



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΙΙΙ: ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΙΚΗΣ ΤΩΝ ΥΛΙΚΩΝ

Διπλωματική Εργασία

*«Μελέτη μηχανικών ιδιοτήτων νανοσωλήνων άνθρακα
με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων»*

Δανάη – Ελένη Σουλιώτη

Επιβλέπων: Κ.Α. Χαριτίδης, Καθηγητής ΕΜΠ

Τριμελής επιτροπή:

Κ. Α Χαριτίδης, Καθηγητής ΕΜΠ

Θ. Θεοδώρου, Καθηγητής ΕΜΠ

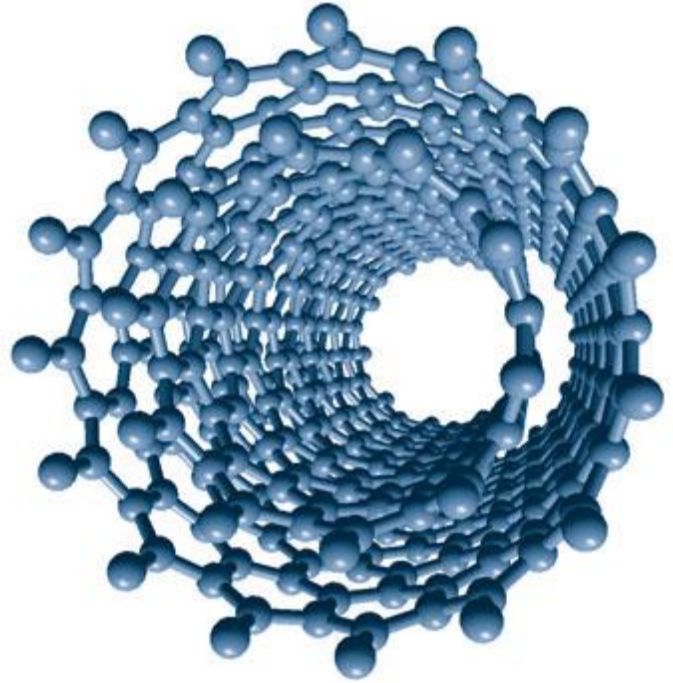
Α. Καραντώνης, Επίκουρος Καθηγητής ΕΜΠ

Αθήνα, 2015

Πρόλογος

Η παρούσα διπλωματική εργασία εκπονήθηκε το έτος 2014-15 στον Τομέα επιστήμης και Τεχνικής των Υλικών της σχολής Χημικών Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου, υπό την επίβλεψη του Καθηγητή Κ.Α Χαριτίδη, τον οποίο θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά για την καθοδήγηση και βοήθεια που μου προσέφερε. Τις θερμές μου ευχαριστίες θα ήθελα να υποβάλλω και στον Υποψήφιο Διδάκτορα Δ.Α. Δραγατογιάννη, χωρίς τη βοήθεια του οποίου δε θα ήταν δυνατή η εκπόνηση της εργασίας μου. Τέλος θα ήθελα να ευχαριστήσω τους γονείς μου αλλά και τους στενούς μου φίλους που δε σταμάτησαν λεπτό να με στηρίζουν.

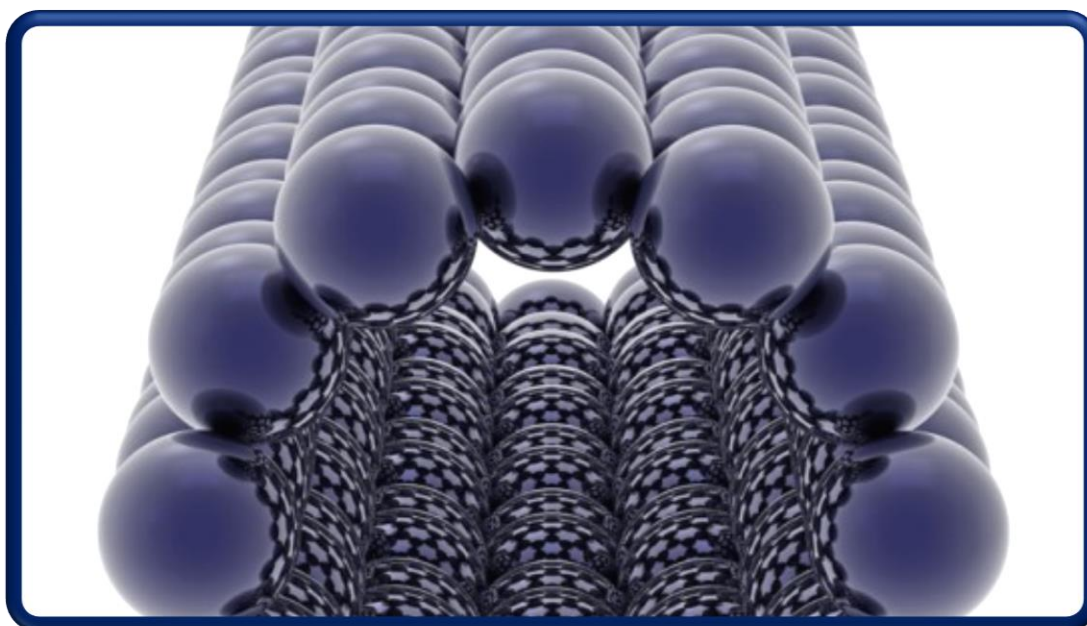
Δανάη - Ελένη Σουλιώτη



Περιεχόμενα

Περίληψη.....	5
Abstract.....	7
1. Νανοσωλήνες Άνθρακα (CNTs).....	9
1.1 ΙδιότητεςCNT	9
1.2 Δομή και είδη CNTs.....	11
1.3 Σύνθεση.....	12
1.3.1 Μέθοδοι σύνθεσης	12
1.3.2 Έλεγχος της μορφής και των ιδιοτήτων των CNTs	15
1.4 Εφαρμογές.....	16
1.4.1 Βιομηχανία.....	16
1.4.2 Ιατρική	17
1.4.3 Τρανζίστορ/Ηλεκτρονικές εφαρμογές.....	18
1.4.4 Αεροδιαστημική και καινοτομίες	18
1.5 Βιβλιογραφία.....	19
2. Θεωρητικές και πειραματικές μελέτες που αφορούν νανοσύνθετα	21
2.1 Σύνθετα πολυμερικής μήτρας.....	21
2.2 Σύνθετα κεραμικής μήτρας.....	22
2.3 Σύνθετα μεταλλικής μήτρας	22
2.4 Βιβλιογραφία.....	23
3. Μοντελοποίηση CNTs με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων	24
3.1 Εισαγωγή στη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων.....	24
3.2 Θεωρητικές μέθοδοι ανάλυσης και μοντελοποίησηςCNTs.....	25
3.2.1 Ατομιστική προσέγγιση.....	25
3.2.2 Προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης.....	26
3.2.3 Προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης στη νανοκλίμακα	27
3.3 Θεμελίωση μοντέλουCNTs θεωρώντας το πραγματικό δυναμικό του δεσμού C-C	28
3.3.1 Ενεργειακή ανάλυση δεσμών.....	28
3.3.2 Εισαγωγή συντεταγμένων και γεωμετρικών χαρακτηριστικών	33
3.4 Κατασκευή μοντέλου	48
3.5 Βιβλιογραφία.....	57

4. Επίλυση και μετεπεξεργασία.....	59
4.1 Επίλυση και Postprocessing	59
4.2 Αποτελέσματα -Υπολογισμός μέτρου ελαστικότητας	62
4.3 Παραμετρικές αναλύσεις	64
4.3.1 Σχέση ακτίνας - μέτρου ελαστικότητας.....	64
4.3.2 Σχέση λόγου Poisson - μέτρου ελαστικότητας	69
4.3.3 Σχέση πάχους τοιχώματος - μέτρου ελαστικότητας	71
4.4 Συμπεράσματα.....	76
4.4.1 Σχεδιασμός και λειτουργικότητα μοντέλου.....	76
4.4.2 Παραμετρικές αναλύσεις.....	76
4.5 Βιβλιογραφία.....	77
5. Προτάσεις για μελλοντική έρευνα	78
5.1 Αριστοποίηση μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων.....	78
5.2 Μελλοντική έρευνα – καινοτομίες	78
5.3 Βιβλιογραφία.....	79
Παράρτημα	80
Εντολές κώδικα.....	80
Δείγμα κώδικα	82
Βιβλιογραφία παραρτήματος	85



Περίληψη

Προτείνεται ένα τρισδιάστατο μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων (Finite Element Model), armchair και zigzag μονοτοιχωματικών νανοσωλήνων άνθρακα (SWCNTs). Η εξαγωγή του μοντέλου βασίζεται στην υπόθεση ότι οι νανοσωλήνες άνθρακα όταν υπόκεινται σε μηχανική φόρτιση, συμπεριφέρονται ως χωροδικτύωματα. Για την κατασκευή και επίλυση του μοντέλου χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα προσομοίωσης ANSYS 13.0 και η σχεδίαση των νανοσωλήνων έγινε χρησιμοποιώντας τις αντίστοιχες εντολές κώδικα του προγράμματος.

Στο παρόν μοντέλο, οι δεσμοί μεταξύ των ατόμων άνθρακα, μοντελοποιούνται ως ελαστικοί δοκοί (στοιχεία – elements) οι οποίες και υπόκεινται σε φόρτιση, ενώ τα άτομα άνθρακα ως κόμβοι (nodes) μεταξύ των δεσμών - δοκών. Η μετατόπιση των ατόμων άνθρακα περιορίζεται από τους δεσμούς και συνεπώς η τελική παραμόρφωση του νανοσωλήνα προκύπτει ως αποτέλεσμα της αλληλεπίδρασης των δεσμών. Για να κατασκευάσουμε το μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων, και να επιτύχουμε την προσομοίωσή του με ένα χωροδικτύωμα, στη θέση των ατόμων άνθρακα τοποθετήθηκαν σημεία – κόμβοι και οι ενώσεις μεταξύ τους μοντελοποιούνται χρησιμοποιώντας στοιχεία ελαστικών δοκών τριών διαστάσεων.

Ο παραπάνω σχεδιασμός πραγματοποιείται σε επτά διαφορετικές περιπτώσεις: για τα δύο είδη νανοσωλήνων μονού τοιχώματος, armchair και zigzag, για διαφορετικές διαμέτρους – άρα και κατανομές ατόμων - για το κάθε είδος. Οι διαφορετικές κατασκευές για τη διαφοροποίηση της διαμέτρου των νανοσωλήνων που εξετάστηκαν είναι οι (4,4), (8,8) και (16,16) για τους μεν armchair νανοσωλήνες και οι (4,0), (8,0), (16,0) και (32,0) για τους zigzag. Ενδεικτικά, ο (16,16) νανοσωλήνας αποτελείται από 1120 κόμβους, ο (32,0) από 1280 κόμβους και ο μικρότερος νανοσωλήνας (4,0) περιλαμβάνει 160 κόμβους. Σε κάθε περίπτωση, armchair ή zigzag μορφής, οι διαφορετικοί νανοσωλήνες είναι ισομήκεις για καλύτερη συγκρισιμότητα των αποτελεσμάτων, και το μήκος τους είναι αρκετά μεγάλο ώστε να εξαλειφθούν φαινόμενα μεγέθους.

Το μέτρο ελαστικότητας των δοκών – δεσμών προσδιορίζεται, χρησιμοποιώντας μια σύνδεση μεταξύ της μοριακής δυναμικής (*molecular dynamics*) και της προσέγγισης συνεχούς ανάλυσης (*continuum analysis*). Οι δεσμοί μοντελοποιήθηκαν μέσω ελαστικών τρισδιάστατων δοκών κυκλικής, συμπαγούς διατομής και συγκεκριμένης ακτίνας, μέσω της οποίας καθορίζεται και το τελικό πάχος τοιχώματος του νανοσωλήνα. Οι εκάστοτε ενεργειακές σταθερές και το μήκος του δεσμού μεταξύ ανθράκων βρέθηκαν στη βιβλιογραφία και αποτέλεσαν το μέσο σύνδεσης των δομικών μηχανικών χαρακτηριστικών των νανοσωλήνων με παραμέτρους μοριακής μηχανικής, απαραίτητο για την εξαγωγή των τελικών αποτελεσμάτων για τα μέτρα διάτμησης και ελαστικότητας των νανοσωλήνων.

Επιπλέον, στο συγκεκριμένο μοντέλο, διερευνάται η επίδραση του πλευρικού πάχους των σωλήνων (wall thickness), της διαμέτρου και της χειρομορφίας στο μέτρο ελαστικότητας κατά Young και στο μέτρο διάτμησης των δύο ειδών SWCNTs. Αποφαιίνεται ότι η επιλογή του πάχους επηρεάζει σημαντικά την μέτρηση του μέτρου ελαστικότητας, διαφορετικά όμως για κάθε είδος νανοσωλήνα. Αποδεικνύεται, ακόμα, η εξάρτηση του μέτρου ελαστικότητας τόσο από τη διάμετρο όσο και από τη χειρομορφία των νανοσωλήνων. Γενικά, με την αύξηση της διαμέτρου του σωλήνα, τείνει να αυξάνεται επίσης και το μέτρο ελαστικότητάς του. Παρατηρείται απόκλιση από τον κανόνα αυτόν, βέβαια σε κάποιες περιπτώσεις.

Το προτεινόμενο μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων αποτελεί ένα αξιόλογο εργαλείο μελέτης της μηχανικής συμπεριφοράς των νανοσωλήνων άνθρακα ακόμα και την ενσωμάτωσή τους στην κατασκευή και μελέτη σύνθετων νανοϋλικών (nanocomposites). Εφόσον το μοντέλο περιέχει σχετικά μικρό αριθμό στοιχείων, εκτελείται σε μικρό υπολογιστικό χρόνο και απαιτεί ελάχιστη υπολογιστική ισχύ. Αυτό το πλεονέκτημα, σε συνδυασμό με τις δυνατότητες μοντελοποίησης της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων, επεκτείνει το πεδίο εφαρμογής του μοντέλου σε νανοσωλήνες μονού τοιχώματος με μεγάλο αριθμό ατόμων, καθώς και σε νανοσωλήνες πολλαπλών τοιχωμάτων, σε άλλες νανοδομές σχετιζόμενες με άνθρακα και τελικά σε νανοςύνθετα υλικά που περιέχουν νανοσωλήνες.

Λέξεις κλειδιά: Νανοσωλήνες άνθρακα, μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων, μέτρο ελαστικότητας, πάχος τοιχώματος

Abstract

A three-dimensional, finite element model for single-walled armchair and zigzag nanotubes is proposed. The model development is based on the assumption that when subjected to mechanical loading, carbon nanotubes behave like three dimensional space-frame structures. ANSYS 13 software was used in order to design, solve and process the results of the model. All design parameters, formulas and mechanical properties of the materials used are inserted through ANSYS 13 built-in commands.

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 displacement of individual atoms under an external force is constrained by the bonds. Therefore, the total deformation of the nanotube is the result of the interactions between the bonds. By considering the bonds as connecting load-carrying elements, and the atoms as joints of the connecting elements, CNTs may be simulated as space-frame structures. In order to design the finite element model and achieve its space-frame like behavior, keypoints acting as nodes represent the carbon atoms and the connecting bonds are modeled by 3D elastic beam elements.

The aforementioned design process is repeated for all 7 cases studied: For both single-walled carbon nanotubes forms, armchair and zigzag, with the armchair form having three different diameters, namely (4,4),(8,8) and (16,16), and the zigzag form having 4 different diameters, (4,0),(8,0),(16,0) and (32,0). Indicatively, the (16,16) nanotubes consists of 1120 nodes, the (32,0) of 1280 nodes and the smallest, the (4,0), includes 160 nodes. All nanotubes, armchair and zigzag are of equal length to their same form counterparts and of equivalent length between them so as to ensure comparability of the results, and eliminate possible size-effect related phenomena.

The Young modulus of the beam elements is calculated using a linkage between molecular and continuum mechanics. Carbon atom bonds are modeled by 3D elastic beams with a circular, solid cross-section that possess a certain radius, which in its turn determines the wall thickness of the CNT. In order to determine the elastic moduli of beam elements, relations between the sectional stiffness parameters in structural mechanics and the force-field constants in molecular mechanics need to be obtained from literature.

Furthermore, the model has been used to investigate the effect of wall thickness, diameter and chirality on the elastic moduli of the different SWCNTs. For the values of wall thickness used in the literature, the obtained values of Young's modulus agree very well with the corresponding theoretical results and many experimental measurements. The FE model results suggest that Young's modulus is inversely

proportional to the wall thickness. Dependence of elastic moduli to diameter and chirality of the nanotubes has been also found. With increasing tube diameter, the elastic moduli of SWCNTs generally increases. However, results do tend to vary among the different types of nanotubes.

The presented results demonstrate that the proposed FE model may provide a valuable tool for studying the mechanical behavior of CNTs and nanocomposites, as the FE model comprises small number of elements, it performs under minimal computational time by requiring minimal computational power. This advantage, in combination with the modeling abilities of the FE method, extends the model applicability to SWCNTs with very large number of atoms as well as to MWCNTs, other carbon-related nanostructures and moreover, to CNT-based nanocomposites.

Keywords: Carbon Nanotubes, Finite element method, Young modulus, wall thickness

1. Νανοσωλήνες Άνθρακα CNTs

Τα τελευταία χρόνια, σημαντική πρόοδος έχει επιτευχθεί στον τομέα της νανομηχανικής. Ένας συγκεκριμένος τομέας, στον οποίο έχει διεξαχθεί συστηματική έρευνα, είναι ο τομέας ανάπτυξης των νανοϋλικών και συγκεκριμένα των νανοσωλήνων άνθρακα. Από την ανακάλυψή τους το 1991 από τον Iijima και μετά, οι νανοσωλήνες άνθρακα, συχνά εμφανιζόμενοι σε σύντμηση CNTs (Carbon Nano Tubes), έχουν λάβει μεγάλη προσοχή στοχευμένη κυρίως στην μέτρηση των θεμελιωδών μηχανικών ιδιοτήτων τους αλλά και των δυνατικών εφαρμογών τους. Αυτό κυρίως οφείλεται στις εκπληκτικές τους φυσικές (μηχανικές, θερμικές και ηλεκτρικές) ιδιότητες, όπως αυτές παρουσιάζονται σε πλήθος σχετικών θεωρητικών και πειραματικών μελετών.

1.1 Ιδιότητες CNTs

Οι φυσικές ιδιότητες των νανοσωλήνων άνθρακα συνδέονται άμεσα με εκείνες του γραφενίου, εφόσον δεν είναι τίποτα άλλο παρά τυλιγμένα φύλλα γραφενίου. Οι ιδιότητες του στοιχειακού άνθρακα προέρχονται από τα ασθενώς δεσμευμένα ηλεκτρόνια σθένους τα οποία καταλαμβάνουν ένα 2s και τρία 2p τροχιακά. Η ενεργειακή διαφορά μεταξύ των s και p τροχιακών είναι μικρή σε σύγκριση με τις ενέργειες σύζευξης των ατόμων (interatomic binding energies) και ως εκ τούτου είναι δυνατόν να υπάρξει υβριδισμός ή ανάμιξη του σ και π χαρακτήρα. Ο Υβριδισμός ενός s και ενός n-p τροχιακού επισημαίνεται σαν spⁿ και συνοδεύεται από την εμφάνιση και των τριών τύπων (sp, sp², sp³). Το διαμάντι εμφανίζει sp³ υβριδισμό ενώ οι επίπεδες (planar) δομές όπως ο γραφίτης και οι ημιεπίπεδες όπως οι νανοσωλήνες εμφανίζουν sp² υβριδισμό.

Πίνακας 1.1: Ιδιότητες CNTs σε σύγκριση με το γραφίτη

Ιδιότητα	CNTs	Γραφίτης
Ειδικό βάρος	0,8 g/cm ³ για SWCNT 1,8 g/cm ³ για MWCNT (θεωρητικό)	2,26 g/cm ³
Μέτρο ελαστικότητας	≈ 1 TPa για SWCNT ≈ 0,3 – 1 TPa για MWCNT	1 TPa (in-plane)
Αντοχή	50-500 GPa για SWCNT 10-60 GPa για MWCNT	
Θερμική διαστολή	αμελητέα	-1 · 10 ⁻⁶ K ⁻¹
Θερμική σταθερότητα	>700°C σε αέρα / 2800°C σε κενό	450-600°C σε αέρα
Θερμική αγωγιμότητα	3000 W m ⁻¹ K ⁻¹	3000 W m ⁻¹ K ⁻¹

Λόγω της ενιαίας ατομικής τους δομής, οι νανοσωλήνες άνθρακα παρουσιάζουν αξιοσημείωτες **ηλεκτρονικές, θερμικές, μαγνητικές και μηχανικές** ιδιότητες, οι οποίες άλλες λιγότερο και άλλες περισσότερο εξαρτώνται από την χειρομορφία τους. Συγκεκριμένα, η χειρομορφία του νανοσωλήνα άνθρακα έχει ισχυρό αντίκτυπο στις ηλεκτρονικές του ιδιότητες. Παρόλο που οι SWCNTs έχουν δομή παρόμοια με ενός φύλλου γραφενίου, το οποίο θεωρείται ημιαγωγικό υλικό με μηδενικό χάσμα, έχει αποδειχθεί ότι οι SWCNTs μπορεί να είναι είτε **μεταλλικοί** είτε **ημιαγωγάμοι**: οι νανοσωλήνες τύπου ‘armchair’ είναι μεταλλικού χαρακτήρα, οι τύπου ‘zig-zag’ και οι νανοσωλήνες με $n - m = 3k$, όπου k ακέραιος αριθμός, έχουν ημιαγωγικό χαρακτήρα μικρού χάσματος, ενώ όλοι οι υπόλοιποι νανοσωλήνες είναι ημιαγωγοί μεγάλου χάσματος. Από κβαντικής άποψης οι CNTs εμφανίζουν τοπικά συγκέντρωση ηλεκτρονίων (electron localization) που προκαλείται μεταξύ άλλων από ατέλειες στην δομή τους. Έτσι οι νανοσωλήνες που εμφανίζουν μεταλλικό χαρακτήρα, επιτρέπουν την διέλευση του ρεύματος βαλλιστικά χωρίς την ταυτόχρονη εκπομπή θερμότητας. Επιπλέον οι νανοσωλήνες άνθρακα εμφανίζουν την υψηλότερη θερμική αγωγιμότητα μεταξύ των μέχρι σήμερα γνωστών υλικών, ενώ μπορούν να λειτουργήσουν άριστα και σαν εκπομπείς πεδίου ^[21]. Όσον αφορά τις μηχανικές τους ιδιότητες, οι CNTs παρουσιάζουν απρόσμενα υψηλή **ακαμψία, μηχανική αντοχή και ελαστικότητα**. Η δυνητική χρήση των CNTs ως υλικά ενίσχυσης σε σύνθετα νανοϋλικά, έχουν δημιουργήσει την ανάγκη ακριβούς υπολογισμού των μηχανικών τους ιδιοτήτων, την προσέγγιση της παραμόρφωσης τους υπό μηχανικό φορτίο και σαν μεταγενέστερο βήμα, την πρόβλεψη της μηχανικής τους συμπεριφοράς μέσω θεωρητικών μοντέλων. Ο χαρακτηρισμός των μηχανικών ιδιοτήτων των CNTs είναι πιο σύνθετος από ότι για τα συμβατικά υλικά, λόγω της ισχυρής εξάρτησής τους από το μέγεθος και το είδος των νανοδομών.

Από τον πίνακα 1.1 γίνεται φανερό ότι τα CNTs διαθέτουν μοναδικές μηχανικές, ηλεκτρικές, μαγνητικές, θερμικές και οπτικές ιδιότητες. Σε ειδικές εφαρμογές όπως στην διαστημική αεροναυπηγική όπου και απαιτούνται ελαφρά υλικά πολύ υψηλής απόδοσης, χρησιμοποιούνται συχνά σύνθετα υλικά πολυμερικής μήτρας με νανοσωλήνες άνθρακα ως ενίσχυση. Επιπλέον, αν και ο γραφίτης είναι ημι-μέταλλο, τα CNTs μπορεί να είναι ή μεταλλικά ή ημιαγωγάμοι λόγω τοπολογικών ατελειών από τα «καπάκια» φουλερενίου στα άκρα των νανοσωλήνων (πεντάγωνα σε εξαγωνικό πλέγμα). Οι φυσικο-μηχανικές ιδιότητες των CNTs εξαρτώνται από τις διαστάσεις τους, την ελικότητα και τη χειρομορφία τους. Όπως αναφέραμε και προηγουμένως, οι ανώτατες ιδιότητές τους προσφέρουν δυνατότητες συναρπαστικών εφαρμογών, όπως δείχνει και το γεγονός ότι η NASA έχει επενδύσει μεγάλα χρηματικά ποσά στην έρευνα για την ανάπτυξη σύνθετων υλικών με CNTs για τη χρήση στην αποστολή στο Άρη.

Η χημική δραστηριότητα ενός CNT, σε σύγκριση με ένα φύλλο γραφενίου, αυξάνεται λόγω της καμπυλότητας της επιφάνειας του νανοσωλήνα άνθρακα, καθώς η δραστηριότητα σχετίζεται άμεσα με την αναντιστοιχία του p-τροχιακού που προκαλείται από την αυξημένη καμπυλότητα της επιφάνειας του νανοσωλήνα άνθρακα. Καθώς τα πλευρικά τοιχώματα και το άκρο του CNT έχουν διαφορετική καμπυλότητα δεν έχουμε ίδια χημική δραστηριότητα σε όλο το μήκος του νανοσωλήνα άνθρακα. Για τον ίδιο λόγο, μία μικρότερη διάμετρος των νανοσωλήνων άνθρακα οδηγεί σε αυξημένη δραστηριότητα. ^[20]

Τα σύνθετα υλικά ενισχυμένα με νανοσωλήνες άνθρακα (CNT) χρησιμοποιούνται σε πλήθος εφαρμογών, λόγω των εξαιρετικών μηχανικών, ηλεκτρικών και θερμικών ιδιοτήτων ^{[6][7]} οι οποίες προκύπτουν από τις διαστάσεις στην νανοκλίμακα, τα φυσικά χαρακτηριστικά, αλλά και το λόγο μήκους/ύψους των

νανοσωλήνων άνθρακα. Το «κλειδί» στην επιτυχημένη ενίσχυση ενός υλικού με CNTs, είναι η καλή **διασπορά τους στη μήτρα** – ένα συχνά δύσκολο έργο λόγω της ισχυρής τάσης των νανοσωλήνων να συσσωρεύονται και να σχηματίζουν συσσωματώματα [1]. Η προσθήκη νανοσωλήνων στην πολυμερική μήτρα μπορεί να βελτιώσει τις θερμικές ιδιότητες του πολυμερούς, καθιστώντας το μια λειτουργική επιφάνεια εναλλαγής θερμότητας, να αυξήσει το μέτρο ελαστικότητας και την αντοχή του και πιθανώς να του προσδώσει χρήσιμες ηλεκτρομαγνητικές ιδιότητες [3] όπως θα δούμε αναλυτικότερα και σε επόμενο κεφάλαιο που αφορά τα νανოსύνθετα.

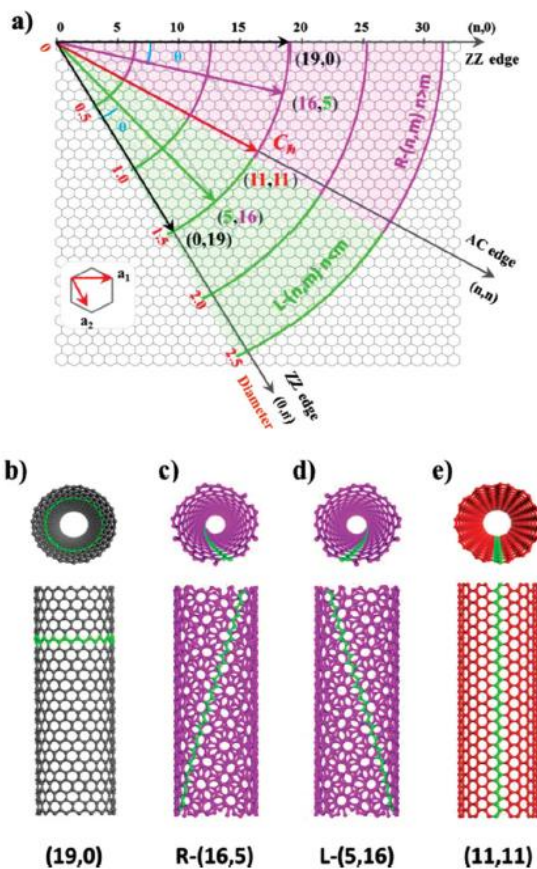
1.2 Δομή και είδη CNTs

Υπάρχουν δύο μεγάλες κατηγορίες νανοσωλήνων άνθρακα: Οι πολλαπλών τοιχωμάτων ή πολυφλουκοί ή multi-walled carbon nanotubes (**MWCNTs**) και οι μονού τοιχώματος ή μονοφλουκοί, single-walled carbon nanotubes (**SWCNTs**). Οι SWCNTs έχουν συνήθως διάμετρο 0.4 – 3nm και μήκος από μερικές δεκάδες νανόμετρα μέχρι μερικά χιλιοστά

Οι πολυφλουκοί νανοσωλήνες άνθρακα αποτελούνται από ομόκεντρα κυλινδρικά φύλλα γραφενίου, ομοαξονικά τοποθετημένα γύρω από ένα κούφιο πυρήνα με διαστρωματικό διαχωρισμό όπως στο γραφίτη. Η απόσταση των κυλίνδρων είναι περίπου 0.34 nm, όμοια δηλαδή με τη διεύθυνση των επιπέδων στο γραφίτη. Οι εξωτερικές διαμέτρους των MWCNTs είναι μεταξύ 5 και 100 nm ενώ το μήκος τους είναι δυνατόν να αγγίξει και τα μερικά μm. Οι MWNTs μπορούν να έχουν διάμετρο από 2 έως 100 nm και μήκος κάποιων δεκάδων μικρομέτρων. [10]

Η δομή ενός SWCNT μπορεί να προκύψει εάν θεωρήσουμε πως ένα τέλειο γραφιτικό φύλλο περιελίσσεται κατά τέτοιο τρόπο ώστε δύο ισοδύναμα σημεία του εξαγωνικού του πλέγματος (π.χ. η αρχή και το τέλος του πλεγματού ανύσματος C) να συμπέσουν. Σημειώνεται πως το τέλειο γραφιτικό φύλλο θεωρείται πως αποτελείται αποκλειστικά από εξάγωνα άνθρακα. Η μορφή που θα αποκτήσει ο νανοσωλήνας εξαρτάται από τον τρόπο με τον οποίο περιελίσσεται το φύλλο γραφίτη και μπορεί να περιγραφεί με την βοήθεια των ακέραιων αριθμών (**n,m**), γνωστοί και ως δείκτες ελικότητας (chiral indices). Οι ακέραιοι αυτοί αριθμοί καθορίζουν το διάνυσμα χειρομορφίας (chiral vector):

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



Εικόνα 1.1 : a) Πιθανές γωνίες και κατευθύνσεις που μπορεί να τυλιχτεί το φύλλο γραφενίου. (b-e) Νανοσωλήνες άνθρακα μονού τοιχώματος, διαφορετικής χειρομορφίας [11]

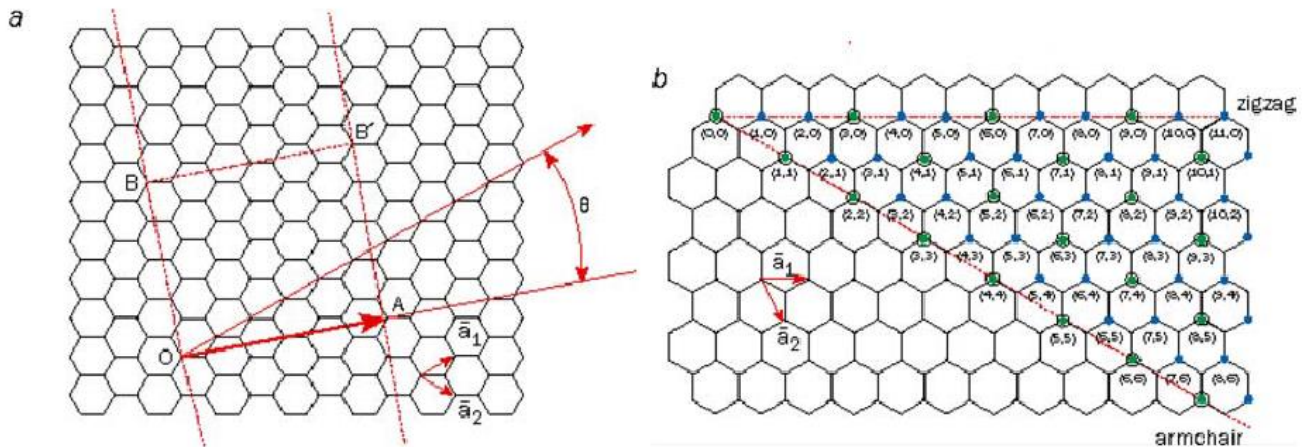
Όπου $a = |\hat{a}_1| = |\hat{a}_2| \approx 2.49 \text{ \AA}$ τα μοναδιαία διανύσματα στο εξαγωνικό πλέγμα γραφενίου δύο διαστάσεων. Εύκολα αποδεικνύεται ότι η περιφέρεια του νανοσωλήνα υπολογίζεται από την σχέση:

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

Και άρα η διάμετρος υπολογίζεται από την σχέση:

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

Η σχέση αυτή θα αναφερθεί και παρακάτω απλοποιημένη για τα είδη νανοσωλήνων άνθρακα που εξετάζουμε.



Εικόνα 1.2 : Σχηματική αναπαράσταση της μορφοποίησης των διαφορετικών ειδών CNTs ανάλογα με το διάνυσμα χειρομορφίας.[11]

Οι δείκτες n, m της σχέσης 1.1 καθορίζουν τη χειρομορφία των ανοσωλήνων άνθρακα. Οι νανοσωλήνες τύπου *armchair* μορφοποιούνται όταν $n = m$ (n, n) και η χειρική γωνία είναι 30° . Οι νανοσωλήνες τύπου *zigzag* μορφοποιούνται όταν, είτε η τιμή n είτε η τιμή m είναι μηδέν ($n, 0$) και η χειρική γωνία είναι 0° . Οι υπόλοιποι νανοσωλήνες στους οποίους η χειρική γωνία είναι μεταξύ 0° και 30° είναι γνωστοί ως νανοσωλήνες τύπου *chiral*. Στην εικόνα 1.2 φαίνεται καλύτερα η μορφοποίηση των νανοσωλήνων *armchair* και *zigzag* από ένα φύλλο γραφενίου.^[13]

1.3 Σύνθεση

1.3.1 Μέθοδοι σύνθεσης

Τέσσερις μέθοδοι κυριαρχούν στην παραγωγή νανοσωλήνων άνθρακα. Οι μέθοδοι αυτές λαμβάνουν χώρα στην αέρια φάση. Πρόκειται για την ηλεκτρική εκκένωση παρουσία γραφίτη (Carbon Arc ή Arc-

Discharge), την εξαέρωση γραφίτη μέσω παλμικού laser (Laser Ablation ή Pulsed Laser Vaporization-PLV), την εναπόθεση αερίων υδρογονανθράκων (Chemical Vapor Deposition-CVD) και την μετατροπή μονοξειδίου του άνθρακα υπό υψηλή πίεση (High-Pressure CO Conversion HiPCO).^[22]

- **Ηλεκτρική Εκκένωση Παρουσία Γραφίτη (Carbon Arc ή Arc-Discharge)**

Η μέθοδος αυτή οδηγεί στην παραγωγή πολύ καλής ποιότητας νανοσωλήνων πολλαπλού και απλού τοιχώματος. Για την παραγωγή των νανοσωλήνων χρησιμοποιούνται δύο ηλεκτρόδια γραφίτη για την ηλεκτρική εκκένωση παρουσία συνεχούς ρεύματος υψηλής εντάσεως. Για την παραγωγή νανοσωλήνων απλού τοιχώματος, η άνοδος ενισχύεται συνήθως με Νικέλιο ή Κοβάλτιο. Κατόπιν, και κατά την 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 κρίσιμες παραμέτρους της μεθόδου, μαζί με την ένταση του συνεχούς ρεύματος και τη θερμοκρασία.

- **Εξάχνωση Γραφίτη Μέσω Παλμικού Laser (Laser Ablation ή Pulsed Laser Vaporization)**

Η μέθοδος της εξάχνωσης γραφίτη μέσω παλμικού Laser παρουσία καταλύτη και κάποιου αδρανούς αερίου οδηγεί στο σχηματισμό απλού τοιχώματος νανοσωλήνων. Η παρουσία του καταλύτη κρίνεται απαραίτητη δεδομένου ότι χωρίς αυτήν η μέθοδος θα οδηγούσε στο σχηματισμό φουλερενίων. Η μέθοδος αυτή 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 ρευστών κοντά στον γραφίτη 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.

