



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Πολιτικών Μηχανικών
Τομέας Δομοστατικής
Εργαστήριο Στατικής και Αντισεισμικών Ερευνών

ΜΗ ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΗΛΕΚΤΡΙΚΗ ΑΠΟΚΡΙΣΗ ΠΟΛΥΜΕΡΟΥΣ ΕΝΙΣΧΥΜΕΝΟΥ ΜΕ ΓΡΑΦΕΝΙΟ

Μια προσέγγιση με πεπερασμένα στοιχεία

Μπενετάτος Ερρίκος

Επιβλέπων: Βησσαρίων Παπαδόπουλος, αναπληρωτής
καθηγητής, ΕΜΠ

Αθήνα, Οκτώβριος 2022



National Technical University of Athens
School of Civil Engineering
Department of Structural Engineering
Laboratory of Structural Analysis and Antiseismic Research

NONLINEAR ELECTRIC RESPONSE OF GRAPHENE REINFORCED POLYMERS

A Finite Element Approach

Errikos Benetatos

Supervisor: Vissarion Papadopoulos, associate professor, NTUA

Athens, October 2022

Ευχαριστίες

Θέλω να ευχαριστήσω από καρδιάς όλους εκείνους που στάθηκαν δίπλα μου κατά την διάρκεια της ακαδημαϊκής μου πορείας, που με την υποστήριξή τους συνέβαλλαν στο να φέρω τις σπουδές μου εις πέρας και στην διεκπεραίωση αυτής της διπλωματικής εργασίας.

Ευχαριστώ τον καθηγητή μου, Βησσαρίων Παπαδόπουλο ο οποίος μου έδωσε την ευκαιρία να ασχοληθώ με ένα εξαιρετικά ενδιαφέρον πρόβλημα ως θέμα διπλωματικής εργασίας και βρισκόταν στο πλευρό μου ως διδάσκοντας στα μαθήματα του προπτυχιακού για όλα τα χρόνια των σπουδών μου, καθώς και κατά τη διάρκεια εκπόνησης αυτής της εργασίας.

Επίσης θέλω να ευχαριστήσω θερμά τον υποψήφιο διδάκτορα Ιωάννη Καλογέρη, του οποίου οι ικανότητες και γνώσεις έπαιξαν καταλυτικό ρόλο στο να έρθει εις πέρας η παρούσα εργασία.

Τέλος, ευχαριστώ τους φίλους και γονείς μου για την υποστήριξη τους καθ'ολη την διάρκεια των σπουδών μου.

1 ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

2	ΠΕΡΙΛΗΨΗ	6
3	ABSTRACT	7
4	ΕΙΣΑΓΩΓΗ	8
5	ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΥΠΟΒΑΘΡΟ.....	11
5.1	ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ	11
5.1.1	ΜΗ ΓΡΑΜΜΙΚΑ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ.....	14
5.1.2	ΤΕΤΡΑΠΛΕΥΡΙΚΑ ΙΣΟΠΑΡΑΜΕΤΡΙΚΑ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ	14
5.1.3	ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ GAUSS.....	18
5.2	ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΑ ΕΡΓΑΛΕΙΑ	20
5.2.1	NEWTON-RAPHSON	20
5.2.2	ΛΟΓΙΣΜΟΣ ΤΩΝ ΜΕΤΑΒΟΛΩΝ.....	22
5.2.3	ΣΤΑΣΙΜΗ ΤΙΜΗ ΣΥΝΑΡΤΗΣΙΑΚΟΥ	23
5.2.4	ΑΣΘΕΝΗΣ ΜΟΡΦΗ.....	25
6	ΕΦΑΡΜΟΓΗ.....	26
6.1	ΦΥΣΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΚΑΙ ΔΕΔΟΜΕΝΑ	30
6.2	ΕΠΙΛΥΣΗ	33
6.2.1	ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΕΚΦΡΑΣΗ.....	33
6.2.2	ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ ΣΧΗΜΑΤΟΣ.....	37
6.3	ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ.....	40
7	ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ	52
8	Βιβλιογραφία.....	62

2 ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Έχει διαπιστωθεί ότι, όσον αφορά την ενίσχυση των μηχανικών και ηλεκτρικών ιδιοτήτων νανοσύνθετων μητρών πολυμερών, η χρήση γραφενίου αποδίδει εξαιρετικά αποτελέσματα ως προς αυτούς τους σκοπούς. Το καινοτόμο αυτό υλικό δείχνει να διαθέτει μια ιδιαίτερα ευρεία γκάμα φυσικών ιδιοτήτων που το καθιστά κατάλληλο για έναν μεγάλο αριθμό πρακτικών εφαρμογών σε διάφορους τομείς της βιομηχανίας. Σε ό,τι αφορά την ηλεκτρική απόκριση πολυμερών, η παρούσα εργασία στοχεύει στην μαθηματική μοντελοποίηση μιας δομής πολυμερούς ενισχυμένης με φύλλα γραφενίου κατά την επιβολή διαφοράς δυναμικού. Η εκπόνηση του προβλήματος έγινε με χρήση λογισμικού που αναπτύχθηκε σε περιβάλλον MATLAB. Θα διεξαχθεί μια εναλλακτική επίλυση με χρήση πεπερασμένων στοιχείων προς επαλήθευση των προϋπάρχοντων αποτελεσμάτων ως προς την ενεργό ηλεκτρική αγωγιμότητα τέτοιων πολυμερών, λαμβάνοντας υπόψιν το φαινόμενο σήραγγας που παρατηρείται στις νανομετρικές κλίμακες.

3 ABSTRACT

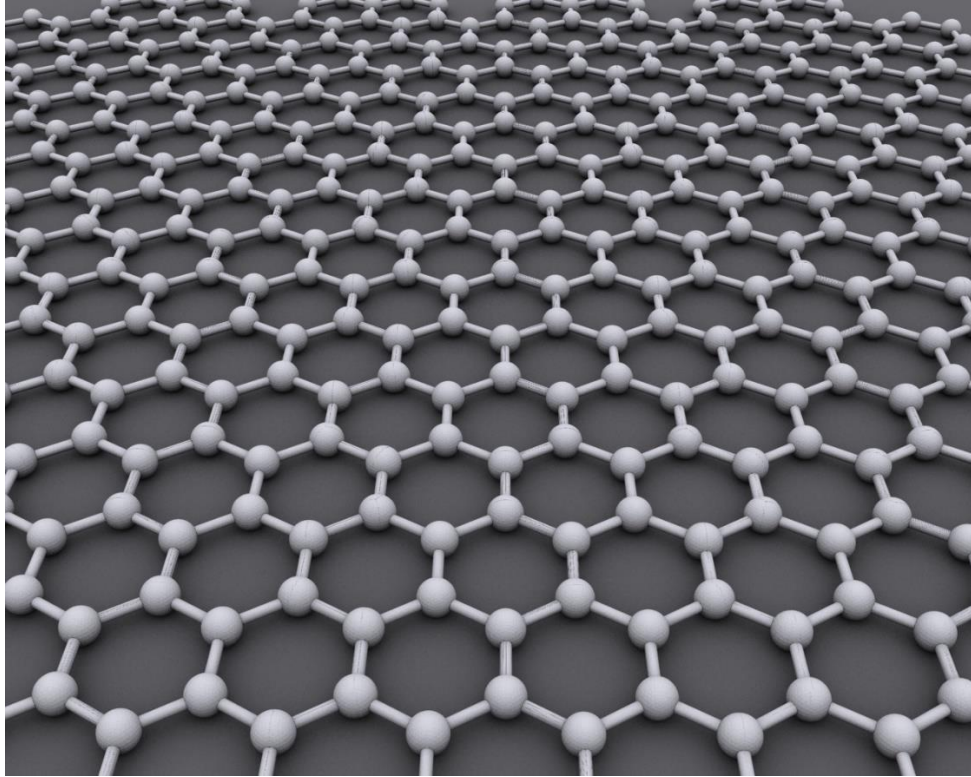
It has been confirmed that, regarding the reinforcement of nanocomposite polymer matrices in respect to their mechanical and electric properties, the use of graphene has been proven to be extremely effective. This innovative new material, appears to encompass a wide variety of physical properties that make it suitable for a big number of practical applications in different sectors of industry. In terms of the electric response of polymers, this thesis aims to mathematically model a structure of graphene reinforced polymer sheet as it responds to potential difference. This problem is evaluated with an alternative approach using the finite elements method in a MATLAB environment, attempting to confirm the available results regarding the effective electric conductivity of such polymer composites, while accounting for the quantum tunneling effect.

4 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Για την βελτιστοποίηση των θερμικών, μηχανικών και ηλεκτρικών ιδιοτήτων διαφόρων νανοσύνθετων υλικών από πολυμερή, έχει χρησιμοποιηθεί ένας αριθμός από πληρωτικά υλικά βασισμένα στον άνθρακα όπως ανθρακονήματα και μαύρος άνθρακας. Σε νεότερες καινοτομίες, χρησιμοποιούνται φύλλα από Γραφένιο. Το γραφένιο είναι ένα διδιάστατο φύλλο από σωματίδια άνθρακα διατεταγμένα σε σχήμα κυρήθρας και συνδεδεμένα μεταξύ τους. Αυτές οι πιο πρόσφατες συνθέσεις χρησιμοποιούν το γραφένιο ούτως ώστε να εκμεταλλευτούν το μεγάλο εύρος ηλεκτρικών και μηχανικών ιδιοτήτων που αυτό βελτιώνει, κάτι το οποίο μπορεί να βρεί εφαρμογή σε μια ιδιαίτερα ευρεία γκάμα πρακτικών εφαρμογών. Δομές από πολυμερή αποδίδουν, σε γενικές γραμμές, σχεδόν μονωτική συμπεριφορά όσο αφορά τις ηλεκτρομαγνητικές τους ιδιότητες, και παρατηρείται ότι η ενίσχυση αυτών των πολυμερών με φλύδες από το εξαιρετικά αγώγιμο γραφένιο, κατά ένα μικρό ποσοστό κατ'όγκο σε δεδομένο κυβικό δοκίμιο, αυξάνει εντυπωσιακά την

ηλεκτρική τους αγωγιμότητα με μια συμπεριφορά «διήθησης» του ηλεκτρικού ρεύματος.

Εξετάζεται μια εναλλακτική επίλυση προβλήματος ηλεκτρικού δυναμικού ως προς μια δομή από πολυμερές και γραφένιο, συνδεδεμένες σε λεπτές τετραγωνικές φλύδες κατανεμημένες εναλλάξ. Η επίλυση λαμβάνει υπόψιν την επιρροή του φαινομένου σήραγγας λόγω διαφοράς της αγωγιμότητας των υλικών, και ακολουθείται μια μέθοδος ισοπαραμετρικών τετραπλευρικών πεπερασμένων στοιχείων για την επίλυση ως προς το ηλεκτρικό δυναμικό. Η δομή λειτουργεί ως ένα μονοδιάστατο σύστημα για ηλεκτρικό ρεύμα που διατρέχει παράλληλα στην επιφάνεια των υλικών με παγιωμένες συνοριακές συνθήκες στην δεξιά και αριστερή πλευρά, μια αλληλουχίας τριών τεμαχίων, γραφένιο-πολυμερές-γραφένιο, διδιάστατης γεωμετρίας. Το πρόβλημα επιλύθηκε σε περιβάλλον MATLAB και τα αποτελέσματα φαίνονται σε αναλυτικά γραφήματα για το ηλεκτρικό δυναμικό V (Volt) και το ηλεκτρικό ρεύμα E (Volt/m).



Εικόνα 4-1 Η κρηθηθροειδής διάταξη του γραφενίου στον χώρο.

Ως J τίθεται η πυκνότητα ηλεκτρικού ρεύματος (ampere/m^2) η οποία, όπως και το μέγεθος E , έχει την τιμή 0 μόνο για την διεύθυνση κάθετη στις άνω και κάτω πλευρές του σχήματος και ότι παράλληλα σε αυτές μπορεί να πάρει κάθε αριθμητική τιμή καθώς το πρόβλημα είναι μονοδιάστατο ως προς την μεταβλητή. Στην συνέχεια θα φανεί πως η επίλυση του προβλήματος με χρήση τετραγωνικών ισοπαραμετρικών πεπερασμένων στοιχείων δίνει αποτελέσματα συνεπή με αυτά του Yvonnet[4], ο οποίος αντ'αυτού χρησιμοποιεί τριγωνικά πεπερασμένα στοιχεία.

Το πρόβλημα αρχικά θέλει την εξήγηση της φαινομενικά υψηλής ενεργού ηλεκτρικής αγωγιμότητας, και της μη γραμμική ηλεκτρικής συμπεριφοράς μια δομής πολυμερούς ενισχυμένη με νανοσύνθετες φλύδες γραφενίου. Έχει παρατηρηθεί ότι ένα δοκίμι πολυμερούς, οριακά μονωτικό σε ηλεκτρικό ρεύμα εκ φύσεως, αποκτά μια ασυνήθιστα μεγάλη αγωγιμότητα εαν ενισχυθεί το εσωτερικό του με μικρά τεμάχια γραφενίου, δεδομένου ότι εξετάζουμε τα υλικά σε

νανομετρικές κλίμακες. Το φαινόμενο σήραγγας είναι μια πιθανή εξήγηση για τα παραπάνω. Ο Υνονnet για να διαπιστώσει την επίδραση του φαινομένου σήραγγας χρησιμοποίησε τα πεπερασμένα στοιχεία ως προσεγγιστική αριθμητική μέθοδο για να υπολογίσει τις τιμές του δυναμικού στο εσωτερικό της δομής από το οποίο προκύπτει η τιμή του ηλεκτρικού ρεύματος. Όπως θα εξεταστεί και παρακάτω, προκύπτουν μη γραμμικότητες ως προς την πυκνότητα ηλεκτρικού ρεύματος και την διαφορά δυναμικού, οι οποίες επιλύονται αναπτύσσοντας μια γραμμική προσέγγιση των αρμόδιων μαθηματικών εκφράσεων, ούτως ώστε να εφαρμοστεί άρτια η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων που επιλέχθηκε για τις ανάγκες του προβλήματος

Το φαινόμενο σήραγγας φαίνεται να είναι υπεύθυνο για την μη γραμμική συμπεριφορά του ηλεκτρικού ρεύματος εντός του υλικού καθώς και για την φαινόμενη υψηλή αγωγιμότητα του κατά τ'άλλα σχεδόν μονωτικού πολυμερούς φτιαγμένο από ανθρακονήματα (Carbon Fiber). Θεωρητικά, για διαστάσεις νανομετρικής κλίμακας, τα ηλεκτρόνια συμπεριφέρονται σαν ουσιαστικά να περνούν μέσα από μια σήραγγα μέσα από τέτοια φράγματα αγωγιμότητας, δεδομένης κάποιας ορισμένης απόστασης ανάμεσα στα δύο αγωγία μέσα. Κατ'επέκταση, αυτή η κίνηση των ηλεκτρονίων προς μια διεύθυνση ουσιαστικά αποδίδει ηλεκτρικό ρεύμα, σε ένα μέσο που υπό άλλες συνθήκες δεν θα μπορούσε να αποδώσει.

Το φαινόμενο αυτό έχει φανεί μέσα από πειραματικά δεδομένα. Για την αναπαραγωγή αυτών των αποτελεσμάτων. Για τις εξισώσεις που ακολουθούν, οι όροι που φαίνονται με **έντονη** γραμματοσειρά αντιπροσωπεύουν τανυστικά και μητρικά μεγέθη ενώ οι όροι με κανονική, βαθμωτά μεγέθη.

5 ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΥΠΟΒΑΘΡΟ

5.1 ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ

Η μελέτη διαφόρων φυσικών φαινομένων όπως λόγου χάρη, η στατική ανάλυση ενός φορέα από σκυρόδεμα, η μεταφορά θερμότητας από ένα σώμα σε ένα άλλο αλλά και η ηλεκτρομαγνητική απόκριση ενός υλικού σε διαφορά δυναμικού,

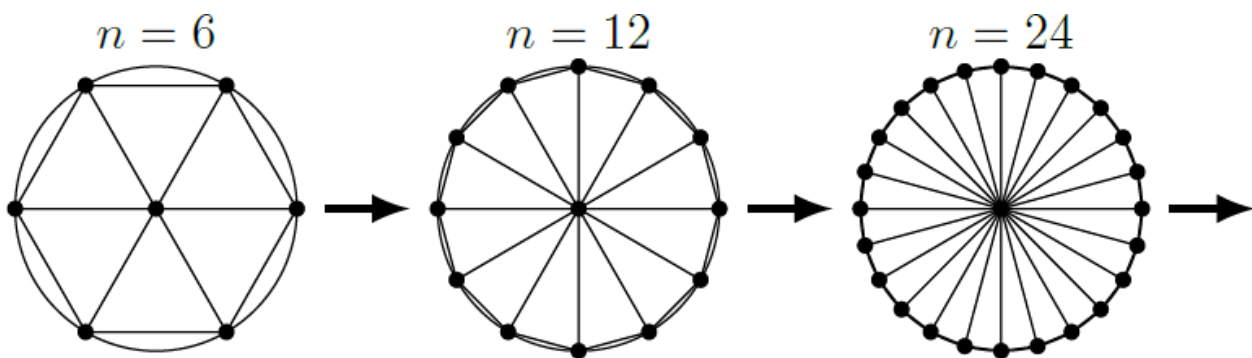
ουσιαστικά διεξάγεται μέσω των μαθηματικών εκφράσεων και εξισώσεων που περιγράφουν τα εν λόγω φαινόμενα. Μολονότι αυτές οι εξισώσεις δεν είναι απαραίτητα εξαιρετικά δύσκολες στην διατύπωση και ως προς την μαθηματική επαγωγή μέσω την οποίας οδηγηθήκαμε σε αυτές, η ακριβής επίλυση αυτών μπορεί να αποτελέσει ένα πολύ δυσχερές εγχείρημα. Για τέτοιου είδους περιπτώσεις, μια εναλλακτική, προσεγγιστική μέθοδος για την επίλυση αυτών των προβλημάτων είναι πολλές φορές η οδός που κανείς θα ακολουθήσει προκειμένου να εξάγει κάποιο χρήσιμο αποτέλεσμα. Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων αποτελεί μια τέτοια μέθοδο και είναι ευρέως διαδεδομένη λόγω της ευκολίας της στην απλοποίηση πολύπλοκων γεωμετρικά δομών καθώς και στις προσομείωση εφαρμογών σε H/Y. Έτσι, για παράδειγμα, μια σύνθετη γεωμετρικά δομή μπορεί να καταμεριστεί σε ένα πλήθος απλούστερων υποπεδίων τα οποία είναι πολύ πιο εύκολα στην μαθηματική μεταχείριση, τα οποία ονομάζονται πεπερασμένα στοιχεία.

