



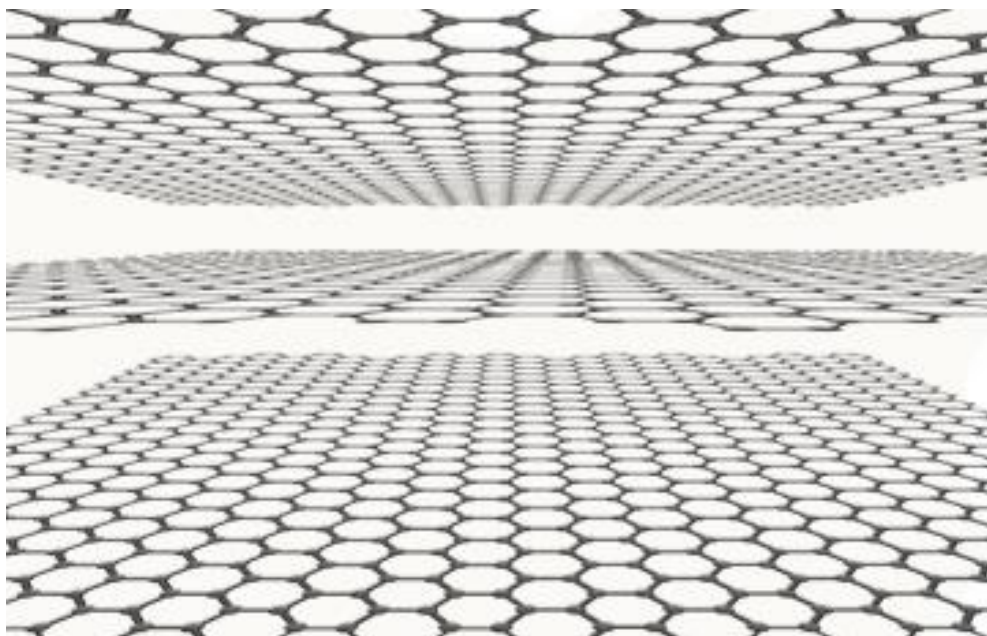
ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ  
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΔΠΜΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ

ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΣΧΟΛΗ ΠΟΛΙΤΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΣΤΑΤΙΚΗΣ ΚΑΙ ΑΝΤΙΣΕΙΣΜΙΚΩΝ ΕΡΕΥΝΩΝ

ΜΕΛΕΤΗ ΤΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΚΑΙ ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΩΝ  
ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΤΟΥ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ ΜΕ ΤΗΝ ΜΕΘΟΔΟ ΤΩΝ  
ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ



ΕΚΠΟΝΗΣΗ: ΠΑΠΑΜΙΧΑΗΛ ΣΤΕΦΑΝΟΣ

ΑΡΙΘΜΟΣ ΜΗΤΡΩΟΥ: 52114013

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ: ΠΑΠΑΔΟΠΟΥΛΟΣ ΒΗΣΣΑΡΙΩΝ



Ευχαριστίες,

Ευχαριστώ τον Επίκουρο καθηγητή κ. Βησσαρίωνα Παπαδόπουλο για την καθοδήγηση και την εμπιστοσύνη που μου επέδειξε. Καθώς και την οικογένεια μου και τους φίλους μου που είναι συνέχεια δίπλα μου και με στηρίζουν.

# ΜΕΛΕΤΗ ΤΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΚΑΙ ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΩΝ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΤΟΥ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ ΜΕ ΤΗΝ ΜΕΘΟΔΟ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ

ΠΑΠΑΜΙΧΑΗΛ ΣΤΕΦΑΝΟΣ

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ: ΒΗΣΣΑΡΙΩΝ ΠΑΠΑΔΟΠΟΥΛΟΣ

ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΣΤΑΤΙΚΗΣ ΚΑΙ ΑΝΤΙΣΕΙΣΜΙΚΩΝ ΕΡΕΥΝΩΝ ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΕΙΟ  
ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟΥΠΟΛΗ ΖΩΓΡΑΦΟΥ, ΑΘΗΝΑ, 15780, ΕΛΛΑΔΑ

[steve\\_thespro@yahoo.gr](mailto:steve_thespro@yahoo.gr)

## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η μελέτη των μηχανικών και θερμοδυναμικών ιδιοτήτων του γραφενίου με την χρήση πεπερασμένων στοιχείων. Και πιο συγκεκριμένα με την χρήση πεπερασμένων στοιχείων χωρικού πλαισίου που χρησιμοποιούνται ευρέως στην μηχανική των κατασκευών. Στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μια σύντομη εισαγωγή για το τι είναι το γραφένιο και τι το κάνει τόσο ξεχωριστό ώστε να αξίζει να το μελετήσει κάποιος. Στο δεύτερο κεφάλαιο μελετώνται οι μηχανικές του ιδιότητες. Αρχικά γίνεται μια σύντομη εισαγωγή των μεθόδων με τις οποίες μοντελοποιείται το γραφένιο. Ύστερα μια υπενθύμιση των χωρικών πλαισίων από την μηχανική των κατασκευών. Έπειτα γίνεται η συσχέτιση μεταξύ της μοριακής μηχανικής και της μηχανικής των κατασκευών, δηλαδή με ποιον τρόπο προσομοιάζεται το μοντέλο γραφενίου με τα πεπερασμένα στοιχεία χωρικού πλαισίου. Μετά παρουσιάζεται αναλυτικά πως έγινε η κατασκευή του μοντέλου στο *Ansys Mechanical Apdl* ταυτόχρονα με την βοήθεια του *Matlab*. Και στο τέλος του δεύτερου κεφαλαίου ακολουθούν τα αποτελέσματα που μας δείχνουν ουσιαστικά τις μηχανικές ιδιότητες του γραφενίου. Στο τρίτο κεφάλαιο μελετώνται οι θερμοδυναμικές ιδιότητες του υλικού. Στην αρχή γίνεται μια σύντομη εισαγωγή όσο αναφορά κάποια θερμοδυναμικά μεγέθη και στην συνέχεια παρουσιάζεται η μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε και τέλος τα αποτελέσματα της μεθόδου και κάποια χρησιμα συμπεράσμα που προέκυψαν. Για την επίλυση των προβλημάτων των πεπερασμένων στοιχείων χρησιμοποιήθηκε το εμπορικό πρόγραμμα *Ansys Mechanical Apdl* και για την κατασκευή της γεωμετρίας των κόμβων το εμπορικό πρόγραμμα *Matlab*.

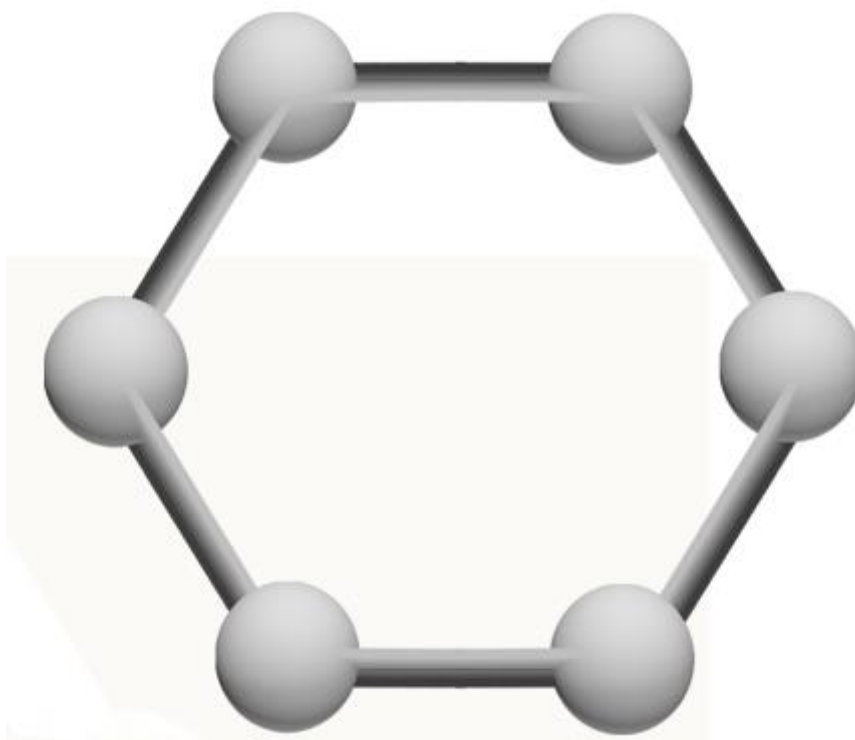
## ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΟ ΓΡΑΦΕΝΙΟ ΤΙΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΟΥ ΚΑΙ ΠΙΘΑΝΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ.....	3
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ ΜΕ ΤΗΝ ΧΡΗΣΗ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ ΚΑΙ ΜΕΛΕΤΗ ΤΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΤΟΥ ΥΛΙΚΟΥ.....	5
2.1 Εισαγωγή .....	5
2.2 Η προσέγγιση της μηχανικής των κατασκευών όσο αναφορά το γραφένιο .....	6
2.4 Η σύνδεση μεταξύ των παραμέτρων δυσκαμψίας και των σταθερών των δυναμικών πεδίων.....	8
2.5 Υπολογισμός του μέτρου ελαστικότητας του γραφενίου.....	10
2.6 Κατασκευή του μοντέλου γραφενίου .....	11
2.7 Αποτελέσματα της μεθόδου.....	16
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΟΥ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ .....	27
3.1 Εισαγωγή στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του γραφενίου .....	27
3.2 Ειδική θερμότητα $C_v$ , η θερμοκρασία $T$ και η σύνδεση τους με τις ιδιοσυχνότητες του υλικού .....	28
3.3 Προσομοίωση των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων του γραφενίου με πεπερασμένα στοιχεία .....	29
3.4 Αποτελέσματα της μεθόδου.....	32
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ .....	43



## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΟ ΓΡΑΦΕΝΙΟ ΤΙΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΟΥ ΚΑΙ ΠΙΘΑΝΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

Το γραφένιο [1] είναι ένα εξαγωνικό πλέγμα άνθρακα. Εικ. 1 πάχους ενός ατόμου, η θεωρεία όσο αναφορά το υλικό υπήρχε εδώ και αρκετά χρόνια όμως το 2004 κατάφεραν την γνώση που προουπήρχε από την φυσική και την χημεία τόσο καιρό να την κάνουν να εξελιχθεί. Το 2004 δυο επιστήμονες ο *Andre Geim* και *Konstantin Novoselov* οι οποίοι το 2004 βραβεύτηκαν και οι δυο τους με το βραβείο *Nobel* κατάφεραν χρησιμοποιώντας σελοτέιπ και γραφίτη από μολύβι να οδηγήσουν στην παραγωγή του υλικού.

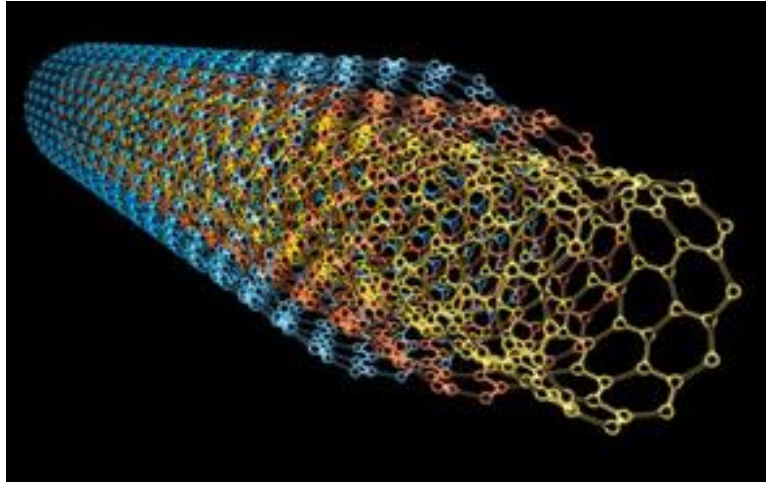


Εικόνα 1: Εξαγωνικό πλέγμα γραφενίου

Από την ανακάλυψη του και μετά η έρευνα για το γραφένιο έχει εκτοξευτεί. Είναι είτε κύριο είτε δευτερεύον θέμα σε πάνω από 100000 ακαδημαϊκές εργασίες και από το 2012 πάνω από 2000 διπλώματα ευρεσιτεχνίας έχουν χορηγηθεί.

Η προσοχή που έχει συγκεντρώσει η έρευνα πάνω στο γραφένιο είναι πάρα πολύ μεγάλη κάτι αντίστοιχο έχει μόνο άλλη μια φορά παλιότερα και αυτό αφορούσε ένα άλλο υλικό το πυρίτιο.

Το γραφένιο είναι απίστευτα ισχυρό (το πιο ισχυρό υλικό που έχει μετρηθεί ποτέ), απίστευτα ελαφρύ και ηλεκτρικά υπεραγώγιμο. Κάποιες από αυτές του τις ιδιότητες μελετώνται και στην παρούσα εργασία. Αυτά του τα χαρακτηριστικά το καθιστούν κύριο συστατικό για τις εφαρμογές τεχνολογίας της επόμενης γενιάς στα κυκλώματα των smartphones και των υπολογιστών. Εικ. 2.



Εικ. 2: Τυλιγμένο πλέγμα γραφενίου , δηλαδή νανοσωλήνες άνθρακα με εφαρμογές σε *microchip* υπολογιστών



## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΟΥ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ ΜΕ ΤΗΝ ΧΡΗΣΗ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ ΚΑΙ ΜΕΛΕΤΗ ΤΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΤΟΥ ΥΛΙΚΟΥ

### 2.1 Εισαγωγή

Η προσομοίωση των μοντέλων νανοτεχνολογίας όπως είναι οι νανοσωλήνες άνθρακα και το γραφένιο γίνεται με δύο τρόπους. Ο πρώτος είναι με την μέθοδο του *molecular dynamics (MD)* [2],[3]. Κάθε πρόβλημα που συνδέεται με την κίνηση των μορίων και των ατόμων μπορεί να προσομοιωθεί με αυτή την μέθοδο μοντελοποίησης. Ωστόσο λόγω των πολύ υψηλών υπολογιστικών απαιτήσεων πρακτικές εφαρμογές αυτών των μεθόδων μοντελοποίησης περιορίζονται μόνο σε συστήματα που περιλαμβάνουν μικρό αριθμό ατόμων ή μορίων και σε μοντέλα με μικρή διάρκεια ζωής από *ps* έως *ns*.

Η άλλη προσέγγιση είναι η μοντελοποίηση της συνεχούς μηχανικής. Κάποιοι ερευνητές κατέφυγαν στην κλασική μηχανική του συνεχούς μέσου για να μοντελοποιήσουν τους νανοσωλήνες άνθρακα. Για παράδειγμα ο *Tersoff* [4] έκανε απλούς υπολογισμούς της ενέργειας βασιζόμενος στην παραμόρφωση ενός απλού μοντέλου γραφίτη, αντιμετωπίζοντας το ως ένα ελαστικό συνεχές και κατέληξε ότι οι ελαστικές ιδιότητες ενός φύλλου γραφίτη μπορούν να προβλεφθούν μέσω της ελαστικής ενέργειας παραμόρφωσης των νανοσωλήνων.

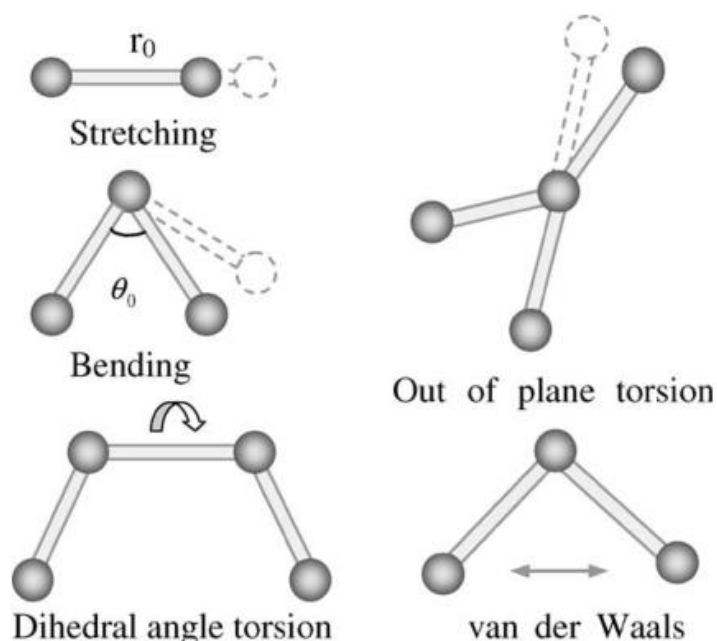
Η απαίτηση που υπήρχε είναι η ανάπτυξη μιας μεθόδου μοντελοποίησης η οποία θα αναλύει την μηχανική απόκριση στην ατομική κλίμακα αλλά δεν θα μπερδεύει τα πράγματα στις χρονικές κλίμακες. Μια τέτοια απαίτηση θα βοηθούσε και στον σχεδιασμό νανοσυσκευών και στην προσομοίωση με την μέθοδο πολλαπλών κλιμάκων των νανοσυστημάτων [5]. Με βάση το άρθρο των *C.Li, T. – W.Chou* [6] αναλύεται μια μέθοδος που επεκτείνει την μέθοδο της κλασικής μηχανικής του στερεού στην μοντελοποίηση των νανοσωλήνων άνθρακα. Η ιδέα του άρθρου στηρίζεται στο ότι νανοσωλήνες άνθρακα μπορούν να θεωρηθούν σαν επιμήκη *fullereness* τα οποία πήραν την ονομασία τους από τον διάσημο για τον σχεδιασμό γεωδαιτικών θόλων *R. Buckminster Fuller*. Στην πραγματικότητα είναι εμφανές ότι υπάρχουν ομοιότητες μεταξύ του μοριακού μοντέλου του νανοσωλήνα και της κατασκευής ενός πλαισίου κτηρίου. Σε ένα νανοσωλήνα άνθρακα τα άτομα είναι συνδεδεμένα με ομοιοπολικούς δεσμούς. Αυτοί οι δεσμοί έχουν χαρακτηριστικό μήκος και γωνίες στο τρισδιάστατο χώρο. Έτσι είναι λογικό να προσομοιάσουμε την παραμόρφωση ενός νανοσωλήνα με την κλασική μηχανική των κατασκευών.

