



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΔΙΑΤΜΗΜΑΤΙΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΩΝ
ΣΠΟΥΔΩΝ ΣΤΗΝ
«ΕΦΑΡΜΟΣΜΕΝΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ»

*Ανάλυση πολλαπλών κλιμάκων για την διερεύνηση της
μηχανικής συμπεριφοράς δοκιμίου από βισκοελαστικό
υλικό ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα υπό
ανακυκλιζόμενη φόρτιση.*

του

Δημητρίου Ν. Σάββα

Διπλωματούχου Μηχανολόγου Μηχανικού Α.Π.Θ

Μεταπτυχιακή εργασία υποβληθείσα σε εκπλήρωση των απαιτήσεων για τον
μεταπτυχιακό τίτλο σπουδών «Εφαρμοσμένη Μηχανική»

στο

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

Τριμελής επιτροπή:

Ε. Κοντού, Καθηγήτρια Ε.Μ.Π, ΣΕΜΦΕ

Β. Παπαδόπουλος, Επίκουρος Καθηγητής Ε.Μ.Π, Σχολή Πολιτικών Μηχανικών (Επιβλέπων)

Μ. Παπαδρακάκης, Καθηγητής Ε.Μ.Π, Σχολή Πολιτικών Μηχανικών

Ιούνιος 2012

ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ

Θα ήθελα να ευχαριστήσω όλους όσους συνέβαλαν στην ολοκλήρωση της παρούσας μεταπτυχιακής εργασίας. Ιδιαίτερες ευχαριστίες απευθύνονται στον επιβλέποντα, Επίκουρο Καθηγητή της Σχολής Πολιτικών Μηχανικών, κύριο Βησσαρίων Παπαδόπουλο που μου παρείχε την ευκαιρία της εκπόνησης της παρούσας εργασίας, καθώς και για την πολύτιμη βοήθεια, συμβουλή και υποστήριξη του κατά την εκτέλεσή της. Ευχαριστώ επίσης τον Καθηγητή της Σχολής Πολιτικών Μηχανικών, κύριο Μανώλη Παπαδρακάκη, μέλος της τριμελούς συμβουλευτικής επιτροπής, για τις χρήσιμες παρατηρήσεις του και δημιουργικές συζητήσεις που είχα μαζί του στο πλαίσιο της ολοκλήρωσης της παρούσας εργασίας. Σημαντική ήταν η προσφορά της Καθηγήτριας της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών κυρίας Ευαγγελίας Κοντού που μου παρείχε τα πειραματικά δεδομένα που αφορούν την βισκοελαστική συμπεριφορά του PEEK. Θα ήθελα να την ευχαριστήσω επίσης θερμά για όλες τις γνώσεις που μου παρείχε πάνω στην βισκοελαστική συμπεριφορά των υλικών και την περιγραφή τους μέσω των καταστατικών τους μοντέλων. Τέλος θερμές ευχαριστίες οφείλω στην οικογένειά μου και ιδιαίτερα στην μητέρα μου για την υποστήριξη, υπομονή και εμπιστοσύνη που μου δείχνουν πάντα σε κάθε μου προσπάθεια.

Πίνακας περιεχομένων

Περίληψη:	7
1. Εισαγωγή	9
2. Μοντελοποίηση των νανοσωλήνων άνθρακα.....	12
2.1. Ατομική δομή των νανοσωλήνων άνθρακα.....	12
2.2. Δομική μοριακή μηχανική	13
2.3. Ισοδύναμο στοιχείο δοκού του μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα	16
3. Στοχαστική μοντελοποίηση ΝΣΑ με κυματοειδή γεωμετρία.....	20
3.1. Η μέθοδος του διαχωρισμού	20
4. Μοντελοποίηση του ΡΕΕΚ ως βισκοελαστικό υλικό.....	23
4.1. Το βισκοελαστικό μοντέλο των Maxwell-Wiechert.....	23
4.2. Χαρακτηρισμός βισκοελαστικού υλικού	25
5. Μοντελοποίηση του ΑΣΟ νανοςύνθετου υλικού	28
5.1. Η τεχνική του ενσωματωμένουστοιχείου	28
6. Μοντέλο ολίσθησης μεταξύ ΝΣΑ και πολυμερούς.....	30
7. Αριθμητικά αποτελέσματα	33
7.1. Ευθύγραμμοι ΝΣΑ.....	33
7.2. ΝΣΑ κυματοειδούς γεωμετρίας	40
8. Συμπεράσματα	43
Αναφορές	45

Περίληψη:

Στην παρούσα μεταπτυχιακή εργασία εξετάζονται οι μηχανικές ιδιότητες καθώς και η ικανότητα απόσβεσης ταλαντώσεων, δοκιμίου αποτελούμενο από πλαστικό υλικό ενισχυμένο με νανοσωλήνες άνθρακα (ΝΣΑ), που υπόκειται σε ανακυκλιζόμενη φόρτιση. Ειδικότερα μελετάται η επίδραση της διεπιφανειακής διατμητικής αντοχής (ΔΔΑ) του υλικού και των τάσεων που αναπτύσσονται στην διεπιφάνεια μεταξύ του νανοσωλήνα και της μήτρας του πολυμερούς, στις προαναφερθείσες ιδιότητες του νανοςύνθετου υλικού. Οι προσομοιώσεις που παρουσιάζονται βασίζονται σε αναλύσεις πολλαπλών κλιμάκων με χρήση κλασσικών πεπερασμένων στοιχείων συνεχούς μέσου. Η ατομιστική διάταξη των μορίων του νανοσωλήνα άνθρακα μοντελοποιείται βάση της θεωρίας της δομικής μοριακής μηχανικής (ΔΜΜ), όπου οι πληροφορίες των ατομικών αλληλεπιδράσεων διατηρούνται από το προσομοίωμα. Στην συνέχεια το λεπτομερές προσομοίωμα του νανοσωλήνα αντικαθίσταται από μία ισοδύναμη τρισδιάστατη δοκό η οποία αποτελεί το βασικό στοιχείο για την κατασκευή νανοσωλήνων άνθρακα τυχαίας γεωμετρίας, με μήκος που προσεγγίζει την μικροκλίμακα. Για τις αναλύσεις που παρουσιάζονται επιλέγεται αντιπροσωπευτικό στοιχείο όγκου (ΑΣΟ) του νανοςύνθετου, το οποίο αποτελείται από έναν νανοσωλήνα άνθρακα ενσωματωμένο μέσα σε μήτρα ορθογωνικής διατομής από βισκοελαστικό πολυμερές υλικό. Η καταστατική συμπεριφορά των επιμέρους υλικών που αποτελούν το σύνθετο, προσομοιώνονται με γραμμικό ελαστικό, Hooke's μοντέλο για τον ΝΣΑ και γραμμικό βισκοελαστικό Maxwell-Wiechert μοντέλο για το πολυμερές. Ο μηχανισμός μεταφοράς δυνάμεων διαμέσου της διεπιφάνειας νανοσωλήνα/πολυμερούς λαμβάνεται υπόψιν στις αναλύσεις με την ενσωμάτωση στον κώδικα ανάλυσης πεπερασμένων στοιχείων ενός μη γραμμικού μοντέλου ολίσθησης. Η διακριτοποίηση των ΑΣΟ του νανοςύνθετου περιλαμβάνει δύο ανεξάρτητα πλέγματα πεπερασμένων στοιχείων που καταλήγουν έτσι σε απλούστερο προσομοίωμα. Ένα πλέγμα από τρισδιάστατα 8-κομβικά στοιχεία συνεχούς μέσου χρησιμοποιείται για την διακριτοποίηση της ορθογωνικής μήτρας, ενώ ένα δεύτερο πλέγμα, αποτελούμενο από τρισδιάστατα στοιχεία δοκού συνδεδεμένα σε σειρά χρησιμοποιείται για την διακριτοποίηση των ΝΣΑ. Στην παρούσα μελέτη εξετάζονται τόσο ευθύγραμμοι όσο και κυματοειδής ΝΣΑ. Στην περίπτωση των κυματοειδής ΝΣΑ, τυχαίες γεωμετρίες αυτών παράγονται χρησιμοποιώντας την μέθοδο της φασματικής απεικόνισης. Το εξελισσόμενο φάσμα ενέργειας που χρησιμοποιείται για την γέννηση τυχαίων γεωμετριών προκύπτει μετά από την στατιστική επεξεργασία πραγματικών φωτογραφιών του νανοςύνθετου υλικού που λήφθησαν από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο. Μέσες στοχαστικές ιδιότητες του υλικού προκύπτουν μετά από προσομοιώσεις Monte Carlo. Οι μηχανικές ιδιότητες και η απόσβεση του υλικού του νανοςύνθετου καθορίζονται βάση αναλύσεων ευαισθησίας, όπου οι μεταβλητές που εκτιμώνται είναι η εκατοστιαία κατα βάρος (% κ.β.) περιεκτικότητα ΝΣΑ στο ΑΣΟ του νανοςύνθετου καθώς και η ΔΔΑ του. Τα αριθμητικά αποτελέσματα που παρουσιάζονται

καταδεικνύουν την σημαντική επίδραση της $\Delta\Delta A$ και της κυματοειδούς γεωμετρίας των ΝΣΑ στην απόσβεση που παρουσιάζει το νανοσύνθετο υλικό.

1. Εισαγωγή

Τα τελευταία χρόνια οι νανοσωλήνες άνθρακα (ΝΣΑ) έχουν προσελκύσει το ενδιαφέρον μελετών λόγω των εκπληκτικών μηχανικών ιδιοτήτων που παρουσιάζουν. Τόσο πειραματικές μετρήσεις [1-5] όσο και αριθμητικές προσομοιώσεις [6-9] έχουν υπολογίσει το μέτρο ελαστικότητας τους στην τιμή του 1 TPa ενώ η εφελκυστική αντοχή τους έχει υπολογιστεί περίπου στην τιμή των 150 GPa. Οι παραπάνω σπουδαίες μηχανικές ιδιότητες καθώς και ο υψηλός λόγος μήκος/διαμέτρου σε συνδυασμό με την χαμηλή τους πυκνότητα καθιστούν τους ΝΣΑ ιδανικούς ως ενισχυτικά στοιχεία των νανοςύνθετων υλικών. Παρόλα αυτά, σε αντίθεση με τα κλασσικά ανθρακονήματα, οι ΝΣΑ λόγω του ελαχίστου μεγέθους τους αλληλεπιδρούν σε ατομικό επίπεδο με τα μόρια του πολυμερούς μόνο μέσω δυνάμεων van der Waals, που συνήθως η επίδρασή τους στις συνολικές μηχανικές ιδιότητες του σύνθετου υλικού είναι αμελητέες. Πειραματικές μελέτες [10-12] καταδεικνύουν ωστόσο ότι η εφαρμογή λειτουργικών τεχνικών στην επιφάνεια των ΝΣΑ μπορεί να επιτύχει μεγαλύτερη συνάφεια μεταξύ των ατόμων του πολυμερούς και των ΝΣΑ αυξάνοντας έτσι την διεπιφανειακή διατμητική αντοχή (ΔΔΑ) του νανοςύνθετου υλικού με συνέπεια την περαιτέρω βελτίωση της ακαμψίας και της απόσβεσης του.

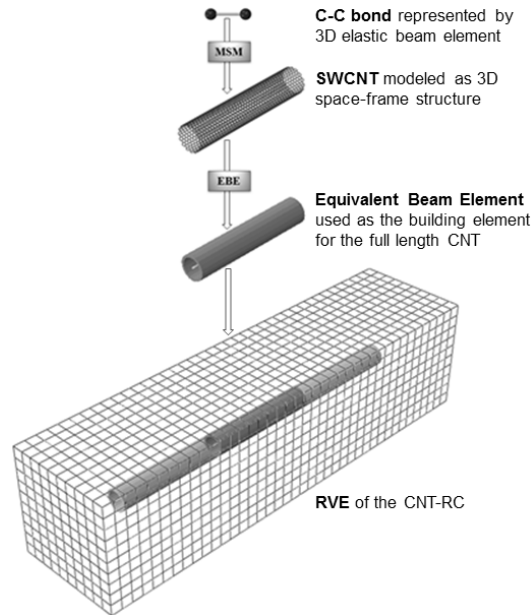
Από την σκοπιά της υπολογιστικής μηχανικής, οι κλασσικές ατομικές υπολογιστικές τεχνικές που χρησιμοποιούνται όπως για παράδειγμα η *ab initio*- κβαντική χημεία [13-15] (βασισμένη απευθείας στη θεμελιώδη φυσική), η μοριακή δυναμική [16,17] (διατηρώντας τα άτομα, αλλά χωρίς τις συναρτήσεις κύματος) αλλά και οι προσεγγίσεις μηχανικής του συνεχούς μέσου [18-21] (παραλείποντας τα άτομα και τις συναρτήσεις κύματος) είναι από τις πιο διαδεδομένες για την μοντελοποίηση των ΝΣΑ. Παρά την συνεχή και μεγάλη ανάπτυξη των υπολογιστικών δυνατοτήτων οι ατομικές υπολογιστικές μέθοδοι όπως η *ab initio* κβαντική χημεία και η μοριακή δυναμική περιορίζονται σε αναλύσεις ατομικής κλίμακας και προσομοίωση φαινομένων μικρής χρονικής διάρκειας. Από την άλλη οι προσεγγίσεις μηχανικής συνεχούς μέσου υπερτερούν έναντι άλλων για την προσομοίωση φαινομένων μεγαλύτερης κλίμακας και μεγαλύτερης χρονικής διάρκειας. Η βασική τους αρχή είναι η αντικατάσταση των χημικών δεσμών μεταξύ των ατόμων που χρησιμοποιούνται από την μοριακή δυναμική με ισοδύναμα στοιχεία συνεχούς μέσου που μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε μια ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων. Η σύνδεση της μοριακής δυναμικής με την θεωρία της μηχανικής του συνεχούς μέσου επιτυγχάνεται μέσω ενεργειακών ισοδυναμιών. Η πιο γνωστή από τις προσεγγίσεις μηχανικής του συνεχούς μέσου είναι η μέθοδος της δομικής μοριακής μηχανικής (ΔΜΜ) που λόγω της απλότητας και αποτελεσματικότητας της χρησιμοποιείται ευρέως. Στην ΔΜΜ το ατομικό πλέγμα που συνθέτει τον ΝΣΑ μοντελοποιείται ως ένα πλαισιωτό δίκτυο όπου οι ομοιοπολικοί δεσμοί μεταξύ των ατόμων άνθρακα αντικαθίστανται από ισοδύναμα στοιχεία δοκού. Οι ακαμψία των δοκών αυτών που προσομοιάζει τις ενδοατομικές επιδράσεις στο ατομικό πλέγμα προκύπτει από την ισοδυναμία των ενεργειακών εκφράσεων της δομικής και μοριακής

μηχανικής. Συνήθως η γραμμική συμπεριφορά των ατομικών επιδράσεων περιγράφεται στην μοριακή μηχανική από ένα δυναμικό που προσεγγίζεται από ένα πολυώνυμο δευτέρας τάξεως. Αντιστοίχα η μη γραμμική συμπεριφορά των δεσμών περιγράφεται από ένα πιο σύνθετο δυναμικό γνωστό ως δυναμικό του Morse [22-24].

Για την μοντελοποίηση σύνθετων υλικών ενισχυμένων με ΝΣΑ διάφορες μέθοδοι ανάλυσης πολλαπλών κλιμάκων έχουν προταθεί, οι οποίες συνδυάζουν διαφορετικές κλίμακες ανάλυσης και λαμβάνουν υπόψιν τους φαινόμενα που αναπτύσσονται στην διεπιφάνεια των ΝΣΑ και του πολυμερούς. Ανάμεσα σε αυτές είναι και οι μέθοδοι στις οποίες οι αναλύσεις γίνονται παράλληλα (συγχρόνως) στις διαφορετικές κλίμακες και είναι γνωστές ως «concurrent multiscale methods» αλλά και αυτές όπου οι αναλύσεις γίνονται διαδοχικά, γνωστές ως «sequential multiscale methods» [25, 26]. Οι παράλληλες μέθοδοι αναλύσεων πολλαπλών κλιμάκων συνδυάζουν την μοριακή δυναμική με συνεχή μεθόδους γεφυρώνοντας την ατομική κλίμακα με την μακροκλίμακα. Σε αυτήν την προσέγγιση από την λύση του ατομικού προβλήματος καθορίζονται οι συνοριακές συνθήκες που απαιτούνται για την λύση του συνεχούς προβλήματος στην μακρο κλίμακα ενώ οι επιλύσεις στις διαφορετικές κλίμακες γίνονται συγχρόνως και συνεχώς «on the fly». Από την άλλη οι διαδοχικές μέθοδοι εφαρμόζουν έναν διαχωρισμό των επιμέρους κλιμάκων του προβλήματος και η λύση επιτυγχάνεται διαδοχικά από την μικρότερη κλίμακα προς την μεγαλύτερη. Ακολουθώντας την τελευταία προσέγγιση ο Odegard [21] μοντελοποίησε τους ΝΣΑ, την διεπιφάνεια ΝΣΑ/πολυμερούς και την μήτρα του νανοσύνθετου υλικού με μία ισοδύναμη συνεχή ίνα η οποία διατηρεί τις πληροφορίες από το ατομικό πλέγμα και τις ενδοατομικές αλληλεπιδράσεις. Παρόμοιες αναλυτικές διατυπώσεις που βασίζονται σε ισοδύναμες εκφράσεις μεταξύ των μοντέλων συνεχούς μέσους και των ατομικών νανομοντέλων παρουσιάζονται από άλλους ερευνητές [27-29]. Στην μελέτη [30] οι ΝΣΑ μοντελοποιούνται με βάση την θεωρία της δομικής μοριακής μηχανικής (ΔΜΜ) όπου γίνεται η παραδοχή της στερεάς σύνδεσης μεταξύ των μορίων του πολυμερούς και των ΝΣΑ. Αντίθετα στην μελέτη [31] όπου στοιχεία ελατηρίων χρησιμοποιούνται για την σύνδεση των ατόμων άνθρακα στο ατομικό πλέγμα των ΝΣΑ, η σύνδεση των μορίων της μήτρας με τα μόρια των ΝΣΑ γίνεται με δεσμούς van der Waals που προσομοιώνονται με ελατήρια των οποίων η συμπεριφορά καθορίζεται από το δυναμικό των Lenard-Jones.