Πρόδρομος της μεθόδου αποτέλεσε η μελέτη του Ρώσο-Καναδού μηχανικού Alexander Pavlovich Hrennikoff και καθηγητή του πανεπιστημίου της Βρεταννικής Κολούμπια, ο οποίος το 1941 επιχείρησε να αντικαταστήσει ένα ελαστικό πλέγμα με ένα σύνολο δοκών και ράβδων. Η μέθοδος ουσιαστικά γεννήθηκε λίγα χρόνια αργότερα όταν για την επίλυση του προβλήματος των κεκλιμένων πτερύγων των μαχητικών αεροσκαφών. Τα αεροσκάφη είχαν υψηλές απαιτήσεις αντοχής σε τάση καθώς ο σχεδιασμός ήθελε την ανάπτυξη ιδιαίτερα υψηλών ταχυτήτων, κατά τον Β' Παγκόσμιο Πόλεμο. Έτσι, ο Έλληνας μηχανικός Ιωάννης Αργύρης επινόησε την χρήση τριγωνικών στοιχείων σε περιβάλλον ηλεκτρομηχανικού υπολογιστή ο οποίος διέθετε δυνατότητα χειρισμού αλγεβρικών συστημάτων έως και 64 αγνώστων. Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων είχε γεννηθεί και αμέσως βρίσκει πρακτική εφαρμογή.

Βασική αρχή της μεθόδου είναι, όπως αναφέρθηκε, ο καταμερισμός της γεωμετρίας του προβλήματος σε ένα σύνολο υποπεδίων κατά τρόπο ώστε η διαχείριση τους να είναι απλούστερη συγκριτικά με την αυτήν ολόκληρου του εκάστοτε σχήματος. Κάθε ένα από τα υποπεδία οφείλει να υπακούει στις φυσικές ιδιότητες του τμήματος στο οποίο ανήκει, είτε αυτό είναι κάποια πάγια φυσική σταθερά όπως αγωγιμότητα, διαπερατότητα ή κατά μέτρο ελαστικότητας, είτε συμπεριφορά υπό ορισμένο είδος φόρτισης.

Αφού έχει χωριστεί ο φορέας κατά ικανοποιητικό αριθμό στοιχείων πρέπει να διατυπωθεί ο τρόπος με τον οποίον προσεγγίζεται ο υπολογισμός του ζητούμενου μεγέθους για το οποίο επιχειρούμε να λύσουμε το πρόβλημα. Σε αυτό το σημείο, γίνεται η παραδοχή ότι η ζητούμενη λύση ακολουθεί ένα προσεγγιστικό πεδίο στο εσωτερικό κάθε στοιχείου. Το πεδίο αυτό συνήθως πρόκειται για ένα άθροισμα πολυωνυμικών συναρτήσεων διότι εύκολα μπορεί να προσομοιωθεί η καμπυλότητα και η συνέχεια του πεδίου της λύσης. Σημειώνεται, ότι η επιλογή πολυωνυμικών συναρτήσεων δεν είναι δεσμευτική για τον μελετητή, απλώς στην πλειονότητα των περιπτώσεων αποτελεί την ευχερέστερη μέθοδο καθώς τα πολώνυμα είναι πολύ ευκολότερα στον χειρισμό. Θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν κάλλιστα, ημιτονοειδείς συναρτήσεις. Οι συναρτήσεις αυτές αποκαλούνται συναρτήσεις σχήματος

Έχοντας προετοιμάσει κατάλληλα την διακριτοποίηση της γεωμετρίας του προβλήματος και οπλίζοντας τα πεπερασμένα στοιχεία με τις συναρτήσεις σχήματος, ακολουθεί η αναλυτική επίλυση ως προς το ζητούμενο ξεχωριστά για κάθε στοιχείο, και τα αποτελέσματα συνολικά πλέον συνιστούν την τελική λύση. Η ακρίβεια αυτής εξαρτάται, προφανώς από τον αριθμό των στοιχείων της διακριτοποίησης, και την φύση των συναρτήσεων σχήματος, αν δηλαδή αυτές προσεγγίζουν ικανοποιητικά την ομαλότητα την λύσης.



Εικόνα 5-1: Διακριτοποίηση κυκλικού φορέα

Στην εικόνα 1 φαίνεται μια οπτικοποίηση του πως όσο μεγαλύτερος ο αριθμός των στοιχείων της διακριτοποίησης, τόσο ακριβέστερη η προσέγγιση της γεωμετρίας του εξεταζόμενου πεδίου, και κατ' επέκταση, της ζητούμενης λύσης.

5.1.1 ΜΗ ΓΡΑΜΜΙΚΑ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ

Πολλές φορές, το είδος των προβλημάτων που πραγματευόμαστε απαιτεί ιδιαίτερη μεταχείριση καθώς ενδεχομένως να προκύψουν μη γραμμικότητες ως προς την γεωμετρία ή ως προς τις φυσικές ιδιότητες, όταν για παράδειγμα η καταστατική σχέση που χρησιμοποιείται εμπεριέχει μη γραμμικότητες σε σχέση με τη ζητούμενη λύση. Για παράδειγμα, ας θεωρήσουμε πως διερευνούμε για την δυσκαμψία ενός μηχανικού φορέα \mathbf{K} . Η γραμμική συσχέτιση ανάμεσα στην δυσκαμψία και την μετατόπιση εκφράζεται για κάθε στοιχείο ως

$$[\mathbf{K}]\{\mathbf{D}\} = \{\mathbf{R}_c\} \quad (1)$$

Όπου $\{\mathbf{D}\}$ το διάνυσμα των επικόμβιων μετακινήσεων και $\{\mathbf{R}_c\}$ αντίστοιχα, τον επικόμβιων δράσεων. Το μητρώο δυσκαμψίας \mathbf{K} υπολογίζεται μέσω την αριθμητικής προσέγγισης της μεθόδου. Η μη γραμμικότητα του υλικού, υπεισέρχεται στα μαθηματικά ως εξάρτηση ανάμεσα στα στοιχεία $\mathbf{K}_{ij} = \mathbf{K}_{ij}(\mathbf{u})$, όπου \mathbf{u} το διάνυσμα των μετατοπίσεων. Σε τέτοια περίπτωση χρησιμοποιούνται κατάλληλες τεχνικές ώστε να απαλειφθεί η μη γραμμικότητα και να προχωρήσουμε κατά τα γνωστά.

5.1.2 ΤΕΤΡΑΠΛΕΥΡΙΚΑ ΙΣΟΠΑΡΑΜΕΤΡΙΚΑ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ

Τα ισοπαραμετρικά στοιχεία επινοήθηκαν κατά την προσπάθεια διαχείρισης στοιχείων μη ορθογωνικών και με καμπυλόγραμμες πλευρές. Χάρη σε αυτά, μας δίνεται η δυνατότητα πιστότερης προσομοίωσης της γεωμετρίας με οποιοδήποτε σχήμα και με καμπύλα σύνορα. Η διαδικασία προσομοίωσης χρησιμοποιεί ένα

δεύτερο σύστημα συντεταγμένων, το οποίο ορίζεται στο Καρτεσιανό σύστημα μέσω μια απεικόνισης, και ονομάζεται φυσικό σύστημα. Απαιτείται επιπλέον ο προσδιορισμός του μητρώου μετασχηματισμού $[J]^1$, που εκφράζει την Ιακωβιανή της απεικόνισης.

Ο όρος ισοπαραμετρικός οφείλεται στο ότι οι συνιστώσες των μετατοπίσεων ή μεγεθών που αναζητούμε, καθώς και η απεικόνιση των συντεταγμένων στο φυσικό σύστημα εκφράζονται ως προς τις επικόμβιες ποσότητες με τις ίδιες συναρτήσεις σχήματος. Εάν τα πολυώνυμα που εκφράζουν την απεικόνιση των συντεταγμένων ήταν χαμηλότερου βαθμού από αυτά των μετατοπίσεων, τότε θα συζητούσαμε για υποπαραμετρική θεώρηση, και κατά πλήρη αντιστοιχία, υπερπαραμετρική θεώρηση για πολυώνυμα υψηλότερου βαθμού.

Η απεικόνιση, ορίζει τις συντεταγμένες x, y, z στο καρτεσιανό σύστημα συναρτήσει των φυσικών συντεταγμένων ξ, η, ζ , δηλαδή, για το τρισδιάστατο στοιχείο είναι:

$$x = x(\xi, \eta, \zeta)$$

$$y = y(\xi, \eta, \zeta)$$

$$z = z(\xi, \eta, \zeta)$$

Και αντίστοιχα, η αντίστροφη απεικόνιση:

$$\xi = \xi(x, y, z)$$

$$\eta = \eta(x, y, z)$$

$$\zeta = \zeta(x, y, z)$$

¹ Το μητρωο $[J]$ εκφράζει το Ιακωβιανό μητρώο και δεν πρέπει να παρερμηνευτεί για το J που συμβολίζει το διάνυσμα της πυκνότητας ηλεκτρικού ρεύματος.

Η απεικόνιση μεταξύ των καμπυλόγραμμων και των Καρτεσιανών συντεταγμένων είναι αμφιμονοσήμαντη, δηλαδή για κάθε στοιχείο με συντεταγμένες (x,y,z) , αντιστοιχεί ένα μόνο σημείο με συντεταγμένες (ξ,η,ζ) και αντίστροφα. Ο όγκος του στοιχειώδους παραλληλεπιπέδου στο Καρτεσιανό σύστημα εκφράζεται ως

$$dV = \begin{vmatrix} \frac{dx}{d\xi} & \frac{dy}{d\xi} & \frac{dz}{d\xi} \\ \frac{dx}{d\eta} & \frac{dy}{d\eta} & \frac{dz}{d\eta} \\ \frac{dx}{d\zeta} & \frac{dy}{d\zeta} & \frac{dz}{d\zeta} \end{vmatrix} d\xi d\eta d\zeta = \det[J] d\xi d\eta d\zeta \quad (2)$$

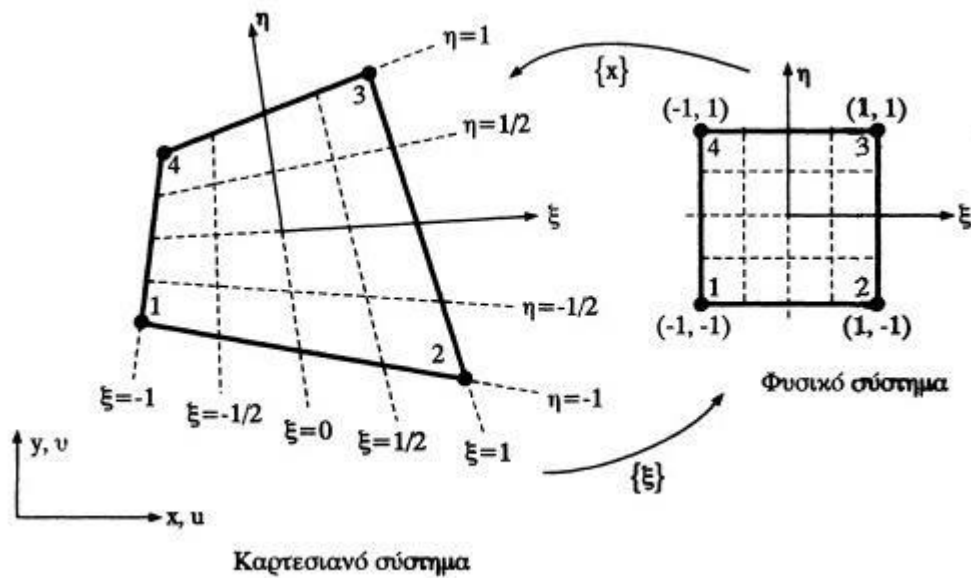
Όπου $\det[J]$ η ορίζουσα του Ιακωβιανού μητρώου J

Εαν πρόκειται για διδιάστατη απεικόνιση, τότε το στοιχειώδες εμβαδόν πλέον, dA , εκφράζεται ως:

$$dA = \begin{vmatrix} \frac{dx}{d\xi} & \frac{dy}{d\xi} \\ \frac{dx}{d\eta} & \frac{dy}{d\eta} \end{vmatrix} d\xi d\eta = \det[J] d\xi d\eta \quad (3)$$

Και προφανώς, για την μονοδιάστατη απεικόνιση, λαμβάνουμε:

$$dx = \left(\frac{dx}{d\xi} \right) d\xi = \det[J] d\xi \quad (4)$$



Εικόνα 5-2: Ο αμφιμονοσήμαντος μετασχηματισμός από το φυσικό στο καρτεσιανό κι εναλλάξ [3]

Κατά τα γνωστά της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων, θεωρήθηκε πως το ηλεκτρικό δυναμικό ακολουθεί μια πολυωνυμική κατανομή εντός του κάθε στοιχείου, η οποία εκφράζεται από τις συναρτήσεις σχήματος που τους αντιστοιχεί. Οι συναρτήσεις σχήματος χρησιμοποιούνται για τον προσεγγιστικό προσδιορισμό της τιμής της μεταβλητής, για οποιοδήποτε σημείο του πεπερασμένου στοιχείου, εκφράζοντας την ως προς τις επικόμβιες τιμές της μεταβλητής αυτής. Εν προκειμένω, υποθέτουμε πως το δυναμικό εντός ενός πεπερασμένου στοιχείου ακολουθεί τις συναρτήσεις σχήματος. Για το υπόψη πρόβλημα, επιλέγονται πολυωνυμικές συναρτήσεις, ορισμένες κατά τις δύο διαστάσεις του κάθε στοιχείου. Αυτές είναι, στο φυσικό σύστημα:

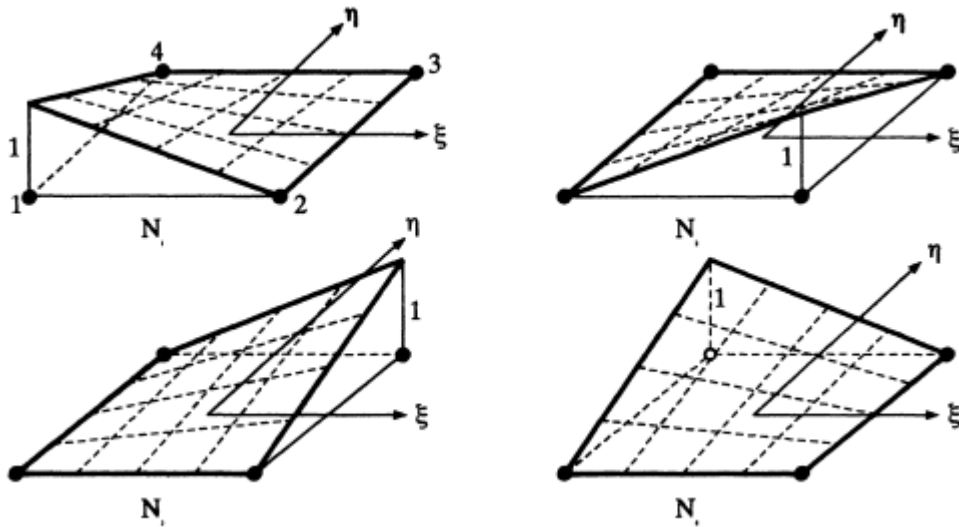
$$N_1 = \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 - \eta)$$

$$N_2 = \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 - \eta)$$

$$N_3 = \frac{1}{4}(1 + \xi)(1 + \eta)$$

$$N_4 = \frac{1}{4}(1 - \xi)(1 + \eta)$$

Όπου ξ η οριζόντια συντεταγμένη και η η κατακόρυφη, και προφανώς $\xi, \eta \leq 1$



Εικόνα 5-3 Οπτικοποίηση των συναρτήσεων σχήματος [3]

5.1.3 ΟΛΟΚΛΗΡΩΣΗ GAUSS

Η ισοπαραμετρική θεώρηση μας βοηθάει να αναπαράγουμε πιστότερα την προσομοίωση των πεπερασμένων στοιχείων, ειδικά εάν πρόκειται για στοιχεία με καμπύλης γεωμετρίας. Επιπλέον, επειδή το MATLAB δεν είναι εφοδιασμένο με τα κατάλληλα εργαλεία ώστε να διεξάγει ολοκλήρωση συνάρτησης, καταφεύγουμε στην μέθοδο αριθμητικής ολοκλήρωσης Gauss, η οποία εφαρμόζεται άμεσα στα ισοπαραμετρικά πεπερασμένα στοιχεία. Επιλέγονται δειγματοληπτικά σημεία εντός της συνάρτησης σχήματος του στοιχείου και συντελεστές βάρους αντίστοιχα προκειμένου να βελτιστοποιηθεί η ακρίβεια του τελικού αποτελέσματος. Τα σημεία και τα βάρη αντίστοιχα μπορούν να είναι οποιουδήποτε πλήθους, αλλά για

πάνω από 6, η διαδικασία υπολογισμού της ολοκλήρωσης Gauss καθιστάται εξαιρετικά πολύπλοκη. Η ολοκλήρωση Gauss μας επιτρέπει να αντικαταστήσουμε την ολοκλήρωση από επαλληλία των τιμών της συνάρτησης στο δειγματοληπτικό σημείο επί τον συντελεστή βάρους, κάτι που μπορεί να διαχειριστεί το MATLAB

Για να επιτευχθεί αυτό το είδος αριθμητικής ολοκλήρωσης, θα χρησιμοποιηθεί ο τετραγωνισμός Gauss-Legendre (Gauss-Legendre quadrature). Αυτή η μέθοδος, για ολοκλήρωση στο διάστημα $[-1, 1]$ παίρνει την μορφή

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

Όπου

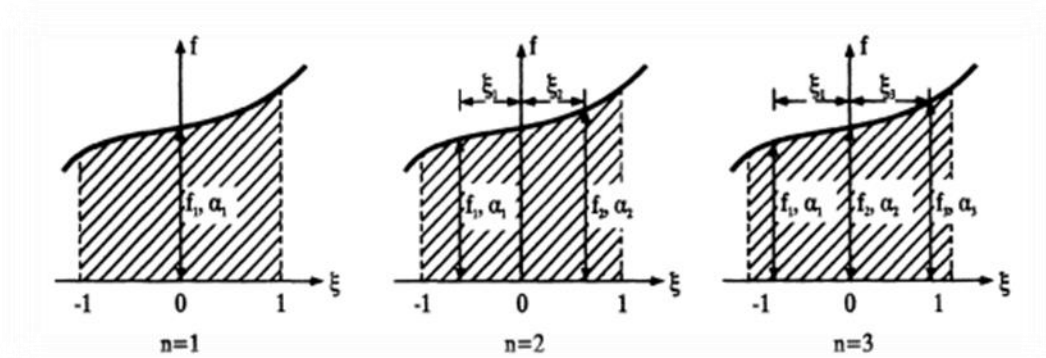
- n το πλήθος των δειγματοληπτικών σημείων
- w_i οι συντελεστές βάρους
- x_i οι ρίζες του n -οστού πολυωνύμου Legendre

Αναλόγως το πλήθος των δειγματοληπτικών σημείων n , η επιλογή των w_i και x_i μας επιτρέπει να ολοκληρώσουμε πολυώνυμα βαθμού έως και $2n-1$ με πλήρη ακρίβεια

n	x_i	w_i
1	0.0	2.0
2	± 0.57735	1.0
3	± 0.77459 0.0	0.55555 0.88888
4	± 0.86113 ± 0.33998	0.34785 0.65214
5	± 0.90617 ± 0.53846 0.0	0.23692 0.47862 0.56888

6	± 0.93246	0.17132
	± 0.66120	0.36076
	± 0.23861	0.46791

Πίνακας 1 Οι τιμές των ριζών και βαρών για τα πολυώνυμα Legendre [3]



Εικόνα 5-4 Η επιλογή σημείων και βαρών Gauss [3]

5.2 ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΑ ΕΡΓΑΛΕΙΑ

5.2.1 NEWTON-RAPHSON

Στην αριθμητική ανάλυση, η μέθοδος Newton-Raphson είναι μια επαναληπτική διαδικασία η οποία αποσκοπεί στον προσεγγιστικό υπολογισμό των ριζών μιας

διαφορίσιμης συνάρτησης. Εφόσον η παράγωγος f' είναι κι αυτή διαφορίσιμη, η διαδικασία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να βρεθούν οι ρίζες της παραγώγου, δηλαδή τα κρίσιμα σημεία της συνάρτησης. Αυτα τα σημεία μπορεί να είναι τα ακρότατα και τα σαγματικά σημεία της συνάρτησης σε κάποιο διάστημα.