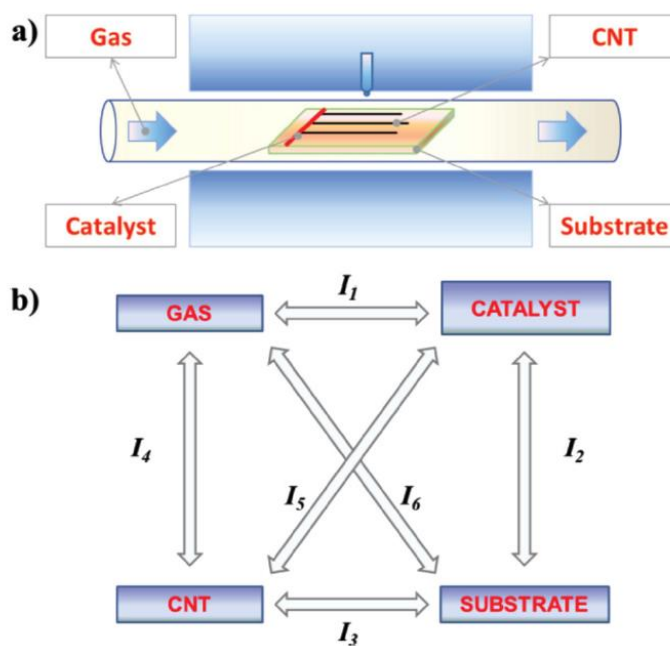
- **Χημική Εναπόθεση Ατμών (Chemical Vapor Deposition)**

Η χημική εναπόθεση ατμών (Chemical Vapor Deposition ή CVD) αποτελεί ίσως την πιο διαδεδομένη μέθοδο σύνθεσης CNTs, κατά την οποία ένας επιλεγμένος υδρογονάνθρακας σε αέρια μορφή αποσυντίθεται καταλυτικά παρουσία επιλεγμένου μεταλλικού καταλύτη.

Σε σχέση με τις προηγούμενες δύο μεθόδους σύνθεσης CNTs (ηλεκτρική εκκένωση τόξου, εξάχνωση με laser) η CVD είναι πιο απλή και πιο οικονομική τεχνική που λειτουργεί σε χαμηλότερες θερμοκρασίες και πιέσεις προσφέροντας καλύτερο έλεγχο των πειραματικών παραμέτρων. Επιπλέον επιτρέπει την χρήση πλήθους διαφορετικών ειδών αερίων σε διαφορετικές καταστάσεις (στερεά, υγρά ή αέρια) επιτρέποντας την χρήση διαφορετικών υποστρωμάτων, τα οποία με την σειρά τους καθιστούν δυνατή την ανάπτυξη CNTs σε ένα εύρος μορφών (σκόνη, λεπτά υμένα, προσανατολισμένοι CNTs, διακλαδισμένα δίκτυα CNTs, ευθείς CNTs, CNTs με την μορφή σπείρων). Η CVD χρησιμοποιείται για την ανάπτυξη νηματιδίων άνθρακα από το 1959 και παρέχει την δυνατότητα να ελεγχθούν και να προσαρμοσθούν πολλαπλές δομικές παράμετροι των συντιθέμενων CNTs όπως η διάμετρος, το μήκος και η διεύθυνση τους.

Γενικά η διαδικασία ανάπτυξης των CNTs περιλαμβάνει την διέλευση ατμών υδρογονανθράκων (τυπικά για 15-60 min) διαμέσου ενός σωληνοειδούς φούρνου παρουσία καταλύτη σε αρκετά υψηλή θερμοκρασία (600-1200°C) ώστε οι υδρογονάνθρακες να αποσυντεθούν καταλυτικά (Εικόνα 1.3). Οι

CNTs αναπτύσσονται πάνω στον καταλύτη μέσα στον αντιδραστήρα και συλλέγονται μετά την ψύξη του συστήματος σε θερμοκρασία δωματίου. Στην περίπτωση που η πηγή άνθρακα βρίσκεται σε υγρή κατάσταση (π.χ. βενζόλιο, αλκοόλη) το υγρό προ-θερμαίνεται και διοχετεύεται στον φούρνο με την βοήθεια κάποιου αδρανούς αερίου. Όταν η πηγή άνθρακα βρίσκεται σε στερεά κατάσταση (π.χ. ναφθαλίνη) η εξάχνωση της είναι δυνατόν να επιτευχθεί σε ένα δευτερεύοντα φούρνο σε χαμηλότερη θερμοκρασία πριν την διοχέτευση του στο κυρίως φούρνο. Ο *καταλύτης* μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε οποιαδήποτε μορφή (στερεή, υγρή, αέρια) και μπορεί είτε να είναι εξ αρχής κατάλληλα τοποθετημένος στο εσωτερικό του αντιδραστήρα είτε να διοχετευθεί σε αυτόν κατά την διάρκεια της αντίδρασης. Η πυρόλυση των ατμών καταλύτη στην κατάλληλη θερμοκρασία απελευθερώνει μεταλλικά σωματίδια *in situ*. Εναλλακτικά ο καταλύτης ακινητοποιημένος σε κατάλληλο υπόστρωμα τοποθετείται εντός του φούρνου και θερμαίνεται μέχρι την επιθυμητή θερμοκρασία ώστε να καταλύσει την ανάπτυξη των CNTs.

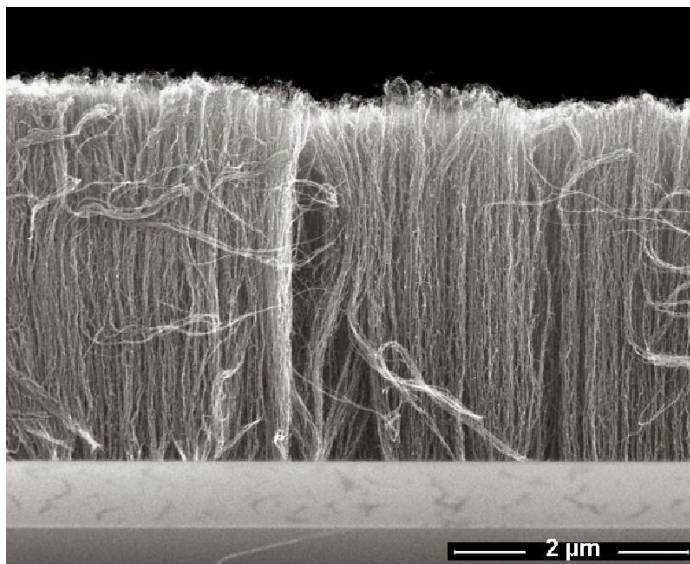


Εικόνα 1.3 : Σχηματική αναπαράσταση της παρασκευής CNTs με τη μέθοδο CVD. Όπου I_1 - I_6 συμβολίζονται οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ των διαφόρων παραγόντων. [1]

Οι τρεις κύριες παράμετροι που επηρεάζουν την ανάπτυξη των CNTs με την μέθοδο CVD είναι το είδος του υδρογονάνθρακα, ο καταλύτης και η θερμοκρασία πυρόλυσης. Χαμηλές θερμοκρασίες CVD (600-900°C) καταλήγουν στον σχηματισμό MWCNTs ενώ υψηλότερες θερμοκρασίες (900-1200°C) ευνοούν την ανάπτυξη SWCNTs. Αυτό υποδεικνύει ότι οι SWCNTs έχουν υψηλότερη ενέργεια σχηματισμού πιθανότατα λόγω της μικρότερης διαμέτρου τους που οδηγεί σε υψηλότερη καμπυλότητα και υψηλή ενέργεια παραμόρφωσης. Επίσης σε γενικές γραμμές όταν το μέγεθος των σωματιδίων του καταλύτη είναι μερικά nm τότε ευνοείται η ανάπτυξη SWCNTs ενώ όταν τα σωματίδια είναι μερικές δεκάδες nm τότε ευνοείται η ανάπτυξη MWCNTs.^[13]

- *Μετατροπή Μονοξειδίου του Άνθρακα υπό Υψηλή Πίεση (High- Pressure CO Conversion)*

Η μέθοδος HiPCO δίνει τη δυνατότητα παραγωγής μεγάλων ποσοτήτων νανοσωλήνων κάτι που την καθιστά εν δυνάμει ικανή για τη μαζική παραγωγή απλού τοιχώματος σωλήνων. Οι καταλύτες που χρησιμοποιούνται κατά την εφαρμογή της μεθόδου για την παραγωγή απλού τοιχώματος νανοσωλήνων σχηματίζονται *in situ* από τη θερμική αποικοδόμηση του πεντακαρβονυλικού ιόντος υπό θερμή ροή μονοξειδίου του άνθρακα, σε πίεση 10 - 1 atm και θερμοκρασία 1200 - 800°C. Οι μέθοδοι που χρησιμοποιούν υδρογονάνθρακες ως πηγή άνθρακα οδηγούν αναπόφευκτα στον ανεπιθύμητο σχηματισμό άμορφου άνθρακα και γραφίτη, λόγω της θερμικής διάσπασης των παραπάνω σε υψηλές θερμοκρασίες. Έτσι απαιτείται ένα στάδιο καθαρισμού για την απομάκρυνση του άμορφου άνθρακα. Η μέθοδος HiPCO χρησιμοποιεί CO ως πηγή άνθρακα και 5 Fe(CO) ως πρόδρομο καταλύτη. Η ποσότητα των νανοσωλήνων απλού τοιχώματος που παράγεται καθώς και η διάμετρός τους διαφέρει ανάλογα με τις συνθήκες και την γεωμετρία της συσκευής. Η διαδικασία για την παραγωγή των νανοσωλήνων περιλαμβάνει τη θερμική αποικοδόμηση του 5 Fe(CO) που οδηγεί σε συσσωματώματα σιδήρου στην αέριο φάση. Τα συσσωματώματα που δημιουργούνται δρουν ως πυρήνες όπου αναπτύσσονται οι νανοσωλήνες. Ο στερεός άνθρακας προέρχεται από την αντίδραση δύο μορίων μονοξειδίου προς



Εικόνα 1.4 : Εικόνα SEM κατακόρυφα ευθυγραμμισμένων CNTs που παρήχθησαν με τη μέθοδο CVD[18]

διοξείδιο και άνθρακα (αντίδραση Boudouard). Η αντίδραση λαμβάνει χώρα καταλυτικά στην επιφάνεια των σωματιδίων σιδήρου τα οποία προάγουν

το σχηματισμό των νανοσωλήνων. Ο σωλήνας quartz όπου ρέουν τα αντιδρώντα αέρια έχει παχύ τοίχωμα και βρίσκεται μέσα σε φούρνο. Ο βαθμός στον οποίο τα αντιδρώντα αέρια θερμαίνονται καθορίζει το ποσό και την ποιότητα των νανοσωλήνων που παράγονται. Αρχικά, τα αέρια CO και Fe(CO)₅ διατηρούνται σε χαμηλές θερμοκρασίες με χρήση νερού ως ψυκτικό. Έτσι συντελείται ταχεία θέρμανση μέσα στο φούρνο, που οδηγεί στην παραγωγή μεγάλων ποσοτήτων απλού τοιχώματος νανοσωλήνων.^[22]

1.3.2 Έλεγχος της μορφής και των ιδιοτήτων των CNTs

Η ταυτοποίηση της δομής των νανοσωλήνων άνθρακα είναι αναγκαία προϋπόθεση για την θεμελιώδη έρευνα τους και την πρόοδο στον τομέα των πολλά υποσχόμενων εφαρμογών τους. Αν και τεράστια πρόοδος έχει γίνει στην *ελεγχόμενη σύνθεση μέσω της μεθόδου CVD*, δεν έχει ακόμα βρεθεί η ακριβής και κατάλληλη προσέγγιση για την εξακρίβωση της χειρομορφίας των νανοσωλήνων άνθρακα, καταρχάς λόγω του μεγέθους τους που βρίσκεται στη νανοκλίμακα αλλά και της ποικιλίας των δομών τους.^[13]

Λόγω του ότι, οι ιδιότητες των SWCNTs είναι άμεσα εξαρτώμενες από τη δομή τους, η σύνθεση των SWCNTs με ελεγχόμενες δομές, ειδικά απευθείας στις επιφάνειες που μας ενδιαφέρουν, είναι ένας τομέας υψηλού ενδιαφέροντος, ειδικά όταν πρόκειται για την παραγωγή νανοηλεκτρονικών συσκευών. Τα τελευταία 10 χρόνια τεράστιες επιτυχίες έχουν σημειωθεί στον συγκεκριμένο τομέα. Η CVD είναι η

πλέον υποσχόμενη και ελεγχόμενη προσέγγιση στην σύνθεση των SWCNTs, και ευρύτερα των SWNTs, πάνω σε επιφάνειες.

Οι δομές των SWCNTs που παράγονται με CVD, επηρεάζονται από πολλούς παράγοντες, μεταξύ των οποίων τα νανοσωματίδια του **καταλύτη**, συμπεριλαμβανομένων των μεταλλικών και μη μεταλλικών, τα οποία έχουν αποδειχτεί να παίζουν ενεργό ρόλο στην ανάπτυξη των SWCNTs και αρκετών διαφορετικών μηχανισμών καταλυτών. Ακόμα, ανάλογα με την αλληλεπίδραση μεταξύ καταλύτη και επιφάνειας – δοκιμίου πάνω στην οποία γίνεται η ανάπτυξη, οι νανοσωλήνες υιοθετούν δύο τρόπους ανάπτυξης, tip και base, όπως έχει αποδειχθεί από in situ παρατηρήσεις με χρήση TEM.^[1]

Η κατεύθυνση των SWCNTs κατά την διάρκεια της ανάπτυξης τους μπορεί να ελεγχθεί μέσω της ροής αερίου, των επιφανειακών αλληλεπιδράσεων, ή με χρήση εξωτερικών πεδίων, τα οποία μπορεί να χρησιμοποιηθούν για την παρασκευή οριζόντια διευθετημένων SWCNTs. Σύμφωνα με τους Chen et al.^[1], υπό τις βέλτιστες συνθήκες εφαρμογής της CVD, οι SWCNTs αναπτύσσονται με μεγάλο ρυθμό, μέχρι και 5 mm/min, διευκολύνοντας της παρασκευή υπερμικρών νανοσωλήνων. Η ανάπτυξη των νανοσωλήνων μπορεί να οριοθετηθεί και να περιοριστεί με την χρήση νανοφραγμάτων, τα οποία ενσωματώνονται στην μέθοδο CVD.

Ο έλεγχος της διαμέτρου των SWCNTs εξαρτάται κατά πολύ από τους χρησιμοποιούμενους καταλύτες. Επιλέγοντας καταλύτες συγκεκριμένου μεγέθους, τα SWCNTs με διαμέτρους εντός ενός μικρού εύρους τιμών, μπορούν επιλεκτικά να αυξηθούν. Για συγκεκριμένα νανοσωματίδια, η θερμοκρασία αποτελεί ακόμα ένα πιθανό παράγοντα που επηρεάζει την διάμετρο των SWCNTs. Η παροχή αερίου φαίνεται επίσης να επηρεάζει την διάμετρο των παραγομένων SWCNTs.

Ωστόσο η μεταβλητή που είναι δύσκολο να ελεγχθεί κατά την παραγωγή των νανοσωλήνων, είναι η χειρομορφία τους, η οποία φαίνεται πιθανόν να καθοριστεί μόνο με την χρήση κατάλληλων καταλυτών. Ο έλεγχος της χειρομορφίας αποτελεί μια πρόκληση για τη σύγχρονη έρευνα αλλά αν επιτευχθεί ικανοποιητικά θα αλλάξει ριζικά τον τρόπο παραγωγής των SWCNTs και θα διευρύνει το πεδίο εφαρμογών τους εισάγοντας καινοτόμες εφαρμογές.

1.4 Εφαρμογές

Το 41% των διπλωμάτων ευρεσιτεχνίας που έχουν δοθεί σε εφευρέσεις πάνω στη νανοτεχνολογία αφορούν στη σύνθεση και στην επεξεργασία των νανοσωλήνων άνθρακα, ενώ παρατηρείται πως ως προς τις εφαρμογές τους χρησιμοποιούνται κυρίως σε ηλεκτρονικά μικροσκόπια και οθόνες (25%), ως σύνθετα υλικών (9%), σε μπαταρίες και συσκευές αποθήκευσης ενέργειας (7%), σε αισθητήρες (3%), για αποθήκευση υδρογόνου (6%) και ένα ακόμα ποσοστό 3% σε πρόσθετες εφαρμογές στις οποίες πιθανότατα ανήκουν τα νανοϋλικά πληρώσεως, οι επιβραδυντές καύσης των πλαστικών κ.ά.

Τα νανοςύνθετα υλικά είναι υλικά ευρείας κλίμακας, τα οποία αποτελούνται από δύο ή περισσότερες συνιστώσες εκ των οποίων τουλάχιστον μία πρέπει να βρίσκεται σε διαστάσεις νανοκλίμακας. Για παράδειγμα, ένα πολυμερές που παίζει το ρόλο του μητρικού υλικού, όταν αναμιχθεί με ένα έγκλεισμα, που βρίσκεται σε νάνο-διάσταση, όπως νανοσωλήνες άνθρακα ή φουλλερένια, δημιουργεί ένα σύνθετο υλικό το οποίο χαρακτηρίζεται ως νανοςύνθετο. Τα νάνο-εγκλείσματα μπορεί να είναι σε μορφή **κόκκων, νανο-ινών, νανοσωλήνων** και **λεπτών επικαλυπτικών στρωμάτων**.^[13]

1.4.1 Βιομηχανία

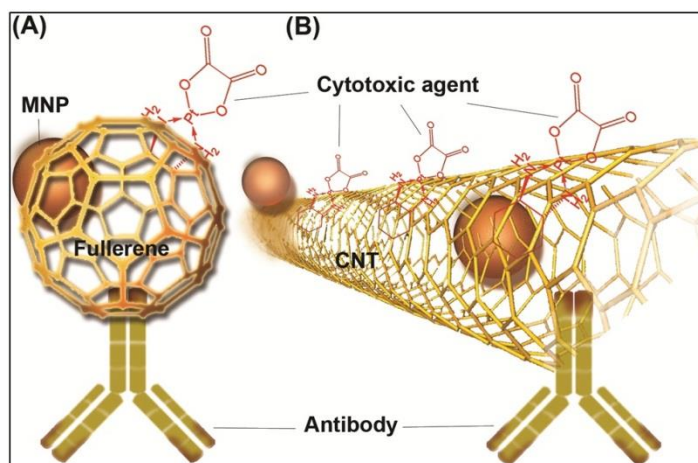
Οι νανοσωλήνες άνθρακα τα τελευταία χρόνια ενσωματώνονται ολοένα και περισσότερο στη βιομηχανική παραγωγή είτε ως ενισχυτικοί παράγοντες μηχανικών ιδιοτήτων είτε λόγω των λοιπών ξεχωριστών τους ιδιοτήτων (π.χ. ηλεκτρική αγωγιμότητα, ιδιότητα επιβράδυνσης καύσης). Πιο συγκεκριμένα οι νανοσωλήνες άνθρακα εφαρμόζονται:

- ✓ Στην αυτοκινητοβιομηχανία: το γεγονός ότι η προσθήκη νανοσωλήνων σε ένα υλικό το κάνει αγωγίμο βρίσκει εφαρμογή στη βιομηχανία αυτοκινήτων, όπου η παρουσία τους στα ελαστικά του μέρη, επιτρέπει ακόμα και την ηλεκτροστατική βαφή του.
- ✓ Στη βιομηχανία πλαστικών: Όπως γνωρίζουμε, χάρη στις εξαιρετικές μηχανικές τους ιδιότητες οι νανοσωλήνες άνθρακα βελτιώνουν αξιοσημείωτα την αντοχή των σύνθετων υλικών, μειώνοντας ταυτόχρονα το βάρος τους. Πρόσθετα σε πολυμερή όπως το πολυαιθυλένιο οδηγούν στην αύξηση του μέτρου ελαστικότητας του πολυμερούς κατά περίπου 30%

Εφαρμογές υπό έρευνα περιλαμβάνουν τα αλεξικέραυνα, την αποπάγωση και την στενή παρακολούθηση της δομής των αεροσκαφών.

1.4.2 Ιατρική

Αν και ακόμα δεν έχει αποσαφηνιστεί πλήρως η τοξικότητα ή μη των νανοσωλήνων άνθρακα, εντούτοις ήδη χρησιμοποιούνται σε ορισμένους τομείς της ιατρικής, όπως στη θεραπεία του καρκίνου. Ένα από τα μακροχρόνια υφιστάμενα προβλήματα στην ιατρική είναι η θεραπεία του καρκίνου χωρίς να καταστραφεί ο υγιής ιστός του σώματος. Η καθιερωμένη χημειοθεραπεία καταστρέφει τα καρκινικά κύτταρα αλλά και τα υγιή κύτταρα. Πρόσφατα, μικροσκοπικοί νανοσωλήνες από άνθρακα εμφυτεύτηκαν σε καρκινικά κύτταρα και όταν αυτοί εκτεθούν σε ακτινοβολία στο εγγύς υπέρυθρο – από ένα λέιζερ – τότε θερμαίνονται, φονεύουν το καρκινικό κύτταρο, ενώ τα υγιή κύτταρα χωρίς νανοσωλήνες παραμένουν αβλαβή.^[5]



Εικόνα 1.5 : Παράδειγμα τροποποιημένων φουλλερενίων και CNTs για χρήση ως φέροντα μόρια στην καταπολέμηση του καρκίνου. [17]

Ερευνητές από το Πανεπιστήμιο Rice έχουν δείξει ότι η χρήση μικρού βάρους % νανοσωλήνων άνθρακα μπορεί να οδηγήσει σε σημαντικές βελτιώσεις στις μηχανικές ιδιότητες σε βιοδιασπώμενα πολυμερή νανουσύνθετες εφαρμογές στην μηχανική οστικών ιστών.^[15]

Τα CNTs επιδεικνύουν χημική συμβατότητα αλλά και συμβατότητα διαστάσεων με τα βιομόριο, όπως το DNA και οι πρωτεΐνες. Προϊόντα υπό ανάπτυξη περιλαμβάνουν τις τυπωμένες λωρίδες για την ανίχνευση των οιστρογόνων και προγεστερόνης, μικροσυστοιχίες για το DNA και την ανίχνευση πρωτεϊνών και αισθητήρες NO₂ καρδιακής προτροπίνης.^[15]

1.4.3 Τρανζίστορ/ Ηλεκτρονικές εφαρμογές

Λόγω των εξαιρετικών τους ιδιοτήτων, οι νανοσωλήνες μελετώνται με σκοπό την χρήση τους σε ποικίλες εφαρμογές όπως σε οθόνες εκπομπής πεδίου (Field Emission Displays - FEDs). Οι ιδιαίτερες ιδιότητες των νανοσωλήνων άνθρακα τους καθιστούν πιθανούς υποψήφιους για την επόμενη γενιά συσκευών εκπομπής. Οι οθόνες εκπομπής πεδίου βασίζονται στη δημιουργία ισχυρού ηλεκτρικού πεδίου για την παραγωγή ηλεκτρονίων. Η αποδοτικότητα της συσκευής εξαρτάται ευθέως από την ισχύ του πεδίου και αντιστρόφως από τη διάμετρο του «καλωδίου», με αποτέλεσμα οι νανοσωλήνες να αποτελούν ελκυστική επιλογή.^[3]

Πρόσφατα, αρκετές μελέτες έχουν υπογραμμίσει την προοπτική της χρήσης των νανοσωλήνων άνθρακα ως δομικά στοιχεία, για την παραγωγή τρισδιάστατων μακροσκοπικών συσκευών εξ'ολοκλήρου από άνθρακα (<1mm σε όλες τις διαστάσεις). Οι Lalwani et al^[16], έχουν αναφέρει μία νέα, πρωτοποριακή μέθοδο θερμικής διαδικτύωσης για την παραγωγή μακροσκοπικών δομικών στοιχείων, επιδαπέδιων, πορωδών κριωμάτων, με τη χρήση νανοσωλήνων άνθρακα μονών και πολλαπλών τοιχωμάτων. Αυτά τα δομικά στοιχεία περιέχουν macro-, micro-, & nano πορώδεις δομές και που μπορούν να προσαρμοστούν σε συγκεκριμένες εφαρμογές. Όπως για την παραγωγή, αποθήκευση ενέργειας της επόμενης γενιάς, υπερπυκνωτές, τρανζίστορ εκπομπής πεδίου, υψηλής απόδοσης καταλύτες, φωτοβολταϊκά και Βιοιατρικές συσκευές και εμφυτεύματα.

Οι νανοσωλήνες άνθρακα μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την κατασκευή μοριακών τρανζίστορ επίδρασης πεδίου (field-effect transistors -FETs) και αλλά και μονοηλεκτρονικών transistors (single electron transistors), αντίστοιχα. Μια άλλη ενδιαφέρουσα εφαρμογή είναι η χρήση νανοσωλήνων άνθρακα για αποθήκευση υδρογόνου. Οι νανοσωλήνες έχουν τη δυνατότητα γρήγορης απορρόφησης ποσοτήτων υδρογόνου υψηλής πυκνότητας σε θερμοκρασία δωματίου και ατμοσφαιρική πίεση. Έχει αναφερθεί πως οι μονού τοιχώματος νανοσωλήνες έχουν την δυνατότητα αποθήκευσης υδρογόνου σε πυκνότητα μεγαλύτερη από 363kg/m. Μπορούν ακόμα να χρησιμοποιηθούν και ως αισθητήρες αερίων λόγω της ευμεταβλητότητας της ηλεκτρικής αντίστασης των ημιαγωγικών νανοσωλήνων απλού τοιχώματος όταν εκτίθενται σε αέρια.^[3] Πρόσφατα οι νανοσωλήνες άνθρακα έχουν χρησιμοποιηθεί ως ακίδα στη μικροσκοπία σάρωσης.^[4]

1.4.4 Αεροδιαστημική και καινοτομίες

Αδιαμφισβήτητα, η πιο πρωτοποριακή χρήση των μηχανικών ιδιοτήτων των νανοσωλήνων άνθρακα είναι στις **διαστημικές εφαρμογές**. Ήδη οι νανοσωλήνες άνθρακα χρησιμοποιούνται από τη NASA σε διαστημικά οχήματα προκειμένου και πάλι να βελτιωθεί η αντοχή τους με ταυτόχρονη ελάττωση του βάρους τους, ενώ έχει προγραμματιστεί η χρήση τους για την κατασκευή του ανελκυστήρα του διαστήματος, μοντέλο του οποίου φαίνεται στην Εικόνα 1.6.^[5]

Σύμφωνα με τους Gohardani et al. (2014)^[19], οι εξαιρετικές ιδιότητες των CNTs τα καθιστούν απολύτως κατάλληλα για χρήσεις σε αεροσκάφη και προηγμένες αεροδιαστημικές εφαρμογές.

Περίληπτικά οι εφαρμογές αυτές περιλαμβάνουν:

- Σε εμπορικά και στρατιωτικά αεροσκάφη, όπου είναι απαραίτητη η χρήση ελαφρών υλικών χωρίς όμως να θυσιάζεται η αντοχή και η δομική τους ακεραιότητα. Ιδιαίτερα σημαντική εφαρμογή βρίσκουν στην κατασκευή συστημάτων πρόωσης αεροσκαφών.
- Στις καλωδιώσεις αεροσκαφών αντικαθιστώντας τον σημαντικά βαρύτερο χαλκό.
- Σε αλεξικέραυνα για επιβατηγά αεροσκάφη.
- Σε σένσορες ιδιαίτερα για εφαρμογές σε διαστημικά ταξίδια. Η χρήση των CNTs ως σένσορες και αισθητήρες είναι μια από τις πιο υποσχόμενες εφαρμογές τους. Ιδιαίτερα σε διαστημικά ταξίδια, είναι απαραίτητη η εύκολη μεταφορά δεδομένων και σημάτων εξ αποστάσεως και οι CNTs με τις εξαιρετικές τους ηλεκτρικές ιδιότητες “self-sensing” της μεταβολής ηλεκτρικής αντίστασης αποτελούν πολύ καλά υποψήφια υλικά.
- Ως ασπίδες ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας (EMI shielding) σε διαστημόπλοια και θόνες αεροσκαφών.



Εικόνα 1.6 : Μοντέλο της NASA για τον «ανελκυστήρα του διαστήματος» [19]

1.5 Βιβλιογραφία

- [1] Chen Y., Zhang Y., Hu Y., Kang L., Zhang S., Xie H., Liu D., Zhao Q., Li Q., Zhang J., State of the Art of Single-Walled Carbon Nanotube Synthesis on Surfaces, [www.advanced materials.com](http://www.advancedmaterials.com)
- [2] H. W. G. Wildoer, I.C. Venema, A.G. Rinzler *et al.*, *Nature* 391, 59 (1998)
- [3] N. Taniguchi, "On the Basic Concept of 'Nano-Technology - Part II'", British Society of Precision Engineering (1974)]
- [4] X. Zheng, M. J. O'Connell, S. K. Doorn, X. Z. Liao, Y. H. Zhao, E. A. Akhador, M. A. Hoffbauer, B. J. Roop, Q. X. Jia, R. C. Dye, D. E. Peterson, S. M. Huang, J. Liu & Y. T. ZhuL.
- [5] www.jimkava.com

- [6] Maletta, Michael, "The Development of a Progressive Failure Model of a Fiber-Reinforced Composite Lamina" (2008). Masters Theses. Paper 676
- [7](Xiao-Lin Xie, 2005)
- [8] , (Ana M. Diez-Pascual M. N.-D.-R, High performance PEEK/carbon nanotube composites compatibilized with polysulfones-II: Mechanical and electrical properties, 2010
- [9]V.N. Popov, Materials Science and Engineering R 43, 61, (2004)
- [10] Anna Moisala, 'Studies on synthesis of single-walled carbon nanotubes by gas phase chemical vapour deposition', Thesis, University of Helsinki, 2006
- [11]Mauro Giorcelli, 'Growth and characterization of carbon nanotubes by CVD system' PhD Thesis, Politecnico di Torino.
- [12]Jian Yang, 'Carbon nanotubes as reinforcements and interface modifiers in metal matrix composites' Thesis, Ecole Polytechnique Federale de lausanne, 2004.
- [13]Χαριτίδης Κ. Α., Νανοδομές και Νανοϋλικά: Σύνθεση, Ιδιότητες και Εφαρμογές. Εκδόσεις ΕΜΠ Αθήνα 2007
- [14] K. H. Liu , X. P. Hong , Q. Zhou , C. H. Jin , J. H. Li , W. W. Zhou , J. Liu , E. G. Wang , A. Zettl , F. Wang , Nat Nanotechnol 2013 , 8 , 917 .
- [15] <http://www.rice.edu/>
- [16] Lalwani, Henslee, Allan, Behzad, Lin, Liangjun; Kasper, Kurtis; Qin, Yi-Xian; Mikos, Antonios G., Sitharaman, Balaji, Two-dimensional nanostructure-reinforced biodegradable polymeric nanocomposites for bone tissue engineering". Biomacromolecules 14(2013) p.900–909
- [17] <http://bi.tbzmed.ac.ir/>
- [18] <http://www.ikts.fraunhofer.de/>
- [19]Gohardani O., Elola M.C., Elizetxea C., Potential and prospective implementation of carbon nanotubes on next generation aircraft and space vehicles, Prog. In Aero. Sc. 70 (2014) p.42-68
- [20] Mauro Giorcelli, 'Growth and characterization of carbon nanotubes by CVD system' PhD Thesis, Politecnico di Torino.
- [21]Jian Yang, 'Carbon nanotubes as reinforcements and interface modifiers in metal matrix composites' Thesis, Ecole Polytechnique Federale de lausanne, 2004.
- [22] Prasek J., Drbohlavova J., Chomoucka J., Hubalek J., Jasek O., Adamc V., Kizek R., Methods for carbon nanotubes synthesis—review , Mater. Chem., 2011, 21, 15872

2 Θεωρητικές και πειραματικές μελέτες που αφορούν νανοσύνθετα

2.1 Σύνθετα πολυμερικής μήτρας

Αμέσως μετά την καταγεγραμμένη ανακάλυψη των νανοσωλήνων άνθρακα το 1991 από τον Iijima ^[1] και την κατανόηση των μοναδικών φυσικών τους ιδιοτήτων, συμπεριλαμβανομένων των μηχανικών, θερμικών και ηλεκτρικών, πολλοί ερευνητές έχουν προσπαθήσει να παράγουν προηγμένα σύνθετα υλικά εμπλουτισμένα με CNTs που επιδεικνύουν μία ή περισσότερες από αυτές τις ιδιότητες.

Οι νανοσωλήνες άνθρακα κατέχουν μία από τις μεγαλύτερες γνωστές τιμές θερμικής αγωγιμότητας, γι' αυτό και η χρήση τους προτείνεται σε σύνθετα υλικά θερμικής διαχείρισης. Σύμφωνα με τους Rupesh et al ^[2], οι νανοσωλήνες άνθρακα αποτελούν ακόμα μηχανικά τέλειες ίνες με αντοχή θραύσης περί τα 200GPa, και μέτρο ελαστικότητας με μέση τιμή το 1TPa. Αυτό, σε συνδυασμό με την περίπου 500 φορές περισσότερη επιφάνεια ανά γραμμάριο σε σχέση με τις απλές ίνες άνθρακα και την αναλογία διαστάσεων ίση με περίπου 103, έχει δημιουργήσει μεγάλο ενδιαφέρον ως προς την χρήση των νανοσωλήνων άνθρακα ως μία ενισχυτική φάση των πολυμερικών μητρών. Αυξημένη ερευνητική δραστηριότητα διεξάγεται επίσης στον τομέα μελέτης της **διεπιφάνειας** μεταξύ των νανοσωλήνων και της περιβάλλουσας πολυμερικής μήτρας. Στην μικρο-μηχανική, οι τάσεις μεταφέρονται από την μήτρα στον νανοσωλήνα άνθρακα μέσω της συσσώρευσης διατμητικών τάσεων στη διεπαφή τους. Συχνά, οι ιδιότητες των συνθέτων αποδεικνύονται πειραματικά να είναι πολύ χαμηλότερες από ότι θα περίμενε κανείς θεωρητικά, γεγονός που συνήθως έγκειται στην έλλειψη διεπιφανειακής δέσμωσης μεταξύ μήτρας και ενίσχυσης. ^[2] Εάν κάποιος θεωρήσει την επιφάνεια του νανοσωλήνα άνθρακα ως ένα εκτεθειμένο φύλλο γραφένιου, δεν είναι παράξενο ότι η διεπιφανειακή αλληλεπίδραση είναι προβληματική. Ο λόγος είναι η ασθενής ενδοπλεγματική αλληλεπίδραση (inter-planar interaction) του γραφένιου, η οποία μεν που προσδίδει την λιπαντική του ιδιότητα αλλά επιφέρει και την αντίσταση στην δέσμωση με τη μήτρα. Το φαινόμενο αυτό επιβαρύνεται ακόμα περισσότερο από την χημικώς αδρανή δομή του γραφένιου.

Υπάρχουν πολλά παραδείγματα θεωρητικών και πειραματικών μελετών που αφορούν νανοσύνθετα πολυμερικής μήτρας. Ένα παράδειγμα αποτελεί το αγωγίμο φίλτρο των πολυμερών με ενίσχυση CNTs οι οποίοι αποδεικνύονται αρκετά αποτελεσματικοί συγκρινόμενοι με τα παραδοσιακά μικροσωματίδια μαύρου άνθρακα, πρωταρχικά λόγω της υψηλής τους αναλογίας διαστάσεων.^[4] Άλλες μελέτες αναφέρονται αμέσως παρακάτω:

- ♦ Οι Seo et al ^[5], μελέτησαν την επιρροή της περιεκτικότητας σε νανοσωλήνες άνθρακα στις ηλεκτρικές και ρεολογικές ιδιότητες του ενισχυμένου πολυπροπυλενίου (PP). Παρατήρησαν ότι

η ένταση αντίστασης (volume resistivity) του σύνθετου υλικού μειώθηκε αυξάνομένης της περιεκτικότητας σε CNTs. Το ιζώδες των συνθέτων αυξήθηκε με την προσθήκη μεγαλύτερου ποσοστού νανοσωλήνων άνθρακα, και συνοδεύτηκε με αύξηση των ιδιοτήτων της ελαστικής τήξης. Το φαινόμενο αυτό επεξηγείται μέσω της υψηλής αναλογία διαστάσεων των νανοσωλήνων άνθρακα.

- ♦ Οι Emilie et al.^[3] ανακάλυψαν ότι το μέτρο εφελκυσμού και το όριο διαροής αυξήθηκαν με την προσθήκη φορτίου SWNTs σε σύνθετο πολυιμίδιο. Η αύξηση αυτή ήταν πολύ μικρότερη σε δείγματα μορφής φιλμ (χωρίς προσανατολισμένα SWCNTs). Αυτό το χαμηλό επίπεδο βελτίωσης προέκυψε λόγω της ανεπαρκούς και ατελούς διασποράς των SWCNTs στην πολυμερική μήτρα. Με τη βελτίωση της διασποράς, αναμένεται σημαντική ενίσχυση των αποτελεσμάτων των μηχανικών ιδιοτήτων των ευθυγραμμισμένων ινών.
- ♦ Οι Zou et al.^[6], έδειξαν ότι για την διασπορά MWCNTs σε μία πολυμερική μήτρα μέσω εκβολής κοχλίας, υπάρχει μία κρίσιμη συγκέντρωση MWCNTs ίση με 1,0 wt% όπου ένα λεπτό δίκτυο πληρωτικού υλικού σχηματίζεται. Για το λόγο αυτό τα σύνθετα υλικά κατέχουν βελτιωμένες μηχανικές ιδιότητες.
- ♦ Οι Shuying et al.^[7] Έδειξαν μέσω ανάλυσης DSC, ότι η εισαγωγή των SWCNTs αυξάνει θερμοκρασία υαλώδους μετάπτωσης των συνθέτων και η χαμηλή συσώρευση των SWNT δρα ως παράγοντας πυρηνοποίησης στην κρυσταλλοποίηση του ABS, καθώς παρατηρήθηκαν μικρές κορυφές τήξης στα 0,5wt% και 1wt% SWCNTs.

