



Semnan University

Journal of Modeling in Engineering

Journal homepage: <https://modelling.semnan.ac.ir/>



Research Article

Determination of Young's modulus of Boron Nitride nanotubes using energy method

Danial Ghahremani Moghadam¹, Massoud Mir¹, Fatemehzahra Ranjbar², Mahnaz Golmareshk²

1. Assistant Professor, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Quchan University of Technology

2. MSc student, Department of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, Quchan University of Technology

*Corresponding Author: d.ghahremani@qiet.ac.ir

PAPER INFO

Paper history:

Received: 15 October 2022

Revised: 23 December 2022

Accepted: 08 January 2023

Keywords:

Nanotube boron nitride,
Young's modulus,
Energy method,
Mechanical unit cell.

ABSTRACT

Considering the increasing use of nanotubes in various industries, it is of great importance to investigate the mechanical properties of these nanostructures. Today, due to the extraordinary properties that nanotubes have shown in various sciences, they have attracted the attention of many scientists. Boron nitride nanotubes are a form of boron nitride that are structurally very similar to carbon nanotubes. Many studies have been done to achieve the mechanical properties of these materials, and scientists have achieved this with different methods. But finding an easy and simple solution has always been the focus of many scientists who are still trying to achieve it. In this study, the molecular mechanics and solid mechanics properties of boron nitride nanotubes have been studied using a mechanical model to predict Young's modulus; and a spatial structure consisting of a unit cell has been used to describe the mechanical response of boron nitride nanotubes to applied loading. According to this assumption, a new unit cell, named mechanical unit cell, is introduced here to make a boron nitride plate or wall of boron nitride nanotubes. The analytical research presented in this research provides a simple method for predicting the Young's modulus of boron nitride nanotubes, and the obtained results are in good agreement with experimental and theoretical data.

© 2023 Published by Semnan University Press.

DOI: <https://doi.org/10.22075/jme.2023.28700.2351>

How to cite this article:

Ghahremani-Moghadam, D., Mir, M., Ranjbar, F., & Golmareshk, M. (2023). Determination of Young's modulus of Boron Nitride nano tubes using energy method. *Journal of Modeling in Engineering*, 21(73), 159-169. doi: 10.22075/jme.2023.28700.2351

تعیین مدول یانگ نانولوله‌های نیتريد بور با استفاده از روش انرژی

دانیال قهرمانی مقدم^{۱*}، مسعود میر^۱، فاطمه زهرا رنجبر^۲، مهناز گل مارشک^۲

اطلاعات مقاله	چکیده
<p>نوع مقاله: پژوهشی دریافت مقاله: ۱۴۰۱/۰۷/۲۳ بازنگری مقاله: ۱۴۰۱/۱۰/۰۲ پذیرش مقاله: ۱۴۰۱/۱۱/۰۳</p>	<p>با توجه به استفاده روزافزون از نانولوله‌ها در صنایع مختلف، بررسی خواص مکانیکی این نانو ساختارها از اهمیت بالایی برخوردار است. امروزه به دلیل خواص فوق العاده که نانولوله‌ها در علوم مختلف از خود نشان دادند مورد توجه بسیاری از دانشمندان قرار گرفته‌اند. نانولوله‌های نیتريد بور شکلی از نیتريد بور هستند که از لحاظ ساختاری بسیار شبیه نانولوله‌های کربنی می‌باشند. مطالعات زیادی برای دستیابی به خواص مکانیکی این مواد انجام شده است که دانشمندان با روش‌های مختلفی به این مهم دست یافته‌اند. اما همواره پیدا کردن راه حلی آسان و ساده مورد توجه بسیاری از دانشمندان بوده است که همچنان برای رسیدن به آن در تلاش هستند. در این مطالعه خواص مکانیک مولکولی و مکانیک جامد نانولوله نیتريد بور با استفاده از مدل مکانیکی برای پیش‌بینی مدول یانگ مورد مطالعه قرار گرفته است؛ و از یک ساختار فضایی متشکل از یک سلول واحد استفاده شده است تا پاسخ مکانیکی نانولوله نیتريد بور را به بارگذاری اعمال شده شرح دهد. با توجه به این فرض، یک سلول واحد جدید، با نام سلول واحد مکانیکی، در اینجا برای ساخت یک صفحه نیتريد بور یا جداره نانولوله‌های نیتريد بور معرفی شده است. تحلیل‌های ارائه شده در این پژوهش یک روش ساده برای پیش‌بینی مدول یانگ نانولوله‌های نیتريد بور ارائه می‌دهد و نتایج بدست آمده با داده‌های تجربی و نظری مطابقت خوبی دارد.</p>
<p>واژگان کلیدی: نانو لوله، نیتريد بور، مدول یانگ، روش انرژی، سلول واحد مکانیکی.</p>	

۱-مقدمه

نانولوله‌های نیتريد بور در سال ۱۹۹۴ پیش‌بینی شدند و به‌طور آزمایشی در سال ۱۹۹۵ کشف شدند. از نظر ساختاری مشابه نانو لوله‌های کربنی هستند که استوانه‌هایی با قطر کمتر از میکرومتر و طول میکرومتر هستند، با این تفاوت که به جای اتم‌های کربن به‌طور متناوب توسط اتم‌های نیتروژن و بور جایگزین می‌شوند. با این حال خواص نانولوله‌های نیتريد بور بسیار متفاوت است، نیتريد بور به دلیل مقاومت و پایداری حرارتی بالایی که دارد، توجه بسیاری را به خود جلب کرده است. نانولوله‌های نیتريد بور بر خلاف نانولوله‌های کربنی، عایق حرارت هستند؛ بنابراین پایداری شیمیایی و حرارتی بیشتری نسبت به نانولوله‌های

کربنی دارند. همچنین در برابر تابش نوترون مقاومت قابل‌توجهی دارند. نانولوله‌های نیتريد بور که توسط نانوصفحات نیتريد بور نورد می‌شوند، در مقایسه با نانولوله‌های کربنی که توسط گرافن نورد شده‌اند، می‌توانند مقاومت قابل توجهی در برابر اکسیداسیون در دمای بالا از خود نشان دهند. نانولوله‌های کربنی به آسانی در هوا (۴۰۰ درجه سانتی‌گراد) اکسید می‌شوند و در دمای ۷۰۰ درجه سانتی‌گراد وقتی اکسیژن کافی تامین می‌شود کاملاً می‌سوزند. با این حال، نانولوله‌های نیتريد بور دارای خواص ساختاری، مکانیکی و شیمیایی منحصر به فردی هستند. نانولوله‌های نیتريد بور به دلیل شباهت‌های ساختاری که با نانولوله‌های کربنی دارد مورد توجه همگان قرار گرفتند.

