



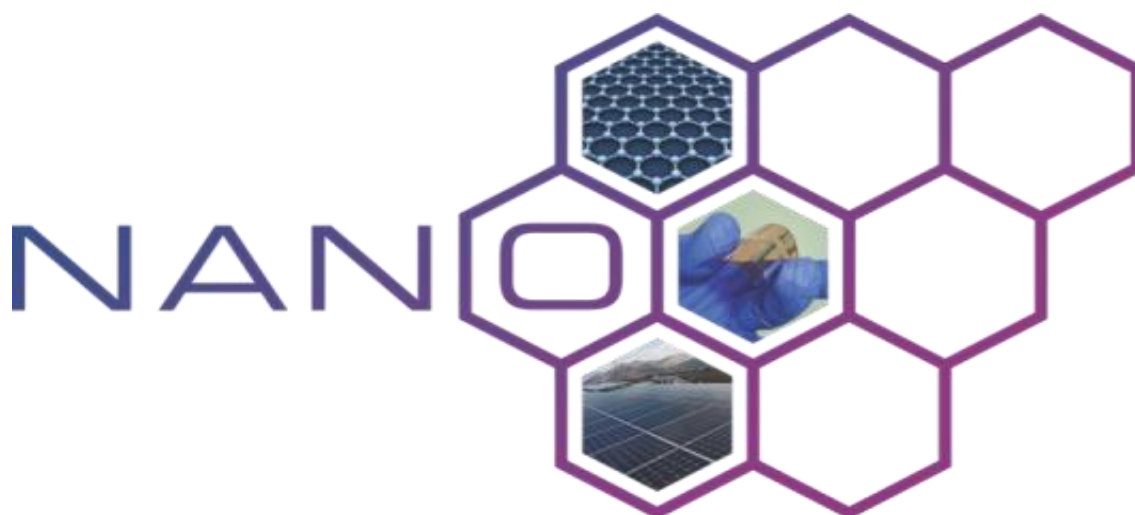
ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ  
ΤΟΜΕΑΣ ΙΙΙ: ΕΠΙΣΤΗΜΗ ΚΑΙ ΤΕΧΝΙΚΗ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Διπλωματική εργασία

ΜΗ ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ ΜΕ ΤΗ  
ΜΕΘΟΔΟ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ

*Χαράλαμπος Θεοδωρίδης*

*Επιβλέπων: Κ. Α. Χαριτίδης, Καθηγητής Ε. Μ. Π.*



ΑΘΗΝΑ, 2019



# Περιεχόμενα

<i>Πρόλογος</i> .....	5
<i>Περίληψη</i> .....	6
<i>Abstract</i> .....	8
<b>1 ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΑΝΘΡΑΚΑ</b> .....	<b>9</b>
1.1 Γενικά .....	9
1.2 Νανοσωλήνες άνθρακα CNTs .....	10
1.3 Δομή και είδη CNTs .....	10
1.4 Ιδιότητες CNTs.....	12
1.4.1 Σύγκριση με γραφίτη .....	12
1.4.2 Ηλεκτρικές και θερμικές ιδιότητες νανοσωλήνων άνθρακα .....	13
1.4.3 Μηχανικές ιδιότητες νανοσωλήνων άνθρακα .....	13
1.4.4 Οπτικές ιδιότητες νανοσωλήνων άνθρακα .....	14
1.5 Μέθοδοι παραγωγής νανοσωλήνων άνθρακα .....	14
1.5.1 Τόξου εκκένωσης (Arc-Discharge).....	14
1.5.2 Εξάτμιση με laser (Laser Ablation ή Pulsed Laser Vaporization ).....	15
1.5.3 Χημική απόθεση ατμών (Chemical Vapor Deposition-CVD).....	15
1.6 Εφαρμογές .....	155
1.6.1 Ιατρική.....	15
1.6.2 Ηλεκτρονική.....	16
1.6.3 Μηχανική.....	16
1.6.4 Βιομηχανία .....	16
<b>2 ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ CNTs ΜΕ ΤΗΝ ΜΕΘΟΔΟ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ</b> .....	<b>18</b>
2.1 Εισαγωγή στη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων .....	18
2.2 Μέθοδοι ανάλυσης και μοντελοποίησης CNTs.....	18
2.2.1 Ατομιστική προσέγγιση .....	18
2.2.2 Προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης.....	19
2.2.3 Προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης στη νανοκλίμακα.....	19
2.3 Μοντελοποίηση CNTs με την προσέγγιση της δομικής μηχανικής .....	21
2.3.1 Ανάπτυξη της θεωρητικής προσέγγισης.....	21
2.3.2 Προσδιορισμός των παραμέτρων που θα εισαχθούν στο μοντέλο.....	23
2.3.3 Σύγκριση της παρούσας προσέγγισης με την βιβλιογραφία.....	23
2.3.4 Συζήτηση ως προς το πάχος τοιχώματος.....	23
2.3.5 Συζήτηση ως προς τον λόγο Poisson.....	24
2.3.6 Συζήτηση ως προς την διάμετρο.....	24
2.3.7 Συγκεντρωτικά οι τιμές των παραμέτρων για τη δημιουργία του μοντέλου.....	25

<b>3 ΚΑΤΑΣΚΕΥΗ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΣΤΟΝ ABAQUS</b>	<b>26</b>
3.1 Γενικά για το λογισμικό Abaqus .....	26
3.2 Εισαγωγή γεωμετρίας.....	26
3.3 Παράδειγμα δημιουργίας μοντέλου στον Abaqus CAE.....	27
<b>4 ΕΠΙΛΥΣΗ ΜΟΝΤΕΛΟΥ ΣΤΟΝ ABAQUS</b>	<b>30</b>
4.1 Παραμόρφωση ναοσωλήνων άνθρακα.....	31
4.2 Αποτελέσματα για το μέτρο ελαστικότητας.....	31
4.2.1 Σύγκριση με την βιβλιογραφία .....	32
4.2.2 Σχέση διαμέτρου-μέτρου ελαστικότητας .....	32
4.2.3 Σχέση μήκους-μέτρου ελαστικότητας.....	34
4.2.4 Σχέση λόγου Poisson-μέτρου ελαστικότητας .....	36
4.3 Αποτελέσματα για το μέτρο διάτμησης.....	38
4.3.1 Σύγκριση με την βιβλιογραφία .....	40
<b>5 ΜΗ ΓΡΑΜΜΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ</b>	<b>41</b>
5.1 Ανάπτυξη θεωρίας μη γραμμικού μοντέλου .....	41
5.2 Κατασκευή μη γραμμικού μοντέλου στον Abaqus.....	42
5.3 Εξαγωγή αποτελεσμάτων .....	43
<b>6 ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΜΕΛΛΟΝΤΙΚΗ ΕΡΕΥΝΑ</b>	<b>46</b>
6.1 Σχολιασμός αποτελεσμάτων και συμπεράσματα.....	46
6.2 Προτάσεις για μελλοντική έρευνα .....	47
<b>7 ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ</b>	<b>48</b>

# Πρόλογος

Η παρούσα διπλωματική εργασία εκπονήθηκε στη σχολή Χημικών Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου και συγκεκριμένα στο Εργαστήριο Προηγμένων και Συνθέτων Υλικών, Νανοϋλικών, Νανοδιεργασιών και Νανοτεχνολογίας. Πραγματοποιήθηκε υπό την επίβλεψη του Καθηγητή Κ.Α. Χαριτίδη, τον οποίο θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά για την πολύτιμη καθοδήγηση που μου προσέφερε. Επιπλέον, τις θερμές μου ευχαριστίες θα ήθελα να υποβάλω και στον μεταδιδακτορικό ερευνητή Δ.Α. Δραγατογιάννη, για τις συμβουλές και την βοήθεια που μου παρείχε. Ιδιαίτερη μνεία θα πρέπει να γίνει για τον μεταδιδακτορικό ερευνητή Γ. Ψυχογιό, χωρίς την συνεισφορά του οποίου δεν θα ήταν δυνατή η ολοκλήρωση της παρούσας εργασίας. Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένεια μου για την διαρκή υποστήριξη.

Χαράλαμπος Θεοδωρίδης

# Περίληψη

Προτείνεται ένα τρισδιάστατο μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων με σκοπό την προσομοίωση των βασικών μηχανικών ιδιοτήτων μονοτοιχωματικών νανοσωλήνων άνθρακα (*single-walled carbon nanotubes*). Η θεμελίωση του μοντέλου βασίζεται στην υπόθεση ότι οι νανοσωλήνες άνθρακα όταν υπόκεινται σε μηχανική φόρτιση, συμπεριφέρονται ως χωροδικτυώματα. Πιο συγκεκριμένα, στο παρόν μοντέλο, γίνεται η παραδοχή ότι οι δεσμοί μεταξύ των ατόμων άνθρακα δύνανται να προσομοιωθούν με στοιχεία δοκού (*beam elements*), ενώ τα άτομα άνθρακα θεωρούνται ως κόμβοι μεταξύ των δοκών.

Στην παρούσα εργασία, διερευνάται κατά πόσο η επιλογή του πεπερασμένου στοιχείου που χρησιμοποιείται για τη μοντελοποίηση των δοκών δύναται να επιφέρει διαφοροποίηση στα λαμβανόμενα αποτελέσματα. Πέραν αυτού, διερευνάται η επίδραση των γεωμετρικών χαρακτηριστικών του νανοσωλήνα στο μέτρο ελαστικότητας και στο μέτρο διάτμησης του. Τέλος, εκτελείται μια σειρά από προσομοιώσεις για να ελεγχθεί κατά πόσο ο λόγος Poisson των δοκών επηρεάζει το μέτρο ελαστικότητας των νανοσωλήνων. Για τους ανωτέρω σκοπούς εκτελέστηκε μια σειρά από προσομοιώσεις σε νανοσωλήνες άνθρακα τύπου *armchair* και *zigzag*.

Ένα πρώτο βασικό συμπέρασμα που εξήχθη από την παρούσα εργασία είναι ότι η λανθασμένη επιλογή πεπερασμένου στοιχείου για την μοντελοποίηση των δοκών μπορεί να επιφέρει σοβαρό σφάλμα στα υπολογιζόμενα μέτρα ελαστικότητας και διάτμησης του νανοσωλήνα. Αυτή η παρατήρηση θεωρείται ιδιαίτερα σημαντική μιας και στα αποτελέσματα που έχουν παρουσιασθεί μέχρι τώρα στη σχετική βιβλιογραφία, δεν δίνονται λεπτομέρειες σχετικά με τον τύπο του πεπερασμένου στοιχείου που έχει χρησιμοποιηθεί. Επιπλέον διαπιστώθηκε ότι η επιλογή του μήκους του νανοσωλήνα πρέπει να υπερβαίνει μια «οριακή» τιμή (της τάξης των 10 nm) ώστε τα λαμβανόμενα αποτελέσματα να μην εμφανίζουν εξάρτηση από αυτό. Οι παρατηρήσεις αυτές ισχύουν τόσο για νανοσωλήνες τύπου *armchair*, όσο και *zigzag*.

Σε ότι αφορά την επίδραση των γεωμετρικών χαρακτηριστικών ενός νανοσωλήνα στις βασικές μηχανικές του ιδιότητες βρέθηκε ότι το μέτρο ελαστικότητας Young αυξάνει ελαφρά συναρτήσει της διαμέτρου του νανοσωλήνα, μέχρι μια «οριακή» διάμετρο άνω της οποίας παραμένει πρακτικά ανεξάρτητο. Πιο συγκεκριμένα, μπορεί να θεωρηθεί ότι τόσο για τους *armchair* όσο και για τους *zigzag* νανοσωλήνες το μέτρο ελαστικότητας τους είναι της τάξης του 1 TPa, τιμή η οποία είναι σε συμφωνία με την γενικά αποδεκτή τιμή που αναφέρεται στη σχετική βιβλιογραφία. Αντίστοιχη συμπεριφορά παρατηρήθηκε και για το μέτρο διάτμησης, το οποίο συγκλίνει προς την τιμή των 0.5 TPa. Τέλος, ο λόγος Poisson των δοκών δεν βρίσκεται να έχει σημαντική επίδραση στα λαμβανόμενα αποτελέσματα.

Στο τελευταίο κομμάτι της εργασίας έγινε μελέτη της μηχανικής συμπεριφοράς νανοσωλήνων άνθρακα στη μη γραμμική περιοχή παραμορφώσεων. Για την περιγραφή της μη γραμμικής συμπεριφοράς χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Morse, όπου η σχέση δύναμης-παραμόρφωσης είναι σημαντικά μη γραμμική για παραμορφώσεις μεγαλύτερες από περίπου 10%. Κατασκευάστηκαν διαγράμματα τάσης-παραμόρφωσης για τους νανοσωλήνες άνθρακα (12.12) και (20.0) και έγινε σύγκριση τους με αποτελέσματα της βιβλιογραφίας.

Συμπερασματικά, το προτεινόμενο μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων αποτελεί ένα αξιόλογο εργαλείο μελέτης της μηχανικής συμπεριφοράς νανοσωλήνων άνθρακα μονού τοιχώματος, δεδομένου ότι δεν παρουσιάζει σημαντικές αποκλίσεις τόσο από άλλα θεωρητικά μοντέλα, όσο και από αντίστοιχες πειραματικές μετρήσεις, ενώ το υπολογιστικό του κόστος είναι ιδιαίτερα μικρό δεδομένου ότι μια προσομοίωση διαρκεί περίπου 1 λεπτό σε έναν σύγχρονο επιτραπέζιο υπολογιστή.

**Λέξεις κλειδιά:** Νανοσωλήνες άνθρακα, CNTs, μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων, μέτρο ελαστικότητας, μέτρο διάτμησης, μη γραμμική συμπεριφορά

# *Abstract*

A three dimensional, finite element model is proposed to simulate the mechanical properties of single-walled carbon nanotubes. The model development is based on the assumption that when subjected to mechanical loading, carbon nanotubes behave like space-frame structures. Specifically, in the present model, the bonds between carbon atoms are considered as connecting load-carrying members and are modeled by beam elements, whereas the carbon atoms are considered as joints of the members and are modeled by nodes.

The present study investigates whether the selection of the finite element that is used for modeling the beams can cause differentiation in the results obtained. Beyond that, the effect of the geometrical characteristics of the nanotube on the elastic modulus and the shear modulus is investigated. Finally, simulations are performed to examine whether the Poisson ratio of the beam elements affects the nanotube elastic modulus. To achieve the above, a series of simulations was performed on armchair and zigzag carbon nanotubes.

A first conclusion, that emerges from the present work, is that an inaccurate selection of the finite element that is used for modeling the beam elements can cause a serious error in the calculations of the Young modulus and the Shear modulus of the nanotube. This observation is considered to be of much importance, since the results presented so far in the relevant literature do not provide details on the type of the finite element that has been used. Furthermore, it has been found that the selection of the length of the nanotube must exceed a critical value ( $\sim 10$  nm), in order that the obtained results do not exhibit an abusive dependence on it. These observations apply on both armchair and zigzag carbon nanotubes.

Regarding the effect of the geometrical characteristics of the nanotube on its mechanical properties, it is found that Young modulus slightly increases in relation to the diameter, up to a critical value of the diameter, above which it remains practically independent. Furthermore, it can be assumed that for both armchair and zigzag carbon nanotubes, Young modulus is approximately 1 TPa, a value that is in agreement with the generally accepted one that is quoted in the literature. Corresponding behavior was also observed for the Shear modulus, which converges to the value of 0.5 TPa. Finally, the Poisson ratio of the beam elements does not appear to have any significant effect on the results obtained.

Furthermore, in the last part of the present work, a study of the mechanical behavior of carbon nanotubes in the non-linear region was performed. Morse potential is used, in order to describe non-linear behavior, where the force-deformation relationship is significantly non-linear for deformations greater than 10%.Diagrams that describe the stress-strain relationship for carbon nanotubes (12.12) and (20.0) are constructed and they are compared with literature results.

In conclusion, the proposed finite element model is a useful tool in the study of the mechanical behavior of single-walled carbon nanotubes, given the fact that it does not show significant deviations from other theoretical models and corresponding experimental studies, while its computational cost is particularly small since a simulation lasts only one minute on a modern desktop computer.

**Keywords:** Carbon nanotubes, Finite element model, Young modulus, Shear modulus, Morse potential, non-linear behavior

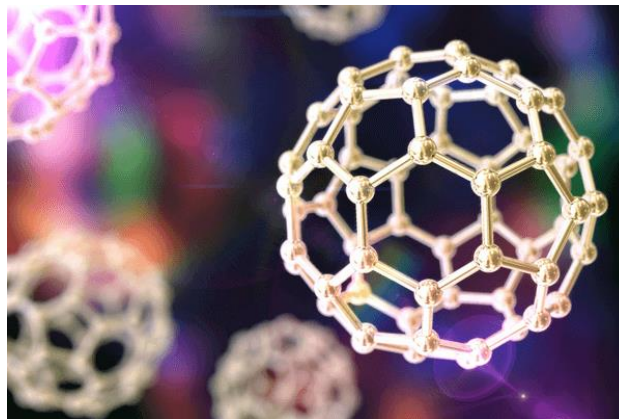


## 1.1 Γενικά

Η νανοτεχνολογία αναφέρεται στην επιστήμη και τεχνολογία που αναπτύσσονται σε κλίμακα ατόμων και μορίων και συγκεκριμένα στο μέγεθος των νανομέτρων, της τάξεως δηλαδή του  $10^{-9}$  m. Βασικό αντικείμενο της είναι ο φλοιός του ατόμου και οι ιδιότητες που μπορεί να αναπτύξει. Τα τελευταία είκοσι χρόνια έχει υπάρξει εκθετική πρόοδος και αυτό οφείλεται σε δύο συνιστώσες, αρχικά στο μικρό χρονικό διάστημα που μετρά το αντικείμενο μελέτης και κατά δεύτερον στις ατελείωτες δυνατότητες, που υπόσχονται να επιλύσουν πολλές παγκόσμιες προκλήσεις σε εφαρμογές όπως η ιατρική, η βιομηχανική παραγωγή και η προστασία του περιβάλλοντος.

Μερικά σπουδαία επιτεύγματα της νανοτεχνολογίας αφορούν τον τομέα της ενέργειας και του περιβάλλοντος. Συγκεκριμένα εστιάζοντας στον τομέα της ενέργειας, η νανοτεχνολογία έχει μειώσει σημαντικά τις αρνητικές επιπτώσεις της παραγωγής, αποθήκευσης και χρήσης ενέργειας και προσφέρει λύσεις όσον αφορά την εξοικονόμηση ενέργειας. Για παράδειγμα, η εφαρμογή υλικών νανοκλίμακας στις φωτοβολταϊκές κυψέλες αυξάνει την απόδοση μετατροπής της ηλιακής ενέργειας και μειώνει σημαντικά το κόστος. Όμως και στον τομέα της αυτοκινητοβιομηχανίας, η νανοτεχνολογία έχει συμβάλει. Τα σωματίδια ροδίου και πλατίνας που χρησιμοποιούνται για να δεσμεύουν τα επιβαρυντικά για το περιβάλλον απόβλητα του κινητήρα αποτελούν ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα.

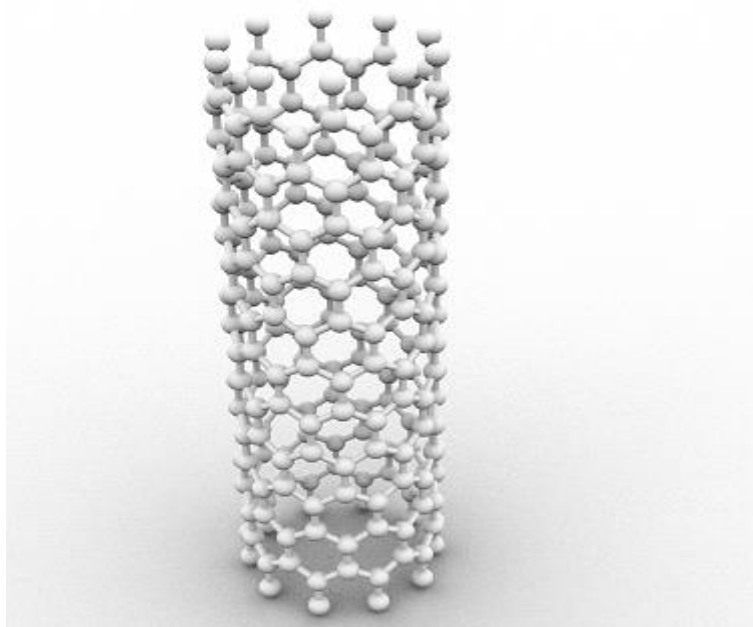
Επιπλέον, στο μέλλον αναμένεται να υπάρξουν ραγδαίες εξελίξεις σε τομείς όπου η νανοτεχνολογία δύναται να δώσει σπουδαίες λύσεις. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα είναι η παραγωγή υδρογόνου, που επί το πλείστον μέχρι σήμερα γίνεται μέσω της ηλεκτρόλυσης του νερού. Όμως έτσι, καταναλώνεται ένα σημαντικό ποσό ενέργειας που έχει ως αποτέλεσμα την αύξηση του κόστους. Η νανοτεχνολογία ενδέχεται να προσφέρει λύση σε αυτό το πρόβλημα, μέσω της διάσπασης του νερού με νανοφωτοκατάλυση, η οποία είναι μία από τις πιο ελπιδοφόρες μεθόδους οικονομικά για την άμεση παραγωγή υδρογόνου από ηλιακή ενέργεια. Επίσης, η νανοτεχνολογία ασχολείται με τη βιώσιμη αποθήκευση ηλεκτρικής ενέργειας. Μερικά από τα πιο σημαντικά ενεργειακά συστήματα που μελετά, με στόχο την αύξηση της απόδοσης, του μεγέθους και της λειτουργικότητάς τους, είναι οι επαναφορτιζόμενες μπαταρίες και οι υπερπυκνωτές. Άξιο αναφοράς, είναι το γεγονός ότι η ηλεκτρολυτική αγωγιμότητα αυξάνεται μέχρι και έξι φορές με την εισαγωγή νανοσωματιδίων από αλουμίνα, πυρίτιο ή ζιρκόνιο σε μη υδατικούς υγρούς ηλεκτρολύτες.



