

بررسی اثر قطر و دما بر روی خواص مکانیکی نانولوله های تک جداره نیتريد بور با استفاده از شبیه سازی دینامیک ملکولی

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: ۳۵۱۴۱-۱۷۹، Ab.fereidoon@gmail.com

چکیده

شبیه سازی دینامیک ملکولی جهت محاسبه خواص مکانیکی نانولوله های تک جداره نیتريد بور بکار رفته است. اثر قطر، کایرالیته 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 آرمچر در محدوده قطر مشابه هستند. همچنین مدول یانگ هر دو نوع نانولوله تک جداره نیتريد بور تا قطر مشابهی افزایش داشته و بعد از آن بطور محسوسی کاهش می یابد. ما پی بردیم که تغییرات قطر تاثیر محسوسی بر روی تنش و کرنش نهایی نانولوله های زیگزاگ ندارد. علاوه بر این نتایج نشان میدهد که تمام خواص مکانیکی محاسبه شده با افزایش دما کاهش می 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، مدول یانگ، خواص مکانیکی

Investigation the effect of diameter and temperature on mechanical properties of single-walled boron nitride nanotubes by molecular dynamics simulation

Mohammad reza mostafaei¹, abdolhosein fereidoon^{2*}, 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, Ab.fereidoon@gmail.com

Abstract

The molecular dynamics (MD) simulation is used to calculate the mechanical properties of single-walled BNNTs (SWBNNT). The effects of diameter, chirality 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 SWBNNTs increase when the tube diameter increases till the specific diameter and then decrease slightly. We found that diameter changes have no significant influence on the failure stress and strain of zigzag BNNTs. In addition, the results confirmed that all measured mechanical properties decrease with increasing temperature. 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

ویژگی های نانوتیوب های کربنی است، نانولوله های نیتريد بور دارای ویژگی های مفید دیگری نیز می باشند. این مواد از برخی موارد از نانو تیوب های کربنی نیز بهتر هستند. برای مثال، مطالعات تئوری پیش بینی نموده است که نانولوله نیتريد بور یک ماده ی عایق است و گاف انرژی الکتریکی آن حدوداً ۵/۵ الکترون ولت است [۸]. این ویژگی ها به قطر و کایرالیته نانو لوله ها، بستگی ندارد، بنابراین بر اساس اندازه گیری های رسانایی، تمام نانولوله های نیتريد بور رفتار عایق یا نیمه رسانایی از خود نشان می دهند [۹، ۱۰]. به عبارت دیگر، تاکنون بیشتر نانو نانولوله های کربنی تولید شده، هم از نانو تیوب های رسانا و هم نارسا تشکیل شده اند و جداسازی کامل آنها از هم، مشکل است. نانو نانولوله های نیتريد بور همچنین دارای ویژگی های شیمیایی پایدارتری هستند. برای مثال، آنها دارای مقاومت بیشتری در برابر اکسیداسیون در دمای بالا هستند. برخی نانولوله های نیتريد بور که دارای

۱- مقدمه

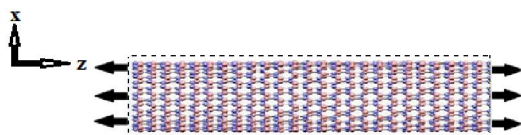
بعد از کشف نانولوله های کربنی در سال ۱۹۹۱ [۱]، محققین سریعاً شروع به جستجو برای پیدا کردن مواد دیگری کردند که دارای ساختار لوله ای مانند با خواص مکانیکی بهتری باشند. نیتريد بور یکی از این مواد بود و احتمالاً تولید نانو تیوب های نیتريد بور در سال ۱۹۹۴ پیش بینی شد [۲]. سپس این مواد به طور موفقیت آمیز در سال ۱۹۹۵، سنتز شد [۳]. مشابه نانو لوله های کربنی، این نانو لوله ها نیز دارای ویژگی های مکانیکی فوق العاده ای هستند. علت این موضوع، ساختار لوله ای شکل و وجود پیوندهای مستحکم SP² در دیواره ی این نانولوله ها میباشد. نتایج تجربی نشان داده است که مدول اندازه گیری در این مواد در گستره ی ۷۲۲ گیگاپاسکال تا ۱/۲۲ تراپاسکال می باشد [۴-۷]. این مقدار با مقدار بدست آمده برای نانو لوله های کربنی قابل مقایسه است. علاوه بر این ویژگی های مفید که مشابه با