Υποθέτουμε μια αρχική λύση x_0 και βάσει αυτής προχωρούμε στην προσέγγιση της x_1 , κατασκευάζοντας σταδιακά μια ακολουθία προσεγγιστικών λύσεων x_k εως ότου ικανοποιηθούν τα απαραίτητα κριτήρια ακρίβειας όπως τα θεσπίσαμε στο εκάστοτε πρόβλημα. Θεωρώντας μια μονομεταβλητή συνάρτηση, η διαδικασία εκτελεί την επανάληψη

$$x_{k+1} = x_k + t = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)} \quad (5)$$

Για να καταλήξουμε σε αυτήν την μορφή, αρχικά θεωρούμε το ανάπτυγμα Taylor δευτέρας τάξης για την συνάρτηση f ως

$$f(x_k + t) \approx f(x_k) + f'(x_k)t + \frac{1}{2}f''(x_k)t^2 \quad (6)$$

Στην επόμενη επανάληψη, προσδιορίζεται το x_{k+1} ώστε να ελαχιστοποιείται η ως άνω προσέγγιση κατά t . Θέτοντας την παράγωγο ίση με 0, αποδίδεται

$$\frac{d}{dt} \left(f(x_k) + f'(x_k)t + \frac{1}{2}f''(x_k)t^2 \right) = f'(x_k) + f''(x_k)t = 0 \quad (7)$$

Συνεπάγεται

$$t = -\frac{f'(x_k)}{f''(x_k)} \quad (8)$$

Και έτσι καταλήγουμε στην αρχική σχέση.

Σε περίπτωση που εμπλέκονται μητρωικές σχέσεις σε ένα σύνθετο πρόβλημα περισσότερων βαθμών ελευθερίας, λόγω χάρη ο προσδιορισμός της μετατόπισης ενός δομικού στοιχείου, η μέθοδος λαμβάνει την μορφή:

$$[K]\{\Delta u\} = \{R\} - \{F\} \quad (1)$$

$[K]$ το εφαπτομενικό μητρώο στιβαρότητας. $\{R\}$ το διάνυσμα των εξωτερικών δράσεων και $\{F\}$ των εσωτερικών. Οι ποσότητες $[K]$ και $\{F\}$ υπολογίζονται βάσει της λύσης u_i , η οποία ανανεώνεται αντίστοιχα ως $u_{i+1} = u_i + \Delta u$, δεδομένης αρχικής λύση u_0 .

5.2.2 ΛΟΓΙΣΜΟΣ ΤΩΝ ΜΕΤΑΒΟΛΩΝ

Ορισμένες μαθηματικές αρχές, που ονομάζονται παραλλακτικές ή ενεργειακές αρχές παίζουν μείζονα ρόλο στην μελέτη μηχανικών και φυσικών φαινομένων. Κάποιες από αυτές είναι η αρχή των δυνατών έργων, η αρχή της ελάχιστης δυναμικής ενέργεια, η αρχή του Hamilton, και άλλες. Μέσω αυτών των αρχών οδηγούμαστε στην διερεύνηση για μία ή περισσότερες, συναρτήσεις ή μεταβλητές που κάνουν στάσιμη την τιμή ενός συγκεκριμένου ολοκληρώματος. Δηλαδή αναζητούμε τα μέγιστα, ελάχιστα και σαγματικά σημεία τους εν λόγω ολοκληρώματος. Το ολοκλήρωμα αυτό είναι συνάρτηση των αγνώστων συναρτήσεων και των παραγώγων τους, και καλείται συναρτησιακό.

Για παράδειγμα, η δυναμική ενέργεια μιας ράβδου, εξαρτάται από την συνάρτηση της μετατόπισης $u(x, y, z)$, ή οποία απαιτείται να ανήκει σε ένα σύνολο αποδεκτών συναρτήσεων που ικανοποιούν τις συνοριακές συνθήκες του προβλήματος. Σε αυτό το παράδειγμα, η αρχή της ελάχιστης ενέργειας υπαγορεύει πως οι συναρτήσεις εκείνες που ελαχιστοποιούν την ενέργεια, αποτελούν τις πραγματικές μετατοπίσεις του προβλήματος.

Το πεδίο των μαθηματικών που αναζητά την εύρεση των στάσιμων τιμών των συναρτησιακών, ονομάζεται λογισμός των μεταβολών. Αυτή η μεθοδολογία βοηθά στην παραγωγή των διαφορικών εξισώσεων που διέπουν το εκάστοτε πρόβλημα καθώς και το σύνολο των αποδεκτών αρχικών και συνοριακών συνθηκών που είναι ενεργειακά συμβατές με τις παραδοχές της θεώρησης. Επιπλέον, ο λογισμός

των μεταβολών είναι συμβατός με προσεγγιστικές μεθόδους επίλυσης, όπως αυτή των πεπερασμένων στοιχείων.

5.2.3 ΣΤΑΣΙΜΗ ΤΙΜΗ ΣΥΝΑΡΤΗΣΙΑΚΟΥ

Θεωρούμε συναρτησιακό μίας και μόνο συναρτήσεων μιας μεταβλητής, με δεδομένες τιμές στα άκρα. Αυτό λαμβάνει την μορφή:

$$I = \int_a^b F(x, u_*, u'_*) dx \quad (9)$$

Όπου $u_* = u_*(x)$ που ανήκει σε ένα σύνολο αποδεκτών συναρτήσεων και u'_* η παράγωγος της. Το σύνολο των αποδεκτών συναρτήσεων u_* , οφείλει να διαθέτει τις ακόλουθες ιδιότητες:

- Οι συναρτήσεις έχουν συνεχείς παραγώγους δευτέρας τάξης
- Λαμβάνουν δεδομένες τιμές στο σύνορο του πεδίου, εν προκειμένω για $x=a$ και $x=b$

Η F έχει συνεχείς δεύτερες παραγώγους ως προς x , u_* και u'_* . Δεχόμαστε πως υπάρχει μια συνάρτηση u η οποία κάνει την τιμή του συναρτησιακού στάσιμη. Έτσι, για δεδομένη, αυθαίρετη συνάρτηση $\eta(x)$, συνεπή προς τις ιδιότητες της u , και για μικρή διαταραχή ε λαμβάνεται

$$u_*(x) = u(x) + \varepsilon \eta(x) \quad (10)$$

Θέτοντας $\varepsilon = 0$ λαμβάνεται η συνάρτηση που κάνει στάσιμη την τιμή του συναρτησιακού. Δηλώνοντας I_* την τιμή του I που αντιστοιχεί στην u_* , λαμβάνουμε:

$$I_*(\varepsilon) = \int_a^b F(x, u_*, u'_*) dx = \int_a^b F(x, u + \varepsilon\delta, u' + \varepsilon\delta') dx \quad (11)$$

Με την παραδοχή ότι η $I_*(\varepsilon)$ έχει συνεχεία παραγώγους οποιασδήποτε τάξεως, μπορούμε να την αναπτύξουμε ως σειρά Taylor γύρω από την θέση $\varepsilon = 0$. Είναι

$$I_*(\varepsilon) - I_*(0) = \left. \frac{dI_*}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} \varepsilon + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 I_*}{d\varepsilon^2} \right|_{\varepsilon=0} \varepsilon^2 + \dots \quad (12)$$

Η στάσιμη τιμή αποδίδεται από την συνθήκη

$$\left. \frac{dI_*}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = 0 \quad (13)$$

Αντικαθιστώντας

$$\left. \frac{dI_*}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = \int_a^b \left. \frac{dF}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} dx = \int_a^b \left[\frac{\partial F}{\partial u_*} \frac{du_*}{d\varepsilon} + \frac{\partial F}{\partial u'_*} \frac{du'_*}{d\varepsilon} \right]_{\varepsilon=0} dx = 0 \quad (14)$$

Διαπιστώνουμε εύκολα πως από την παραγώγιση ως προς ε , λαμβάνουμε

$$\frac{du_*}{d\varepsilon} = \eta, \quad \frac{du'_*}{d\varepsilon} = \eta' \quad (15)$$

Και αφού για $\varepsilon = 0$ είναι $u_* = u$ και $u'_* = u'$, τότε

$$\left. \frac{\partial F}{\partial u_*} \right|_{\varepsilon=0} = \frac{\partial F}{\partial u}, \quad \left. \frac{\partial F}{\partial u'_*} \right|_{\varepsilon=0} = \frac{\partial F}{\partial u'} \quad (16)$$

Συνεπώς, η σχέση (13) μπορεί να γραφεί

$$\left. \frac{dI_*}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} = \int_a^b \left[\frac{\partial F}{\partial u_*} \eta + \frac{\partial F}{\partial u_*'} \eta' \right] dx = 0 \quad (17)$$

Η ποσότητα $\varepsilon\eta(x)$ γράφεται ως δu και αποκαλείται μεταβολή της u . Είναι δηλαδή $u_* - u = \delta u = \varepsilon\eta(x)$, και δ είναι ο τελεστής της μεταβολής

5.2.4 ΑΣΘΕΝΗΣ ΜΟΡΦΗ

Καίρια για την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων, είναι η δυνατότητα να εκφράσουμε τις διαφορικές εξισώσεις που διέπουν το σύστημα στην ασθενή τους μορφή. Η ασθενείς μορφές είναι σημαντικά εργαλεία για την μαθηματική ανάλυση σύνθετων συστημάτων που περιγράφονται από μερικές διαφορικές εξισώσεις. Σε αυτές τις μορφές, δεν είναι απαραίτητο κάποιες συνθήκες συνέχειας και διαφορισιμότητας να ευσταθούν απολύτως, δηλαδή βρίσκουμε λύσεις που απαιτούν ασθενέστερες προϋποθέσεις ομαλότητας.

Η διαφορική εξίσωση που διέπει το σύστημα μαζί με τις συνοριακές συνθήκες, αποτελούν την ισχυρή μορφή του προβλήματος. Ας θεωρήσουμε τα εξής δεδομένα για ένα πρόβλημα μίας διάστασης. Είναι:

$$1. \frac{d}{dx} \left(a(x) \frac{du}{dx} \right) = q(x), \quad 0 < x < L$$

$$2. u(0) = u_0$$

$$3. \left. a \frac{du}{dx} \right|_{x=L} = q_0$$

Τα μεγέθη $a(x)$, $q(x)$, u_0 , q_0 , L , θεωρούνται δεδομένα. Κατά την διαδικασία, πολλαπλασιάζουμε την εξίσωση 1 με μια αυθαίρετη συνάρτηση $w(x)$ και ολοκληρώνουμε σε όλο το πεδίο που ορίζει το πρόβλημα. Η συνάρτηση $w(x)$ καλείται συνάρτηση βάρους ή αλλιώς συνάρτηση δοκιμής (test function). Είναι σημαντικό η συνάρτηση δοκιμής να είναι αυθαίρετη, διαφορετικά παύει να ισχύει η ισοδυναμία ανάμεσα στην ασθενή και την ισχυρή μορφή. Προχωρώντας:

$$\int_0^L w(x) \left[\frac{d}{dx} \left(a \frac{du}{dx} \right) - q(x) \right] dx = 0 \quad (18)$$

Στην συνέχεια, εφαρμόζοντας τον κανόνα της παραγοντικής ολοκλήρωσης έχουμε:

$$\int_0^L \left[\frac{dw}{dx} a \frac{du}{dx} - wq \right] dx - \left[wa \frac{du}{dx} \right]_0^L = 0 \quad (19)$$

Στην παραπάνω σχέση βλέπουμε ότι ήδη οι απαιτήσεις διαφορισιμότητας για την u είναι πρώτης τάξης αντί για δευτέρας όπως είχαμε στην ισχυρή μορφή. Η επιπλέον απαίτηση διαφορισιμότητας μετατέθηκε στην συνάρτηση δοκιμής w . Αξίζει να σημειωθεί ότι ο δεύτερος όρος της παραπάνω σχέσης αποδίδει απο μόνος του την συνοριακή συνθήκη 3, επομένως παραμένει για εμάς μόνο να επιβάλουμε κατα την επιλογή συναρτήσεων σχήματος για την u , την συνθήκη $u(0) = u_0$.

6 ΕΦΑΡΜΟΓΗ

Το φαινόμενο σήραγγας ουσιαστικά είναι η παρατήρηση ότι τα κινούμενα ηλεκτρόνια μπορούν ουσιαστικά να διαπεράσουν το μονωτικό υλικό, αγνοώντας πρακτικά το «φράγμα» που παρουσιάζει αυτό απέναντι στην κίνηση των ηλεκτρονίων δηλαδή του ηλεκτρικού ρεύματος κατά τα γνωστά της φυσικής. Στην δική μας περίπτωση, το σκέλος από πολυμερές έχει τον ρόλο του μονωτή ο οποίος εν τέλει θα διαπεραστεί από ηλεκτρικό ρεύμα χάρη στο αγώγιμο γραφένιο. Ο Yvonnet[4] διαπίστωσε πως το φαινόμενο σήραγγας παίζει μείζονα ρόλο στην εμφάνιση αγωγιμότητας σε μια τρισδιάστατη δομή, και εξακρίβωσε την εγκυρότητα του μοντέλου επίλυσης πάνω σε ένα απλό πρόβλημα-σημείο αναφοράς μονοδιάστατης φύσης. Η μεταβλητή του προβλήματος είναι το ηλεκτρικό δυναμικό Φ στην επιφάνεια της δομής, και θα ελεγχθεί η διαφορά δυναμικού ανάμεσα στους κόμβους για να αποδειχθεί η παρουσία ηλεκτρικού ρεύματος. Παράλληλα θα διαπιστωθεί πως η ενεργός αγωγιμότητα της δομής είναι τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη από αυτήν του συνθετικού πολυμερούς.

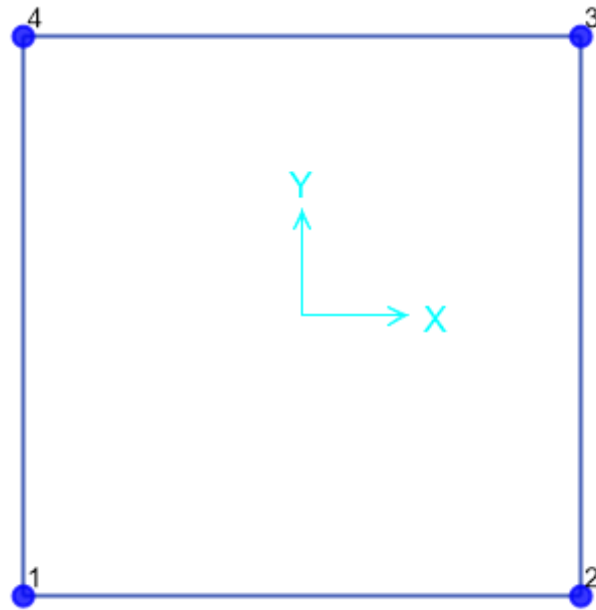
Κατά τα γνωστά της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων, θεωρήθηκε πως το ηλεκτρικό δυναμικό ακολουθεί μια πολυωνυμική κατανομή εντός του κάθε στοιχείου, η οποία εκφράζεται από τις αντίστοιχες συναρτήσεις σχήματος. Η διαδικασία έλαβε χώρα μετά από μετασχηματισμό της γεωμετρίας σε φυσικό σύστημα αξόνων κανονικοποιημένο στη μονάδα

Θα εργαστούμε διακριτοποιώντας τον φορέα σε ισοπαραμετρικά τετραπλευρικά στοιχεία. Αρχικά προσδιορίστηκε η δομή που θα υποβληθεί στην ηλεκτρομαγνητική φόρτιση. Η γεωμετρία υπεισέρχεται στη δομή, ως ορθογώνιο συνολικού πλάτους 3 nm και ύψους 1 nm. Το κάθε τμήμα υλικού είναι ουσιαστικά ένα τετράγωνο πλευράς 1 nm. Το κάθε στοιχείο της διακριτοποίησης έχει διαστάσεις $0.5 \times 0.5 \text{ \AA}$ όπου $1 \text{ \AA} = 10^{-1} \text{ nm}$ ούτως ώστε να βρεθούμε με $60 \times 20 = 1200$ στοιχεία αντίστοιχα κατά πλάτος και καθ' ύψος της δομής. Σημειώνεται, πως δεν υπάρχει κάποιος περιορισμός στο πλήθος των στοιχείων στα οποία διακριτοποιείται η δομή μας, παρά μόνο επιλέχθηκαν τα 1200 στοιχεία ως καταλληλός αριθμός από άποψη υπολογιστικού χρόνου για το MATLAB, και επαρκούς ακρίβειας αποτελεσμάτων.