■ ΣΧΗΜΑ 1.1 | Η νανοτεχνολογία θεωρείται από πολλούς η επιστήμη του μέλλοντος. [1]

## 1.2 Νανοσωλήνες άνθρακα CNTs

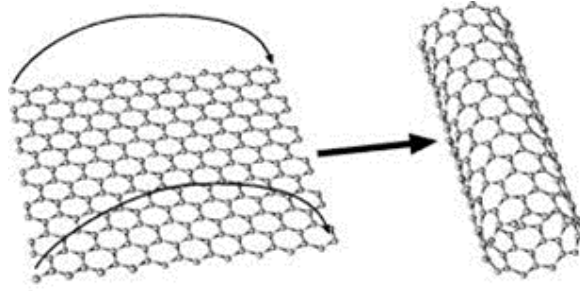
Ένας συγκεκριμένος τομέας της νανοτεχνολογίας στον οποίο έχει διεξαχθεί διεξοδική έρευνα τα τελευταία χρόνια είναι οι νανοσωλήνες άνθρακα, συχνά αναφερόμενοι σε σύντμηση CNTs (*Carbon Nanotubes*). Η ανακάλυψη τους ήταν προ των πυλών το 1956, όταν ο Roger Bacon μελετούσε την τήξη γραφίτη υπό συνθήκες υψηλής θερμοκρασίας και πίεσης. Κατάφερε να παρασκευάσει μακριές λεπτές ίνες από γραφίτη, ωστόσο η έλλειψη ισχυρών ηλεκτρονικών μικροσκοπίων την εποχή εκείνη απέτρεψε την ανακάλυψη τους, κατά τη διαδικασία παρασκευής της ίνας. Ουσιαστικά ανακαλύφθηκαν το 1991 από τον Sumio Iijima [2] και έκτοτε έχουν λάβει μεγάλη προσοχή και εκτεταμένη μελέτη, λόγω των εκπληκτικών φυσικών (μηχανικών, θερμικών και ηλεκτρικών) ιδιοτήτων τους. Οι CNTs σχηματίζονται από φύλλα γραφενίου. Το γραφένιο είναι μία αλλοτροπική μορφή άνθρακα που αποτελείται από ένα μόνο στρώμα ατόμων άνθρακα και είναι διατεταγμένο σε ένα εξαγωνικό πλέγμα. Είναι το δομικό στοιχείο πολλών άλλων αλλότροπων του άνθρακα, όπως ο γραφίτης, το διαμάντι και οι νανοσωλήνες άνθρακα. Στο Σχήμα 1.2 αναπαρίσταται ένας νανοσωλήνας άνθρακα μονού τοιχώματος.



■ ΣΧΗΜΑ 1.2 | Σχηματική αναπαράσταση νανοσωλήνα άνθρακα.

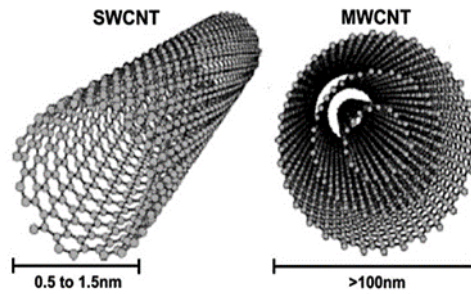
## 1.3 Δομή και είδη CNTs

Υπάρχουν δύο μεγάλες κατηγορίες νανοσωλήνων άνθρακα, οι πολλαπλών τοιχωμάτων (*multi walled carbon nanotubes*–MWCNTs) και οι μονού τοιχώματος (*single walled carbon nanotubes*–SWCNTs). Οι SWCNTs αποτελούνται από ένα μοναδικό φύλλο γραφενίου τυλιγμένο έτσι ώστε να σχηματίζουν ένα κύλινδρο διαμέτρου της τάξης του 1 nm και μήκους μέχρι 1 cm, όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.3. Αντίθετα οι MWCNTs σχηματίζονται από περισσότερους κυλίνδρους που βρίσκονται ο ένας μέσα στον άλλον ανάλογα με τη διάμετρο. Η απόσταση των κυλίνδρων είναι περίπου 0.35 nm, όμοια δηλαδή με τη διεύθυνση των επιπέδων στο γραφίτη. Τέλος, μπορούν να έχουν διάμετρο από 2 έως 100 nm και μήκος κάποιων δεκάδων μικρομέτρων [3].



■ ΣΧΗΜΑ 1.3 Το φύλλο γραφενίου τυλίγεται και σχηματίζει έναν νανοσωλήνα άνθρακα. [4]

Όσον αφορά τη δομή ενός SWCNT, μπορεί να προκύψει εάν θεωρηθεί πως ένα τέλειο γραφιτικό φύλλο περιελίσσεται με τέτοιο τρόπο ώστε δύο ισοδύναμα σημεία (π.χ. η αρχή και το τέλος του πλεγματού ανύσματος C) του εξαγωνικού του πλέγματος να συμπέσουν. Σημειώνεται πως το τέλειο γραφιτικό φύλλο θεωρείται πως αποτελείται αποκλειστικά από εξάγωνα άνθρακα. Στο Σχήμα 1.4 παρουσιάζεται η δομή νανοσωλήνων άνθρακα μονού τοιχώματος και πολλαπλών τοιχωμάτων.



■ ΣΧΗΜΑ 1.4 Οπτική σύγκριση νανοσωλήνων SWCNTs και MWCNTs. [5]

Η μορφή που θα αποκτήσει ο νανοσωλήνας εξαρτάται από τον τρόπο με τον οποίο περιελίσσεται το φύλλο γραφενίου και μπορεί να περιγραφεί με τη βοήθεια των ακέραιων αριθμών  $(n, m)$ , γνωστοί ως δείκτες ελικότητας (*chiral indices*). Οι ακέραιοι αυτοί αριθμοί καθορίζουν το διάνυσμα χειρομορφίας (*chiral vector*):

$$\hat{C} = n\hat{a}_1 + m\hat{a}_2 \quad (1.1)$$

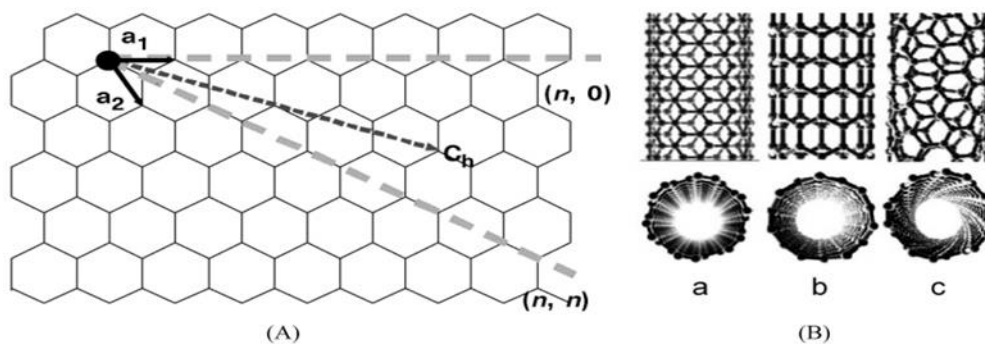
όπου  $\hat{a}_1$  και  $\hat{a}_2$  τα μοναδιαία διανύσματα στο εξαγωνικό πλέγμα γραφενίου δύο διαστάσεων. Επίσης ισχύει  $a = \|\hat{a}_1\| = \|\hat{a}_2\| \approx 2.49 \text{ \AA}$ . Η περιφέρεια του νανοσωλήνα υπολογίζεται από τη σχέση [6]:

$$C = \|\hat{C}\| = a\sqrt{n^2 + m^2 + nm} \quad (1.2)$$

και η διάμετρος από τη σχέση [6]:

$$C = a \frac{\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}{\pi} \quad (1.3)$$

Όπως αναφέρεται παραπάνω, οι δείκτες  $n, m$  της σχέσης (1.1) καθορίζουν την χειρομορφία των νανοσωλήνων άνθρακα. Αν  $n = m$  και η χειρική γωνία (*chiral angle*) είναι  $30^\circ$ , τότε ο νανοσωλήνας θα είναι τύπου *armchair*. Αν η χειρική γωνία είναι  $0^\circ$  και  $n = 0, m \neq 0$  ή  $n \neq 0, m = 0$ , ο νανοσωλήνας είναι τύπου *zigzag*. Οι υπόλοιποι νανοσωλήνες στους οποίους η χειρική γωνία είναι μεταξύ  $0^\circ$  και  $30^\circ$  είναι γνωστοί ως νανοσωλήνες τύπου *chiral*. Οι τρεις τύποι νανοσωλήνων άνθρακα που αναφέρθηκαν, όπως επίσης και η γωνία που σχηματίζουν τα μοναδιαία διανύσματα στο εξαγωνικό πλέγμα γραφενίου φαίνονται στο Σχήμα 1.5.



■ ΣΧΗΜΑ 1.5 Η αριστερή εικόνα δείχνει την γωνία που σχηματίζουν τα μοναδιαία διανύσματα στο εξαγωνικό πλέγμα γραφενίου και η δεξιά τους τρεις τύπους νανοσωλήνων άνθρακα που προκύπτουν ανάλογα με την τιμή της χειρικής γωνίας. [7]

## 1.4 Ιδιότητες CNTs

Σε αυτή την ενότητα θα εξεταστούν οι βασικότερες ιδιότητες των νανοσωλήνων άνθρακα. Αρχικά θα γίνει σύγκριση με τον γραφίτη και στη συνέχεια θα γίνει αναφορά στις ηλεκτρικές, θερμικές, μηχανικές και οπτικές ιδιότητες που εμφανίζουν οι CNTs.

### 1.4.1 Σύγκριση με γραφίτη

Οι φυσικές ιδιότητες των νανοσωλήνων άνθρακα συνδέονται άμεσα με εκείνες του γραφενίου, αφού δεν είναι τίποτα άλλο παρά τυλιγμένα φύλλα γραφενίου. Στον παρακάτω πίνακα [7], [4] παρατίθενται οι ιδιότητες των νανοσωλήνων άνθρακα και αυτές του γραφίτη και γίνεται εύκολα η διαπίστωση πως υπάρχει άμεση συσχέτιση. Στον γραφίτη τα άτομα του άνθρακα σχηματίζουν επίπεδα φύλλα, με δεσμούς πολύ ισχυρούς μεταξύ των ατόμων του ίδιου φύλλου, οι δεσμοί όμως μεταξύ των φύλλων είναι ασθενείς. Ως συνέπεια, ο γραφίτης εμφανίζεται μαλακός και σκίζεται πολύ εύκολα, ενώ οι συνήθεις σχηματισμοί του στη φύση είναι επίσης πλακώδεις. Τέλος, δύναται να εμφανιστεί και σε σπηλοειδείς, ακτινωτές και ακανόνιστες συμπαγείς μάζες.

**ΠΙΝΑΚΑΣ 1** Σύγκριση ιδιοτήτων νανοσωλήνων άνθρακα και γραφίτη.

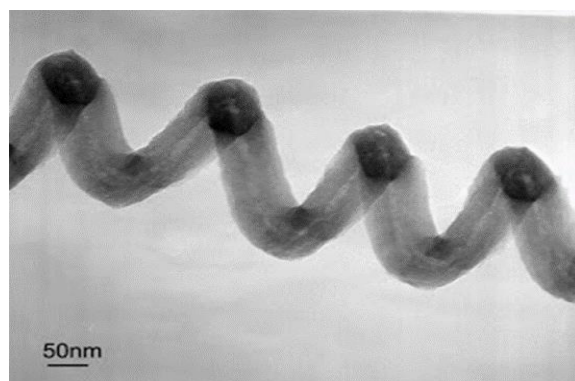
Ιδιότητα	CNTs	Γραφίτης
Ειδικό βάρος	0.8 g/cm <sup>3</sup> για SWCNT 1,8 g/cm <sup>3</sup> για MWCNT	2.6 g/cm <sup>3</sup>
Μέτρο ελαστικότητας	~ 1 TPa για SWCNT ~ 0.7 TPa για MWCNT	1 TPa
Αντοχή	50- 500 GPa για SWCNT 10- 60 GPa για MWCNT	
Θερμική διαστολή	Αμελητέα	- 10 <sup>-6</sup> K <sup>-1</sup>
Θερμική σταθερότητα	> 700 °C σε αέρα > 2800 °C σε κενό	450-600 °C σε αέρα
Θερμική αγωγιμότητα	3000 W · m <sup>-1</sup> · K <sup>-1</sup>	3000 W · m <sup>-1</sup> · K <sup>-1</sup>
Αντίσταση	5-50 μΩ · cm	50 μΩ · cm

### 1.4.2 Ηλεκτρικές και θερμικές ιδιότητες νανοσωλήνων άνθρακα

Οι νανοσωλήνες άνθρακα μπορούν να είναι μεταλλικοί ή ημιαγωγοί. Συγκεκριμένα για τους SWCNTs, ισχύει ότι όλοι οι τύπου armchair εμφανίζουν μεταλλική συμπεριφορά, ενώ οι υπόλοιποι μπορούν να είναι είτε ημιαγωγοί με πολύ μικρό ενεργειακό χάσμα (ή ημιμέταλλα), είτε ημιαγωγοί [8]. Λόγω της γεωμετρίας τους, έχουν αυξημένη αγωγιμότητα και παράλληλα παρατηρείται μικρή αύξηση της θερμοκρασίας τους, σε αντίθεση με τα μέταλλα. Εξίσου ενδιαφέρουσες με τις ηλεκτρικές ιδιότητες είναι και οι θερμικές ιδιότητες και γενικά η θερμική συμπεριφορά των νανοσωλήνων. Η θερμική ενέργεια στους νανοσωλήνες μεταφέρεται ουσιαστικά σε κύματα. Στα υλικά που θεωρούνται καλοί αγωγοί της θερμότητας τα κύματα αυτά κινούνται πολύ γρήγορα σε μία μονοδιάστατη κατεύθυνση, κατά μήκος του άξονα των νανοσωλήνων. Μάλιστα διαπιστώθηκε ότι τα θερμικά αυτά κύματα, κινούνται μέσα στους νανοσωλήνες με μια ταχύτητα της τάξης των 10000 m · sec<sup>-1</sup>, γεγονός που συνάδει με πολύ υψηλή θερμική αγωγιμότητα [8].

### 1.4.3 Μηχανικές ιδιότητες νανοσωλήνων άνθρακα

Από την ανακάλυψη των νανοσωλήνων, οι μηχανικές τους ιδιότητες εξέπληξαν τους ερευνητές, καθώς παρουσιάζουν πολύ υψηλή αντοχή με χαμηλό βάρος, πολύ καλό μέτρο ελαστικότητας και είναι ιδιαίτερα εύκαμπτοι. Μάλιστα, μπορούν να επιμηκυνθούν, να διπλώσουν ή ακόμη και να δημιουργήσουν κύκλους πριν σπάσουν, όπως φαίνεται και στην παρακάτω εικόνα.



■ ΣΧΗΜΑ 1.6

Η εικόνα δείχνει την ελαστικότητα ενός νανοσωλήνα άνθρακα που υπόκειται σε αξονικό εφελκυστικό φορτίο. [7]

Στον πίνακα που παρατίθεται παρακάτω περιέχονται διάφοροι τύποι νανοσωλήνων άνθρακα με τις μηχανικές τους ιδιότητες [9].

**ΠΙΝΑΚΑΣ 2** Μηχανικές ιδιότητες διαφόρων τύπων CNTs.

Υλικό	Μέτρο ελαστικότητας (GPa)	Τάση εφελκυσμού (GPa)	Ποκνότητα (g/cm <sup>3</sup> )	Επιμήκυνση πριν την θραύση (%)
SWCNT	1054	150	1.4	
Armchair SWCNT	940	126.2	-	23.1
Zigzag SWCNT	940	94.5	-	15.6-17.5
Chiral SWCNT	920	-	-	-
MWCNT	1200	150	-	2.6

#### 1.4.4 Οπτικές ιδιότητες νανοσωλήνων άνθρακα

Οι οπτικές ιδιότητες που παρουσιάζουν οι νανοσωλήνες άνθρακα είναι εξίσου σημαντικές. Έχουν την δυνατότητα να απορροφήσουν ή να σκεδάσουν το φως. Επειδή οι οπτικές ιδιότητες εξαρτώνται άμεσα από τη χειρομορφία και τη διάμετρο του εκάστοτε νανοσωλήνα, η οπτική συμπεριφορά που επιδεικνύει μπορεί να οδηγήσει εύκολα και γρήγορα στον καθορισμό του. Εκτός από τη διάμετρο, τις οπτικές ιδιότητες επηρεάζει και το μήκος του νανοσωλήνα. Συγκεκριμένα, η αύξηση του μήκους προκαλεί αύξηση στην ικανότητα του υλικού να απορροφά φως, καθώς επίσης του δίνει και την ιδιότητα να φθορίζει στο κοντινό υπέρυθρο φάσμα [1].

### 1.5 Μέθοδοι παραγωγής νανοσωλήνων άνθρακα

Οι πρώτοι νανοσωλήνες που δημιουργήθηκαν από τον Iijima [2] παράχθηκαν με την τεχνική της ηλεκτρικής εκκένωσης τόξου. Ανεξάρτητα από τη χρησιμοποιούμενη μέθοδο, η δομή του νανοσωλήνα σχηματίζεται με τον ίδιο τρόπο, αυτό που διαφέρει είναι ο τρόπος σχηματισμού. Γενικά, οι τεχνικές παραγωγής νανοσωλήνων άνθρακα μπορούν να χωριστούν σε τρεις κατηγορίες [10], [11]:

- ❖ Τόξου εκκένωσης (*arc-discharge*)
- ❖ Εξάχνωση με laser (*laser ablation*)
- ❖ Χημική απόθεση ατμών (*Chemical Vapor Deposition-CVD*)

#### 1.5.1 Τόξου εκκένωσης (Arc-Discharge)

Η μέθοδος αυτή οδηγεί στην παραγωγή πολύ καλής ποιότητας νανοσωλήνων πολλαπλού και απλού τοιχώματος [10]. Για την παραγωγή τους χρησιμοποιούνται δύο ηλεκτρόδια γραφίτη για την ηλεκτρική εκκένωση παρουσία συνεχούς ρεύματος υψηλής εντάσεως. Για την παραγωγή νανοσωλήνων μονού τοιχώματος (SWCNTS), η άνοδος ενισχύεται συνήθως με νικέλιο ή κοβάλτιο. Στη συνέχεια, και κατά τη διάρκεια της αποφόρτισης, μία ράβδος άνθρακα δημιουργείται στην κάθοδο οδηγώντας στον σχηματισμό τόσο νανοσωλήνων όσο και άμορφου άνθρακα. Η πίεση του αερίου ηλίου, που χρησιμοποιείται για να επιταχυνθεί η εναπόθεση του άνθρακα, αποτελεί μία από τις κρίσιμες παραμέτρους της μεθόδου, μαζί με την ένταση του συνεχούς ρεύματος και την θερμοκρασία.

### 1.5.2 Εξάτμιση με laser (Laser Ablation ή Pulsed Laser Vaporization)

Η μέθοδος της εξάτμισης γραφίτη μέσω παλμικού laser παρουσία καταλύτη και κάποιου αδρανούς αερίου οδηγεί στο σχηματισμό απλού τοιχώματος νανοσωλήνων [11]. Η παρουσία του καταλύτη κρίνεται απαραίτητη, δεδομένου ότι χωρίς αυτόν η μέθοδος θα οδηγούσε στο σχηματισμό φουλερενίων. Πλεονέκτημα της μεθόδου αυτής είναι ότι οδηγεί σε καθαρότερο προϊόν, ενώ παράγοντες που επηρεάζουν την ποσότητα των νανοσωλήνων που παράγεται είναι η ποσότητα και το είδος του καταλύτη, η ισχύς και το μήκος κύματος εκπομπής του laser, η θερμοκρασία, η πίεση και το είδος του αδρανούς αερίου, καθώς και η δυναμική των ρευστών κοντά στον γραφιτικό στόχο. Πρόκειται για μία μέθοδο χαμηλού κόστους σε σχέση με την arc-discharge, μιας και δεν απαιτεί τη χρήση ισχυρού ηλεκτρικού πεδίου που οδηγεί σε προϊόντα απαλλαγμένα από άμορφο άνθρακα.

### 1.5.3 Χημική απόθεση ατμών (Chemical Vapor Deposition-CVD)

Η διαδικασία ανάπτυξης των νανοσωλήνων άνθρακα μέσω χημικής απόθεσης ατμών περιλαμβάνει τη διέλευση ατμών υδρογονανθράκων διαμέσου ενός σωληνοειδούς φούρνου παρουσία καταλύτη σε αρκετά υψηλή θερμοκρασία (600-1200 °C) ώστε οι υδρογονάνθρακες να αποσυντεθούν καταλυτικά [10]. Οι CNTs αναπτύσσονται πάνω στον καταλύτη μέσα στον αντιδραστήρα και συλλέγονται μετά την ψύξη του συστήματος σε θερμοκρασία δωματίου. Ο καταλύτης μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε οποιαδήποτε μορφή (στερεή, υγρή, αέρια) και μπορεί να είναι εξ αρχής τοποθετημένος στο εσωτερικό του αντιδραστήρα είτε να διοχετευθεί σε αυτόν κατά τη διάρκεια της αντίδρασης. Οι τρεις κύριες παράμετροι που επηρεάζουν την ανάπτυξη των CNTs είναι, το είδος του υδρογονάνθρακα, ο καταλύτης και η θερμοκρασία πυρόλυσης. Τέλος, αξίζει να αναφερθεί ότι χαμηλές θερμοκρασίες CVD (600-900 °C) καταλήγουν στον σχηματισμό MWCNTs, ενώ υψηλότερες θερμοκρασίες (900-1200 °C) ευνοούν την ανάπτυξη SWCNTs.

## 1.6 Εφαρμογές

Οι νανοσωλήνες άνθρακα έχουν συγκεντρώσει το ενδιαφέρον των ερευνητών και των επενδυτών σε παγκόσμιο επίπεδο, λόγω των πολυάριθμων εν δυνάμει εφαρμογών τους. Αυτή τη στιγμή κυριότερα εμπόδια στην προώθησή τους είναι η περιορισμένη δυνατότητα παραγωγής τους, καθώς και η δυσκολία συνένωσής τους σε μακροδομές (νήματα) που θα διατηρούν τις ιδιότητές τους.

### 1.6.1 Ιατρική

Η νανοτεχνολογία στην ιατρική περιλαμβάνει εφαρμογές νανοσωματιδίων και έχει επικρατήσει να αναφερόμαστε σε αυτήν με τον όρο νανοϊατρική. Οι νανοσωλήνες άνθρακα θεωρούνται ως ένα πολύ βιο-συμβατό υλικό [12], καθώς κύτταρα μπορούν και αναπτύσσονται στους CNTs, συνεπώς φαίνεται να μην έχουν τοξική επίδραση σε αυτά. Τα χαρακτηριστικά των τοιχωμάτων των CNTs οδηγούν επίσης σε βιοϊατρικές εφαρμογές, όπως αγγειακές ενδοπροσθέσεις, την ανάπτυξη νευρώνων και την ανάπλαση ιστού. Επίσης έχει δειχθεί πειραματικά [13] ότι ένα μόνο σκέλος του DNA μπορεί να συνδεθεί με ένα νανοσωλήνα, πράγμα που μπορεί να βρει μελλοντικά εφαρμογές στη γονιδιακή θεραπεία. Όσον αφορά την καταπολέμηση του καρκίνου, αναφέρεται [12] περίπτωση εμφύτευσης μικροσκοπικών νανοσωλήνων άνθρακα σε καρκινικά κύτταρα, τα οποία ακολούθως εκτέθηκαν σε ακτινοβολία στο εγγύς υπέρυθρο ή λέιζερ. Λόγω των θερμικών ιδιοτήτων των νανοσωλήνων αναπτύχθηκε πολύ υψηλή θερμοκρασία που κατέστρεψε τα καρκινικά κύτταρα, ενώ τα υγιή κύτταρα χωρίς εμφυτευμένους νανοσωλήνες παρέμειναν αβλαβή [13].





