

فهرست مطالب

عنوان

صفحه

فهرست علائم.....	ح
فهرست جداول.....	خ
فهرست اشکال.....	د
چکیده.....	۱

فصل اول

مقدمه نانو.....	۳
۱-۱ مقدمه.....	۴
۱-۱-۱ فناوری نانو.....	۴
۲-۱ معرفی نانولوله‌های کربنی.....	۵
۱-۲-۱ ساختار نانو لوله‌های کربنی.....	۵
۲-۲-۱ کشف نانولوله.....	۷
۳-۱ تاریخچه.....	۱۰

فصل دوم

خواص و کاربردهای نانو لوله‌های کربنی.....	۱۴
۱-۲ مقدمه.....	۱۵
۲-۲ انواع نانولوله‌های کربنی.....	۱۶
۱-۲-۲ نانولوله‌ی کربنی تک دیواره (SWCNT).....	۱۶
۲-۲-۲ نانولوله‌ی کربنی چند دیواره (MWNT).....	۱۹
۳-۲ مشخصات ساختاری نانو لوله‌های کربنی.....	۲۱
۱-۳-۲ ساختار یک نانو لوله تک دیواره.....	۲۱
۲-۳-۲ طول پیوند و قطر نانو لوله کربنی تک دیواره.....	۲۴
۴-۲ خواص نانو لوله‌های کربنی.....	۲۵
۱-۴-۲ خواص مکانیکی و رفتار نانو لوله‌های کربن.....	۲۹
۱-۴-۲-۱ مدول الاستیسیته.....	۲۹

۳۳.....	۲-۴-۱-۲ تغییر شکل نانو لوله ها تحت فشار هیدرواستاتیک
۳۶.....	۲-۴-۱-۳ تغییر شکل پلاستیک و تسلیم نانو لوله ها
۳۹.....	۲-۵-۱ کاربردهای نانو فناوری
۴۰.....	۲-۵-۱-۱ کاربردهای نانولوله‌های کربنی
۴۱.....	۲-۵-۱-۱-۱ کاربرد در ساختار مواد
۴۳.....	۲-۵-۱-۲ کاربردهای الکتریکی و مغناطیسی
۴۶.....	۲-۵-۱-۳ کاربردهای شیمیایی
۴۷.....	۲-۵-۱-۴ کاربردهای مکانیکی

فصل سوم.....

۵۵.....	روش های سنتز نانو لوله های کربنی
۵۶.....	۳-۱-۱ فرایندهای تولید نانولوله های کربنی
۵۶.....	۳-۱-۱-۱ تخلیه از قوس الکتریکی
۵۸.....	۳-۱-۲ تبخیر/سایش لیزری
۵۹.....	۳-۱-۳ رسوب دهی شیمیایی بخار به کمک حرارت (CVD)
۶۱.....	۳-۱-۴ رسوب دهی شیمیایی بخار به کمک پلاسما (PECVD)
۶۲.....	۳-۱-۵ رشد فاز بخار
۶۲.....	۳-۱-۶ الکترولیز
۶۳.....	۳-۱-۷ سنتز شعله
۶۳.....	۳-۱-۸ خالص سازی نانولوله های کربنی
۶۴.....	۳-۲-۱ تجهیزات
۶۶.....	۳-۲-۱-۱ میکروسکوپ های الکترونی
۶۷.....	۳-۲-۱-۲ میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM)
۶۸.....	۳-۲-۱-۳ میکروسکوپ الکترونی پیمایشی یا پویشی (SEM)
۷۰.....	۳-۲-۱-۴ میکروسکوپ های پروب پیمایشگر (SPM)
۷۰.....	۳-۲-۱-۵ میکروسکوپ های نیروی اتمی (AFM)
۷۱.....	۳-۲-۱-۶ میکروسکوپ های تونل زنی پیمایشگر (STM)

فصل چهارم.....

