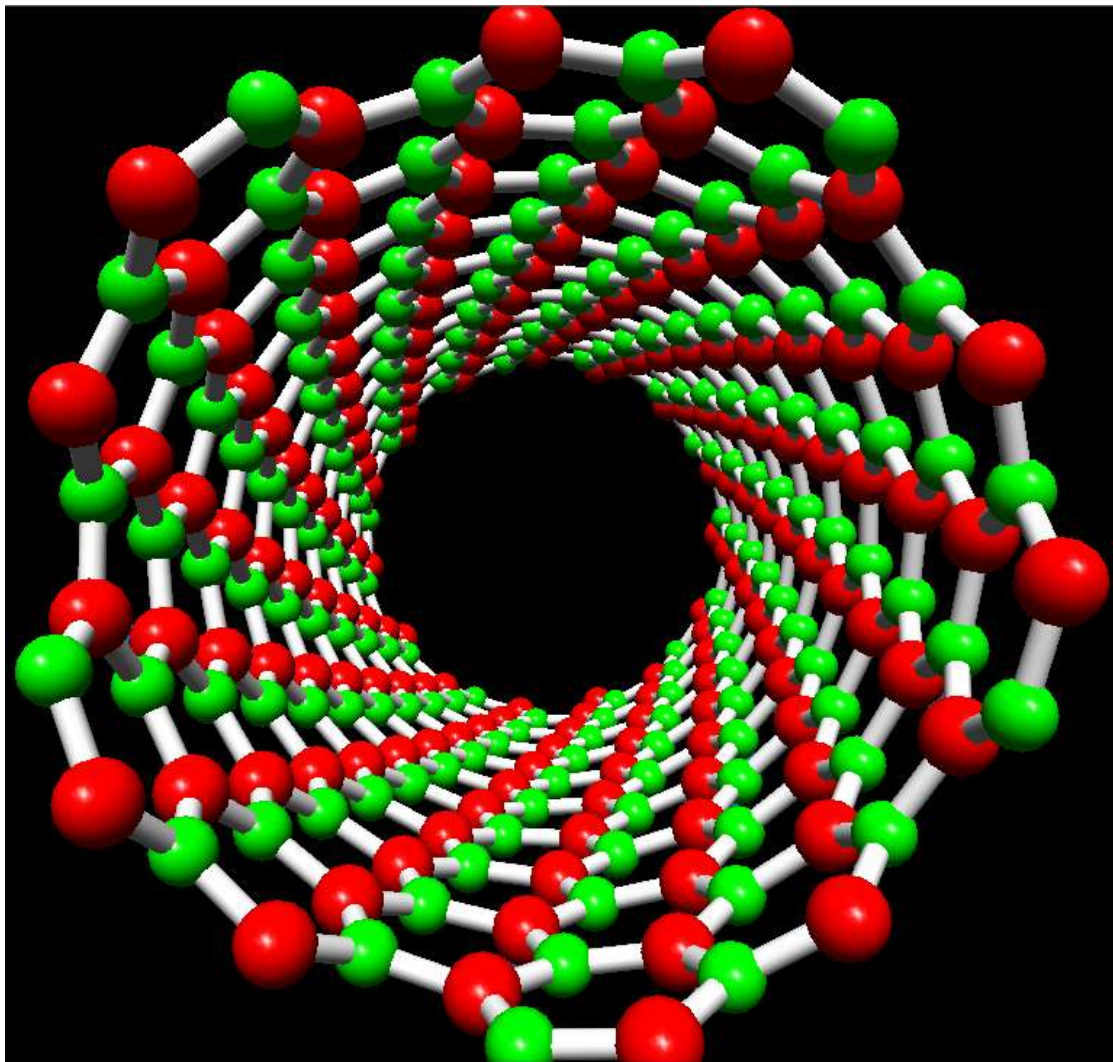


ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΔΥΤΙΚΗΣ ΕΛΛΑΔΑΣ  
ΣΧΟΛΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ  
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ Τ.Ε.

ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

**ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΑΛΑΝΤΩΤΙΚΗΣ  
ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ  
ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ**



**ΓΚΟΥΛΕΜΑΝΗΣ ΜΑΡΙΟΣ ΠΑΝΑΓΙΩΤΗΣ**

**A.M. 5592**

**ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ: Δρ. ΓΙΑΝΝΟΠΟΥΛΟΣ Ι. ΓΕΩΡΓΙΟΣ**

**ΠΑΤΡΑ 2014**

## ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Το τεύχος αυτό αποτελεί την Πτυχιακή Εργασία η οποία εκπονήθηκε στο Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών του Τεχνολογικού Εκπαιδευτικού Ιδρύματος Δυτικής Ελλάδας και ασχολείται με την αριθμητική πρόβλεψη της συμπεριφοράς νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου σε ταλαντωτικές καταπονήσεις καθώς και τον υπολογισμό των ιδιοσυχνοτήτων τους σε περιβάλλον πεπερασμένων στοιχείων.

Οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου έχουν προσελκύσει τα τελευταία χρόνια έντονο ερευνητικό ενδιαφέρον λόγω της πολυχρηστικότητας τους σε πολλές διαφορετικές εφαρμογές η οποία προκύπτει από τις εντυπωσιακές ιδιότητες (μηχανικές, οπτικές, ηλεκτρικές και θερμικές) που τους χαρακτηρίζουν.

Στην παρούσα εργασία προτείνεται μια πρωτότυπη αριθμητική μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων για την πρόβλεψη της συμπεριφοράς νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου σε ταλαντωτικές καταπονήσεις και τον υπολογισμό των ιδιοσυχνοτήτων των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου για σωλήνες διαφορετικών γεωμετρικών χαρακτηριστικών.

Η εργασία αυτή βοήθησε τον συγγραφέα στην εκμάθηση της μεθόδου της αριθμητικής μοντελοποίησης νανοδομημένων υλικών αλλά και στην εξοικείωση με τον ταχέως αναπτυσσόμενο τομέα τον νανοϋλικών και της νανοτεχνολογίας.

Στο συγκεκριμένο τεύχος παρουσιάζονται για πρώτη φορά αριθμητικά αποτελέσματα που αφορούν την συμπεριφορά νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου υπό ταλαντωτικές φορτίσεις τα οποία έχουν εξαχθεί με συγκεκριμένες πρωτότυπες αριθμητικές μεθόδους.

Θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή Δρ. Γιαννόπουλο Ι. Γεώργιο, επιστημονικό συνεργάτη του Τμήματος Μηχανολόγων Μηχανικών Τ.Ε. για την καθοδήγηση, τις ιδέες και την βοήθεια που μου προσέφερε καθ' όλη τη διάρκεια εκπόνησης της εργασίας μου. Επίσης θα ήθελα να ευχαριστήσω τον Δρ. Τσίρκα Σωτήριο για την φιλοξενία που μου παρείχε στο εργαστήριο CAM/CNC όπου και έλαβε χώρα το μεγαλύτερο μέρος της ενασχόλησης με την εργασία αυτή.

**Υπεύθυνη Δήλωση Σπουδαστή:** Ο κάτωθι υπογεγραμμένος σπουδαστής έχω επίγνωση των συνεπειών του Νόμου περί λογοκλοπής και δηλώνω υπεύθυνα ότι είμαι συγγραφέας αυτής της Πτυχιακής Εργασίας, έχω δε αναφέρει στην Βιβλιογραφία μου όλες τις πηγές τις οποίες χρησιμοποίησα και έλαβα ιδέες ή δεδομένα. Δηλώνω επίσης ότι, οποιοδήποτε στοιχείο ή κείμενο το οποίο έχω ενσωματώσει στην εργασία μου προερχόμενο από Βιβλία ή άλλες εργασίες ή το διαδίκτυο, γραμμένο ακριβώς ή παραφρασμένο, το έχω πλήρως αναγνωρίσει ως πνευματικό έργο άλλου συγγραφέα και έχω αναφέρει ανελλιπώς το όνομά του και την πηγή προέλευσης.

Ο σπουδαστής

(Ονοματεπώνυμο)

.....

(Υπογραφή)

## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η νανοτεχνολογία πραγματεύεται υλικά και κατασκευές καθώς και εφαρμογές τους, σε τομείς όπως είναι τα τεχνολογικά υλικά, τα ηλεκτρονικά, οι ηλεκτρονικοί υπολογιστές, οι αισθητήρες και οι μηχανές σε επίπεδο νανοκλίμακας. Άτομα και μόρια, ή ακόμα και οι επεκτάσεις τους σε ατομικές και μοριακές δομές, θεωρούνται οι βασικές μονάδες ή τα δομικά στοιχεία των μελλοντικών γενεών υλικών και ηλεκτρονικών συσκευών. Η ουσιαστική πρόοδος στην επιστημονική περιοχή της νανοτεχνολογίας κατά την τελευταία δεκαετία, οφείλεται σε μία σειρά από σημαντικές εξελίξεις σε διάφορους συμπληρωματικούς τομείς, όπως οι ανακαλύψεις του γραφενίου, των νανοσωλήνων και των φουλερενίων.

Στην παρούσα εργασία προτείνεται μια αριθμητική μέθοδος για την μοντελοποίηση νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου η οποία βασίζεται στην αποκλειστική χρήση πεπερασμένων στοιχείων τύπου ελατηρίου, για την προσομοίωση των διατομικών αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων αζώτου και βορίου οι οποίες εξαρτώνται από το δυναμικό πεδίο που αναπτύσσεται γύρω από αυτά. Για την προσομοίωση αυτών των αλληλεπιδράσεων χρησιμοποιούνται μαθηματικές εκφράσεις της δυναμικής ενέργειας που παρέχονται από την μοριακή χημεία. Τα δυναμικά αυτά προσομοιώνονται έπειτα μέσω γραμμικών ελαστικών πεπερασμένων στοιχείων τύπου ελατηρίου κατάλληλης δυσκαμψίας. Οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου μοντελοποιούνται σε επίπεδο ατόμου, δηλαδή λαμβάνεται υπ' όψιν η σχετική θέση των ατόμων αζώτου και βορίου σε νανοεπίπεδο. Στα μοντέλα που προκύπτουν επιβάλλονται κατάλληλες φορτίσεις και στηρίζεις για την εξαγωγή αποτελεσμάτων που έχουν να κάνουν με τις ιδιοσυχνότητες των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου.

Η παρούσα πτυχιακή εργασία είναι δομημένη σε κεφάλαια τα οποία αναλύονται παρακάτω.

Στο πρώτο κεφάλαιο λαμβάνει χώρα μια σύντομη αλλά απαραίτητη εισαγωγή στον προς μελέτη επιστημονικό τομέα καθώς και μια βιβλιογραφική ανασκόπηση γύρω από το αντικείμενο το οποίο πραγματεύεται η παρούσα πτυχιακή.

Στο δεύτερο κεφάλαιο γίνεται λεπτομερής ανάλυση των ατόμων που συνθέτουν τις νανοδομές που μελετάμε, ανάλυση της δομής των νανοσωλήνων άνθρακα και νιτριδίου του βορίου, καταγραφή των ιδιοτήτων και των εφαρμογών των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου. Επίσης παρουσιάζονται και οι τεχνικές παρασκευής των τελευταίων.

Στο τρίτο κεφάλαιο γίνεται λεπτομερής παρουσίαση της γεωμετρίας των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου και των διατομικών αλληλεπιδράσεων σε αυτούς.

Στο τέταρτο κεφάλαιο παρουσιάζουμε και αναλύουμε την προτεινόμενη αριθμητική μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων.

Στο πέμπτο κεφάλαιο παρατίθενται ομαδοποιημένα τα αποτελέσματα που αφορούν τις ιδιοσυχνότητες των μοντέλων που μελετήσαμε.

Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα συμπεράσματα που εξάγαμε μετά την συλλογή των αποτελεσμάτων της διαδικασίας.

Τέλος υπάρχει η βιβλιογραφία την οποία χρησιμοποιήσαμε ως πηγές και το παραρτημα της εργασίας στο οποίο παρουσιάζεται η διαδικασία μοντελοποίησης στο λογισμικό πεπερασμένων στοιχείων.

# ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

<b>ΠΡΟΛΟΓΟΣ</b>	<b>i</b>
<b>ΥΠΕΥΘΥΝΗ ΔΗΛΩΣΗ</b>	<b>ii</b>
<b>ΠΕΡΙΛΗΨΗ</b>	<b>iii</b>
<b>ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ</b>	<b>iv</b>
<b>ΕΙΣΑΓΩΓΗ</b>	<b>1</b>
1.ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ	4
1.1 ΓΕΝΙΚΑ	4
1.2 ΙΣΤΟΡΙΚΗ ΑΝΑΔΡΟΜΗ	6
1.3 ΝΑΝΟΔΟΜΗΜΕΝΑ ΥΛΙΚΑ	9
1.4 ΝΑΝΟΣΥΝΘΕΤΑ ΥΛΙΚΑ	9
1.5 ΝΑΝΟΤΕΧΝΙΕΣ – ΝΑΝΟΚΑΤΑΣΚΕΥΕΣ	12
1.6 ΝΑΝΟΜΗΧΑΝΙΚΗ – ΜΟΡΙΑΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ	14
1.7 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ	16
<b>2. ΑΖΩΤΟ, ΒΟΡΙΟ ΚΑΙ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ</b>	<b>18</b>
2.1 ΒΟΡΙΟ	18
2.2 ΑΖΩΤΟ	21
2.3 ΝΙΤΡΙΔΙΟ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ	25
2.4 ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΑΝΘΡΑΚΑ	26
2.5 ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ	27
2.6 ΔΟΜΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ	30
2.7 ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ	33
2.7.1 ΜΗΧΑΝΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ	33
2.7.2 ΘΕΡΜΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ	34
2.7.3 ΗΛΕΚΤΡΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ	34
2.7.4 ΜΑΓΝΗΤΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ	34
2.7.5 ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΣΕ ΣΧΕΣΗ ΜΕ ΤΟ ΝΕΡΟ	35
2.7.6 ΠΙΕΖΟΗΛΕΚΤΡΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ	35
2.8 ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ	36
2.8.1 ΑΠΟΘΗΚΕΥΣΗ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ	37
2.8.2 ΣΥΝΘΕΤΑ ΥΛΙΚΑ	38
2.8.3 ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΕΣ	38
2.8.4 ΙΑΤΡΙΚΗ ΚΑΙ ΒΙΟΛΟΓΙΑ	39
2.8.5 ΑΝΑΝΕΩΣΙΜΕΣ ΠΗΓΕΑ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ	39
2.9 ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΠΑΡΑΣΚΕΥΗΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ	40
2.9.1 ΕΞΑΧΝΩΣΗ ΗΛΕΚΤΡΟΔΙΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ ΜΕ ΤΗΝ ΧΡΗΣΗ ΗΛΕΚΤΡΙΚΟΥ ΤΟΞΟΥ ΕΚΚΕΝΩΣΗΣ	41
2.9.2 ΦΩΤΟΔΙΑΣΠΑΣΗ ΜΕ ΛΕΪΖΕΡ	42
2.9.3 ΚΑΤΑΛΥΤΙΚΗ ΧΗΜΙΚΗ ΕΝΑΠΟΘΕΣΗ (CVD)	43
2.9.4 ΜΕΤΑΤΡΟΠΗ CO ΜΕ ΥΨΗΛΗ ΠΙΕΣΗ (HiPCO)	43
<b>3. ΔΟΜΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΑ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ ΚΑΙ ΔΙΑΤΟΜΙΚΕΣ ΔΥΝΑΜΕΙΣ</b>	<b>45</b>
3.1 ΝΑΝΟΔΟΜΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ	45
3.2 ΔΙΑΤΟΜΙΚΕΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ	48
<b>4. ΠΡΟΤΕΙΝΟΜΕΝΗ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΕΘΟΔΟΣ</b>	<b>52</b>
4.1 Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ	53
4.2 ΠΡΟΤΕΙΝΟΜΕΝΗ ΜΕΘΟΔΟΣ	54
4.2.1 ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΜΟΝΟΤΟΙΧΟΥ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΑ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ	54
4.2.2 ΘΕΜΕΛΙΩΔΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗ	57

4.2.3 ΥΙΟΘΕΤΟΥΜΕΝΑ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΚΑΙ ΕΞΙΣΩΣΕΙΣ	60
<b>5. ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ</b>	<b>63</b>
<b>6. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ</b>	<b>86</b>
<b>ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ</b>	<b>87</b>
<b>ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ</b>	<b>88</b>

## ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Από τα πιο σημαντικά ευρήματα στο τομέα της επιστήμης των υλικών τις δύο προηγούμενες δεκαετίες ήταν η πρόοδος της έρευνας στο τομέα της νανοτεχνολογίας, με έμφαση στα νανοϋλικά και κυρίως σε αυτά που περιέχουν άνθρακα.

Ο όρος νανοτεχνολογία χρησιμοποιείται για να περιγράψει την ικανότητα να δημιουργούμε και να χειριζόμαστε διατάξεις και συστήματα (νανοκινητήρες κ.α.) με έλεγχο της ύλης στη νανοκλίμακα, δηλαδή σε κλίμακα ατόμων, μορίων και μοριακών δομών. Η ουσία της έγκειται στη δυνατότητα πραγματοποίησης διαδικασιών και διεργασιών στη νανοκλίμακα με στόχο τη δημιουργία μεγαλύτερων δομών με νέα μοριακή οργάνωση. Οι νανοδομές, όπως ονομάζονται, αποτελούν τα μικρότερα κατασκευάσματα του ανθρώπου και εμφανίζουν καινοτόμες φυσικές, χημικές και βιολογικές ιδιότητες, που πηγάζουν από το μέγεθος, το σχήμα και τη σύνθεσή τους.

Σταθμός στην ανάπτυξη της νανοτεχνολογίας θα μπορούσε να θεωρηθεί η ανακάλυψη νέων μορφών του άνθρακα, με πρώτη αυτή της ανακάλυψης των φουλερενίων το 1985 από τους Kroto και άλλους. Το ενδιαφέρον όμως των ερευνητών εστιάζεται περισσότερο στη νανοτεχνολογία και κυρίως στα νανοϋλικά άνθρακα μετά το 1991, οπότε έγιναν ευρέως γνωστοί οι νανοσωλήνες άνθρακα μετά την ανακοίνωση του καθηγητή Sumio Iijima στο περιοδικό Nature .

Το εξαγωνικό νιτρίδιο του βορίου (h-BN) είναι ένα τύπου γραφίτη υλικό στο οποίο δίκτυα από επίπεδες εξαγωνικές κυψελίδες στοιβάζονται η μία δίπλα στην άλλη τακτικά [1]. Οι νανοσωλήνες νιτρίδιου του βορίου είχαν προβλεφθεί πρώτη φορά θεωρητικά το 1994 [2] και στα επόμενα δύο χρόνια συντέθηκαν από διάφορες ερευνητικές ομάδες.[2,3]

Ως συνέχεια των νανοσωλήνων του άνθρακα έρχονται οι νανοσωλήνες νιτρίδιου του βορίου. Οι νανοσωλήνες νιτρίδιου του βορίου είναι κατ' ουσία φύλλα νιτρίδιου του βορίου τυλιγμένα κυλινδρικά και έχουν διαστάσεις μερικών νανομέτρων. Αυτά τα νανοϋλικά όπως και οι νανοσωλήνες άνθρακα έχουν προσελκύσει το επιστημονικό ενδιαφέρον λόγω των δυνατοτήτων τους για εφαρμογές σε νανοσυσκευές, σύνθετα υλικά, ηλεκτρονικές συσκευές και πολλούς άλλους τομείς εφαρμογών οι οποίοι αυξάνονται καθημερινά.

Στην παρούσα πτυχιακή εργασία, μελετήθηκαν αριθμητικά οι ιδιοσυχνότητες νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου διαφόρων μεγεθών, χρησιμοποιώντας μια νέα ατομιστική προσέγγιση δομικής μηχανικής κατάλληλη για την πρόβλεψη των δυναμικών ιδιοτήτων των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου.

Η προτεινόμενη μέθοδος υιοθετεί τρισδιάστατα, γραμμικά, δίκωμα πεπερασμένα στοιχεία ελατηρίου, τριών βαθμών ελευθερίας ανά κόμβο. Συγκεκριμένα χρησιμοποιούνται ελατήρια. Η προτεινόμενη μέθοδος υιοθετεί τρισδιάστατα, γραμμικά, δίκωμα πεπερασμένα στοιχεία ελατηρίου, τριών βαθμών ελευθερίας ανά κόμβο. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιούνται ελατήρια που έχουν συγκεκριμένη δυσκαμψία κατά μήκος της διεύθυνσης του δεσμού και μηδενική δυσκαμψία στις άλλες διευθύνσεις, για την διασύνδεση των ομοιοπολικά δεσμευμένων ατόμων αζώτου και βορίου (B-N νανοδομή) ώστε να προσομοιώσουν αποκλειστικά την αλληλεπίδραση του εφελκυσμού των δεσμών. Επιπλέον, ελατήρια συγκεκριμένης δυσκαμψίας και στις τρεις διευθύνσεις υιοθετούνται για την διασύνδεση αντικριστών ατόμων βορίου και αζώτου δύο γειτονικών δεσμών (B-N-B και N-B-N νανοδομές) με τέτοιο τρόπο ώστε να καταστεί εφικτή η ταυτόχρονη προσομοίωση της κάμψης και της στρέψης των δεσμών. Αυτό το αριθμητικό σχήμα αναμένεται να έχει μερικά προτερήματα σε σχέση με μεθόδους δομικής μηχανικής που βασίζονται στη χρήση στοιχείων δοκού για τρεις βασικούς λόγους. Πρώτον, τα ελατήρια επιτρέπουν στους δεσμούς να παραμένουν ευθύγραμμοι σύμφωνα με την μοριακή θεωρία. Δεύτερον, δεδομένου ότι η κάμψη της γωνίας των δεσμών όπως επίσης και οι διατομικές αλληλεπιδράσεις λόγω στρέψης εκτός επιπέδου είναι αλληλοσχετιζόμενα φαινόμενα μεταξύ δύο δεσμών, η χρήση ελατηρίων για την διασύνδεση αντικριστών ατόμων σε μία B-N-B ή N-B-N νανοδομή δείχνει ότι επιτρέπει πιο ρεαλιστικές παραμορφώσεις δεσμών. Τρίτον, η προτεινόμενη μέθοδος οδηγεί σε μικρότερο υπολογιστικό κόστος αφού οι περιστροφικοί βαθμοί ελευθερίας είναι απόντες σε κάθε επικόμβια θέση. Ο τελευταίος λόγος όπως επίσης και το γεγονός ότι η παρούσα μέθοδος δεν απαιτεί την χρήση στρεπτικών ελατηρίων και άρα τη χρήση τριπλών κόμβων σε κάθε θέση ατόμου βορίου ή αζώτου, οδηγεί σε ευκολότερη προεπεξεργασία κατά τη μοντελοποίηση. Η προτεινόμενη μέθοδος μπορεί να χαρακτηριστεί απλοϊκή και μικρού υπολογιστικού κόστους. Τέλος, για την προσημείωση των σημειακών μαζών στις ατομικές θέσεις χρησιμοποιήθηκαν σημειακά στοιχεία μάζας τριών βαθμών ελευθερίας. Η μοντελοποίηση και επίλυση των εξισώσεων γίνεται μέσω του



λογισμικού πακέτου πεπερασμένων στοιχείων Lusas Fea. Με τη χρήση της συγκεκριμένης αριθμητικής τεχνικής, μελετάται η ταλαντωτική συμπεριφορά νανοσωλήνων άνθρακα υπό διάφορες συνθήκες στήριξης του νανοσωλήνα. Τέλος τα πολυάριθμα αποτελέσματα επικεντρώνονται στις τέσσερις πρώτες ιδιομορφές και ιδιοσυχνότητες ενώ παρουσιάζονται παραμετρικά όσον αφορά το μέγεθος του νανοσωλήνα και την στήριξή του.

# 1. NANOTEΧΝΟΛΟΓΙΑ

## 1.1 ΓΕΝΙΚΑ

Νανοτεχνολογία είναι ένας όρος που χρησιμοποιείται για να περιγράψει τη δημιουργία κα χρήση λειτουργικών δομών μεγέθους μεταξύ 1 και 100 νανομέτρων, της τάξεως δηλαδή των  $10^{-9}$  μέτρων. Οι διαστάσεις γίνονται ευκολότερα αντιληπτές αναφέροντας πως ένα νανόμετρο ισούται περίπου με το 1/80000 μιας ανθρώπινης τρίχας ή με το μήκος 10 ατόμων υδρογόνου σε σειρά. Κατά παρόμοιο τρόπο ορίζεται και ο όρος νανοεπιστήμη αναφερόμενος σε επιστήμες οι οποίες μελετούν φαινόμενα στην κλίμακα αυτή.

Αν και το πεδίο της νανοτεχνολογίας μόλις πρόσφατα άρχισε να αναπτύσσεται ουσιαστικά, οι δυνατότητες της είχαν αρχίσει να γίνονται εμφανείς ήδη από την εποχή που ο φυσικός Richard Feynman έδωσε το λόγο με τίτλο “There’s Plenty of Room at the Bottom” μιλώντας για τα μεγάλα περιθώρια που αφήνουν οι νόμοι της φύσης για τον έλεγχο της ύλης σε ατομικό επίπεδο.

Στη μέχρι τώρα ανάπτυξη της σημαντικό ρόλο έπαιξαν η σημαντική βελτίωση του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου ενώ σταθμοί μπορούν να θεωρηθούν οι ανακαλύψεις δομών άνθρακα σε μορφή σφαίρας γνωστές ως φουλερένια καθώς και σε μορφή σωλήνα γνωστές ως νανοσωλήνες άνθρακα με ιδιαίτερες ιδιότητες το καθένα.

Ο όρος νανοτεχνολογία χαρακτηρίζεται από μεγάλη ευρύτητα όντας πολύ γενικός για να περιγράψει οτιδήποτε συμβαίνει στις διαστάσεις του νανομέτρου. Κατά συνέπεια, μπορεί να χωρισθεί σε πιο ειδικά θέματα όπως αυτό της νανοηλεκτρικής, των νανοϋλικών και άλλων. Οι εφαρμογές της είναι αναρίθμητες ενώ οι επιπτώσεις γίνονται αντιληπτές σε πολλαπλά επίπεδα κατά κύριο λόγο στον οικονομικό τομέα επηρεάζοντας παγκόσμιες βιομηχανίες και οικονομίες, αλλά και στον κοινωνικό τομέα βελτιώνοντας το επίπεδο ζωής μας.

Ένας από τους σημαντικότερους λόγους για τους οποίους η Νανοτεχνολογία έχει βρεθεί στο επίκεντρο του ενδιαφέροντος είναι ότι μας βοηθά να καλύψουμε ένα μεγάλο κενό που έχουμε στην κατανόηση της ύλης. Μέχρι τώρα, γνωρίζουμε αρκετά πράγματα για τα υποατομικά σωματίδια αλλά και τη συμπεριφορά μεμονωμένων ατόμων και μορίων με τη συμβολή της Φυσικής και της Χημείας. Επίσης έχουμε μάθει πολλά για τη συμπεριφορά της ύλης στον μακρόκοσμο. Ωστόσο η γνώση μας

ήταν μικρή για τη συμπεριφορά συστημάτων ατόμων ή και μορίων. Η Νανοτεχνολογία μας επέτρεψε να εμβαθύνουμε σε αυτές τις διαστάσεις. Ένας άλλος λόγος, εξίσου σημαντικός, είναι ότι τα φαινόμενα της νανοκλίμακας «γεννούν» μεγάλες προσδοκίες για ιδιαίτερου ενδιαφέροντος εφαρμογές. Για παράδειγμα είναι δυνατή η αρχιτεκτονική εξειδικευμένων μορίων άτομο προς άτομο.

Δεν θα πρέπει ωστόσο να φανταστεί κανείς πως η νανοτεχνολογία πρόκειται για επιστημονική επανάσταση. Τα περισσότερα θέματα όπου αυτή περικλείει προκύπτουν σαν λογική συνέπεια της εξέλιξης της ικανότητας της επιστήμης και της τεχνολογίας να ερευνά και να εργάζεται σε όλο και μικρότερη κλίμακα. Εξάλλου, η κατάλυση, ένα φαινόμενο που ανέκαθεν χαρακτηριζόταν από νανομετρικές διαστάσεις αποτελεί επιστημονικό κλάδο ο οποίος αναπτύσσεται πολλές δεκαετίες. Επιπλέον, ολόκληρα επιστημονικά πεδία όπως η χημεία ή η βιολογία ανέκαθεν δούλευαν σε τέτοιες διαστάσεις παρόλο που ο όρος νανοεπιστήμη εισήχθη μόλις πρόσφατα.

Οι λόγοι για τους οποίους η νανοτεχνολογία είναι σημαντική είναι οι εξής:

1. Οι ιδιότητες των ηλεκτρονίων στα υλικά επηρεάζονται από αλλαγές στη νανοκλίμακα. Έτσι, είναι δυνατό να διαφοροποιηθούν οι βασικές ιδιότητες των υλικών (π.χ. θερμοκρασία τήξης, μαγνητισμός κ.λπ.) χωρίς αλλαγή της χημικής τους σύνθεσης.
2. Η ζωή εξελίσσεται σε νανοκλίμακα. Η συστηματική οργάνωση των υλικών στη νανοκλίμακα είναι ένα κύριο χαρακτηριστικό των βιολογικών συστημάτων. Η νανοτεχνολογία υπόσχεται να μας επιτρέψει να τοποθετούμε τεχνητά στοιχεία και συναρμολογημένες διατάξεις μέσα στα κύτταρα.
3. Λόγω του μεγέθους τους, τα διάφορα στοιχεία σε νανοκλίμακα προσφέρουν συνολικά πολύ μεγάλη επιφάνεια. Έτσι είναι ιδανικά για χρήση σε σύνθετα υλικά, στην απορρόφηση των φαρμάκων, σε ηλιακές κυψέλες και στην ενεργειακή αποθήκευση.
4. Τα νανοδομημένα υλικά είναι σκληρότερα και λιγότερο εύθραυστα.
5. Τα νανοδομημένα υλικά μπορούν να χρησιμοποιηθούν για διάφορες οπτικοηλεκτρονικές εφαρμογές.

## 1.2 ΙΣΤΟΡΙΚΗ ΑΝΑΔΡΟΜΗ

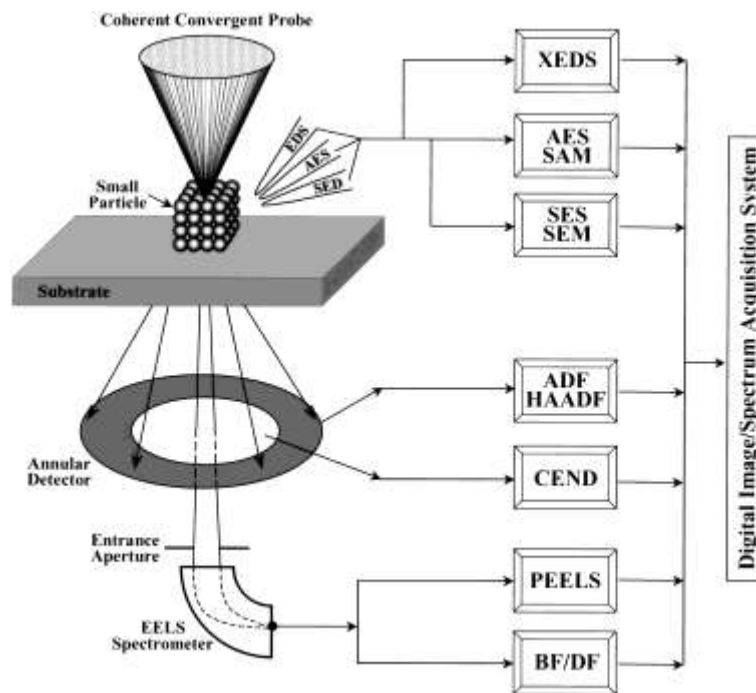
Ιστορικά πρώτα ο Έλληνας διανοητής Δημόκριτος διατύπωσε τον ισχυρισμό ότι «ο υλικός κόσμος αποτελείται από άτομα» ήδη πριν από 2400 χρόνια. Ένα νανόμετρο είναι ένα εκατομμυριοστό του χιλιοστομέτρου. Αντικείμενο της νανοτεχνολογίας είναι ο φλοιός του ατόμου και όχι ο πυρήνας του.