لمپس این اجازه را می دهد تا بتوان متوسط زمانی و مکانی کمیت های فیزیکی از قبیل دما، فشار، انرژی و ... را محاسبه کرده و به کاربر این توانایی داده می شود تا این مقادیر نوشته شده را برای کار مشخص در فواصل زمانی در متن برنامه خود بیاورد. بخش نهایی نیز اجرای فرآیند شبیه سازی می باشد لمپس اجازه تغییر شکل جعبه شبیه سازی در حین اجرا را می دهد. نانو ساختاری که شبیه سازی می گردد به جعبه شبیه سازی متصل شده، بنابراین نانو ساختار نیز همراه جعبه شبیه سازی تغییر شکل می یابد که همین موضوع باعث می گردد تا کاربر بتواند فشار در نرخ کرنش ثابت به یک نانو ساختار را وارد کند.

۱-۲- تست کششی تک محوره در لمپس

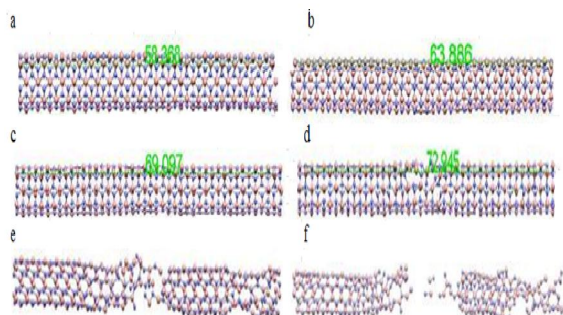
برای بیان روش شبیه سازی لمپس، آزمون کششی برای نمونه ای از نانولوله نیتريدبور نشان داده شده است (شکل ۱).

مقدر نرخ کرنشی $0.1/0$ توان منهای یک پیکو ثانیه و در کل فرایند این مقدار ثابت بوده همچنین گام زمانی انجام فرایند اتموتائیه میباشد. مقدار فشار نیز ۱ بار می باشد. در مقاله حاضر زمان ۲۰ پیکو ثانیه برای تعادل سیستم و زمان ۱۰۰ پیکو ثانیه برای حالت بارگذاری در نظر گرفته شده و این فرایند برای نانولوله ها در دمای ۱ تا ۸۰۰ کلوین انجام گرفته است.



شکل ۱ نانولوله نیتريد بور استفاده شده در جعبه شبیه سازی لمپس (فلش جهت اعمال فشار را نشان میدهد)

شکل (۲) نمونه تصویر گرافیکی استخراج شده از VMD جهت نمونه ای از نانولوله نیتريد بور بوده و همانطور که ملاحظه میگردد نانولوله بعد ۱۸/۲۵٪ کشیدگی در راستای طولی دچار شکست گردیده است.



شکل ۲ تصویر گرافیکی VMD از نمونه ای از مراحل گسیختگی نانولوله نیتريد بور تحت کشش

۲-۲- استوکیمتری نانولوله های بکار رفته

مقادیر قطر خارجی نانولوله که توسط برنامه نانوتیوب مدلر با در نظر گرفتن طول باند اتمی $1/45$ آنگستروم بدست آمده و همچنین تعداد اتم های هر مدل در جدول (۱) نشان داده شده است. نمونه گرافیکی از انواع مدل های بکار رفته نانولوله های نیتريد بور نیز در شکل (۳) نشان داده شده است.

ساختارهای نانوکریستالی کامل هستند، می توانند تا دمای ۹۰۰ درجه سانتیگراد نیز تحمل حرارتی داشته باشند. این درحالی است که نانولوله های کربنی در محیط هوا و در دمای ۴۰۰ درجه سانتیگراد اکسید می شوند [۱۱]. به دلیل داشتن ویژگی مقاومت بالا در برابر اکسیداسیون، نانولوله های نیتريد بور برای تولید مواد کامپوزیتی مناسب می باشند [۱۲].