Αφού η δομή μοντελοποιείται με διδιάστατα, επιφανειακά στοιχεία, θα αγνοηθεί η επιρροή της διάστασης του βάθους. Στήνουμε τα θεμέλια για την διεξαγωγή τη επίλυσης εισάγοντας σε ξεχωριστά διανύσματα τους κόμβους που υπάγονται στις συνοριακές συνθήκες, και τις τιμές αυτών. Τα γεωμετρικά στοιχεία του

προβλήματος αντιστοιχίζονται σε μεταβλητές και θέτουμε αρχικές τιμές για την νόρμα του προσαυξήματος του δυναμικού.

Όπως θα προσδιοριστεί παρακάτω, το μέτρο του διανύσματος της προσαύξησης ηλεκτρικού δυναμικού θα αποτελέσει κριτήριο για την ακριβεια της επαναληπτικής μεθόδου. Η φορτίση έναντι της οποίας εξετάστηκε η διατομή απαιτεί επιβολή δυναμικού στις κατακόρυφες πλευρές ως $\Phi = 0$ και $\bar{\Phi} = 0.2$ όπως φαίνεται και στην εικόνα (3-2) , και η πυκνότητα ηλεκτρικού ρεύματος \mathbf{J} είναι μηδενική στις οριζόντιες παρειές κατα την κάθετη διεύθυνση σε αυτές. Υπενθυμίζεται πως το πρόβλημα είναι μονοδιάστατο ως προς την μεταβλητή, δηλαδή το ηλεκτρικό δυναμικό μεταβάλλεται μόνο ως προς την διεύθυνση X. Επίσης, πρέπει να υπολογιστεί η απόσταση του κέντρου του κάθε στοιχείου από το κοντινότερο σε αυτό, τμήμα γραφενίου για να ελέγχεται εάν το στοιχείο υπόκειται σε φαινόμενο σήραγγας και κατ'επέκταση να υπολογίζεται η επιρροή αυτού.

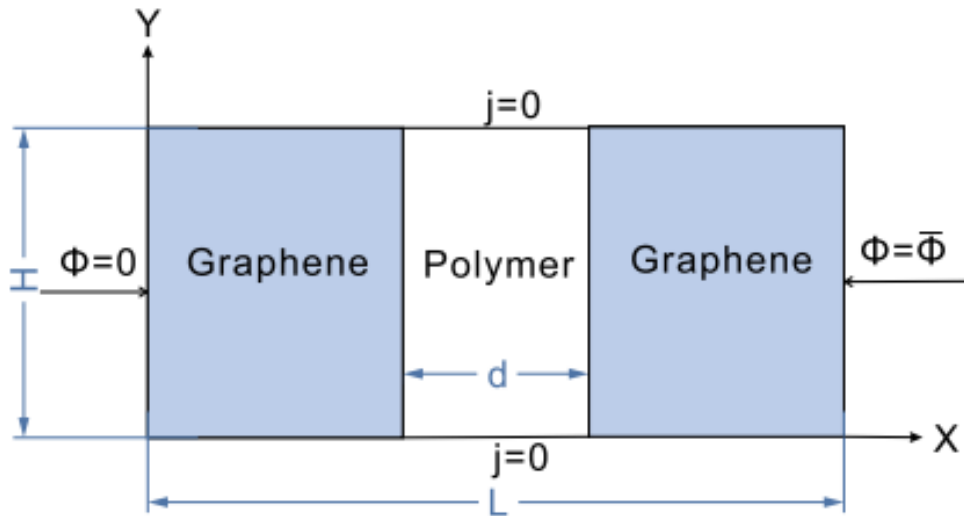


Εικόνα 6-1 ποιοτική απεικόνιση του πλαισίου επίλυσης ενός στοιχείου

Στην εικόνα φαίνεται σχηματικά το πλαίσιο στο οποίο το πρόγραμμα θα χειρίζεται το κάθε στοιχείο. Το φυσικό σύστημα έχει την αρχή των αξόνων στο γεωμετρικό κέντρο του στοιχείου. Κάθε στοιχείο θα πρέπει να φέρει την αρίθμηση των κόμβων όπως φαίνεται στην εικόνα, αριστερόστροφα με τον πρώτο κόμβο κάτω αριστερά. Επιπλέον, θα πρέπει οι κόμβοι να αριθμούνται προοδευτικά, διατηρώντας την αρίθμηση για τους κοινούς κόμβους μεταξύ των στοιχείων και προχωρώντας από κάτω και αριστερά προς τα πάνω και δεξιά για όλη την επιφάνεια του δοκιμίου

Αναλύοντας το δυναμικό εντός του στοιχείου ως γινόμενο των συναρτήσεων σχήματος με τις επικόμβιες τιμές του δυναμικού μπορούμε να μεταχειριστούμε τα μεγέθη με τέτοιο τρόπο ώστε να φαίνεται με σαφήνεια η ομοιότητα ανάμεσα στο ηλεκτρομαγνητικό πρόβλημα που πραγματεύεται η εργασία και σε ένα αντίστοιχο μηχανικό πρόβλημα.

Για το κάθε στοιχείο θα επιλυθεί η καταστατική μαθηματική εξίσωση που αποδίδει το ζητούμενο αποτέλεσμα. Αυτή πρόκειται για την ασθενή μορφή της έκφρασης της ενέργειας του συστήματος. Επειδή, λοιπόν, οι σχετικές μαθηματικές σχέσεις είναι εξαιρετικά δύσκολες στην προσπάθεια αναλυτικής μαθηματικής επίλυσης, θα προσδιοριστεί η ασθενής μορφή της έκφρασης την ενέργειας, και ως προς αυτή θα διεξαχθεί η προσεγγιστική μέθοδος επίλυσης με χρήση των ισοπαραμετρικών τετραπλευρικών πεπερασμένων στοιχείων. Επιπλέον, η μέθοδος καλείται να αντιμετωπίσει μη γραμμικότητα της ασθενούς μορφής ως προς την μεταβλητή μας. Ακολουθεί σαφής μαθηματική επεξήγηση του πως θα προσδιορισθεί η ασθενής μορφή, και πως γραμμικοποιείται εν τέλει η καταστατική σχέση.



Εικόνα 6-2 Απεικόνιση των συνοριακών συνθηκών του προβλήματος

6.1 ΦΥΣΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΚΑΙ ΔΕΔΟΜΕΝΑ

Το ενδιάμεσο σκέλος που αποτελείται από πολυμερές έχει αγωγιμότητα που περιγράφεται από

$$k_p = \begin{bmatrix} 10^{-10} & 0 & 0 \\ 0 & 10^{-10} & 0 \\ 0 & 0 & 10^{-10} \end{bmatrix}$$

Ενώ τα δύο ακραία σκέλη από γραφένιο αντίστοιχα έχουν k_p

$$k_g = \begin{bmatrix} 8.32 * 10^4 & 0 & 0 \\ 0 & 8.32 * 10^4 & 0 \\ 0 & 0 & 83.2 \end{bmatrix}$$

Για τους σκοπούς του προβλήματος θα αγνοηθεί η αγωγιμότητα κατά την διάσταση κάθετη στο επίπεδο της δομής μας, επομένως εισάγουμε τους τανυστές της αγωγιμότητας στο πρόγραμμα, μόνο με τα στοιχεία a_{ij} , καταλήγοντας έτσι σε δύο μητρώα 2x2, όπου:

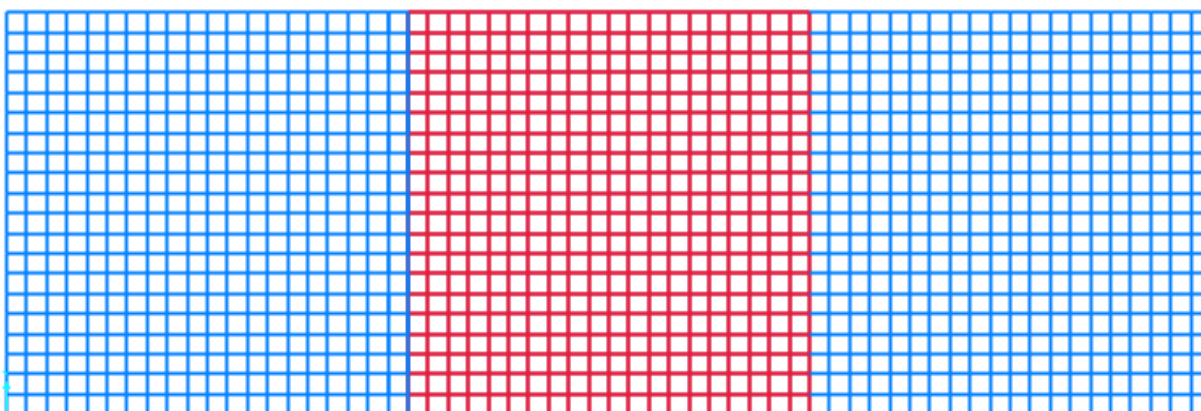
$$i, j \leq 2.$$

Η λύση του προβλήματος θα φταστεί μέσω της προσεγγιστικής μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων σε μια αναδρομική εξίσωση που θα προκύπτει εκφράζοντας την ασθενή μορφή της εξίσωσης που περιγράφει την ενέργεια του συστήματος. Στο περιβάλλον MATLAB έχουν προσδιοριστεί οι γεωμετρικές προδιαγραφές του προβλήματος όπως περιγράφηκαν παραπάνω, και τα δεδομένα της διακριτοποίησης και των συνοριακών συνθηκών. Στις γωνίες του κάθε στοιχείου αριθμήθηκαν οι κόμβοι πιστά στην διαδικασία που προαναφέρθηκε. Το λογισμικό του MATLAB αντιλαμβάνεται ως γνωστόν, μόνο διανύσματα, επομένως σε ξεχωριστά διανύσματα πρέπει να εισηχθούν:

- Οι κόμβοι που αντιστοιχούν σε σημεία του συνόρου της γεωμετρίας
- Οι τιμές του δυναμικού στους συνοριακούς κόμβους
- Οι βαθμοί ελευθερίας που αντιστοιχούν σε συνοριακό κόμβο

Αναπτύσσεται κώδικας ο οποίος εισάγει στο πρόγραμμα τις συντεταγμένες των κόμβων ως προς την αρχή των αξόνων, καθώς και την συνδεσιμότητα των κόμβων μεταξύ τους, έτσι ώστε να αναγνωρίζει το πρόγραμμα με ποιούς κόμβους (appendix) ακριβώς θα χρειαστεί να δουλέψει, ανάλογα με το στοιχείο που εξετάζεται. Σε αυτό το σημείο θα προσδιορισθεί η σειρά των κόμβων όπως φαίνεται στην εικόνα, κάτι το οποίο θα μας χρειαστεί στην κατασκευή του καθολικού εφαπτομενικού μητρώου αγωγιμότητας. Εισάγω ως αρχική μαντεψιά λύσης, ένα διάνυσμα που συμπεριλαμβάνει την τιμή του ηλεκτρικού δυναμικού κατ'αντιστοιχία με τους αριθμημένους κόμβους του συστήματος, το οποίο έχει $(60+1) \times (20+1) = 1281$ γραμμές και 1 μόνο στήλη, με καθε μία από τις γραμμές να αντιπροσωπεύουν έναν κόμβο.

Έχοντας εφοδιάσει τον κώδικα με αυτά τα στοιχεία είμαστε έτοιμοι να ξεκινήσουμε την επίλυση, η οποία γίνεται εντός μια συνάρτησης που καλείται εντός του προγράμματος, με ορίσματα τις γεωμετρικές και φυσικές ιδιότητες των υλικών όπως περιγράφηκαν έως τώρα μαζί με τις συνοριακές συνθήκες. Στο παρακάτω σχήμα φαίνεται μια ακριβής εικονογράφηση της διακριτοποίησης πάνω στην οποία θα επιλυθεί το πρόβλημα.



Εικόνα 6-3 Γραφένιο με μπλέ, πολυμερές με κόκκινο

Θα παράξουμε κώδικα ο οποίος τρέχοντας αναδρομικά θα υπολογίζει προσεγγιστικά το ηλεκτρικό δυναμικό σε κάθε έναν από τους κόμβους των στοιχείων και στη συνέχεια θα ενημερώνει την αρχική λύση, με την οποία θα επαναλαμβάνεται η διαδικασία εως ότου επιτευχθεί το επιθυμητό αποτέλεσμα, ήτοι να ικανοποιηθούν το κριτήριο που θεσπίσαμε ως τα αποδεκτό όριο για να θεωρηθεί το διανυσμα των δυναμικών των κόμβων ως τελική λύση

6.2 ΕΠΙΛΥΣΗ

6.2.1 ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΕΚΦΡΑΣΗ

Σκοπός του κώδικα είναι, συνθέτοντας τα καθολικά μητρώα R και K , αντίστοιχα για το υπόλοιπο και το εφαπτομενικό μητρώο αγωγιμότητας, να επιλύσει την αναδρομική σχέση που μας αποδίδει το ηλεκτρικό δυναμικό. Ξεκινώντας με την ενέργεια W , έχουμε

$$W = \int_{\Omega} \omega d\Omega \quad (20)$$

Όπου

$$\omega = J(x)E(x) \quad (21)$$

Και E το ηλεκτρικό πεδίο με

$$E(x) = -\nabla\varphi(x) \quad (22)$$

Και ως Ω συμβολίζεται το σύνολο του χωρίου ολοκλήρωσης, εν προκειμένω η επιφάνεια του πεπερασμένου στοιχείου

J η πυκνότητα ηλεκτρικού ρεύματος για την οποία είναι

$$J(x) = k_{p/g}^0 * E(x) \quad (23)$$

Για τα στοιχεία που υπόκεινται σε φαινόμενο σήραγγας, η πυκνότητα ηλεκτρικού ρεύματος λαμβάνει την μορφή:

$$J = G(E,d)E \quad (24)$$

Όπου:

$$G(E,d) = \frac{2.2e^3 \|E\|^2}{8\pi h \Phi_0} e^{-\frac{8\pi}{2.96h e \|E\|} (2m)^{\frac{1}{2}} (\Phi_0)^{\frac{3}{2}}} + 3 \cdot \frac{(2m \Phi_0)^{\frac{1}{2}}}{2d} \left(\frac{e}{h}\right)^2 \|E\| d e^{-\left(\frac{4\pi d}{h}\right) (2m \Phi_0)^{\frac{1}{2}}} \quad (25)$$

Η παραπάνω σχέση ισχύει για εγγύτητα στο γραφένιο $d < d_{cut}$ όπου d_{cut} η απόσταση αποκοπής, άνω της οποίας το φαινόμενο σήραγγας αμελείται. Θα δοκιμαστεί η δομή για διαφορετικές τιμές της απόστασης αποκοπής για καλύτερη οπτικοποίηση της επίδρασης του φαινομένου σήραγγας.

Συναρτήσει της απόστασης d από την εναλλαγή των υλικών, του ηλεκτρικού φορτίου και της μάζας του ηλεκτρονίου e και m αντίστοιχα, της σταθεράς του Planck, h , και το ύψος δυναμικού Φ_0 . Ανα πάσα στιγμή, η ενεργός αγωγιμότητα του στοιχείου υπολογίζεται ως:

$$k_T = \frac{\partial J}{\partial E} \quad (26)$$

βάσει της οποίας θα επιλυθεί το πρόβλημα

Ακολουθώντας την μεθοδολογία που αναπτύχθηκε στα κεφάλαια παραπάνω, καλούμαστε να βρούμε την στάσιμη τιμή του συναρτησιακού W προσδιορίζοντας έτσι την ασθενή μορφή της έκφρασης της ενέργειας.

$$D_{\delta\varphi} W = 0 \quad (27)$$

Όπου $D_{\delta\varphi}$ η παράγωγος κατά διεύθυνση (παράγωγος Gateaux) και $\delta\varphi$ ένα τυχαίο μεταβλητό προσαύξιμα δυναμικού καθ'ολο το μήκος της δομής, εκτος μόνο από τις ακραίες πλευρές $x=0$, $x=L$ όπου $\delta\varphi = 0$ καθώς πρέπει πάντοτε να ικανοποιούνται οι συνοριακές συνθήκες.

