

مدل سازی رفتار نوسانی نانو پیازهای کربنی داخل نانولوله های کربنی تک جداره بر اساس روش

تقریب پیوسته

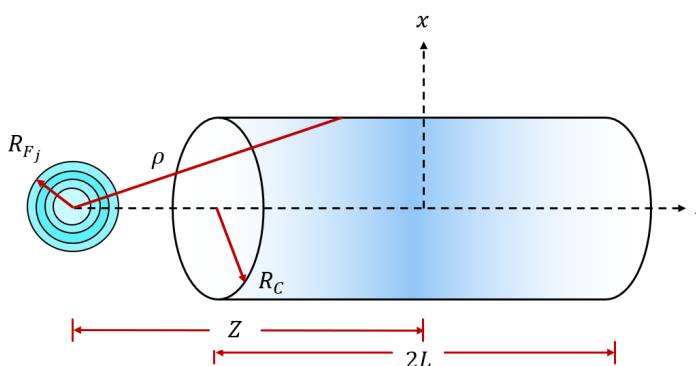
فاطمه صادقی

استادیار، گروه علوم مهندسی، دانشکده فناوری های نوین، دانشگاه محقق اردبیلی، نمین، ایران

برجسته ها

- فرکانس نانو نوسانگر پیاز کربنی- نانولوله کربنی در مقیاس گیگاهرتز است.
- هسته های داخلی سبک تر، فرکانس ماکزیمم بیشتری تولید می کنند.
- سرعت فرار با افزایش تعداد لایه های نانو پیاز کربنی کاهش می یابد.

چکیده گرافیکی



مشخصات مقاله

تاریخچه مقاله:

نوع مقاله: علمی پژوهشی

دریافت: ۱۴۰۲/۰۵/۰۸

بازنگری: ۱۴۰۲/۰۵/۲۸

پذیرش: ۱۴۰۲/۰۶/۲۸

ارائه برخط: ۱۴۰۲/۰۶/۲۸

*نویسنده مسئول:

f.sadeghi@uma.ac.ir

کلیدواژه ها:

نانو نوسانگرها

نانو پیاز کربنی

نانولوله کربنی تک جداره

روش تقریب پیوسته

فرکانس

چکیده

در این مقاله، رفتار نوسانی نانو پیازهای کربنی داخل نانولوله های کربنی تک جداره مورد مطالعه قرار گرفته است. بدین منظور، با استفاده از تئوری تقریب پیوسته و تابع پتانسیل لنارد- جونز، روابطی تحلیلی برای محاسبه نیروی بین مولکولی و اندروالسی و انرژی پتانسیل سیستم ارائه شده است. با استفاده از قانون دوم نیوتن و با صرف نظر از اثرات اصطکاک، معادله حرکت به صورت عددی حل شده و پاسخ های زمانی مکان و سرعت نوسانگر محاسبه شده است. همچنین، به منظور محاسبه فرکانس نوسانات سیستم، یک رابطه نیمه تحلیلی بر اساس اصل پایستاری انرژی مکانیکی به دست آمده است. رابطه ارائه شده برای فرکانس هم به پارامترهای هندسی و هم به شرایط اولیه حرکت وابسته می باشد. با استفاده از این رابطه، مطالعه جامعی بر روی رفتار نوسانی نانو پیازهای کربنی داخل نانولوله های کربنی تک جداره با تغییر پارامترهای سیستم انجام گرفته است. نتایج عددی نشان می دهد که فرکانس تولید شده توسط این نوع از نانو نوسانگرها در مقیاس گیگاهرتز است. همچنین، مشاهده شده است که سرعت فرار و فرکانس ماکزیمم نوسانگر با افزایش تعداد لایه های نانو پیاز کربنی کاهش می یابند.

۱- مقدمه

بر مبنای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، سونگ و ژا [۱۳] نشان دادند ائتلاف انرژی در نانو نوسانگر C₆₀- نانولوله کربنی به شعاع نانولوله و نقص تهی‌جایی^۸ حساس بوده و نیز اثر این نقص بر روی رفتار این نوع از نانو نوسانگرها به شعاع و درجه مارپیچی^۹ نانولوله وابسته می‌باشد.

اگرچه روش دینامیک مولکولی یک روش معتبر و قابل‌اطمینان برای بررسی رفتار نانو نوسانگرها به شمار می‌آید، ولی ضعف عمده این نوع از مدل‌سازی، زمان‌بر بودن آن است. از طرف دیگر، محاسبات انجام‌گرفته در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی کاملاً به‌صورت عددی صورت می‌گیرد و در نتیجه، امکان رسیدن به روابط تحلیلی و یا نیمه‌تحلیلی برای بررسی رفتار نوسانی سیستم‌ها وجود نخواهد داشت. از آنجایی‌که نیروی بین‌مولکولی و اندروالسی نقشی اساسی در رفتار نانو نوسانگرها ایفا می‌کند، محققان از مدل‌سازی دیگری به نام روش تقریب پیوسته^{۱۰} استفاده نمودند تا بتوانند این نیروی بین لایه‌ای را به‌صورت تحلیلی محاسبه نمایند. این روش نخستین بار در سال ۱۹۹۱ توسط جیریفالکو [۱۴] برای محاسبه برهم‌کنش‌های واندروالسی میان دو مولکول باکی‌بال^{۱۱} ارائه گردید. در این رهیافت فرض می‌شود که اتم‌ها به‌طور یکنواخت با چگالی میانگین سطحی یا حجمی مشخصی بر روی سطح یا حجم هر مولکول توزیع می‌شوند [۱۵ و ۱۶].

کاربرد موفقیت‌آمیز روش تقریب پیوسته در انواع مختلفی از سیستم‌های مولکولی گزارش شده است [۱۷-۱۹]. در این خصوص، باوآن و همکاران [۲۰] با به‌کارگیری روش تقریب پیوسته، گزینش انواع یون‌ها (Na⁺, Cl⁻, Ca²⁺, K⁺) داخل کانال‌های مصنوعی استوانه‌ای و مخروطی از جنس پلی‌اتیلن ترفتالات^{۱۲} را بررسی نمودند. نتایج تحقیق آن‌ها نشان داد که برهم‌کنش‌های واندروالسی به‌دست‌آمده از روش تقریب پیوسته تطابق بسیار خوبی با نتایج حاصله از روش دینامیک مولکولی دارد. هیلدر و هیل [۲۱] برهم‌کنش‌های بین نانولوله‌های کربنی با مولکول‌های C₆₀، C₇₀ و C₈₀ را بر

ایده ایجاد نانو نوسانگرها^۱ نخستین بار در سال ۲۰۰۰ و طی یک آزمایش تجربی بر روی نانولوله‌های چندجداره مطرح گردید [۱]. در این آزمایش، دانشمندان یک انتهای لایه‌های خارجی نانولوله را باز نمودند و سپس، یک نانو ابزار متحرک در یک میکروسکوپ انتقال الکترونی با کیفیت وضوح بالا به لایه‌های هسته داخلی متصل کردند و بنابراین، قادر بودند که رفتار چنین سیستم‌هایی را با بیرون کشیدن هسته داخلی و هل دادن آن به سمت لایه‌های خارجی بررسی نمایند. طی این آزمایش، آن‌ها دریافتند اگر هسته داخلی از لایه‌های خارجی بیرون کشیده و سپس رها شود، به دلیل نیروی بازگرداننده‌ای که بر اثر برهم‌کنش‌های واندروالسی^۲ ایجاد می‌گردد، هسته داخلی به‌سرعت به داخل نانولوله بیرونی کشیده می‌شود. تحقیقات انجام‌گرفته در نهایت منجر به پیدایش بسیاری از نانو نوسانگرهای فرکانس بالا گردید [۲-۵]. از جمله کاربردهای این نوسانگرها می‌توان به فیلترهای نوری فوق‌سریع برای سیستم‌های فیبر نوری و نانوانت‌ها که حساس به سیگنال‌های الکترومغناطیسی با فرکانس بالا هستند، اشاره نمود [۶-۸].

