ دارای عیب استون-ولز نشان داده شده است. تسریس [۷] نشان می دهد که استفاده از چند جزء بین هر دو گره در مدل سازی اجزاء محدود نانولوله های کرنی تأثیر بسیار کمی در دقت نتایج دارد ولی در مقابل هزینه زمانی تحلیل مدل را بسیار افزایش می دهد. به همین منظور در پژوهش حاضر نیز فقط از یک جزء برای مدل سازی پیوند کرن-کرن استفاده شده است که در شکل ۴ قابل مشاهده است.

۳- نتایج شبیه سازی

با استفاده از مدل های اجزاء محدود تولید شده و اجرای برنامه نوشته شده، بر روی مدل ها بارگذاری انجام می شود. در حین فرایند بارگذاری مشاهده می شود که همواره تنش در یکی از اجزاء اطراف عیب استون-ولز به مقدار تنش شکست تعیین شده می رسد و به طور خودکار توسط برنامه حذف می شود. به عبارت دیگر محل شروع (هسته زایی) شکست، محل عیب هندسی است. پس از حذف یک جزء از مدل، سهم دیگر اجزاء از تحمل بار اعمالی افزایش پیدا می کند و به طور طبیعی اجزاء اطراف آن سریع تر به تنش نهایی خود می رسند. این روند تا شکست کامل نانولوله توسط برنامه اجرا می شود.

جدول ۱- مشخصات هندسی نانولوله‌های مدل‌سازی شده

نوع نانولوله	قطر (Å)	طول (Å)	L/D
زیگزاگ (۵،۰)	۳/۹۱	۴۵/۴۷	۱۱/۶۰
زیگزاگ (۱۰،۰)	۷/۸۳	۷۱/۰۵	۹/۰۷
کایرال (۵،۲)	۴/۸۹	۴۹/۴۹	۱۰/۱۱
کایرال (۵،۴)	۶/۱۱	۴۹/۹۴	۸/۱۶
آرمچیر (۵،۵)	۶/۷۸	۵۰/۲۲	۷/۴۰
آرمچیر (۸،۸)	۱۰/۸۵	۶۰/۳۰	۵/۵۵



شکل ۴- الف) مش‌بندی و بارگذاری نانولوله زیگزاگ (۰،۱۰) دارای عیب استون-ولز
ب) مش‌بندی و بارگذاری نانولوله آرمچیر (۸،۸) دارای عیب استون-ولز

۳-۱- منحنی تنش - کرنش نانولوله‌های کربنی

برای بررسی تأثیر عیب هندسی استون-ولز بر استحکام نهایی نانولوله‌ها، نمودار تنش - کرنش نانولوله‌های طبیعی و معیوب برای هر سه نوع نانولوله‌ی تک‌جداره‌ی آرمچیر، کایرال و زیگزاگ در ادامه ارائه می‌شود. همانطور که در شکل ۵ نشان داده شده است، نمودار تنش - کرنش نانولوله زیگزاگ (۵،۰) به صورت غیرخطی به دست آمده است که با نتایج دیگر پژوهشگران هماهنگی دارد. شیب تغییرات برای هر دو نانولوله طبیعی و معیوب نیز یکسان است. بر اساس نتایج به دست آمده

مقدار تنش نهایی و کرنش نهایی برای نانولوله زیگزاگ (۵،۰) طبیعی به ترتیب ۹۴/۴ گیگاپاسکال و ۲۳٪ است. همان‌طور که در شکل ۵ مشاهده می‌شود تأثیر عیب استون-ولز بر تنش و کرنش نهایی نانولوله‌ی زیگزاگ ناچیز است به گونه‌ای که تنش نهایی ۲٪ و کرنش نهایی ۱۶٪ کاهش پیدا می‌کند. بر اساس شکل ۵ الگوی شکست در نانولوله (۵،۰) به صورت شکست ترد است، یعنی به محض اینکه یکی از اجزاء گسیخته می‌شود، فرایند شکست بقیه اجزاء بسیار سریع رخ می‌دهد و نمودار تنش - کرنش پس از نقطه بیشینه ادامه پیدا نمی‌کند. این

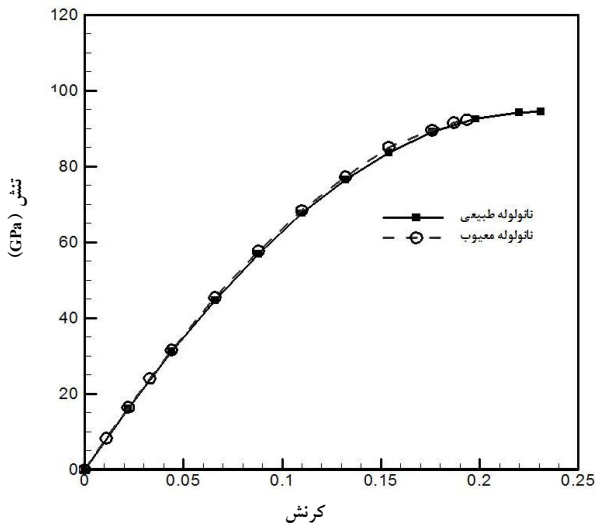
روند برای هر دو نوع نانولوله طبیعی و معیوب قابل مشاهده است.

