

شبیه سازی اتمی بررسی اثر قطر، تعداد دیواره، فاصله بین لایه ای و دما بر روی خواص مکانیکی نانولوله های چند جداره نیتريد بور

محمد رضا مصطفایی^{۱*}، عبدالحسین فریدون^۲، مسعود درویش گنجی^۱

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی مکانیک طراحی کاربردی، گروه مکانیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد سمنان، سمنان، ایران

۲- استاد، دانشگاه آزاد اسلامی واحد سمنان، گروه مکانیک، سمنان، ایران

* سمنان، صندوق پستی: ۱۷۹-۳۵۱۴۱، mhr.mostafaei@gmail.com

چکیده

به کمک استفاده از شبیه سازی دینامیک ملکولی، خواص مکانیکی نانولوله های تک جداره، دوجداره و سه جداره نیتريد بور محاسبه شده است. اثر قطر، کایرالیته، فاصله بین لایه ای و دما بر روی خواص مکانیکی مجموعه مدنظر تخمین زده شده است. نتایج نشان می دهد که نانولوله های نیتريد بور زیگزاگ مستحکم تر از نوع آرمیچر در محدوده قطر مشابه هستند. همچنین مدول یانگ هر دو نوع نانولوله دوجداره و سه جداره نیتريد بور با افزایش قطر، افزایش می یابد. علاوه بر این مدول یانگ نانولوله های نیتريد بور دو جداره کوچکتر از سه جداره و بزرگتر از تک جداره می باشد. ما نشان دادیم که مدول یانگ نانولوله های دوجداره نیتريد بور با تعداد لایه مختلف افزایش می یابد در زمانیکه فاصله بین لایه ای کاهش یابد. یافته های شبیه سازی ما نه تنها درک کلی ملکولی از نانولوله های نیتريد بور را می دهد، بلکه می تواند جهت مهندسی مکانیک و پژوهشگرانی که در زمینه توسعه خواص مکانیکی فعالیت دارند، مفید واقع شود.

کلیدواژگان

شبیه سازی دینامیک ملکولی، نانولوله های نیتريد بور چندجداره، مدول یانگ، خواص مکانیکی

Atomistic simulations on the influence of diameter, number of walls, interlayer distance and temperature on the mechanical properties of MWBNNTs

Mohammad reza mostafaei^{1*}, Abdolhosein fereidoon², Masoud darvish ganji¹

1- Department of Mechanical Engineering, Semnan University, Semnan, Iran

2- Department of Mechanical Engineering, Semnan Branch, Islamic Azad University, Semnan, Iran

*P.O.B. 35145-179, Semnan, Iran, mhr.mostafaei@gmail.com

Abstract

By using molecular dynamics (MD) simulation the mechanical properties of single, double and triple walled BNNTs (SWBNNT, DWBNNT and TWBNNT) is investigated. The effects of diameter, chirality, interlayer distance and temperature on the mechanical properties of respected systems have been investigated. The results showed that, zigzag BNNTs are stiffer than armchair ones with nearly the same diameter. Also, the Young's modulus of both type of DWBNNTs and TWBNNT increase when the tube diameter increases. In addition, the results confirmed that all measured mechanical properties decrease with increasing temperature. Furthermore, the Young's modulus of DWBNNTs are smaller than TWBNNTs and larger than SWBNNT. We showed that the Young's modulus of DWBNNTs with various interlayer distances increase when separation wall distances were decreased. Our simulation findings afford not only a molecular level understanding of the BNNTs but also may be instructive to mechanical engineers and scientists who attempt to develop effective mechanical properties.

Keywords

Molecular dynamics simulation, BNNTs, Young's modulus, Mechanical properties

۱- مقدمه

صفحه گرافن مانند شبکه نیتريد بور به دور خود تصور کرد جایی که اتم های نیتروژن و بور جایگزین اتم کربن می شوند. با وجود شباهت های ساختاری بسیار زیاد این نانولوله ها با نانولوله های کربنی، تفاوت های فراوانی هم دارند برای مثال نانولوله های کربنی می تواند با توجه به جهت چرخش هم فلزی و هم نیمه رسانا باشند [۲]. در حالیکه شبکه نیتريد بور بدون تاثیر از زاویه آن همواره نارسانا می باشد به علاوه نانولوله ی نیتريد بور مقاومت گرمایی و شیمیایی بسیار بیشتری دارد [۳]. نانولوله های نیتريد بور اولین بار در آزمایشگاه در سال ۱۹۹۵ میلادی تولید شدند [۴]. شکل (۱) تصویر میکروسکوپ TEM از یک نانولوله نیتريد بور از یک تا شش دیواره را نشان می دهد.