Ενδιαφέρον γεγονός αποτελεί και η πρόσφατη ανακάλυψη η πρόσφατη ανακάλυψη επιστημόνων πως το περίφημο υάλωμα των μελανόμορφων και ερυθρόμορφων αττικών αγγείων, που μεσουράνησαν στον αρχαίο κόσμο από τον 7ο ως τον 4ο αι. π.Χ., αποτελεί ένα νανοϋλικό το οποίο δημιουργούνταν με μια συνειδητή και άκρως συνεπή τεχνική.

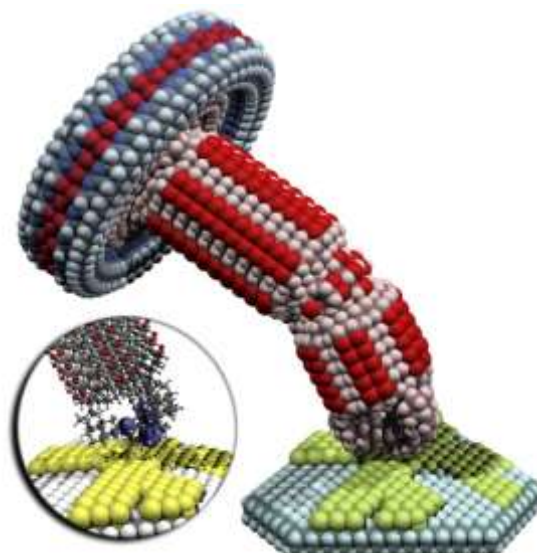
Η βαφή των αγγείων ήταν και αυτή ένα κολλοειδές αιώρημα από άργιλο, η οποία ήταν «διαλεγμένη» έτσι ώστε να έχει συγκεκριμένη χημική σύσταση. Μια επίσης πολύ συγκεκριμένη τεχνική όπτησης των αγγείων σε τρία στάδια με συγκεκριμένες θερμοκρασίες έκανε τη βαφή αυτή να θαλοποιείται «κλείνοντας» μέσα της νανοκρυστάλλους μαγνητίτη, οι οποίοι της έδιναν το χαρακτηριστικό μαύρο-μπλε χρώμα. Το μελανό υάλωμα των αττικών αγγείων έχει αποτελέσει επί χιλιετίες αντικείμενο ατυχών προσπαθειών μίμησης και επισταμένων μελετών. Η «νανοδιάστασή» του ανακαλύφθηκε πρόσφατα από Έλληνες ερευνητές, ενώ πρόσφατα προκάλεσε το ενδιαφέρον θυγατρικής εταιρίας της NASA, η οποία προσπαθεί να αντλήσει από αυτό έμπνευση για την ανάπτυξη βελτιωμένων κεραμικών επενδύσεων για διαστημικές εφαρμογές.

Η έννοια της Νανοτεχνολογίας εμφανίζεται σε μια ιστορική ομιλία του νομπελίστα φυσικού Richard P.Feynman την οποία έδωσε το 1959 στο ετήσιο συνέδριο της Αμερικανικής Ένωσης Φυσικών που διεξήχθη στο Τεχνολογικό Ινστιτούτο της Καλιφόρνια, με τίτλο Υπάρχει πολύς χώρος στον πυθμένα (There's Plenty of Room at the Bottom). Το 1965 ο Gordon Moore προέβλεψε ότι ο αριθμός των τρανζίστορ σε ένα μικροεπεξεργαστή θα διπλασιάζεται κάθε 18 μήνες, κάτι που επαληθεύτηκε στη πράξη και ονομάστηκε νόμος του Moore. Επίσης, το 1974 ο Norio Taniguchi, καθηγητής στο πανεπιστήμιο του Τόκιο δημοσιεύει μια από τις πλέον γνωστές εργασίες στην οποία αναφέρει ότι «η νάνο-τεχνολογία κυρίως συνίσταται στον διαχωρισμό, τη συνένωση και την παραμόρφωση υλικών σε ατομικό ή μοριακό επίπεδο». Έπειτα κομβικής σημασίας σταθμοί για την εξέλιξη της Νανοτεχνολογίας

είναι το 1981 η ανακάλυψη του Ηλεκτρονικού Μικροσκοπίου Σάρωσης (Scanning Electron Microscopy, SEM) (Σχήμα 1,1), καθώς και η πρώτη δημοσίευση με αντικείμενο τη κατασκευή προϊόντων με ακρίβεια ατόμου από τον Κ. Eric Drexler.

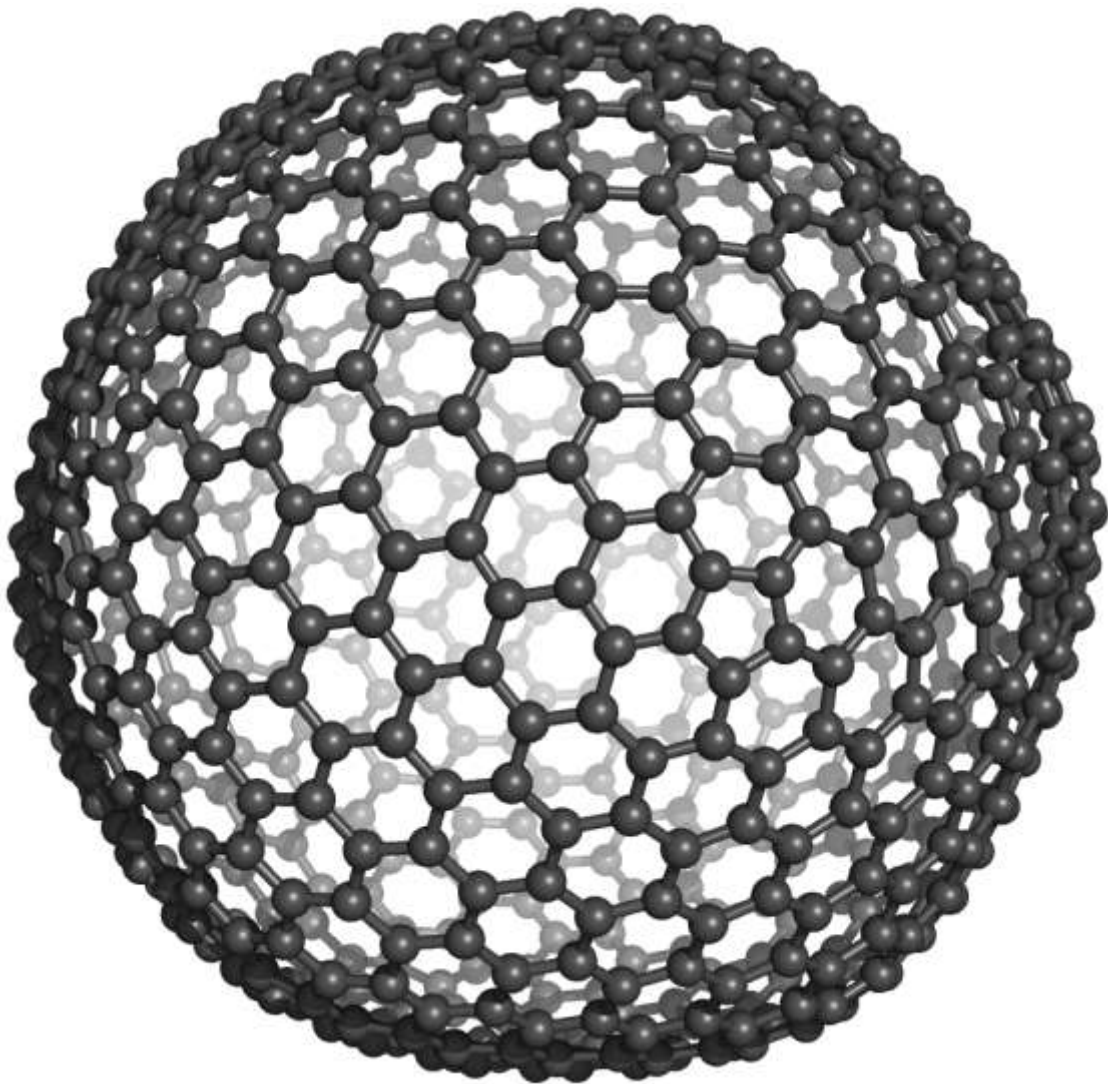


Σχήμα 1.1: Ηλεκτρονικό μικροσκόπιο σάρωσης



Σχήμα 1.2: Μηχανική σε νάνο-διαστάσεις

Ακόμα, σημαντικά χρονολογικά σημεία είναι το 1985 η ανακάλυψη των φουλερενίων (Σχήμα 1.3) και το 1986 η ανακάλυψη του Μικροσκοπίου Ατομικής Δύναμης (AFM), που συντέλεσαν στις ερευνητικές προσπάθειες στη νανοκλίμακα. Τέλος οι ανακαλύψεις των νανοσωλήνων άνθρακα το 1991 από τον S.Iijima και του φύλλου γραφενίου από τους A.K. Geim και K.S. Novoselov αποτελούν από τους σημαντικότερους σταθμούς στη πορεία της εξέλιξης της νανοτεχνολογίας (Σχήμα 1.2).



**Σχήμα 1.3:** Φουλερένιο

### 1.3 ΝΑΝΟΔΟΜΗΜΕΝΑ ΥΛΙΚΑ

Νανοδομημένα υλικά ονομάζονται τα υλικά με τη χαρακτηριστική μικροδομή μεγέθους νανοκλίμακας. Η μικροδομή αφορά τη χημικά σύνθεση, τη διάταξη των ατόμων (ατομική δομή) και το μέγεθος ενός στερεού σε μια, δύο, ή τρεις διαστάσεις. Οι πιθανοί παράγοντες που επηρεάζουν τις ιδιότητες των νανοδομημένων υλικών αφορούν επενέργειες λόγω μεγέθους( όπου η κρίσιμη κλίμακα μεγέθους των φυσικών φαινομένων είναι συγκρίσιμη με το χαρακτηριστικό μέγεθος των δομικών στοιχείων της μικροδομής), αλλαγές των διαστάσεων του συστήματος, αλλαγές της ατομικής δομής, καθώς και αλλαγές της χημικής σύστασης. Τα νανοϋλικά μπορούν να ομαδοποιηθούν σε:

- νανოსωματίδια (τα δομικά στοιχεία)
- νανοενδιάμεσα και
- νανοσύνθετα

Μπορούν να βρίσκονται ή να είναι πολύ μακριά από τη θερμοδυναμική ισορροπία. Για παράδειγμα, νανοδομημένα υλικά που αποτελούνται από κρυσταλλίτες μεγέθους νανομέτρων Au ή NaCl με διαφορετικούς κρυσταλλογραφικούς προσανατολισμούς και διαφορετικές χημικές συνθέσεις διαφέρουν σε μεγάλο βαθμό από τη θερμοδυναμική ισορροπία τους. Νανοϋλικά των οποίων η σύνθεση προκύπτει από υπερμοριακή χημεία μπορεί να αποδώσουν νανοσυστήματα τα οποία βρίσκονται σε θερμοδυναμική ισορροπία.

### 1.4 ΝΑΝΟΣΥΝΘΕΤΑ ΥΛΙΚΑ

Αν και οι όροι *νανοϋλικό* και *νανοσύνθετο* αντιπροσωπεύουν νέα πεδία στην Επιστήμη των Υλικών, στην πραγματικότητα τέτοια υλικά χρησιμοποιούνται εδώ και αιώνες και υπάρχουν γύρω μας στη φύση. Ωστόσο δεν είναι παρά τα τελευταία χρόνια που ο χαρακτηρισμός και ο έλεγχος της ύλης στις νανοδιαστάσεις, διερευνήθηκαν διεξοδικά. Ένα νανοσύνθετο ορίζεται ως ένα σύνθετο υλικό του οποίου κάποιο από τα συστατικά του έχει τουλάχιστον μια διάσταση στη νανοκλίμακα. Η πρόκληση και το ενδιαφέρον στην ανάπτυξη νανοσύνθετων υλικών

είναι να βρούμε τρόπους να δημιουργήσουμε μακροδομές που θα ωφελούνται από τις μοναδικές φυσικές και μηχανικές ιδιότητες των νανοδομών που θα υπάρχουν μέσα τους (Σχήμα 1.4).



**Σχήμα 1.4:** Παρασκευή νανοσύνθετου

Φυσικά υλικά όπως τα κόκκαλα, τα δόντια, είναι πολύ καλά παραδείγματα της πετυχημένης εφαρμογής αυτής της ιδέας, προσφέροντας άριστες μηχανικές ιδιότητες σε σχέση με αυτές των συστατικών τους. Τέτοια σύνθετα υλικά παρουσιάζουν πολύ καλά οργανωμένες δομές τόσο σε μακροσκοπικό επίπεδο, όσο και στις νανοδιαστάσεις. Συνήθως τα υλικά αυτά αποτελούνται από δύο συστατικά: το υλικό της ενίσχυσης, οι διαστάσεις του οποίου είναι στη νανοκλίμακα και τη μήτρα που φιλοξενεί την ενίσχυση και η οποία είναι ένα μαλακό υλικό, συνήθως πρωτεϊνικής φύσης.



Η νανοκλίμακα, όπως γίνεται κατανοητό, παίζει πολύ σημαντικό ρόλο. Από μηχανική άποψη, ο μηχανισμός για αυτά τα βιοσύνθετα είναι απλός: η μήτρα μεταφέρει τη φόρτιση μέσω διάτμησης στην ενίσχυση. Ένας μεγάλος λόγος μήκους προς τη διάμετρο (aspect ratio) της ενίσχυσης αντισταθμίζει το χαμηλό μέτρο ελαστικότητας της μαλακής πρωτεϊνικής μήτρας, οδηγώντας σε βελτιωμένη δυσκαμψία του σύνθετου. Επίσης η αντοχή στη θραύση των βιοσύνθετων εξαρτάται από τη μέγιστη αντοχή σε εφελκυσμό της ενίσχυσης. Έτσι, η χρήση νανοδομών επιτρέπει την προσέγγιση της μέγιστης θεωρητικής αντοχής υλικού, καθώς οι μηχανικές ιδιότητες δεν επηρεάζονται από ατέλειες στη νανοκλίμακα. Αυτή η παρατήρηση είναι μια επέκταση της κλασσικής προσέγγισης για ανθεκτικά υλικά, σύμφωνα με την οποία πρέπει να μειώνονται οι διαστάσεις τόσο ώστε να αποκλείονται τυχόν κρίσιμες ατέλειες. Γι' αυτό, χρησιμοποιούνται ως ενίσχυση υλικά με υψηλή κρυσταλλικότητα και με διαστάσεις σε νανόμετρα, οπότε όλες οι ατέλειες εκτός από τις ατομικές μπορούν να εξαλειφθούν (Σχήμα 1.5). Αυτή η εξερεύνηση των ιδιοτήτων σαν συνάρτηση των ατελειών δεν περιορίζεται μόνο στις μηχανικές, καθώς ένα μεγάλο εύρος από τις φυσικές ιδιότητες των υλικών επίσης εξαρτώνται από τη συγκέντρωση των ατελειών. Ακόμη, η μικρή κλίμακα μεγέθους μπορεί να δημιουργήσει διάφορα εγγενή φαινόμενα, για παράδειγμα μέσω του κβαντικού περιορισμού ή της δραματικής αύξησης της διεπιφανειακής περιοχής.



**Σχήμα 1.5:** Φωτογραφίες μεμβράνης νανοσωλήνων άνθρακα πολλαπλού τοιχίου(αριστερά), σκέτης εποξικής ρητίνης (μέση) και νανοσύνθετου (δεξιά)

Η ιδέα της ανάπτυξης δομικών και λειτουργικών νανοσύνθετων υλικών με βελτιωμένη συμπεριφορά βρίσκεται αυτή τη στιγμή στο επίκεντρο του ενδιαφέροντος για μια ευρεία ποικιλία μεταλλικών, κεραμικών και πολυμερικών μητρών, αν και έμφαση έχει δοθεί κυρίως στα πολυμερή υλικά. Τα υλικά ενίσχυσης μπορούν να είναι είτε οργανικά είτε ανόργανα, με πολύ μεγάλη ποικιλία συνδυασμών και δομών. Το σύνθετο που προκύπτει γενικά παρουσιάζει πλήθος βελτιωμένων ιδιοτήτων, τόσο ώστε να είναι δύσκολο να το διακρίνουμε σε δομικό ή λειτουργικό.

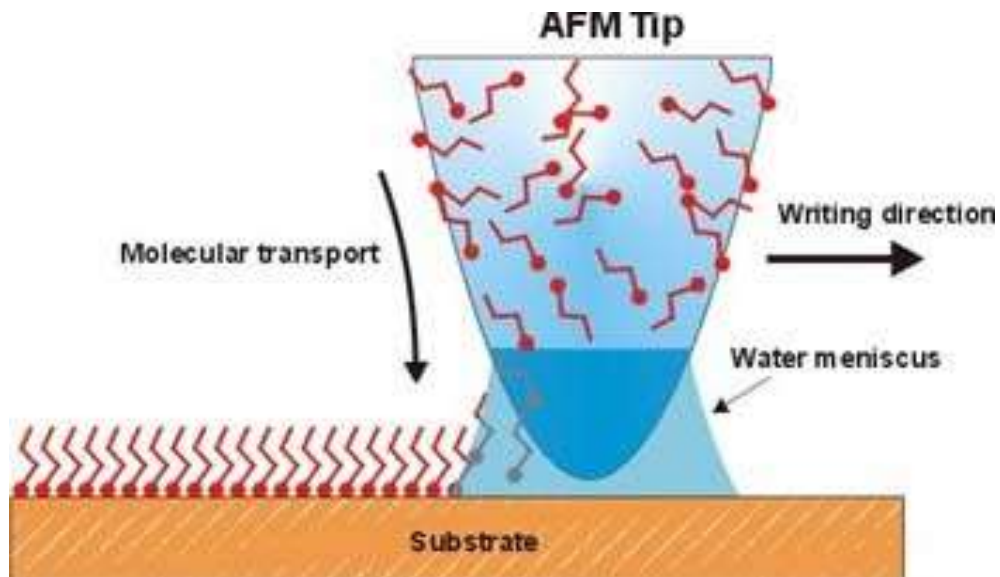
Μερικά από τα υλικά που χρησιμοποιούνται ευρέως ως υλικά ενίσχυσης είναι διάφορες αλλοτροπίες του άνθρακα, όπως οι νανοσωλήνες άνθρακα, τα φύλλα γραφενίου και άλλα. Οι νανοσωλήνες και τα φύλλα γραφενίου, τα οποία αποτελούν και τον πρόγονο των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου, έχουν προσελκύσει τα προηγούμενα χρόνια ιδιαίτερο ενδιαφέρον γιατί προβλέφθηκε αρχικά και στη συνέχεια αποδείχθηκε πειραματικά ότι έχουν αξιόλογες μηχανικές και φυσικές ιδιότητες. Ο συνδυασμός αυτών των ιδιοτήτων με τη χαμηλή τους πυκνότητα τα καθιστά ιδανικά υλικά για πολυμερικά σύνθετα υλικά υψηλής απόδοσης.

Παρ' όλο που τα τελευταία χρόνια έχουν γίνει μεγάλα βήματα για να ξεπεραστούν οι δυσκολίες στην παραγωγή πολυμερών νανοσυνθέτων, η διαδικασία παραγωγής αποτελεί «κλειδί» για την πλήρη εκμετάλλευση των ιδιοτήτων των νανοϋλικών της ενίσχυσης. Μια πρωταρχική δυσκολία είναι η επίτευξη καλής διασποράς της ενίσχυσης στη μήτρα. Αν δεν επιτευχθεί, τότε τα συσσωματώματα δρουν ως ατέλειες, γεγονός που περιορίζει τη μηχανική συμπεριφορά του συνθέτου. Τα συσσωματώματα αυτά επηρεάζουν τις φυσικές ιδιότητες του συνθέτου, όπως για παράδειγμα την οπτική διαπερατότητα.

## **1.5 NANOTECHNIES – NANOΣΥΣΚΕΥΕΣ**

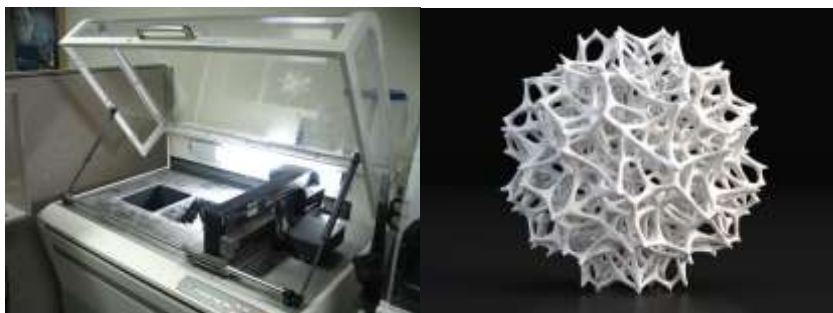
Τα νανοεργαλεία και οι νανοτεχνικές είναι μια υποκατηγορία της νανοτεχνολογίας και αποτελούν συσκευές που χειρίζονται υλικά και αντικείμενα σε νάνο και ατομικό επίπεδο. Χαρακτηριστικά παραδείγματα είναι συσκευές όπως τα μικροσκόπια

ατομικής δύναμης, μικροσκοπία σάρωσης και εργαλεία νανολιθογραφίας (Σχήμα 1.6). Ορισμένα άλλα νανοεργαλεία περιλαμβάνουν τεχνικές παραγωγής, τεχνικές ανάλυσης και μέσα μετρολογίας.



**Σχήμα 1.6:** Εργαλείο νανολιθογραφίας Dip Pen

Η ανάπτυξη λογισμικού υπολογιστικής νανοτεχνολογίας είναι μια σημαντική τεχνική για την έρευνα και την ανάπτυξη. Οι νανοτεχνικές χρησιμοποιούνται στη λιθογραφία, τη χημική εναπόθεση ατμού (CVD), την τρισδιάστατη εκτύπωση (Σχήμα 1.7), και τα νανορευστά σε τομείς εφαρμογών όπως η ιατρική διάγνωση και οι βιοαισθητήρες.



**Σχήμα 1.7:** τρισδιάστατος εκτυπωτής (αριστερά) και προϊόν εκτύπωσης (δεξιά)

Ως νανοσυσκευή μπορεί να θεωρηθεί κάθε πλήρες σύστημα με νανοδομημένα στοιχεία που ασκεί λειτουργίες, σε επίπεδο νανοκλίμακας. Η πρώτη νανοσυσκευή στην αγορά ήταν η κβαντική τελεία φθορισμού βιοανιχνευτών. Τα μικροηλεκτρομηχανικά συστήματα (MEMS) είναι μια άλλη σημαντική κατηγορία συσκευών που χρησιμοποιούνται χαρακτηριστικά ως επιταχυνσιόμετρα σε αερόσακους αυτοκινήτων. Πολλές άλλες υποσχόμενες εφαρμογές είναι σε εξέλιξη, όπως οι νανοηλεκτρονικές συσκευές μνήμης, οι νανοαισθητήρες και τα συστήματα χορήγησης φαρμάκων. Συνιστώσες των νανοσυσκευών είναι τα νανοϋλικά, τα ημιαγώγιμα οργανικά μόρια, τα πολυμερή και τα χημικά προϊόντα και τα υλικά υψηλής καθαρότητας.

## **1.6 NANOMΗΧΑΝΙΚΗ – ΜΟΡΙΑΚΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗ**

Η νανομηχανική είναι ένας κλάδος των νανοεπιστημών που μελετά τις θεμελιώδεις μηχανικές (ελαστικές, θερμικές και ηλεκτρικές) ιδιότητες των φυσικών συστημάτων στην νανοκλίμακα. Η νανομηχανική έχει προκύψει ως σταυροδρόμι της κλασικής μηχανικής, της φυσικής στερεάς κατάστασης, της στατιστικής μηχανικής, της επιστήμης των υλικών, και της κβαντικής χημείας. Ως περιοχή των νανοεπιστημών, η νανομηχανική παρέχει την επιστημονική βάση της νανοτεχνολογίας.

Τα κβαντικά φαινόμενα που εμπεριέχονται στις νανοδομές καθορίζουν δυνάμεις αλληλεπίδρασης μεταξύ μεμονωμένων ατόμων, οι οποίες εντάσσονται στη νανομηχανική δια μέσου μαθηματικών μοντέλων που ονομάζονται διατομικά δυναμικά. Η αξιοποίηση των διατομικών δυναμικών εντός της κλασικής δυναμικής παρέχει προσδιοριστικά μηχανικά μοντέλα νανοδομών και συστημάτων σε ατομική κλίμακα. Οι αριθμητικές μέθοδοι επίλυσης αυτών των μοντέλων μπορεί να είναι η μοριακή δυναμική ή η μοριακή μηχανική. Σύγχρονα αριθμητικά εργαλεία περιλαμβάνουν επίσης υβριδικές προσεγγίσεις πολυκλίμακας που επιτρέπουν την ταυτόχρονη ή διαδοχική χρήση των ατομιστικών μεθόδων και των συνεχών μεθόδων (μακροκλίμακας), συνήθως, την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων, σε ένα ενιαίο μαθηματικό μοντέλο. Η ανάπτυξη αυτών των σύνθετων μεθόδων είναι ένα ξεχωριστό αντικείμενο της έρευνας της εφαρμοσμένης μηχανικής.

Για την περιγραφή της ενέργειας μιας νανοδομής, θα πρέπει να ληφθούν υπόψη όλες οι διαφορετικές αλληλεπιδράσεις που συνυπάρχουν στο σύστημα. Το άθροισμα της ενέργειας όλων αυτών των αλληλεπιδράσεων είναι η βάση ενός δυναμικού πεδίου. Ένα δυναμικό πεδίο επιτρέπει τον υπολογισμό όλων των δυνάμεων του συστήματος, το οποίο με τη σειρά του δίνει την ενέργεια του συστήματος. Για να δημιουργηθεί ένα δυναμικό πεδίο, χρειαζόμαστε μια μαθηματική εξίσωση σε όρους ενέργειας καθώς και τις τυχόν απαιτούμενες παραμέτρους (σταθερές) για αυτές τις εξισώσεις. Οι εξισώσεις αυτές προέρχονται από την κλασική φυσική, και οι παράμετροι προέρχονται είτε από πειραματικά δεδομένα, είτε από υπολογισμούς κβαντικής μηχανικής υψηλότερου επιπέδου.

Γνωρίζοντας την δυναμική ενέργεια που διέπει τις διατομικές αλληλεπιδράσεις, το πρώτο βήμα είναι να βρεθεί η γεωμετρία ενός μορίου (ή μιας συναρμολόγησης μορίων) που αντιστοιχεί στο ελάχιστο δυναμικό της συνολικής ενέργειας. Η διαδικασία αυτή παράγει μια σταθερή, εξιδανικευμένη γεωμετρία του μορίου. Η ελαχιστοποίηση της δυναμικής ενέργειας (δηλαδή, η βελτιστοποίηση της γεωμετρίας μιας νανοδομής) περιλαμβάνει την αναζήτηση του ελάχιστου των συναρτήσεων, και συγκεκριμένα απαιτεί υπολογισμούς των παραγώγων των συναρτήσεων (στην προκειμένη περίπτωση, του ενεργειακού δυναμικού), σε σχέση με τις ανεξάρτητες μεταβλητές που εδώ είναι οι συντεταγμένες (συνήθως οι καρτεσιανές) των ατόμων της δομής.

Η χρησιμότητα της μοριακής μηχανικής εξαρτάται σημαντικά από την ανάπτυξη πεδίων δυνάμεων ακριβείας. Πεδία δυνάμεων καλής ποιότητας έχουν αναπτυχθεί για ένα ευρύ φάσμα ενώσεων, συμπεριλαμβανομένων και πολλών ενώσεων με ενδιαφέρον στη βιοχημεία. Ένα συγκεκριμένο υ965 υποσύνολο ενώσεων για τις οποίες διατίθενται καλής ποιότητας πεδία περιλαμβάνουν H, C, N, O, F, Si, P, S, Cl όταν περιορίζονται στο να σχηματίζουν απλές χημικά δομές. Πολλές ατομικά ακριβείς δομές που θα μπορούσαν να είναι χρήσιμες στη νανοτεχνολογία εμπίπτουν σε αυτή την κατηγορία και μπορούν να διαμορφωθούν με αρκετή ακρίβεια για να καθορίσουν τη συμπεριφορά των μοριακών μηχανών.