مقدار تنش و کرنش نهایی برای نانولوله‌ی (۱۰،۰) به ترتیب برابر ۹۴/۶ گیگاپاسکال و ۲۳٪ است. با توجه به شکل ۶ که منحنی تنش-کرنش نانولوله‌ی زیگزاگ (۱۰،۰) را به تصویر کشیده است، می‌توان گفت که عیب استون-ولز در این نوع نانولوله باعث ۳٪ کاهش در تنش نهایی و ۱۳٪ کاهش در کرنش نهایی شده است.

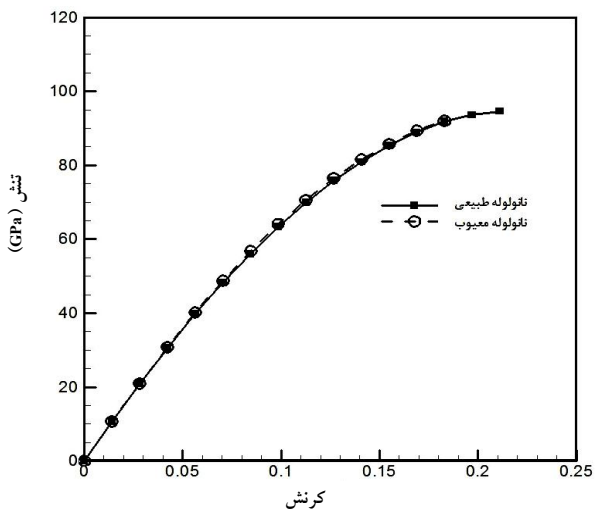
در شکل‌های ۷ و ۸ نمودار تنش-کرنش نانولوله‌های کایرال به ترتیب (۵،۲) و (۵،۴) مشاهده می‌شود. بنابر دانش نویسنده، مدل‌سازی این نوع نانولوله تا به حال بندرت توسط پژوهشگران صورت گرفته است.

با ملاحظه به نمودار شکل‌های ۷ و ۸، مقدار تنش و کرنش نهایی برای نانولوله طبیعی (۵،۲) به ترتیب ۹۱/۳ گیگاپاسکال و ۱۴/۱٪ و برای نانولوله‌ی طبیعی (۵،۴) به ترتیب ۱۱۲ گیگاپاسکال و ۱۶/۸۵٪ به دست آمده است. نمودار شکل‌های ۷ و ۸ هم‌چنین نشان می‌دهد که تأثیر عیب استون-ولز بر مقادیر تنش و کرنش نهایی نانولوله کایرال متناسب با کایرالیته آن متفاوت است، به گونه‌ای که برای نوع (۵،۲) تنش و کرنش نهایی به ترتیب ۲٪ و ۴٪ و برای نوع (۵،۴) تنش و کرنش نهایی به ترتیب ۲۷٪ و ۳۸٪ کاهش پیدا می‌کند. در این نمودار نیز مشاهده می‌شود که تغییرات تنش-کرنش غیرخطی است و فرایند شکست به صورت ترد اتفاق می‌افتد.