## 2.2 Η προσέγγιση της μηχανικής των κατασκευών όσο αναφορά το γραφένιο

Από την πλευρά των κατασκευαστικών χαρακτηριστικών του γραφενίου, είναι λογικό να περιμένει κανείς ότι θα υπάρχουν σχέσεις που θα συνδέουν τις παραμορφώσεις του γραφενίου με τις κατασκευές τύπου πλαισίου. Για τον μακροσκοπικό χώρο οι κατασκευές των πλαισίων είναι από μηχανικά υλικά και οι ιδιότητες του υλικού και οι παράμετροι του στοιχείου μπορούν εύκολα να βρεθούν από τα δεδομένα του υλικού και από τους υπολογισμούς των διαστάσεων του στοιχείου. Για το γραφένιο δεν υπάρχουν πληροφορίες σχετικά με την ελαστικότητα του, τις ιδιότητες του υλικού και της γεωμετρίας του. Έτσι κρίνεται απαραίτητο να υπάρξει ένας σύνδεσμος μεταξύ της μικροσκοπικής υπολογιστικής χημείας και της μακροσκοπικής μηχανικής των κατασκευών.

## 2.3 Οι συναρτήσεις δυναμικού της μοριακής μηχανικής

Από την πλευρά της μοριακής μηχανικής, ένα κομμάτι γραφενίου ή ένας νανοσωλήνας άνθρακα μπορεί να θεωρηθεί ως ένα μεγάλο μόριο αποτελούμενο από άτομα άνθρακα. Τα νουκλεόνια μπορούν να θεωρηθούν ως σημεία του υλικού. Οι κινήσεις τους καθορίζονται από ένα πεδίο δυναμικού, το οποίο δημιουργείται από τις αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίων-νουκλεονίων και νουκλεονίων-νουκλεονίων [8]. Συνήθως το δυναμικό πεδίο εκφράζεται με την μορφή της ενέργειας δυναμικού. Η οποία εξαρτάται αποκλειστικά από τις σχετικές θέσεις των νουκλεονίων που αποτελούν το μόριο.



Εικόνα 4: Αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων στην μοριακή μηχανική

Το συνολικό δυναμικό ενέργειας παραλείποντας την ηλεκτροστατική αλληλεπίδραση είναι ένα άθροισμα ενεργειών λόγω του σθένος των αλληλεπιδράσεων των δεσμών και των μη δεσμών (*Rappe et al.*, 1992).

$$U = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum U_\varphi + \sum U_\omega + \sum U_{vdw} \quad (9)$$

Όπου το  $U_r$  αντιπροσωπεύει την αλληλεπίδραση του τεντώματος των δεσμών, το  $U_\theta$  την γωνία κάμψης των δεσμών, το  $U_\varphi$  για το δίδρο γωνίας στρέψης, το  $U_\omega$  για την εκτός επιπέδου στρέψη, το  $U_{vdw}$  για την αλληλεπίδραση των δεσμών *Van der Waals* όπως φαίνεται στην Εικ. 4.

Υπάρχει πλήθος αναφορών στην βιβλιογραφία της μοριακής μηχανικής που αναφέρονται στην εύρεση των συναρτησιακών μορφών αυτών των δυναμικών ενέργειας [9], [10], [11], [12]. Ως εκ τούτου, διάφορες μορφές ενέργειας μπορούν χρησιμοποιηθούν για αυτούς τους όρους ενέργειας, ανάλογα με το συγκεκριμένο υλικό και τις συνθήκες φόρτισης που θεωρούνται. Σε γενικές γραμμές για τα ομοιοπολικά συστήματα οι κύριες συνεισφορές ενέργειας προέρχονται από τους τέσσερις πρώτους όρους. Σύμφωνα με την παραδοχή των μικρών παραμορφώσεων η αρμονική προσέγγιση είναι επαρκής για την περιγραφή της ενέργειας [13]. Για λόγους απλότητας και ευκολίας έχουν υιοθετηθεί οι πιο απλές αρμονικές μορφές και έχει συγχωνευθεί το δίδρο στρέψης και η εκτός επιπέδου στρέψη σε ένα εννιαίο ισοδύναμο όρο δηλαδή:

$$U_r = \frac{1}{2} k_r (r - r_0)^2 = \frac{1}{2} k_r \Delta r^2 \quad (1)$$

$$U_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 = \frac{1}{2} k_\theta \Delta \theta^2 \quad (2)$$

$$U_\tau = U_\varphi + U_\omega = \frac{1}{2} k_\tau \Delta \varphi^2 \quad (3)$$

Όπου  $k_r$ ,  $k_\theta$ ,  $k_\tau$  είναι οι σταθερές της δύναμης εφελκυσμού, της δύναμης λυγισμού και της εκτός επιπέδου καμπτικής ροπής και αντίστοιχα  $\Delta r$ ,  $\Delta \theta$ ,  $\Delta \varphi$  είναι η μετατόπιση λόγω εφελκυσμού, η μεταβολή της γωνίας στο επίπεδο και η μεταβολή της γωνίας εκτός επιπέδου λόγω στριψίματος.

## 2.4 Η σύνδεση μεταξύ των παραμέτρων δυσκαμψίας και των σταθερών των δυναμικών πεδίων

Σε ένα νανοσωλήνα άνθρακα, τα άτομα άνθρακα είναι συνδεδεμένα με ομοιοπολικούς δεσμούς και έχουν την μορφή εξαγώνων στο τοίχωμα του σωλήνα. Αυτοί οι ομοιοπολικοί δεσμοί έχουν χαρακτηριστικό μήκος και χαρακτηριστικές γωνίες στον τρισδιάστατο χώρο. Όταν ένας νανοσωλήνας υπόκειται σε εξωτερικές δυνάμεις, οι παραμορφώσεις των ατόμων περιορίζονται από τους συγκεκριμένους δεσμούς. Η ολική παραμόρφωση του νανοσωλήνα είναι το αποτέλεσμα των αλληλεπιδράσεων των δεσμών. Θεωρώντας τους ομοιοπολικούς δεσμούς ως συνδεδετικά στοιχεία μεταξύ των ατόμων του άνθρακα, ένας νανοσωλήνας μπορεί να προσομοιωθεί σαν ένα χωρικό πλαίσιο. Τα άτομα του άνθρακα μπορούν να θεωρηθούν σαν κόμβοι που συνδέουν τα συνδεδετικά στοιχεία τους ομοιοπολικούς δεσμούς.

Στις παρακάτω παραγράφους θα καθιερωθούν οι σχέσεις μεταξύ των παραμέτρων δυσκαμψίας της μηχανικής των κατασκευών και των σταθερών των δυναμικών πεδίων που προήλθαν από την μοριακή μηχανική. Για ευκολία έγινε η υπόθεση ότι τα τμήματα μεταξύ των ατόμων άνθρακα είναι ίδια και ομοιόμορφα στρογγυλά. Έτσι μπορεί να γίνει η υπόθεση ότι  $I = I_x = I_y$  και μόνο τρεις παράμετροι δυσκαμψίας μένουν να υπολογιστούν οι  $EA, EI, GJ$ .

Επειδή η παραμόρφωση ενός χωρικού πλαισίου έχει ως αποτέλεσμα την μεταβολή στην ενέργεια παραμόρφωσης, οι τρεις παράμετροι δυσκαμψίας μπορούν να βρεθούν με βάση το ισοδύναμο ενέργειας. Παρατηρείτε ότι καθένας από τους όρους στις εξισώσεις (1), (2), (3) της μοριακής μηχανικής αντιπροσωπεύει μια συγκεκριμένη αλληλεπίδραση. Τώρα αυτό που πρέπει να γίνει είναι να θεωρηθούν οι ενέργειες παραμόρφωσης των στοιχείων υπό συγκεκριμένες αλληλεπιδράσεις. Σύμφωνα με την θεωρία της κλασικής μηχανικής των κατασκευών η ενέργεια παραμόρφωσης μιας δοκού μήκους  $L$  η οποία δέχεται αξονική δύναμη  $N$  όπως φαίνεται στην Εικ. 5α είναι:

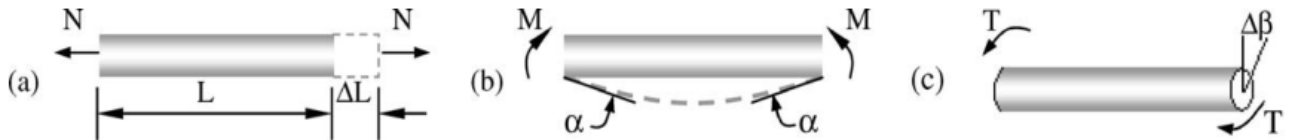
$$U_A = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = \frac{1}{2} \frac{N^2 L}{EA} = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} \Delta L^2 \quad (4)$$

Όπου  $\Delta L$  είναι η αξονική μετατόπιση που προκύπτει από τον εφελκυσμό. Η ενέργεια παραμόρφωσης της δοκού λόγω της ροπής που προκύπτει από τον λυγισμό βλέπε Εικ. 5β.

$$U_M = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = \frac{2EI}{L} \alpha^2 = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (2\alpha)^2 \quad (5)$$

Όπου το  $\alpha$  δηλώνει την γωνία περιστροφής στο τέλος της δοκού. Η ενέργεια παραμόρφωσης λόγω της στρεπτικής ροπής.

$$U_T = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{1}{2} \frac{T^2 L}{GJ} = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\Delta\beta)^2 \quad (6)$$



Εικόνα 5: Εφελκυσμός, λυγισμός και στρέψη του στοιχείου

Όπου  $\beta$  είναι η σχετική στροφή.

Όπως φαίνεται από τις εξισώσεις (1) έως (4) το  $U_r$  και το  $U_A$  εκφράζουν και τα δύο την ενέργεια εφελκυσμού, τα  $U_\theta$  και τα  $U_M$  εκφράζουν την ενέργεια λυγισμού και τα  $U_\tau$  και τα  $U_T$  την ενέργεια λόγω ροπής. Είναι λογικό να υποθέσει κανείς ότι η γωνία  $2\alpha$  είναι ίση με την μετατόπιση της γωνίας του δεσμού  $\Delta\theta$ , το  $\Delta L$  είναι ίσο με το  $\Delta r$  και το  $\Delta\varphi$  είναι ίσο με το  $\Delta\beta$ . Έτσι συγκρίνοντας τις εξισώσεις (1) έως (3) με τις εξισώσεις (4) έως (6) προκύπτει μια απευθείας σχέση μεταξύ των παραμέτρων της μηχανικής των κατασκευών  $EA, EI$  και  $GJ$  και των παραμέτρων της μοριακής μηχανικής  $k_r, k_\theta, k_\tau$  και έτσι προκύπτουν οι ακόλουθες σχέσεις:

$$\frac{EA}{L} = k_r, \frac{EI}{L} = k_\theta, \frac{GJ}{L} = k_\tau \quad (7)$$

Η εξίσωση (7) αποτελεί στην ουσία την βασική σχέση για την εφαρμογή της μηχανικής των κατασκευών στην μοντελοποίηση των νανοσωλήνων άνθρακα και του γραφενίου και άλλων συναφών κατασκευών. Εφόσον είναι γνωστές οι σταθερές των δυνάμεων  $k_r, k_\theta$  και  $k_\tau$  οι παράμετροι των μηχανικών κατασκευής  $EA, EI$  και  $GJ$  μπορούν εύκολα να υπολογιστούν. Και ύστερα με την μέθοδο επίλυσης του μητρώου δυσκαμψίας για χωρικά πλαίσια, η παραμόρφωση και η σχετική ελαστική συμπεριφορά των πλαισίων γραφενίου και των νανοσωλήνων άνθρακα σε ατομικό επίπεδο μπορούν να προσομοιωθούν.

## 2.5 Υπολογισμός του μέτρου ελαστικότητας του γραφενίου

Προκειμένου να διαπιστωθεί και να πιστοποιηθεί η αποτελεσματικότητα της μεθόδου της μηχανικής των κατασκευών στους νανοσωλήνες άνθρακα θα γίνει εφαρμογή της πρώτα σε φύλλα γραφενίου. Για τους υπολογισμούς θεωρείται ως αρχικό μήκος μεταξύ των δεσμών άνθρακα  $L = 1.421 \text{ \AA}$  [14]. Τα υπολογιστικά αποτελέσματα που θα προκύψουν θα συγκριθούν με τα λιγιστά αποτελέσματα που υπάρχουν από θεωρητικά και πειραματικά δεδομένα.

Όπως δηλώθηκε και νωρίτερα ένας νανοσωλήνας άνθρακα μπορεί να θεωρηθεί σαν ένα πλέγμα γραφενίου το οποίο έχει τυλιχθεί και έχει την μορφή ενός σωλήνα. Για αυτό θα υπολογιστεί το μέτρο ελαστικότητας του γραφενίου. Για να βρεθεί η αποτελεσματικότητα της παρούσας μεθόδου. Αναμένεται αυτοί οι υπολογισμοί να δώσουν χρήσιμες πληροφορίες όσο αναφορά την επιλογή των σταθερών του δυναμικού πεδίου.

Το μέτρο ελαστικότητας ενός υλικού είναι το πηλίκο της τάσης προς την παραμόρφωση

$$Y = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{F/A_0}{\Delta H/H_0} \quad (8)$$

Όπου  $F$  είναι η δύναμη που ασκείται στα άτομα στο τέλος του πλέγματος,

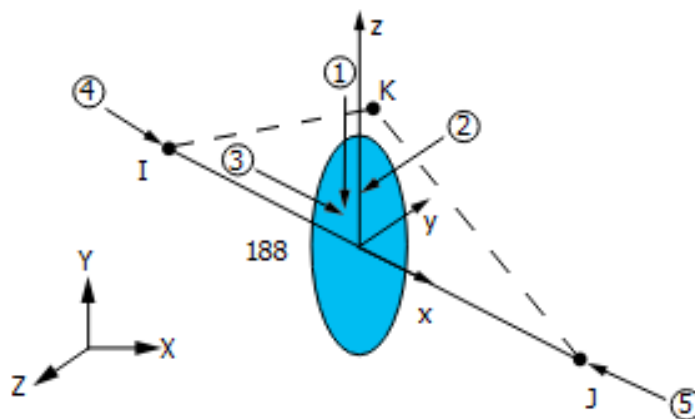
$$A_0 = Wt \quad (9)$$

Όπου  $A_0$  είναι το εμβαδόν του πλέγματος στην πλευρά που ασκείται η δύναμη, με  $W$  το πλάτος του πλέγματος και  $t$  το πάχος του πλέγματος,  $H_0$  το αρχικό μήκος και  $\Delta H$  είναι η μετατόπιση.

## 2.6 Κατασκευή του μοντέλου γραφενίου

Τα μοντέλα γραφενίου πάνω στα οποία έγιναν οι υπολογισμοί κατασκευάστηκαν με τον εξής τρόπο. Πρώτα φτιάχτηκε ο κώδικας με τις θέσεις των κόμβων του πλέγματος τους στο πρόγραμμα Matlab και ύστερα αυτές οι θέσεις των κόμβων πέρασαν στο υπολογιστικό πρόγραμμα Ansys Mechanical Apdl όπου μέσω του γραφικού περιβάλλον του προγράμματος έγινε η επιλογή των πεπερασμένων στοιχείων, των ιδιοτήτων του υλικού και στην συνέχεια η επίλυση και η εξαγωγή των αποτελεσμάτων της μεθόδου. Να σημειωθεί ότι κάθε κόμβος εκφράζει ένα άτομο άνθρακα και κάθε πεπερασμένο στοιχείο τους ομοιοπολικούς δεσμούς που συνδέουν τα άτομα άνθρακα μεταξύ τους. Επίσης μπορεί κανείς να παρατηρήσει πως ο κώδικας λειτουργεί. Καθώς με το που φτιάξει τον τελευταίο κόμβο δεξιά σύμφωνα με τις διαστάσεις που του έχουν δωθεί, πηγαίνει και φτιάχνει τον πρώτο κόμβο από την αριστερή πλευρά κατεβαίνοντας κατά  $L = 0,1421 \text{ nm}$ .