بیشتر مطالعات انجام‌گرفته بر روی نانو نوسانگرها بر پایه شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی^۳ صورت گرفته است. از آنجایی‌که ائتلاف انرژی^۴ یک مانع اساسی برای متوقف نمودن نوسانات سیستم به شمار می‌آید، این موضوع در انواع مختلفی از نانو نوسانگرهای فرکانس بالا با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مورد مطالعه گسترده قرار گرفته است [۹-۱۱]. گاوو و همکاران [۱۲] با بررسی ائتلاف انرژی در نوسانگرهای تشکیل یافته از نانولوله‌های کربنی^۵ دوجداره دریافتند ائتلاف انرژی در نانولوله‌های متشابه^۶ (آرمچیر/ آرمچیر یا زیگزاک/ زیگزاک) بسیار بیشتر از نانولوله‌های غیرمتشابه^۷ (آرمچیر/ زیگزاک) است. همچنین،

1 Nano-oscillators

2 VdW interactions

3 Molecular dynamics simulations

4 Energy dissipation

5 Carbon nanotubes

6 Commensurate nanotubes

7 Incommensurate nanotubes

8 Vacancy defect

9 Helicity

10 Continuum approximation

11 Buckyball

12 Polyethylene terephthalate

انرژی مکانیکی، رابطه‌ای نیمه‌تحلیلی برای محاسبه فرکانس بسیاری از این نوسانگرها ارائه نمودند که وابسته به شرایط هندسی و شرایط اولیه سیستم بود.

مروری بر مطالعات انجام‌گرفته نشان می‌دهد که رفتار نانو نوسانگر نانو پیاز کربنی- نانولوله کربنی تک‌جداره بر اساس توزیع واقعی نیروی واندروالسی موردبررسی قرار نگرفته است. از آنجایی که این نیرو نقش اساسی در حرکت نوسانی نوسانگرها ایفا می‌کند، ضروری است که فرکانس نوسان به‌صورت دقیق و بدون ساده‌سازی نیروی واندروالسی تعیین گردد. بدین منظور، ابتدا با استفاده از هندسه ارائه‌شده در [۳۰] و نیز با به‌کارگیری روش تقریب پیوسته و تابع پتانسیل لنارد-جونز^۲، برهم‌کنش‌های واندروالسی بین دو نانو ساختار به‌صورت روابط کاملاً تحلیلی به‌دست‌آمده است. سپس، با استفاده از قانون دوم نیوتن، معادله حرکت نانو نوسانگر با استفاده از روش عددی رونگه-کوتا^۳ حل‌شده است. با استفاده از پاسخ‌های زمانی مکان و سرعت نوسانگر، فرکانس نوسانات سیستم به‌دست‌آمده است. همچنین، بر مبنای اصل پایستگی انرژی مکانیکی، رابطه‌ای نیمه‌تحلیلی برای محاسبه فرکانس نانو نوسانگر استخراج‌شده است. تأثیر تعداد لایه‌های نانو پیاز کربنی، طول نانولوله کربنی و شرایط اولیه (مکان و سرعت اولیه) بر روی رفتار نوسانی نانو نوسانگر موردبررسی و تحلیل قرارگرفته است. همچنین، سرعت فرار نوسانگر^۴ به ازای تعداد لایه‌های نانو پیاز کربنی و طول نانولوله کربنی محاسبه‌شده است.

۲- روش تقریب پیوسته

انرژی پتانسیل واندروالسی بین دو نانو ساختار، با جمع کردن انرژی پتانسیل بین هر جفت از اتم‌های کربن در دو مولکول محاسبه می‌گردد [۳۴]:

$$E^{(tot)} = \sum_i \sum_j \Phi(\rho_{ij}) \quad (1)$$

که در آن $\Phi(\rho_{ij})$ بیانگر تابع انرژی پتانسیل برای اتم‌های i و j است که در فاصله ρ_{ij} از یکدیگر قرارگرفته‌اند. در این

اساس روش تقریب پیوسته مدل‌سازی نمودند و نشان دادند نتایج حاصله از آن انطباق قابل قبولی با نتایج به‌دست‌آمده از مدل‌سازی‌های گسسته دارد. همچنین، در مورد نوسانگر C₆₀- نانولوله کربنی، انصاری و همکاران [۲۲] نشان دادند که اگر این دو نانوساختار به‌صورت کاملاً صلب در نظر گرفته شوند، نتایج مدل‌سازی تقریب پیوسته و شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مطابقت بسیار خوبی خواهند داشت.

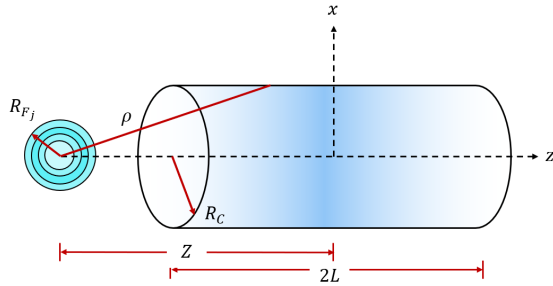
مشاهدات تجربی نشان داده‌اند که رفتار مکانیکی مواد در مقیاس نانو به‌واسطه تأثیر مشخصه‌های ابعادی، وابسته به‌اندازه می‌باشد. از آنجایی که تئوری‌های کلاسیک مکانیک محیط پیوسته امکان در نظر گرفتن اثرات وابسته به‌اندازه را ندارند، استفاده از تئوری‌های غیرکلاسیک به‌منظور تحلیل رفتارهای مکانیکی نانو سازه‌ها موردتوجه محققان قرارگرفته است [۲۳-۲۵]. در این خصوص، انصاری و همکاران [۲۶]، رفتار ارتعاشی نانولوله‌های کربنی را بر اساس تئوری گرادیان کرنش موردبررسی قرار دادند و نشان دادند که نتایج حاصل از این تئوری با نتایج حاصل از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مطابقت دارد.

در سال‌های اخیر، رفتار نوسانی بسیاری از نانو نوسانگرها بر اساس روش تقریب پیوسته مورد مطالعه گسترده قرارگرفته است. در این خصوص، باووان و هیل [۲۷] نشان دادند که فرکانس نوسانگر نانولوله کربنی- نانولوله کربنی با افزایش سرعت اولیه همواره افزایش می‌یابد و نیز کاهش طول هسته داخلی باعث افزایش فرکانس نوسانگر می‌شود که این موضوع با نتیجه ارائه‌شده توسط ژنگ و ژیانگ [۲۸] مطابقت داشت. کاکس و همکاران [۲۹] و تامواناتا و هیل [۳۰] به ترتیب رفتار نانو نوسانگرهای C₆₀- نانولوله کربنی و نانو پیازهای کربنی^۱- نانولوله‌های کربنی بر اساس روش تقریب پیوسته مدل‌سازی نمودند. به‌نظر می‌رسد که این اصطکاک و ساده‌سازی نیرو به‌صورت تابع ضربه که در دو انتهای نانولوله اثر می‌کند، رابطه ساده‌شده برای تخمین فرکانس نوسانات سیستم ارائه نمود. فقط به شرایط هندسی سیستم وابستگی داشت. مورد بررسی رفتار دقیق نانو نوسانگرها، انصاری و همکاران [۲۳-۲۴] با استفاده از توزیع واقعی نیروی واندروالسی و بر مبنای اصل پایستگی

² Lennard-Jones potential function

³ Runge-Kutta

⁴ Escape velocity



شکل (۱): هندسه نوسانگر نانو پیاز کربنی- نانولوله کربنی تک‌جداره.

برای محاسبه برهم‌کنش‌های واندروالسی کل بین این دو نانو ساختار، ابتدا لازم است که برهم‌کنش‌های بین هر لایه از نانو پیاز کربنی با نانولوله کربنی محاسبه شود. انرژی پتانسیل و نیروی واندروالسی بین فلورن کروی و نانولوله کربنی به ترتیب به صورت زیر بیان می‌شوند [۳۱]:

$$E(Z) = \sum_{n=1}^2 (-1)^{n+1} \left(G_1 \tan^{-1} Z_n + \sum_{i=1}^9 G_{2i-1} \frac{Z_n}{(1+Z_n^2)^i} \right) \quad (5)$$

$$F(Z) = \sum_{n=1}^2 \sum_{\substack{i=3 \\ i \neq 5}}^{10} (-1)^n \frac{C_i}{\lambda^{2i} (1+Z_n^2)^i} \quad (6)$$

سپس با جمع زدن برهم‌کنش‌های بین هر لایه از فلورن کروی چندلایه با نانولوله، برهم‌کنش‌های کل سیستم به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$E^{(tot)}(Z) = \sum_{j=1}^S \sum_{n=1}^2 (-1)^{n+1} \left(G_1^j \tan^{-1} Z_{nj} + \sum_{i=1}^9 G_{2i-1}^j \frac{Z_{nj}}{(1+Z_{nj}^2)^i} \right) \quad (7)$$

$$F^{(tot)}(Z) = \sum_{j=1}^S \sum_{n=1}^2 \sum_{\substack{i=3 \\ i \neq 5}}^{10} (-1)^n \frac{C_{ij}}{\lambda_j^{2i} (1+Z_{nj}^2)^i} \quad (8)$$