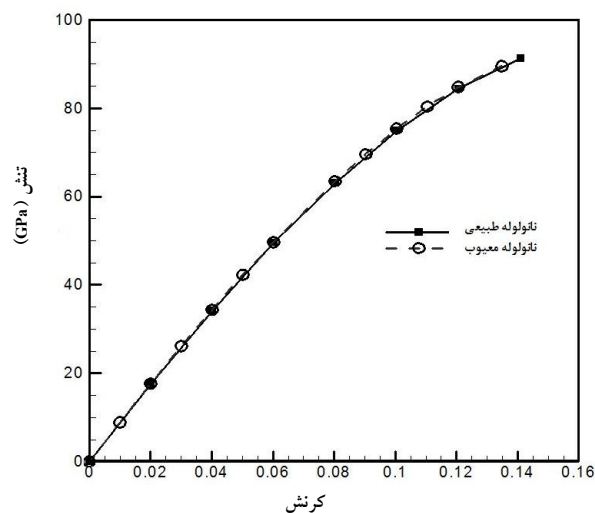
نتایج مدل‌سازی برای نانولوله آرمچیر نشان می‌دهد که تنش و کرنش نهایی برای نانولوله طبیعی (۵،۵) به ترتیب ۱۱۵ گیگاپاسکال و ۱۹/۵٪ است. برای نانولوله طبیعی (۸،۸) نیز مقادیر تنش و کرنش نهایی به ترتیب ۱۲۰ گیگاپاسکال و ۱۸/۵٪ به دست آمده است. نمودار شکل‌های ۹ و ۱۰ نشان می‌دهند که عیب استون-ولز دارای تأثیر زیادی بر تنش و کرنش نهایی نانولوله آرمچیر نسبت به نانولوله زیگزاگ است، به گونه‌ای که تنش و کرنش نهایی نانولوله معیوب (۵،۵) به ترتیب ۲۸٪ و ۴۴٪ کم‌تر از تنش و کرنش نهایی نانولوله‌های طبیعی است.



شکل ۵- نمودار تنش-کرنش نانولوله زیگزاگ (۱۰،۰)



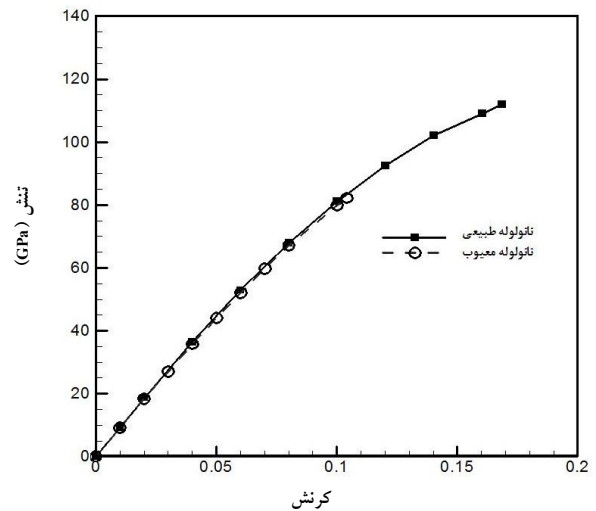
شکل ۶- نمودار تنش-کرنش نانولوله زیگزاگ (۱۰،۰)



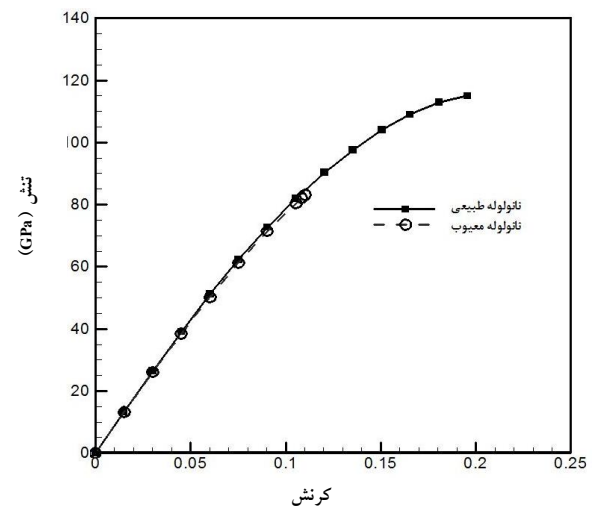
شکل ۷- نمودار تنش-کرنش نانولوله کایرال (۲،۵)

نانولوله معیوب (۸۸) نیز تنش و کرنش نهایی به ترتیب ۳۰٪ و ۴۱٪ کاهش یافته است.