## 1.7 ΠΕΡΙΓΡΑΦΗ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟΥ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΟΣ

Νανοτεχνολογία νοείται η δυνατότητα ελέγχου ή χειρισμού υλικών σε ατομική κλίμακα με στόχο την παραγωγή δομών με πρωτότυπες ιδιότητες και λειτουργίες που οφείλονται στο μέγεθός τους, στο σχήμα τους ή στη σύνθεσή τους. Δημιουργούνται νέα νοήμονα υλικά διαφορετικού μεγέθους και σχήματος σε νανοκλίμακα, τα οποία χαρακτηρίζονται από εξαιρετικές ιδιότητες όπως ηλεκτρικές, οπτικές, φυσικές, χημικές, κ.ά. Στο επίπεδο της νανοκλίμακας οι ιδιότητες αυτές των υλικών μπορεί να είναι εντελώς διαφορετικές από τις ιδιότητες των ίδιων υλικών σε συμβατική κλίμακα. Τα νέα αυτά πολυλειτουργικά υλικά οφείλουν τις μοναδικές τους λειτουργικές δυνατότητες στις νανοδομές από τις οποίες προήλθαν. Η επιστήμη των νανοϋλικών, δηλαδή των υλικών που περιέχουν δομημένες μονάδες (π.χ. φύλλα γραφενίου) στην κλίμακα του νανόμετρου, είναι η ταχύτερα αναπτυσσόμενη περιοχή στην επιστήμη των υλικών και της τεχνολογίας. Πιο συγκεκριμένα, η ικανότητα χειρισμού μορίων με μακρομηχανική ακρίβεια οδήγησε στη δημιουργία υλικών και συσκευών σε επίπεδο νανοκλίμακας (νανοδομών) με έμφυτα πλεονεκτήματα σε σχέση με τις αντίστοιχες διατάξεις της μακροκλίμακας. Το πολύ μικρό μέγεθος στο οποίο αναφέρεται η νανοτεχνολογία έθεσε εξ αρχής την ανάγκη δημιουργίας προτύπων. Τα κλασσικά πρότυπα (models) που χρησιμοποιούνται στην επιστήμη έχουν διαφορετικές φύσεις. Πρώτα από όλα, χρησιμοποιούνται για απλοποίηση. Δεύτερον, χρησιμοποιούνται ως διδακτικές απεικονίσεις περίπλοκων καταστάσεων που δεν είναι εύκολα παρατηρήσιμες, αν και τα πρότυπα δεν απεικονίζουν επακριβώς την πραγματικότητα. Το τρίτο πλεονέκτημα αφορά τις μηχανικές αναλογίες που διατηρούν τα πρότυπα. Η εμπειρική τους των προτύπων επιτρέπει ρύθμιση ή βελτιστοποίηση των παραμέτρων ώστε να συμβαδίζουν με την πραγματικότητα. Αξίζει δε να σημειωθεί ότι τα πρότυπα βασίζονται σε μαθηματική μοντελοποίηση πράγμα που σημαίνει ότι έχουν θεωρητικό υπόβαθρο. Μία ευκαιρία δημιουργίας προτύπων παρέχουν οι υπολογιστικές διαδικασίες, καθώς προσφέρουν δυνατότητες όχι μόνο προσέγγισης των φαινομένων, αλλά και απεικόνισης αυτών. Για το λόγο αυτό, από το ξεκίνημα της νανοτεχνολογίας, η υπολογιστική προσομοίωση έχει κεντρικό ρόλο στην ανάλυση της συμπεριφοράς των νανοσυστημάτων. Η επιλογή αυτή, όμως, οφείλεται και σε ειδικότερους λόγους. Πρώτον, οι ενεργειακές παράμετροι που παράγονται από το δυναμικό πεδίο της μοριακής μηχανικής είναι ουσιώδεις στον υπολογισμό και εξορθολογισμό της δομής. Δεύτερον, τα πρότυπα

δεν καταστρώνονται με το χέρι, αλλά δομούνται και πιστοποιούνται αυτόματα με εφαρμογή κατάλληλων αλγόριθμων. Επομένως, η προσπάθεια καταναλώνεται στην ανάπτυξη αλγορίθμων και προσαρμογή των πειραματικών δεδομένων. Τρίτον, η αφθονία δυναμικής πληροφορίας που παρέχει η υπολογιστική προσομοίωση καθώς και η ακρίβεια αυτής την καθιστά μοναδικό εργαλείο στην ανάλυση νανοτεχνολογικών εφαρμογών. Η υπολογιστική νανοτεχνολογία είναι ένας ταχέως εξελισσόμενος τομέας που χρησιμοποιείται για την προσομοίωση των νανοδομών ώστε να γίνει κατανοητός και να προβλεφθεί η συμπεριφορά αυτών σε μοριακό επίπεδο. Έχει δε σημαντικό ρόλο στην ανάπτυξη της νανοτεχνολογίας. Οι κλίμακες του μήκους και του χρόνου στις νανοδομές αλλά και τα φαινόμενα που τις διέπουν έχουν συρρικνωθεί σε τέτοιο βαθμό ώστε να μπορούν να προσομοιωθούν άμεσα και με ακρίβεια εφαρμόζοντας την υπολογιστική τεχνολογία και τη θεωρία της μοντελοποίησης. Η ταχέως αυξανόμενη υπολογιστική ισχύς που χρησιμοποιείται για μεγάλης κλίμακας και υψηλής αξιοπιστίας προσομοιώσεις καθιστά ικανές τις προσομοιώσεις σε επίπεδο νανοκλίμακας, που εξελίσσονται πλέον σε προβλεπτικές. Η υπολογιστική νανοτεχνολογία είναι ανερχόμενη με τη μορφή εργαλείου θεμελιώδους τεχνολογικής ανάλυσης για το σχεδιασμό νανοσυσκευών, όπως ακριβώς χρησιμοποιείται η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων για την ανάλυση και το σχεδιασμό των περισσότερων τεχνολογικών συστημάτων. Η αύξηση του αριθμού των ερευνητικών εργασιών που χρησιμοποιούν υπολογιστική τεχνολογία για να προσομοιώσουν τις ιδιότητες των νανοσωλήνων και γενικότερα των νανοδομών ή νανομηχανών βασίζεται στη διαθεσιμότητα υπολογιστικών αλγόριθμων και υπολογιστικής ισχύος που απαιτούνται για τις βαρυσήμαντες μελέτες. Οι προσομοιώσεις σε επίπεδο νανομηχανικής έχουν τεράστιες απαιτήσεις όσον αφορά τις διαστάσεις του προβλήματος, την διαθέσιμη μνήμη, και το χρόνο υπολογισμών. Αυτό συμβαίνει διότι όσο μικραίνει το μέγεθος του αντικειμενικού όγκου αναφοράς αυξάνει η απαίτηση λεπτομερούς προσομοίωσης των σωματιδιακών αλληλεπιδράσεων. Για να γεφυρωθεί αυτό το κενό, είναι αναγκαία η επιτάχυνση των αλγορίθμων και του λογισμικού, πέρα από τα πλεονεκτήματα που προσφέρει η υπολογιστική τεχνολογία. Όμως μόνο οι παράμετροι αυτές δεν είναι αρκετές για την επίτευξη του στόχου. Κατά προσθήκη, υπάρχει ανάγκη για μία βελτιωμένη φυσική προτυποποίηση παράλληλα με την ανάπτυξη νέων θεωρητικών αρχών και αλγορίθμων.

## 2. ΑΖΩΤΟ, ΒΟΡΙΟ ΚΑΙ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ

### 2.1 ΒΟΡΙΟ

Το βόριο είναι το χημικό στοιχείο με σύμβολο B και ατομικό αριθμό 5. Είναι το πρώτο μέλος και μοναδικό αμέταλλο στοιχείο της 13 ομάδας του περιοδικού πίνακα των στοιχείων. Παρουσιάζει αρκετές αλλοτροπικές μορφές, που όλες είναι στερεές. Είναι στερεό, είτε κρυσταλλικό, είτε άμορφο, με χημικές ιδιότητες που το κατατάσσουν στην ιδιαίτερη ομάδα των μεταλλοειδών, δηλαδή χημικών στοιχείων που άλλοτε συμπεριφέρονται ως μέταλλα και άλλοτε ως αμέταλλα.

1																	2		
H																	He		
3	4													6	7	8	9	10	
Li	Be													B	C	N	O	F	Ne
11	12													13	14	15	16	17	18
Na	Mg													Al	Si	P	S	Cl	Ar
19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36		
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr		
37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54		
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe		
55	56	57-70	71	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	
Cs	Ba	* * *	Lu	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
87	88	* * *	89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103	104	
Fr	Ra	* * *	Lr	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Uun	Uuu	Uub	Uuq	Uur	Uus	Uut	Uuq	Uuq	

* Lanthanide series													
57	58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70
La	Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb
** Actinide series													
89	90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102
Ac	Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No

Σχήμα 2.1: Θέση και στοιχεία βορίου στον περιοδικό πίνακα

Το άμορφο βόριο έχει μορφή καφέ σκόνης, ενώ το κρυσταλλικό είναι μαύρο και πολύ σκληρό (έχει σκληρότητα 9,13/12 στην κλίμακα Mohs).



Στον φλοιό της γης δεν βρέθηκε ποτέ ελεύθερο, δηλαδή σε στοιχειακή μορφή, παρά μόνο σε ενώσεις με άλλα χημικά στοιχεία κυρίως με τη μορφή του ορυκτού βόρακα (τετραβορικό νάτριο). Το όνομα του (Boron) προέρχεται από την περσική λέξη *burah* που είναι το όνομα του ορυκτού βόρακα.

Το βόριο απαντάται στη φύση σε δύο σταθερά ισότοπα, το  $^{10}\text{B}$  και  $^{11}\text{B}$ , σε αναλογία περίπου 20% και 80% αντίστοιχα. Αυτά τα ισότοπα και η ποικιλία στην αναλογία τους σε σχέση με το κοίτασμα από το οποίο προέρχονται, εμποδίζει τον προσδιορισμό του ατομικού βάρους με μεγαλύτερη ακρίβεια ( $^{10}\text{B}=10,012939$  και  $^{11}\text{B}=11,009305$ ).

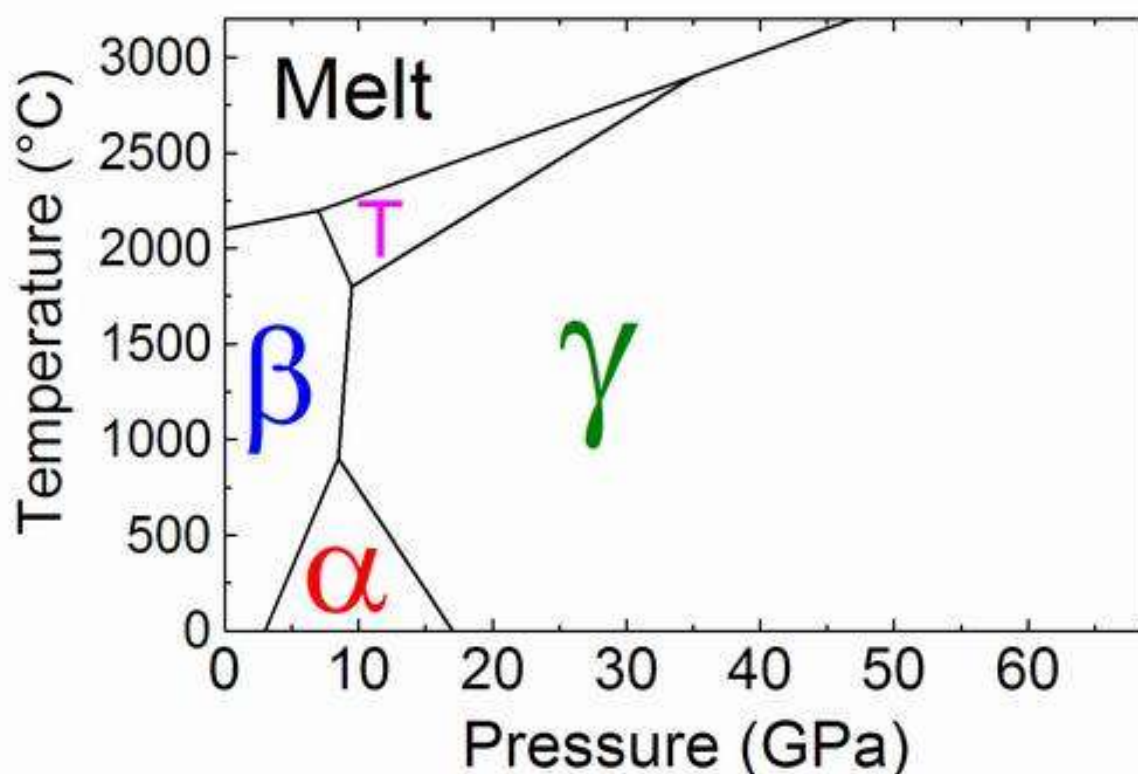
Παρόμοια προβλήματα στον προσδιορισμό των φυσικών ιδιοτήτων του προκαλούν και οι πολλές διαφορετικές φυσικές μορφές με τις οποίες εμφανίζεται αλλά και το γεγονός ότι συνήθως περιέχει προσμίξεις ιδιαίτερα δύσκολο να απομακρυνθούν.

Το βόριο σε καθαρή μορφή είναι σκούρο καφέ ή μαύρο στερεό, συνήθως άμορφο (σκόνη) αλλά και κρυσταλλικό. Είναι εξαιρετικά σκληρό και πυρίμαχο στερεό με υψηλό σημείο τήξεως και σχετικά χαμηλή πυκνότητα. Είναι κακός αγωγός του ηλεκτρισμού υπό κανονικές συνθήκες αλλά μετατρέπεται σε καλό αγωγό σε υψηλές θερμοκρασίες.

Φάση Βορίου	A	B	C
Συμμετρία	Ρομβοειδής	Ρομβοειδής	Ορθορομβική
Άτομα/Μονάδα	12	105	28
Πυκνότητα (g/cm <sup>3</sup> )		2,35	2,52
Σκληρότητα (GPa)	42	45	50-58
Bulk Modulus (GPa)	185	224	227
Bandgap (eV)	2	1,6	2,1

**Πίνακας 2.1:** Ιδιότητες βορίου ανάλογα την φάση στην οποία βρίσκεται

Το άμορφο Βόριο είναι προϊόν αρκετών χημικών αντιδράσεων. Περιέχει βόριο εικοσαεδρικό, όπου κάθε άτομο βορίου είναι τυχαία συνδεδεμένο με άλλα, χωρίς μεγάλης κλίμακας τάξη. Το κρυσταλλικό βόριο είναι πολύ σκληρό μαύρο στερεό με πολύ υψηλό σημείο τήξης.



Σχήμα 2.2: Διάγραμμα φάσεων βορίου

Το βόριο έχει παρόμοια με τον άνθρακα ικανότητα να σχηματίζει σταθερούς δεσμούς ομοιοπολικούς δεσμούς και μοριακές κατασκευές. Επίσης το βόριο χρησιμοποιήθηκε σε θερμοάντοχα κράματα. Αν και η αναμενόμενη και συνηθισμένη οξειδωτική του κατάσταση είναι +3, σχηματίζει και ενώσεις με άλλες.

Η κρυσταλλική δομή του βορίου είναι από τις πιο περίπλοκες ανάμεσα στα χημικά στοιχεία. Αυτό οφείλεται στην ποικιλία των τρόπων με τους οποίους το άτομο προσπαθεί να λύσει τα προβλήματα του ηλεκτρονιακού ελλείματος. Η δομή που κυριαρχεί είναι αυτή του εικοσαέδρου B12, η οποία επίσης παρατηρείται στις δομές πολλών μεταλλικών βοριδίων και βορανίων. Η δομή αυτή αφήνει μεγάλα κενά

ανάμεσα στα άτομα, ικανά να φιλοξενήσουν επιπλέον άτομα βορίου ή μετάλλων. Ακόμα και στην πυκνότερη δομή, την α-ρομβοεδρική, το ποσοστό του χώρου που είναι κατειλημμένο είναι μόλις 37% (σε σχέση με το μέγιστο 74% για σφαίρες). Η α-ρομβοεδρική περιλαμβάνει κανονικά εικοσάεδρα  $B_{12}$  τοποθετημένα σε μια ελαφρώς παραμορφωμένη κυβική δομή μέγιστης πυκνότητας. Η πιο θερμοδυναμικά σταθερή δομή είναι η β-ρομβοεδρική, αρκετά πιο περίπλοκη και αποτελούμενη από 105 άτομα βορίου. Τέλος, η πρώτη κρυσταλλική δομή που παρασκευάστηκε (1943) ονομάστηκε α-τετραγωνική βορίου και περιέχει 50 άτομα ( $4B_{12} + 2B$ ). Στη συνέχεια (1974) όμως ανακαλύφθηκε ότι αυτή η μορφή εμφανίζεται μόνο παρουσία άνθρακα ή αζώτου ως πρόσμιξη, με αποτέλεσμα στην πραγματικότητα να είναι  $B_{50}C_2$  ή  $B_{50}N_2$ .

## 2.2 ΑΖΩΤΟ

Το Αζωτο (Nitrogenium) είναι χημικό στοιχείο που ανήκει στα αμέταλλα, έχει σύμβολο N και ατομικό αριθμό 7. Στη συνηθισμένη μορφή και κάτω από Κανονικές Συνθήκες είναι διατομικό αέριο, άχρωμο, άοσμο, άγευστο και σχετικά αδρανές στις Κ.Σ. Η λέξη άζωτο προέρχεται ετυμολογικά από τις λέξεις «α-» (στερητικό) και «ζωή». Έχει την έννοια ότι δεν υποστηρίζει τη ζωή όπως το οξυγόνο.

The image shows a standard periodic table of elements. The element Nitrogen (N) is circled in red. Below the main table, there are two smaller tables: the Lanthanide series and the Actinide series.

1	H																	2	He																
3	Li	4	Be											5	B	6	C	7	N	8	O	9	F	10	Ne										
11	Na	12	Mg											13	Al	14	Si	15	P	16	S	17	Cl	18	Ar										
19	K	20	Ca	21	Sc	22	Ti	23	V	24	Cr	25	Mn	26	Fe	27	Co	28	Ni	29	Cu	30	Zn	31	Ga	32	Ge	33	As	34	Se	35	Br	36	Kr
37	Rb	38	Sr	39	Y	40	Zr	41	Nb	42	Mo	43	Tc	44	Ru	45	Rh	46	Pd	47	Ag	48	Cd	49	In	50	Sn	51	Sb	52	Te	53	I	54	Xe
55	Cs	56	Ba	57-71	* * *	72	Hf	73	Ta	74	W	75	Re	76	Os	77	Ir	78	Pt	79	Au	80	Hg	81	Tl	82	Pb	83	Bi	84	Po	85	At	86	Rn
87	Fr	88	Ra	89-103	* * *	104	Lr	105	Rf	106	Db	107	Sg	108	Bh	109	Hs	110	Mt	111	Uun	112	Uub	113	Uuq										

*Lanthanide series																											
57	La	58	Ce	59	Pr	60	Nd	61	Pm	62	Sm	63	Eu	64	Gd	65	Tb	66	Dy	67	Ho	68	Er	69	Tm	70	Yb
**Actinide series																											
89	Ac	90	Th	91	Pa	92	U	93	Np	94	Pu	95	Am	96	Cm	97	Bk	98	Cf	99	Es	100	Fm	101	Md	102	No

Σχήμα 2.3: Θέση και στοιχεία αζώτου στον περιοδικό πίνακα

Είναι το πιο διαδεδομένο χημικό στοιχείο του ατμοσφαιρικού αέρα της Γης, αποτελώντας το 78% του όγκου του και απαραίτητο συστατικό όλων των ζωντανών οργανισμών. Θεωρείται το πέμπτο πιο διαδεδομένο συστατικό του σύμπαντος.

Ελεύθερο άζωτο (διάζωτο, εφόσον αποτελείται από διατομικά μόρια) έχει βρεθεί σε μετεωρίτες, στον ήλιο και άλλα άστρα και νεφελώματα, ενώ είναι βασικό συστατικό της ατμόσφαιρας του Τιτάνα. Ενωμένο βρίσκεται σε όλους τους ζωντανούς ιστούς με τη μορφή πρωτεϊνών, αμινοξέων και άλλων χημικών ενώσεων.

Το Άζωτο σχηματίζει πολλές σημαντικές βιομηχανικά και βιοχημικά σημαντικές ενώσεις, όπως: αμμωνία, νιτρικό οξύ, νιτροενώσεις, αμίνες, αμινοξέα, νιτρίλια, νουκλεϊκά οξέα, καθώς και πλήθος άλλων ανόργανων και οργανικών ενώσεων. Η νανοτεχνολογία ερευνά εφαρμογές σε διάφορες τεχνητές αλλοτροπικές μορφές και χημικές ενώσεις μοριακού μεγέθους.

Τα άζωτο είναι αέριο, άχρωμο, άοσμο, άγευστο, ελαφρότερο του αέρα. Ο τριπλός δεσμός ανάμεσα στα δύο άτομα που αποτελούν το μόριο του αζώτου ( $N_2$ ) θεωρείται από τους ισχυρότερους στη φύση, με αποτέλεσμα να είναι αδρανές αέριο, ιδιαίτερα σε συνηθισμένες θερμοκρασίες. Διαλύεται ελάχιστα στο νερό, δεν είναι δηλητηριώδες, αλλά ασφυκτικό. Δεν καίγεται, αλλά έχει παρατηρηθεί ότι ορισμένα στοιχεία μπορούν να «καούν» σε άζωτο, όπως το μαγνήσιο στους 300 °C και το λίθιο ακόμα και σε θερμοκρασία δωματίου, παράγοντας κρυσταλλικά μεταλλικά νιτρίδια. Όταν θερμανθεί υπό πίεση με το υδρογόνο παρουσία καταλύτη, σχηματίζεται αμμωνία.

Το φυσικό άζωτο στη Γη αποτελείται από μείγμα δύο σταθερών ισοτόπων του, το  $^{14}N$  (99,63%) και το  $^{15}N$  (0,37%). Από τα υπόλοιπα γνωστά ραδιενεργά ισότοπα, το  $^{13}N$  έχει χρόνο ημιζωής περίπου δέκα λεπτά ενώ τα υπόλοιπα λίγα δευτερόλεπτα ή και λιγότερο.

Το μόριο του αζώτου δεν έχει διπολική ροπή και έτσι είναι διάφανο στην υπέρυθη και ορατή ακτινοβολία. Αντίθετα, σημαντική απορρόφηση υπεριώδους φωτός παρουσιάζεται σε μήκος κύματος περίπου 100 nm.

Εξαιτίας της αδράνειάς του, το *αέριο* άζωτο χρησιμοποιείται ευρέως από τη χημική βιομηχανία ως αδρανές "κάλυμμα" για την προστασία μίας ουσίας από ανεπιθύμητη επαφή με το οξυγόνο και την υγρασία. Έτσι, χρησιμοποιείται για τη διατήρηση

τροφών, ως ασφαλές κάλυμμα υγρών εκρηκτικών, στην παραγωγή ολοκληρωμένων κυκλωμάτων και ανοξειδωτού χάλυβα.

Η χαμηλή θερμοκρασία και η αδράνεια του αζώτου στην υγρή κατάσταση, το καθιστά κατάλληλο ως ψυκτικό για μια πλειάδα χρήσεων όπως για τη μεταφορά τροφίμων και άλλων προϊόντων, για τα οποία υπάρχει κίνδυνος αλλοίωσης τους, για τη διατήρηση βιολογικών δειγμάτων, αίματος και αναπαραγωγικών κυττάρων (σπέρματος και ωαρίων), στην έρευνα στον τομέα της κρυογονικής και άλλα.

Το μεγαλύτερο μέρος του στοιχειακού αζώτου καταναλώνεται για την παραγωγή σημαντικών βιομηχανικών ενώσεων του.

Έτσι, μεγάλες ποσότητες αζώτου χρησιμοποιούνται μαζί με υδρογόνο για την συνθετική παραγωγή αμμωνίας, μίας από τις δύο σημαντικότερες εμπορικές αζωτούχες ενώσεις. Στη συνέχεια μέρος της αμμωνίας χρησιμοποιείται ως πρώτη ύλη για την παραγωγή νιτρικού οξέος, νιτρικών αλάτων και ανθρακικής σόδας. Επίσης, από αμμωνία παρασκευάζεται η υδραζίνη,  $N_2H_4$ , ένα άχρωμο υγρό που χρησιμοποιείται ως καύσιμο πυραύλων και σε άλλες βιομηχανικές εφαρμογές.

Η δεύτερη σημαντικότερη αζωτούχος ένωση είναι το νιτρικό οξύ, ένα εξαιρετικά διαβρωτικό υγρό, που βρίσκει εφαρμογή στην παραγωγή λιπασμάτων, χρωμάτων, φαρμάκων και εκρηκτικών. Το νιτρικό αμμώνιο,  $NH_4NO_3$ , είναι η πιο συνηθισμένη αζωτούχος ένωση των συνθετικών λιπασμάτων.

Το άζωτο επίσης μπορεί να ενωθεί με το οξυγόνο δίνοντας διάφορα οξειδία του αζώτου: α) Το υποοξείδιο του αζώτου ή αέριο του γέλωτος (laughing gas),  $N_2O$ , το οποίο χρησιμοποιείται ως αναισθητικό, β) Το μονοοξείδιο του αζώτου,  $NO$ , το οποίο αντιδρά ταχύτατα με οξυγόνο προς διοξείδιο του αζώτου και είναι σημαντικός ατμοσφαιρικός ρύπος, γ) Το διοξείδιο του αζώτου,  $NO_2$ , ενδιάμεσο στην παραγωγή του νιτρικού οξέος και ισχυρό οξειδωτικό. Άλλα δύο οξειδία, το τριοξείδιο του διαζώτου ( $N_2O_3$ ) και το πεντοοξείδιο του διαζώτου ( $N_2O_5$ ), είναι πολύ ασταθή και εκρηκτικά.

Τα αζίδια, ανόργανα ή οργανικά, είναι ενώσεις που περιέχουν μία ομάδα τριών ατόμων αζώτου ( $-N_3$ ) και είναι εξαιρετικά ευαίσθητα σε δονήσεις και ασταθή. Κάποια από αυτά, όπως το αζίδιο του μολύβδου ή αζωτούχος μόλυβδος,  $Pb(N_3)_2$ , χρησιμοποιούνται ως πυροκροτητές.

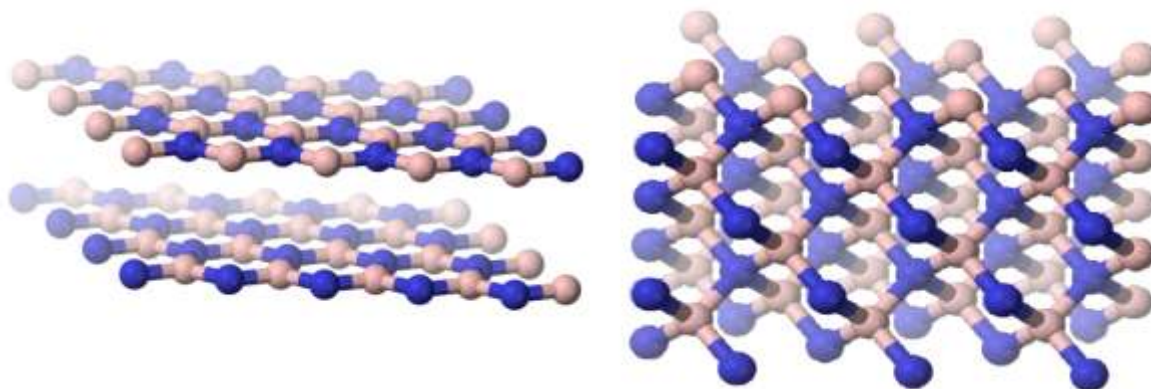
Τέλος, μια μεγάλη ποικιλία οργανικών ενώσεων έχουν ως βασικό συστατικό το άζωτο, όπως είναι τα αμινοξέα, οι αμίνες και τα αμίδια, και η νιτρογλυκερίνη.

	Άζωτο	Βόριο
Ατομικές Ιδιότητες		
Ατομική ακτίνα	92 pm	98 pm
Ομοιοπολική ακτίνα	75 pm (N-) 65 pm (N=) 58 pm (N≡)	82 pm (sp <sup>2</sup> )
Ηλεκτραρνητικότητα	3,04 (κλίμακα Pauling)	2,04
Κυριότεροι αριθμοί οξείδωσης	0, ±3, ±5	±3
Ενέργειες ιονισμού	1.402,3 kJ/mole (N → N <sup>+</sup> + e <sup>-</sup> ) 2.856 kJ/mole (N <sup>+</sup> → N <sup>2+</sup> + 2e <sup>-</sup> ) 4.858,1 kJ/mole (N <sup>2+</sup> → N <sup>3+</sup> + 3e <sup>-</sup> )	1η:800,6 kJ/mol (B <sub>(g)</sub> → B <sup>+</sup> <sub>(g)</sub> + e <sup>-</sup> ) 2η:2.427,1 kJ/mol (B <sup>+</sup> <sub>(g)</sub> → B <sup>2+</sup> <sub>(g)</sub> + e <sup>-</sup> ) 3η:3.659,7 kJ/mol (B <sup>2+</sup> <sub>(g)</sub> → B <sup>3+</sup> <sub>(g)</sub> + e <sup>-</sup> )
Φυσικά Χαρακτηριστικά		
Σημείο τήξης	-209,86 °C (63,29 K)	2,076 °C (2.349,16 K)
Σημείο βρασμού	-195,79 °C (77,36 K)	3.927 °C (4.200,16 K)
Πυκνότητα	1,2506 kg/m <sup>3</sup> (0 °C, 1 atm)	2.340 kg/m <sup>3</sup>
Ενθαλπία τήξης	0.72 kJ·mol <sup>-1</sup>	50.2 kJ·mol <sup>-1</sup>
Ενθαλπία εξάτμισης	5.56 kJ·mol <sup>-1</sup>	480 kJ·mol <sup>-1</sup>
Ειδική θερμοχωρητικότητα	29.124 J·mol <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup> (25 °C) (N <sub>2</sub> )	11.087 J·mol <sup>-1</sup> ·K <sup>-1</sup> (20°)
Μαγνητική συμπεριφορά	διαμαγνητικό	διαμαγνητικό

**Πίνακας 2.2:** Συγκριτικός πίνακας ιδιοτήτων βορίου και αζώτου

## 2.3 ΝΙΤΡΙΔΙΟ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ

Το νιτρίδιο του βορίου είναι μια χημική ένωση με χημικό τύπο BN, η οποία αποτελείται από ίσου αριθμού άτομα βορίου και αζώτου. Το νιτρίδιο του βορίου είναι ισοηλεκτρονικό υλικό με μορφή παρόμοια με την δικτυωτή του άνθρακα και έτσι συναντάται σε αρκετούς κρυσταλλικούς τύπους. Η εξαγωγική μορφή αντίστοιχη με αυτή του γραφίτη αποτελεί την πιο σταθερή του νιτρίδιου του βορίου ανάμεσα στις πολλές και έτσι χρησιμοποιείται ως λιπαντικό καθώς και ως πρόσθετο σε προϊόντα κοσμητολογίας (καλλυντικά). Η κυβική μορφή (cubic structure) είναι ανάλογη με του διαμαντιού και ονομάζεται c-BN. Η σκληρότητα του είναι κατώτερη μόνο από αυτή του διαμαντιού αλλά η θερμική και χημική σταθερότητα του είναι εξαιρετική. Η εξαγωγική μορφή (hexagonal structure) είναι αυτή που χρησιμοποιείται στα νανοφύλλα και τους νανοσωλήνες, αποτελείται από εξάγωνα όπου στις κορυφές του υπάρχουν άτομα αζώτου και βορίου και ονομάζεται h-BN.

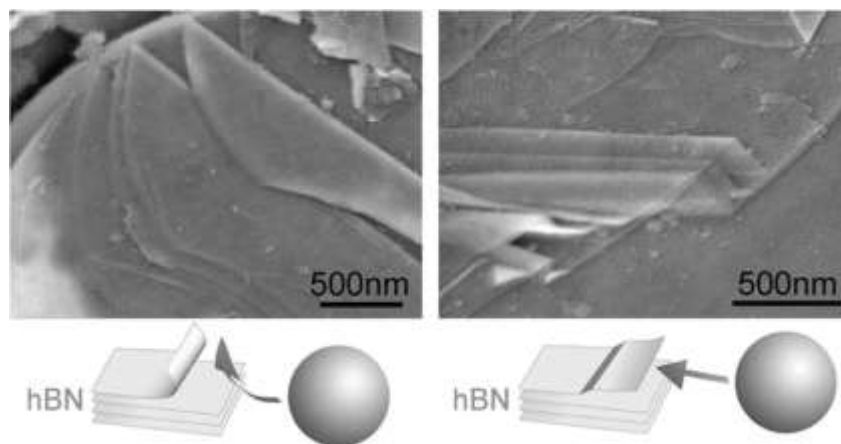


**Σχήμα 2.4:** Εξαγωγική και κυβική μορφή του νιτρίδιου του βορίου σε τρισδιάστατη απεικόνιση

Το νιτρίδιο του βορίου δεν συναντάται στη φύση αντιθέτως παράγεται με συνθετικές μεθόδους από το βορικό οξύ ή το τριοξείδιο του βορίου. Το αρχικό προϊόν είναι άμορφη σκόνη νιτρίδιου του βορίου η οποία μετατρέπεται σε κρυσταλλικό h-

BN, θερμαίνοντας σε ροή αζώτου σε θερμοκρασίες άνω των 1500ο C. Το c-BN με διαδικασία ανόπτησης της σκόνης h-BN σε ακόμα μεγαλύτερες θερμοκρασίες και πιέσεις της τάξης των 5GPa. Αντίθετα με το διαμάντι, μεγαλύτερου μεγέθους σφαιρίδια c-BN μπορούν να κατασκευαστούν συσσωματώνοντας σχετικά φθηνότερες σκόνης c-BN. Ως αποτέλεσμα το c-BN χρησιμοποιείται συχνά σε μηχανολογικές εφαρμογές.

Εξαιτίας της εξαιρετικής θερμικής και χημικής σταθερότητας του νιτριδίου του βορίου, κεραμικά τα οποία το περιέχουν στη σύνθεσή τους χρησιμοποιούνται παραδοσιακά ως μέρη εξοπλισμού υψηλής θερμικής αντοχής.