Η παράγωγος κατά διεύθυνση προσδιορίζεται ως:

$$D_{\delta\varphi} W(\varphi) = \left. \frac{d}{d\varepsilon} [W(\varphi + \varepsilon\delta\varphi)] \right|_{\varepsilon=0} \quad (28)$$

Στη συνέχεια, θέτοντας χρησιμοποιώντας την σχέση λαμβάνεται:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial \omega}{\partial E} \cdot D_{\delta\varphi}(E) d\Omega = 0 \quad (29)$$

Όπου:

$$D_{\delta\varphi}(\mathbf{E}) = -\nabla(\delta\varphi) \quad (30)$$

Καταλήγουμε στην ασθενή μορφή:

$$\int_{\Omega} \mathbf{J} \cdot \nabla(\delta\varphi) d\Omega = R = 0 \quad (31)$$

Προχωρώντας, πρέπει να γραμμικοποιηθεί η εξίσωση καθώς το \mathbf{J} όπως έχει προσδιοριστεί καθιστά το πρόβλημα μη γραμμικό ως προς το δυναμικό Φ . Θα υιοθετηθεί μια διαδικασία Newton-Raphson για τον σκοπό αυτό. Ξεκινώντας, χρησιμοποιείται ένα πρώτης τάξεως ανάπτυγμα Taylor της παραπάνω παράστασης R

$$R(\varphi_{\kappa} + \Delta\varphi_{\kappa}) \cong R(\varphi_{\kappa}) + D_{\Delta\varphi} R(\varphi_{\kappa}) \quad (32)$$

Θέτοντας $R(\varphi_{\kappa} + \Delta\varphi_{\kappa}) = 0$, προκύπτει

$$D_{\Delta\varphi} R(\varphi_{\kappa}) = -R(\varphi_{\kappa}) \quad (33)$$

Όπου ο όρος στο αριστερό τμήμα της εξίσωσης μπορεί να γραφτεί ως

$$- \int_{\Omega} \frac{\partial \mathbf{J}}{\partial \mathbf{E}} \nabla(\Delta\varphi) \cdot \nabla(\delta\varphi) d\Omega \quad (34)$$

Ενώ έπειτα από κατάλληλες πράξεις, θα προκύψει:

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{E}} = \mathbf{k}_T(\mathbf{E}) = \begin{cases} \mathbf{k}_{p/g}^0, & d > d_{cut} \\ G'(\|\mathbf{E}\|) \cdot \frac{\mathbf{E} \otimes \mathbf{E}}{\|\mathbf{E}\|^2} + G(\|\mathbf{E}\|) \cdot \frac{\|\mathbf{E}\|^2 \mathbf{I} - \mathbf{E} \otimes \mathbf{E}}{\|\mathbf{E}\|^3}, & d \leq d_{cut} \end{cases} \quad (1)$$

$$\text{Με } A = \frac{2.2e^3 \|\mathbf{E}\|^2}{8\pi h \Phi_0}, \frac{8\pi}{2.96he \|\mathbf{E}\|} (2m)^{\frac{1}{2}} (\Phi_0)^{\frac{3}{2}},$$

$$3 \cdot \frac{(2m\Phi_0)^{\frac{1}{2}}}{2d} \left(\frac{e}{h}\right)^2 \|\mathbf{E}\| d e^{-\left(\frac{4\pi d}{h}\right)(2m\Phi_0)^{\frac{1}{2}}}$$

6.2.2 ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ ΣΧΗΜΑΤΟΣ

Εκφράζεται το ηλεκτρικό δυναμικό ως άθροισμα των πολυωνυμικών συναρτήσεων όπως φαίνεται στις εξισώσεις.

Είναι:

$$\sum_{i=1}^4 N_i \Phi_i \quad (35)$$

Αναπτύσσοντας το άθροισμα, μπορούμε να εκφράσουμε πλέον σε μητρική μορφή το δυναμικό ως προς τα επικόμβια φορτία δηλαδή:

$$\Phi(\mathbf{x}) = [N_1 \quad N_2 \quad N_3 \quad N_4] \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \end{bmatrix} \quad (1)$$

Προσδιορίζεται το μητρώο των παραγώγων των συναρτήσεων σχήματος \mathbf{B} με το οποίο θα εκφραστεί κατά την μέθοδο το ηλεκτρικό ρεύμα \mathbf{E} . Ακολουθούν:

$$\nabla(\Phi_{\kappa}) = \mathbf{B}^e \Phi_{\kappa}^e, \quad \nabla(\Delta\Phi_{\kappa}) = \mathbf{B}^e \Delta\Phi_{\kappa}^e, \quad \nabla(\delta\Phi_{\kappa}) = \mathbf{B}^e \delta\Phi_{\kappa}^e \quad (36)$$

Η ως άνω διακριτοποίηση, υπεισέρχεται στην εξίσωση (35) και τελικά αποδίδει

$$\delta\Phi^{eT} \left(\int_{\Omega} \mathbf{B}^{eT} \mathbf{k}_T(\Phi_{\kappa}) \mathbf{B}^e d\Omega \right) \Delta\Phi_{\kappa} = \delta\Phi^{eT} \left(\int_{\Omega} \mathbf{B}^{eT} \mathbf{J}(\Phi_{\kappa}) d\Omega \right) \quad (37)$$

Και χάρη στην αυθαίρετη επιλογή της $\delta\Phi$, εν τέλει καταλήγουμε στην εξίσωση

$$\mathbf{K} \cdot \Delta\Phi_{\kappa} = \mathbf{R} \quad (38)$$

Όπου \mathbf{K} το εφαπτομενικό μητρώο αγωγιμότητας και \mathbf{R} ένας όρος υπολοίπου. Έπειτα από κάθε επανάληψη, το ηλεκτρικό δυναμικό ενημερώνεται ως

$$\Phi_{\kappa+1} = \Phi_{\kappa} + \Delta\Phi_{\kappa} \quad (39)$$

Έως ότου ικανοποιηθεί το κριτήριο $\|\Delta\Phi_{\kappa}\| \leq 10^{-5}$

Στην συνάρτηση επίλυσης εισάγονται τα γεωμετρικά και φυσικά δεδομένα ως ορίσματα και προσδιορίζονται τα μητρώα που θα χρησιμοποιηθούν για την επίλυση της εξίσωσης σε επίπεδο στοιχείου, και έπειτα για την επαλληλία τους στο καθολικό μητρώο αγωγιμότητας και ρεσιντουαλ, ονομαζόμενα TaCoMa και Residual αντίστοιχα. (παράρτημα). Πιστά στην μέθοδο των τετραπλευρικών πεπερασμένων στοιχείων, ξεκινάει η εισαγωγή των σημείων και βαρών της

μεθόδου τετραγωνισμού Gauss-Legendre, τα οποία αποτελούν τα σημεία εκκίνησης δυο βρόχων «για», κατά τον προσδιορισμό των τιμών των συναρτήσεων σχήματος στα δειγματοληπτικά σημεία. Σύμφωνα με την μέθοδο αυτή, αποδοθούν με ακρίβεια λύσεις για πολυώνυμα βαθμού έως και $2n-1$, επομένως επιλέγουμε να προσεγγίσουμε τις συναρτήσεις σχήματος με $n = 2$ δειγματοληπτικά σημεία. Ακολουθεί ο προσδιορισμός του Ιακωβιανού μητρώου ως προς τις παραγώγους των συναρτήσεων σχήματος του στοιχείου.

Ιδιαίτερη σημασία έχει να συνυπολογιστεί το φαινόμενο σήραγγας ανάλογα με την απόσταση του κέντρου του στοιχείου από το πέρας του υλικού.(παράρτημα) εντός των βρόχων πρέπει να εξάγουμε το διάνυσμα των ηλεκτρικών δυναμικών των κόμβων του στοιχείου, καθώς και τα υπόλοιπα ατομικά του γεωμετρικά στοιχεία που θα χρειαστούν στον υπολογισμό των μητρώων υπολείμματος και αγωγιμότητας.

Πρωτίστως όμως, πρέπει να προσδιοριστούν οι τιμές των συναρτήσεων σχήματος στα δειγματοληπτικά σημεία, και το Ιακωβιανό μητρώο που χρειάζεται κατά τον μετασχηματισμό στο φυσικό σύστημα. Έπειτα, βάσει του διανύσματος των δυναμικών του στοιχείου, υπολογίζεται ο όρος $\mathbf{B}^e = \nabla\Phi$, ο οποίος ταυτίζεται με το μητρώο των παραγώγων των συναρτήσεων σχήματος κατά τη μέθοδο των ισοπαραμετρικών τετραπλευρικών πεπερασμένων στοιχείων, και προκύπτει μετά από παραγωγή των στοιχείων κάθε γραμμής κατά τις συντεταγμένες διανυσματικά.

Εξοπλισμένοι με αυτά εισάγουμε συνάρτηση στο λογισμικό η οποία λαμβάνοντας υπόψιν την απόσταση d του στοιχείου από την πλευρά του υλικού υπολογίζει την ενεργό αγωγιμότητα k_T και παράλληλα την πυκνότητα ηλεκτρικού ρεύματος J ανάλογα

Σε αυτό το σημείο είμαστε έτοιμοι να υπολογίσουμε τα μητρώα \mathbf{R} και \mathbf{K} για το κάθε στοιχείο πιστά στην εξίσωση 38. Εντός ενός βρόχου «για» (forloop) για κάθε τιμή των Gauss weights και Gauss points παράγονται πλήρως τα μητρώα, όπως φαίνονται στην εξίσωση, πολλαπλασιασμένα με τις τιμές των Gauss weights και

την ορίζουσα του Ιακωβιανού μητρώου, τα οποία στη συνέχεια θα ταξινομηθούν στα αντίστοιχα καθολικά μητρώα του συστήματος κατα συνέπεια, με τις θέσεις που τους αντιστοιχούν ως προς τους κόμβους του συστήματος

Η διαδικασία αυτή επαναλαμβάνεται για το πλήθος των στοιχείων της διακριτοποίησης. Με το πέρας του υπερκείμενου βρόχου και την πλήρη συμπλήρωση των δεδομένων στα καθολικά μητρώα, εφαρμόζουμε σε αυτά τις τιμές των μεγεθών που αντιστοιχούν στους συνοριακούς κόμβους (appendix). Όταν επιτευχθεί αυτό, επιλύεται η τελική εξίσωση ως προς το προσαύξημα $\Delta\Phi$

$$[\Delta\Phi_k] = [TaCoMa]^{-1}[Residual]$$

Το αποτέλεσμα προστίθεται στην αρχική λύση, και με το ενημερωμένο διάνυσμα η διαδικασία επαναλαμβάνεται συνεχώς για όσο ισχύει $\|\Delta\Phi_k\| \geq 10^{-5}$. Η λύση έχει βρεθεί όταν το κριτήριο έχει ικανοποιηθεί και έχουμε πλέον υπολογίσει το διάνυσμα των ηλεκτρικών δυναμικών στο σύνολο των κόμβων του συστήματος.

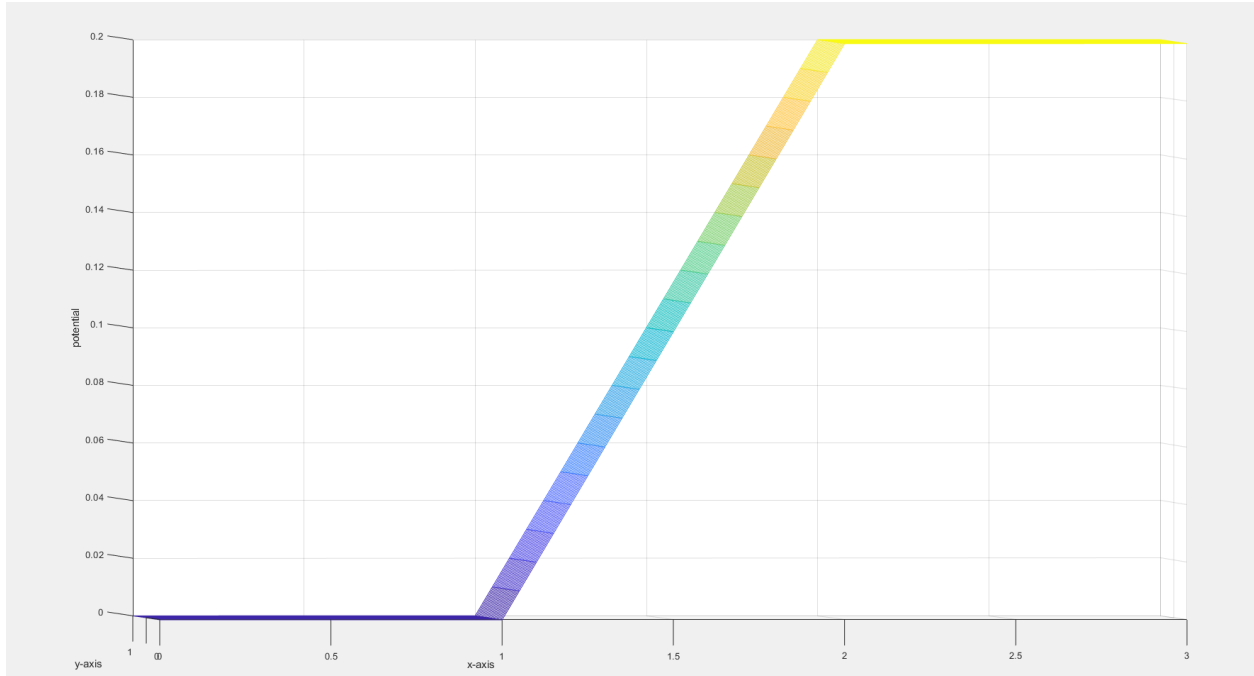
6.3 ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Στην παρακάτω εικόνα απεικονίζεται το τελικό γράφημα του ηλεκτρικού δυναμικού κατ'αντιστοιχεία με τους κόμβους του υλικού από $x = 0$ έως και $x = L$. Όπως είναι προφανές, δεν υπάρχει καμία μεταβολή δυναμικού ως προς τον y άξονα. Είναι φανερό ότι παρ'ολη την χαμηλή αγωγιμότητα του ενδιάμεσου σκέλους, η παρουσία των φύλλων γραφενίου θα επαυξήσει σημαντικά την ένταση του ηλεκτρικού ρεύματος που το διαπερνάει

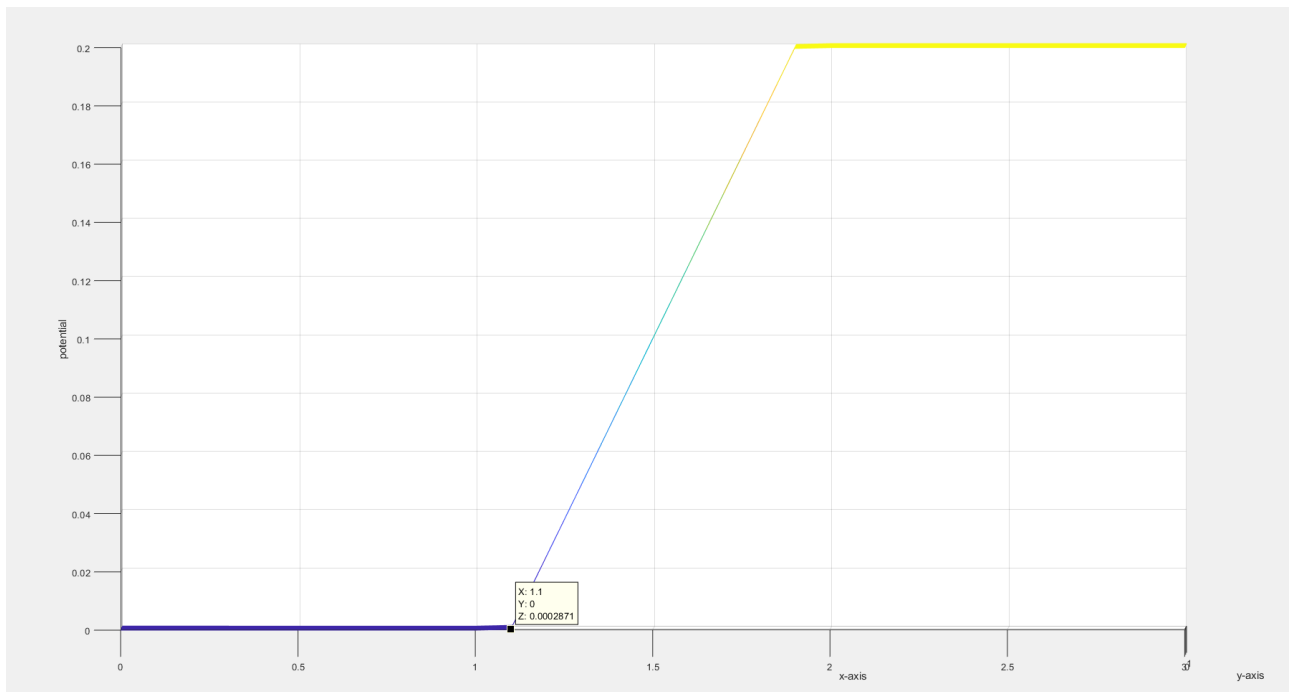
Τα αποτελέσματα μας υποδηλώνουν ξεκάθαρα την ύπαρξη απότομης διαφοράς δυναμικού σε κομμάτια του πολυμερούς εντός της απόστασης αναφοράς $d < d_{cut}$

από το γραφένιο. Από το διάγραμμα του δυναμικού πάνω στη γεωμετρία της δομής κατά τον άξονα X, βλέπουμε ότι στις πλευρές του πολυμερούς τείνει το δυναμικό να μεταβάλλεται σαφώς μη γραμμικά καθώς και παρατηρείται διαφορά δυναμικού, δηλαδή ηλεκτρικό ρεύμα, πολύ μεγαλύτερο από αυτό που θα προβλεπόταν αμελώντας τελείως το φαινόμενο σήραγγας, αντί να καταλήξει απ'ευθείας στις τιμές που λαμβάνει στα γραφένια. Βλέπουμε δηλαδή ότι στη δομή αυτή αντί να μηδενίζεται απ'ευθείας γραμμικά το δυναμικό, το διάγραμμα «διαχέει» τις τιμές του εντος της δομής καθιστώντας την κατά το σύνολό της, πιο αγωγήμη.