که در آن $Z_{2j} = \frac{Z-L}{\lambda_j}$ و $Z_{1j} = \frac{Z+L}{\lambda_j}$ می‌باشند و سایر پارامترهای ثابت عبارتند از:

$$\begin{aligned} C_{3j} &= -4AK_j, & C_{4j} &= 2R_{F_j}^2 C_{3j}, \\ C_{6j} &= 5K_j', & C_{7j} &= 80R_{F_j}^2 K_j', \\ C_{8j} &= 336R_{F_j}^4 K_j', & C_{9j} &= 512R_{F_j}^6 K_j', \\ C_{10j} &= 256R_{F_j}^8 K_j', & K_j' &= \frac{4B}{5} K_j, \\ K_j &= 2\pi^2 R_C R_{F_j}^2 \eta_{F_j} \eta_C, & \lambda_j &= \sqrt{R_C^2 - R_{F_j}^2} \end{aligned} \quad (9)$$

مقاله، از انرژی پتانسیل ندارد- جونز به صورت زیر استفاده می‌شود [۳۵]:

$$\Phi(\rho_{ij}) = -\frac{A}{\rho_{ij}^6} + \frac{B}{\rho_{ij}^{12}} \quad (2)$$

که در آن A و B به ترتیب ثابت‌های جاذبه و دافعه هستند. در روش تقریب پیوسته، فرض می‌شود که اتم‌های کربن به صورت کاملاً یکنواخت بر روی سطح یا حجم هر مولکول توزیع می‌شوند. از آنجایی که نانو پیاز کربنی و نانولوله کربنی، مولکول‌های سطحی هستند، چگالی میانگین سطحی برای این دو نانو ساختار در نظر گرفته می‌شود؛ بنابراین، با استفاده از روش تقریب پیوسته، انرژی پتانسیل کل سیستم با انتگرال‌گیری از رابطه ندارد- جونز بر روی سطح این دو نانو ساختار، به صورت زیر بیان می‌شود [۳۴]:

$$E^{(tot)} = \eta_1 \eta_2 \iint \Phi(\rho_{ij}) d\Sigma_1 d\Sigma_2 \quad (3)$$

در رابطه فوق، η_1 و η_2 معرف چگالی سطحی اتم‌های کربن بر روی هر نانو ساختار است و ρ فاصله بین دو امان سطح $d\Sigma_1$ و $d\Sigma_2$ می‌باشد. با محاسبه انرژی پتانسیل واندروالسی کل سیستم، می‌توان نیروی بین‌مولکولی واندروالسی را که جز نیروهای پایستار است، محاسبه نمود. این نیرو به صورت منفی گرادیان انرژی پتانسیل کل سیستم، محاسبه می‌گردد [۳۴]:

$$F^{(tot)} = -\nabla E^{(tot)} \quad (4)$$

۳- برهم‌کنش‌های واندروالسی

هندسه نانو نوسانگر نانو پیاز کربنی- نانولوله کربنی تک جداره در شکل ۱ نشان داده شده است. تعداد لایه‌های نانو پیاز کربنی برابر با S می‌باشد و تعداد اتم‌های کربن در لایه - λ_m از آن برابر با $60j^2$ است؛ بنابراین، هسته داخلی فلورن C_{60} بوده و لایه‌های دیگر به ترتیب فلورن‌های C_{240} ، C_{540} ، C_{960} ، C_{1500} و غیره می‌باشند. همچنین، توزیع اتم‌های کربن بر روی هر لایه از نانو پیاز کربنی با شعاع R_{F_j} با چگالی میانگین سطحی η_{F_j} صورت می‌گیرد. در این نوسانگر، مبدأ دستگاه مختصات در مرکز نانولوله به طول $2L$ و شعاع R_C قرار دارد و چگالی میانگین سطحی برای نانولوله کربن برابر با η_C است. فاصله مرکز نانو پیاز کربنی از مبدأ مختصات نیز برابر با Z می‌باشد.

$$V_{esc} = \sqrt{\frac{-2E^{(tot)}(0)}{m_F}} \quad (11)$$

در رابطه قبل، $E^{(tot)}(0)$ بیانگر انرژی پتانسیل کل سیستم در مرکز نانولوله است و m_F معرف جرم نانو پیاز کربنی است که به صورت زیر محاسبه می شود [۳۰]:

$$m_F = m_0 \sum_{j=1}^S 60j^2 \quad (12)$$

که در آن m_0 جرم یک اتم کربن است.

۵- معادله حرکت نانو نوسانگر

با صرف نظر کردن از نیروهای اصطکاک، معادله حرکت نانو نوسانگر با استفاده از قانون دوم نیوتن به صورت زیر نوشته می شود:

$$m_F \frac{d^2 Z}{dt^2} = F^{(tot)}(Z) \quad (13)$$

که با حل این معادله با استفاده از روش های انتگرال گیری عددی مانند رونگه-کوتا، مکان و سرعت نانو نوسانگر بر حسب زمان به دست می آیند و در نتیجه، فرکانس نانو نوسانگر را می توان بر اساس پاسخ زمانی حاصله محاسبه نمود.

۶- فرکانس نانو نوسانگر بر اساس اصل

پایستاری انرژی مکانیکی

فرکانس نانو نوسانگر را نیز می توان با استفاده از اصل پایستاری انرژی مکانیکی محاسبه نمود. بر این اساس، عبارت زیر را تشکیل می دهیم [۳۱]:

$$\frac{1}{2} m_F \left(\frac{dZ}{dt} \right)^2 + E^{(tot)}(Z) = E^{(tot)}(A_0) \quad (14)$$

در این رابطه، A_0 و T به ترتیب معرف دامنه^۱ و دوره تناوب حرکت^۲ هستند.

با انتگرال گیری از رابطه قبل نسبت به زمان خواهیم داشت:

$$\sqrt{\frac{m_F}{2}} \int_0^{A_0} \frac{dZ}{\sqrt{E^{(tot)}(A_0) - E^{(tot)}(Z)}} = \int_0^{\frac{T}{4}} dt \quad (15)$$

همچنین:

$$\begin{aligned} G_1^j &= \frac{3}{8} \mu_{3j} + \frac{5}{16} \mu_{4j} + \frac{63}{256} \mu_{6j} + \frac{231}{1024} \mu_{7j} \\ &\quad + \frac{429}{6435} \mu_{8j} + \frac{2048}{32768} \mu_{9j} \\ &\quad + \frac{12155}{65536} \mu_{10j} \\ G_3^j &= \frac{1}{4} \mu_{3j} + \frac{5}{24} \mu_{4j} + \frac{77}{128} \mu_{6j} + \frac{512}{12155} \mu_{7j} \\ &\quad + \frac{143}{1024} \mu_{8j} + \frac{2145}{16384} \mu_{9j} \\ &\quad + \frac{98304}{12155} \mu_{10j} \\ G_5^j &= \frac{1}{6} \mu_{4j} + \frac{21}{160} \mu_{6j} + \frac{77}{640} \mu_{7j} + \frac{143}{1280} \mu_{8j} \\ &\quad + \frac{429}{4096} \mu_{9j} + \frac{2431}{24576} \mu_{10j} \\ G_7^j &= \frac{9}{80} \mu_{6j} + \frac{33}{320} \mu_{7j} + \frac{429}{4480} \mu_{8j} \\ &\quad + \frac{1287}{28672} \mu_{9j} + \frac{2431}{28672} \mu_{10j} \\ G_9^j &= \frac{1}{10} \mu_{6j} + \frac{11}{120} \mu_{7j} + \frac{143}{1680} \mu_{8j} \\ &\quad + \frac{143}{1792} \mu_{9j} + \frac{2431}{32256} \mu_{10j} \\ G_{11}^j &= \frac{1}{12} \mu_{7j} + \frac{13}{168} \mu_{8j} + \frac{65}{896} \mu_{9j} \\ &\quad + \frac{1105}{16128} \mu_{10j} \\ G_{13}^j &= \frac{1}{14} \mu_{8j} + \frac{15}{224} \mu_{9j} + \frac{85}{1344} \mu_{10j} \\ G_{15}^j &= \frac{1}{16} \mu_{9j} + \frac{17}{288} \mu_{10j} \\ G_{17}^j &= \frac{1}{18} \mu_{10j} \end{aligned} \quad (10)$$

که در آن $\mu_{ij} = C_{ij} \lambda_j^{1-2i}$ می باشد.