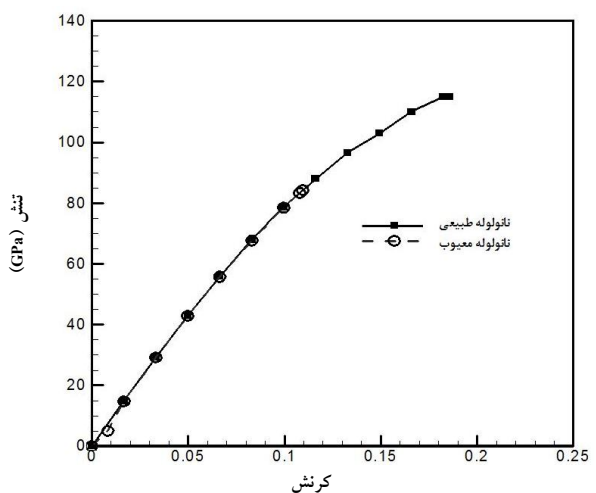
نانولوله آرمچیر نیز مانند نانولوله زیگزاگ و کایرال، دارای تغییرات تنش - کرنش غیرخطی است. فرایند شکست نانولوله آرمچیر نیز به صورت شکست ترد است. نکته قابل توجه در همه نمودارهای تنش - کرنش ارائه شده در مطالب بالا، این است که نحوه (شیب) تغییرات تنش و کرنش برای هر دو نوع نانولوله طبیعی و معیوب تفاوت چندانی ندارد و تقریباً می توان گفت که شیب تغییرات آن ها با یکدیگر برابر است. برای اعتبارسنجی، نتایج این پژوهش با نتایج به دست آمده توسط دیگر پژوهشگران مقایسه شد. مقایسه مقادیر به دست آمده تنش نهایی و کرنش نهایی برای نانولوله های مورد بررسی در این پژوهش با نتایج دیگر پژوهشگران و روش های دیگر در جدول ۲ درج شده است. با توجه به مقادیر درج شده برای تنش و کرنش نهایی در جدول ۲ می توان دریافت که نتایج پژوهش حاضر توافق خوبی با نتایج روش اجزاء محدود به کار گرفته شده توسط دیگر پژوهشگران دارد. اختلاف نتایج با مقادیر روش های تجربی و مکانیک مولکولی بیش تر است. روش تجربی مقادیر کم تری را برای استحکام نهایی نشان می دهد که ناشی از عیوب در حین تولید نانولوله است که در روش های مکانیک مولکولی و اجزاء محدود در نظر گرفته نمی شوند. در روش مکانیک مولکولی، تعداد کمی از اتم ها در نظر گرفته می شوند و معادلات حرکت نیوتنی برای آن ها حل می شوند. به همین دلیل نتایج آن برای نانولوله های کوتاه به دست آمده است که این موضوع باعث می شود با مقادیر روش اجزاء محدود که نانولوله های بلند را بررسی می کند، اختلاف داشته باشد. اختلاف در بین روش های اجزاء محدود نیز به این دلیل است که اجزاء متفاوتی به عنوان پیوند کربن - کربن توسط پژوهشگران مورد استفاده قرار گرفته است. به عنوان مثال روسی [۱۳] از اجزاء فنر کششی و پیچشی برای پیوند کربن - کربن و تسرپس [۷] مانند کار کنونی از جزء تیر استفاده کرده است.



شکل ۸- نمودار تنش - کرنش نانولوله کایرال (۴،۵)



شکل ۹- نمودار تنش - کرنش نانولوله آرمچیر (۵،۵)



شکل ۱۰- نمودار تنش - کرنش نانولوله آرمچیر (۸،۸)

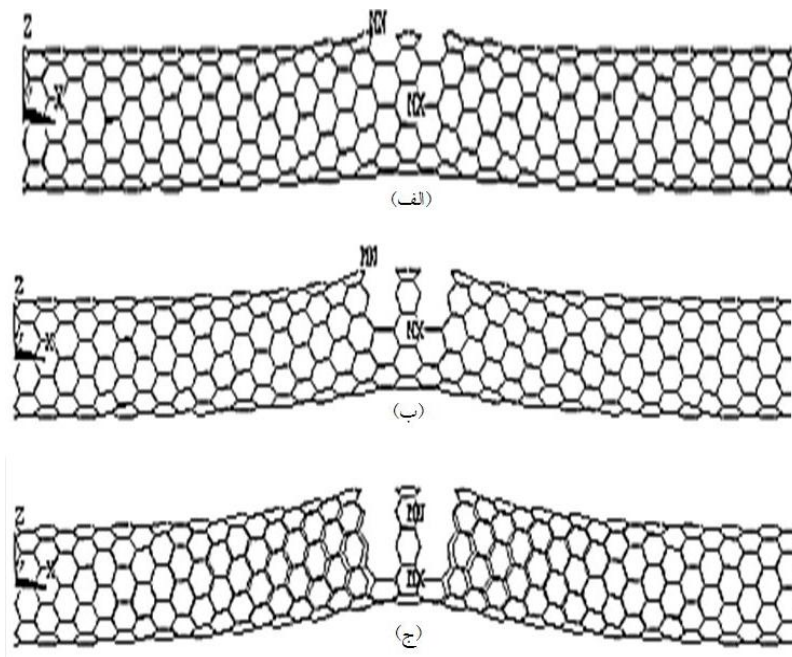
جدول ۲- تنش نهایی و کرنش نهایی نانولوله‌های طبیعی و دارای عیب استون-ولز