Στην παρούσα μελέτη, η επίδραση της διεπιφανειακής διατμητικής αντοχής στις μηχανικές ιδιότητες και την αποσβεση του ενισχυμένου πολυμερούς υλικού με ΝΣΑ διερευνάται με την βοήθεια αναλύσεων πολλαπλής κλίμακας. Το ατομικό πλέγμα των ΝΣΑ προσομοιώνεται με ένα πλαισιωτό δίκτυο δοκών χρησιμοποιώντας αρχές της ΔΜΜ. Καθώς οι ΝΣΑ σχηματίζουν μακρτές αλυσίδες φτάνοντας σε μήκος κάποιων μικρών η λεπτομερής προσομοίωση της νανοδομής τους με βάση την ΔΜΜ είναι μια υπολογιστικά επίπονη διαδικασία. Για αυτόν τον λόγο το λεπτομερές μοντέλο της ΔΜΜ αντικαθίσταται από μία ισοδύναμη δοκό (ΙΔ) η οποία χρησιμοποιείται ως το βασικό στοιχείο για την δόμηση των μακρτών αλυσίδων των ΝΣΑ. Στην ΙΔ

ανατίθονται γραμμικές ελαστικές ιδιότητες ενώ στην μήτρα που αποτελείται από πολυμερές υλικό και συμπεριφέρεται γραμμικά βισκοελαστικά ανατίθεται το μοντέλο των Maxwell-Wiechert. Συγκεκριμένα το πολυμερές υλικό που χρησιμοποιείται στην παρούσα μελέτη είναι το poly-ether-ether-ketone (PEEK).



Εικόνα 1: Γραφική αναπαράσταση της μοντελοποίησης πολλαπλών κλιμάκων του ΑΣΟ του νανოსύνθετου υλικού

Ο διεπιφανειακός μηχανισμός μεταφοράς δυνάμεων μεταξύ της περιφερειακής επιφάνειας των ΝΣΑ και της περιβάλλουσας μήτρας λαμβάνεται υπόψιν στην παρούσα ανάλυση μέσω της υλοποίησης ενός μη γραμμικού μοντέλου ολίσθησης. Το μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων του ΑΣΟ αποτελείται από δύο ανεξάρτητα πλέγματα: ένα δομημένο πλέγμα από τρισδιάστατα στοιχεία συνεχούς μέσου για την διακριτοποίηση της μήτρας και ένα πλέγμα αποτελούμενο από τρισδιάστατα στοιχεία δοκού συνδεδεμένα σε σειρά για την διακριτοποίηση των μακρών ΝΣΑ. Η επίδραση της γεωμετρίας των ΝΣΑ στις μηχανικές ιδιότητες και την απόσβεση του νανοςύνθετου υλικού είναι επίσης αντικείμενο διερεύνησης της παρούσας εργασίας. Στις αναλύσεις που παρουσιάζονται λαμβάνονται υπόψιν τόσο ευθύγραμμοι όσο και κυματοειδής ΝΣΑ. Στην περίπτωση των κυματοειδής ΝΣΑ, τυχαίες γεωμετρίες αυτών παράγονται χρησιμοποιώντας την στοχαστική διαδικασία της φασματικής απεικόνισης. Ένα εξελισσόμενο φάσμα ενέργειας προκύπτει από την επεξεργασία εικόνων ηλεκτρονικού μικροσκοπίου του νανοςύνθετου υλικού από όπου μπορεί να εξαχθεί η τυχαία γεωμετρία των ΝΣΑ. Οι στοχαστικές μέσες ιδιότητες του νανοςύνθετου υλικού προκύπτουν μετά από αναλύσεις Monte Carlo για διάφορες τιμές της κατά βάρους περιεκτικότητας τους (%κ.β) σε ΝΣΑ που διακυμαίνονται από 0.1% ως και 2%. Επίσης εξετάζονται τιμές της ΔΔΑ που κυμαίνονται από πολύ χαμηλές ως και υψηλότερες οι οποίες προσεγγίζουν την

διαμητική τάση αντοχής του PEEK. Τα αριθμητικά αποτελέσματα που παρουσιάζονται καταδεικνύουν την σημαντική επίδραση της ΔΔΑ και της κυματοειδούς γεωμετρίας των ΝΣΑ στην απόσβεση του νανოსύνθετου υλικού. Μια γραφική αναπαράσταση της ανάλυσης πολλαπλών κλιμάκων και των διαφορετικών προσομοιώσεων που ακολουθούνται σε κάθε κλίμακα φαίνεται στην Εικόνα 1.

2. Μοντελοποίηση των νανοσωλήνων άνθρακα

2.1. Ατομική δομή των νανοσωλήνων άνθρακα

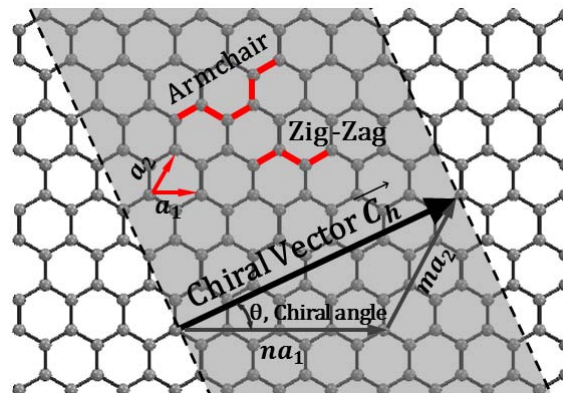
Ένας μονότοιχος νανοσωλήνας άνθρακα (ΜΤΝΣΑ) προσομοιάζεται με μια σωληνοειδή κατασκευή που προκύπτει από την περιέλαση ενός φύλλου γραφενίου. Οι πολύτοιχοι νανοσωλήνες άνθρακα (ΠΤΝΣΑ) αποτελούνται από ομόκεντρους ΜΤΝΣΑ διαφορετικής ακτίνας. Η ατομική δομή του νανοσωλήνα προσδιορίζεται από ένα χαρακτηριστικό διάνυσμα (chiral vector) \vec{C}_h το οποίο μαζί με την γωνία (chiral angle) θ καθορίζει την διεύθυνση δίπλωσης του φύλλου γραφενίου. Ένας ΜΤΝΣΑ με chirality (n, m) προκύπτει κόβοντας το φύλλο γραφενίου κατα μήκος των διακεκομένων γραμμών και διπλώνοντάς το κατα την διεύθυνση του chiral διανύσματος όπως φαίνεται στην Εικόνα 2. Το chiral διάνυσμα ορίζεται ως εξής:

$$\vec{C}_h = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 \quad 1$$

και η γωνία θ του chiral διανύσματος δίνεται από την εξίσωση

$$\theta = \text{atan}\left(\frac{\sqrt{3}m}{2n+m}\right) \quad 2$$

όπου \vec{a}_1 και \vec{a}_2 είναι τα διανύσματα βάσης που φαίνονται στην Εικόνα 2 ενώ (n, m) είναι οι παράμετροι που χαρακτηρίζουν το chirality του νανοσωλήνα.



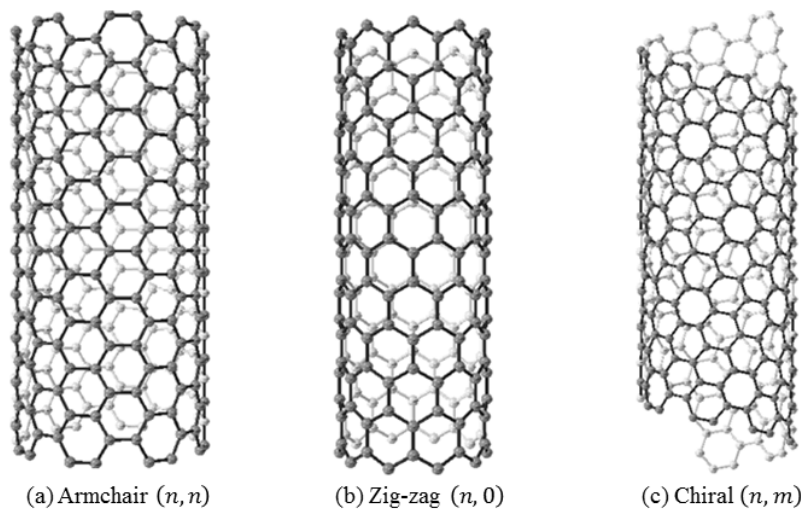
Εικόνα 2: Ατομικό πλέγμα φύλλου γραφενίου, επεξήγηση των παραμέτρων του chirality

Για $n=m$ η γωνία $\theta=30^\circ$ και ο νανοσωλήνας χαρακτηρίζεται ως τύπου armchair, ενώ για $m=0$ η γωνία $\theta=0^\circ$ και ο νανοσωλήνας χαρακτηρίζεται ως τύπου zig-zag. Για γωνία $\theta \in (0^\circ, 30^\circ)$ ο τύπος του νανοσωλήνα που δημιουργείται είναι (n, m) . Η διάμετρος του ΝΣΑ εξαρτάται από το chiralδιάνυσμα και υπολογίζεται από τις παραμέτρους n και m από τον τύπο:

$$d_{cnt} = |a_1| \frac{\sqrt{n^2 + nm + m^2}}{\pi} \quad 3$$

2.2. Δομική μοριακή μηχανική

Το ατομικό πλέγμα των ΝΣΑ προσομοιάζεται με μια πλαισιωτή κατασκευή. Στην Εικόνα 3 παρουσιάζονται διαφορετικού τύπου chirality νανοσωλήνες άνθρακα. Η εξαγωνική διάταξη των ατόμων που φαίνεται στην Εικόνα 3 αποτελεί το στοιχειώδες κατασκευαστικό στοιχείο της πλαισιωτής κατασκευής. Σύμφωνα με τις αρχές της δομικής μοριακής μηχανικής η παραμόρφωση του ΝΣΑ υπό εξωτερική φόρτιση καθορίζεται από τις αλληλεπιδράσεις των ατόμων [32]. Συνήθως αυτές οι δυνάμεις πεδίου εκφράζονται μέσω της δυναμικής ενέργειας του ατομικού πλέγματος. Υποθέτοντας ότι υπάρχουν ομοιότητες μεταξύ των παραμορφώσεων του ατομικού πλέγματος και των παραμορφώσεων της πλαισιωτής κατασκευής, μπορεί να οριστεί μια ισοδυναμία μεταξύ της δυναμικής ενέργειας των ατόμων του ΝΣΑ σε μοριακό επίπεδο και της ενέργειας παραμόρφωσης των στοιχείων συνεχούς μέσου της πλαισιωτής κατασκευής. Από την παραπάνω ενεργειακή ισοδυναμία και τις τιμές των δυνάμεων πεδίου που καθορίζονται από την υπολογιστική χημεία, μπορούν να υπολογιστούν οι ιδιότητες του υλικού και η γεωμετρία των στοιχείων συνεχούς μέσου που συνθέτουν την πλαισιωτή κατασκευή και απαιτούνται για την ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων.

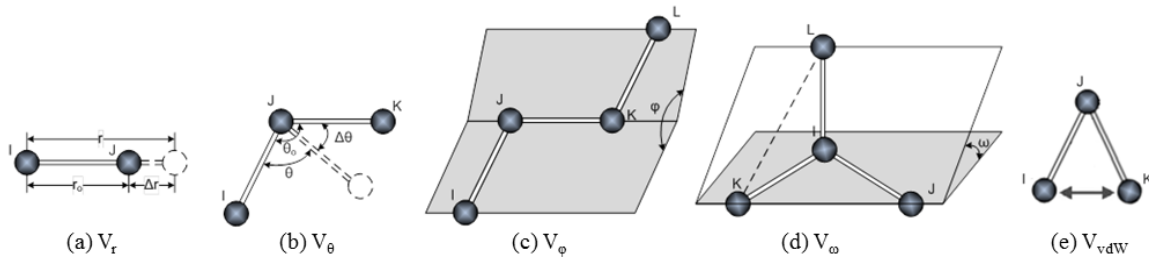


Εικόνα 3: ΝΣΑ με chirality τύπου (a) armchair, (b) zig-zag and (c) chiral

Η συνολική δυναμική ενέργεια (V_{total}) η οποία χαρακτηρίζει το πεδίο δυνάμεων στο μοριακό πλέγμα εκφράζεται ως το άθροισμα των ενεργειών που οφείλονται στις διατομικές αλληλεπιδράσεις. Οι επιμέρους ενέργειες οφείλονται σε αλληλεπιδράσεις χημικού δεσμού μεταξύ των γειτονικών ατόμων αλλά και σε αλληλεπιδράσεις μεταξύ απομακρυσμένων ατόμων του μοριακού συστήματος όπως είναι οι αλληλεπιδράσεις λόγω δυνάμεων van der Waals αλλά και οι ηλεκτροστατικές αλληλεπιδράσεις [32]. Αμελώντας τις ηλεκτροστατικές επιδράσεις η συνολική δυναμική ενέργεια του μοριακού συστήματος εκφράζεται ως εξής:

$$V_{total} = \sum V_r + \sum V_\theta + \sum V_\phi + \sum V_\omega + \sum V_{vdW} \quad 4$$

Η παραπάνω εξίσωση περιλαμβάνει τις ενδοατομικές επιδράσεις όπως αυτές περιγράφονται στην Εικόνα 4. V_r είναι η ενέργεια εξ' αιτίας του εφελκυσμού του δεσμού, V_θ είναι η ενέργεια λόγω κάμψης της γωνίας του, V_ϕ είναι η ενέργεια εξ' αιτίας της δίδερης γωνίας στρέψης του, V_ω είναι η ενέργεια λόγω της στρέψης εκτός επιπέδου του δεσμού και V_{vdW} είναι η ενέργεια που οφείλεται στην ενέργεια που δεν αφορά παραμόρφωση δεσμού αλλά την van der Waals αλληλεπίδραση. Για συστήματα ομοιοπολικών δεσμών, η κύρια συνεισφορά στην συνολική δυναμική ενέργεια προέρχεται από τους τέσσερις πρώτους όρους της εξίσωσης (4) καθώς η συνεισφορά των αλληλεπιδράσεων van der Waals θεωρείται αμελητέα.



Εικόνα 4: Ενδοατομικές επιδράσεις που συνεισφέρουν στην συνολική δυναμική ενέργεια του μοριακού συστήματος

Στο πεδίο της μοριακής μηχανικής υπάρχουν αρκετές μελέτες που προτείνουν διαφορετικές εκφράσεις των παραπάνω ενεργειακών όρων οι οποίοι εξαρτώνται από το υλικό και τις συνθήκες φόρτισης του ατομικού μοντέλου [33, 34]. Τόσο γραμμικές όσο και μη γραμμικές εκφράσεις των ενεργειακών όρων έχουν εφαρμοστεί από διάφορους μελετητές. Οι πιο διαδεδομένες είναι η έκφραση της ενέργειας ως πολυωνύμου δευτέρας τάξεως, η έκφραση της από το δυναμικό του Morse, των Tersoff-Brenner και των Lenard-Jones. Στην παρούσα μελέτη γίνεται η υπόθεση των μικρών παραμορφώσεων του νανοσωλήνα, ώστε οι αλληλεπιδράσεις των ατόμων άνθρακα να θεωρούνται γραμμικές, επιτρέποντας επομένως την έκφραση των ενεργειακών όρων μέσω αρμονικών συναρτήσεων της μορφής:

$$V_r = \frac{1}{2} k_r (r - r_0)^2 = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2 \quad 5$$

$$V_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\theta - \theta_0)^2 = \frac{1}{2} k_\theta (\Delta \theta)^2 \quad 6$$

$$V_\tau = V_\phi + V_\omega = \frac{1}{2} k_\tau (\Delta \phi)^2 \quad 7$$

όπου k_r , k_θ , και k_τ είναι οι σταθερές των δυνάμεων αντίστασης κατά τον εφελκυσμό των δεσμών, την κάμψη τους και την στρέψη τους αντίστοιχα, ενώ Δr , $\Delta \theta$ και $\Delta \phi$ είναι η μεταβολή της αξονικής απόστασης των ατόμων κατά τον εφελκυσμό, η μεταβολή της γωνίας τους κατά την κάμψη και η μεταβολή της γωνίας τους κατά την στρέψη του δεσμού αντίστοιχα. Στην εξίσωση (7) οι ενεργειακοί όροι που αναφέρονται στην διέδρη και στην εκτός επιπέδου στρέψη του δεσμού έχουν συγχωνευθεί σε έναν μόνο όρο που αντιστοιχεί στην συνολική ενέργεια λόγω στρέψης του δεσμού γενικά.

Σύμφωνα με την θεωρία της δομικής μηχανικής η ενέργεια παραμόρφωσης μιας ομοιόμορφης δοκού μήκους L που υποβάλλεται σε αξονική φόρτιση N (Εικόνα 5α) δίνεται από τον τύπο:

$$V_A = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{N^2}{EA} dL = \frac{1}{2} \frac{N^2 L}{EA} = \frac{1}{2} \frac{EA}{L} (\Delta L)^2 \quad 8$$

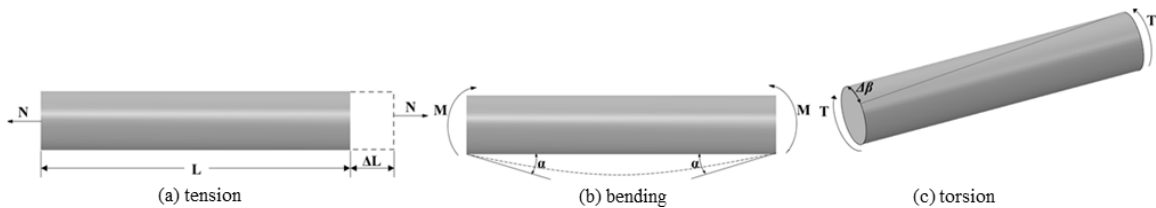
όπου ΔL είναι η αξονική επιμήκυνση της δοκού λόγω αξονικής παραμόρφωσης της. Η ενέργεια καμπτικής παραμόρφωσης της παραπάνω δοκού που υποβάλλεται σε καθαρή ροπή κάμψης M (Εικόνα 5β) είναι:

$$V_M = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{M^2}{EI} dL = \frac{2EI}{L} a^2 = \frac{1}{2} \frac{EI}{L} (2a)^2 \quad 9$$

όπου a είναι η γωνία κάμψης των άκρων της δοκού. Η ενέργεια στρεπτικής παραμόρφωσης της δοκού υπό καθαρή ροπή στρέψης T (Εικόνα 5c) είναι:

$$V_T = \frac{1}{2} \int_0^L \frac{T^2}{GJ} dL = \frac{1}{2} \frac{T^2 L}{GJ} = \frac{1}{2} \frac{GJ}{L} (\Delta \beta)^2 \quad 10$$

όπου $\Delta \beta$ είναι η σχετική μεταβολή της γωνίας στρέψης των άκρων της δοκού.



Εικόνα 5: Καθαρός εφελκυσμός, κάμψη και στρέψη ομοιόμορφης δοκού

Συνδυάζοντας τις παραπάνω ενεργειακές εκφράσεις που προκύπτουν από την δομική μηχανική με αυτές που προκύπτουν από την μοριακή μηχανική, εξισώσεις (5-7), υπολογίζονται οι παράμετροι ακαμψίας EA , EI και GJ της δοκού με γνωστές τις σταθερές των δυνάμεως αντίστασης k_r , k_θ και k_τ ως εξής:

$$EA = k_r L, \quad EI = k_\theta L, \quad GJ = k_\tau L \quad 11$$

Εάν υποθέσουμε κυκλική διατομή για την δοκό που αντιπροσωπεύει τον δεσμό μεταξύ των ατόμων άνθρακα, η διάμετρός της υπολογίζεται από τις σταθερές των μοριακών δυνάμεων αντίστασης βάση του τύπου:

$$d = 4 \sqrt{\frac{EI}{EA}} = 4 \sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}} \quad 12$$

καταλήγοντας σε επιφάνεια διατομής $A = \pi d^2/4$, σε ροπή αδρανείας $I_x = I_y = \pi d^4/64$ και σε πολική ροπή αδρανείας $J = \pi d^4/32$.

