



## محاسبه‌ی مدول یانگ و ضریب میرایی طولی در کامپوزیت مس تقویت شده با نانو لوله‌های کربنی

مهسا آراسته<sup>1</sup>، فرزانه اجاق‌نژاد<sup>2\*</sup>

1- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی عمران، دانشگاه آزاد اسلامی واحد تهران جنوب، تهران

2- استادیار، دانشکده‌ی فنی و مهندسی، دانشگاه الزهراء، تهران

\* تهران، صندوق پستی 1993891176، f.ojaghezhad@alzahra.ac.ir

### چکیده

### اطلاعات مقاله:

دریافت: 98/09/06

پذیرش: 99/06/22

### کلیدواژگان

ضریب میرایی طولی

مدول یانگ

فاکتور Q

دینامیک مولکولی

با توجه به استفاده‌ی گسترده از نانو لوله‌های کربنی در ساخت مواد مرکب با قابلیت‌های ویژه، در این مطالعه، ثابت‌های الاستیک، فاکتور Q و ضریب میرایی طولی بلور مس تقویت شده با نانو لوله‌های کربنی، با استفاده از روش دینامیک مولکولی محاسبه شده است. همچنین اثر دما و کایرالیته نانو لوله‌های کربنی بر این پارامترها مورد بررسی قرار گرفته است. علاوه بر این، در مدلسازی‌ها از دو پتانسیل بین اتمی ایربو و ترسوف برای شبیه‌سازی میان‌کنش اتم‌های کربن، استفاده شده و اثر پتانسیل مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین، به منظور بررسی اثر طول نانو لوله‌ها در خواص مکانیکی کامپوزیت، نمونه‌هایی با طول الیاف کوتاه‌تر نیز در نظر گرفته شده است. در این مطالعه، مدول یانگ با اعمال تنش تک‌محوری و فاکتور Q با استفاده از روش ارتعاش اجباری محاسبه می‌شود. سپس، با استفاده از نظریه‌ی ضریب میرایی طولی سازه‌های چند درجه‌ی آزادی، ضریب میرایی طولی تعیین می‌شود. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که افزودن نانو لوله‌های کربنی به محیط مس بلوری باعث افزایش مدول یانگ و ضریب میرایی کامپوزیت می‌شود. از بین نانو لوله‌های کربنی آرمچیر، زیگزاگ و کایرال با قطر و طول یکسان، نانو لوله‌ی کربنی کایرال یا آرمچیر بسته به پتانسیل مورد استفاده اثر فزاینده‌تری بر مدول یانگ ماده‌ی مرکب دارد. همچنین، با تقویت بلور مس به وسیله‌ی نانو لوله‌های کربنی، فاکتور Q به طور چشمگیری کاهش می‌یابد.

## Young modulus and longitudinal damping coefficient of the composite copper reinforced by carbon nanotubes

Mahsa Arasteh<sup>1</sup>, Farzaneh Ojaghezhad<sup>2\*</sup>

1- Civil Engineering, South Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran.

2- Engineering Department, Alzahra University, Tehran, Iran

\* P.O.B. 1993891176, Tehran, Iran, f.ojaghezhad@alzahra.ac.ir

### Keywords

Longitudinal damping coefficient, Young's modulus, Q-factor, Molecular dynamics

### Abstract

Due to the widespread use of carbon nanotubes in composites with special capabilities, in this study, the elastic constants, Q-factor, and longitudinal damping coefficient of crystalline copper reinforced by carbon nanotubes were examined exploiting molecular dynamics simulation. The effect of temperature and chirality of carbon nanotubes on the above-mentioned parameters was also investigated. The mechanical behavior of the copper composites is considered for two different carbon interatomic potentials Airebo and Tersoff. Additionally, the mechanical characteristics of the composites are pursued in the case of short carbon nanotube fibers, as well. In this work, Young's modulus and Q-factor were determined via the uniaxial stress and forced vibration method, respectively. Subsequently, employing the multi-degree of freedom structural dynamics, the longitudinal damping coefficient was obtained. The results showed that by the addition of the carbon nanotubes to the copper matrix, its Young's modulus and damping coefficient increased. A comparison between armchair, zigzag, and chiral carbon nanotubes of the same diameter and length manifested that the chiral or armchair carbon nanotubes, depending on the employed interatomic potentials, had a more dominant effect on increasing the composite Young's modulus. Moreover, the calculations show that the Q-factor in the reinforced cell was significantly reduced.

در ساخت کامپوزیت‌ها با کاربردهای ویژه در تکنولوژی و مهندسی معطوف

شده است. به دلیل اینکه نانو لوله‌های کربنی دارای مدول یانگ بسیار بالایی

هستند [1]، یکی از کاربردهای نانو لوله‌های کربنی، در تقویت خواص مکانیکی

### 1- مقدمه

در سالهای اخیر توجه خاص محققین بر نانو لوله‌های کربنی و استفاده از آنها

Please cite this article using:

برای ارجاع به این مقاله از عبارت زیر استفاده نمایید:

Arasteh, M, Ojaghezhad, F., "Young modulus and longitudinal damping coefficient of the composite copper reinforced by carbon nanotubes", In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 2, No.7, pp. 931-940, 2020.

که با افزایش طول نانو لوله، مقدار مدول الاستیسیته افزایش پیدا می کند [6]. در مطالعه‌ای دیگر، خسروی و همکاران [7] با استفاده از آزمون‌های کشش و خمش سه نقطه‌ای به بررسی تأثیر افزودن نانو لوله‌های کربنی بر رفتار کششی و خمشی کامپوزیت‌هایی پرداخته‌اند که زمینه‌ی آن‌ها اپوکسی تقویت شده با بازالت است. آن‌ها برای بررسی مکانیزم شکست کامپوزیت‌ها از میکروسکوپ روبشی الکترونی گسیل میدانی استفاده کرده‌اند. نتایج این بررسی نشان می‌دهد که بیشترین میزان بهبود در استحکام کششی، استحکام خمشی و همچنین جذب انرژی، مربوط به نمونه‌های حاوی 0.3 درصد وزنی نانو لوله‌ی کربنی است. مدول کششی و خمشی نمونه‌ها با افزودن نانو لوله‌ها روند افزایشی دارد. تأثیر مثبت نانو لوله‌های کربنی در یک مقدار مشخص بر استحکام خمشی، بیشتر از تأثیر همان میزان نانو لوله‌ی کربنی بر بهبود استحکام کششی است [7]. همچنین، اسماعیلی و دشت بیاض [8] از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به پیش‌بینی خواص الاستیک نانو کامپوزیت با زمینه فلزی Al-SiC و درصد‌های مختلف تقویت‌کننده پرداخته‌اند. آن‌ها با بهره‌گیری از پتانسیل‌های بین اتمی مناسب، سه ثابت الاستیک نانو کامپوزیت شامل مدول یانگ، مدول برشی و ضریب پواسون را محاسبه و نتایج را با برخی نتایج حاصل از روش‌های سنتی مقایسه کرده‌اند.

معدولیت و همکاران [9] به بررسی تأثیر میرایی بر پاسخ غیر خطی ارتعاشات اجباری در نانو کامپوزیت‌های با زمینه‌ی گرافن پرداخته‌اند. برای این منظور از نظریه‌ی کلاسیک ورق‌ها، نظریه‌ی تنش غیر موضعی و روابط کرنش-جابجایی غیرخطی وون-کارمن برای ورق ناهمسانگردی که در دو راستای صفحه با سلول کلونین-ویت مدل شده است، استفاده کرده‌اند. نتایج نشانگر این است که کاهش میرایی سازه‌ای و محیطی و همچنین کاهش سختی بستر به شکل چشمگیری بر دامنه‌ی بیشینه‌ی نوسانات در نزدیکی تشدید افزوده و سبب افزایش اثرات غیر خطی در رفتار سازه می‌شود. افزایش پارامتر غیرموضعی نیز منجر به رفتار غیر خطی سازه شده و اثر میراکنندگی دارد که با انحراف و خمیدگی بیشتر منحنی‌های پاسخ فرکانسی سیستم قابل تشخیص است [9]. در تحقیقی دیگر، تسرپس و پاپانیکس<sup>5</sup> [10] نانو لوله‌های تک‌جداره را تحت بارگذاری‌های کششی و پیچشی قرار داده‌اند و مدول‌های کششی و برشی را برای آن‌ها محاسبه کرده‌اند. در نتایج ارائه شده، مدول الاستیسیته‌ی نانو لوله با افزایش قطر افزایش می‌یابد و در نهایت به مقدار ثابتی میل می‌کند. این روش، بعدها مبنای کار محققان دیگر برای پیش‌بینی رفتارهای مکانیکی نانو لوله‌های کربنی شده است.

