SID

فیلم های آموزشی

سامانه ویراستاری STES

بلاگ مرکز اطلاعات علمی

کارگاه های آموزشی

سرویس ترجمه تخصصی

سرویس های ویژه

# کارگاه‌های آموزشی مرکز اطلاعات علمی

آموزش مهارت های کاربردی در تدوین و چاپ مقاله

اصول تنظیم قراردادها

مقاله نویسی علوم انسانی

Archive of SID


# مطالعه برخی از خواص نانولوله‌های کربنی با استفاده از میدان نیروی والانس پربینوس-ترسوف

**عباسی، طیبه[۱]؛ رجبی، احمد[۲]؛ بهتویی، زهرا[۳]**

[۱]شرکت توزیع نیروی برق تهران بزرگ ،تهران

[۲] گروه فیزیک، دانشگاه شهید رجایی، تهران

[۳] آموزش و پرورش شهرستان ورامین،ورامین

## چکیده

*در این مقاله به بررسی اثر دما بر انرژی نانولوله‌های کربنی زیگزاگ (۰-۷) و آرمچیر (۷-۷) با استفاده از مدل نیروی والانس می‌پردازیم. هین طور سهم مدهای مختلف انرژی را با استفاده از مدل مذکور مورد بررسی قرار می‌دهیم. به علاوه در مورد چند نانولوله زیگزاگ و آرمچیر با طول یکسان، وابستگی انرژی به شعاع را مورد بررسی قرار می‌دهیم. مدل مطرح شده توسط پربینوس و ترسوف در سال ۲۰۰۹ پیشنهاد شده است. روش شبیه‌سازی استفاده شده مونت‌کارلو می‌باشد. این مدل برای پیوند $SP^2$ نانو ساختارهای کربنی قابل استفاده بوده و بخش‌های مختلف انرژی را به صورت جداگانه به صورت تابعی از موقعیت اتم‌ها مطرح می‌کند. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد انرژی کل نیز با افزایش دما در هر دو نوع نانو لوله افزایش می‌یابد. همین‌طور در مورد نانولوله‌های با طول یکسان با افزایش شعاع، انرژی کل کاهش می‌یابد*

# Some properties of carbon nano tubes by using Perebeinous-Tersoff Valence Force Field

**Abasi, Tayebeh[1]; Rajabi, Ahmad;[2]Behtooee, Zahra[3]**

[1] *Great Tehran electrical distribution company*

[2] *Department of Physics, Shahid Rajaeei University, Tehran*

[3] *Varamin education office*

## Abstract

*In this paper we investigate influence of temperature on energy of zigzag and armchair carbon nanotube, using the Valence force field. We investigate the energy modes contributions using this model. This Valence force field is suggested by Perebeinous and Tersoff in 2009. The method of simulation is Monte Carlo. This model introduced for $SP^2$ bonded nano carbon structures and gives energy as a function of atomic positions.We find that total energy increase by increasing temperature in both nano tube and in nano tube with same length by increasing radiu decrease the total energy.*

*PACS No. 81*

### مقدمه

کشف نانوله‌ها در سال ۱۹۹۱، موجب شده‌است که فعالیت‌های تحقیقاتی گسترده‌ای در علوم به این مبحث و کاربردهای آن‌ها اختصاص یابد. نانولوله‌های کربنی به دلیل خواص ویژه، کاربردهای بسیاری دارند و از آن‌ها می‌توان در ابزارهای الکتریکی، حسگرهای شیمیایی، صنعت داروسازی، ذخیره‌سازی گازها و... استفاده کرد.[۳-۱] از خواص ویژه دیگر نانولوله‌ها می‌توان به رسانش گرمایی و الکتریکی و استحکام بالای آن‌ها اشاره کرد.

در سال‌های اخیر تحقیقات نظری و عملی فراوانی نیز بر روی ساختار اتمی و ساختارهای الکترونی و بررسی خواص مکانیکی نانولوله‌ها متمرکز شده است. در زمینه بررسی خواص مکانیکی نانولوله‌های کربنی، تحقیقات انجام شده با استفاده از شبیه‌سازی‌های

www.SID.ir

Archive of SID


کلاسیک، شامل روش‌های دینامیک مولکولی و روش مونت‌کارلو می‌باشد.