2.2 Σύνθετα κεραμικής μήτρας

Αρκετά πειράματα έχουν πρόσφατα επιβεβαιώσει τις θεωρητικά προβλεπόμενες εξαιρετικές μηχανικές ιδιότητες των νανοσωλήνων άνθρακα. Συνεπώς, οι νανοσωλήνες άνθρακα φαίνεται να αποτελούν δυναμικά ελκυστικά υλικά ως βελτιωτικά στοιχεία στην σύνθετη κεραμική μήτρα.

Μαζικά σύνθετα υλικά κεραμικής μήτρας έχουν προετοιμαστεί μέσω θερμικής συμπίεσης. Παρατηρήσεις δείχνουν ότι οι δέσμες CNT παραμένουν παρούσες στα σύνθετα υλικά, αλλά σε μικρότερη ποσότητα από ότι στην αρχική σκόνη. Η βελτίωση στην μικροδομή των συνθέτων υλικών, η αλλαγή στην φύση της μήτρας και οι προσπάθειες ευθυγράμμισης των CNT είναι τομεία υπό εξέλιξη.

Τα σύνθετα υλικά CNT Ceramics, γίνονται ελκυστικά υλικά, όχι μόνο για τις ενισχυμένες μηχανικές τους ιδιότητες, αλλά και για την πιθανότητα διαμόρφωσης της ηλεκτρικής αγωγιμότητάς τους μέσω του περιεχομένου σε νανοσωλήνες άνθρακα.^[8]

2.3 Σύνθετα μεταλλικής μήτρας

Η χρήση των CNTs σε μεταλλικές μήτρες παρεμποδίζεται σε μεγάλο βαθμό από την κακή τους διασπορά, καθώς λόγω της μεγάλης ειδικής τους επιφάνειας και των ισχυρών διαμοριακών αλληλεπιδράσεων Van der Waals που αναπτύσσονται μεταξύ τους τείνουν να συσσωματώνονται. Σύμφωνα με αρκετές μελέτες, για την αποφυγή του φαινομένου αυτού, οι CNTs πριν την ενσωμάτωση τους στις εκάστοτε μεταλλικές μήτρες διασκορπίζονται πρώτα (με ή χωρίς την σκόνη της εκάστοτε μεταλλικής μήτρας) σε διαλύματα αιθανόλης ή αλκοόλης με την χρήση υπερήχων έτσι ώστε να ελαχιστοποιηθεί η συσσωμάτωση τους [9].

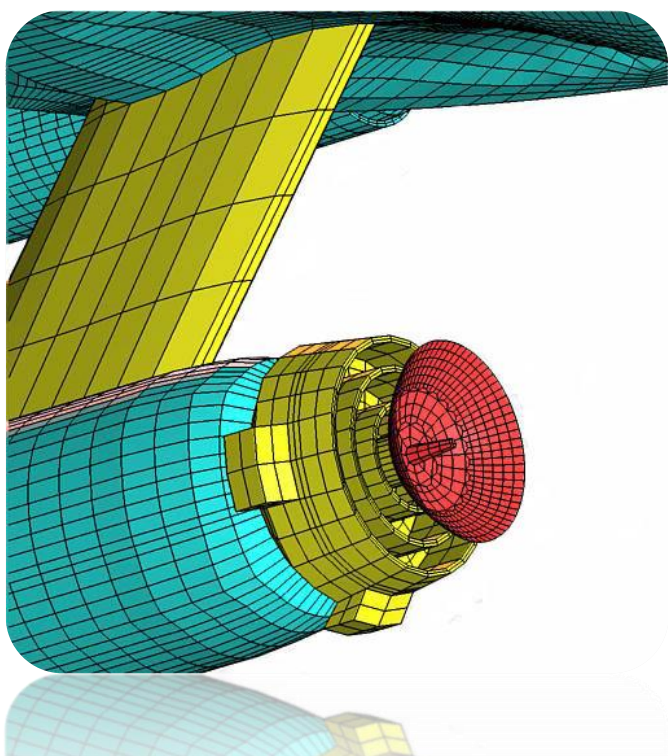
Ακόμα τη βιβλιογραφία γίνεται εκτενής αναφορά στη λειτουργικοποίηση (ή τροποποίηση) των CNTs με οξύ πριν την εισαγωγή τους σε μεταλλικές μήτρες. Οι πιο κοινές μήτρες που περιέχουν CNTs είναι οι μήτρες αλουμινίου και κράματα χάλυβα.

2.4 Βιβλιογραφία

- [1] Iijima S., Helical microtubes of graphitics carbon, *Nature (London)* 354 (1991) 56
- [2] Rupesh K., Suryasarathi B., Carbon nanotubes based composites : A review, *Journal of Min. & Mat. Charact. & Engin.* 4 (2005), p.31-46
- [3] Emilie J. Siochia, Dennis C. Working, Cheol Park, Peter T. Lilleheia, Jason H. Rouse, Crystal C. Topping, Arup R. Bhattacharyya, Satish Kumar, *Composites: Part B* **35** (2004) 439
- [4] J.K.W.Sandler, J.E.Kirk, I.A.Kinloch, M.S.P.Sha, A.H.Windle, *Polymer* **44** (2003) 5893
- [5] Min-Kang Seo, Soo-Jin Park, *Chemical Physics Letters* **395** (2004) 44.
- [6] Yaobang Zou, Yongcheng Feng, Lu Wang, Xiaobo Liu, *Carbon* **42** (2004) 271
- [7] Shuying Yang, Jose Rafael Castilleja, E.V. Barrerab, Karen Lozanoa, *Polymer Degradation and Stability* 83 (2004) 383.
- [8] L. Y. Jiao , B. Fan , X. J. Xian , Z. Y. Wu , J. Zhang , Z. F. Liu , *J. Am. Chem. Soc.* **2008** , 130 , 12612
- [9] Chunfeng Deng, XueXi Zhang, Dezun Wang, Qiang Lin, Aibin Li, “Preparation and characterization of carbon nanotubes/aluminum matrix composites” *Materials Letters* 61 (2007) 1725–1728
- [10]C.F. Deng, D.Z. Wang, X.X. Zhang, A.B. Li “Processing and properties of carbon nanotubes reinforced aluminum composites” *Materials Science and Engineering A* 444 (2007) 138–145

3 Μοντελοποίηση CNTs με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων

3.1 Εισαγωγή στη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων



Εικόνα 3.1 : Παράδειγμα διακριτοποίησης και εφαρμογής πλέγματος σε πολύπλοκη κατασκευή [13]

Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων (Finite Element Method ή FEM) αποτελεί ένα ισχυρό εργαλείο στη μελέτη των κατασκευών και βρίσκει μεγάλο αριθμό εφαρμογών. Μόλις το 1909 ο Γερμανός μαθηματικός Ritz ανέπτυξε τις αρχές της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων, η οποία αργότερα εμπλουτίστηκε από τους Galerkin και Hrenikoff.^[12] Στο πεδίο της ανάλυσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί όχι μόνο στο (συμβατικό) ελαστικό πεδίο (θεωρία μικρών μετατοπίσεων) αλλά και για μη γραμμικά προβλήματα, λυγισμό, δυναμική συμπεριφορά κ.ά. Η μέθοδος χρησιμοποιείται γενικότερα σε προβλήματα που επιδέχονται μεταβολική διατύπωση στην μηχανική των συνεχών μέσων. Η αρχική διατύπωση της μεθόδου έγινε με βάση την μητρική ανάλυση, αργότερα όμως δόθηκε ευρύτερη και πιο θεμελιώδης θεωρητική βάση. Το χαρακτηριστικό της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων είναι η χρήση διδιάστατων και τρισδιάστατων στοιχείων για την προσομοίωση συνεχών μέσων. Τα πρώτα πεπερασμένα στοιχεία χρησιμοποιήθηκαν σε προβλήματα επίπεδης εντατικής κατάστασης, αργότερα όμως διατυπώθηκαν

στοιχεία και για τρισδιάστατα στερεά, ελάσματα υπό κάμψη, παχιά κελύφη, και άλλες μορφές κατασκευών. Μετά την καθιέρωσή τους στη γραμμική ελαστική περιοχή εφαρμόστηκαν και σε δυσκολότερα προβλήματα όπως η δυναμική συμπεριφορά, ο λυγισμός και η μη γραμμική απόκριση και συμπεριφορά του υλικού. Για να επιλυθούν δε προβλήματα με μη γραμμική συμπεριφορά του υλικού απαιτείται επαναληπτική διαδικασία.^[11] Η βασική έννοια της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων είναι, όπως και στη μητρική ανάλυση, η δυνατότητα προσομοίωσης της πραγματικής κατασκευής με συστατικά στοιχεία τα οποία συνδέονται σε ένα πεπερασμένο αριθμό κόμβων. Η μεθοδολογία αυτή αποτελεί φυσιολογική προσομοίωση των πλαισίων, καθώς αυτά αποτελούνται από

δοκούς που είναι συνδεδεμένες στα άκρα τους. Σε μία συνεχή όμως κατασκευή δεν υπάρχουν φυσικοί διαχωρισμοί και συνεπώς απαιτείται να γίνει τεχνητός διαχωρισμός σε στοιχεία, τα οποία να συνδέονται κατά μήκος των άκρων (πλευρών) τους. Τα τεχνητά αυτά στοιχεία, ή πεπερασμένα στοιχεία είναι συνήθως τετράπλευρα ή τριγωνικά και οι κόμβοι συνήθως βρίσκονται στα άκρα. Για να γίνει χρήση μητρωικών μεθόδων απαιτείται να προσομοιωθεί η συνεχής κατασκευή με ένα πεπερασμένο αριθμό διακριτών μεταβλητών. Οι μεταβλητές αυτές είναι οι μετατοπίσεις των κόμβων και σε ορισμένες περιπτώσεις και οι παράγωγοί τους. Εάν περιλαμβάνονται και οι παράγωγοι γίνεται λόγος για βαθμούς ελευθερίας αντί για μετατοπίσεις κόμβων. Οι μετατοπίσεις στο εσωτερικό των στοιχείων πρέπει να είναι συμβατές με τις μετατοπίσεις των κόμβων και όλες οι αλληλεπιδράσεις των στοιχείων εκφράζονται σε σχέση με τις κομβικές μετατοπίσεις. Με αυτό τον τρόπο οι μόνοι άγνωστοι είναι οι μετατοπίσεις στους κόμβους και το πρόβλημα μετατρέπεται από συνεχές σε διακριτό. Παρ' όλο που μπορεί να υπάρχει μεγάλος αριθμός κομβικών μετατοπίσεων ο αριθμός τους είναι πεπερασμένος. Το πρόβλημα εκφράζεται τότε ως ένα σύνολο (σύστημα) γραμμικών εξισώσεων οι οποίες επιλύονται με αριθμητικές μεθόδους. Συνοψίζοντας η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων έχει τα εξής χαρακτηριστικά:^[10]

- ♦ Η ακρίβεια της μεθόδου αυξάνεται όταν αυξάνεται ο αριθμός των στοιχείων, ή καλύτερα, των κόμβων. Όσο αυξάνεται όμως ο αριθμός των στοιχείων, τόσο αυξάνονται ο χρόνος υπολογισμού και το κόστος.
- ♦ Έχει την ικανότητα να αντιμετωπίζει ικανοποιητικά προβλήματα με περίπλοκα γεωμετρικά χαρακτηριστικά μέσω της δυνατότητας χρησιμοποίησης μη δομημένων υπολογιστικών πλεγμάτων (meshes)
- ♦ Τα μη δομημένα πλέγματα επιτρέπουν τοπική πυκνωση (ή αραιώση) της πυκνότητας τους, με βάση διάφορα κριτήρια.



Τα στάδια χρήσης της μεθόδου περιληπτικά είναι τα εξής:^[10]

Εικόνα 3.2 : Παράδειγμα διακριτοποίησης και εφαρμογής πλέγματος σε πολύπλοκη κατασκευή [13]

- ♦ Διακριτοποίηση του χώρου με τη χρήση στοιχείων πεπερασμένου μεγέθους, τα οποία δεν επικαλύπτονται, αλλά συνδέονται μεταξύ τους.
- ♦ Προσέγγιση του άγνωστου μεγέθους με τη χρήση απλών βασικών συναρτήσεων.
- ♦ Διατύπωση εξισώσεων για ένα οποιοδήποτε στοιχείο.
- ♦ Διαδικασία σύνδεσης όλων των στοιχείων του υπολογιστικού χώρου, η οποία οδηγεί στη δημιουργία του συστήματος εξισώσεων.
- ♦ Επίλυση του συστήματος εξισώσεων που προκύπτει.

3.2 Θεωρητικές μέθοδοι ανάλυσης και μοντελοποίησης CNTs

Οι θεωρητικές προσεγγίσεις για τη μοντελοποίηση της μηχανικής συμπεριφοράς των νανοσωλήνων άνθρακα χωρίζονται γενικά σε 3 μεγάλες κατηγορίες: Την ατομιστική προσέγγιση (atomistic approach),

την προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης (continuum analysis) και την προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης στη νανοκλίμακα (nanoscale continuum approach).^[18]

3.2.1 Ατομιστική προσέγγιση

Σύμφωνα με τον ορισμό που δίνουν οι Rafiee et al (2013)^[1] στην ανάλυση τους, τα ατομιστικά μοντέλα προβλέπουν τη θέση των ατόμων με βάση δυνάμεις αλληλεπίδρασης και συνοριακές συνθήκες. Οι πληροφορίες αυτές είναι απαραίτητες για την επίλυση της κυματικής εξίσωσης Schrodinger και την ανάκτηση πληροφοριών χημικής φύσης για τα υλικά. Οι ατομιστικές τεχνικές μοντελοποίησης μπορούν να καταταχθούν σε τρεις κύριες κατηγορίες, τη **μοριακή δυναμική** (Molecular Dynamics ή MD), τη μέθοδο **Monte-Carlo** (MC) και τις προσεγγίσεις **ab initio**^[17].

Η ατομιστική προσέγγιση περιλαμβάνει ακόμα τεχνικές όπως η μέθοδος δυναμικού Morse, η μοριακή δυναμική ισχυρής σύναψης (tight-bonding molecular dynamics ή TBMD), η μέθοδος τοπικής πυκνότητας (local density ή LD), η θεωρία συναρτησιοειδούς πυκνότητας (density functional theory ή DFT) κ.α. Σε αυτή την κατηγορία προσεγγίσεων εφαρμόζεται και το μοντέλο δυναμικού Morse.

Τα μοντέλα που χρησιμοποιούν την προσέγγιση αυτή, είναι γενικά αξιόπιστα και προβλέπουν επιτυχώς τις μηχανικές ιδιότητες των CNTs, αρκεί όμως να μην πρόκειται για μεγάλο μεγέθους συστήματα. Στην περίπτωση μεγάλων, πολύπλοκων συστημάτων, η ατομιστική προσέγγιση αποδεικνύεται ιδιαίτερα χρονοβόρα καθώς περιέχει μεγάλο αριθμό ιδιαίτερα πολύπλοκων μαθηματικών υπολογισμών.

Η πρώτη καταγεγραμμένη τεχνική που χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση των CNTs ήταν αυτή της **μοριακής δυναμικής** (MD). Η μέθοδος MD χρησιμοποιεί ρεαλιστικά δυναμικά και πεδία ενέργειας για πλήθος σωμάτων ώστε να υπολογίσει την ολική ενέργεια του συστήματος σωματιδίων. Αφού επιτευχθεί ο υπολογισμός αυτός, μπορούν να πραγματοποιηθούν εξίσου ρεαλιστικοί υπολογισμοί για τη συμπεριφορά του συστήματος αλλά και για τις ιδιότητες των ατόμων ή μορίων που το αποτελούν. Οι μέθοδοι Monte Carlo και MD έχουν τα θεμέλιά τους στο δεύτερο νόμο του Newton, με την πρώτη να αποτελεί στοχαστική προσέγγιση και τη δεύτερη ντετερμινιστική.^[1] Η τεχνική ab initio από την άλλη είναι ακριβής και βασίζεται στην ακριβή επίλυση της εξίσωσης Schrödinger.^[17]

3.2.2 Προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης

Τα τελευταία χρόνια, οι ατομιστικές μέθοδοι τείνουν να αντικατασταθούν από τις μεθόδους συνεχούς ανάλυσης (**continuum analysis methods**), οι οποίες και ενδείκνυνται για την αποτελεσματική μοντελοποίηση μεγάλων ατομικών συστημάτων και είναι ιδιαίτερα δημοφιλείς σε πολλούς μηχανικούς. Βασική θεώρηση των προσεγγίσεων συνεχούς μηχανικής ανάλυσης (CM) είναι η μοντελοποίηση του νανοσωλήνα άνθρακα ως μια συνεχής δομή, με συνεχή κατανομή μάζας, ακαμψίας κτλ. Έτσι λοιπόν, η μορφή πλέγματος του νανοσωλήνα άνθρακα αγνοείται στη συνεχή μοντελοποίηση και αντικαθίσταται από ένα συνεχές μέσο. Η συνεχής μοντελοποίηση μπορεί να πραγματοποιηθεί είτε αναλυτικά, είτε υπολογιστικά, αντιπροσωπεύοντας τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων (FEM).

Συχνά, χρησιμοποιείται από τους ερευνητές το συνεχές **μοντέλο κελύφους** για τη μελέτη των ιδιοτήτων των CNTs (continuum shell model). Οι Silvestre et al όμως^[19,20] έδειξαν ότι οι θεωρίες ρηχού κελύφους

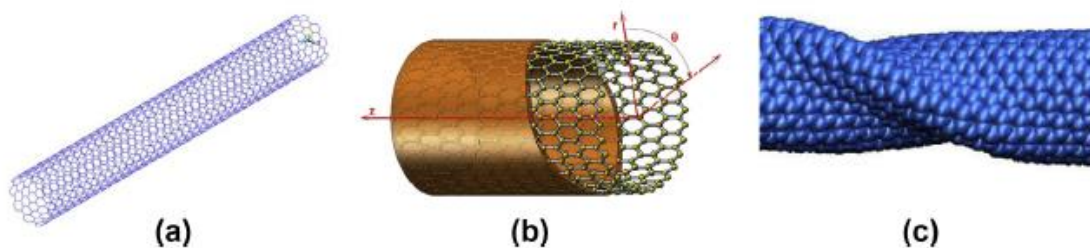
(shallow shell), δεν είναι γενικά ακριβείς για την ανάλυση CNTs, αφού οι CNTs δεν είναι «ρηχές» μορφές. Μόνο πολύ πιο πολύπλοκες θεωρήσεις κελύφους μπορούν να παράγουν ακριβή αποτελέσματα για τους CNTs.

Επιπλέον, σύμφωνα με τους Rafiee et al,^[1] κάποιες παράμετροι όπως το πάχος τοιχώματος του νανοσωλήνα, δεν είναι καλά ορισμένες στην προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης. Για παράδειγμα, ενώ συχνά στην προσέγγιση αυτή ως πάχος τοιχώματος του νανοσωλήνα άνθρακα θεωρείται η απόσταση μεταξύ διαδοχικών φύλλων γραφενίου στα 0,34 nm, πολλά μοντέλα συνεχούς ανάλυσης καταλήγουν σε ένα ενεργό πάχος τοιχώματος (effective wall thickness) μεταξύ ενός μεγάλου εύρους τιμών, αναφορικά από 0,066nm μέχρι και 0,65 nm, ανάλογα με το είδος του μοντέλου και πιο συγκεκριμένα ανάλογα με το είδος της δομικής μονάδας της συνεχούς κατασκευής.

3.2.3 Προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης στη νανοκλίμακα

Σε αντίθεση με την προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης, όπου ολόκληροι οι νανοσωλήνες αντικαθίστονται από ένα συνεχές μέσο, η προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης στη νανοκλίμακα (**NCM**) παρέχει μια ενδιάμεση λύση της διαδικασίας μοντελοποίησης με αντικατάσταση μόνο του διατομικού δεσμού άνθρακα – άνθρακα από ένα συνεχές στοιχείο, όπως για παράδειγμα από μια ράβδο, ένα ελατήριο ή μια δοκό. Με άλλα λόγια, κατά την NCM οι μοριακές αλληλεπιδράσεις μεταξύ των δεσμών C-C μπορούν να εξεταστούν χρησιμοποιώντας καθαρά δομικά μέρη των οποίων οι ιδιότητες υπολογίζονται ξεχωριστά από την ατομιστική μοντελοποίηση.^[5] Σύμφωνα με τους Sakharova et al^[5], η προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης στη νανοκλίμακα μπορεί να θεωρηθεί ως ένας ικανοποιητικός συμβιβασμός μεταξύ της εξάλειψης των μειονεκτημάτων των προσομοιώσεων μοριακής ανάλυσης, δηλαδή της μεγάλου υπολογιστικού φόρτου, και της ευαισθησίας της συνεχούς μηχανικής ανάλυσης όσον αφορά την ακριβή υπολογισμό των μηχανικών ιδιοτήτων των CNTs.

Δύο κύριες στρατηγικές επίλυσης χρησιμοποιούνται κατά την προσέγγιση NCM, η **quasi-continuum** και η **equivalent-continuum** μέθοδοι, οι οποίες αναπτυχθήκαν από τους Tadmor et al.^[22] και τους Odegard et al.^[3] αντίστοιχα. Η πρώτη, παρουσιάζει τη σχέση μεταξύ της παραμόρφωσης ενός συνεχούς μέσου με την παραμόρφωση του κρυσταλλικού του πλέγματος με χρήση του κανόνα Cauchy-Born. Η δεύτερη μέθοδος που αναπτύχθηκε από τους Odegard et al^[3], παρέχει ένα συσχετισμό μεταξύ υπολογιστικής χημείας και δομικής μηχανικής για συνεχή μέσα. Πιο αναλυτικά, ο συσχετισμός αυτός προέρχεται από την εξίσωση της ολικής μοριακής δυναμικής ενέργειας μιας νανοδομής (total molecular potential energy), με την ενέργεια παραμόρφωσης των ισοδύναμων συνεχών στοιχείων από τα οποία και αποτελείται.



Εικόνα 3.3 : Μοντέλα CNTs κατασκευασμένα με (a) Προσέγγισης συνεχούς ανάλυσης στη νανοκλίμακα (b) Προσέγγισης συνεχούς ανάλυσης (c) Ατομιστικής προσέγγισης[1]

Ακόμα, οι Zhang et al. ^[25] ενσωμάτωσαν διατομικά δυναμικά σε μία συνεχή ανάλυση, θεμελιώνοντας έτσι μία θεωρία συνεχούς ανάλυσης στην νανοκλίμακα για να διερευνήσουν τις ελαστικές ιδιότητες των SWCNTs. Αργότερα οι Wu et al. ^[26] επέκτειναν αυτή τη θεωρία λαμβάνοντας υπ'όψιν τους την κυρτότητα του νανοσωλήνα και τα φαινόμενα κάμψης. Οι Chang et al. ^[27] δήλωσαν πως ο δεσμός C-C παραμένει πάντοτε ευθής ανεξάρτητα από το ασκούμενο φορτίο, άρα κατέστησαν καταλληλότερα τα στοιχεία – ελατήρια για την μοντελοποίηση του δεσμού. Οι Arroyo et al. ^[28] εισήγαγαν εξισώσεις κλειστής μορφής για τις ελαστικές ιδιότητες των SWCNTs, βασιζόμενες στον εκθετικό νόμο Cauchy - Born, χρησιμοποιώντας την πεπερασμένη θεωρία συνεχούς παραμόρφωσης. Τέλος οι Cheng et al. ^[29] παρουσίασαν μία νέα προσέγγιση με τίτλο «Ατομιστική – συνεχής μοντελοποίηση» (ACM) η οποία συσχετίζει την 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.

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκε η προσέγγιση συνεχούς ανάλυσης στη νανοκλίμακα και πιο συγκεκριμένα η equivalent continuum μέθοδος, όπως αυτή αναπτύχθηκε από τους Odegard et al. ^[3] και αργότερα εμπλουτίστηκε από τους Li & Chou ^[4]. Αυτό που έκαναν οι Li & Chou ήταν ουσιαστικά να δημιουργήσουν 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 C-C. Οι σχέσεις που διέπουν τη μέθοδο αυτή θα παρουσιαστούν αναλυτικά σε επόμενο υποκεφάλαιο.

Οι δοκοί (beam elements) έχουν εξεταστεί σε βάθος από την ερευνητική κοινότητα λόγω του ότι είναι πιο εύχρηστες από άλλα στοιχεία κατά τη μοντελοποίηση αλλά και παρέχουν ιδιαίτερα αξιόπιστα μοντέλα.

3.3 Θεμελίωση μοντέλου CNTs θεωρώντας το πραγματικό δυναμικό του δεσμού C - C

Το μοντέλο που αναπτύχθηκε βασίζεται στην υπόθεση ότι οι νανοσωλήνες άνθρακα, όταν υφίστανται φόρτιση συμπεριφέρονται ως ένα **χωροδικτώμα**. Για τη μοντελοποίηση των ιδιοτήτων των CNTs χρειάστηκε να δημιουργήσουμε ένα δίκτυο σημείων - κόμβων τα οποία αντιπροσωπεύουν τα άτομα άνθρακα και τελικά σχηματίζεται ένας κύλινδρος τυλιγμένου φύλλου γραφενίου για δύο μορφές CNTs : armchair και zigzag. Τα CNTs που μοντελοποιούμε είναι μονού τοιχώματος (single walled carbon nanotubes ή SWCNTs). Για τη μοντελοποίηση των δεσμών μεταξύ των ανθράκων χρησιμοποιούμε τη θεώρηση των ισοδύναμων δοκών, η οποία θα αναλυθεί στο επόμενο υποκεφάλαιο. Οι δεσμοί είναι αυτοί που συνδέουν τους κόμβους (άτομα άνθρακα) μεταξύ τους προς σχηματισμό του τελικού κυλινδρικού χωροδικτώματος. Σε αυτό το σημείο πρέπει να σημειωθεί ότι θεωρήσαμε σταθερό μήκος για το δεσμό C - C με τιμή $l = 0,1421nm$ η οποία έχει επιβεβαιωθεί πειραματικά ^[16].

Ως ακτίνα του κυλίνδρου θεωρείται κάθε φορά η υπολογιζόμενη με τον τρόπο που θα δούμε παρακάτω ακτίνα για το κάθε είδος νανοσωλήνα άνθρακα, συμβολιζόμενη ως R. Για τον υπολογισμό των αποστάσεων παρακάτω, θα χρειαστεί να έχουμε μια ολοκληρωμένη εικόνα της εξαγωνικής «κυψελίδας»

που σχηματίζουν τα άτομα άνθρακα και των αποστάσεων που τη χαρακτηρίζουν. Όλες οι αποστάσεις της κυψελίδας υπολογίζονται με βάση το σταθερό μήκος του δεσμού C-C ίσο με 0,1421 nm.

3.3.1 Ενεργειακή ανάλυση δεσμών

Η προσέγγιση των ενεργειών των δεσμών μεταξύ των ατόμων άνθρακα είναι καίριας σημασίας για την εξαγωγή του μοντέλου πεπερασμένων στοιχείων. Όπως προαναφέρθηκε, οι νανοσωλήνες άνθρακα μπορούν να αντιμετωπιστούν ως ένα χωροδικτύωμα με τους δεσμούς να αποτελούν πλέον υλικές ενώσεις από ένα συνεχές μέσο μεταξύ των ατόμων άνθρακα.

Σύμφωνα με τον Le (2014) ^[17], η δυναμική ενέργεια του συστήματος που εξετάζουμε εκφράζεται ως ένα άθροισμα σθένους ή δεσμικών και μη δεσμικών αλληλεπιδράσεων:

$$U = U_{\theta} + U_r + U_{\tau} + U_{\omega} + U_{vdw} + U_{el} \quad (3.1)$$

Όπου U_r η ενέργεια έκτασης των δεσμών και U_{θ} η ενέργεια κάμψης γωνίας δεσμού (bond angle bending energy), οι οποίες θα αναλυθούν παρακάτω. Τα U_{τ} , U_{ω} , U_{vdw} , και U_{el} αναφέρονται στις ενέργειες στρέψης, αναστροφής, αλληλεπίδρασης Van der Waals και ηλεκτροστατικής αλληλεπίδρασης αντίστοιχα. Στην παρούσα εργασία θα θεωρηθούν αμελητέες.

Οι Li και Chou (2003) ^[4] χρησιμοποίησαν τη μέθοδο της ακαμψίας για να προσομοιώσουν τη μηχανική συμπεριφορά των νανοσωλήνων άνθρακα, και για το σκοπό αυτό δημιούργησαν μια σύνδεση μεταξύ των σταθερών δύναμης κατά τη μοριακή μηχανική και της ακαμψίας των στοιχείων κατά την δομική μηχανική (structural mechanics) μέσω της **ισοδυναμίας ενεργειών**. Το βασικό στοιχείο αυτής της προσέγγισης είναι ότι υποθέτοντας μικρές παραμορφώσεις, μπορούμε να υιοθετήσουμε τις απλούστερες αρμονικές εκφράσεις των διαφόρων στερικών (steric potential energy) δυναμικών ενεργειών των δεσμών του νανοσωλήνα, ενέργειες που συμπεριλαμβάνονται όπως είδαμε και στο άθροισμα της δυναμικής ενέργειας του συστήματος (εξίσωση (3.1)). Δηλαδή:

$$U_r = \frac{1}{2} k_r (r - r_0)^2 = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2 \quad (3.2)$$

$$U_{\theta} = \frac{1}{2} k_{\theta} (\theta - \theta_0)^2 = \frac{1}{2} k_{\theta} (\Delta \theta)^2 \quad (3.3)$$

$$U_{\tau} = U_{\phi} + U_{\omega} = \frac{1}{2} k_{\tau} (\Delta \phi)^2 \quad (3.4)$$

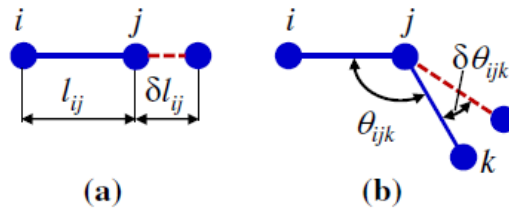
Όπου U_r είναι η ενέργεια έκτασης δεσμού (bonded stretching energy), U_{θ} η ενέργεια κάμψης γωνίας δεσμού (bonded angle bending energy), και U_{τ} είναι ο συνδυασμός της ενέργειας στρέψης διεδρικής γωνίας (dihedral angle torsion energy) U_{ϕ} , και τις out-of-plane ενέργειες στρέψης U_{ω} . Τα k_r , k_{θ} και k_{τ} είναι η σταθερά δύναμης έκτασης δεσμού, η σταθερά δύναμης κάμψης γωνίας δεσμού και η αντίσταση στρέψης αντίστοιχα. Τέλος, τα Δr , $\Delta \theta$, $\Delta \phi$ αντιπροσωπεύουν την αύξηση στην έκταση του δεσμού, τη μεταβολή στη γωνία κάμψης του δεσμού και τη μεταβολή στη γωνία στρέψης του δεσμού αντίστοιχα. Αν συνδέσουμε τις ενεργειακές σχέσεις αυτές με τις αντίστοιχα καθαρά δομικές μηχανικές σχέσεις, θα έχουμε:

$$U_A = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = \frac{1}{2} \frac{N^2 L}{EA} = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (\Delta L)^2 \quad (3.5)$$

$$U_M = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = \frac{2EI}{L} \alpha^2 = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (2\alpha)^2 \quad (3.7)$$

$$U_T = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{1}{2} \frac{T^2 L}{GJ} = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\Delta\beta)^2 \quad (3.8)$$

Όπου U_A, U_M και U_T είναι η ενέργεια τάσης μιας ομοιόμορφης δοκού μήκους L , διατομής A και ροπής αδράνειας I υπο αξονική δύναμη, καθαρή κάμψη και καθαρή στρέψη αντίστοιχα. E και G είναι τα μέτρα ελαστικότητας κατά Young και διάτμησης αντίστοιχα, ΔL είναι η ολική αξονική παραμόρφωση και το 2α αντιπροσωπεύει την ολική σχετική γωνία περιστροφής. Τέλος, $\Delta\beta$ είναι η σχετική γωνία στρέψης και J η πολική ροπή αδράνειας.



Εικόνα 3.4 : Σχηματική αναπαράσταση των: a) του μήκους δεσμού I_{ij} και της επιμήκυνσής του δl_{ij} b) της γωνίας θ_{ijk} μεταξύ γειτονικών δεσμών και της διαφοροποίησης του $\delta\theta_{ijk}$.

Βασικό χαρακτηριστικό της παρούσας θεώρησης που χρησιμοποιείται για την επίλυση του μοντέλου, είναι η εξίσωση των αντίστοιχων ενεργειών, μοριακής δυναμικής και δομικής μηχανικής, μεταξύ τους. Αυτό συνεπάγεται ότι τα U_τ και U_A αντιπροσωπεύουν την ενέργεια έκτασης, τα U_θ και U_M την ενέργεια κάμψης και τα U_τ και U_T την ενέργεια στρέψης. Είναι λογικό έπειτα να υποθέσουμε ότι το ΔL ισοδυναμεί με το Δr , το 2α με το $\Delta\theta$ και το $\Delta\beta$ με το $\Delta\phi$. Έτσι συγκρίνοντας τις σχέσεις (3.2)-(3.4) και (3.5)-(3.7) μεταξύ τους αποκτούμε μια άμεση σχέση μεταξύ της ακαμψίας του στοιχείου-δοκού και των σταθερών δύναμης όπως αυτές χρησιμοποιούνται στη μοριακή δυναμική:

$$\frac{EA}{L} = k_r \quad (3.9)$$

$$\frac{EI}{L} = k_\theta \quad (3.10)$$

$$\frac{GJ}{L} = k_\tau \quad (3.11)$$

Οι εξισώσεις (3.9)-(3.11) αποτελούν τη βάση της προσέγγισης ακαμψίας, όπως αυτή χρησιμοποιήθηκε από τους Li και Chou^[4]. Οι τιμές των σταθερών ενέργειας διασταυρώθηκαν στη βιβλιογραφία [2][4] και τελικά χρησιμοποιήθηκαν οι τιμές που παρουσιάζονται στον πίνακα 1, ενώ συμπεριλαμβάνονται και οι αντίστοιχοι τύποι υπολογισμού που προκύπτουν από τις (3.9)-(3.11):

Πίνακας 3.1 : Τιμές σταθερών και υπολογισμός δεδομένων

Παράμετρος	Τιμή	Τύπος υπολογισμού
ν	0.3	-
k_r	$6.52 \cdot 10^{-7} \text{ N nm}^{-1}$	-
k_θ	$8.76 \cdot 10^{-10} \text{ N nm rad}^{-2}$	-

k_r	$2.78 \cdot 10^{-10} \text{ N nm rad}^{-2}$	-
Μήκος δεσμού $a_{c,c}$	0.1421nm	-
Πάχος τοιχώματος t	0.147 nm	$t = 4 \sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}}$
Εμβαδό διατομής A	0.01697 nm ²	$A = \frac{\pi d^2}{4}$
Αδράνεια I	0.00106 nm ²	$I = \frac{\pi d^2}{64}$
Μέτρο Ελασ/τας element E	5.49 TPa	$E = \frac{k_r^2 L}{4\pi k_\theta}$
Μέτρο διάτμησης element G	0.871 TPa	$G = \frac{k_r^2 k_r L}{8\pi k_\theta^2}$

Σύμφωνα με την πρωτότυπη εργασία των Li & Chou ^[4] πάνω στην μέθοδο ακαμψίας, οι σταθερές ενέργειας k που επελέξαν βασίζονται στην αντίστοιχη εμπειρία με τα φύλλα γραφενίου. Η k_r συγκεκριμένα βασίζεται σε αναφορά (Cornell et al. ^[24]) και η τιμή της δεν είναι απολύτως αριστοποιημένη για τη χρήση σε τέτοιες αναλύσεις. Παρόλα αυτά, η επίδραση της k_r σύμφωνα με τους Li & Chou ^[4] είναι πολύ αθηνής στον υπολογισμό του μέτρου ελαστικότητας,

Όσον αφορά το λόγο Poisson ν , τόσο στην πρωτότυπη δουλειά των Li et al ^[2], όσο και στην πλειοψηφία της βιβλιογραφίας που είναι διαθέσιμη [1],[5],[8], η τιμή που χρησιμοποιείται είναι αυθαίρετη, και έχει μοναδικό περιορισμό να είναι ένας θετικός αριθμός μικρότερος του 0.5. Στην πραγματικότητα ο περιορισμός αυτός παραβιάζει τον τύπο $G = E/(2(1 + \nu))$ που θα έπρεπε να ισχύει για μια ισότροπη και ομοιόμορφη ράβδο, γεγονός που παρατηρήθηκε και από τους Fan et al ^[6], οι οποίοι όμως απέδειξαν ότι τελικά ο λόγος Poisson έχει πολύ μικρή επηρροή στα τελικά αποτελέσματα για τιμές μεταξύ 0.05 και 0.3. Για το λόγο, στο πρώτο υπολογιστικό μέρος της παρούσας εργασίας υιοθετήθηκε η αντιπροσωπευτική τιμή για μεγάλο εύρος υλικών ίση με 0.3. Εξάλλου, εφόσον στον κώδικα εισάγεται «χειροκίνητα» η τιμή του μέτρου διάτμησης G , η οποία προκύπτει από την ενεργειακή εξίσωση των σχέσεων δομικής και μοριακής μηχανικής, ο λόγος ν παύει να επηρεάζει τους υπολογισμούς μας, παρά αποκτά τυπικό χαρακτήρα στο πρόγραμμα. Παρακάτω, στο δεύτερο υπολογιστικό μέρος, θα γίνει μια απόδειξη της όντως μικρής επηρροής του λόγου Poisson στο μέτρο ελαστικότητας των νανοσωλήνων άνθρακα, καθώς αυτή συχνά θεωρείται δεδομένη στη βιβλιογραφία χωρίς όμως να δείχνεται.