Ύστερα οι θέσεις των κόμβων περάστηκαν με ένα αρχείο .txt στο υπολογιστικό πρόγραμμα Ansys Mechanical Apdl όπου με γραφικό τρόπο έγινε η ένωση των κόμβων με γραμμικά πεπερασμένα στοιχεία. Όσο αναφορά τα πεπερασμένα στοιχεία που χρησιμοποιήθηκαν ήταν BEAM188. Το οποίο έχει 6 ή 7 βαθμούς ελευθερίας σε κάθε κόμβο. Αυτοί περιλαμβάνουν μετατοπίσεις κατά τις x,y και z διευθύνσεις και περιστροφές επίσης κατά τις x,y και z κατευθύνσεις ο έβδομος βαθμός ελευθερίας είναι κατόπιν επιλογής και αφορά την περίπτωση της στρέβλωσης και στην συγκεκριμένη περίπτωση δεν χρειάστηκε. Το συγκεκριμένο πεπερασμένο στοιχείο βρίσκει πολύ καλή εφαρμογή σε περιπτώσεις όπου υπάρχει μεγάλη γραμμική και μη γραμμική μετατόπιση ή περιστροφή ή παραμόρφωση.



Εικόνα 6: Το πεπερασμένο στοιχείο BEAM188 του Ansys Mechanical Apdl που χρησιμοποιήθηκε

Το πεπερασμένο στοιχείο BEAM188 βασίζεται στην θεωρία για την δοκό Timoshenko όπου είναι η πρώτη τάξης θεωρία διατμητικής παραμόρφωσης που λέει ότι η

εγκάρσια διάτμηση παραμένει σταθερή κατα μήκος της επιφάνειας διατομής της δοκού.

Το πεπερασμένο στοιχείο BEAM188 υποστηρίζει την ελαστική σχέση ανάμεσα στις διατμητικές τάσεις και διατμητικές παραμορφώσεις. Το BEAM188 δεν χρησιμοποιεί υψηλότερης τάξης θεωρίες για τις διατμητικές τάσεις. Σε τέτοιες περιπτώσεις πρέπει να χρησιμοποιούνται πεπερασμένα στοιχεία τύπου solid.

Το BEAM188 υποστηρίζει την περιορισμένη στρέβλωση κάνοντας διαθέσιμο τον 7 βαθμό ελευθερίας σε κάθε κόμβο. Αν αφήσει κανείς τις παραμέτρους ως έχουν η στρέβλωση σε κάθε κόμβο θεωρείται πολύ μικρή και μπορεί να αμεληθεί χρησιμοποιώντας 6 βαθμούς ελευθερίας βλέπε Εικ. 6 σε κάθε κόμβο  $U_x, U_y, U_z, R_x, R_y, R_z$ .

Όσο αναφορά την εύρεση των τιμών των παραμέτρων δυσκαμψίας  $EA, EI, GJ$  που απαιτούνται αυτές υπολογίστηκαν με την βοήθεια της σχέσης (16) όπου συνδέονται οι σχέσεις των παραμέτρων  $k_r, k_\theta, k_\tau$  της μοριακής μηχανικής με τις παραμέτρους δυσκαμψίας  $EA, EI, GJ$ .

Πιο συγκεκριμένα θεωρώντας ότι τα πεπερασμένα έχουν κυκλική διατομή [15] προκύπτουν οι εξής εξισώσεις:

$$d = 4 \sqrt{\frac{EI}{EA}} = 4 \sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}}, E = \frac{k_r^2 L}{4\pi k_\theta}, G = \frac{k_r^2 k_\tau L}{8\pi k_\tau^2} \quad (10)$$

Οι σταθερές των δυνάμεων πεδίου έχουν τις εξής τιμές με βάση τις αναφορές [12], [16] :

$$k_r = 938 \text{ kcal} \cdot \text{mole}^{-1} \text{Å}^{-2} = 6.52 \cdot 10^{-7} \text{ N} \cdot \text{nm}^{-1},$$

$$k_\theta = 126 \text{ kcal} \cdot \text{mole}^{-1} \cdot \text{rad}^{-2} = 8.76 \cdot 10^{-10} \text{ N} \cdot \text{nm} \cdot \text{rad}^{-2}$$

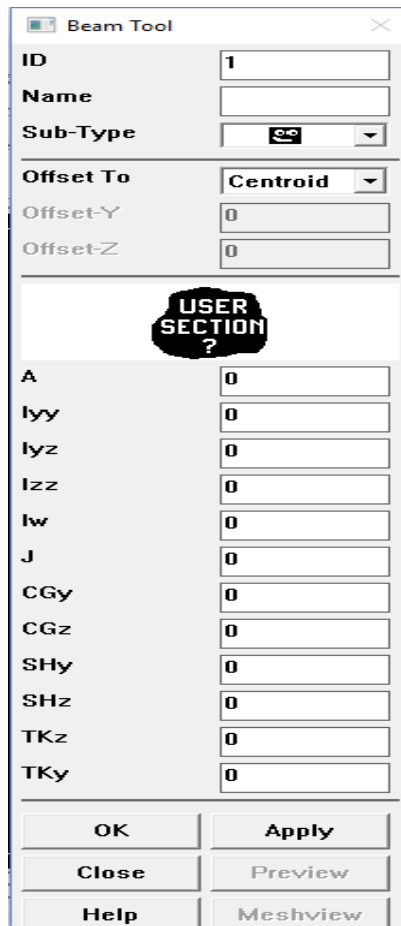
$$k_\tau = 40 \text{ kcal} \cdot \text{mole}^{-1} \cdot \text{rad}^{-2} = 2.78 \cdot 10^{-10} \text{ N} \cdot \text{nm} \cdot \text{rad}^{-2}$$

Και με  $L = 0,1421 \text{ nm}$  στις εξισώσεις (10) προκύπτουν οι τιμές των  $d = 0.147 \text{ nm}$ ,  $E = 5.49 \text{ TPa}$  και  $G = 0.871 \text{ TPa}$  και στη συνέχεια βρίσκονται οι υπόλοιπες τιμές

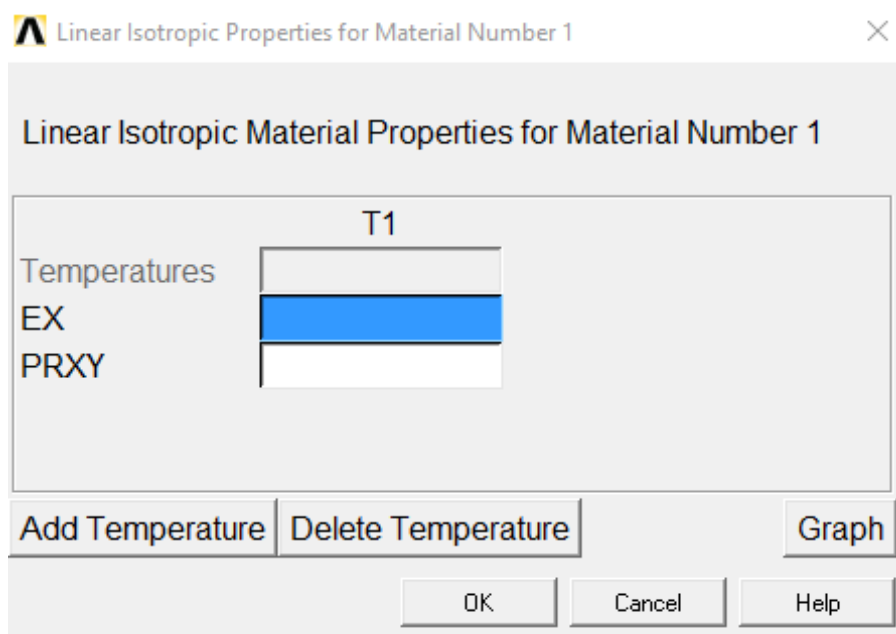
$$A = 0,1686 \cdot 10^{-19} \text{ m}^2, I = 2,265 \cdot 10^{-41} \text{ m}^4, J = 7,19 \cdot 10^{-42} \text{ m}^4$$

Ύστερα αυτά τα δεδομένα τοποθετούνται στο menu του Ansys που αναφέρεται στις ιδιότητες του πεπερασμένου στοιχείου και του υλικού όπως φαίνεται στην Εικ. 7 και την Εικ. 8.



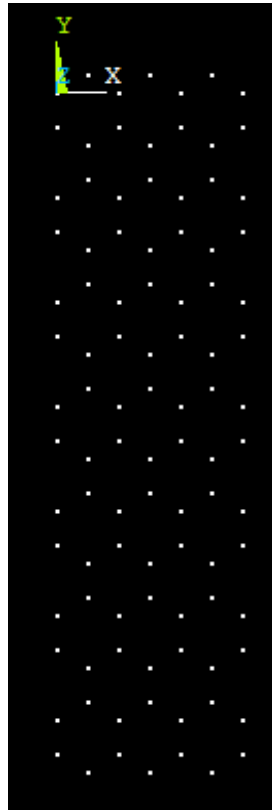


Εικόνα 7: Ιδιότητες πεπερασμένου στοιχείου στο Ansys Mechanical

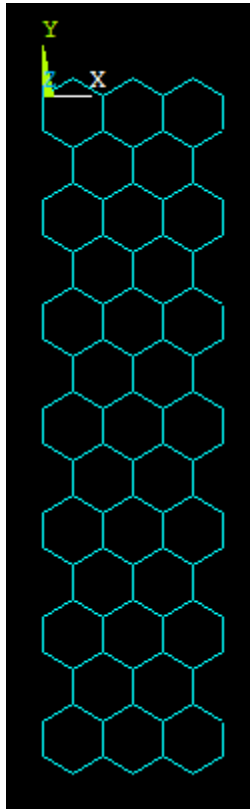


Εικόνα 8: Οι ιδιότητες του υλικού στο Ansys Mechanical

Στην συνέχεια περάστηκαν οι θέσεις των κόμβων και προστέθηκαν τα τετρασμένα στοιχεία βλέπε Εικ. 9 και Εικ. 10.



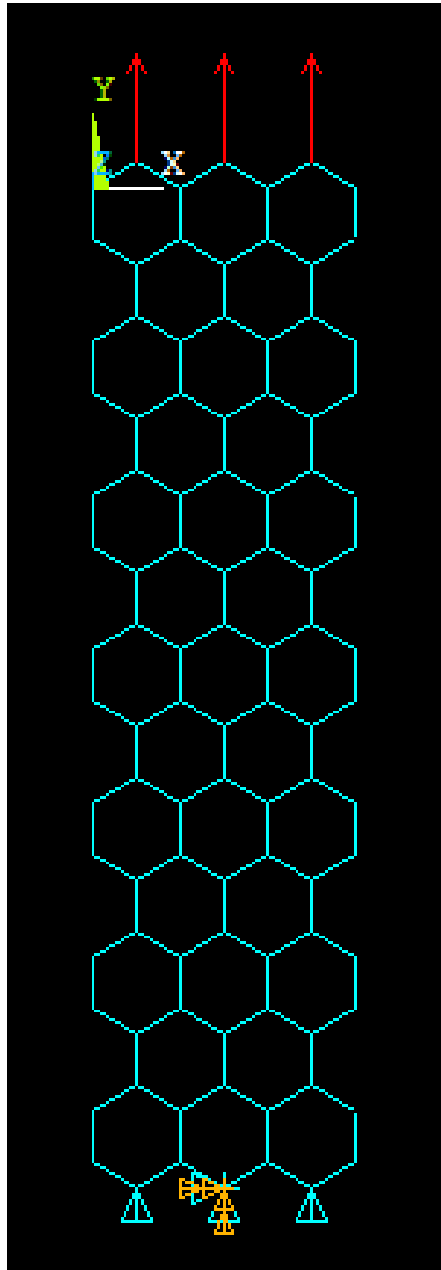
Εικόνα 9: Οι θέσεις των κόμβων όπως εμφανίζονται στο Ansys Mechanical



Εικόνα 10: Το πλέγμα του γραφενίου διαμορφωμένο στο Ansys Mechanical

## 2.7 Αποτελέσματα της μεθόδου

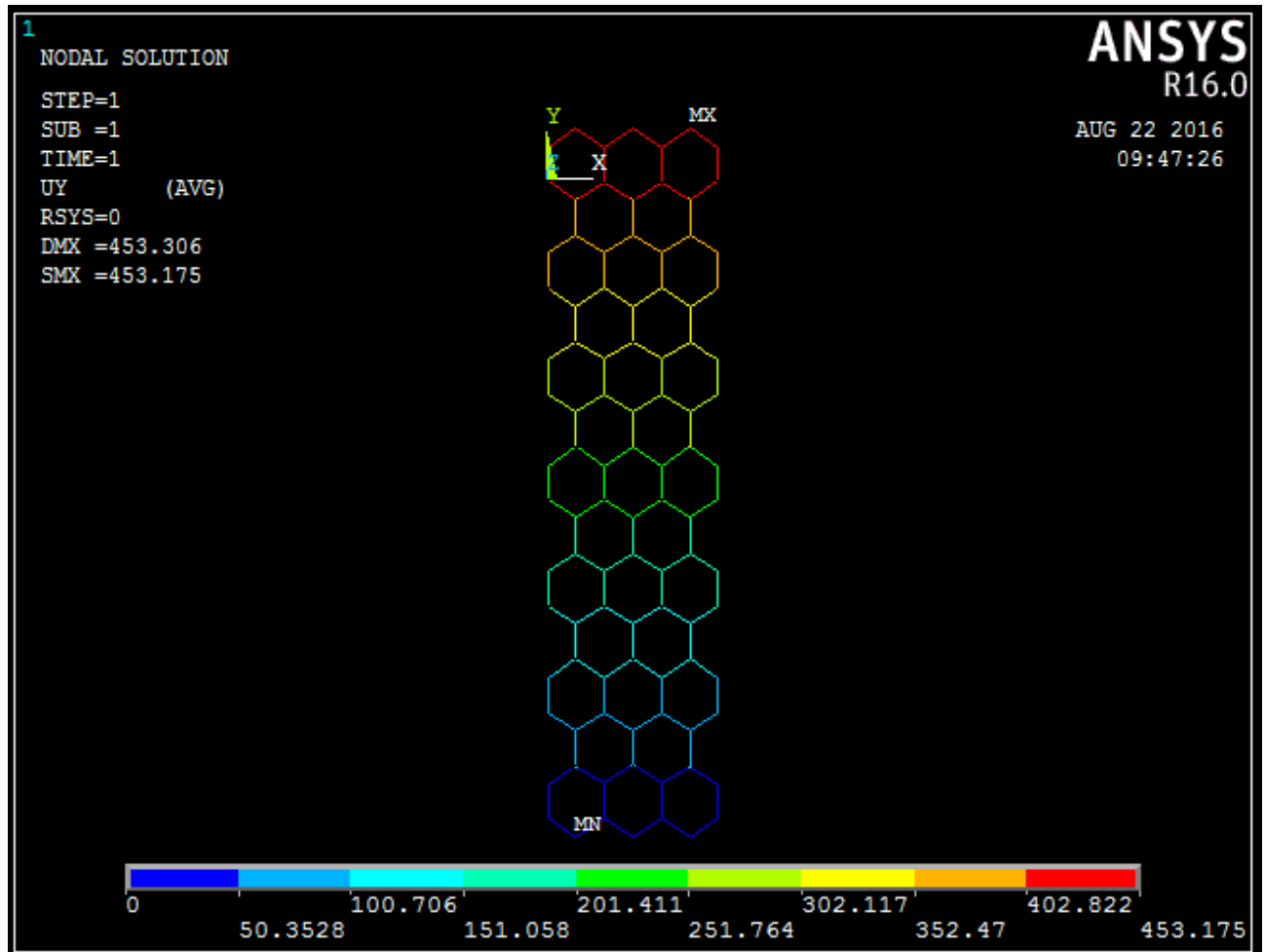
Μελετήθηκαν τέσσερα διαφορετικά σε μέγεθος κόμβων πλέγματα. Οι διαφορές που παρατηρήθηκαν όσον αφορά το μέτρο ελαστικότητας ήταν πολύ μικρές. Πιο συγκεκριμένα όσο μεγάλωνε το μέγεθος του πλέγματος υπήρχε πολύ μικρή αύξηση του μέτρου ελαστικότητας.