* پست الکترونیک نویسنده مسئول: d.ghahremani@qiet.ac.ir

۱. استادیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی قوچان

۲. دانشجو کارشناسی ارشد، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی قوچان

تحت تأثیر نسبت ابعاد آن قرار می‌گیرد و تا نسبت ابعاد ۱۵ افزایش می‌یابد و سپس پایدار می‌شود. همچنین نشان دادند که مدول یانگ نانولوله زیگزاگ مقدار بالاتری را در مقایسه با مدول یانگ نانولوله آرمچیر برای نسبت‌های مختلف نمایش می‌دهند. همچنین، رفتار تغییر شکل نانولوله‌های نیتريد بور تحت بارگذاری کششی محوری از طریق شبیه سازی دینامیک مولکولی توضیح داده شده است. گریبل و همکاران [۷]، برای مدل سازی نانولوله‌های نیتريد بور، از پتانسیل ترسف استفاده کرد که می‌تواند پیوند کووالانسی را به روشی دقیق توصیف کند. همچنین برای مدل سازی نقص‌ها، تعداد ثابتی از اتم‌ها را به‌طور تصادفی از ساختار نانولوله حذف کرد، در حالی که برای مدل سازی عامل سازی، تعداد ثابتی از اتم‌های نیتروژن را روی سطح ساختار نانولوله در مکان‌های بور به‌طور تصادفی انتخاب کرد. برای بررسی تأثیر عیوب و عامل سازی بر مدول یانگ نانولوله‌های نیتريد بور، منحنی تنش- کرنش را اندازه‌گیری کرد. گریبل یک کاهش کلی، مستقل از کایرالیته در استحکام کششی با افزایش غلظت نقص مشاهده کرد از سوی دیگر، برای نانولوله‌های بور-نیتريد عامل دار شده، با افزایش عامل دار شدن کاهش قابل توجهی مشاهده نشد و حتی شواهدی از افزایش وابستگی به کایرالیته در این حالت وجود دارد. وانگ [۸]، برای بررسی خواص مکانیکی و الکترونیکی نانولوله‌های بدون عیب و معیوب از روش تئوری تابعی چگالی استفاده کرد. تجزیه و تحلیل بر روی استحکام ذاتی، سفتی و کرنش بحرانی شکست انواع مختلف نانولوله-های نیتريد بور به‌طور سیستماتیک انجام شد. نتایج محاسباتی نشان داد که استحکام ذاتی نانولوله‌های نیتريد بور به‌صورت خطی با افزایش تراکم نقص در اطراف محور کاهش می‌یابد. نانولوله‌های نیتريد بور با جای خالی بور قدرت ذاتی بالاتری نسبت به مدل جای خالی نیتروژن نشان داد. همچنین دیگر پیش بینی‌های مختلف مدول یانگ در مطالعات مختلف برای نانولوله نیتريد بور در جدول ۱ آمده است. برای دستیابی به خواص مکانیکی نانولوله روش‌های نظری و تجربی مختلفی ارائه شده که هر کدام دارای مشکلاتی می‌باشند همین دلیل دستیابی به نتایج قابل اطمینان را با چالش روبرو می‌کنند. روش‌های تجربی به دلیل کوچک بودن ابعاد نانولوله‌ها، نداشتن اطلاعات دقیقی

مطالعات رفتار مکانیکی نانولوله‌های کربنی عمدتاً بر پذیرش پتانسیل‌های تجربی مختلف و مدل‌های پیوسته با استفاده از نظریه کشش متمرکز شده‌اند. خواص ارتجاعی نانولوله‌های نیتريد بور توسط گریبل و همکاران [۱]، مورد مطالعه قرار گرفت که در آن نانولوله‌ها در سرامیک‌های آمورف سیلیکون بور نیتريد تعبیه شده بودند. تجزیه و تحلیل بر اساس شبیه سازی MD انجام شد. علاوه بر این، آن‌ها تأثیر نسبت نانولوله/ماتریس را بر مدول الاستیک کامپوزیت بررسی کردند. آن‌ها نشان دادند که قانون توسعه یافته مخلوط‌ها مدول یانگ کامپوزیت را با یک تخمین خوب پیش‌بینی می‌کند مون و همکاران [۲]، یک شبیه سازی دینامیک مولکولی با استفاده از پتانسیل ترسف مانند برای بررسی هندسه بهینه، انرژی کرنش و رفتار حرارتی نانولوله‌های نیتريد بور انجام داده‌اند. آن‌ها نشان دادند با افزایش انرژی کرنش نانولوله‌های نیتريد بور با طول پیوند $1/45A^\circ$ قطر به اندازه $1/2$ کاهش می‌یابد و به ورق نیتريد بور نزدیک می‌شود. لی و همکاران [۳]، نانولوله‌های نیتريد بور تک جداره را با استفاده از میدان نیروی دریدینگ^۱ (یک میدان نیروی عمومی برای شبیه سازی مولکولی) مطالعه کرده‌اند و مدول یانگ و مدول برشی نانولوله‌های نیتريد بور را $0/9$ و $0/5$ تراپاسگال محاسبه کرده‌اند. فخرآبادی و همکاران [۴]، مقدار مدول یانگ نانولوله‌های نیتريد بور با استفاده از نظریه تابعی چگالی ab-initio و تقریب گرادیان تعمیم یافته روش ab-initio $0/821$ و $0/764$ تراپاسگال به دست آوردند. جیانگ و گیو [۵]، از یک مدل دینامیک مولکولی برای تجزیه و تحلیل نانولوله‌های نیتريد بور تک جداره استفاده کردند. آن‌ها در این مطالعه نشان دادند که مدول یانگ هر دو نانولوله زیگزاگ و آرمچیر با افزایش قطر نانولوله، به ویژه در قطر-های کوچک تر افزایش می‌یابد. همچنین آن‌ها نشان دادند که مدول یانگ نانولوله‌های زیگزاگ بیشتر از مدول یانگ آرمچیر تحت تأثیر شعاع قرار دارد. ویو و همکاران [۶]، خواص مکانیکی نانولوله‌های نیتريد بور را با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه قرار دادند. آن‌ها با تغییر دادن نسبت ابعاد نانولوله، مدول یانگ و همچنین رفتار تغییر شکل نانولوله را بررسی کردند. نتایج آن‌ها نشان می‌دهد که مدول یانگ نانولوله‌های نیتريد بور تا حد زیادی

^۱ DREIDING

باشد و هم از نظر محاسباتی گسترده نباشد بسیار دارای اهمیت می‌باشد. در پژوهش حاضر نیز هدف ما دستیابی به روشی ساده جهت محاسبه مدول یانگ برای نانولوله‌های نیتريد بور آرمچير و زيگزاگ می‌باشد. به همین دلیل با بهره‌گیری از روشی تحلیلی و با در نظر گرفتن مدل خرپا برای نانولوله نیتريد بور و با فرمولی ساده به بررسی مدول یانگ نانولوله خواهیم پرداخت.