Στο κεφάλαιο όπου γίνεται ο σχολιασμός των αποτελεσμάτων και η παραμετρική ανάλυση με βάση το πάχος τοιχώματος, χρησιμοποιούνται διαφορετικές τιμές, τόσο για το πάχος τοιχώματος όσο και για το μέτρο ελαστικότητας της δοκού – στοιχείου. Πιο συγκεκριμένα για τα δύο σετ τιμών:

Οι Jalalahmadi et al (2007) ^[9], ακολούθησαν την παρακάτω διαδικασία για τον υπολογισμό ενός νέου μέτρου ελαστικότητας του element και πάχους τοιχώματος:

Για τον υπολογισμό του μέτρου ελαστικότητας μια χρησιμοποιείται μια σύνδεση μεταξύ μοριακής και δομικής μηχανικής. Υπάρχει πληθώρα βιβλιογραφίας στον τομέα της μοριακής δυναμικής αφιερωμένη

στη μελέτη της λειτουργικής μορφής του ενεργειακού δυναμικού. Μια από τις πρώτες τέτοιες προσεγγίσεις του ενεργειακού δυναμικού, είναι το εκθετικό ζεύγος δυναμικού Morse. [15]

$$V(r) = D_e(1 - e^{-\alpha(r-r_e)})^2 \quad (3.12)$$

Η παραπάνω σχέση είναι ο τύπος του **δυναμικού Morse**, όπου r είναι η απόσταση μεταξύ των ατόμων, r_e είναι το μήκος δεσμού στην ισορροπία και D_e και α είναι ενεργειακές σταθερές που προσδιορίζονται ανάλογα το είδος του υλικού. Το δυναμικό αυτό παράγει απωστικές δυνάμεις σε μικρά εύρη, ελκτικές σε μεσαία και εξασθενεί ομαλά στο μηδέν σε μεγάλα εύρη. Χρησιμοποιεί μια μορφή δυναμικού που περιέχει δύο εκθετικούς όρους αντί για ένα νόμο που εξαρτάται από την ισχύ.

Το δυναμικό αυτό ζεύγος έπειτα εμπλουτίστηκε προσθέτοντας έναν όρο για την κάμψη της γωνίας του δεσμού, όπως φαίνεται και στην εργασία των Belytschko et al. (2002) ^[14].

$$E = E_{stretch} + E_{angle} \quad (3.13)$$

$$E_{stretch} = D_e \left\{ [1 - e^{-\beta(r-r_0)}]^2 - 1 \right\} \quad (3.14)$$

$$E_{angle} = \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 [1 + k_{sextic} (\theta - \theta_0)^4] \quad (3.15)$$

Όπου $E_{stretch}$ είναι η ενέργεια δεσμού λόγω έκτασης, E_{angle} είναι η ενέργεια δεσμού λόγω γωνιακής κάμψης, r είναι το μήκος του δεσμού και θ είναι η γωνία μεταξύ δύο επικοινωνούντων δεσμών, η οποία αποτελεί και κλασσικό μέτρο εκτίμησης της παραμόρφωσης στη μοριακή δυναμική. Για τις σταθερές ενεργειακές παραμέτρους ισχύει: ^[9]

$$r_0 = 1.39 \times 10^{-10} m, D_e = 6.03105 \times 10^{-19} Nm, \beta = 2.625 \times 10^{10} m^{-1},$$

$$\theta_0 = 2.094 \text{ rad}, k_\theta = 0.9 \times 10^{-18} \frac{Nm}{\text{rad}^2}, k_{sextic} = 0.754 \text{ rad}^{-4},$$

Οι σταθερές αν και προκύπτουν από στην έκφραση του δυναμικού Morse, λεχουν τροποποιηθεί ελαφρά ώστε ο νέος όρος που αφορά την κάμψη του δεσμού να αντιστοιχεί στο δυναμικό Brenner για παραμορφώσεις μικρότερες του 10%. ^{[9][16]}

Περνώντας τώρα στο κομμάτι της δομικής μηχανικής, για να υπολογίσουμε τις ενεργές τιμές της έκτασης και της ακαμψίας του δεσμού, θεωρούμε αρχικά τα μέτρα ακαμψίας των κλασσικών δοκών ως εξής:

$$K_F^{beam} = \frac{EA}{l}, K_M^{beam} = \frac{EI}{l} \quad (3.16), (3.17)$$

Όπου E είναι το μέτρο ελαστικότητας, A η επιφάνεια της διατομής της δοκού, I είναι η αδράνεια και l το μήκος της δοκού, δηλαδή στην περίπτωσή μας του δεσμού, για το οποίο χρησιμοποιούμε την ευρέως αποδεκτή τιμή 0,1421 nm. Αν παραγωγίσουμε τις σχέσεις (3.14)-(3.17) για να πάρουμε τους αντίστοιχους συντελεστές ακαμψίας για το δεσμό. Τελικά θα καταλήξουμε στα:

$$K_F = 5337.38 \frac{\text{eV}}{\text{nm}^2} = 854 \text{ nN/nm}$$

$$K_M = 5.617 \frac{\text{eV}}{\text{rad}^2} = 0.9 \text{ nN nm/rad}^2$$

Και εξισώνοντας τώρα τις (3.16), (3.17) με τις τιμές που προέκυψαν για τα K_M, K_F καταλήγω ότι:

$$EA = 128.8 \text{ nN}$$

$$EI = 0.13 \text{ nN nm}^2$$

Και υποθέτοντας στοιχείο κυκλικής διατομής, τελικά έχουμε το τελικό ζεύγος τιμών:

$$d = 0.1296 \text{ nm}$$

$$E = 9.382 \text{ TPa}$$

Το δεύτερο ζεύγος τιμών, αποτελεί μια προσέγγιση με βάση τα χαρακτηριστικά ενός φύλλου γραφίτη, με πάχος τοιχώματος, το οποίο σύμφωνα με τους Dresselhaus et al ^[7] είναι ίσο με το Interlayer spacing του φύλλου, να είναι στα 0,34 nm. Οι Li & Chou ^[4] χρησιμοποίησαν την ίδια τιμή $t = 0,34$ για μοντελοποίηση SWCNTs και οι Fan et al ^[6] με τη σειρά τους, υπολόγισαν το μέτρο ελαστικότητας φύλλων γραφενίου με το πάχος αυτό. Απέδειξαν μέσω ανάλυσης FE, ότι το μέτρο ελαστικότητας αυτό πλησιάζει τα 1,025 TPa, που αποτελούν και την κοινώς αποδεκτή τιμή, αλλά και κυρίως ότι φαίνεται η τιμή αυτή να είναι σχεδόν ανεξάρτητη του μεγέθους του μοντέλου, επιτρέποντας μας να τη θεωρήσουμε προσεγγιστικά ίση με την τιμή του μέτρου ελαστικότητας της δομικής εξαγωνικής κυψελίδας και να την ενσωματώσουμε ως τιμή στον κώδικα μας.

3.3.2 Εισαγωγή συντεταγμένων και γεωμετρικών χαρακτηριστικών

Για την κατασκευή του μοντέλου είναι απαραίτητο να προσδιορισθούν και να εισαχθούν στον κώδικα οι συντεταγμένες κάθε σημείου των νανοσωλήνων.

Παρακάτω θα παρουσιαστούν αναλυτικά τόσο η διαδικασία υπολογισμού των σημείων αλλά και οι τελικές τους τιμές για κάθε είδος αλλά και διάμετρο νανοσωλήνα άνθρακα. Αναλυτικότερα, πρέπει να αναφέρουμε πως σε κάθε διάμετρο που εξετάζουμε, ο σχεδιασμός του νανοσωλήνα αλλάζει ριζικά, καθώς μια μεγαλύτερη διάμετρος, αντιστοιχεί προφανώς σε περισσότερες εξαγωνικές κυψελίδες ανα κυκλικό τμήμα του κυλίνδρου. Τα κυκλικά αυτά τμήματα – ή διαδοχικές κυκλικές μονάδες- αποτέλεσαν και τη βάση σχεδιασμού του κυλινδρικού χωροδικτύωματος.

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 (1995) ^[7], έδειξαν ότι ισχύει ο παρακάτω τύπος υπολογισμού:

$$D = \frac{\sqrt{n^2+m^2+nm}}{\pi} \sqrt{3}l \quad (3.18)$$

Δηλαδή πιο αναλυτικά:

$$D = \frac{3nl}{\pi} \text{ για τους armchair νανοσωλήνες (n,n)}$$

$$D = \frac{\sqrt{3}nl}{\pi} \text{ για τους zigzag νανοσωλήνες (n,0)}$$

➤ **Για τη μορφή Armchair (4,4):**

Στον νανοσωλήνα αυτό, σε κάθε ισοδύναμο κύκλο αντιστοιχούν 8 σημεία, 2 σε κάθε τεταρτημόριο. Υπάρχουν δύο είδη κυκλικών μονάδων, τα οποία επαναλαμβάνονται και ενώνονται κατάλληλα για να σχηματίσουν την τελική μορφή του νανοσωλήνα.

Οι συντεταγμένες κάθε σημείου επάνω στην κυκλική μονάδα είναι συνάρτηση δύο παραμέτρων: του μήκους δεσμού μεταξύ ανθράκων a_{C-C} και της ακτίνας του κυλίνδρου, η οποία όπως προαναφέρθηκε υπολογίζεται μέσω τύπων για κάθε είδος νανοσωλήνα.

Ο πιο αξιόπιστος τρόπος υπολογισμού των συντεταγμένων, αποδείχθηκε πως είναι να χωρίσουμε κάθε τεταρτημόριο των 90° σε ισής γωνίας τόξα (π.χ. στην περίπτωση του πρώτου κύκλου του armchair (4,4) κάθε τεταρτημόριο χωρίζεται σε 3 τμήματα των 30°) και μέσω των τριγωνομετρικών αριθμών των γωνιών να υπολογιστούν οι αντίστοιχες αποστάσεις.

Για τον πρώτο κύκλο οι συντεταγμένες θα είναι:

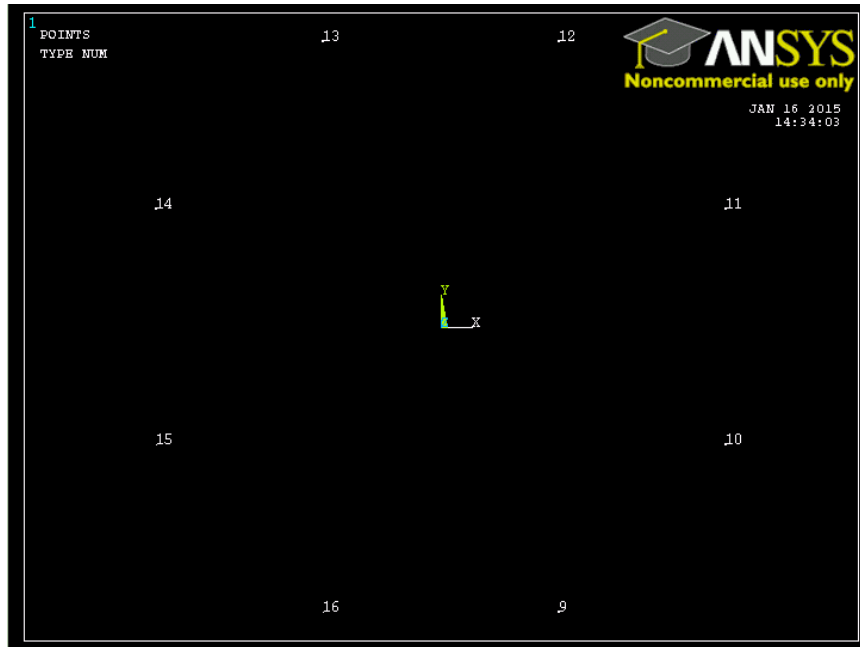
$$\begin{aligned} x_1 &= R \cdot \sin 30^\circ & x_5 &= -R \cdot \sin 30^\circ \\ y_1 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2} & y_5 &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2} \\ x_2 &= R \cdot \sin 60^\circ & x_6 &= -R \cdot \sin 60^\circ \\ y_2 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 60^\circ)^2} & y_6 &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 60^\circ)^2} \\ x_3 &= R \cdot \sin 60^\circ & x_7 &= -R \cdot \sin 60^\circ \\ y_3 &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 60^\circ)^2} & y_7 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 60^\circ)^2} \\ x_4 &= R \cdot \sin 30^\circ & x_8 &= -R \cdot \sin 30^\circ \\ y_4 &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2} & y_8 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2} \end{aligned}$$



Εικόνα 3.5: Ο πρώτος κύκλος σημείων για το Armchair (4,4), όπως φαίνεται στο περιβάλλον ANSYS.

Για τον δεύτερο κύκλο οι συντεταγμένες θα είναι:

$$\begin{aligned}
 x_9 &= R \cdot \sin 22,5^\circ & x_{11} &= R \cdot \sin 67,5^\circ \\
 y_9 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 22,5^\circ)^2} & y_{11} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 67,5^\circ)^2} \\
 x_{10} &= R \cdot \sin 67,5^\circ & x_{12} &= R \cdot \sin 22,5^\circ \\
 y_{10} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 67,5^\circ)^2} & y_{12} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 22,5^\circ)^2} \\
 x_{13} &= -R \cdot \sin 22,5^\circ & x_{15} &= -R \cdot \sin 67,5^\circ \\
 y_{13} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 22,5^\circ)^2} & y_{15} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 67,5^\circ)^2} \\
 x_{14} &= -R \cdot \sin 67,5^\circ & x_{16} &= -R \cdot \sin 22,5^\circ \\
 y_{14} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 67,5^\circ)^2} & y_{16} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 22,5^\circ)^2}
 \end{aligned}$$

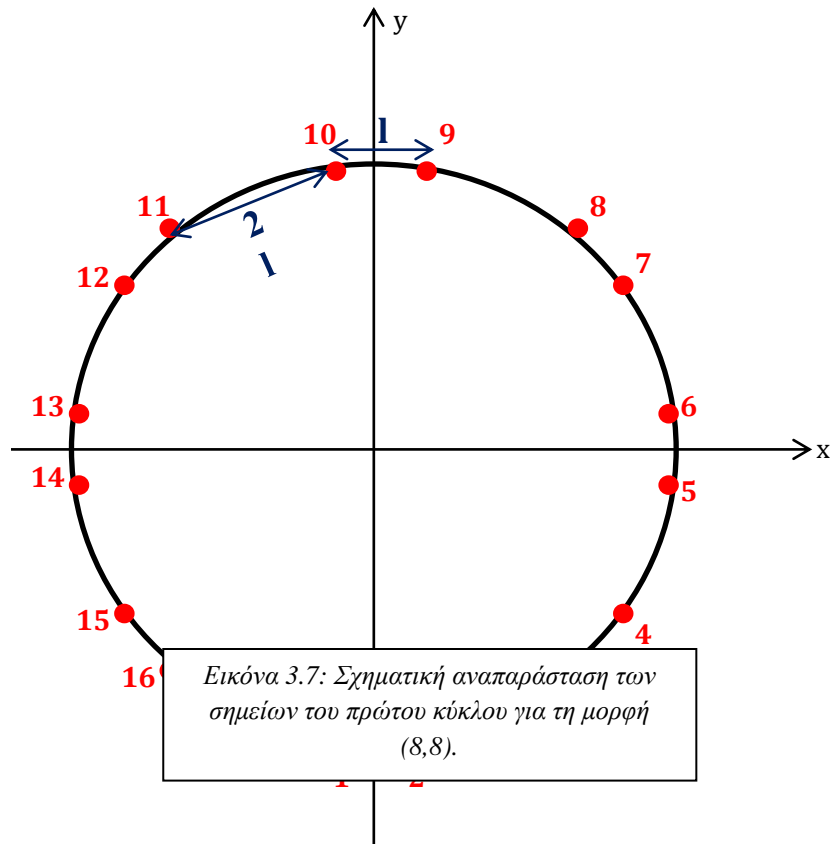


Εικόνα 3.6: Ο δεύτερος κύκλος σημείων για το Armchair (4,4), όπως φαίνεται στο περιβάλλον ANSYS.

➤ **Για τη μορφή Armchair (8,8):**

Βασιζόμενοι στη θεώρηση των Κ.Ι Tserpes, Ρ. Papanikos^[15] για μια δομή (8,8) για τους armchair νανοσωλήνες καταγράψαμε ένα σύστημα σημείων σταθερής περιοδικότητας γύρω από ένα πεπερασμένο πλήθος ομόκεντρων κύκλων με κέντρο τον άξονα συμμετρίας του νανοσωλήνα. Για τον **πρώτο τέτοιο κύκλο**, τα σημεία υπολογίστηκαν όπως αναφέρθηκε προηγουμένως για τη δομή armchair (4,4), χωρίζοντας δηλαδή κάθε τεταρτημόριο σε ίσα τόξα. Αυτή τη φορά βέβαια, σε κάθε τεταρτημόριο έχουμε 4 σημεία – άτομα άνθρακα.

Στη διπλανη εικόνα φαίνεται η κατάταξη των σημείων του πρώτου κύκλου καθώς και οι αποστάσεις μεταξύ τους. Σε αυτό το σημείο πρέπει να αναφέρουμε πως οι αποστάσεις αυτές αφορούν το φύλλου γταφενίου πριν τυλιχτεί, άρα



Εικόνα 3.7: Σχηματική αναπαράσταση των σημείων του πρώτου κύκλου για τη μορφή (8,8).

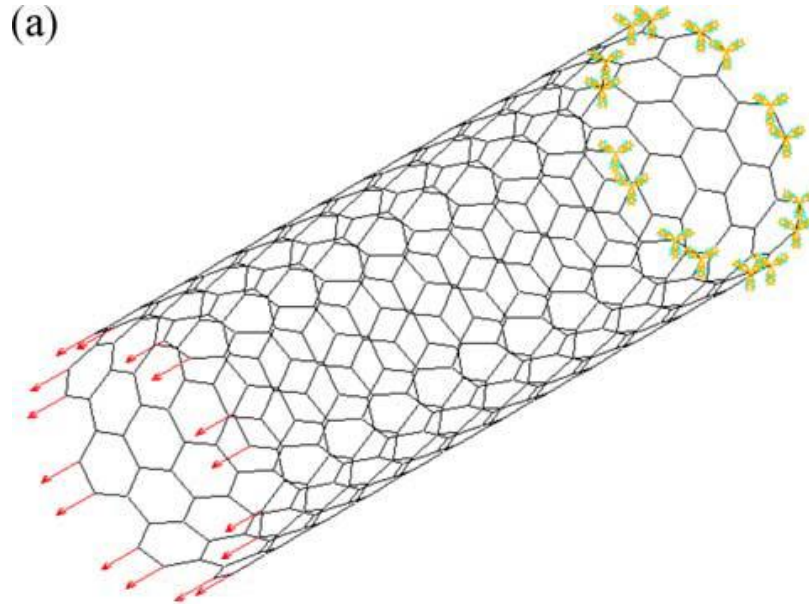
για τον υπολογισμό των συντεταγμένων σε κυκλική περιτύλιξη η μέθοδος των γωνιών είναι η πιο αξιόπιστη.

Συγκεκριμένα, για τη μορφή (8,8), χωρίζουμε τα τεταρτημόρια σε 12 νοητά τμήματα των $7,5^\circ$, και εξετάζουμε ποιές γωνίες συμπίπτουν με τα άτομα του άνθρακα. Αναλυτικά, παρατηρούμε ότι το σημείο 2, βρίσκεται σε γωνία $7,5^\circ$ ενώ μέχρι το επόμενο σημείο, μεσολαβούν άλλα 4 τμήματα, άρα βρίσκεται σε γωνία $37,5^\circ$. Το μήκος των x_2 και x_3 θα υπολογιστεί επομένως από τα αντίστοιχα ορθογώνια τρίγωνα που σχηματίζονται και τα αντίστοιχα y με χρήση του πυθαγορείου θεωρήματος.

Ανακεφαλαιώνοντας, τα **16 σημεία** του πρώτου κύκλου που εξετάζουμε (8 για το πρώτο ημικύκλιο και 8 για το δεύτερο έχουν ως εξής:

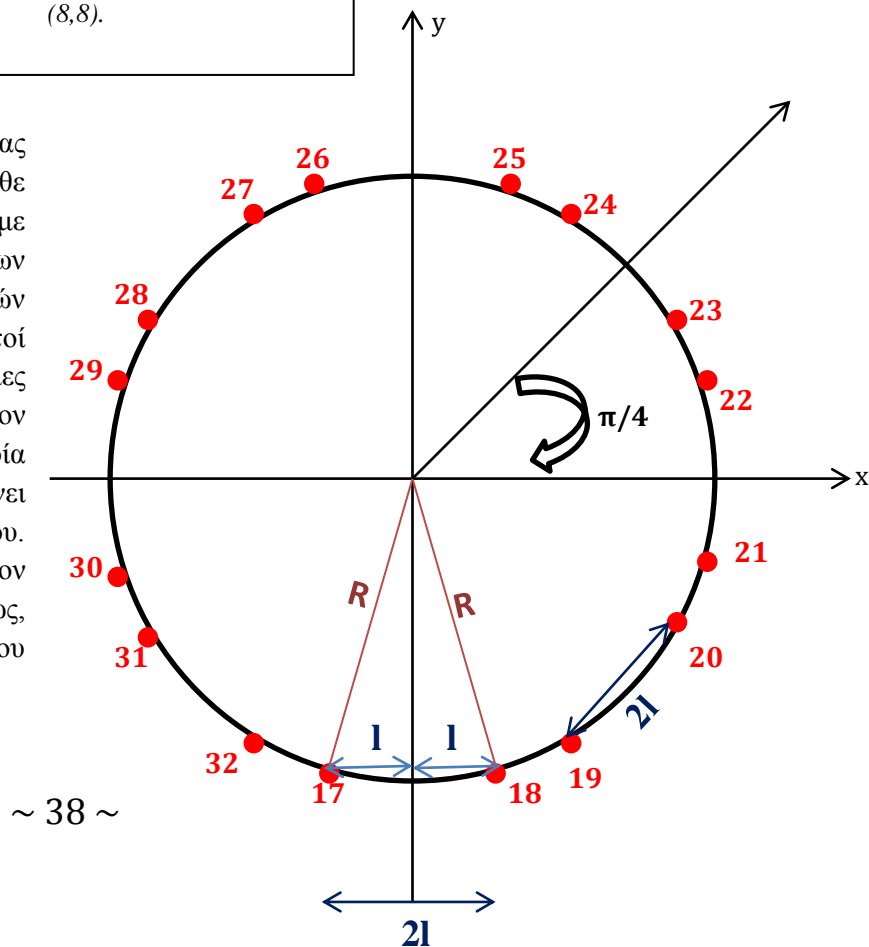
$$\begin{array}{ll}
 x_1 = -R \cdot \sin 7,5^\circ & x_9 = R \cdot \sin 7,5^\circ \\
 y_1 = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 7,5^\circ)^2} & y_9 = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 7,5^\circ)^2} \\
 x_2 = R \cdot \sin 7,5^\circ & x_{10} = -R \cdot \sin 7,5^\circ \\
 y_2 = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 7,5^\circ)^2} & y_{10} = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 7,5^\circ)^2} \\
 x_3 = R \cdot \sin 37,5^\circ & x_{11} = -R \cdot \sin 37,5^\circ \\
 y_3 = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 37,5^\circ)^2} & y_{11} = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 37,5^\circ)^2} \\
 x_4 = R \cdot \sin 52,5^\circ & x_{12} = -R \cdot \sin 52,5^\circ \\
 y_4 = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 52,5^\circ)^2} & y_{12} = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 52,5^\circ)^2} \\
 x_5 = R \cdot \sin 82,5^\circ & x_{13} = -R \cdot \sin 82,5^\circ \\
 y_5 = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 82,5^\circ)^2} & y_{13} = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 82,5^\circ)^2} \\
 x_6 = R \cdot \sin 82,5^\circ & x_{14} = -R \cdot \sin 82,5^\circ \\
 y_6 = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 82,5^\circ)^2} & y_{14} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 82,5^\circ)^2} \\
 x_7 = R \cdot \sin 52,5^\circ & x_{15} = -R \cdot \sin 52,5^\circ \\
 y_7 = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 52,5^\circ)^2} & y_{15} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 52,5^\circ)^2} \\
 x_8 = R \cdot \sin 37,5^\circ & x_{16} = -R \cdot \sin 37,5^\circ \\
 y_8 = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 37,5^\circ)^2} & y_{16} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 37,5^\circ)^2}
 \end{array}$$

Εδώ παρατίθεται μια τρισδιάστατη θεώρηση του νανοσωλήνα που μοντελοποιείται για την καλύτερη οπτική κατανόηση των ομόκεντρων αυτών κύκλων:



Εικόνα 3.8: Σχηματική αναπαράσταση ενός CNT (8,8).

Ο τρισδιάστατος αυτός νανοσωλήνας αποτελείται από 16 άτομα άνθρακα σε κάθε νοητό κύκλο και μπορούμε να εκτιμήσουμε καλύτερα την περιοδικότητα τόσο των σημείων/κόμβων αλλά και των διαδοχικών κύκλων. Παρατηρούμε ότι ανα δύο, οι νοητοί κύκλοι αποτελούνται από σημεία με τις ίδιες ακριβώς συντεταγμένες x,y, δηλαδή ο 1^{ος} με τον 3^ο και τον 5^ο κ.ω.κ, έχουν σημεία στα οποία διαφέρει μόνο η συντεταγμένη z, που παραμένει σταθερή για όλα τα σημεία του ίδιου κύκλου. Αντίστοιχα, το ίδιο συμβαίνει και για τον 2^ο, τον 4^ο και τον 6^ο κ.ω.κ κύκλο. Επομένως, αναλύοντας τα σημεία του πρώτου και δεύτερου



εν σειρά κύκλου, έχουμε μια εικόνα για όλα τα σημεία του τρισδιάστατου μοντέλου.

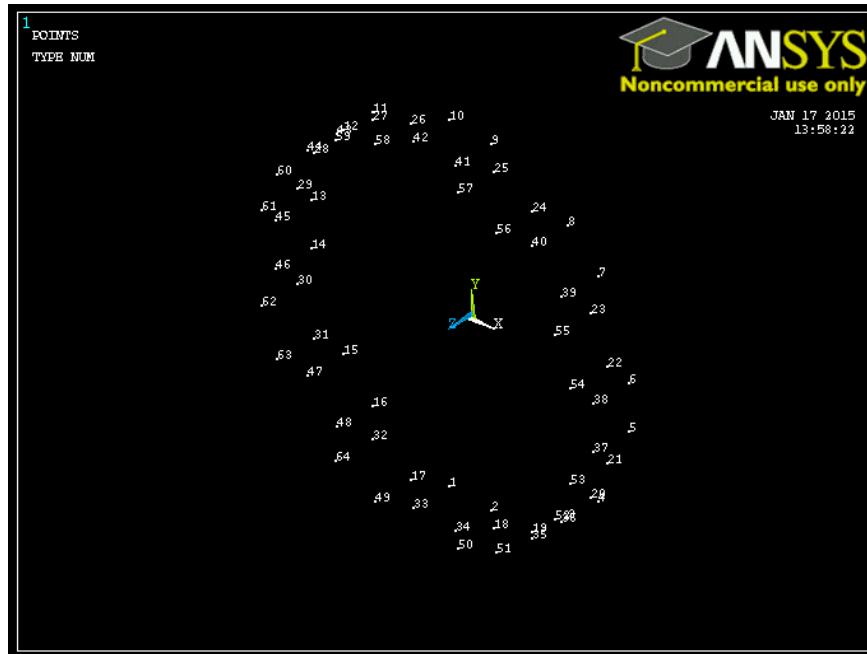
Για τον **δεύτερο κύκλο**, τα σημεία 17-32 υπολογίστηκαν όπως και για τον πρώτο με τη διαφορά ότι κάθε τεταρτημόριο χωρίστηκε τώρα σε 6 ίσα τμήματα των 15° .

Εικόνα 3.9: Σχηματική αναπαράσταση των σημείων του δεύτερου κύκλου για τη μορφή (8,8).

Ανακεφαλαιώνοντας, τα **16 σημεία** του δεύτερου κύκλου που εξετάζουμε έχουν ως εξής:

$x_{17} = -R \cdot \sin 15^\circ$	$y_{25} = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 15^\circ)^2}$
$y_{17} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 15^\circ)^2}$	$x_{26} = -R \cdot \sin 15^\circ$
$x_{18} = R \cdot \sin 15^\circ$	$y_{26} = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 15^\circ)^2}$
$y_{18} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 15^\circ)^2}$	$x_{27} = -R \cdot \sin 30^\circ$
$x_{19} = R \cdot \sin 30^\circ$	$y_{27} = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2}$
$y_{19} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2}$	$x_{28} = -R \cdot \sin 60^\circ$
$x_{20} = R \cdot \sin 60^\circ$	$y_{28} = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 60^\circ)^2}$
$y_{20} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 60^\circ)^2}$	$x_{29} = -R \cdot \sin 75^\circ$
$x_{21} = R \cdot \sin 75^\circ$	$y_{29} = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 75^\circ)^2}$
$y_{21} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 75^\circ)^2}$	$x_{30} = -R \cdot \sin 75^\circ$
$x_{22} = R \cdot \sin 75^\circ$	$y_{30} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 75^\circ)^2}$
$y_{22} = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 75^\circ)^2}$	$x_{31} = -R \cdot \sin 60^\circ$
$x_{23} = R \cdot \sin 60^\circ$	$y_{31} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 60^\circ)^2}$
$y_{23} = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 60^\circ)^2}$	$x_{32} = -R \cdot \sin 30^\circ$
$x_{24} = R \cdot \sin 30^\circ$	$y_{32} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2}$
$y_{24} = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2}$	
$x_{25} = R \cdot \sin 15^\circ$	

Παρακάτω φαίνονται τα σημεία - κόμβοι τεσσάρων διαδοχικών κύκλων στο περιβάλλον του ANSYS πριν ενωθούν μεταξύ τους με δεσμούς – στοιχεία:



Εικόνα 3.10: Σχηματική αναπαράσταση των σημείων τεσσάρων διαδοχικών κύκλων για τη μορφή (8,8).

➤ **Για τη μορφή Armchair (16,16):**

Για τον πρώτο κύκλο της μορφής (16,16) οι συντεταγμένες των σημείων έχουν ως εξής:

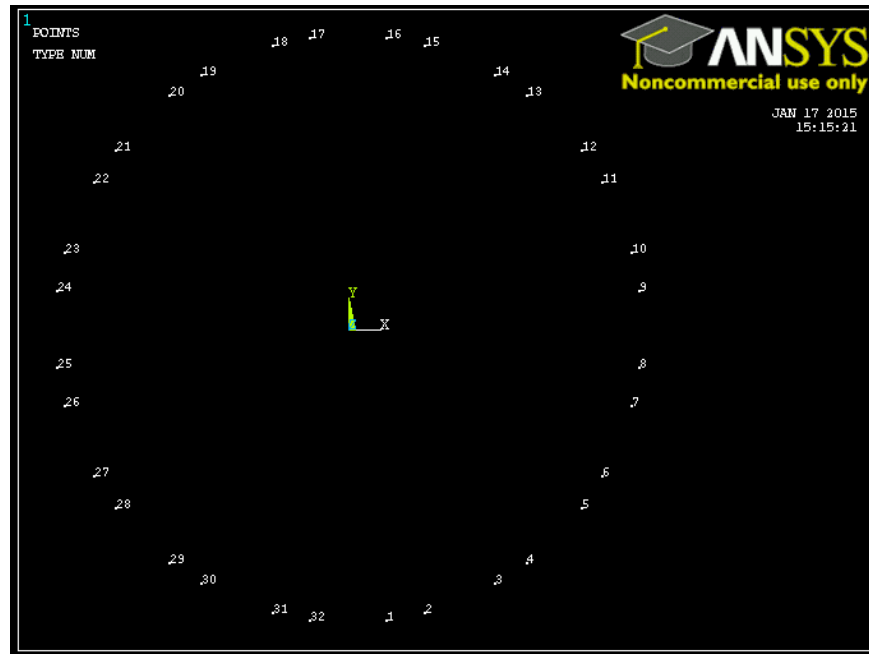
$$\begin{aligned}
 x_1 &= R \cdot \sin 7,5^\circ & y_4 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 37,5^\circ)^2} \\
 y_1 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 7,5^\circ)^2} & x_5 &= R \cdot \sin 52,5^\circ \\
 x_2 &= R \cdot \sin 15^\circ & y_5 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 52,5^\circ)^2} \\
 y_2 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 15^\circ)^2} & x_6 &= R \cdot \sin 60^\circ \\
 x_3 &= R \cdot \sin 30^\circ & y_6 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 60^\circ)^2} \\
 y_3 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2} & x_7 &= R \cdot \sin 75^\circ \\
 x_4 &= R \cdot \sin 37,5^\circ & y_7 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 75^\circ)^2}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
x_8 &= R \cdot \sin 82,5^\circ & x_{20} &= -R \cdot \sin 37,5^\circ \\
y_8 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 82,5^\circ)^2} & y_{20} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 37,5^\circ)^2} \\
x_9 &= R \cdot \sin 82,5^\circ & x_{21} &= -R \cdot \sin 52,5^\circ \\
y_9 &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 82,5^\circ)^2} & y_{21} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 52,5^\circ)^2} \\
x_{10} &= R \cdot \sin 75^\circ & x_{22} &= -R \cdot \sin 60^\circ \\
y_{10} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 75^\circ)^2} & y_{22} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 60^\circ)^2} \\
x_{11} &= R \cdot \sin 60^\circ & x_{23} &= -R \cdot \sin 75^\circ \\
y_{11} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 60^\circ)^2} & y_{23} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 75^\circ)^2} \\
x_{12} &= R \cdot \sin 52,5^\circ & x_{24} &= -R \cdot \sin 82,5^\circ \\
y_{12} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 52,5^\circ)^2} & y_{24} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 82,5^\circ)^2} \\
x_{13} &= R \cdot \sin 37,5^\circ & x_{25} &= -R \cdot \sin 82,5^\circ \\
y_{13} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 37,5^\circ)^2} & y_{25} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 82,5^\circ)^2} \\
x_{14} &= R \cdot \sin 30^\circ & x_{26} &= -R \cdot \sin 75^\circ \\
y_{14} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2} & y_{26} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 75^\circ)^2} \\
x_{15} &= R \cdot \sin 15^\circ & x_{27} &= -R \cdot \sin 60^\circ \\
y_{15} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 15^\circ)^2} & y_{27} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 60^\circ)^2} \\
x_{16} &= R \cdot \sin 7,5^\circ & x_{28} &= -R \cdot \sin 52,5^\circ \\
y_{16} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 7,5^\circ)^2} & y_{28} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 52,5^\circ)^2} \\
x_{17} &= -R \cdot \sin 7,5^\circ & x_{29} &= -R \cdot \sin 37,5^\circ \\
y_{17} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 7,5^\circ)^2} & y_{29} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 37,5^\circ)^2} \\
x_{18} &= -R \cdot \sin 15^\circ & x_{30} &= -R \cdot \sin 30^\circ \\
y_{18} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 15^\circ)^2} & y_{30} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2} \\
x_{19} &= -R \cdot \sin 30^\circ & x_{31} &= -R \cdot \sin 15^\circ \\
y_{19} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2} & y_{31} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 15^\circ)^2}
\end{aligned}$$

$$x_{32} = -R \cdot \sin 7,5^\circ$$

$$y_{32} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 7,5^\circ)^2}$$

Τα σημεία του πρώτου κύκλου στο περιβάλλον ANSYS έχουν ως εξής:



Εικόνα 3.11: Ο πρώτος κύκλος σημείων για το Armchair (16,16), όπως φαίνεται στο περιβάλλον ANSYS.