نیتريد بور ترکیبی شیمیایی با فرمول BN می باشد که از تعداد مساوی اتم نیتروژن و بور بوجود آمده است. نیتريد بور شش گوشه که هم شکل با گرافیت می باشد پایدارترین و نرم ترین نوع چند شبکه ای نیتريد بور است و در نتیجه به عنوان روان کننده روغن یا مواد افزودنی به لوازم آرایشی استفاده می شود. شکل مکعبی آن مشابه الماس است که سختی آن کمتر از الماس بوده در حالیکه پایداری شیمیایی و گرمایی آن بیشتر است. ساختار شش گوشه ای آن می تواند حتی سخت تر از ساختار مکعبی باشد. شبکه نانویی نیتريد بور یک نانو ساختار دو بعدی است که از یک لایه نیتريد بور تشکیل میشود. نانو ساختار نیتريد بور نه تنها در مقابل تجزیه در خلا، هوا و بعضی مایعات مقاوم است بلکه تا دماهای بالای ۹۰۰ درجه سانتیگراد هم تجزیه نمی شود [۱]. نانولوله ی نیتريد بور را می توان از پیچیدن

سازی می‌تواند شبیه‌سازی‌های پیچیده را اجرا کند. برای بررسی سیستم‌های مولکولی نمی‌توان از روش‌های بر پایه^۱ محیط پیوسته استفاده کرد، چون دینامیک سیستم بسیار سریع بوده و از طرفی محیط فرایند هم پیوسته نیست؛ لذا از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده می‌شود، که بر مبنای مکانیک کلاسیک بوده و لمپس یکی از نرم‌افزارهایی است که می‌توان با آن، بر اساس روش دینامیک مولکولی بسیاری از سیستم‌های اتمی مولکولی را شبیه‌سازی نمود.

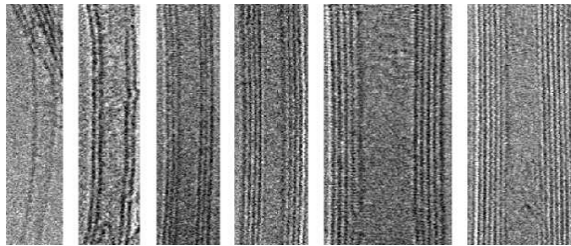
وی.ام.دی برنامه تجسم مولکولی برای نمایش، متحرک سازی و تجزیه و تحلیل سیستم‌های بزرگ بیومولکولی با استفاده از گرافیک سه بعدی بوده که بیش از ۶۰ فرمت مولکولی از جمله خروجی لمپس را پشتیبانی می‌کند [۱۹]. در این پروژه به کمک این نرم افزار محاسبات خواص مکانیکی و ترمودینامیکی نانولوله‌های نیتريد بور در دماهای مختلف محاسبه و با نرم افزار وی.ام.دی ساختارهای تشکیل شده قابل مشاهده و مدلسازی هستند [۱۹].

برای مدلسازی پیوند کووالانسی بین بور و نیتروژن توابع پتانسیل تجربی متنوعی وجود دارد. در این مطالعه ما از تابع پتانسیل ترسوف [۲۰] برای مدلسازی سیستم نانو ساختاری استفاده کرده‌ایم. در واقع نیتريد بور به صورت یک ماده واحد که در آن پارامترهای پتانسیل یکسانی بر روی اتم‌های بور و نیتريد اعمال می‌شود، عمل می‌کند. شرایط مرزی تناوبی که اعمال و برای رسیدن به تعادل از گروه هم‌فشار-هم‌دما (NPT) استفاده می‌گردد. برای این حالت، فشار در مقدار ۱ بار ثابت نگه - داشته شده و دما در محدوده ۱ الی ۸۰۰ کلوین تغییر می‌کند. مقدار نرخ کرنش ۰/۰۱ یک بر روی پیکوتانیه برای کل فرایند این ثابت بوده همچنین گام زمانی انجام فرایند ۱ فمتوثانیه می‌باشد. طول باند بور-نیتروژن به مقدار ۱/۴۵ آنگستروم مطابق مقالات تنظیم می‌گردد [۸]. همچنین زمان ۲۰ پیکو ثانیه برای تعادل سیستم و زمان ۱۰۰ پیکو ثانیه برای حالت بارگذاری در نظر گرفته شده می‌شود. مدل‌های مختلف نانولوله‌های دو جداره و سه جداره حالت آرمیچر و زیگزاگ نیتريد بور در شکل (۲) و استوکیومتری تمام مدل‌ها بطور خلاصه در جدول (۱) نشان داده شده است.