همچنین، دوان و همکاران<sup>6</sup> [11] با استفاده از روش دینامیک مولکولی به بررسی میرایی کامپوزیت مس تقویت شده با نانو لوله‌های کربنی پوشش داده شده با نیکل پرداخته‌اند. در این مطالعه، آن‌ها با استفاده از بارگذاری تناوبی، انرژی سیستم را برای محاسبه‌ی فاکتور Q به دست آورده‌اند. نتایج نشان می‌دهد که تقویت بلور مس با استفاده از نانو لوله‌ی کربنی با پوشش نیکل سبب کاهش فاکتور Q می‌شود.

در مطالعه‌ی پیش رو، با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، ثابت-های الاستیک، فاکتور Q و ضریب میرایی طولی در بلور مس، نانو لوله‌های کربنی و بلور مس تقویت شده با نانو لوله‌های کربنی مورد بررسی قرار می‌گیرد. در این کار، اثر دما و کاپرالیته‌ی نانو لوله‌های کربنی در کامپوزیت بر ثابت‌های الاستیک، فاکتور Q و ضریب میرایی طولی آن مطالعه می‌شود. در تحلیل

مواد است. چنانچه، نانو لوله‌های کربنی به صورت رشته‌های تقویت‌کننده در زمینه‌های فلزی یا پلیمری مورد استفاده قرار گیرد، ویژگی‌های مکانیکی مانند ثابت‌های الاستیک و مدول یانگ کامپوزیت حاصل، افزایش چشمگیری خواهد داشت. بر اساس کار انجام شده توسط کازاتی و ودانی<sup>1</sup> [2]، کامپوزیت‌های زمینه فلزی تقویت شده با نانو ذرات و نانو لوله‌های کربنی دارای خواص مکانیکی بهتر و خواص گرمایی و الکتریکی بهبودیافته‌تری هستند.

در تحقیق کازاتی و ودانی همچنین به بهبود سایر ویژگی‌های مهندسی جالب نظیر ظرفیت میرایی، سایش و رفتار خزشی در این کامپوزیت‌ها اشاره شده است. به عنوان مثال دیگر از تقویت خواص مکانیکی کامپوزیت‌های فلزی می‌توان به کار چوی و همکاران<sup>2</sup> [3] اشاره کرد که به مطالعه‌ی رفتار مکانیکی کامپوزیت آلومینیوم تقویت شده با نانو لوله‌ی کربنی آرمچیر تحت بارگذاری کششی و با استفاده از روش دینامیک مولکولی پرداخته‌اند.

هو و همکاران<sup>3</sup> [4] با استفاده از روش‌های دینامیک مولکولی و مکانیک مولکولی به بررسی رفتار مکانیکی کامپوزیت‌های حاوی نانو لوله‌های کوتاه تحت بارگذاری‌های مختلف پرداخته‌اند. آن‌ها ابتدا با استفاده از روش مکانیک مولکولی، خواص مکانیکی نانو لوله‌های کربنی را محاسبه و سپس برای نانو لوله‌ها یک مدل پیوسته ارائه کرده‌اند. در ادامه، با استفاده از روش دینامیک مولکولی خواص مکانیکی لایه‌ی میانی نانو لوله و بستر پلیمری، محاسبه شده و با بهره‌گیری از این خواص یک المان هشت گره‌ای معادل پیشنهاد شده است. در نهایت، با استفاده از روش المان محدود، خواص مکانیکی و همچنین، توزیع تنش در بستر برای یک المان حجمی حاوی نانو لوله‌ی کوتاه مطالعه شده است. نتایج مطالعات آن‌ها نشان می‌دهد که با افزایش طول نانو لوله در بستر، اثر تقویت‌کنندگی آن بیشتر می‌شود. همچنین، این نتایج نشان می‌دهد که با افزایش درصد حجمی نانو لوله مقدار مدول الاستیسیته‌ی المان حجمی افزایش پیدا می‌کند [4].

در مقاله‌ای دیگر، رفیعی و شکرپه [5] به بررسی اثر تقویت‌کنندگی نانو لوله‌های کربنی کوتاه و بلند در بستر الاستیک پرداخته‌اند. در این مطالعه، آن‌ها با استفاده از روش المان محدود، نانو لوله، بستر و پیوندهای واندروالسی میان نانو لوله و بستر را مدل کرده‌اند. پیوندهای میان دو اتم کربن در نانو لوله‌ها با استفاده از المان‌های تیر مدل شده‌اند و پیوندهای واندروالسی نیز به صورت المان‌هایی با رفتار غیر خطی مدلسازی شده است. نتایج نشان می‌دهد که رفتار کامپوزیت‌های حاوی نانو لوله، رفتاری غیرخطی است. آن‌ها علت این غیر خطی بودن را در غیر خطی در نظر گرفتن پیوندهای واندروالسی دانسته‌اند. به علاوه، پیش‌بینی‌های این روش نشان می‌دهد که استفاده از قانون اختلاط در کامپوزیت‌های حاوی نانو لوله‌ی کربنی ممکن است نتایج درستی نداشته باشد. در نهایت، در این مقاله یک مدل رشته‌ی<sup>4</sup> معادل برای نانو لوله، به منظور استفاده در قانون اختلاط ارائه شده است [5].

در تحقیق دیگری، رفیعی و شکرپه [6] با استفاده از روش چند مقیاسی اثر طول نانو لوله‌ی کوتاه را بر مدول الاستیسیته و رفتار تنش-کرنش المان حاوی نانو لوله‌ی کربنی بررسی کرده‌اند. آن‌ها در این مدلسازی اثر جداری میانی را با استفاده از پیوندهای واندروالسی در نظر گرفته‌اند. همچنین پیوندهای میان اتم‌های کربن در نانو لوله‌ها را به صورت المان‌های تیر مدل کرده‌اند. نتایج حاکی از این است که نانو لوله‌های کوتاه‌تر از 100 میکرومتر، در تقویت بستر، اثر چندانی ندارد. همچنین، در این مطالعه نشان داده شده است

<sup>4</sup> Fiber<sup>5</sup> Tserpes and Papanikos<sup>6</sup> Duan et al.<sup>1</sup> Casati and Vedani<sup>2</sup> Choi et al.<sup>3</sup> Hu et al.

کرد. با توجه به اینکه بلور مس ساختار مکعبی fcc دارد، بر اساس رابطه ی هوک تعمیم یافته ی زیر، تحت بارگذاری محوری دارای دو ثابت الاستیک مستقل  $C_{11}$  و  $C_{12}$  است [18]:

$$\begin{bmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \\ \varepsilon_z \end{bmatrix} \quad (1)$$

به منظور شبیه سازی تنش تک محوری در محدوده ی الاستیک در راستای محور  $Z$  کرنش های کوچکتر از 0.002 در هر سه راستا به گونه ای اعمال می شود که تنش ها در دو راستای  $X$  و  $Y$  صفر باشد. در این حالت، شیب نمودار تنش-کرنش در راستای محور  $Z$  بیانگر مدول یانگ ماده ( $E$ ) در آن راستا خواهد بود:

$$\sigma_z = \left( C_{11} - \frac{2C_{12}^2}{C_{11} + C_{12}} \right) \varepsilon_z = E \varepsilon_z \quad (2)$$

در حالت تنش تک محوری در راستای محور  $Z$ ، کرنش های محوری در هر سه جهت غیر صفر و به صورت  $\varepsilon_x = \varepsilon_y = \frac{-C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \varepsilon_z$  به هم مربوط هستند. در روش کرنش تک محوری، کرنش طولی در راستای  $Z$  ایجاد می شود و در نتیجه، در هر سه جهت تنش در بلور به صورت زیر به وجود می آید:

$$\sigma_x = \sigma_y = C_{12} \sigma_z \quad (3)$$

$$\sigma_z = C_{11} \varepsilon_z \quad (4)$$

در عبارات فوق،  $C_{11} = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)}$  و  $C_{12} = \frac{\nu}{1-\nu}$ . با ترسیم نمودارهای  $\sigma_x - \varepsilon_x$  و  $\sigma_z - \varepsilon_z$  و استفاده از روابط بالا، مدول یانگ  $E$  و ضریب پواسون  $\nu$  محاسبه می شود. لازم به تذکر است که بارگذاری کرنشی به صورت مرحله به مرحله <sup>11</sup> و با گام کرنشی حدود 0.00019 برای کرنش تک محوری و گام کرنشی حدود 0.000057 برای تنش تک محوری اعمال می شود.