Για τον δεύτερο κύκλο οι συντεταγμένες των σημείων είναι:

$$x_{33} = R \cdot \sin 3,75^\circ$$

$$x_{37} = R \cdot \sin 48,75^\circ$$

$$y_{33} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 3,75^\circ)^2}$$

$$y_{37} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 48,75^\circ)^2}$$

$$x_{34} = R \cdot \sin 18,75^\circ$$

$$x_{38} = R \cdot \sin 63,75^\circ$$

$$y_{34} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 18,75^\circ)^2}$$

$$y_{38} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 63,75^\circ)^2}$$

$$x_{35} = R \cdot \sin 30^\circ$$

$$x_{39} = R \cdot \sin 71,25^\circ$$

$$y_{35} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2}$$

$$y_{39} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 71,25^\circ)^2}$$

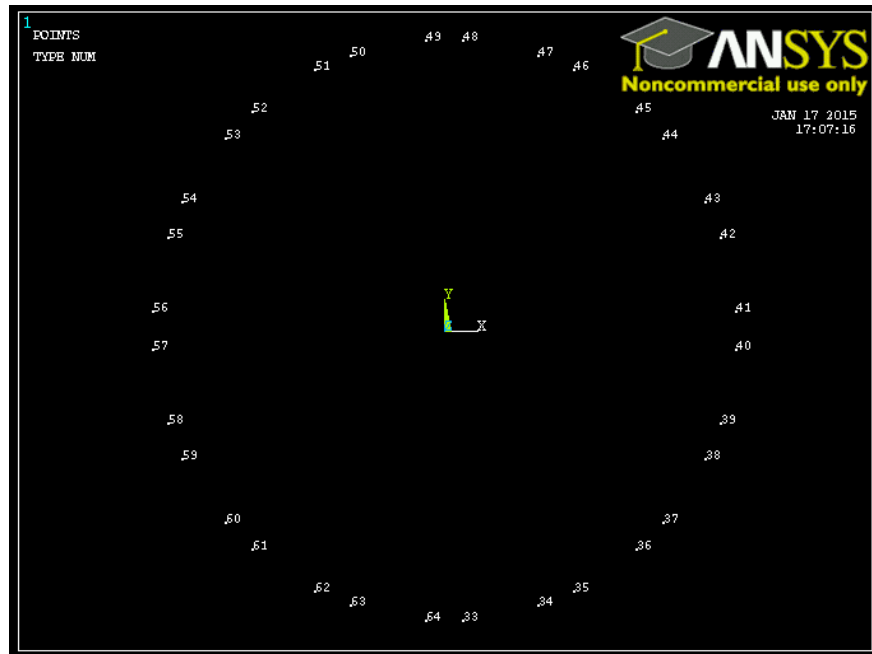
$$x_{36} = R \cdot \sin 41,25^\circ$$

$$x_{40} = R \cdot \sin 86,25^\circ$$

$$y_{36} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 41,25^\circ)^2}$$

$$y_{40} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 86,25^\circ)^2}$$

$$\begin{aligned}
x_{41} &= R \cdot \sin 86,25^\circ & x_{53} &= -R \cdot \sin 48,75^\circ \\
y_{41} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 86,25^\circ)^2} & y_{53} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 48,75^\circ)^2} \\
x_{42} &= R \cdot \sin 71,25^\circ & x_{54} &= -R \cdot \sin 63,75^\circ \\
y_{42} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 71,25^\circ)^2} & y_{54} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 63,75^\circ)^2} \\
x_{43} &= R \cdot \sin 63,75^\circ & x_{55} &= -R \cdot \sin 71,25^\circ \\
y_{43} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 63,75^\circ)^2} & y_{55} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 71,25^\circ)^2} \\
x_{44} &= R \cdot \sin 48,75^\circ & x_{56} &= -R \cdot \sin 86,25^\circ \\
y_{44} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 48,75^\circ)^2} & y_{56} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 86,25^\circ)^2} \\
x_{45} &= R \cdot \sin 41,25^\circ & x_{57} &= -R \cdot \sin 86,25^\circ \\
y_{45} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 41,25^\circ)^2} & y_{57} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 86,25^\circ)^2} \\
x_{46} &= R \cdot \sin 30^\circ & x_{58} &= -R \cdot \sin 71,25^\circ \\
y_{46} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2} & y_{58} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 71,25^\circ)^2} \\
x_{47} &= R \cdot \sin 18,75^\circ & x_{59} &= -R \cdot \sin 63,75^\circ \\
y_{47} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 18,75^\circ)^2} & y_{59} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 63,75^\circ)^2} \\
x_{48} &= R \cdot \sin 3,75^\circ & x_{60} &= -R \cdot \sin 48,75^\circ \\
y_{48} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 3,75^\circ)^2} & y_{60} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 48,75^\circ)^2} \\
x_{49} &= -R \cdot \sin 3,75^\circ & x_{61} &= -R \cdot \sin 41,25^\circ \\
y_{49} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 3,75^\circ)^2} & y_{61} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 41,25^\circ)^2} \\
x_{50} &= -R \cdot \sin 18,75^\circ & x_{62} &= -R \cdot \sin 30^\circ \\
y_{50} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 18,75^\circ)^2} & y_{62} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2} \\
x_{51} &= -R \cdot \sin 30^\circ & x_{63} &= -R \cdot \sin 18,75^\circ \\
y_{51} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 30^\circ)^2} & y_{63} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 18,75^\circ)^2} \\
x_{52} &= -R \cdot \sin 41,25^\circ & x_{64} &= -R \cdot \sin 3,75^\circ \\
y_{52} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 41,25^\circ)^2} & y_{64} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 3,75^\circ)^2}
\end{aligned}$$



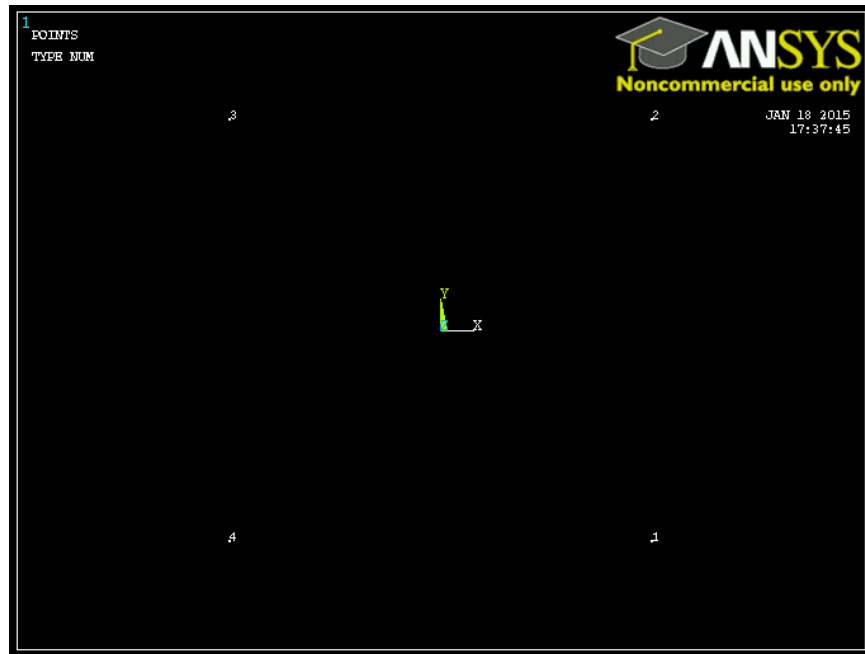
Εικόνα 3.12: Ο δεύτερος κύκλος σημείων για το Armchair (16,16), όπως φαίνεται στο περιβάλλον ANSYS.

➤ Για τη μορφή ZigZag (4,0) :

Η μορφή zigzag (4,0) περιέχει μόνο 4 σημεία ανά κύκλο και είναι ο μικρότερης διαμέτρου νανοσωλήνας άνθρακα που εξετάζεται στην παρούσα εργασία. Ο υπολογισμός των συντεταγμένων των σημείων του έγινε με τον ίδιο τρόπο όπως στην περίπτωση των armchair νανοσωλήνων.

Τα σημεία του πρώτου κύκλου έχουν ως εξής:

$$\begin{aligned}
 x_1 &= R \cdot \sin 45^\circ & x_3 &= -R \cdot \sin 45^\circ \\
 y_1 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 45^\circ)^2} & y_3 &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 45^\circ)^2} \\
 x_2 &= R \cdot \sin 45^\circ & x_4 &= -R \cdot \sin 45^\circ \\
 y_2 &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 45^\circ)^2} & y_4 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 45^\circ)^2}
 \end{aligned}$$



Εικόνα 3.13: Ο πρώτος κύκλος σημείων για το Zigzag (4,0), όπως φαίνεται στο περιβάλλον ANSYS.

Αντίστοιχα για τον δεύτερο κύκλο:

$$x_5 = 0$$

$$y_5 = -R$$

$$x_6 = R$$

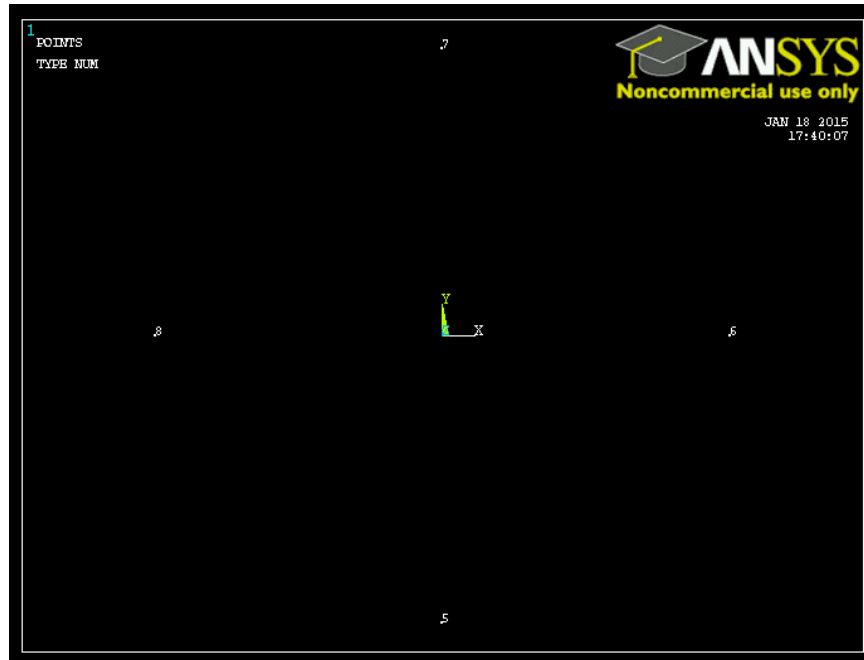
$$y_6 = 0$$

$$x_7 = 0$$

$$y_7 = R$$

$$x_8 = -R$$

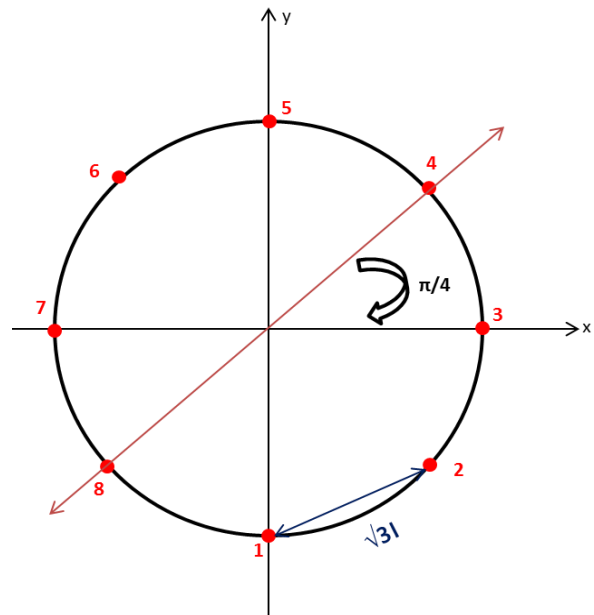
$$y_8 = 0$$



Εικόνα 3.14: Ο δεύτερος κύκλος σημείων για το Zigzag (4,0), όπως φαίνεται στο περιβάλλον ANSYS.

➤ Για τη μορφή ZigZag (8,0) :

Βασιζόμενοι και πάλι στη θεώρηση των Κ.Ι Tserpes, Ρ. Παπανίκος^[15] για μια δομή (8,0) για τους zigzag νανοσωλήνες καταγράψαμε ένα σύστημα σημείων σταθερής περιοδικότητας γύρω από ένα πεπερασμένο πλήθος ομόκεντρων κύκλων με κέντρο τον άξονα συμμετρίας του νανοσωλήνα. Όπως και στην προηγούμενη περίπτωση, έχουμε δυο «είδη» κύκλων, δηλαδή 2 διαφορετικές ταξινομήσεις των σημείων. Σε αντιστοιχία με τη δομή armchair, οι κύκλοι και σε αυτή την περίπτωση επαναλαμβάνονται εναλλάξ, αλλάζοντας βέβαια την αντίστοιχη απόσταση. Για τον **πρώτο τέτοιο κύκλο**, τα σημεία έχουν ως εξής:



Εικόνα 3.15: Σχηματική αναπαράσταση των σημείων του πρώτου κύκλου για τη μορφή (8,0).

$$\begin{aligned}
 x_1 &= 0 & x_5 &= 0 \\
 y_1 &= -R & y_5 &= R \\
 x_2 &= R \cdot \sin 45^\circ & x_6 &= -R \cdot \sin 45^\circ \\
 y_2 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 45^\circ)^2} & y_6 &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 45^\circ)^2} \\
 x_3 &= R & x_7 &= -R \\
 y_3 &= 0 & y_7 &= 0 \\
 x_4 &= R \cdot \sin 45^\circ & x_8 &= -R \cdot \sin 45^\circ \\
 y_4 &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 45^\circ)^2} & y_8 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 45^\circ)^2}
 \end{aligned}$$



Εικόνα 3.16: Ο πρώτος κύκλος σημείων για το Zigzag (8,0), όπως φαίνεται στο περιβάλλον ANSYS.

Τα σημεία του δεύτερου κύκλου:

$$\begin{aligned}
 x_9 &= R \cdot \sin 22,5^\circ & x_{11} &= R \cdot \sin 67,5^\circ \\
 y_9 &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 22,5^\circ)^2} & y_{11} &= \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 67,5^\circ)^2} \\
 x_{10} &= R \cdot \sin 67,5^\circ & \\
 y_{10} &= -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 67,5^\circ)^2} & x_{12} &= R \cdot \sin 22,5^\circ
 \end{aligned}$$

$$y_{12} = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 22,5^\circ)^2}$$

$$x_{13} = -R \cdot \sin 22,5^\circ$$

$$y_{13} = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 22,5^\circ)^2}$$

$$x_{14} = -R \cdot \sin 67,5^\circ$$

$$y_{14} = \sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 67,5^\circ)^2}$$

$$x_{15} = -R \cdot \sin 67,5^\circ$$

$$y_{15} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 67,5^\circ)^2}$$

$$x_{16} = -R \cdot \sin 22,5^\circ$$

$$y_{16} = -\sqrt{R^2 - (R \cdot \sin 22,5^\circ)^2}$$



Εικόνα 3.17: Ο δεύτερος κύκλος σημείων για το Zigzag (8,0), όπως φαίνεται στο περιβάλλον ANSYS.

Με τον ίδιο ακριβώς τρόπο υπολογίζονται και τοποθετούνται στον κώδικα του ANSYS και οι συντεταγμένες των νανοσωλήνων άνθρακα μορφής Zigzag (16,0) και (32,0). Λόγω του μεγάλου πλήθους σημείων και της επαναληψιμότητας των υπολογιστικών μεθόδων δε θεωρείται απαραίτητο να συμπεριληφθούν.

3.4 Κατασκευή μοντέλου

Κατά την κατασκευή του μοντέλου στο λογισμικό ANSYS 13, θεωρήσαμε ότι το χωροδικτύωμα του νανοσωλήνα άνθρακα αποτελείται από κόμβους (οι οποίοι αντιπροσωπεύουν τα άτομα άνθρακα) και δοκούς που ενώνουν τους κόμβους μεταξύ τους (που αντιπροσωπεύουν τους δεσμούς μεταξύ των ατόμων άνθρακα). Η παραδοχή αυτή της ισοδύναμης δοκού, δίνει πολύ ικανοποιητικά αποτελέσματα όπως παρατηρούμε στη βιβλιογραφία, και ως στοιχεία του ANSYS μπορούν να χρησιμοποιηθούν είτε η δοκός 188 (BEAM188) είτε η 189 (BEAM189). Και οι δύο δοκοί είναι κατάλληλες για χρήση σε τρισδιάστατο σύστημα συντεταγμένων με 6 βαθμούς ελευθερίας ^[23].

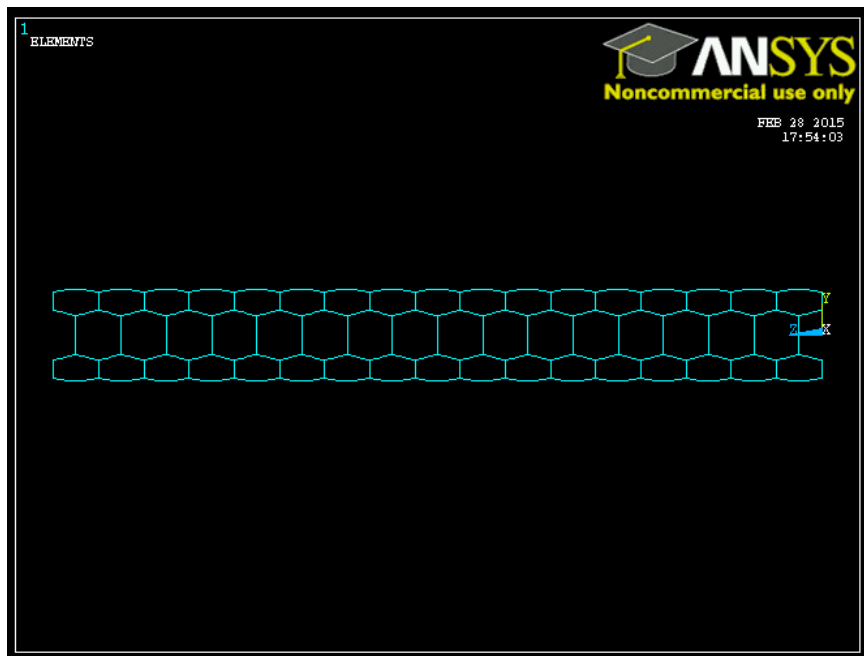
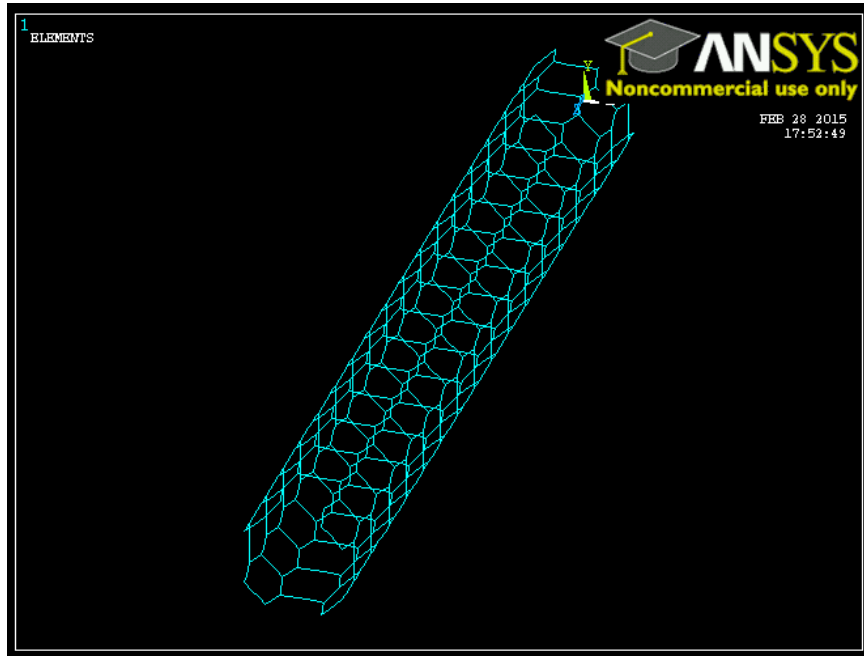
- Το στοιχείο **BEAM188** είναι ένα γραμμικό τρισδιάστατο στοιχείο 2 κόμβων, με 6 βαθμούς ελευθερίας σε κάθε κόμβο. Οι βαθμοί ελευθερίας αυτοί συμπεριλαμβάνουν την οριζόντια παραμόρφωση στη διεύθυνση των αξόνων x, y και z και τη στρέψη γύρω από τους τρεις άξονες αυτούς. Είναι κατάλληλο για την ανάλυση λεπτών έως σχετικά ογκοδών/παχιών κατασκευών. Βασίζεται στη θεωρία δοκών του Timoshenko και περιλαμβάνει φαινόμενα διατμητικής παραμόρφωσης. Η στρέβλωση των διατομών θεωρείται απεριόριστη.
- Το στοιχείο **BEAM189** είναι ένα γραμμικό τρισδιάστατο στοιχείο 3 κόμβων και βασίζεται σε πολυώνυμο 2^{ου} βαθμού, σε αντίθεση με άλλα στοιχεία που βασίζονται σε Χερμιτιανά πολυώνυμα, όπως το BEAM4 για παράδειγμα. Λόγω αυτού, δεν επιτρέπεται να γίνει αντιστάθμιση κατά την εύρεση των κατανεμημένων φορτίων και επιπλέον δεν υποστηρίζονται συνισταμένες δυνάμεις εκτός των ασκουμένων σε κόμβους. Από την άλλη, το BEAM 189 έχει την ίδια στιγμιαία γραμμική κάμψη (*linear bending moment variation*) με το BEAM4, το οποίο χρησιμοποιείται ευρέως στη βιβλιογραφία ^[15]. Το 189 βέβαια προτείνεται να υποστεί λεπτομερές Meshing για να υποστηρίξει τέτοιες φορτίσεις. Γενικά είναι ένα υπολογιστικά αποτελεσματικότερο στοιχείο και με προϋπόθεση την τελειοποίηση του mesh, έχει ιδιότητες υπερσύγκλισης (super convergence).

Παλαιότερα, κατά τις προηγούμενες εκδόσεις της πλατφόρμας ANSYS, είθισται να χρησιμοποιείται το δομικό στοιχείο BEAM4, όπως παρατηρείται στη βιβλιογραφία ^{[2][6]}. Μετά την κατάργηση του BEAM4 στις νεότερες εκδόσεις του ANSYS, προτείνεται η χρήση ενός εκ των δύο προαναφερθέντων δοκών. Οι Prabhu et al ^[30] χρησιμοποίησαν το δομικό στοιχείο COMBIN40, το οποίο βασίζεται στην εξίσωση των ενεργειακών σταθερών k με τη σταθερά νοητών ελατηρίων που ακολουθούν το νόμο του Hooke. Εφόσον στη δική μας περίπτωση όλες οι απαραίτητες μηχανικές ιδιότητες των στοιχείων – δοκών υπολογίστηκαν μέσω των σταθερών k, κάτι τέτοιο δεν είναι απαραίτητο.

Αναλυτικά τώρα θα παρουσιαστούν τα ολοκληρωμένα Meshed μοντέλα για τους διαφόρους νανοσωλήνες άνθρακα που εξετάστηκαν:

➤ Armchair (4,4):

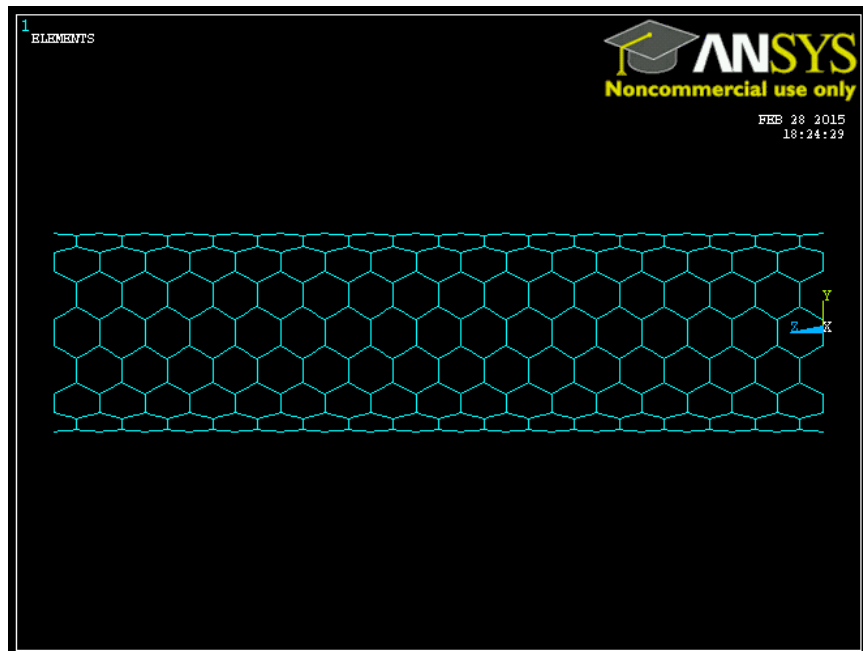
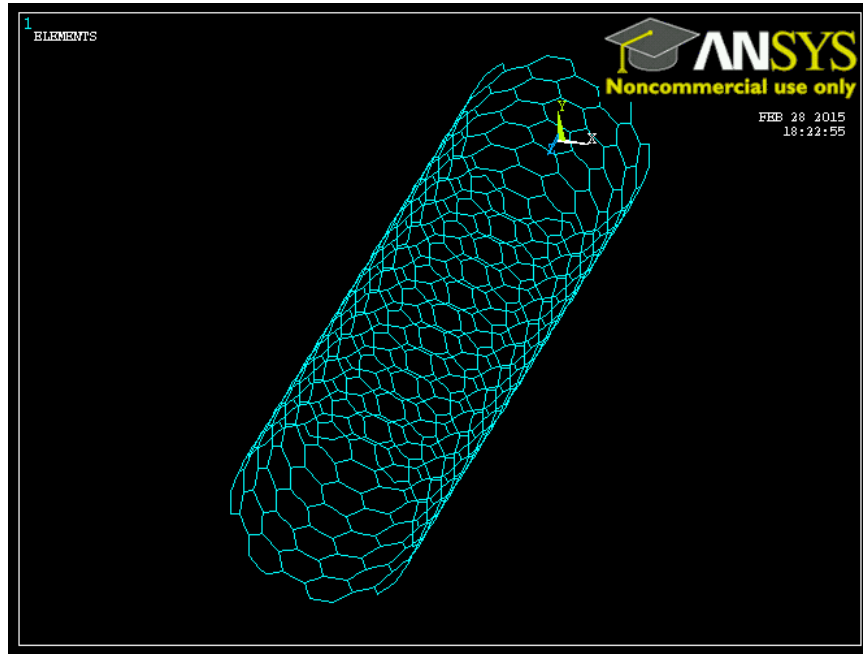
Ο νανοσωλήνας armchair (4,4) αποτελείται από 280 σημεία και υπολογίζεται να έχει ακτίνα ίση με 0,272 nm. Το συνολικό του μήκος H_0 είναι 4,1929 nm, όπως και των άλλων δυο νανοσωλήνων της μορφής armchair που εξετάζονται παρακάτω.



Εικόνες 3.18 και 3.19: Η ολοκληρωμένη δομή για το Armchair (4,4) συμπεριλαμβανομένων των elements, όπως φαίνεται στο περιβάλλον ANSYS.

➤ Armchair (8,8):

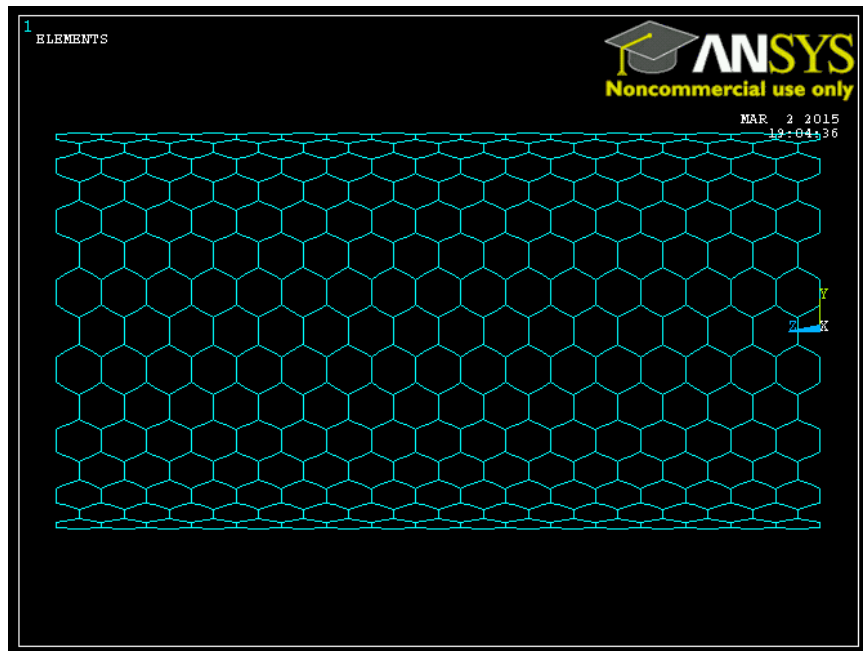
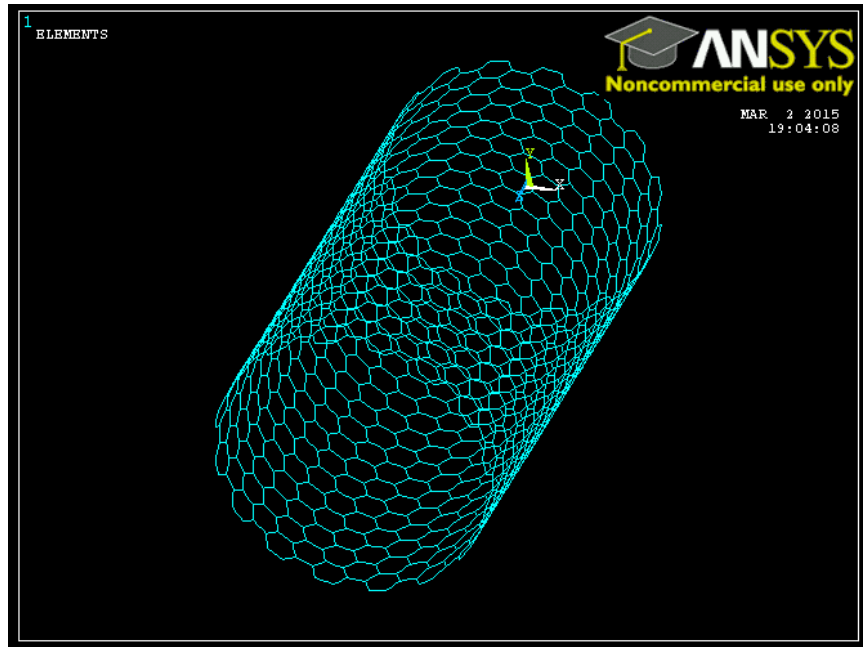
Ο νανωσωλήνας armchair (8,8) αποτελείται από 560 σημεία και υπολογίζεται να έχει ακτίνα ίση με 0,5428 nm.



Εικόνες 3.20 και 3.21: Η ολοκληρωμένη δομή για το Armchair (8,8) συμπεριλαμβανομένων των elements, όπως φαίνεται στο περιβάλλον ANSYS.

➤ Armchair (16,16):

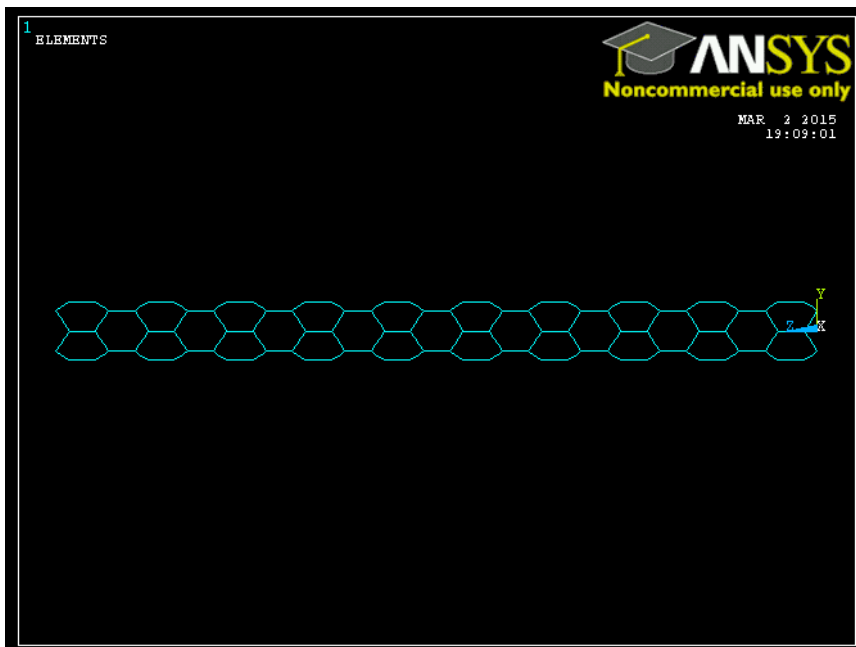
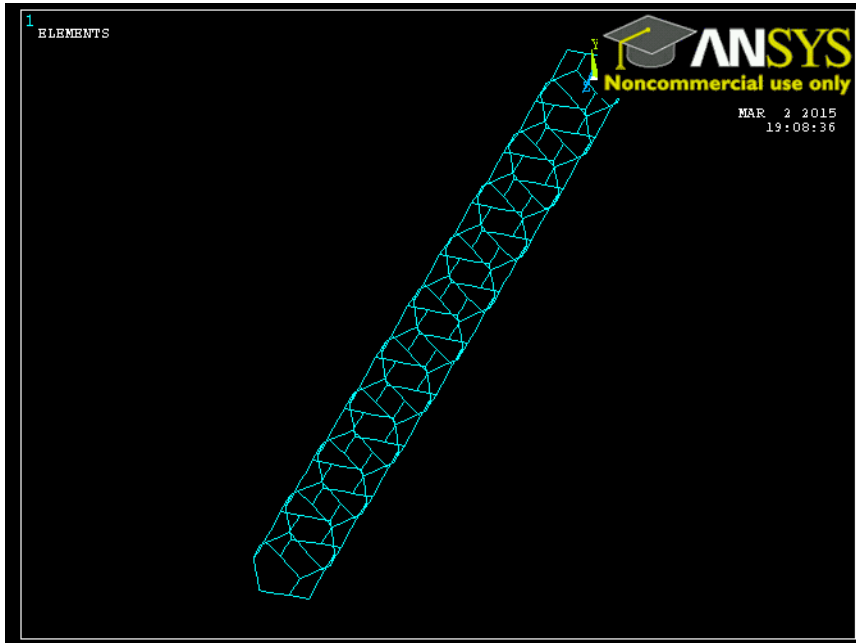
Ο νανοσωλήνας armchair (16,16) αποτελείται από 1120 σημεία και υπολογίζεται να έχει ακτίνα ίση με 1,0856 nm. Το μήκος του είναι ίδιο με των άλλων



Εικόνες 3.22 και 3.23: Η ολοκληρωμένη δομή για το Armchair (16,16) συμπεριλαμβανομένων των elements, όπως φαίνεται στο περιβάλλον ANSYS.

➤ Zigzag (4,0):

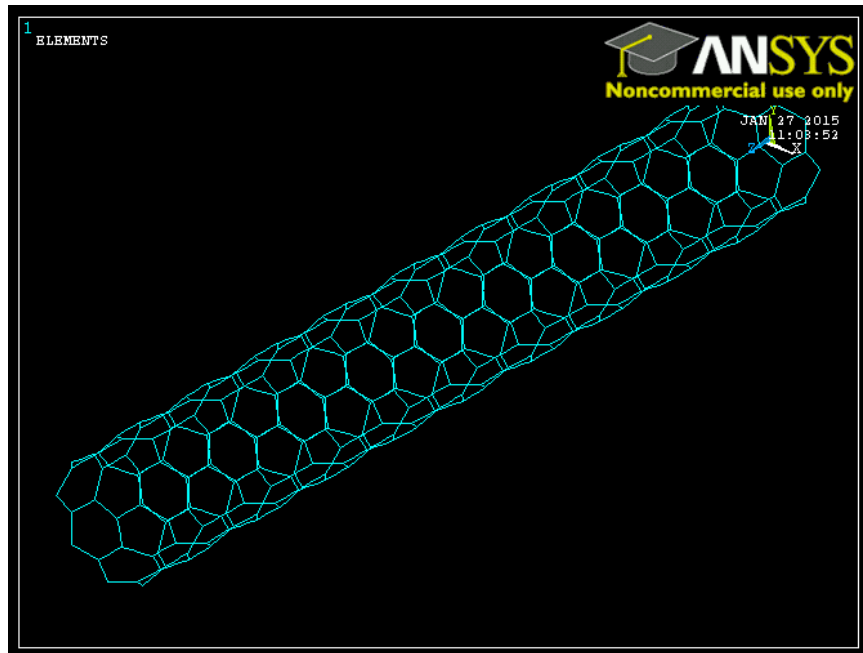
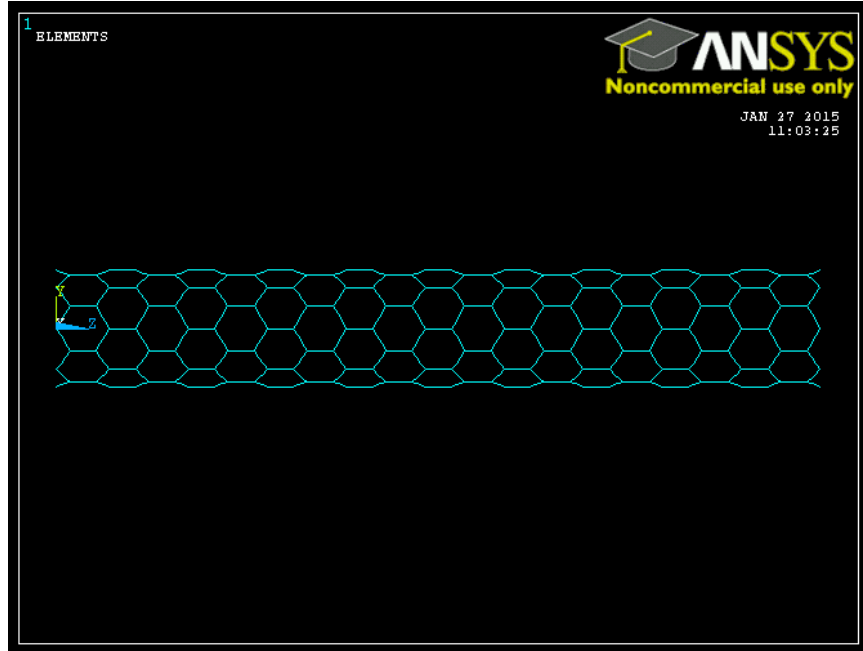
Η δομή zigzag (4,0) αποτελεί και το μικρότερης διαμέτρου νανοσωλήνα που εξετάζουμε, ενώ αποτελείται από 160 σημεία – κόμβους. Όλοι οι νανοσωλήνες της μορφής zigzag επιλέχθηκε να έχουν μήκος $29a_{C-C}$, ίσο δηλαδή με 4,1209nm, όπου 1 το μήκος του δεσμού μεταξύ ανθράκων, το οποίο και δίνει μια ικανοποιητική αναλογία μήκους δεσμού – μήκους νανοσωλήνα.