Εικόνα 11: Πλέγμα γραφενίου με πλάτος  $0,738 \text{ nm}$  και μήκος  $2,842 \text{ nm}$  υπόκειται σε μονοαξονικό εφελκυσμό

Στην Εικ. 11 φαίνεται ένα πλέγμα γραφενίου με πλάτος  $0,738 \text{ nm}$  και μήκος  $2,842 \text{ nm}$  υπόκειται σε μονοαξονικό εφελκυσμό. Η δύναμη σε κάθε κόμβο που του ασκείται είναι

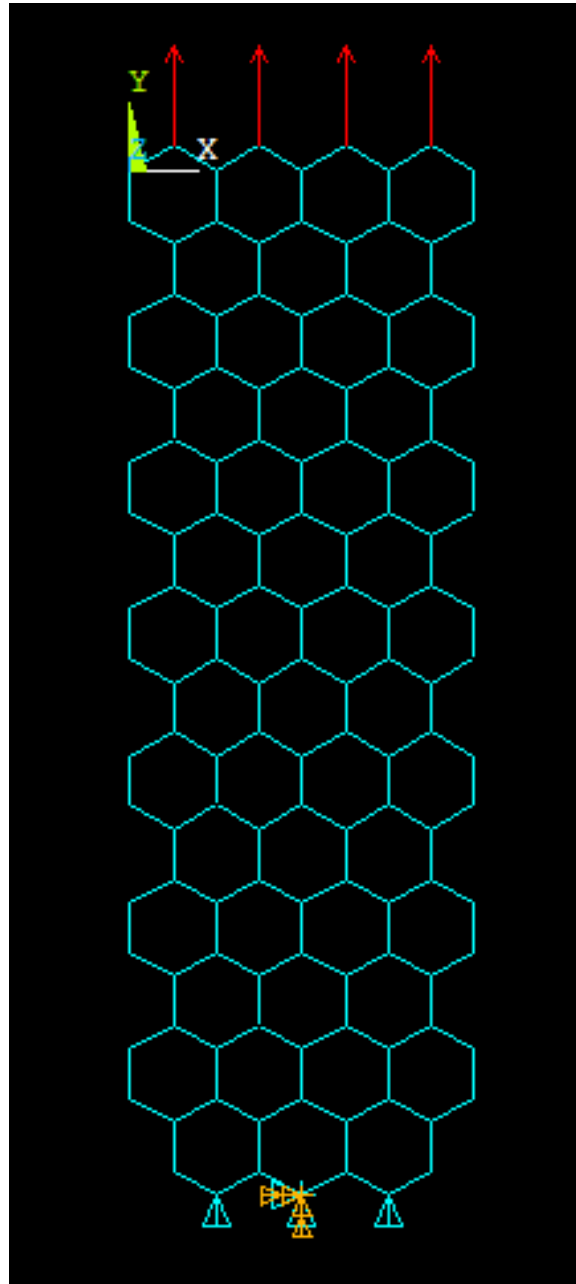
$F = 10^{-5} N$ . Στην Εικ. 12 φαίνεται η μετατόπιση ανά κόμβο κατά την διεύθυνση  $Y$  η μετατόπιση είναι εκφρασμένη σε νανόμετρα. Φαίνεται ότι τις μεγαλύτερες τιμές της μετατόπισης συναντώνται στους ακραίους κόμβους όπου ασκούνται οι δυνάμεις.



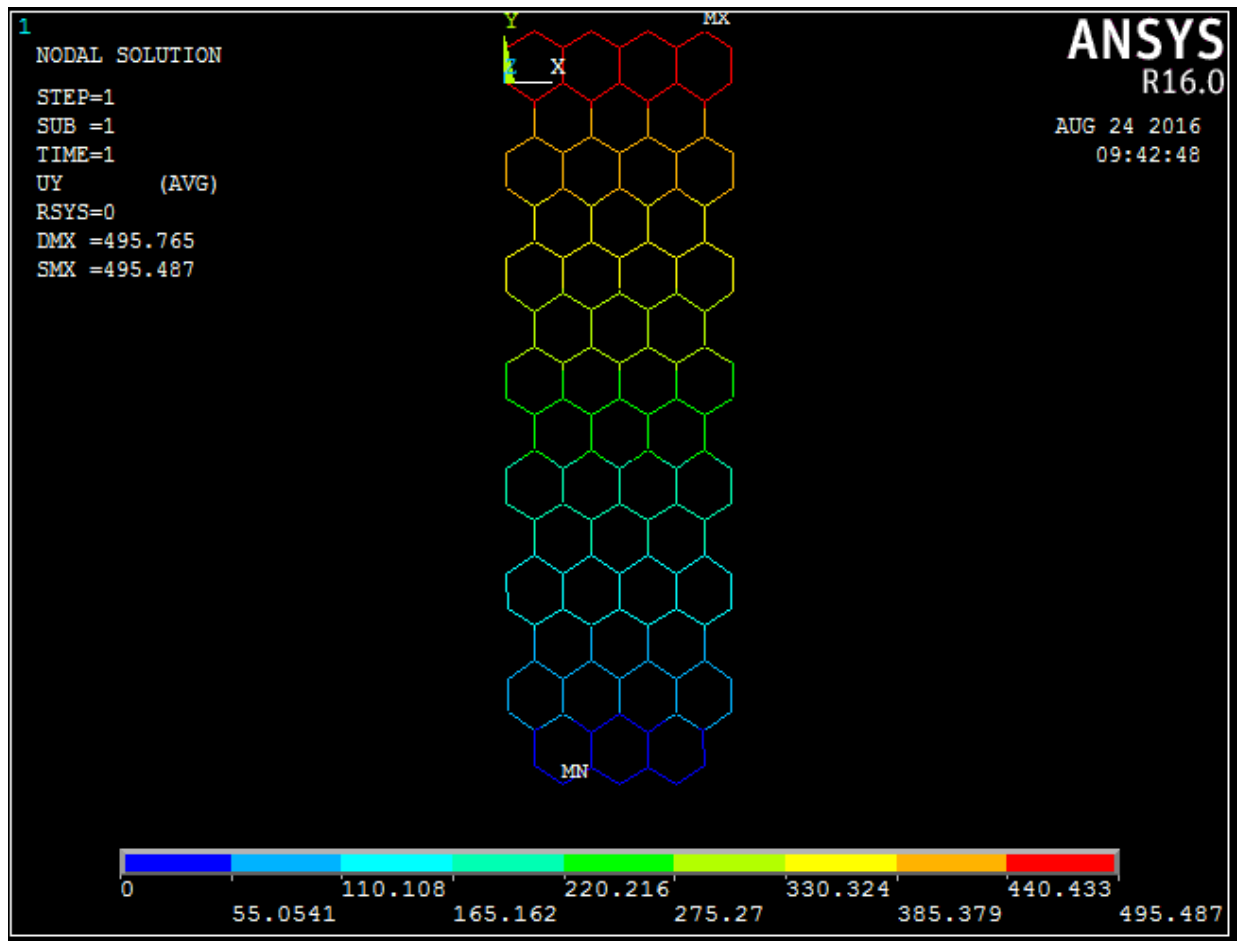
Εικόνα 12: Χρωματική αναπαράσταση των μετατοπίσεων των κόμβων κατά την διεύθυνση του άξονα  $Y$  για το πλέγμα γραφενίου με πλάτος  $0,738 \text{ nm}$  και μήκος  $2,842 \text{ nm}$

Στην Εικ.13 φαίνεται ένα πλέγμα γραφενίου με πλάτος  $0,738 \text{ nm}$  και μήκος  $3,05515 \text{ nm}$  υπόκειται σε μονοαξονικό εφελκυσμό. Η δύναμη σε κάθε κόμβο που του ασκείται είναι  $F = 10^{-5} N$ . Στην Εικ. 14 φαίνεται η μετατόπιση ανά κόμβο κατά την διεύθυνση  $Y$  η μετατόπιση είναι εκφρασμένη σε νανόμετρα. Φαίνεται ότι τις μεγαλύτερες τιμές της μετατόπισης συναντώνται στους ακραίους κόμβους όπου ασκούνται οι δυνάμεις.

$$Y = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{F/A_0}{\Delta H/H_0} = \left( \frac{3 \cdot 10^{-5}}{\frac{0.738 * t * 10^{-18}}{453.241} / \frac{2,842}{2,842}} \right) \text{ όπου } t = \text{πάχος του πλέγματος (11)}$$



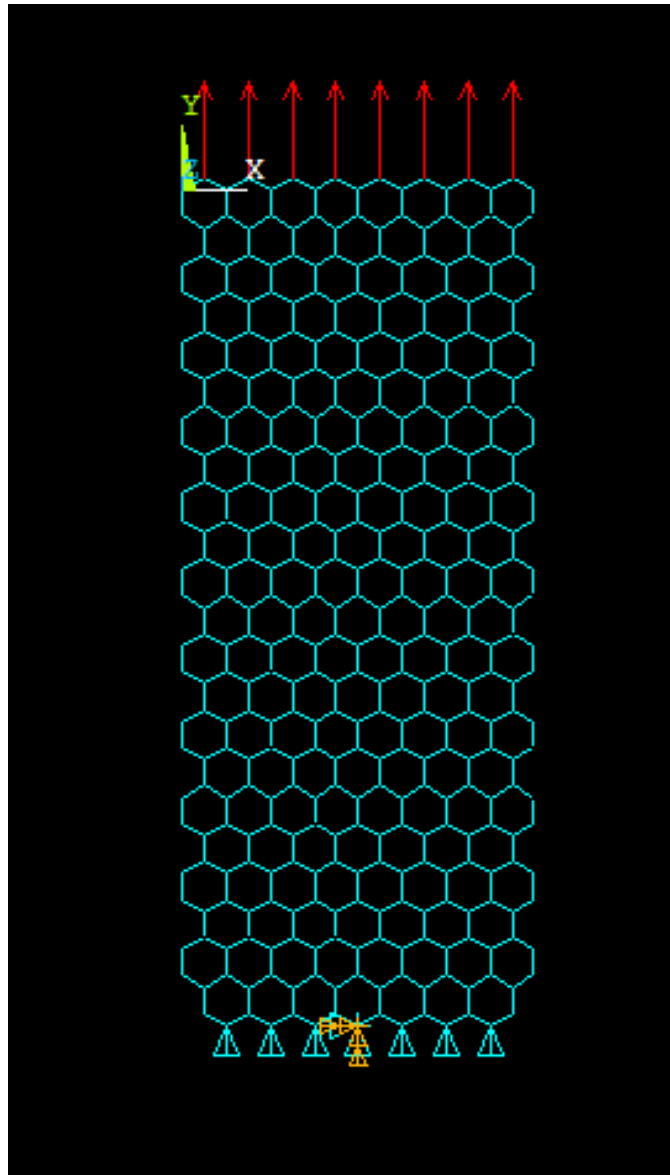
Εικόνα 13: Πλέγμα γραφενίου με πλάτος  $0,985 \text{ nm}$  και μήκος  $3,05515 \text{ nm}$  υπόκειται σε μονοαξονικό εφέλκυσμό



Εικόνα 14: Χρωματική αναπαράσταση των μετατοπίσεων των κόμβων κατά την διεύθυνση του άξονα Y για το πλέγμα γραφενίου με πλάτος  $0,985 \text{ nm}$  και μήκος  $3,05515 \text{ nm}$

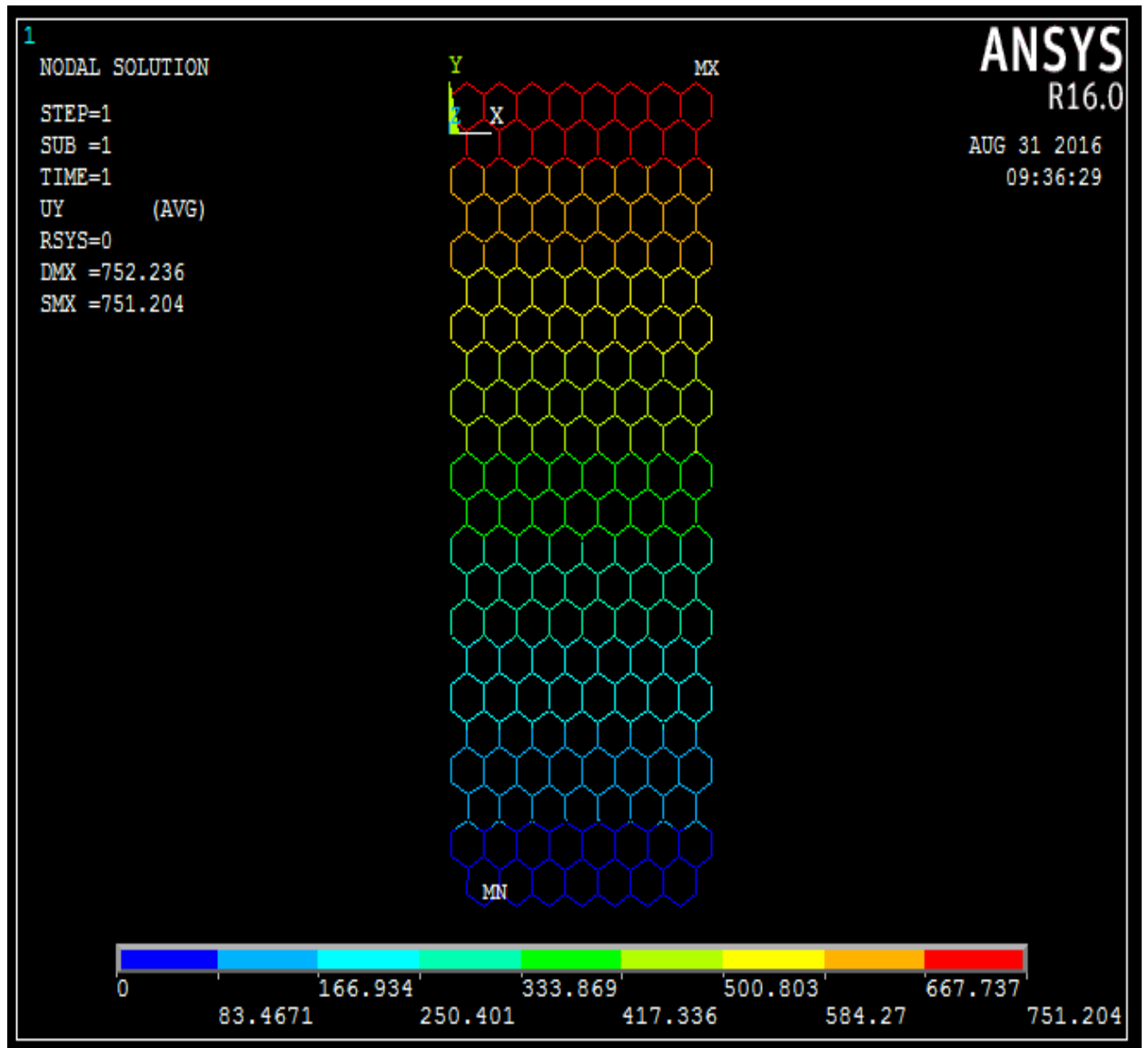
$$Y = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{F/A_0}{\Delta H/H_0} = \left( \frac{4 \cdot 10^{-5}}{\frac{0,985 * t * 10^{-18}}{495,487} \cdot \frac{495,487}{3,05515}} \right) \text{ όπου } t = \text{πάχος του πλέγματος (12)}$$

Στην Εικ.15 φαίνεται ένα πλέγμα γραφενίου με πλάτος  $1,969 \text{ nm}$  και μήκος  $4,76035 \text{ nm}$  υπόκειται σε μονοαξονικό εφελκυσμό. Η δύναμη σε κάθε κόμβο που του ασκείται είναι  $F = 10^{-5} \text{ N}$ . Στην Εικ. 16 φαίνεται η μετατόπιση ανά κόμβο κατά την διεύθυνση Y η μετατόπιση είναι εκφρασμένη σε νανόμετρα. Φαίνεται ότι τις μεγαλύτερες τιμές της μετατόπισης συναντώνται στους ακραίους κόμβους όπου ασκούνται οι δυνάμεις.