Από την εξίσωση (11) προκύπτει η έκφραση του μέτρου ελαστικότητας του Young και του διατμητικού μέτρου ελαστικότητας της δοκού κυκλικής διατομής στην μορφή:

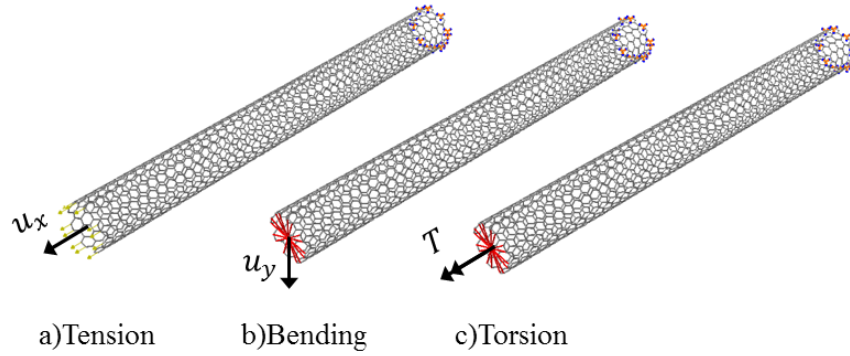
$$E = \frac{k_r^2 L}{4\pi k_\theta} \quad \text{και} \quad G = \frac{k_r^2 k_\tau L}{8\pi k_\theta^2} \quad 13$$

Στην παρούσα μελέτη χρησιμοποιούνται οι ακόλουθες σταθερές των δυνάμεων αντίστασης [35]: $k_r = 938 \text{ kcal} \times \text{mole}^{-1} \times \text{\AA}^{-2} = 6.52 \times 10^{-7} \text{ N/nm}$, $k_\theta = 126 \text{ kcal} \times \text{mole}^{-1} \times \text{rad}^{-2} = 8.76 \times 10^{-10} \text{ Nnm rad}^{-2}$ και $k_\tau = 40 \text{ kcal} \times \text{mole}^{-1} \times \text{rad}^{-2} = 2.78 \times 10^{-10} \text{ Nnm rad}^{-2}$, σε συνδυασμό με το μήκος της δοκού $L = 0.1421 \text{ nm}$ που αντιστοιχεί στην απόσταση μεταξύ των ατόμων άνθρακα a_{c-c} . Αντικαθιστώντας τις παραπάνω σταθερές στην εξίσωση (13) υπολογίζονται η τιμή του μέτρου ελαστικότητας του Young $E = 5488 \text{ Gra}$ και το διατμητικό μέτρο ελαστικότητας $G = 870.7 \text{ GPa}$. Επίσης η διάμετρος της κυκλικής διατομής της ισοδύναμης δοκού υπολογίζεται από την εξίσωση (12) στην τιμή $d = 0.147 \text{ nm}$.

2.3. Ισοδύναμο στοιχείο δοκού του μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα

Παρόλο που η μέθοδος της ΔΜΜ σε σχέση με την μέθοδο της μοριακής δυναμικής (ΜΔ), υπερβαίνει κατά την υπολογιστική διαδικασία τους περιορισμούς σε χρόνο επίλυσης και σε μέγεθος κλίμακας του προβλήματος, ωστόσο η λεπτομερής προσομοίωση της νανοδομής των ΝΣΑ καταλήγει σε ένα υπολογιστικό πρόβλημα αρκετά μεγάλου μεγέθους που καθιστά την επίλυσή του σχεδόν αδύνατη. Για παράδειγμα η ανάλυση ενός ΝΣΑ με διάμετρο 14 nm και μήκος 1 μm αντιστοιχεί σε ένα υπολογιστικό πρόβλημα της τάξης των 10^7 βαθμών ελευθερίας. Επομένως η ανάλυση ενός νανοςύνθετου υλικού που περιέχει έστω 1% κ.β ΝΣΑ είναι μια αρκετά επίπονη υπολογιστική διαδικασία. Για αυτόν τον λόγο το λεπτομερές μοντέλο ΔΜΜ του ΝΣΑ αντικαθίσταται από από μία ισοδύναμη δοκό (ΙΔ) από γραμμικό ελαστικό υλικό. Για τον

καθορισμό των παραμέτρων ακαμψίας της ισοδύναμης δοκού το λεπτομερές μοντέλο ΔΜΜ του μονότοιχου νανοσωλήνα που προσομοιώνεται από ένα πλαισιωτό δίκτυο δοκών υποβάλλεται σε τρεις ανεξάρτητες φορτίσεις, εφελκυσμό, κάμψη και στρέψη. Οι συνοριακές συνθήκες καθώς και τα φορτία που επιβάλλονται σε κάθε περίπτωση απεικονίζονται στην Εικόνα 6.



Εικόνα 6: Προσομοίωση ΝΣΑ από πλαισιωτό δίκτυο δοκών, συνοριακές συνθήκες και φορτία για (a) εφελκυσμό, (b) κάμψη και (c) στρέψη του λεπτομερούς μοντέλου ΔΜΜ

Ειδικότερα η αξονική ακαμψία της ισοδύναμης δοκού υπολογίζεται από την προσομοίωση του εφελκυσμού του ΝΣΑ επιβάλλοντας στο ένα άκρο του αξονική μετατόπιση u_x ενώ το άλλο άκρο του είναι πακτωμένο όπως φαίνεται στην Εικόνα 6α. Από την ανάλυση των πεπερασμένων στοιχείων υπολογίζονται οι αντιδράσεις F_x στους πακτωμένους κόμβους του λεπτομερούς μοντέλου ΔΜΜ το οποίο έχει αρχικό μήκος L_0 . Η ισοδύναμη αξονική ακαμψία της δοκού δίνεται από τον τύπο:

$$(EA)_{eq} = \frac{F_x L_0}{u_x} \quad 14$$

Στην περίπτωση της κάμψης του ΝΣΑ επιβάλλεται στο ένα άκρο του εγκάρσια μετατόπιση u_y ενώ το άλλο άκρο του είναι πακτωμένο όπως φαίνεται στην Εικόνα 6β. Οι αντιδράσεις F_y στους πακτωμένους κόμβους υπολογίζονται από την ανάλυση των πεπερασμένων στοιχείων. Η ισοδύναμη καμπτική ακαμψία της δοκού υπολογίζεται από τον τύπο:

$$(EI)_{eq} = \frac{F_y}{3u_y} L_0^3 \quad 15$$

Παρομοίως, στην περίπτωση της στρέψης επιβάλλεται στρεπτική ροπή T στο ένα άκρο του ΝΣΑ ενώ οι κόμβοι του άλλου άκρου του είναι πακτωμένοι όπως φαίνονται στην Εικόνα 6c. Η γωνία στρέψης ϕ υπολογίζεται από την ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων και η ισοδύναμη στρεπτική ακαμψία της δοκού δίνεται από τον τύπο:

$$(GJ)_{eq} = \frac{T}{\phi} L_0 \quad 16$$

Στην Εικόνα 7 απεικονίζονται τα διαγράμματα της αξονικής, καμπτικής και στρεπτικής ακαμψίας της ισοδύναμης δοκού όπως αυτά προέκυψαν από την εφαρμογή των εξισώσεων (14-16). Οι τιμές των ακαμψιών της δοκού στα διαγράμματα δίνονται σε σχέση με την πραγματική διάμετρο του ΝΣΑ η οποία υπολογίζεται από την εξίσωση (3). Τα διαγράμματα αφορούν ΝΣΑ με chiralilty τύπου armchair (n, n) και zigzag (n, 0). Εάν θέλαμε να υπολογίσουμε τα μέτρα ελαστικότητας του υλικού του ΝΣΑ, από τις αντίστοιχες ακαμψίες της ΙΔ που υπολογίστηκαν προηγουμένως, θα πρέπει να επιλέξουμε συγκεκριμένο προφίλ για την διατομή της. Για παράδειγμα εάν θεωρήσουμε ότι η ισοδύναμη δοκός έχει προφίλ κοίλου σωλήνα τότε οι γεωμετρικές της ιδιότητες όπως η επιφάνεια της, οικαμπτικές ροπές αδράνειας της και η πολική ροπή αδράνειας της δίνονται από τους τύπους:

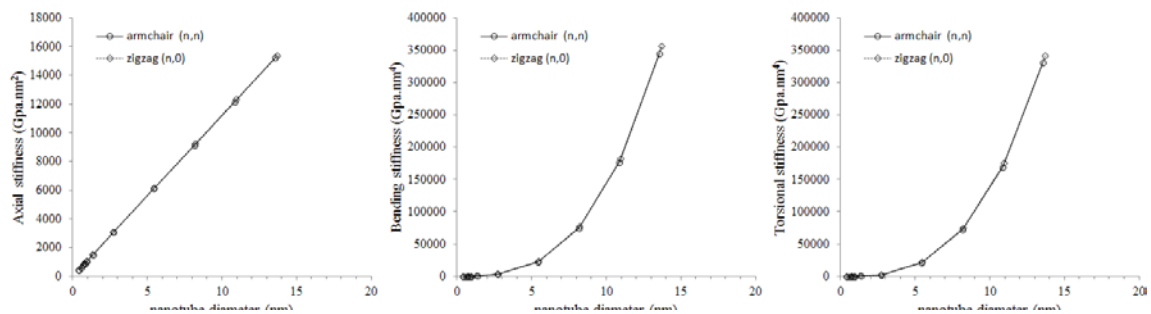
$$A_{eq} = \frac{\pi}{4} \left[(d_{eq} + t)^2 - (d_{eq} - t)^2 \right] \quad 17$$

$$I_{eq} = \frac{\pi}{64} 2 \left[(d_{eq} + t)^4 - (d_{eq} - t)^4 \right] \quad J_{eq} = I_{eq} \quad 18$$

όπου η ισοδύναμη διάμετρος d_{eq} της δοκού υπολογίζεται από την αξονική και καμπτική ακαμψία της για αυθαίρετα επιλεγμένο πάχος t του τοιχώματος του προφίλ κοίλου σωλήνα ως εξής:

$$d_{eq} = \sqrt{8 \frac{(EI)_{eq}}{(EA)_{eq}} - t^2} \quad 19$$

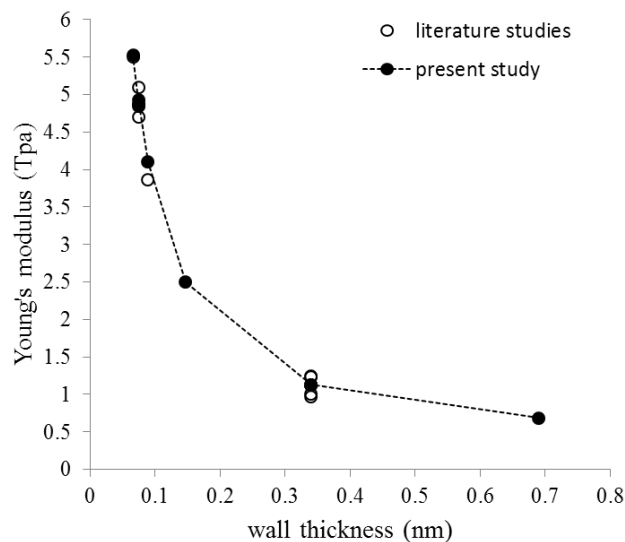
Το μέτρο ελαστικότητας του Young και το διαμητικό μέτρο ελαστικότητας της κοίλης ισοδύναμης δοκού ενός ΝΣΑ τύπου armchair (8, 8) υπολογίστηκαν από τις εξισώσεις (14-19). Οι τιμές αυτές συγκρίνονται στον Πίνακα 1 με αντίστοιχους υπολογισμούς από άλλες μελέτες που έχουν δημοσιευθεί στην βιβλιογραφία όπου εφαρμόζονται διαφορετικές υπολογιστικές τεχνικές συμπεριλαμβανομένου αναλύσεις μοριακής δυναμικής, tight-binding μοντέλα, ab-initio κβαντική υπολογιστική χημεία και άλλες. Τα αποτελέσματα αναφέρονται σε διαφορετικό πάχος τοιχώματος της διατομής της σωληνωτής δοκού. Η Εικόνα 8 συνοψίζει γραφικά τα αποτελέσματα που αναγράφονται στον παραπάνω πίνακα συγκρίνοντας τα άμεσα, αξιολογώντας κατά αυτόν τον τρόπο την ακρίβεια της υπολογιστικής τεχνικής που προτείνεται στην παρούσα εργασία.



Εικόνα 7: Αξονική, καμπτική και στρεπτική ακαμψία της ισοδύναμης δοκού ΝΣΑ σε σχέση με την πραγματική τους διάμετρο.

Investigators	Method	Wall thickness (nm)	Young's modulus (TPa)	
			Literature	Present study
Yakobson et. al. [36]	Molecular dynamics	0.066	5.5	5.52
Zhou et. al. [37]	Tight-binding model	0.074	5.1	4.93
Tu and Ou-Yang [38]	Local density approximation model	0.075	4.7	4.86
Kudin et. al. [39]	Ab initio computations	0.089	3.859	4.10
Pantano et. al. [40]	Continuum shell modeling	0.075	4.84	4.86
Li and Chou [22]	Structural mechanics: stiffness matrix method	0.34	1.01	1.13
Lu [41]	Molecular dynamics	0.34	0.974	1.13
Hernandez et. al. [42]	Tight binding molecular dynamics	0.34	1.24	1.13
Jin and Yuan [8]	Molecular dynamics	0.34	1.238	1.13
Odegard et. al. [21]	Equivalent-continuum modeling	0.69	-	0.69
Present work	MSM	0.147	-	2.50

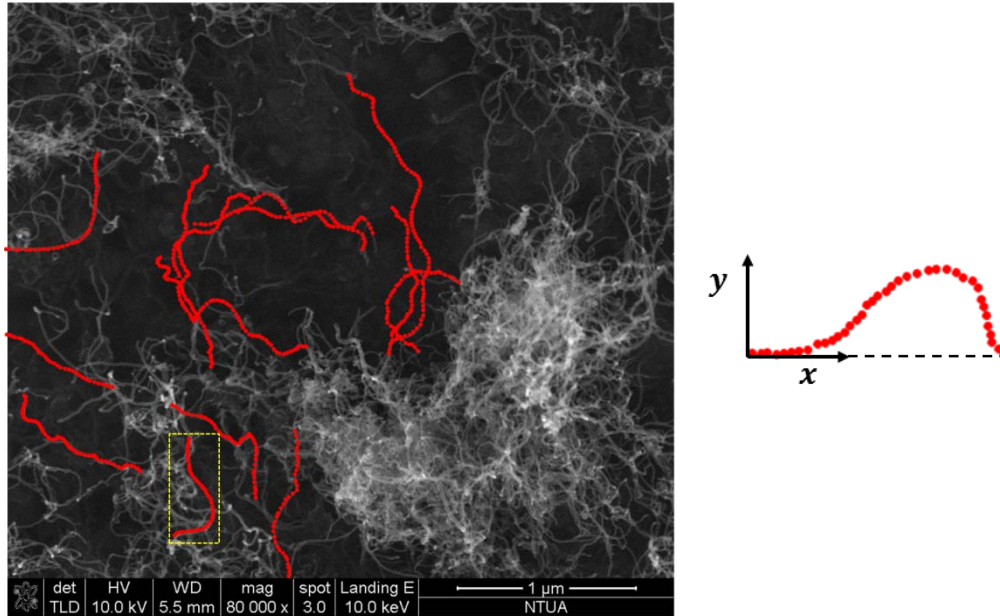
Πίνακας 1: Σύγκριση του μέτρου ελαστικότητας του Young ΝΣΑ (8, 8) για διαφορετικές τιμές πάχους τοιχώματος του.



Εικόνα 8: Μέτρο ελαστικότητας του Young της ισοδύναμης δοκού ΝΣΑ τύπου armchair (8, 8) σε σχέση με το πάχος τοιχώματος της διατομής του.

3. Στοχαστική μοντελοποίηση ΝΣΑ με κυματοειδή γεωμετρία

Η τυχαία κυματοειδής γεωμετρία των νανοσωλήνων μπορεί να μοντελοποιηθεί μέσω ενός μη ομογενούς στοχαστικού πεδίου που προκύπτει χρησιμοποιώντας την μέθοδο της φασματικής απεικόνισης σε συνδυασμό με ένα εξελισσόμενο φάσμα ενέργειας (ΕΦΕ). Οι στατιστικές ιδιότητες του ΕΦΕ προκύπτουν από την επεξεργασία ενός πλήθους πραγματικών νανοσωλήνων άνθρακα τυχαίας γεωμετρίας όπως αυτοί απεικονίζονται στο ηλεκτρονικό μικροσκόπιο (Εικόνα 9).



Εικόνα 9: Εικόνα από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο ΝΣΑ τυχαίας γεωμετρίας μέσα σε πολυμερές υλικό.

3.1. Η μέθοδος του διαχωρισμού

Το ΕΦΕ εξαρτάται τόσο από την συχνότητα ω όσο και από τις χωρικές μεταβλητές που καθορίζουν την θέση. Στις περιπτώσεις ξεχωριστών ή περίπου ξεχωριστών ΕΦΕ, τα οποία όπως περιγράφεται στην [43] χρησιμοποιούνται κατά κύριο λόγο σε περιπτώσεις γεωμετρικών ατελειών όπως είναι η κυματοειδής γεωμετρία των ΝΣΑ, η έκφρασή τους δίνεται από το γινόμενο ενός ομογενούς φάσματος ενέργειας $S_h(\omega)$ και μιας χωρικής συνάρτησης $g_h(x)$ ως εξής:

$$S(\omega, x) = S_h(\omega) \cdot g_h(x) \quad 20$$

Σε παλαιότερες μελέτες έχουν προταθεί διάφορες μεθοδολογίες για την εκτίμηση του ΕΦΕ από διαθέσιμες πειραματικές μετρήσεις, όπως για παράδειγμα από πραγματικά δείγματα στοχαστικών σημάτων. Ανάμεσά τους οι πιο συχνά χρησιμοποιούμενες, είναι ο βραχύς μετασχηματισμός Fourier και αυτές που βασίζονται σε εκτιμήσεις του μήκους κύματος [44-48]. Το βασικό μειονέκτημα των παραπάνω μεθοδολογιών είναι ότι δεν

μπορούν να επιτύχουν ανάλυση στο πεδίο του χώρου και της συχνότητας ταυτόχρονα. Μια πρωτότυπη μεθοδολογία παρουσιάστηκε στην [43] για την εκτίμηση του ΕΦΕ μέσω ξεχωριστών διαδικασιών. Η μέθοδος αυτή βασίζεται σε απλές αρχές της θεωρίας στοχαστικών διαδικασιών και για τον λόγο αυτόν η υλοποίησή της είναι απλή και υπολογιστικά ευφυής, με αρκετά καλή ακρίβεια αποτελεσμάτων. Η ανάλυση γίνεται ταυτόχρονα και με βέλτιστο τρόπο τόσο στο πεδίο του χώρου όσο και της συχνότητας [43, 49, 50].