از ابعاد نانولوله و همچنین سختی کنترل این مواد در محیط‌های آزمایشگاهی مورد اطمینان نیستند. روش‌های نظری و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تا حدودی می‌توانند مشکلات روش‌های تجربی را برطرف کنند اما انجام این روش‌ها نیز با مشکلاتی مواجه است و نیاز به سیستم‌های پیشرفته در این روش‌ها سبب شده است که انجام این روش تنها برای ابعادهای کوچک مقرون به صرفه باشد. در نتیجه پیدا کردن روشی مناسب که هم از دقت کافی برخوردار

نام‌گذاری

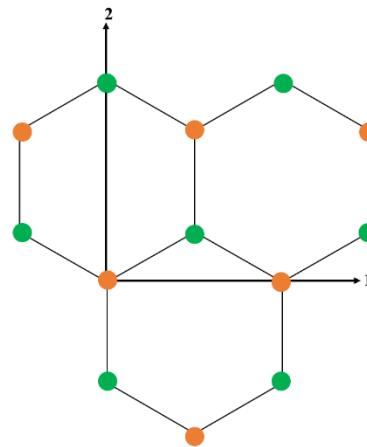
e_i	کشش میله	L	طول نانولوله نیتريد بور
K	سختی طولی نانولوله نیتريد بور	r_0	طول تعادل پیوند نیترون و بور
t	ضخامت دیواره نانولوله نیتريد بور	θ	زاویه پیچش
n_z	تعداد سلول واحد مکانیکی در یک نانولوله نیتريد بور زيگزاگ	V_f	پتانسیل پیوند کششی
x,y,z	محور جا به جایی	V_θ	پتانسیل پیوند پیچشی
X	جا به جایی طولی نانولوله نیتريد بور	b	قطر شش ضلعی
V	انرژی پتانسیل نیروی خارجی	U_{MUC}	انرژی کرنشی کل سلول واحد مکانیکی
π	کل انرژی پتانسیل	U_{Z-BNNT}	انرژی کرنشی کل نانولوله زيگزاگ
t	ضخامت نانولوله نیتريد بور	U_{A-BNNT}	انرژی کرنشی کل نانولوله آرمچير
E_z	مدول یانگ نانولوله نیتريد بور زيگزاگ	A_{BNNT}	سطح مقطع نانولوله نیتريد بور
n_a	تعداد سلول واحد مکانیکی در نانولوله نیتريد بور آرمچير		
E_a	مدول یانگ نانولوله نیتريد بور آرمچير		

جدول ۱- مقادیر مطالعات مدول یانگ برای نانولوله نیتريد بور

منابع	نوع نانولوله	مدول یانگ (TPa)	روش
تانور و همکاران [۹]	BNNT	-۱/۰۶۵۸	شبیه سازی دینامیک مولکولی
چوپرا و همکاران [۱۰]	MWBNNT	۰/۷۹۹۸	آزمایشات تجربی (میکروسکوپ نیروی اتمی)
قاسمی و همکاران [۱۱]	SWBNNT	۰/۲۴±۱/۲۲	آزمایشات تجربی (میکروسکوپ نیروی اتمی)
چوپال و همکاران [۱۲]	MWBNNT	۰/۳ ± ۱/۸	آزمایشات تجربی (میکروسکوپ نیروی اتمی)
سوریاوانشی و همکاران [۱۳]	BNNT	۰/۵۰۵ - ۱/۰۳۱	آزمایشات تجربی (میکروسکوپ الکترونی عبوری)
بولدرین و همکاران [۱۴]	BNNT	۱/۱ - ۱/۳	شبیه سازی دینامیک مولکولی
ورما و همکاران [۱۵]	SWBNNT	۰/۹۸۲ - ۱/۱۳۷	شبیه سازی مکانیک مولکولی
ناتوسکی و همکاران [۱۶]	BNNT	۰/۸۴۴ ، ۰/۸۸۶ ، ۱/۰۶	شبیه سازی مکانیک مولکولی
مصطفایی و همکاران [۱۷]	MWBNNT	۱/۰۲ - ۱/۱۳۵	شبیه سازی دینامیک مولکولی
هرناندز و همکاران [۱۸]	SWBNNT	۰/۹۱۲ - ۰/۸۷۴	شبیه سازی دینامیک مولکولی
سانتوش و همکاران [۱۹]	BNNT	۰/۸۲۶ - ۱/۰۴۰	شبیه سازی مکانیک مولکولی

۲- هندسه نانولوله نیتريد بور

نانولوله‌های نیتريد بور دارای ترکیباتی از آرایش شش ضلعی اتم‌ها هستند. در نانولوله‌های نیتريد بور شبکه شش ضلعی

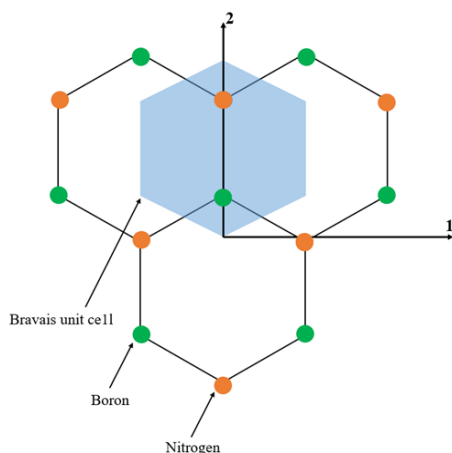


شکل ۱- نمای کلی ساختار اتمی برای نیتريد بور.

از اتم‌های متناوب بور و نیتروژن تشکیل شده است. اتم‌های بور و نیتروژن با پیوند یونی در کنار یک‌دیگر قرار گرفته‌اند و وجود این پیوندهای متفاوت در این نانولوله‌ها زمینه‌ساز تفاوت‌هایی است که در خواص آن‌ها وجود دارد. نمونه‌ای از ساختار اتمی نیتريد بور را می‌توان در شکل ۱ مشاهده کرد. شبکه براوه برای نامحدودی از نقاط گسسته در فضا است که چینش و جهت آن مستقل از نقطه مبدأ باشد ناحیه هاشور خورده در شکل ۲ سلول واحد شبکه براوه را نشان می‌دهد [۲۰]. هر سلول شامل دو مکان غیر معادل است با بور و نیتروژن برای صفحه نیتريد بور نشان داده شده است. ساختار نانولوله‌های کربنی و نانولوله‌های نیتريد بور را می‌توان با تکرار شکل هندسی دیگر به غیر از شش ضلعی ایجاد کرد. چنین هندسه‌ای که می‌توان با تکرار آن نانولوله را تشکیل داد سلول واحد مکانیکی^۱ نامیده می‌شود. میر و همکاران [۲۱]، برای محاسبه مدول یانگ نانولوله کربنی سلول واحد مکانیکی جدیدی را در ساختار این نانو مواد پیشنهاد کردند. این سلول تناوبی یا سلول واحد مکانیکی به شکل یک مستطیل در شکل ۳ نشان داده شده است و با تکرار این مستطیل نانولوله تشکیل می‌شود.