■ ΣΧΗΜΑ 1.7 | Στην εικόνα φαίνονται νανορομπότ να επισκευάζουν κύτταρα του αίματος. [13]

## 1.6.2 Ηλεκτρονική

Σκοπός της νανοηλεκτρονικής είναι να βρει απαντήσεις για το πώς θα μπορούσε να αναβαθμίσει τις δυνατότητες των ηλεκτρονικών συσκευών με εν δυνάμει μείωση της κατανάλωσης ενέργειας και ταυτόχρονη μείωση του βάρους και του όγκου τους [5]. Στους στόχους μπορούν να αριθμηθούν η βελτίωση των οθονών ηλεκτρονικών συσκευών, η αύξηση της πυκνότητας μνήμης στα chip και η βελτίωση των τρανζίστορ που χρησιμοποιούνται σήμερα. Η νανοηλεκτρική εστιάζει στην παραγωγή ηλεκτρονικών στοιχείων όπως διαίοδοι, LED και τρανζίστορ από νανοϋλικά.

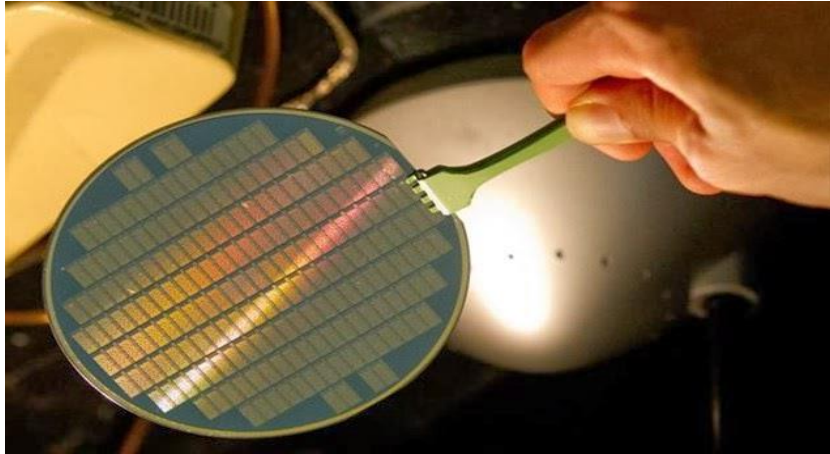
## 1.6.3 Μηχανική

Οι εφαρμογές στον τομέα της μηχανικής αποτελούν εν δυνάμει ένα από τα ευρύτερα πεδία εφαρμογής νανοσωλήνων [14]. Χαρακτηριστικά παραδείγματα είναι η χρήση των CNTs στον αθλητικό εξοπλισμό όπως στις ρακέτες του τένις, στα εξαρτήματα αεροπλάνων όπως στις καλωδιώσεις και στα αλεξικέραυνα, ακόμα και στην αεροδιαστημική όπως στις ασπίδες ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας σε διαστημόπλοια και οθόνες υπολογιστών. Τέλος, όσον αφορά τα διαστημικά ταξίδια, αξίζει να αναφερθεί ότι η χρήση των CNTs ως σένσορες και αισθητήρες είναι μία από τις πιο υποσχόμενες εφαρμογές τους.

## 1.6.4 Βιομηχανία

Τα τελευταία χρόνια η χρήση των CNTs στη βιομηχανία έχει ανθίσει, με βασικούς πρωταγωνιστές δύο κλάδους [14]. Αρχικά, την αυτοκινητοβιομηχανία, όπου οι νανοσωλήνες όταν βρίσκονται στα ελαστικά μέρη του αυτοκινήτου επιτρέπουν ακόμα και την ηλεκτροστατική βαφή του (δεδομένου ότι η προσθήκη νανοσωλήνων σε ένα υλικό το καθιστά αγωγίμο). Επιπλέον, το γεγονός ότι είναι πιο ανθεκτικοί από τον χάλυβα και έξι φορές ελαφρύτεροι δείχνει ότι οχήματα που φέρουν μέρη που απαρτίζονται από νανοσωλήνες άνθρακα θα ήταν ανθεκτικότερα, ελαφρύτερα και θα προσέφεραν ταυτόχρονα οικονομία στα καύσιμα. Κατά δεύτερον στην βιομηχανία πλαστικών, όπου αν προστεθούν σε πολυμερή όπως το πολυαιθυλένιο οδηγούν στην αύξηση του μέτρου ελαστικότητας του πολυμερούς μέχρι και 30%.





■ ΣΧΗΜΑ 1.8 | Στην εικόνα φαίνεται ο κεντρικός επεξεργαστής ενός υπολογιστή, ο οποίος αποτελείται αποκλειστικά από νανοσωλήνες άνθρακα [5]

Στο Σχήμα 1.8 φαίνεται ο επεξεργαστής ενός υπολογιστή που αποτελείται από 142 τρανζίστορ, το καθένα εκ των οποίων περιέχει νανοσωλήνες άνθρακα μήκους που κυμαίνεται από 10 έως 200 νανόμετρα. [5]

# ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ CNTs ΜΕ ΤΗΝ ΜΕΘΟΔΟ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ

## 2

### 2.1 Εισαγωγή στη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων

Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων (Finite Element Method–FEM) είναι μία αριθμητική μέθοδος για την επίλυση προβλημάτων στους τομείς της μηχανικής και της μαθηματικής φυσικής. Εφαρμόζεται σε προβλήματα δομικής ανάλυσης, μεταφοράς θερμότητας, ροής ρευστών, μεταφοράς μάζας και ηλεκτρομαγνητικού δυναμικού. Η αναλυτική λύση αυτών των προβλημάτων απαιτεί την επίλυση προβλημάτων συνοριακών τιμών με μερικές διαφορικές εξισώσεις. Στη συνέχεια προκύπτει ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων και η μέθοδος δίνει κατά προσέγγιση τιμές αγνώστων σε διακριτό αριθμό σημείων πάνω στον εξεταζόμενο τομέα.

Για να λύσει το πρόβλημα υποδιαιρεί ένα μεγάλο πρόβλημα σε μικρότερα, απλούστερα μέρη που ονομάζονται πεπερασμένα στοιχεία. Το επόμενο βήμα είναι, οι απλές εξισώσεις που μοντελοποιούν αυτά τα πεπερασμένα στοιχεία να σχηματίσουν ένα μεγαλύτερο σύστημα εξισώσεων που μοντελοποιεί ολόκληρο το πρόβλημα. Τέλος, η FEM χρησιμοποιεί αριθμητικές μεθόδους για να ελαχιστοποιήσει το σφάλμα. Να σημειωθεί ότι τα πεπερασμένα αυτά στοιχεία συνδέονται σε έναν, επίσης, πεπερασμένο αριθμό κόμβων και είναι συνήθως τετράπλευρα ή τριγωνικά και οι κόμβοι τις περισσότερες φορές βρίσκονται στα άκρα.

Συνοψίζοντας, η FEM έχει τα εξής χαρακτηριστικά:

- ❖ Η ακρίβεια της μεθόδου αυξάνεται όταν αυξάνεται ο αριθμός των στοιχείων. Αντίστοιχα όμως αυξάνεται και το υπολογιστικό κόστος.
- ❖ Έχει την ικανότητα να αντιμετωπίζει ικανοποιητικά προβλήματα με περίπλοκη γεωμετρία, μέσω της δυνατότητας χρησιμοποίησης μη δομημένων πλεγμάτων.

Τα στάδια χρήσης της μεθόδου περιληπτικά είναι τα εξής:

- ❖ Διακριτοποίηση του χώρου με την χρήση στοιχείων πεπερασμένου μεγέθους, τα οποία συνδέονται μεταξύ τους.
- ❖ Προσέγγιση του άγνωστου μεγέθους με τη χρήση απλών συναρτήσεων.
- ❖ Διατύπωση εξισώσεων για ένα οποιοδήποτε στοιχείο.
- ❖ Σύνδεση όλων των στοιχείων του υπολογιστικού χώρου, η οποία οδηγεί στη δημιουργία συστήματος εξισώσεων.
- ❖ Επίλυση του συστήματος εξισώσεων που προκύπτει.

### 2.2 Μέθοδοι ανάλυσης και μοντελοποίησης CNTs

Οι θεωρητικές προσεγγίσεις για τη μοντελοποίηση της μηχανικής συμπεριφοράς των νανοσωλήνων άνθρακα χωρίζονται σε τρεις μεγάλες κατηγορίες, την ατομιστική προσέγγιση (*atomistic approach*), την προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης (*continuum analysis*) και την προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης στην νανοκλίμακα (*nanoscale continuum analysis*).

#### 2.2.1 Ατομιστική προσέγγιση

Οι ατομιστικές τεχνικές μοντελοποίησης μπορούν να καταταχθούν σε τρεις κύριες κατηγορίες, τη μοριακή δυναμική, τη μέθοδο Monte Carlo και τις προσεγγίσεις *ab initio*. Εν γένει, τα ατομιστικά

μοντέλα προβλέπουν τη θέση των ατόμων με βάση δυνάμεις αλληλεπίδρασης και συνοριακές συνθήκες, πληροφορίες απαραίτητες για την επίλυση της κυματικής εξίσωσης Schrodinger. Τα μοντέλα που χρησιμοποιούν την προσέγγιση αυτή, είναι γενικά αξιόπιστα και προβλέπουν επιτυχώς τις μηχανικές ιδιότητες των CNTs, αρκεί να μην πρόκειται για μεγάλου μεγέθους συστήματα.

Οι σπουδαιότερες μελέτες μοντελοποίησης CNTs που έχουν βασισθεί στην ατομιστική προσέγγιση είναι των Yakobson et al. [15], του Kudin [16] και του Lu [17].

Οι Yakobson et al. [15] μοντελοποίησαν CNTs, χρησιμοποιώντας την μέθοδο της μοριακής δυναμικής. Η μελέτη τους, έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον, αφού χρησιμοποίησαν το μικρότερο πάχος τοιχώματος (*wall thickness*) που έχει επιλεγεί, συγκεκριμένα 0.066 nm. Μπορεί τα αποτελέσματα που προέκυψαν να μην ήταν τα καλύτερα δυνατά, αφού για παράδειγμα στον (8,8) armchair νανοσωλήνα προέκυψε μέτρο ελαστικότητας 5.5 TPa. Πάραυτα η μελέτη τους χρησιμοποιήθηκε ως σημείο αναφοράς σε μεταγενέστερες προσομοιώσεις [18] [6].

Η έρευνα του Kudin [16], αποτελεί την πιο δημοφιλή μοντελοποίηση CNTs που έχει γίνει με τη χρήση των προσεγγίσεων *ab initio*. Χρησιμοποίησαν πάχος τοιχώματος 0.089 nm και προέκυψε μέτρο ελαστικότητας 3.859 TPa για τον (8,8) armchair νανοσωλήνα. Βασίσθηκαν στη θεώρηση ότι η προσέγγιση κελύφους ουσιαστικά αγνοεί την σαφή ατομική δομή και δεν απαιτείται η λεπτομερής γνώση των υποατομικών δυνάμεων. Η προσέγγιση αυτή απαιτεί την εύρεση της ακαμψίας του κελύφους από την μέθοδο *ab initio*, αφού δεν υπάρχουν διαθέσιμες πειραματικές μετρήσεις.

Ο Lu [17], χρησιμοποίησε την μέθοδο της μοριακής δυναμικής και επιλέγοντας πάχος τοιχώματος 0.34 nm εξήγαγε αξιόλογα αποτελέσματα. Συγκεκριμένα στον (8,8) armchair νανοσωλήνα βρήκε μέτρο ελαστικότητας 0.974 TPa.

### 2.2.2 Προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης

Βασική θεώρηση των προσεγγίσεων συνεχούς μηχανικής είναι η μοντελοποίηση του νανοσωλήνα ως συνεχούς δομής, με συνεχή κατανομή μάζας και ακαμψίας. Έτσι λοιπόν, η μορφή πλέγματος των CNTs αγνοείται και αντικαθίσταται από ένα συνεχές μέσο. Συχνά χρησιμοποιείται από τους ερευνητές το συνεχές μοντέλο κελύφους (*continuum shell model*) [19]. Όμως οι θεωρίες ρηχού κελύφους δεν είναι ακριβείς για την ανάλυση CNTs και μόνο πιο πολύπλοκες θεωρίες κελύφους δύνανται να παράγουν ακριβή αποτελέσματα για τους CNTs.

Όσον αφορά την προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης, άξια αναφοράς είναι η εργασία των Pantano et al. [19], οι οποίοι μοντελοποίησαν CNTs χρησιμοποιώντας στοιχεία κελύφους (*shell elements*) και προσομοίωσαν τις επιπτώσεις των δυνάμεων Van der Waals. Συγκριτικά με τις προαναφερθείσες προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν βασιζόμενες στην ατομιστική προσέγγιση, οι Pantano et al. [19], χρησιμοποιώντας πάχος τοιχώματος 0.075 nm βρήκαν ότι για τον (8,8) armchair νανοσωλήνα το μέτρο ελαστικότητας είναι 4.84 TPa.

### 2.2.3 Προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης στη νανοκλίμακα

Σε αντίθεση με την προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης, όπου ολόκληροι οι νανοσωλήνες αντικαθίστανται από ένα συνεχές μέσο, στην προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης στη νανοκλίμακα (NCM) γίνεται αντικατάσταση μόνο του διατομικού δεσμού άνθρακα - άνθρακα από ένα συνεχές στοιχείο, όπως μία δοκός, μία ράβδος ή ένα ελατήριο. Δύο κύριες μέθοδοι επίλυσης χρησιμοποιούνται κατά την προσέγγιση NCM, η quasi-continuum και η equivalent-continuum μέθοδοι, οι οποίες αναπτύχθηκαν από τους Tadmor et. al. [20] και τους Odegard et. al. [21] αντίστοιχα. Η δεύτερη μέθοδος, που είναι και αυτή που θα μας απασχολήσει, παρέχει ένα συσχετισμό μεταξύ μοριακής δυναμικής και δομικής μηχανικής για συνεχή μέσα. Συγκεκριμένα, ο συσχετισμός αυτός προέρχεται από την εξίσωση της ολικής μοριακής δυναμικής ενέργειας μιας νανοδομής, με την ενέργεια παραμόρφωσης των ισοδύναμων συνεχών στοιχείων από τα οποία και αποτελείται.

Οι σπουδαιότερες μελέτες μοντελοποίησης CNTs που έχουν βασισθεί στην προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης στη νανοκλίμακα είναι, των Odegard et. al. [21], των Li et al. [18] και των Cheng et. al. [22].

Όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, οι Odegard et. al. [21] εισήγαγαν την μέθοδο equivalent-continuum. Συγκεκριμένα, ασχολήθηκαν με δύο ανεξάρτητα παραδείγματα. Αρχικά, με τον προσδιορισμό της ενεργής συνεχούς γεωμετρίας και συγκεκριμένα με το πάχος τοιχώματος και κατά δεύτερον με την κάμψη του φύλλου γραφενίου. Ως αποτέλεσμα καθορίστηκε ένα ενεργό πάχος τοιχώματος, που είναι σημαντικά μεγαλύτερο από την απόσταση διαδοχικών φύλλων γραφενίου, ίσο με 0.69 nm. Σημειώνεται ότι το εν λόγω πάχος τοιχώματος είναι το μεγαλύτερο που έχει χρησιμοποιηθεί στην μοντελοποίηση CNTs.

Οι Li et al. [18] είναι αυτοί που εμπλούτισαν την θεωρία που εισήγαγαν οι Odegard et. al. [21], δημιουργώντας μια προσέγγιση βασισμένη σε αρχές της δομικής μηχανικής, όπου οι διατομικές δυναμικές ενέργειες συσχετίστηκαν με τις ενέργειες παραμόρφωσης των ισοδύναμων δοκών που προσομοιάζουν τους δεσμούς άνθρακα-άνθρακα. Συγκεκριμένα, τα αποτελέσματα τους έρχονται σε συμφωνία με τα ήδη υπάρχοντα θεωρητικά και πειραματικά αποτελέσματα [23]. Επί παραδείγματι, στον (8,8) armchair νανοσωλήνα, με πάχος τοιχώματος  $t = 0.34$  nm, το μέτρο ελαστικότητας που προκύπτει είναι 1.01 TPa. Επιπλέον, υποστήριξαν ότι η συσχέτιση μεταξύ της διαμέτρου των CNTs και του μέτρου Young μπορεί να γίνει κατανοητή από τον προσανατολισμό του διατομικού δεσμού C-C. Κατέληξαν στο συμπέρασμα ότι σε γενικές γραμμές το μέτρο ελαστικότητας δεν εξαρτάται από τους δείκτες διανύσματος (n,m), έτσι οι armchair και zigzag νανοσωλήνες δεν παρουσιάζουν κάποια σημαντική διαφοροποίηση.

Επίσης υποστήριξαν ότι για διαμέτρους μεγαλύτερες από 0.7 nm, το μέτρο Young των νανοσωλήνων zigzag είναι ελαφρώς μεγαλύτερο από αυτό των armchair, ενώ τα πράγματα αντιστρέφονται για διαμέτρους μικρότερες των 0.7 nm. Αυτό οφείλεται στο ότι στους zigzag CNTs, το ένα τρίτο των δεσμών είναι ευθυγραμμισμένο με την κατεύθυνση που ασκείται δύναμη, ενώ στους armchair CNTs κάθε δεσμός βρίσκεται υπό γωνία με τον άξονα που ασκείται η δύναμη. Έτσι, η διαφορά στην ελαστική συμπεριφορά των νανοσωλήνων άνθρακα, είναι άμεση συνέπεια της εγγενούς ατομικής δομής.

Επιπλέον, υποστήριξαν ότι για διαμέτρους μικρότερες του 1 nm, το μέτρο κατά Young εμφανίζει ισχυρή εξάρτηση από την διάμετρο, ενώ όταν οι CNTs που εξετάζονται έχουν διάμετρο μεγαλύτερη του 1 nm, η εξάρτηση γίνεται ιδιαίτερα ασθενής. Μια πιθανή εξήγηση αυτής της συμπεριφοράς είναι, όπως τόνισαν, η επίδραση της κυρτότητας του νανοσωλήνα, η οποία προκαλεί μεγαλύτερη παραμόρφωση στους δεσμούς μεταξύ των ανθράκων, άρα και μεγαλύτερη επιμήκυνση. Όσο αυξάνεται η διάμετρος, η επίδραση της κυρτότητας μειώνεται και το μέτρο ελαστικότητας προσεγγίζει αυτό του φύλλου γραφενίου.

Οι Cheng et al. [22], συσχέτισαν τη μοριακή δυναμική και την equivalent-continuum μέθοδο ώστε να προσομοιώσουν το αρχικό στάδιο ισορροπίας του νανοσωλήνα και να θεμελιώσουν ένα μοντέλο κατάλληλο για στατική και δυναμική ανάλυση. Μοντελοποίησαν νανοσωλήνες armchair και zigzag και για να επιβεβαιώσουν την προτεινόμενη τεχνική που εισήγαγαν σύγκριναν τα αποτελέσματα με τα αντίστοιχα της βιβλιογραφίας.

Οι K. I. Tserpes και P. Papanikos [6] προσομοίωσαν νανοσωλήνες άνθρακα τριών ειδών, armchair, zigzag και chiral με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων. Πραγματεύτηκαν την επιρροή που έχει το πάχος τοιχώματος και η διάμετρος στο μέτρο ελαστικότητας νανοσωλήνων άνθρακα μονού τοιχώματος, SWCNTs. Όπως οι Li et al. [18], βασίστηκαν στην υπόθεση ότι οι νανοσωλήνες άνθρακα όταν υπόκεινται σε φόρτιση συμπεριφέρονται ως χωροδικτύωματα. Επίσης ακολούθησαν τον δρόμο των προαναφερθέντων όσον αφορά την ενεργειακή θεώρηση και κατέληξαν στις ίδιες ακριβώς τιμές για τις σταθερές δύναμης.

## 2.3 Μοντελοποίηση CNTs με την προσέγγιση της δομικής μηχανικής

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε η προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης στη νανοκλίμακα και πιο συγκεκριμένα η equivalent continuum μέθοδος.

### 2.3.1 Ανάπτυξη της θεωρητικής προσέγγισης

Από τα δομικά χαρακτηριστικά των νανοσωλήνων άνθρακα, είναι λογικό να γίνει η πρόβλεψη ότι πιθανώς υπάρχει ομοιότητα μεταξύ των παραμορφώσεων των CNTs και των χωροδικτυωμάτων (*space-frame structures*). Όσον αφορά τα χωροδικτυώματα, είναι εύκολη η πρόσβαση στις τιμές που αφορούν τις ιδιότητες των υλικών και των στοιχείων από εγχειρίδια δεδομένων. Όμως, για τους νανοσωλήνες άνθρακα, δεν υπάρχουν διαθέσιμες πληροφορίες σχετικά με τις ιδιότητές τους. Συνεπώς, είναι επιτακτική ανάγκη να βρεθεί μία σύνδεση μεταξύ της μοριακής δυναμικής και της μακροσκοπικής δομικής μηχανικής.

Από τη σκοπιά της μοριακής μηχανικής, ένας νανοσωλήνας άνθρακα μπορεί να θεωρηθεί ως ένα μεγάλο μόριο που αποτελείται από άτομα άνθρακα [18]. Οι ατομικοί πυρήνες μπορούν να θεωρηθούν ως υλικά σημεία. Οι κινήσεις τους καθορίζονται από ένα πεδίο δύναμης, το οποίο δημιουργείται από αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίου-πυρήνα και αλληλεπιδράσεις πυρήνα-πυρήνα. Συνήθως, το πεδίο δύναμης εκφράζεται με τη μορφή δυναμικής ενέργειας και εξαρτάται αποκλειστικά από τις σχετικές θέσεις των πυρήνων που αποτελούν το μόριο.