۷۳.....	شبیه سازی خواص و رفتار نانو لوله های کربنی بوسیله روش های پیوسته
۷۴.....	۴-۱ مقدمه

۷۵.....	۲-۴ مواد در مقیاس نانو
۷۵.....	۱-۲-۴ مواد محاسباتی
۷۶.....	۲-۲-۴ مواد نانو ساختار
۷۷.....	۳-۴ مبانی تئوری تحلیل مواد در مقیاس نانو
۷۷.....	۱-۳-۴ چارچوب های تئوری در تحلیل مواد
۷۷.....	۱-۱-۳-۴ چارچوب محیط پیوسته در تحلیل مواد
۷۹.....	۴-۴ روش های شبیه سازی
۷۹.....	۱-۴-۴ روش دینامیک مولکولی
۸۰.....	۲-۴-۴ روش مونت کارلو
۸۰.....	۳-۴-۴ روش محیط پیوسته
۸۱.....	۴-۴-۴ مکانیک میکرو
۸۱.....	۵-۴-۴ روش المان محدود (FEM)
۸۱.....	۶-۴-۴ محیط پیوسته مؤثر
۸۳.....	۵-۴ روش های مدلسازی نانو لوله های کربنی
۸۳.....	۱-۵-۴ مدل های مولکولی
۸۳.....	۱-۱-۵-۴ مدل مکانیک مولکولی (دینامیک مولکولی)
۸۶.....	۲-۱-۵-۴ روش اب انیشو
۸۶.....	۳-۱-۵-۴ روش تایت باندینگ
۸۷.....	۴-۱-۵-۴ محدودیت های مدل های مولکولی
۸۷.....	۲-۵-۴ مدل محیط پیوسته در مدلسازی نانولوله ها
۸۸.....	۱-۲-۵-۴ مدل یاکوبسون
۸۹.....	۲-۲-۵-۴ مدل کوشی بورن
۸۹.....	۳-۲-۵-۴ مدل خرابایی
۹۲.....	۴-۲-۵-۴ مدل قاب فضایی
۹۵.....	۶-۴ محدوده کاربرد مدل محیط پیوسته
۹۷.....	۱-۶-۴ کاربرد مدل پوسته پیوسته
۹۷.....	۲-۶-۴ اثرات سازه نانولوله بر روی تغییر شکل
۹۸.....	۳-۶-۴ اثرات ضخامت تخمینی بر کماتش نانولوله
۹۹.....	۴-۶-۴ اثرات ضخامت تخمینی بر کماتش نانولوله
۹۹.....	۵-۶-۴ محدودیتهای مدل پوسته پیوسته
۹۹.....	۱-۵-۶-۴ محدودیت تعاریف در پوسته پیوسته

- ۹۹..... ۲-۵-۶-۴ محدودیت های تئوری کلاسیک محیط پیوسته
- ۱۰۰..... ۶-۶-۴ کاربرد مدل تیر پیوسته

فصل پنجم

- ۱۰۲..... مدل های تدوین شده برای شبیه سازی رفتار نانو لوله های کربنی
- ۱۰۳..... ۱-۵ مقدمه
- ۱۰۴..... ۲-۵ نیرو در دینامیک مولکولی
- ۱۰۴..... ۱-۲-۵ نیروهای بین اتمی
- ۱۰۵..... ۱-۱-۲-۵ پتانسیلهای جفتی
- ۱۰۹..... ۲-۱-۲-۵ پتانسیلهای چندتایی
- ۱۱۱..... ۲-۲-۵ میدانهای خارجی نیرو
- ۱۱۱..... ۳-۵ بررسی مدل های محیط پیوسته گذشته
- ۱۱۳..... ۴-۵ ارائه مدل های تدوین شده برای شبیه سازی نانولوله های کربنی
- ۱۱۴..... ۱-۴-۵ مدل انرژی-معادل
- ۱۱۵..... ۱-۱-۴-۵ خصوصیات محوری نانولوله های کربنی تک دیواره
- ۱۲۴..... ۲-۱-۴-۵ خصوصیات محیطی نانولوله های کربنی تک دیواره
- ۱۳۱..... ۲-۴-۵ مدل اجزاء محدود بوسیله نرم افزار ANSYS
- ۱۳۱..... ۱-۲-۴-۵ تکنیک عددی بر اساس المان محدود
- ۱۴۱..... ۲-۲-۴-۵ ارائه ۳ مدل تدوین شده اجزاء محدود توسط نرم افزار ANSYS
- ۱۵۵..... ۳-۴-۵ مدل اجزاء محدود بوسیله کد عددی تدوین شده توسط نرم افزار MATLAB
- ۱۵۵..... ۱-۳-۴-۵ مقدمه
- ۱۵۷..... ۲-۳-۴-۵ ماتریس الاستیسیته
- ۱۵۸..... ۳-۳-۴-۵ آنالیز خطی و روش اجزاء محدود برپایه جابجائی
- ۱۵۸..... ۴-۳-۴-۵ تعیین و نگاشت المان
- ۱۶۱..... ۵-۳-۴-۵ ماتریس کرنش-جابجائی
- ۱۶۲..... ۶-۳-۴-۵ ماتریس سختی برای یک المان دوزنقه ای
- ۱۶۳..... ۷-۳-۴-۵ ماتریس سختی برای یک حلقه کربن
- ۱۶۷..... ۸-۳-۴-۵ ماتریس سختی برای یک ورق گرافیتی تک لایه
- ۱۶۸..... ۹-۳-۴-۵ مدل پیوسته به منظور تعیین خواص مکانیکی ورق گرافیتی تک لایه