شش ضلعی برابر است. همچنین آن‌ها توانستند این مهم را به اثبات برسانند که تمامی عضوهایی که در شش ضلعی وجود دارد، در سلول واحد پیشنهادی آن‌ها نیز یافت

می‌شود. با توجه به شباهت‌های ساختاری نانولوله‌های کربنی و نانولوله‌های نیتريد بور می‌توان از این تئوری در ساختار نانولوله‌های نیتريد بور استفاده کرد با این تفاوت که در نانولوله‌های کربنی ضلع‌های سلول واحد بین اتم‌های کربن قرار گرفته‌اند در حالی که در نانولوله نیتريد بور این ضلع اتم‌های نیتروژن و بور را به هم وصل می‌کنند و از چیدمان این سلول‌های واحد در کنار یک‌دیگر نانولوله‌ها تشکیل می‌شوند.



شکل ۲- سلول واحد در یک شبکه براوه [۲۰].

۳- انرژی پتانسیل

انرژی ذخیره شده در سلول واحد نانولوله‌های نیتريد بور برابر است با مجموع انرژی که عضوهای آن ذخیره کردند. با توجه به شکل (۳) انرژی کل ذخیره شده در سلول واحد نانولوله کربنی برابر خواهد شد با:

$$U_{MUC} = u_1 + 2u_2 + 4u_3 + 2u_4 \quad (1)$$

در این رابطه u_i انرژی ذخیره شده در عضوهای سلول واحد و U_{MUC} انرژی کل سلول واحد می‌باشد.

مدل ساختاری نانولوله‌های نیتريد بور از سه نوع برهم‌کنش اتمی تشکیل شده است که می‌تواند به عنوان یک عنصر میله‌ای مدل شود. بنابراین انرژی کرنش کل برای سلول مکانیکی واحد نانولوله نیتريد بور رابطه (۱) می‌تواند به شرح زیر دوباره بازنویسی شود:

$$(U_{MUC})_{BN} = (u_1)_{B-N} + 2(u_2)_{B-N} + 2(u_3)_{N-N} + 2(u_3)_{B-B} + (u_4)_{N-N} + (u_4)_{B-B} \quad (2)$$

^۱ MUC

برای میله به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$K = \frac{AE}{L} \quad (7)$$

$$u_i = \frac{1}{2} K e_i^2 \quad (8)$$

فاصله بین اتم های بور و نیتريد ۰.۱۵۳ نانومتر و ۰.۱۴۵ نانومتر و همچنین ضخامت لایه نانو صفحات بور نیتريد ۰.۴ نانومتر در نظر گرفته می‌شود. در این مطالعه از سختی‌های محاسبه شده توسط ناتوسکی و همکاران [۱۶]، برای نانوصفحه نیتريد بور استفاده شده که در جدول ۲ آمده است.

جدول ۲- ثابت‌های خطی و پیچشی برای نانولوله نیتريد بور (a=آتو؛ بیانگر ۱۰^{-۱۸} است.) [۱۶].

	$K_{r_{B-N}}$ (A°)	$K_{\theta_{B-N}}$ (N/m)	K_{θ}^N (N.a/rad ²)	K_{θ}^B (N.a/rad ²)
نمونه ۱	1.45	595	1.36	0.662
نمونه ۲	1.45	675	2.35	1.12
نمونه ۳	1.53	595	1.36	0.662
نمونه ۴	1.53	827	2.01	0.95

بر اساس مفهوم میدان نیروی مولکولی، در بین برهم‌کنش‌های اتمی، انرژی پتانسیل سیستم نانولوله با پیوندهای اتم به اتم را می‌توان به صورت زیر بیان کرد [۱۶]:

$$E^m = \frac{1}{2} \sum_i K_i^p (\Delta r_i)^2 + \frac{1}{2} \sum_j K_j^\theta (\Delta \theta_j)^2 \quad (9)$$

که در رابطه بالا $\Delta r = r - r_0$ ، تغییرات فاصله طولی بین اتم‌های مجاور است و $\Delta \theta = \theta - \theta_0$ اختلاف زاویه بین دو عضو می‌باشد. همچنین K_i^p و K_j^θ به ترتیب ثابت سختی خطی و ثابت سختی پیچشی هستند.

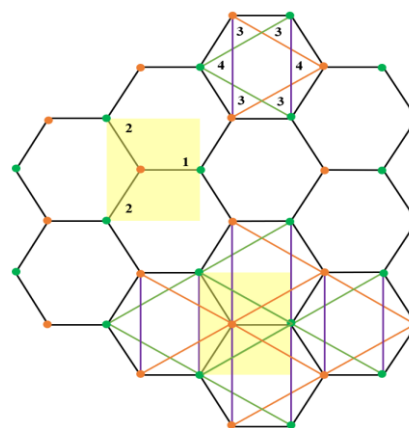
بر اساس رابطه (۱) پتانسیل خطی بین پیوند و پتانسیل پیچشی پیوند را می‌توان به شرح زیر تخمین زد:

$$V_r^{BN} = \frac{1}{2} K^p (\Delta r_{BN})^2 \quad (10)$$

$$V_\theta^N = \frac{1}{2} K^\theta (\Delta \theta_N)^2 \quad (11)$$

$$V_\theta^B = \frac{1}{2} K^\theta (\Delta \theta_B)^2 \quad (12)$$

با مشتق گرفتن از پتانسیل‌های خطی و پیچشی بالا، نیرو و گشتاور بین اتم‌های نیتروژن و بور در حال تعامل را



شکل ۳- یک سلول واحد با هندسه مستطیل شکل در یک ورق نیتريد بور.

انرژی کرنش مربوط به عضو، e_i برای یک میله الاستیک از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$u_i = \frac{E_i A_i}{2 L_i} e_i^2 \quad (3)$$

در رابطه بالا E_i ، A_i و L_i به ترتیب نشان دهنده مدول یانگ سطح مقطع و طول میله i هستند. مدول یانگ مربوط به هر میله از رابطه (۴) بدست می‌آید:

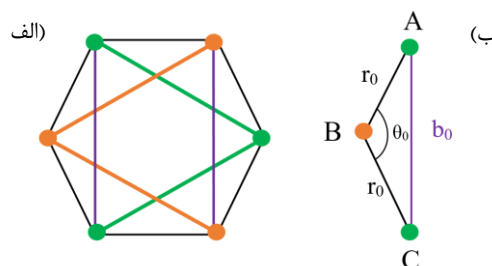
$$E = \frac{d\sigma}{d\varepsilon} \Big|_{\varepsilon=0} \quad (4)$$

کرنش و تنش در این عضو را می‌توان به صورت زیر بدست آورد:

$$\varepsilon = \ln \left(\frac{r}{r_0} \right) \quad (5)$$

$$\sigma = \frac{F}{A} \quad (6)$$

در دو رابطه بالا F نیرویی می‌باشد که به هر عضو اعمال می‌شود. A سطح مقطع هر عضو و r_0 و r به ترتیب طول اولیه و طول هر عضو بعد از اعمال فشار می‌باشد.