## 2-2- فاکتور Q

برای محاسبه ی ضریب میرایی طولی از فاکتور  $Q$  استفاده می شود. فاکتور  $Q$  پارامتری بدون بعد است که با میرایی رابطه ی عکس دارد و از روش های ارتعاش آزاد و ارتعاش اجباری قابل محاسبه است. در این مطالعه، برای محاسبه ی فاکتور  $Q$  از روش ارتعاش اجباری استفاده می شود و نمونه در جهت طولی تحت بارگذاری کششی متناوب قرار می گیرد. بدین منظور، ابتدا در دمای مورد نظر با استفاده از هنگردهای  $NVT$ <sup>12</sup> و  $NPT$  با گام زمانی برابر 0.001 پیکوثانیه سیستم متعادل شده، سپس با هنگر  $NVE$  نسبت به محیط ایزوله می شود. در ادامه، تغییر طول تناوبی با دامنه ی ثابت و فرکانس زاویه ای  $\omega = 10^{12} \text{ rad/s}$  در جهت  $Z$  به صورت  $L(t) - L_0 = A_0 \sin \omega t$  به نمونه

دینامیکی سازه های ساخته شده از مواد کامپوزیت فلزی دارای نانو لوله ی کربنی تقویت کننده، بهره گیری از نتایج عددی حاصل از تحقیق حاضر، شامل مدول یانگ و ضریب میرایی کامپوزیت، بی شک، منجر به ارائه ی نتایج تحلیلی دقیق تر خواهد شد. علاوه، از سایر کاربردهای احتمالی کامپوزیت های فلزی تقویت شده با نانو لوله های کربنی می توان به استفاده از آن ها در سیستم های جاذب انرژی، اتصالات فلزی با قابلیت میرایی بالا و طراحی مکانیزم های میرا کننده در ساختمان اشاره کرد. در بخش 2 مقاله ی حاضر، راجع به نظریه های مورد استفاده در محاسبه ی ثابت های الاستیک، فاکتور  $Q$  و ضریب میرایی طولی بحث و جزئیات شبیه سازی در هر مورد ارائه می شود. بخش 3 به ارائه ی نتایج و جداول مربوط اختصاص دارد و بخش 4 جمع بندی و نتیجه گیری های مطالعه ی حاضر است.

## 2- نظریه و شبیه سازی

در این مطالعه، برای محاسبه ی ثابت های الاستیک، فاکتور  $Q$  و ضریب میرایی طولی بلور مس، نمونه ای با ابعاد  $14a \times 14a \times 12a$  با اعمال شرایط مرزی تناوبی<sup>1</sup> در هر سه جهت مورد استفاده قرار گرفته است. در عبارت فوق،  $a$  پارامتر شبکه ی بلور مس است. پارامتر شبکه ی بلور مس در این مطالعه با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی و تابع پتانسیل بین اتمی مدل اتم ادغام شده<sup>2</sup> برابر 0.3615 نانومتر در دمای صفر درجه ی کلونین به دست می آید. همچنین، در مطالعه ی حاضر، در دمای 300 درجه ی کلونین پارامتر شبکه ای برای مس با استفاده از تابع پتانسیل مدل اتم ادغام شده برابر 0.3632 محاسبه شده است که با پارامتر شبکه ی گزارش شده توسط کیتل<sup>4</sup> [12] در دمای اتاق که برابر 0.361 نانومتر است، همخوانی قابل قبولی دارد. در ادامه، بلور مس تقویت شده با نانو لوله های کربنی آرمچیر، زیگزاگ و کایرال با نشانه های به ترتیب، (8,8)، (14,0) و (9,7) که محور طولی آن ها در امتداد محور  $Z$  است، با استفاده از دینامیک مولکولی مدل سازی می شود. ضخامت جداره ی نانو لوله های کربنی برابر 0.34 نانومتر [13] و طول آن ها در امتداد محور  $Z$  برابر با طول بلور مس برای مدل سازی رشته های بلند و یا کوتاه تر از طول بلور مس، مثلاً برابر  $8a$  برای مدل سازی رشته های کوتاه در نظر گرفته می شود. لازم به ذکر است که این نانو لوله ها تقریباً دارای شعاع های یکسان هستند و لذا مقایسه ی نتایج حاصل از آن ها، امکان بررسی اثر کایرالیته را فراهم می کند. در این شبیه سازی ها، اندرکنش اتم های مس با استفاده از تابع پتانسیل مدل اتم ادغام شده [14]، اندرکنش اتم های کربن توسط تابع پتانسیل ایریو<sup>5</sup> [15] و ترسوف<sup>6</sup> [16] و میان کنش اتم های مس و کربن با تابع پتانسیل لنارد-جونز<sup>7</sup> محاسبه می شود. پارامترهای تابع پتانسیل لنارد-جونز با استفاده از قاعده ی اختلاط<sup>8</sup> پارامترهای لنارد-جونز گرافیت و بلور مس fcc به صورت عمق چاه انرژی برابر 0.02578 الکترون-ولت و فاصله ی تعادلی برابر 0.30825 آنگستروم در نظر گرفته شده است [17].

## 1-2- ثابت های الاستیک

برای محاسبه ی ثابت های الاستیک ماده با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی، می توان از روش کرنش تک محوری<sup>9</sup> یا تنش تک محوری<sup>10</sup> استفاده

<sup>7</sup> Lennard-Jones

<sup>8</sup> Mixing rule

<sup>9</sup> Uniaxial strain

<sup>10</sup> Uniaxial stress

<sup>11</sup> Incremental loading

<sup>12</sup> Ensemble

<sup>1</sup> Periodic Boundary Conditions

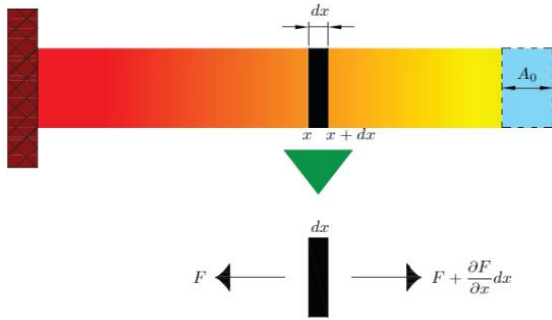
<sup>2</sup> Lattice parameter

<sup>3</sup> Embedded Atom Method (EAM)

<sup>4</sup> Kittel

<sup>5</sup> Airebo

<sup>6</sup> Tersoff



**Fig. 2** A fixed member under free vibration with a shown infinitesimal element and its free force diagram

شکل 2 تیر یک سر گیردار تحت ارتعاش آزاد طولی که یک المان طولی از آن در شکل مشخص شده و دیاگرام آزاد آن المان ترسیم شده است

با در نظر گرفتن یک المان طولی و رسم دیاگرام آزاد نیروهای وارد بر آن المان، معادله ی حرکت به صورت زیر نوشته می شود:

$$F + \frac{\partial F}{\partial x} dx - F = dm \frac{\partial^2 u}{\partial t^2}, \quad (7)$$

که در آن  $u$  میدان جابجایی در هر نقطه از تیر در امتداد تیر و  $dm$  جرم المان است. جرم هر المان به صورت زیر محاسبه می شود:

$$dm = \rho S dx, \quad (8)$$

در رابطه ی فوق،  $S$  مساحت سطح مقطع تیر و  $\rho$  جرم مخصوص است. نیرو در سطح مقطع عضو بر حسب تنش نرمال در مقطع به صورت  $F = \sigma S$  بیان می شود. تنش نرمال در مقطع نیز با استفاده از قانون هوک بر حسب کرنش و نرخ تغییر آن به شکل  $\sigma = E\varepsilon + C\dot{\varepsilon}$  نوشته می شود. در این رابطه،  $C$  ضریب میرایی طولی عضو است. در نتیجه، نیروی محوری در سطح مقطع به صورت زیر در می آید:

$$F = SE\varepsilon + SE\dot{\varepsilon}, \quad (9)$$

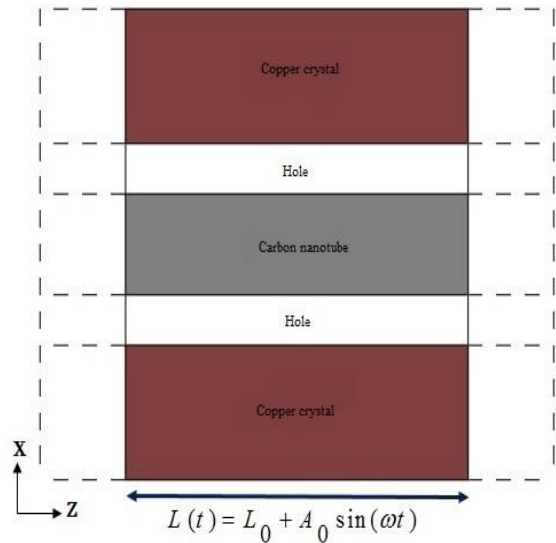
با توجه به تعریف کرنش  $\varepsilon = \frac{\partial u}{\partial x}$ ، معادله ی حرکت (7) به صورت زیر نوشته می شود:

$$Eu'' + C\dot{u}'' = \rho\ddot{u}, \quad (10)$$

در معادله ی فوق،  $\ddot{u}$  و  $u''$ ، به ترتیب، نشان دهنده ی مشتق اول زمانی، مشتق دوم زمانی و مشتق دوم نسبت به  $x$  است. برای حل معادله ی بالا، از روش جداسازی متغیرها به صورت  $u = X(x)T(t)$  استفاده می شود. با جایگذاری  $u$  رابطه ی زیر حاصل می شود:

$$\frac{EX''}{\rho X} + \frac{CX'T'}{\rho XT} = \frac{T''}{T}. \quad (11)$$

اعمال می شود (شکل 1). در این رابطه،  $A_0$  دامنه ی نوسان و  $L_0$  طول اولیه ی نمونه است.



**Fig. 1** The periodic displacement in the copper cell reinforced with carbon nanotubes

شکل 1 تغییر طول تناوبی در نمونه ی مس تقویت شده با نانو لوله ی کربنی

فاکتور  $Q$  بر اساس نسبت انرژی ذخیره شده به انرژی تلف شده در سیستم به صورت زیر تعریف می شود [11]:

$$Q = 2\pi \frac{U_{stored}}{U_{disp}} \quad (5)$$

در رابطه ی فوق، انرژی ذخیره شده در سیستم به شکل زیر بیان می شود [11]:

$$U_{stored} = \frac{1}{2} EV \varepsilon_{max}^2 \quad (6)$$

در رابطه ی بالا،  $\varepsilon_{max} = \frac{A_0}{L_0}$  بیانگر کرنش حداکثر در طول یک چرخه ی نوسان و برابر 0.02 در نظر گرفته می شود. همچنین، در رابطه ی (6)،  $E$  مدول یانگ و  $V$  حجم نمونه است.

### 3-2- ضریب میرایی

سازه هایی که دارای جرم و سختی گسترده هستند، سازه های چند درجه ی آزادی محسوب می شوند [19]. برای محاسبه ی ضریب میرایی بحرانی طولی یک تیر با جرم و سختی گسترده، سازه به صورت یک تیر یک سر گیردار فرض شده، با اعمال جابه جایی اولیه به سر آزاد تیر، تحت ارتعاش طولی آزاد قرار می گیرد (شکل 2).

## 3-1- ثابت‌های الاستیک

در این قسمت، ابتدا به منظور اعتبار سنجی نتایج محاسبات، مدول یانگ بلور مس با استفاده از روش تنش تک‌محوری در دماهای مختلف محاسبه و نتایج در جدول 1 با نتایج موجود در کار دوان و همکاران [11] مقایسه شده است. به منظور بررسی اثر تابع پتانسیل بر نتایج مدول یانگ بلور مس، نتایج کار حاضر با استفاده از دو پتانسیل مدل اتم ادغام شده [20,14] تعیین شده است. ملاحظه می‌شود که نتایج مرتبط به تابع پتانسیل مدل اتم ادغام شده [20] همخوانی بیشتری با نتایج مرجع [11] دارد. همچنین، ضرایب الاستیک مس بلوری با استفاده از روش کرنش تک‌محوری در دمای 300 درجه‌ی کلونین با استفاده از روابط (3) و (4) محاسبه و نتایج در جدول 2 با نتایج گزارش شده توسط فروند و سورش<sup>1</sup> [18] مقایسه شده است.

**جدول 2** ثابت‌های الاستیک بلور مس برحسب گیگا پاسکال با استفاده از روش کرنش تک‌محوری و تابع پتانسیل مدل اتم ادغام شده [14] در دمای 300 درجه‌ی کلونین

**Table 2** Young's modulus of copper crystal in terms of GPa using the uniaxial strain method and employing EAM potential [14] in 300 degrees Kelvin

	تحقیق حاضر	فروند و سورش [18]	اختلاف نتایج (%)
$C_{11}$	164.9	168.4	2.1
$C_{12}$	121.1	121.4	0.2

نتایج ارائه شده در جدول 1 متناظر با توابع پتانسیل مدل اتم ادغام شده‌ی ارائه شده توسط آدامز و همکاران [14] و ژو و همکاران [20] است و نتایج جدول 2 متناظر با تابع پتانسیل مدل اتم ادغام شده‌ی ارائه شده توسط آدامز و همکاران [14] است. بررسی نتایج ذکر شده در جدول 1 نشان می‌دهد که نتایج حاصل از تابع پتانسیل [20] همخوانی بهتری با مرجع [11] دارد. همچنین نتایج جدول 2 نشان می‌دهد که اختلاف نتایج مربوط به تابع پتانسیل [14] در دمای اتاق با نتایج گزارش شده توسط فروند و سورش بسیار اندک است. با توجه به اینکه نتایج ارائه شده توسط فروند و سورش آزمایشگاهی و در دمای اتاق گزارش شده است و اختلاف بسیار اندکی با نتایج حاصل از تابع پتانسیل مدل اتم ادغام شده‌ی آدامز و همکاران [14] دارد، ادامه‌ی تحقیق حاضر توسط همین تابع پتانسیل در نظر گرفته شده است.

**جدول 3** مدول یانگ نانو لوله‌های کربنی برحسب گیگا پاسکال با استفاده از روش تنش تک‌محوری و با استفاده از توابع پتانسیل ایربو [15] و ترسوف [16] در دماهای مختلف

**Table 3** Young's modulus of carbon nanotubes in terms of GPa based on the uniaxial stress method and for two interatomic potentials Airebo [15] and Tersoff [16] in different temperatures

دما (کلونین)	آرمچیر		زیگزاگ		کایرال	
	ایربو	ترسوف	ایربو	ترسوف	ایربو	ترسوف
10	1078.0	1359.3	1201.3	1340.3	1378.7	1744.1
50	1086.2	1355.7	1184.7	1336.6	1470.2	1616.2
150	1086.2	1344.9	1186.3	1324.4	1304.0	1508.8
250	1100.1	1333.0	1128.9	1312.4	1287.7	1346.1

با توجه به شرایط مرزی مساله،  $u(0, t) = u'(L, t) = 0$  و با فرض  $\alpha^2 = -\frac{E X''}{\rho X}$ ، معادلات دیفرانسیل عادی مرتبه‌ی دوم با ضرایب ثابت مطابق روابط زیر نتیجه می‌شود:

$$\begin{cases} X'' + \frac{\alpha^2 \rho}{E} X = 0, & X(0) = X'(L) = 0, \\ T'' + \frac{\alpha^2 C}{E} T' + \alpha^2 T = 0, \end{cases} \quad (12)$$

از حل معادله‌ی نخست، با استفاده از شرایط مرزی نوشته شده، رابطه‌ی زیر حاصل می‌شود:

$$\alpha_n = \frac{\pi}{2L} \sqrt{\frac{E}{\rho}} (2n + 1), \quad (13)$$

با در دست داشتن  $\alpha_n$ ، پاسخ معادله‌ی دوم که به فرم  $e^{\beta t}$  است، با تعیین  $\beta_n$  از رابطه‌ی زیر نتیجه می‌شود:

$$\beta_n = \frac{-C\alpha_n^2}{2E} \pm \frac{C\alpha_n^2}{2E} \sqrt{1 - \frac{4E^2}{C^2\alpha_n^2}} \quad (14)$$

ضریب میرایی بحرانی ( $C_c$ ) برای  $n = 0$  از روابط فوق، به صورت زیر نتیجه می‌شود:

$$C_c = \frac{4L}{\pi} \sqrt{E\rho}. \quad (15)$$

از طرفی نسبت میرایی طولی در عضو به صورت  $\xi = C/C_c$  تعریف می‌شود که در آن  $C$  ضریب میرایی طولی سازه است. پارامتر  $Q$  بنابه تعریف با نسبت میرایی رابطه‌ی عکس دارد:

$$\xi = \frac{1}{2Q}. \quad (16)$$

## 3- نتایج عددی

در این بخش، نتایج عددی حاصل از شبیه‌سازی دینامیکی جهت محاسبه‌ی ثابت‌های الاستیک، فاکتور  $Q$  و ضریب میرایی طولی برای بلور مس، نانو لوله-های کربنی و بلور مس تقویت شده با نانو لوله‌های کربنی ارائه می‌شود.