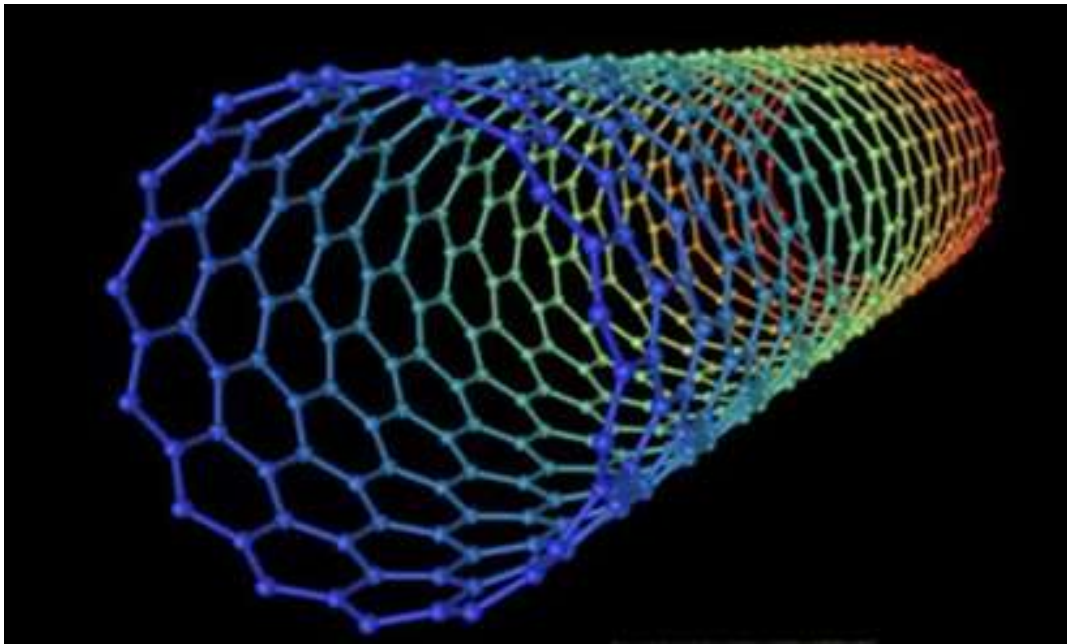


**Σχήμα 2.5:** Εικόνα εξαγωγικού νιτριδίου του βορίου από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο

## 2.4 ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΑΝΘΡΑΚΑ

Η ανακάλυψη των φουλερενίων αποτέλεσε το πρόδρομο για την ανακάλυψη και των νανοσωλήνων άνθρακα, που είναι ακόμα μία από τις αλλοτροπικές μορφές του άνθρακα. Πρόκειται για γραφιτικές δομές οι οποίες παράχθηκαν κατά τη διεργασία παραγωγής φουλερενίων με τη μέθοδο του ηλεκτρικού τόξου εκκένωσης και ονομάστηκαν «νανοσωλήνες άνθρακα» λόγω της κυλινδρικής τους δομής και της διαμέτρου τους, που είναι της τάξης του νανομέτρου (Σχήμα 2.6).





**Σχήμα 2.6:** Κρυσταλλική δομή μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα

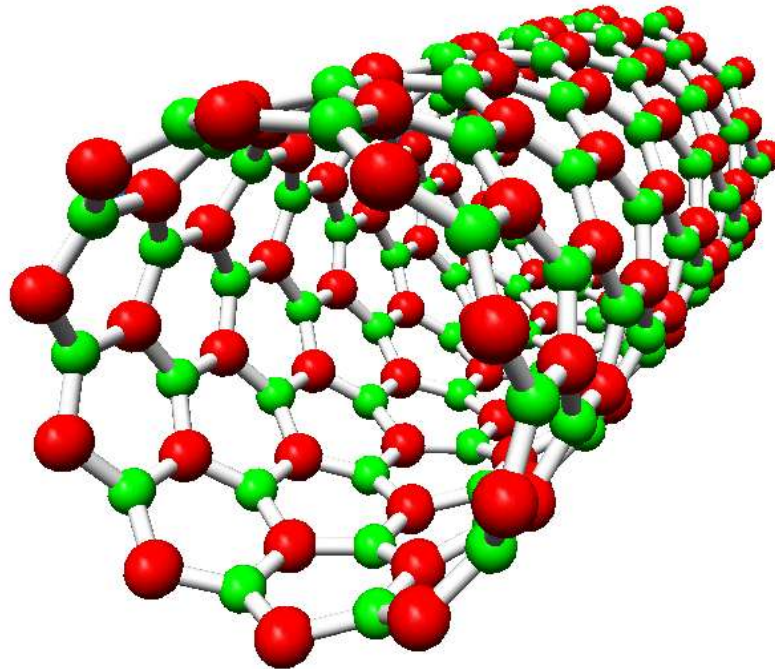
Τυπικές διαστάσεις αυτών των σωλήνων αντιστοιχούν σε διαμέτρους μεταξύ 2 και 25nm και μήκος μερικών μικρομέτρων, ενώ μπορούν να αποτελούνται από 2 ή περισσότερα τοιχώματα. Η εξέλιξη των ερευνών στο συγκεκριμένο πεδίο οδήγησε και στην παραγωγή νανοσωλήνων άνθρακα με ένα τοίχωμα, η διάμετρος των οποίων έχει πολύ μικρότερο εύρος και κυμαίνεται μεταξύ 1 και 2nm, ενώ το μήκος τους είναι και πάλι της τάξης μερικών μικρομέτρων.

Οι νανοσωλήνες άνθρακα έχουν προσελκύσει το ενδιαφέρον επιστημόνων διάφορων ειδικοτήτων χάρη στις σημαντικές ηλεκτρονικές και μηχανικές ιδιότητες τους. Παρακάτω θα αναφερθούμε εκτενέστερα στους τύπους, τις ιδιότητές τους και στις εφαρμογές τους.

## **2.5 ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ**

Η ανακάλυψη των νανοσωλήνων άνθρακα αποτέλεσε τον πρόδρομο για την ανακάλυψη των νανοσωλήνων νιτρίδιου του βορίου. Οι νανοσωλήνες άνθρακα είναι γραφιτικές δομές οι οποίες παράχθηκαν κατά την διαδικασία παραγωγής

φουλερενίων με τη μέθοδο του ηλεκτρικού τόξου εκκένωσης και ονομάστηκαν «νανοσωλήνες άνθρακα» λόγω της κυλινδρικής τους δομής και της διαμέτρου τους, που είναι της τάξης του νανομέτρου.



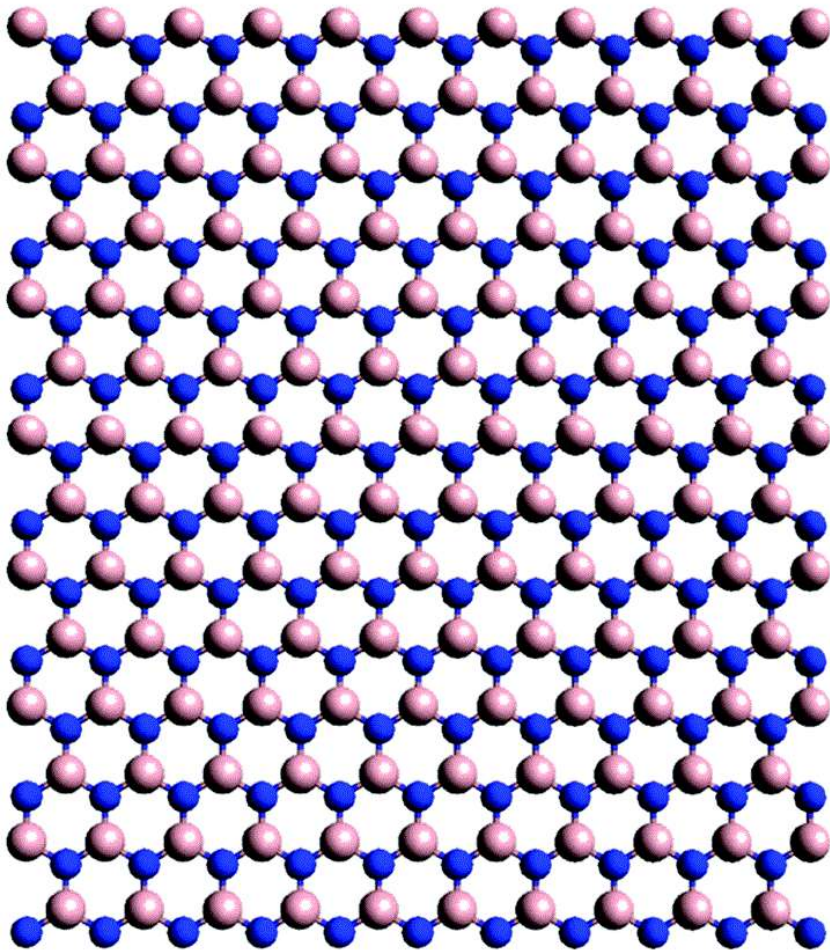
**Σχήμα 2.7:** Κρυσταλλική δομή μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα

Οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου όπως και οι νανοσωλήνες άνθρακα έχουν διαμέτρους από 2nm έως και 25nm και μήκος μερικών μικρομέτρων, ενώ μπορούν να αποτελούνται από ένα, δύο ή περισσότερα τοιχώματα.

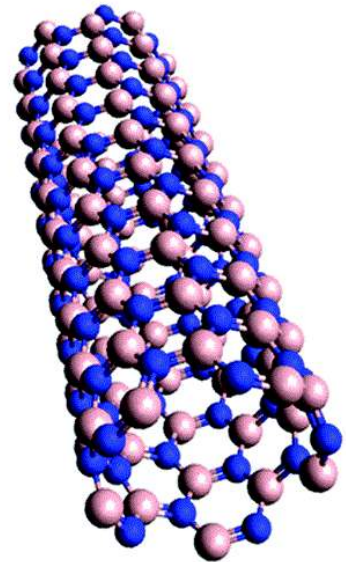
Οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου (BNNT) οι οποίοι κατασκευάζονται έχουν την ίδια δομή με αυτή των νανοσωλήνων άνθρακα (CNT), δηλαδή φύλλα γραφενίου ή νιτριδίου του βορίου τυλιγμένα γύρω από τον εαυτό τους αλλά οι ιδιότητές τους είναι πολύ διαφορετικές. Ενώ οι νανοσωλήνες άνθρακα (CNT) μπορεί να είναι ηλεκτρικοί αγωγοί ή ημιαγωγοί ανάλογα με την διεύθυνση τυλίγματος και την ακτίνα, οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου (BNNT) είναι ηλεκτρικοί μονωτές με bandgap περίπου 5,5eV (ίδιο με του διαμαντιού), το οποίο είναι σχεδόν ανεξάρτητο από τη μορφολογία του νανοσωλήνα[4]. Όπως και στις άλλες μορφές του νιτριδίου του βορίου, έτσι και οι νανοσωλήνες είναι πιο σταθεροί θερμικά και χημικά από τους

νανοσωλήνες άνθρακα, γεγονός το οποίο εξυπηρετεί σε εφαρμογές συγκεκριμένων απαιτήσεων.

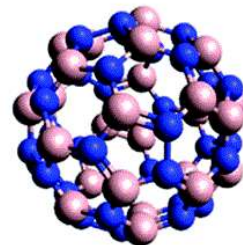
## Nanosheet



## Nanotube



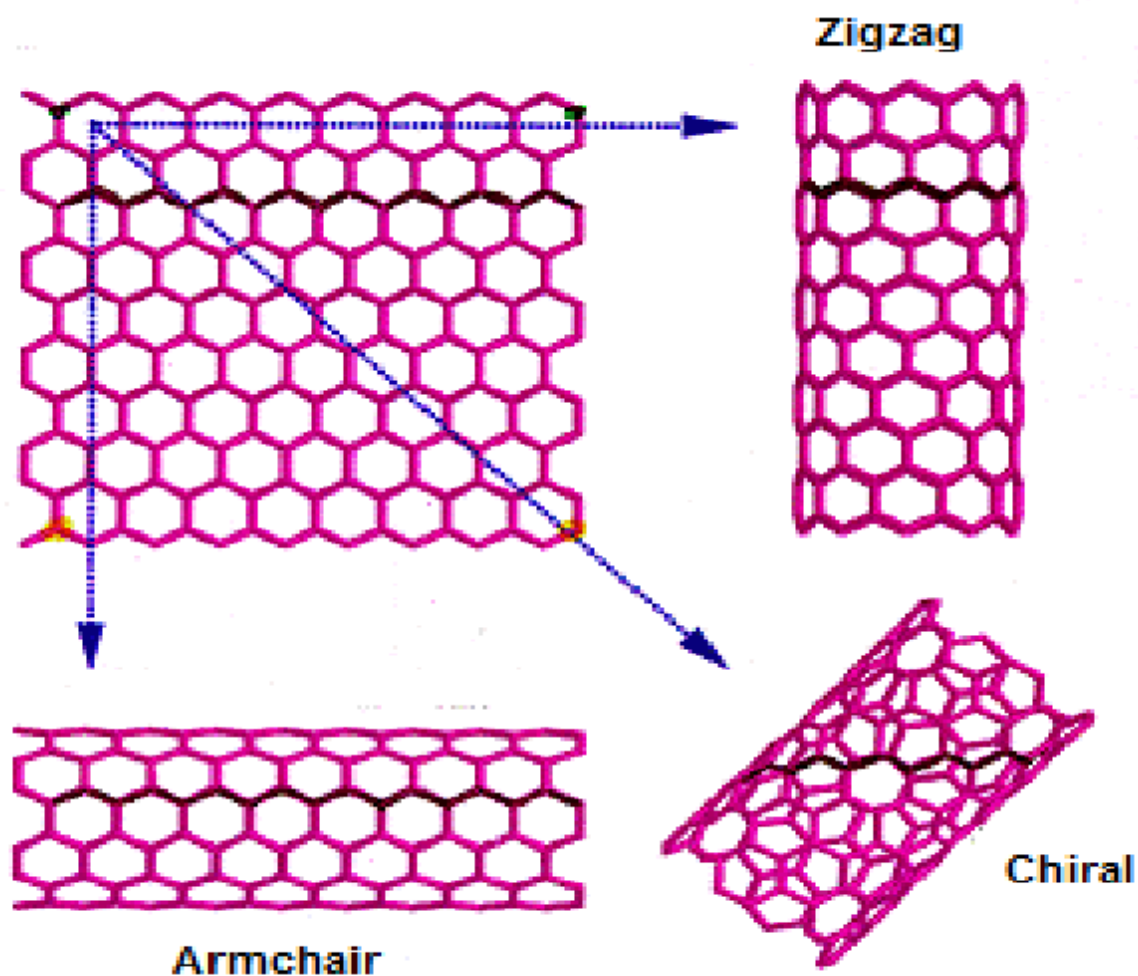
## Fullerene



**Σχήμα 2.8:** Νανοφύλλο, νανοσωλήνας και φουλερένιο από νιτρίδιο του βορίου

## 2.6 ΔΟΜΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ

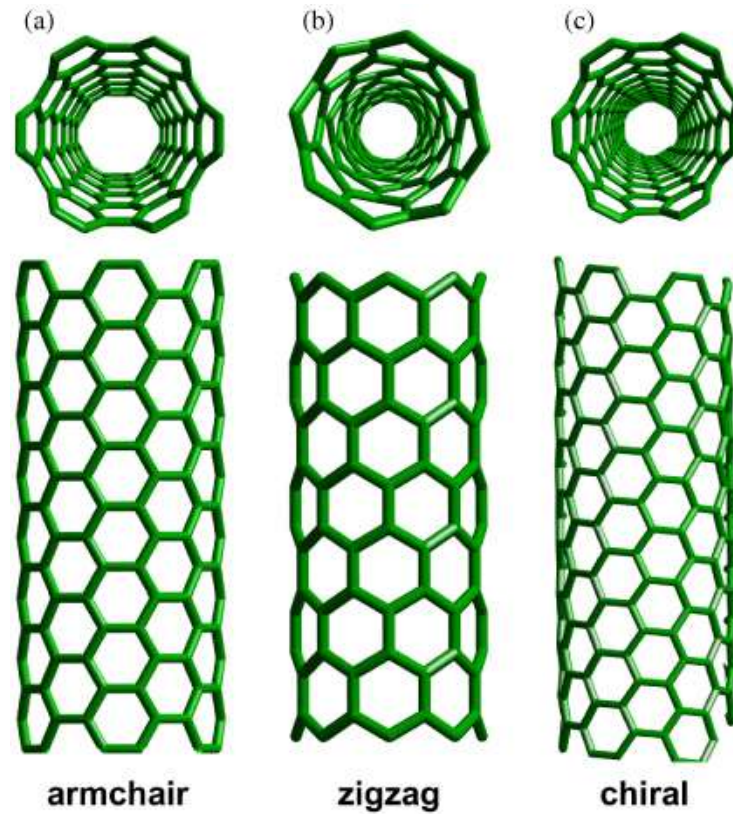
Ένας νανοςωλήνας νιτριδίου του βορίου, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 2.9 προκύπτει από την τύλιξη ενός φύλλου εξαγωνικού νιτριδίου του βορίου σε κυλινδρική μορφή.



**Σχήμα 2.9:** Σχηματικό διάγραμμα τρόπου τύλιξης του εξαγωνικού πλέγματος νιτριδίου του βορίου για το σχηματισμό νανοςωλήνα

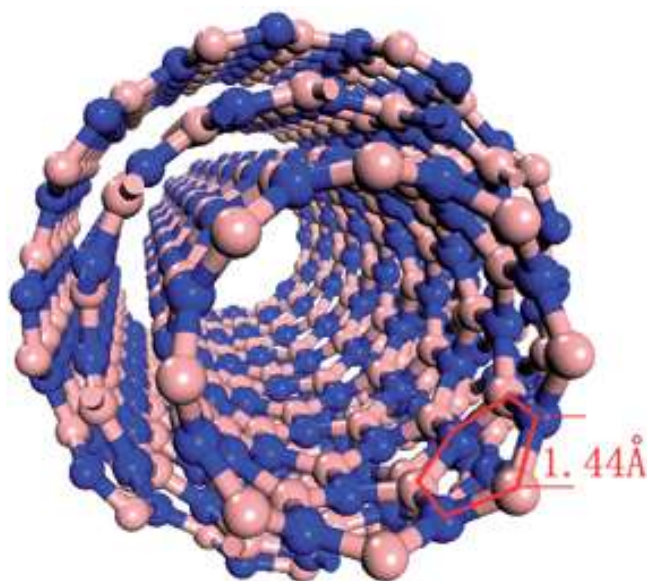
Ανάλογα με την διάταξη την διεύθυνση κατά την οποία θα περιστρέψουμε το εξαγωνικό πλέγμα μπορούν να προκύψουν τρεις τύποι προσανατολισμού των

ατόμων αζώτου και βορίου στην περιφέρεια του νανοσωλήνα, γεγονός το οποίο μας δίνει τρεις διαφορετικούς μεταξύ τους τύπους νανοσωλήνα οι οποίοι προσδιορίζονται ως armchair, zigzag και chiral.



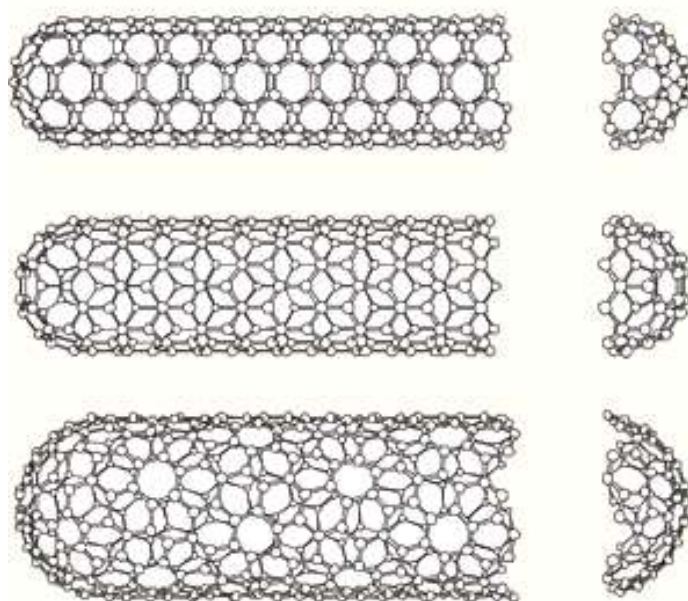
**Σχήμα 2.10:** μικροδομή armchair (a), zigzag (b) και chiral (c) νανοσωλήνα αντίστοιχα

Οι νανοσωλήνες νιτρίδιου του βορίου μπορεί να είναι είτε μονότοιχοι είτε πολύτοιχοι. Οι μονότοιχοι νανοσωλήνες έχουν μόνο έναν σωλήνα ενώ οι πολύτοιχοι έχουν έναν κεντρικό σωλήνα τον οποίο περιβάλλουν ένα ή περισσότερα στρώματα νιτρίδιου του βορίου με τα άτομα να είναι τοποθετημένα κατά τέτοιο τρόπο ώστε τα άτομα βορίου του πρώτου φύλλου και έχουν ακριβώς από πάνω του άτομα αζώτου στη επόμενη στρώση και αντίστροφα. [5]



**Σχήμα 2.11:** πολύτοιχος νανοσωλήνας νιτριδίου του βορίου

Τα κυλινδρικά φύλλα νιτριδίου του βορίου στους πολύτοιχους νανοσωλήνες απέχουν μεταξύ τους 1,44 Å, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.11. Τα άκρα των νανοσωλήνων μπορεί να ανοιχτά ή κλειστά Σχήμα 2.12. Τα άκρα τους αποτελούνται από «καπάκια» τα οποία προκύπτουν από συνδυασμό εξαγώνων και τουλάχιστον έξι πενταγώνων. Ο τερματισμός των νανοσωλήνων γίνεται είτε με «καπάκι» κωνικής μορφής είτε ημιδακτυλιοειδούς μορφής.



**Σχήμα 2.12:** Κλειστά άκρα νανοσωλήνα

## 2.7 ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ

Οι εξαιρετικά καλές ιδιότητες των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου έχουν στρέψει το ερευνητικό ενδιαφέρον σε αυτούς τα τελευταία χρόνια. Η έρευνα αποσκοπεί στην πλήρη κατανόησή τους και στην καλύτερη εκμετάλλευσή τους σε ενδεχόμενες εφαρμογές. Οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου διαφέροντας ελάχιστα αλλά σε σημαντικά σημεία από τους νανοσωλήνες άνθρακα έχουν να δώσουν πιθανές λύσεις σε πολλές εφαρμογές που οι νανοσωλήνες άνθρακα αδυνατούν όπως στα μικροκυκλώματα καθώς οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου είναι πάντα μονωτές σε αντίθεση με τους νανοσωλήνες άνθρακα οι οποίοι είναι αγωγοί ή ημιαγωγοί ανάλογα με την γεωμετρία τους.

Η μοναδική φύση των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου είναι συνυφασμένη με την φύση του ιονικού δεσμού αζώτου – βορίου, ο οποίος επάγει μια διπολική στιγμή ανάμεσα στο υδρογόνο και τους νανοσωλήνες για ισχυρότερο δέσιμο. Λόγω αυτού του ιονικού δεσμού οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου είναι υλικά μεγάλα διάκενα όπως και άλλα νιτρίδια.

### 2.7.1 Μηχανικές Ιδιότητες

Οι μηχανικές ιδιότητες των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου ήταν αναμενόμενο να έχουν πολύ καλές μηχανικές ιδιότητες αφού αποτελούν το επόμενο βήμα της μελέτης και εξέλιξης μετά τους νανοσωλήνες άνθρακα.

Το γραφένιο όπως είναι γνωστό εδώ και αρκετό καιρό έχει μέτρο ελαστικότητας στη διεύθυνση των επιπέδων του περίπου 1,06TPa ενώ οι νανοσωλήνες άνθρακα μπορούν να φτάσουν θεωρητικά έως και 1TPa στη διεύθυνση του άξονα τους. Όσον αφορά τους νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου έχει προταθεί μέτρο ελαστικότητας 1,18TPa. Οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου μαζί με τους νανοσωλήνες άνθρακα είναι κατάλληλοι για χρήση σε σύνθετα υλικά που χρειάζονται διαφορετικές ιδιότητες σε διαφορετικές διευθύνσεις. Οι εξαιρετικές μηχανικές ιδιότητες των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου έχουν προκαλέσει το ενδιαφέρον των ερευνητών για την

εκμετάλλευση του σε εφαρμογές που απαιτούν υψηλή μηχανική απόδοση ως μέρος σε σύνθετα υλικά.

### **2.7.2 Θερμικές Ιδιότητες**

Οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου έχουν αξιοσημείωτη θερμική αγωγιμότητα και υψηλή ειδική θερμότητα. Θεωρητικές μελέτες έχουν καταδείξει την υψηλή ειδική θερμότητα των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου και έχουν προβλέψει πως η θερμική αγωγιμότητά τους είναι υψηλότερη από αυτή των νανοσωλήνων άνθρακα. Επίσης έχει αποδειχθεί ότι η θερμική αγωγιμότητα των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου σε χαμηλές θερμοκρασίες είναι ανεξάρτητη από την διάμετρο του σωλήνα και την μορφολογία του. Μια πρόσφατη μάλιστα μελέτη έχει δείξει πως παρά την μικρότερη θερμική αγωγιμότητα του εξαγωνικού νιτριδίου του βορίου σε σχέση με αυτή του γραφενίου με κάποια μείωση της διασποράς σε ένα φύλλο νιτριδίου του βορίου μπορούμε να ξεπεράσουμε τα  $600\text{W/m/K}$  σε θερμοκρασία δωματίου, βέβαια η πειραματική τιμή είναι μέχρι τώρα στα  $\sim 350\text{W/m/K}$ .

### **2.7.3 Ηλεκτρικές Ιδιότητες**

Οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου είναι γενικά μονωτές με πολύ υψηλό bandgap από 5,0 έως 6,0 eV. Οι μελέτες έχουν δείξει πως αυτό είναι ανεξάρτητο από τις λεπτομέρειες της δομής τους (διάμετρος, προσανατολισμός κ.λπ.) με εξαίρεση να αποτελούν φυσικά ειδικές περιπτώσεις όπως παραδείγματος χάριν πολύ μικρή διάμετρος.

### **2.7.4 Μαγνητικές Ιδιότητες**

Η ανάλυση των μαγνητικών ιδιοτήτων έδειξε μια μαγνητική καμπύλη χαρακτηριστική των υπερ-παραμαγνητικών υλικών με περίπου 0 coercivity, με δείκτη μαγνητικού κορεσμού  $8\text{ Emu/g}$  για ένα πεδίο  $15000\text{ Oe}$ . Σύμφωνα με τους ερευνητές ο μαγνητισμός των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου είναι συνάρτηση της θερμοκρασίας και του εφαρμοζόμενου μαγνητικού πεδίου. Όπως προβλέφθηκαν από θεωρητικούς υπολογισμούς η ενίσχυση νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου με άνθρακα μπορεί να επιφέρει αυθόρμητη μαγνήτιση (αντικαθιστώντας είτε το άτομο



του αζώτου, είτε το άτομο του βορίου). Επίσης αυτές οι ιδιότητες μπορούν να συντονιστούν από διαδικασία χημειορόφησης. Για παράδειγμα απορρόφηση φθορίου σε άτομο βορίου του νανοσωλήνα μπορεί να επιφέρει δυνατό μαγνητισμό. Πειραματικά η μαγνητική συμπεριφορά των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου μπορεί να παρουσιαστεί μέσω συνάρτησής τους με νανοσωματίδια τεταρτοξειδίου του σιδήρου ή με την παρουσία σωματιδίων από κατάλυση με σίδηρο.

### **2.7.5 Ιδιότητες σε σχέση με το νερό**

Οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου όταν έρθουν σε επαφή με το νερό εμφανίζουν μια υπερευδροφοβική συμπεριφορά. Επίσης το PH του νερού δεν επηρεάζει τις ιδιότητες και την συμπεριφορά των νανοσωλήνων.

### **2.7.6 Πιεζοηλεκτρικές ιδιότητες**

Οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου είναι εξαιρετικά πιεζοηλεκτρικά συστήματα. Ένας πρόσφατος υπολογισμός δείχνει ότι η αξονική παραμόρφωση μέχρι και 1% μπορεί να προκληθεί από ηλεκτρικό πεδίο ισχύος 10V/nm λόγω σύμπραξης πιεζοηλεκτρικών και ηλεκτροστατικών επιρροών. Αυτό είναι περίπου εννέα φορές μεγαλύτερο από ότι σε παραδοσιακά πιεζοηλεκτρικά κεραμικά.

## 2.8 ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

Απλώνοντας ένα μικρό ποσό νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου σε κάποιο πολυμερές, οι ερευνητές έφτιαξαν σκληρά και ελαφρά υλικά. Τα πολυμερή μπορούν να εκχυθούν με νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου για να φτιάξουν υλικά με παρεμφερείς ιδιότητες. Τα πολυμερή σύνθετα με ενίσχυση νανοσωλήνων άνθρακα είναι ιδανικά για ελαφριές δεξαμενές αποθήκευσης καυσίμων και πλαστικά δοχεία τα οποία προορίζονται ακόμα και για αποθήκευση τροφής.

Οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου λόγω του βάρους τους θα μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την κατασκευή αεροσκαφών ελαφρότερων των υπάρχοντων άρα και αισθητά μικρότερη κατανάλωση καυσίμων καθώς και για την κατασκευή εξαρτημάτων αυτοκινήτων ή ισχυρότερες ανεμογεννήτριες, ιατρικά εμφυτεύματα και αθλητικό εξοπλισμό υψηλού τεχνολογικού επιπέδου. Ακόμα μια εξεζητημένη εφαρμογή η οποία όμως είναι πολύ σημαντική η προσθήκη νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου σε κατασκευή εξωσκελετών για την υποβοήθηση ατόμων με κινητικά προβλήματα.

Η ανάπτυξη αποτελεί μέρος μιας ευρύτερης προσπάθειας έρευνας για να δημιουργηθούν πολυμερή ενισχυμένα με νανοσωματίδια. Ίνες άνθρακα και ίνες γυαλιού χρησιμοποιούνται εδώ και πολλά χρόνια για τη ενίσχυση των πολυμερών. Σε αντίθεση όμως με τις ίνες ένα πολύ μικρό ποσοστό νανοσχηματισμών σε σχέση με τον συνολικό όγκο του σύνθετου υλικού είναι αρκετό για να βελτιώσει την συμπεριφορά του υλικού τόσο θερμικά όσο και μηχανικά.

Τα νανοϋλικά είναι ήδη σημαντικά υλικά για χρήση σε πολυμερή σύνθετα. Αυτοκινητοβιομηχανίες έχουν ήδη φτάσει στην κατασκευή κάποιων εξαρτημάτων του κινητήρα από σύνθετα υλικά με προσθήκη νανοσωλήνων άνθρακα και όλα δείχνουν πως το επόμενο βήμα είναι η χρήση και νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου.

Στην αεροναυπηγική νανοϋλικά όπως γραφένιο και νανοσωλήνες άνθρακα είναι μια πραγματικότητα εδώ και χρόνια και οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου ετοιμάζονται να παίξουν το δικό τους σημαίνοντα ρόλο και σε αυτή τη βιομηχανία αφού έχουν ήδη χρησιμοποιηθεί σε διαστημικές εφαρμογές από τη NASA και το μόνο που καθυστερεί την πλήρη χρήση τους σε αυτές τις εφαρμογές είναι η έλλειψη όλων των δεδομένων που χρειάζονται να αποσαφηνισθούν όσον αφορά τις ιδιότητες τους

### **2.8.1 Αποθήκευση Ενέργειας**

Οι νανοσωλήνες άνθρακα όπως και άλλα νανοϋλικά χρησιμοποιούνται πολύ συχνά στα κελιά καυσίμου (fuel cells), στις μπαταρίες και σε άλλες ηλεκτρομηχανικές εφαρμογές. Το βασικό πλεονέκτημα των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου είναι οι πολύ μικρές τους διαστάσεις, η λεία επιφάνεια και η τέλεια γνώση της δομής της επιφάνειας.