شکل ۴- (الف) عنصر سازنده شش ضلعی نانولوله، (ب) هندسه پایه.

در این روش از پتانسیل انرژی استفاده شده، بنابراین برای بدست آوردن مدول یانگ از سختی خطی بین اتم‌ها استفاده شده است و با تعریف رابطه سختی، انرژی کرنشی

۴- مدول یانگ نانولوله نیتريد بور

۴-۱ نانولوله زيگزاگ

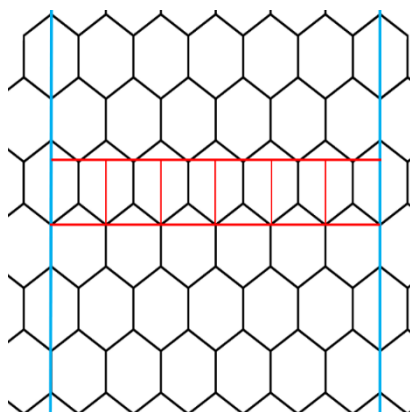
شکل (۵) یک نانو لوله زيگزاگ رول نشده با کایرالیته (۰, ۶) را نشان می‌دهد. ۶ سلول واحد مکانیکی در نوار در جهت افقی وجود دارد. به‌طور کلی، تعداد سلول‌های واحد در یک نوار افقی برای یک نانو لوله زيگزاگی با کایرالیته (n, 0) برابر با n است. از آنجایی که ارتفاع نوار $\frac{3}{2}r_0$ است، تعداد نوارها در جهت عمودی یک نانولوله زيگزاگ با طول L برابر با $\frac{2L}{3r_0}$ است. بنابراین، تعداد سلول‌های واحد مکانیکی در یک نانولوله زيگزاگ با (n, 0) کایرالیته و طول L را می‌توان به صورت زیر بدست آورد:

$$n_z = \frac{2nL}{3r_0} \quad (18)$$

و در نتیجه، کل انرژی کرنش یک نانولوله زيگزاگ را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$U_{Z-CNT} = n_z U_{MUC} \quad (19)$$

برای یافتن رفتار مکانیکی نانولوله‌ها، لازم است پاسخ مکانیکی سلول واحد مکانیکی زمانی که در معرض نیروی خارجی قرار می‌گیرد محاسبه شود. در اینجا از روش انرژی برای حل این مشکل استفاده می‌شود. مدل خرابایی معادل برای یک سلول واحد زيگزاگ در شکل (۶) نشان داده شده است. در این مدل ۹ عضو وجود دارد که می‌توانند انرژی کرنش را مطابق معادله ذخیره کنند [۲۱]. با حل تغییر شکل‌های نوار e_i از نظر اجزای جابه‌جایی، فرمول‌های زیر را می‌توان برای تغییر شکل اعضا بدست آورد:



شکل ۵- یک نانولوله زيگزاگ باز شده و جهت گیری عناصر سازنده سلول واحد.

می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$F_{BN} = K^{\theta} \Delta r_{BN} \quad (13)$$

$$M_N^{\theta} = K^{\theta} \Delta \theta \quad (14)$$

$$M_B^{\theta} = K^{\theta} \Delta \theta \quad (15)$$

در شکل (۴-الف) شبکه شش ضلعی ورق نیتريد بور را نشان می‌دهد. قطرهای کوچک شش ضلعی برای شبیه سازی گشتاور برهم‌کنش بین اتم‌های غیر مجاور استفاده شده است. این فرض ساختار نانولوله را به یک مدل خرابایی ساده تبدیل می‌کند.

برای تغییرات کوچک پارامترهای هندسی، تغییر قطر $\Delta b = b - b_0$ می‌تواند به صورت نوشته شود:

$$\Delta b = \frac{1}{2} r_0 \Delta \theta \quad (16)$$

گشتاوری که نیروی عضو b_0 در نقطه B ایجاد می‌کند با گشتاور پیچشی حاصل از برهم‌کنش دو اتم غیر مجاور برابر بوده بنابراین برای فرمول‌های (۱۴) و (۱۵) با استفاده از رابطه (۱۶) می‌توان نوشت:

$$F_{b_0} = \frac{4K^{\theta} \Delta b}{r_0(r_0 - \sqrt{3}\Delta b)} \quad (17)$$

با استفاده از سری تیلور رابطه (۱۷) را به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$F_{b_0} = \frac{4k^{\theta}}{r_0^2} \Delta b \quad (18)$$

با توجه به رابطه نیرو- جابه‌جایی می‌توان به نتیجه زیر برای ثابت سختی خطی دست یافت:

$$K = \frac{4K^{\theta}}{r_0^2} \quad (19)$$

با توجه به داده‌های جدول ۲ و همچنین با استفاده از رابطه (۱) می‌توان سختی پیچشی را به سختی خطی تبدیل کرد. سختی‌های خطی به‌دست آمده در جدول ۳ آمده است.

جدول ۳- ثابت خطی بین اتم‌ها.

r_{B-N} (Å)	$K_{r_{B-N}}$ (N/m)	K_N (N/m)	K_B (N/m)
1.45	595	1.26×10^2	2.58×10^2
1.45	675	2.13×10^2	4.47×10^2
1.53	595	1.13×10^2	2.32×10^2
1.53	827	1.62×10^2	3.43×10^2

اصل حداقل انرژی پتانسیل کل بیان می‌کند که برای شرایط تعادل، اولین تغییر از انرژی پتانسیل کل باید صفر شود:

$$\delta\pi = 0 \quad (25)$$

کل انرژی پتانسیل ثابت به صورت زیر توصیف شده است:

$$\frac{\partial\pi}{\partial X} = \frac{\partial\pi}{\partial y} = \frac{\partial\pi}{\partial z} = 0 \quad (26)$$