Σύμφωνα με αυτήν την προσέγγιση η εκτίμηση του πρώτου όρου της εξίσωσης (20) μπορεί να προκύψει από τον τύπο:

$$\bar{S}_h(\omega) = E \left[\frac{1}{2\pi L} \left| \int_0^L f^{(i)}(x) \cdot e^{-i\omega x} dx \right|^2 \right] \quad 21$$

όπου $f^{(i)}(x)$ είναι ένα δείγμα του στοχαστικού πεδίου (συγκεκριμένα η κυματοειδής γεωμετρία του i ΝΣΑ) και $E[\cdot]$ δηλώνει την μαθηματική προσδοκία. Μια εκτίμηση της χωρικής συνάρτησης προκύπτει από την κατανομή του μέσου τετραγώνου όλων των δειγμάτων σύμφωνα με την σχέση:

$$\bar{g}_h(x) = \frac{E \left[|f(x)|^2 \right]}{2 \int_0^\infty \bar{S}_h(\omega) d\omega} \quad 22$$

Μπορεί εύκολα να δειχθεί ότι μια ακριβής εκτίμηση του ΕΦΕ μπορεί να προκύψει από τον τύπο [43]:

$$\bar{S}_h(\omega, x) = E \left[|f^{(i)}(x)|^2 \right] \frac{\bar{S}_h(\omega)}{2 \int_0^\infty \bar{S}_h(\omega) d\omega} \quad 23$$

Εκτιμώντας το ΕΦΕ από ένα πλήθος τυχαίων γεωμετριών των ΝΣΑ που έχουμε πάρει από φωτογραφίες ηλεκτρονικού μικροσκοπίου (Εικόνα 9), τυχαίες κυματοειδής γεωμετρίες αυτών μπορούν να παραχθούν χρησιμοποιώντας την εξίσωση (23) της μεθόδου φασματικής απεικόνισης ως εξής:

$$\hat{f}^{(j)}(x) = \sqrt{2} \sum_{n=0}^{N-1} A_n \cos(\omega_n x + \varphi_n^{(j)}) \quad 24$$

όπου

$$A_n = \sqrt{2\bar{S}_h(\omega_n, x)\Delta\omega}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1$$

$$\omega_n = n\Delta\omega, \quad n = 0, 1, \dots, N-1$$

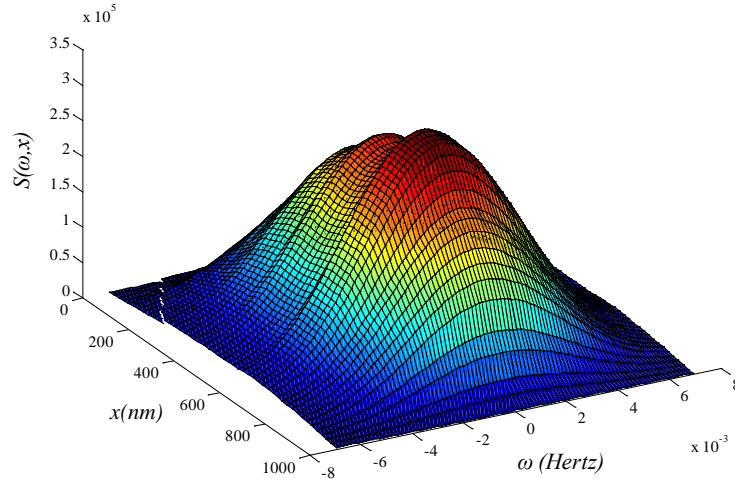
$$\Delta\omega = \frac{\omega_{up}}{N}$$

$$A_0 = 0, \quad \bar{S}_h(\omega_0, x) = 0$$

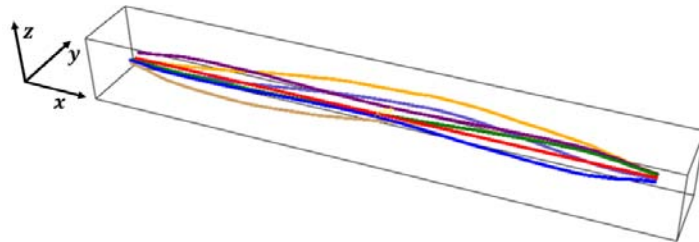
25

Η παράμετρος ω_{up} αναφέρεται στο άνω όριο της συχνότητας, πέρα από την οποία η συνάρτηση αυτοσυσχέτισης υποτίθεται ότι μηδενίζεται. Η παράμετρος $\varphi_n^{(j)}$ αντιπροσωπεύει τις τυχαίες γωνίες φάσης που παίρνουν τιμές εντός του διαστήματος $[0-2\pi]$ για κάθε j πραγματοποίηση.

Στην Εικόνα 10 παρουσιάζεται το ΕΦΕ που δίνεται από την εξίσωση (23), ενώ τυχαίες πραγματοποιήσεις ΝΣΑ με τυχαία κυματοειδή γεωμετρία που προκύπτουν από την εξίσωση (24) φαίνονται στην Εικόνα 11. Η τρισδιάστατη χωρική κυματοειδή γεωμετρία των ΝΣΑ προκύπτει με την θεώρηση ότι η συντεταγμένες $z=z(x)$ και $y=y(x)$ αυτών αποτελούν ανεξάρτητα στοχαστικά πεδία που παράγονται από την εξίσωση (24).



Εικόνα1: ΕΦΕ παραγόμενο από φωτογραφίες ηλεκτρονικού μικροσκοπίου



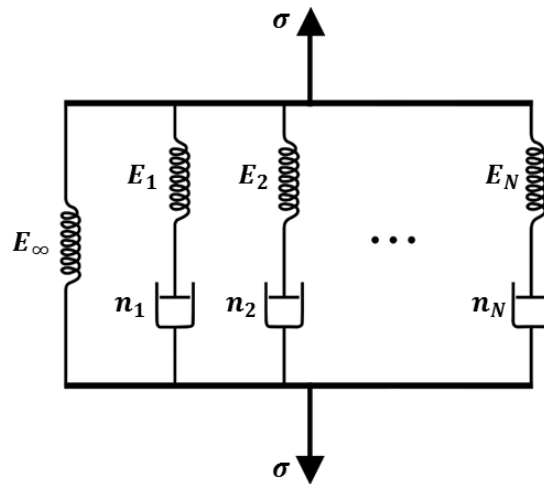
Εικόνα2: Δείγμα πραγματοποιήσεων ΝΣΑ με τυχαία κυματοειδή γεωμετρία

4. Μοντελοποίηση του PEEK ως βισκοελαστικό υλικό

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιείται για το πολυμερές της μήτρας του νανοςύνθετου υλικού, το ημικρυσταλλικό θερμοπλαστικό υλικό poly-ether-ether-ketone (PEEK), το οποίο συμπεριφέρεται ως γραμμικό βισκοελαστικό υλικό. Το συγκεκριμένο πολυμερές, λόγω των εξαιρετικών του μηχανικών ιδιοτήτων [51-53], όπως η υψηλή του αντοχή, ευκαμψία και ανθεκτικότητα σε συνδυασμό με την εξαιρετική του θερμική σταθερότητα και χημική του αντίσταση, είναι κατάλληλο για την κατασκευή σύνθετων υλικών υψηλών επιδόσεων.

4.1. Το βισκοελαστικό μοντέλο των Maxwell-Wiechert

Ένα πραγματικό πολυμερές υλικό όταν υποβάλλεται σε δοκιμασία χαλάρωσης, συνήθως δεν έχει ένα μοναδικό χρόνο χαλάρωσης, αλλά μια κατανομή αυτών εντός του συνολικού χρονικού διαστήματος που διαρκεί το συγκεκριμένο πείραμα. Το μοντέλο των Maxwell-Wiechert λαμβάνει υπόψιν του, τους διαφορετικούς χρόνους χαλάρωσης του υλικού και για αυτόν τον λόγο χρησιμοποιείται για την προσομοίωση περίπλοκων βισκοελαστικών φαινομένων. Το συγκεκριμένο μοντέλο αποτελείται από ένα πεπερασμένο αριθμό μοντέλων Maxwell και ένα ελαστικό μοντέλο Hooke, σε παράλληλη σύνδεση, όπως φαίνεται στην Εικόνα 12.



Εικόνα 12: Το μοντέλο των Maxwell-Wiechert

Η σχέση τάσεων-παραμορφώσεων του παραπάνω μοντέλου δίνεται από την εξίσωση:

$$\hat{\sigma}(t) = E_{\infty} \hat{\varepsilon}(0) + \sum_{j=1}^N E_j \exp\left(-\frac{t}{\tau_j}\right) \hat{\varepsilon}(0) \quad 26$$

όπου $\tau_j = n_j/E_j$ είναι οι χρόνοι χαλάρωσης που εξαρτώνται από την παράμετρο απόσβεσης n_j και την ελαστική σταθερά των ελατηρίων E_j . Η χαρακτηριστική συνάρτηση χαλάρωσης που προβλέπεται από το μοντέλο δίνεται από την εξίσωση:

$$\hat{\Gamma}(t) = E_{\infty} + \sum_{j=1}^N E_j \exp\left(-\frac{t}{\tau_j}\right) \quad 27$$

Το στιγμιαίο $\hat{\Gamma}_0$ και το μακροπρόθεσμο $\hat{\Gamma}_{\infty}$ μέτρο χαλάρωσης του βισκοελαστικού πολυμερούς ορίζονται ως εξής:

$$\hat{\Gamma}_0 = \lim_{t \rightarrow 0} \hat{\Gamma}(t) = E_{\infty} + \sum_{j=1}^N E_j \quad 28$$

και

$$\hat{\Gamma}_{\infty} = \lim_{t \rightarrow \infty} \hat{\Gamma}(t) = E_{\infty} \quad 29$$

Παρατηρούμε για το παραπάνω μοντέλο, όταν αυτό υπόκειται σε πείραμα χαλάρωσης, ότι η τελική του τάση μετά από αρκετό χρόνο $t \rightarrow \infty$ δεν μηδενίζεται εντελώς αλλά προσεγγίζει ένα ελάχιστο όριο $\hat{\sigma}(\infty) = E_{\infty} \epsilon_0$. Οι παραπάνω εξισώσεις περιγράφουν την συμπεριφορά του μοντέλου των Maxwell-Wiechert σε χαλάρωση. Το μοντέλο είναι επίσης κατάλληλο για την προσομοίωση της συμπεριφοράς του υλικού σε κόπωση. Η κόπωση και η χαλάρωση είναι δύο χαρακτηριστικές συμπεριφορές των βισκοελαστικών υλικών. Η μαθηματική περιγραφή του ενός φαινομένου μπορεί να γίνει από το άλλο μέσω της παρακάτω ολοκληρωματικής εξίσωσης [54]

$$t = \int_0^t \hat{\Gamma}(\tau) \hat{Y}(t-\tau) d\tau \quad 30$$

όπου \hat{Y} είναι το μέτρο κόπωσης του βισκοελαστικού υλικού που εξαρτάται από τους χαρακτηριστικούς χρόνους τ . Η χρονικά εξαρτώμενη συνάρτηση χαλάρωσης (27) μπορεί να μετασχηματιστεί από το πεδίο του χρόνου στο πεδίο της συχνότητας μέσω του μετασχηματισμού Fourier, καταλήγοντας έτσι στην περιγραφή του μιγαδικού μέτρου χαλάρωσης του υλικού στη μορφή:

$$\begin{aligned} \Gamma^* &= \Gamma' + i \cdot \Gamma'' \\ &= E_{\infty} + \sum_{j=1}^N E_j \frac{i\omega\tau_j}{1+i\omega\tau_j} \\ &= E_{\infty} + \sum_{j=1}^N E_j \frac{\omega^2\tau_j^2}{1+\omega^2\tau_j^2} + i \cdot \sum_{j=1}^N E_j \frac{\omega\tau_j}{1+\omega^2\tau_j^2} \end{aligned} \quad 31$$

όπου Γ' και Γ'' είναι το μέτρο αποθήκευσης και το μέτρο απώλειας ενέργειας αντίστοιχα. Ο μηχανικός παράγοντας απωλειών, ο οποίος αποτελεί ένα μέτρο της ικανότητας απόσβεσης ενέργειας του υλικού, ορίζεται ως το κλάσμα του μέτρου απώλειας προς το μέτρο αποθήκευσης του υλικού και εξαρτάται από την συχνότητα διέγερσής του.

$$\tan \delta = \frac{\Gamma''}{\Gamma'}$$

32

Η γωνία απωλειών δείναι η διαφορά φάσης μεταξύ της τάσης και της παραμόρφωσης εκφρασμένες στο πεδίο του χρόνου, και προκύπτουν από ένα πείραμα αρμονικής ταλαντωτικής διέγερσης του βισκοελαστικού υλικού. Μετά από αρκετό χρόνο, θεωρητικά άπειρο, αρμονικής ταλάντωσης του βισκοελαστικού δοκιμίου, όταν το υλικό έχει περιέλθει τελικά σε σταθερή κατάσταση, παρατηρούνται στο διάγραμμα τάσεων-παραμορφώσεων του χαρακτηριστικοί βρόγχοι υστέρησης που οφείλονται στην γωνία φάσης ή αλλιώς απώλειών δ . Το ποσό της καταναλισκώμενης ενέργειας ανά κύκλο ταλάντωσης παριστάνεται από την επιφάνεια που καταλαμβάνει ο βρόγχος υστέρησης και αποτελεί ένα μέτρο της αποσβενόμενης ενέργειας του υλικού.

4.2. Χαρακτηρισμός βισκοελαστικού υλικού

Ο χαρακτηρισμός ενός βισκοελαστικού υλικού απαιτεί τον προσδιορισμό των μηχανικών του ιδιοτήτων εντός ενός ευρύ πεδίου του χρόνου και της συχνότητας. Τα πειράματα κόπωσης και χαλάρωσης παρέχουν πληροφορίες για την μακροπρόθεσμη συμπεριφορά του υλικού ή αλλιώς για την συμπεριφορά του υλικού σε πολύ μικρές συχνότητες διέγερσης. Ένα χρήσιμο εργαλείο για τον χαρακτηρισμό βισκοελαστικών υλικών είναι το πείραμα της δυναμικής μηχανικής ανάλυσης (DMA) σε συνδυασμό με την αρχή της αντιστοιχίας χρόνου-θερμοκρασίας. Μέσω αυτών των πειραματικών εργαλείων τα βισκοελαστικά δεδομένα ενός υλικού καθορίζονται εντός ενός περιορισμένου χρονικού πεδίου ή πεδίου συχνότητας, υπό ένα όμως ευρύ θερμοκρασιακό πεδίο. Οι κύριες καμπύλες του υλικού που προκύπτουν από την παραπάνω πειραματική διαδικασία χρησιμοποιούνται για τον προσδιορισμό των παραμέτρων των βισκοελαστικών μοντέλων. Το μέτρο αποθήκευσης και απωλειών ενέργειας εκφρασμένα ως προς την συχνότητα για το Maxwell-Wiechert μοντέλο που περιγράφηκε προηγουμένως, εκφράζονται μέσω της σειράς του Prony στην μορφή:

$$\Gamma' = E_{\infty} + \sum_{j=1}^N E_j \frac{\omega^2 \tau_j^2}{1 + \omega^2 \tau_j^2} \quad 33$$

και

$$\Gamma'' = \sum_{j=1}^N E_j \frac{\omega \tau_j}{1 + \omega^2 \tau_j^2} \quad 34$$

Οι παραπάνω εκφράσεις χρησιμοποιούνται εντός μιας μη γραμμικής διαδικασίας ελαχίστων τετραγώνων για την προσέγγιση των πειραματικών καμπυλών. Σκοπός της διαδικασίας αυτής είναι ο προσδιορισμός των χρόνων χαλάρωσης τ_j και των ελαστικών σταθερών E_j που είναι οι παράμετροι του βισκοελαστικού μοντέλου. Η συνάρτηση

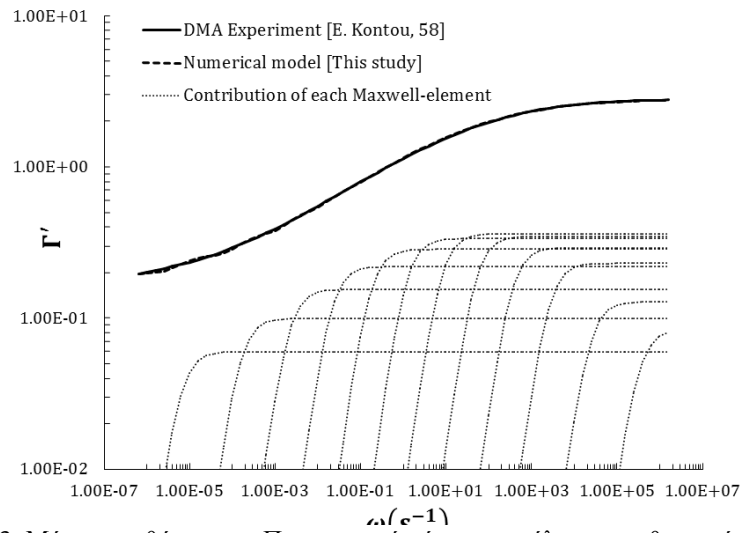
25

σφάλματος που πρέπει να ελαχιστοποιηθεί ώστε η προσέγγιση να θεωρείται επαρκής είναι:

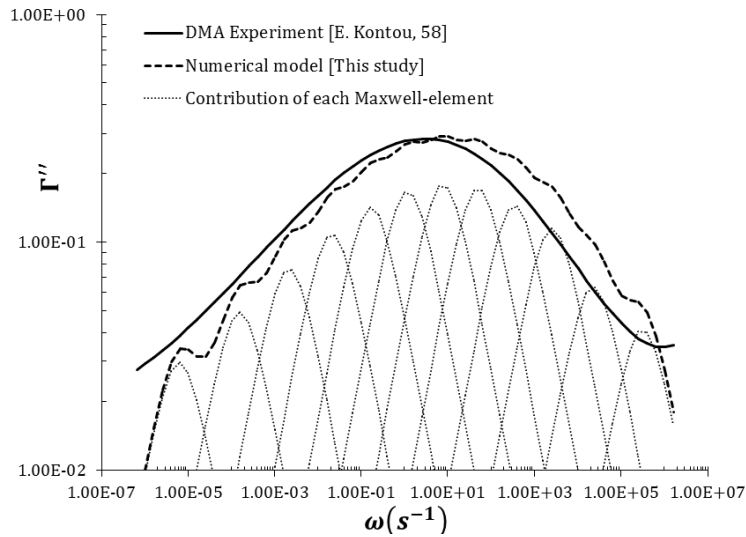
$$R^2 = \sum_{i=1}^M \frac{1}{\hat{\Gamma}_\infty^2} \left[\left(\hat{\Gamma}' - \bar{\Gamma}' \right)_i^2 + \left(\hat{\Gamma}'' - \bar{\Gamma}'' \right)_i^2 \right] \quad 35$$

όπου $\bar{\Gamma}'$ και $\bar{\Gamma}''$ είναι οι πειραματικές τιμές των μέτρων αποθήκευσης και απωλειών αντίστοιχα, μετρημένες σε M διαφορετικές τιμές συχνότητας. Αρκετές δημοσιευμένες μελέτες στην διεθνή βιβλιογραφία προτείνουν διαφορετικούς αλγορίθμους βαθμονόμησης των αριθμητικών μοντέλων, με βάση πειραματικά δεδομένα [55-57].