۳- نتایج و بحث

مدول یانگ، تنش نهایی و کرنش شکست مدل‌های چندجداره زیگزاگ و آرمیچر نانولوله‌های نیتريد بور با استفاده از روش دینامیک مولکولی شبیه سازی و با یکدیگر مقایسه می‌گردند. در پردازش رفتار مکانیکی نانولوله نیتريد بور، نمودار تنش-کرنش محاسبه و مدول یانگ، تنش نهایی و کرنش شکست از روی آن محاسبه می‌گردد. رفتار الاستیک غیر خطی برای صفحات نانوگرافن و نانولوله‌ها مطابق تحقیقات پیشنهاد می‌گردد [۲۱، ۲۲].

نتایج نشان می‌دهد که با افزایش کرنش شبه استاتیک خارجی، تنش بصورت غیر خطی افزایش می‌یابد.



شکل ۱ تصویر میکروسکوپ TEM از یک نانولوله نیتريد بور از یک تا شش دیواره، این مدل نشان می‌دهد که ۴ لایه کنوردیناسیونی (یا صفحه‌ای) از شبکه‌های هگزگونال به هم متصل شده و ساختار نیتريد بور را تشکیل داده اند.

با عنایت به ویژگی‌های برتر نانولوله‌های نیتريد بور نسبت به نانولوله‌های کربن، جهت محاسبه دقیق خواص مکانیکی آنها بدست آوردن مدول یانگ ضروری می‌باشد. درک دقیق از مکانیسم در مقیاس نانو جهت توسعه کاربردهای مکانیکی نانولوله‌های نیتريد بور، امری ضروری می‌باشد. بخاطر مشکلات آزمایشات تجربی در این مقیاس، ثابت شده است که محاسبات بر مبنای اتمی جهت تعیین خواص مکانیکی قدرتمند تر و دقیق تر می‌باشند.

بسیاری از روش‌های تئوری از قبیل: اصل اول [۵-۷]، اتصال تنگ [۸-۱۱] و روش دینامیک مولکولی [۱۲-۱۴] انجام شده تا خواص فوق العاده نانولوله‌های نیتريد بور محاسبه گردد.

آقای چوپرا^۲ و همکاران [۱۵] مقدار مدول یانگ نانولوله‌های چندجداره نیتريد بور را به روش آنالیز ارتعاش حرارتی به مقدار ۱/۲۲ تراپاسکال بدست آوردند. استفاده از روش اتصال تنگ مدول یانگ ۸۶۲-۹۴۰ گیگاپاسکال را برای قطر ۰/۸ الی ۲/۱ نانومتر نتیجه داد [۱۱]. آقای سوریاوانشی^۳ و همکاران [۱۶] مقدار مدول یانگ نانولوله چندجداره نیتريد بور را به روش میدان الکتریکی ناشی از رزونانس، در محدوده ۰/۷-۱/۲ تراپاسکال محاسبه نمودند. اخیراً آقای دکتر فخرآبادی و همکاران [۱۷] مقدار مدول یانگ نانولوله‌های نیتريد بور دو جداره را به کمک روش ab-initio به مقدار ۸۲۱ گیگاپاسکال و ۷۶۴ گیگاپاسکال بترتیب برای نانولوله‌های با کایرالیته‌های (۷و۷)@ (۲و۲) و (۹و۹)@ (۲و۲) تخمین زدند. در سال ۲۰۰۲ مقدار مدول یانگ نانولوله‌های نیتريد بور چند جداره به روش آزمایشات تجربی به مقدار ۱/۳-۱/۱ تراپاسکال محاسبه گردید [۱۸].

همانطور که مشهود است، نتایج در طیف گسترده‌ای گزارش شده و همچنین هیچ مقایسه‌ای بین مدول یانگ، اثر قطر و دما جهت نانولوله‌های تک جداره، دو جداره و سه جداره نیتريد بور با یکدیگر گزارش نگردیده است. این کمبودها ما را به سمت محاسبات خواص مکانیکی نانولوله‌های چندجداره نیتريد بور و بررسی اثر قطر، کایرالیته، دما و تعداد دیواره تشویق نمود. بین روش‌های محاسباتی ذکر شده در بالا، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کمتر وقت‌گیر بوده و می‌توان آن را برای سیستم‌های پیچیده با عدد اتمی بالا استفاده کرد. همچنین، این روش به ما اجازه می‌دهد که اثر دما در تمام نمونه‌ها در نظر گرفته شود. تمام این مزایا به همراه نتایج دقیق، برای محاسبه مدول یانگ، تنش نهایی و کرنش شکست نانولوله‌های چندجداره نیتريد بور در این مقاله استفاده می‌شود.