نوع نانولوله	مرجع	روش	تنش نهایی (گیگاپاسکال)	کرنش نهایی (%)
(۵،۰) طبیعی	کار حاضر	اجزاء محدود	۹۴/۴	۲۳
	[۱۳]	اجزاء محدود (فنر)	۹۳/۸	۱۷/۲
(۵،۰) معیوب	کار حاضر	اجزاء محدود	۹۲/۳	۱۹/۳
	کار حاضر	اجزاء محدود	۹۴/۶	۲۱
(۰،۱۰) طبیعی	[۱۵]	دینامیک مولکولی	۹۲/۵	-
	[۱]	تجربی	۱۰۵	۲۰
	[۱۳]	اجزاء محدود (فنر)	۹۴/۷	۱۸/۴
	[۱۶]	مولکولی/کوانتومی	۸۸	۱۸/۱
(۰،۱۰) معیوب	کار حاضر	اجزاء محدود	۹۲	۱۸/۲
	کار حاضر	اجزاء محدود	۹۱/۳	۱۴/۱
(۵،۲) طبیعی	کار حاضر	اجزاء محدود	۸۹/۵	۱۳/۴۸
	کار حاضر	اجزاء محدود	۱۱۲	۱۶/۸۵
(۵،۴) معیوب	کار حاضر	اجزاء محدود	۸۲/۲	۱۰/۴
	کار حاضر	اجزاء محدود	۱۱۵	۱۹/۶
(۵،۵) طبیعی	[۷]	اجزاء محدود (تیر)	۱۲۲/۵۴	۱۹/۶۴
	[۱]	مکانیک کوانتومی	۱۱۰	۳۰
	[۱۳]	اجزاء محدود (فنر)	۱۱۷/۳	۱۹/۹۵
	[۱۶]	مولکولی/کوانتومی	۱۰۵	۲۹/۷
(۵،۵) معیوب	کار حاضر	اجزاء محدود	۸۳/۲	۱۱
	[۷]	اجزاء محدود (تیر)	۹۲/۴۴	۱۱/۵۱
	[۱۶]	مولکولی/کوانتومی	۸۸	۱۶/۲
(۸،۸) طبیعی	کار حاضر	اجزاء محدود	۱۲۰	۱۸/۶
	[۱۴]	چگالی تابعی	۱۱۵	۲۹/۵
(۸،۸) معیوب	کار حاضر	اجزاء محدود	۸۴/۳	۱۰/۹

۳-۲- مسیر رشد ترک در نانولوله‌ی کربنی

در زمینه پژوهش‌ها بر روی نانولوله‌های کربنی، شناسایی مسیر رشد ترک ناشی از شکستن اجزاء نیز مورد علاقه پژوهشگران بوده است. به همین منظور در ادامه به بررسی مکانیزم و مسیر رشد ترک در نانولوله‌های مورد بررسی پرداخته می‌شود. در شکل ۱۱ مراحل متوالی فرایند شکست یک نانولوله زیگزاگ

(۰،۱۰) که دارای عیب استون-ولز است نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که پس از بارگذاری، اولین اجزایی که به مقدار تنش شکست خود می‌رسند، همان اجزای اطراف عیب استون-ولز هستند که در راستای طولی نانولوله قرار دارند. بر مبنای الگوریتم شرح داده شده در بخش ۲-۱، جزئی که به مقدار تنش شکست خود برسد توسط برنامه رایانه‌ای از مدل اجزاء محدود



شکل ۱۱- مراحل شکست نانولوله زیگزاگ (۰،۱۰) دارای عیب استون-ولز

نشان می دهد که دارای عیب استون-ولز است. همان طور که در شکل ۱۳ مشاهده می شود، در ابتدای بارگذاری چند جزء اطراف عیب هندسی که مورب هستند، به بیشینه تنش خود می رسند و توسط برنامه رایانه ای از مدل تحت بارگذاری حذف می شوند. با حذف این اجزاء و در پی آن افزایش سهم دیگر اجزاء از بار اعمال شده، دیگر اجزاء نزدیک عیب استون-ولز خیلی سریع به تنش شکست خود می رسند. این فرایند شکست پیش رونده با همین روند ادامه می یابد تا در نهایت نانولوله با زاویه ۴۵ درجه نسبت به محور طولی گسیخته می شود.