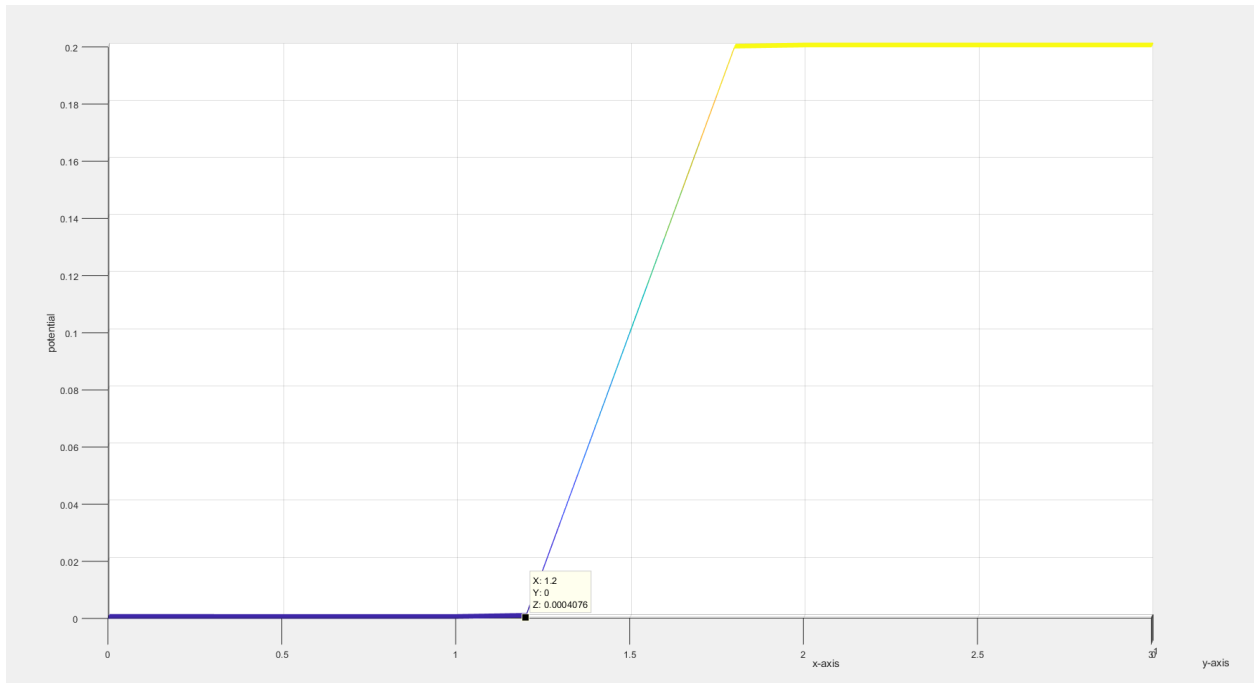
Παρατίθενται τα σχετικά διαγράμματα για τις διάφορες τιμές της απόστασης αποκοπής, ξεκινώντας από καθόλου φαινόμενο σήραγγας έως ότου αυτό να διέπει όλο το σκέλος πολυμερούς. Η απόσταση αποκοπής d_{cut} μετριέται σε νανόμετρα



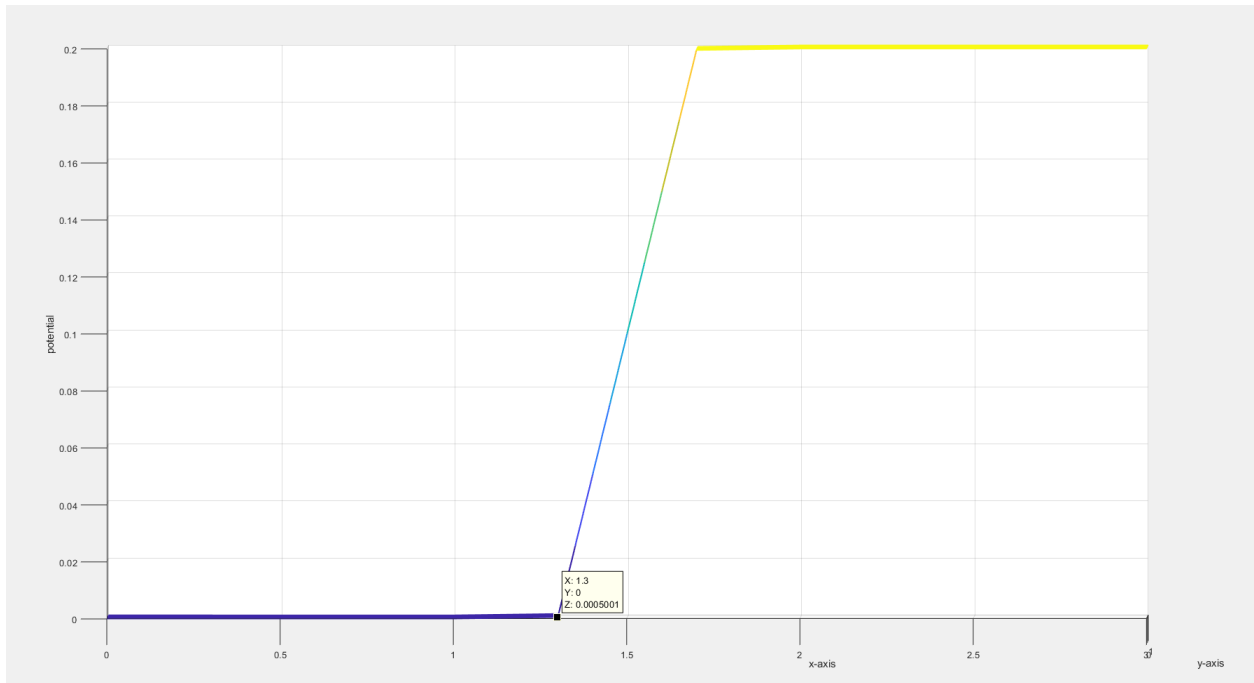
$$d_{cut} = 0$$



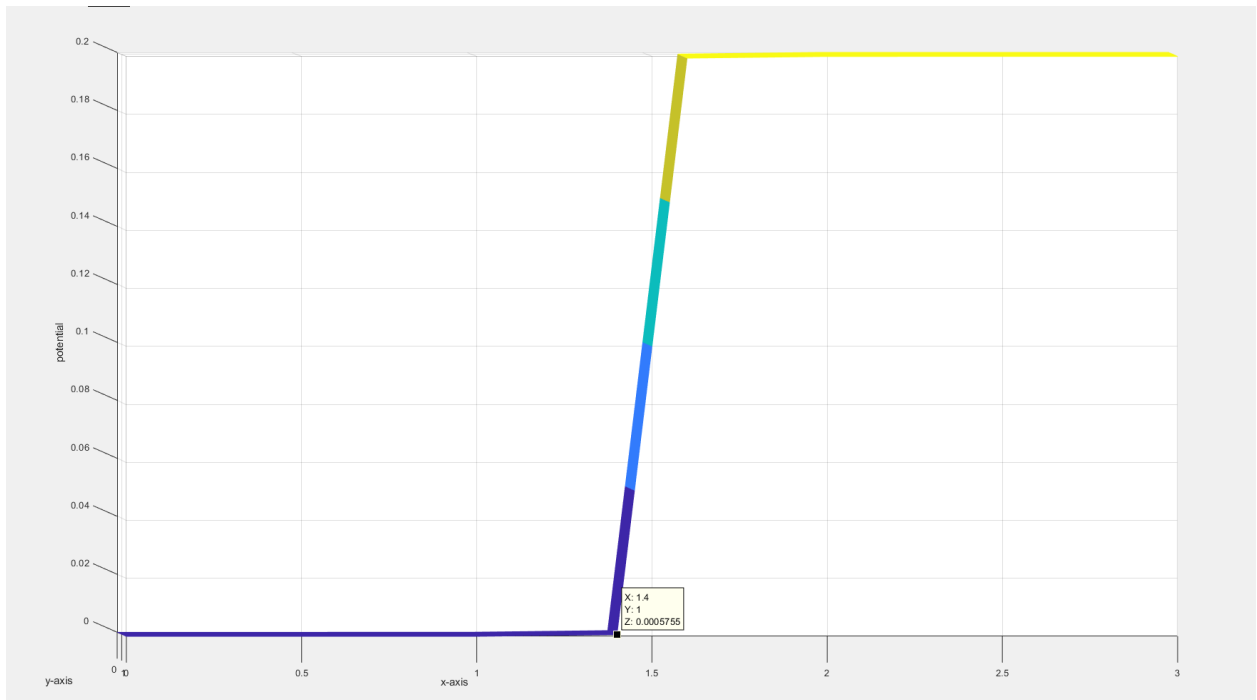
$$d_{cut} = 0.1$$



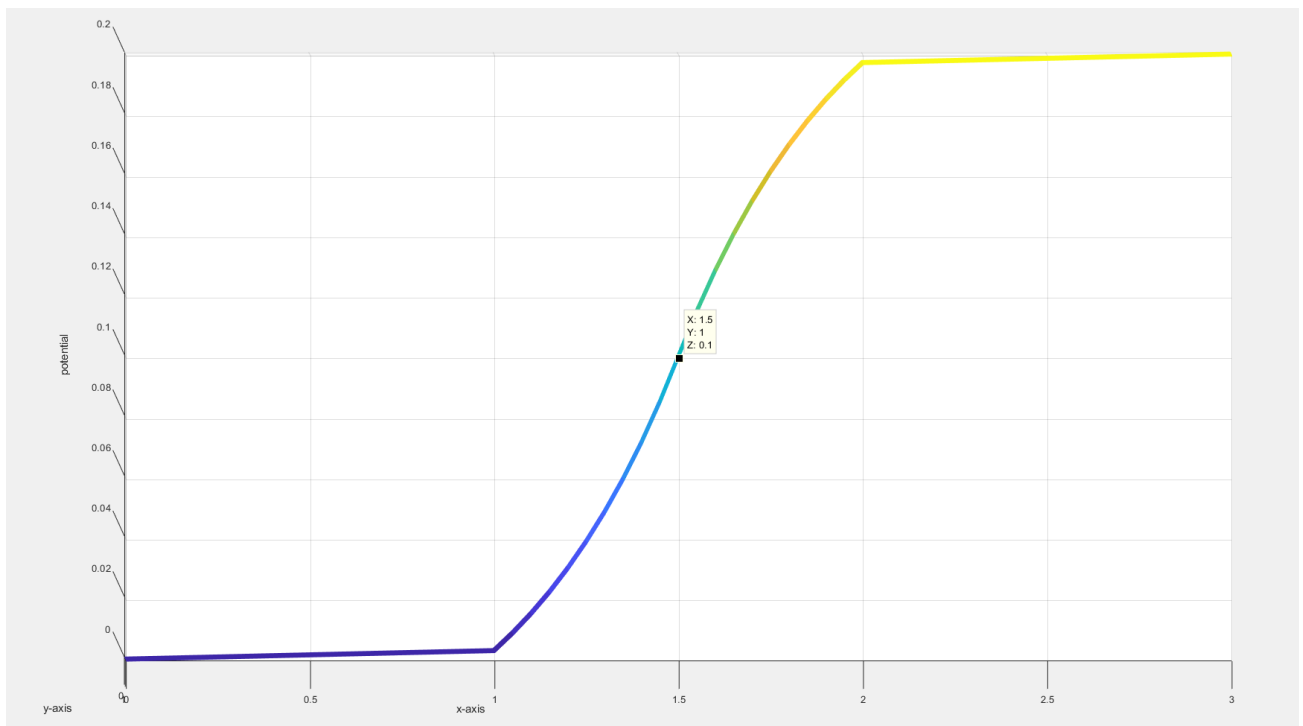
$d_{cut} = 0.2$



$d_{cut} = 0.3$



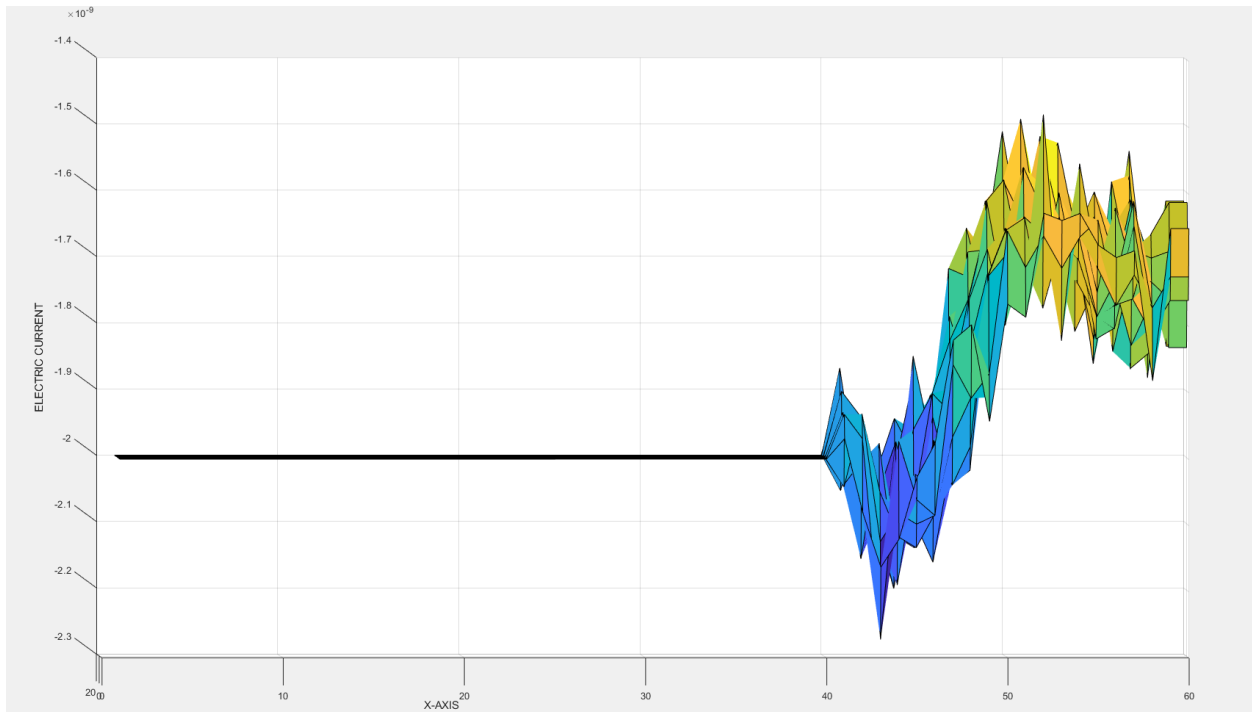
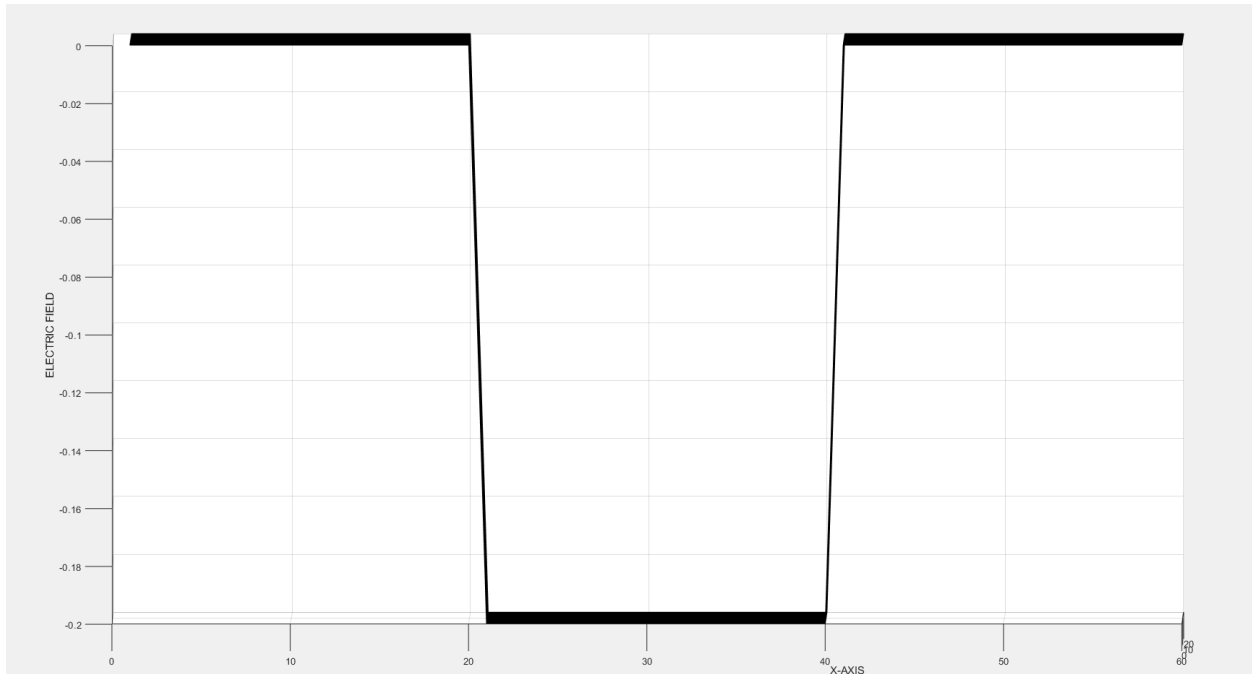
$d_{cut} = 0.4$



$d_{cut} = 0.5$

Η μη γραμμική συμπεριφορά του ηλεκτρικού δυναμικού γίνεται ιδιαίτερα σαφής όταν ολόκληρο το σκέλος υπόκειται στο φαινόμενο σήραγγας. Αυτό οφείλεται στο ότι κανένα τμήμα του πολυμερούς δεν θα σταματήσει την υπερπήδηση των ηλεκτρονίων από το γραφένιο στο πολυμερές και όλη η δομή θα συμπεριφερθεί κατ'αυτόν τον τρόπο. Παρ'όλα αυτά αξίζει να παρατηρηθεί πως ακόμα και όταν κλάσματα του πολυμερούς υποβάλλονται στη μη γραμμική απόκριση, η διαφορά δυναμικού εντός αυτού γίνεται όλο και πιο μεγάλη από στοιχείο σε στοιχείο.