فصل ششم

نتایج

- ۱۷۱.....
- ۱-۶ نتایج حاصل از مدل انرژی-معادل..... ۱۷۲.....
- ۱-۱-۶ خصوصیات محوری نانولوله کربنی تک دیواره..... ۱۷۳.....
- ۲-۱-۶ خصوصیات محیطی نانولوله کربنی تک دیواره..... ۱۷۶.....
- ۲-۶ نتایج حاصل از مدل اجزاء محدود بوسیله نرم افزار ANSYS..... ۱۸۱.....
- ۱-۲-۶ نحوه مش بندی المان محدود نانولوله های کربنی تک دیواره در نرم افزار ANSYS و ایجاد ساختار
- قاب فضایی و مدل سیمی به کمک نرم افزار [۵۴] MATLAB..... ۱۸۲.....
- ۲-۲-۶ اثر ضخامت بر روی مدول الاستیک نانولوله های کربنی تک دیواره..... ۱۹۲.....
- ۳-۶ نتایج حاصل از مدل اجزاء محدود بوسیله کد تدوین شده توسط نرم افزار MATLAB..... ۱۹۶.....

فصل هفتم

نتیجه گیری و پیشنهادات

- ۲۰۳.....
- ۱-۷ نتیجه گیری..... ۲۰۴.....
- ۲-۷ پیشنهادات..... ۲۰۶.....

فهرست مراجع

- ۲۰۷.....

فهرست علائم

علائم اختصاری

تعریف

SWCNTs : Single-Walled Carbon Nanotubes
MWCNTs : Multi-Walled Carbon Nanotubes
CNTs : Carbon Nano Tubes
MWNTs : Multi-Walled Nano Tubes
FED : Field Emission Devices
TEM : Transmission Electron Microscope
SEM : Scanning Electron Microscopy
CVD : Chemical Vapor Deposition
PECVD : Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition
SPM : Scanning Probe Microscopy
NEMs : Nano Electro Mechanical System
AFM : Atomic Force Microscopy
STM : Scanning Tunnelling Microscopy
FEM : Finite Element Modeling
ASME : American Society of Mechanical Engineers
RVE : Representative Volume Element
SLGS: Single-Layered Grephene Sheet

فهرست جداول

عنوان	صفحه
جدول ۴-۱: اتفاقات مهم در توسعه مواد در ۳۵۰ سال گذشته	۷۶
جدول ۵-۱: خصوصیات هندسی و الاستیک المان تیر	۱۳۵
جدول ۵-۲: پارامترهای اندرکنش واندروالس	۱۵۰
جدول ۶-۱: اطلاعات مربوط به مش بندی المان محدود مدل قاب فضایی در نرم افزار ANSYS	۱۸۴
جدول ۶-۲: مشخصات هندسی نانولوله های کربنی تک دیواره در هر سه مدل	۱۸۵
جدول ۶-۳: داده ها برای مدول یانگ در هر سه مدل توسط نرم افزار ANSYS	۱۸۶
جدول ۶-۴: داده ها برای مدول برشی در هر سه مدل توسط نرم افزار ANSYS	۱۸۷
جدول ۶-۵: مقایسه نتایج مدول یانگ برای مقادیر مختلف ضخامت گزارش شده	۱۹۴
جدول ۶-۶: مشخصات صفحات گرافیتی مدل شده با آرایش صندلی راحتی	۱۹۶
جدول ۶-۷: مشخصات صفحات گرافیتی مدل شده با آرایش زیگزاگ	۱۹۷
جدول ۶-۸: مقایسه مقادیر E ، G و ν به دست آمده از مدل های تدوین شده در این تحقیق با نتایج موجود در منابع	۲۰۲