با عنایت به ویژگی های برتر نانولوله های نیتريد بور نسبت به نانولوله های کربن، جهت محاسبه دقیق خواص مکانیکی آنها بدست آوردن مدول یانگ ضروری میباشد. در سالهای اخیر با روشهای تئوری و تجربی مقادیر مختلفی توسط محققان بدست آمده است [۶، ۷، ۱۳-۱۷]. از آنجا که هیچ روش تئوری و آزمایشگاهی بعلت وجود خطا و نقص در ساختار نانولوله (بعلت روشهای سنتز متفاوت) نمیتواند مقدار کاملا دقیقی از مدول یانگ نانولوله ها را بیان کند، در این مقاله انجام کار به کمک روش دینامیک ملکولی انجام گرفته است. مزیت اصلی استفاده از روش دینامیک ملکولی دقت بالایی محاسبات عدم وجود نقص در شبکه کریستالی نانولوله نیتريد بور و توانایی ایجاد هر مقدار دلخواه نانولوله بر خلاف محدودیت تولید واقعی آن در عمل با روشهای مختلف سنتز میباشد.

۲- شبیه سازی

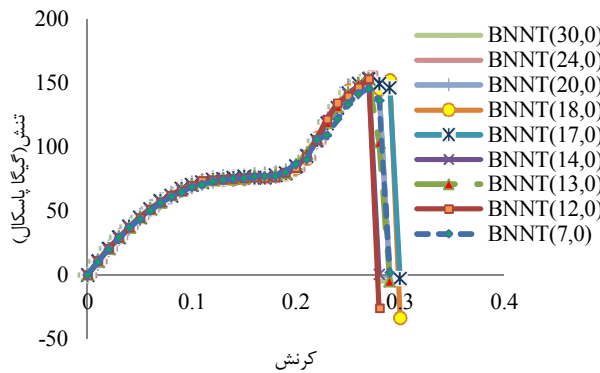
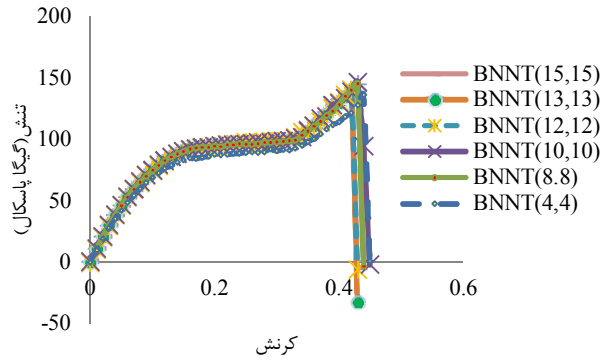
دینامیک مولکولی شکلی از شبیه سازی کامپیوتری است که در آن اتمها و مولکول ها میتوانند برای یک دوره از زمان تحت قوانین شناخته شده فیزیک باهم برهم کنش کرده و چشم اندازی از حرکت اتمها بدهند. از آنجائیکه سیستمهای مولکولی عموماً شامل تعداد زیادی از ذرات هستند، امکان پذیر نیست که ویژگیهای سیستم های پیچیده را بطور تحلیلی بدست آوریم. شبیه سازی دینامیک مولکولی این مساله را با بکار بردن روش محاسباتی حل می کند. این روش یک واسطه بین تجربیات آزمایشگاهی و نظریه ایجاد می کند و به عنوان یک آزمایش مجازی در نظر گرفته می شود روابط بین ساختار مولکولها، حرکت مولکولها و توابع مولکولی را بررسی می کند.

نرم افزار لمپس یک نرم افزار دینامیک مولکولی است که آزمایشگاه ملی سنديا آن را ساخته و از محاسبات موازی M.P.I بهره می برد [۱۸]. در این پروژه به کمک این نرم افزار محاسبات خواص مکانیکی و ترمودینامیکی نانو لوله های نیتريد بور در دماهای مختلف محاسبه و با نرم افزار VMD ساختارهای تشکیل شده قابل مشاهده و مدلسازی هستند [۱۹].

برای مدلسازی از معیار پتانسیل ترسوف انتخاب می گردد و واحدهای لازم برای زمان (ثانیه)، فاصله (آنگستروم) و انرژی (الکترون ولت) تعریف می گردد. شرایط مرزی می تواند بصورت تناوبی یا غیر تناوبی انتخاب شود که در این مقاله تناوبی انتخاب شده است.