۴- سرعت فرار نانو نوسانگر

سرعت فرار یکی از پارامترهای مهم سیستم های نوسانی به شمار می آید. این کمیت بیانگر بیشینه مقدار سرعت اولیه ای است که حرکت نوسانی به ازای آن اتفاق می افتد. به عبارت دیگر، اگر سرعت اولیه از سرعت فرار بیشتر گردد، هسته داخلی به داخل غلاف خارجی کشیده نمی شود و از انتهای آن فرار می کند. به دلیل ناچیز بودن نیروهای اصطکاک در نانو نوسانگرها [۳۶]، سرعت فرار را می توان با استفاده از اصل پایستاری انرژی مکانیکی چنین محاسبه نمود [۳۱]:

¹Amplitude

²Period of motion

که با استفاده از آن می‌توان فرکانس دقیق نانو نوسانگرها را به دست آورد.

۷- نتایج مدل‌سازی

در این بخش، با توجه به روابط ارائه‌شده در بخش‌های پیشین، رفتار نوسانی نانو پیازهای کربنی داخل نانولوله‌های کربنی تک‌جداره به ازای پارامترهای هندسی و شرایط اولیه مختلف مورد بررسی و تحلیل قرار می‌گیرد. در جدول ۱، مقادیر عددی ثابت‌های جاذبه و دافعه، جرم یک اتم کربن، شعاع‌ها و چگالی سطحی انواع فلورن‌های کروی به همراه چگالی سطحی نانولوله کربنی ارائه‌شده است. همچنین، جدول ۲ بیانگر مقادیر شعاع نانولوله کربنی به ازای لایه‌های مختلف نانو پیاز کربنی است. لازم به ذکر است که به‌منظور بررسی نوسانات پایدار این نوع از نوسانگرها، شعاع بهینه نانولوله انتخاب‌شده است. شعاع بهینه نانولوله شعاعی است که به ازای آن انرژی مکش^۲ سیستم ماکزیمم می‌گردد و در نتیجه هسته داخلی با سرعت و فرکانس بیشتری در داخل نانولوله نوسان می‌کند [۲۹ و ۳۴].

جدول (۱): مقادیر عددی ثابت‌های مورد نیاز در مدل‌سازی [۳۲].

$17/4 \text{ ev} \times \text{Å}^6$	ثابت جاذبه
$29000 \text{ ev} \times \text{Å}^{12}$	ثابت دافعه
$1/993 \times 10^{-26} \text{ kg}$	جرم یک اتم کربن
$3/55 \text{ Å}$	C_{60} شعاع
$7/12 \text{ Å}$	C_{240} شعاع
$10/5 \text{ Å}$	C_{540} شعاع
$13/8 \text{ Å}$	C_{960} شعاع
$17/5225 \text{ Å}$	C_{1500} شعاع
$0/3789 \text{ Å}^{-2}$	C_{60} چگالی سطحی
$0/3767 \text{ Å}^{-2}$	C_{240} چگالی سطحی
$0/3898 \text{ Å}^{-2}$	C_{540} چگالی سطحی
$0/4011 \text{ Å}^{-2}$	C_{960} چگالی سطحی
$0/3888 \text{ Å}^{-2}$	C_{1500} چگالی سطحی
$0/3812 \text{ Å}^{-2}$	چگالی سطحی نانولوله کربنی

به‌منظور حل رابطه (۱۵) و به دست آوردن دوره تناوب حرکت می‌توان از روش‌های عددی بهره جست؛ اما به دلیل این‌که انتگرال این رابطه در دامنه حرکت نامعین است، این نقطه تکین^۱ باید قبل از انتگرال‌گیری عددی برطرف شود. به این منظور، عبارت $E^{(tot)}(A_0) - E^{(tot)}(Z)$ را به صورت ضربی از $A_0 - Z$ به صورت زیر می‌نویسیم [۳۱]:

$$E^{(tot)}(A_0) - E^{(tot)}(Z) = (A_0 - Z)H^{(tot)}(Z) \quad (16)$$

که در آن تابع $H^{(tot)}(Z)$ در دامنه حرکت مخالف صفر است. لازم به ذکر است این تابع با توجه به تابع انرژی پتانسیل کل نانو نوسانگر به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$H^{(tot)}(Z) = \sum_{j=1}^S \sum_{n=1}^2 (-1)^{n+1} \left(G_1^j H_{j,n}(Z) + \sum_{i=1}^9 \sum_{k=0}^i \gamma_{jik} H_{j,n,i,k}(Z) \right) \quad (17)$$

که در آن $\gamma_{jik} = \frac{G_1^j}{\lambda_j} \binom{i}{k}$ است و تابع‌های $H_{j,n}(Z)$ و $H_{j,n,i,k}(Z)$ به ترتیب به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$H_{j,n}(Z) = \frac{1}{\lambda_j(1 + A_{0nj}Z_{nj}) - \frac{(A_0 - Z)^2}{3\lambda_j^3(1 + A_{0nj}Z_{nj})^3} + \dots} \quad (18)$$

$$H_{j,n,i,k}(Z) = \frac{(A_{0nj}^{2k} + Z_{nj}^{2k}) - \sum_{m=1}^{2k+1} Z_{nj}^{2k-m+1} A_{0nj}^{m-1}}{(1 + Z_{nj}^2)^i (1 + A_{0nj}^2)^i} \quad (19)$$

همچنین، $A_{01j} = \frac{A_0 + L}{\lambda_j}$ و $A_{02j} = \frac{A_0 - L}{\lambda_j}$ می‌باشند.

پس از جایگذاری رابطه (۱۶) در رابطه (۱۵) و نیز اعمال تغییر متغیر $Z = A_0 \sin^2(\varphi)$ برای حل انتگرال حاصله خواهیم داشت:

$$T = 4\sqrt{2m_F A_0} \int_0^{\pi/2} \frac{\sin \varphi}{\sqrt{H^{(tot)}(\varphi, A_0)}} d\varphi \quad (20)$$

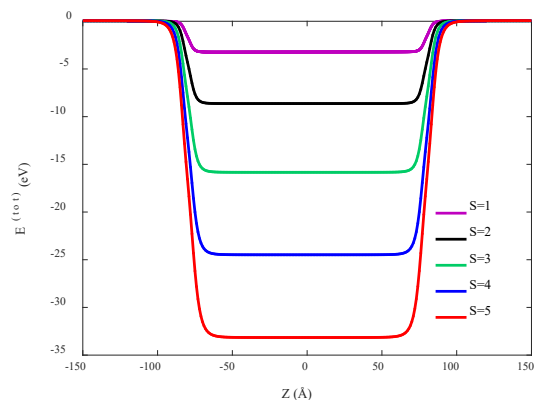
در نهایت، فرکانس نانو نوسانگر نیز با معکوس نمودن دوره تناوب به دست می‌آید:

$$f = \frac{1}{T} \quad (21)$$

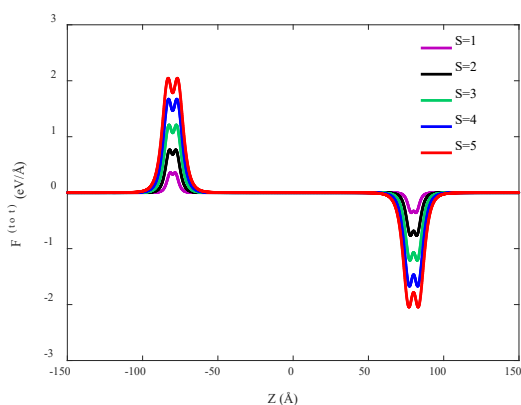
شایان ذکر است رابطه نیمه‌تحلیلی ارائه‌شده برای فرکانس تابعی از پارامترهای هندسی و شرایط اولیه حرکت می‌باشد

² Suction energy

¹ Singular point



(الف)



(ب)

شکل (۲): الف) انرژی پتانسیل؛ ب) نیروی واندروالسی نوسانگر نانو پیاز کربنی - نانولوله کربنی تک‌جداره به ازای تعداد لایه‌های مختلف نانو پیاز کربنی.

به ازای تعداد لایه‌های مختلف نانو پیاز کربنی، سرعت فرار نوسانگر برحسب نصف طول نانولوله در شکل ۳ نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، سرعت فرار نوسانگر با افزایش طول نانولوله ابتدا افزایش می‌یابد و سپس به سرعت به یک مقدار حدی میل می‌نماید. همچنین، در یک طول مشخص از نانولوله، افزایش تعداد لایه‌های هسته داخلی باعث افزایش مقدار $E^{(tot)}(0)$ و کاهش سرعت فرار نوسانگر می‌شود. بنابراین، نانو پیازهای کربنی سنگین‌تر به دلیل جرم بیشتر راحت‌تر از انتهای نانولوله فرار می‌کنند. در جدول ۳، حد نهایی سرعت فرار نوسانگر به ازای تعداد لایه‌های مختلف نانو پیاز کربنی محاسبه شده است.