## مدل میدان نیروی والانس پربینوس – ترسوف

در سال ۲۰۰۹ پربینوس و ترسوف میدان نیرویی را برای برهم‌کنش بین اتم‌های کربن پیشنهاد کردند که حاوی ٦ جمله می‌باشد. این پتانسیل، انرژی را به عنوان تابعی از مکان اتمها بیان می‌کند و برای اتم کربن با هیبرید $SP^2$ و زاویه بین اتم‌ها در حدود $120 \pm 5$ درجه، قابل استفاده می‌باشد. این پتانسیل به شکل زیر می باشد.

$$E_T = \frac{1}{NS_0}(E_{st} + E_{be} + E_{out} + E_{bo} + E_p + E_{co})$$

(۱)

با تقسیم رابطه بالا بر $NS_0$ چگالی انرژی به دست می‌آید. N تعداد کل اتمها و $S_0$ مساحت سلول واحد است.

این پتانسیل به ترتیب شامل جملات مربوط به انرژی کشسانی پیوند، انرژی خمشی پیوند، انرژی نوسانات خارج از صفحه، پتانسیل ترکیبی کشش-کشش، انرژی پیوند $\pi - \pi$ و انرژی ترکیبی خمش – کشش می‌باشد.[ ٤]

## روش شبیه سازی

محاسبات با استفاده از کد نوشته شده در محیط برنامه نویسی فرترن و اعمال شبیه‌سازی مونت‌کارلو و به کارگیری الگوریتم مترو پلیس انجام شده است. ما در این مقاله نانولوله‌های متفاوت آرمچیر و زیگزاگ با طول تقریباً یکسان را مورد بررسی قرار می‌دهیم. بار دیگر یک نانولوله کربنی آرمچیر (7–7) با طول ۹۹/۳٤ آنگستروم و شعاع ٤/۸۵ آنگستروم و یک نانو لوله زیگزاگ (۰–۷) با طول ۹۸/۷۳ و شعاع ۲/۸۰ آنگستروم را در دماهای متفاوت تحت مدل پتانسیل مطرح شده قرار می‌دهیم.

فایل ورودی برنامه حاوی اطلاعاتی در مورد موقعیت مکانی اتمها در نانولوله آرمچیر و زیگزاگ می‌باشد. فاصله cut-off را نیز ۲ آنگستروم در نظر می‌گیریم. در حین اجرا برنامه تمام اتمها به جز اتم‌های مرزی که شامل اتمهای لبه‌های بالا و پایین نانولوله‌ها هستند، بر اساس الگوریتم مترو پلیس برای رسیدن به انرژی کمینه جابه‌جا می‌شوند. فشردگی یا کشیدگی مورد نظر با آهنگ ۰/۰۲ آنگستروم به ازای هر میلیون گام مونت‌کارلو بر روی اتم‌های مرزی اعمال می‌گردد. پس از اعمال کشش کامل، جهت ایجاد واهلش درونی، ٤ میلیون گام مونت‌کارلو طی می‌شود. لذا تعداد کل گام‌های شبیه‌سازی از رابطه زیر به ازای تغییر طول‌های مختلف تعیین می‌گردد. در این مقاله ما کشش صفر را بر سیستم اعمال می‌کنیم. بنابراین فقط تعداد ٤ میلیون گام مونت‌کارلو جهت رسیدن سیستم به انرژی کمینه طی می‌شود.

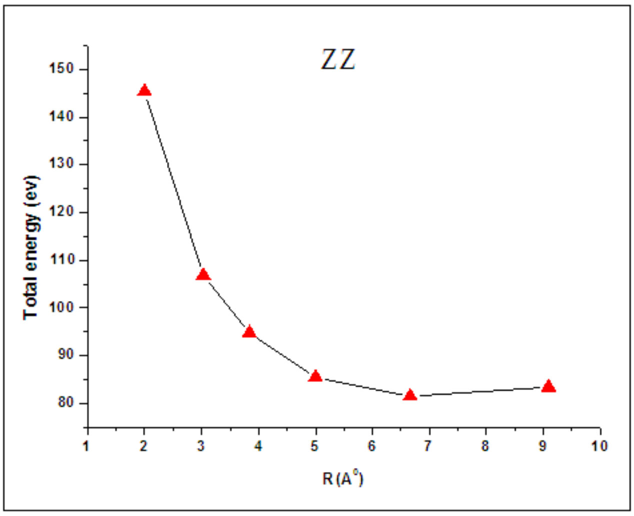
$$NMD = \left(\frac{\Delta L_y}{0.02} + 4\right) \times 10^6$$

(۲)

## نتایج به دست‌آمده از شبیه‌سازی

در پایان شبیه‌سازی نمودار انرژی کل به ازای شعاع‌های متفاوت از نانولوله‌های آرمچیر و زیگزاگ مختلف در دمای ۳۰۰ درجه کلوین رسم می‌شود. طول نانولوله‌های آرمچیر ٤۷/۹٦ و طول نانولوله‌های زیگزاگ ٤۷/۵٦ آنگستروم می‌باشد. تعداد اتم‌ها نیز بر حسب شعاع متفاوت می‌باشد.