در این صورت روابط زیر را می‌توان نوشت:

$$\frac{\partial\pi}{\partial X} = \frac{\partial\pi}{\partial e_1} \frac{\partial e_1}{\partial X} + \frac{\partial\pi}{\partial e_2} \frac{\partial e_2}{\partial X} + \frac{\partial\pi}{\partial e_3} \frac{\partial e_3}{\partial X} + \frac{\partial\pi}{\partial e_4} \frac{\partial e_4}{\partial X} + \frac{\partial\pi}{\partial e_5} \frac{\partial e_5}{\partial X} + \frac{\partial\pi}{\partial e_6} \frac{\partial e_6}{\partial X}$$

$$\frac{\partial\pi}{\partial y} = \frac{\partial\pi}{\partial e_1} \frac{\partial e_1}{\partial y} + \frac{\partial\pi}{\partial e_2} \frac{\partial e_2}{\partial y} + \frac{\partial\pi}{\partial e_3} \frac{\partial e_3}{\partial y} + \frac{\partial\pi}{\partial e_4} \frac{\partial e_4}{\partial y}$$

$$\frac{\partial\pi}{\partial z} = \frac{\partial\pi}{\partial e_1} \frac{\partial e_1}{\partial z} + \frac{\partial\pi}{\partial e_2} \frac{\partial e_2}{\partial z} + \frac{\partial\pi}{\partial e_3} \frac{\partial e_3}{\partial z} + \frac{\partial\pi}{\partial e_4} \frac{\partial e_4}{\partial z}$$

(27)

جایگزینی مقادیر ثابت و حل معادلات (27) و (29) به‌طور همزمان منجر به تعیین سختی طولی نانولوله زیگزاگ می‌شود:

$$K_{Zig} = \frac{P}{X} \quad (30)$$

سطح مقطع یک نانولوله نیز به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$A_{BNNNT} = \pi dt \quad (31)$$

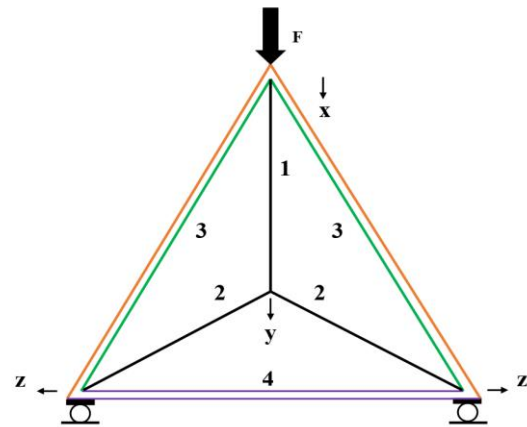
که در آن t ضخامت دیواره نانولوله است که برابر با ۰.۴ آنگستروم است. در نتیجه، مدول یانگ نانولوله زیگزاگ با کایرالایته $(n, 0)$ و طول L به صورت زیر به دست می‌آید:

$$E_{Zig} = \frac{K_{Zig}L}{A_{BNNNT}} \quad (32)$$

با توجه به این موضوع که در مطالعه حاضر چهار نانولوله با فواصل طولی متفاوت در حال بررسی می‌باشد روابط بالا برای هر چهار نانولوله تکرار شده و در نتیجه مدول یانگ‌های بدست آمده در جدول ۴ نشان داده شده‌است.

جدول ۴- مقادیر مدول یانگ برای نانولوله نیتريد بور زیگزاگ

فاصله طولی (Å)	سختی خطی (N/m)	مدول یانگ زیگزاگ (TPa)
۱.۴۵	۵۹۵	۱/۱۷
۱.۴۵	۶۷۵	۱/۹۹
۱.۵۳	۵۹۵	۱/۰۶
۱.۵۳	۸۲۷	۱/۵۵



شکل ۶- یک مدل خرابایی معادل برای سلول واحد با

جهت‌گیری زیگزاگ.

$$e_1 = y - x \quad (20)$$

$$e_2 = -\frac{1}{2}y + \frac{\sqrt{3}}{2}z$$

$$e_3 = -\frac{\sqrt{3}}{2}x + \frac{1}{2}z$$

$$e_4 = 2z$$

شکل (۷) یک نانولوله نیتريد بور را نشان می‌دهد که به طور متقارن توسط یک نیروی خارجی عمودی P بارگذاری می‌شود. تغییر شکل عمودی آن، X ، برابر است با:

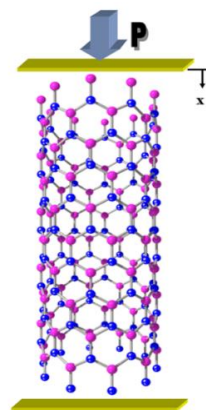
$$X = \frac{2L}{3r_0} \quad (21)$$

همچنین کاری که نیروی خارجی بر روی نانولوله انجام می‌دهد و به صورت انرژی پتانسیل در آن ذخیره می‌شود عبارت است از:

$$V = -PX \quad (22)$$

در نهایت با استفاده از رابطه (۱۹) و (۲۲)، کل انرژی پتانسیل ذخیره شده در نانولوله بدست می‌آید:

$$\pi = U_{Z-CNT} + V \quad (23)$$



شکل ۷- بارگذاری و تغییر شکل یک نانولوله نیتريد بور.

۴-۲- نانولوله آرمچیر

یک نانولوله آرمچیر رول نشده در شکل (۸) نشان داده شده است. این نوار حاوی ۷ سلول واحد مکانیکی در جهت افقی است. برای نانولوله (n,n) آرمچیر، تعداد سلول‌های واحد مکانیکی در یک نوار افقی ۲n است. باید توجه داشت که تمام مستطیل‌ها دارای اعضای مساوی هستند و در نتیجه هر یک از آن‌ها می‌توانند به میزان مساوی انرژی کرنش را جذب کنند. از آنجایی که ارتفاع نوار $\sqrt{3}r_0$ است، تعداد نوارها در جهت عمودی در نانولوله آرمچیر با طول L برابر $\frac{L}{\sqrt{3}r_0}$ است. بنابراین یک نانولوله آرمچیر با کایرالیته (n,n) و طول L از سلول‌های واحد زیر تشکیل شده است.

$$n_A = \frac{2nL}{\sqrt{3}r_0} \quad (33)$$

سپس، کل انرژی کرنش یک نانولوله آرمچیر با استفاده از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$U_{A-CNT} = n_A U_{MUC} \quad (34)$$

شکل (۹) مدل خرپایی معادل را برای جهت گیری آرمچیر نانولوله مشابه یک سلول واحد مکانیکی نشان می‌دهد. زیگزاگ، این مدل همچنین شامل ۹ عضو است که می‌توانند انرژی کرنش را مطابق معادله (۱۶) ذخیره کنند مطابق شکل (۹) اجزای محوری با جابه‌جایی‌ها به صورت زیر مرتبط هستند:

$$\begin{aligned} e_1 &= z \\ e_2 &= \frac{\sqrt{3}}{4}x + \frac{1}{2}(y-z) \\ e_3 &= \frac{\sqrt{3}}{2}y - \frac{1}{4}x \\ e_4 &= -x \end{aligned} \quad (35)$$