### **2.8.2 Σύνθετα Υλικά**

Λόγω της υψηλής αντοχής και δυσκαμψίας τους οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου αποτελούν ιδανική λύση για δομικές εφαρμογές. Θεωρητικά οι μονότοιχοι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου έχουν μέτρο ελαστικότητας 1,18TPa. Φυσικά όπως ισχύει και στους νανοσωλήνες άνθρακα οι πολύτοιχοι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου είναι πιο αδύνατοι καθώς οι κύλινδροι από τους οποίους αποτελούνται μπορεί να ολισθαίνουν ο ένας σε σχέση με τον άλλο. Οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου μπορούν να υπομείνουν μεγάλες εφελκυστικές παραμορφώσεις και να μην δείξουν σημάδια αστοχίας. Βέβαια σε άλλες διευθύνσεις είναι εξαιρετικά ευλύγιστοι.

Σύμφωνα με τις ιδιότητες τους οι νανοσωλήνες αποτελούν μια πρώτης τάξης ενίσχυση στα σύνθετα υλικά. Το κύριο πρόβλημα είναι η δημιουργία μιας καλής διεπιφάνειας ανάμεσα στους νανοσωλήνες και την μήτρα του πολυμερούς. Αυτό οφείλεται στην πολύ λεία επιφάνεια των νανοσωλήνων καθώς και στην πολύ μικρή του διάμετρο η οποία είναι σχεδόν ίση με τη διάμετρο της πολυμερισμένης αλυσίδας. Επίσης τα συσσωματώματα των νανοσωλήνων, τα οποία σχηματίζονται κατά την ανάμιξη του με την πολυμερή μήτρα, συμπεριφέρονται διαφορετικά στις φορτίσεις απ' ότι οι μεμονωμένοι νανοσωλήνες. Κύρια βελτίωση των υλικών στα οποία χρησιμοποιούνται νανοσωλήνες αναμένεται να είναι η αντοχή τους σε κρούση λόγω του ότι οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου πρόκειται να απορροφήσουν μεγάλο ποσοστό της ενέργειας με την πολύ καλή ελαστική συμπεριφορά τους και την εξαιρετική δυνατότητα ευλυγισίας που τους χαρακτηρίζουν.

Ακόμα λόγω της υψηλής θερμικής και χημικής σταθερότητας που διακρίνει τους νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου οι οποίοι μπορούν να παραμένουν σταθεροί

ακόμα και στους 1000°C τους καθιστά ιδανικούς για πολυετή χρήση σε κεραμικά υψηλών απαιτήσεων.

### **2.8.3 Υπολογιστές**

Οι νανοσωλήνες άνθρακα χρησιμοποιούνται στον τομέα των μικροϋπολογιστών λόγω της ηλεκτρικής τους αγωγιμότητας ως μεταφορείς ηλεκτρικού σήματος. Οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως μόνωση γύρω από τους νανοσωλήνες άνθρακα για την κατασκευή νανοκαλωδίων. Επίσης η υψηλή θερμική τους αγωγιμότητα τους κάνει χρήσιμους για απαγωγή θερμότητας και ψύξη σε τέτοια συστήματα το οποίο είναι και ένα μεγάλο πρόβλημα τους.

### **2.8.4 Ιατρική και Βιολογία**

Οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου μπορούν να χρησιμοποιηθούν στην κατασκευή πρόσθετων μελών για άτομα που τα χρειάζονται.

Επίσης οι νανοσωλήνες άνθρακα μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως βιοαισθητήρες οι οποίοι χρησιμεύουν για την μέτρηση ουσιών σε διαλύματα. Οι νανοσωλήνες προστίθενται στο διάλυμα και προσκολλώνται πάνω τους οι ουσίες που μας ενδιαφέρουν αλλάζοντας την ιδιοσυχνότητά τους. Έτσι από το πόσο έχει αλλάξει η ιδιοσυχνότητα μπορούμε να μετρήσουμε την συγκέντρωση της ουσίας μέσω στο διάλυμα.

Επιπλέον στην νανοϊατρική είναι πολύ χρήσιμοι στην SPM (Scanning Probe microscopy) ως πάρα πολύ λεπτές δύσκαμπτες πιπέτες. Πρόσφατα νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου δοκιμάστηκαν σε κύτταρα ινοβλαστών και επέδειξαν άριστη κυτταροσυμβατότητα ακόμα και σε υψηλές συγκεντρώσεις καλλιέργειας.

### **2.8.5 Ανανεώσιμες Πηγές Ενέργειας**

Το Νοέμβριο του 2009 η κρατική εταιρία ηλεκτρισμού της Νορβηγίας, έθεσε σε λειτουργία μια πρωτότυπη μονάδα ωσμωτικής ενέργειας, που εκμεταλλεύεται τη μίξη θαλασσινού και γλυκού νερού. Ερευνητική όμως ομάδα από το Πανεπιστήμιο Claude Bernard της Λουν στη Γαλλία υποστηρίζει ότι έχει αναπτύξει μια συσκευή 1000 φορές

ισχυρότερη από το σύστημα των Νορβηγών, το οποίο θα καταστήσει την ώσμωση ως βασική πηγή ανανεώσιμης ενέργειας. Η μέθοδος των Γάλλων ερευνητών αποτελείται από μια αδιάβροχη μεμβράνη η οποία φέρει μια μοναδική οπή στη μέση στην οποία οι ερευνητές τοποθέτησαν έναν νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου με εξωτερική διάμετρο μερικών δεκάδων νανομέτρων. Με αυτή τη μεμβράνη να διαχωρίζει **δύο δεξαμενές**, αλμυρού και γλυκού νερού, οι ερευνητές μέτρησαν το ηλεκτρικό ρεύμα που πέραγε από την μεμβράνη μέσω δύο ηλεκτροδίων εμβαπτισμένων στα υγρά εκατέρωθεν του νανοσωλήνα. Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι η συσκευή παράγαγε ηλεκτρικό ρεύμα της τάξης του ενός Νανοαμπέρ, 1000 φορές περισσότερο από την απόδοση των συμβατικών τεχνολογιών ώσμωσης. Σε μεγαλύτερη κλίμακα μια μεμβράνη με νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου επιφάνειας ενός τετραγωνικού μέτρου θα μπορούσε να παράξει 4 Κιλοβάτ ενέργειας ή 30 Μεγαβάτ ετησίως.

## **2.9 ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΠΑΡΑΣΚΕΥΗΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ**

Από τότε που ανακαλύφθηκαν οι νανοσωλήνες άνθρακα περίπου πριν μία δεκαετία, έχουν αναπτυχθεί πολλές τεχνικές παραγωγής τους. Με τις ίδιες τεχνικές παράγονται και οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου. Οι πρωταρχικές μέθοδοι σύνθεσης για νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου μονού και πολλαπλού τοιχίου είναι οι εξής:

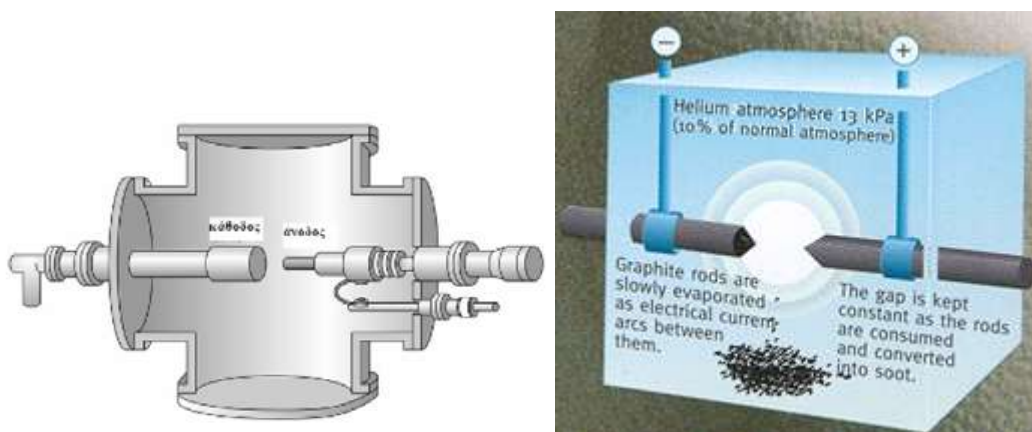
1. ηλεκτροδίων άνθρακα με τη χρήση ηλεκτρικού τόξου εκκένωσης.
2. Φωτοδιάσπαση γραφίτη με τη χρήση λέιζερ.
3. Χημική εναπόθεση ατμών (Chemical Vapour Deposition-CVD).
4. Μετατροπή CO με υψηλή πίεση (HiPCO).

Τα προϊόντα μπορεί να είναι πολύτοιχοι νανοσωλήνες ή μονότοιχοι ανάλογα με τις παραμέτρους της μεθόδου. Γενικά, ενώ οι πολύτοιχοι νανοσωλήνες μπορούν να συντεθούν και χωρίς τη χρήση καταλύτη, οι μονότοιχοι απαιτούν την παρουσία του. Το μέγεθος μάλιστα των καταλυτικών σωματιδίων καθορίζει και τη διάμετρο του νανοσωλήνα. Οι διαδικασίες αέριας φάσης τείνουν να παράγουν νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου με λιγότερες προσμίξεις και είναι ιδανικές για παραγωγή

μεγάλης κλίμακας ενώ προσφέρουν μεγαλύτερες δυνατότητες για εφαρμογές με σύνθετα υλικά. Σε αυτή την ενότητα, γίνεται ανασκόπηση στις κύριες τεχνικές για την παραγωγή νανოსωλήνων άνθρακα και νιτριδίου του βορίου.

### 2.9.1 Εξάχνωση Ηλεκτροδίων Άνθρακα με την χρήση ηλεκτρικού τόξου εκκένωσης

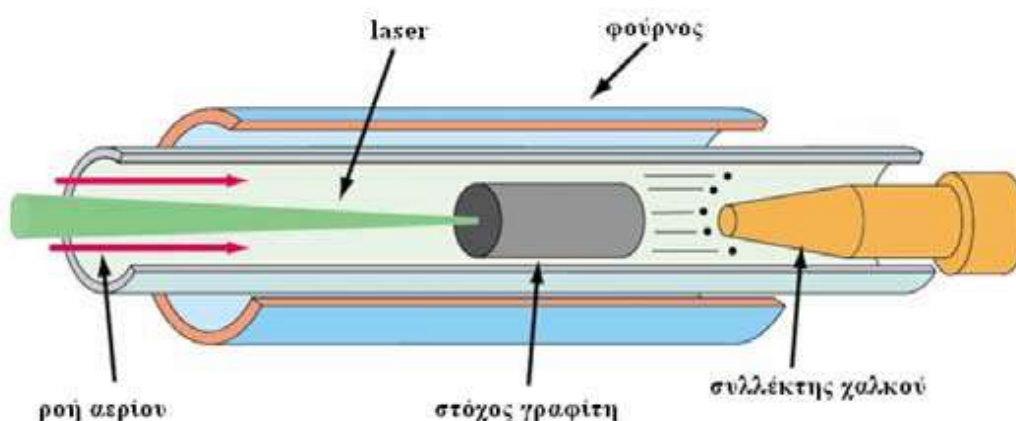
Ο Iijima πρώτος παρατήρησε τους νανοσωλήνες που παράγονται με την τεχνική ηλεκτρικής εκκένωσης τόξου. Όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.11, αυτή η τεχνική, γενικά συνοδεύεται από την χρήση δύο υψηλής καθαρότητας γραφιτικών πόλων ως ανόδου και καθόδου. Οι πόλοι πλησιάζουν ο ένας τον άλλο υπό ατμόσφαιρα ηλίου και εφαρμόζεται μια τάση, μέχρι να επιτευχθεί ένα σταθερό ηλεκτρικό τόξο. Η ακριβής διαδικασία ποικίλει ανάλογα το μέγεθος των γραφιτικών πόλων. Καθώς καταναλώνεται η άνοδος, ένα σταθερό κενό μεταξύ της ανόδου και της καθόδου διατηρείται προσαρμόζοντας την θέση της ανόδου. Το υλικό έπειτα εναποτίθεται πάνω στην κάθοδο για να σχηματίσει μία ανάπτυξη που αποτελείται από ένα εξωτερικό κέλυφος από τηγμένο υλικό και ένα μαλακότερο ινώδη πυρήνα που περιέχει νανοσωλήνες και άλλα σωματίδια άνθρακα. Για να παραχθούν νανοσωλήνες άνθρακα, τα ηλεκτρόδια εμποτίζονται με μια μικρή ποσότητα από σωματίδια μεταλλικού καταλύτη.



**Σχήμα 2.13:** Σχηματική αναπαράσταση εξάχνωσης ηλεκτροδίων άνθρακα με τη χρήση ηλεκτρικού τόξου εκκένωσης

## 2.9.2 Φωτοδιάσπαση με τη Χρήση Λείζερ

Η τεχνική εξάχνωσης γραφίτη με χρήση δεσμών λέιζερ αρχικά χρησιμοποιήθηκε για την σύνθεση φουλερενίων. Έπειτα από χρόνια, η τεχνική έχει βελτιωθεί για να επιτρέπει την παραγωγή νανοσωλήνων απλού τοιχώματος.



**Σχήμα 2.14:** Σχηματική αναπαράσταση διαδικασίας φωτοδιάσπασης γραφίτη με τη χρήση λέιζερ

Σε αυτήν την τεχνική, ένα laser χρησιμοποιείται για να φωτοδιασπά ένα γραφιτικό στόχο που συγκρατείται σε ένα φούρνο ελεγχόμενης ατμόσφαιρας σε θερμοκρασίες κοντά στους 1200 °C. Η διάταξη αυτής της τεχνικής φαίνεται στο Σχήμα 2.14. Για να παραχθούν νανοσωλήνες μονού τοιχώματος, ο γραφιτικός στόχος εμποτίζεται με καταλύτη κοβάλτιο και νικέλιο. Το συμπυκνωμένο υλικό έπειτα συλλέγεται πάνω σε ένα υδρόψυκτο στόχο.

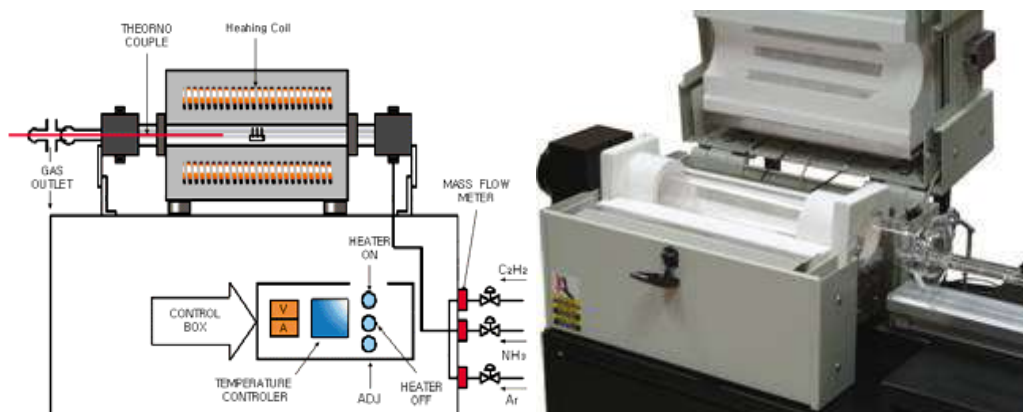
Και οι δύο προηγούμενες τεχνικές περιορίζονται από τον όγκο του δείγματος που μπορούν να παράγουν σε σχέση με το μέγεθος της πηγής άνθρακα (η άνοδος στη ηλεκτρικής εκκένωσης τόξου και ο στόχος στη τεχνική εξάχνωσης γραφίτη με χρήση δεσμών laser). Επιπρόσθετα, απαιτούνται επιπλέον βήματα καθαρισμού για να διαχωρίσουμε τους νανοσωλήνες από ανεπιθύμητα παραπροϊόντα. Αυτοί οι περιορισμοί έχουν υποκινήσει την ανάπτυξη των τεχνικών αέριας φάσης, όπως τη μέθοδο χημικής εναπόθεσης με ατμό, όπου οι νανοσωλήνες σχηματίζονται από την αποσύνθεση ενός αερίου που περιέχει άνθρακα. Οι τεχνικές αέριας φάσης είναι



αποδεκτές για συνεχείς διαδικασίες αφού η πηγή άνθρακα αντικαθίσταται συνεχώς από ρέον αέριο. Επί πρόσθετα, η τελική καθαρότητα των νανοσωλήνων που παράγονται μπορεί να είναι αρκετά υψηλή, ελαχιστοποιώντας έτσι τα επιπλέοντα βήματα καθαρισμού.

### 2.9.3 Καταλυτική Χημική Εναπόθεση Ατμών (CVD)

Οι τεχνικές αέριας φάσης χρησιμοποιούν αέριους υδρογονάνθρακες ως πηγή άνθρακα για την παραγωγή νανοσωλήνων άνθρακα μονού και πολλαπλού τοιχώματος μέσω της CVD Σχήμα 2.15. Οι υδρογονάνθρακες πυρολύονται γρήγορα πάνω σε επιφάνειες γύρω στους 600-700 °C. Ως συνέπεια αυτού, οι νανοσωλήνες που αναπτύσσονται από υδρογονάνθρακες μπορούν να έχουν ουσιαστικά αποθέματα άμορφου άνθρακα πάνω στην επιφάνεια των σωλήνων και θα απαιτούσαν περισσότερα βήματα καθαρισμού. Παρόλο που η αδράνεια των υδρογονανθράκων σε χαμηλές θερμοκρασίες επιδρά στην καθαρότητα των παραγόμενων νανοσωλήνων, η χαμηλότερη θερμοκρασία επεξεργασίας ενεργοποιεί την ανάπτυξη νανοσωλήνων άνθρακα σε μια ποικιλία υποστρωμάτων, περιλαμβανομένου και του γυαλιού.



Σχήμα 2.15: Διάταξη CVD για την παραγωγή νανοσωλήνων άνθρακα

### 2.9.4 Μετατροπή CO με υψηλή πίεση (HiPCO)

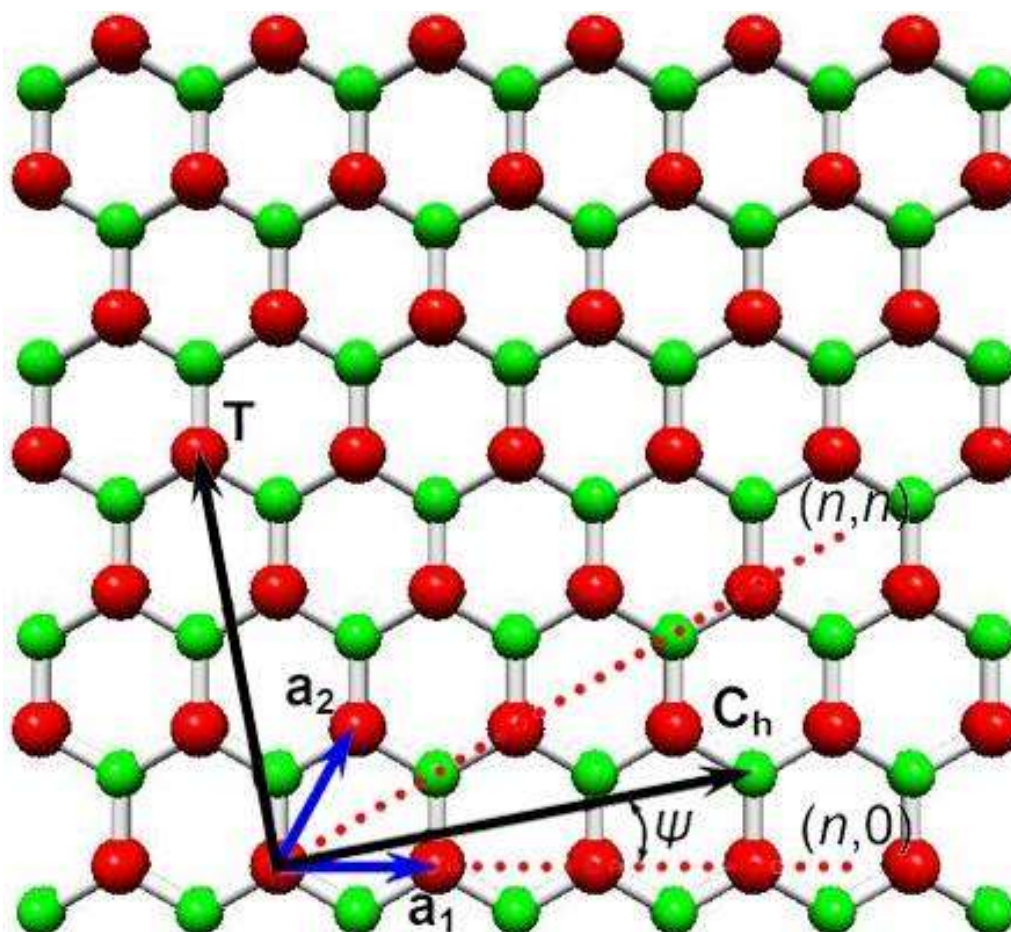
Πρόκειται για την ανάπτυξη αέριας φάσης των νανοσωλήνων μονού τοιχώματος με το μονοξείδιο του άνθρακα ως πηγή άνθρακα σε υψηλές θερμοκρασίες και πιέσεις (1200°C και 10atm). Οι νανοσωλήνες HiPCO (high-pressure conversion of carbon monoxide) είναι ιδιαίτερα προσεγμένοι και έχουν εμπορευματοποιηθεί από την

Carbon Nanotechnologies Inc. (Houston, TX) η οποία ασχολείται με την παραγωγή μεγάλης κλίμακας νανοσωλήνων άνθρακα μονού τοιχώματος υψηλής καθαρότητας.

### 3. ΔΟΜΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΑ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ ΚΑΙ ΔΙΑΤΟΜΙΚΕΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ

#### 3.1 ΝΑΝΟΔΟΜΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ

Μια χαρακτηριστική δομή του νιτρίδιου του βορίου φαίνεται στο σχήμα 3.1. Οι χαρακτηριστικές διαστάσεις του είναι το μήκος κατά την κατακόρυφη διεύθυνση στην οποία υπάρχουν διατάξεις τύπου armchair και την οριζόντια τύπου zigzag. Τα άτομα του αζώτου και του βορίου βρίσκονται τοποθετημένα σε εξαγωνικές διατάξεις δεσμών, των οποίων το μήκος είναι  $r_0$  και η γωνία που σχηματίζουν είναι  $120^\circ$ .



Σχήμα 3.1: Ατομική Δομή φύλλου νιτρίδιου του βορίου

Οι ατομικές θέσεις, (συντεταγμένες σε σύστημα x,y,z), κατά την κατάσταση ισορροπίας, για ένα καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων, μπορούν να οριστούν από τα παρακάτω διανύσματα:

$$\mathbf{a}_1 = r_0 \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad (3.1)$$

$$\mathbf{a}_2 = r_0 \begin{Bmatrix} \cos 60^\circ \\ \sin 60^\circ \end{Bmatrix} = r_0 \begin{Bmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{Bmatrix} \quad (3.2)$$

Ένας μονότοιχος νανοσωλήνας νιτριδίου του βορίου μπορεί να δημιουργηθεί από το τύλιγμα ενός φύλλου νιτριδίου του βορίου, το οποίο είναι ιδανικά κομμένο, ώστε να σχηματιστεί ένας κύλινδρος. Το φύλλο αυτό του νιτριδίου του βορίου πρέπει να είναι τυλιγμένο προς τη διεύθυνση ενός άξονα  $C_h$  ο οποίος ορίζεται ως εξής:

$$C_h = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 \quad (3.3)$$

Όπου τα  $\mathbf{a}_1$  και  $\mathbf{a}_2$  είναι τα διανύσματα που ορίζουν το κυψελοειδές εξαγωνικό πλέγμα που φαίνεται στο Σχήμα 3.1. Οι ακέραιοι αριθμοί (n,m) δηλώνουν τα βήματα κατά μήκος των zigzag δεσμών άνθρακα και γενικά χρησιμοποιούνται για να ονομάσουν τον νανοσωλήνα. Το μέγεθος του διανύσματος  $C_h$  αντιπροσωπεύει την περιφέρεια των νανοσωλήνων:

$$\pi D = 2\pi R = |C_h| = r_0 \sqrt{3(n^2 + nm + m^2)} \quad (3.4)$$

Όπου D και R είναι η διάμετρος και η ακτίνα του νανοσωλήνα αντίστοιχα. Η παράμετρος  $r_0$  η οποία λαμβάνεται ίση με 0,145nm δηλώνει το μήκος του δεσμού αζώτου – βορίου στην απαραμόρφωτη κατάσταση.

Ένας νανοσωλήνας (n,n) ονομάζεται armchair ενώ ένας νανοσωλήνας (n,0) ονομάζεται zigzag. Η γωνία  $\psi$  ( $0 \leq \psi \leq 30^\circ$ ) ορίζεται ως εξής:

$$\tan \psi = \frac{\sqrt{3}m}{(2n+m)} \quad (3.5)$$

Είναι εύκολα κατανοητό ότι για έναν armchair νανοσωλήνα η γωνία αυτή είναι ίση με  $\psi=30^\circ$ , ενώ για την κατηγορία zigzag νανοσωλήνων είναι  $\psi=0^\circ$ . Οι chiral νανοσωλήνες είναι τύπου  $(n,m)$  με  $n \neq m$  και  $0 \leq \psi \leq 30^\circ$ , αν και στην παρούσα δεν έχουμε πειραματιστεί με νανοσωλήνες τύπου chiral.

Η διάμετρος  $D$  των νανοσωλήνων δίδεται από την παρακάτω εξίσωση:

$$D = \frac{r_0 \sqrt{3(n^2 + nm + m^2)}}{\pi} \quad (3.6)$$

Όπου  $r_0$  είναι η απόσταση μεταξύ δύο γειτονικών ατόμων αζώτου και βορίου και είναι ίση με 0.145nm.

Η ιδανική ορθογώνια περιοχή φύλλου γραφίτη, η οποία πρέπει να κοπεί και εν συνεχεία να τυλιχθεί για να παραχθεί ένας δεδομένος νανοσωλήνας, ορίζεται από το διάνυσμα  $C_h$  και ένα μετασχηματισμένο διάνυσμα  $T$ . Το συγκεκριμένο διάνυσμα το οποίο απεικονίζεται στο Σχήμα 2.1 δίδεται από τη σχέση:

$$\mathbf{T} = \left( \frac{2m+n}{W} \right) \mathbf{a}_1 + \left( -\frac{2n+m}{W} \right) \mathbf{a}_2 \quad (3.7)$$

Όπου το  $W$  τον υψηλότερο κοινό διαιρέτη των  $2m+n$  και  $2n+m$ .

Στην παρούσα εργασία για λόγους απλότητας, οι αρχικές συντεταγμένες του φύλλου νιτριδίου του βορίου  $(x', y')$ , έχουν μετασχηματισθεί σε ένα νέο σύστημα συντεταγμένων  $(x,y,z)$  του νανοσωλήνα έτσι ώστε το  $T$  να ανήκει στον  $y'$  άξονα. Οι συντεταγμένες κάθε ατόμου του νανοσωλήνα προκύπτουν από τις αντίστοιχες

ατομικές συντεταγμένες του φύλλου νιτριδίου του βορίου σύμφωνα με την εξίσωση μετασχηματισμού του Koloczek και άλλων:

$$(x, y, z) = \left( R \cos\left(\frac{x'}{R}\right), r \sin\left(\frac{x'}{R}\right), y' \right) \quad (3.8)$$

Όπου R είναι η ακτίνα του νανοσωλήνα.

Το μέτρο του διανύσματος T καθορίζει το μήκος των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου:

$$L = |\mathbf{T}| = \frac{3r_0 \sqrt{3(n^2 + nm + m^2)}}{W} \quad (3.9)$$

### 3.2 ΔΙΑΤΟΜΙΚΕΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ

Για να γίνει κατανοητή η μηχανική συμπεριφορά των νανοδομών, είναι απαραίτητο να τονιστεί ότι υπάρχουν δύο κύριοι παράγοντες που την επηρεάζουν:

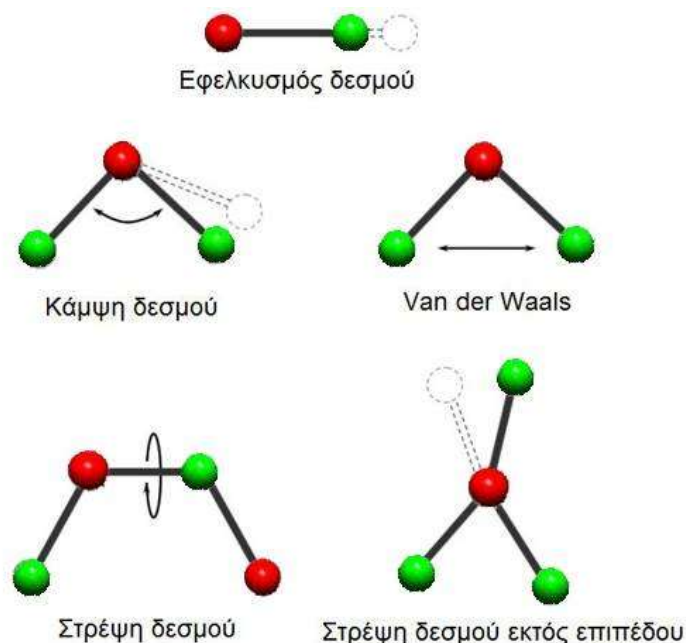
1. Οι δυνάμεις μεταξύ των ατόμων, οι οποίες τα συγκρατούν στη συγκεκριμένη δομή.
2. Ο τρόπος διάταξης των ατόμων, δηλαδή η γεωμετρία της νανοδομής.

Υπάρχουν δύο είδη «δεσμών» μεταξύ των ατόμων: (i) οι κύριοι δεσμοί, οι οποίοι δύναται να είναι ιοντικοί, ομοιοπολικοί ή μεταλλικοί και (ii) οι δευτερεύοντες δεσμοί, οι οποίοι δύναται να είναι αλληλεπιδράσεις van der Waals ή δεσμοί υδρογόνου. Οι δεσμοί της πρώτης κατηγορίας είναι ισχυροί, με σημείο τήξης μεταξύ των 1000 και 4000°K, ενώ οι δεσμοί της δεύτερης κατηγορίας θεωρούνται γενικά ασθενείς, με σημείο τήξης μεταξύ των 100 και 500°K. Τα κεραμικά και μεταλλικά υλικά δομούνται εξ' ολοκλήρου με δεσμούς της πρώτης κατηγορίας και πιο συγκεκριμένα με ιοντικούς και ομοιοπολικούς δεσμούς τα κεραμικά υλικά, ενώ με μεταλλικούς και ομοιοπολικούς δεσμούς τα μέταλλα. Στις αλλοτροπικές μορφές του άνθρακα, όπως

το διαμάντι, το γραφένιο οι γραφιτικές νιφάδες, οι νανοσωλήνες κ.λπ. οι κύριοι δεσμοί είναι ομοιοπολικού τύπου, ενώ ταυτόχρονα υπάρχουν και δευτερεύοντες αλληλεπιδράσεις και συγκεκριμένα αλληλεπιδράσεις van der Waals. Το ίδιο συμβαίνει και στο νιτρίδιο του βορίου και τους νανοσωλήνες νιτρίδιου του βορίου.