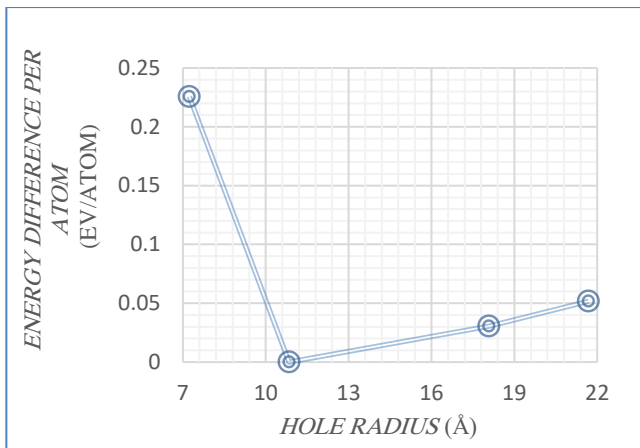
**جدول 1** مدول یانگ بلور مس برحسب گیگا پاسکال با استفاده از روش تنش

تک‌محوری و دو تابع پتانسیل مدل اتم ادغام شده در دماهای مختلف

**Table 1** Young's modulus of copper crystal in terms of GPa with the uniaxial stress method employing two EAM potentials in different temperatures

دما (کلونین)	تحقیق حاضر		دوان و همکاران [11]	اختلاف نتایج (%)	
	EAM [14]	EAM [20]		EAM [14]	EAM [20]
10	76.9	79.6	82.32	6.6	3.3
50	76.5	75.3	74.45	2.8	1.1
100	76.0	74.9	-	-	-
150	75.7	70.4	-	-	-
200	75.0	71.2	66.30	13.1	7.4
250	74.5	65.6	-	-	-
300	74.1	65.1	60.59	22.3	7.4

<sup>1</sup> Freund and Suresh



**Fig. 3** Energy difference with respect to the minimum state of energy in terms of eV/atom versus hole radius in terms of Angstrom

**شکل 3** اختلاف انرژی بر واحد اتم نسبت به حالت کمینه انرژی بر حسب الکترون-ولت بر اتم در مقابل شعاع حفره بر حسب آنگستروم

**جدول 4** مدول یانگ بلور مس تقویت شده با نانو لوله های کربنی بر حسب گیگا پاسکال با استفاده از روش تنش تک-محوری و پتانسیل های بین اتمی ایربو و ترسوف در دماهای مختلف

**Table 4** Young's modulus of the reinforced copper in terms of GPa using the uniaxial stress method and two interatomic potentials Airebo and Tersoff in different temperatures

دما (کلوین)	آرمچیر		زیگزراگ		کایرال	
	ایربو	ترسوف	ایربو	ترسوف	ایربو	ترسوف
50	119.9	140.0	122.0	124.8	123.7	130.0
100	112.8	138.7	112.5	118.2	123.4	125.2
150	105.9	138.3	111.8	107.8	114.9	117.2
200	103.5	114.8	104.6	111.2	117.5	121.0
250	106.6	107.9	105.9	111.2	111.9	118.0
300	102.5	107.3	103.1	108.2	112.0	114.4

از مقایسه ی مقادیر جداول 1 و 4 برای دمای 50 درجه ی کلوین ملاحظه می شود که در حالتی که از پتانسیل ایربو استفاده می شود، افزودن نانو لوله های کربنی کایرال، زیگزراگ و آرمچیر به محیط بلوری مس به ترتیب، باعث افزایش حدود 62، 60 و 57 درصدی در مدول یانگ کامپوزیت نسبت به بلور مس می شود.

اما در دماهای بالاتر مدول یانگ کامپوزیت نسبت به بلور مس به میزان کمتری افزایش می یابد. وقتی که از پتانسیل ترسوف استفاده می شود، افزایش مدول یانگ کامپوزیت نسبت به بلور مس در دمای 50 درجه ی کلوین برابر 70، 63 و 83 درصد به ترتیب برای نانو لوله های کایرال، زیگزراگ و آرمچیر است. روند کاهشی مدول یانگ کامپوزیت با افزایش دما تقریباً در همه ی حالت ها ملاحظه می شود.

در خصوص اثر کایرالیته ی نانو لوله ی کربنی بر مدول یانگ کامپوزیت ملاحظه می شود که بر اساس پتانسیل ترسوف، در دمای 50 درجه ی کلوین، نانو لوله ی آرمچیر در مقایسه با زیگزراگ و کایرال اثر فزاینده تری بر مدول یانگ داشته است. در حالیکه، در دمای 300 درجه، نانو لوله ی کایرال اثر فزاینده تر در مقایسه با زیگزراگ و آرمچیر داشته است.

حال، به منظور محاسبه ی مدول یانگ نانو لوله های کربنی، ابتدا نانو لوله های کربنی آرمچیر، زیگزراگ و کایرال که دارای نشانه های، به ترتیب، (8,8)، (14,0) و (9,7) و طول 4.338 نانومتر در امتداد محور Z هستند، با استفاده از هنگردهای NVT و NPT و گام زمانی 0.001 پیکوثانیه به تعادل می رسند.

در ادامه، در جهت Z تغییر طول ایجاد کرده، نمودار تنش-کرنش در جهت Z ترسیم شده و مدول یانگ محوری نانو لوله که برابر با شیب نمودار تنش-کرنش است، استخراج می شود. در این شبیه سازی ها، میان کنش اتم های کربن با استفاده از توابع پتانسیل ایربو [15] و ترسوف [16] مدل سازی می شود. نتایج مدول یانگ نانو لوله های کربنی در جدول 3 خلاصه شده است. نتایج نشان می دهد که مدول یانگ نانو لوله های کربنی با استفاده از پتانسیل ترسوف با افزایش دما برای همه ی حالت ها، مطابق انتظار، روند کاهشی دارد.

این درحالیست که با پتانسیل ایربو، با افزایش دما مدول یانگ نانو لوله های کایرال و زیگزراگ تقریباً روند کاهشی و برای نانو لوله ی آرمچیر روند افزایشی دارد. نتایج گزارش شده در جدول 3 نشان می دهد که با شعاع یکسان، نانو لوله های کربنی کایرال دارای مدول یانگ بیشتری نسبت به نانو لوله های کربنی آرمچیر و زیگزراگ هستند.

به عنوان مثال، در دمای 10 درجه ی کلوین و با پتانسیل ترسوف، مدول یانگ نانو لوله های کربنی آرمچیر و زیگزراگ تقریباً با هم برابر اما مدول یانگ نانو لوله ی کربنی کایرال حدود 30% بیشتر است. نکته ی قابل توجه این است که با افزایش دما اثر کایرالیته ی بر مدول یانگ نانو لوله های کربنی کاهش می یابد.

به عنوان مثال، بر اساس نتایج حاصل از پتانسیل ترسوف، در دمای 50 درجه ی کلوین، مدول یانگ نانو لوله ی کایرال نسبت به آرمچیر حدود 28% و مدول یانگ نانو لوله ی آرمچیر نسبت به نانو لوله ی زیگزراگ حدود 1.4% بیشتر است. این در حالیست که در دمای 250 درجه ی کلوین، این اعداد به ترتیب برابر 1% و 1.5% است.

در نهایت، برای محاسبه ی مدول یانگ بلور مس تقویت شده با نانو لوله های کربنی، در درون بلور مس حفره ای ایجاد کرده و نانو لوله های کربنی مورد نظر در درون آن قرار داده می شود.

برای تعیین اندازه ی بهینه ی شعاع حفره، شعاع حفره های مختلف ایجاد شده، نانو لوله در حفره قرار داده شده و انرژی سیستم بر اساس توابع پتانسیلی مورد استفاده محاسبه می شود. شعاع حفره ی متناظر با انرژی کمینه ی سیستم برای مدل سازی انتخاب می شود.

محاسبات نشان می دهد که انرژی سیستم برای شعاع حفره ی 1.0845 نانومتر کمینه است (شکل 3). در شکل 3 نمودار اختلاف انرژی سیستم نسبت به حالت کمینه برای شعاع حفره های مختلف ترسیم شده است.