Εικόνες 3.24 και 3.25: Η ολοκληρωμένη δομή για το Zigzag (4,0) συμπεριλαμβανομένων των elements, όπως φαίνεται στο περιβάλλον ANSYS.

➤ Zigzag (8,0)

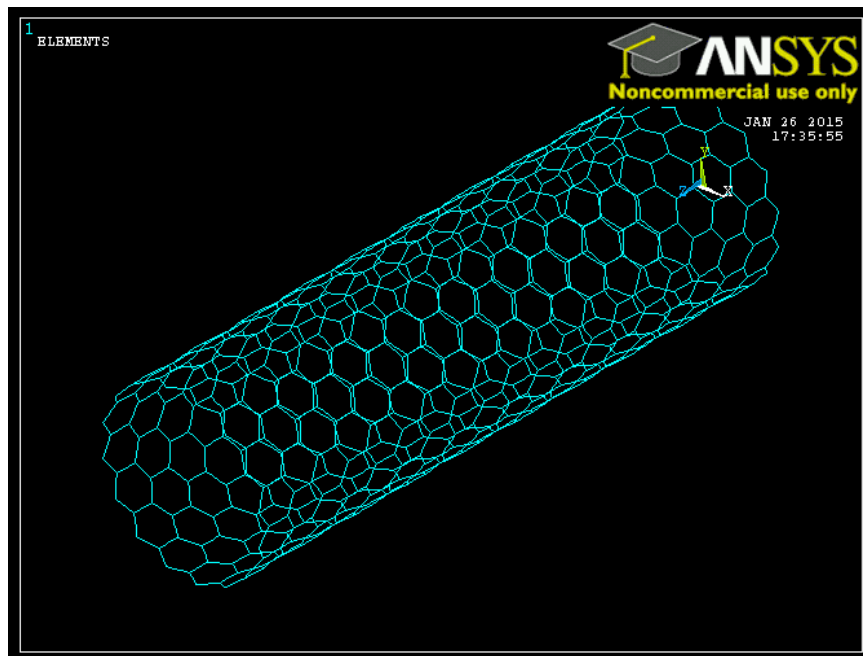
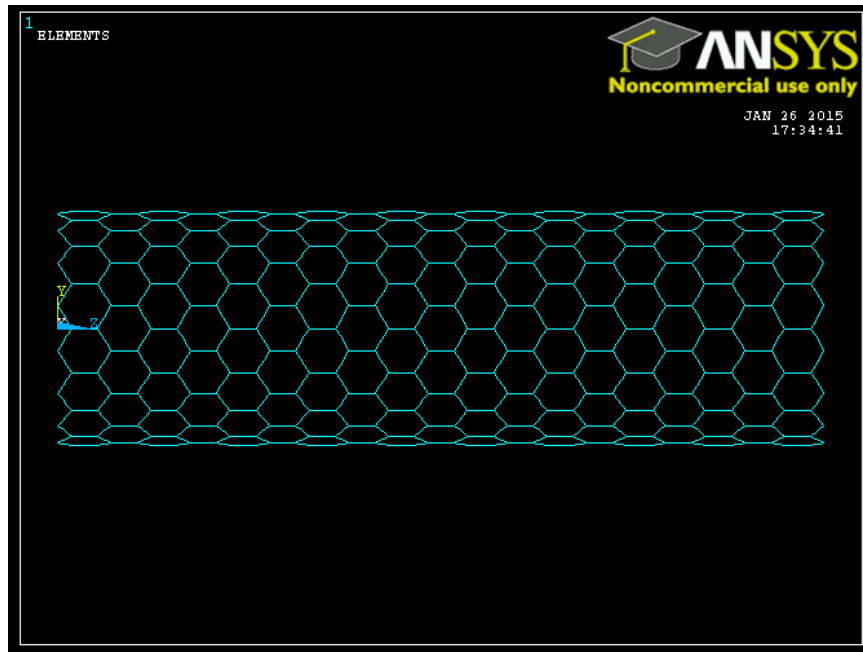
Όταν τοποθετήσουμε και τα 320 σημεία από τα οποία αποτελείται το μοντέλο, αλλά και τα ενώσουμε με τους κατάλληλους δεσμούς, έχουμε την παρακάτω απεικόνιση στο περιβάλλον ANSYS:



Εικόνες 3.26 και 3.27: Η ολοκληρωμένη δομή για το Zigzag (8,0) συμπεριλαμβανομένων των elements, όπως φαίνεται στο περιβάλλον ANSYS.

➤ Zigzag (16,0):

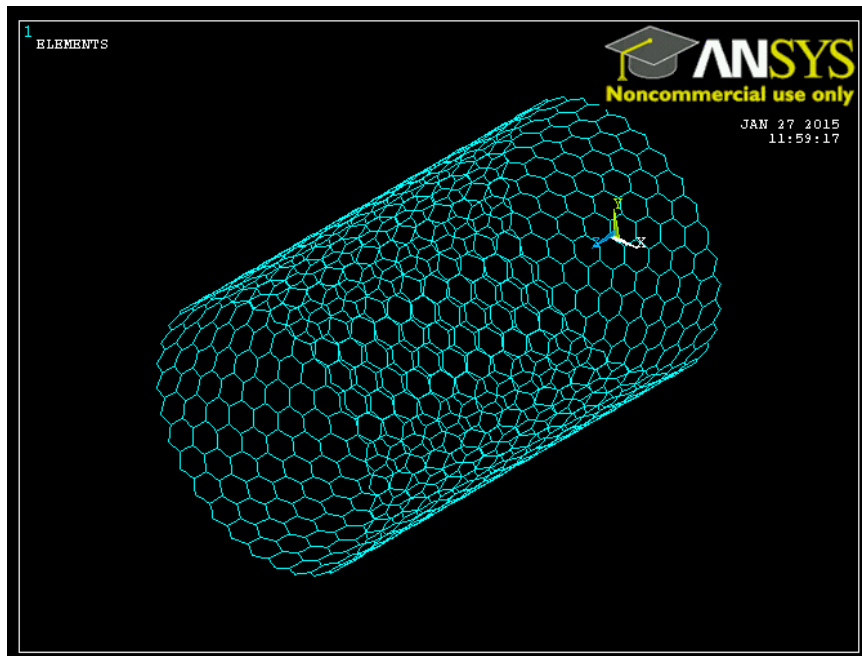
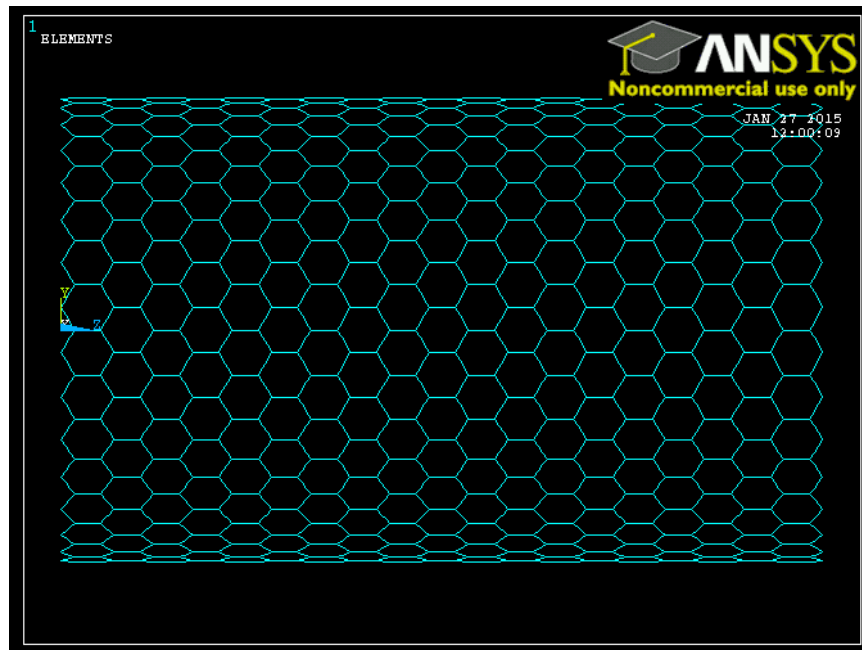
Η μορφή zigzag (16,0) αποτελείται από 640 σημεία και η ακτίνα του νανοσωλήνα υπολογίζεται στα 0.62675 nm.



Εικόνες 3.28 και 3.29: Η ολοκληρωμένη δομή για το Zigzag (16,0) συμπεριλαμβανομένων των elements, όπως φαίνεται στο περιβάλλον ANSYS.

➤ Zigzag (32,0):

Ο νανοσωλήνας άνθρακα (32,0), έχει το ίδιο μήκος με τους δύο προηγούμενους zigzag νανοσωλήνες, αποτελείται όμως από 1280 σημεία.



Εικόνες 3.30 και 3.31: Η ολοκληρωμένη δομή για το Zigzag (32,0) συμπεριλαμβανομένων των elements, όπως φαίνεται στο περιβάλλον ANSYS.

3.5 Βιβλιογραφία

- [1] Rafiee R., Moghadam R.M., On the modeling of carbon nanotubes: A critical review, *Composites: Part B* 56 (2014), p.435-449
- [2] Tserpes K.I., Papanikos P., Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes, *Composites: Part B* 36 (2005), p.468-477
- [3] Odegard G.M., Gates T.S., Nicholson L.M., Wise K.E., Equivalent-continuum modeling of Nano-Structured materials, *Comp. Sc. And Tech.* 62:14 (2002), p.1869-1880
- [4] Li C., Chou T., A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes, *Int. Jour. of Solids & Struct.* 40 (2013), p.2487-2499
- [5] Sakharova N.A., Antunes J.M., Oliveira M.C., Chaparro B.M., Brett C.M.A., Fernandes J.V., Modelling of single-wall carbon nanotubes mechanical behaviour, *WCCM XI – ECCM V – ECFD VI*
- [6] Fan C.W., Huang J.H., Hwu C., Liu Y.Y., A finite element approach for estimation of Young's modulus of single-walled carbon nanotubes, *Third Taiwan-Japan Work. on Mech. and Aer. Engin.* (2005)
- [7] Dresselhaus MS, Dresselhaus G, Saito R (1995) *Physics of carbon nanotubes.* *Carbon* 33:883–891
- [8] Le M.Q., Young's modulus prediction of hexagonal nanosheets and nanotubes based on dimensional analysis and atomistic simulations, *Meccanica* 49 (2014), p.1709-1719
- [9] Jalalahmadi B., Naghdabadi R., Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes and introducing a new wall thickness, *Jour. Of Phys. Conf. Ser.* 61 (2007), p.497-502
- [10] Καρύδης Π.Α., Σημειώσεις του μαθήματος «Υπολογιστικές μέθοδοι και εφαρμογές σε λεπτότοιχες κατασκευές», Σχολή Ναυπηγών Μηχανολόγων Μηχανικών, ΕΜΠ
- [11] Bathe K.J. *Finite Element Procedures.* Prentice Hall Inc, New Jersey, 1996
- [12] Γκότσης Π.Κ, Πεπερασμένα στοιχεία, εκδόσεις Ζήτη
- [13] <http://www.truegrid.com>
- [14] Belytschko T, Xiao S P, Schatz G.C., Ruoff R.S., *Phys. Rev. B* 65 (2002) 235430
- [15] Torrens, I. M. *Interatomic Potentials*, 1972 (Academic Press, New York).
- [16] Brenner, D. W. and Garrison, B. J. Dissociative valence force field potential for silicon. *Phys. Rev. B*, July 1986, 34(2), 1304-1307.
- [17] Le M.Q., Young's modulus prediction of hexagonal nanosheets and nanotubes based on dimensional analysis and atomistic simulations, *Meccanica* 49 (2014), p.1709–1719
- [18] Iijima S, Brabec C, Maiti A, Bernholc J. Structural flexibility of carbon nanotubes. *J Chem Phys*;104: (1996) p.2089–2092
- [19] Cornwell CF, Wille LT. Elastic properties of single-walled carbon nanotubes in compression. *Solid State Commun* 1997;101:555–8
- [20] Yao N, Lordi V. Young's modulus of single-walled carbon nanotubes. *J Appl Phys* 1998;84:1939–43
- [21] Zhao J., Wei N., Fan Z., Jiang J.W., Rabczuk T., The mechanical properties of three types of carbon allotropes, *Nanotechnology* 24(9):095702 (2013)
- [22] Tadmor EB, Phillips R, Ortiz M. Mixed atomistic and continuum models of deformation in solids. *Langmuir* 1996;12(19):4529–34.
- [23] http://mostreal.sk/html/elem_55/chapter4/ES4-189.htm
- [24] Cornell, W.D., Cieplak, P., Bayly, C.I., et al., 1995. A second generation force-field for the simulation of proteins, nucleic-acids, and organic-molecules. *Journal of American Chemical Society* 117, 5179–5197.
- [25] Zhang P, Huang Y, Geubelle PH, Klein PA, Hwang KC. The elastic modulus of single-wall carbon nanotubes: a continuum analysis incorporating interatomic potentials. *Int J Solid Struct* 2002;39:3893–906.

- [26] Wu J, Hwang KC, Huang Y. An atomistic-based finite-deformation shell theory for single-wall carbon nanotubes. *J Mech Phys Solid* 2008;56:279–92.
- [27] Chang T, Gao H. Size-dependent elastic properties of a single-walled carbon nanotube via a molecular mechanics model. *J Mech Phys Solid* 2003;51:1059–74.
- [28] Arroyo M, Belytschko T. Finite crystal elasticity of carbon nanotubes based on the exponential Cauchy–Born rule. *Phys Rev B* 2004;69:115415.
- [29] Cheng Hsien-Chie, Liu Yang-Lun, Hsu Yu-Chen, Chen Wen-Hwa. Atomistic-continuum modeling for mechanical properties of single-walled carbon nanotubes. *Int J Solids Struct* 2009;46:1695–704.
- [30] Prabhu S., Bhaumik S., Vinayagam B.K., Finite element modeling and analysis of zigzag and armchair type single wall carbon nanotube, *Journal of Mech. Eng. Res.* 48 (2012), p.260-266

4 Επίλυση και επεξεργασία αποτελεσμάτων

Το μοντέλο αφού κατασκευάστηκε επιλύθηκε με τη δημιουργία και εφαρμογή κατάλληλου κώδικα επίλυσης. Η ανάγνωση αλλά και αξιοποίηση των αποτελεσμάτων της επίλυσης έγινε στο επόμενο στάδιο, αυτό της μετεπεξεργασίας (post processing). Το συγκεκριμένο κεφάλαιο, εκτός από τον υπολογισμό του μέτρου ελαστικότητας για κάθε είδος ναοσωλήνα άνθρακα, περιέχει δυο παραμετρικές αναλύσεις: Την εξάρτηση του μέτρου ελαστικότητας τόσο από τη διάμετρο των ναοσωλήνων άνθρακα όσο και από τη διακύμανση του λόγου Poisson. Παρατίθεται ακόμα και μια βιβλιογραφική αναφορά στην εξάρτηση του μέτρου ελαστικότητας από το πάχος τοιχώματος του ναοσωλήνα άνθρακα.

4.1 Επίλυση και Post processing

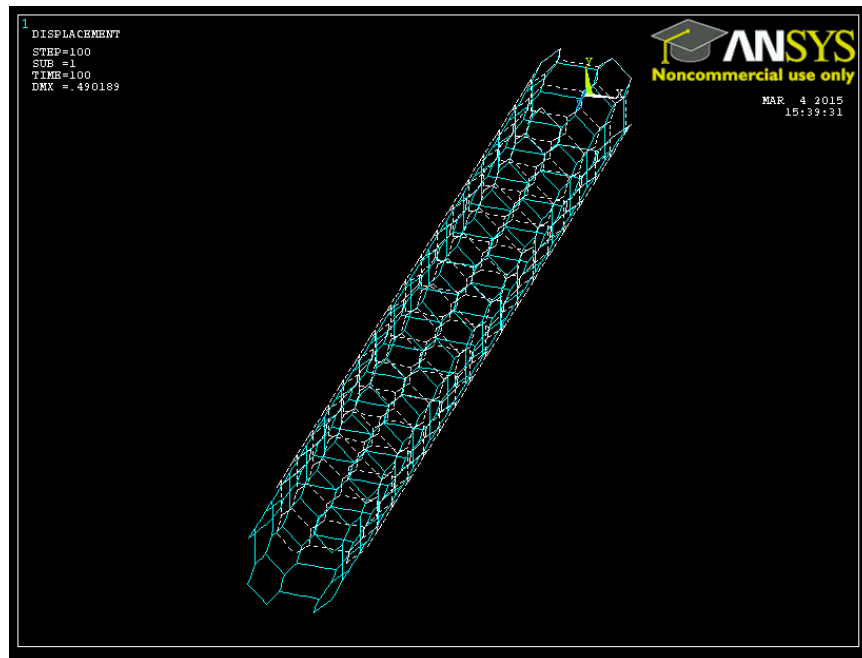
Όπως έχει προαναφερθεί, κατασκευάστηκε ένας κώδικας εντολών για την επίλυση των μοντέλων ναοσωλήνα άνθρακα, καθώς και ένας αντίστοιχος κώδικας επεξεργασίας και εκτύπωσης των αποτελεσμάτων. Πιο συγκεκριμένα για κάθε ναοσωλήνα, τα βήματα που ακολουθήθηκαν κατά την επίλυση ήταν τα εξής:

- i) Ορισμός 6 βαθμών ελευθερίας για τα δομικά στοιχεία : Μετατόπιση και περιστροφή και στους 3 άξονες X,Y,Z.
- ii) Πάκτωση του ενός άκρου του ναοσωλήνα με χρήση οριακών συνθηκών.
- iii) Άσκηση μετατόπισης στο ελεύθερο άκρο του ναοσωλήνα με τη χρήση κατάλληλης array σε $N=100$ επαναλήψεις, για βήμα $A=0,005$.
- iv) Ορισμός εξόδου δεδομένων. Τα δεδομένα εξόδου είναι η αντίστοιχη δύναμη F που ασκείται στους ελεύθερους κόμβους όταν αυτοί υπόκεινται σε μετατόπιση (displacement control analysis).

Μετά την παραλαβή των αποτελεσμάτων δύναμης, τα οποία θα αξιοποιηθούν στο επόμενο υποκεφάλαιο, με χρήση του μενού Post processing του ANSYS αποκτήθηκε μια σαφής ποιοτική εικόνα της μηχανικής συμπεριφοράς του μοντελοποιημένου ναοσωλήνα, όπως θα φανεί στις επόμενες εικόνες.

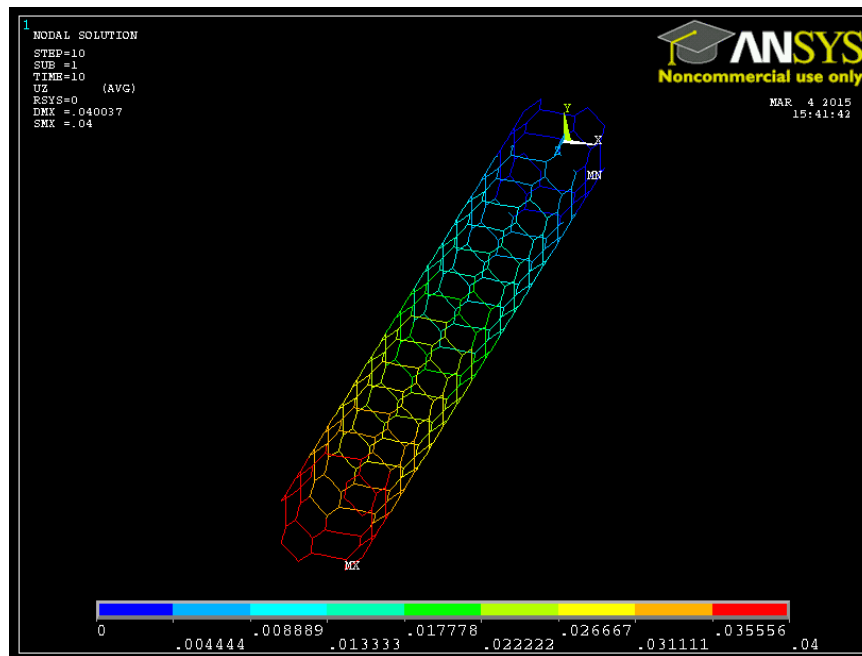
♦ Παραμόρφωση χωροδικτύωματος

Όπως αναμενόταν, το χωροδικτύωμα παραμορφώνεται κυρίως στη διεύθυνση κατά την οποία ασκείται η επιμήκυνση ΔH , δηλαδή στον άξονα Z. Βέβαια μικρότερη παραμόρφωση συμβαίνει και κατά τις διευθύνσεις Y και X, γεγονός που οφείλεται στην σύνδεση κάθε κόμβου με 3 διαφορετικές δοκού. Ποιοτικά, η συνολική παραμόρφωση φαίνεται στην Εικόνα 4.1.



Εικόνα 4.1 : Παραμόρφωση χωροδικτυώματος για το armchair (4,4) για $N=100$

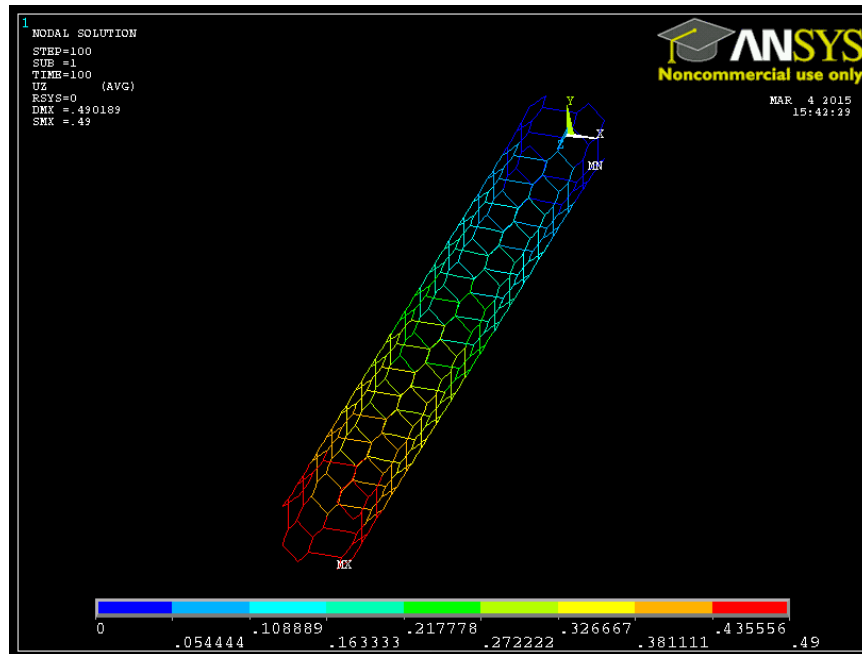
- ♦ Μετατόπιση κατά τον άξονα Z



Εικόνα 4. 2: Επίλυση κόμβων με βάση τους βαθμούς ελευθερίας για το armchair (4,4) – Μετατόπιση κατά Z, $N=10$

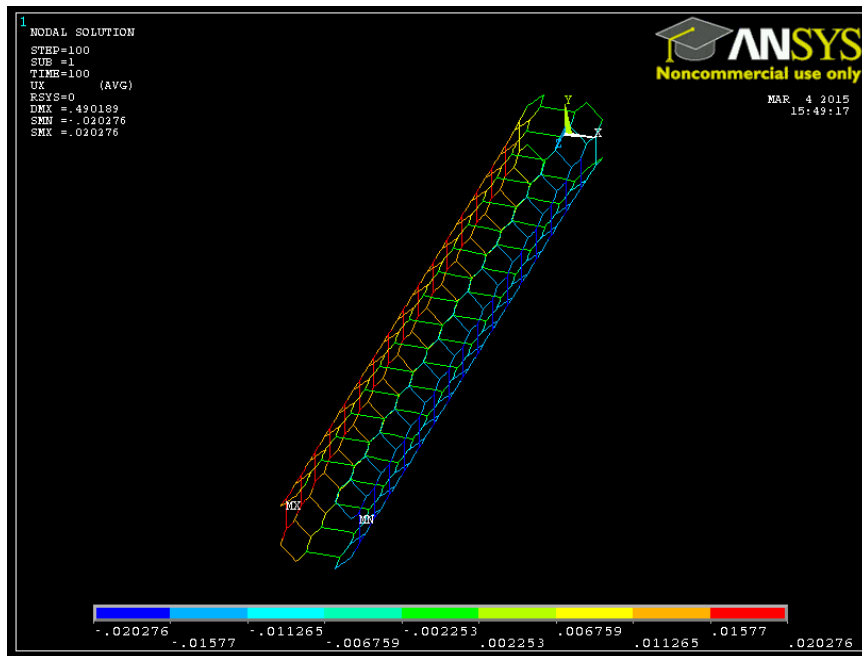
Η μετατόπιση Z, δηλαδή η μετατόπιση στον άξονα που ασκείται η επιμήκυνση και η αντίστοιχη δύναμη. Είναι όπως αναμενόταν μεγαλύτερη στο κάτω άκρο, όπου αι ασκείται η ΔH και σταδιακά μικρότερη μέχρι μηδενισμού στο άνω πακτωμένο άκρο. Βρισκόμαστε στα πρώτα στάδια της προσομοίωσης γι' αυτό

και η μεγαλύτερη τιμή της (κόκκινο τμήμα) είναι ακόμα σχετικά μικρή. Στην επόμενη εικόνα, στο τελευταίο βήμα της επίλυσης έχει φτάσει την τελική τιμή της.



Εικόνα 4.3 : Επίλυση κόμβων με βάση τους βαθμούς ελευθερίας για το armchair (4.4) – Μετατόπιση κατά Z, N=100

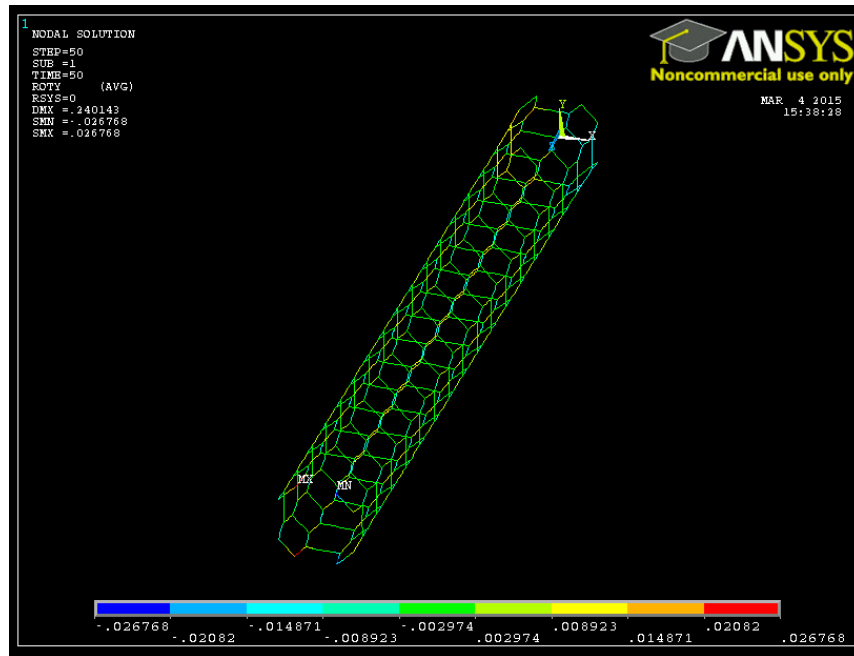
- ♦ Μετατόπιση κατά τον άξονα X



Εικόνα 4.4 : Επίλυση κόμβων με βάση τους βαθμούς ελευθερίας για το armchair (4.4)– Μετατόπιση κατά X, N=100

Όπως προαναφέρθηκε η μετατόπιση στους άλλους 2 άξονες δεν είναι μηδενική, λόγω σύνδεσης κάθε κόμβου με 3 elements.

- ♦ Στροφή κατά τον άξονα Y



Εικόνα 4.5 : Επίλυση κόμβων με βάση τους βαθμούς ελευθερίας για το armchair (4,4)– Στροφή κατά Y, N=50

4.2 Αποτελέσματα για το μέτρο ελαστικότητας

Ελαστικότητα είναι ο τύπος συμπεριφοράς κατά την οποία ένα παραμορφωμένο σώμα επιστρέφει στην αρχική του κατάσταση όταν η ασκούμενη τάση που προκαλεί την παραμόρφωση απομακρυνθεί/αποσυρθεί. Έτσι, η ύπαρξη της τάσης είναι απαραίτητη για να προκαλέσει και να διατηρήσει την παραμόρφωση. Η απλούστερη συμπεριφορά λαμβάνεται όταν η τάση είναι ανάλογη με την παραμόρφωση. Αυτή η απλή συσχέτιση είναι ο νόμος του Χούκ (Hooke’s law). Για παράδειγμα σε απλό εφελκυσμό η εφελκυστική τάση είναι: ^[12]

$$\sigma E = E \frac{L-L_0}{L_0} \quad (4.1)$$

Όπου E είναι το μέτρο ελαστικότητας του Young (Young’s modulus).

Το μέτρο ελαστικότητας κατά Young ενός υλικού επομένως, είναι ο λόγος της κανονικής τάσης προς την κανονική παραμόρφωση, όπως αυτά υπολογίστηκαν από μονοαξονικές δοκιμές εφελκυσμού.

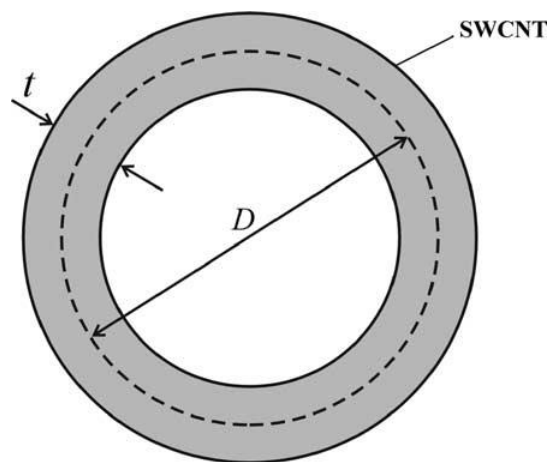
Για τα SWCNTs που εξετάζουμε το μέτρο ελαστικότητας, συμβολιζόμενο από εδώ και πέρα ως Y , θα υπολογιστεί βάση της επόμενης σχέσης:

$$Y = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{\frac{F}{A_0}}{\frac{\Delta H}{H_0}} \quad (4.2)$$

Όπου F είναι η συνολική ασκούμενη δύναμη, A_0 η επιφάνεια/διατομή στην οποία ασκείται η δύναμη, H_0 το αρχικό μήκος του δοκιμίου και ΔH η επιμήκυνση. Το A_0 είναι ίσο με $\pi D t$ όπου D είναι η μέση διάμετρος.

Είδαμε ότι χεδιάζοντας τη διαδικασία επίλυσης του ANSYS, ακολουθήσαμε μια displacement control προσέγγιση, δηλαδή ουσιαστικά ζητάμε μια σταδιακή επιμήκυνση του κάτω, μη πακτωμένου άκρου του νανοσωλήνα ΔH και το πρόγραμμα υπολογίζει την αντίστοιχη δύναμη που θα απαιτούταν για να επιτευχθεί η επιμήκυνση αυτή. Η επίλυση γίνεται για 100 βήματα και τελικά λαμβάνουμε τις αντίστοιχες τιμές δύναμης F για κάθε ΔH . Με γνωστά τα H_0 και A_0 , κατασκευάζουμε διαγράμματα ΔH - F για κάθε περίπτωση νανοσωλήνα και από την κλίση του κάθε γραφήματος, με χρήση του τύπου (4.2), υπολογίζουμε το μέτρο ελαστικότητας κατά Young, Y .

Τα αποτελέσματα για το μέτρο ελαστικότητας για τα είδη νανοσωλήνων που εξετάστηκαν φαίνονται στον παρακάτω πίνακα:



Εικόνα 4.6 :Σχηματική αναπαράσταση του πάχους τοιχώματος t και της διαμέτρου D της διατομής ενός νανοσωλήνα άνθρακα

Πίνακας 4.1. Υπολογισμοί μέτρου ελαστικότητας για όλα τα είδη νανοσωληνων με πάχος τοιχώματος 0,147 nm

<i>Είδος νανοσωλήνα</i>	<i>Μέτρο Ελαστικότητας</i>
(4,4)	2048.66
(8,8)	1146.61
(16,16)	1177.47
(4,0)	1885.08
(8,0)	1919.90
(16,0)	1959.72
(32,0)	1990.28

4.3 Παραμετρικές αναλύσεις

4.3.1 Σχέση ακτίνας – μέτρου ελαστικότητας

Τα αποτελέσματα για το μέτρο ελαστικότητας των 7 περιπτώσεων νανοσωλήνων άνθρακα φαίνονται στους δύο παρακάτω πίνακες. Φαίνεται ακόμα η ακτίνα R και η επιφάνεια της διατομής A_0 . Για τους Zigzag νανοσωλήνες έχουμε, για πάχος τοιχώματος $t = 0,147$ nm:

Πίνακας 4.2. Μέτρο ελαστικότητας για τους zigzag νανοσωλήνες με πάχος τοιχώματος 0,147 nm

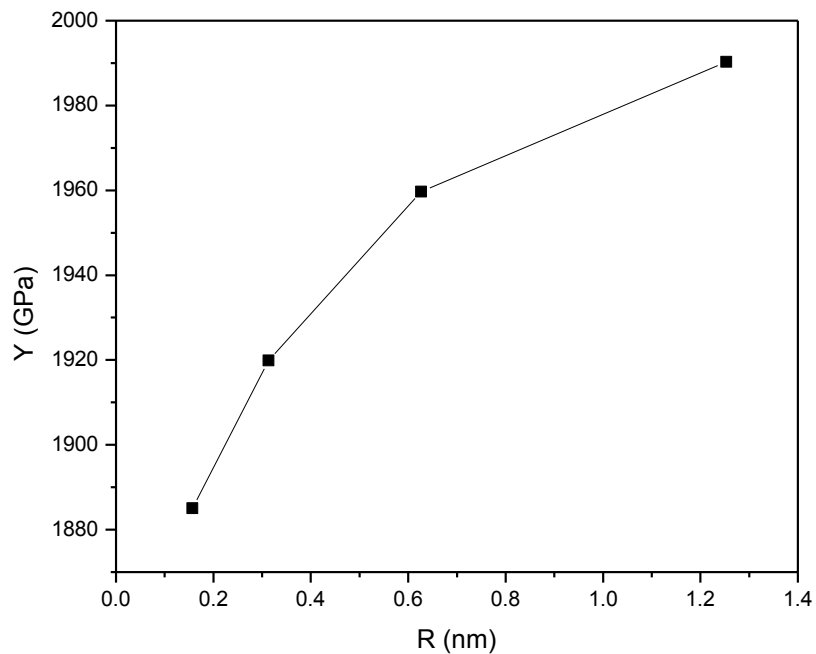
(n,m)	R (nm)	A_0 (nm ²)	Y (GPa)
(4,0)	0.1567	0.1447	1885.08
(8,0)	0.3134	0.2895	1919.90
(16,0)	0.6267	0.5788	1959.72
(32,0)	1.2535	1.1578	1990.28

Και αντίστοιχα για τους Armchair νανοσωλήνες έχουμε:

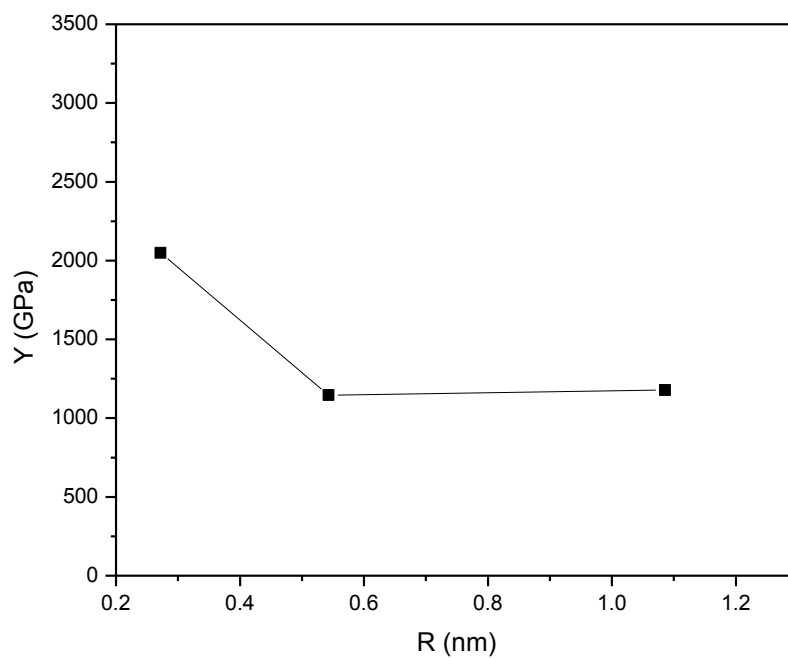
Πίνακας 4.3. Μέτρο ελαστικότητας για τους armchair νανοσωλήνες με πάχος τοιχώματος 0,147 nm

(n,m)	R (nm)	A_0 (nm ²)	Y (GPa)
(4,4)	0.272	0.2512	2048.66
(8,8)	0.5428	0.5013	1146.61
(16,16)	1.0856	1.0027	1177.47

Διάγραμμα 4.1. Μέτρο ελαστικότητας Y (GPa) συναρτήσει της ακτίνας R (nm) για τους zigzag νανοσωλήνες με πάχος τοιχώματος 0,147 nm.