پاسخ‌های زمانی مکان و سرعت نوسانگر نانو پیاز کربنی ۵ لایه - نانولوله کربنی تک‌جداره در شکل ۴ نشان داده شده

جدول (۲): شعاع بهینه نانولوله کربنی به ازای لایه‌های مختلف نانو پیاز کربنی.

تعداد لایه‌های نانو پیاز کربنی	شعاع نانولوله (Å)
۱	۶/۷۸۴
۲	۱۰/۳۳۱۵
۳	۱۳/۷۰۱۲
۴	۱۶/۹۹۵۰
۵	۲۰/۷۱۷۵

لازم به ذکر است که چگالی سطحی فلورن C_N در جدول ۱ از رابطه $\frac{N}{4\pi R_N^2}$ محاسبه شده است که در آن N معرف تعداد اتم‌های کربن می‌باشد.

توزیع انرژی پتانسیل و نیروی واندروالسی بین نانو پیاز کربنی و نانولوله کربنی به ازای تعداد لایه‌های مختلف از هسته داخلی در شکل ۲ نشان داده شده است. در این شکل، طول نانولوله ۱۶۰ آنگستروم در نظر گرفته شده است. اگر نانو پیاز کربنی از مبدأ مختصات شروع به حرکت نماید، در ابتدا مقدار نیروی واندروالسی برابر با صفر و در نتیجه انرژی پتانسیل سیستم ثابت می‌باشد. هنگامی که نانو پیاز کربنی در داخل نانولوله قرار دارد و فاصله مرکز آن از انتهای نانولوله تقریباً به ۱۵ آنگستروم می‌رسد، نیروی جاذبه از طرف نانولوله به آن وارد می‌شود و این نیرو تا جایی ادامه می‌یابد که هسته داخلی از نانولوله خارج شده و مرکز آن به اندازه ۱۵ آنگستروم از انتهای نانولوله فاصله بگیرد. اگر نانولوله به حد کافی طویل باشد، بازه اثر نیرو که تقریباً برابر با ۳۰ آنگستروم می‌باشد، نسبت به طول نانولوله بسیار کوچک خواهد بود؛ بنابراین، می‌توان نتیجه گرفت که اگر نانولوله به حد کافی طویل باشد، نیروی واندروالسی را می‌توان با یک تابع ضربه که در دو انتهای نانولوله اعمال می‌شود، معادل نمود. در صورتی که برای نانولوله‌های با طول کم، چنین فرضی مناسب نمی‌باشد. لازم به ذکر است که نیروی جاذبه واندروالسی اعمال شده در دو انتهای نانولوله عامل اصلی حرکت نوسانی نانو پیاز کربنی داخل نانولوله کربنی است. همچنین، مشاهده می‌شود که با افزایش تعداد لایه‌های نانو پیاز کربنی، مقادیر انرژی پتانسیل و نیروی واندروالسی به‌طور قابل‌ملاحظه‌ای افزایش می‌یابند.

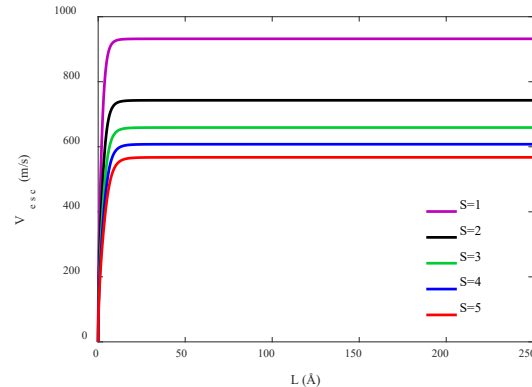
مشاهده نمود که در مکان‌هایی که نیروی واندروالسی برابر با صفر است، حرکت هسته داخلی با سرعت ثابت انجام می‌گیرد و در نزدیکی دو انتهای نانولوله که نیروی جاذبه وجود دارد، هسته داخلی با شتاب متغیر حرکت می‌کند. با توجه به شرایط اولیه حرکت، فرکانس نوسانگر معادل با ۸/۲۱ گیگاهرتز به دست می‌آید.

جدول (۳): مقادیر حد نهایی سرعت فرار نوسانگرهای نانو پیاز کربنی - نانولوله کربنی تک‌جداره.

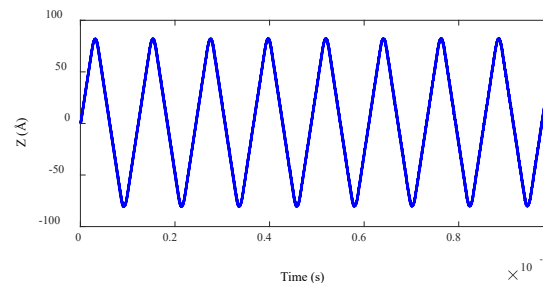
تعداد لایه‌های نانو پیاز کربنی	سرعت فرار (m/s)
۱	۹۳۲
۲	۶۸۱/۷
۳	۵۵۱/۳
۴	۴۶۸/۱
۵	۴۰۲/۳

به ازای طول‌های مختلف نانولوله، تغییرات فرکانس نوسانگر نانو پیاز کربنی ۵ لایه - نانولوله کربنی تک‌جداره برحسب مکان رهایش و سرعت اولیه در شکل ۵ نشان داده شده است. لازم به ذکر است که مکان رهایش به صورت اختلاف بین دامنه حرکت و نصف طول نانولوله تعریف می‌شود. همچنین، برای تعیین فرکانس در این شکل از رابطه نیمه‌تحلیلی ارائه شده در بخش ۶ استفاده شده است. در شکل ۵ الف، هسته داخلی بدون سرعت اولیه و از یک مکان رهایش مشخص شروع به حرکت می‌کند. در صورتی که در شکل ۵ ب، هسته داخلی در مرکز نانولوله و با یک سرعت اولیه معین شروع به حرکت می‌کند. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود، فرکانس سیستم در یک شرایط اولیه خاص به مقدار بیشینه خود می‌رسد. چنین شرایطی، شرایط بحرانی (مکان رهایش بحرانی یا سرعت اولیه بحرانی) و فرکانس‌های متناظر با آن‌ها فرکانس‌های ماکزیم نامیده می‌شوند. بر طبق شکل، رفتار نمودار فرکانس تا نقطه بحرانی صعودی و پس‌از آن، نزولی می‌شود. شایان‌ذکر است که این منحنی‌ها تا جایی رسم شده‌اند که حرکت نوسانی سیستم ادامه دارد؛ بنابراین، حد نهایی سرعت اولیه در شکل ۵ ب، بیانگر سرعت فرار نوسانگر می‌باشد که مستقل از طول نانولوله می‌باشد.

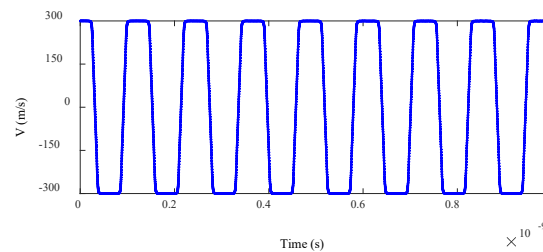
است. در شکل ۴، طول نانولوله ۱۶۰ آنگستروم در نظر گرفته شده است. همچنین، برای شروع حرکت، فرض شده است که هسته داخلی در مبدأ مختصات دارای سرعت ۳۰۰ متر بر ثانیه می‌باشد.



شکل (۳): سرعت فرار برای انواع مختلفی از نوسانگرهای نانو پیاز کربنی - نانولوله کربنی تک‌جداره برحسب نصف طول نانولوله.