برای محاسبه ی ویژگی مکانیکی کامپوزیت مورد نظر، نمودار تنش-کرنش در دماهای مختلف و برای پتانسیل های ایربو و ترسوف ترسیم و مدول یانگ استخراج می شود. نتایج مربوط به مدول یانگ بلور مس تقویت شده برای دو پتانسیل مذکور در جدول 4 آورده شده است.

ایجاد درصد خطای قابل توجه بین نتایج حاصل از این تحقیق با مطالعه ای ایشان شده است. اما همانطور که ملاحظه می شود اختلاف نتایج مراجع [11] و [21] بسیار بیشتر است.

به طور مشابه، برای محاسبه ی فاکتور Q برای بلور مس، ابتدا نمونه ی بلور مس در دماهای مختلف با استفاده از هنگردهای NVT و NPT با گام زمانی 0.001 پیکوثانیه به تعادل می رسد، سپس با استفاده از هنگرد NVE نسبت به محیط ایزوله می شود و در ادامه، تحت بارگذاری تناوبی قرار می گیرد. نتایج مربوط به فاکتور Q در بلور مس در جدول 7 ارائه شده است. نتایج جدول 7 نشان می دهد که با افزایش دما، فاکتور Q در بلور مس کاهش می یابد. همان طور که ملاحظه می شود با افزایش دما فاکتور Q به سرعت کاهش می یابد که با توجه به افزایش میرایی با افزایش دما قابل توجیه است.

سرانجام، بلور مس تقویت شده با نانو لوله های کربنی، ابتدا در دماهای مختلف با استفاده از هنگردهای NVT و NPT و با گام زمانی 0.001 پیکوثانیه به تعادل می رسند. در ادامه، با هنگرد NVE نسبت به محیط ایزوله شده و تحت بارگذاری تناوبی قرار می گیرد. نتایج فاکتور Q برای بلور مس تقویت شده در جدول 8 برای دو پتانسیل ایربو و ترسوف ارائه شده است.

**جدول 7** فاکتور Q در بلور مس با استفاده از روش ارتعاش اجباری در دماهای مختلف

دما (کلوین)	فاکتور Q
50	16654.6
100	6618.9
150	4384.3
200	3111.5
250	2404.7
300	1897.5

**جدول 8** فاکتور Q برای بلور مس تقویت شده با استفاده از روش ارتعاش اجباری و پتانسیل های ایربو و ترسوف در دماهای مختلف

دما (کلوین)	آرمچیر		زیگزاگ		کایرال	
	ایربو	ترسوف	ایربو	ترسوف	ایربو	ترسوف
50	120.06	56.37	70.36	20.81	11.90	6.49
100	20.30	98.18	10.97	3.84	17.39	11.89
150	90.17	55.12	10.60	24.48	28.63	23.82
200	11.58	36.98	12.31	27.96	26.13	13.94
250	20.17	27.01	15.97	27.07	21.79	25.09
300	66.61	31.44	27.02	22.80	17.74	25.79

نتایج جداول 7 و 8 نشان می دهد که با تقویت بلور مس توسط نانو لوله های کربنی فاکتور Q به شدت کاهش می یابد. نتایج نشان می دهد که با تقویت بلور مس، حساسیت فاکتور Q در کامپوزیت حاصل، نسبت به دما کاهش چشمگیری پیدا می کند. همچنین، به نظر می آید که اثر نانو لوله های کایرال و زیگزاگ در کاهش فاکتور Q نسبت به نانو لوله ی آرمچیر بیشتر است. علاوه بر این، فاکتور Q در نمونه های مدلسازی شده با پتانسیل ترسوف کمتر از نمونه های شبیه سازی شده با پتانسیل ایربو است. در مورد کامپوزیت های ساخته

در ادامه، به منظور مقایسه ی اثر نانو لوله های کربنی کوتاه و بلند به عنوان رشته های تقویت کننده ی زمینه، نمونه هایی با طول نانو لوله ی کوتاهتر از زمینه ی بلوری مس نیز شبیه سازی و از نظر خواص مکانیکی بررسی می شود. در این نمونه ها، طول نانو لوله های کربنی تقریباً به اندازه 8 برابر پارامتر شبکه ای مس یعنی حدود 29 آنگستروم فرض می شود. در این حالت، مدول یانگ کامپوزیت برای دو پتانسیل ایربو و ترسوف مطابق جدول 5 به دست می آید.

**جدول 5** مدول یانگ بلور مس تقویت شده با نانو لوله های کربنی کوتاه برحسب گیگاپاسکال با استفاده از روش تنش تک محوری و پتانسیل های بین اتمی ایربو و ترسوف در دماهای مختلف

**Table 5** Young's modulus of the reinforced copper in terms of GPa using the uniaxial stress method and two interatomic potentials Airebo and Tersoff in different temperatures

دما (کلوین)	آرمچیر		زیگزاگ		کایرال	
	ایربو	ترسوف	ایربو	ترسوف	ایربو	ترسوف
50	107.9	117.4	108.0	118.3	109.5	119.8
100	107.3	116.5	108.2	117.6	110.0	119.1
150	107.1	117.6	107.8	117.7	108.8	119.2
200	107.6	116.3	107.8	117.5	109.4	118.4
250	107.3	115.8	107.1	117.0	108.9	117.9
300	106.8	115.4	107.7	115.9	108.4	117.5

نکته ی جالب در نمونه های با نانو لوله های کوتاه این است که مدول یانگ این نمونه ها با تغییر دما تغییر قابل ملاحظه ای نمی کند. هر چند که روند کاهش کلی در مدول یانگ با افزایش دما در این نمونه ها نیز قابل مشاهده است، اما این کاهش در مقایسه با نمونه های با نانو لوله های بلند بسیار کمتر است. همچنین، در این حالت اثر کایرالیته ی نانو لوله هم بر مدول یانگ کم رنگ تر است.

### 2-3- فاکتور Q

نخست، به منظور اعتبار سنجی نتایج محاسبات، فاکتور Q مربوط به نانو لوله ی کربنی آرمچیر با نشانه ی (10,10) و طول های 4، 8 و 16 نانومتر در دمای 100 درجه ی کلوین با استفاده از تابع پتانسیل بین اتمی ایربو و روابط (5) و (6) محاسبه و نتایج در جدول 6 با نتایج کار دوان و همکاران [11] و والابھانی و همکاران [21] مقایسه شده است.

**جدول 6** فاکتور Q برای نانو لوله های کربنی آرمچیر با استفاده از روش ارتعاش اجباری در دمای 100 درجه ی کلوین

طول نانو لوله (nm)	تحقیق حاضر	مرجع [11]	مرجع [21]	اختلاف تحقیق حاضر و مرجع [21] (%)	اختلاف مراجع [11] و [21] (%)
0.4	910.4	-	3000	69.6	-
0.8	3679.5	-	2900	26.9	-
0.16	1219.0	7000	2000	39.0	250

فاکتور Q برای نانو لوله های کربنی متأثر از طول و ضخامت نانو لوله ی کربنی، دمای شبیه سازی، پتانسیل مورد استفاده، شرایط مرزی و روش محاسبه است. بنابراین، مشخص نبودن ضخامت جداره ی نانو لوله ی کربنی، پتانسیل مورد استفاده و شرایط مرزی مدل در کار تحقیقاتی والابھانی و همکاران [21] باعث

<sup>1</sup> Vallabhaneni et al.

شده با نانو لوله های کربنی کوتاه، فاکتور Q برای دو پتانسیل ایربو و ترسوف محاسبه و در جدول 9 آورده شده است. همچنین، بررسی نتایج حاکی از اینست که در دماهای پایین اثر کایرالیته بر فاکتور Q نسبت به دماهای بالا بسیار چشمگیرتر است. به عنوان مثال، بر اساس پتانسیل ترسوف، در دمای 50 درجه، فاکتور Q برای کامپوزیت با نانو لوله ی کایرال حدود 8.5 برابر نسبت به کامپوزیت با نانو لوله ی آرمچیر کمتر است در حالیکه در دمای 300 درجه اختلاف فاکتور Q در کامپوزیت با نانو لوله ی کایرال و آرمچیر بسیار کمتر و در حدود 22% است.