Διάγραμμα 4.2. Μέτρο ελαστικότητας Y (GPa) συναρτήσει της ακτίνας R (nm) για τους armchair νανοσωλήνες με πάχος τοιχώματος 0,147 nm

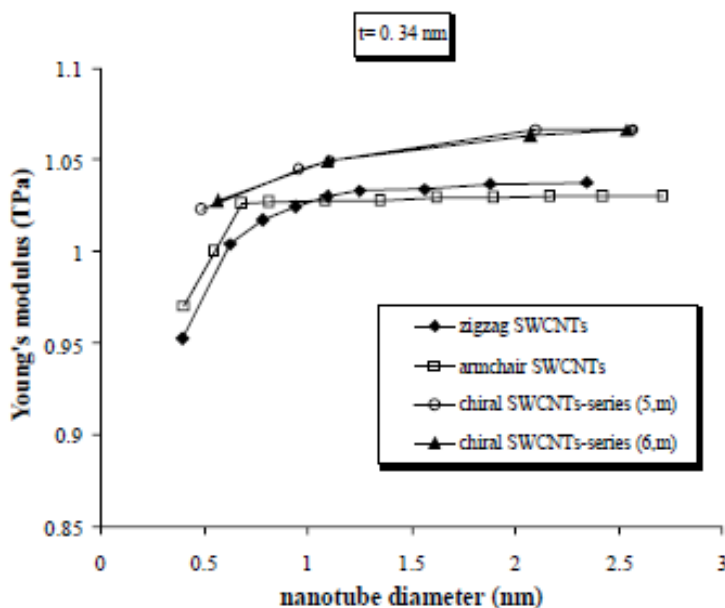


Στα παραπάνω διαγράμματα φαίνονται οι τιμές του μέτρου ελαστικότητας συναρτήσει της ακτίνας των νανοσωλήνων άνθρακα.

- ♦ Παρατηρούμε ότι για τη μορφή **Zigzag**, υπάρχει μια τάση αύξησης του μέτρου ελαστικότητας αυξανόμενης της διαμέτρου του νανοσωλήνα. Κάτι τέτοιο ήταν αναμενόμενο αφού η τάση αυτή κυριαρχεί στη βιβλιογραφία. Μια πιθανή εξήγηση της αυξητικής τάσης του μέτρου ελαστικότητας, η οποία βέβαια δεν ακολουθεί το ίδιο μοτίβο για όλα τα είδη των CNTs, είναι σύμφωνα με τους Li & Chou ^[3] είναι η επίδραση της **κυρτότητας** (curvature) του νανοσωλήνα. Πιο συγκεκριμένα, όσο μικρότερη διάμετρο έχει ένας νανοσωλήνας, τόσο μεγαλύτερη είναι η κυρτότητά του, η οποία με τη σειρά της προκαλεί μεγαλύτερη παραμόρφωση στους δεσμούς μεταξύ των ανθράκων (elements του μοντέλου) άρα και μεγαλύτερη επιμήκυνση ΔH του νανοσωλήνα. Αυξανόμενης της διαμέτρου, η επίδραση αυτή της κυρτότητας μειώνεται, και το μέτρο ελαστικότητας του νανοσωλήνα προσεγγίζει αυτό του φύλλου γραφενίου, το οποίο και δεν έχει καμία κυρτότητα. Οι Tserpes et al ^[1] παρατήρησαν ότι για τους Zigzag μονοτοιχωματικούς νανοσωλήνες άνθρακα, για ένα εύρος διαμέτρων μεταξύ 0,391 και 2,35 nm τα αντίστοιχα μέτρα ελαστικότητας κινούνται σε ένα εύρος 0,952 με 1,038 TPa. Επιπλέον, παρατηρείται τόσο στο προηγούμενο όσο και στα επόμενα γραφήματα αλλά και στην αντίστοιχη βιβλιογραφία του κεφαλαίου, ότι για μεγαλύτερες διαμέτρους, υπάρχει μια τάση σταθεροποίησης των τιμών του μέτρου ελαστικότητας, δηλαδή οι διαφορές αρχίζουν και εξομαλύνονται
- ♦ Όσον αφορά τους **armchair** CNTs, το πρώτο και κυριότερο που παρατηρούμε είναι μια σημαντική απόκλιση της τιμής του νανοσωλήνα μικρής ακτίνας, η οποία δημιουργεί μια σχέση σχεδόν αντίστροφη από αυτή που αναμενόταν για τα μέτρα ελαστικότητας. Σύμφωνα και με την εξήγηση του προηγούμενου διαγράμματος, θα έπρεπε αυξανόμενης της ακτίνας το μέτρο ελαστικότητας να αυξάνεται. Στην περίπτωση αυτή όμως, και συγκεκριμένα για τη μορφή (4,4), το μέτρο ελαστικότητας λαμβάνει μια ανεξήγητα υψηλή τιμή, ακολουθεί μείωση για τον (8,8) και έπειτα μια αναμενόμενη μικρή αύξηση για τον (16,16). Γενικότερα στη βιβλιογραφία είναι δύσκολο να βρεθούν αποτελέσματα για νανοσωλήνες άνθρακα μικρής διαμέτρου, αφού συνήθως η ακτίνα αυτών που εξετάζονται είναι μεταξύ 0.5-1 nm. Σύμφωνα όμως με τους Dominguez et al (2014) ^[16], η τάση αυτή δεν οφείλεται σε κάποιο υπολογιστικό ή σχεδιαστικό λάθος αλλά στην ίδια τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων. Οι Dominguez et al σύγκριναν υπολογισμούς για το μέτρο ελαστικότητας νανοσωλήνων άνθρακα μονού τοιχώματος μέσω δύο διαφορετικών μεθόδων: Της μεθόδου ανάλυσης με πεπερασμένα στοιχεία (Finite element analysis - **FEA**), η οποία και χρησιμοποιείται στην παρούσα εργασία, και της θεωρίας συναρτησιοειδούς πυκνότητας (Density functional theory - **DFT**). Έδειξαν ότι κατά την χρήση της FEA τα αποτελέσματα που έλαβαν για τους νανοσωλήνες με μικρή σχετικά ακτίνα, μικρότερη των 0,4 nm, δεν είναι απόλυτα αξιόπιστα για μικρού μήκους νανοσωλήνες (με μήκος $l < 7$ nm). Αναλυτικότερα, οι μη δεσμικές αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονικής φύσεως (δυνάμεις Van der Waals) μεταξύ των ατόμων άνθρακα δε μπορούν να ληφθούν υπόψιν κατά την FEA, παίζουν όμως σημαντικό ρόλο στη μηχανική συμπεριφορά του νανοσωλήνα, ειδικά όταν για μικρές διαμέτρους τα άτομα βρίσκονται σε μικρή απόσταση μεταξύ τους. Αν βέβαια το μήκος του νανοσωλήνα ξεπεράσει τα 7nm η απόκλιση αυτή σταματά να γίνεται αισθητή καθώς το μέτρο ελαστικότητας αρχίζει να ανεξαρτητοποιείται από τη διάμετρό του. Αντίθετα, η μέθοδος DFT παρέχει πιο αξιόπιστα αποτελέσματα για τους νανοσωλήνες μικρότερης διαμέτρου καθώς λαμβάνει υπόψιν τέτοιες αλληλεπιδράσεις και δεν εξαρτάται μόνο από την καθαρά γεωμετρική θεώρηση του νανοσωλήνα όπως η FEA.

Επιπλέον, παρατηρείται τόσο στα προηγούμενα όσο και στα επόμενα γραφήματα αλλά και στην αντίστοιχη βιβλιογραφία του κεφαλαίου, ότι για μεγαλύτερες διαμέτρους, υπάρχει μια τάση σταθεροποίησης των τιμών του μέτρου ελαστικότητας, δηλαδή οι διαφορές αρχίζουν και εξομαλύνονται. Παρατίθεται ένα σχετικό διάγραμμα από τη δουλειά των Tserpes et al ^[1] όπου η σταθεροποίηση αυτή για μεγάλες τιμές ακτίνας (στην προκειμένη περίπτωση διάμετρου) γίνεται ξεκάθαρη:

Διάγραμμα 4.3. (Tserpes et al. (2005) ^[1]) Μέτρο ελαστικότητας Y (GPa) συναρτήσει της διαμέτρου (nm) για διάφορα είδη νανοσωλήνων, με πάχος τοιχώματος 0,34nm.



Το φαινόμενο αυτό επιβεβαιώνεται και από τους Jin και Juan ^[18], ο οποίοι έδειξαν για SWCNTs με διαμέτρους στο εύρος 0,814-2,714nm, ότι το μέτρο ελαστικότητας παραμένει πρακτικά σταθερό.

Σε αυτό το σημείο παρατίθεται ένας πίνακας με ενδεικτικές τιμές για τα μέτρα ελαστικότητας μονοτοιχωματικών νανοσωλήνων άνθρακα όπως αυτές εμφανίζονται στη βιβλιογραφία. Όλες οι τιμές προέρχονται από υπολογισμούς που έγιναν με τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων:

Πίνακας 4.4 : Μέτρο ελαστικότητας για SWCNTs στη βιβλιογραφία με χρήση της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων.

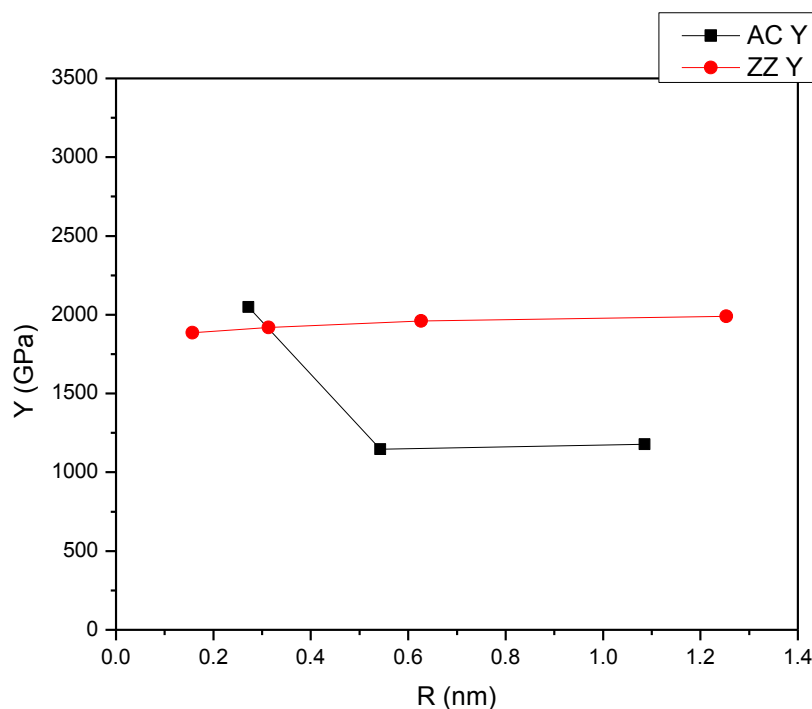
Είδος SWCNT	R (nm)	Y (TPa)	t (nm)	Αναφορά	Είδος στοιχείου
AC (3,3)	0.2035	1.0313	0.1470	Fan et al (2005) [8]	BEAM4
AC (6,6)	0.4070	1.0346	0.1470	Fan et al (2005) [8]	BEAM4
AC (7,7)	0.9519	3.2960	0.1296	Jalalahmadi et al (2007) [7]	
AC (8,8)		2.3770	0.1470	Tserpes et al (2005) [1]	BEAM4
AC	1.0000	3.2560	0.1470	Prabhu et al (2012) [5]	COMBIN40
ZZ (5,0)	0.1958	0.9903	0.1470	Fan et al (2005) [8]	BEAM4
ZZ (10,0)	0.3915	1.0175	0.1470	Fan et al (2005) [8]	BEAM4
ZZ (12,0)	0.9422	3.3120	0.1296	Jalalahmadi et al (2007) [7]	
ZZ (25,0)	0.9795	1.0422	0.1470	Fan et al (2005) [8]	BEAM4

Όπου AC συμβολίζονται οι armchair CNTs και ZZ οι zigzag.

Παρατηρούμε μια σχετικά μεγάλη διασπορά τιμών για τους SWCNTs στη βιβλιογραφία. Αυτό το οφείλεται στις διαφορές μεταξύ των προσεγγίσεων που χρησιμοποιούνται οι οποίες και συχνά εμπεριέχουν πολλές παραμέτρους, όπως διαφορετικές ενεργειακές σταθερές, γεωμετρικά χαρακτηριστικά (μήκος και πάχος νανοσωλήνα) αλλά και διαφορετικό είδος δομικών στοιχείων (elements) κατά τη μοντελοποίηση. Το στοιχείο BEAM4, που χρησιμοποιείται εκτενώς στην όχι τόσο πρόσφατη βιβλιογραφία για παράδειγμα, έχει πλέον καταργηθεί από τις νεότερες εκδόσεις του ANSYS.

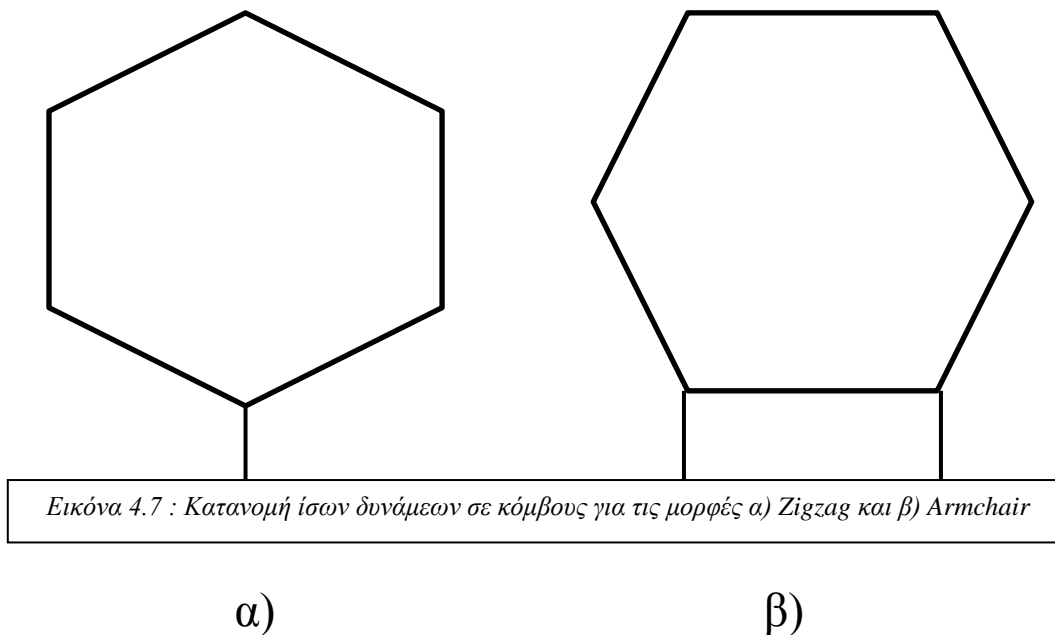
Η διασπορά αυτή γίνεται ακόμα πιο αισθητή αν συμπεριλάβουμε πειραματικές μελέτες που αφορούν τη μελέτη μηχανικών ιδιοτήτων CNTs. Κάτι τέτοιο είναι φυσικά αναμενόμενο γιατί κατά τη διεξαγωγή πειραματικών μετρήσεων, οι μεταβλητές που επηρεάζουν τη μέτρηση είναι πολύ περισσότερες από ότι σε μια θεωρητική μελέτη. Αναφορικά, οι Krishnam et al. (1998) ^[14] χρησιμοποίησαν τη μέθοδο TEM για να μελετήσουν τη δόνηση ενός CNT και υπολόγισαν το μέτρο ελαστικότητας στο εύρος 0,9-1,7 TPa. Οι Wong et al. (1997) ^[15] υπολόγισαν αντίστοιχα το μέτρο ελαστικότητας στο 1,28 TPa χρησιμοποιώντας AFM. Οι Lourie και Wagner (1998) ^[13], χρησιμοποιώντας φασματοσκοπία Raman, υπολόγισαν αντίστοιχα το μέτρο ελαστικότητας για SWCNTs μέσα στο εύρος τιμών 2,8-3,6 TPa.

Διάγραμμα 4.4 : Συνδυαστική απεικόνιση ακτίνας – μέτρου ελαστικότητας και για τα 2 είδη CNTs, για πάχος τοιχώματος 0,147nm



Από τα αποτελέσματα των πινάκων αλλά και από το συνδυαστικό γράφημα, παρατηρείται ακόμα ότι για κοντινές τιμές ακτίνας, το μέτρο ελαστικότητας των zigzag νανοσωλήνων είναι γενικά υψηλότερο από των αντίστοιχων armchair. Μια πιθανή εξήγηση του φαινομένου αυτού έγκειται στη μορφή της **δομικής κυψελίδας** του κάθε τύπου νανοσωλήνα όπως αναφέρεται και από τους Prabhu et al (2012) ^[5]. Πιο

αναλυτικά, στην περίπτωση των Zigzag νανοσωλήνων, η ίδια δύναμη (ή στην περίπτωση displacement control η ίδια επιμήκυνση) ασκείται σε ένα μόνο κόμβο της κάθε δομικής κυψελίδας του άκρου του νανοσωλήνα, ενώ στην περίπτωση των armchair νανοσωλήνων, η ίδια δύναμη ή επιμήκυνση ασκείται σε 2 κόμβους της κάθε ακραίας δομικής κυψελίδας. Αλλάζουν επομένως σημαντικά τα μοτίβα κατανομής δύναμης – επιμήκυνσης, αφού π.χ. για σταθερή επιμήκυνση μεταξύ των ειδών, η μεν κατανομή της δύναμης στον zigzag γίνεται σε n κόμβους, ενώ στον armchair γίνεται σε $2n$.

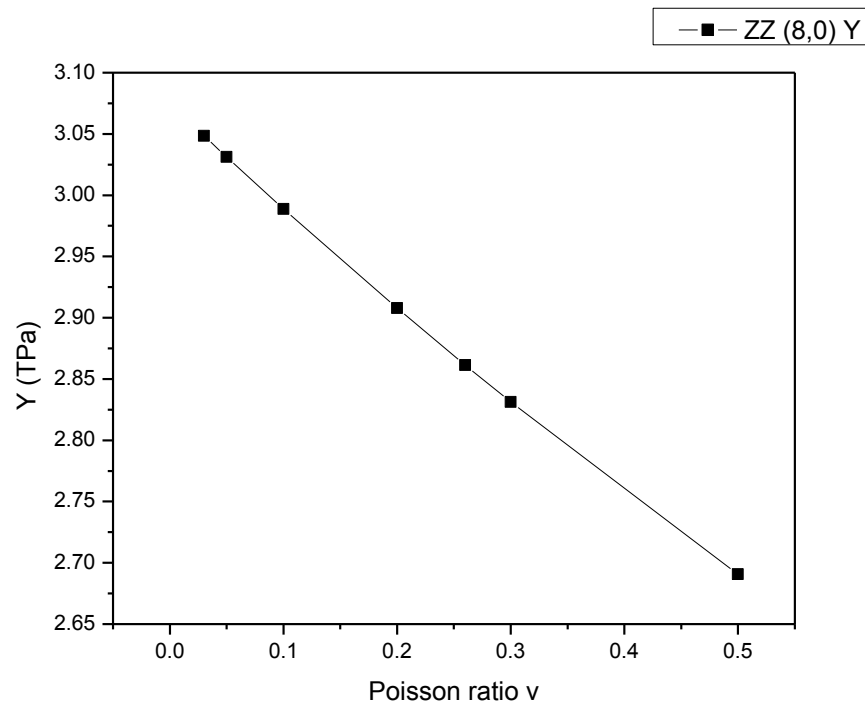


4.3.2 Σχέση λόγου Poisson – μέτρου ελαστικότητας

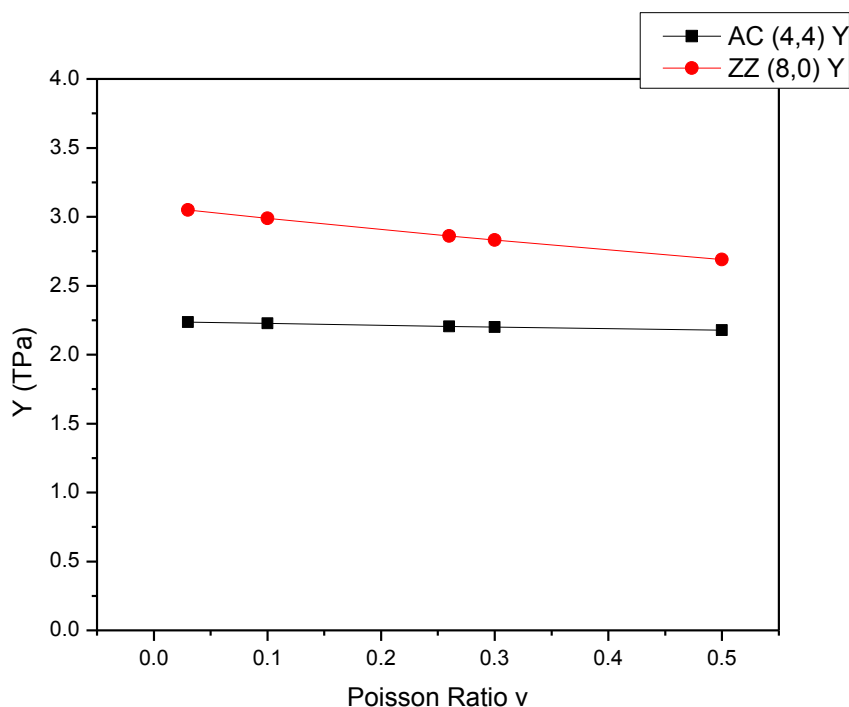
Στο υποκεφάλαιο αυτό εξετάζεται εάν και κατά πόσον ο λόγος Poisson που θεωρούμε για τη δοκό – στοιχείο επηρεάζει τους υπολογισμούς του μέτρου ελαστικότητας, όταν στον κωδικά μας βέβαια δεν εισάγουμε κάποιο μέτρο διάτμησης που να τον δεσμεύει μεταξύ ορισμένων τιμών, αλλά μεταβάλλουμε σημαντικά την τιμή του στο διάστημα 0.03 – 0.5. Να σημειώσουμε εδώ ότι ο λόγος Poisson που εξετάζουμε δεν έχει καμία σχέση με το λόγο Poisson του χωροδικτυώματος ως σύνολο, παρά μόνο αποτελεί παράμετρο του element, δηλαδή του δεσμού μεταξύ των ανθράκων. Υπάρχει σαφώς αβεβαιότητα στη βιβλιογραφία για τον ορισμό αυτής της τιμής, αφού γίνεται μια προσπάθεια

μοντελοποίησης ενός μη υλικού στοιχείου με μηχανικές ιδιότητες υλικής δοκού. Τα αποτελέσματα της παραμετρικής αυτής ανάλυσης φαίνονται παρακάτω:

Διάγραμμα 4.5: Η σχέση του μέτρου ελαστικότητας με το το λόγο Poisson του δομικού στοιχείου για το νανοσωλήνα Zigzag (8,0)



Διάγραμμα 4.6: Η σχέση του μέτρου ελαστικότητας με το το λόγο Poisson του δομικού στοιχείου για τα δυο είδη νανοσωλήνων



Παρατηρούμε ότι υπάρχει μια τάση ελάττωσης του μέτρου ελαστικότητας της συνολικής με την αύξηση του λόγου Poisson της δοκού. Η ελάττωση αυτή είναι εντονότερη για τους zigzag νανοσωλήνες. Ωστόσο, σε γενικές γραμμές, η επιλογή του λόγου Poisson δε φαίνεται να επηρεάζει σε μεγάλο βαθμό τα αποτελέσματα για το μέτρο ελαστικότητας, αφού για αύξηση του λόγου Poisson κατά 90%, το μέτρο ελαστικότητας αυξάνεται κατά 16% στην περίπτωση του zigzag (8,0) νανοσωλήνα άνθρακα.

Ο λόγος που εκτελέστηκε η παραμετρική αυτή ανάλυση είναι ότι συχνά κατά τη διερεύνηση του πάχους τοιχώματος του νανοσωλήνα καταλήγουμε σε ένα σετ τιμών $t - E$, όπου E το μέτρο ελαστικότητας της δοκού - element. Για μια ολοκληρωμένη μοντελοποίηση 6 βαθμών ελευθερίας όμως είναι απαραίτητη και η εισαγωγή είτε του μέτρου διάτμησης είτε του λόγου Poisson του δομικού στοιχείου - element. Ο υπολογισμός όμως των μέτρων διάτμησης δεν είναι πάντα δυνατός στις ενεργειακές προσεγγίσεις που ακολουθούνται, εφόσον ο αντίστοιχος ενεργειακός όρος δεν εμπεριέχεται στην κάθε ανάλυση. Το μέτρο Poisson επομένως ίσως να αποτελεί ένα πιο ασφαλές χαρακτηριστικό που μπορεί να δοθεί καταχρηστικά στη δοκό.

4.3.3 Σχέση πάχους τοιχώματος – μέτρου ελαστικότητας

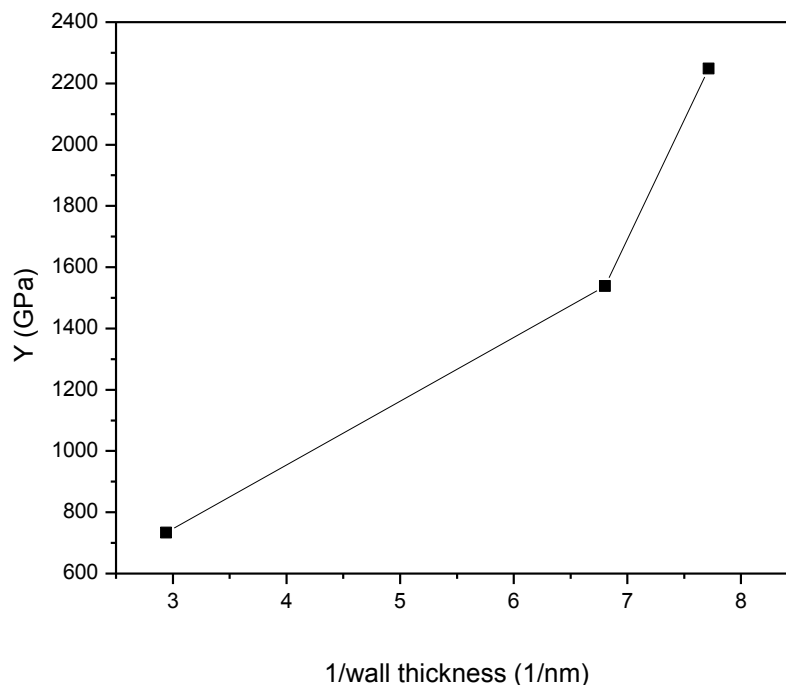
Οι ακριβείς διαστάσεις των νανοσωλήνων άνθρακα στην ισορροπία είναι ακόμα υπό διερεύνηση. Σε αντίθεση με το μήκος δεσμού a_{C-C} , για το οποίο η πειραματικά παρατηρούμενη τιμή των 0.1421 nm γίνεται καθολικά δεκτή, το πάχος τοιχώματος t δεν έχει καθοριστεί ακόμα πλήρως. Εφόσον στην

παρούσα εργασία θεωρούμε τους νανοσωλήνες ως χωροδικτυώματα, το πάχος τοιχώματος, από εδώ και πέρα συμβολιζόμενο ως t , πρέπει να καθοριστεί ως συνεχής έννοια. Εξάλλου το t συνδέεται και με τη διάμετρο των δομικών στοιχείων – elements που χρησιμοποιούμε, αποκτά δηλαδή υλικό και δομικό χαρακτήρα σε τέτοιου είδους αναλύσεις.

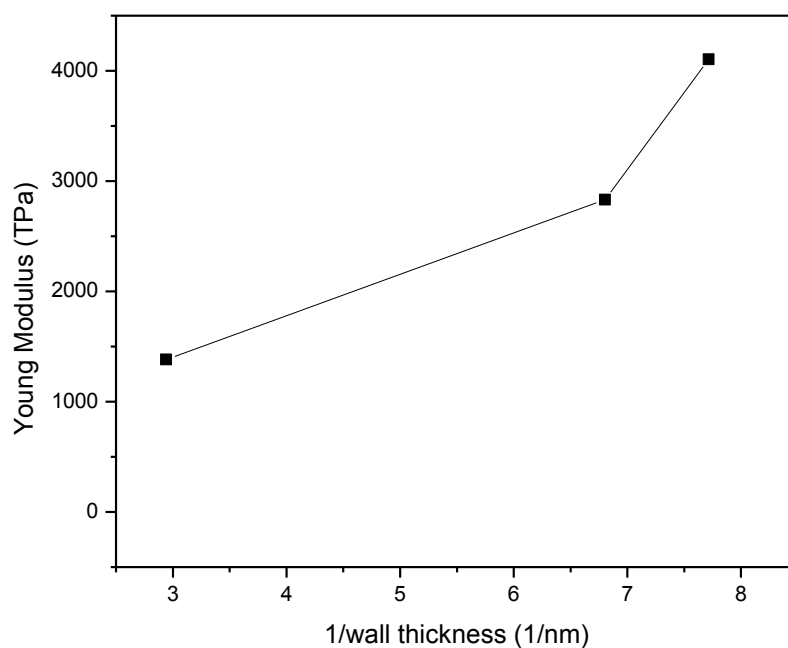
Στο υποκεφάλαιο 3.2.1 αναλύθηκε και αιτιολογήθηκε ο υπολογισμός και η χρήση των διαφόρων t (πάχη τοιχώματος) καθώς και των αντίστοιχων μέτρων ελαστικότητας των δοκών - elements. Παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα του μέτρου ελαστικότητας Y από την επίλυση του μοντέλου για δυο είδη νανοσωλήνων, του armchair (8,8) και του zigzag (8,0), για τα διαφορετικά t . Τα δύο αυτά είδη επιλέχθηκαν λόγω του ότι έχουν αρκετά μεγάλη διάμετρο ώστε παράμετροι όπως ο λόγος Poisson να μην τα επηρεάζει σημαντικά (βλ. Κεφάλαιο 4.3.2), αλλά όχι τόσο μεγάλη ώστε το μέτρο ελαστικότητας να μην είναι αξιόπιστο λόγω μικρού λόγου διαστάσεων, κάτι που δεν χαρακτηρίζει γενικά τους νανοσωλήνες.

Ακόμα πρέπει να αναφέρουμε πως επειδή ο υπολογισμός των μέτρων διάτμησης δεν ήταν δυνατός για όλα τα σετ τιμών εφόσον ο αντίστοιχος ενεργειακός όρος δεν εμπεριέχεται στην αναλύσή τους, όλοι οι υπολογισμοί έγιναν με δεδομένο πλέον ένα σταθερό λόγο Poisson ίσο με 0.3, ο οποίος όπως είδαμε στο υποκεφάλαιο 4.3.2, δεν επηρεάζει σημαντικά τους υπολογισμούς μας, άρα έχουμε μια ξεκάθαρη τουλάχιστον ποιοτική εικόνα της σχέσης του t με το μέτρο ελαστικότητας.

Διάγραμμα 4.7: Η σχέση του μέτρου ελαστικότητας με το αντίστροφο πάχος τοιχώματος για το νανοσωλήνα Armchair (8,8)



Διάγραμμα 4.8: Η σχέση του μέτρου ελαστικότητας με το αντίστροφο πάχος τοιχώματος για το νανοσωλήνα Zigzag (8,0)

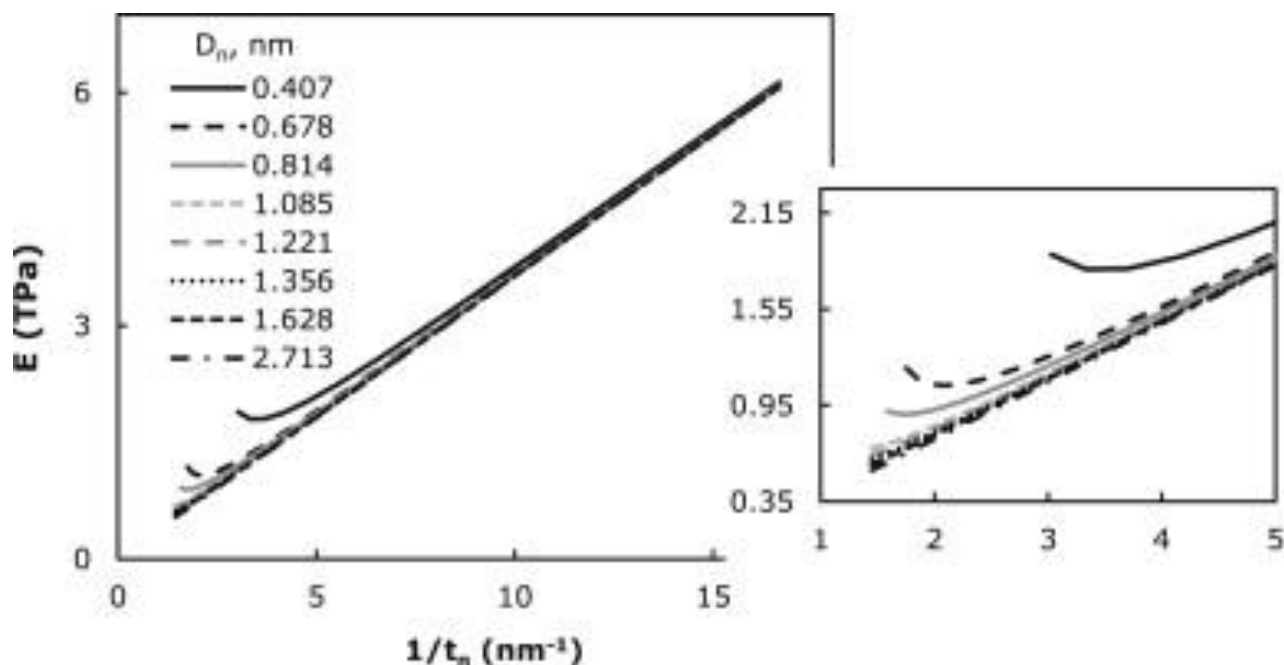


Από τα παραπάνω διαγράμματα φαίνεται ξεκάθαρα πως για το t και το μέτρο ελαστικότητας υπάρχει μια σχεδόν αντιστρόφως ανάλογη εξάρτηση, και στις δύο περιπτώσεις CNTs, η οποία βέβαια δεν είναι εντελώς γραμμική.

Ενδεικτικά αναφέρεται πως στη σχετική βιβλιογραφία ([1],[3],[4],[19],[20]) παρατηρείται ακριβώς η ίδια εξάρτηση. Συγκεκριμένα οι Tserpes et al. ^[1] παρατήρησαν ότι για διακύμανση του t μεταξύ **0.066 και 0.69 nm**, το μέτρο ελαστικότητας κατά Young μεταβλήθηκε μεταξύ 5.296 και 0.507 TPa για τον (8,8) νανοσωλήνα άνθρακα και μεταξύ 5.278 και 0.509 TPa για τον (14,0).