۲- شبیه سازی

لمپس^۴ وی.ام.دی^۵، برای بررسی خواص مکانیکی نانولوله‌های چندجداره نیتريد - بور بکار رفته اند. لمپس یا همان شبیه‌سازی برای دستگاه‌های پر ذره، که با موازی

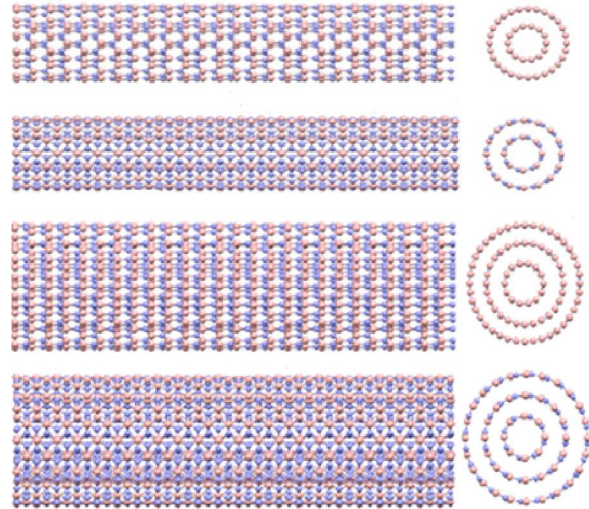
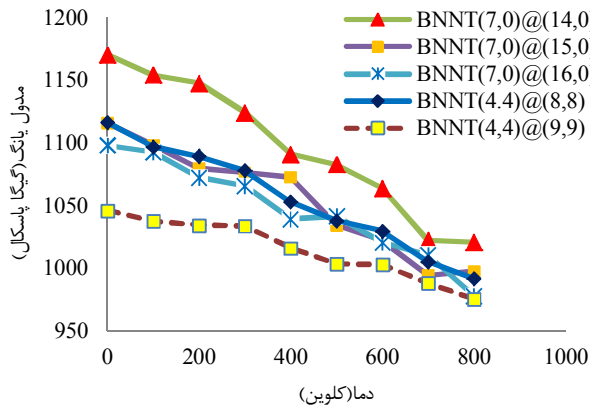
¹ First-principles

² Tight-binding

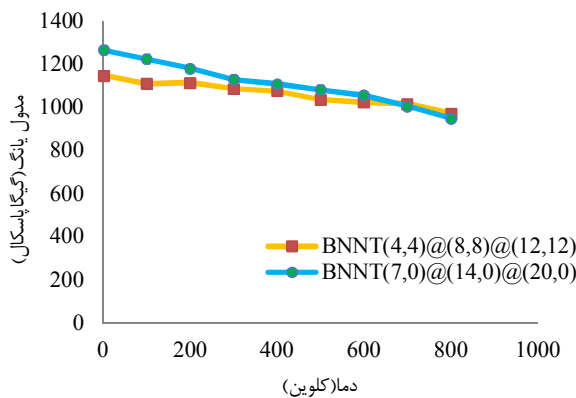
³ Chopra

⁴ Suryavanshi

⁵ LAMMPS



شکل ۲ ساختار نانولوله های نیتريد بور بکار رفته دوجداره و سه جداره



شکل ۳ بررسی تاثیر دما بر روی نانولوله های دو جداره و سه جداره زیگزاگ و آرمیچر نیتريد بور در دمای ۱ تا ۸۰۰ کلون

واضح است که کلیه خواص مکانیکی با افزایش دما کاهش می یابد. این نتایج بصورت عددی در جداول ۲ الی ۴ نشان داده شده است.

جدول ۲ مدول یانگ نانولوله های نیتريد بور دوجداره و سه جداره در دمای ۱ تا ۸۰۰ کلون