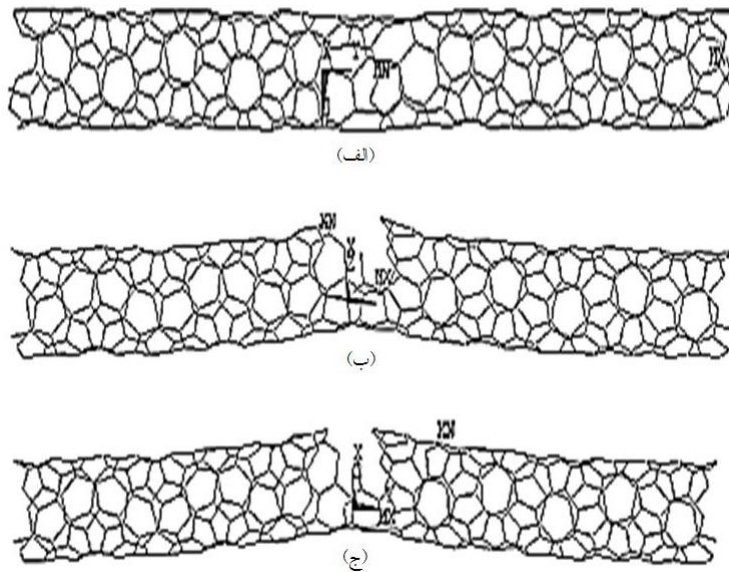
۴- نتیجه گیری

۱. روش اجزاء محدود بر پایه مکانیک اتمی با فرض رفتار قاب فضایی قادر است که رفتار نانولوله های کربنی طبیعی و معیوب را شبیه سازی کند.
۲. در این پژوهش با روش اجزاء محدود اثر عیب استون-ولز بر تنش و کرنش نهایی نانولوله های کربنی زیگزاگ، کایرال و آرمچیر مورد بررسی قرار گرفت.
۳. نتایج شبیه سازی درباره نانولوله ی طبیعی زیگزاگ نشان

حذف می شود. پس از حذف این جزء از مدل، به طور طبیعی سهم اجزاء طولی همین ردیف از بار اعمال شده افزایش پیدا می یابد و این اجزاء قبل از بقیه اجزاء نانولوله به مقدار تنش شکست خود می رسند و از مدل حذف می شوند. این فرایند تا زمان گسیختگی کامل نانولوله در همین راستا ادامه پیدا می کند. مطابق شکل ۱۱ مسیر شکست عمود بر راستای طولی نانولوله است.

در شکل ۱۲ مراحل شکست یک نانولوله کایرال (۲،۵) تحت بارگذاری که دارای عیب استون-ولز است، نشان داده شده است. مطابق این شکل مشاهده می شود که اجزاء اطراف محل عیب هندسی به بیشینه تنش خود می رسند که پس از حذف آن ها از مدل، سهم اجزاء اطراف آن ها از بار اعمال شده افزایش پیدا می کند و در نتیجه شکست در همین راستای محیطی ادامه پیدا می کند. به دلیل اینکه اجزاء نانولوله کایرال با محور طولی نانولوله زاویه دارند، مسیر شکست این نانولوله ها عمود بر محور طولی نانولوله نیست و به صورت مورب شکست روی می دهد.

شکل ۱۳ یک نانولوله آرمچیر (۸،۸) تحت بارگذاری را



شکل ۱۲- مراحل شکست نانولوله کایرال (۲،۵) دارای عیب استون- ولز

نهایی برای نانولوله‌ی آرمچیر طبیعی (۵،۵) به ترتیب ۱۱۵ گیگاپاسکال و ۱۹/۵٪ است. برای نانولوله (۸،۸) نیز مقادیر تنش و کرنش نهایی به ترتیب برابر ۱۲۰ گیگاپاسکال و ۱۸/۵٪ به دست آمده است. بر اساس نتایج حاصل می‌توان گفت عیب استون- ولز بر تنش و کرنش نهایی نانولوله آرمچیر تأثیر بیش‌تری نسبت به نانولوله زیگزاگ می‌گذارد به گونه‌ای که تنش نهایی نانولوله‌های آرمچیر معیوب حدود ۲۸-۳۰٪ و کرنش نهایی حدود ۴۱-۴۴٪ کم‌تر از تنش و کرنش نهایی نانولوله‌های آرمچیر طبیعی است.