فهرست اشکال

عنوان	صفحه
شکل ۱-۱: میکروگراف TEM که لایه های نانولوله کربنی چند دیواره را نشان می دهد	۴
شکل ۱-۲: اشکال متفاوت مواد با پایه کربن	۶
شکل ۱-۳: تصویر گرفته شده TEM که فلورن هایی کپسول شده به صورت نانولوله های کربنی تک دیواره را نشان می دهد	۷
شکل ۱-۴: تصویر TEM از نانولوله کربنی دو دیواره که فاصله دو دیواره در عکس TEM ۰/۳۶ nm می باشد	۸
شکل ۱-۵: تصویر TEM گرفته شده از نانوپایاد	۸
شکل ۱-۲: تصویر نانولوله های تک دیواره و چند دیواره کشف شده توسط ایجیما در سال ۱۹۹۱	۱۵
شکل ۲-۲: انواع نانولوله: (الف) ورق گرافیتی (ب) نانولوله زیگزاگ (۰، ۱۲) (ج) نانولوله زیگزاگ (۶، ۶) (د) نانولوله کایرال (۲، ۱۰)	۱۷
شکل ۲-۳: شبکه شش گوشه ای اتم های کربن	۱۸
شکل ۲-۴: تصویر شماتیک شبکه شش گوشه ای ورق گرافیتی، شامل تعریف پارامترهای ساختاری پایه و توصیف اشکال نانولوله های کربنی تک دیواره	۱۹
شکل ۲-۵: شکل شماتیک یک نانولوله کربنی چند دیواره MWCNTs	۲۰
شکل ۲-۶: نانو پیاد	۲۱
شکل ۲-۷: شکل شماتیک یک نانولوله که از حلقه ها شش ضلعی کربنی تشکیل شده است	۲۲
شکل ۲-۸: تصویر شماتیک یک حلقه شش ضلعی کربنی و پیوندهای مربوطه	۲۲
شکل ۲-۹: تصویر شماتیک شبکه کربن در سلول های شش ضلعی	۲۳
شکل ۲-۱۰: توضیح بردار لوله کردن نانولوله، بصورت ترکیب خطی از بردارهای پایه a , b	۲۳
شکل ۲-۱۱: نمونه های نانولوله های صندلی راحتی، زیگزاگ و کایرال و انتها بسته آنها که مرتبط است با تنوع فلورن ها	۲۴
شکل ۲-۱۲: تصویر سطح مقطع یک نانولوله	۲۵
شکل ۲-۱۳: مراحل آزاد سازی نانولوله کربن	۳۳
شکل ۲-۱۴: مراحل کمانش و تبدیل پیوندها در یک نانولوله تحت بار فشاری	۳۶
شکل ۲-۱۵: نحوه ایجاد و رشد نقایص تحت بار کششی الف: جریان پلاستیک، ب: شکست ترد (در اثر ایجاد نقایص پنج و هفت ضلعی) ج: گردنی شدن نانولوله در اثر اعمال بار کششی	۳۸
شکل ۲-۱۶: تصویر میکروسکوپ الکترونی پیمایشی SEM اعمال بار کششی بر یک نانولوله	۳۹