ضرایب صحیح پتانسیل، پارامترهای شبیه سازی و گزینه های خروجی در قسمت بعد تعریف می گردند. لازم بذکر است بیش از ۷۰ مدل تابع پتانسیل در لمپس تعریف شده است. پارامترهای شبیه سازی عمومی مانند گام زمان، دما، فشار و ... در اینجا تعریف می شوند. بیشترین روشهای کنترلی فشار و دما از جمله روش برندنسن و نوز-هورور در لمپس اجرا شده است.

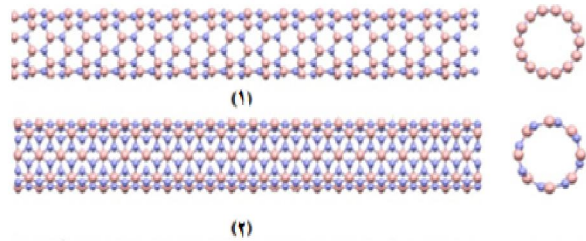
گروههای میکرو تکنیکال (NVE)، گروه متعارف (NVT) و همدمما - هم فشار (NPT) نیز اجرا شده و گروه NPT از ترموستات و باروستات نوز-هورور به منظور کنترل دما و فشار استفاده کرده است. در مقاله حاضر از روش NPT برای رسیدن به تعادل استفاده گردیده و فشار در مقدار ۱ بار ثابت گردیده است.



شکل ۴ نمودار تنش-کرنش نانو لوله های نیتريد بور تحت بارگذاری کششی تک محوره در دمای ۳۰۰ کلوین

جدول ۱ استوکیومتری نانولوله های بکار رفته

کایرالیته	قطر خارجی (آنگستروم)	تعداداتم
(۴و۴)	۵/۵۴	۳۵۲
(۸و۸)	۱۱/۰۸	۷۰۴
(۱۰و۱۰)	۱۳/۸۵	۸۸۰
(۱۲و۱۲)	۱۶/۶۲	۱۰۵۶
(۱۳و۱۳)	۱۸/۰۰	۱۱۴۴
(۱۵و۱۵)	۲۰/۷۷	۱۳۲۰
(۷و۰)	۵/۵۶	۳۶۴
(۱۲و۰)	۹/۵۹	۶۲۴
(۱۳و۰)	۱۰/۳۹	۶۷۶
(۱۴و۰)	۱۱/۲	۷۲۸
(۱۷و۰)	۱۳/۶	۸۸۴
(۱۸و۰)	۱۴/۴	۹۳۶
(۲۰و۰)	۱۵/۹۱	۱۰۴۰
(۲۴و۰)	۱۹/۱۸۶	۱۲۴۸
(۳۰و۰)	۲۳/۹۸	۱۵۶۰

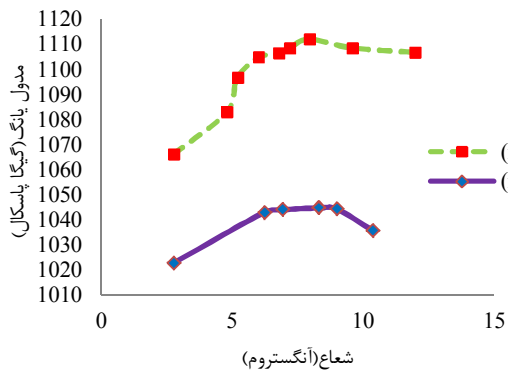


شکل ۳ ساختار نانولوله های نیتريد بور بکار رفته: ۱. نانولوله تک جداره زیگزاگ ۲. تک جداره آرمیچر

۳- بحث و مقایسه نتایج

۳-۱- بررسی اثر قطر بر خواص مکانیکی نانو لوله های تک جداره

جهت بررسی اثر قطر لوله و کایرالیته، مدل یانگ نانو لوله های نیتريد بور برای حالت آرمیچر و زیگزاگ با قطرهای متفاوت محاسبه گردید (مطابق شکل ۵).



۳-۲- محاسبات مدول یانگ

به منظور بدست آوردن مدول یانگ، 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 نانو لوله 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. نتایج نشان می دهد که با افزایش کرنش شبه استاتیک خارجی تنش بصورت غیر خطی افزایش می یابد (شکل ۴).