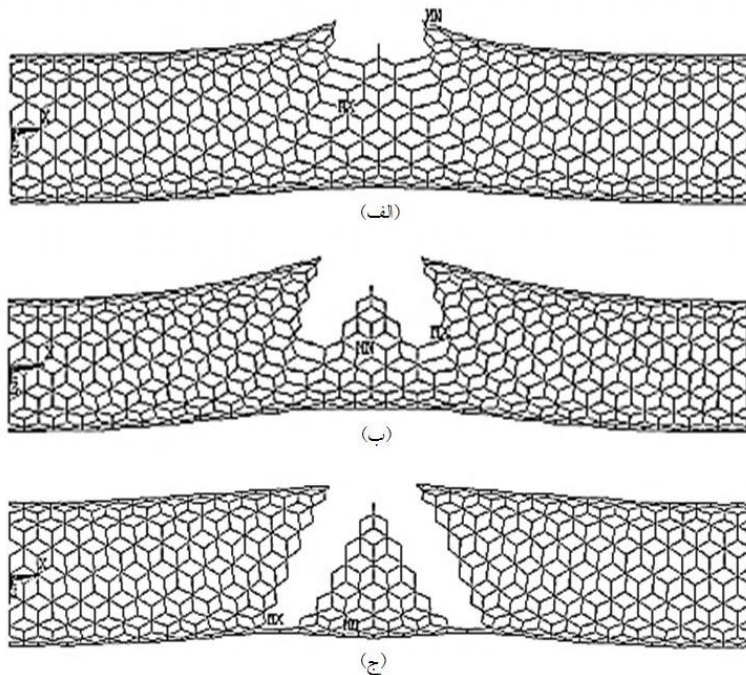
۶. نانولوله آرمچیر طبیعی دارای استحکام بیش‌تری نسبت به نانولوله‌های به ترتیب کایرال و زیگزاگ است. اما وقتی که عیب استون- ولز در آن‌ها وجود داشته باشد، نانولوله زیگزاگ دارای استحکام بیش‌تری نسبت به نانولوله‌های به ترتیب کایرال و آرمچیر است. به عبارت دیگر عیب استون- ولز بیشترین تأثیر کاهش در تنش و کرنش نهایی را بر روی نانولوله آرمچیر می‌گذارد.

۷. مسیر رشد ترک به عنوان یکی از بخش‌های مورد بررسی در شکست نانولوله‌های کربنی در انواع مختلف نانولوله آرمچیر، زیگزاگ و کایرال بررسی شد.

می‌دهد که تنش و کرنش نهایی برای نانولوله‌ی (۵،۰) به ترتیب برابر ۹۴/۴ گیگاپاسکال و ۲۳٪ و برای نانولوله (۱۰،۰) برابر ۹۴/۶ گیگاپاسکال و ۲۱٪ است. تأثیر عیب استون- ولز بر تنش و کرنش نهایی نانولوله زیگزاگ بسیار ناچیز است، به گونه‌ای که تنش نهایی ۲-۳٪ و کرنش نهایی ۱۳-۱۶٪ کاهش پیدا می‌کند.

۴. بر اساس دانش نویسندگان، تاکنون پژوهشی پیرامون رفتار مکانیکی نانولوله کایرال صورت نگرفته است. به همین منظور شبیه‌سازی این نوع نانولوله نیز انجام شد که بر اساس نتایج آن، تنش نهایی و کرنش نهایی برای نانولوله (۵،۲) به ترتیب برابر ۹۱/۳ گیگاپاسکال و ۱۴/۱٪ و برای نانولوله‌ی (۵،۴) به ترتیب ۱۱۲ گیگاپاسکال و ۱۶/۸۵٪ به دست آمد. عیب استون- ولز متناسب با کایرالیته نانولوله بر مقادیر تنش و کرنش نهایی آن تأثیر می‌گذارد، به گونه‌ای که مقدار تنش نهایی حدود ۲-۲۷٪ و مقدار کرنش نهایی حدود ۳۸-۴٪ کاهش پیدا می‌کند. به عبارت دیگر هر چقدر نانولوله کایرال از حالت زیگزاگ به آرمچیر تغییر می‌کند، تأثیر عیب بر استحکام نهایی آن بیش‌تر می‌شود.

۵. بر اساس نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی، تنش و کرنش



شکل ۱۳- مراحل شکست نانولوله آرمچیر (۸۸) دارای عیب استون-ولز

۸. پس از بارگذاری بر روی نانولوله زیگزاگ مشاهده می‌شود که در محل عیب استون-ولز هسته اولیه ترک ایجاد می‌شود. چون در ساختار نانولوله‌ی زیگزاگ اجزایی در راستای طولی وجود دارد، مسیر رشد ترک عمود بر محور طولی نانولوله است.
۹. در نانولوله کایرال به دلیل اینکه تمام اجزای نانولوله با محور طولی زاویه دارند، مسیر رشد ترک ناشی از عیب استون-ولز با محور طولی زاویه دارد. زاویه این مسیر شکست متناسب با زوج مرتب کایرالیته (n, m) در نانولوله‌های کایرال مختلف، متفاوت است.
۱۰. در نانولوله‌های آرمچیر معیوب، پس از شکستن اولین جزء، اجزای مورب اطراف آن گسیخته می‌شوند و این روند ادامه پیدا می‌کند. به همین دلیل مسیر رشد ترک ناشی از عیب استون-ولز با محور طولی دارای زاویه ۴۵ درجه است.
۱۱. نتایج به دست آمده در قسمت تنش و کرنش نهایی و مسیر رشد ترک توافق بسیار خوبی با کارهای آزمایشگاهی و روش دینامیک مولکولی دارد.