(الف)

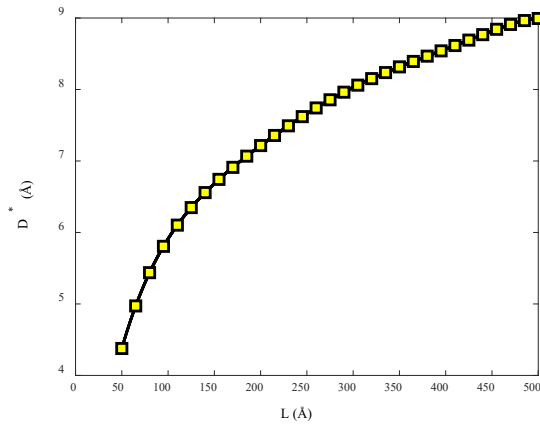


(ب)

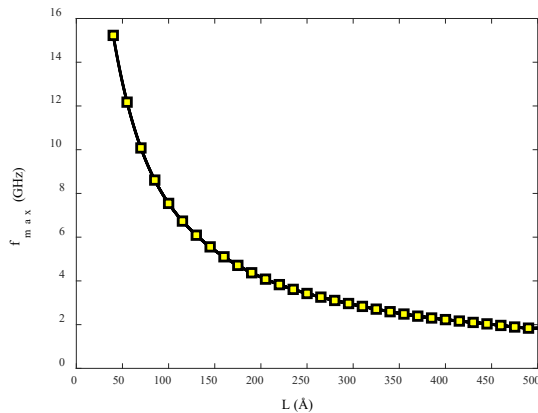
شکل (۴): پاسخ زمانی: الف) مکان؛ ب) سرعت نوسانگر نانو پیاز کربنی ۵ لایه - نانولوله کربنی تک‌جداره.

طبق شکل ۴ مشخص است که نانو پیاز کربنی حول مبدأ مختصات نوسان می‌کند. به عبارت دیگر، نقطه تعادل سیستم یعنی جایی که نیرو برابر با صفر است، در وسط نانولوله اتفاق می‌افتد. با توجه به توزیع سرعت برحسب زمان نیز می‌توان

در شکل ۷، تأثیر طول نانولوله کربنی بر روی مکان رهایش بحرانی و فرکانس ماکزیمم نوسانگر نانو پیاز کربنی ۵ لایه- نانولوله کربنی تک‌جداره بررسی شده است. با توجه به این شکل می‌توان مشاهده نمود که با افزایش طول نانولوله، مکان رهایش بحرانی افزایش و فرکانس ماکزیمم کاهش می‌یابد.



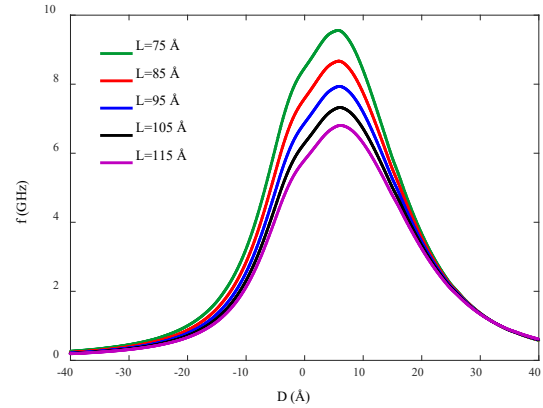
(الف)



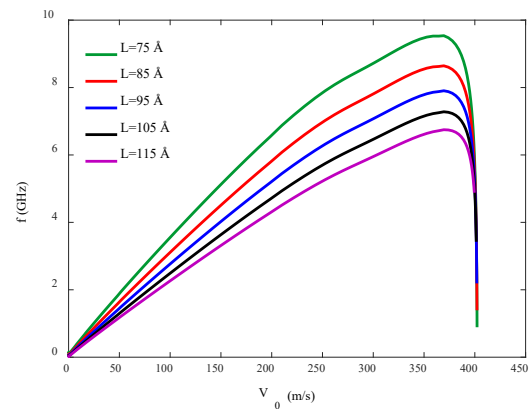
(ب)

شکل (۷): تأثیر طول نانولوله روی (الف) مکان رهایش بحرانی؛ (ب) فرکانس ماکزیمم نوسانگر نانو پیاز کربنی ۵ لایه- نانولوله کربنی تک‌جداره.

با در نظر گرفتن نانولوله به طول ۱۶۰ نانگستروم و به ازای تعداد لایه‌های مختلف هسته داخلی، تغییرات فرکانس نوسانگر نانو پیاز کربنی- نانولوله کربنی تک‌جداره برحسب مکان رهایش و سرعت اولیه در شکل ۸ نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که با افزایش تعداد لایه‌های هسته داخلی، سرعت فرار نوسانگر کاهش می‌یابد. با توجه به

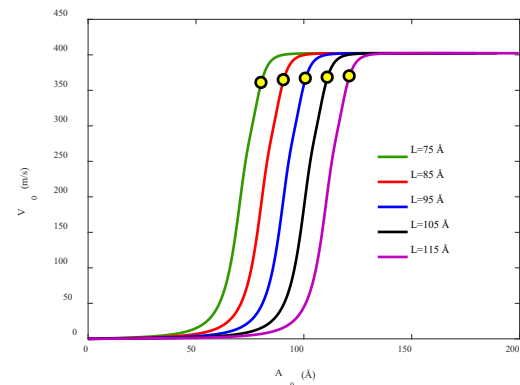


(الف)



(ب)

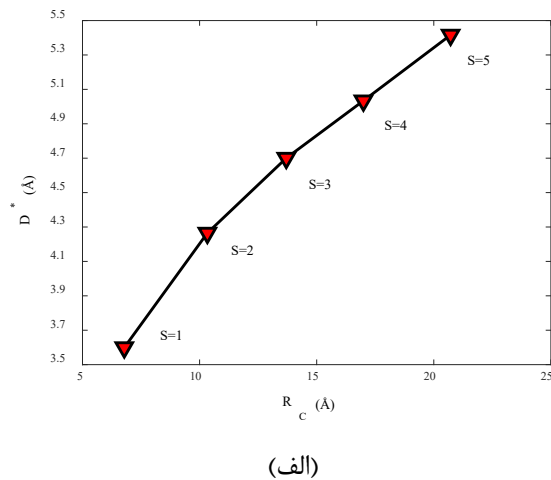
شکل (۸): فرکانس نوسانگر نانو پیاز کربنی ۵ لایه- نانولوله کربنی تک‌جداره برحسب (الف) مکان رهایش؛ (ب) سرعت اولیه به ازای طول‌های مختلف نانولوله.



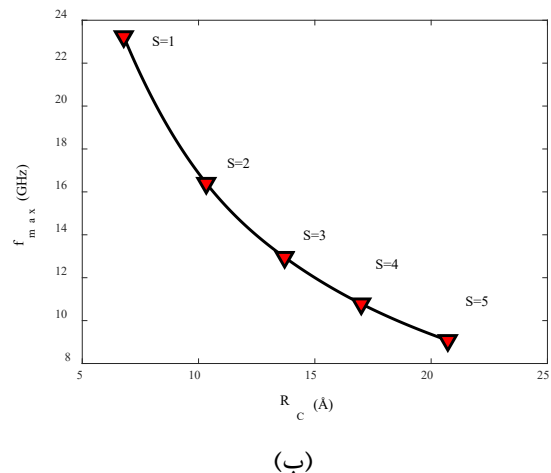
شکل (۹): سرعت اولیه برحسب دامنه نوسانگر نانو پیاز کربنی ۵ لایه- نانولوله کربنی تک‌جداره به ازای طول‌های مختلف نانولوله.

کربنی سبک‌تر در مکان‌های رهائش بحرانی کمتر قادر به تولید فرکانس ماکزیمم بیشتری هستند.

به‌منظور اعتبارسنجی نتایج حاصل از این پژوهش، فرکانس به‌دست‌آمده بر طبق اصل پایستگی انرژی با فرکانس حاصله از رابطه ارائه‌شده در [۳۰] مقایسه شده است. بدین منظور، با در نظر گرفتن نوسانگر نانو پیاز کربنی ۵ لایه- نانولوله کربنی تک‌جداره، تغییرات فرکانس نوسانگر برحسب نصف طول نانولوله در شکل ۱۰ نشان داده شده است. به‌منظور محاسبه فرکانس سیستم بر طبق رابطه نیمه‌تحلیلی ارائه‌شده در پژوهش حاضر، شرایط اولیه به‌گونه‌ای در نظر گرفته شده است که فرکانس ماکزیمم تولید گردد.