Ο ομοιοπολικός δεσμός βασίζεται στο ότι δύο άτομα μοιράζονται ηλεκτρόνια της εξωτερικής του στοιβάδας. Η πιο απλή μορφή ενός ομοιοπολικού δεσμού βρίσκεται στο μόριο του υδρογόνου. Κατά την προσέγγιση των δύο πυρήνων υδρογόνου δημιουργείται μια νέα τροχιά, στην οποία τα δύο ηλεκτρόνια κινούνται και την οποία μοιράζονται τα δύο άτομα. Η διαδικασία της κοινής χρήσης ηλεκτρονίων οδηγεί σε ελαχιστοποίηση της δυναμικής ενέργειας, και τη δημιουργία ενός σταθερού δεσμού.

Για την προσομοίωση της νανοδομής ενός υλικού μέσω μεθοδολογιών μοριακής μηχανικής είναι σημαντική η περιγραφή και διατύπωση των δυνάμεων που επικρατούν μεταξύ μεμονωμένων ατόμων. Η περιγραφή αυτή χαρακτηρίζεται από το δυναμικό πεδίο. Συνήθως, το δυναμικό πεδίο εκφράζεται από μια μορφή δυναμικής ενέργειας. Η δυναμική ενέργεια, παραβλέποντας την ηλεκτροστατική αλληλεπίδραση, αποτελεί ένα άθροισμα ενεργειών που οφείλονται στις διατομικές αλληλεπιδράσεις, οι οποίες παρουσιάζονται στο Σχήμα 3.2.



**Σχήμα 3.2:** Διατομικές αλληλεπιδράσεις ατόμων βορίου – αζώτου.

Είναι πάρα πολύ σημαντικό στην υπολογιστική μοριακή μηχανική της νανοδομής των υλικών να περιγράψουμε τις δυνάμεις μεταξύ μεμονωμένων ατόμων.

Το αναπτυσσόμενο πεδίο δυνάμεων χαρακτηρίζεται από μια δυναμική ενέργεια. Η συγκεκριμένη δυναμική ενέργεια, παραλείποντας τις ηλεκτροστατικές αλληλεπιδράσεις, ορίζεται ως το άθροισμα των ενεργειών ένεκα των διατομικών αλληλεπιδράσεων, οι οποίες απεικονίζονται στο Σχήμα 3.2 και μπορεί να εκφραστεί από την παρακάτω εξίσωση:

$$U = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum U_\phi + \sum U_\omega + \sum U_{vdw} \quad (3.10)$$

Όπου ο όρος  $U_r$  αναπαριστά την ενέργεια εξαιτίας εφελκυσμού του δεσμού, ο όρος  $U_\theta$  εκφράζει την ενέργεια εξαιτίας της κάμψης της γωνίας του δεσμού,  $U_\phi$  είναι η ενέργεια εξαιτίας της δίεδρης γωνίας στρέψης του δεσμού,  $U_\omega$  είναι η ενέργεια λόγω της στρέψης εκτός επιπέδου ενός δεσμού και τέλος ο όρος  $U_{vdw}$  δηλώνει την ενέργεια που οφείλεται στους δεσμούς van der Waals.

Αν υποθέσουμε κάποιες μικρές μετατοπίσεις, η αρμονική προσέγγιση της παραπάνω εξίσωσης είναι επαρκής για να περιγράψουμε την δυναμική ενέργεια και επομένως το αντίστοιχο αναπτυσσόμενο δυναμικό πεδίο. Υιοθετώντας τους απλούστερους δυναμικούς όρους και συγχωνεύοντας την ενέργεια  $U_\theta$  και  $U_\phi$  σε μια ισοδύναμη  $U_\tau$ , οι ακόλουθοι όροι είναι επαρκείς να περιγράψουν την συνολική δυναμική ενέργεια:

$$U_r = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2 \quad (3.11)$$

$$U_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\Delta \theta)^2 \quad (3.12)$$

$$U_\tau = U_\phi + U_\omega = \frac{1}{2} k_\tau (\Delta \phi) \quad (3.13)$$

Όπου οι όροι  $k_r$ ,  $k_\theta$  και  $k_\tau$  δηλώνουν την σταθερά εφελκυσμού δεσμού, την σταθερά κάμψης γωνίας δεσμού και την σταθερά στρέψης δεσμού, αντίστοιχως. Τέλος  $\Delta r$ ,  $\Delta \theta$  και  $\Delta \phi$  αναπαριστούν τη μεταβολή του μήκους του δεσμού, της γωνίας κάμψης δεσμού και της γωνίας στρέψης δεσμού αντίστοιχα. Οι σταθερές δυσκαμψίας



σύμφωνα με τη μοριακή χημεία έχουν τις εξής τιμές:  $k_r = 6.52 \times 10^{-7} \text{Nm}^{-1}$ ,  
 $k_\theta = 8.76 \times 10^{-10} \text{Nmrad}^{-2}$  και  $k_\tau = 2.78 \times 10^{-10} \text{Nmrad}^{-2}$

Αντικαθιστώντας τις εξισώσεις (3.11) έως (3.13) στην εξίσωση (3.10) προκύπτει η συνολική δυναμική ενέργεια του συστήματος:

$$U = \sum \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2 + \sum \frac{1}{2} k_\theta (\Delta \theta)^2 + \sum \frac{1}{2} k_\tau (\Delta \phi)^2 \quad (3.14)$$

Η επίλυση της παραπάνω εξίσωσης δύναται να οδηγήσει στον πλήρη ορισμό της κατάστασης παραμόρφωσης ενός νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου.

#### 4.ΠΡΟΤΕΙΝΟΜΕΝΗ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΕΘΟΔΟΣ

Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων αποτελεί σήμερα τη σημαντικότερη μέθοδο της υπολογιστικής μηχανικής. Η ανάπτυξη της μπορεί να θεωρηθεί ως συμβολή τριών βασικών επιστημονικών περιοχών, των ενεργειακών μεθόδων της μηχανικής, της θεωρίας προσεγγίσεων των μαθηματικών αλλά και των πληροφοριακών συστημάτων σχεδιασμού CAD.

Η αξία της μεθόδου έγκειται στη δυνατότητα της να παρουσιάζεται ως ένα ενιαίο εργαλείο για την στατική και δυναμική γραμμική και μη-γραμμική ανάλυση των κατασκευών από ραβδωτούς, επιφανειακούς και χωρικούς φορείς ή συνδυασμούς τους, για τυχαία γεωμετρία, φόρτιση και συνοριακές συνθήκες.

Αρχικά, η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων αποτέλεσε μια ενεργειακή μέθοδο για την επίλυση δισδιάστατων φορέων όπως οι μέθοδοι Rayleigh-Ritz και Galerkin, τις οποίες μετέφερε ουσιαστικά από το χώρο των συνεχών συστημάτων στα διακριτά συστήματα. Στη συνέχεια επικράτησαν οι αρχές των ισοπαραμετρικών στοιχείων που εξασφαλίζουν ακρίβεια στους υπολογισμούς και βελτιώνουν σημαντικά τον ενιαίο προγραμματισμό της μεθόδου.

Τέλος, η ανάπτυξη των προγραμμάτων προεπεξεργασίας και μετεπεξεργασίας των δεδομένων και αποτελεσμάτων καθιέρωσαν τη μέθοδο και τα αντίστοιχα προγράμματα που αναπτύχθηκαν. Έτσι σήμερα, χρησιμοποιώντας προγράμματα που στηρίζονται στις αρχές του CAD ο χρήστης είναι σε θέση να μορφώσει, να τροποποιήσει το προσομοίωμα του και να καθορίσει τις επιβαλλόμενες φορτίσεις κατά τρόπο απλό και εύκολα ελέγξιμο. Μετά την επίλυση του προβλήματος, η επεξεργασία των αποτελεσμάτων γίνεται άμεσα και εποπτικά ενώ σε πολλά συστήματα παρέχεται η δυνατότητα αναζήτησης των αποτελεσμάτων με τη μορφή βάσεων δεδομένων.

Η μέθοδος που χρησιμοποιήσαμε για την επίλυση της εξίσωσης (3.14) η οποία εκφράζει την κατάσταση παραμόρφωση ενός μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα, είναι η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιήσαμε το λογισμικό πακέτο πεπερασμένων στοιχείων Lusas FEA λόγω των δυνατοτήτων που

δίνει για παραμετροποίηση και αντιμετώπιση προβλημάτων μηχανικής των κατασκευών.

#### **4.1 Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ**

Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων είναι μια αριθμητική μέθοδος (μέθοδος υπολογισμού με χρήση ηλεκτρονικού υπολογιστή) για τον υπολογισμό προσεγγιστικών λύσεων μερικών διαφορικών εξισώσεων.

Οι αναλυτικές μέθοδοι επίλυσης των εξισώσεων με τις οποίες περιγράφονται τα μηχανικά προβλήματα είναι εφαρμόσιμη μόνο σε απλές καταπονήσεις και απλά γεωμετρικά σχήματα. Η ανάγκη όμως για επίλυση πιο σύνθετων προβλημάτων οδήγησε στην ανάπτυξη των προσεγγιστικών μεθόδων επίλυσης.

Μια τέτοια μέθοδος είναι και η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων. Η συγκεκριμένη μέθοδος είναι μεν προσεγγιστική αλλά δίνει αρκετά αξιόπιστα αποτελέσματα και μπορεί να εφαρμοστεί σχεδόν σε όλα τα προβλήματα. Βέβαια η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων είναι μία μέθοδος που απαιτεί πολύ μεγάλη υπολογιστική ισχύ ειδικά για σύνθετα μοντέλα. Αυτό το πρόβλημα έχει ξεπεραστεί σε μεγάλο βαθμό τα τελευταία χρόνια καθώς η διαθέσιμη υπολογιστική ισχύς ακόμα και σε πολύ απλά συστήματα έχει φτάσει σε πολύ υψηλά επίπεδα. Καταλαβαίνουμε την αξιοπιστία των αποτελεσμάτων της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων όταν σκεφτούμε πως χρησιμοποιείται στην έρευνα και ανάπτυξη μεγάλων βιομηχανιών ειδικά τα τελευταία χρόνια για τη μελέτη σχεδόν όλων των κατασκευών.

Η μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων είναι μια εξέλιξη των μητρικών μεθόδων αριθμητικής επίλυσης διαφορικών εξισώσεων και έγινε από σπουδαίους επιστήμονες όπως ο Ιωάννης Αργύρης, ο Clough, ο Ritz και πολλοί άλλοι.

Για την εφαρμογή της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων απαιτούνται τα παρακάτω στάδια:

1. Εισάγουμε την γεωμετρία της κατασκευής και δημιουργούμε το τρισδιάστατο μοντέλο.
2. Χωρίζουμε το τρισδιάστατο μοντέλο σε κατάλληλο αριθμό πεπερασμένων στοιχείων και αφού ετοιμαστεί το πλέγμα επιλέγουμε το είδος της επίλυσης και εισάγουμε όλα τα απαραίτητα για την επίλυση δεδομένα.

3. Όταν ετοιμάσουμε τα προς επίλυση δεδομένα, τα εισάγουμε σε ένα πρόγραμμα το οποίο μας δίνει την επίλυση του προβλήματος. Τέτοιου είδους προγράμματα ονομάζονται επεξεργαστές ή επιλυτές και χρησιμοποιούν αριθμητικές μεθόδους για την επίλυση.

4. Όταν τελειώσει η επίλυση τα αποτελέσματα χρησιμοποιούμε ένα πρόγραμμα που ονομάζεται μετεπεξεργαστής για την μετατροπή των αποτελεσμάτων σε μορφή αξιοποιήσιμη από τον μελετητή.

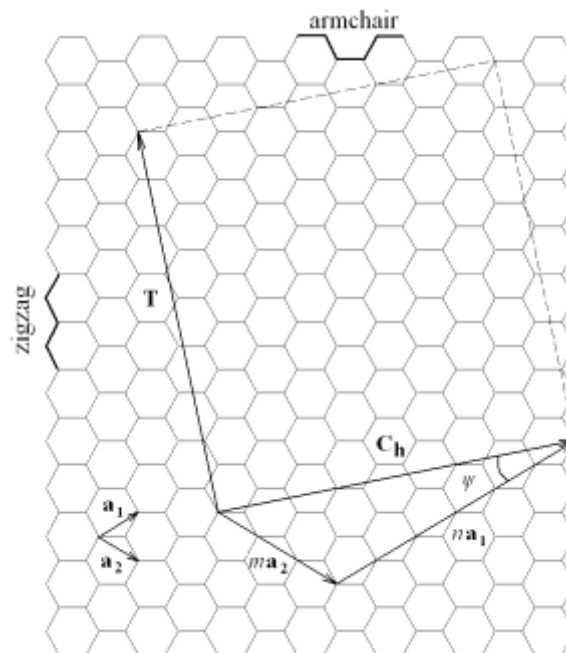
## 4.2 ΠΡΟΤΕΙΝΟΜΕΝΗ ΜΕΘΟΔΟΣ

### 4.2.1 Γεωμετρία μονότοιχου νανωσωλήνα νιτριδίου του βορίου

Η δομή ενός μονότοιχου νανωσωλήνα νιτριδίου του βορίου μπορεί να αναπαραχθεί με την περιστροφή ενός φύλλου γραφενίου, το οποίο ιδεατά κόβεται με τέτοιο τρόπο ώστε να μπορεί να σχηματιστεί ένας κύλινδρος. Το γραφένιο πρέπει να περιστραφεί στην κατεύθυνση που ορίζει το διάνυσμα (chiral vector)  $C_h$ , το οποίο με την σειρά του ορίζεται ως (βλέπε Σχήμα 4.1):

$$C_h = n a_1 + m a_2 \quad (4.1)$$

όπου  $a_1$  και  $a_2$  είναι τα διανύσματα βάσης του κυψελοειδούς δικτυώματος και οι μεταβλητές  $(n, m)$  είναι ακέραιοι αριθμοί που αντιστοιχούν σε αριθμούς βημάτων κατά μήκος δεσμών βορίου – αζώτου μορφής zigzag και γενικά χρησιμοποιούνται για να ονοματίσουν έναν συγκεκριμένο τύπο νανωσωλήνα (Σχήμα 4.1).



**Σχήμα 4.1:** Δημιουργία ενός μονότοιχου νανωσωλήνα από ένα φύλλο νιτριδίου του βορίου.

Ένας νανοσωλήνα τύπου  $(n, n)$  συνήθως ονοματίζεται ως τύπου armchair ενώ ένας νανοσωλήνας τύπου  $(n, 0)$  συνήθως λέγεται zigzag. Η γωνία  $\psi$  ( $0 \leq \psi \leq 30^\circ$ ) ορίζεται ως:

$$\tan \psi = \frac{\sqrt{3}m}{(2n+m)} \quad (4.2)$$

Προφανώς, με απλούς υπολογισμούς μπορεί να διαπιστωθεί ότι ένας νανοσωλήνας τύπου armchair αντιστοιχεί σε γωνία  $\psi = 30^\circ$  ενώ ένας νανοσωλήνας τύπου zigzag αντιστοιχεί σε γωνία  $\psi = 0^\circ$ , αντίστοιχα. Η διάμετρος ενός νανοσωλήνα  $D$  υπολογίζεται από την παρακάτω εξίσωση:

$$D = \frac{r_0 \sqrt{3(n^2 + nm + m^2)}}{\pi} \quad (4.3)$$

όπου  $r_0$  είναι η απόσταση ισορροπίας μεταξύ δυο γειτονικών ατόμων αζώτου και βορίου και με βάση το πεδίο δυνάμεων που είναι αντίστοιχη στην απλή αρμονική προσέγγιση είναι ίσο με 0.145nm.

Η ιδεατή επιφάνεια ενός φύλλου νιτριδίου του βορίου η οποία μπορεί να δημιουργήσει έναν νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου ορίζεται από το διάνυσμα  $\mathbf{C}_h$  και το ακόλουθο διάνυσμα μετατόπισης  $\mathbf{T}$ :

$$\mathbf{T} = \left( \frac{2m+n}{W} \right) \mathbf{a}_1 + \left( -\frac{2n+m}{W} \right) \mathbf{a}_2 \quad (4.4)$$

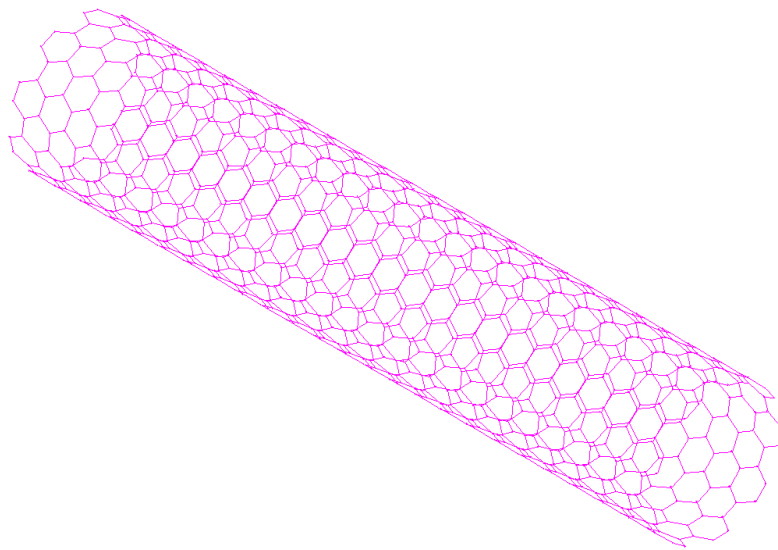
όπου το  $W$  ορίζει τον μέγιστο κοινό διαιρέτη μεταξύ των ποσοτήτων  $2m+n$  και  $2n+m$ .

Για λόγους απλότητας, το αρχικό σύστημα συντεταγμένων του φύλλου νιτριδίου του βορίου  $(x', y')$  μπορεί να μετασχηματιστεί σε ένα νέο τρισδιάστατο σύστημα  $(x, y, z)$  του νανοσωλήνα, ώστε το διάνυσμα  $\mathbf{T}$  να βρίσκεται πάνω στην διεύθυνση που ορίζει ο  $y'$ -άξονας. Με αυτόν τον τρόπο, οι ατομικές συντεταγμένες του νιτριδίου του βορίου μετατρέπονται σε συντεταγμένες νανοσωλήνα σύμφωνα με την εξίσωση:

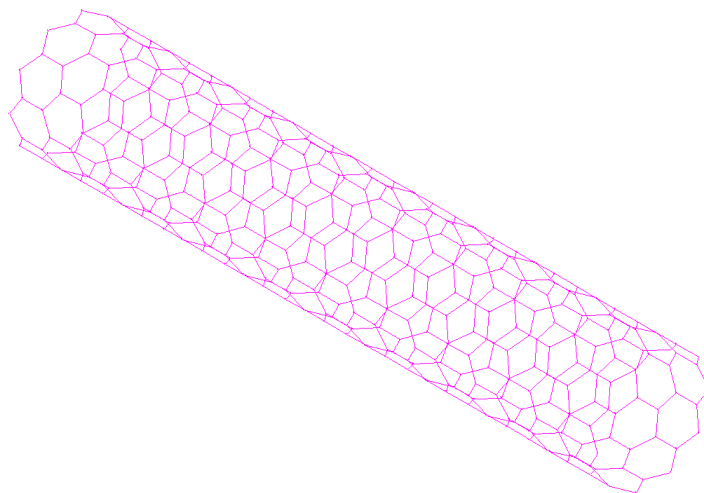
$$(x, y, z) = \left( R \cos\left(\frac{x'}{R}\right), r \sin\left(\frac{x'}{R}\right), y' \right) \quad (4.5)$$

όπου  $R$  είναι η ακτίνα του νανοσωλήνα.

Τα Σχήματα 4.2 και 4.3 παρουσιάζουν δυο χαρακτηριστικές γεωμετρίες ενός νανοσωλήνα τύπου armchair και ενός νανοσωλήνα τύπου zigzag, αντιστοίχως. Μπορεί εύκολα να παρατηρηθεί η ιδιόμορφη διαφορετική διάταξη των άκρων των δύο περιπτώσεων, το σχήμα των οποίων έχει δώσει και την αντίστοιχη ονομασία τους.



**Σχήμα 4.2:** Δομή μονότοιχου νανοσωλήνα τύπου armchair



**Σχήμα 4.3:** Δομή μονότοιχου νανοσωλήνα τύπου zigzag

#### 4.2.2 Θεμελιώδης εξίσωση

Σύμφωνα με τη μοριακή θεωρία το δυναμικό πεδίο που εμφανίζεται μέσα σε έναν νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου, θεωρώντας ότι οι αλληλεπιδράσεις των δεσμών van der Waals είναι αμελητέες, μπορεί να περιγραφεί από την ακόλουθη εξίσωση της συνολικής δυναμικής ενέργειας:

$$U = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum U_\tau \quad (4.6)$$

όπου το  $U_r$  παρουσιάζει την ενέργεια λόγω εφελκυσμού των δεσμών, το  $U_\theta$  την ενέργεια λόγω της κάμψης των δεσμών και το  $U_\tau$  την ενέργεια λόγω της στρέψης των δεσμών. Με την υιοθέτηση μόνο των απλών αρμονικών μορφών οι δυναμικές ενέργειες μπορούν να εκφραστούν, αντίστοιχα ως [6]:

$$U_r = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2 \quad (4.7)$$

$$U_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\Delta \theta)^2 \quad (4.8)$$

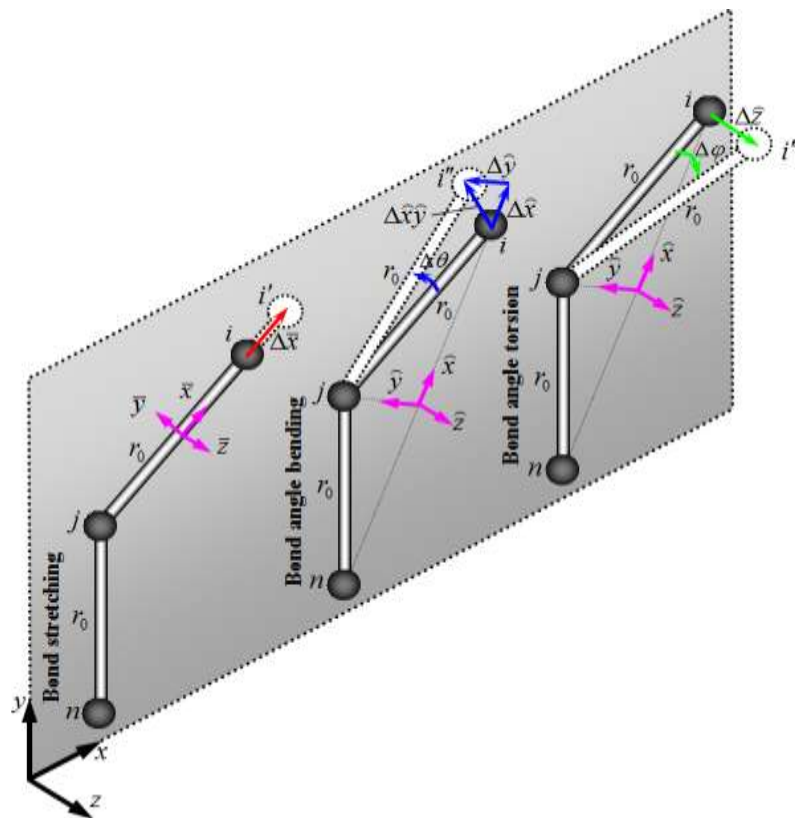
$$U_\tau = \frac{1}{2} k_\tau (\Delta \phi)^2 \quad (4.9)$$

όπου  $k_r$ ,  $k_\theta$  και  $k_\tau$  είναι οι σταθερές δύναμης ένεκα του εφελκυσμού των δεσμών, της κάμψης των δεσμών και της στρέψης των δεσμών οι οποίες λαμβάνονται ίσες με  $k_r = 486.5 \text{ nN nm}^{-1}$ ,  $k_\theta = 0.6952 \text{ nN nm rad}^{-2}$  και  $k_\tau = 0.6255 \text{ nN nm rad}^{-2}$ , αντίστοιχα. Παρομοίως, οι παράμετροι  $\Delta r$ ,  $\Delta \theta$  και  $\Delta \phi$  εκφράζουν τη μεταβολή του μήκους του δεσμού, τη μεταβολή της γωνίας κάμψης του δεσμού και τη μεταβολή της γωνίας στρέψης των δεσμών, αντίστοιχα.

Ας υποθέσουμε ότι η νανοδομή  $ijn$  του Σχήματος 4.4 είναι σε ισορροπία. Η νανοδομή αποτελείται από 2 άτομα βορίου και 1 άτομο αζώτου τα οποία είναι τοποθετημένα στα σημεία  $i$ ,  $j$ , και  $n$ . Η απόσταση μεταξύ των συνδεδεμένων ατόμων όταν βρίσκονται σε ισορροπία είναι  $r_0$ .

Παρατηρούμε μια μεταφορά στο χώρο του ανώτερου ατόμου αζώτου από το σημείο  $i$  στα σημεία  $i'$ ,  $i''$ , και  $i'''$  λόγω του εφελκυσμού των δεσμών, λόγω κάμψης των δεσμών και λόγω στρέψης των δεσμών, αντίστοιχα. Το Σχήμα 4.4 παρουσιάζει ξεχωριστά τις τρεις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων. Προκειμένου να απλοποιηθεί η αριθμητική ανάλυση του προβλήματος, υιοθετήθηκαν δυο διαφορετικά τοπικά συστήματα συντεταγμένων τα οποία φαίνονται στο Σχήμα 4.4.

Το πρώτο ορίζεται σαν  $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$  και χρησιμοποιείται για την ανάλυση των αλληλεπιδράσεων του εφελκυσμού μεταξύ των ατόμων βορίου – αζώτου. Παρατηρούμε ότι ο  $\bar{x}$ -άξονας του συγκεκριμένου τοπικού συστήματος συντεταγμένων συμπίπτει με τις  $ij$  γραμμές. Ο προσανατολισμός του  $\bar{y}$ -άξονα δεν έχει καμία σημασία. Το δεύτερο το οποίο ορίζεται σαν  $(\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ , χρησιμοποιείται για να περιγράψει τις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των δεσμών βορίου - αζώτου, δηλαδή τη κάμψη των δεσμών και τη στρέψη των δεσμών. Ο  $\hat{x}$ -άξονας του συγκεκριμένου τοπικού συστήματος συντεταγμένων συμπίπτει με τις  $in$  γραμμές ενώ ο  $\hat{y}$ -άξονας βρίσκεται στο  $ijn$  επίπεδο.



**Σχήμα 4.4:** Ανάλυση των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων σε τοπικά συστήματα συντεταγμένων



Σύμφωνα με αυτά τα δυο τοπικά συστήματα συντεταγμένων η μεταβολή του μήκους, η μεταβολή και η μεταβολή της γωνία στρέψης των δεσμών μπορεί να εκφραστούν αντίστοιχα ως εξής:

$$\Delta r = \Delta \bar{x} \quad (4.10)$$

$$\Delta \theta = \frac{\Delta \bar{x} \bar{y}}{r_0} = \frac{\sqrt{(\Delta \bar{x})^2 + (\Delta \bar{y})^2}}{r_0} \quad (4.11)$$

$$\Delta \phi = \frac{\Delta \bar{z}}{r_0} \quad (4.12)$$

όπου  $\Delta \bar{x}$  είναι το μήκος της  $i'$  γραμμής η οποία αντιστοιχεί στη μετατόπιση του ανώτερου ατόμου άνθρακα κατά μήκος του  $\bar{x}$ -άξονα εξαιτίας της αλληλεπίδρασης εφελκυσμού του δεσμού. Επιπλέον το  $\Delta \bar{x} \bar{y}$  είναι το μήκος της  $i''$  γραμμής που βρίσκεται στο επίπεδο  $\bar{x} \bar{y}$ , εξαιτίας της αλληλεπίδρασης κάμψης των δεσμών. Οι μεταβολές  $\Delta \bar{x}$  και  $\Delta \bar{y}$  παρουσιάζουν τη μετατόπιση του άνω ατόμου άνθρακα κατά μήκος του  $\bar{x}$ -άξονα και του  $\bar{y}$ -άξονα, αντίστοιχα, για την περίπτωση όπου η γωνία των δεσμών κάμπτεται. Καταλήγοντας, το  $\Delta \bar{z}$  είναι το μήκος της  $i'''$  γραμμής, το οποίο αντιστοιχεί στο άνω άτομο άνθρακα κατά μήκος του  $\bar{z}$ -άξονα λόγω της αλληλεπίδρασης στρέψης των δεσμών.

Με αντικατάσταση των εξισώσεων (4.7) έως (4.12) στην εξίσωση (4.6) προκύπτει η ακόλουθη κατάλληλα μετασχηματισμένη θεμελιώδης εξίσωση:

$$U = \sum \frac{1}{2} k_r (\Delta \bar{x})^2 + \sum \frac{1}{2} \frac{k_\theta}{r_0^2} (\Delta \bar{x})^2 + \sum \frac{1}{2} \frac{k_\theta}{r_0^2} (\Delta \bar{y})^2 + \sum \frac{1}{2} \frac{k_\tau}{r_0^2} (\Delta \bar{z})^2 \quad (4.13)$$

Είναι προφανές ότι ο δεύτερος από τους τέσσερις δυναμικούς όρους που εμφανίζεται στην αριστερή πλευρά της παραπάνω εξίσωσης, παράγει τους αντίστοιχους συντελεστές δυσκαμψίας, ίσους με:

$$k_{\bar{x}} = k_r \quad (4.14)$$

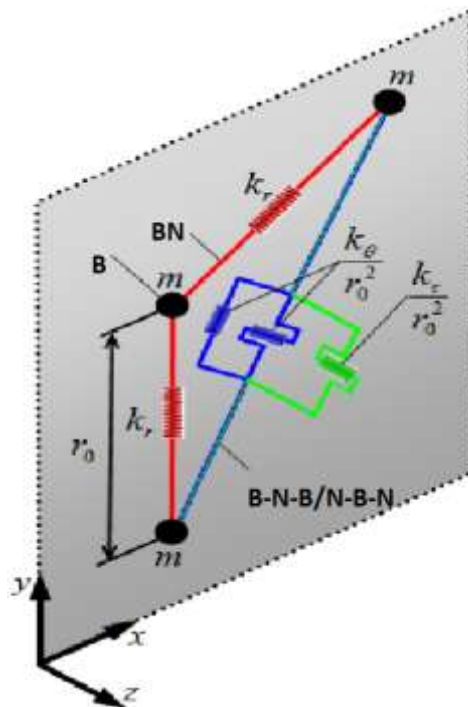
$$k_{\bar{x}} = \frac{k_{\theta}}{r_0^2} \quad (4.15)$$

$$k_{\bar{y}} = \frac{k_{\theta}}{r_0^2} \quad (4.16)$$

$$k_{\bar{z}} = \frac{k_{\tau}}{r_0^2} \quad (4.17)$$

### 4.2.3 Υιοθετούμενα πεπερασμένα στοιχεία και εξισώσεις

Προκειμένου να συμπεριλάβουμε τις προαναφερόμενες παραμέτρους δυσκαμψίας στην ανάλυση των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου, θα χρησιμοποιηθούν δύο είδη πεπερασμένων στοιχείων τύπου ελατηρίου. Τα στοιχεία αυτά τα οποία δηλώνονται σαν BN και B-N-B στο Σχήμα 4.5, είναι γραμμικά στοιχεία, ορίζονται από δυο κόμβους και έχουν έξι βαθμούς ελευθερίας ανά κόμβο δηλαδή τις τρεις μετατοπίσεις [6].



**Σχήμα 4.5:** Προσομοίωση των αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων βορίου και αζώτου μέσω των προτεινόμενων στοιχείων τύπου ελατηρίου και μάζας.