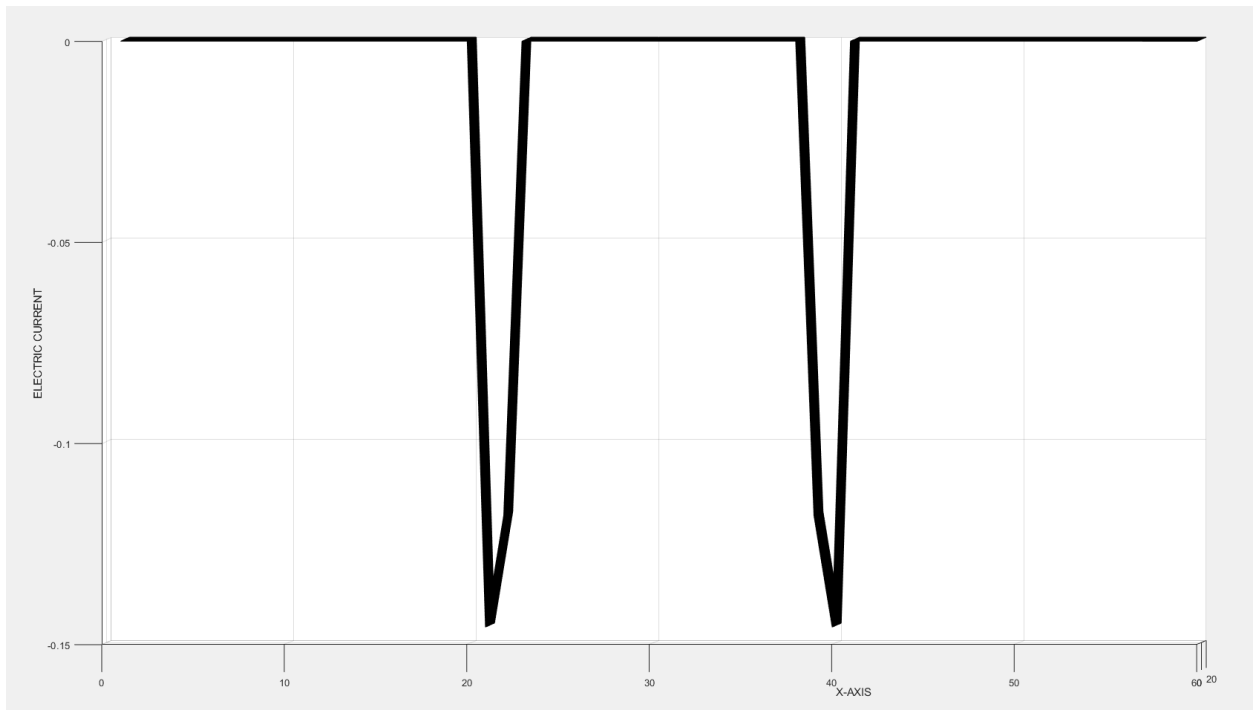
Όπως και ο Yvonnet[4], δείξαμε ότι οι τιμή της διαφοράς δυναμικού ανάμεσα στα δύο φύλλα γραφενίου, εξαρτάται μη γραμμικά από την διαφορά δυναμικού που επιβάλλεται λόγω των συνοριακών συνθηκών στις δύο ακραίες πλευρές της γεωμετρίας του προβλήματος. Παρακάτω παρατίθενται τα διαγράμματα του ηλεκτρικού ρεύματος J που διατρέχει την επιφάνεια, και του ηλεκτρικού πεδίου E για τις αντιστιχες τιμές του d_{cut} .



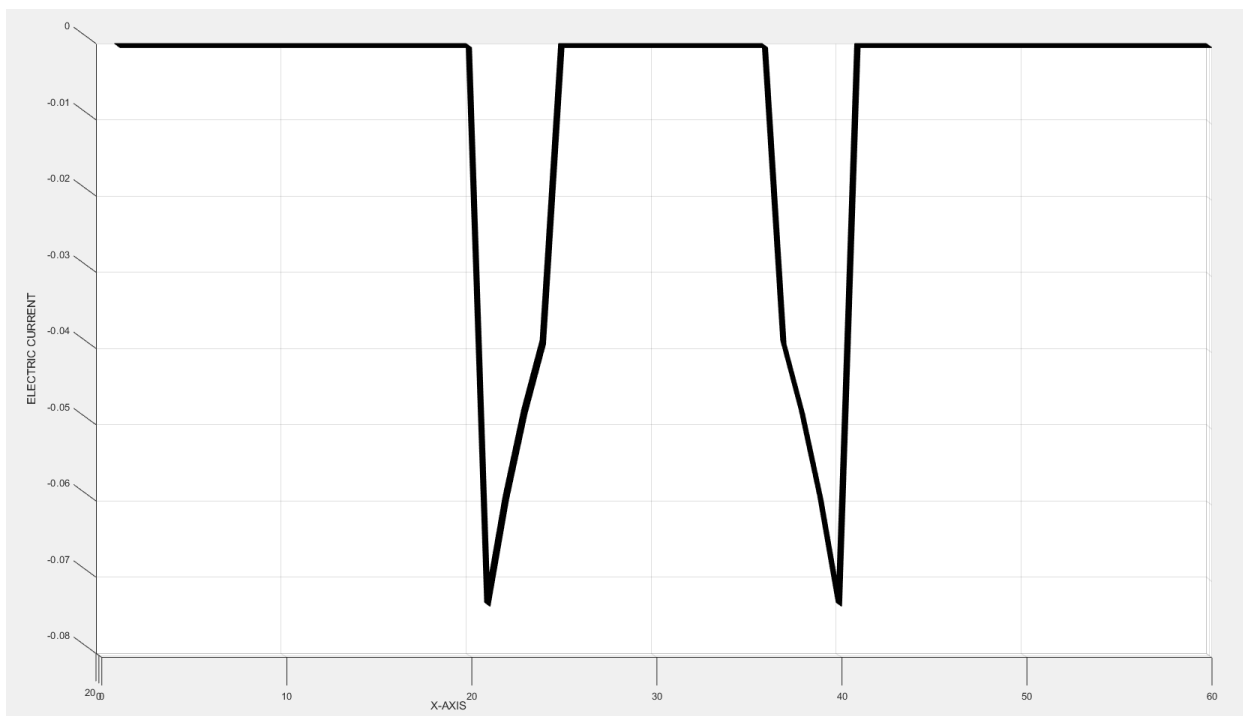
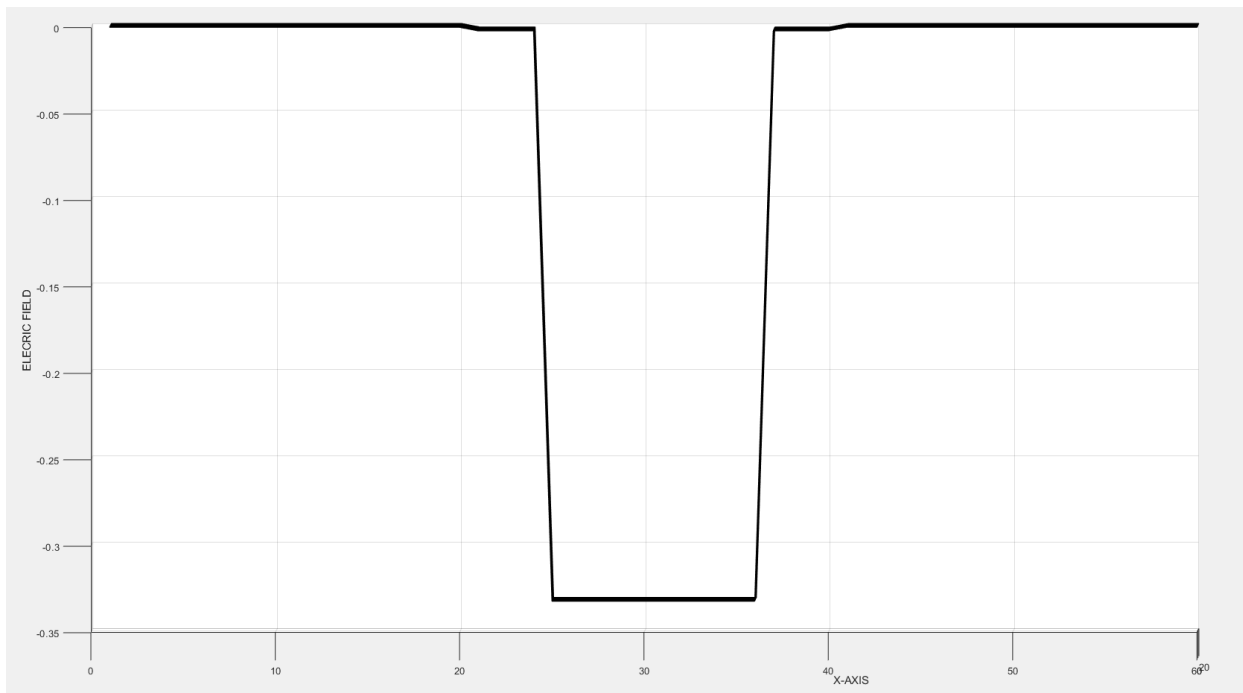
2

$$d_{cut} = 0$$

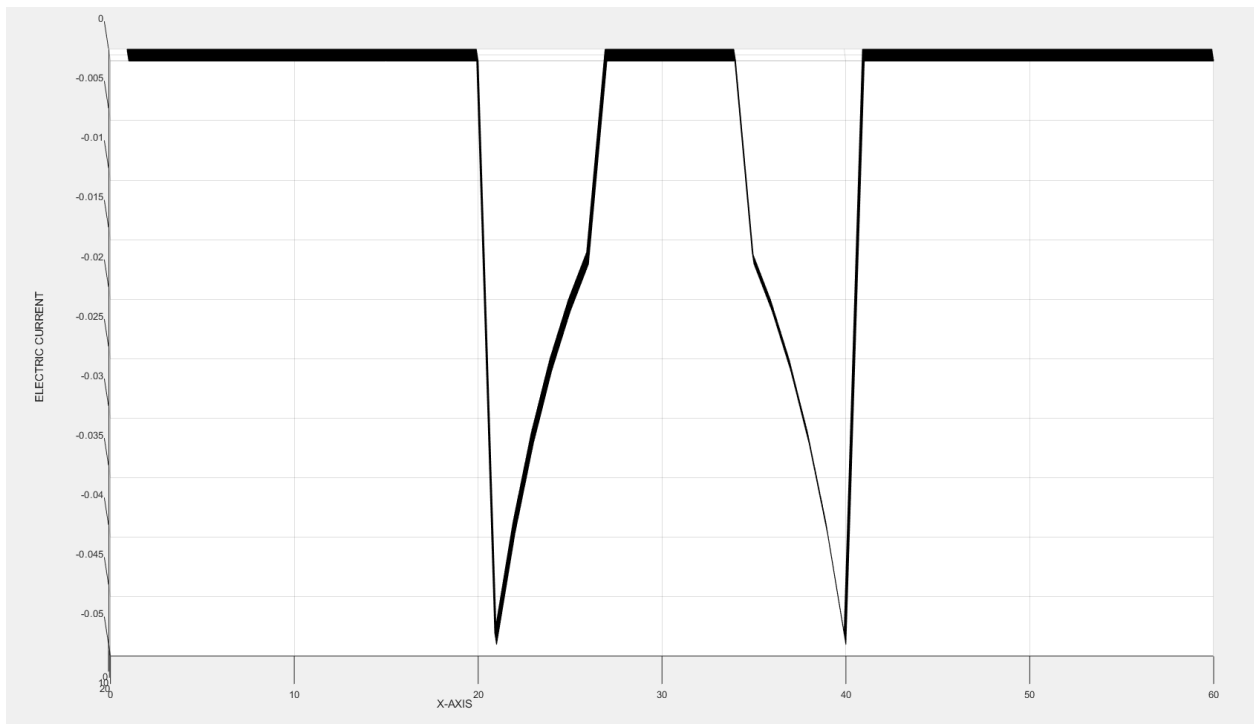
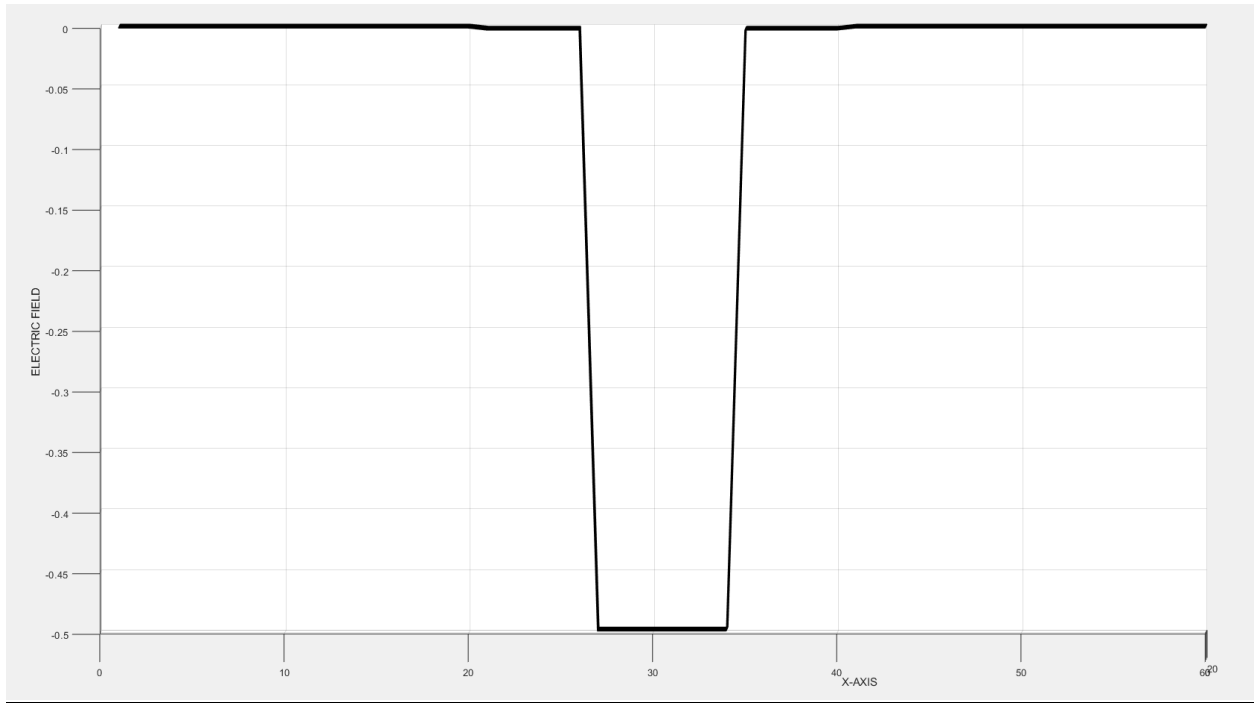
² Η διαταραχή που φαίνεται στο δεξί μέρος του διαγράμματος αποτελεί όρο αριθμητικού θορύβου και δεν έχει καμία απολύτως φυσική σημασία



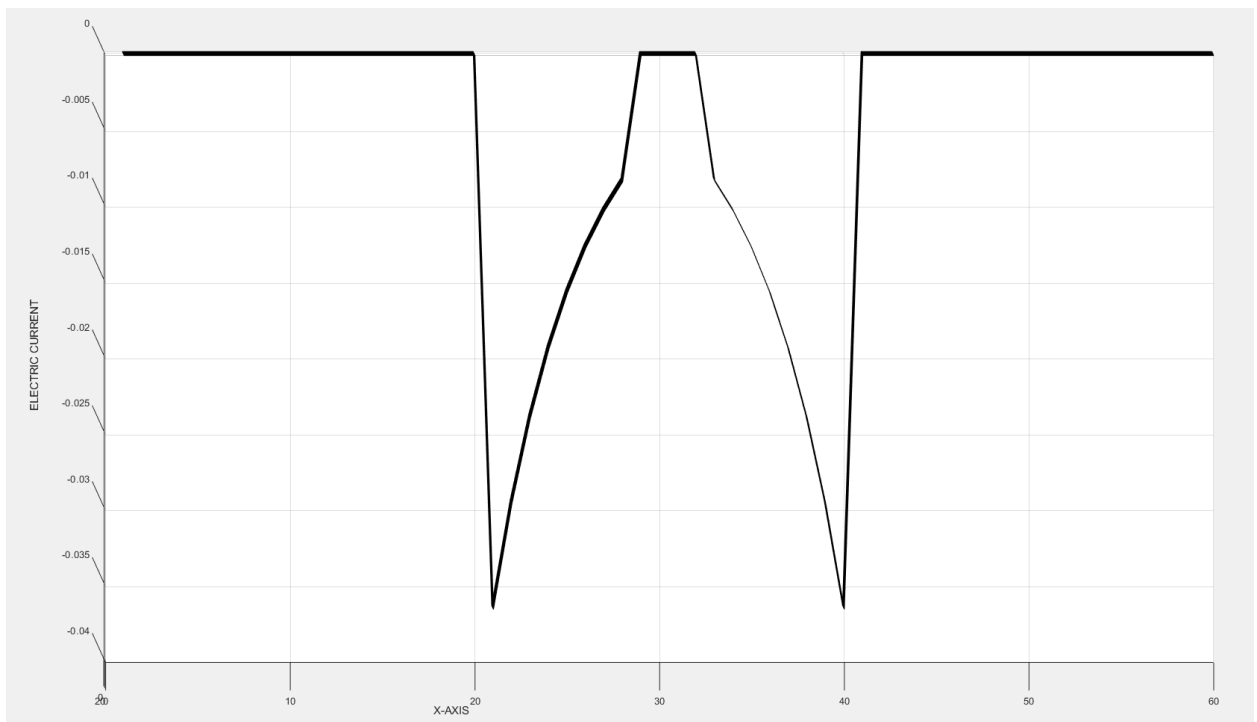
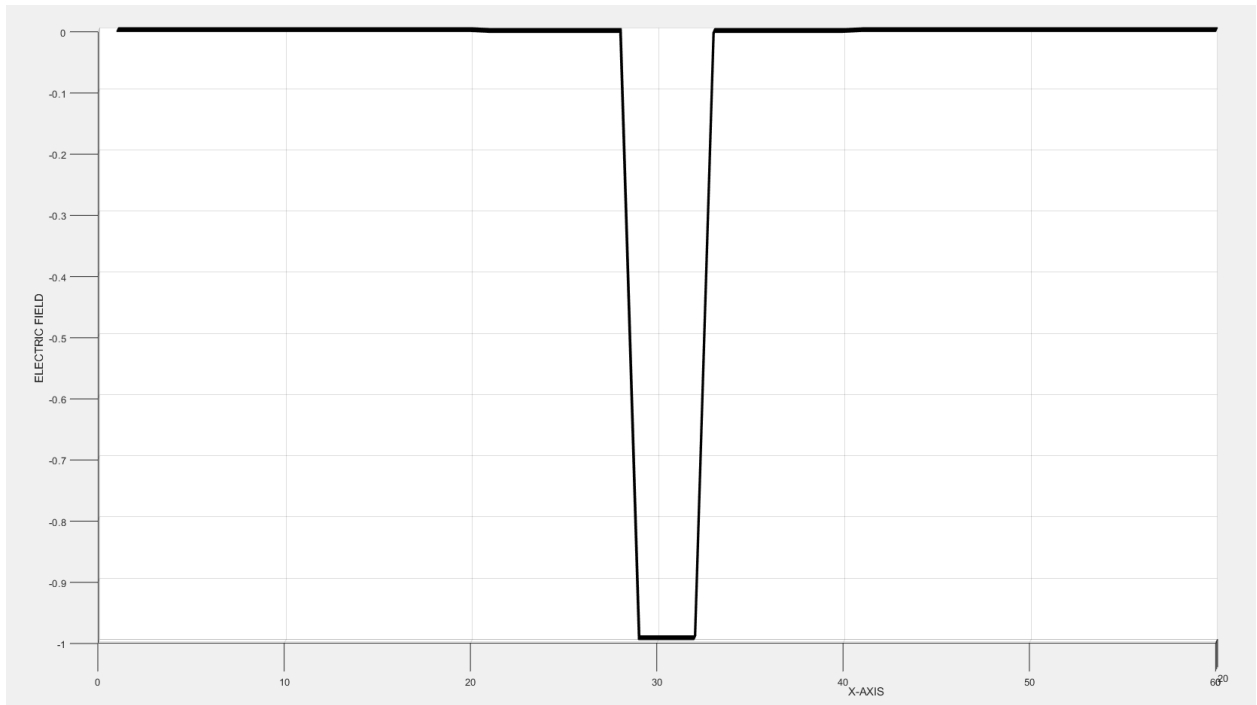
$$d_{cut} = 0.1$$