**جدول 11** ضریب میرایی طولی مس تقویت شده بر حسب  $(\frac{kg.s}{cm^2})$  با استفاده از دو پتانسیل ایربو و ترسوف در دماهای مختلف

**Table 11** Longitudinal damping coefficient of the reinforced copper (model B) in terms of  $kg.s/cm^2$  employing two interatomic potentials Airebo and Tersoff in different temperatures

دما (کلوین)	آرمچیر		زیگزاگ		کایرال	
	ایربو	ترسوف	ایربو	ترسوف	ایربو	ترسوف
50	0.0007	0.0016	0.0012	0.0041	0.0072	0.0136
100	0.0040	0.0009	0.0075	0.0219	0.0049	0.0073
150	0.0009	0.0016	0.0077	0.0033	0.0029	0.0035
200	0.0068	0.0022	0.0064	0.0029	0.0032	0.0061
250	0.0039	0.0030	0.0050	0.0030	0.0037	0.0033
300	0.0012	0.0025	0.0029	0.0035	0.0046	0.0032

نتایج جداول 10 و 11 نشان می دهد که تقویت بلور مس با نانو لوله های کربنی سبب افزایش چشمگیر ضریب میرایی طولی می شود. درحالی که از پتانسیل ایربو استفاده شود، در کامپوزیت های با نانو لوله ی کربنی کایرال، در دماهای بیشتر از 150 درجه ی کلوین، ضریب میرایی با افزایش دما، افزایش می یابد. اما در سایر مدل ها روند مشخصی دیده نمی شود. ضریب میرایی کامپوزیت ساخته شده با نانو لوله ی کربنی آرمچیر در بیشتر دماها کمتر از کامپوزیت ساخته شده با نانو لوله ی کربنی زیگزاگ است و در دماهای کمتر از 150 درجه ی کلوین، ضریب میرایی کامپوزیت ساخته شده با نانو لوله ی کربنی آرمچیر کمتر از کامپوزیت ساخته شده با نانو لوله ی کربنی کایرال است. در مقایسه ی ضریب میرایی کامپوزیت های ساخته شده با نانو لوله های کربنی کایرال و زیگزاگ، اثر نانو لوله ی کربنی زیگزاگ در افزایش ضریب میرایی بلور مس در بسیاری موارد بیشتر از نانو لوله ی کربنی کایرال است. در حالی که از پتانسیل ترسوف استفاده شود، ضریب میرایی در کامپوزیت های متشکل از نانو لوله های کربنی کایرال و زیگزاگ بیشتر است و این اختلاف با افزایش دما کاهش می یابد.

**جدول 12** ضریب میرایی طولی مس تقویت شده با نانو لوله های کربنی کوتاه بر حسب  $(\frac{kg.s}{cm^2})$  با استفاده از دو پتانسیل ایربو و ترسوف در دماهای مختلف

**Table 12** Longitudinal damping coefficient of the reinforced copper with short carbon nanotubes fibers in terms of  $kg.s/cm^2$  for two interatomic potentials Airebo and Tersoff in different temperatures

دما (کلوین)	آرمچیر		زیگزاگ		کایرال	
	ایربو	ترسوف	ایربو	ترسوف	ایربو	ترسوف
50	0.0004	0.0013	0.0007	0.0003	0.0007	0.0000
100	0.0002	0.0005	0.0013	0.0005	0.0010	0.0005
150	0.0001	0.0007	0.0007	0.0010	0.0007	0.0008
200	0.0011	0.0009	0.0017	0.0007	0.0009	0.0013
250	0.0011	0.0011	0.0017	0.0012	0.0007	0.0014
300	0.0013	0.0017	0.0016	0.0017	0.0020	0.0022

در کامپوزیت های با الیاف کوتاه، به طور کلی ضریب میرایی نسبت به کامپوزیت های با الیاف بلند کمتر است و در این کامپوزیت ها معمولا با افزایش دما میرایی افزایش می یابد. در نتایج حاصل از پتانسیل ایربو، ضریب میرایی در کامپوزیت های ساخته شده از زیگزاگ و کایرال نسبت به حالت آرمچیر بیشتر است.

**جدول 9** فاکتور Q برای بلور مس تقویت شده با نانو لوله های کربنی کوتاه با استفاده از روش ارتعاش اجباری و پتانسیل های ایربو و ترسوف در دماهای مختلف

**Table 9** Q-factor of the reinforced copper with short carbon nanotubes fibers using the forced vibration method by employing two interatomic potentials Airebo and Tersoff in different temperatures

دما (کلوین)	آرمچیر		زیگزاگ		کایرال	
	ایربو	ترسوف	ایربو	ترسوف	ایربو	ترسوف
50	184.98	64.48	120.64	300.34	111.18	5791.59
100	342.08	164.69	61.01	183.75	84.77	182.88
150	612.24	123.94	115.46	81.98	110.31	102.34
200	73.14	93.91	46.32	121.42	91.31	64.50
250	70.43	73.85	45.45	71.21	108.31	60.37
300	59.15	48.92	48.19	49.58	39.58	38.24

بررسی و مقایسه ی نتایج جداول 8 و 9 نشان می دهد که در کامپوزیت های با نانو لوله ی کوتاه و در دماهای پایین چنانچه از پتانسیل ترسوف استفاده شود، اثر نانو لوله ی آرمچیر و زیگزاگ در کاهش فاکتور Q بسیار بیشتر از نانو لوله ی کایرال است. به طور کلی فاکتور Q در کامپوزیت های با نانو لوله ی کوتاه در مقایسه با کامپوزیت های با الیاف بلند به خصوص در دماهای پایین بسیار بیشتر است و با افزایش دما این اختلاف به شدت کاهش می یابد.

### 3-3- ضریب میرایی

مطابق توضیحات ارائه شده در بخش 2-3، نمونه های استفاده شده در این مطالعه، سازه های چند درجه ی آزادی هستند. بنابراین، ضریب میرایی آن ها از روابط (16)-(15) محاسبه می شود. نتایج عددی برای ضریب میرایی بلور مس در جدول 10 ارائه شده است.

**جدول 10** ضریب میرایی طولی بلور مس بر حسب  $(\frac{kg.s}{cm^2})$  در دماهای مختلف

**Table 10** Longitudinal damping coefficient of copper crystal in terms of  $kg.s/cm^2$  in different temperatures

دما (کلوین)	ضریب میرایی بلور مس $(10^{-6} \frac{kg.s}{cm^2})$
50	4.34
100	10.9
150	16.4
200	22.9
250	29.5
300	37.2

نتایج جدول 10 بیانگر آن است که افزایش دما سبب افزایش ضریب میرایی می شود و مثلا، ضریب میرایی بلور مس در دمای 300 درجه نسبت به دمای 50 درجه ی کلوین حدود 9 برابر افزایش یافته است. همچنین، نتایج عددی



فاکتور مرتبط با میرایی	$Q$
حجم ( $\text{nm}^3$ )	$V$
جرم المان (kg)	$dm$
طول (nm)	$L$
طول اولیه نمونه (nm)	$L_0$
دامنه ی نوسان (nm)	$A_0$
ضریب میرایی ( $\text{kg}\cdot\text{s}/\text{cm}^2$ )	$C$
زمان (t)	$t$
انرژی (eV)	$U$
موقعیت (nm)	$x$
مولفه ی جابجایی (nm)	$u$
<b>علائم یونانی</b>	
مولفه های تنش محوری (GPa)	$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$
مولفه های کرنش محوری	$\varepsilon_x, \varepsilon_y, \varepsilon_z$
ضریب پواسون	$N$
نسبت میرایی	$\xi$
جرم مخصوص ( $\text{g}/\text{cm}^3$ )	$\rho$
فرکانس زاویه ای (rad/s)	$\Omega$
<b>زیر نویس ها</b>	
ذخیره شده	Stored
تلف شده	$disp$
بحرانی	$C$
بیشینه	$max$