کایرالیته	۱	۱۰۰	۲۰۰	۳۰۰	۴۰۰	۵۰۰	۶۰۰	۷۰۰	۸۰۰
(۸,۸)@(۴,۴)	۱۱۱۶/۳	۱۰۹۷	۱۰۸۹/۴	۱۰۷۸/۱	۱۰۵۳	۱۰۳۷/۸۶	۱۰۲۹/۷	۱۰۰۵/۳	۹۹۱/۷
(۹,۹)@(۴,۴)	۱۰۴۶/۲	۱۰۳۷/۷	۱۰۳۴/۷	۱۰۳۳/۹	۱۰۱۶/۴	۱۰۰۳/۶	۱۰۰۳/۳	۹۸۸/۲	۹۷۵/۵
(۱۴,۰)@(۷,۰)	۱۱۷۰/۴	۱۱۵۴/۳	۱۱۴۷/۸	۱۱۲۴/۳	۱۰۹۱/۲	۱۰۸۲/۸	۱۰۶۳/۹	۱۰۲۲/۳	۱۰۲۱
(۱۵,۰)@(۷,۰)	۱۱۱۵/۸	۱۰۹۸/۴	۱۰۷۹/۶	۱۰۷۳/۴	۱۰۷۲/۷	۱۰۳۴/۵	۱۰۲۲/۳	۹۹۴/۵	۹۹۷/۱
(۱۲,۱۲)@(۸,۸)@(۴,۴)	۱۱۴۷/۱	۱۱۰۹/۵	۱۱۱۳/۲	۱۰۸۵/۲	۱۰۷۵/۲	۱۰۳۵/۵	۱۰۲۳/۴	۱۰۱۶/۳	۹۷۱/۹
(۲۰,۰)@(۱۴,۰)@(۷,۰)	۱۲۶۴/۸۱	۱۲۲۲/۹	۱۱۸۰/۵	۱۱۲۹/۶	۱۱۰۷/۴	۱۰۸۰/۵۸	۱۰۵۶/۸	۱۰۰۴/۴	۹۴۸/۸

جدول ۱ استوکیومتری نانولوله های بکار رفته

تعداداتم	قطر خارجی (آنگستروم)	کایرالیته
۱۰۵۶	۱۰/۹۴۷	(۸,۸)@(۴,۴)
۱۱۴۴	۱۲/۴۶۲	(۹,۹)@(۴,۴)
۱۰۹۲	۱۱/۲	(۱۴,۰)@(۷,۰)
۱۱۴۴	۱۲/۰	(۱۵,۰)@(۷,۰)
۱۱۹۶	۱۲/۸	(۱۶,۰)@(۷,۰)
۲۱۱۲	۱۶/۶۲	(۱۲,۱۲)@(۸,۸)@(۴,۴)
۲۱۳۲	۱۵/۹۱	(۲۰,۰)@(۱۴,۰)@(۷,۰)

۳-۲- محاسبات مدول یانگ

بنابراین مدول یانگ از چند جمله ای درجه دوم برحسب تنش- کرنش مطابق رابطه ذیل محاسبه شده است:

$$\sigma = \frac{\partial U}{\partial \epsilon} = D\epsilon^2 + E\epsilon + C \quad (1)$$

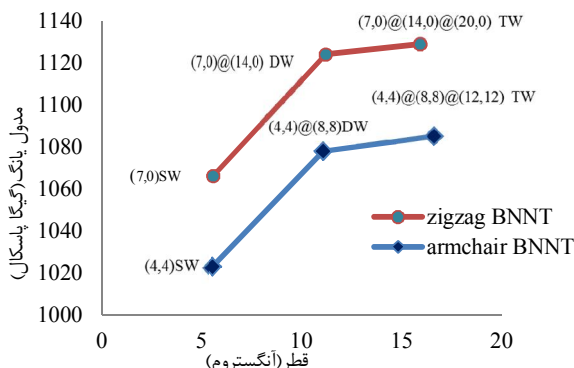
که در آن U انرژی کرنشی سیستم، D مدول الاستیک درجه سوم، E مدول یانگ و C تنش پسماند در نانولوله های نیتريد بور است. هر دو مقدار σ_f و ϵ_f از داده های نمودار تنش-کرنش خروجی لمپس استنتاج شده و مدول یانگ تمامی مدل ها از معادله (۱) محاسبه شده است.

گزارشات مختلفی درباره تاثیر قطر و کایرالیته بر خواص مکانیکی نانولوله های نیتريد بور گزارش شده است [۱۱, ۱۲]. بر این اساس نانولوله های زیگزاگ و آرمیچر تحت بررسی قرار گرفتند و نتایج نشان داد مدول یانگ تمامی مدل ها با افزایش قطر، افزایش می یابد؛ مدل زیگزاگ مدول یانگ بالاتری نسبت به حالت آرمیچر در محدوده قطر مشابه داشته ولی بعلا سخته تر بودن در کرنش های پایین تری نسبت به حالت آرمیچر می شکند. این نتایج در محدوده دمایی ۱ تا ۸۰۰ کلون مورد بررسی قرار گرفت (شکل ۳).