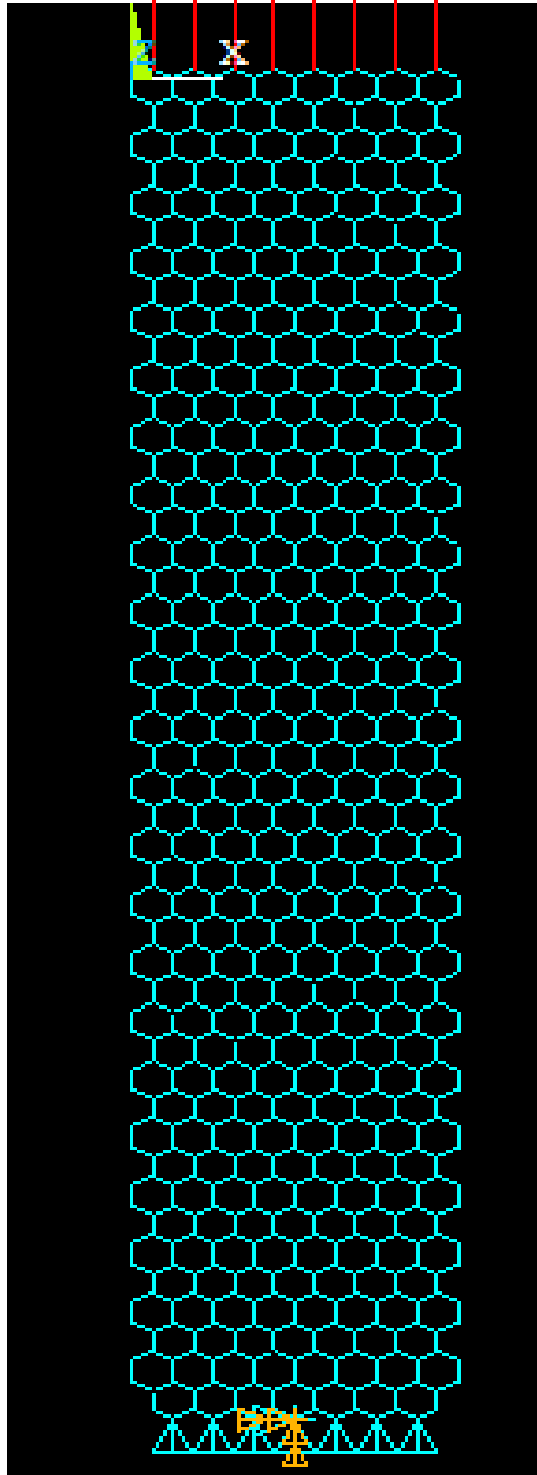
Εικόνα 15: Πλέγμα γραφενίου με πλάτος  $1,969 \text{ nm}$  και μήκος  $4,76035 \text{ nm}$  υπόκειται σε μονοαξονικό εφελκυσμό





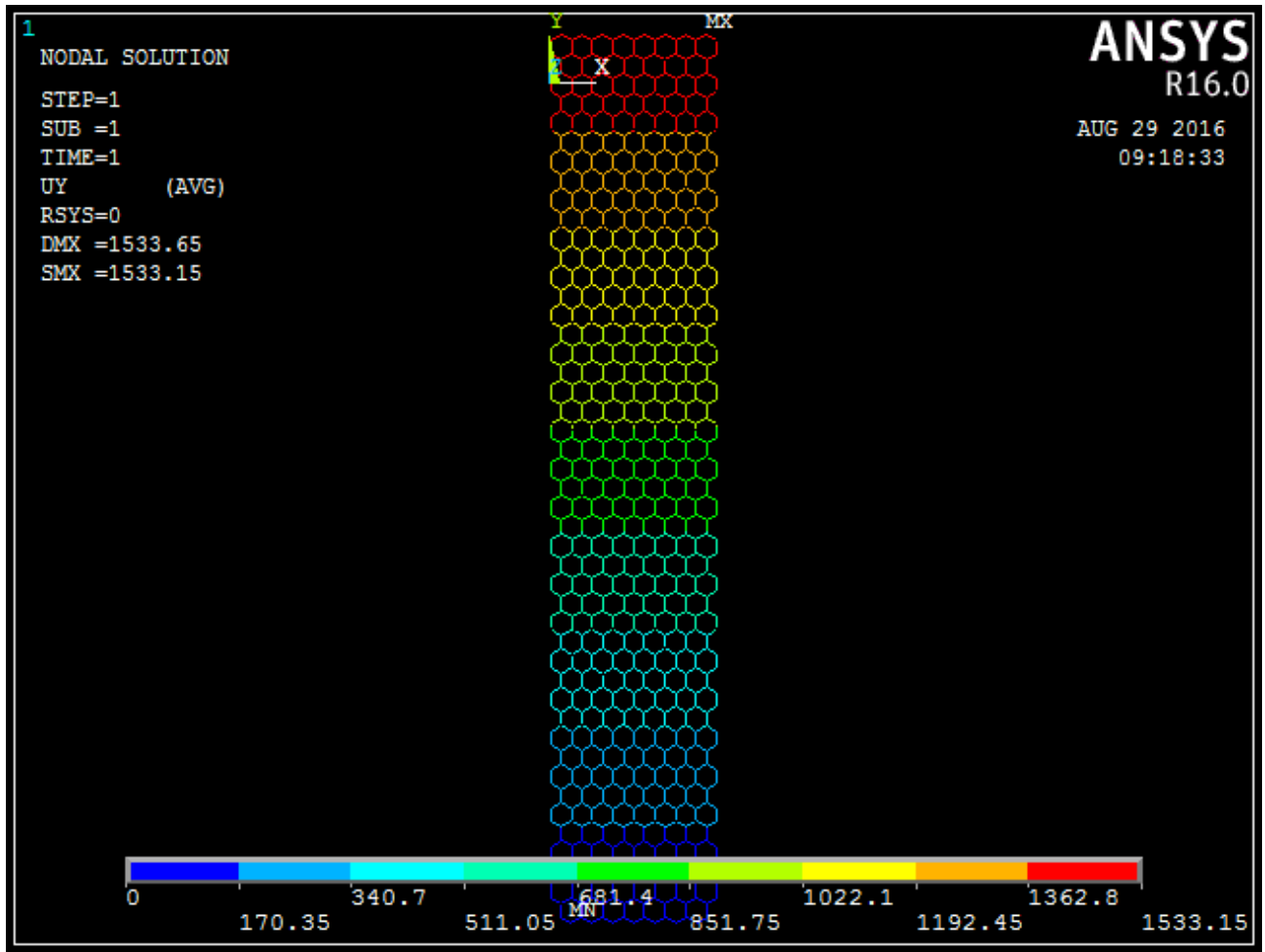
Εικόνα 16: Χρωματική αναπαράσταση των μετατοπίσεων των κόμβων κατά την διεύθυνση του άξονα Y για το πλέγμα γραφενίου με πλάτος  $1,969 \text{ nm}$  και μήκος  $4,76035 \text{ nm}$

$$Y = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{F/A_0}{\Delta H/H_0} = \left( \frac{\frac{8 \cdot 10^{-5}}{1,969 * t * 10^{-18}}}{\frac{751,22}{4,76035}} \right) \text{ όπου } t = \text{πάχος του πλέγματος (13)}$$



Εικόνα 17: Πλέγμα γραφενίου με πλάτος  $1,969 \text{ nm}$  και μήκος  $9,8769 \text{ nm}$  υπόκειται σε μονοαξονικό εφελκυσμό

Στην Εικ.17 φαίνεται ένα πλέγμα γραφενίου με πλάτος  $1,969 \text{ nm}$  και μήκος  $9,8769 \text{ nm}$  υπόκειται σε μονοαξονικό εφελκυσμό. Η δύναμη σε κάθε κόμβο που του ασκείται είναι  $F = 10^{-5} \text{ N}$ . Στην Εικ.19 φαίνεται η μετατόπιση ανά κόμβο κατά την διεύθυνση  $Y$  η μετατόπιση είναι εκφρασμένη σε νανόμετρα. Φαίνεται ότι τις μεγαλύτερες τιμές της μετατόπισης συναντώνται στους ακραίους κόμβους όπου ασκούνται οι δυνάμεις.



Εικόνα 18: Χρωματική αναπαράσταση των μετατοπίσεων των κόμβων κατά την διεύθυνση του άξονα Y για το πλέγμα γραφενίου με πλάτος  $1,969 \text{ nm}$  και μήκος  $9,8769 \text{ nm}$

$$Y = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{F/A_0}{\Delta H/H_0} = \left( \frac{8 \cdot 10^{-5}}{\frac{1,969 * t * 10^{-18}}{\frac{1533,40}{9,8769}}} \right) \text{ όπου } t = \text{πάχος του πλέγματος (14)}$$

Στις σχέσεις (11), (12), (13) και (14) υπολογίζεται το μέτρο ελαστικότητας. Στις εξισώσεις αυτές παρέμεινε  $t = \text{το πάχος του πλέγματος}$  και δεν αντικαταστάθηκε με την θεωρητική τιμή  $0,34$  [14]. Προκειμένου να γίνει και μια παραμετρική ανάλυση και σε σχέση με το πάχος του πλέγματος του γραφενίου γνωρίζοντας από τα πειραματικά δεδομένα ότι το μέτρο ελαστικότητας του γραφενίου έχει την ευρέως αποδεκτή τιμή  $Y = 1.025 \text{ Tpa}$  [17].

Πρώτα θα γίνει η μελέτη θεωρώντας το πάχος του πλέγματος  $t = 0,34 \text{ nm}$  προκειμένου να φανεί πόσο επηρεάζει το μέγεθος του πλέγματος το μέτρο ελαστικότητας. Στις σχέσεις (11), (12), (13) και (14) τοποθετώντας την τιμή  $t = 0,34 \text{ nm}$ . Βρίσκονται αντίστοιχα οι τιμές  $Y_1, Y_2, Y_3, Y_4$  όπως φαίνονται στην Εικ. 19. Στην Εικ. 19 φαίνεται ότι το μέγεθος του πλέγματος έχει πολύ μικρή επίδραση στο μέτρο ελαστικότητας του γραφενίου. Καθώς για τέσσερα διαφορετικά σε μήκος και πλάτος μοντέλα προκύπτει σχεδόν το ίδιο μέτρο ελαστικότητας. Τα μοντέλα αυτά φαίνονται στις παραπάνω εικόνες Εικ. 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18.

	Width (nm)	Length (nm)	Y (Tpa)
Model1	0,738	2,842	0,7538
Model2	0,985	3,05515	0,736
Model3	1,969	4,76035	0,7573
Model4	1,969	9,8759	0,7697

Εικόνα 19: Το μέτρο ελαστικότητας για τέσσερα διαφορετικά μοντέλα με θεωρητικό πάχος πλέγματος  $t = 0,34 \text{ nm}$

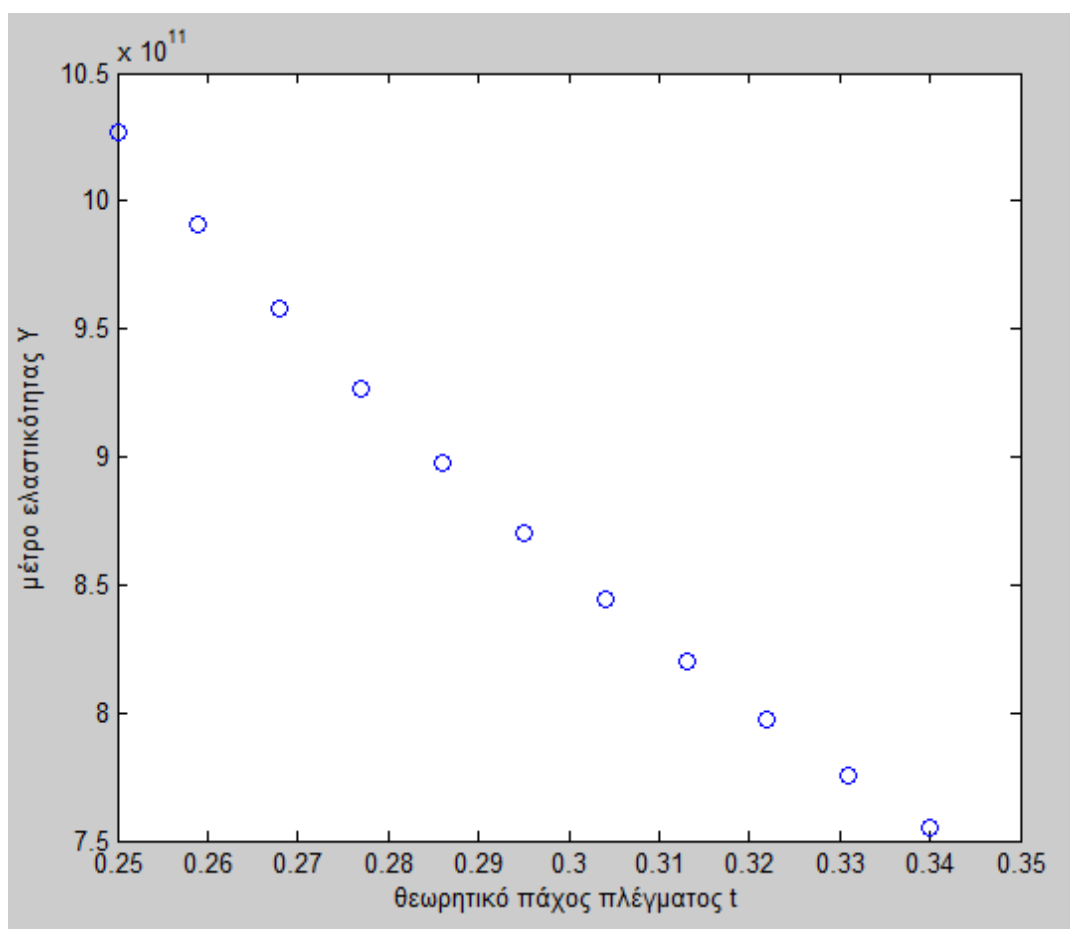
Μπορεί να δει κανείς ότι τα αποτελέσματα της μεθόδου ναι μεν πλησιάζουν την πειραματική τιμή του μέτρου ελαστικότητας γραφενίου  $Y = 1.025 \text{ Tpa}$  [17] και των αποτελεσμάτων της δημοσίευσης των (Chunyu Li, Tsu – Wei Chou) [6] αλλά υπάρχει κάποια απόκλιση. Πάνω στην μέθοδο των (Chunyu Li, Tsu – Wei Chou) [6] βασίζεται η παρούσα εργασία. Στην Εικ. 20 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της δουλειάς των (Chunyu Li, Tsu – Wei Chou) [6].

	Width (nm)	Length (nm)	Y (Tpa)
Model1	0,738	2,842	0,995
Model2	0,985	3,126	1,002
Model3	1,969	4,831	1,0210
Model4	1,969	9,847	1,0240

Εικόνα 20: Τα αποτελέσματα που δημοσίευσαν οι (Chunyu Li, Tsu – Wei Chou 2003) με θεωρητικό πάχος πλέγματος  $t = 0,34 \text{ nm}$

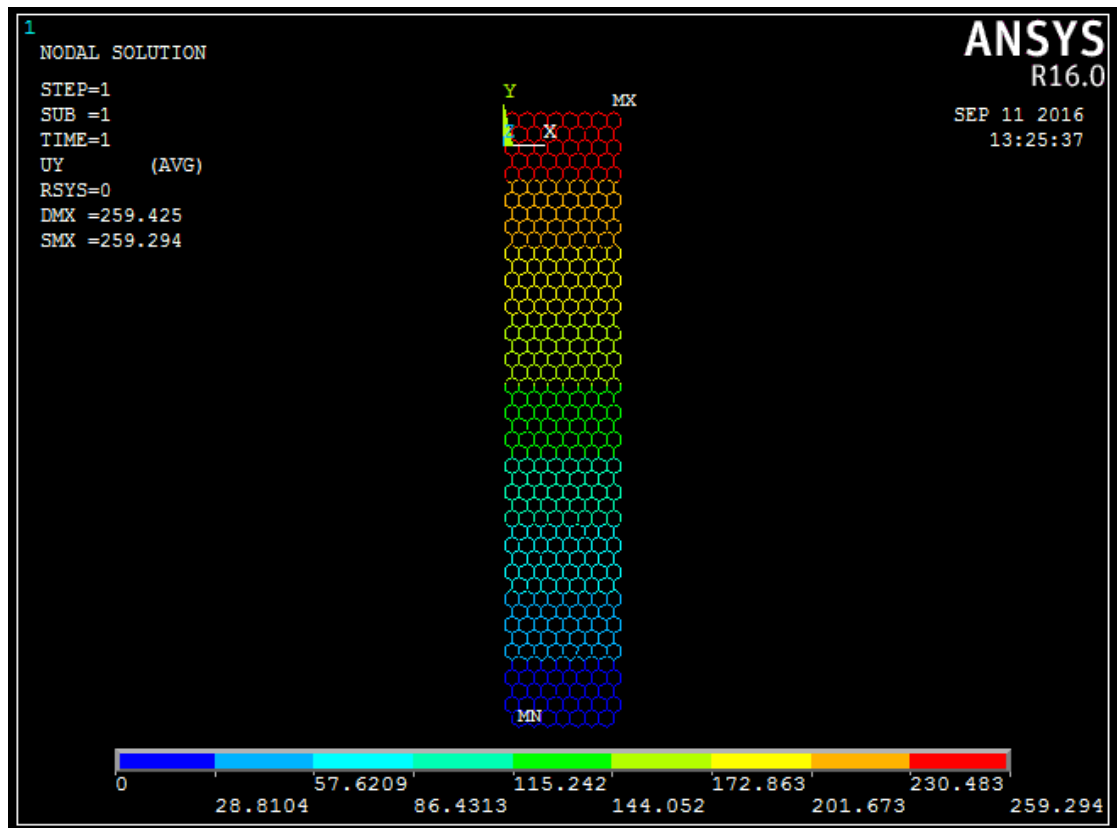
Επειδή στην παρούσα εργασία εφαρμόστηκε αυτή καθαύτη η μέθοδος των (Chunyu Li, Tsu – Wei Chou) [6] με ακριβώς τις ίδιες τιμές των παραμέτρων  $k_r, k_\theta, k_\tau$  που όπως ειπώθηκε και παραπάνω από αυτές προκύπτουν οι παράμετροι των μηχανικών κατασκευής  $EA, EI$  και  $GJ$  του κάθε πεπερασμένου στοιχείου.

Και παρόλα αυτά παρατηρείται μια μικρή απόκλιση μεταξύ των αποτελεσμάτων για αυτό το λόγο θα γίνει μια παραμετρική μελέτη ως αναφορά το θεωρητικό πάχος  $t$  του πλέγματος. Στην Εικ. 21 παρουσιάζεται ένα διάγραμμα που στον άξονα  $y$  του έχει το μέτρο ελαστικότητας  $Y$  και στον άξονα  $x$  το πάχος του πλέγματος  $t$ . Οι τιμές του πάχους  $t$  του πλέγματος θα ξεκινούν από  $0,25nm$  έως  $0,34nm$ . Το μοντέλο στο οποίο έγινε αυτή η μελέτη είναι αυτό που φαίνεται στις Εικ. 16,17 με πλάτος  $1,969 nm$  και μήκος  $9,8769 nm$  και με 8 δυνάμεις μέτρου  $F = 10^{-5} N$  να του ασκούνται κατά την διεύθυνση του άξονα  $y$  σε 8 αντίστοιχα κόμβους του στο πάνω άκρο του και στο κάτω άκρο του υπάρχουν 6 κυλίσεις σε 6 κόμβους αντίστοιχα με περιορισμό της μετατόπισης ως προς τον άξονα  $y$ . Και μία πάκτωση στο μεσαίο κόμβο που δεν επιτρέπει την μετατόπιση ως προς τους τρεις άξονες  $x, y, z$ . Οι υπολογισμοί και οι γραφική παράσταση έγιναν στο υπολογιστικό πρόγραμμα Matlab.