Η γενική έκφραση της δυναμικής ενέργειας, παραλείποντας την ηλεκτροστατική αλληλεπίδραση, είναι ένα άθροισμα ενεργειών που οφείλονται στο σθένος ή στις δεσμικές και μη δεσμικές αλληλεπιδράσεις [18]:

$$U = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum U_\varphi + \sum U_\omega + \sum U_{vdw} \quad (2.1)$$

όπου  $U_r$  η ενέργεια έκτασης των δεσμών,  $U_\theta$  η ενέργεια κάμψης γωνίας δεσμού,  $U_\varphi$  η ενέργεια στρέψης,  $U_\omega$  η ενέργεια αναστροφής (*improper-out of plane torsion*) και τέλος  $U_{vdw}$  η ενέργεια μη δεσμικής αλληλεπίδρασης Van der Waals.

Στο παρελθόν, έγινε προσπάθεια από πολλούς ερευνητές που ασχολήθηκαν με τη μοριακή μηχανική, να βρουν λειτουργικές μορφές (ως προς την χρησιμοποίησή τους στην επίλυση προβλημάτων) αυτών των δυναμικών ενεργειακών όρων. Οι μορφές αυτές ποικίλουν ανάλογα με το εξεταζόμενο υλικό και τις συνθήκες επιβολής της δύναμης. Σε γενικές γραμμές, για τα ομοιοπολικά συστήματα, οι κύριες συμβολές στη συνολική ενέργεια προέρχονται από τους πρώτους τέσσερις όρους. Έτσι, μέσω της προσέγγισης ισοδυναμίας ενεργειών, υποθέτοντας μικρές παραμορφώσεις, η αρμονική προσέγγιση είναι επαρκής για την περιγραφή της ενέργειας. Επίσης, για λόγους ευκολίας πραγματοποιείται συγχώνευση της ενέργειας στρέψης και της ενέργειας αναστροφής σε έναν ενιαίο όρο [18]:

$$U_r = \frac{1}{2}k_r(r - r_0)^2 = \frac{1}{2}k_r(\Delta r)^2 \quad (2.2)$$

$$U_\theta = \frac{1}{2}k_\theta(\theta - \theta_0)^2 = \frac{1}{2}k_\theta(\Delta\theta)^2 \quad (2.3)$$

$$U_\tau = U_\varphi + U_\omega = \frac{1}{2}k_\tau(\Delta\varphi)^2 \quad (2.4)$$

όπου τα  $k_r$ ,  $k_\theta$  και  $k_\tau$  είναι η σταθερά δύναμης έκτασης δεσμού, η σταθερά δύναμης κάμψης γωνίας δεσμού και η αντίσταση στρέψης αντίστοιχα και τα σύμβολα  $\Delta r$ ,  $\Delta\theta$  και  $\Delta\varphi$  αντιπροσωπεύουν την αύξηση έκτασης δεσμού, την μεταβολή στη γωνία κάμψης του δεσμού και την μεταβολή στη γωνία στρέψης του δεσμού αντίστοιχα.

Σε έναν νανοσωλήνα άνθρακα, τα άτομα άνθρακα συνδέονται μεταξύ τους με ομοιοπολικούς δεσμούς και σχηματίζουν εξάγωνα στο τοίχωμα του σωλήνα. Αυτοί οι ομοιοπολικοί δεσμοί έχουν χαρακτηριστικό μήκος δεσμού και γωνίες δεσμού σε έναν τρισδιάστατο χώρο. Όταν ένας νανοσωλήνας υπόκειται σε εξωτερικές δυνάμεις, οι μετατοπίσεις των επιμέρους ατόμων περιορίζονται από αυτούς τους δεσμούς. Η ολική παραμόρφωση του νανοσωλήνα λοιπόν, είναι το αποτέλεσμα των αλληλεπιδράσεων των δεσμών. Επομένως, θεωρώντας τους ομοιοπολικούς δεσμούς ως συνδεδεμένα στοιχεία ανάμεσα στα άτομα άνθρακα, προκύπτει το συμπέρασμα ότι ένας νανοσωλήνας άνθρακα δύναται να προσομοιωθεί ως ένα χωροδικτύωμα, με τα άτομα άνθρακα να λειτουργούν ως αρθρώσεις των συνδεδεμένων στοιχείων [18].

Στη συνέχεια, θα ορισθούν οι σχέσεις μεταξύ των παραμέτρων της ακαμψίας (*sectional stiffness*) στη δομική μηχανική και των σταθερών της δύναμης στη μοριακή μηχανική. Για ευκολία θα γίνει η παραδοχή ότι τα τμήματα των δεσμών άνθρακα-άνθρακα είναι όμοια. Επειδή η παραμόρφωση ενός χωροδικτύωματος οδηγεί στην αλλαγή των ενεργειών τάσης, προσδιορίζονται οι τρεις παράμετροι ακαμψίας που βασίζονται στην ισοδυναμία ενέργειας. Αξίζει να σημειωθεί ότι κάθε ένας από τους ενεργειακούς όρους στη μοριακή μηχανική [εξισώσεις (2.2)-(2.4)] αντιπροσωπεύει μία ατομική αλληλεπίδραση και πως θα πρέπει επίσης να καθορισθεί η ενέργεια τάσης των δομικών στοιχείων. Σύμφωνα με τη θεωρία της κλασικής δομικής μηχανικής, η ενέργεια παραμόρφωσης μιας ομοιόμορφης δοκού μήκους  $L$  υποβαλλόμενης σε αξονική δύναμη  $N$  είναι [18]:

$$U_A = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = \frac{1}{2} \frac{N^2 L}{EA} = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (\Delta L)^2 \quad (2.5)$$

όπου  $\Delta L$ , είναι η ολική αξονική παραμόρφωση. Η ενέργεια παραμόρφωσης μιας ομοιόμορφης δοκού υπό καθαρή κάμψη  $M$ , είναι [18]:

$$U_M = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = \frac{2EI}{L} \alpha^2 = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (2\alpha)^2 \quad (2.6)$$

όπου  $2\alpha$ , είναι η ολική σχετική γωνία περιστροφής. Η ενέργεια παραμόρφωσης μιας ομοιόμορφης δοκού υπό καθαρή στρέψη  $T$ , είναι [18]:

$$U_T = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{1}{2} \frac{T^2 L}{GJ} = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\Delta\beta)^2 \quad (2.7)$$

όπου  $\beta$ , είναι η σχετική γωνία στρέψης και  $J$  η πολική ροπή αδράνειας. Είναι λογικό να συμπεράνουμε ότι ο όρος  $2\alpha$  είναι ισοδύναμος με το  $\Delta\theta$ , ο όρος  $\Delta L$  είναι ισοδύναμος με τον όρο  $\Delta r$  και ότι όρος  $\Delta\beta$  είναι ισοδύναμος με τον όρο  $\Delta\varphi$  [18]. Επομένως, συγκρίνοντας τις εξισώσεις (2.2)-(2.4) με τις εξισώσεις (2.5)-(2.7) προκύπτει μία άμεση σχέση ανάμεσα στις παραμέτρους της δομικής μηχανικής  $EA$ ,  $EI$  και  $GJ$  και τις παραμέτρους της μοριακής μηχανικής  $k_r$ ,  $k_\theta$  και  $k_\tau$ :

$$\frac{EA}{L} = k_r \quad (2.8)$$

$$\frac{EI}{L} = k_\theta \quad (2.9)$$

$$\frac{GJ}{L} = k_\tau \quad (2.10)$$

Οι εξισώσεις (2.8)-(2.10) θέτουν τις βάσεις της εφαρμογής της θεωρίας της δομικής μηχανικής στη μοντελοποίηση νανοσωλήνων άνθρακα. Επομένως στα προβλήματα όπου οι σταθερές  $k_r$ ,  $k_\theta$  και  $k_\tau$  είναι γνωστές, οι παράμετροι ακαμψίας είναι εύκολο να υπολογισθούν. Τέλος, ακολουθώντας

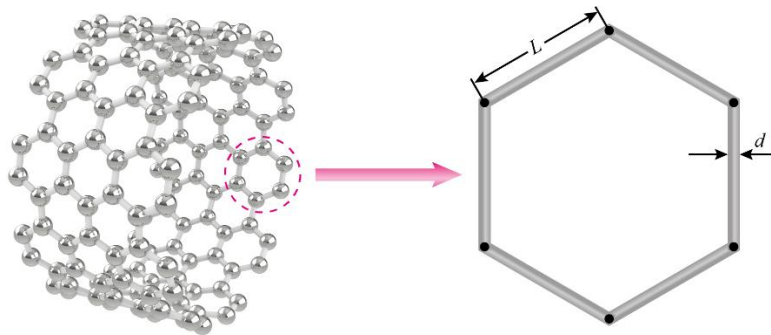
την διαδικασία λύσης της μεθόδου των μητρώων ακαμψίας για τα χωροδικτύωματα, μπορεί να προσομοιωθεί η παραμόρφωση και η ελαστική συμπεριφορά νανοσωλήνων άνθρακα.

### 2.3.2 Προσδιορισμός των παραμέτρων που θα εισαχθούν στο μοντέλο

Οι τιμές των σταθερών δύναμης επιλέγονται βάσει της εμπειρίας που υπάρχει πάνω στα φύλλα γραφενίου [6] [18] :

$$\begin{aligned} k_r &= 938 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{\AA}^{-2} = 6.52 \times 10^{-7} \text{ N} \cdot \text{nm}^{-1} \\ k_\theta &= 126 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{rad}^{-2} = 8.76 \times 10^{-10} \text{ N} \cdot \text{nm} \\ k_\tau &= 40 \text{ kcal} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{rad}^{-2} = 2.78 \times 10^{-10} \text{ N} \cdot \text{nm} \cdot \text{rad}^{-2} \end{aligned}$$

Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως, η μοντελοποίηση των νανοσωλήνων άνθρακα που θα προσομοιωθούν βασίζεται στην υπόθεση ότι συμπεριφέρονται ως ένα χωροδικτύωμα. Αυτό σημαίνει ότι οι ισοδύναμες δοκοί-πεπερασμένα στοιχεία προσομοιάζουν τους δεσμούς άνθρακα-άνθρακα (Σχήμα 2.1) και ως εκ τούτου θεωρείται ότι το μήκος τους είναι  $1.421 \text{ \AA}$ , το οποίο είναι το μήκος του ομοιοπολικού δεσμού άνθρακα-άνθρακα. Η επιφάνεια εγκάρσιας διατομής του νανοσωλήνα είναι  $A_0 = \pi d^2$  όπου  $d$  είναι η διάμετρος του σωλήνα.



■ ΣΧΗΜΑ 2.1 | Οι δεσμοί άνθρακα-άνθρακα προσομοιώνονται με στοιχεία δοκού

### 2.3.3 Σύγκριση της παρούσας προσέγγισης με την βιβλιογραφία

Ενώ οι βασικές πτυχές της θεωρίας που ανέπτυξαν οι Tserpes et al. [6] συμβαδίζουν πλήρως με αυτές των Li et al. [18], υπάρχουν δύο σημαντικές διαφοροποιήσεις. Αρχικά, θεώρησαν ότι το πάχος τοιχώματος ισούται με τη διάμετρο του δεσμού, που δίνεται από τη σχέση  $d = 4\sqrt{k_r/k_\theta}$  και ως εκ τούτου χρησιμοποίησαν πάχος τοιχώματος ίσο με  $0.147 \text{ nm}$ . Επομένως, η εξίσωση (2.8) τους έδωσε μέτρο ελαστικότητας δοκού ίσο με  $5.49 \text{ TPa}$  και η (2.9)  $G = 0.871 \text{ TPa}$ . Η δεύτερη διαφορά έγκειται στον λόγο Poisson, ο οποίος υπολογίζεται από την σχέση  $G = E/2(1 + \nu)$ , που ισχύει για μία ισότροπη και ομοιόμορφη ράβδο. Το ζεύγος  $E$  και  $G$  που επέλεξαν, δίνει λόγο Poisson ίσο με  $2.15$ .

### 2.3.4 Συζήτηση ως προς το πάχος τοιχώματος

Το πάχος τοιχώματος των νανοσωλήνων άνθρακα, είναι μία από τις βασικότερες παραμέτρους στη μοντελοποίηση νανοσωλήνα άνθρακα και η επιλογή του παίζει σημαντικό ρόλο στην έκβαση των τελικών αποτελεσμάτων [6] [18] [15]. Οι ερευνητές, έχουν χρησιμοποιήσει μεγάλο εύρος τιμών για το πάχος τοιχώματος, που κυμαίνεται από  $0.066 \text{ nm}$  (Yakobson [15]) έως  $0.69 \text{ nm}$  (Odegard [21]). Στις περισσότερες μελέτες βέβαια, έχει γίνει η παραδοχή ότι το πάχος τοιχώματος των CNTs ισούται με την απόσταση διαδοχικών φύλλων γραφίτη, δηλαδή είναι ίσο με  $0.34 \text{ nm}$ . Άλλες μελέτες, όπως των Pantano et al. [19], υποδεικνύουν ένα ενεργό πάχος τοιχώματος ίσο με  $0.075 \text{ nm}$ . Για

παράδειγμα, στον (8,8) νανοσωλήνα άνθρακα που αναφέρθηκε και παραπάνω, για πάχος τοιχώματος από 0.066 nm μέχρι 0.69 nm το μέτρο ελαστικότητας που προκύπτει ποικίλλει, από 5.296 TPa μέχρι 0.507 TPa. Πλέον είναι γνωστό, όπως είχε προβλεφθεί και από τους Odegard et al. [21], ότι το μέτρο ελαστικότητας των CNTs είναι αντιστρόφως ανάλογο της επιφάνειας εγκάρσιας διατομής τους, συνεπώς το μέτρο ελαστικότητας κατά Young είναι αντιστρόφως ανάλογο του πάχους τοιχώματος.

### 2.3.5 Συζήτηση ως προς τον λόγο Poisson

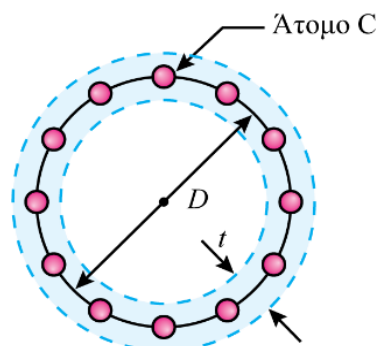
Όπως είναι γνωστό, για ένα ομογενές ιστροπικό υλικό, ισχύει ότι  $\nu = \frac{E}{2G-1}$  και πως για ελαστικά ιστροπικά υλικά  $-1 \leq \nu \leq 0.5$ . Όσον αφορά το λόγο Poisson, τόσο στην πρωτότυπη δουλειά των Fan et al. [23], όσο και στην πλειοψηφία της βιβλιογραφίας που είναι διαθέσιμη [17] [21], η τιμή που χρησιμοποιείται είναι αυθαίρετη και έχει μοναδικό περιορισμό να είναι ένας θετικός αριθμός μικρότερος του 0.5. Στην δημοσίευση των Tserpes et al. [6], για παράδειγμα, αυτός ο περιορισμός παραβιάζεται, αφού το ζεύγος  $E$  και  $G$  που χρησιμοποίησαν δίνει  $\nu = 2.15$ . Αξίζει να σημειωθεί πως στο μοντέλο των Li et al. [18] αυτή η αδυναμία δεν εμφανίζεται αφού δεν απαιτείται η γνώση των  $E$ ,  $G$  και  $d$ , αλλά μόνο το γινόμενο των γινομένων  $EA$ ,  $EI$  και  $GJ$ . Για να ξεπεραστεί αυτή η αδυναμία του μοντέλου, σε όλες τις περιπτώσεις που παρουσιάζονται έχει θεωρηθεί  $\nu = 0.3$ , δεδομένου ότι υπάρχουν σαφείς ενδείξεις ότι η τιμή του λόγου Poisson δεν επηρεάζει σημαντικά το μέτρο ελαστικότητας Young του νανοσωλήνα, για τιμές μεταξύ 0.05 και 0.3, όπως υποστήριξαν και οι Fan et al. [23].

### 2.3.6 Συζήτηση ως προς την διάμετρο

Όπως έχει αναφερθεί και παραπάνω, οι νανοσωλήνες άνθρακα αποτελούνται από διαδοχικές εξαγωνικές κυψελίδες και ανάλογα με τη διάμετρο αλλάζει και ο αριθμός τους. Όσον αφορά τον ακριβή υπολογισμό της διαμέτρου που αντιστοιχεί σε κάθε είδος νανοσωλήνα με δείκτες διανύσματος  $(n, m)$ , δηλαδή  $(n, n)$  για τους armchair και  $(n, 0)$  για τους zigzag νανοσωλήνες, οι Dresselhaus et al. [24], έδειξαν ότι ισχύει ο παρακάτω τύπος υπολογισμού:

$$D = \frac{\sqrt{n^2 + m^2 + nm}}{\pi} \sqrt{3}l \quad (2.11)$$

και συγκεκριμένα  $D = 3nl/\pi$  για τους armchair νανοσωλήνες, ενώ  $D = \sqrt{3}nl/\pi$  για τους zigzag νανοσωλήνες. Στο Σχήμα 2.2 φαίνεται η διάμετρος και το πάχος τοιχώματος του νανοσωλήνα.



■ ΣΧΗΜΑ 2.2 | Σχηματική αναπαράσταση διαμέτρου και πάχους τοιχώματος νανοσωλήνα άνθρακα



### 2.3.7 Συγκεντρωτικά οι τιμές των παραμέτρων για τη δημιουργία του μοντέλου

Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, ενώ οι δημοσιεύσεις των Li et al. [18] και Tserpes et al. [6] φαίνεται να έχουν κοινό παρονομαστή, διαφέρουν σε κάποια καίρια σημεία. Στην παρούσα εργασία, γίνεται χρήση της θεώρησης των Li et al. [18], όσον αφορά το πάχος τοιχώματος, δηλαδή  $t = 0.34$ . Όμως, γίνεται επίσης χρήση του τύπου που χρησιμοποίησαν οι Tserpes et al. [6] [24], όσον αφορά τη διάμετρο του στοιχείου δοκού με την σημαντική διαφορά ότι γίνεται η παραδοχή ότι η διάμετρος του στοιχείου δοκού ισούται με το πάχος τοιχώματος. Έτσι η διάμετρος του στοιχείου δοκού θα υπολογιστεί από τον τύπο:  $d = 4\sqrt{k_r/k_\theta} = 0.147$ .

**ΠΙΝΑΚΑΣ 3** Σύνοψη παραμέτρων του μοντέλου.

Παράμετρος	Τιμή
$k_r$	$6.52 \times 10^{-7} \text{ N} \cdot \text{nm}^{-1}$
$k_\theta$	$8.76 \times 10^{-10} \text{ N} \cdot \text{nm}$
$k_\tau$	$2.78 \times 10^{-10} \text{ N} \cdot \text{nm} \cdot \text{rad}$
$\alpha_{c-c}$	$1.421 \text{ \AA}$
$t$	$0.34 \text{ nm}$
$\nu$	$0.3$
$E_{BEAM}$	$5.49 \text{ Tpa}$

### 3.1 Γενικά για το λογισμικό Abaqus

Η κατασκευή του μοντέλου γίνεται στο εμπορικό λογισμικό Abaqus (έκδοση 6.13-1), το οποίο εξειδικεύεται στην ανάλυση με πεπερασμένα στοιχεία και βρίσκει εφαρμογή σε προβλήματα μηχανικής που λύνονται με τη βοήθεια υπολογιστή. Συγκεκριμένα, το Abaqus/CAE (*Complete Abaqus Environment*) είναι μια εφαρμογή λογισμικού που χρησιμοποιείται τόσο για τη μοντελοποίηση και ανάλυση των μηχανικών εξαρτημάτων και συναρμογών (*assembly*) όσο και για την απεικόνιση του αποτελέσματος ανάλυσης πεπερασμένων στοιχείων.

Κάθε ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων στο Abaqus αποτελείται από τρία ξεχωριστά στάδια:

- ❖ Προεπεξεργασία ή μοντελοποίηση: Αυτό το στάδιο περιλαμβάνει τη δημιουργία ενός αρχείου εισόδου που περιέχει ένα σχέδιο μηχανικού για έναν αναλυτή πεπερασμένων στοιχείων.
- ❖ Επεξεργασία ή ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων: Αυτό το στάδιο παράγει ένα οπτικό αρχείο εξόδου.
- ❖ Αναπαραγωγή ή δημιουργία αναφορών, εικόνων, κινούμενων σχεδίων κ.λπ. από το αρχείο εξόδου: Αυτό το στάδιο είναι ένα στάδιο οπτικής απεικόνισης.

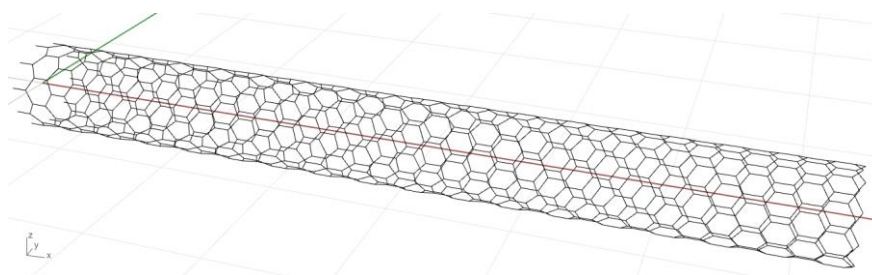
Το Abaqus CAE παρέχει την δυνατότητα προεπεξεργασίας, επίλυσης και μεταεπεξεργασίας των αποτελεσμάτων.

### 3.2 Εισαγωγή γεωμετρίας

Αρχικά, είναι απαραίτητο είναι να βρεθούν οι συντεταγμένες των ατόμων των CNTs στους άξονες  $x$ ,  $y$  και  $z$ . Για την δημιουργία της δομής του εκάστοτε νανοσωλήνα χρησιμοποιήθηκε ένα λογισμικό, που ονομάζεται Visual Molecular Dynamics (VMD), το οποίο ενδείκνυται για την οπτική αναπαράσταση και εξαγωγή των συντεταγμένων των νανοσωλήνων άνθρακα [25]. Το παραπάνω λογισμικό, χρειάζεται ως δεδομένα εισόδου (*input*) τους δείκτες διανύσματος ( $n, m$ ) του εκάστοτε νανοσωλήνα, το μήκος του δεσμού  $C-C$  και το μήκος του νανοσωλήνα. Στη συνέχεια, γίνεται επιλογή μεταξύ *armchair* και *zigzag* και ως δεδομένα εξόδου (*output*) λαμβάνονται οι συντεταγμένες  $x$ ,  $y$ ,  $z$  των ατόμων σε ένα αρχείο μορφής *.xyz*, όπου κάθε γραμμή περιέχει τις συντεταγμένες του κέντρου ενός ατόμου  $C$ . Για παράδειγμα, για τον σχηματισμό του *armchair* (12,12) CNT, αφού γίνει εκκίνηση του VMD, ακολουθείται η εξής διαδικασία, Extensions ► Modeling ► Nanotube builder και εμφανίζεται ένα παράθυρο στο οποίο γίνεται επιλογή του μήκους του δεσμού  $C-C$ ,  $a_{C-C} = 0.1421 \text{ nm}$ , των δεικτών διανύσματος ( $n, m$ ), που είναι ίσοι με 12, του μήκους του νανοσωλήνα,  $L = 5 \text{ nm}$  και τέλος γίνεται επιλογή του *armchair*.