- شکل ۲-۱۷: شکل شماتیک یک نانولوله کربنی به عنوان نوک AFM. ۴۷.....
- شکل ۲-۱۸: نانودنده ها ۵۰.....
- شکل ۳-۱: آزمایش تخلیه قوس ۵۶.....
- شکل ۳-۲: دستگاه تبخیر/سایش لیزری ۵۸.....
- شکل ۳-۳: شماتیک ابزار CVD ۶۰.....
- شکل ۳-۴: میکروگرافی که صاف و مستقیم بودن MWCNTs را که به روش PECVD رشد یافته نشان می دهد ۶۲.....
- شکل ۳-۵: میکروگراف که کنترل بر روی نانولوله ها را نشان می دهد: (الف) 40-50 nm و (ب) 200-300 nm ۶۲.....
- شکل ۳-۶: نانولوله کربنی MWCNT به عنوان تیرک AFM ۷۱.....
- شکل ۴-۱: تصویر شماتیک ارتباط بین زمان و مقیاس طول روشهای شبیه سازی چند مقیاسی ۷۵.....
- شکل ۴-۲: مدل سازی موقعیت ذرات در محیط پیوسته ۷۷.....
- شکل ۴-۳: محدوده طول و مقیاس زمان مربوط به روشهای شبیه سازی متداول ۸۲.....
- شکل ۴-۴: تصویر تلاقی ابزار اندازه گیری و روش های شبیه سازی ۸۲.....
- شکل ۴-۵: تصویر شماتیک وابستگی درونی روش ها و اصل اعتبار روش ۸۳.....
- شکل ۴-۶: تصویر شماتیک اتمهای i,j,k و پیوندها و زاویه پیوند مربوطه ۸۵.....
- شکل ۴-۷: موقعیت نسبی اتمها در شبکه کربنی برای بدست آوردن طول پیوندها در نانولوله ۸۵.....
- شکل ۴-۸: امان حجم معرف در نانولوله کربنی ۹۰.....
- شکل ۴-۹: مدلسازی محیط پیوسته معادل ۹۰.....
- شکل ۴-۱۰: امان حجم معرف برای مدل های شیمیایی، خرابایی و محیط پیوسته ۹۲.....
- شکل ۴-۱۱: تصویر شماتیک تغییر شکل امان حجم معرف ۹۲.....
- شکل ۴-۱۲: شبیه سازی نانولوله بصورت یک قاب فضایی ۹۳.....
- شکل ۴-۱۳: اندرکنشهای بین اتمی در مکانیک مولکولی ۹۳.....
- شکل ۴-۱۴: شکل شماتیک یک صفحه شبکه ای کربن شامل اتم های کربن در چیدمان های شش گوشه ای. ۹۶.....
- شکل ۴-۱۵: شکل شماتیک گروه های مختلف نانولوله کربنی ۹۷.....
- شکل ۴-۱۶: وابستگی کرنش بحرانی نانولوله به شعاع با ضخامت های تخمینی متفاوت ۹۸.....
- شکل ۵-۱: نمایش نیرو و پتانسیل لنارد-جونز بر حسب فاصله بین اتمی I ۱۰۷.....
- شکل ۵-۲: نمایش نیرو و پتانسیل مورس بر حسب فاصله بین اتمی I ۱۰۸.....
- شکل ۵-۳: تصویر شماتیک اتمهای i,j,k و پیوندها و زاویه پیوند مربوطه ۱۰۹.....