هنگامی که یک نانولوله آرمچیر به طور متقارن توسط یک نیروی خارجی عمودی P بارگذاری می‌شود، تغییر شکل عمودی نانولوله، X، برابر است با:

$$X = \frac{L}{\sqrt{3}r_0} \quad (36)$$

با تکرار روش نانولوله زیگزاگ برای نانولوله آرمچیر، مدول یانگ نانولوله آرمچیر با کایرالیته (n,n) و طول L به صورت زیر بدست می‌آید:

$$E = \frac{K_A L}{A_{BNNT}} \quad (37)$$

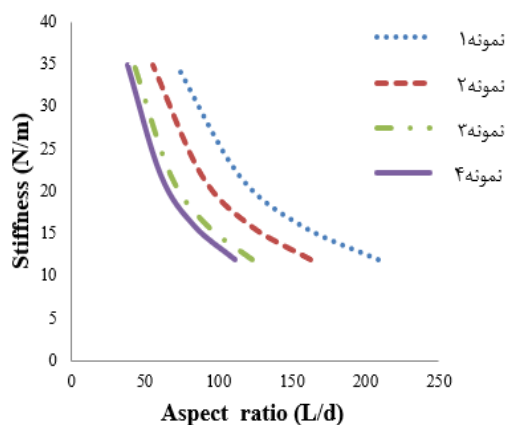
$$K = \pi t E \left(\frac{L}{d}\right)^{-1} \quad (38)$$

جدول ۵- مقادیر مدول یانگ برای نانولوله آرمچیر نیتريدبور

فاصله طولی (A°)	سختی خطی (N/m)	مدول یانگ آرمچیر (TPa)
۱/۴۵	۵۹۵	۱/۱۸
۱/۴۵	۶۷۵	۱/۹۹
۱/۵۳	۵۹۵	۱/۰۶
۱/۵۳	۸۲۷	۱/۵۵

۵- بحث و نتایج

تغییر سختی نانولوله‌های نیتريد بور زیگزاگ در مقایسه با نسبت ابعادی (L/d) در شکل (۱۰) نشان داده شد. مشاهده می‌شود که با افزایش نسبت ابعاد نانولوله نیتريد بور، سختی نانولوله‌های نیتريد بور زیگزاگ برای هر چهار نانولوله با فاصله طولی متفاوت، کاهش یافته است (معادله ۳۸). سختی نانولوله زیگزاگ برای نانولوله‌هایی با مدول یانگ بالاتر برای نسبت‌های یکسان بالاتر بیشتر است.

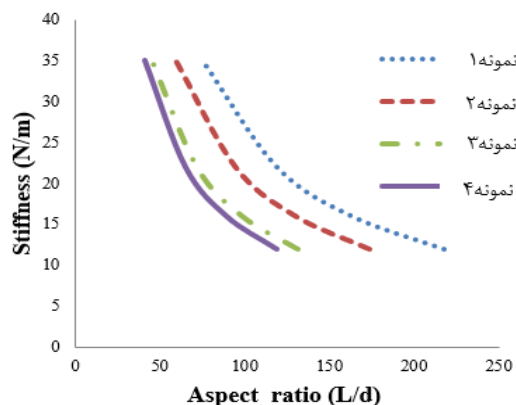


شکل ۱۰- تغییرات سختی نسبت به ابعاد نانولوله‌های نیتريد بور زیگزاگ

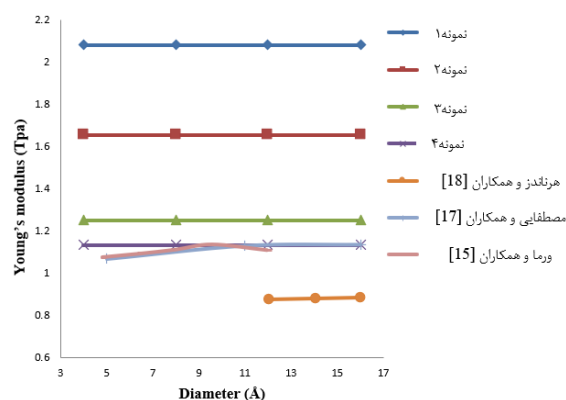
در شکل (۱۱) تغییرات سختی نانولوله‌های نیتريد بور آرمچیر در مقایسه با نسبت ابعادی (L/d) در نشان داده شد. همانند نانولوله‌های زیگزاگ برای نانولوله‌های آرمچیر نیز مشاهده می‌شود که با افزایش نسبت ابعاد نانولوله نیتريد بور، سختی نانولوله‌های نیتريد بور آرمچیر برای هر چهار نانولوله با فاصله طولی متفاوت، کاهش یافته است (معادله ۳۸). نانولوله با مدول یانگ بالاتر بیشترین سختی را دارد و با کاهش مدول یانگ، سختی نیز کاهش می‌یابد. در شکل (۱۲) تغییر مدول یانگ‌های نانولوله نیتريد بور زیگزاگ به دست آمده در این مطالعه نسبت به قطر نانولوله با برخی از مدول یانگ‌های گزارش شده برای نانولوله نیتريد بور در پژوهش‌های پیشین مقایسه شده است.

دقیقی را ارائه می‌دهند، اما از نظر محاسباتی بسیار گرانتر هستند و فقط برای سیستم‌های کوچک حاوی تعداد محدودی اتم مناسب هستند. در نتیجه پیدا کردن روشی مناسب که هم از دقت کافی برخوردار باشد و هم از نظر محاسباتی گسترده نباشد بسیار دارای اهمیت می‌باشد. این روش یک روش تحلیلی بر اساس پیوند بین مکانیک مولکولی و مکانیک جامدات است که به نسبت روش‌های گذشته ساده تر و دارای محاسبات ساده‌تری می‌باشد. در این مطالعه با استفاده از روش انرژی مدول یانگ نانولوله‌های نیتريد بور مورد بررسی قرار گرفته و تأثیر کایرالیته نانولوله و فاصله طولی پیوندهای بین اتمی بر مدول یانگ نانولوله نیتريد بور بررسی شد. از سلول واحد مکانیکی به عنوان یک سازه برای بررسی خواص مکانیکی نانولوله نیتريد بور زیگزاک و آرمچیر استفاده شد. نانولوله نیتريد بور با دو فاصله طولی پیوند ۱/۴۵ و ۱/۵۳ آنگستروم برای دو نوع نانولوله زیگزاک و آرمچیر مورد مطالعه قرار گرفته است. چهار مدول یانگ برای نانولوله زیگزاک و چهار مدول یانگ برای نانولوله آرمچیر به دست آمد که با مقایسه نتایج به دست آمده با نتایج مطالعات قبلی مدول یانگ ۱/۱۳ و ۱/۰۶ تراپاسگال به عنوان بهترین نتیجه به ترتیب برای نانولوله نیتريد بور زیگزاک و آرمچیر برگزیده شدند. که تفاوت بین مدول یانگ نانولوله زیگزاک و آرمچیر بدیهی است که به دلیل وابستگی به کایرالیته متفاوت آنهاست. هنگامی که انحنای دیواره نانولوله نیتريد بور افزایش می‌یابد، دقت پتانسیل بین اتمی به دلیل تغییر زوایای پیوند کاهش می‌یابد. برعکس، برای قطرهای بالاتر، انحنای ناچیز است و شکل دیواره نانولوله نیتريد بور با ورق گرافن همگرا می‌شود. یک فرمول ساده نیز برای سفتی از نظر نسبت ابعاد نانولوله‌های نیتريد بور به دست آمد. همچنین نتایج پیش‌بینی شده نشان می‌دهد که قطر هیچ تاثیری بر مدول یانگ هر دو نانولوله زیگزاک و آرمچیر ندارد.