Στις Εικόνες 13 και 14 παριστάνονται οι κύριες καμπύλες του PEEK, οι οποίες προέκυψαν από πείραμα δυναμικής μηχανικής ανάλυσης που διεξήχθη στο εργαστήριο αντοχής υλικών της ΣΕΜΦΕ από την ερευνητική ομάδα της καθηγήτριας κυρίας Ε. Κοντού. Σε αυτές το εφελκυστικό μέτρο αποθήκευσης και απωλειών του υλικού παριστάνονται σε λογαριθμικό διάγραμμα σε σχέση με την συχνότητα διέγερσης. Το στιγμιαίο μέτρο ελαστικότητας του Young για το PEEK μπορεί να προσδιοριστεί από το διάγραμμα του εφελκυστικού μέτρου αποθήκευσης. Η τιμή του δίνεται από την τιμή του διαγράμματος που αντιστοιχεί στην μέγιστη συχνότητα. Επομένως προκύπτει ότι $E_0 = 3$ ΜΡαπερίπου [58]. Για λόγους σύγκρισης, οι αριθμητικές καμπύλες που προκύπτουν από το μοντέλο των Maxwell-Wiechert παριστάνονται σε σχέση με τις πειραματικές. Οι παράμετροι του αριθμητικού μοντέλου που προέκυψαν μετά την ελαχιστοποίηση της συνάρτησης σφάλματος, (εξίσωση 35), αναγράφονται στον Πίνακα 2. Ο μη γραμμικός αλγόριθμος που εφαρμόστηκε κατέληξε στην ανάγκη παράλληλης σύνδεσης δώδεκα στοιχείων του Maxwell για την επίτευξη ικανοποιητικής ακρίβειας προσέγγισης. Η συνεισφορά κάθε ενός από τα Maxwell στοιχεία στην συνολική απόκριση του υλικού παριστάνεται στα παρακάτω διαγράμματα (Εικόνα 13 και 14). Οι διαφορές που παρατηρούνται μεταξύ της αριθμητικής καμπύλης και της πειραματικής, ειδικά όσο αναφορά το μέτρο απωλειών $\bar{\Gamma}''$, οφείλονται στο γεγονός ότι ο αλγόριθμος προσαρμογής λαμβάνει υπόψιν του την ελαχιστοποίηση της συνάρτησης σφάλματος μόνο για τα δεδομένα του μέτρου αποθήκευσης $\bar{\Gamma}'$. Ένας πιο ευφυής αλλά και πιο περίπλοκος αλγόριθμος θα μπορούσε κατά την διαδικασία προσαρμογής να λαμβάνει υπόψιν του, την ελαχιστοποίηση των συναρτήσεων σφάλματος που αφορούν και τα δύο μηχανικά μέτρα ενεργειών του υλικού.



Εικόνα3: Μέτρο αποθήκευσης: Πειραματική κύρια καμπύλη vs. αριθμητικό μοντέλο



Εικόνα4: Μέτρο απωλειών: Πειραματική κύρια καμπύλη vs. αριθμητικό μοντέλο

j	E_j [MPa]	τ_j	j	E_j [MPa]	τ_j	j	E_j [MPa]	τ_j
1	8.31E-02	1.42E-06	5	3.47E-01	8.85E-03	9	2.19E-01	2.12E+01
2	1.28E-01	1.96E-05	6	3.60E-01	5.78E-02	10	1.54E-01	2.09E+02
3	2.29E-01	1.74E-04	7	3.35E-01	3.77E-01	11	9.91E-02	2.88E+03
4	2.92E-01	1.30E-03	8	2.84E-01	2.65E+00	12	5.97E-02	7.16E+04

Πίνακας 2: Παράμετροι του μοντέλου των Maxwell-Wiechert για το PEEK

5. Μοντελοποίηση του ΑΣΟ νανοσύνθετου υλικού

5.1. Η τεχνική του ενσωματωμένου στοιχείου

Η τεχνική του ενσωματωμένου στοιχείου χρησιμοποιείται για την αποφυγή δημιουργίας περίπλοκου πλέγματος κατά την διακριτοποίηση του αντιπροσωπευτικού στοιχείου όγκου (ΑΣΟ) του νανοσύνθετου υλικού. Με τον τρόπο αυτό αποφεύγεται η ανάγκη διακριτοποίησης της μήτρας και των ΝΣΑ με στοιχεία που έχουν κοινούς κόμβους. Το ΑΣΟ αποτελείται από δύο ανεξάρτητα πλέγματα: ένα για την μήτρα της οποίας η διακριτοποίησή γίνεται με οκτακομβικά στοιχεία συνεχούς μέσου και ένα για τους νανοσωλήνες των οποίων η διακριτοποίηση γίνεται με χρήση στοιχείων τριδιάστατων δοκών σε εν σειρά σύνδεση. Η μεταφορά των φορτίων από την μήτρα στα ενισχυτικά γίνεται μέσω κινηματικών περιορισμών που επιβάλλονται στους κόμβους των ενσωματωμένων στοιχείων. Ως ενσωματωμένα θεωρούνται τα στοιχεία των ισοδύναμων δοκών των ΝΣΑ. Το μητρώο ακαμψίας της ισοδύναμης δοκού στο γενικό σύστημα αξόνων δίνεται από την εξίσωση:

$$K^B = T^T k^b T = T^T \left[\int_{V_e} B^T D B dV_e \right] T \quad 36$$

όπου T είναι το μητρώο μετασχηματισμού από το τοπικό στο γενικό σύστημα αξόνων, k^b είναι το τοπικό μητρώο ακαμψίας της δοκού, D είναι το καταστατικό μητρώο του υλικού και B το μητρώο των παραγώγων των συναρτήσεων σχήματος της δοκού που συνδέει τις παραμορφώσεις με τις μετακινήσεις και τις στροφές των κόμβων της. Όταν η δοκός θεωρείται ενσωματωμένη μέσα στο οκτακομβικό στοιχείο συνεχούς μέσου της μήτρας (γονικό στοιχείο, Εικόνα 15), οι μεταφορικοί της βαθμοί ελευθερίας μπορούν να συσχετιστούν με τις κομβικές μετατοπίσεις του γονικού στοιχείου της μήτρας σύμφωνα με τον κινηματικό περιορισμό:

$$\begin{bmatrix} u_i \\ u_j \\ v_i \\ v_j \\ w_i \\ w_j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} N^M & \mathbf{O} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & N^M & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \mathbf{O} & N^M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U^M \\ V^M \\ W^M \end{bmatrix} \quad 37$$

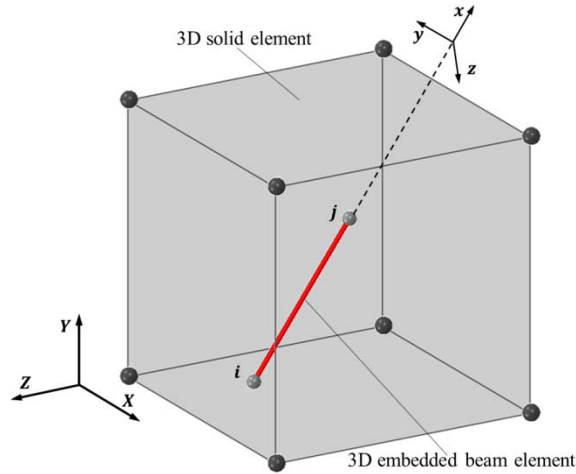
όπου

$$N^M = \begin{bmatrix} N_{1(i)} \dots N_{8(i)} \\ N_{1(j)} \dots N_{8(j)} \end{bmatrix} \quad 38$$

είναι οι τιμές των συναρτήσεων σχήματος του στοιχείου συνεχούς μέσου της μήτρας, διατιμημένες στα σημεία και εντός του γονικού στοιχείου. Τα σημεία αυτά ταυτίζονται με την θέση των κόμβων της ενσωματωμένης δοκού (Εικόνα 15).

$$U^M = [U_1 \dots U_8]^T, V^M = [V_1 \dots V_8]^T, W^M = [W_1 \dots W_8]^T \quad 39$$

είναι οι κομβικές μετατοπίσεις του στοιχείου της μήτρας.



Εικόνα5: Γραφική αναπαράσταση του ενσωματωμένου στοιχείου της δοκού μέσα στο γονικό στοιχείο συνεχούς μέσου

Τροποποιώντας το μητρώο παραμόρφωσης B της εξίσωσης (36) για να ληφθούν υπόψιν οι κινηματικοί περιορισμοί της εξίσωσης (37), καταλήγουμε στο εκτεταμένο μητρώο ακαμψίας της ενσωματωμένης δοκού \bar{K}^B που έχει διαστάσεις (30×30) . Το μητρώο αυτό συνδέει τους 24 μεταφορικούς βαθμούς ελευθερίας $[U^M, V^M, W^M]$ του γονικού στοιχείου της μήτρας και τους 6 περιστροφικούς βαθμούς ελευθερίας $[\theta_{xi}, \theta_{yi}, \theta_{zi}, \theta_{xj}, \theta_{yj}, \theta_{zj}]$ της ενσωματωμένης δοκού, με τις εξωτερικές κομβικές δυνάμεις και ροπές αντίστοιχα που ασκούνται στο σύνθετο στοιχείο. Το τελικό συναθροισμένο μητρώο ακαμψίας που προκύπτει από το γονικό στοιχείο συνεχούς μέσου της μήτρας και της ενσωματωμένης δοκού περιγράφεται ως εξής:

$$K_{(30 \times 30)} = \begin{bmatrix} K^M + \bar{K}_{TT}^B & \bar{K}_{TR}^B \\ \bar{K}_{RT}^B & \bar{K}_{RR}^B \end{bmatrix} \quad 40$$

όπου K^M είναι το μητρώο ακαμψίας του συνεχούς στοιχείου, το \bar{K}_{TT}^B αντιπροσωπεύει το μέρος του εκτεταμένου μητρώου της δοκού που σχετίζεται με τους μεταφορικούς βαθμούς ελευθερίας, το \bar{K}_{RR}^B αντίστοιχα σχετίζεται με τους περιστροφικούς βαθμούς ελευθερίας της δοκού ενώ τα \bar{K}_{TR}^B και \bar{K}_{RT}^B περιέχουν τους όρους εκείνους που συνδέουν μεταφορικούς και περιστροφικούς βαθμούς ελευθερίας.

6. Μοντέλο ολίσθησης μεταξύ ΝΣΑ και πολυμερούς

Οι μηχανικές ιδιότητες και η απόσβεση του νανοσύνθετου υλικού εξαρτώνται από την διεπιφανειακή του αντοχή. Οι μέγιστες διεπιφανειακές τάσεις που παίζουν ρόλο στην αντοχή του υλικού, αναπτύσσονται λόγω της σύνδεσης των ΝΣΑ με την περιβάλλουσα μήτρα από πολυμερές υλικό. Τα φορτία μεταφέρονται από το πολυμερές στους ΝΣΑ δια μέσου της διεπιφάνειά τους. Πειραματικές ενδείξεις [10-12] καταδεικνύουν ότι με την εφαρμογή λειτουργικών τεχνικών στην επιφάνεια του ΝΣΑ, η διεπιφανειακή διατμητική αντοχή του νανοσύνθετου υλικού αυξάνεται, ενώ λόγω του μεγάλου λόγου διαμέτρου προς μήκος του ΝΣΑ, βελτιώνεται η δυνατότητα μεταφοράς των φορτίων δια μέσου της διεπιφάνειας.

Από πειράματα απόσπασης των ΝΣΑ από την μήτρα, γνωστά ως “pullout tests” [59-62], προκύπτει η μη γραμμική συμπεριφορά της διεπιφάνειας λόγω της ολίσθησης των νανοσωλήνων. Για την προσομοίωση του παραπάνω φαινομένου ένα μη γραμμικό μοντέλο ολίσθησης τύπου τριβής, ενσωματώνεται στην ανάλυση πολλαπλών κλιμάκων που περιγράφηκε στην ενότητα 2. Στην Εικόνα 16 απεικονίζεται ένα ΑΣΟ του νανοσύνθετου υλικού που αποτελείται από ένα ευθύγραμμο ΝΣΑ διακριτοποιημένο με τρία στοιχεία δοκού σωληνοειδούς διατομής που ενσωματώνονται εντός των στοιχείων συνεχούς μέσου της μήτρας. Η εξίσωση ισοροπίας που αφορά την κεντρική ισοδύναμη δοκό γράφεται ως εξής:

$$|\sigma_{Ri} - \sigma_{Li}| A_i = \tau_i \pi (D_i + t_i) l_i \quad 41$$

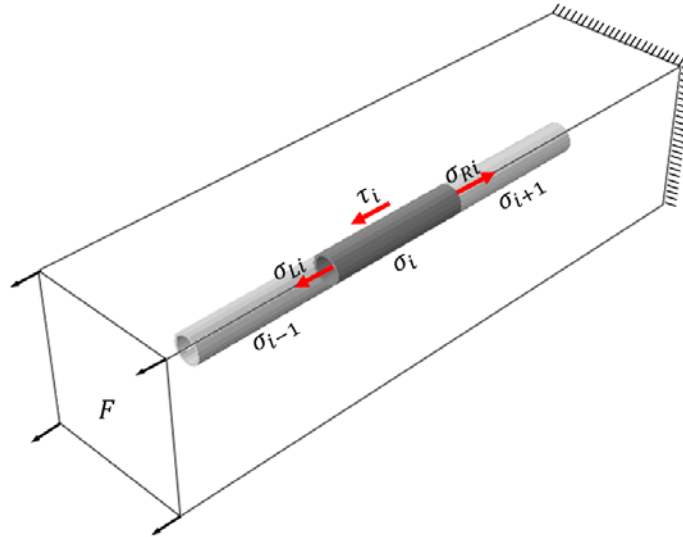
όπου A_i είναι η επιφάνεια της διατομής της δοκού η οποία έχει εξωτερική διάμετρο $D_i + t_i$ και μήκος l_i . Οι κομβικές αξονικές τάσεις σ_{Ri} και σ_{Li} που δρουν στο δεξί και αριστερό άκρο της δοκού υπολογίζονται μετά από μια διαδικασία εξομάλυνσης ως εξής:

$$\sigma_{Ri} = \frac{\sigma_i l_i + \sigma_{i+1} l_{i+1}}{l_i + l_{i+1}} \quad 42$$

$$\sigma_{Li} = \frac{\sigma_i l_i + \sigma_{i-1} l_{i-1}}{l_i + l_{i-1}} \quad 43$$

Λύνοντας την εξίσωση (41) υπολογίζεται η διατμητική τάση τ_i που ασκείται στην διεπιφάνεια μεταξύ ΝΣΑ και μήτρας. Συγκρίνοντας την τιμή της διεπιφανειακής διατμητικής αντοχής ($\Delta\Delta A$) με την παραπάνω διατμητική τάση, το μοντέλο ολίσθησης προκύπτει ως εξής:

$$\tau_i = \frac{A_i}{\pi (D_i + t_i) l_i} |\sigma_{Ri} - \sigma_{Li}| \begin{cases} < \Delta\Delta A & \text{στερεά σύνδεση} \\ \geq \Delta\Delta A & \text{ολίσθηση} \end{cases} \quad 44$$



Εικόνα6: Τάσεις στις δοκούς ενίσχυσης του ΑΣΟ του νανοσύνθετου υλικού σε εφελκυσμό

Εάν μια ισοδύναμη δοκό που καταλαμβάνει ένα μέρος του συνολικού μήκους του ΝΣΑ βρίσκεται σε κατάσταση ολίσθησης, αυτό σημαίνει ότι οι διεπιφανειακοί της δεσμοί με την μήτρα έχουν πλήρως εξασθενήσει καθιστώντας την έτσι ανίκανη να φέρει περαιτέρω φορτία. Η κατάσταση ολίσθησης της δοκού προσομοιώνεται αριθμητικά με την απομοίωση της αξονικής της στιβαρότητας έως μιας ελάχιστης τιμής, σχεδόν μηδενικής. Αντίθετα η καμπτική και η στρεπτική ακαμψία της δοκού που είναι σε κατάσταση ολίσθησης δεν επηρεάζονται. Συνεπώς η δοκός είναι σε θέση να ανθίσταται σε καμπτικά και στρεπτικά φορτία αντίστοιχα.

Η παραπάνω υπολογιστική διαδικασία υλοποιείται μέσω ενός επαναληπτικού αλγορίθμου τύπου Newton-Raphson. Ο αλγόριθμος αυτός χρησιμοποιείται για την επίλυση των μη γραμμικών εξισώσεων που προκύπτουν, ακολουθώντας τα παρακάτω υπολογιστικά βήματα:

Βήμα 1: Υπολογισμός των προσαυξητικών μετατοπίσεων ${}^t \Delta u^{(i)}$ στο χρονικό βήμα t και στην i επανάληψη, εξαιτίας της προσαύξησης του φορτίου ${}^t \Delta P$ του εξωτερικού διανύσματος φόρτισης

$${}^t \Delta u^{(i)} = \left[{}^t K_T^{(i)} \right]^{-1} {}^t \Delta P \quad 45$$

όπου ${}^t K_T^{(i)}$ είναι το γενικό επαπτομενικό μητρώο ακαμψίας του μοντέλου του ΑΣΟ.

Βήμα 2: Έλεγχος όλων των στοιχείων δοκού για τον προσδιορισμό της κατάστασης ολίσθησής τους

$$\text{Slippage} \begin{cases} no \rightarrow {}^t K_{Te}^{(i)} = {}^t K_{Te}^{(i-1)} \\ yes \rightarrow {}^t K_{Te}^{(i)} = {}^t K_{Te}^{(i-1)} \end{cases} \text{ with } (EA)_e \rightarrow 0 \quad 46$$

όταν ένα στοιχείο είναι σε κατάσταση ολίσθησης η αξονική του στιβαρότητα μηδενίζεται καταλήγοντας στο τροποποιημένο μητρώο ακαμψίας του μοντέλου ${}^t K_{Te}^{(i)}$.