Τα στοιχεία BN χρησιμοποιούνται για την προσομοίωση των αλληλεπιδράσεων εφελκυσμού των δεσμών και έχουν το ακόλουθο μητρώο δυσκαμψίας σε σχέση με το τριών διαστάσεων τοπικό σύστημα συντεταγμένων τους  $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ :

$$\mathbf{K}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{BN} = \begin{bmatrix} \mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{BN} & -\mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{BN} \\ -\mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{BN} & \mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{BN} \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

όπου:

$$\mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{BN} = \begin{bmatrix} k_r & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

Τα στοιχεία BNB χρησιμοποιούνται για την ταυτόχρονη προσομοίωση της κάμψης και στρέψης των δεσμών και το μητρώο δυσκαμψίας τους, που εκφράζεται από των τριών διαστάσεων σύστημα συντεταγμένων  $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ , είναι:

$$\mathbf{K}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{BNB} = \begin{bmatrix} \mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{BNB} & -\mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{BNB} \\ -\mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{BNB} & \mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{BNB} \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

όπου:

$$\mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{BNB} = \frac{1}{r_0^2} \begin{bmatrix} k_\theta & 0 & 0 \\ 0 & k_\theta & 0 \\ 0 & 0 & k_\tau \end{bmatrix} \quad (4.21)$$

Καταλήγοντας, ειδικά σημειακά πεπερασμένα στοιχεία μάζα τριών βαθμών ελευθερίας, τα οποία συμβολίζονται με B ή N, τοποθετούνται στις ατομικές θέσεις αζώτου ή βορίου προκειμένου να προσομοιώσουν την αδρανειακή επίδραση των ατόμων αζώτου ή βορίου.

Τα στοιχεία αυτά απαρτίζονται από ένα κόμβο και το μητρώο της μάζας τους το οποίο εκφράζεται από το παγκόσμιο σύστημα συντεταγμένων  $(x, y, z)$  έχει την ακόλουθη μορφή:

$$\mathbf{M}_{xyz}^B = \begin{bmatrix} \mathbf{m}_{xyz}^B & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (4.22)$$

όπου:

$$\mathbf{m}_{xyz}^B = \begin{bmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & m \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

Το ποσό της μάζας  $m$  του παραπάνω μητρώου ισούται με τη μάζα του ατόμου βορίου  $m_c = 1.9943 \times 10^{-26}$  kg

Στη συνέχεια, προκειμένου να ολοκληρωθεί η αριθμητική διατύπωση του υπό εξέταση προβλήματος, κατασκευάζουμε το σύστημα γραμμικών εξισώσεων λαμβάνοντας υπ' όψη τη γνωστή γεωμετρία του νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου, δηλαδή τις θέσεις των ατόμων βορίου - αζώτου. Έπειτα οι μητρικές εξισώσεις όλων των στοιχείων  $B, N, BN$  και  $BNB, NBN$  του νανοσωλήνα αφού μετασχηματισθούν στο παγκόσμιο σύστημα συντεταγμένων  $(x, y, z)$  συναρμολογούνται στην ακόλουθη μητρική εξίσωση ελεύθερης ταλάντωσης:

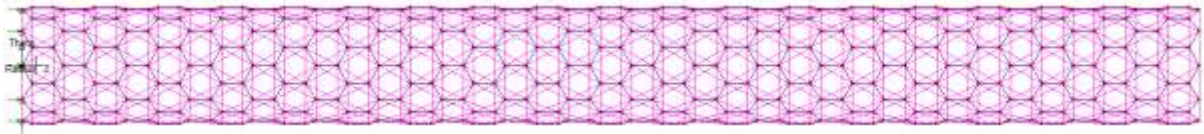
$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}} + \mathbf{K}\mathbf{U} = \mathbf{0} \quad (4.24)$$

όπου  $\mathbf{M}$  και  $\mathbf{K}$  είναι τα συναρμολογημένα μητρώα μάζας και δυσκαμψίας, αντίστοιχα ενώ το  $\mathbf{U}$  είναι το διάνυσμα μετατόπισης. Η άνω τελεία συμβολίζει την παράγωγο σε σχέση με το χρόνο. Προφανώς η παραπάνω εξίσωση δεν λαμβάνει υπόψη φαινόμενα απόσβεσης.

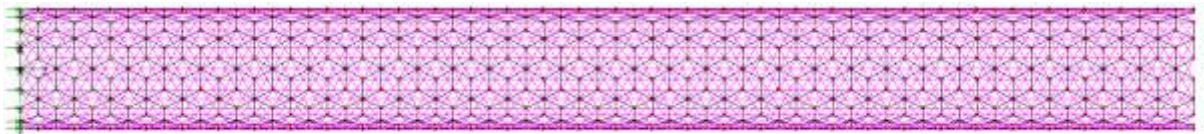
Το πρόβλημα των ιδιοτιμών μπορεί να λυθεί με την εφαρμογή των συνοριακών συνθηκών στην τελευταία εξίσωση και έτσι οι φυσικές συχνότητες και οι αντίστοιχες ιδιομορφές μπορούν να καθοριστούν [6].

## 5. ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ

Στα σχήματα (5.1) και (5.2) φαίνονται δύο από τα μοντέλα με το οποία δουλέψαμε.

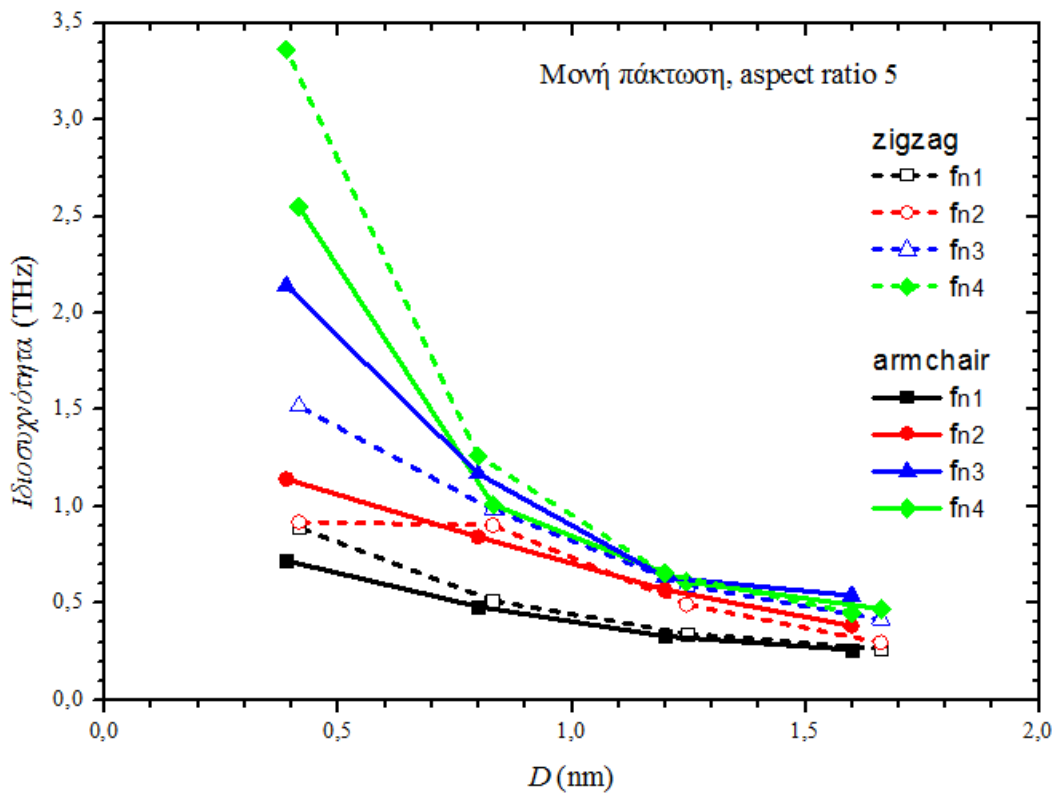


Σχήμα 5.1: Μοντέλο νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου zigzag (10,0)



Σχήμα 5.2: Μοντέλο νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου armchair (6,6)

















Αρχικά υπολογίζουμε τις τέσσερις πρώτες ιδιοσυχνότητες των νανοσωλήνων για τις περιπτώσεις μονόπακτης καθώς και αμφίπακτης στήριξης. Η μεταβολή των τεσσάρων πρώτων ιδιοσυχνοτήτων  $f_{n1}$ ,  $f_{n2}$ ,  $f_{n3}$ ,  $f_{n4}$  σε σχέση με τη διάμετρο των μονόπακτων νανοσωλήνων απεικονίζεται στο Σχήμα 5.3.



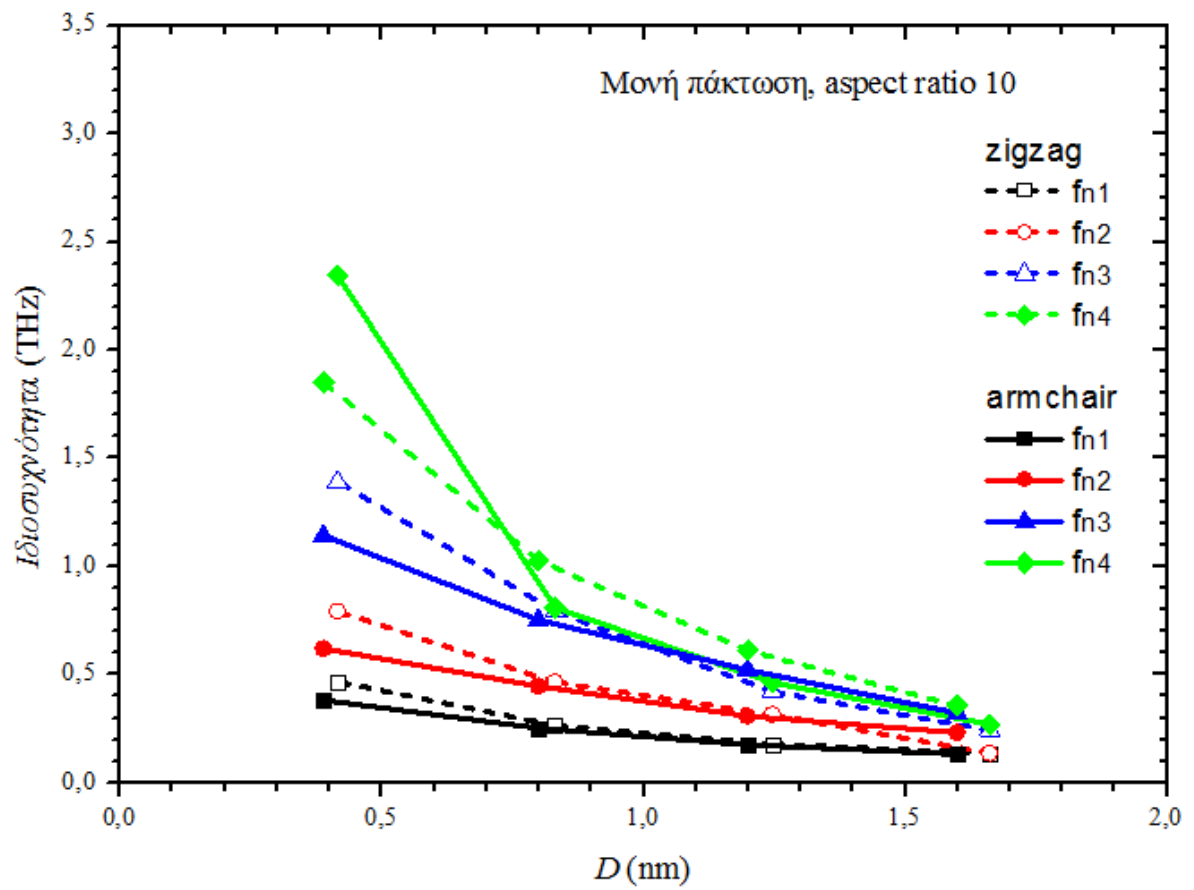
Σχήμα 5.3: Τέσσερις πρώτες ιδιοσυχνότητες μονόπακτου νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου σε σχέση με διάμετρο

Ιδιομορφές Μονόπακτου Armchair Νανοσωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=5$				
	1 <sup>η</sup>	2 <sup>η</sup>	3 <sup>η</sup>	4 <sup>η</sup>
(3,3)				
(6,6)				
(9,9)				
(12,12)				

Σχήμα 5.4: Ιδιομορφές armchair νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου





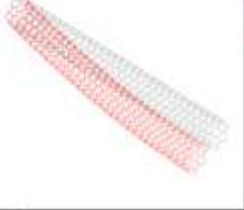










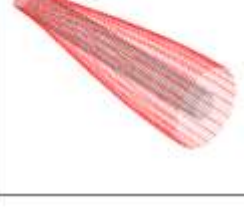
Ιδιομορφές Μονόπακτου Zigzag Νανοςωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=5$				
	1 <sup>η</sup>	2 <sup>η</sup>	3 <sup>η</sup>	4 <sup>η</sup>
(5,0)				
(10,0)				
(15,0)				
(20,0)				

Σχήμα 5.5: Ιδιομορφές zigzag νανοςωλήνα νιτριδίου του βορίου



Σχήμα 5.6: Τέσσερις πρώτες ιδιοσυχνότητες μονόπακτου νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου σε σχέση με διάμετρο

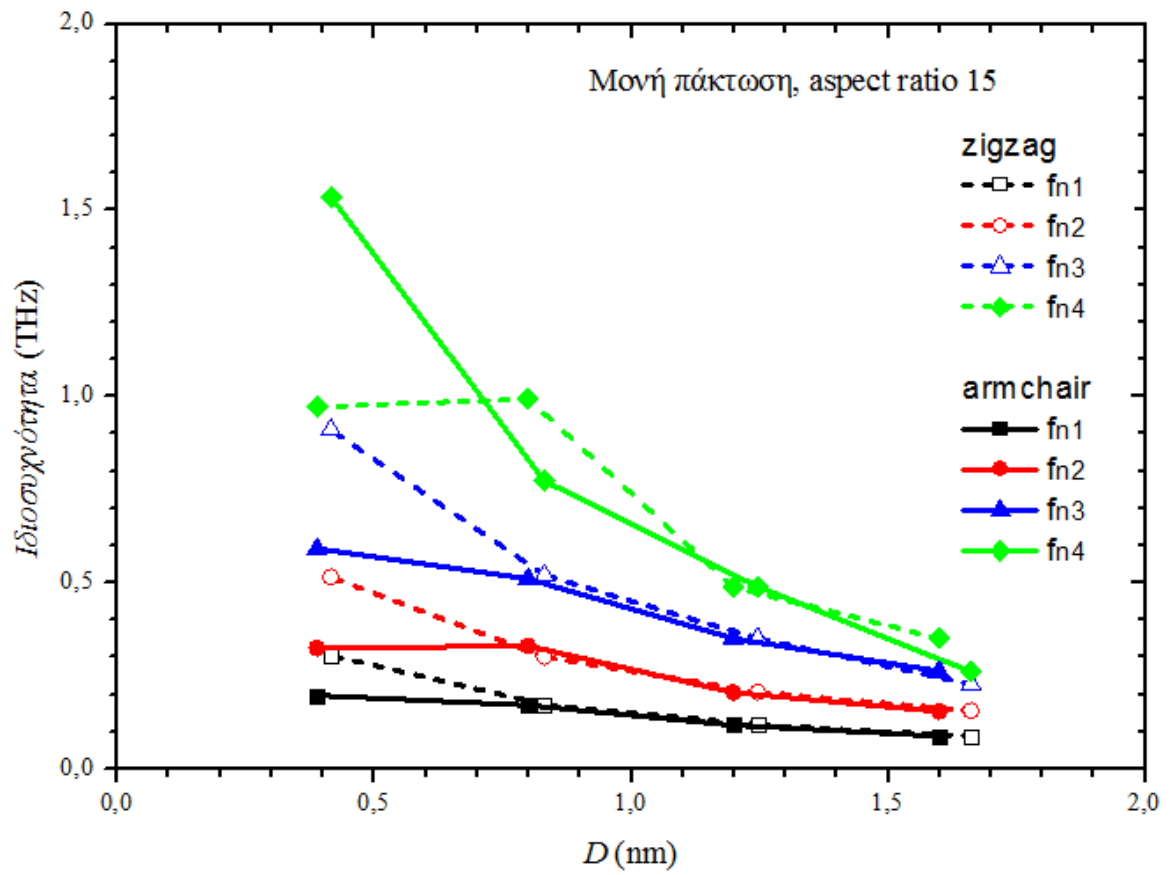


Ιδιομορφές Μονόπακτου Armchair Νανοςωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=10$				
	1 <sup>η</sup>	2 <sup>η</sup>	3 <sup>η</sup>	4 <sup>η</sup>
(3,3)				
(6,6)				
(9,9)				
(12,12)				

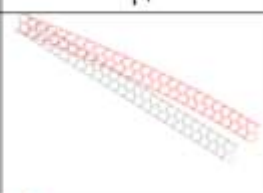
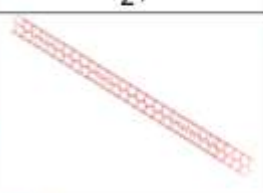
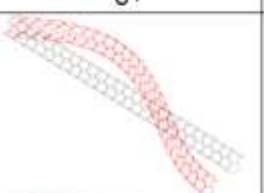
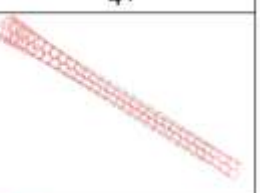


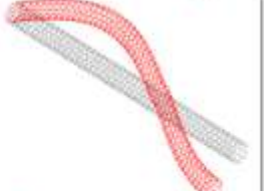

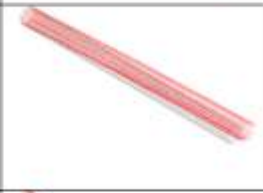
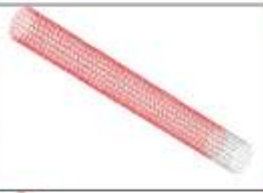
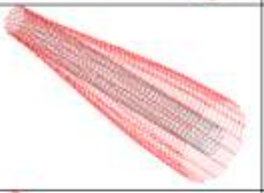

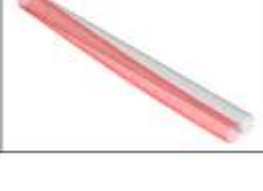
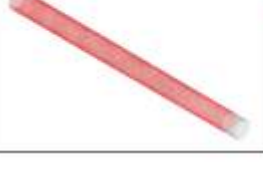


Σχήμα 5.7: Ιδιομορφές armchair νανοςωλήνα νιτριδίου του βορίου

Ιδιομορφές Μονόπακτου Zigzag Νανοςωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=10$				
	1 <sup>η</sup>	2 <sup>η</sup>	3 <sup>η</sup>	4 <sup>η</sup>
(5,0)				
(10,0)				
(15,0)				
(20,0)				

Σχήμα 5.8: Ιδιομορφές zigzag νανοςωλήνα νιτριδίου του βορίου



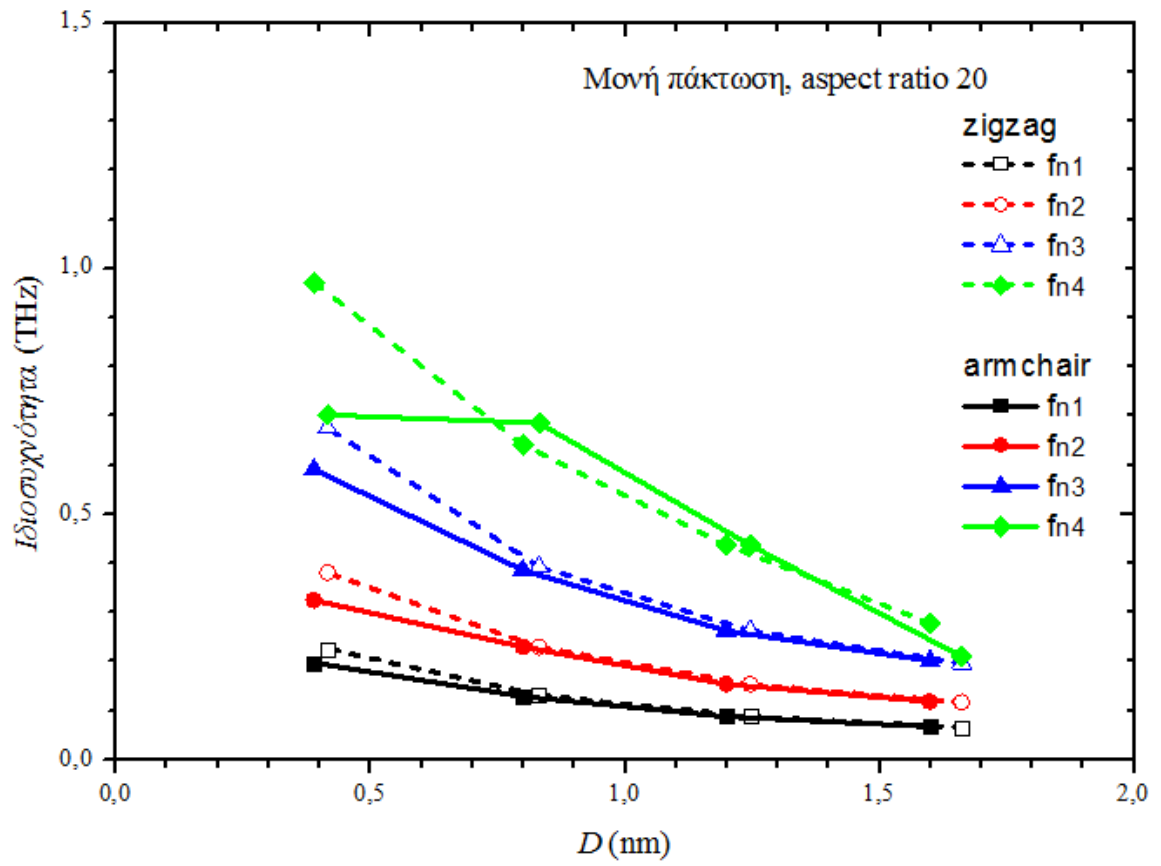
Σχήμα 5.9: Τέσσερις πρώτες ιδιοσυχνότητες μονόπακτου νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου σε σχέση με διάμετρο

Ιδιομορφές Μονόπακτου Armchair Νανოსωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=15$				
	1 <sup>η</sup>	2 <sup>η</sup>	3 <sup>η</sup>	4 <sup>η</sup>
(3,3)				
(6,6)				
(9,9)				
(12,12)				

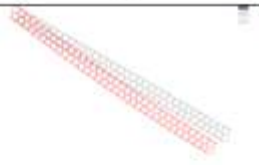
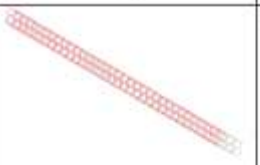
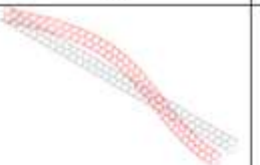
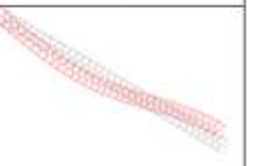
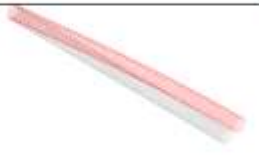

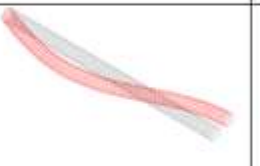
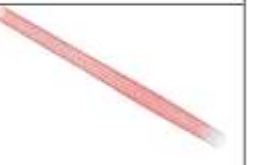





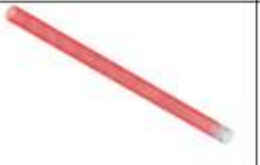


Σχήμα 5.10: Ιδιομορφές armchair νανοςωλήνα νιτριδίου του βορίου

Ιδιομορφές Μονόπακτου Zigzag Νανοσωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=15$				
	1 <sup>η</sup>	2 <sup>η</sup>	3 <sup>η</sup>	4 <sup>η</sup>
(5,0)				
(10,0)				
(15,0)				
(20,0)				



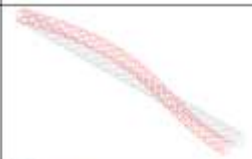




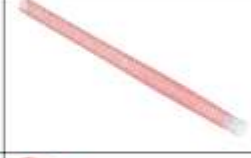

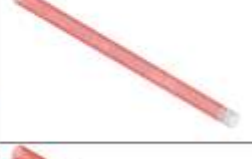
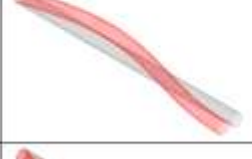
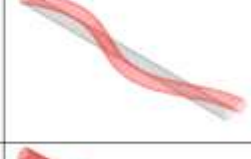


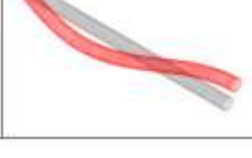

Σχήμα 5.11: Ιδιομορφές zigzag νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου



Σχήμα 5.12: Τέσσερις πρώτες ιδιοσυχνότητες μονόπακτου νανოსωλήνα νιτριδίου του βορίου σε σχέση με διάμετρο

Ιδιομορφές Μονόπακτου Armchair Νανοσωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=20$				
	1 <sup>η</sup>	2 <sup>η</sup>	3 <sup>η</sup>	4 <sup>η</sup>
(3,3)				
(6,6)				
(9,9)				
(12,12)				

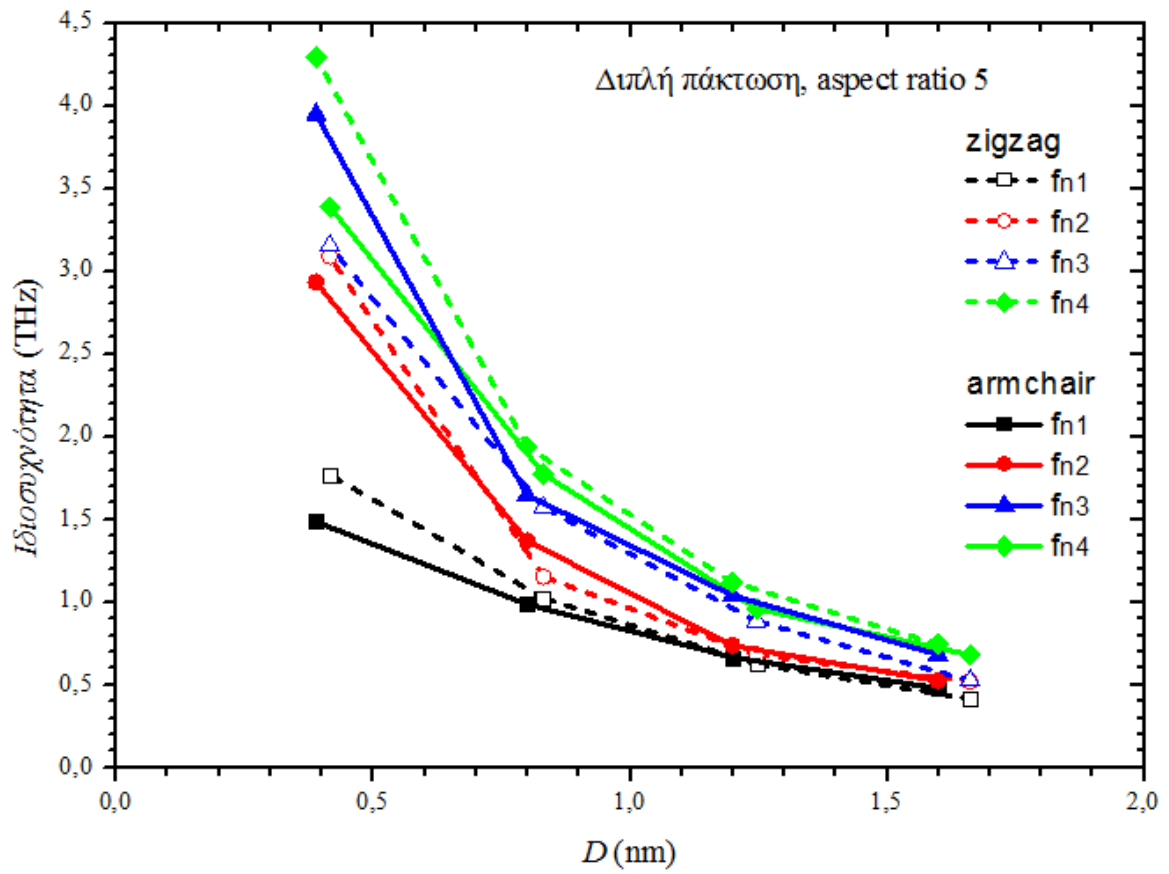
Σχήμα 5.13: Ιδιομορφές armchair νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου

	Ιδιομορφές Μονόπακτου Zigzag Νανοσωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=20$			
	1 <sup>η</sup>	2 <sup>η</sup>	3 <sup>η</sup>	4 <sup>η</sup>
(5,0)				
(10,0)				
(15,0)				
(20,0)				

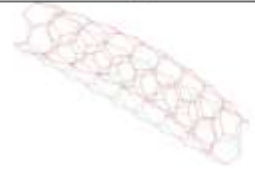






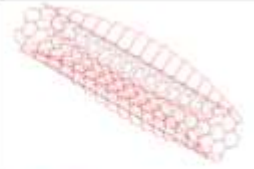








Σχήμα 5.14: Ιδιομορφές zigzag νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου

Είναι φανερό ότι για την περίπτωση του μονόπακτου νανοσωλήνα η γραμμική αύξηση της διαμέτρου οδηγεί σε εκθετική θα μπορούσαμε να πούμε μείωση των ιδιοσυχνοτήτων του. Για μεγαλύτερους κατά διάμετρο νανοσωλήνες λαμβάνονται εμφανώς μικρότερες ιδιοσυχνότητες λόγω των περισσότερων ατόμων αζώτου και βορίου που υπάρχουν στη νανοδομή και άρα της μεγαλύτερης συνολικής μάζας. Επίσης παρατηρείται ότι γενικά για μικρούς σε διάμετρο νανοσωλήνες η armchair μορφή παρέχει ελάχιστα μεγαλύτερες ιδιομορφές σε σχέση με τον zigzag, φαινόμενο που αντιστρέφεται για μεγάλες διαμέτρους. Στα παρακάτω σχήματα παρουσιάζονται οι αντίστοιχες ιδιομορφές που ελήφθησαν για την περίπτωση των armchair και zigzag νανοσωλήνων για τέσσερις διαφορετικές περιπτώσεις του λόγου του μήκους του νανοσωλήνα προς τη διάμετρο του ( $l/d$ ). Οι περιπτώσεις αυτές όπως φαίνεται και στα σχήματα είναι  $l/d=5$ ,  $l/d=10$ ,  $l/d=15$  και  $l/d=20$ . Γίνεται εύκολα αντιληπτή η ομοιότητα στην ταλαντωτική συμπεριφορά και για τους δύο τύπους νανοσωλήνων.