#### 6- مراجع

- [1] Delfani, M.R., Shodja, H.M. and Ojaghnezhad, F., "Mechanics and Morphology of Single-walled Carbon Nanotubes: from Graphene to the Elastica," Philosophical Magazine, Vol. 93, No. 17, pp. 2057-2088, 2013.
- [2] Casati, R. and Vedani, M., "Metal Matrix Composites Reinforced bu Nano-Particles-A Review," Metals, Vol. 4, pp. 65-83, 2014.
- [3] Choi, B.K., Yoon, G.H. and Lee, S., "Molecular Dynamics Studies of CNT-Reinforced Aluminum Composites Under Uniaxial Tensile Loading," Composites Part B: Engineering, Vol. 91, pp. 119-125, 2016.
- [4] Hu, N., Fukunaga, H., Lu, C., Kameyama, M. and Yan, B., "Prediction of Elastic Properties of Carbon Nanotube Reinforced Composites," Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, Vol. 461, No. 2058, pp. 1685-1710, 2005.
- [5] Shokrieh, M. M. and Rafiee, R., "On the Tensile Behavior of an Embedded Carbon Nanotube in Polymer Matrix with Non-Bonded Interphase Region," Composite Structures, Vol. 92, No. 3, pp. 647-652, 2010.
- [6] Shokrieh, M. M. and Rafiee, R., "Investigation of Nanotube Length Effect on the Reinforcement Efficiency in Carbon Nanotube Based Composites," Composite Structures, Vol. 92, No. 10, pp. 2415-2420, 2010.
- [7] Khosravi, H., Eslami-Farsani, R. and Ebrahimnezhad-Khaljiri, H., "An Experimental Study on Mechanical Properties of Epoxy/basalt/carbon Nanotube Composites under Tensile and

#### 4- نتیجه گیری و جمع بندی

در این تحقیق، با استفاده از روش دینامیک مولکولی، ثابت های الاستیک، فاکتور  $Q$  و ضریب میرایی طولی در بلور مس، نانو لوله های کربنی و بلور مس تقویت شده با نانو لوله های کربنی محاسبه و مقایسه شده است. نانو لوله های مورد بررسی در این مطالعه همگی تقریباً دارای قطر یکسان هستند. همچنین، جهت بررسی اثر پتانسیل بین اتمی، در تمام شبیه سازی ها از دو پتانسیل ایربو و ترسوف جهت مدلسازی میان کنش اتمی بین اتم های کربن استفاده شده است. علاوه بر این، به منظور بررسی اثر طول نانو لوله ها در خواص مکانیکی کامپوزیت، کامپوزیت با استفاده از نانو لوله های کوتاه نیز مدلسازی شده و نتایج آن جهت مقایسه آورده شده است. ملاحظه می شود که در بلور مس تقویت شده با نانو لوله های کربنی در حالتی که از پتانسیل ایربو استفاده می شود اثر نانو لوله ی کربنی کایرال در افزایش مدول یانگ بیشتر از نانو لوله ی کربنی زیگزاگ و اثر نانو لوله ی کربنی زیگزاگ بیشتر از نانو لوله ی کربنی آرمچیر است. این در حالیست که تحت پتانسیل بین اتمی ترسوف، مدول یانگ کامپوزیت با نانو لوله ی کربنی آرمچیر بیشتر است. نتایج حاکی از اینست که پتانسیل بین اتمی ترسوف در محاسبه ی مدول یانگ روند بهتری دارد. همچنین، مشاهده می شود که با افزایش دما اثر کایرالیته بر روی مدول یانگ روند کاهشی دارد. به طور کلی ملاحظه می شود که افزایش دما سبب کاهش مدول یانگ می شود. در مورد کامپوزیت های متشکل از نانو لوله های کوتاه، حساسیت مدول یانگ کامپوزیت به تغییر دما بسیار کمتر است.

نتایج محاسبه ی فاکتور  $Q$  حاکی از آن است که با تقویت بلور مس به وسیله ی نانو لوله های کربنی، فاکتور  $Q$  به طور چشمگیری کاهش می یابد که این مساله با توجه به افزایش میرایی در کامپوزیت ها قابل توجیه است. همچنین در بلور مس افزایش دما با فاکتور  $Q$  رابطه ی عکس دارد. اما در کامپوزیت ها با افزایش دما روند مشخص و ثابتی در نتایج فاکتور  $Q$  مشاهده نمی شود.

در بخش پایانی این تحقیق، ضریب میرایی بلور مس و بلور مس تقویت شده با نانو لوله های کربنی محاسبه شده است. نتایج به دست آمده در این بخش نشان می دهد که تقویت بلور مس به وسیله ی نانو لوله های کربنی به میزان زیادی ضریب میرایی آن را افزایش می دهد. همچنین، در بلور مس افزایش دما به طور کلی سبب افزایش ضریب میرایی می شود. نتایج نشان می دهد که در کامپوزیت ساخته شده با نانو لوله ی کربنی آرمچیر ضریب میرایی با دما روند مشخصی ندارد. درحالیکه، در کامپوزیت ساخته شده با نانو لوله ی کربنی زیگزاگ در دماهای بالاتر از 150 درجه ی کلونین ضریب میرایی با افزایش دما، افزایش می یابد. در کامپوزیت ساخته شده با نانو لوله ی کربنی کایرال در دماهای 150 تا 250 درجه ی کلونین ضریب میرایی با افزایش دما، افزایش می یابد. همچنین، اثر نانو لوله ی زیگزاگ در افزایش ضریب میرایی بلور مس بیشتر از نانو لوله ی آرمچیر و در دماهای پایین تر از 150 درجه ی کلونین اثر نانو لوله ی کربنی کایرال بیشتر از آرمچیر است. در دماهای بین 100 تا 250 درجه ی کلونین اثر نانو لوله ی زیگزاگ در افزایش ضریب میرایی بلور مس بیشتر از نانو لوله ی کایرال است.

#### 5- فهرست علائم

$E$	مدول یانگ (GPa)
$F$	نیرو (N)
$S$	مساحت ( $\text{nm}^2$ )
$C_{11}, C_{12}$	ضرایب الاستیک (GPa)

- Flexural Loadings,” In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 3, No. 2, pp. 187-194, 2016.
- [8] Esmaeili, R. and Dashtbayazi, M.R., “Simulation of Mechanical Properties of Al-SiC Nanocomposite Using Molecular Dynamics Method,” In Persian, JAME, Vol. 32, No. 2, pp. 43-54, 2013.
- [9] Madoliat, R., Ghasemi-Ghalebahman, A. and Mohammad-Hanifeh, G., “Effect of Damping on Nonlinear Forced Vibration Response of Graphene-based Nanocomposites,” In Persian, Journal of Science and Technology of Composites, Vol. 4, No. 2, pp. 141-150, 2017.
- [10] Tserpes, K. and Papanikos, P., “Finite Element Modeling of Single-Walled Carbon Nanotubes,” Composites Part B: Engineering, Vol. 36, No. 5, pp. 468-477, 2005.
- [11] Duan, K., Li, L., Hu, Y. and Wang, X., “Damping Characteristic of Ni-Coated Carbon Nanotube/Copper Composite,” Materials & Design, Vol. 133, pp. 455-463, 2017.
- [12] Kittel, C., “Introduction to Solid State Physics,” John Wiley & Sons Inc., New York, 2005.
- [13] Cai, J., Wang, C., Yu, T. and Yu, S., “Wall Thickness of Single-Walled Carbon Nanotubes and Its Young’s Modulus,” Physica Scripta, Vol. 79, No. 2, pp. 025702, 2009.
- [14] Adams, J., Foiles, S. and Wolfer, W., “Self-Diffusion and Impurity Diffusion of Fee Metals Using the Five-Frequency Model and the Embedded Atom Method,” Journal of Materials Research, Vol. 4, No. 1, pp. 102-112, 1989.
- [15] Stuart, S. J., Tutein, A. B. and Harrison, J. A., “A Reactive Potential for Hydrocarbons with Intermolecular Interactions,” The Journal of chemical physics, Vol. 112, No. 14, pp. 6472-6486, 2000.
- [16] Tersoff, J., “Modelling Solid-State Chemistry: Interatomic Potentials for Multicomponent Systems,” Phys. Rev. B, Vol. 39, No. 8, pp. 5566-5568, 1989.
- [17] Xu, Z. and Buehler, M. J., “Nanoengineering Heat Transfer Performance at Carbon Nanotube Interfaces,” ACSNano, Vol. 3, No. 9, pp. 2767-2775, 2009.
- [18] Freund, L. B. and Suresh, S., “Thin Film Materials: Stress, Defect Formation and Surface Evolution,” Cambridge University Press, 2004.
- [19] Hagedorn, P. and DasGupta, A., “Vibrations and Waves in Continuous Mechanical Systems,” Wiley Online Library, 2007.
- [20] Zhou, X.W., Johnson, R.A., and Wadley, H.N.G., “Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers,” Phys. Rev. B, Vol. 69, p. 144113, 2004.
- [21] Vallabhaneni, A. K., Rhoads, J. F., Murthy, J. Y. and Ruan, X., “Observation of Nonclassical Scaling Laws in the Quality Factors of Cantilevered Carbon Nanotube Resonators,” Journal of Applied Physics, Vol. 110, No. 3, pp. 034312, 2011.