Βήμα 3: Διόρθωση των εσωτερικών δυνάμεων ${}^t \Delta F_e^{(i)}$ του στοιχείου e και ενημέρωση του γενικού διανύσματος των δυνάμεων

$${}^t \Delta F_e^{(i)} = {}^t K_{Te}^{(i)} {}^t \Delta u_e^{(i)} \quad 47(a)$$

$${}^t F^{(i)} = {}^t F^{(i-1)} + \sum_{e=1}^N {}^t \Delta F_e^{(i)} \quad 47(b)$$

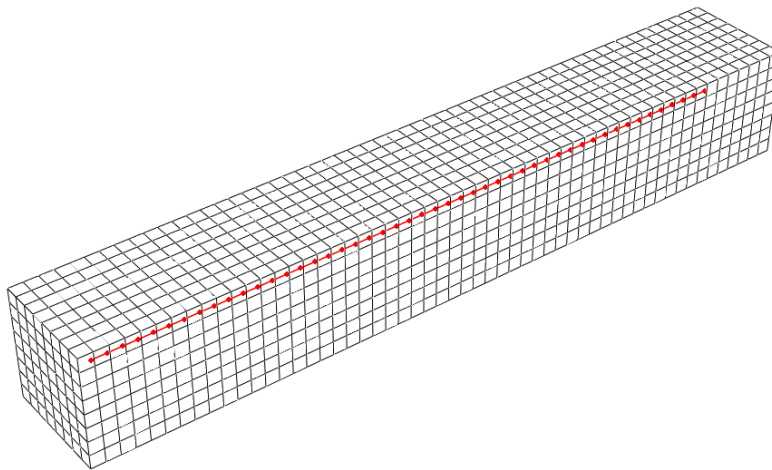
Βήμα 4: Υπολογισμός των αριθμητικών υπολοίπων ${}^t r^{(i)}$

$${}^t r^{(i)} = {}^t P - {}^t F^{(i)} \begin{cases} \leq tol & \text{then } t = t + 1 \text{ go to next increment} \\ > tol & \text{then } i = i + 1 \text{ go to STEP 1} \end{cases} \quad 48$$

7. Αριθμητικά αποτελέσματα

7.1. Ευθύγραμμοι ΝΣΑ

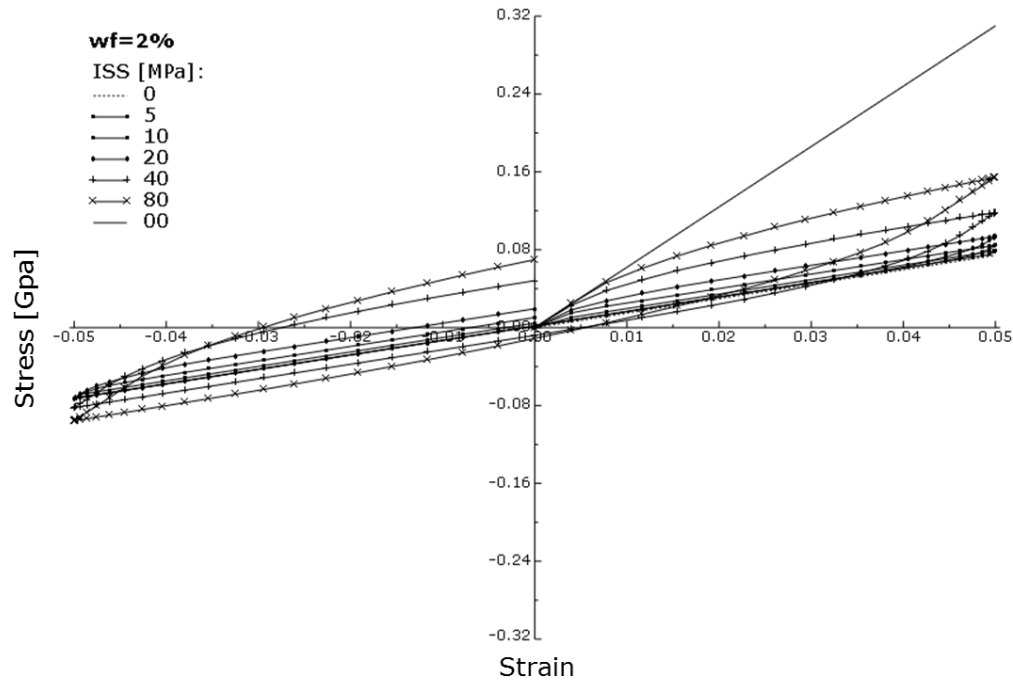
Στις παρακάτω αναλύσεις χρησιμοποιήθηκε ένας μονότοιχος ΝΣΑ τύπου armchair (100, 100) με πραγματική διάμετρο 14 nm. Με βάση την διαδικασία πολλαπλών κλιμάκων που περιγράφηκε στις προηγούμενες ενότητες, ο ΝΣΑ μοντελοποιείται με ένα πλαίσιο χωρικών δοκών οι ιδιότητες των οποίων προκύπτουν από τις αρχές της δομικής μοριακής μηχανικής. Στην συνέχεια με βάση προσομοιώσεις, ο ΝΣΑ αντικαθίσταται από γραμμικές ισοδύναμες δοκούς σωληνοειδούς διατομής με πάχος τοιχώματος $t=0.34$ nm και μέση ισοδύναμη διάμετρο $d_{eq}=13.45$ nm (εξίσ.19). Το ισοδύναμο μέτρο ελαστικότητας του Young και το διατμητικό μέτρο ελαστικότητας της ισοδύναμης δοκού υπολογίζονται από τις εξισώσεις (14) και (16) και είναι περίπου $E=1.06$ TPa και $G=0.51$ TPa αντίστοιχα. Αντιπροσωπευτικά στοιχεία όγκου του νανοσύνθετου με περιεκτικότητα κατά βάρος σε ΝΣΑ από 0.1% έως 2% αναλύονται σε μονοτονική αλλά και ανακυκλιζόμενη φόρτιση σε συχνότητα διέγερσης 1 Hz και μέγιστη παραμόρφωση 5%. Το μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων του ΑΣΟ παριστάνεται στην Εικόνα 17. Η επίδραση της διεπιφανειακής διατμητικής αντοχής ($\Delta\Delta A$) στην ακαμψία και την απόσβεση του νανοσύνθετου υλικού εκτιμάται από παραμετρικές αναλύσεις του ΑΣΟ για διαφορετικές τιμές της $\Delta\Delta A$ από 5 έως 80 MPa. Σημειώνεται ότι η εφελκυστική επιμήκυνση του PEEK στο σημείο διαρροής του είναι 5% ενώ η διατμητική του αντοχή είναι 53 MPa [53].



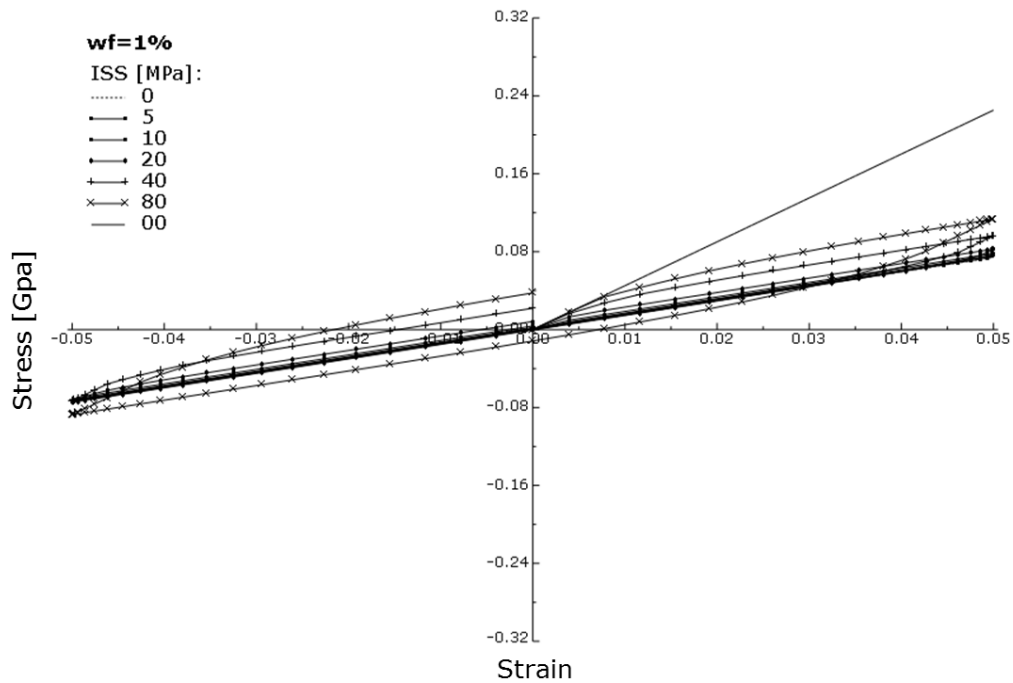
Εικόνα7: Πλέγμα πεπερασμένων στοιχείων του ΑΣΟ νανοσύνθετου με ένα ευθύγραμμο ΝΣΑ

Οι Εικόνες 18-21 παρουσιάζουν τα διαγράμματα τάσης-παραμόρφωσης για τέσσερις διαφορετικές τιμές της διεπιφανειακής διατμητικής αντοχής του υλικού ($\Delta\Delta A=5, 10, 20, 40$ και 80 MPa), για την περίπτωση στερεάς σύνδεσης μεταξύ των δεσμών του ΝΣΑ και του πολυμερούς ($\Delta\Delta A=\infty$) καθώς και την περίπτωση καθαρού πολυμερούς χωρίς ΝΣΑ ($\Delta\Delta A=0$). Οι κ.β % περιεκτικότητες του ΑΣΟ σε ΝΣΑ που εξετάζονται είναι 2, 1, 0.5 και

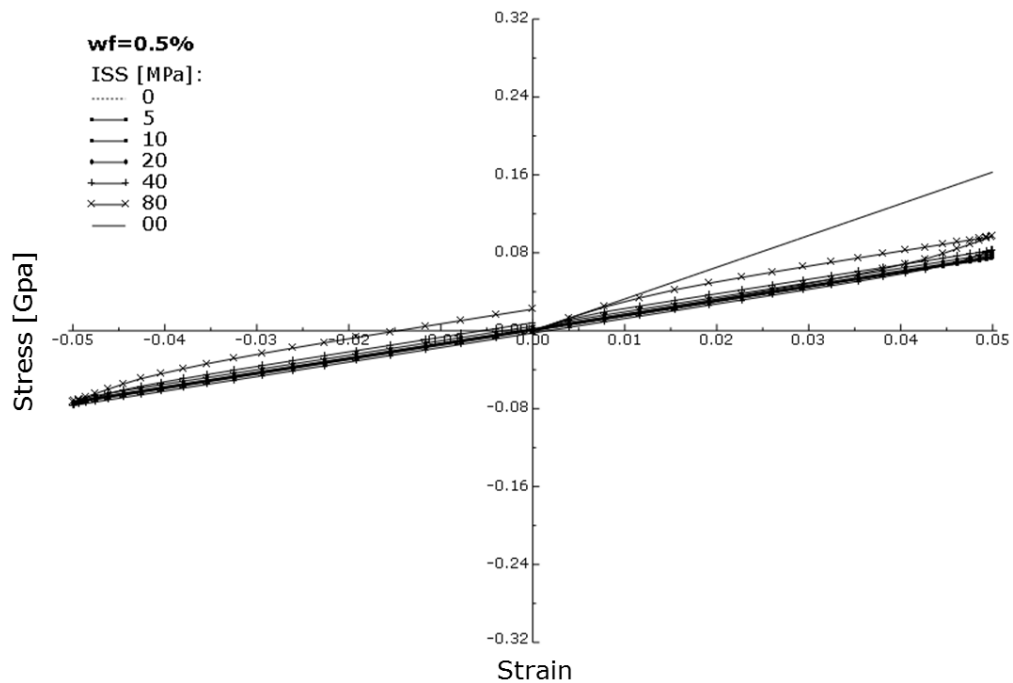
0.1% αντίστοιχα. Το πολυμερές σε όλες τις παραπάνω περιπτώσεις θεωρείται ότι συμπεριφέρεται ως γραμμικό ελαστικό υλικό. Η καταναλισκόμενη ενέργεια (απόσβεση) του ΑΣΟ σε ανακυκλιζόμενη φόρτιση που μετράται από τους βρόγχους υστέρησης στα παρακάτω διαγράμματα, αποδίδεται εξ'ολοκλήρου στην ολίσθηση των ΝΣΑ εντός της μήτρας του ΑΣΟ. Το συμπέρασμα που εξάγεται από τα διαγράμματα είναι ότι η ακαμψία και η ικανότητα απόσβεσης ενέργειας του υλικού αυξάνονται με την αύξηση της $\Delta\Delta A$ του ως ένα σημείο. Η συνολική ακαμψία με αύξηση της %κ.β περιεκτικότητας σε ΝΣΑ προσεγγίζει την ακαμψία του ΑΣΟ εκείνου όπου μεταξύ των δεσμών ΝΣΑ και πολυμερούς θεωρείται στερεά σύνδεση, ενώ η τιμή της είναι τετραπλάσια της ακαμψίας του καθαρού πολυμερούς χωρίς ΝΣΑ. Η 0.1%κ.β περιεκτικότητα του ΑΣΟ σε ΝΣΑ θεωρείται αρκετά χαμηλή και όπως φαίνεται από το αντίστοιχο διάγραμμα ελάχιστα επηρεάζει την συμπεριφορά του καθαρού πολυμερούς.



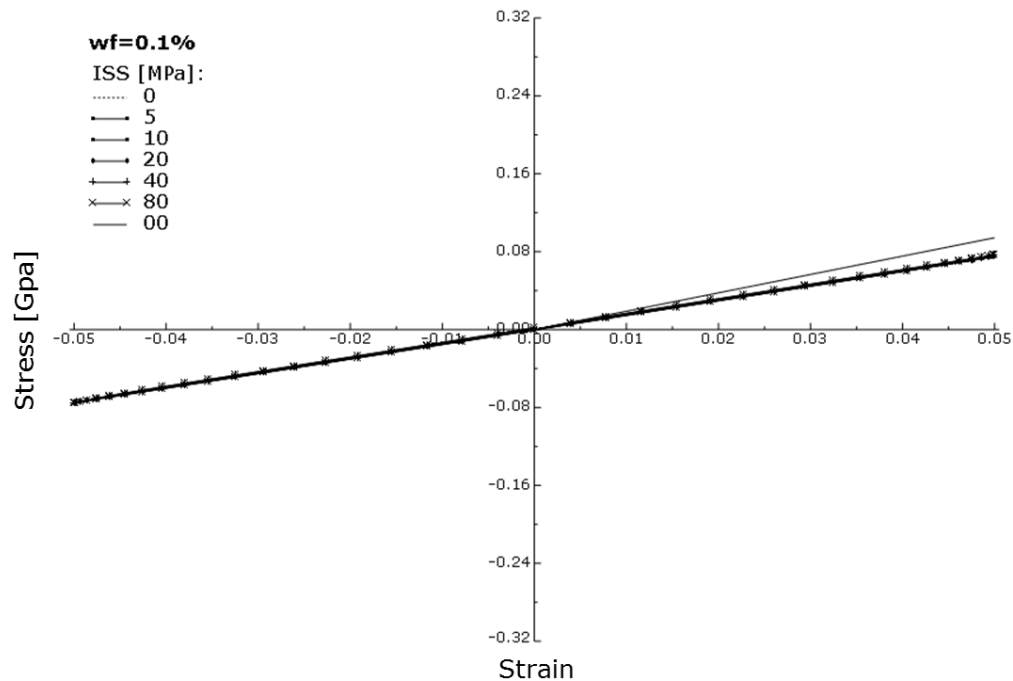
Εικόνα8: Καμπύλες τάσεων-παραμορφώσεων του ΑΣΟ του νανοσύνθετου υλικού θεωρώντας γραμμικό ελαστικό υλικό για το πολυμερές και 2%κ.β περιεκτικότητα σε ΝΣΑ σε τιμές $\Delta\Delta A=0, 5, 10, 20, 40, 80$ and ∞ MPa



Εικόνα9: Καμπύλες τάσεων-παραμορφώσεων του ΑΣΟ του νανοςύνθετου υλικού θεωρώντας γραμμικό ελαστικό υλικό για το πολυμερές και 1%κ.β περιεκτικότητα σε ΝΣΑ σε τιμές $\Delta\Delta A=0, 5, 10, 20, 40, 80$ and ∞ MPa

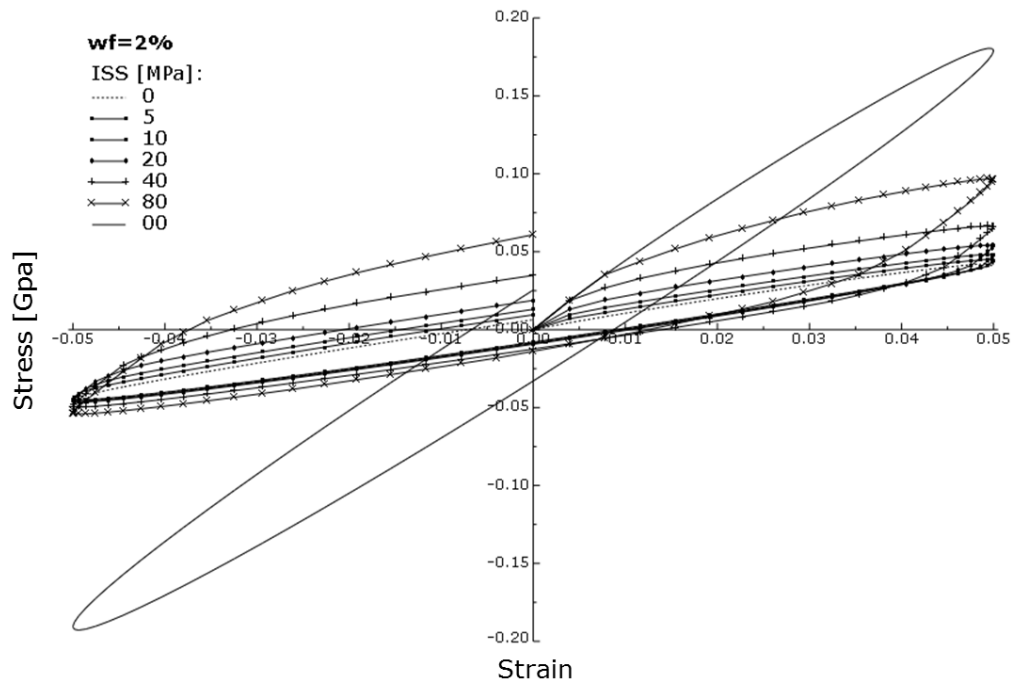


Εικόνα10: Καμπύλες τάσεων-παραμορφώσεων του ΑΣΟ του νανοςύνθετου υλικού θεωρώντας γραμμικό ελαστικό υλικό για το πολυμερές και 0.5%κ.β περιεκτικότητα σε ΝΣΑ σε τιμές $\Delta\Delta A=0, 5, 10, 20, 40, 80$ and ∞ MPa