Σε αυτό το σημείο, επιλέγεται το Generate Nanotube και το λογισμικό σχηματίζει τον CNT. Τέλος, γίνεται μετάβαση στο File και πραγματοποιείται εξαγωγή των συντεταγμένων των ατόμων σε ένα αρχείο μορφής *.xyz*. Εν συνεχεία το αρχείο *.xyz* διαβάζεται από κατάλληλο script με σκοπό να εισαχθεί στο λογισμικό Rhinoceros 3D με σκοπό τη δημιουργία της γεωμετρίας του νανοσωλήνα. Ο εν λόγω script διαβάσει το αρχείο των συντεταγμένων του εκάστοτε νανοσωλήνα, που λαμβάνεται από το VMD, τοποθετεί τα σημεία και στη συνέχεια κάνει τη σύνδεση των ατόμων. Έτσι το μόνο που πρέπει να γίνεται για να αλλάξει ο τύπος του νανοσωλήνα, είναι το αρχείο μορφής *.xyz* που υπεισέρχεται στον script. Συγκεκριμένα, γίνεται εκκίνηση του Rhinoceros και ακολουθείται η εξής διαδικασία, από το Tools ► Rhinoscript ► Load και πραγματοποιείται άνοιγμα του script που

αναφέρθηκε προηγουμένως. Για να εκτελεστεί ο script πραγματοποιείται κλικ στο κουμπί Run. Αφού ολοκληρωθεί η εκτέλεση, το Rhinoceros παράγει τη γεωμετρία, όπως φαίνεται χαρακτηριστικά στο Σχήμα 3.1.



■ ΣΧΗΜΑ 3.1 | Στην εικόνα φαίνεται ο armchair (12,12) στο λογισμικό Rhinoceros

Αφότου σχηματιστεί ο νανοσωλήνας, σειρά έχει η μεταφορά του στον Abaqus. Αυτό γίνεται ως εξής, στον Rhinoceros γίνεται επιλογή της γεωμετρίας και μετά από το File ► Export Selected. Σε αυτό το σημείο δίνεται η δυνατότητα να επιλογής του τύπου του αρχείου iges (.igs) που υποστηρίζεται από τον Abaqus. Τέλος, για την εισαγωγή της γεωμετρίας στον Abaqus, από το βασικό μενού του λογισμικού: File ► Import ► Part και γίνεται επιλογή του αρχείου (.igs). Ο λόγος που επιλέγεται ο νανοσωλήνας armchair (12,12) είναι για να υπάρχει άμεση σύγκριση με την βιβλιογραφία, όπου αποτελέσματα για τον συγκεκριμένο νανοσωλήνα αναφέρονται σε πολλές περιπτώσεις. [23] [26]

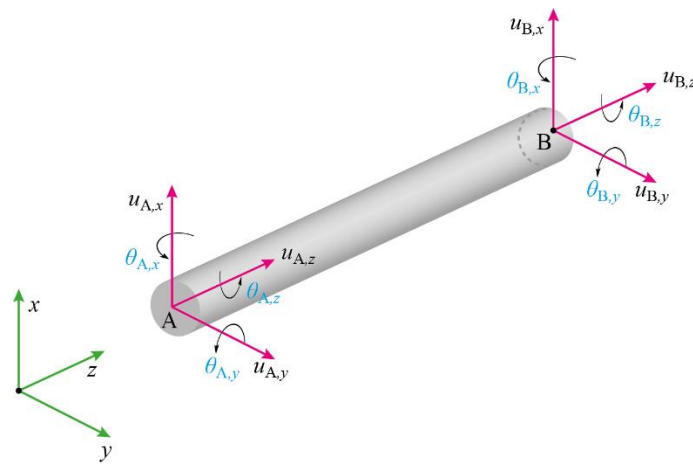
Παρακάτω παρατίθεται ένας πίνακας με τα χαρακτηριστικά ορισμένων νανοσωλήνων που θα μοντελοποιηθούν.

**ΠΙΝΑΚΑΣ 4** Χαρακτηριστικά ορισμένων προς μοντελοποίηση νανοσωλήνων άνθρακα.

Τύπος νανοσωλήνα	Αριθμός κόμβων	Μήκος (nm)	Διάμετρος (nm)
Armchair (4,4)	280	4.177	0.5428
Armchair (8,8)	560	4.172	1.0856
Armchair (12,12)	840	4.185	1.6283
Armchair (14,14)	980	4.18	1.8997
Zigzag (4,0)	160	4.177	0.3134
Zigzag (8,0)	320	4.175	0.6268
Zigzag (12,0)	480	4.185	0.9401
Zigzag (14,0)	560	4.178	1.0968

### 3.3 Παράδειγμα δημιουργίας μοντέλου στον Abaqus CAE

Το λογισμικό Abaqus Standard διαθέτει τρεις τύπους πεπερασμένων στοιχείων για την μοντελοποίηση δοκών, το linear shear flexible beam element (B31), το quadratic beam element (B32) και το cubic formulation beam element (B33). Το B33 είναι ένα κυβικό τρισδιάστατο στοιχείο δύο κόμβων, με έξι βαθμούς ελευθερίας σε κάθε κόμβο. Τα B31 και B32 διαθέτουν επίσης δύο κόμβους, με την διαφορά ότι το B31 χρησιμοποιεί γραμμικές συναρτήσεις μορφής (shape functions), ενώ το B32 τετραγωνικές [26]. Οι βαθμοί ελευθερίας που προαναφέρθηκαν συμπεριλαμβάνουν την παραμόρφωση στη διεύθυνση των αξόνων  $x$ ,  $y$  και  $z$  και τη στρέψη γύρω από αυτούς τους άξονες, γεγονός που βασίζεται στη θεωρία δοκών του Timoshenko και περιλαμβάνει φαινόμενα διατμητικής παραμόρφωσης. Παρακάτω, στο Σχήμα 3.2, αναπαρίσταται ένα κυκλικό στοιχείο δοκού με δύο κόμβους και έξι βαθμούς ελευθερίας.

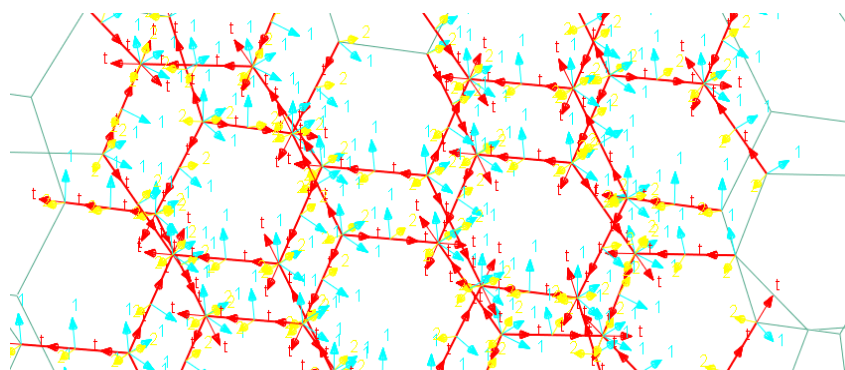


■ ΣΧΗΜΑ 3.2 | Στην εικόνα φαίνεται ένα κυκλικό στοιχείο δοκού με δύο κόμβους.

Στη συνέχεια, θα παρουσιασθεί αναλυτικά η κατασκευή του μοντέλου για τον armchair CNT (12,12) μέχρι την μορφή του πλέγματος (*meshed model*). Για να κατασκευασθεί το μοντέλο στον Abaqus, αφού γίνει η εισαγωγή της γεωμετρίας, ακολουθείται η εξής διαδικασία. Από το κεντρικό μενού επιλέγεται Property ► CreateMaterial ► Mechanical ► Elasticity ► Elastic, επιλέγεται ιστροπικό υλικό και το μέτρο ελαστικότητας των στοιχείων δοκού θεωρείται ίσο με  $5490 \text{ nN} \cdot \text{nm}^{-2}$ . Ο λόγος Poisson όπως αναφέρθηκε επιλέγεται ίσος με 0.3.

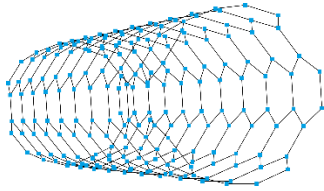
Έπειτα, από το create section, γίνεται επιλογή του beam element και επιλέγεται κυκλικό στοιχείο δοκού: αφότου γίνει επιλογή της δοκού κυκλικής διατομής, πρέπει να γίνει εισαγωγή της ακτίνας. Υπενθυμίζεται ότι η διάμετρος του στοιχείου δοκού υπολογίστηκε από την σχέση  $d = 4 \sqrt{\frac{kr}{k\theta}} = 0.147 \text{ nm}$ . Επομένως, αφού  $d = 0.147 \text{ nm}$ , η ακτίνα είναι ίση με  $r = 0.0735 \text{ nm}$ .

Για να ολοκληρωθεί το module property, γίνεται επιλογή του assign section και της περιοχής που πρέπει να εξετασθεί (εν προκειμένω όλος ο νανοσωλήνας άνθρακα) και τέλος στο assign beam orientation επιλέγεται ο προσανατολισμός που πρέπει να έχουν τα beam elements (αφήνεται ως έχει η προεπιλεγμένη επιλογή που δίνει ο Abaqus), όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.3.

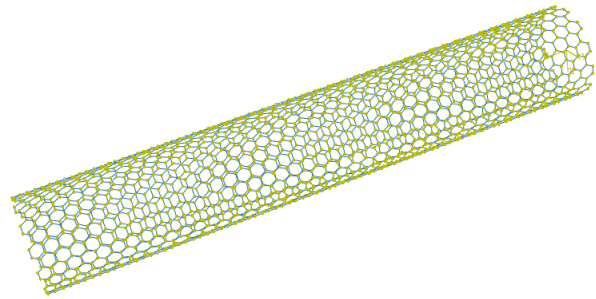


■ ΣΧΗΜΑ 3.3 | Στην εικόνα φαίνεται ο προσανατολισμός των δοκών (*beam orientation*).

Στη συνέχεια, στο module Assembly ► Create instance επιλέγεται το εξάρτημα (*part*) το οποίο θα εξετασθεί. Εν συνεχεία γίνεται μετάβαση στο module Mesh, όπου αρχικά στο Seed part ► Approximate global size γίνεται εισαγωγή της τιμής 0.5, ώστε κάθε σύνδεση που αναπαριστάει έναν δεσμό άνθρακα-άνθρακα να διακριτοποιείται με ένα μόνο στοιχείο δοκού.



α)

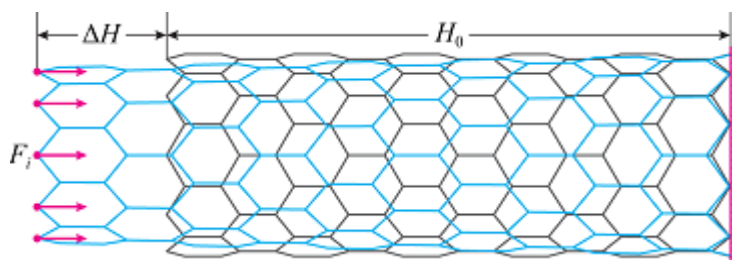


β)

■ ΣΧΗΜΑ 3.4 | α) Πλέγμα πεπερασμένων στοιχείων, όπου τα τετράγωνα αναπαριστούν τους κόμβους του πλέγματος και οι γραμμές τις δοκούς, β) Πλέγμα νανοσωλήνα άνθρακα στον Abaqus.

Τέλος, γίνεται επιλογή του mesh και προκύπτει η μορφή πλέγματος του νανοσωλήνα, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.4.

Μετά από την κατασκευή του μοντέλου, σειρά έχει η επίλυση και η επεξεργασία των αποτελεσμάτων. Για τον υπολογισμό του μέτρου ελαστικότητας Young ενός νανοσωλήνα άνθρακα γίνεται προσομοίωση εφελκυσμού του. Αυτό επιτυγχάνεται με πάκτωση όλων των κόμβων του ενός άκρου του ενώ σε όλους τους κόμβους του άλλου άκρου επιβάλλεται κοινή μετατόπιση κατά την διεύθυνση του άξονά του (Σχήμα 4.1).



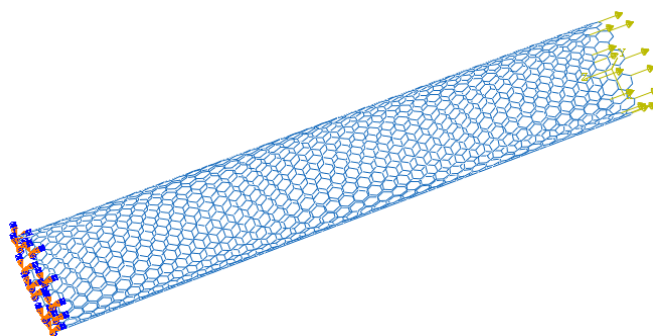
■ ΣΧΗΜΑ 4.1

Ανάπτυξη κομβικών αντιδράσεων,  $F_i$ , κατά τον εφελκυσμό νανοσωλήνα μέσω μετατόπισης του αριστερού και πάκτωσης του δεξιού του άκρου.

Αρχικά, στο module load ορίζονται οι συνοριακές συνθήκες στο άκρο του νανοσωλήνα που επιλέγεται να πακτωθεί και εφαρμόζεται μετατόπιση στο ελεύθερο άκρο. Αρχικά, επιλέγεται create boundary condition ► symmetry/antisymmetry/encastre και επιλέγονται οι κόμβοι του άκρου που θα πακτωθούν (όπως φαίνεται στο δεξί άκρο της εικόνας 4.1).

Στη συνέχεια, από το boundary condition, ομαδοποιούνται οι κόμβοι στους οποίους θα εφαρμοσθεί η μετατόπιση και επιλέγεται displacement/rotation. Η μετατόπιση που θα εφαρμοσθεί αρχικά είναι 0.1 nm. Είναι σημαντικό να τονισθεί ότι οι κόμβοι δεν δύνανται να μετατοπισθούν και στις τρεις διευθύνσεις, παρά μόνο στην αξονική διεύθυνση που εφαρμόζεται η μετατόπιση.

Τέλος, στο module step, αφήνονται οι προεπιλεγμένες από το πρόγραμμα παραμετροί. Η οπτική απεικόνιση του προς επίλυση προβλήματος όπως δίνεται από το γραφικό περιβάλλον εργασίας του Ababus CAE φαίνεται στην Εικόνα (4.2) για τον νανοσωλήνα armchair (12,12).

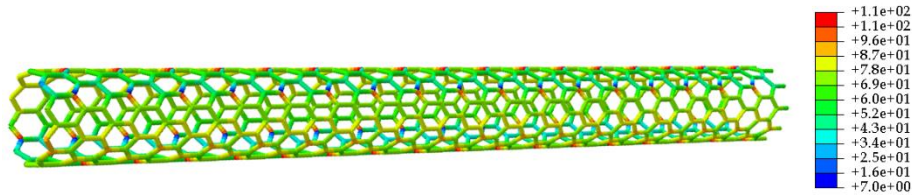


■ ΣΧΗΜΑ 4.2

Στην εικόνα φαίνεται πακτωμένο το αριστερό άκρο του νανοσωλήνα ενώ στο δεξί εφαρμόζεται αξονικό εφελκυστικό φορτίο.

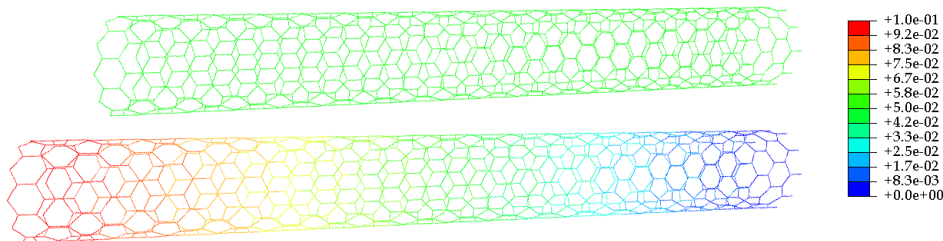
## 4.1 Παραμόρφωση νανοσωλήνων άνθρακα

Όπως αναμενόταν, ο νανοσωλήνας άνθρακα (που συμπεριφέρεται ως χωροδικτύωμα) παραμορφώνεται κυρίως στη διεύθυνση στην οποία ασκείται η μετατόπιση. Βέβαια, μικρότερη παραμόρφωση παρατηρείται και στους άλλους δύο άξονες, γεγονός που οφείλεται στην σύνδεση κάθε κόμβου με ένα στοιχείο δοκού.



■ ΣΧΗΜΑ 4.3 | Τάση που ασκείται στον zigzag (8,0) σε GPa.

Στο Σχήμα 4.3, φαίνεται η συνολική τάση που ασκείται στον zigzag (8,0), ενώ το Σχήμα 4.4 αναπαριστά τον ίδιο νανοσωλήνα άνθρακα πριν και μετά την παραμόρφωση.



■ ΣΧΗΜΑ 4.4 | Αναπαράσταση του zigzag (8,0) πριν την παραμόρφωση (πάνω) και μετά (κάτω)

## 4.2 Αποτελέσματα για το μέτρο ελαστικότητας

Με την προϋπόθεση ότι το πρόβλημα εξετάζεται στην γραμμική ελαστική περιοχή παραμορφώσεων, το μέτρο ελαστικότητας Young του νανοσωλήνα,  $E_{CNT}$ , μπορεί να εκτιμηθεί από τον νόμο του Hooke:

$$E_{CNT} = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{F_t/A_0}{\Delta H/H_0} \quad (4.1)$$

όπου  $F_t = \sum_i F_i$  είναι η συνολική αντίδραση στο άκρο που υφίσταται η μετατόπιση, η οποία λαμβάνεται με άθροιση όλων των αντιδράσεων που αναπτύσσονται στον κάθε κόμβο,  $A_0$  η αρχική (πριν την παραμόρφωση) επιφάνεια διατομής του νανοσωλήνα στην οποία ασκείται η δύναμη,  $H_0$  το αρχικό μήκος του δοκιμίου και  $\Delta H$  η επιβαλλόμενη μετατόπιση. Όπως αναφέρθηκε και προηγουμένως,  $A_0 = \pi dt$ . Στον παρακάτω ΠΙΝΑΚΑΣ 5 Υπολογισμοί μέτρου Young για τους CNTs με στοιχεία B31, B32 και B33. παρουσιάζονται τα αποτελέσματα για το μέτρο ελαστικότητας για πάχος τοιχώματος,  $t = 0.34$  nm, για τρεις τύπους στοιχείων δοκού, στοιχεία B31, B32 και B33.

Σε αυτό το σημείο πρέπει να τονισθεί ότι από τα τρία στοιχεία δοκού που χρησιμοποιήθηκαν για την μοντελοποίηση νανοσωλήνων άνθρακα, μόνο το B33, το οποίο χρησιμοποιεί κυβικές συναρτήσεις μορφής έδωσε ικανοποιητικά αποτελέσματα στην εκτίμηση του μέτρου ελαστικότητας Young. Χρησιμοποιώντας αυτό το πεπερασμένο στοιχείο, πάρθηκαν αποτελέσματα τα οποία

βρέθηκαν σε πολύ καλή συμφωνία με αντίστοιχα αποτελέσματα της οικείας βιβλιογραφίας [18] [23] [6]. Όπως φαίνεται στον Πίνακα 5 Υπολογισμοί μέτρου Young για τους CNTs με στοιχεία B31, B32 και B33. οι CNTs που προσομοιώθηκαν, έδωσαν μέτρο ελαστικότητας περίπου 1 TPa, ανεξάρτητα από τον τύπο του νανοσωλήνα άνθρακα. Τα πεπερασμένα στοιχεία B31 και B32 παρουσίασαν μεγάλη απόκλιση, χαρακτηριστικό είναι ότι η εκτίμηση τους για το μέτρο ελαστικότητας κυμαίνεται από 0.6–0.65 TPa.

**ΠΙΝΑΚΑΣ 5** Υπολογισμοί μέτρου Young για τους CNTs με στοιχεία B31, B32 και B33.

Είδος νανοσωλήνα	Μέτρο ελαστικότητας (TPa) B31	Μέτρο ελαστικότητας (TPa) B32	Μέτρο ελαστικότητας (TPa) B33
Zigzag (4,0)	0.628	0.602	0.969
Zigzag (8,0)	0.648	0.618	1.03
Zigzag (12,0)	0.652	0.622	1.04
Zigzag (16,0)	0.653	0.622	1.04
Armchair (4,4)	0.653	0.621	1.05
Armchair (8,8)	0.653	0.620	1.05
Armchair (12,12)	0.654	0.623	1.05
Armchair (16,16)	0.655	0.621	1.05

#### 4.2.1 Σύγκριση με την βιβλιογραφία

Στον ΠΙΝΑΚΑΣ 6 Σύγκριση του μέτρου ελαστικότητας Young για νανοσωλήνες zigzag και armchair μεταξύ των Fan et al. και της παρούσας εργασίας, για τα πεπερασμένα στοιχεία B33. παρουσιάζεται η σύγκριση των αποτελεσμάτων μας με αυτά των Fan et al. [23]. Είναι εμφανές ότι τα αποτελέσματα πρακτικά ταυτίζονται, γεγονός που οφείλεται στο ότι τόσο στην παρούσα εργασία, όσο και σε αυτή των Fan et al. [23], χρησιμοποιείται  $\nu = 0.3$  για την δοκό.

**ΠΙΝΑΚΑΣ 6** Σύγκριση του μέτρου ελαστικότητας Young για νανοσωλήνες zigzag και armchair μεταξύ των Fan et al. [23] και της παρούσας εργασίας, για τα πεπερασμένα στοιχεία B33.