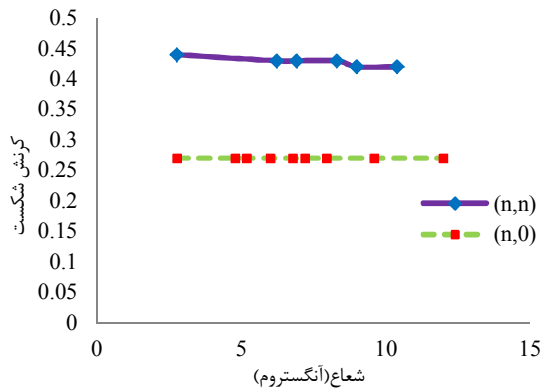
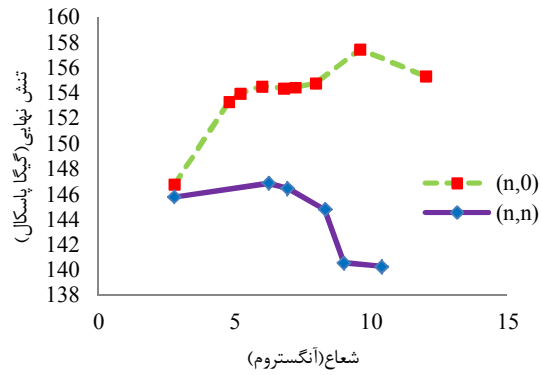
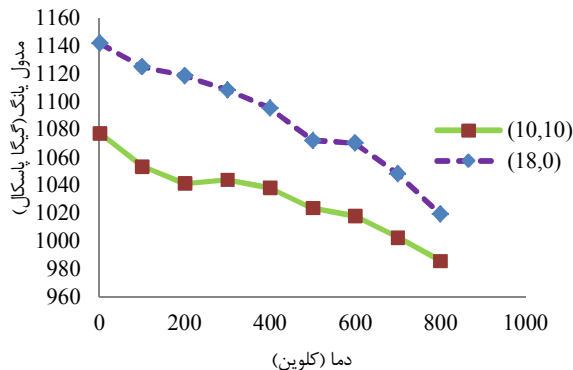
جدول ۳ مقادیر مدول یانگ (برحسب گیگا پاسکال) نانولوله نیتريد بور تک جداره

		زیگزاگ تحت کشش تک محوری				
		(۱۷۰)	(۱۴۰)	(۱۳۰)	(۱۲۰)	(۷۰)
کایرالیته	مدول یانگ	۱۱۰۶	۱۱۰۴/۵	۱۰۹۶/۷	۱۰۸۳	۱۰۶۶/۳
	تنش نهایی	۱۵۳/۱	۱۵۲	۱۵۴	۱۵۳/۶	۱۴۶/۸
	کرنش شکست	۰/۲۷	۰/۲۷	۰/۲۷	۰/۲۷	۰/۲۷
		کایرالیته				
		(۳۰)	(۲۴)	(۲۰)	(۱۸)	(۱۷)
کایرالیته	مدول یانگ	۱۱۰۶/۵	۱۱۰۸/۷	۱۱۱۲/۲	۱۱۰۸/۷	۱۱۰۸/۷
	تنش نهایی	۱۵۵/۳۷	۱۵۷/۵	۱۵۲/۴	۱۵۴/۵	۱۵۴/۵
	کرنش شکست	۰/۲۷	۰/۲۷	۰/۲۷	۰/۲۷	۰/۲۷

نتایج بدست آمده تطابق بسیار خوبی با نتایج کار ورما [۶] دارد. همچنین همانطور که مشهود است نانو لوله زیگزاگ مدول یانگ بالاتری نسبت به حالت آرمیچر داشته و دارای استحکام کشی بالاتری است و این منطبق بر نتایج بدست آمده توسط سایر محققان می باشد [۷، ۱۴]. آقای مون وهوانگ [۲۰] ارتباطی بین مدول یانگ و کایرالیته پیدا نکردند. آقای هراندز و همکاران [۵] پی بردند که مدول یانگ بطور محسوسی با افزایش قطر نانو لوله افزایش می یابد تا به مقدار 1/1 TPa رسیده و سپس مدول یانگ کاهش می یابد. به هر طریق مقادیر مدول یانگ ما بطور عالی در مقادیر ۱/۰۰ الی ۱/۱۲ تراپاسکال در دمای ۳۰۰ کلوین طبق جداول (۳ و ۲) قرار میگیرد و تطابق خوبی با روشهای عددی و گزارشات آزمایشگاهی دارد.