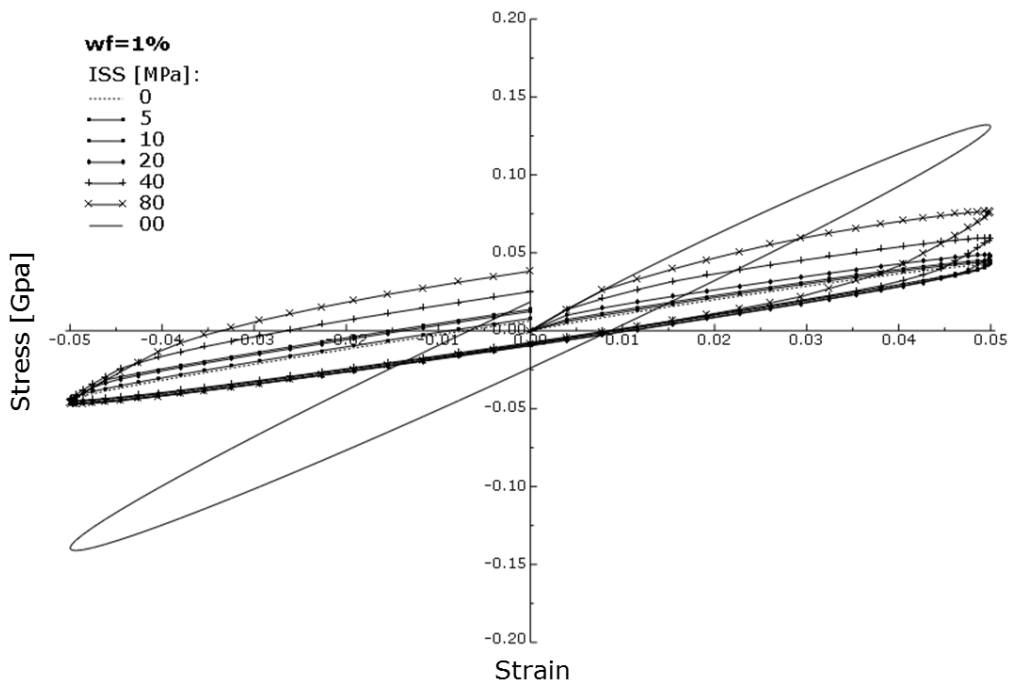


Εικόνα11: Καμπύλες τάσεων-παραμορφώσεων του ΑΣΟ του νανοσύνθετου υλικού θεωρώντας γραμμικό ελαστικό υλικό για το πολυμερές και 0.1%κ.β περιεκτικότητα σε ΝΣΑ σε τιμές $\Delta\Delta A=0, 5, 10, 20, 40, 80$ and ∞ MPa

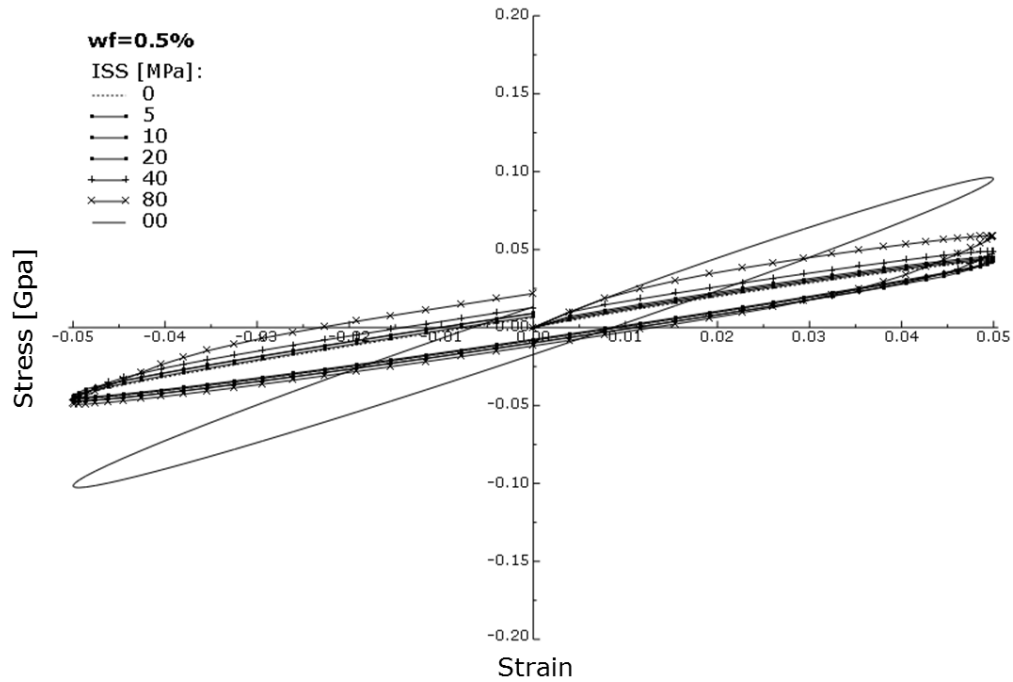
Στις Εικόνες 22-25 παρουσιάζονται παρόμοια αποτελέσματα με αυτά των Εικόνων 18-21 με την διαφορά ότι η μήτρα του ΑΣΟ συμπεριφέρεται ως γραμμικό βισκοελαστικό υλικό. Η καταναλισκόμενη ενέργεια του μοντέλου υπό ανακυκλιζόμενη φόρτιση οφείλεται τώρα τόσο στην βισκοελαστική συμπεριφορά της μήτρας όσο και στην ολίσθηση των ΝΣΑ εντός αυτής. Από τις παρακάτω εικόνες εξάγεται το συμπέρασμα ότι η αύξηση της $\Delta\Delta A$ οδηγεί σε αύξηση της ικανότητας απόσβεσης ενέργειας του νανοσύνθετου υλικού. Συγχρόνως η συνολική ακαμψία του σύνθετου αυξάνεται προσεγγίζοντας την ακαμψία της περίπτωσης όπου θεωρείται στερεά σύνδεση μεταξύ των ΝΣΑ και του πολυμερούς. Η απόσβεση του υλικού είναι εμφανώς σημαντικότερη στην περίπτωση του ΑΣΟ με %κ.β περιεκτικότητα σε ΝΣΑ μεγαλύτερη από 0.5% ενώ για μικρές τιμές της κ.β περιεκτικότητας παραδείγματος χάριν 0.1% η συμπεριφορά απόσβεσης είναι παρόμοια με αυτή του καθαρού πολυμερούς (χωρίς ΝΣΑ).



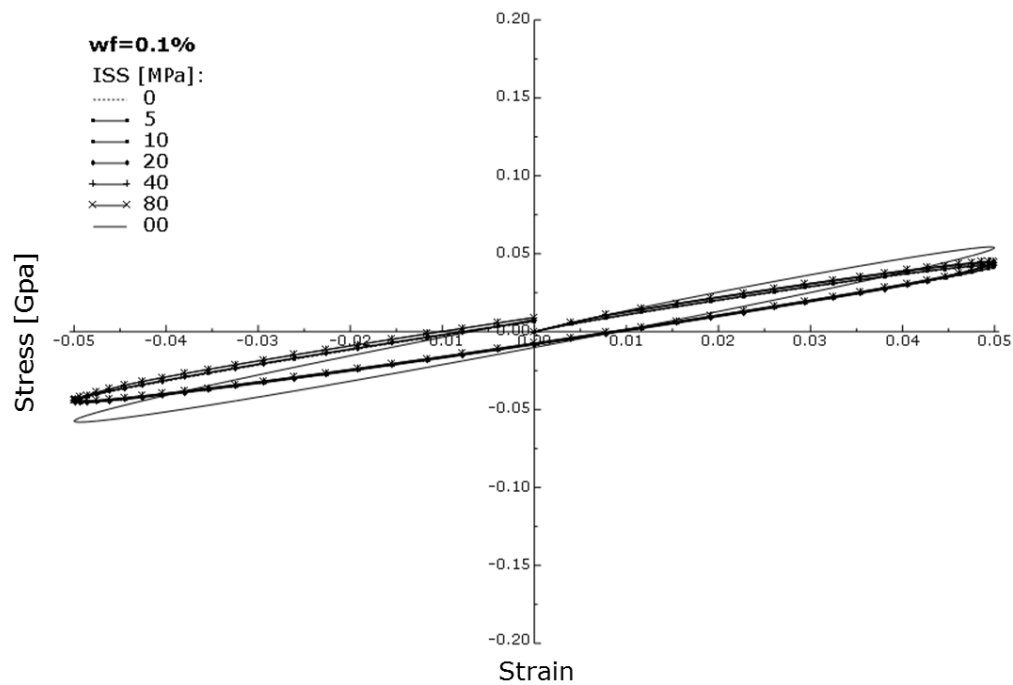
Εικόνα12: Καμπύλες τάσεων-παραμορφώσεων του ΑΣΟ του νανοςύνθετου υλικού θεωρώντας γραμμικό βισκοελαστικό υλικό για το πολυμερές και 2%κ.β περιεκτικότητα σε ΝΣΑ σε τιμές $\Delta\Delta A=0, 5, 10, 20, 40, 80$ and ∞ MPa



Εικόνα13: Καμπύλες τάσεων-παραμορφώσεων του ΑΣΟ του νανοςύνθετου υλικού θεωρώντας γραμμικό βισκοελαστικό υλικό για το πολυμερές και 1%κ.β περιεκτικότητα σε ΝΣΑ σε τιμές $\Delta\Delta A=0, 5, 10, 20, 40, 80$ and ∞ MPa



Εικόνα14: Καμπύλες τάσεων-παραμορφώσεων του ΑΣΟ του νανοςύνθετου υλικού θεωρώντας γραμμικό βισκοελαστικό υλικό για το πολυμερές και 0.5%κ.β περιεκτικότητα σε ΝΣΑ σε τιμές $\Delta\Delta A=0, 5, 10, 20, 40, 80$ and ∞ MPa



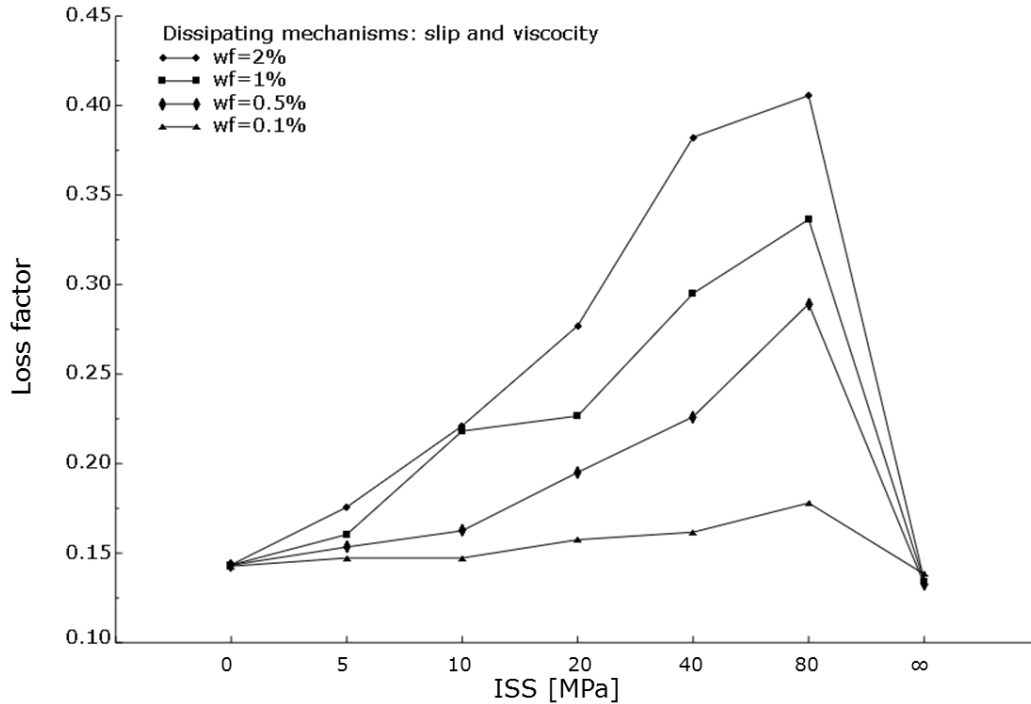
Εικόνα15: Καμπύλες τάσεων-παραμορφώσεων του ΑΣΟ του νανοςύνθετου υλικού θεωρώντας γραμμικό βισκοελαστικό υλικό για το πολυμερές και 0.1%κ.β περιεκτικότητα σε ΝΣΑ σε τιμές $\Delta\Delta A=0, 5, 10, 20, 40, 80$ and ∞ MPa

Στην Εικόνα 26 παρουσιάζεται ο ενεργός παράγοντας απωλειών σε σχέση με τις τιμές της $\Delta\Delta A$ (5, 10, 20, 40 και 80 MPa) και την %κ.β περιεκτικότητα του ΑΣΟ του νανοσύνθετου υλικού σε ΝΣΑ (κ.β=2, 1, 0.1 and 0.5 %) για μήτρα από γραμμικό βισκοελαστικό πολυμερές (PEEK). Ο ενεργός παράγοντας απωλειών υπολογίζεται ως ο λόγος της καταναλισκώμενης ενέργειας ανά μονάδα όγκου προς την μέγιστη αποθηκευμένη ενέργεια του υλικού ανά μονάδα όγκου:

$$\tan \delta = \frac{D}{\pi \sigma_0 \varepsilon_0} \quad 49$$

όπου σ_0 και ε_0 είναι η μέση τάση και παραμόρφωση που προκύπτουν μετά την ανάλυση του μοντέλου με πεπερασμένα στοιχεία σε ανακυκλιζόμενη φόρτιση. D είναι το εμβαδόν του βρόγχου υστέρησης που αντιστοιχεί στο ποσό της αποσβενώμενης ενέργειας ανά κύκλο φόρτισης.

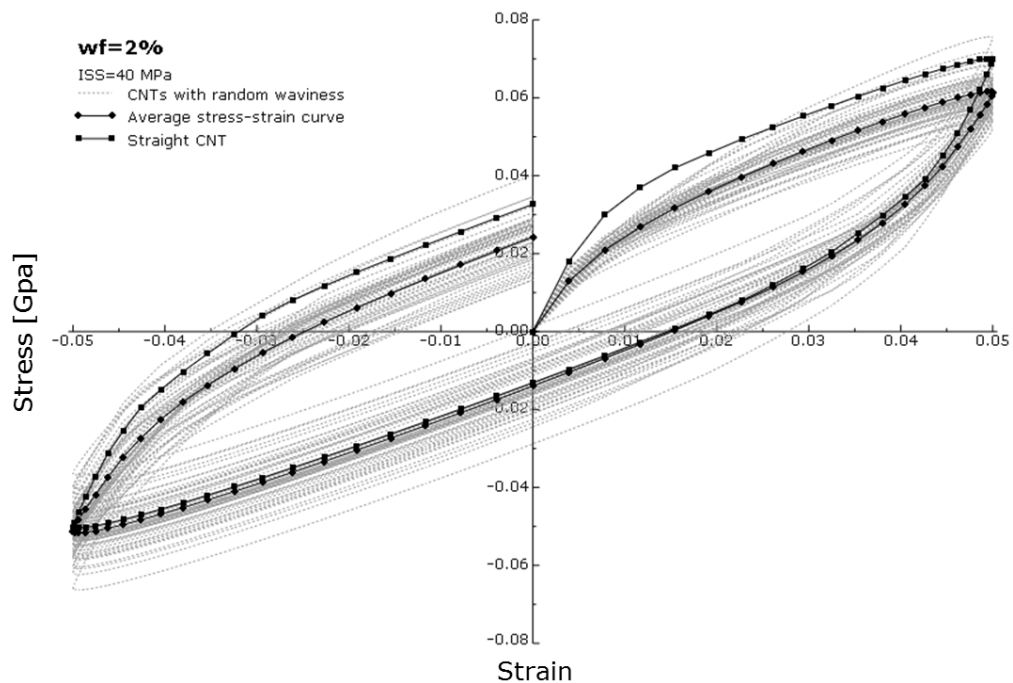
Στην Εικόνα 26 επιβεβαιώνεται το συμπέρασμα που εξήχθει προηγουμένως, ότι η ενέργεια απόσβεσης αυξάνεται με αύξηση της $\Delta\Delta A$ του υλικού. Ο παράγοντας απωλειών αυξάνεται με αύξηση της $\Delta\Delta A$ φτάνοντας ένα μέγιστο όριο για τιμές μεγαλύτερες από 40 MPa. Σημειώνεται ότι η τιμή της διατμητικής τάσης αντοχής του PEEK είναι 52 MPa. Η μέγιστη τιμή του παράγοντα απωλειών αντιστοιχεί σε $\Delta\Delta A=80$ MPa και είναι περισσότερο από 200% για κ.β=0.5%, 250% για κ.β=1% και 300% για κ.β=2% μεγαλύτερη από την τιμή του παράγοντα απωλειών του καθαρού πολυμερούς, χωρίς ΝΣΑ. Για μικρές τιμές περιεκτικότητας κ.β ΝΣΑ, μικρότερες δηλαδή του 0.1% η αύξηση του παράγοντα απωλειών είναι μηδαμινή. Σε όλες τις περιπτώσεις ο παράγοντας απωλειών μειώνεται για τιμές $\Delta\Delta A$ μεγαλύτερες του 80 MPa και τείνει στην τιμή του ΑΣΟ με στερεά σύνδεση των διεπιφανειακών δεσμών. Η συμπεριφορά αυτή του νανοσύνθετου υλικού καταδεικνύει την ανάγκη εφαρμογής κατάλληλων λειτουργικών τεχνικών στην επιφάνεια του ΝΣΑ ώστε να επιτευχθεί υψηλότερη διεπιφανειακή διατμητική αντοχή, κοντά στην διατμητική αντοχή του πολυμερούς, οδηγώντας σε βέλτιστη συμπεριφορά απόσβεσης.



Εικόνα16: Παράγοντας απωλειών υπολογισμένος από τον βρόγχο υστέρησης των διαγραμμάτων τάσεων-παραμορφώσεων για το νανοσύνθετο υλικό, θεωρώντας γραμμικό βισκοελαστικό υλικό για το πολυμερές, %κ.β περιεκτικότητα σε ΝΣΑ 2, 1, 0.5 και 0.1 % και $\Delta\Delta A=0, 5, 10, 20, 40, 80$ και ∞ MPa.