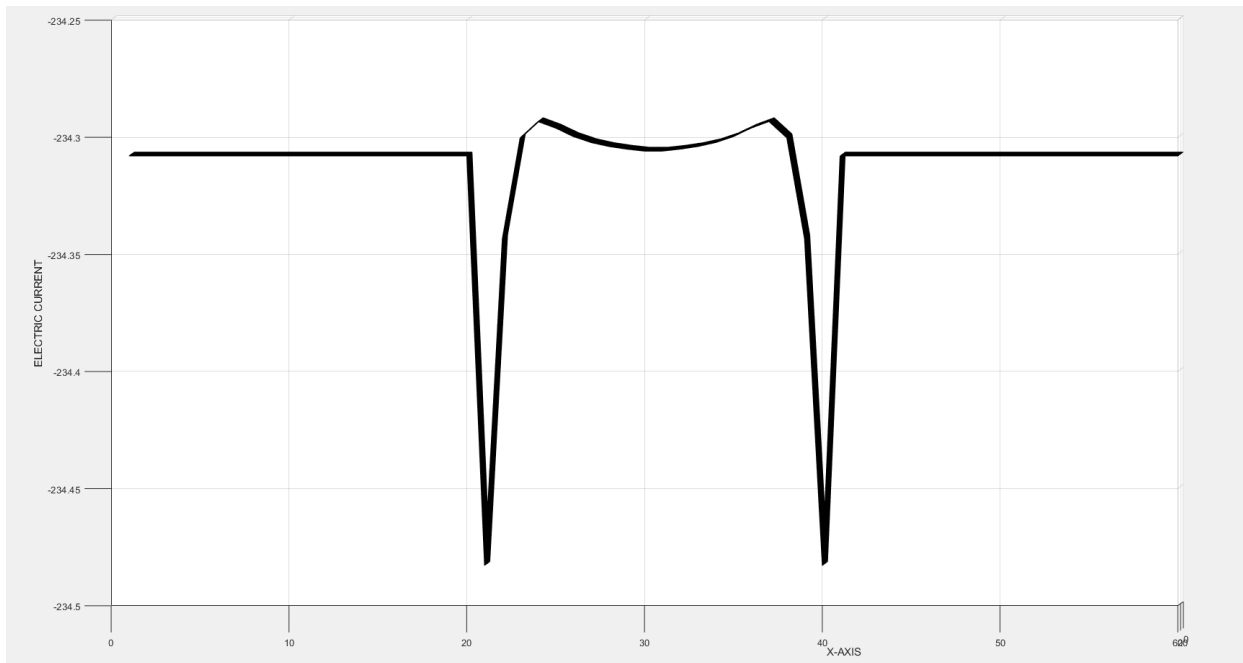
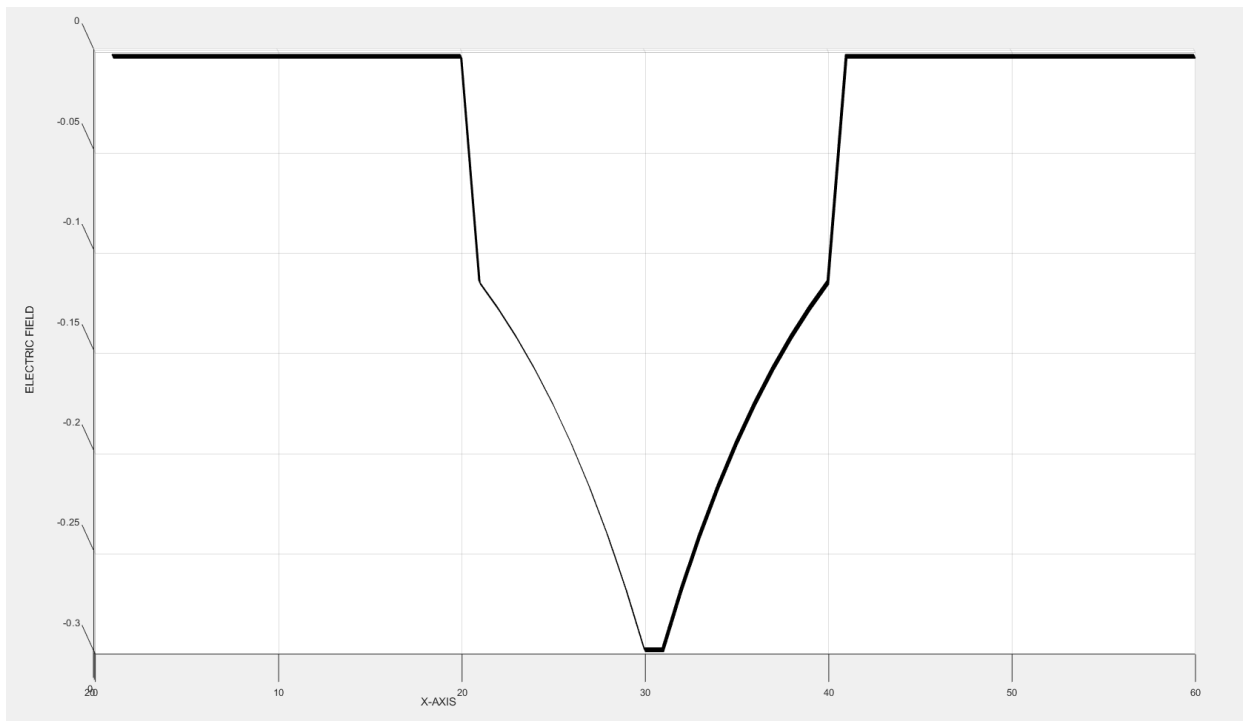
$$d_{cut} = 0.2$$



$$d_{cut} = 0.3$$



$$d_{cut} = 0.4$$



$$d_{cut} = 0.5$$

7 ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

```
clear all; clc;

Height =1;
Length =3;
kp = diag([1*10^-10 , 1*10^-10]);           %Conductivity Coeff. of polymer%
kg = diag([8.32*10^4, 8.32*10^4]);         %Conductivity Coeff. of graphene%
Nelts_x= 60;                               %Number of elements on X-axis
Nelts_y= 20;                               %Number of elements on Y-axis
NeltsTot=Nelts_x*Nelts_y;
NodesTotal=(Nelts_x+1)*(Nelts_y+1);
Nodesx=Nelts_x+1;
Nodesy=Nelts_y+1;
Vbar=0.2;
norm_residual = 10^30;
norm_increment = 10^30;

%Determining node coordinates%
for i=1:Nodesy
    for j=1:Nodesx
        COORDINATES((i-1)*Nodesx+j,1) = (j-1)*Length/Nelts_x ;
        COORDINATES((i-1)*Nodesx+j,2) = (i-1)*Height/Nelts_y ;
    end
end
%Element connectivity%
CONNec(1,:) = [1 2 Nodesx+2 Nodesx+1];
for i = 2:Nelts_x
    CONNec(i,:) = 1+CONNec(i-1,:);
end
for i = 2:Nelts_y
    CONNec(Nelts_x*(i-1) +1 : Nelts_x*i,:) = CONNec(Nelts_x*(i-2) +1 :Nelts_x*(i-1),:) + Nodesx;
end
```

```

% find the 3 element regions
for i=1:NeltsTot
    tempX=(COORDINATES(CONNEC(i,1),1)+COORDINATES(CONNEC(i,2),1)+...
            COORDINATES(CONNEC(i,3),1)+COORDINATES(CONNEC(i,4),1))/4;
    tempY=(COORDINATES(CONNEC(i,1),2)+COORDINATES(CONNEC(i,2),2)+...
            COORDINATES(CONNEC(i,3),2)+COORDINATES(CONNEC(i,4),2))/4;
    centroid(i,:)=[tempX,tempY];
end

sectionLeft=find(centroid(:,1)<1);
sectionMid=intersect(find(centroid(:,1)>1),find(centroid(:,1)<2));
sectionRight=find(centroid(:,1)>2);

Vk = zeros(length(COORDINATES),1)*0.1;

while norm_increment>10^-5
    [Dv,R,C,D]=ElectricalConductionModel(Vk,CONNEC,COORDINATES,BCdof,BCval,kg,kp,sectionMid,Vbar,centroid);
    Vk = Vk+Dv;
    norm_residual = norm(R);
    norm_increment = norm(Dv)
end
for i=1:length(BCval)
    Vk(BCdof(i))=BCval(i);
end

```

```

%% plot results
solutionRearranged=reshape (Vk, [Nodesx,Nodesy] );
solutionRearranged=solutionRearranged';
Xaxis=0:Length/Nelts_x:Length;
Yaxis=0:Height/Nelts_y:Height;
XaxisPlot= repmat (Xaxis, [length (Yaxis), 1] );
YaxisPlot= repmat (Yaxis', [1, length (Xaxis) ] );

figure
mesh (XaxisPlot, YaxisPlot, solutionRearranged)
xlabel ('x-axis')
ylabel ('y-axis')
zlabel ('potential')

```

```

function [ Dv,R,C,D ] = ElectricalConductionModel (Vk,nodes,coordinates,bcdof,bcval,kg,kp,sectionMid,Vbar,centroid)
%-----
% Input data for nodal coordinate values
%-----

nel=size(nodes,1) ; % number of elements
nnel=4; % number of nodes per element
ndof=1; % number of dofs per node (V)
nnode = size(coordinates,1); % total number of nodes in system
sdof=nnode*ndof; % total system dofs
edof=nnel*ndof; % degrees of freedom per element
% Length of the plate (along Y-axis)

% Physical properties
m = 9.1093837*10^-31; %electron mass (Kg)
h = 6.62607015*10^-34; %Planck's constant (Joule*Hz^-1)
e = 1.60217663*10^-19; %elementary charge (coulomb)
Vo = 0.17*1.60217663*10^-19 ; %Barrier height (Joule)

```

```

dcut = %insert value for dcut%
nglx = 2; ngly = 2;           % 2x2 Gauss-Legendre quadrature
nglxy=nglx*ngly;           % number of sampling points per element

%-----
% initialization of matrices and vectors
%-----
TaCoMa = zeros(sdof,sdof);      % tangent conductivity matrix
Residual = zeros(sdof,1);      % residual vector
Be = zeros(2,edof);           % nabla operator
j = zeros(2,1);               % electric current density vector
v = zeros(edof,1);           % electric potential at element nodes

%-----
% computation of element matrices and vectors and their assembly
%-----
[Gausspoint,Gaussweight]=GQuadrature(nglx);    % sampling points & weights

]for iel=1:nel    % loop for the total number of elements

    d = min(abs(centroid(iel)-1),abs(centroid(iel)-2)); %distance from nearest graphene sheet

]for i=1:nnel
    nd(i)=nodes(iel,i);          % Extract connected node for (iel)-th element
    xx(i)=coordinates(nd(i),1); % Extract x value of the node
    yy(i)=coordinates(nd(i),2); % Extract y value of the node
    v(i)=Vk(nd(i));             % Extract nodal values for iel-th element
-end

K = zeros(edof,edof);          % Initialization of tangent conductivity matrix
R = zeros(edof,1);            % Initialization of residual term

```

```

%-----
% numerical integration for stiffness matrix
%-----

]for intx=1:nglx
xi = Gausspoint(intx,1);           | % sampling point in x-axis
wtx = Gaussweight(intx,1);        | % weight in x-axis
]for inty=1:ngly
eta = Gausspoint(inty,1);         | % sampling point in y-axis
wty = Gaussweight(inty,1) ;      | % weight in y-axis

[shape,dhdr,dhds] = sFunctions(xi,eta); % compute shape functions and
                                         % derivatives at sampling point

jacobian = Jacobianmatrix(nnel,dhdr,dhds,xx,yy); % compute Jacobian

detjacob=det(jacobian);              % determinant of Jacobian
invjacob=inv(jacobian);              % inverse of Jacobian matrix

[dhdx,dhdy]=sFunctionDerivatives(nnel,dhdr,dhds,invjacob); % derivatives w.r.t.
                                         % physical coordinate

Be=nabla(nnel,dhdx,dhdy);            % Differential operator
Ee = -Be*v;                          % Electric current

[Kt,j] = FieldCoeff(h,e,m,Vo,d,Ee,sectionMid,iel,kg,kp,dcut);

%-----
% compute element conductivity matrix & residual
%-----

K = K+Be'*Kt*Be*wtx*wty*detjacob;
R = R+Be'*j*wtx*wty*detjacob;

-end
-end                                % end of numerical integration loop

```



```

%initializing conductivity tensor%
function [ Kt,J] = FieldCoeff(h,e,m,Vo,d,E,sectionMid,iel,kg,kp,dcut)
if find(sectionMid==iel) ~= 0
    Kt= kp;
    J = kp*E;
else
    Kt= kg;
    J = kg*E;
end
if d < dcut
    %J(1)=Gnorm*E(1);%dcut is a user defined parameter%
    if Kt == kp

        A = 2.2*e^3/(8*pi*h*Vo);
        B = (8*pi*(2*m)^(1/2)*Vo^(3/2))/(2.96*h*e);
        C = 3*(2*m*Vo)^(1/2)/2*(e/h)^2*exp(-(4*pi*(d*10^-9)/h)*(2*m*Vo)^(1/2));

        Gnorm = (A*norm(E)^2*exp(-B/norm(E))+C*norm(E));

        J(1)=Gnorm*E(1);

    if norm(E)~=0
        Gprime = 2*A*norm(E)*exp(-B/(norm(E)))+A*B*exp(-B/(norm(E)))+C;
        Kt = Gprime*E*E'/norm(E)^2+Gnorm*((norm(E)^2*eye(2,2)-E*E')/norm(E)^3);
    end
end

```

```

index = nd; % extract system dofs associated with element
for k = 1:length(index)
    Residual(index(k)) = Residual(index(k))+R(k); %assemble residual vectors
end

TaCoMa = Assemble(TaCoMa,K,index); % assemble element conductivity matrices

%-----
% apply boundary conditions
%-----
FreeDofs=1:size(coordinates,1);
FreeDofs(bcdof)=[];
Kff=TaCoMa(FreeDofs,FreeDofs);
Kfs=TaCoMa(FreeDofs,bcdof);
Ksf=TaCoMa(bcdof, FreeDofs);
Residual_f=Residual(FreeDofs);
Residual_s=Residual(bcdof);

u_f=Kff\ (Residual_f-Kfs*bcval);
Dv=zeros(size(coordinates,1),1);
Dv(FreeDofs) = u_f;
Dv(bcdof) = 0;
R = Residual;
C = Eplotx;
D = Jplotx;

```

```

function [TaCoMa]=Assemble (TaCoMa,K,index)
%-----
% Purpose:
%   Assembly of element matrices into the system matrix
%
% Variable Description:
%   TaCoMa (Tangent Conductivity Matrix) - system matrix
%   K - element tangent matrix
%   index - d.o.f. vector associated with an element
%-----

edof = length(index);
for i=1:edof
    ii=index(i);
    for j=1:edof
        jj=index(j);
        TaCoMa(ii,jj)=TaCoMa(ii,jj)+K(i,j);
    end
end
end

function [anadelta]=nabla (nnel,dhdx,dhdy)
%-----
% Purpose:
%   Expression for the gradient of the electric potential by element
%
% Variable Description:
%   nnel - number of nodes per element
%   dhdx - derivatives of shape functions with respect to x
%   dhdy - derivatives of shape functions with respect to y
%-----

for i=1:nnel
    anadelta(1,i)=dhdx(i);
    anadelta(2,i)=dhdy(i);
end
end

```

```

% shape functions

shapeQ4(1)=0.25*(1-xi)*(1-eta);
shapeQ4(2)=0.25*(1+xi)*(1-eta);
shapeQ4(3)=0.25*(1+xi)*(1+eta);
shapeQ4(4)=0.25*(1-xi)*(1+eta);

% derivatives

dhdrQ4(1)=-0.25*(1-eta);
dhdrQ4(2)=0.25*(1-eta);
dhdrQ4(3)=0.25*(1+eta);
dhdrQ4(4)=-0.25*(1+eta);

dhdsQ4(1)=-0.25*(1-xi);
dhdsQ4(2)=-0.25*(1+xi);
dhdsQ4(3)=0.25*(1+xi);
dhdsQ4(4)=0.25*(1-xi);

jacobian=zeros(2,2);

for i=1:nnel
jacobian(1,1)=jacobian(1,1)+dhdr(i)*xcoord(i);
jacobian(1,2)=jacobian(1,2)+dhdr(i)*ycoord(i);
jacobian(2,1)=jacobian(2,1)+dhds(i)*xcoord(i);
jacobian(2,2)=jacobian(2,2)+dhds(i)*ycoord(i);
end

```

```
% initialization

Gausspoint=zeros(ngl,1);
Gaussweight=zeros(ngl,1);

% corresponding integration points and weights
% 2-point quadrature rule
Gausspoint(1)=-0.577350269189626;
Gausspoint(2)=-Gausspoint(1);
Gaussweight(1)=1.0;
Gaussweight(2)=Gaussweight(1);
```

1. J.G. Simmons, *Electric Tunnel Effect between Dissimilar Electrodes Separated by a Thin Insulating Film*, J. Appl. Phys. 34 (9) (1963) pp. 2581–2590
2. M. Papadrakakis, *Non-Linear Finite Elements*, Volume 1, (2002), pp 151-168,
3. Μ.Παπαδρακάκης, *Ανάλυση Φορέων με τη Μέθοδο των Πεπερασμένων Στοιχείων* Τεύχος 1, (1996)
4. Xiaoxin L. Julien Yvonnet et al, *Multiscale modeling of nonlinear electric conductivity in graphene-reinforced nanocomposites taking into account tunnelling effect*, Journal of Computational Physics, Volume 337 (2017), pp 116-131, ISSN 0021-9991