Εικόνα 21: Το μέτρο ελαστικότητας σε συνάρτηση με το θεωρητικό πάχος  $t$  του πλέγματος

Προκειμένου να γίνει περισσότερο αντιληπτό το μέγεθος του μέτρου ελαστικότητας του γραφενίου  $Y = 0,75 TPa$  θα γίνει παρόμοια μελέτη για χάλυβα St72 με ιδιότητες όπως δίνονται [18]. Το μοντέλο που θα χρησιμοποιηθεί είναι αυτό των Εικ. 16,17 με πλάτος  $1,969 nm$  και μήκος  $9,8769 nm$  η μόνη διαφορά είναι ότι σε κάθε κόμβο ασκήθηκε δύναμη  $F = 1 \cdot 10^{-10} N$ . Στην Εικ. 22 μπορεί να δει κανείς το αποτέλεσμα με την μετατόπιση εκφρασμένη σε νανόμετρα nm.



Εικόνα 22: Πλέγμα χάλυβα St72 με πλάτος 1,969 nm και μήκος 9,8769 nm

$$Y = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{F/A_0}{\Delta H/H_0} = \left( \frac{8 \cdot 10^{-5}}{\frac{1,969 * 0,0169 * 10^{-18}}{\frac{259,31}{9,8769}}} \right) = 9,1568 \cdot 10^8 \text{ N/m}^2 \quad (15)$$

Προκύπτει ότι το πλέγμα γραφενίου έχει περίπου 812 φορές μεγαλύτερο μέτρο ελαστικότητας από το αντίστοιχων διαστάσεων πλέγμα χάλυβα.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΘΕΡΜΟΔΥΝΑΜΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΤΟΥ ΓΡΑΦΕΝΙΟΥ

### 3.1 Εισαγωγή στις θερμοδυναμικές ιδιότητες του γραφενίου

Από την ανακάλυψή τους οι νανοσωλήνες άνθρακα πολλαπλού τοιχώματος (MWCNTs) είναι μια σημαντική κινητήρια δύναμη για την ανάπτυξη της νανοτεχνολογίας το ίδιο συμβαίνει και με το γραφένιο. Οι εφαρμογές νανοσωλήνων άνθρακα ως ενισχύσεις για σύνθετα υλικά, αγωγούς-νανοσυρμάτων (conducting nanowires), πηγές εκπομπής πεδίου και νανοδιατάξεων, για παράδειγμα, απαιτούν μια θεμελιώδη κατανόηση των μηχανικών και φυσικών τους ιδιοτήτων. Οι σημερινές εντατικές προσπάθειες στο πεδίο της φυσικής, της χημείας, της μηχανικής και της βιολογία αντανακλούν την ανάγκη της διεπιστημονικής προσέγγισης στην έρευνα των νανοσωλήνων και του γραφενίου.

Η ειδική θερμότητα είναι ένα από τα θεμελιώδη θερμικά χαρακτηριστικά μιας ουσίας. Τα τελευταία χρόνια, πειραματικές και θεωρητικές μελέτες έχουν διεξαχθεί για τον προσδιορισμό της ειδικής θερμότητας του γραφενίου. Οι (Benedict *et al.*) [19] ήταν οι πρώτοι που προέβλεψαν θεωρητικά μια γραμμική σχέση μεταξύ της ειδικής θερμότητας των νανοσωλήνων άνθρακα και την θερμοκρασία υπό την προϋπόθεση ότι τόσο η διάμετρος νανοσωλήνων όσο και η θερμοκρασία έχουν επαρκώς μικρές τιμές. Ωστόσο, πειραματικές μετρήσεις των (Yi *et al.*) [20] κατέδειξαν μια εντυπωσιακά γραμμική εξάρτηση της θερμοκρασίας της ειδικής θερμότητας σε ένα μεγάλο εύρος θερμοκρασιών (10 – 300 K) και της διαμέτρου σωλήνα των MWCNTs. Το συμπέρασμα ήταν ότι η σύζευξη μεταξύ των στρωμάτων του σωλήνα ήταν πολύ ασθενέστερη από εκείνη στο γραφίτη. Η ασθενής σύζευξη ενδιάμεσων στρωμάτων πιστεύεται ότι προκαλείται κυρίως από το στροβιλοστρωματικό στοίβαγμα των γειτονικών στρωμάτων. Η ειδική θερμότητα που μετρήθηκε από τους (Mizel *et al.*) [21] πάνω σε MWCNTs και σχοινιά από μονού τοιχώματος νανοσωλήνες άνθρακα (SWCNTs) δείχνει μια γραμμική εξάρτηση θερμοκρασίας στην περιοχή θερμοκρασιών 100 – 200 K, αλλά μια κατά προσέγγιση τετραγωνική εξάρτηση σε χαμηλή θερμοκρασία (< 50 K). Ο (Poron) [22] υπολόγισε τη χαμηλής θερμοκρασίας ειδική θερμότητα των MWCNT όπως επίσης και απομόνωσε ή συνδύασε SWCNT με σταθερής δύναμης δυναμικά μοντέλα και διαπίστωσε ότι η εξάρτηση θερμοκρασίας της ειδικής θερμότητας χαμηλής θερμοκρασίας αλλάζει από μορφή τετραγωνικής ρίζας σε γραμμική μορφή με την αύξηση της διαμέτρου του σωλήνα του συστήματος. Μια εκτενής θεώρηση των θερμικών ιδιοτήτων των νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με την ασυνήθιστη διασπορά φωτονίων τους και την πυκνότητα καταστάσεων τους παρουσιάστηκε από τους (Dresselhaus και Eklund) [23]

Σε αυτή την εργασία, μελετήθηκε η ειδική θερμότητα του γραφενίου με τη χρήση μιας ατομιστικής τεχνικής μοντελοποίησης, δηλαδή με τη μοριακή μέθοδο της μηχανικής των κατασκευών που παρουσιάστηκε παραπάνω. Οι προβλέψεις μοντελοποίησης συγκρίνονται με τα διαθέσιμα πειραματικά και θεωρητικά αποτελέσματα.

### 3.2 Ειδική θερμότητα $C_v$ , η θερμοκρασία $T$ και η σύνδεση τους με τις ιδιοσυχνότητες του υλικού

Θα δωθεί πρώτα μια ερμηνεία της ειδικής θερμότητας  $C_v$  και πως αυτή συνδέεται με την εσωτερική ενέργεια, την θερμοκρασία και στην συνέχεια με τα *vibration modes* (ιδιοσυχνότητες) που χρησιμοποιήθηκαν στην παρούσα μέθοδο.

Η *Kinetic Theory* παρέχει μια μικροσκοπική εξήγηση για την θερμοκρασία, με βάση την οποία τα μακροσκοπικά συστήματα αποτελούνται από μικροσκοπικά σωματίδια όπως μόρια και άτομα. Το *equipartition theorem* της *kinetic theory* ισχυρίζεται ότι κάθε βαθμός ελευθερίας της κλασικής μηχανικής ενός ελεύθερα κινούμενου σωματιδίου έχει κινητική ενέργεια η οποία εξαρτάται από την θερμοκρασία  $T$  και την σταθερά Boltzmann.

Έτσι η θερμοκρασία  $T$  αντικατοπτρίζει την μεταφορά κινητικής ενέργειας των σωματιδίων σε σχέση με το κέντρο μάζας του συστήματος. Οι συγκρούσεις μεταξύ των σωματιδίων οδηγούν στην αύξηση της θερμοκρασίας. Η ειδική θερμοχωρητικότητα  $C_v$  δίνεται ως ο ρυθμός μεταβολής της εσωτερικής ενέργειας ως προς την θερμοκρασία δηλαδή και ορίζεται ως το ποσό ενέργειας που απαιτείται για να αυξηθεί η θερμοκρασία της μονάδας της μάζας ενός υλικού κατά μία μονάδα [24]:

$$C_v = \frac{dE}{dT} \quad (25)$$

Μεταφορά, περιστροφή και *vibration* είναι οι βαθμοί ελευθερίας που χαρακτηρίζουν την ειδική θερμότητα των αερίων. Ενώ για την περίπτωση των στερεών χρειάζονται μόνο οι *vibrations modes*. Στο γραφένιο όπως και στα υπόλοιπα στερεά αρκεί λοιπόν να προσδιοριστούν τα *vibrations modes* και από εκεί θα προκύψει η ειδική θερμοχωρητικότητα  $C_v$ . [25]



### 3.3 Προσομοίωση των θερμοδυναμικών ιδιοτήτων του γραφενίου με πεπερασμένα στοιχεία

Για την ατομική δόνηση ενός μοντέλου γραφενίου [26] με  $n$  άτομα άνθρακα, η μάζα των ηλεκτρονίων είναι αμελητέα σε σύγκριση με τη μάζα ενός πυρήνα άνθρακα ( $m_c = 1,9943 \cdot 10^{-23} \text{ g}$ ). Η μάζα των πυρήνων άνθρακα μπορεί να υποθεθεί να συγκεντρώνεται στο κέντρο των ατόμων. Έτσι, το γραφένιο είναι ένα συγκεντρωτικό (lumped) δομικό σύστημα. Επίσης, λόγω της εξαιρετικά μικρής ακτίνας ( $R_c = 2,75 \cdot 10^{-5} \text{ \AA}$ ) του ατομικού πυρήνα του άνθρακα, η κινητική ενέργεια που αντιστοιχεί στην περιστροφή κάμψης και την στρεπτική περιστροφή μπορεί να παραλειφθεί. Βασιζόμενοι στην εξίσωση κίνησης *Lagrange* για τα συντηρητικά συστήματα, έχουμε ένα σύστημα εξισώσεων κίνησης για την ελεύθερη ταλάντωση,

$$[M][\ddot{q}] + [K][q] = 0 \quad (16)$$

όπου  $[M]$  and  $[K]$  είναι, αντίστοιχα, το καθολικό μητρώο μάζας και καθολικό το μήτρωο δυσκαμψίας (*the global mass matrix and stiffness matrix*), και τα  $[q]$  και  $[\dot{q}]$  είναι, αντίστοιχα, το διάνυσμα κομβικής μετατόπισης και το διάνυσμα επιτάχυνσης

Η συχνότητα ταλάντωσης του νανοσωλήνα μπορεί να ληφθεί με την επίλυση της εξίσωσης (25). Σε αυτήν την περίπτωση, η μέθοδος στατικής συμπύκνωσης εφαρμόζεται για τη μείωση του υπολογιστικού χρόνου. Οι συχνότητες ταλάντωσης  $f$  και τα σχήματα λειτουργίας, στη συνέχεια, λαμβάνονται από την επίλυση του ιδιοπροβλήματος

$$([K] - \omega^2[M])[q] = 0 \quad (17)$$

όπου  $[K]$  και  $[M]$  είναι το συμπυκνωμένο μητρώο δυσκαμψίας και συμπυκνωμένη μήτρα μάζας, αντίστοιχα,  $[q]$  είναι το διάνυσμα μετατόπισης που αντιστοιχεί στις πρωτογενείς συντεταγμένες, δηλαδή, μετατοπίσεις μεταθέσεων των ατόμων άνθρακα, και  $\omega = 2\pi f$  είναι η γωνιακή συχνότητα. Υπάρχει μια φυσική λειτουργία  $[q]$  που αντιστοιχεί σε κάθε φυσική συχνότητα,  $\omega_i$ . Αυτές οι φυσικές καταστάσεις ταλαντώσεων έχουν ιδιότητες ορθογωνιότητας για την μήτρα μάζας  $[M]$  και τη μήτρα δυσκαμψίας  $[K]$  και μπορούν να κανονικοποιηθούν.

Χρησιμοποιώντας έναν πίνακα που περιέχει αυτές τις κανονικοποιημένες καταστάσεις, το σύστημα εξισώσεων κίνησης μπορεί να αποσυνδεθεί σε ένα σύνολο ανεξάρτητων εξισώσεων,

$$[\ddot{Q}] + [\omega][Q] = 0 \quad (18)$$

όπου  $[\omega]$  είναι ο διαγώνιος πίνακας συχνοτήτων και  $[Q]$  το διάνυσμα κανονικών συντεταγμένων.

Η Hamiltonian συνάρτηση ενός νανοσωλήνα και ενός πλέγματος γραφενίου είναι η εξής:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{3n-p} [\dot{Q}_j^2 - w_j^2 Q_j^2] \quad (19)$$

Κάθε όρος της συνάρτησης εκφράζει ένα απλό αρμονικό ταλαντωτή. Με βάση την θεωρία της κβαντομηχανικής αυτοί οι ταλαντωτές μπορούν να θεωρηθούν ως κβαντικοί μηχανικοί ταλαντωτές οι *phonons*. Η κβαντοποίηση παραγματοποιείται εισάγοντας τον *momentum operator* που αντιστοιχεί στο  $\dot{Q}_j$  π.χ.

$$\dot{Q}_j = ih \frac{d}{dQ_j} \quad (20)$$

Όπου  $h$  είναι *reduced* σταθερά του *Planck*. Η *Schrodinger* εξίσωση του ταλαντωτή  $j$  είναι:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d^2}{dQ_j^2} + \frac{1}{2} w_j^2 Q_j^2 \right) \psi_{vj}(Q_j) = E_{vj} \psi_{vj}(Q_j) \quad (21)$$

Όπου  $E_{vj}$  είναι η ιδιοτιμή και  $\psi_{vj}$  η ιδιοσυνάρτηση του ταλαντωτή στην κατάσταση με κβαντικό αριθμό  $vj$ .

Οι ιδιότητες δίνονται από την εξίσωση  $E_{vj} = \left( v_j + \frac{1}{2} \right) \hbar w_j$ , όπου το  $E_{vj}$  αναφέρεται στα ξεχωριστά φάσματα ενέργειας του αρμονικού ταλαντωτή. Αυτό σημαίνει ότι ο αρμονικός ταλαντωτής διεγείρεται από ίσου διαστήματος ενεργειακά επίπεδα.

Σύμφωνα με την Στατιστική Θερμοδυναμική *the vibrational partition function* αυτών των *phonons* μπορεί να γραφτεί ως :

$$Z = \prod_{j=1}^{3n-p} \frac{\exp\left(-\frac{\hbar w_j}{2k_B T}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{\hbar w_j}{2k_B T}\right)} \quad (22)$$

Όπου  $k_B$  η σταθερά του *Boltzman* και  $T$  η θερμοκρασία. Και η εσωτερική ενέργεια του νανοσωλήνα και του γραφενίου είναι:

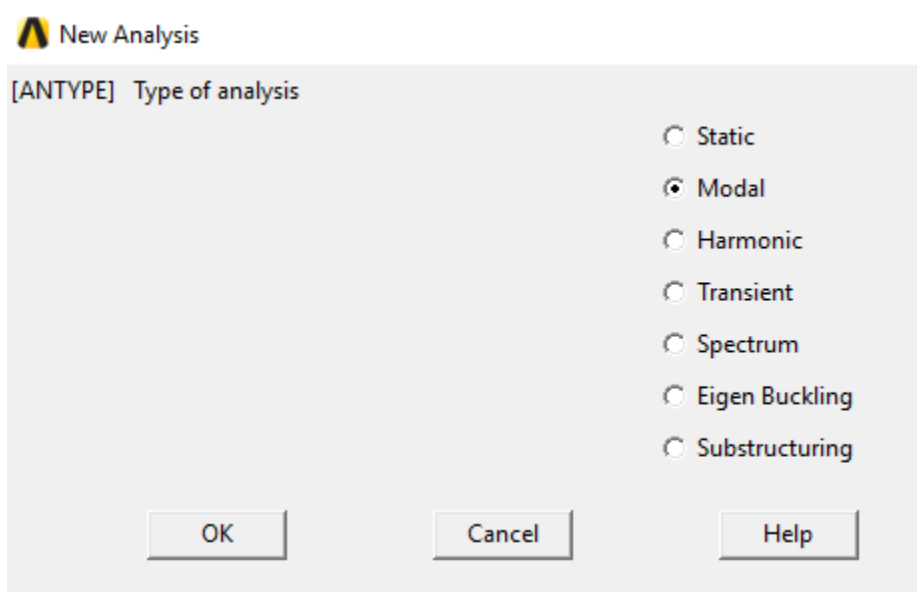
$$E = k_B T^2 \left( \frac{d \ln Z}{dT} \right) = \sum_{j=1}^{3n-p} \frac{h \omega_j [\exp\left(-\frac{h \omega_j}{2k_B T}\right) + 1]}{2[1 - \exp\left(-\frac{h \omega_j}{2k_B T}\right)]} \quad (23)$$

Έτσι από αυτό προκύπτει η ειδική θερμότητα *Specific Heat*

$$Cv = \frac{dE}{dT} = k_B \sum_{j=1}^{3n-p} \frac{(h \omega_j / k_B T)^2 [\exp\left(-\frac{h \omega_j}{2k_B T}\right)]}{[\exp\left(-\frac{h \omega_j}{2k_B T}\right) - 1]^2} \quad (24)$$

### 3.4 Αποτελέσματα της μεθόδου

Το μοντέλο γραφενίου κατασκευάστηκε με τον ίδιο τρόπο που παρουσιάστηκε παραπάνω όταν έγινε μελέτη των μηχανικών ιδιοτήτων του πλέγματος. Οι διαφορές με πριν έγκειται στο γεγονός ότι για να βρεθούν οι θερμοδυναμικές ιδιότητες του γραφενίου χρειάστηκε να γίνει μια *Modal Analysis* στο *Ansys Mechanical Apdl* προκειμένου να βρεθούν οι ιδοσυχνότητες του πλέγματος γραφενίου βλέπε Εικ. 23.