CNT	Fan et al. E (TPa) [23]	Παρούσα εργασία E (TPa)
Armchair (6,6)	1.0346	1.0409
Armchair (12,12)	1.0365	1.0489
Armchair (18,18)	1.0379	1.0424
Zigzag (8,0)	1.0230	1.0276
Zigzag (16,0)	1.0394	1.0439
Zigzag (24,0)	1.0421	1.0469

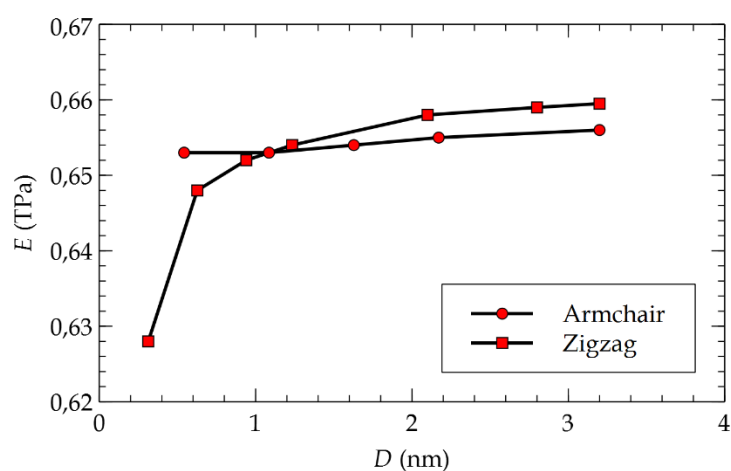
#### 4.2.2 Σχέση διαμέτρου-μέτρου ελαστικότητας

Ένα θέμα που έχει συζητηθεί πολύ στη βιβλιογραφία [18] [6], είναι το πως μεταβάλλεται το μέτρο ελαστικότητας όταν αυξάνεται η διάμετρος. Σύμφωνα με τους Li et al. [18], η γενική τάση είναι να παρατηρείται αύξηση του μέτρου ελαστικότητας όταν αυξάνεται η διάμετρος. Παρακάτω παρατίθεται ένας πίνακας, την διάμετρο, την επιφάνεια διατομής  $A_0 = \pi dt$  και το είδος του νανοσωλήνα. Το μέτρο ελαστικότητας Young για το εκάστοτε πεπερασμένο στοιχείο βρίσκεται στον ΠΙΝΑΚΑΣ 5 Υπολογισμοί μέτρου Young για τους CNTs με στοιχεία B31, B32 και B33.

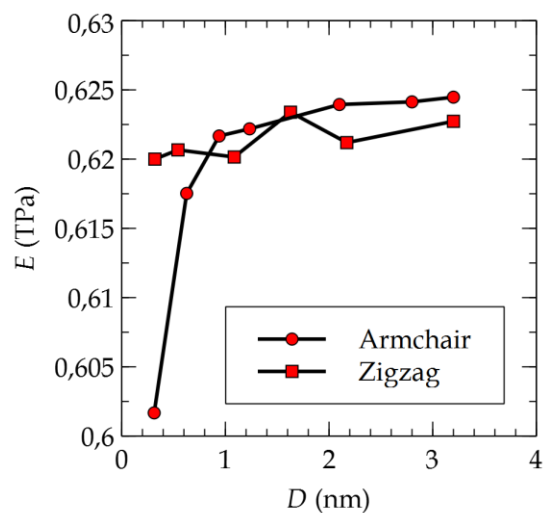
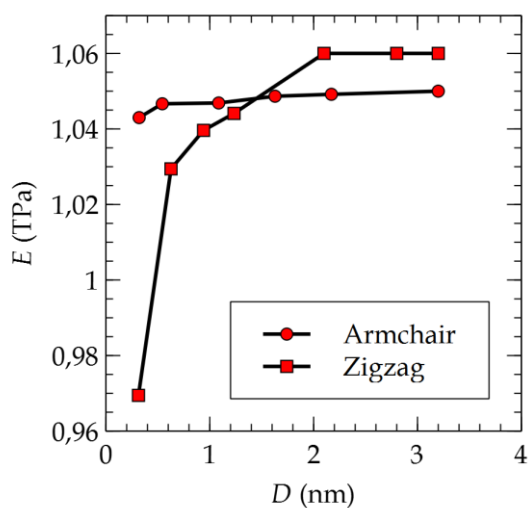


**ΠΙΝΑΚΑΣ 7** Διάμετρος και επιφάνεια διατομής των CNTs που μοντελοποιήθηκαν..

CNT	Διάμετρος (nm)	Επιφάνεια (nm <sup>2</sup> )
Armchair (4,4)	0.5428	0.5798
Armchair (8,8)	1.0856	1.1596
Armchair (12,12)	1.6283	1.7393
Armchair (16,16)	2.1711	2.3190
Zigzag (4,0)	0.3134	0.3348
Zigzag (8,0)	0.6268	0.6695
Zigzag (12,0)	0.9401	1.0041
Zigzag (16,0)	1.2535	1.3389



■ ΣΧΗΜΑ 4.5 | Εξάρτηση του μέτρου ελαστικότητας από την διάμετρο για στοιχεία δοκού B31.



α)

β)

■ ΣΧΗΜΑ 4.6 | Εξάρτηση του μέτρου ελαστικότητας Young από την διάμετρο για στοιχεία δοκού, α) B33 και β) B32.

Στα διαγράμματα 4.5 και 4.6 φαίνεται η εξάρτηση του μέτρου ελαστικότητας συναρτήσει της διαμέτρου για τα πεπερασμένα στοιχεία B31, B32 και B33. Όπως φαίνεται στα παραπάνω διαγράμματα, τα αποτελέσματα που πάρθηκαν από τον Abaqus για το μέτρο ελαστικότητας των CNTs, συμφωνούν με την θεωρία όσον αφορά την εξάρτηση από την διάμετρο [18]. Δηλαδή, σε όλες τις περιπτώσεις για μεγαλύτερη διάμετρο προκύπτει μεγαλύτερο μέτρο ελαστικότητας, μέχρι μια κρίσιμη διάμετρο άνω της οποίας παραμένει πρακτικά ανεξάρτητο. Η τιμή αυτή φαίνεται να εξαρτάται από τον τύπο του νανοσωλήνα. Έτσι για νανοσωλήνες τύπου zigzag η κρίσιμη τιμή της διαμέτρου είναι της τάξης των 3 nm, ενώ για νανοσωλήνες τύπου armchair είναι φανερά χαμηλότερη και είναι της τάξης του 1nm.

Τα διαγράμματα 4.5 και 4.6, τόσο για τους armchair όσο και για τους zigzag επιβεβαιώνουν τον ισχυρισμό των Li et al. [18], αφού φαίνεται ξεκάθαρα ότι για διάμετρο μεγαλύτερη του 1 nm, το μέτρο ελαστικότητας μεταβάλλεται ελαφρώς, ενώ για διάμετρο μικρότερη του 1nm σημαντικά.

Τέλος, γίνεται η παρατήρηση πως και τα τρία πεπερασμένα στοιχεία παρουσιάζουν παρόμοια εξάρτηση της διαμέτρου με το μέτρο ελαστικότητας, με μόνη εξαίρεση τους armchair νανοσωλήνες των στοιχείων B32, όπου φαίνεται να μην υπάρχει διαρκής αύξηση του μέτρου Young όσο αυξάνεται η διάμετρος και να μην σταθεροποιείται το μέτρο Young για διαμέτρους μεγαλύτερες του 1 nm, όπως συμβαίνει στις περιπτώσεις των πεπερασμένων στοιχείων B31 και B33.

### 4.2.3 Σχέση μήκους-μέτρου ελαστικότητας

Στη συνέχεια, θα εξετασθεί η εξάρτηση του μέτρου ελαστικότητας από το μήκος των CNTs. Το μέτρο ελαστικότητας Young οποιουδήποτε υλικού είναι ανεξάρτητο από το μήκος του δείγματος στο οποίο πραγματοποιείται η μέτρηση. Ωστόσο, επειδή στην παρούσα εργασία χρησιμοποιείται μια αριθμητική μέθοδος για τους υπολογισμούς, είναι κομβικής σημασίας να επιβεβαιωθεί ότι πράγματι δεν υφίσταται τέτοια εξάρτηση. Στους παρακάτω δύο πίνακες παρατίθενται οι τιμές που προέκυψαν για το μέτρο ελαστικότητας για διάφορες τιμές μηκών, για τον armchair (8,8) και τον zigzag (8,0). Στη βιβλιογραφία [18], κυριαρχεί η θεώρηση ότι μετά από ένα κρίσιμο μήκος το μέτρο ελαστικότητας τόσο των armchair, όσο και των zigzag, παραμένει σταθερό.

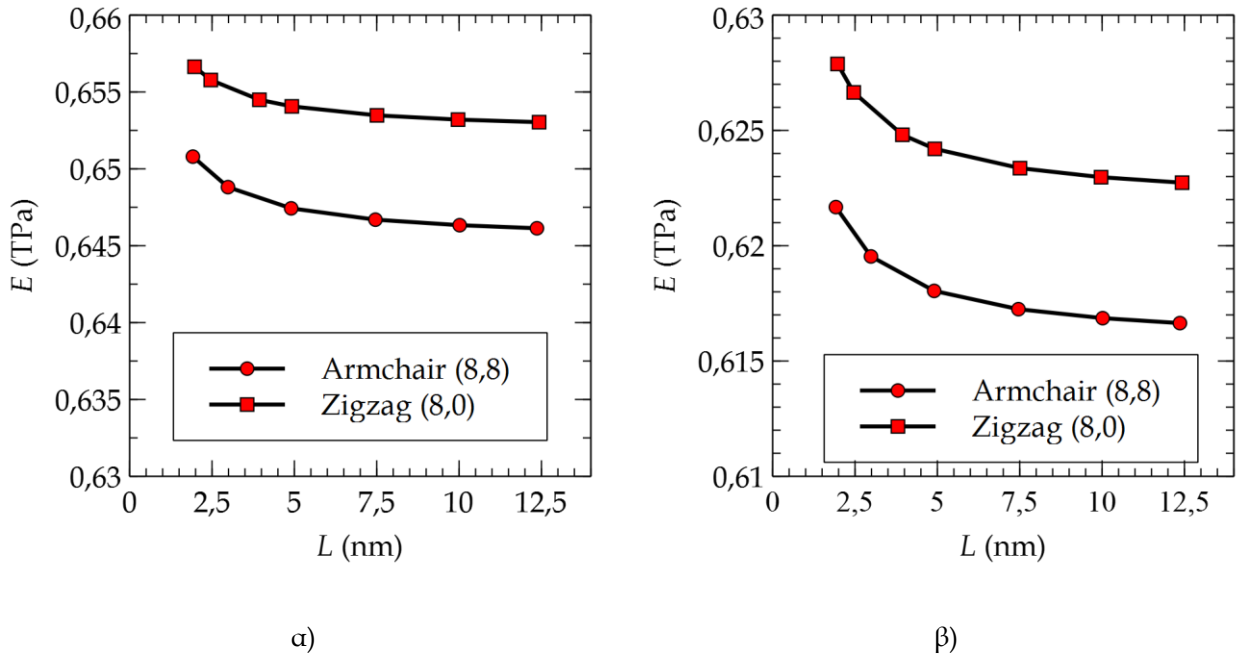
**ΠΙΝΑΚΑΣ 8** Αποτελέσματα για το μέτρο ελαστικότητας συναρτήσει του μήκους για τον Zigzag (8,0).

Μήκος (nm)	$E_{CNT}$ (TPa)-B31	$E_{CNT}$ (TPa)-B33	$E_{CNT}$ (TPa)-B32
1.9184	0.651	1.027	0.622
2.984	0.649	1.027	0.620
4.9025	0.648	1.028	0.618
7.4603	0.647	1.028	0.617
10.018	0.646	1.028	0.617
12.363	0.646	1.028	0.617

**ΠΙΝΑΚΑΣ 9** Αποτελέσματα για το μέτρο ελαστικότητας συναρτήσει του μήκους για τον Armchair (8,8).

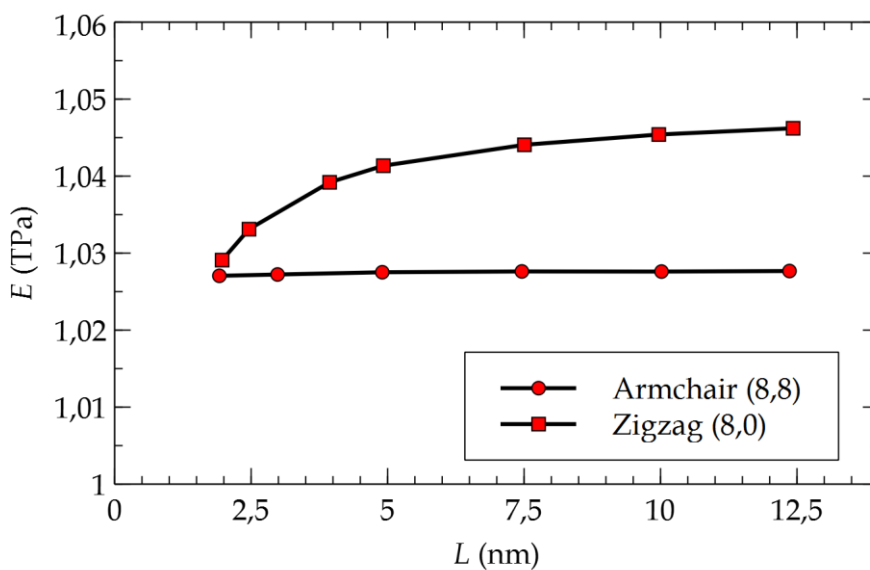
Μήκος (nm)	$E_{CNT}$ (TPa)-B31	$E_{CNT}$ (TPa)-B33	$E_{CNT}$ (TPa)-B32
1.969	0.657	1.029	0.628
2.461	0.656	1.033	0.627
3.938	0.654	1.039	0.625
4.922	0.654	1.041	0.624
7.507	0.653	1.044	0.623
9.968	0.653	1.045	0.623
12.429	0.653	1.046	0.623

Στα επόμενα τρία διαγράμματα θα αποτυπωθεί η εξάρτηση αυτή, για τους δύο νανοσωλήνες που προαναφέρθηκαν, ανάλογα με το εκάστοτε στοιχείο δοκού που εξετάζεται. Να σημειωθεί πως η επιλογή των νανοσωλήνων που παρατίθενται γίνεται για να υπάρχει άμεση σύγκριση με αποτελέσματα της βιβλιογραφίας. [23] [6] [18]



■ ΣΧΗΜΑ 4.7 | Μέτρο ελαστικότητας Young συναρτήσει μήκους για στοιχεία δοκού, α) B31 και β) B32.

Στο Σχήμα 4.7 παρατηρούμε, τόσο για τα πεπερασμένα στοιχεία B31 όσο και για τα B32, πως το κρίσιμο μήκος ταυτίζεται για τους δύο τύπους νανοσωλήνων και είναι της τάξης των 10 nm. Τέλος, φαίνεται πως για μικρά μήκη η τιμή του μέτρου ελαστικότητας είναι μεγαλύτερη και αυξάνοντας το μήκος σταδιακά μειώνεται, μέχρις ότου να σταθεροποιηθεί στο κρίσιμο μήκος που προαναφέραμε.



Στο Σχήμα 4.8 γίνεται σαφές πως το μέτρο ελαστικότητας συγκλίνει προς μία σταθερή τιμή μόνο όταν το μήκος του νανοσωλήνα ξεπεράσει κάποια οριακή τιμή, η οποία για νανοσωλήνες τύπου zigzag είναι της τάξης των 5 nm, ενώ για τύπου armchair της τάξης των 10 nm. Για αυτό το λόγο, την αποφυγή δηλαδή οποιασδήποτε εξάρτησης των αποτελεσμάτων από το μήκος, επιλέχθηκε να παραθέσουμε αποτελέσματα που έχουν ληφθεί σε νανοσωλήνες το μήκος των οποίων είναι τουλάχιστον 10 nm.

#### 4.2.4 Σχέση λόγου Poisson-μέτρου ελαστικότητας

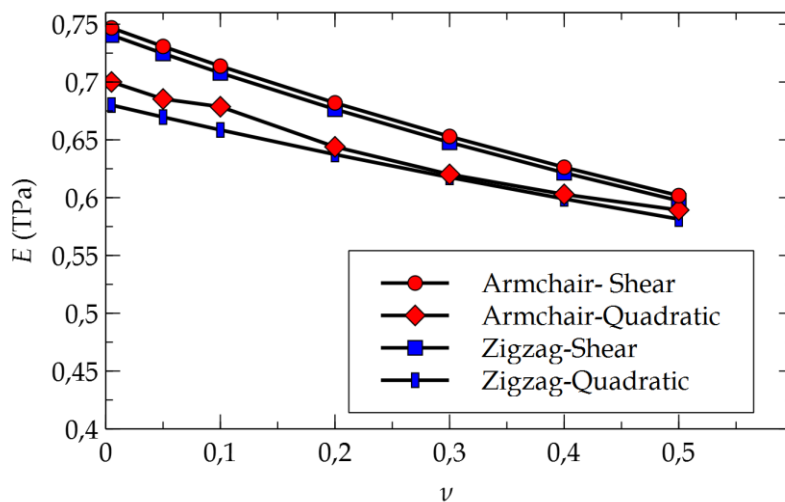
Στο παρόν υποκεφάλαιο εξετάζεται κατά πόσο ο λόγος Poisson επηρεάζει τα αποτελέσματα για το μέτρο ελαστικότητας. Στη βιβλιογραφία [18] [15] [6], κυριαρχεί μία αβεβαιότητα για τον ορισμό αυτής της τιμής, γεγονός που οφείλεται στο ότι γίνεται προσπάθεια να μοντελοποιηθεί ένα μη υλικό στοιχείο με μηχανικές ιδιότητες υλικής δοκού. Πάραυτα, η πληθώρα των δημοσιεύσεων θεωρεί  $\nu = 0.3$  και η τάση που κυριαρχεί είναι πως τελικά ο λόγος Poisson δεν επηρεάζει σημαντικά το μέτρο ελαστικότητας κατά Young. Στην παρούσα εργασία, επιλέχθηκε επίσης αυτή η τιμή και πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις στο διάστημα 0.005–0.5 για να διαπιστωθεί κατά πόσο μεταβάλλονται οι υπολογισμοί. Στους παρακάτω δύο πίνακες παρατίθενται τα αποτελέσματα που προέκυψαν για τα τρία είδη των δομικών στοιχείων που εξετάζονται, για τους armchair (8,8) και zigzag (8,0).

**ΠΙΝΑΚΑΣ 10** Αποτελέσματα για το μέτρο Young συναρτήσει του λόγου Poisson για τον Armchair(8,8)

$\nu$	$E_{CNT}$ (TPa)-B31	$E_{CNT}$ (TPa)-B33	$E_{CNT}$ (TPa)- B32
0.005	0.747	1.047	0.7
0.05	0.731	1.047	0.685
0.1	0.714	1.047	0.679
0.2	0.682	1.047	0.644
0.3	0.653	1.047	0.62
0.4	0.626	1.047	0.603
0.5	0.602	1.047	0.589

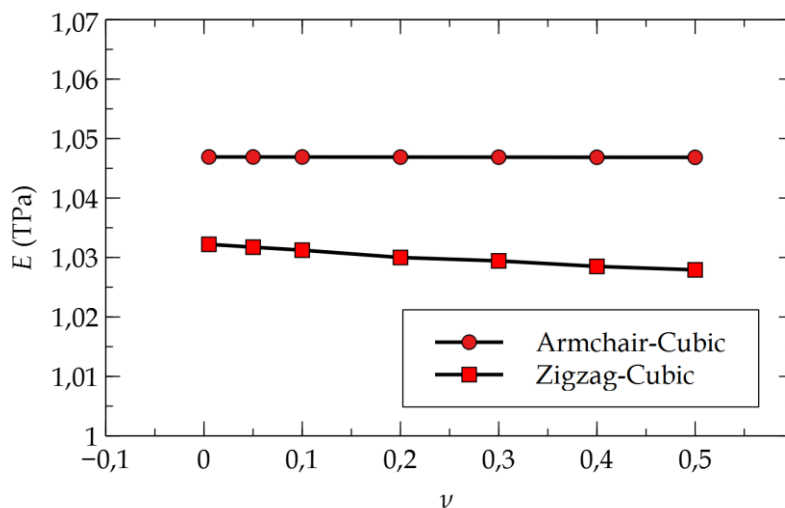
**ΠΙΝΑΚΑΣ 11** Αποτελέσματα για το μέτρο Young συναρτήσει του λόγου Poisson για τον Zigzag(8,0)

$\nu$	$E_{CNT}$ (TPa)-B31	$E_{CNT}$ (TPa)-B33	$E_{CNT}$ (TPa)- B32
0.005	0.741	1.032	0.68
0.05	0.725	1.032	0.67
0.1	0.708	1.031	0.659
0.2	0.676	1.030	0.637
0.3	0.648	1.029	0.618
0.4	0.622	1.029	0.599
0.5	0.597	1.028	0.581



■ ΣΧΗΜΑ 4.9 Μέτρο ελαστικότητας Young συναρτήσει του λόγου Poisson για στοιχεία δοκού B31 και B32.

Στο Σχήμα 4.9, που αφορά τα πεπερασμένα στοιχεία B31 και B32, βλέπουμε πως η εξάρτηση του λόγου Poisson με το μέτρο Young είναι μεγαλύτερη σε σχέση με τα B33 και πως η καμπύλη δεν φαίνεται να σταθεροποιείται αυξάνοντας τον λόγο Poisson. Και σε αυτή την περίπτωση τα συγκεκριμένα πεπερασμένα στοιχεία δείχνουν πως δεν είναι κατάλληλα για την ανάλυση που κάνουμε.



■ ΣΧΗΜΑ 4.10 Μέτρο ελαστικότητας Young συναρτήσει του λόγου Poisson για στοιχεία δοκού cubic B33.

Στο Σχήμα 4.10 παρατηρείται μία ανεπιθύηνη τάση ελάττωσης του μέτρου ελαστικότητας με την αύξηση του λόγου Poisson της δοκού. Η τάση αυτή είναι εντονότερη για τους zigzag νανοσωλήνες, ενώ για τους armchair είναι σχεδόν ανόπικτη. Ωστόσο, σε γενικές γραμμές, η επιλογή του λόγου Poisson δεν φαίνεται να επηρεάζει σε μεγάλο βαθμό τα αποτελέσματα για το μέτρο ελαστικότητας.