واژه‌نامه

- | | | |
|----------------------------------|-------------------------------|-------------------------------------|
| 1. molecular dynamics | 4. progressive fracture model | 7. Ansys |
| 2. Cauchy-Born rule | 5. Stone-Wales (SW) defect | 8. Fortran |
| 3. representative volume element | 6. chirality | 9. Ansys parametric design language |

مراجع

1. Yu, M.F., Lourie, O., Dyer, M.J., Moloni, K., Kelly, T.F. and Ruoff, R.S., "Strength and Breaking Mechanism of Multiwalled Carbon Nanotubes under Tensile Load", *Science*, Vol. 287, pp. 637-640, 2000.
2. Belytschko, T. and Xiao, S.P., "Coupling Methods for Continuum Model with Molecular Model", *Multi Scale Computational Engineering*, Vol. 1, pp. 115-126, 2003.

3. Zhang, P., Huang, Y., Geubelle, P.H., Klein, P. and Hwang, K.C., "The Elastic Modulus of Single Wall Carbon Nanotubes: Continuum Analysis Incorporating Interatomic Potentials", *Solid Structure*, Vol. 39, pp. 3893-3906, 2002.
4. Li, C. and Chou, T.W., "A Structural Mechanics Approach for the Analysis of Carbon Nanotubes", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 40, pp. 2487-2499, 2003.
5. Xiao, J.R., Staniszewski, J. and Gillespie Jr, J.W., "Fracture and Progressive Failure of Defective Graphene Sheets and Carbon Nanotubes", *Composite Structures*, Vol. 88, pp. 602-609, 2009.
6. Rossi, M. and Meo, M., "Tensile Failure Prediction of Single Wall Carbon Nanotube", *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 73, pp. 2589-2599, 2006.
7. Tserpes, K.I., Papanikos, P. and Tsirkas, S.A., "A Progressive Fracture Model for Carbon Nanotubes", *Composites: Part B*, Vol. 37, pp. 662-669, 2006.
8. Zakeri, M. and Shayanmehr, M., "On the Mechanical Properties of Chiral Carbon Nanotubes", *Journal of Ultrafine Grained and Nanostructured Materials*, Vol. 46, No. 1, pp. 1-9, 2013.
9. Muhammad, I.D., Awang, M., Mamat, O. and Ku Shaari, K.Z., "Estimating Young's Modulus of Single-Walled Zirconia Nanotubes using Nonlinear Finite Element Modeling", *Journal of Nanomaterials*, Vol. 2015, pp. 1-9, 2015.
10. Lee, J.H. and Lee, B.S., "Modal Analysis of Carbon Nanotubes and Nanocones using FEM", *Journal of Computational Materials Science*, Vol. 51, pp. 30-42, 2012.
11. Odegard, G.M., Gates, T.S., Nicholson, L.M. and Wise, K.E., "Equivalent Continuum Modeling of Nano-Structured Materials", *Composites Science and Technology*, Vol. 62, pp. 1869-80, 2002.
12. Belytschko, T., Xiao, S.P., Schatz, G.C. and Ruoff, R.S., "Atomistic Simulations of Nanotube Fracture", *Physical Review B*, Vol. 65, pp. 1-12, 2002.
13. Rossi, M. and Meo, M., "On the Estimation of Mechanical Properties of Single walled Carbon Nanotubes by Using a Molecular-Mechanics Based FE Approach", *Composites Science and Technology*, Vol. 69, pp. 1394-1398, 2009.
14. Ogata, S. and Shibutani, Y., "Ideal Tensile Strength and Band Gap of Single-Walled Carbon Nanotubes", *Physical Review B*, Vol. 68, pp. 1-4, 2003.
15. Jeng, Y.R., Tsai, P.C. and Fang, T.H., "Effects of Temperature and Vacancy Defects on Tensile Deformation of Single-Walled Carbon Nanotubes", *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, Vol. 65, pp. 1849-1856, 2004.
16. Khare, R., Mielke, S.L., Paci, J.T., Zhang, S., Ballarini, R., Schatz, G.C. and Belytschko, T., "Coupled Quantum Mechanical/Molecular Mechanical Modeling of the Fracture of Defective Carbon Nanotubes and Graphene Sheets", *Physical Review B*, Vol. 75, 075412, 2007.