در مورد نانولوله های سه جداره، با افزایش دما کاهش مدول یانگ برای $(20,0)@(14,0)@(7,0)$ و $(7,0)@(14,0)@(20,0)$ به مقدار ۳۱۶ و ۱۷۶ واحد است. مشابه حالات تک جداره [۲۴] و دوجداره، نانولوله های سه جداره زیگزگ نسبت به تغییرات شرایط دمایی حساس تر میباشند. علت تفاوت نسبتا اندک مقادیر مدول یانگ ما با نتایج سایر محققان وجود عیوب و خرابی های ایجاد شده در حین ساخت نانولوله در کارهای آزمایشگاهی می باشد. به هر حال نتایج بدست آمده برای مدول یانگ نانولوله های چند جداره ما، با نتایج آزمایشگاهی آقای چوپرا (مدول یانگ ۱/۲۲ تراپاسکال) که ادعا می-شود نانولوله کریستالی بدون وجود عیوب فیزیکی می باشد، تطابق بسیار خوبی دارد [۱۵].

سرانجام شکل (۵) نشان دهنده تاثیر تعداد دیواره نانولوله بر روی مدول یانگ نانولوله های نیتريد بور می باشد. مطابق شکل ملاحظه می گردد رابطه ذیل بین مدول یانگ و تعداد دیواره برقرار است:

$$\text{مدول یانگ تک جداره} [24] > \text{مدول یانگ دوجداره} > \text{مدول یانگ سه جداره}$$



شکل ۵ مقایسه مدول یانگ بعنوان تابعی از قطر در نانوله های تک جداره و دوجداره و سه جداره نیتريد بور در دمای ۳۰۰ کلون

همانطور که مشهود است میزان مدول یانگ تاثیر پذیری بالایی نسبت به افزایش تعداد دیواره دارد و تاثیر پذیری مدول یانگ نسبت به تعداد لایه و درجه حرارت قابل تامل است. علاوه بر این، از آنجا که اثر دما بر مدول یانگ نانولوله های دوجداره نیتريد بور کمتر از نانولوله های سه جداره است، می توان نتیجه گرفت که اثر متقابل بین لایه ای عامل بسیار مهمی بر روی خواص مکانیکی ماده می-باشد. همچنین شکل (۶) نشان دهنده بالاتر بودن مدول یانگ نانولوله های زیگزگ نسبت به حالت آرمیچر است.

۴- خلاصه و نتیجه گیری

در حالت کلی مقدار مدول یانگ نانولوله های زیگزگ نسبت به حالت آرمیچر میزان بالاتری می باشد هر چند حساسیت این نوع نانولوله ها نسبت به افزایش یا کاهش قطر و تغییرات دما بیشتر از نوع آرمیچر است. نتایج بیانگر این واقعیت می تواند باشد که افزایش دما سبب کاهش مدول یانگ، تنش نهایی و کرنش شکست انواع نانولوله های نیتريد بور شده است.

تعداد دیواره نانولوله از دو جداره به سه جداره تا حدودی میزان مدول یانگ را بهبود می بخشد، البته میزان بهبود یافتگی از دوجداره به سه جداره نسبت به حالت تک جداره به دوجداره مقدار کمتری می باشد.

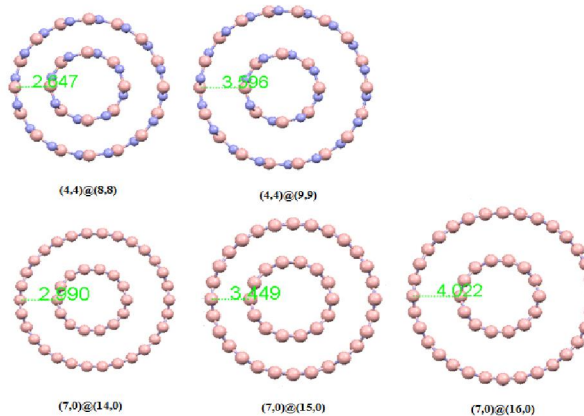
جدول ۳ تنش نهایی نانولوله های نیتريد بور دوجداره و سه جداره در دمای ۱ تا ۸۰۰ کلون