همان‌طور که مشاهده می‌کنیم با افزایش شعاع در نانولوله‌های زیگزاگ و آرمچیر انرژی کاهش می‌یابد که این نتیجه گیری با توجه به نزدیک‌تر شدن ساختار نانولوله های با شعاع بیش‌تر به ساختار گرافین که از لحاظ مکانیکی پایدارتر است، قابل توجیه می باشد.

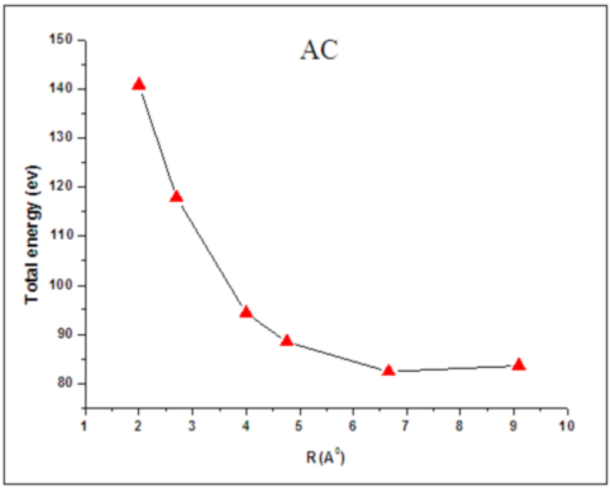



نمودار ۱: تغییرات انرژی بر حسب شعاع در نانولوله‌های زیگزاگ با طول یکسان

www.SID.ir

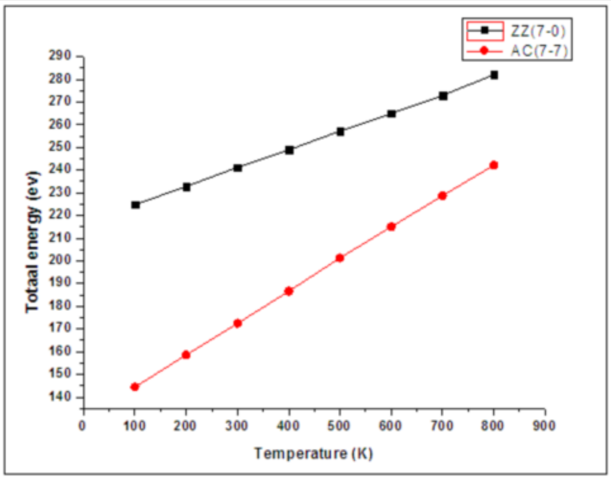
Archive of SID






نمودار۲: تغییرات انرژی بر حسب شعاع در نانولوله‌های آرمچیر با طول یکسان

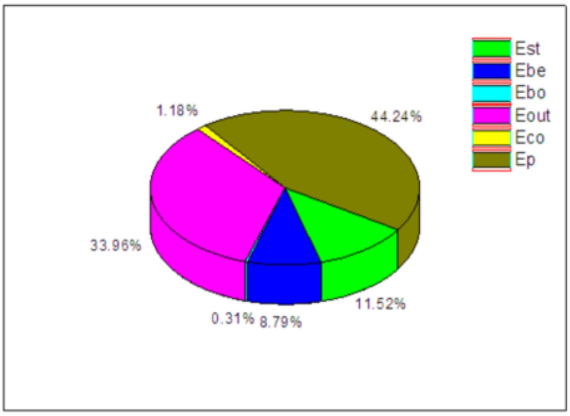
در شکل ۳ نیز تغییر انرژی بر حسب دما را در دو نانولوله آرمچیر (۷–۷) و زیگزاگ (۰–۷) مشاهده می‌کنیم. طول نانولوله‌ها یکسان و شعاع آن‌ها متفاوت می‌باشد.



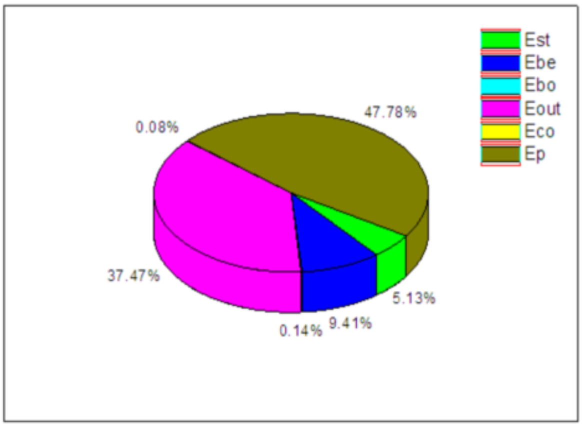

نمودار ۳ : تغییرات انرژی بر حسب دما در نانولوله‌های (۷–۷) و (۰–۷)

همان‌طور که در نمودار می‌بینیم با افزایش دما چالی انرژی نیز افزایش می‌یابد.