### 4.3 Αποτελέσματα για το μέτρο διάτμησης

Στη συνέχεια θα γίνει μία εκτίμηση όσον αφορά το μέτρο διάτμησης. Λόγω της δυσκολίας στις πειραματικές τεχνικές, δεν υπάρχει πληθώρα μετρημένων τιμών όπως γίνεται για το μέτρο Young. Από τις θεωρητικές προβλέψεις ξεχωρίζουν οι εξής δύο, ο Lu [17] υπολόγισε το μέτρο διάτμησης για SWCNTs χρησιμοποιώντας ένα εμπειρικό μοντέλο δυναμικής πλέγματος και συμπέρανε πως το μέτρο διάτμησης των νανοσωλήνων άνθρακα (~ 0.5 TPa) είναι παρεμφερές με αυτό του διαμαντιού και δεν εξαρτάται σημαντικά από τη διάμετρο του νανοσωλήνα και τη χειρομορφία του. Οι Poron et al. [27] χρησιμοποίησαν επίσης ένα παρόμοιο μοντέλο, από το οποίο προέκυψε πως το μέτρο διάτμησης είναι περίπου ίσο με αυτό του γραφίτη για σχετικά μεγάλες διαμέτρους νανοσωλήνων και πως η χειρομορφία του νανοσωλήνα επηρεάζει το μέτρο διάτμησης μόνο για πολύ μικρή διάμετρο.

Στην παρούσα εργασία για να υπολογισθεί το μέτρο διάτμησης, θεωρήθηκε πως το ένα άκρο του SWCNT θα είναι πακτωμένο, ενώ στο άλλο εφαρμόζεται ροπή στρέψης. Το μέτρο διάτμησης υπολογίστηκε από τον παρακάτω τύπο, ο οποίος βασίζεται στη θεωρία της ελαστικότητας σε μακροσκοπική κλίμακα [18]:

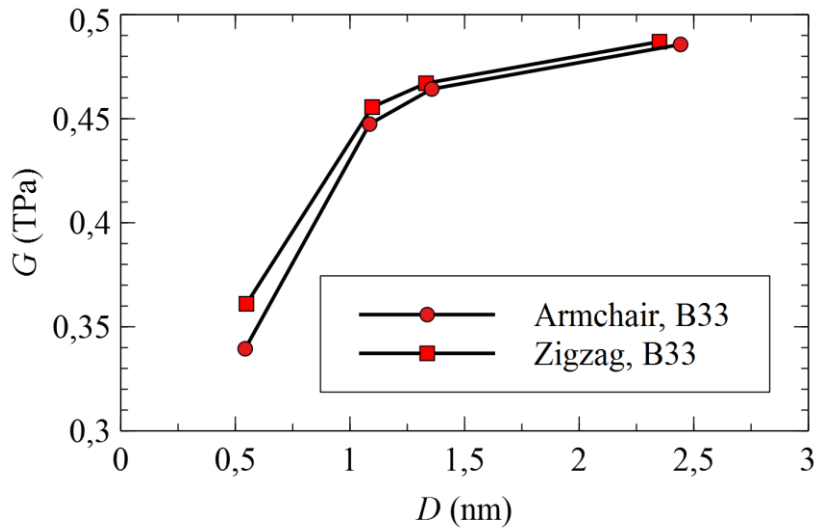
$$G = \frac{TL_0}{\theta J_0} \quad (4.2)$$

όπου  $T$  είναι η ροπή που ενεργεί στο μη πακτωμένο άκρο του νανοσωλήνα,  $L_0$  το αρχικό μήκος του νανοσωλήνα,  $\theta$  η γωνία στρέψης και  $J_0$  η πολική ροπή αδρανείας. Για τον υπολογισμό της πολικής αδρανείας  $J_0$ , οι SWCNTs θεωρούνται ως κοίλοι κύλινδροι με πάχος τοιχώματος  $t = 0.34$  nm. Στους παρακάτω πίνακες παρατίθενται τα αποτελέσματα για το μέτρο διάτμησης, για το εκάστοτε στοιχείο δοκού που χρησιμοποιήθηκε.

**ΠΙΝΑΚΑΣ 12** Υπολογισμοί μέτρου διάτμησης για τους CNTs με στοιχεία B31, B32 και B33.

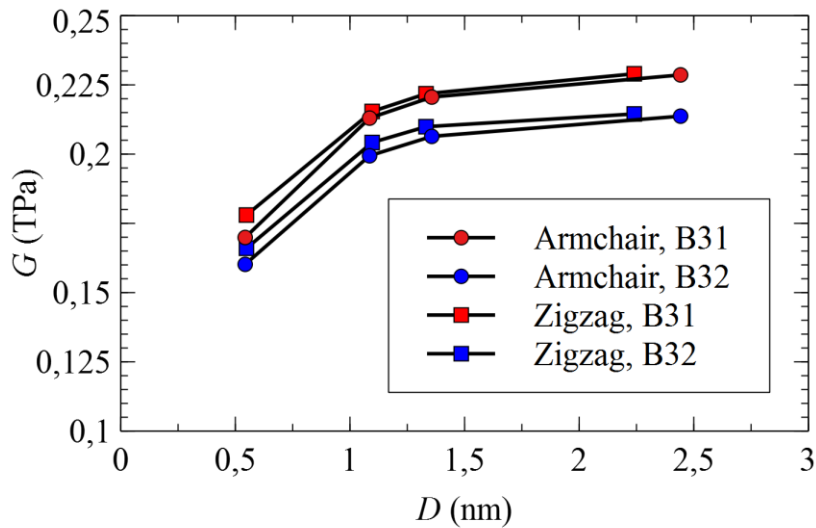
Είδος νανοσωλήνα	Μέτρο διάτμησης (TPa) B33	Μέτρο διάτμησης (TPa)-B31	Μέτρο διάτμησης (TPa)-B32
Zigzag (7,0)	0.361	0.178	0.166
Zigzag (12,0)	0.456	0.215	0.204
Zigzag (17,0)	0.467	0.222	0.21
Zigzag (30,0)	0.487	0.229	0.215
Armchair (4,4)	0.339	0.170	0.160
Armchair (8,8)	0.447	0.213	0.199
Armchair (10,10)	0.464	0.221	0.206
Armchair (18,18)	0.486	0.229	0.214

Η επιλογή της χειρομορφίας των νανοσωλήνων άνθρακα που μοντελοποιήθηκαν, έγινε έτσι ώστε οι zigzag και οι armchair να έχουν παρεμφερή διάμετρο, γεγονός που θα είναι ιδιαίτερα χρήσιμο στην αξιολόγηση των αποτελεσμάτων. Στη συνέχεια παρατίθενται διαγράμματα που δείχνουν την εξάρτηση του μέτρου διάτμησης από την διάμετρο των νανοσωλήνων, για το εκάστοτε στοιχείο δοκού που μοντελοποιήθηκε.



■ ΣΧΗΜΑ 4.11 Μέτρο διάτμησης συναρτήσει διαμέτρου για στοιχεία δοκού B33.

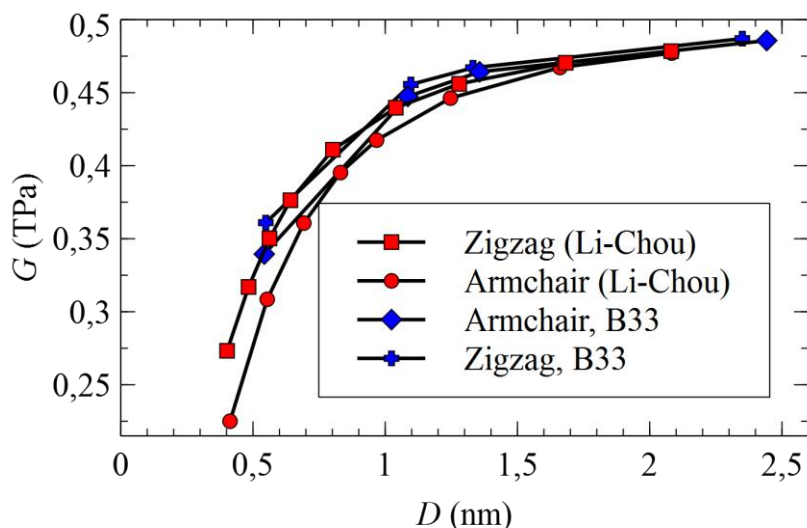
Στα Σχήματα 4.12 και 4.13 παρουσιάζεται η εξάρτηση του μέτρου διάτμησης των νανοσωλήνων τύπου armchair και zigzag από την διάμετρο των νανοσωλήνων. Παρατηρείται πως το μέτρο διάτμησης συμπεριφέρεται όμοια με το μέτρο Young, με την έννοια ότι αυξάνεται καθώς αυξάνεται και η διάμετρος, για νανοσωλήνες μικρής διαμέτρου. Για μεγαλύτερες διαμέτρους ( $D > 2$  nm), το μέτρο διάτμησης αρχίζει και σταθεροποιείται και δεν επηρεάζεται από την αύξηση της διαμέτρου, μετά από μία κρίσιμη διάμετρο.



■ ΣΧΗΜΑ 4.12 Μέτρο διάτμησης συναρτήσει διαμέτρου για στοιχεία δοκού B31 και B32.

Επιπλέον, παρατηρείται πως για το εύρος των διαμέτρων που εξετάζεται, η χειρομορφία των νανοσωλήνων παίζει ανεπαίσθητο ρόλο στο επικείμενο μέτρο διάτμησης. Τέλος, παρατηρείται πως για το πεπερασμένο στοιχείο B33, για διαμέτρους μεγαλύτερες των 2 nm, τα αποτελέσματα για το μέτρο διάτμησης (ΠΙΝΑΚΑΣ 10 Αποτελέσματα για το μέτρο Young συναρτήσεως του λόγου Poisson για τον Armchair(8,8) προσεγγίζουν σε σημαντικό βαθμό αυτά των Lu [17] και Popov [27]. Αντιθέτως, τα πεπερασμένα στοιχεία B31 και B32 προβλέπουν πολύ χαμηλές τιμές για το μέτρο διάτμησης, της τάξης των 0.2 TPa, γεγονός που δεν συμβαδίζει με την βιβλιογραφία.

### 4.3.1 Σύγκριση με την βιβλιογραφία



■ ΣΧΗΜΑ 4.13

Σύγκριση μεταξύ αποτελεσμάτων της τρέχουσας εργασίας (με χρήση του πεπερασμένου στοιχείου B33) και των Li et al. [18].

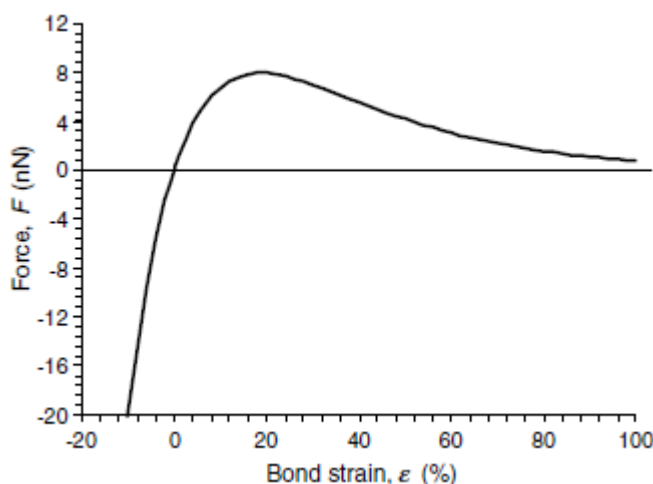
Στο Σχήμα 4.13 γίνεται σύγκριση των αποτελεσμάτων που παρουσιάστηκαν για το μέτρο διάτμησης, για τα πεπερασμένα στοιχεία B33, με τα αντίστοιχα αποτελέσματα των Li et al. [18]. Παρατηρείται, πως τόσο για τους armchair, όσο και για τους zigzag νανοσωλήνες τα αποτελέσματα της παρούσας εργασίας πρακτικά ταυτίζονται με τα δικά τους, ειδικά για διαμέτρους μεγαλύτερες των 1.5 nm.



## 5.1 Ανάπτυξη θεωρίας μη γραμμικού μοντέλου

Υπάρχουν δύο είδη ενδοατομικών δυναμικών: τα ζευγών (*pairwise*) και τα πολλών σωμάτων (*many body*). Η κύρια διαφορά μεταξύ τους έγκειται στη θεώρηση των μη δεσμικών αλληλεπιδράσεων όσον αφορά τα many body δυναμικά. Κατά κύριο λόγο ενδείκνυται η χρήση των δυναμικών πολλών σωμάτων σε σχέση με τα ζευγών, ειδικά σε περιπτώσεις όπου τα μοριακά συστήματα υπόκεινται σε μεγάλες παραμορφώσεις [28]. Σε τέτοιες περιπτώσεις παρατηρούνται μεγάλες αποκλίσεις των ατόμων από την ισορροπία, γεγονός που οδηγεί στην επιβολή πολλαπλών μη δεσμικών αλληλεπιδράσεων ανάμεσα στα άτομα και τον κοντινότερό τους γείτονα.

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε το δυναμικό Morse, το οποίο μέχρι σήμερα έχει εφαρμοσθεί σε πολλές περιπτώσεις όπου παρατηρούνται σημαντικές αποκλίσεις από την ελαστική συμπεριφορά λόγω της ύπαρξης μεγάλων παραμορφώσεων. Οι Belytschko et al [29], και οι Tserpes et al. [6] εφάρμοσαν το δυναμικό Morse για να προσομοιώσουν την θράυση των CNTs όταν υπόκεινται σε αξονική εφελκυστική δύναμη, οι Xiao et al. [30] για να προβλέψουν τις μηχανικές ιδιότητες των CNTs και οι Sun et al. [31] για να προβλέψουν την ακαμψία και την αντοχή τους. Το δυναμικό Morse δεν είναι κατάλληλο να χρησιμοποιηθεί για να περιγράψει την συμπεριφορά των νανοσωλήνων άνθρακα όταν οι δεσμοί σπάσουν, λόγω του ότι δεν είναι δυνατή η αναδιαμόρφωσή τους. Οι Belytschko et al. [29] έδειξαν πως η δύναμη που απαιτείται για να επέλθει η θράυση των CNTs εξαρτάται πρωταρχικά από το σημείο καμψής της ενδοατομικής ενέργειας και είναι σχεδόν ανεξάρτητη από την ενέργεια διάστασης (*dissociation energy*). Στο Σχήμα 5.1 βλέπουμε την καμπύλη δύναμης-παραμόρφωσης, όπως περιγράφεται από το δυναμικό Morse.



■ ΣΧΗΜΑ 5.1 | Στην εικόνα φαίνεται η καμπύλη δύναμης-παραμόρφωσης δεσμού του δυναμικό Morse. [28]

Το παραπάνω σχήμα (5.1) αναπαριστά την σχέση μεταξύ της δύναμης  $F$  και της παραμόρφωσης των δεσμών C-C,  $\epsilon$ , η οποία ορίζεται ως  $\epsilon = (r - r_0)/r_0$ . Όπως φαίνεται χαρακτηριστικά, η σχέση δύναμης-παραμόρφωσης είναι σημαντικά μη γραμμική για παραμορφώσεις της τάξης του 10%. Το ολικό μέγιστο της καμπύλης (υψηλότερη τιμή της δύναμης) λαμβάνεται για παραμόρφωση 19%.

Σύμφωνα με το δυναμικό Morse, η δυναμική ενέργεια του συστήματος ενός νανοσωλήνα μπορεί να εκφραστεί ως [28]:

$$E = E_{stretch} + E_{angle} \quad (5.1)$$

$$E_{stretch} = D_e \{1 - [e^{-\beta(r-r_0)}]^2 - 1\} \quad (5.2)$$

$$E_{angle} = \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 [1 + k_{sextic} (\theta - \theta_0)^4] \quad (5.3)$$

όπου  $E_{stretch}$  είναι η ενέργεια του δεσμού λόγω του τεντώματός του (*bond stretching*) και  $E_{angle}$  είναι η ενέργεια του δεσμού λόγω της κάμψης της γωνίας του (*bond angle-bending*),  $r$  είναι το τρέχον μήκος του δεσμού και  $\theta$  είναι η τρέχουσα γωνία του γειτονικού δεσμού. Στον παρακάτω πίνακα παρατίθενται οι παράμετροι του δυναμικού Morse [28].

**ΠΙΝΑΚΑΣ 13** Σύνοψη παραμέτρων του δυναμικού Morse.

Παράμετρος	Τιμή
$r_0$	$1.421 \times 10^{-10} \text{ m}$
$\beta$	$2.625 \times 10^{-10} \text{ m}^{-1}$
$k_\theta$	$0.9 \times 10^{-18} \text{ N} \cdot \text{m} \cdot \text{rad}^{-2}$
$D_e$	$6.03105 \times 10^{-19} \text{ N} \cdot \text{m}$
$\theta_0$	$2.094 \text{ rad}$
$k_{sextic}$	$0.754 \text{ rad}^{-4}$

Οι παράμετροι που συνοψίζονται στον παραπάνω πίνακα αφορούν το σύνθετες δυναμικό Morse, με την διαφορά ότι προστέθηκε η ενέργεια του δεσμού λόγω της κάμψης της γωνίας του και οι λοιποί παράμετροι έχουν τροποποιηθεί ελαφρώς από τους Belytschko et al. [29], έτσι ώστε το δυναμικό να αντιστοιχεί με αυτό του Brenner [32] για παραμορφώσεις μικρότερες του 10%. Παραγωγίζοντας την σχέση (5.2), προκύπτει η σχέση της δύναμη τεντώματος των ατομικών δεσμών στο μοριακό πεδίο δύναμης:

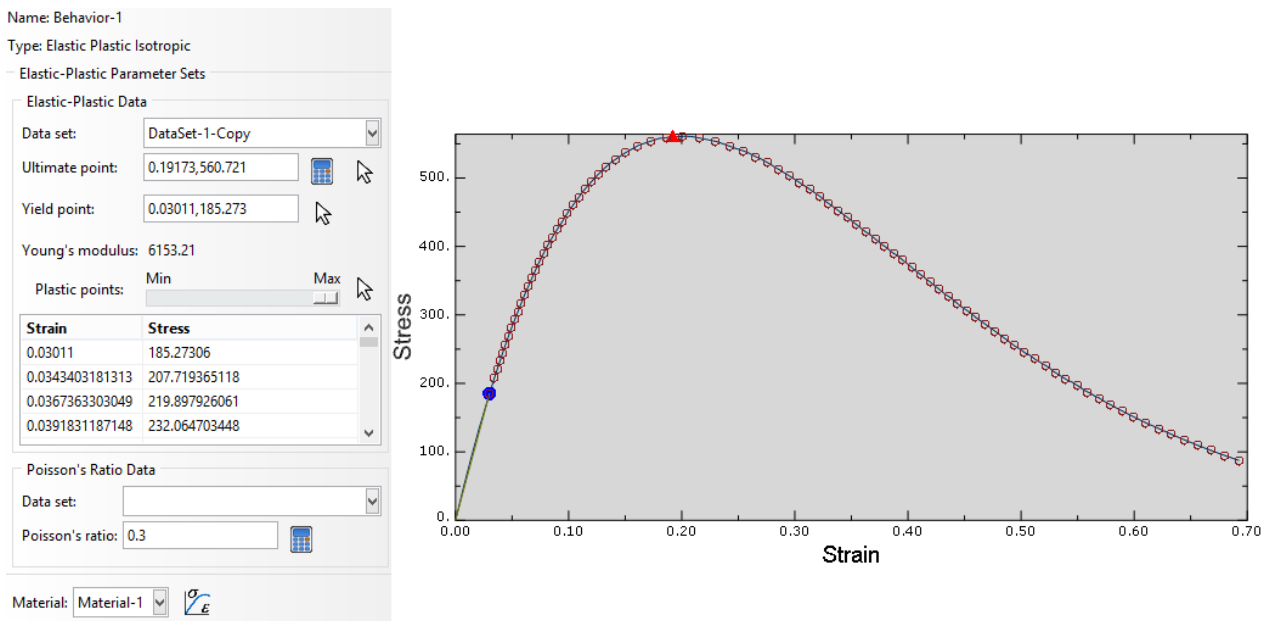
$$F = 2\beta D_e (1 - e^{-\beta(r-r_0)}) e^{-\beta(r-r_0)} \quad (5.4)$$

## 5.2 Κατασκευή μη γραμμικού μοντέλου στον Abaqus

Η διαδικασία της κατασκευής του μη γραμμικού μοντέλου στο λογισμικό Abaqus είναι σχεδόν αυτούσια με αυτή που ακολουθήθηκε για να κατασκευασθεί το γραμμικό. Μάλιστα, στα δύο πρώτα modules, το Property και το Assembly δεν άλλαξε τίποτα. Προχωρώντας στο Step, θα οριστεί αρχικό βήμα της τάξης του 0.01, από 1 που έχει ως προεπιλογή το λογισμικό, γιατί στα μη γραμμικά προβλήματα τίθεται θέμα σύγκλισης της λύσης. Αυτό γίνεται ακολουθώντας τα εξής βήματα, από το Step ► Incrementation ► Increment size και ορίζεται το μέγεθος. Σειρά έχει η αξονική μετατόπιση που θα εφαρμοσθεί στο ένα άκρο, κρατώντας το άλλο πακτωμένο. Σε αυτό το σημείο είναι σημαντικό να τονισθεί, πως στο άκρο που εφαρμόζεται το φορτίο οι κόμβοι πακτώνονται στις άλλες δύο διευθύνσεις. Στη συνέχεια, στο module Mesh, επιλέγονται στοιχεία δοκού B32 τα οποία, μετά από προκαταρκτικές προσομοιώσεις που έγιναν φαίνεται να ταιριάζουν περισσότερο στο μη γραμμικό μοντέλο, σε σχέση με τα B31 και B33.

Επόμενο βήμα είναι να εισαχθούν στο λογισμικό τα ζεύγη τάσεων-παραμορφώσεων, τα οποία προκύπτουν από το δυναμικό Morse και συγκεκριμένα από το Σχήμα (5.1). Σε αυτό το σημείο

χρειάζεται ιδιαίτερη προσοχή, καθώς πρέπει να γίνει μετατροπή των ονομαστικών (*nominal*) ζευγών  $\sigma$ - $\epsilon$ , σε πραγματικά (*true stress-strain*). Το Abaqus παρέχει την δυνατότητα μετατροπής, ακολουθώντας την εξής διαδικασία, επιλέγεται Calibrations ► Create ► Data set και εισάγονται τα ζεύγη ονομαστικής τάσης-ονομαστικής παραμόρφωσης. Στη συνέχεια, από το Data set ► Process ► Convert ► True Form προκύπτουν τα πραγματικά ζεύγη. Τελευταίο βήμα είναι να ορισθεί η πλαστική συμπεριφορά του υλικού πηγαίνοντας Behaviors ► Create ► Elastic Plastic isotropic ► Data set copy και υπολογίζεται το σημείο ολικού μεγίστου (*ultimate point*), το σημείο διαρροής (*yield point*) και ορίζεται επίσης ο λόγο Poisson, ίσος με  $\nu = 0.3$ , όπως φαίνεται στο Σχήμα 5.2.