7.2. ΝΣΑ κυματοειδούς γεωμετρίας

Με βάση την θεωρία της στοχαστικής ανάλυσης εξετάζεται η επιρροή της τυχαίας κυματοειδούς γεωμετρίας των ΝΣΑ στην απόσβεση του νανοσύνθετου υλικού. Για τον σκοπό αυτόν εξετάζεται ένας αριθμός τυχαίων ΝΣΑ που δημιουργήθηκαν από την Εξίσωση (24) και οι οποίοι ενσωματώνονται στην μήτρα, καταλήγοντας σε ένα ΑΣΟ του νανοσύνθετου υλικού με περιεκτικότητα κ.β=2%. Τα ΑΣΟ που δημιουργούνται κατά αυτόν τον τρόπο υποβάλλονται σε ανακυκλιζόμενη φόρτιση ενώ σε όλες τις περιπτώσεις θεωρείται κρίσιμη τιμή $\Delta\Delta A=40$ MPa. Από το σύνολο των διαγραμμάτων τάσεων-παραμορφώσεων που εξάγονται μετά την Monte Carlo ανάλυση και παρουσιάζονται στην Εικόνα 27, υπολογίζεται ο μέσος όρος αυτών. Στην Εικόνα 27 για λόγους σύγκρισης παριστάνεται μαζί με την μέση καμπύλη και η καμπύλη τάσης-παραμόρφωσης που αντιστοιχεί σε ΑΣΟ που περιέχει έναν ευθύγραμμο ΝΣΑ. Από τις καμπύλες αυτές υπολογίζονται οι τιμές του παράγοντα απόσβεσης που παρουσιάζονται στον Πίνακα 3 για την περίπτωση του ΑΣΟ με κυματοειδής και ευθύγραμμους ΝΣΑ αντίστοιχα. Από τις τιμές του Πίνακα 3 παρατηρείται ότι η κυματοειδής γεωμετρία των ΝΣΑ επιφέρει μια μείωση κατά 15% του παράγοντα απωλειών σε σχέση με τους ευθύγραμμους. Συνεπώς καταλήγουμε στο συμπέρασμα ότι η ενίσχυση του πολυμερούς με ΝΣΑ όσο το δυνατόν πιο ευθύγραμμωνοδηγεί σε βελτίωση της ικανότητας απόσβεσης του νανοσύνθετου υλικού.



Εικόνα17: Σύγκριση της μέσης καμπύλης τάσεων-παραμορφώσεων 50 ΑΣΟ που περιέχουν τυχαίας κυματοειδούς γεωμετρίας ΝΣΑ με την αντίστοιχη καμπύλη ΑΣΟ με ευθύγραμμο ΝΣΑ (κ.β=2% και ΔΔΑ=40 MPa)

	Ευθύγραμμος ΝΣΑ	Κυματοειδής ΝΣΑ
Παράγοντας απωλειών	0.3744	0.3182

Πίνακας 3. Παράγοντας απωλειών για ευθύγραμμο και κυματοειδή ΝΣΑ εντός του ΑΣΟ του νανοσύνθετου υλικού

8. Συμπεράσματα

Στην παρούσα μελέτη διερευνάται η επίδραση της διεπιφανειακής διατμητικής αντοχής νανοσύνθετου υλικού στις μηχανικές ιδιότητες και την απόσβεση του με χρήση αναλύσεων πολλαπλών κλιμάκων. Η ατομική διάταξη των νανοσωλήνων άνθρακα μοντελοποιείται ως ένα πλαισιωτό δίκτυο δοκών οι ιδιότητες των οποίων προέρχονται από την θεωρία της δομικής μοριακής μηχανικής. Στην συνέχεια το μοντέλο αυτό αντικαθίσταται από ένα ισοδύναμο στοιχείο δοκού το οποίο χρησιμοποιείται ως το βασικό κατασκευαστικό στοιχείο για την σύνθεση των μακρών ΝΣΑ τυχαίας γεωμετρίας που το μήκος τους φτάνει την μικροκλίμακα. Οι ισοδύναμοι δοκοί ενσωματώνονται στα στοιχεία συνεχούς μέσου της μήτρας της οποίας το πολυμερές υλικό (PEEK) μοντελοποιείται ως γραμμικό βισκοελαστικό υλικό μέσω του μοντέλου των Maxwell-Wiechert. Ο μηχανισμός μεταφοράς δυνάμεων δια μέσου της διεπιφάνειας ΝΣΑ και περιβάλλουσας μήτρας, λαμβάνεται υπόψιν στην ανάλυση πεπερασμένων στοιχείων με την υλοποίηση ενός μοντέλου ολίσθησης μεταξύ των δεσμών. Η μελέτη περιλαμβάνει τόσο ευθύγραμμους όσο και κυματοειδής ΝΣΑ. Στην περίπτωση των κυματοειδών ΝΣΑ, αυτοί προκύπτουν από την στοχαστική επεξεργασία εικόνων ηλεκτρονικού μικροσκοπίου, από όπου με την μέθοδο της φασματικής απεικόνισης προκύπτει ένα εξελισσόμενο φάσμα ενέργειας για την παραγωγή της τυχαίας τους γεωμετρίας. Οι στοχαστικές μέσες μηχανικές ιδιότητες και η απόσβεση του νανοσύνθετου υλικού προκύπτουν μετά από προσομοιώσεις MonteCarlo σε αντιπροσωπευτικά στοιχεία όγκου του υλικού.

Από τα αριθμητικά αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν, καταδεικνύεται η σημαντική επίδραση της διεπιφανειακής διατμητικής αντοχής του υλικού και της κυματοειδούς γεωμετρίας των ΝΣΑ στην συμπεριφορά απόσβεσης του νανοσύνθετου υλικού. Ειδικότερα ο παράγοντας απωλειών αυξάνεται με αύξηση της $\Delta\Delta A$ φτάνοντας ένα άνω όριο για τιμές $\Delta\Delta A$ κοντά στην διατμητική αντοχή του πολυμερούς της μήτρας. Η συμπεριφορά αυτή του νανοσύνθετου υλικού υπονοεί ότι μια διαδικασία εφαρμογής λειτουργικών τεχνικών στην επιφάνεια των ΝΣΑ που θα αύξανε την τιμή της $\Delta\Delta A$ είναι σημαντική για την επίτευξη βέλτιστης συμπεριφοράς απόσβεσης. Επιπλέον, αποδείχθηκε ότι η κυματοειδής γεωμετρία των ΝΣΑ οδηγεί σε μείωση του παράγοντα απωλειών του νανοσύνθετου υλικού, καταδεικνύοντας την σπουδαιότητα της προσπάθειας παραγωγής νανοσύνθετων υλικών που περιέχουν όσο το δυνατόν ευθύγραμμους ΝΣΑ ώστε να βελτιωθεί η ικανότητα απόσβεσης τους.

Αναφορές

1. *Helical microtubules of graphitic carbon.* **Iijima S.** London : s.n., 1991, Letters to Nature, Vol. 354, pp. 56–58.
2. *Mechanical properties of carbon nanotubes.* **Salvetat J.P., Bonard J.M., Thomson N.B., Kulik A.J., Forro L., Benoit W., Zuppiroli L.** 3, 1999, Applied Physics A: Materials Science and Processing, Vol. 69, pp. 255-260.
3. *Direct mechanical measurement of the tensile strength and elastic modulus of multiwalled carbon nanotubes.* **Demczyk B.G., Wang Y.M., Cumings J., Hetman M., Han W., Zettl A., Ritchie R.O.** 1-2, 2002, Materials Science and Engineering A, Vol. 334, pp. 173-178.
4. *Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load.* **Yu M.-F., Lourie O., Dyer M.J., Moloni K., Kelly T.F., Ruoff R.S.** 5453, 2000, Science, Vol. 287, pp. 637-640.
5. *Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes.* **Treacy M.M.J., Ebbesen T.W., Gibson J.M.** 6584, 1996, Nature, Vol. 381, pp. 678-680.
6. *Finite crystal elasticity of carbon nanotubes based on the exponential Cauchy-Born rule.* **Arroyo M., Belytschko T.** 11, 2004, Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics, Vol. 69, pp. 1154151-11541511.
7. *Size-dependent elastic properties of a single-walled carbon nanotube via a molecular mechanics model.* **Chang T., Gao H.** 6, 2003, Journal of the Mechanics and Physics of Solids, Vol. 51, pp. 1059-1074.
8. *Simulation of elastic properties of single-walled carbon nanotubes.* **Jin Y., Yuan F.G.** 11, 2003, Composites Science and Technology, Vol. 63, pp. 1507-1515.
9. *On the elastic properties of carbon nanotube-based composites: Modelling and characterization.* **Thostenson E.T., Chou T.-W.** 5, Journal of Physics D: Applied Physics, Vol. 36, pp. 573-582.
10. *Functionalized SWNT/polymer nanocomposites for dramatic property improvement.* **Ramanathan T., Liu H., Brinson L.C.** 17, Journal of Polymer Science, Part B: Polymer Physics, Vol. 43, pp. 2269-2279.
11. *Improvement of Thermal and Mechanical Properties of Carbon Nanotube Composites through Chemical Functionalization.* **Velasco-Santos C., Martinez-Hernandez A.L., Fisher F.T., Ruoff R., Castano V.M.** 23, 2003, Chemistry of Materials, Vol. 15, pp. 4470-4475.

12. *Improving the dispersion and integration of single-walled carbon nanotubes in epoxy composites through functionalization.***Zhu J., Kim J., Peng H., Margrave J.L.,Khabashesku V.N., Barrera E.V.** 8, 2003, Nano Letters, Vol. 3, pp. 1107-1113.
13. *Atomistic-continuum and ab initio estimation of the elastic moduli of single-walled carbon nanotubes.***Chandraseker K., Mukherjee S.** 1, 2007, Computational Materials Science, Vol. 40, pp. 147-158.
14. *Ab initio study of the elastic properties of single-walled carbon nanotubes and graphene.***Van Lier G., Van Alsenoy C., Van Doren V.,Geerlings P.** 1-2, 2000, Chemical Physics Letters, Vol. 326, pp. 181-185.
15. *First-principles study on morphology and mechanical properties of single-walled carbon nanotube.***Zhou G., Duan W., Gu B.** 5, 2001, Chemical Physics Letters, Vol. 333, pp. 344-349.
16. *Molecular dynamics (MD) simulations of the dependence of C-C bond lengths and bond angles on the tensile strain in single-wall carbon nanotubes (SWCNT).***Agrawal P.M., Sudalayandi B.S., Raff L.M.,Komanduri R.** 4, 2008, Computational Materials Science, Vol. 41, pp. 450-456.
17. *Mechanical properties of carbon nanotubes using molecular dynamics simulations with the inlayer van der Waals interactions.***Chen W.H., Cheng H.C., Hsu Y.C.** 2, 2007, Computer Modeling in Engineering and Sciences, Vol. 20, pp. 123-145.
18. *Atomistic-continuum modeling for mechanical properties of single-walled carbon nanotubes.***Cheng H.-C., Liu Y.-L., Hsu Y.-C., Chen W.-H.** 7-8, 2009, International Journal of Solids and Structures, Vol. 46, pp. 1695-1704.
19. *Prediction of buckling characteristics of carbon nanotubes.***Hu N., Nunoya K., Pan D., Okabe T., Fukunaga H.** 20, 2007, International Journal of Solids and Structures, Vol. 44, pp. 6535-6550.
20. *Development of a 4-node finite element for the computation of nano-structured materials.***Nasdala L., Ernst G.** 4, 2005, Computational Materials Science, Vol. 33, pp. 443-458.
21. *Equivalent continuum modeling of nano-structured materials.***Odegard G.M., Gates T.S., Nicholson L.M., Wise K.E.** 14, 2002, Composites Science and Technology, Vol. 62, pp. 1869-1880.
22. *A structural mechanics approach for the analysis of carbon nanotubes.***Li C., Chou T.-W.** 10, 2003, International Journal of Solid Structures, Vol. 40, pp. 2487-2499.

23. *Finite element methods for the non-linear mechanics of crystalline sheets and nanotubes.* **Arroyo M., Belytschko T.** 3, 2004, International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 59, pp. 419-456.
24. *A progressive fracture model for carbon nanotubes.* **Tserpes K.I., Papanikos P., Tsirkas S.A.** 7-8, 2006, Composites Part B: engineering, Vol. 37, pp. 662-669.
25. *Concurrent quantum/continuum coupling analysis of nanostructures.* **Qian D., Liu W.K., Zheng Q.** 41-42, 2008, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 197, pp. 3291-3323.
26. *Coupling atomistics and continuum in solids: Status, prospects, and challenges.* **Wernik J.M., Meguid S.A.** 1, 2009, International Journal of Mechanics and Materials in Design, Vol. 5, pp. 79-110.
27. *Effect of an interphase region on debonding of a CNT reinforced polymer composite.* **Needleman A., Borders T.L., Brinson L.C., Flores V.M., Schadler L.S.** 15, 2010, Composites Science and Technology, Vol. 70, pp. 2207-2215.
28. *The effect of van der Waals-based interface cohesive law on carbon nanotube-reinforced composite materials.* **Tan H., Jiang L.Y., Huang Y., Liu B., Hwang K.C.** 14, 2007, Composites Science and Technology, Vol. 67, pp. 2941-2946.
29. *A cohesive law for interfaces between multi-wall carbon nanotubes and polymers due to the van der Waals interactions.* **Lu W.B., Wu J., Song J., Hwang K.C., Jiang L.Y., Huang Y.** 41-42, 2008, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 197, pp. 3261-3267.
30. *Multi-scale modeling of tensile behavior of carbon nanotube-reinforced composites.* **Tserpes K.I., Papanikos P., Labeas G., Pantelakis Sp.G.** 1, 2008, Theoretical and applied fracture mechanics, Vol. 49, pp. 51-60.
31. *Investigation of stress-strain behavior of single walled carbon nanotube/rubber composites by a multi-scale finite element method.* **Georgantzinos, S.K., Giannopoulos, G.I., Anifantis, N.K.** 3, 2009, Theoretical and Applied Fracture Mechanics, Vol. 52, pp. 158-164.
32. **Machida, K.** *Principles of Molecular Mechanics.* Tokyo : Kodansha and John Wiley & Sons Co-publication, 1999.
33. *A full periodic-table force-field for molecular mechanics and molecular dynamics simulations.* **Rappe A.K., Casewit C.J., Colwell K.S., et al.** 1992, Journal of American Chemical Society, Vol. 114, pp. 10024–10035.

34. *Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films.* **Brenner D.W.** 1990, Physical Review B, Vol. 42, p. 9458.
35. *A second generation force-field for the simulation of proteins, nucleic-acids, and organic-molecules.* **Cornell W.D., Cieplak P., Bayly C.I., et al.** 1995, Journal of American Chemical Society, Vol. 117, pp. 5179–5197.
36. *Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear range.* **Yakobson B.I., Brabec C.J., Bernholc J.** 1996, Physics Review Letter, Vol. 76, pp. 2511–4.
37. *Strain energy and Young's modulus of single-wall carbon nanotubes calculated from electronic energy band theory.* **Zhou X., Zhou J.J., Ou-Yang Z.C.** 20, 2000, Physics Review B, Vol. 62, pp. 13692–6.
38. *Single-walled and multiwalled carbon nanotubes viewed as elastic tubes with the effective Young's moduli dependent on layer number.* **Tu Z., Ou-Yang Z.** 2002, Physics Review B, Vol. 65, p. 233407.
39. *C₂F, BN and C nanoshell elasticity from ab initio computations.* **Kudin K.N., Scuseria G.E., Yakobson B.I.** 2001, Physics Review B, Vol. 64, p. 235406.
40. *Mechanics of deformation of single and multi-wall carbon nanotubes.* **Pantano A., Parks D.M., Boyce M.C.** 2004, Journal of Mechanics & Physics of Solids, Vol. 52, pp. 789–821.
41. *Elastic properties of carbon nanotubes and nanoropes.* **Lu J.P.** 7, 1997, Physical Review Letter, Vol. 79, pp. 1297–300.
42. *Elastic properties of C and B_xC_yN_z composite nanotubes.* **Hernandez E., Goze C., Bernier P., Rubio A.** 20, 1998, Physical Review Letter, Vol. 80, pp. 4502–5.
43. *Accurate estimation of evolutionary power spectra for strongly narrow-band random fields.* **Schillinger D., Papadopoulos V.** 2009, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering.
44. *Wavelet analysis of vibration, part I: Theory.* **Newland D.E.** 1994a, Journal of Vibration Acoustics, Vol. 116, pp. 409-416.
45. *Wavelet analysis of vibration, part II: Wavelet maps.* **Newland D.E.** 1994b, Journal of Vibration Acoustics, Vol. 116, pp. 417-425.
46. **Mallat S.** *A wavelet tour of signal processing.* New York : Academic Press, 1999.

47. *Stochastic processes evolutionary spectrum estimation via harmonic wavelets.* **Spanos P.D., Tezcan J., Tratskas P.** 2005, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 194, pp. 1367-1383.
48. **Cohen L.** *Time-Frequency Analysis.* New Jersey : Prentice Hall, 1995.
49. *Buckling analysis of imperfect I-section beam-columns with stochastic shell finite elements.* **Schillinger D., Papadopoulos V., Bischoff M., Papadrakakis M.** 2010, Computational Mechanics.
50. *Efficient modeling of imperfections for buckling analysis of composite cylindrical shells.* **Broggi M., Schuëller G. I.** 11, 2011, Engineering Structures, Vol. 33, pp. 1796-1806.
51. *Victrax poly(ethersulfone) (PES) and Victrax poly(ether ether ketone) (PEEK).* **Searle O.B., Pfeiffer R.H.** 8, 1985, Polymer Engineering & Science, Vol. 25, pp. 474–6.
52. *Mechanical properties of poly(ether-ether-ketone) for engineering applications.* **Jones D.P., Leach D.C., Moore D.R.** 9, 1985, Polymer, Vol. 26, pp. 1385–93.
53. www.victrax.com
54. **Ferry J.D.** *Viscoelastic Properties of Polymers.* New York : John Wiley & Sons, 1980.
55. **Findley, W. N., Lai, J. S. and Onaran, K.** *Creep and relaxation of nonlinear viscoelastic materials.* Amsterdam: North-Holland : s.n., 1976.
56. *Determination of discrete relaxation and retardation time spectra from dynamic mechanical data.* **Baumgaertel M., Winter, H. H.** 1989, Rheologica Acta, Vol. 28, pp. 511–519.
57. *Generating line spectra from experimental responses. Part I: relaxation modulus and creep compliance.* **Emri I., Tschoegl N. W.** 1993, Rheologica Acta, Vol. 32, pp. 311–321.
58. **NTUA-CMRECT report M18.**
59. *Load transfer in carbon nanotube epoxy composites.* **Schadler L.S., Giannaris S.C., Ajayan P.M.** 26, 1998, Applied Physics Letters, Vol. 73, pp. 3842–4.
60. *Load transfer and deformation mechanisms in carbon nanotube–polystyrene composites.* **Qian D., Dickey E.C., Andrews R., Rantell T.** 20, 2000, Applied Physics Letters, Vol. 76, pp. 2868–70.

61. *Measurement of carbon nanotube–polymer interfacial strength.* **Barber A.H., Cohen S.R., Wagner H.D.** 23, 2003, Applied Physics Letters, Vol. 82, pp. 4140–2.

62. *Interface Toughness of Carbon Nanotube Reinforced Epoxy Composites.* **Yogeeswaran G.** 2011, Applied Materials & Interfaces Letters, Vol. 3, pp. 129–134.