اشاره کردیم که یکی از مزیت‌های مدل مطرح شده امکان تفکیک سهم جملات مختلف انرژی می‌باشد. در نمودارهای ٤ و ٥ سهم جملات مختلف انرژی در نانولوله‌های (۷–۷) و (۷–۰) در دمای ۳۰۰ درجه کلوین را مشاهده می‌کنیم.




نمودار٤: سهم جملات مختلف انرژی در نانولوله آرمچیر (۷–۷) در دمای ۳۰۰ درجه کلوین




نمودار:٥ سهم جملات مختلف انرژی در نانولوله زیگزاگ (۰–۷) در دمای ۳۰۰ درجه کلوین

مشاهده می‌شود که در هر دو نانولوله Ep بیش‌ترین سهم در انرژی کل را دارد. این جمله انرژی پیوند $\pi-\pi$ را مطرح می‌کند. در ساختار نانولوله هر اتم کربن با سه اتم همسایه خود پیوند سیگما برقرار می‌کند و الکترون باقی‌مانده به شکل اوربیتال $\pi$ خواهد بود. به دلیل ساختار نانولوله‌ها این اوربیتال‌ها هم‌پوشانی زیادی با یکدیگر داشته و افزایش سهم انرژی در این بخش نیز به همین علت می‌باشد. جمله بعدی که بیش‌ترین سهم در انرژی کل را دارد مربوط به انرژی نوسانات خارج از صفحه می‌باشد. این جمله حاصل‌ضرب سه پیوند یک اتم کربن با سه همسایه اول خود می‌باشد که باز هم به دلیل ساختار خاص نانولوله‌ها و درگیر شدن اوربیتال‌ها با یکدیگر، سهم این جمله نیز قابل ملاحظه می‌باشد در صورتی که در گرافین به دلیل مسطح بودن صفحه و هم‌پوشانی

www.SID.ir

Archive of SID


بسیار اندک این اوربیتال‌ها با یکدیگر و همین طور اوربیتال‌های $\pi$ که عمود بر صفحه هستند، سهم این دو جمله بسیار اندک می‌باشد.

## نتیجه گیری

ما از شبیه‌سازی استاندارد مونت‌کارلو که بر اساس الگوریتم متروپلیس است و از مدل نیروی والانس پربینوس- ترسوف استفاده کردیم و نانولوله‌های متفاوت آرمچیر و زیگزاگ با طول تقریباً یکسان را مورد بررسی قرار دادیم و سهم مدهای مختلف انرژی را با استفاده از این روش محاسبه کردیم. نتایج به دست آمده نشان داد انرژی کل با افزایش دما در هر دو نوع نانو لوله آرمچیر و زیگزاگ افزایش می‌یابد. همین‌طور در مورد نانولوله‌های با طول یکسان با افزایش شعاع، انرژی کل کاهش می‌یابد.

## مرجع‌ها

[1] Yu, M.-F; Lourie, O; Dyer, MJ; Moloni, K; Kelly, TF; Ruoff, RS;"*Strength and Breaking Mechanism of Multiwalled Carbon Nanotubes Under Tensile Load*"; Science **287**No. 5453(2000) 637–640.

[2] Demczyk, B.G; Wang, Y.M; Cumings, J; Hetman, M; Han, W; Zettl, A., Ritchie, R.O., *"Direct mechanical measurement of the tensile strength and elastic modulus of multiwalled carbon nanotubes*".;Materials Science and Engineering **A 334** No1–2 (2002) 173–178.

[3] Hong, Seunghun; Myung, S; "*Nanotube Electronics: A flexible approach to mobility*"; Nature Nanotechnology **2**,No. 4 (2007) 207–208

[4] Perebeinos V; Tersoff J; *" Valence Force Model for Phonons in Graphene and Carbon Nanotubes"*; Physical Rev **B 79**, No. 24 (2009) 241409-241413.

www.SID.ir

SID

فیلم های آموزشی
سامانه ویراستاری STES
بلاگ مرکز اطلاعات علمی
کارگاه های آموزشی
سرویس ترجمه تخصصی
سرویس های ویژه

کارگاه‌های آموزشی مرکز اطلاعات علمی

آموزش مهارت های کاربردی در تدوین و چاپ مقاله

اصول تنظیم قراردادها

مقاله نویسی علوم انسانی