- شکل ۴-۵: فعل و انفعالات بین اتمی در مکانیک مولکولی ۱۱۵
- شکل ۵-۵: شکل شماتیک (الف) یک نانولوله صندلی راحتی (ب) یک نانولوله زیگزاگ ۱۱۶
- شکل ۶-۵: شکل شماتیک یک نانولوله صندلی راحتی (الف) واحد شش گوشه ای (ب) نیروهای توزیع شده روی پیوند b ۱۱۷
- شکل ۷-۵: شکل شماتیک یک نانولوله زیگزاگ (الف) واحد شش گوشه ای (ب) نیروهای توزیع شده روی پیوند b ۱۲۰
- شکل ۸-۵: تصویر شماتیک توزیع نیروها برای یک نانولوله کربنی تک دیواره ۱۲۲
- شکل ۹-۵: تصویر شماتیک توزیع نیرو در یک نانولوله کربنی زیگزاگ ۱۲۴
- شکل ۱۰-۵: تصویر شماتیک (الف) نانولوله کربنی Armchair، (ب) مدل تحلیلی برای تراکم در جهت محیطی (ج) روابط هندسی ۱۲۵
- شکل ۱۱-۵: تصویر شماتیک (الف) نانولوله کربنی Zigzag (ب) مدل تحلیلی برای فشار در جهت محیطی ۱۲۹
- شکل ۱۲-۵: تعادل مکانیک مولکولی و مکانیک ساختاری برای تعاملات کووالانس و غیر کووالانس بین اتم های کربن (الف) مدل مکانیک مولکولی (ب) مدل مکانیک ساختاری ۱۳۲
- شکل ۱۳-۵: منحنی پتانسیل لئارد-جونز و نیروی واندروالس نسبت به فاصله اتمی ۱۳۳
- شکل ۱۴-۵: رابطه نیرو (بین پیوند کربن-کربن) و کرنش بر اساس پتانسیل بهبود یافته مورس ۱۳۷
- شکل ۱۵-۵: استفاده از المان میله خربایی برای شبیه سازی نیروهای واندروالس ۱۳۸
- شکل ۱۶-۵: منحنی نیرو-جابجایی غیر خطی میله خربایی ۱۳۹
- شکل ۱۷-۵: تغییرات سختی فنر نسبت به جابجایی بین اتمی ۱۴۰
- شکل ۱۸-۵: مدل های المان محدود ایجاد شده برای اشکال مختلف نانولوله (الف): صندلی راحتی (۷،۷) (ب): زیگزاگ (۷،۰) (ج): نانولوله دودیواره (۵،۵) و (۱۰،۱۰) ۱۴۰
- شکل ۱۹-۵: المان های نماینده برای مدل های شیمیایی، خربایی و محیط پیوسته ۱۴۲
- شکل ۲۰-۵: شبیه سازی نانولوله های کربنی تک دیواره به عنوان ساختار قاب فضایی ۱۴۴
- شکل ۲۱-۵: شرایط مرزی و بارگذاری بر روی مدل المان محدود نانولوله کربنی تک دیواره: (الف) زیگزاگ (۷،۰)، (ب) صندلی راحتی (۷،۷)، (ج) زیگزاگ (۰،۱۰)، (د) صندلی راحتی (۷،۷) ۱۴۵
- شکل ۲۲-۵: شرایط مرزی و بارگذاری بر روی مدل المان محدود نانولوله کربنی چند دیواره: (الف) مجموعه ۴ دیواره نانولوله زیگزاگ (۵،۰) (۱۴،۰) (۲۳،۰) (۳۲،۰) تحت کشش خالص، (ب) مجموعه ۴ دیواره نانولوله صندلی راحتی (۵،۵) (۱۰،۱۰) (۱۵،۱۵) (۲۰،۲۰) تحت پیچش خالص ۱۴۵
- شکل ۲۳-۵: نانولوله تحت کشش ۱۴۷
- شکل ۲۴-۵: یک نانولوله کربنی تک دیواره شبیه سازی شده به عنوان ساختار قاب فضایی ۱۴۸