■ ΣΧΗΜΑ 5.2

Στην εικόνα φαίνεται η καμπύλη τάσης-παραμόρφωσης δεσμού του δυναμικού Morse και τα δεδομένα που ορίστηκαν για τον καθορισμό της πλαστικής συμπεριφοράς του μοντέλου στον Abaqus.

### 5.3 Εξαγωγή αποτελεσμάτων

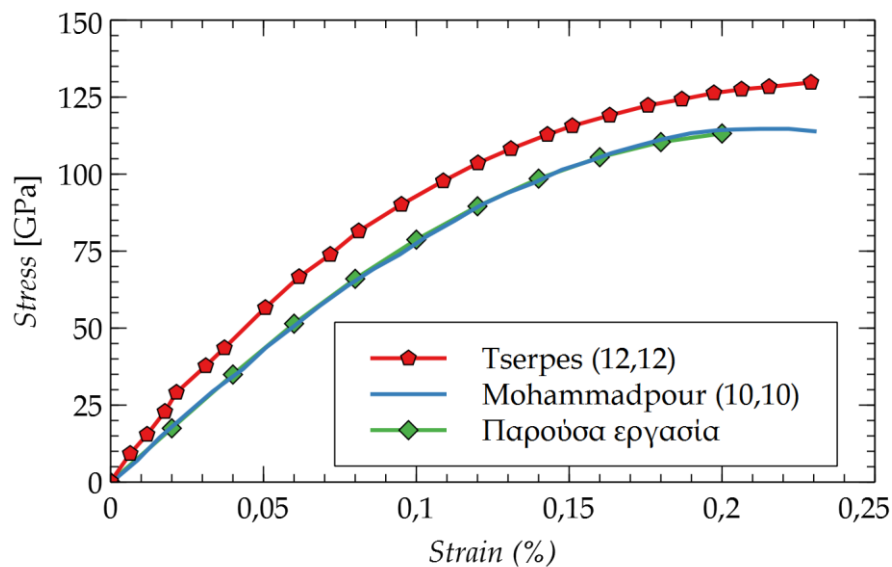
Μετά την κατασκευή του μοντέλου και τον καθορισμό της πλαστικής συμπεριφοράς, σειρά έχει η εξαγωγή των αποτελεσμάτων και συγκεκριμένα η εξαγωγή των δύο παραμέτρων που θα χρειαστούν για να κατασκευασθούν τα διαγράμματα τάσης-παραμόρφωσης (*stress-strain curves*). Οι δύο αυτοί παράμετροι είναι η αξονική δύναμη  $RF_3$  (η συνολική αντίδραση στους κόμβους του ελεύθερου άκρου του νανοσωλήνα) και η μετατόπιση  $U_3$  (η μετατόπιση των κόμβων του ελεύθερου άκρου του νανοσωλήνα) μέσω των οποίων θα υπολογισθούν η τάση και η παραμόρφωση αντίστοιχα. Για τον υπολογισμό της τάσης, θεωρώντας ως επιφάνεια διατομής την αρχική (πριν την παραμόρφωση) επιφάνεια διατομής  $A_0 = \frac{\pi d^2}{4}$ , χρησιμοποιείται η σχέση  $\sigma = \frac{F}{A_0}$ . Για τον καθορισμό της παραμόρφωσης, χρησιμοποιείται η σχέση  $\epsilon = \frac{l-l_0}{l_0}$ , όπου  $U_3 = l - l_0$ . Η ποσότητα  $l - l_0$  λαμβάνεται από τα αποτελέσματα της προσομοίωσης, ως η ποσότητα των κόμβων του ελεύθερου συνόρου του νανοσωλήνα κατά την διεύθυνση της ασκούμενης εφελκυστικής δύναμης. Μοντελοποιούνται δύο νανοσωλήνες άνθρακα, ο (12,12) armchair και ο (20,0) zigzag με διαμέτρους  $d = 1.6283$  nm και  $d = 1.5669$  nm αντίστοιχα. Και στις δύο περιπτώσεις που μελετήθηκαν το αρχικό μήκος των νανοσωλήνων ήταν  $l_0 = 5$  nm. Η επιλογή των συγκεκριμένων

νανοσωλήνων γίνεται για να υπάρχει δυνατότητα σύγκρισης με την βιβλιογραφία. Στη συνέχεια, παρατίθενται δύο πίνακες οι οποίοι περιέχουν τα αποτελέσματα που εξήχθησαν από το λογισμικό για τα  $RF_3$  και  $U_3$  και τα ζεύγη  $\sigma$ - $\epsilon$ , τα οποία προκύπτουν με τον τρόπο που αναφέρθηκε παραπάνω και τα διαγράμματα τάσης-παραμόρφωσης για τους δύο νανοσωλήνες που μοντελοποιήθηκαν.

**ΠΙΝΑΚΑΣ 14** Αποτελέσματα μη γραμμικής προσομοίωσης για τον *Armchair* (12,12).

$RF_3$	$\Sigma RF_3$	$U_3$	$\sigma$	$l$	$\epsilon$
0	0	0	0	5	0
1.58	37.83	0.1	18.17	5.1	0.02
2.76	66.13	0.2	31.76	5.2	0.04
3.96	95	0.3	45.62	5.3	0.06
4.95	118.82	0.4	57.06	5.4	0.08
5.88	141.03	0.5	67.73	5.5	0.1
6.59	158.39	0.6	76.07	5.6	0.12
7.39	177.36	0.7	85.17	5.7	0.14
7.87	188.88	0.8	90.70	5.8	0.16
8.31	199.45	0.9	95.78	5.9	0.18
8.58	205.89	1	98.87	6	0.2

Στο Σχήμα 5.3 παρουσιάζεται το διάγραμμα τάσης παραμόρφωσης για τον *armchair* (12,12) που μοντελοποιήθηκε και γίνεται σύγκριση με τις αντίστοιχες δουλειές των Tserpes et al. [6] και των Mohammadpour et al. [33]. Παρατηρείται πως τα αποτελέσματα της παρούσας εργασίας διαφέρουν σε μικρό βαθμό με τους πρώτους, ενώ είναι σχεδόν αυτούσια με τους δεύτερους.

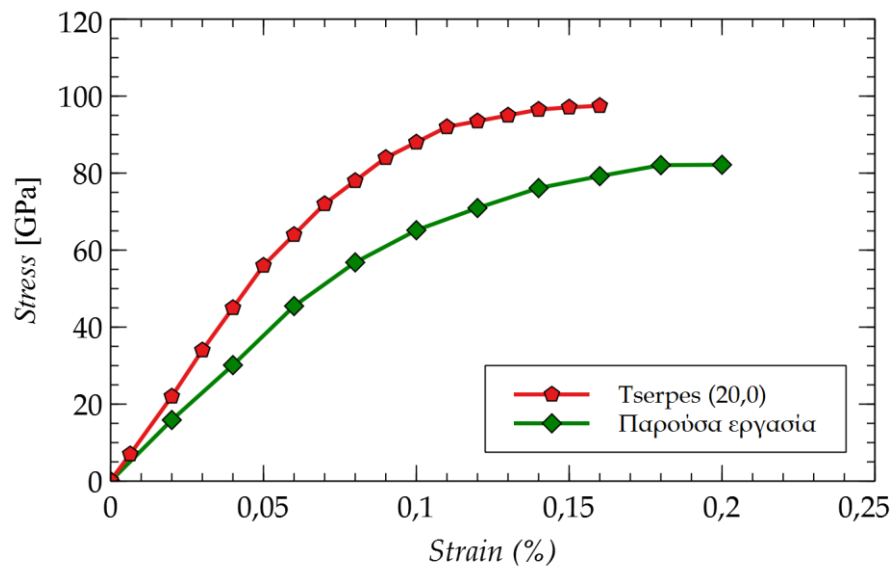


■ ΣΧΗΜΑ 5.3 | Διάγραμμα τάσης-παραμόρφωσης για τον *Armchair* (12,12).

**ΠΙΝΑΚΑΣ 15** Αποτελέσματα μη γραμμικής προσομοίωσης για τον Zigzag (20,0).

$RF_3$	$\sum RF_3$	$U_3$	$\sigma$	$l$	$\epsilon$
0	0	0	0	5	0
1.531	30.61	0.1	15.88	5.1	0.02
2.91	58.1	0.2	30.13	5.2	0.04
4.38	87.68	0.3	45.47	5.3	0.06
5.48	109.55	0.4	56.81	5.4	0.08
6.28	125.68	0.5	65.18	5.5	0.1
6.84	136.79	0.6	70.94	5.6	0.12
7.34	146.79	0.7	76.12	5.7	0.14
7.64	152.77	0.8	79.22	5.8	0.16
7.91	158.27	0.9	82.08	5.9	0.18
7.92	158.45	1	82.17	6	0.2

Στο Σχήμα 5.4 παρατηρείται ότι η απόκλιση σε σχέση με την εργασία των Tserpes et al. [6] είναι μεγαλύτερη για τον zigzag (20,0) από ότι για τον armchair (12,12) που σχολιάστηκε παραπάνω. Αξιολογώντας λοιπόν τα αποτελέσματά της παρούσας εργασίας για το μη γραμμικό μοντέλο που κατασκευάστηκε, παρατηρείται ότι οι armchair που μοντελοποιήθηκαν προσεγγίζουν περισσότερο την βιβλιογραφία σε σχέση με τους zigzag.



■ ΣΧΗΜΑ 5.4 | Διάγραμμα τάσης-παραμόρφωσης για τον Zigzag (20,0).

## 6.1 Σχολιασμός αποτελεσμάτων και συμπεράσματα

Όπως είναι φανερό από τα αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν, η επιλογή του πεπερασμένου στοιχείου επιφέρει σημαντική διαφοροποίηση ως προς το εκτιμώμενο μέτρο ελαστικότητας του νανοσωλήνα. Πιο συγκεκριμένα, τα πεπερασμένα στοιχεία B31 και B32 φαίνεται να υποεκτιμούν την τιμή του μέτρου ελαστικότητας, δεδομένου ότι  $E_{CNT} \approx 1$  TPa είναι η πιο συχνά συναντώμενη τιμή στη βιβλιογραφία [18] [6] [33]. Έτσι, από τα τρία διαφορετικά πεπερασμένα στοιχεία που χρησιμοποιήθηκαν στο λογισμικό Abaqus, μόνο το B33, το οποίο χρησιμοποιεί κυβικές συναρτήσεις μορφής, έδωσε ικανοποιητικά αποτελέσματα στην εκτίμηση του μέτρου ελαστικότητας Young νανοσωλήνων άνθρακα. Χρησιμοποιώντας αυτό το πεπερασμένο στοιχείο, οι προσομοιώσεις που εκτελέστηκαν βρέθηκαν σε πολύ καλή συμφωνία με την βιβλιογραφία.

Όσον αφορά την εξάρτηση από την διάμετρο, παρατηρήθηκε ότι όσο αυξάνεται, αυξάνεται και το μέτρο ελαστικότητας. Αυτό συμβαίνει μέχρι μία κρίσιμη διάμετρο, άνω της οποίας παραμένει πρακτικά ανεξάρτητο. Η κρίσιμη αυτή τιμή εξαρτάται από τον τύπο του νανοσωλήνα, για νανοσωλήνες τύπου zigzag είναι της τάξης των 3 nm, ενώ για νανοσωλήνες τύπου armchair είναι φανερά χαμηλότερη και είναι της τάξης του 1 nm.

Όσον αφορά την εξάρτηση από το μήκος του προς μοντελοποίηση νανοσωλήνα άνθρακα, αυτό δύναται να επηρεάσει τα αποτελέσματα, μόνο όταν δεν υπερβαίνει κάποια κρίσιμη τιμή, η οποία εκτιμήθηκε ότι είναι της τάξης των 5–10 nm για νανοσωλήνες άνθρακα τύπου armchair και zigzag.

Παράλληλα, η εξάρτηση από τον λόγο Poisson του πεπερασμένου στοιχείου δεν θεωρείται ιδιαίτερα σημαντική. Αυτός είναι και ο λόγος για τον οποίο κάποια μοντέλα που έχουν παρουσιασθεί στη βιβλιογραφία και χρησιμοποιούν αφύσικη τιμή για τον λόγο Poisson, τελικά, υπολογίζουν σχετικά αποδεκτές τιμές για το μέτρο ελαστικότητας Young.

Επιπλέον, από την παρούσα εργασία είναι φανερό ότι το μέτρο ελαστικότητας Young είναι πρακτικά ανεξάρτητο από τον τύπο του νανοσωλήνα, μιας και οι διαφορές που βρέθηκαν δεν ξεπερνούν το 5%. Λαμβάνοντας ως πάχος τοιχώματος την τιμή  $t = 0.34$  nm, διαπιστώθηκε ότι όλοι οι νανοσωλήνες άνθρακα που εξετάστηκαν βρέθηκε να έχουν μέτρο ελαστικότητας Young περίπου 1 TPa.

Όσον αφορά τον υπολογισμό του μέτρου διάτμησης και την επιλογή του πεπερασμένου στοιχείου, προκύπτει το ίδιο συμπέρασμα με παραπάνω. Δηλαδή, τα πεπερασμένα στοιχεία B31 και B32 υποεκτιμούν και το μέτρο διάτμησης, ενώ το B33 προσεγγίζει σημαντικά τις τιμές που συναντώνται στην βιβλιογραφία, δηλαδή  $G \approx 0.5$  TPa, για διαμέτρους μεγαλύτερες των 2 nm.

Στη μη γραμμική περιοχή παραμορφώσεων κατασκευάστηκαν διαγράμματα τάσης-παραμόρφωσης τα οποία βρέθηκαν σε αρκετά ικανοποιητική συμφωνία με αντίστοιχα αποτελέσματα της βιβλιογραφίας. Όσον αφορά τους armchair νανοσωλήνες άνθρακα τα αποτελέσματά της παρούσας εργασίας ταυτίζονται με αυτά των Mohammadpour et al. [33], ενώ δεν διαφέρουν σε σημαντικό βαθμό από αυτά των Tserpes et al. [6].

Συμπερασματικά, το παρόν μοντέλο επιτυγχάνει την εκτίμηση της μηχανικής συμπεριφοράς των νανοσωλήνων άνθρακα τύπου armchair και zigzag, σε αρκετά ικανοποιητικό βαθμό, λαμβάνοντας υπόψιν ότι δεν παρουσιάζει σημαντικές αποκλίσεις τόσο από άλλα θεωρητικά μοντέλα, όσο και από αντίστοιχες πειραματικές μετρήσεις.

## 6.2 Προτάσεις για μελλοντική έρευνα και αξιολογες πειραματικές εργασίες

Οι προτάσεις για μελλοντική έρευνα και πιθανές βελτιώσεις συνοψίζονται σε δύο κατηγορίες, πρώτον την αριστοποίηση της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων για την μοντελοποίηση νανοσωλήνων άνθρακα και δεύτερον την εξέλιξη του υπάρχοντος μοντέλου και την ενσωμάτωσή του σε άλλους ερευνητικούς τομείς που αφορούν σύνθετα υλικά με CNTs. Όσον αφορά την βελτίωση της μεθόδου, εντοπίζουμε τρία σημεία που θα μπορούσαν να οδηγήσουν στην αντιμετώπιση των δυσκολιών που υπάρχουν σήμερα. Αυτά είναι, η ενσωμάτωση των ενεργειών Van der Waals στην ενεργειακή θεώρηση της μεθόδου για αποφυγή αποκλίσεων σε CNTs μικρής διαμέτρου, η δημιουργία ενός υβριδικού πεπερασμένου που να μπορεί να υποστηρίξει το συνδυασμό ενεργειακών και δομικών χαρακτηριστικών και τέλος ο καθορισμός μιας συγκεκριμένης τιμής για τον λόγο Poisson και το πάχος τοιχώματος του εκάστοτε πεπερασμένου στοιχείου που χρησιμοποιείται.

Τέλος, μεγάλο ενδιαφέρον παρουσιάζει η μελέτη της διεπιφάνειας μεταξύ νανοσωλήνα άνθρακα και μήτρας. Ενδεικτικά, οι Liu et al. [34] προέβησαν στον χαρακτηρισμό της διεπιφάνειας μεταξύ CNTs και μήτρας χρησιμοποιώντας ένα συνεκτικό μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων και διερεύνησαν τις μηχανικές ιδιότητες του προκύπτοντος σύνθετου υλικού. Τέλος, οι Kumar et al. [35] διερεύνησαν την επίδραση της ακαμψίας και του μεγέθους της διεπιφάνειας στο μέτρο ελαστικότητας του συνθέτου, χρησιμοποιώντας ένα ομοιογενές στοιχείο χαρακτηριστικού όγκου το οποίο περιείχε πολλαπλούς CNTs.

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] S. Reich, C. Thomsen και J. Maultzsch, Carbon nanotubes: Basic Concepts and Physical Properties, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2004.
- [2] S. Iijima, "Structural flexibility of carbon nanotubes," *Journal of Chemical Physics*, no. 104, pp. 2089-2092, (1996).
- [3] A. Moisala, «Studies on Synthesis of Single Walled Carbon Nanotubes by Gas-Phase Chemical Vapour Deposition,» *Academic Dissertation*, pp. 12-15, 2006.
- [4] M. Shaffer και J. Sandler, «Processing And Properties of Nanocomposites,» *World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd.*, 2006.
- [5] C. Miko, M. Milas, J. Seo, E. Couteau, N. Barisic and R. Gaal, "Effect of electron irradiation on the electrical properties of fibers of aligned single-walled carbon nanotubes," *Applied Physics Letters*, no. 83, pp. 4622-4624, 2003.
- [6] K.I. Tserpes and P. Papanikos, "Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes," *Composites: Part B*, no. 36, pp. 468-477, (2004).
- [7] R. Bacon, "Growth, structure and properties of graphite whiskers," *Journal of Applied Physics*, vol. 31, no. 283, pp. 283-290, 1960.
- [8] "<http://www.pa.msu.edu/cmp/csc/ntproperties/>," [Online]. [Accessed 5 July 2019].
- [9] E. Hernandez, C. Goze, P. Bernier and A. Rubio, "Elastic properties of single walled nanotubes," *Journal of Applied Physics*, vol. A, no. 68, pp. 287-292, 1999.
- [10] D. Gomez-Gualdrón, J. Burgos, J. Yu and P. Balbuena, "Carbon nanotubes: Engineering biomedical applications," *Elsevier Inc. and Translational Science*, vol. 104, pp. 175-177, 2011.
- [11] T. Guo, P. Nikolaev, A. Thess, D. Colbert and R. Smalley, "Catalytic growth of single-walled nanotubes by laser vaporization," *Chemical Physics Letters*, no. 243, pp. 49-54, 1995.
- [12] V. Popov, «Materials Science and Engineering,» τόμ. 43, pp. 61-102, 2004.
- [13] V. Raffa, G. Clofani, S. Nitodas, T. Karachalios, D. Alessandro, M. Masini and A. Cuschieri, "Can the properties of carbon nanotubes influence their internalization by living cells," *Carbon*, no. 46, pp. 1600-1602, 2008.
- [14] S. Belluci, "Physics and applications," *Physica Status Solidi*, vol. 2, no. 1, pp. 34-47, 2005.
- [15] B. Yakobson and C. Brabec, "Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear range," *Physical Review Letters*, no. 76, pp. 2511-2514, (1996).
- [16] K. Kudin, "Nanoshell elasticity from ab initio computations," *Physical Review Letters*, vol. B, no. 64, pp. 335-406, (2001).
- [17] J. Lu, "Elastic properties of carbon nanotubes and nanoropes," *Physical Review Letters*, no. 79, pp. 1297-1300, (1997).
- [18] C. Li and T.-W. Chou, "A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes," *International Journal of Solids and Structure*, no. 40, pp. 2487-2499, 2003.
- [19] A. Pantano, "Mechanics of deformation of single and multi-wall carbon nanotubes," *Journal of Mechanical Physics and Solids*, no. 52, pp. 789-821, (2004).
- [20] E.B. Tadmor, R. Phillips and M. Ortiz, "Mixed atomistic and continuum models of deformation in solids," *Langmuir*, vol. 12, no. 19, pp. 4529-4534, 1996.
- [21] G. Odegard, "Equivalent-continuum modeling of nano-structured materials," *Journal of composites Science and Technology*, no. 62, pp. 1869-1880, (2002).



- [22] H. Cheng, Y. Liu, Y. Hsu and W. Hsen, "Atomistic-continuum modeling for mechanical properties of single-walled carbon nanotubes," *International Journal of Solids and Structures*, vol. 46, no. 7-8, pp. 1695-1704, 2009.
- [23] C. Fan, Y. Liu and C. Hwu, *Applied Physics*, vol. A, no. 95, pp. 819-831, 2009.
- [24] M.S.Dresselhaus, G.Dresselhaus and R.Saito, "Physics of carbon nanotubes," *Carbon*, no. 33, pp. 883-891, (1995).
- [25] "<https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>," [Online]. [Accessed 5 July 2019].
- [26] "<http://dsk.ippt.pan.pl/docs/abaqus/v6.13/index.html>," [Online]. [Accessed 5 July 2019].
- [27] V.N.Popov, V. Doren and M.Balkanski, "Elastic properties of single walled carbon-nanotubes," *Physical Review*, vol. B, no. 61, pp. 3078-3084, 2000.
- [28] K. Tserpes and P. Papanikos, "The effect of Stone-Wales defect on the tensile behavior and fracture of single-walled carbon nanotubes," *Composite Structures*, no. 79, pp. 581-589, 2007.
- [29] T.Belytschko, S.P.Xiao, G.C.Schatz and R.S.Ruoff, "Atomistic simulations of nanotube fracture," *Physical Review*, vol. B, no. 65, (2004).
- [30] J. Xiao, B.A.Gama and J.W.Gillespie, "An analytical molecular structural mechanics model for the mechanical properties of carbon nanotubes," *International Journal of Solids and Structures*, vol. 42, no. 11-12, pp. 3075-3092, 2005.
- [31] X. Sun and W.Zhao, "Prediction of stiffness and strength of single-walled carbon nanotubes by molecular-mechanics based finite element approach," *Materials Science and Engineering*, vol. 390, no. 1-2, pp. 366-371, 2005.
- [32] D.W.Brenner, "Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films," *Physical Review*, vol. 42, no. 15, 1990.
- [33] E.Mohammadpour, M.Awang and M.Z.Abdullah, "Predicting the Young's modulus of single-walled carbon nanotubes using finite element modeling," *Journal of Applied Sciences*, no. 49, pp. 51-60, 2011.
- [34] X. Liu, Q. Yang and L. Su, "Interface analysis and design in carbon nanotube array composite based on cohesive finite element approach," *Materials Science and Engineering*, vol. 592, pp. 83-87, 2014.
- [35] P. Kumar and J. Srinivas, "Numerical evaluation of effective elastic properties of CNT-reinforced polymers for interface effects," *Computational Materials Science*, vol. 88, pp. 139-144, 2014.