۳-۲- بررسی اثر دما بر نانو لوله های تک جداره

برای بررسی تاثیر دما بر روی خواص مکانیکی نانو لوله های نیتريد بور از نانو لوله های زیگزاگ و آرمیچر بترتیب با کایرالیته های (۱۸ و ۰) و (۱۰ و ۰) استفاده شده است تغییرات دما از ۱ تا ۸۰۰ کلوین مورد بررسی قرار گرفته و نتایج آن در شکل (۶) و جدول های (۴-۶) گزارش گردیده است



شکل ۵: مدول یانگ، تنش تسلیم و کرنش شکست نانو لوله های نیتريد بور تک جداره برحسب قطر نانولوله تحت کشش تک محوره در دمای ۳۰۰ کلوین

نتایج ما نشان می دهد که مدول یانگ مدل های آرمیچر و زیگزاگ با افزایش قطر، افزایش محسوسی دارد و این افزایش تا قطر ۱۶/۶۲ آنگستروم برای کایرالیته (۱۲ و ۱۲) و قطر ۱۹/۱۹ آنگستروم برای کایرالیته (۲۴ و ۰) ادامه یافته و بعد از آن کاهش نسبی دارد.

مقادیر بدست آمده در جداول (۲) و (۳) نشان داده شده است.

جدول ۲ مقادیر مدول یانگ (برحسب گیگا پاسکال) نانولوله نیتريد بور تک جداره

		آرمیچر تحت کشش تک محوری					
		(۱۵ و ۱۵)	(۱۳ و ۱۳)	(۱۲ و ۱۲)	(۱۰ و ۱۰)	(۸ و ۸)	(۴ و ۴)
کایرالیته	مدول یانگ	۱۰۳۵/۷	۱۰۴۴/۴	۱۰۴۴/۸	۱۰۴۴/۱	۱۰۴۱/۷	۱۰۲۲/۹
	تنش نهایی	۱۴۰/۷	۱۴۰/۶	۱۴۴/۸	۱۴۶/۵	۱۴۶/۹	۱۴۵/۸
	کرنش شکست	۰/۴۲	۰/۴۲	۰/۴۲	۰/۴۳	۰/۴۴	۰/۴۴

جدول ۶: کرنش شکست نانولوله های نیتريد بور تک جداره دردمای ۱ تا ۸۰۰ کلوین (k) ۱۰۰K، ۲۰۰K، ۳۰۰K، ۴۰۰K

کایرالیته	۱ K	۱۰۰K	۲۰۰K	۳۰۰K	۴۰۰K
(۱۰و۱۰)	۰/۵	۰/۴۷	۰/۴۶	۰/۴۳	۰/۳۹
(۱۸و۰)	۰/۳	۰/۲۸	۰/۲۷	۰/۲۷	۰/۲۷
	۵۰۰K	۶۰۰K	۷۰۰K	۸۰۰K	
(۱۰و۱۰)	۰/۳۹	۰/۳۶	۰/۳۴	۰/۳۳	
(۱۸و۰)	۰/۳۱	۰/۲۶	۰/۲۶	۰/۲۶	

همانطور که ملاحظه می گردد در هر دو مدل زیگزاگ و آرمیچر، مدول یانگ با افزایش دما کاهش می یابد و نانولوله های نانولوله های نیتريد بور زیگزاگ حساسیت بیشتری نسبت به تغییرات دما دارند. به همین ترتیب تنش نهایی و کرنش شکست در مدل آرمیچر با افزایش دما روند نزولی دارد، ولی در مورد نانولوله های زیگزاگ به نظر می رسد تقریباً ثابت و مستقل از تغییرات دمایی باشد.