کاپیرالیتی	۱	۱۰۰	۲۰۰	۳۰۰	۴۰۰	۵۰۰	۶۰۰	۷۰۰	۸۰۰
(۸ و ۸) @ (۴ و ۴)	۱۹۳/۲	۱۵۵	۱۶۱/۴	۱۲۴/۲	۱۱۹/۷	۱۲۲/۹	۱۱۴/۸	۱۰۳/۸	۱۰۲/۲
(۹ و ۹) @ (۴ و ۴)	۱۸۳/۲	۱۴۷/۶	۱۳۳/۴	۱۳۲/۶	۱۱۵/۱	۱۰۷/۵	۱۰۱/۵	۹۷/۷	۹۷/۸
(۱۴ و ۰) @ (۷ و ۰)	۱۶۹/۸	۱۵۹/۳	۱۵۷/۸	۱۴۵/۴	۱۴۲/۲	۱۳۸/۷	۱۳۷/۲	۱۳۳/۶	۱۱۹/۱
(۱۵ و ۰) @ (۷ و ۰)	۱۶۳/۱	۱۵۳/۶	۱۴۸/۴	۱۴۹/۱	۱۴۴/۴	۱۳۵/۴	۱۳۳/۴	۱۳۰/۵	۱۲۵/۴
(۱۲ و ۱۲) @ (۸ و ۸) @ (۴ و ۴)	۲۰۲/۲	۱۴۳/۳	۱۳۴/۵	۱۱۰/۹	۱۰۷/۶	۱۰۶/۹	۱۰۵/۶	۹۷/۷	۹۹/۵
(۲۰ و ۰) @ (۱۴ و ۰) @ (۷ و ۰)	۱۸۷/۷	۱۶۷/۲	۱۵۷/۱	۱۵۱/۳	۱۴۶/۷	۱۴۳/۵	۱۳۵/۳	۱۱۸/۴	۸۱/۹

جدول ۴ کرنش شکست نانولوله های نیتريد بور دوجداره و سه جداره در دمای ۱ تا ۸۰۰ کلون

کاپیرالیتی	۱	۱۰۰	۲۰۰	۳۰۰	۴۰۰	۵۰۰	۶۰۰	۷۰۰	۸۰۰
(۸ و ۸) @ (۴ و ۴)	-۰/۵	-۰/۴۴	-۰/۴۵	-۰/۳۹	-۰/۳۷	-۰/۳۷	-۰/۳۴	-۰/۳۷	-۰/۳۷
(۹ و ۹) @ (۴ و ۴)	-۰/۵	-۰/۴۴	-۰/۴۱	-۰/۴۱	-۰/۳۷	-۰/۳۴	-۰/۳۱	-۰/۲۸	-۰/۲۸
(۱۴ و ۰) @ (۷ و ۰)	-۰/۲۹	-۰/۲۷	-۰/۲۷	-۰/۲۶	-۰/۲۶	-۰/۲۶	-۰/۲۶	-۰/۲۶	-۰/۲۳
(۱۵ و ۰) @ (۷ و ۰)	-۰/۲۹	-۰/۲۸	-۰/۲۷	-۰/۲۷	-۰/۲۷	-۰/۲۸	-۰/۲۷	-۰/۲۷	-۰/۲۵
(۱۲ و ۱۲) @ (۸ و ۸) @ (۴ و ۴)	-۰/۵	-۰/۴۱	-۰/۳۹	-۰/۳۳	-۰/۳	-۰/۲۸	-۰/۲۶	-۰/۲۳	-۰/۲۵
(۲۰ و ۰) @ (۱۴ و ۰) @ (۷ و ۰)	-۰/۲۹	-۰/۲۷	-۰/۲۷	-۰/۲۷	-۰/۲۶	-۰/۲۶	-۰/۲۵	-۰/۲۲	-۰/۱۶

اکنون برای محاسبه تاثیر فاصله بین لایه ای بر روی مدول یانگ نانولوله های دو جداره نیتريد بور، پنج نمونه از حالت های زیگزگ و آرمیچر مدل و مدول الاستیسیته آنها محاسبه شده است (مطابق شکل ۴). با انجام محاسبات، مدول یانگ $(8,8)@(4,4)$ و $(9,9)@(4,4)$ بترتیب مقادیر ۱۰۷۸/۱ گیگاپاسکال و ۱۰۳۳/۹ گیگاپاسکال بدست آمد. این اختلاف مدول یانگ، ناشی از تفاوت فاصله بین لایه ای است (مانند شکل ۵). در حقیقت تعاملات جاذب نیروهای واندروالس در $(8,8)@(4,4)$ قویتر از $(9,9)@(4,4)$ بوده و در نتیجه مدول یانگ بالاتری دارد. این موضوع در مورد نانولوله های زیگزگ نیز بطور مشابه ملاحظه گردید؛ بطوریکه برای مدول یانگ نانولوله های دو جداره $(14,0)@(7,0)$ ، $(15,0)@(7,0)$ و $(16,0)@(7,0)$ بترتیب مقادیر ۱۱۲۴/۳، ۱۰۷۶/۴ و ۱۰۶۵/۷ بدست آمد.



شکل ۴ نمای روبرو از نانولوله های دوجداره نیتريد بور، تفاوت فاصله بین لایه ای کاملا مشهود است

همچنین اثر متقابل بین لایه ای عامل بسیار مهمی بر روی خواص مکانیکی ماده می باشد بطوریکه با افزایش تعداد لایه و لذا کاهش تعاملات نیروهای جاذب و اندروالس، کاهش مدول یانگ را خواهیم داشت.