- شکل ۵-۲۵: شکل شماتیک اتمهای کربن و پیوند های کربن متصل کننده آنها در ورق گرافیت ۱۴۸
- شکل ۵-۲۶: نمودار Ewa بر حسب فاصله بین اتمی pa ۱۵۰
- شکل ۵-۲۷: شکل شماتیک شش گوشه ای کربن و اتم های کربن و پیوندهای کووالانس و واندروالس ۱۵۱
- شکل ۵-۲۸: شکل شماتیک شش گوشه ای کربن که تنها پیوندهای کووالانس را نشان می دهد ۱۵۱
- شکل ۵-۲۹: سه حالت بار گذاری برای معادل سازی انرژی کرنشی مدل ها ۱۵۲
- شکل ۵-۳۰: شکل شماتیک از شش گوشه ای کربن و نیرو های غیر پیوندی ۱۵۴
- شکل ۵-۳۱: شکل شماتیک شش گوشه ای کربن با در نظر گرفتن ۹ پیوند واندروالس بین اتم های کربن ... ۱۵۴
- شکل ۵-۳۲: یک مدل جزئی از ساختار شبکه ای رول نشده که نانولوله کربنی را شکل می دهد. شش ضلعی های متساوی الاضلاع نماینده حلقه های شش ضلعی پیوند های کووالانس کربن می باشد، که هر رأس آن محل قرار گیری اتم کربن می باشد ۱۵۶
- شکل ۵-۳۳: شکل یک حلقه کربن به صورت یک شش ضلعی متساوی الاضلاع و هر اتم کربن به عنوان گره با نامگذاری قراردادی ۱۵۹
- شکل ۵-۳۴: شکل یک دوزنقه متساوی الساقین از حلقه شش گوشه ای کربن (الف) در فضای X و Y (ب) ۱۵۹
- شکل ۵-۳۵: شکل نگاشت یافته در فضای I و S ۱۵۹
- شکل ۵-۳۵: المان دوزنقه ای هم اندازه و مشابه المان اصلی ABCF که در صفحه به اندازه زاویه θ چرخیده است ۱۶۳
- شکل ۵-۳۶: شش حالت ممکن دوزنقه شکل گرفته در شش گوشه ای کربن ABCDEF. هر دوزنقه یک شکل دوران یافته از دیگری است ۱۶۶
- شکل ۵-۳۷: حلقه شش گوشه ای کربن ABCDEF که تشکیل شده از دو دوزنقه ABCD و DEFC، در این شکل نشان داده شده که در این حالت تنها CF ایجاد شده است ۱۶۷
- شکل ۵-۳۸: شکل شماتیک حلقه کربن شش گوشه ای به عنوان المان پایه صفحه گرافیتی ۱۶۸
- شکل ۵-۳۹: پارامترهای هندسی ورق گرافیتی ۱۶۹
- شکل ۵-۴۰: مدل ورق گرافیتی زیگزاگ. ورق گرافیتی تک لایه (a) تحت کشش (b) تحت بار های مماسی ... ۱۷۰
- شکل ۶-۱: شکل شماتیک (الف) یک نانولوله صندلی راحتی (ب) یک نانولوله زیگزاگ ۱۷۲
- شکل ۶-۲: تغییرات مدول یانگ در جهت محوری E ۱۷۳
- شکل ۶-۳: تغییرات مدول برشی G ۱۷۴
- شکل ۶-۴: تغییرات مدول یانگ در جهت محوری E نانولوله های کربنی با قطر یکسان، نسبت به ضخامت دیواره t ۱۷۴
- شکل ۶-۵: تغییرات مدول برشی نانولوله های کربنی با قطر یکسان نسبت به ضخامت دیواره t ۱۷۵