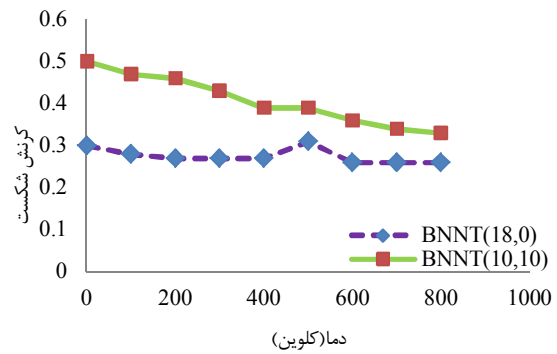
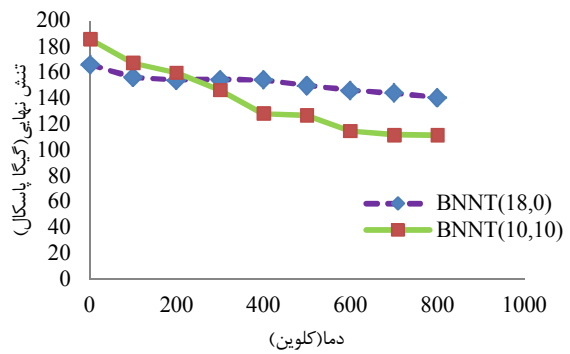
۴- خلاصه و نتیجه گیری

مطابق شکل (۵) در حالت کلی مقدار مدول یانگ نانولوله های زیگزاگ نسبت به حالت آرمیچر میزان بالاتری می باشد هرچند حساسیت این نوع نانولوله ها نسبت به افزایش یا کاهش قطر و تغییرات دما بیشتر از نوع زیگزاگ است.

همانطور که در بخش قبلی مشاهده گردید میزان تغییرات مدول یانگ نسبت مستقیمی با تغییر قطر نانولوله دارد، بدین معنی که با افزایش قطر تا حد معینی مدول یانگ افزایش یافته و سپس روند کاهشی دارد. این مقدار مربوط به قطر ۱۶/۶۲ آنگستروم با کایرالیته (۱۲و۱۲) و قطر ۱۹/۱۹ آنگستروم برای کایرالیته (۲۰و۰) بترتیب برای حالت های آرمیچر و زیگزاگ میباشد. همچنین مطابق نمودارهای بخش ۳ علیرغم تغییرات تنش نهایی به موازات تغییرات مدول یانگ، کرنش شکست نسبت به افزایش قطر تغییرات محسوسی ندارد.

با مشاهده شکل (۶) به این نکته حائز اهمیت پی برده می شود که اثر دما تاثیر منفی بر روی مدول یانگ، تنش نهایی و کرنش شکست تمامی انواع نانولوله های نیتريد بور بکار رفته در این مقاله داشته است. بعنوان مثال با قرار دادن نانولوله ها در معرض شرایط دمایی ۱ تا ۸۰۰ کلوین، میزان افت مدول یانگ برای حالت تک جداره در بازه ۱۰۸۹ الی ۹۷۷ گیگا پاسکال و ۱۱۱۵ الی ۹۹۷ گیگاپاسکال بترتیب برای مدل آرمیچر و زیگزاگ مشاهده شده است و همانطور که عنوان گردید میزان افت دما در نانولوله های زیگزاگ بیشتر از حالت آرمیچر میباشد.

به جرات می توان گفت روش بکار گرفته شده در این مقاله نمونه ای از دقیق ترین روش های ارائه شده جهت تعیین



شکل ۶: تاثیر دما بر روی مدول یانگ، تنش تسلیم و کرنش شکست نانولوله های تک-جداره نیتريد بور با کایرالیته (۱۰و۱۰) و (۱۸و۰)

جدول ۴: مدول یانگ نانولوله های نیتريد بور تک جداره دردمای ۱ تا ۸۰۰ کلوین (k) ۱۰۰K، ۲۰۰K، ۳۰۰K، ۴۰۰K