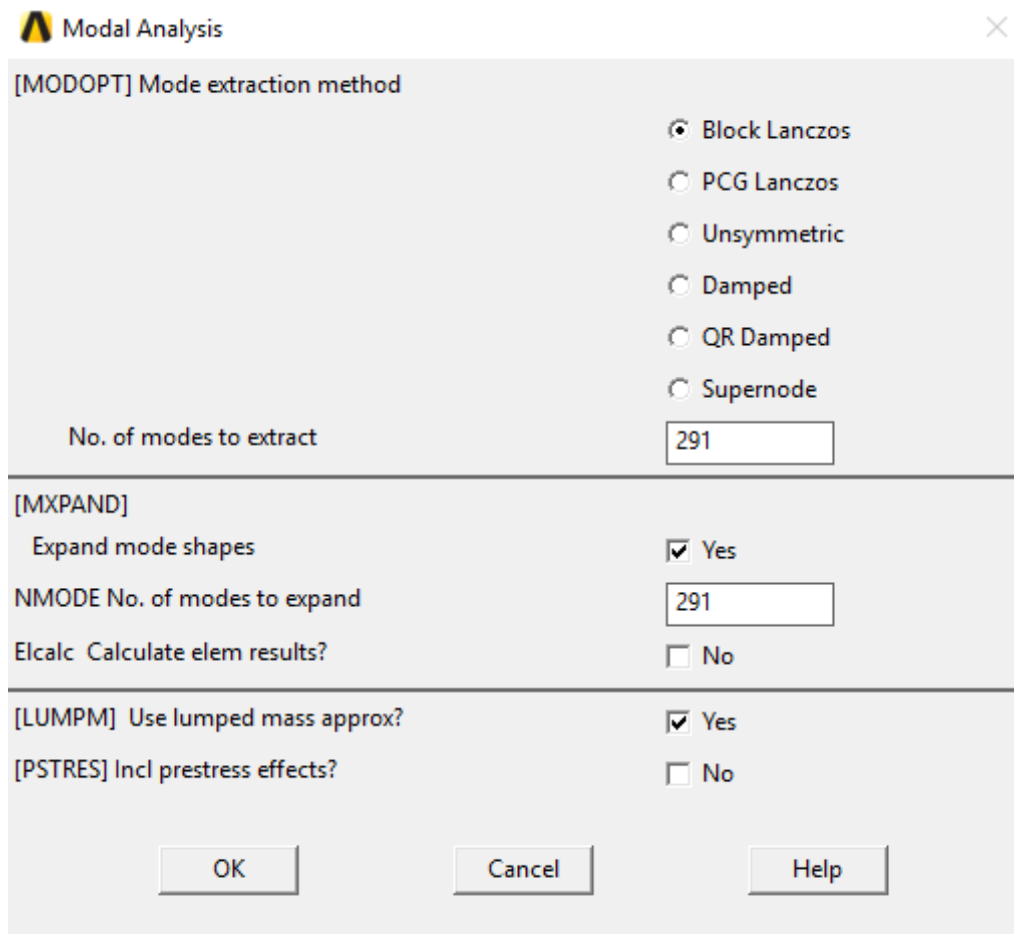
Εικόνα 23:Επιλογή στο *Ansys* για *Modal Analysis*

Αφού επιλεγεί να γίνει *Modal Analysis* στο *Ansys* στην συνέχεια θα πρέπει να αποφασιστούν ο αριθμός των *modes* που πρέπει να υπολογιστούν δηλαδή ο αριθμός των ιδιοσυχνοτήτων βλέπε Εικ. 24. Αυτό προκύπτει ως εξής είναι ο αριθμός των κόμβων επί τρία μείν τους δεσμευμένους κόμβους. Στην συνέχεια παρουσιάζεται το μοντέλο που χρησιμοποιήθηκε ένα πλέγμα γραφενίου με πλάτος  $0,738 \text{ nm}$  και μήκος  $2,842 \text{ nm}$  όπως φαίνεται στην Εικ. 25 που έχει αριθμό κόμβων  $n = 98$  και από τους οποίους είναι δεσμευμένοι οι τρεις. Άρα ο αριθμός των *modes* θα είναι

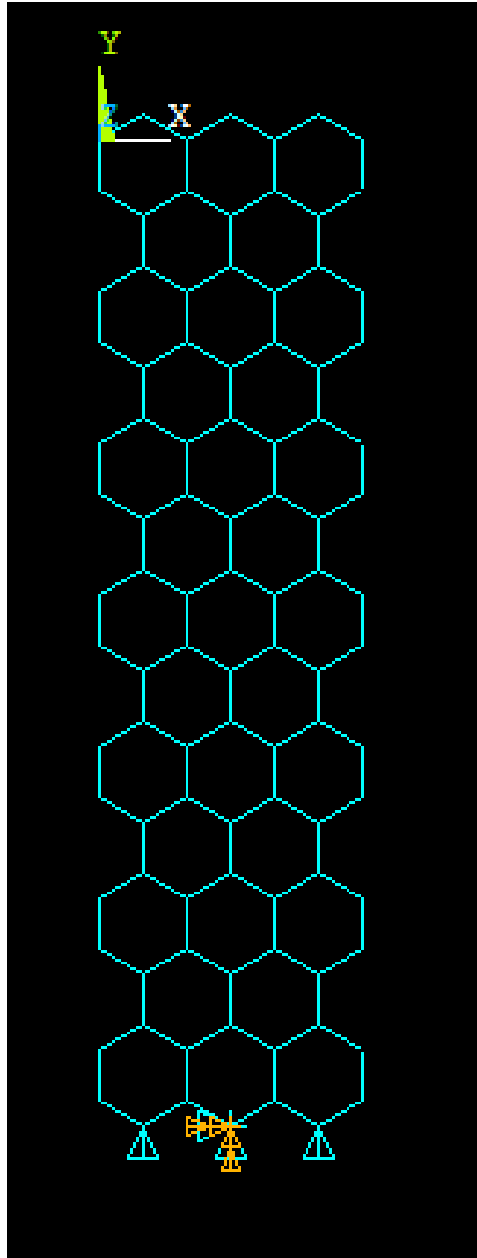
$$\text{no of modes} = 3n - 3 = 3 * 98 - 3 = 291 \quad (25)$$

Όσο αναφορά τις ιδιότητες των πεπερασμένων στοιχείων είναι ίδιες με αυτές που χρησιμοποιήθηκαν στην εύρεση των μηχανικών ιδιοτήτων του γραφενίου. Το μόνο που πρέπει να ληφθεί επιπλέον υπόψη είναι η πυκνότητα *density* είναι ίση

$$\rho = 2 \frac{m}{3AL} = \frac{2 * 1,9943 * 10^{-26}}{3 * 0,1686 * 10^{-19} * 0,1421 * 10^{-9}} = 5564 \text{ kg/m}^3 \quad (26)$$

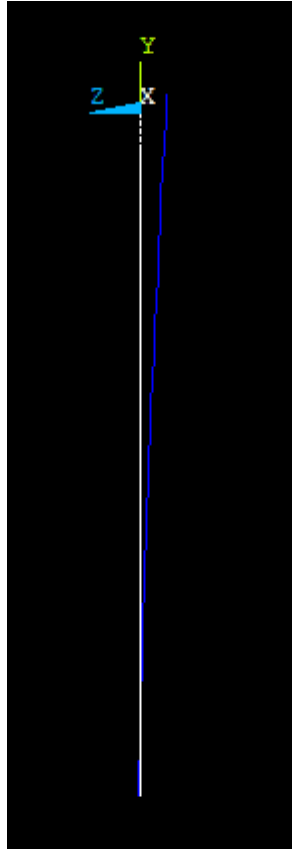


Εικόνα 24:Αριθμός των ιδιοσυχνοτήτων

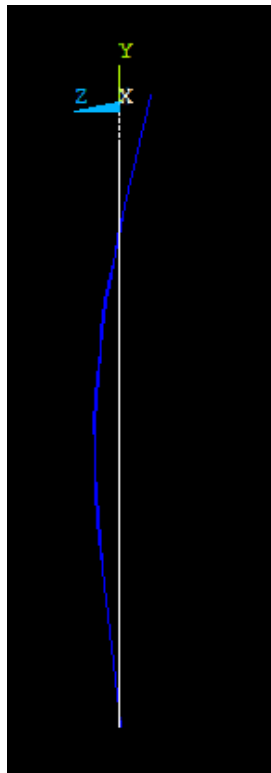


Εικόνα 25: Μοντέλο γραφενίου με πλάτος  $0,738 \text{ nm}$  και μήκος  $2,842 \text{ nm}$

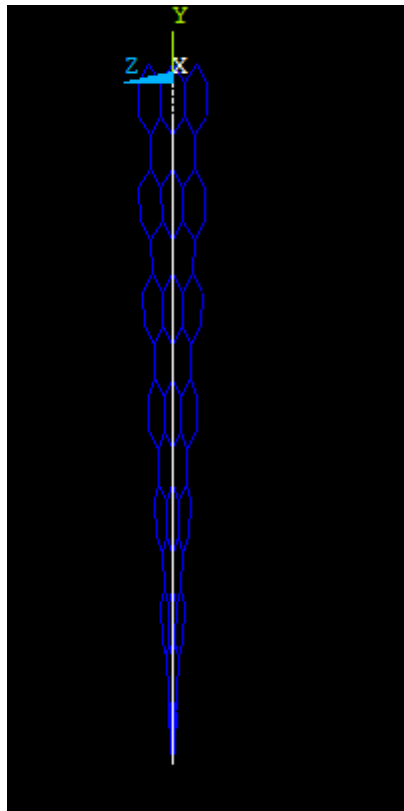
Οι ιδιοσυχνότητες που προκύπτουν από το *Modal Analysis* του *Ansys* βλέπε τις Εικ. 26 έως 35 όπου φαίνονται τα αποτελέσματα των 10 πρώτων ιδιοσυχνοτήτων στην συνέχεια διαιρούνται με την ταχύτητα του φωτός  $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$ . Τοποθετώντας τα όλα αυτά στην εξίσωση (33) υπολογίζεται η ειδική θερμότητα  $Cv$  του πλέγματος γραφενίου με πλάτος  $0,738 \text{ nm}$  και μήκος  $2,842 \text{ nm}$  με την βοήθεια ενός μικρού αρχείου στο Matlab που υπολογίζει το άθροισμα που βρίσκεται σε αυτή τη σχέση και που εμφανίζει τα αποτελέσματα της μεθόδου σε σύγκριση με τα αποτελέσματα που βρήκαν (*F. Ma, H. B. Zheng*) [28] και (*Eric Pop, Vikas Varshney*) [27] βλέπε Εικ. 36.



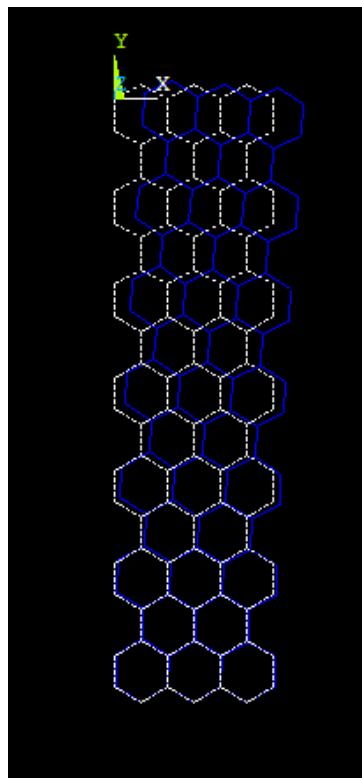
Εικόνα 27: Αποτέλεσμα 1<sup>ης</sup> ιδιοσυχνότητας  $h_1 = 2,719 \cdot 10^{10} \text{ Hz}$



Εικόνα 28: Αποτέλεσμα 2<sup>ης</sup> ιδιοσυχνότητας  $h_2 = 1,8563 \cdot 10^{11} \text{ Hz}$

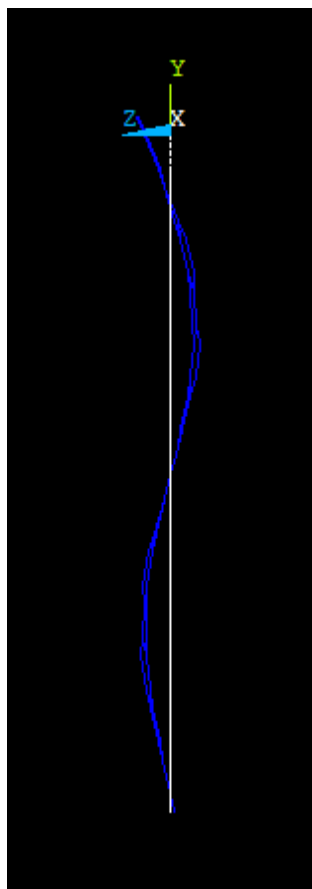


Εικόνα 29: Αποτέλεσμα 3<sup>ης</sup> ιδιοσυχνότητας  $h_3 = 1,9258 \cdot 10^{11} \text{ Hz}$

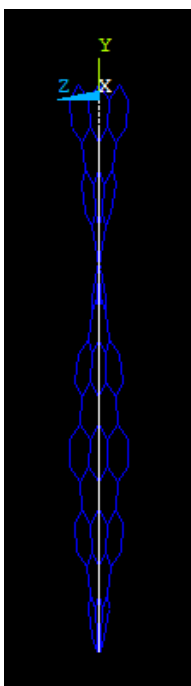


Εικόνα 30: Αποτέλεσμα 4<sup>ης</sup> ιδιοσυχνότητας  $h_4 = 2,3211 \cdot 10^{11} \text{ Hz}$

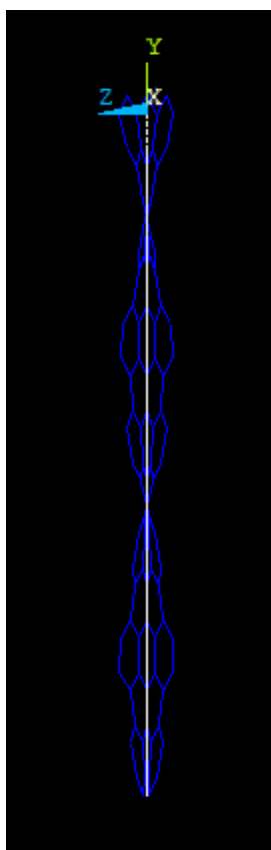




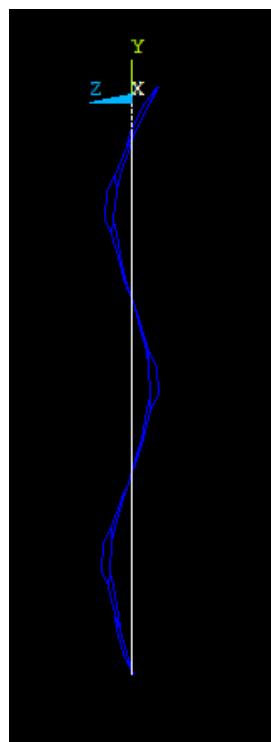
Εικόνα 31: Αποτέλεσμα 5<sup>ης</sup> ιδιοσυχνότητας  $h_5 = 5,3442 \cdot 10^{11} \text{ Hz}$



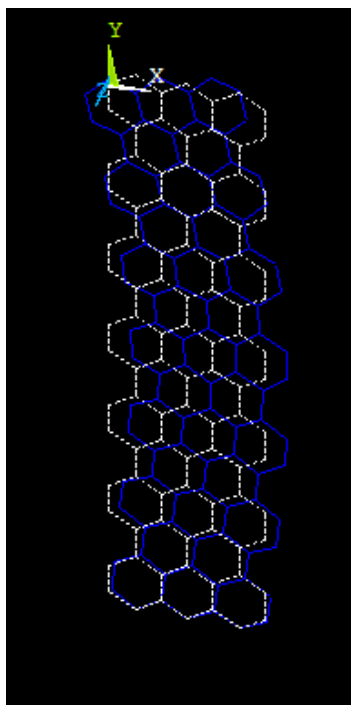
Εικόνα 32: Αποτέλεσμα 6<sup>ης</sup> ιδιοσυχνότητας  $h_6 = 5,9315 \cdot 10^{11} \text{ Hz}$



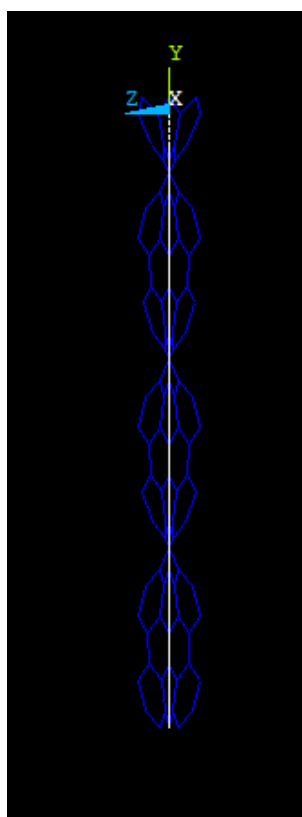
Εικόνα 33: Αποτέλεσμα 7<sup>ης</sup> ιδιοσυχνότητας  $h_7 = 1,0309 \cdot 10^{12} \text{ Hz}$