Στην πρόσφατη εργασία των Sakharova et al. (2015) ^[20] διερευνήθηκε η σχέση του wall thickness με το μέτρο ελαστικότητας για νανοσωλήνες άνθρακα διαφόρων διαμέτρων, όπως φαίνεται στο παρακάτω διάγραμμα:

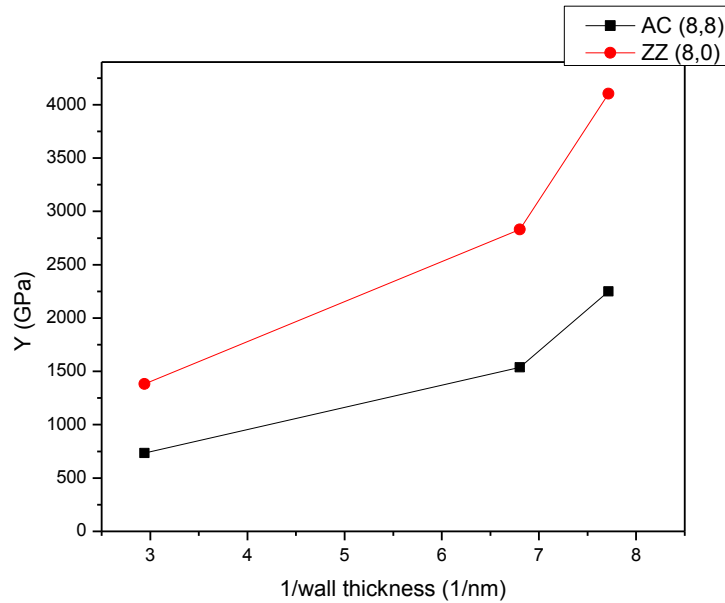
Διάγραμμα 4.9: Η σχέση του μέτρου ελαστικότητας με το αντίστροφο πάχος τοιχώματος για νανοσωλήνες διαφόρων διαμέτρων ^[20]



Οι Sakharova et al. ^[20] παρατήρησαν ότι για διαμέτρους μεγαλύτερες του 1.085 nm, η σχέση των E (TPa) και $1/t$ (nm^{-1}) είναι ανεξάρτητη της διαμέτρου και ακολουθεί μια ομογενή γραμμική κατανομή. Στην περίπτωση όμως που $D < 1,085$ nm, η απόκλιση από την ομογενή γραμμική αυτή σχέση είναι εμφανής, ιδιαίτερα για μικρές τιμές $1/t$. Μια πιθανή εξήγηση αυτού του φαινομένου είναι ότι, όσο μικρότερη είναι η διάμετρος των SWCNTs, τόσο η συμπεριφορά τους προσομοιάζει ένα στερεό κύλινδρο παρά ένα κούφιο σωλήνα, γεγονός το οποίο σαφώς επηρεάζει και το μέτρο ελαστικότητας. Οι Sakharova et al. Κατέληξαν ότι αν το t είναι μικρότερο ή ίσο με το μισό της διαμέτρου του SWCNT, το μέτρο ελαστικότητας αποκτά μια γραμμική σχέση με το t .

Τα αποτελέσματα αυτά, ^[20] προσφέρουν μια καλή εξήγηση στην **απόκλιση των μετρήσεων** της παρούσας εργασίας από το γραμμικό μοντέλο, καθώς δουλεύουμε σε σχετικά μικρές διαμέτρους, αναφορικά μόλις 0,6268 nm για το νανοσωλήνα zigzag (8,0).

Διάγραμμα 4.10: Συνδυαστικό διάγραμμα για τους νανοσωλήνες Zigzag (8,0) και Armchair (8,8)



Από το συνδυαστικό διάγραμμα συμπεραίνεται ακόμα, ότι η διακύμανση του t επηρεάζει περισσότερο το μέτρο ελαστικότητας των zigzag νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με των armchair. Η εξήγηση αυτού του φαινομένου είναι πρακτικά και ο λόγος που το μέτρο ελαστικότητας των zigzag νανοσωλήνων είναι μεγαλύτερο από το αντίστοιχο των armchair κατά την FE μοντελοποίηση τους.

Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζονται μερικές από τις θεωρήσεις του t στη βιβλιογραφία.

Πίνακας 4.5 : Σύγκριση αποτελεσμάτων για το μέτρο ελαστικότητας για διάφορες τιμές πάχους τοιχώματος και μεθόδους στη βιβλιογραφία

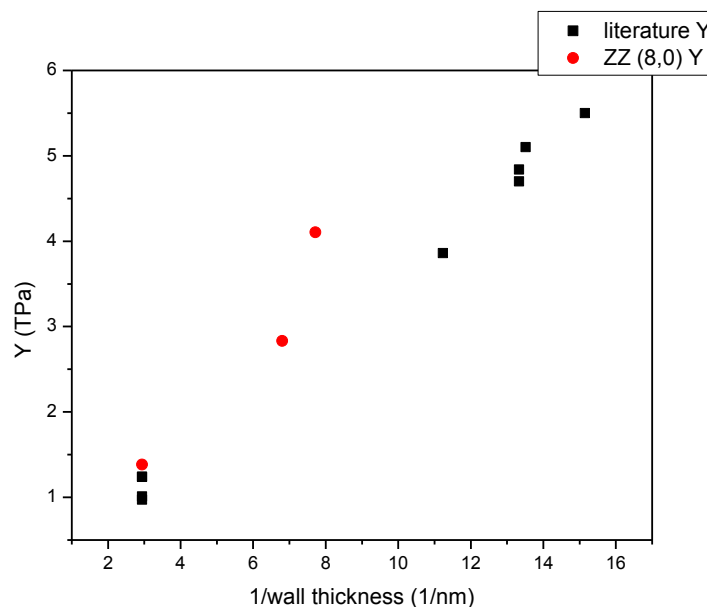
Ερευνητές	Μέθοδος	Πάχος τοιχώματος (nm)	Μέτρο ελαστικότητας (TPa)
Yakobson et al. [11]	Molecular Dynamics	0.066	5.5
Zhou et al. [10]	Tight-binding model	0.074	5.1
Tu et al. [9]	Local density model	0.075	4.7
Kudin et al. [7]	Ab initio computations	0.089	3.859
Pantano et al. [6]	Continuum shell modeling	0.075	4.84
Li & Chou [3]	Stiffness matrix method	0.34	1.01
Lu [8]	Molecular dynamics	0.34	0.974
Hernandez et al. [5]		0.34	1.24
Jin et al.	Molecular dynamics	0.34	1.238
Odegard et al. [2]	Equivalent continuum modeling	0.69	-
Tserpes et al. [1]	Stiffness matrix method	0.147	-

Παρατηρούμε πως μια μεγάλη γκάμα τιμών για το t , με εύρος από 0,064 ως και 0,69 nm υιοθετείται στη βιβλιογραφία. Στην πλειοψηφία των ερευνών, το t λαμβάνεται ίσο με την ενδοστρωματική απόσταση του

γραφίτη (0,34 nm). Άλλοι ερευνητές βέβαια, με χρήση διαφορετικών μεθόδων καταλήγουν σε πολύ διαφορετικές θεωρήσεις για το t . Για παράδειγμα, οι Odegard et al. ^[2], ανακάλυψαν πως μέσω της συσχέτισης της μοριακής δυναμικής με τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων, το t προκύπτει αρκετά μεγαλύτερο από 0,34 nm, και βρίσκεται μεταξύ των τιμών 0,57-0,69 nm.

Στην ανάλυση που παρουσιάστηκε την παρούσα εργασία, χρησιμοποιώντας ως βάση τη θεώρηση των Li & Chou ^[3] σε συνδυασμό με μια προσέγγιση δομικού χαρακτήρα κατά την εξίσωση ενεργειακών – δομικών χαρακτηριστικών, η τιμή που προέκυψε για το t ήταν 0,147nm. Στο παρακάτω διάγραμμα συγκρίνονται ποιοτικά οι τιμές που προέκυψαν στην παρούσα εργασία σε σχέση με αυτές της βιβλιογραφίας. Αν αναλογιστεί κανείς το πλήθος παραμέτρων που αλλάζουν σε κάθε προσέγγιση (μέθοδος ανάλυσης, σταθερές, γεωμετρικά χαρακτηριστικά) και ότι πρόκειται για μέσες τιμές του Y , τα δεδομένα της παρούσας εργασίας δεν εμφανίζουν σημαντική απόκλιση.

Διάγραμμα 4.11 : Σύγκριση εξάρτησης πάχους τοιχώματος - μέτρου ελαστικότητας μεταξύ τιμών της βιβλιογραφία (μαύρα τετράγωνα) και της παρούσας εργασίας (κόκκινοι ρόμβοι).



4.4 Συμπεράσματα

4.4.2 Σχεδιασμός και λειτουργικότητα μοντέλου

Προτάθηκε ένα τρισδιάστατο μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων για νανοσωλήνες άνθρακα διαφόρων διαμέτρων για τα είδη armchair και zigzag. Ο σχεδιασμός και η επίλυση του μοντέλου πραγματοποιήθηκε σε κώδικα του προγράμματος ANSYS. Όσον αφορά το σχεδιασμό:

- ✓ Το ANSYS προσφέρει εύχρηστο τρόπο σχεδιασμού νανοσωλήνων άνθρακα με εισαγωγή απλώς των συντεταγμένων των σημείων – κόμβων – ατόμων άνθρακα, οι οποίες υπολογίζονται γεωμετρικά από τη δομή του νανοσωλήνα. Η προεργασία επομένως είναι πολύ δυσκολότερη από το σχεδιαστικό κομμάτι του προγράμματος.
- ✓ Το μοντέλο, για μικρό αριθμό κόμβων και στοιχείων επιτυγχάνει ικανοποιητικά αποτελέσματα. Με σχετικά μικρό αριθμό κόμβων για τα διάφορα είδη CNTs που εξετάσαμε φαίνεται πως επιτεύχθηκε μια ικανοποιητική προσέγγιση του aspect ratio ενός CNT.
- ✓ Λόγω του μικρού υπολογιστικού φόρτου επεξεργασίας δεδομένων που περιλαμβάνει, το παρόν μοντέλο πιθανώς να είναι ένα χρήσιμο εργαλείο στην εκτίμηση της μηχανικής συμπεριφοράς των νανοσωλήνων άνθρακα armchair και zigzag, λαμβάνοντας υπόψη ότι δεν παρουσιάζει σημαντικές αποκλίσεις τόσο από άλλα θεωρητικά μοντέλα, όσο και από αντίστοιχες πειραματικές μετρήσεις.

4.4.3 Παραμετρικές αναλύσεις

Αφού υπολογίστηκε το μέτρο ελαστικότητας κάθε νανοσωλήνα, εκτελέστηκαν τριών ειδών παραμετρικές αναλύσεις: η εξάρτηση του μέτρου ελαστικότητας Y από τη διάμετρο του CNT, το λόγο Poisson του beam element και το πάχος τοιχώματος t του CNT.

- ♦ Όσον αφορά την εξάρτηση από τη διάμετρο, αυξανόμενης αυτής αυξάνεται και το μέτρο ελαστικότητας. Προσεγγίζοντας ωστόσο μεγαλύτερες τιμές διαμέτρου το μέτρο ελαστικότητας τείνει να σταθεροποιηθεί. Η απόκλιση από τη γενική αυτή τάση για CNTs μικρής ακτίνας είναι λογική και εξηγήθηκε.
- ♦ Όσον αφορά την εξάρτηση από το λόγο Poisson του beam element, δε θεωρείται ιδιαίτερα σημαντική αλλά η σχέση των δύο χρειάζεται περαιτέρω διερεύνηση και δεν είναι καταληκτική.
- ♦ Όσον αφορά την εξάρτηση από το πάχος τοιχώματος t του νανοσωλήνα άνθρακα, προσεγγίζει μια σχεδόν γραμμική αντιστρόφως ανάλογη σχέση με το μέτρο ελαστικότητας όπως επιβεβαιώνεται και στη βιβλιογραφία. Η απόκλιση από τη γραμμική συμπεριφορά οφείλεται στη μικρή διάμετρο του νανοσωλήνα άνθρακα η οποία επηρεάζει τη μηχανική του συμπεριφορά.

4.6 Βιβλιογραφία

- [1] Tserpes K.I., Papanikos P., Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes, *Composites: Part B* 36 (2005), p.468-477
- [2] Odegard G.M., Gates T.S., Nicholson L.M., Wise K.E., Equivalent-continuum modeling of Nano-Structured materials, *Comp. Sc. And Tech.* 62:14 (2002), p.1869-1880
- [3] Li C., Chou T., A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes, *Int. Jour. of Solids & Struct.* 40 (2013), p.2487-2499
- [4] Jalalahmadi B., Naghdabadi R., Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes and introducing a new wall thickness, *Jour. Of Phys. Conf. Ser.* 61 (2007), p.497-502
- [5] Hernandez E, Goze C, Bernier P, Rubio A. Elastic properties of C and BxCyNz composite nanotubes. *Phys Rev Lett* 1998;80(20):4502–5.
- [6] Pantano A, Parks DM, Boyce MC. Mechanics of deformation of single and multi-wall carbon nanotubes. *J Mech Phys Solids* 2004;52:789–821.
- [7] Kudin KN, Scuseria GE, Yakobson BI. C2F, BN and C nanoshell elasticity from ab initio computations. *Phys Rev B* 2001;64:235406.
- [8] Lu JP. Elastic properties of carbon nanotubes and nanoropes. *Phys Rev Lett* 1997;79(7):1297–300.
- [9] Tu Z, Ou-Yang Z. Single-walled and multiwalled carbon nanotubes viewed as elastic tubes with the effective Young's moduli dependent on layer number. *Phys Rev B* 2002;65:233407.
- [10] Zhou X, Zhou JJ, Ou-Yang ZC. Strain energy and Young's modulus of single-wall carbon nanotubes calculated from electronic energy band theory. *Phys Rev B* 2000;62(20):13692–6.
- [11] Yakobson BI, Brabec CJ, Bernholc J. Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear range. *Phys Rev Lett* 1996;76: 2511–4.
- [12] <https://www.materials.uoc.gr/>
- [13] Lourie O, Wanger HD (1998). Evaluation of Young's modulus of carbon nanotubes by micro Raman spectroscopy. *J. Mater.* 13(9):2418–2422.
- [14] Krishnan A, Dujardin E, Ebbesen TW, Yianilos PN, Treacy MMJ (1998). Young's modulus of single walled nanotubes. *Phys. Rev. B.* 58(20):14013–14019.
- [15] Wong, E.W., Sheehan, P.E. and Lieber, C.M., “Nanobeam Mechanics: Elasticity, Strength, and Toughness of Nanorods and Nanotubes and Carbon Nanotubes”, *Science*, 277, pp.1971-1973, 1997.
- [16] Dominguez-Rodriguez G., Tapia A., Aviles F., An assessment of finite element analysis to predict the elastic modulus and Poisson's ratio of single wall carbon nanotubes, *Comp. Mat. Science* 82 (2014), p.257-263
- [17] Natsuki T., Tantrakarn K., Endo M., Prediction of elastic properties for single-walled carbon nanotubes, *Carbon* 42 (2004), p.39-45
- [18] Jin Y, Yuan FG. Simulation of elastic properties of single-walled carbon nanotubes. *Compos Sci Technol* 2003;63:1507–15.
- [19] Prabhu S., Bhaumik S., Vinayagam B.K., Finite element modeling and analysis of zigzag and armchair type single wall carbon nanotube, *Journal of Mech. Eng. Res.* 48 (2012), p.260-266
- [20] Sakharova N.A., Pereira A.F.G., Antunes J.M., Brett C.M.A., Fernandes J.V., Mechanical characterization of single-walled carbon nanotubes: Numerical simulation study, *Comp. B: Engineering* 75 (2015), p.73–85

5 Προτάσεις για μελλοντική Έρευνα

5.1 Αριστοποίηση μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων

Οι προτάσεις για μελλοντική έρευνα και πιθανές βελτιώσεις συνοψίζονται σε δύο κατηγορίες: Πρώτον τη αριστοποίηση της μεθόδου 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 το πρώτο κομμάτι τα μειονεκτήματα και ελλείψεις που παρουσιάζει η μέθοδος FE θα μπορούσαν να αντιμετωπιστούν με :

- Την ενσωμάτωση των ενεργειών Van der Waals στην ενεργειακή θεώρηση της μεθόδου για αποφυγή αποκλίσεων σε CNTs μικρής διαμέτρου.
- Τη δημιουργία και αποτελεσματικό χαρακτηρισμό ενός υβριδικού element που να μπορεί να υποστηρίξει το συνδυασμό ενεργειακών και δομικών χαρακτηριστικών.

Περαιτέρω έρευνα χρειάζονται ακόμα :

- Οι ενεργειακές σταθερές άλλων μεθόδων (MD, MC) οι οποίες ενσωματώνονται στην ανάλυση FE. Η χρήση τους μπορεί να επιφέρει ικανοποιητικά αποτελέσματα αλλά λόγω πολλαπλών παραδοχών στις σχέσεις των δυναμικών που χρησιμοποιούνται και λόγω του γεγονότος ότι προέρχονται από τη μελέτη γραφιτικών φύλλων, και όχι CNTs, χρειάζεται σχετική διερεύνηση σε συνδυασμό με πειραματικές μετρήσεις για τη αριστοποίησή τους.
- Αποσαφήνιση της χρήσης και της επίδρασης του λόγου Poisson στο μοντέλο, όπως προτάθηκε και από τους Natsuki et al. ^[3].
- Η εύρεση μιας κατάλληλης τιμής ή εύρους τιμών για το wall thickness για τα διάφορα είδη και μεγέθη CNTs που να δίνει επαναλήψιμα και αξιόπιστα αποτελέσματα.

5.2 Μελλοντική έρευνα - καινοτομίες

Όσον αφορά το δεύτερο κομμάτι, της μελλοντικής έρευνας, το παρόν μοντέλο θα μπορούσε να ενσωματωθεί σε μια μήτρα πολυμερούς υλικού και να μελετηθεί η μηχανική συμπεριφορά του σύνθετου υλικού ως σύνολο. Σε τέτοια θέματα μεγάλο ενδιαφέρον παρουσιάζει η μελέτη του *interphase* μεταξύ νανοσωλήνα άνθρακα και μήτρας.

Πρόσφατα άρχισαν να γίνονται αξιόλογες σχετικές μελέτες στον τομέα μοντελοποίησης σύνθετων με CNTs και ειδικά στο χαρακτηρισμό της διεπιφάνειας. Ενδεικτικά, αναφέρονται δυο παραδείγματα τέτοιων μελετών:

- Οι Liu et al. (2014) ^[1] πρόβησαν σε χαρακτηρισμό του Interphase μεταξύ CNTs και μήτρας χρησιμοποιώντας ένα συνεκτικό μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων. Έπειτα εκτέλεσαν χαρακτηρισμό μηχανικών ιδιοτήτων του προκύπτοντος σύνθετου υλικού, δείχνοντας παράλληλα τη σημαντική επιρροή της φύσης και των ιδιοτήτων του interphase στο τελικό σύνθετο υλικό. Στη μελέτη τους συμπεραίνεται ακόμα πως ένα μεγάλο κλάσμα όγκου CNTs/μήτρας έχει ως αποτέλεσμα μεγάλη ακαμψία και αντοχή του τελικού συνθέτου.

- Οι Kumar et al. (2014) ^[2], με τη χρήση μικρομηχανικής προσέγγισης και της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων, διερεύνησαν την επίδραση της ακαμψίας και του μεγέθους του interphase στο μέτρο ελαστικότητας του συνθέτου. Χρησιμοποίησαν ένα ομοιογενές στοιχείο χαρακτηριστικού όγκου το οποίο περιείχε πολλαπλούς CNTs. Λαμβάνοντας υπόψιν το μήκος αλλά και τη χειρομορφία των CNTs, κατασκεύασαν ένα μοντέλο σε καλή συμφωνία με τα πειραματικά αποτελέσματα.

Φαίνεται πως υπάρχει ένα πολλά υποσχόμενο μέλλον στον τομέα της μοντελοποίησης του interphase μεταξύ CNTs και μήτρας σε νανοσύνθετα υλικά. Περαιτέρω έρευνα πιθανόν να προσεγγίσει σε πολύ καλό βαθμό τις πραγματικές μηχανικές ιδιότητες των συνθέτων με CNTs, καθιστώντας έτσι τον θεωρητικό υπολογισμό ιδιοτήτων μια γρήγορη, οικονομική και αξιόπιστη λύση.

5.3 Βιβλιογραφία

- [1] Liu X., Yang Q., Su L., Interface analysis and design in carbon nanotube array composite based on cohesive finite element approach, *Met. Sc. & Engin. A* 592 (2014), p.83-87
- [2] Kumar P., Srinivas J., Numerical evaluation of effective elastic properties of CNT-reinforced polymers for interphase effects, *Comp. Mat. Sc.* 88 (2014), p.139-144
- [3] Natsuki T., Tantrakarn K., Endo M., Prediction of elastic properties for single-walled carbon nanotubes, *Carbon* 42 (2004), p.39-45

Παράρτημα

➤ Εντολές ANSYS

/PREP7	Είσοδος στο Menu Preprocessing
ET,1,BEAM188	Καθορισμός είδους υλικού 1
R= I=	Καθορισμός πραγματικών σταθερών (ακτίνα, μήκος δεσμού)
SECTYPE,1,BEAM,CSOLID	Ορισμός διατομής δοκού ως συμπαγής και σφαιρική
SECDATA,R	Εισαγωγή τιμών για την ακτίνα της δοκού
MP,EX,1,	Καθορισμός μέτρου ελαστικότητας για το υλικό 1
MP,PRXY,1,	Καθορισμός λόγου Poisson για το υλικό 1
K,1,X1,Y1,Z1 K,2,X2,Y2,Z2 K,v,Xv,Yv,Zv	Δημιουργία σημείων 1 – v με τις ανάλογες συντεταγμένες στους άξονες x,y,z.
L,1,2 L,v-1,v	Σύνδεση σημείων με γραμμές
NKPT,NODE,ALL	Δημιουργία κόμβων επάνω σε όλες τις θέσεις σημείων (keypoints)
LMESH,ALL	Meshing όλων των γραμμών και επομένως δημιουργία element για κάθε υπάρχουσα line
/SOLU	Είσοδος στο Menu επίλυσης
ANTYPE,STATIC	Ορισμός στατικού τύπου ανάλυσης
NSEL,S,LOC,Z,0	Επιλογή κόμβων στο Z = 0
D,ALL,ALL	Περιορισμός όλων των βαθμών ελευθερίας (κίνηση κατά x,y,z και περιστροφές)
*DIM,DIS,ARRAY,100	!INITIALIZE ARRAY PARAMETER DIS
A=0	!INITIALIZE PARAMETER A
*DO,I,1,100	!START DO LOOP FOR LOADING
DIS(I)=A	!STORE DISP VALUE IN DIS FOR
A=A+0.04	!UPDATE PARAMETER A
*ENDDO	!END DO LOOP ON LOADING
NLGEOM,ON	TURN ON NONLINEAR GEOMETRY EFFECTS
AUTOTS,ON	TURN ON AUTOMATIC TIME STEPPING
OUTRES,,1	!SAVE RESULTS FOR LAST SUBSTEP OF EACH LS
NROPT,FULL,,OFF	!USE FULL NEWTON-RAPHSON WITH NO ADAPTIVE DESCENT
NEQIT,100	!USE MAXIMUM 100 EQUILIBRIUM ITERATIONS
ALLSEL	!SELECT EVERYTHING
*DO,I,1,100	START DO LOOP FOR WRITING LOAD STEPS
NSEL,S,LOC,Z=....	Επιλογή κόμβων για Z=l _{CNT}

D,ALL,UZ,DIS(I)	Καθορισμός μετατόπισης κατά Z στους συγκεκριμένους κόμβους
D,ALL,UY	Περιορισμός μετατόπισης κατά τον γάξονα
ALLSEL	SELECT EVERYTHING
LSWRITE,I	WRITE LOAD STEP FILE
*ENDDO	END DO LOOP ON WRITING LOAD STEPS
LSWRITE,I	!WRITE LOAD STEP FILE
*ENDDO	!END DO LOOP ON WRITING LOAD STEPS
LSSOLVE,I,100	SOLVE FROM LS FILES (1 TO 57)
/POST1	Είσοδος στο Menu Postprocessing
*DO,J,1,100	LOOP OVER LOAD STEPS
SET, J	READ RESULTS SET
NSEL,S,LOC, Y	SELECT NODES AT Y = 0
*GET,NUMNOD,NODE,0,COUNT	STORE # OF NODES IN NUMNOD
*GET,CURNOD,NODE,0,NUM,MIN	STORE MIN NODE # TO CURNOD
SUM=0	INITIALIZE TOTAL REACTION F
*DO,1,1,NUMNOD	LOOP OVER SELECTED NODES
*GET,RFY,NODE,CURNOD,RF,FY	STORE Y REACT. FORCE IN RFY
SUM=SUM+RFY	UPDATE TOTAL REACTION FORCE
CURNOD=NDNEXT(CURNOD)	UPDATE CURRENT NODE NUMBER
*ENDDO	END LOOP OVER SELECTED NODES
DISJ=DIS(J)	STORE CURRENT INDENTATION DEPTH TO PARAMETER DISJ
SUM=SUM/100	CONVERT TO MILLINEWTONS
/OUTPUT,NANO_RF_D,OUT,,APPEND	! REDIRECT OUTPUT TO FILE
*VWRITE,DISJ,SUM	WRITE DISJ AND SUM TO FILE
(E16.8,5X,E16.8)	FORMAT STATEMENT
/OUTPUT	REDIRECT OUTPUT TO OUTPUT W
*ENDDO	END LOOP OVER LOAD STEPS

➤ Δείγμα κώδικα

Το δείγμα που επισυνάπτεται αφορά το μονοφλουϊκό νανοσωλήνα άνθρακα μορφής Armchair (16,16).

/PREP7

ET,1,BEAM188

R=1.0856

L=0.1421

SECTYPE,1,BEAM,CSOLID

SECDATA,0.0735

MP,EX,1,5.49E3

MP,PRXY,1,0.3

MP,GXY,1,871

K,1,(SIN(0.130899694))*R,-((R**2-((SIN(0.130899694))*R)**2)**(1/2)),0
K,2,(SIN(0.261799388))*R,-((R**2-((SIN(0.261799388))*R)**2)**(1/2)),0
K,3,(SIN(0.523598776))*R,-((R**2-((SIN(0.523598776))*R)**2)**(1/2)),0
K,4,(SIN(0.654498469))*R,-((R**2-((SIN(0.654498469))*R)**2)**(1/2)),0
K,5,(SIN(0.916297857))*R,-((R**2-((SIN(0.916297857))*R)**2)**(1/2)),0
K,6,(SIN(1.04719755))*R,-((R**2-((SIN(1.04719755))*R)**2)**(1/2)),0
K,7,(SIN(1.30899694))*R,-((R**2-((SIN(1.30899694))*R)**2)**(1/2)),0
K,8,(SIN(1.43989663))*R,-((R**2-((SIN(1.43989663))*R)**2)**(1/2)),0
K,9,(SIN(1.43989663))*R,(R**2-((SIN(1.43989663))*R)**2)**(1/2),0
K,10,(SIN(1.30899694))*R,(R**2-((SIN(1.30899694))*R)**2)**(1/2),0
K,11,(SIN(1.04719755))*R,(R**2-((SIN(1.04719755))*R)**2)**(1/2),0
K,12,(SIN(0.916297857))*R,(R**2-((SIN(0.916297857))*R)**2)**(1/2),0
K,13,(SIN(0.654498469))*R,(R**2-((SIN(0.654498469))*R)**2)**(1/2),0
K,14,(SIN(0.523598776))*R,(R**2-((SIN(0.523598776))*R)**2)**(1/2),0
K,15,(SIN(0.261799388))*R,(R**2-((SIN(0.261799388))*R)**2)**(1/2),0
K,16,(SIN(0.130899694))*R,(R**2-((SIN(0.130899694))*R)**2)**(1/2),0
K,17,-((SIN(0.130899694))*R),(R**2-((SIN(0.130899694))*R)**2)**(1/2),0
K,18,-((SIN(0.261799388))*R),(R**2-((SIN(0.261799388))*R)**2)**(1/2),0
K,19,-((SIN(0.523598776))*R),(R**2-((SIN(0.523598776))*R)**2)**(1/2),0
K,20,-((SIN(0.654498469))*R),(R**2-((SIN(0.654498469))*R)**2)**(1/2),0
K,21,-((SIN(0.916297857))*R),(R**2-((SIN(0.916297857))*R)**2)**(1/2),0
K,22,-((SIN(1.04719755))*R),(R**2-((SIN(1.04719755))*R)**2)**(1/2),0
K,23,-((SIN(1.30899694))*R),(R**2-((SIN(1.30899694))*R)**2)**(1/2),0
K,24,-((SIN(1.43989663))*R),(R**2-((SIN(1.43989663))*R)**2)**(1/2),0
K,25,-((SIN(1.43989663))*R),-((R**2-((SIN(1.43989663))*R)**2)**(1/2)),0
K,26,-((SIN(1.30899694))*R),-((R**2-((SIN(1.30899694))*R)**2)**(1/2)),0
K,27,-((SIN(1.04719755))*R),-((R**2-((SIN(1.04719755))*R)**2)**(1/2)),0
K,28,-((SIN(0.916297857))*R),-((R**2-((SIN(0.916297857))*R)**2)**(1/2)),0
K,29,-((SIN(0.654498469))*R),-((R**2-((SIN(0.654498469))*R)**2)**(1/2)),0
K,30,-((SIN(0.523598776))*R),-((R**2-((SIN(0.523598776))*R)**2)**(1/2)),0
K,31,-((SIN(0.261799388))*R),-((R**2-((SIN(0.261799388))*R)**2)**(1/2)),0
K,32,-((SIN(0.130899694))*R),-((R**2-((SIN(0.130899694))*R)**2)**(1/2)),0
K,33,(SIN(0.0654498469))*R,-((R**2-((SIN(0.0654498469))*R)**2)**(1/2)),((3**((1/2)/2))*1
K,34,(SIN(0.327249235))*R,-((R**2-((SIN(0.327249235))*R)**2)**(1/2)),((3**((1/2)/2))*1
K,35,(SIN(0.458148929))*R,-((R**2-((SIN(0.458148929))*R)**2)**(1/2)),((3**((1/2)/2))*1
K,36,(SIN(0.719948316))*R,-((R**2-((SIN(0.719948316))*R)**2)**(1/2)),((3**((1/2)/2))*1
K,37,(SIN(0.85084801))*R,-((R**2-((SIN(0.85084801))*R)**2)**(1/2)),((3**((1/2)/2))*1
K,38,(SIN(1.1126474))*R,-((R**2-((SIN(1.1126474))*R)**2)**(1/2)),((3**((1/2)/2))*1

K,39,(SIN(1.24354709))*R,-((R**2-((SIN(1.24354709))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,40,(SIN(1.50534648))*R,-((R**2-((SIN(1.50534648))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,41,(SIN(1.50534648))*R,(R**2-((SIN(1.50534648))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,42,(SIN(1.24354709))*R,(R**2-((SIN(1.24354709))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,43,(SIN(1.1126474))*R,(R**2-((SIN(1.1126474))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,44,(SIN(0.85084801))*R,(R**2-((SIN(0.85084801))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,45,(SIN(0.719948316))*R,(R**2-((SIN(0.719948316))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,46,(SIN(0.458148929))*R,(R**2-((SIN(0.458148929))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,47,(SIN(0.327249235))*R,(R**2-((SIN(0.327249235))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,48,(SIN(0.0654498469))*R,(R**2-((SIN(0.0654498469))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,49,-((SIN(0.0654498469))*R),(R**2-((SIN(0.0654498469))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,50,-((SIN(0.327249235))*R),(R**2-((SIN(0.327249235))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,51,-((SIN(0.458148929))*R),(R**2-((SIN(0.458148929))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,52,-((SIN(0.719948316))*R),(R**2-((SIN(0.719948316))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,53,-((SIN(0.85084801))*R),(R**2-((SIN(0.85084801))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,54,-((SIN(1.1126474))*R),(R**2-((SIN(1.1126474))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,55,-((SIN(1.24354709))*R),(R**2-((SIN(1.24354709))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,56,-((SIN(1.50534648))*R),(R**2-((SIN(1.50534648))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,57,-((SIN(1.50534648))*R),-((R**2-((SIN(1.50534648))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,58,-((SIN(1.24354709))*R),-((R**2-((SIN(1.24354709))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,59,-((SIN(1.1126474))*R),-((R**2-((SIN(1.1126474))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,60,-((SIN(0.85084801))*R),-((R**2-((SIN(0.85084801))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,61,-((SIN(0.719948316))*R),-((R**2-((SIN(0.719948316))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,62,-((SIN(0.458148929))*R),-((R**2-((SIN(0.458148929))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,63,-((SIN(0.327249235))*R),-((R**2-((SIN(0.327249235))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1
 K,64,-((SIN(0.0654498469))*R),-((R**2-((SIN(0.0654498469))*R)**2)**(1/2)),((3**(1/2))/2)*1

K,65,(SIN(0.130899694))*R,-((R**2-((SIN(0.130899694))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,66,(SIN(0.261799388))*R,-((R**2-((SIN(0.261799388))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,67,(SIN(0.523598776))*R,-((R**2-((SIN(0.523598776))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,68,(SIN(0.654498469))*R,-((R**2-((SIN(0.654498469))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,69,(SIN(0.916297857))*R,-((R**2-((SIN(0.916297857))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,70,(SIN(1.04719755))*R,-((R**2-((SIN(1.04719755))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,71,(SIN(1.30899694))*R,-((R**2-((SIN(1.30899694))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,72,(SIN(1.43989663))*R,-((R**2-((SIN(1.43989663))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,73,(SIN(1.43989663))*R,(R**2-((SIN(1.43989663))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,74,(SIN(1.30899694))*R,(R**2-((SIN(1.30899694))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,75,(SIN(1.04719755))*R,(R**2-((SIN(1.04719755))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,76,(SIN(0.916297857))*R,(R**2-((SIN(0.916297857))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,77,(SIN(0.654498469))*R,(R**2-((SIN(0.654498469))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,78,(SIN(0.523598776))*R,(R**2-((SIN(0.523598776))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,79,(SIN(0.261799388))*R,(R**2-((SIN(0.261799388))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,80,(SIN(0.130899694))*R,(R**2-((SIN(0.130899694))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,81,-((SIN(0.130899694))*R),(R**2-((SIN(0.130899694))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,82,-((SIN(0.261799388))*R),(R**2-((SIN(0.261799388))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,83,-((SIN(0.523598776))*R),(R**2-((SIN(0.523598776))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,84,-((SIN(0.654498469))*R),(R**2-((SIN(0.654498469))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,85,-((SIN(0.916297857))*R),(R**2-((SIN(0.916297857))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,86,-((SIN(1.04719755))*R),(R**2-((SIN(1.04719755))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,87,-((SIN(1.30899694))*R),(R**2-((SIN(1.30899694))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,88,-((SIN(1.43989663))*R),(R**2-((SIN(1.43989663))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,89,-((SIN(1.43989663))*R),-((R**2-((SIN(1.43989663))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,90,-((SIN(1.30899694))*R),-((R**2-((SIN(1.30899694))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,91,-((SIN(1.04719755))*R),-((R**2-((SIN(1.04719755))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,92,-((SIN(0.916297857))*R),-((R**2-((SIN(0.916297857))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,93,-((SIN(0.654498469))*R),-((R**2-((SIN(0.654498469))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,94,-((SIN(0.523598776))*R),-((R**2-((SIN(0.523598776))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1
 K,95,-((SIN(0.261799388))*R),-((R**2-((SIN(0.261799388))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1

K,96,-((SIN(0.130899694))*R),-((R**2-((SIN(0.130899694))*R)**2)**(1/2)),(3**(1/2))*1

L,1,2	L,17,49	
L,3,4	L,18,50	L,33,65
L,5,6	L,19,51	L,34,66
L,7,8	L,20,52	L,35,67
L,9,10	L,21,53	L,36,68
L,11,12	L,22,54	L,37,69
L,13,14	L,23,55	L,38,70
L,15,16	L,24,56	L,39,71
L,17,18	L,25,57	L,40,72
L,19,20	L,26,58	L,41,73
L,21,22	L,27,59	L,42,74
L,23,24	L,28,60	L,43,75
L,25,26	L,29,61	L,44,76
L,27,28	L,30,62	L,45,77
L,29,30	L,31,63	L,46,78
L,31,32	L,32,64	L,47,79
		L,48,80
L,1,33	L,33,64	L,49,81
L,2,34	L,34,35	L,50,82
L,3,35	L,36,37	L,51,83
L,4,36	L,38,39	L,52,84
L,5,37	L,40,41	L,53,85
L,6,38	L,42,43	L,54,86
L,7,39	L,44,45	L,55,87
L,8,40	L,46,47	L,56,88
L,9,41	L,48,49	L,57,89
L,10,42	L,50,51	L,58,90
L,11,43	L,52,53	L,59,91
L,12,44	L,54,55	L,60,92
L,13,45	L,56,57	L,61,93
L,14,46	L,58,59	L,62,94
L,15,47	L,60,61	L,63,95
L,16,48	L,62,63	L,64,96

```

NKPT,NODE,ALL
LMESH,ALL
/SOLU
ANTYPE,STATIC
NSEL,S,LOC,Z,0
D,ALL,ALL
*DIM,DIS,ARRAY,100
A=0
*DO,I,1,100
DIS(I)=A
A=A+0.005
*ENDDO
NLGEOM,ON
AUTOTS,ON
OUTRES,,1
NROPT,FULL,,OFF
NEQIT,100
ALLSEL
*DO,I,1,100
NSEL,S,LOC,Z,(17*(3**(1/2))*1)
D,ALL,UZ,DIS(I)
D,ALL,UY
ALLSEL
LSWRITE,I
*ENDDO
LSSOLVE,I,100
FINISH
/POST1
*DO,J,1,100
SET,J
NSEL,S,LOC,Z

```

```

*GET,NUMNOD,NODE,0,COUNT
*GET,CURNOD,NODE,0,NUM,MIN
SUM=0

*DO,I,1,NUMNOD
*GET,RFZ,NODE,CURNOD,RF,FZ
SUM=SUM+RFZ
CURNOD=NDNEXT(CURNOD)
*ENDDO

DISI=DIS(J)

/OUTPUT,NANO_RF_D,OUT,,APPEND

*VWRITE,SUM
(E16.8,5X,E16.8)

/OUTPUT

*ENDDO

```

➤ Βιβλιογραφία Παραρτήματος

[1] http://mostreal.sk/html/guide_55/g-adv/GADV8.htm

[2] http://mostreal.sk/html/com_55/chapter3/CS3-S.htm#SECTYPE