کایرالیته	۱ K	۱۰۰K	۲۰۰K	۳۰۰K	۴۰۰K
(۱۰و۱۰)	۱۰۷۷/۵۵	۱۰۵۳/۹	۱۰۴۱/۵	۱۰۴۴/۱	۱۰۳۸/۶
(۱۸و۰)	۱۱۴۲/۲	۱۱۲۵/۲۷	۱۱۱۸/۸	۱۱۰۸/۷	۱۰۵۹/۸
	۵۰۰K	۶۰۰K	۷۰۰K	۸۰۰K	
(۱۰و۱۰)	۱۰۲۳/۸۲	۱۰۱۸/۳	۱۰۰۲/۹	۹۸۶/۱	
(۱۸و۰)	۱۰۷۲/۴	۱۰۷۰/۴	۱۰۴۸/۵	۱۰۱۹/۵	

جدول ۵: تنش نهایی نانولوله های نیتريد بور تک جداره دردمای ۱ تا ۸۰۰ کلوین (k) ۱۰۰K، ۲۰۰K، ۳۰۰K، ۴۰۰K

کایرالیته	۱ K	۱۰۰K	۲۰۰K	۳۰۰K	۴۰۰K
(۱۰و۱۰)	۱۸۶/۱	۱۶۷/۳	۱۵۹/۸	۱۴۶/۵	۱۲۸/۲
(۱۸و۰)	۱۶۶/۲	۱۵۶/۱	۱۵۴	۱۵۴/۴	۱۵۴/۳
	۵۰۰K	۶۰۰K	۷۰۰K	۸۰۰K	
(۱۰و۱۰)	۱۲۶/۹	۱۱۴/۸	۱۱۱/۷	۱۱۱/۴	

خواص مکانیکی نانولوله های تک جداره و چند جداره نیتريد بور می باشد زیرا روشی کاملاً گرافیکی بدون وجود نقص در شبکه بلور است.

۵-مراجع

- [1] Iijima, S., Helical microtubules of graphitic carbon. *nature*, 1991. 354(6348): p. 56-58.
- [2] Rubio, A., J.L. Corkill, and M.L. Cohen, Theory of graphitic boron nitride nanotubes. *Physical Review B*, 1994. 49(7): p. 5081.
- [3] Chopra, N.G., et al., Boron nitride nanotubes. *Science*, 1995. 269(5226): p. 966-967.
- [4] 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.
- [5] Hernandez, E., et al., Elastic properties of single-wall nanotubes. *Applied Physics A*, 1999. 68(3): p. 287-292.
- [6] Verma, V., V. Jindal, and K. Dharamvir, Elastic moduli of a boron nitride nanotube. *Nanotechnology*, 2007. 18(43): p. 435711.
- [7] Bettinger, H.F., et al., Mechanically induced defects and strength of BN nanotubes. *Physical Review B*, 2002. 65(4): p. 041406.
- [8] Zhi, C., et al., Engineering of electronic structure of boron-nitride nanotubes by covalent functionalization. *Physical Review B*, 2006. 74(15): p. 153413.
- [9] 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.
- [10] Chen, C.-W., M.-H. Lee, and S. Clark, Band gap modification of single-walled carbon nanotube and boron nitride nanotube under a transverse electric field. *Nanotechnology*, 2004. 15(12): p. 1837.
- [11] 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.
- [12] Griebel, M. and J. Hamaekers, Molecular dynamics simulations of boron-nitride nanotubes embedded in amorphous Si-BN. *Computational materials science*, 2007. 39(3): p. 502-517.
- [13] Hernandez, E., et al., Elastic properties of C and B x C y N z composite nanotubes. *Physical Review Letters*, 1998. 80(20): p. 4502.
- [14] Zhang, P. and V.H. Crespi, Plastic deformations of boron-nitride nanotubes: an unexpected weakness. *Physical Review B*, 2000. 62(16): p. 11050.
- [15] Dumitrică, T., et al., Thermodynamics of yield in boron nitride nanotubes. *Physical Review B*, 2003. 68(8): p. 085412.
- [16] 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.
- [17] Santosh, M., P.K. Maiti, and A. Sood, Elastic properties of boron nitride nanotubes and their comparison with carbon nanotubes. *Journal of nanoscience and nanotechnology*, 2009. 9(9): p. 5425-5430.
- [18] Plimpton, S., A. Thompson, and P. Crozier, Large-scale atomic/molecular massively parallel simulator (LAMMPS). 2012.
- [19] Humphrey, W., A. Dalke, and K. Schulten, VMD: visual molecular dynamics. *Journal of molecular graphics*, 1996. 14(1): p. 33-38.
- [20] 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.