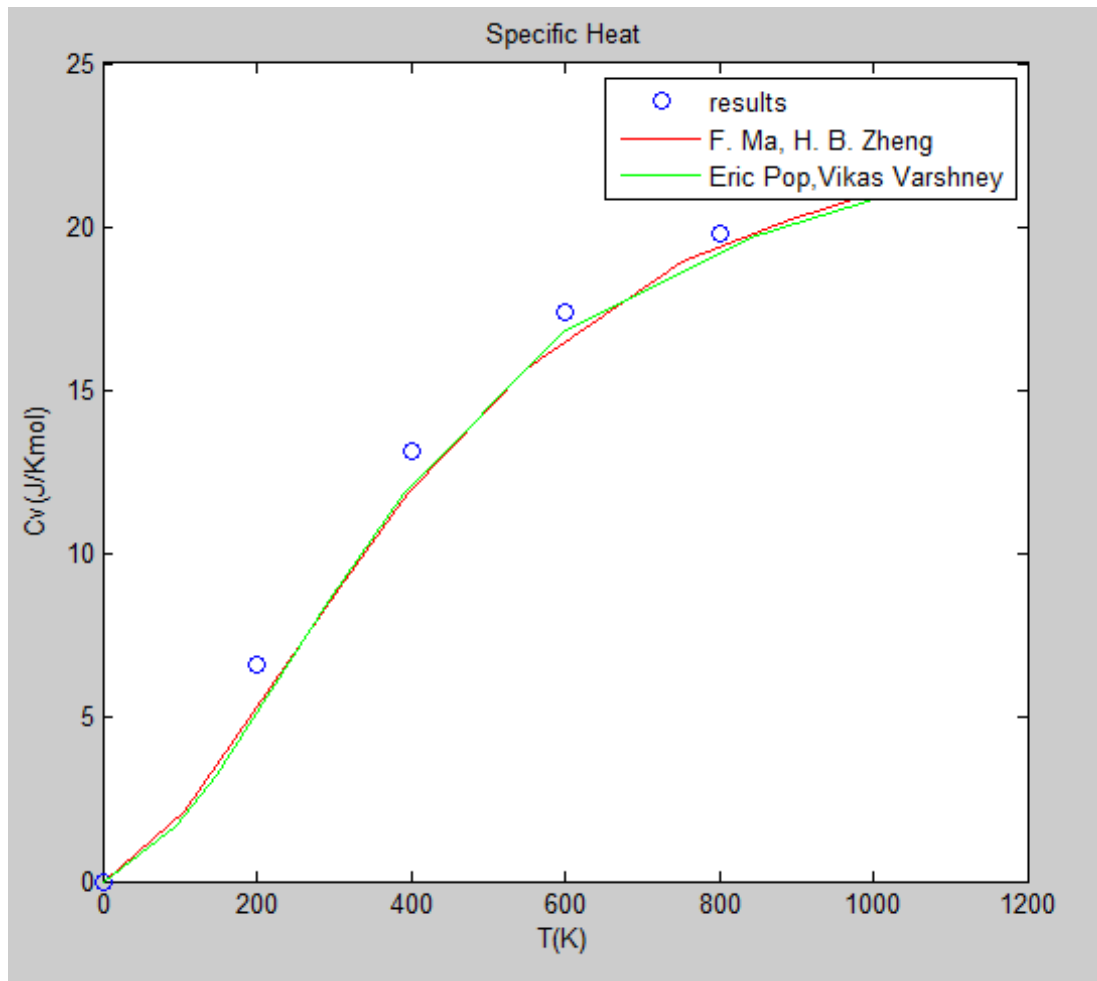
Εικόνα 34: Αποτέλεσμα 8<sup>ης</sup> ιδιοσυχνότητας  $h_8 = 1,0499 \cdot 10^{12} \text{ Hz}$



Εικόνα 35: Αποτέλεσμα 9<sup>ης</sup> ιδιοσυχνότητας  $h_9 = 1,1953 \cdot 10^{12} \text{ Hz}$

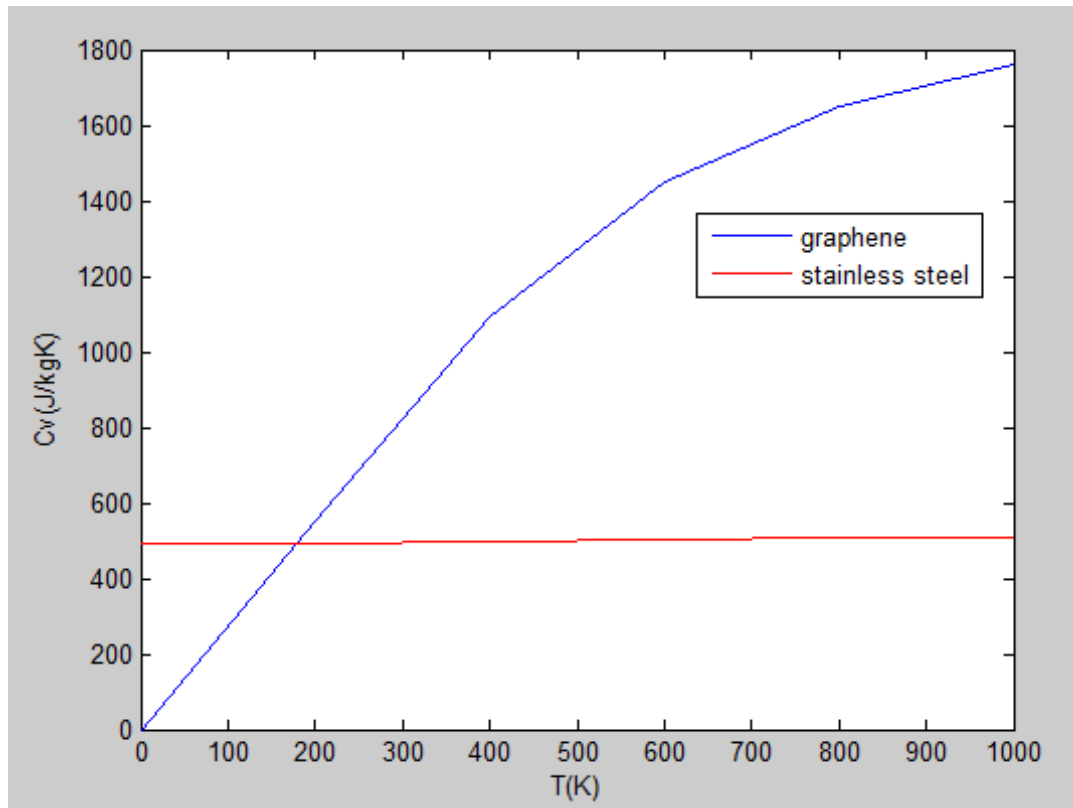


Εικόνα 36: Αποτέλεσμα 10<sup>ης</sup> ιδιοσυχνότητας  $h_{10} = 1,5179 \cdot 10^{12} \text{ Hz}$



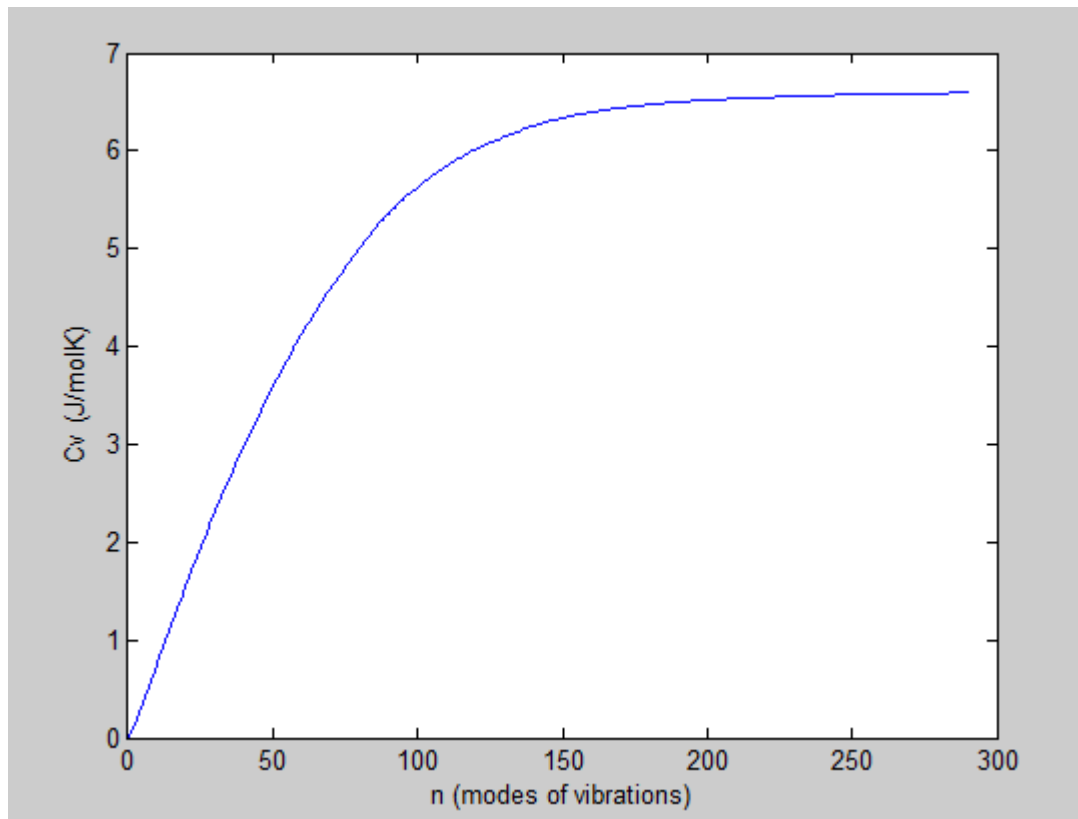
Εικόνα 36: Η ειδική θερμότητα ενός πλέγματος γραφενίου με με πλάτος  $0,738 \text{ nm}$  και μήκος  $2,842 \text{ nm}$  σε σύγκριση και με τα αποτελέσματα των εργασιών των (*F. Ma, H. B. Zheng*) και (*Eric Pop, Vikas Varshney*)

Σε περίπτωση που κάποιος θελήσει μπορεί να γίνει μετατροπή της ειδικής θερμότητας  $C_v$  από μονάδες ( $J/Kmol$ ) σε ( $J/KgK$ ) διαιρώντας με την ατομική μάζα  $M_c = 12$  του άνθρακα και στην συνέχεια μετατρέποντας τα  $gr$  σε  $Kg$  και έτσι μπορεί να γίνει μια άμεση σύγκριση με την ειδική θερμότητα ενός άλλου υλικού π.χ. του ανοξείδωτου χάλυβα stainless steel 304 [29] βλέπε Εικ. 37.



Εικόνα 37: Η ειδική θερμότητα του γραφενίου σε σύγκριση με την ειδική θερμότητα του ανοξείδωτου χάλυβα

Στην Εικ. 38 φαίνεται ότι περίπου στις 150 πρώτες ιδιοσυχνότητες υπάρχει σύγκλιση και βρίσκεται το αποτέλεσμα. Δηλαδή το 50% του συνόλου των ιδιοσυχνοτήτων



Εικόνα 38: Διάγραμμα σύγκλισης των ιδιοσυχνοτήτων για την ειδική θερμότητα

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

- Η μέθοδος των (*Chunyu Li, Tsu – Wei Chou*) [6] προσομοίωσης του μοντέλου γραφενίου με πεπερασμένα στοιχεία χωρικού πλαισίου δίνει πολυ ικανοποιητικά αποτελέσματα τόσο ως αναφορά τις μηχανικές ιδιότητες όσο και ως αναφορά τις θερμοδυναμικές του ιδιότητες
- Το υπολογιστικό κόστος αυτής της μεθόδου είναι πολύ μικρό σε σχέση με τα προϋπάρχοντα μοντέλα προσομοίωσης του γραφενίου που στηρίζονται σε μεθόδους μοριακής δυναμικής
- Παρατηρείται πολύ μεγάλη διαφορά ανάμεσα στο μέτρο ελαστικότητας του γραφενίου και ενός τυπικού χάλυβα. Πράγμα που επιβεβαιώνει τις εκτιμήσεις των ερευνητών ότι είναι το γραφένιο είναι το πιο ισχυρό υλικό που έχει μετρηθεί
- Επίσης στην Εικ. 37 αποτυπώνεται ξεκάθαρα στο γραφένιο η γραμμική σχεδόν σχέση ανάμεσα στην ειδική θερμότητα και την θερμοκρασία που δείχνει πόσο καλά άγει την θερμοκρασία το γραφένιο
- Τέλος φαίνεται ότι δεν χρειάζεται όλο το πλήθος των ιδιοσυχνοτήτων αλλά το 50% για να βρεθεί η ειδική θερμότητα

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΕΙΑ

1. <http://www.graphenomenon.com>
2. Iijima, S., Brabec, C., Maiti, A., Bernholc, J., 1996. Structural flexibility of carbon nanotubes. *Journal of Chemical Physics* 104, 2089–2092.
3. Yakobson, B.I., Campbell, M.P., Brabec, C.J., Bernholc, J., 1997. High strain rate fracture and C-chain unraveling in carbon nanotubes. *Computational Materials Science* 8, 341–348.
4. Tersoff, J., 1992. Energies of fullerenes. *Physical Review B* 46, 15546–15549.
5. Nakano, A. et al., 2001. Multiscale simulation of nanosystems. *Computing in Science and Engineering* 3, 56–66.
6. C. Li, T.-W. Chou / *International Journal of Solids and Structures* 40 (2003) 2487–2499.
7. Weaver Jr., W., Gere, J.M., 1990. *Matrix Analysis of Framed Structures*, third ed. Van Nostrand Reinhold, New York.
8. Machida, K., 1999. *Principles of Molecular Mechanics*. Kodansha and John Wiley & Sons Co-publication, Tokyo.
9. Rappe, A.K., Casewit, C.J., Colwell, K.S., et al., 1992. UFF, A full periodic-table force-field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations. *Journal of American Chemical Society* 114, 10024–10035.
10. Brenner, D.W., 1990. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films. *Physical Review B* 42, 9458.
11. Mayo, S.L., Olafson, B.D., Goddard, W.A., 1990. Dreiding—a generic force-field for molecular simulations. *Journal of Physical Chemistry* 94, 8897–8909.



12. Cornell, W.D., Cieplak, P., Bayly, C.I., et al., 1995. A second generation force-field for the simulation of proteins, nucleic-acids, and organic-molecules. *Journal of American Chemical Society* 117, 5179–5197.
13. Gelin, B.R., 1994. *Molecular Modeling of Polymer Structures and Properties*. Hanser/Gardner Publishers, Cincinnati.
14. Dresselhaus, M.S., Dresselhaus, G., Saito, R., 1995. *Physics of carbon*
15. Dimitrios Savvas, 2014, *Multiscale analysis of CNT and GnP-reinforced composites using FEM/XFEM*, Athens
16. Jorgensen, W.L., Severance, D.L., 1990. Aromatic aromatic interactions—free-energy profiles for the benzene dimer in water, chloroform, and liquid benzene. *Journal of American Chemical Society* 112, 4768–4774.
17. Kelly, B.T., 1981. *Physics of Graphite*. Applied Science, London.
18. [www.m3.tuc.gr](http://www.m3.tuc.gr)
19. L.X. Benedict, S.G. Louie, M.L. Cohen, *Solid State Commun.* 100 (1996) 177.
20. W. Yi, L. Lu, D.-L. Zhang, Z.W. Pan, S.S. Xie, *Phys. Rev. B* 59 (1999) R9015.
21. A. Mizel, L.X. Benedict, M.L. Cohen, S.G. Louie, A. Zettl, N.K. Budraa, W.P. Beyermann, *Phys. Rev. B* 60 (1999) 3264.
22. V.N. Popov, *Carbon* 42 (2004) 991–995.
23. M.S. Dresselhaus, P.C. Eklund, *Adv. Phys.* 49 (2000) 705–814.
24. [http://www.engineeringtoolbox.com/heat-work-energy-d\\_292.html](http://www.engineeringtoolbox.com/heat-work-energy-d_292.html)
25. Kittel, Charles (2005). *Introduction to Solid State Physics* (8th ed.). Hoboken, New Jersey, USA: John Wiley & Sons. p. 141

26. C. Li, T.-W. Chou / Materials Science and Engineering A 409 (2005) 140–144
  
27. Eric Pop, Vikas Varshney and Ajit K. Roy (2012) Thermal properties of graphene: Fundamentals and applications
  
28. F. Ma , H. B. Zheng, Y. J. Sun, D. Yang, K. W. Xu and Paul K. Chu (2012) Strain effect on lattice vibration, heat capacity, and thermal conductivity of graphene
  
29. [http://www.engineersedge.com/materials/specific\\_heat\\_capacity\\_of\\_metals\\_13259.htm](http://www.engineersedge.com/materials/specific_heat_capacity_of_metals_13259.htm)