مدول یانگ‌های به دست آمده در مطالعه حاضر برای نانولوله نیتريد بور آرمچیر در شکل (۱۳) نشان داده شده است. مدول یانگ‌های گزارش شده با قطر نانولوله تغییرات جزئی دارند و در قطرهای بزرگ این تغییرات لحاظ نمی‌شود. به همین دلیل نمودارهای هر دو نانولوله زیگزاک و آرمچیر به صورت خطی رسم شده‌اند.



شکل ۱۱- تغییرات سختی نسبت به ابعاد نانولوله‌های نیتريد بور آرمچیر



شکل ۱۳- مقایسه مدول یانگ مقالات موجود با مطالعه فعلی برای آرمچیر نانولوله‌های نیتريد بور

۶- نتیجه‌گیری

رویکردهای نظری مبتنی بر مکانیک کوانتومی / مولکولی، از جمله روش‌های دینامیک مولکولی کلاسیک از ابتدا نتایج

مراجع

- [1] M. Griebel, J. Hamaekers, "Molecular dynamics simulations of boron-nitride nanotubes embedded in amorphous Si-BN", Computational materials science, Vol. 39, No. 3, 2007, pp. 502-517.
- [2] W.H. Moon, H.J. Hwang, "Molecular-dynamics simulation of structure and thermal behaviour of boron nitride nanotubes", Nanotechnology, Vol. 15, No. 5, 2004, pp. 431-439.
- [3] C. Li, T.W. Chou, "Static and dynamic properties of single-walled boron nitride nanotubes", Journal of nanoscience and nanotechnology, Vol. 6, No. 1, 2006, pp. 54-60.
- [4] D. Vahedi Fakhrabad, N. Shahtahmassebi, "First-principles calculations of the Young's modulus of double wallboron-nitride nanotubes", Materials Chemistry and Physics, Vol. 138, No. 2, 2013, pp. 963-966.

- [5] L. Jiang, W. Guo, "A molecular mechanics study on size-dependent elastic properties of single-walled boron nitride nanotubes", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 59, No. 6, 2011, pp. 1204-1213.
- [6] X. Wei, M.S. Wang, Y. Bando and D. Golberg, "Tensile tests on individual multi-walled boron nitride nanotubes", *Advanced Materials*, Vol. 22, No. 43, 2010, pp. 4895-4899.
- [7] M. Griebel, J. Hamaekers and F. Heber, "A molecular dynamics study on the impact of defects and functionalization on the Young modulus of boron-nitride nanotubes", *Computational Materials Science*, Vol. 45, No. 4, 2009, pp. 1097-1103.
- [8] H. Wang, N. Ding, X. Zhao and C. Wu, "Defective boron nitride nanotubes: mechanical properties, electronic structures and failure behaviors", *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 51, No.12, 2018, pp. 125-133.
- [9] A.E. Tanur, J. Wang, A.L Reddy, D.N Lamont, Y.K. Yap and G.C Walker, "Diameter-dependent bending modulus of individual multiwall boron nitride nanotubes", *The Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 117, No. 1, 2013, pp. 4618-4625.
- [10] N.G. Chopra, A. Zettl, "Measurement of the elastic modulus of a multi-wall boron nitride nanotube", *Solid State Communications*, Vol. 105, No. 5, 1998, pp. 297-300.
- [11] H.M Ghassemi, C.H. Lee, Y.K. Yap and R.S Yassar, "In situ TEM monitoring of thermal decomposition in individual boron nitride nanotubes", *JOM*, Vol. 62, No. 1, 2010, pp. 69-73.
- [12] V.K Choyal, V. Choyal, S. Nevhal, A. Bergaley and S. Kundalwal, "Effect of aspect ratio on Young's modulus of boron nitride nanotubes: A molecular dynamics study", *Materials Today: Proceedings*, Vol. 26, No. 1, 2020, pp. 1-4.
- [13] A.P. Suryavanshi, M.F. Yu, J. Wen, C. Tang, Y. Bando, "Elastic modulus and resonance behavior of boron nitride nanotubes", *Applied Physics Letters* Vol. 84, NO.1, 2004, pp. 2527-2529.
- [14] L. Boldrin, F. Scarpa, R. Chowdhury and S. Adhikari, "Effective mechanical properties of hexagonal boron nitride nanosheets", *Nanotechnology*, Vol. 22, No. 50, 2011, pp. 505-512.
- [15] V. Verma, V.K. Jindal and K. Dharamvir, "Elastic moduli of a boron nitride nanotube", *Nanotechnology*, Vol. 18, No. 1, 2007, pp. 435-442.
- [16] T. Natsuki, J. Natsuki, "Prediction of mechanical properties for hexagonal boron nitride nanosheets using molecular mechanics model", *Applied Physics A*, Vol. 123, No. 4, 2017, pp. 1-6.
- [17] A. Fereidoon, M. Mostafaei, M.D. Ganji and F. Memarian, "Atomistic simulations on the influence of diameter, number of walls, interlayer distance and temperature on the mechanical properties of BNNTs", *Superlattices and Microstructures*, Vol. 86, No. 1, 2015, pp. 126-133.
- [18] E. Hernandez, C. Goze, P. Bernier, A. Rubio, "Elastic properties of single-wall nanotubes", *Applied Physics A*, Vol. 68, No.3, 1999, pp. 287-292.
- [19] M. Santosh, P.K. Maiti and A. Sood, "Elastic properties of boron nitride nanotubes and their comparison with carbon nanotubes", *Journal of nanoscience and nanotechnology*, Vol. 9, No. 9, 2009, pp. 5425-5430.
- [20] H. Mousavi, R. Moradian, "Metallic and semimetallic properties of doped graphene and boron nitride planes", *Solid State Communications*, Vol. 153, No. 1, 2013, pp. 17-22.
- [21] M. Mir, M. Tahani and B. Hassani, "Analytical prediction of Young's modulus of carbon nanotubes using a variational method", *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 45, No. 1, 2017, pp. 1031-1043.