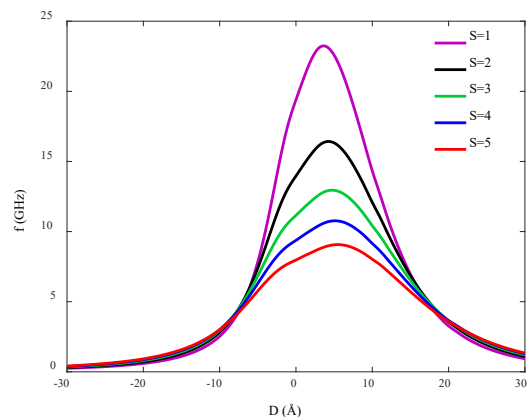
(الف)



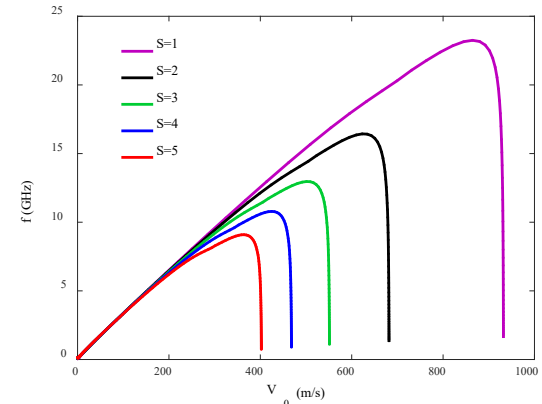
(ب)

شکل (۹): تأثیر تعداد لایه‌های هسته داخلی روی: (الف) مکان رهائش بحرانی؛ (ب) فرکانس ماکزیمم نوسانگر نانو پیاز کربنی ۵ لایه- نانولوله کربنی تک‌جداره.

شرایط اولیه در نظر گرفته شده در شکل ۴، فرکانس نوسانگر بر طبق شکل ۸ معادل با $8/24$ گیگاهرتز به دست می‌آید؛ بنابراین، فرکانس به‌دست‌آمده با استفاده از رابطه نیمه‌تحلیلی ارائه‌شده، تطابق بسیار خوبی با فرکانس محاسبه‌شده از حل عددی معادله حرکت دارد.



(الف)



(ب)

شکل (۸): فرکانس نوسانگر نانو پیاز کربنی - نانولوله

کربنی تک‌جداره برحسب: (الف) مکان رهائش؛ (ب) سرعت اولیه به ازای تعداد لایه‌های مختلف هسته داخلی.

با استفاده از نتایج شکل ۸، تغییرات مکان رهائش بحرانی و فرکانس ماکزیمم نوسانگر نانو پیاز کربنی- نانولوله کربنی تک‌جداره برحسب شعاع نانولوله و به ازای تعداد لایه‌های مختلف هسته داخلی در شکل ۹ نشان داده شده است. نتایج ارائه‌شده گویای این مطلب است که با افزایش تعداد لایه‌های نانو پیاز کربنی، مکان رهائش بحرانی به تدریج افزایش و فرکانس ماکزیمم کاهش می‌یابد؛ بنابراین، نانو پیازهای

مورد بررسی قرار گرفت. همچنین، سرعت فرار نوسانگر به ازای طول‌های مختلف نانولوله و تعداد لایه‌های مختلف نانو پیاز کربنی محاسبه گردید. نتایج عددی نشان دادند که حد نهایی سرعت فرار نوسانگر مستقل از طول نانولوله می‌باشد ولی با افزایش تعداد لایه‌های نانو پیاز کربنی کاهش می‌یابد. همچنین، با افزایش طول نانولوله و تعداد لایه‌های هسته داخلی، مکان رهایش بحرانی افزایش ولی فرکانس ماکزیمم نوسانگر کاهش می‌یابد.

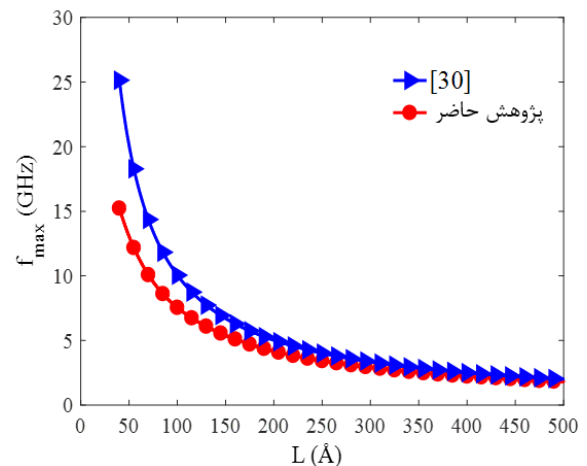
۹- فهرست علائم

ثابت جاذبه	A
دامنه	A_0
ثابت دافعه	B
مکان رهایش	D
مکان رهایش بحرانی	D^*
فرکانس و فرکانس ماکزیمم	f_{max}, f
نیروی واندروالسی کل	$F^{(tot)}$
انرژی پتانسیل کل	$E^{(tot)}$
نصف طول نانولوله	L
جرم اتم کربن	m_0
جرم نانو پیاز کربنی	m_F
شعاع نانولوله	R_C
شعاع فلورن	R_F
تعداد لایه‌های نانو پیاز کربنی	S
دوره تناوب	T
سرعت، سرعت اولیه، سرعت فرار	V_{esc}, V_0, V
مکان	Z
چگالی سطحی نانولوله	η_C
چگالی سطحی فلورن	η_F
فاصله بین دو اتم i و j	ρ_{ij}
تابع پتانسیل	$\Phi(\rho_{ij})$

۱۰- مراجع

[1] Cumings J, Zettl A. Low-friction nanoscale linear bearing realized from multiwall carbon nanotubes. Science. 2000;289(5479):602.

طبق شکل ۱۰ مشاهده می‌شود که با افزایش طول نانولوله اختلاف بین نتایج فرکانس کاهش می‌یابد و نتایج حاصل از دو روش کاملاً بر هم منطبق می‌شوند. در واقع، اگر نانولوله به اندازه کافی طویل باشد، بازه اثر نیرو که در دو انتهای نانولوله اثر می‌کند در مقایسه با طول نانولوله بسیار کوچک خواهد بود و لذا می‌توان نیرو را با یک تابع ضربه تخمین زد. در غیر این صورت، باید از توزیع واقعی نیرو برای محاسبه فرکانس استفاده نمود که این مسئله در پژوهش حاضر مورد بررسی قرار گرفت.



شکل (۱۰): مقایسه فرکانس ماکزیمم محاسبه شده در پژوهش حاضر و [۳۰] برای نوسانگر نانو پیاز کربنی ۵ لایه- نانولوله کربنی تک‌جداره.

۸- نتیجه گیری

بر مبنای تئوری تقریب پیوسته و تابع پتانسیل لنارد- جونز، یک رابطه نیمه‌تحلیلی برای محاسبه دقیق فرکانس نوسانگر نانو پیاز کربنی- نانولوله کربنی تک‌جداره ارائه گردید. در ابتدا روابطی تحلیلی برای انرژی پتانسیل و نیروی واندروالسی سیستم به دست آمد و سپس با صرف نظر از اثرات اصطکاک، عبارت مربوط به فرکانس نوسانگر از معادله انرژی استخراج گردید که هم به پارامترهای هندسی و هم به شرایط اولیه حرکت بستگی داشت. نتایج عددی نشان دادند که فرکانس به دست آمده از اصل پایستگی انرژی مکانیکی تطابق بسیار خوبی با فرکانس حاصله از حل عددی معادله حرکت دارد. تأثیر طول نانولوله، تعداد لایه‌های هسته داخلی و نیز شرایط اولیه حرکت بر روی فرکانس نوسانگر