۵- مراجع

- [1] Lin, Y., et al, Aqueously dispersed silver nanoparticle-decorated boron nitride nanosheets for reusable, thermal oxidation-resistant surface enhanced Raman spectroscopy (SERS) devices. *ACS applied materials & interfaces*, 2012. **4**(2): p. 1110-1117.
- [2] Khoo, K. and S.G. Louie, Tuning the electronic properties of boron nitride nanotubes with transverse electric fields: A giant dc Stark effect. *Physical Review B*, 2004. **69**(20): p. 201401.
- [3] Golberg, D., et al, Synthesis and characterization of ropes made of BN multiwalled nanotubes. *Scripta Materialia*, 2001. **44**(8): p. 1561-1565.
- [4] Chopra, N.G., et al, Boron nitride nanotubes. *Science*, 1995. **269**(5226): p. 966-967.
- [5] Sanchez-Portal, D. and E. Hernandez, Vibrational properties of single-wall nanotubes and monolayers of hexagonal BN. *Physical Review B*, 2002. **66**(23): p. 235415.
- [6] Kim, Y.-H., H.-S. Sim, and K. Chang, Electronic structure of collapsed C, BN, and BC 3 nanotubes. *Current Applied Physics*, 2001. **1**(1): p. 39-44.
- [7] Erkoç, Ş., Structural and electronic properties of single-wall BN nanotubes. *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 2001. **542**(1): p. 89-93.
- [8] Zhang, P. and V.H. Crespi, Plastic deformations of boron-nitride nanotubes: an unexpected weakness. *Physical Review B*, 2000. **62**(16): p. 11050.
- [9] Rogers, K., P. Fowler, and G. Seifert, Chemical versus steric frustration in boron nitride heterofullerene polyhedra. *Chemical Physics Letters*, 2000. **332**(1): p. 43-50.
- [10] Dumitrică, T., et al, Thermodynamics of yield in boron nitride nanotubes. *Physical Review B*, 2003. **68**(8): p. 085412.
- [11] Hernandez, E., et al, Elastic properties of single-wall nanotubes. *Applied Physics A*, 1999. **68**(3): p. 287-292.
- [12] Li, C. and T.-W. Chou, Static and dynamic properties of single-walled boron nitride nanotubes. *Journal of nanoscience and nanotechnology*, 2006. **6**(1): p. 54-60.
- [13] Verma, V., V. Jindal, and K. Dharamvir, Elastic moduli of a boron nitride nanotube. *Nanotechnology*, 2007. **18**(43): p. 435711.
- [14] Griebel, M., 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*, 2009. **45**(4): p. 1097-1103.
- [15] Chopra, N.G. and A. Zettl, Measurement of the elastic modulus of a multi-wall boron nitride nanotube. *Solid State Communications*, 1998. **105**(5): p. 297-300.
- [16] Suryavanshi, A.P., et al, Elastic modulus and resonance behavior of boron nitride nanotubes. *Applied Physics Letters*, 2004. **84**(14): p. 2527-2529.
- [17] Fakhrabad, D.V. and N. Shahtahmassebi, First-principles calculations of the Young's modulus of double wall boron-nitride nanotubes. *Materials Chemistry and Physics*, 2013. **138**(2): p. 963-966.
- [18] Bettinger, H.F., et al, Mechanically induced defects and strength of BN nanotubes. *Physical Review B*, 2002. **65**(4): p. 041406.
- [19] Humphrey, W., A. Dalke, and K. Schulten, VMD: visual molecular dynamics. *Journal of molecular graphics*, 1996. **14**(1): p. 33-38.
- [20] Tersoff, J., New empirical approach for the structure and energy of covalent systems. *Physical Review B*, 1988. **37**(12): p. 6991.
- [21] Lee, C., et al, Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *science*, 2008. **321**(5887): p. 385-388.
- [22] Khare, R., et al, Coupled quantum mechanical/molecular mechanical modeling of the fracture of defective carbon nanotubes and graphene sheets. *Physical Review B*, 2007. **75**(7): p. 075412.
- [23] Moon, W.H. and H.J. Hwang, Molecular-dynamics simulation of structure and thermal behaviour of boron nitride nanotubes. *Nanotechnology*, 2004. **15**(5): p. 431.
- [24] Fereidoon, A., et al, Atomistic simulations on the influence of diameter, number of walls, interlayer distance and temperature on the mechanical properties of BNNTs. *Superlattices and Microstructures*, 2015. **86**: p. 126-133.