- شکل ۶-۶: تغییرات نسبت پواسون^۷..... ۱۷۵
- شکل ۶-۷: تغییرات مدول یانگ در جهت محیطی ($E\theta$) ۱۷۶
- شکل ۶-۸: تغییرات مدول یانگ در جهت محیطی ($E\theta$) نانولوله های کربنی با قطر یکسان، نسبت به ضخامت دیواره t ۱۷۷
- شکل ۶-۹: تغییرات نسبت پواسون ($\nu\theta z$) ۱۷۷
- شکل ۶-۱۰: مقایسه تغییرات مدول یانگ در جهت محوری E نسبت به قطر..... ۱۷۸
- شکل ۶-۱۱: مقایسه تغییرات مدول یانگ در جهت محیطی ($E\theta$) نسبت به قطر..... ۱۷۹
- شکل ۶-۱۲: مقایسه تغییرات مدول برشی نسبت به قطر..... ۱۷۹
- شکل ۶-۱۳: مقایسه تغییرات نسبت پواسون ($\nu\theta z$) نانولوله های کربنی نسبت به قطر..... ۱۸۰
- شکل ۶-۱۴: نمودار تنش- کرنش برای نانولوله کربنی صندلی راحتی..... ۱۸۱
- شکل ۶-۱۵: شکل شماتیک شش گوشه ای کربن همراه با تنها ۶ پیوند کووالانس..... ۱۸۱
- شکل ۶-۱۶: شکل شماتیک شش گوشه ای کربن و اتم های کربن و ۶ پیوند کووالانس و ۶ پیوند واندروالس..... ۱۸۲
- شکل ۶-۱۷: شکل شماتیک شش گوشه ای کربن با در نظر گرفتن ۹ پیوند واندروالس بین اتم های کربن..... ۱۸۲
- شکل ۶-۱۸: مش بندی المان محدود نانولوله های کربنی تک دیواره صندلی راحتی و زیگزاگ..... ۱۸۳
- شکل ۶-۱۹: نانولوله های کربنی تک دیواره صندلی راحتی (۱۲،۱۲) و زیگزاگ (۱۴،۰) تحت تست کشش..... ۱۸۴
- شکل ۶-۲۰: کانتور تغییر شکل نانولوله های کربنی تک دیواره صندلی راحتی (۱۲،۱۲) تحت تست کشش..... ۱۸۵
- شکل ۶-۲۱: نانولوله های کربنی تک دیواره صندلی راحتی (۱۲،۱۲) تحت تست پیچش..... ۱۸۶
- شکل ۶-۲۲: کانتور تغییر شکل نانولوله های کربنی تک دیواره صندلی راحتی (۱۲،۱۲) تحت تست پیچش..... ۱۸۷
- شکل ۶-۲۳: مقایسه تغییرات مدول یانگ نانولوله تک دیواره صندلی راحتی نسبت به قطر برای هر سه مدل اجزاء محدود..... ۱۸۸
- شکل ۶-۲۴: مقایسه تغییرات مدول یانگ نانولوله تک دیواره زیگزاگ نسبت به قطر برای هر سه مدل اجزاء محدود..... ۱۸۸
- شکل ۶-۲۵: مقایسه تغییرات مدول برشی نانولوله تک دیواره صندلی راحتی نسبت به قطر برای هر سه مدل اجزاء محدود..... ۱۸۹
- شکل ۶-۲۶: مقایسه تغییرات مدول برشی نانولوله تک دیواره زیگزاگ نسبت به قطر برای هر سه مدل اجزاء محدود..... ۱۹۰
- شکل ۶-۲۷: مقایسه تغییرات نسبت پواسون نانولوله تک دیواره نسبت به قطر برای هر سه مدل اجزاء محدود..... ۱۹۰
- شکل ۶-۲۸: مدل اجزاء محدود نانولوله تک دیواره (۱۲و۱۲) بعد از تست کشش..... ۱۹۱
- شکل ۶-۲۹: مدل اجزاء محدود نانولوله تک دیواره (۱۲و۱۲) بعد از تست پیچش..... ۱۹۲

- شکل ۳۰-۶: شماتیک سه شکل نانولوله: مدل مولکولی، مدل ساختاری، و مدل معادل پیوسته ۱۹۳
- شکل ۳۱-۶: فاصله بین لایه های ورق گرافیتی ۱۹۳
- شکل ۳۲-۶: مقایسه مدول یانگ برای نانولوله کربنی (۸،۸) در ضخامت های مختلف با نتایج موجود در مراجع ۱۹۵
- شکل ۳۳-۶: پارامترهای هندسی ورق گرافیتی ۱۹۶
- شکل ۳۴-۶: شکل شماتیک حلقه کربن شش گوشه ای به عنوان المان پایه صفحه گرافیتی ۱۹۷
- شکل ۳۵-۶: مقایسه تغییرات مدول یانگ صفحه گرافیتی تک دیواره صندلی راحتی نسبت n, t ۱۹۸
- شکل ۳۶-۶: مقایسه تغییرات مدول یانگ صفحه گرافیتی تک دیواره زیگزاگ نسبت n, t ۱۹۸
- شکل ۳۷-۶: مقایسه تغییرات مدول برشی صفحه گرافیتی تک دیواره صندلی راحتی نسبت n, t ۱۹۹
- شکل ۳۸-۶: مقایسه تغییرات مدول برشی صفحه گرافیتی تک دیواره زیگزاگ نسبت n, t ۱۹۹
- شکل ۳۹-۶: مقایسه تغییرات نسبت پواسون صفحه گرافیتی تک دیواره صندلی راحتی نسبت n ۲۰۰
- شکل ۴۰-۶: مقایسه تغییرات نسبت پواسون صفحه گرافیتی تک دیواره زیگزاگ نسبت n ۲۰۰