- behaviors of C₆₀-nanotube oscillators. *Physical Letters A*. 2009;373(11):1058.
- [14] Girifalco LA. Interaction potential for carbon (C₆₀) molecules. *The Journal of Physical Chemistry*. 1991;95(14):5370.
- [15] Stevens K, Thamwattana N, Tran-Duc T. Continuum modeling with functional Lennard-Jones parameters for DNA-graphene Interactions. *Advanced Theory and Simulations*. 2023;6(5):2200896.
- [16] Sadeghi F, Ajori S. Dynamic behavior of lysozyme enzyme inside titania nanotubes: a continuum approach. *The European Physical Journal Plus*. 2022; 137(10):1178.
- [17] Alshehri MH. Continuum modelling for encapsulation of anticancer drugs inside nanotubes. *Mathematics*. 2021;9(19):2469.
- [18] Ansari R, Kazemi E, Mahmoudinezhad E, Sadeghi F. Preferred position and orientation of anticancer drug cisplatin during encapsulation into single-walled carbon nanotubes. *Journal of Nanotechnology in Engineering and Medicine*. 2012;3(1):010903.
- [19] Ansari R, Alisafaei F, Alipour A, Mahmoudinezhad E. On the van der Waals interaction of carbon nanocones. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2012; 73(6):751.
- [20] Baowan D, Thamwattana N, Tran-Duc T. Critical sizes for PET cylindrical and hourglass shaped pores for selective ion channels. *Physica B: Condensed Matter*. 2022;633:413476.
- [21] Hilder TA, Hill JM. Continuous versus discrete for interacting carbon nanostructures. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2007;40(14):3851.
- [22] Ansari R, Sadeghi F, Ajori S. Continuum and molecular dynamics study of C₆₀ fullerene-carbon nanotube oscillators. *Mechanics Research Communications*. 2013;47:18-23.
- [23] Ansari R, Gholami R. Dynamic stability analysis of multi-walled carbon nanotubes with arbitrary boundary conditions based on the nonlocal elasticity theory. *Mechanics of Advanced Materials and Structures*. 2017;24(14):1180-1188.
- [24] Ansari R, Gholami R, Sahmani S, Norouzzadeh A, Bazdid-Vahdati M. Dynamic stability analysis of embedded multi-walled carbon nanotubes in thermal environment. *Acta Mechanica Sinica Sinica*. 2015;28(6):659-667.
- [25] Ansari R, Gholami R, Rouhi H. Size-dependent nonlinear forced vibration analysis of magneto-
- [2] Ajori S, Sadeghi F, Ansari R. Dynamic behavior of chloride ion-electrically charged open carbon nanocone oscillators: A molecular dynamics study. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science*. 2021;235(21):5709-5717.
- [3] Liu R, Zhao Y, Sui C, Sang Y, Hao W, Li J, Wu J, He X, Wang C. Molecular dynamics simulations of Carbyne/Carbon nanotube gigahertz oscillators. *Computational Materials Science*. 2023;222: 112105.
- [4] Al Salihi HA, Fayad MA, Slepchenkov M, Shunaev V. Nanoscale oscillator on the base of single-walled carbon nanotube with internal fullerenes C₃₆ and C₈₀. *Laser Physics, Photonic Technologies, and Molecular Modeling*. 2020;11458:239.
- [5] Sarapat P, Hill JM, Baowan D. Mechanics of atoms interacting with a carbon nanotorus: Optimal configuration and oscillation behaviour. *Philosophical Magazine*. 2019;99(11):1386.
- [6] Minkel JR. Focus: nanotubes in the fast lane. *Physics*. 2002;9:4.
- [7] Damjanović M, Milošević I, Vuković T, Sredanović R. Full symmetry, optical activity, and potentials of single-wall and multiwall nanotubes. *Physical Review B*. 1999;60(4):2728.
- [8] Awad AA, Houshang A, Zahedinejad M, Khymyn R, Åkerman J. Width dependent auto-oscillating properties of constriction based spin Hall nano-oscillators. *Applied Physics Letters*. 2020;116(23): 232401.
- [9] Hem J, Buda-Prejbeanu LD, Ebels U. Power and phase dynamics of injection-locked spin torque nano-oscillators under conservative and dissipative driving signals. *Physical Review B*. 2019; 100(5):054414.
- [10] Li L, Chen L, Liu R, Du Y. Recent progress on excitation and manipulation of spin-waves in spin Hall nano-oscillators. *Chinese Physics B*. 2020;29(11):117102.
- [11] Li C, Wang S, Xu N, Yang X, Liu B, Yang B, Fang L. Spin-torque nano-oscillators based on radial vortex in the presence of interface Dzyaloshinskii-Moriya interaction. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2020;498:166155.
- [12] Guo W, Guo Y, Gao H, Zheng Q, Zhong W. Energy dissipation in gigahertz oscillators from multiwalled carbon nanotubes. *Physical Review Letters*. 2003; 91(12):125501.
- [13] Song HY, Zha XW. Molecular dynamics study of effects of radius and defect on oscillatory

Mathematical and Physical Character. 1924;106(738):441-462.

[36] Zheng Q, Liu JZ, Jiang Q. Excess van der Waals interaction energy of a multiwalled carbon nanotube with an extruded core and the induced core oscillation. *Physical Review B*. 2002;65(24):245409.

electro-thermo-elastic Timoshenko nanobeams based upon the nonlocal elasticity theory. *Composite Structures*. 2015;126:216-226.

[26] Ansari R, Gholami R, Ajori S. Torsional vibration analysis of carbon nanotubes based on the strain gradient theory and molecular dynamic simulations. *Journal of Vibration and Acoustics*. 2013;135(5):051016.

[27] Baowan D, Hill JM. Force distribution for double-walled carbon nanotubes and gigahertz oscillators. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik*. 2007;58:857.

[28] Zheng Q, Jiang Q. Multiwalled carbon nanotubes as gigahertz oscillators. *Physical Review Letters*. 2002;88(4):045503.

[29] Cox BJ, Thamwattana N, Hill JM. Mechanics of atoms and fullerenes in single-walled carbon nanotubes. II. Oscillatory behaviour. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2007;463(2078):477.

[30] Thamwattana N, Hill JM. Oscillation of nested fullerenes (carbon onions) in carbon nanotubes. *Journal of Nanoparticle Research*. 2008;10:665-677.

[31] Ansari R, Sadeghi F, Motevalli B. A comprehensive study on the oscillation frequency of spherical fullerenes in carbon nanotubes under different system parameters. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2013;18(3):769.

[32] Ansari R, Sadeghi F, Darvizeh M. Continuum study on the oscillatory characteristics of carbon nanocones inside single-walled carbon nanotubes. *Physica B: Condensed Matter*. 2016;482:28-37.

[33] Ansari R, Sadeghi F, Ajori S. Oscillation characteristics of carbon nanotube molecules along carbon nanotubes under various system parameters. *European Journal of Mechanics-A/Solids*. 2017;62:67-79.

[34] Cox BJ, Thamwattana N, Hill JM. Mechanics of atoms and fullerenes in single-walled carbon nanotubes. I. Acceptance and suction energies. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 2007;463(2078):461.

[35] Jones JE. On the determination of molecular fields.—I. From the variation of the viscosity of a gas with temperature. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a*



Modeling the Oscillatory Behavior of Carbon Nano-onions Inside Single-walled Carbon Nanotubes Based on the Continuum Approximation Method

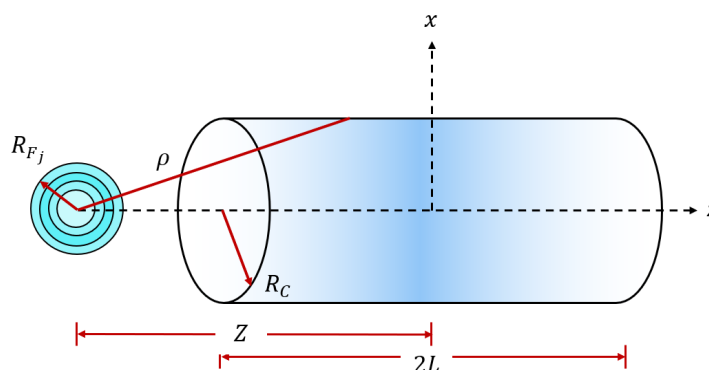
Fatemeh Sadeghi

Assistant Professor, Department of Engineering Sciences, Faculty of Advanced Technologies, University of Mohaghegh Ardabili, Namin, Iran

HIGHLIGHTS

- Frequency of carbon onion-carbon nanotube nano-oscillators is in the gigahertz range.
- Lighter cores generate higher maximum frequencies.
- Escape velocity is reduced by increasing the layers of carbon nano-onions.

GRAPHICAL ABSTRACT



ARTICLE INFO

Article history:

Article Type: Research paper

Received: 30 July 2023

Received in revised form: 19 August 2023

Accepted: 19 September 2023

Available online: 19 September 2023

*Correspondence: f.sadeghi@uma.ac.ir

How to cite this article:

F. Sadeghi. Modeling the oscillatory behavior of carbon nano-onions inside single-walled carbon nanotubes based on the continuum approximation method. *Journal of Aerospace Mechanics*. 2023; 19(4):135-148.

Keywords:

Nano-oscillators

Carbon nano-onions

Single-walled carbon nanotubes

Continuum approximation method

Frequency

ABSTRACT

In this paper, oscillatory behavior of carbon nano-onions inside single-walled carbon nanotubes is investigated. To this end, using the continuum approximation along with the Lennard-Jones potential function, analytical expressions are derived for the evaluation of van der Waals interaction force and potential energy of system. Based on the Newton's second law and ignoring the frictional forces, the motion equation is solved numerically and the time histories of displacement and velocity of oscillator are obtained. Moreover, in order to determine the oscillation frequencies of system, a semi-analytical expression is derived based on the conservation of mechanical energy principle. The proposed expression of frequency is dependent on both geometrical parameters and initial conditions. Using this expression, a comprehensive study is performed on the oscillatory behavior of carbon nano-onions inside single-walled carbon nanotubes by varying system parameters. Numerical results indicate that the generated frequency of this type of nano-oscillators is in the gigahertz range. It is further observed that the escape velocity as well as the maximum oscillation frequency decrease as the number of layers of carbon nano-onion increases.