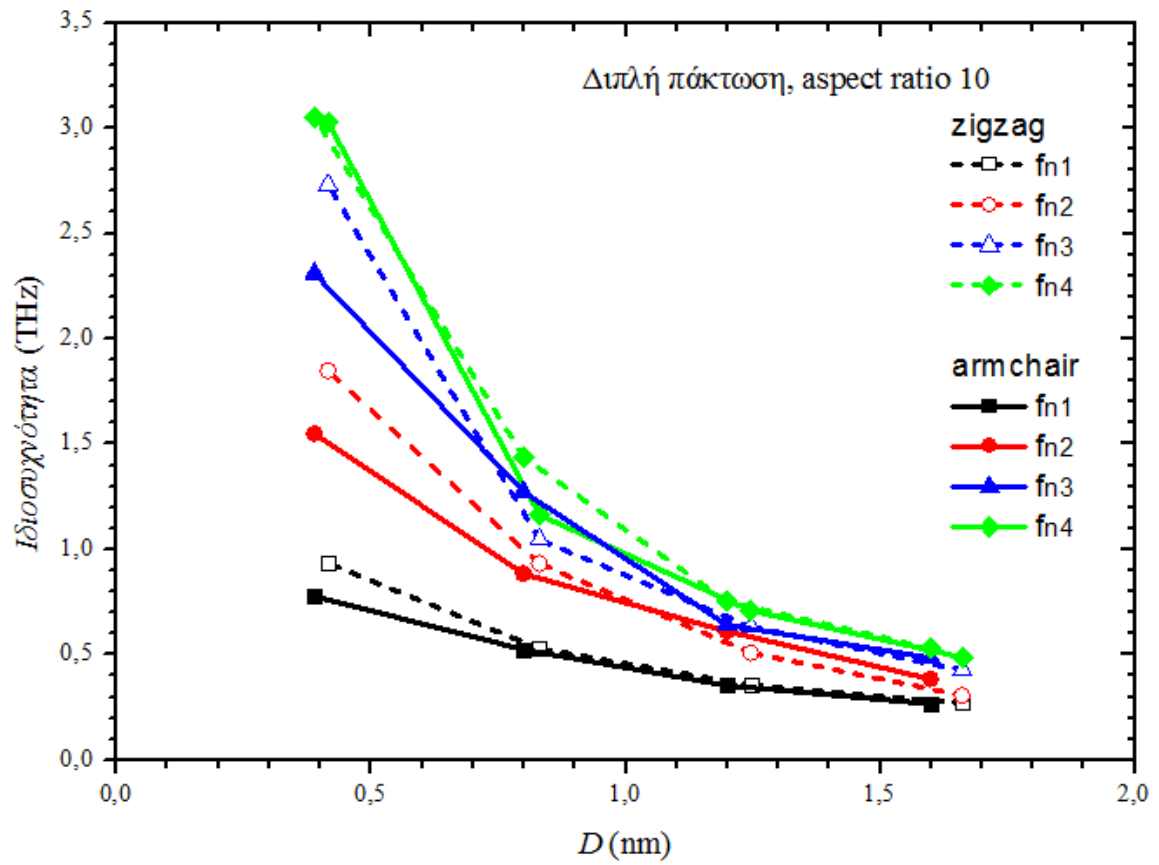
Σχήμα 5.15: Τέσσερις πρώτες ιδιοσυχνότητες αμφίπακτου νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου σε σχέση με διάμετρο

Ιδιομορφές Αμφίπακτου Armchair Νανოსωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=5$				
	1 <sup>η</sup>	2 <sup>η</sup>	3 <sup>η</sup>	4 <sup>η</sup>
(3,3)				
(6,6)				
(9,9)				
(12,12)				





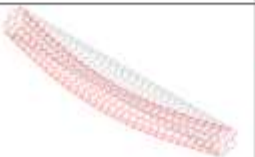
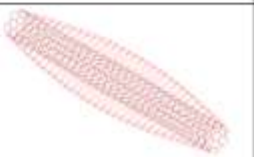










Σχήμα 5.16: Ιδιομορφές armchair νανοςωλήνα νιτριδίου του βορίου

	Ιδιομορφές Αμφίπακτου Zigzag Νανοσωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=5$			
	1 <sup>η</sup>	2 <sup>η</sup>	3 <sup>η</sup>	4 <sup>η</sup>
(5,0)				
(10,0)				
(15,0)				
(20,0)				














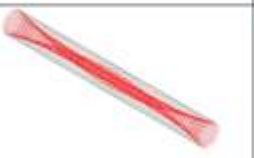


Σχήμα 5.17: Ιδιομορφές zigzag νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου



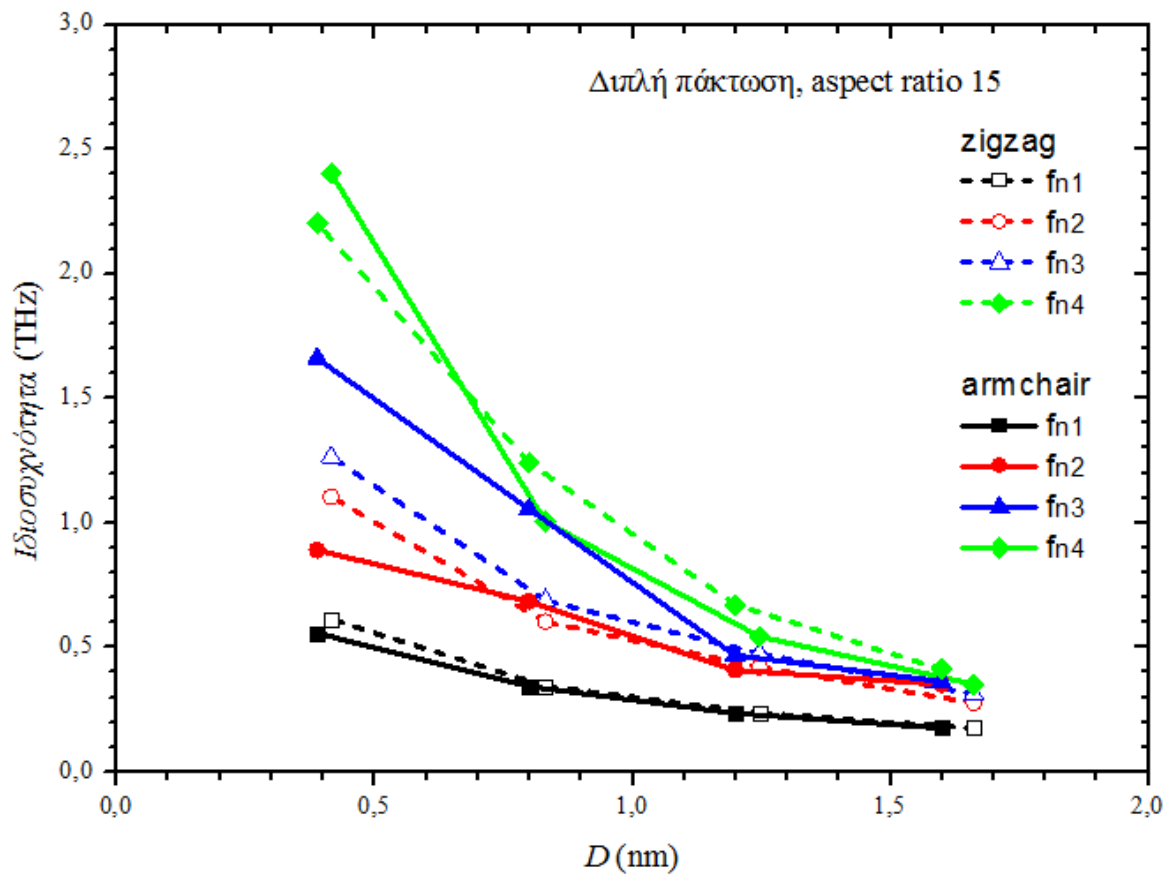
Σχήμα 5.18: Τέσσερις πρώτες ιδιοσυχνότητες αμφίπακτου νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου σε σχέση με διάμετρο

Ιδιομορφές Αμφίπακτου Armchair Νανοσωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=10$				
	1 <sup>η</sup>	2 <sup>η</sup>	3 <sup>η</sup>	4 <sup>η</sup>
(3,3)				
(6,6)				
(9,9)				
(12,12)				

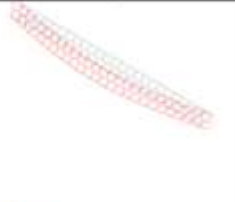


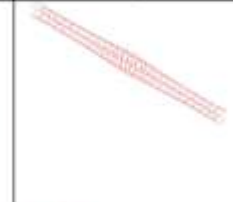
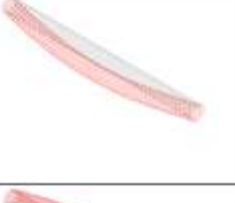
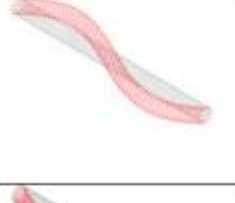


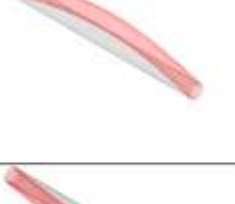
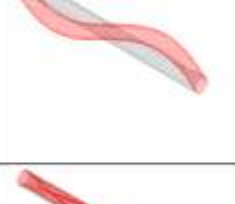
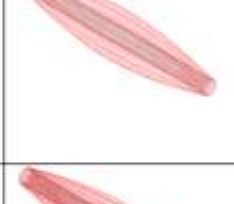





Σχήμα 5.19: Ιδιομορφές armchair νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου

Ιδιομορφές Αμφίπακτου Zigzag Νανοσωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=10$				
	1 <sup>η</sup>	2 <sup>η</sup>	3 <sup>η</sup>	4 <sup>η</sup>
(5,0)				
(10,0)				
(15,0)				
(20,0)				

Σχήμα 5.20: Ιδιομορφές zigzag νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου



Σχήμα 5.21: Τέσσερις πρώτες ιδιοσυχνότητες αμφίπακτου νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου σε σχέση με διάμετρο

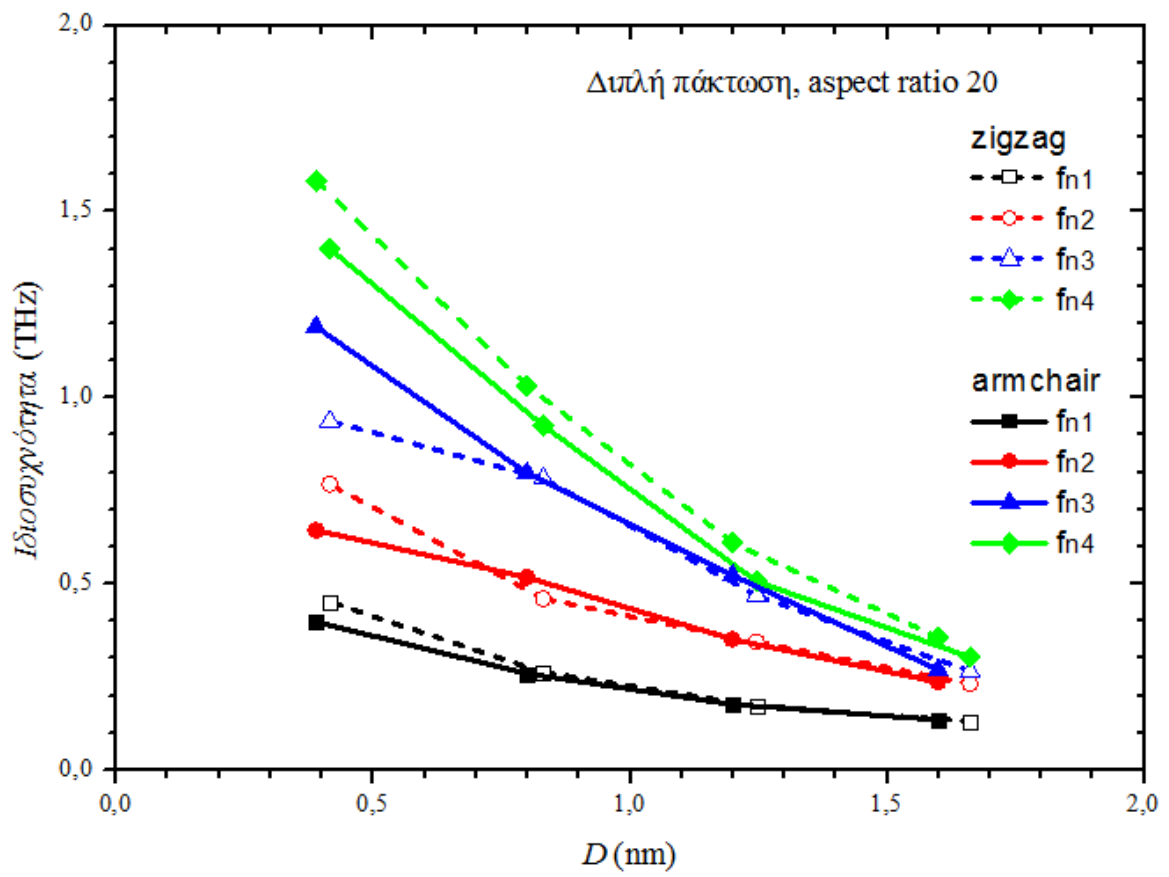
Ιδιομορφές Αμφίπακτου Armchair Νανοςωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=15$				
	1 <sup>η</sup>	2 <sup>η</sup>	3 <sup>η</sup>	4 <sup>η</sup>
(3,3)				
(6,6)				
(9,9)				
(12,12)				

Σχήμα 5.21: Ιδιομορφές armchair νανοςωλήνα νιτριδίου του βορίου

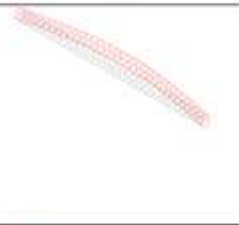
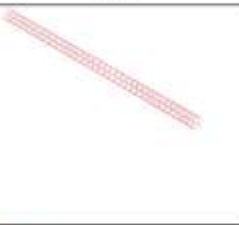
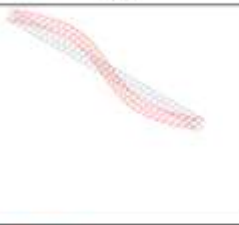
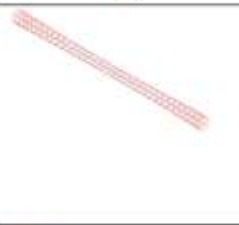


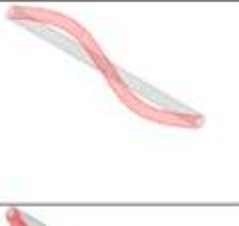
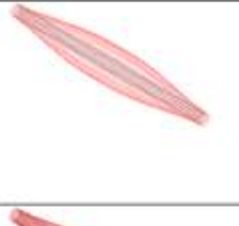


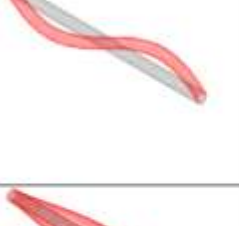
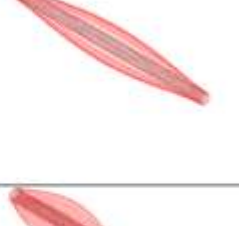




Ιδιομορφές Αμφίπακτου Zigzag Νανοςωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=15$				
	1 <sup>η</sup>	2 <sup>η</sup>	3 <sup>η</sup>	4 <sup>η</sup>
(5,0)				
(10,0)				
(15,0)				
(20,0)				

Σχήμα 5.22: Ιδιομορφές zigzag νανοςωλήνα νιτριδίου του βορίου





Σχήμα 5.23: Τέσσερις πρώτες ιδιοσυχνότητες αμφίπακτου νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου σε σχέση με διάμετρο

Ιδιομορφές Αμφίπακτου Armchair Νανοςωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=20$				
	1η	2η	3η	4η
(3,3)				
(6,6)				
(9,9)				
(12,12)				

Σχήμα 5.24: Ιδιομορφές armchair νανοςωλήνα νιτριδίου του βορίου

Ιδιομορφές Αμφίπακτου Zigzag Νανოსωλήνα Νιτριδίου του Βορίου Για $l/d=20$				
	1 <sup>η</sup>	2 <sup>η</sup>	3 <sup>η</sup>	4 <sup>η</sup>
(5,0)				
(10,0)				
(15,0)				
(20,0)				

Σχήμα 5.25: Ιδιομορφές zigzag νανοςωλήνα νιτριδίου του βορίου

Παρακάτω παρουσιάζονται οι τέσσερις πρώτες περιπτώσεις παραμόρφωσης για κάθε μοντέλο νανοςωλήνα σε όλα τους λόγους μήκους προς διάμετρο για τους οποίους δουλέψαμε για μοντέλα με πάκτωση και στα δύο άκρα του μοντέλου. Με το μαύρο χρώμα βλέπουμε το μοντέλο στην απαραμόρφωτη κατάσταση και με το κόκκινο το βλέπουμε παραμορφωμένο. Όλες οι εικόνες είναι φωτογραφίες από το πρόγραμμα των πεπερασμένων στοιχείων Lusas FEA.

## 6. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στην παρούσα πτυχιακή προτάθηκε και διερευνήθηκε αριθμητικά η ταλαντωτική συμπεριφορά νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου. Για το σκοπό αυτό υιοθετήθηκε η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων για τη μοντελοποίηση των νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου σε ατομικό επίπεδο. Για την προσομοίωση των διατομικών αλληλεπιδράσεων υιοθετήθηκαν αντίστοιχες δυναμικές εξισώσεις ενέργειας που προτείνονται στη μοριακή χημεία. Οι εξισώσεις αυτές οδήγησαν στην χρήση πεπερασμένων στοιχείων τύπου ελατηρίου κατάλληλων συντελεστών δυσκαμψίας. Για την προσέγγιση των αδρανειακών φαινομένων λήφθηκε υπ' όψιν η ατομική μάζα του βορίου και του αζώτου στις αντίστοιχες ατομικές θέσεις. Εξετάσθηκαν τόσο armchair όσο και zigzag τύποι νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου, διαφορετικών παραμέτρων και λόγου συνολικού μήκους σωλήνα προς τη διάμετρο αυτού ώστε να φανεί η επίδραση της γεωμετρίας στην ιδιοσυχνότητα του νανοσωλήνα. Επίσης εξετάσθηκε η μονόπλευρη και η αμφίπλευρη περίπτωση στήριξης των μοντέλων. Στο παρόν τεύχος παρατέθηκαν πλήθος αποτελεσμάτων παραμετρικά δοσμένων όσον αφορά τις μεταβολές των τεσσάρων πρώτων ιδιοσυχνοτήτων καθώς και των αντίστοιχων ιδιομορφών για να δοθούν οι σχεδιαστικές κατευθύνσεις για πιθανή μελλοντική χρήση νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου. Από τα αποτελέσματα που παρουσιάστηκαν εξάγουμε μια σειρά από σημαντικά συμπεράσματα:

- Η γεωμετρία παίζει σημαίνοντα ρόλο στην ιδιοσυχνότητα του νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου.
- Μεγαλώνοντας τη διάμετρο η ιδιοσυχνότητα τείνει να μειώνεται καθώς τα πιο πολλά άτομα που υπάρχουν στη δομή καθιστούν την ταλάντωση δυσκολότερη.
- Οι τύπου zigzag νανοσωλήνες εμφανίζουν μεγαλύτερες αριθμητικές τιμές ιδιοσυχνοτήτων από τους τύπου armchair κατά κανόνα.
- Για μικρές διαμέτρους οι διαφορές μεταξύ των zigzag και των armchair είναι μεγάλες αλλά όσο η διάμετρος μεγαλώνει οι διαφορές τείνουν να απαλείφονται.
- Ο zigzag τύπος φαίνεται πιο ευαίσθητος στην ταλάντωση από τον armchair.
- Η αμφίπλευρη πάκτωση εμφανίζει στους νανοσωλήνες μεγαλύτερες αριθμητικά ιδιοσυχνότητες από την μονόπλευρη.

## ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. Rubio A., Corkill J.L., Cohen M.L., *Theory of graphitic boron nitride nanotubes*, Physical Review B, Vol 49, pp 5081-5084, 1994
2. Golberg D., Bando Y., Eremets M., Takemura K., Kurashima K., Yusa, H., *Nanotubes in boron nitride laser heated at high pressure*, Applied physics letters, Vol 69, pp. 2045-2047, 1996
3. Chopra N.G., Luyken R.J., Cherrey K., Crespi V.H., Cohen M.L., Louie S.G., Zettl A., *Boron nitride nanotubes*, Science, Vol 269, pp. 966-967, 1995
4. Golberg D., Bando Y., Tang C., Zhi C., *Boron Nitride nanotubes*, Advanced Materials, Vol 18, pp. 2413-2432, 2007
5. Golberg D., Bando Y., Huang Y., Terao, T., Mitome M., Tang C., Zhi C., *Boron nitride nanotubes and nanosheets*, ACS Nano, Vol 4 p.p. 2979-2993
6. Giannopoulos G.I., *Fullerenes as mass sensors: A numerical investigation*, Computational Materials Science, Vol 56, pp. 36-42, 2013.

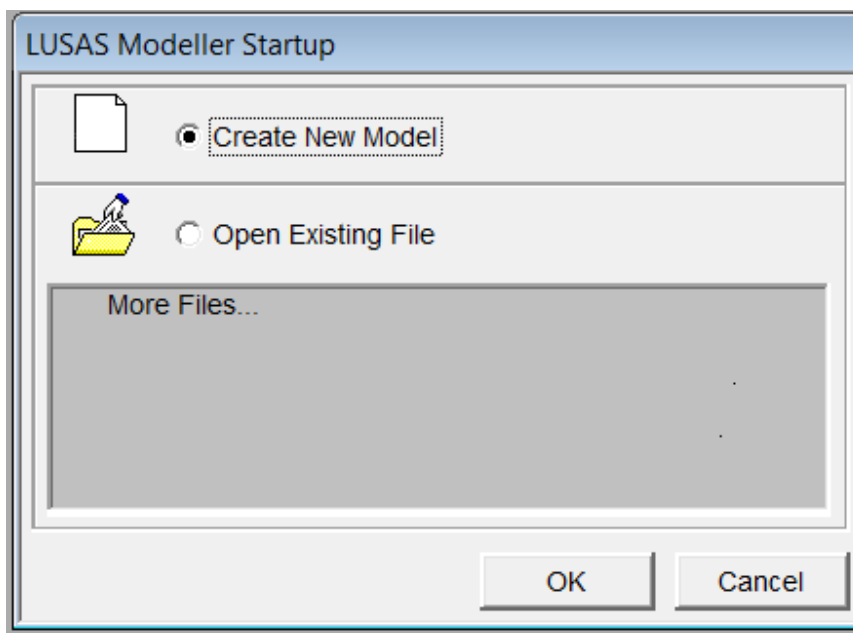
## ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

Στο παράρτημα αυτό θα δοθούν με λεπτομέρεια οι οδηγίες μοντελοποίησης ενός μονότοιχου ναοσωλήνα νιτριδίου του βορίου προκειμένου να έχει τη δυνατότητα ο μελλοντικός αναγνώστης να επαναλάβει την όλη διαδικασία μόνος του.

Με το LUSAS όπως και με κάθε άλλο πρόγραμμα ανάλυσης, ο χρήστης μηχανικός είναι ο μόνος υπεύθυνος για τυχόν λάθη που θα παρουσιάσει το πρόγραμμα στα αποτελέσματα, αφού πρέπει να γνωρίζει με βεβαιότητα τι εισάγει σε αυτό.

Ακολουθεί ένας οδηγός όπου παρατίθεται βήμα-βήμα η κατασκευή του zigzag μονότοιχου ναοσωλήνα (10,0) με τη βοήθεια του εμπορικού πακέτου πεπερασμένων στοιχείων LUSAS. Μέσω αυτού δίνεται η δυνατότητα στον αναγνώστη να κατανοήσει σχετικώς τη λειτουργία του προγράμματος, καθώς επίσης και να αποτελέσει έναυσμα για την προσωπική του ενασχόληση και πληρέστερη κατανόηση επί του θέματος.

Όταν ξεκινήσει το πρόγραμμα για πρώτη φορά θα εμφανιστεί ένα παράθυρο διαλόγου το LUSAS Modeller Startup στο οποίο καλούμαστε να επιλέξουμε και να τρέξουμε είτε ένα προηγούμενο αρχείο είτε να ξεκινήσουμε ένα νέο όπως θα κάνουμε στην περίπτωση αυτή.



Για ένα νέο μοντέλο θα εμφανιστεί το New Model Startup παράθυρο διαλόγου στο οποίο καλείται ο χρήστης να δηλώσει κάποια βασικά στοιχεία ως εξής:

- Ως όνομα πληκτρολογούμε “to\_onoma\_pou\_thelo”.
- Χρησιμοποιούμε Default working folder.
- Ως τίτλο πληκτρολογούμε “tube 10-0”.
- Ως σύστημα μονάδων ορίζουμε N m kg C s.
- Επιλέγουμε ως startup template το none από τη λίστα επιλογών.
- Κάνουμε κλικ στο OK.

The image shows a dialog box titled "New Model Startup". It is divided into two main sections: "File details" and "Model".

**File details:**

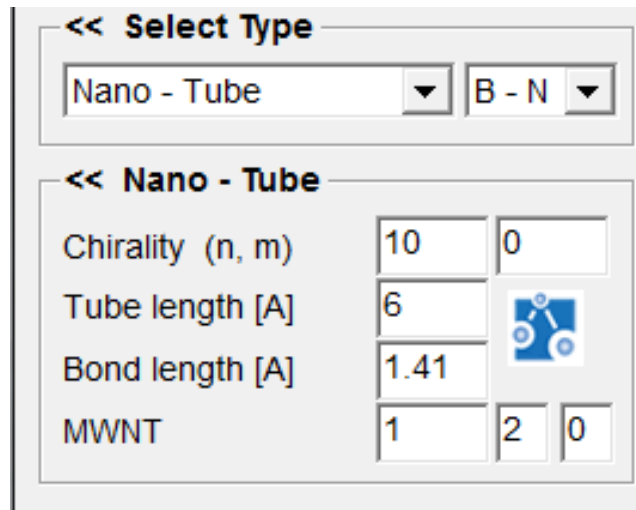
- File name:** to\_onoma\_pou\_thelo
- Working folder:** Radio buttons for Default (selected), Last used, and User defined.
- Save in:** C:\Lusas135\Projects

**Model:**

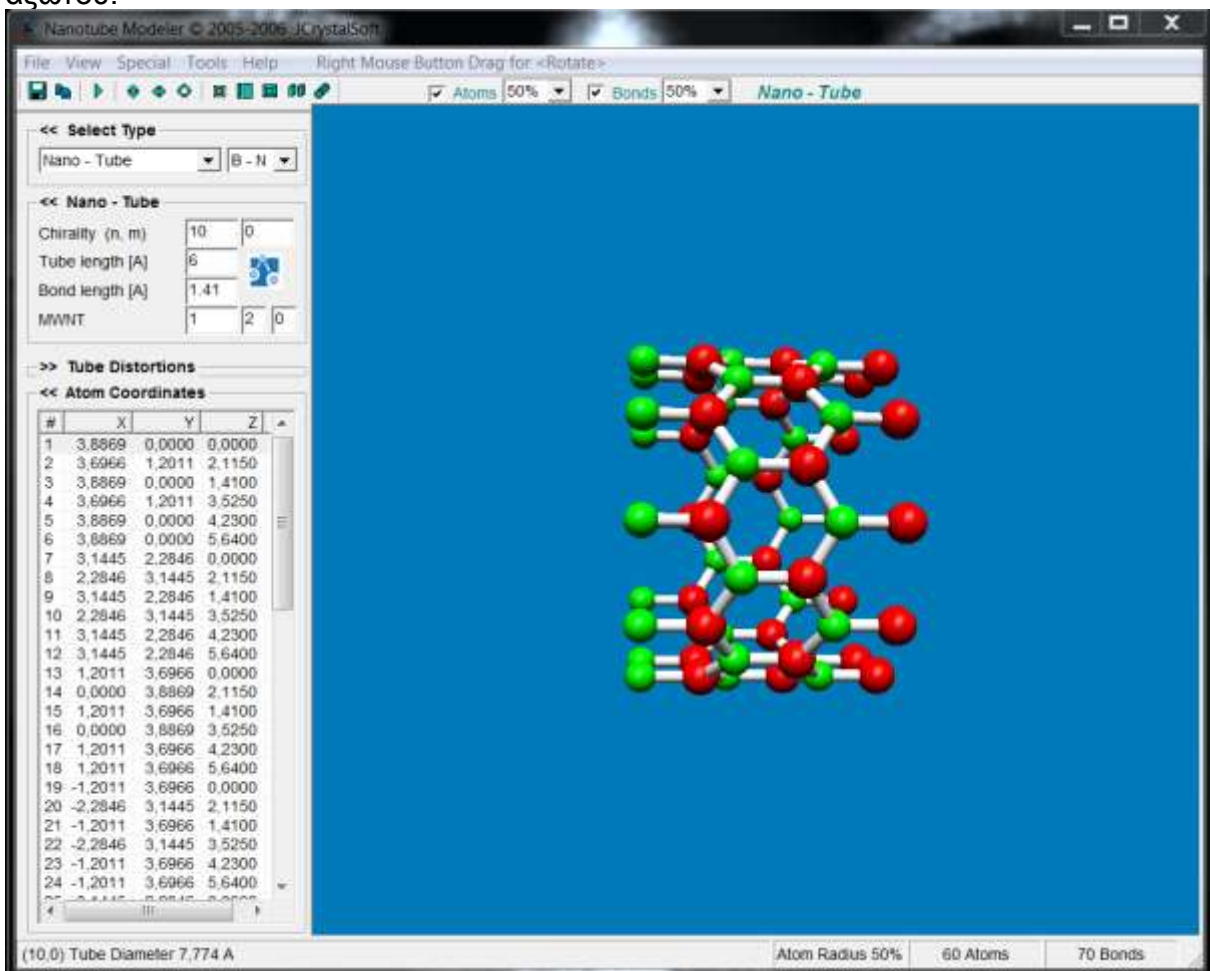
- Title:** zigzag\_10-0
- Units:** N m kg C s
- Startup template:** None
- Job No.:** (empty field)
- Vertical Axis:** Radio buttons for X, Y, and Z (Z is selected).


At the bottom of the dialog box are three buttons: OK, Cancel, and Help.

Μόλις πατηθεί η επιλογή OK θα βρεθούμε στο περιβάλλον του προγράμματος. Τώρα θα ξεκινήσουμε το στάδιο όπου θα αρχίσει το χτίσιμο του νανοσωλήνα (10,0). Βασικό και αναπόσπαστο κομμάτι της επίτευξης αυτού είναι να μας είναι γνωστή η γεωμετρία του νανοσωλήνα, η θέση δηλαδή των ατόμων (τα οποία στο πρόγραμμα αναπαρίστανται με κόμβους) στο χώρο των τριών διαστάσεων. Για να επιτευχθεί αυτό χρησιμοποιούμε το πρόγραμμα Nanotube Modeler. Με αυτό το πρόγραμμα μπορούμε να βρούμε τις συντεταγμένες (x,y,z) του κάθε ατόμου βορίου και αζώτου (κόμβους), για οποιονδήποτε νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου. Ανοίγοντας το πρόγραμμα αυτό εμφανίζεται ένα παράθυρο διαλόγου στο οποίο καλείτε ο χρήστης να δηλώσει κάποια βασικά στοιχεία ως εξής:



Εισάγοντας αυτά τα στοιχεία και πατώντας enter μας εμφανίζει στην οθόνη τον νανοσωλήνα άνθρακα καθώς και τις συντεταγμένες του κάθε ατόμου βορίου και αζώτου.



Όπως βλέπουμε έχουμε τις συντεταγμένες καθώς και το αν είναι άτομο αζώτου ή βορίου ο κάθε κόμβος που πρόκειται να σχεδιάσουμε. Σε αυτή τη φάση είμαστε σε θέση να προχωρήσουμε στη μοντελοποίηση. Επιστρέφοντας στο πρόγραμμα LUSAS στο πάνω μέρος της μπάρας επιλογών επιλέγουμε Geometry- Surface- Coordinates ή πατώντας το εικονίδιο  εμφανίζεται το παράθυρο διαλόγου Enter




your coordinates στο οποίο περνάμε τις συντεταγμένες κάθε κόμβου. Το πλήκτρο Tab χρησιμοποιείται για να δημιουργήσει νέες γραμμές:

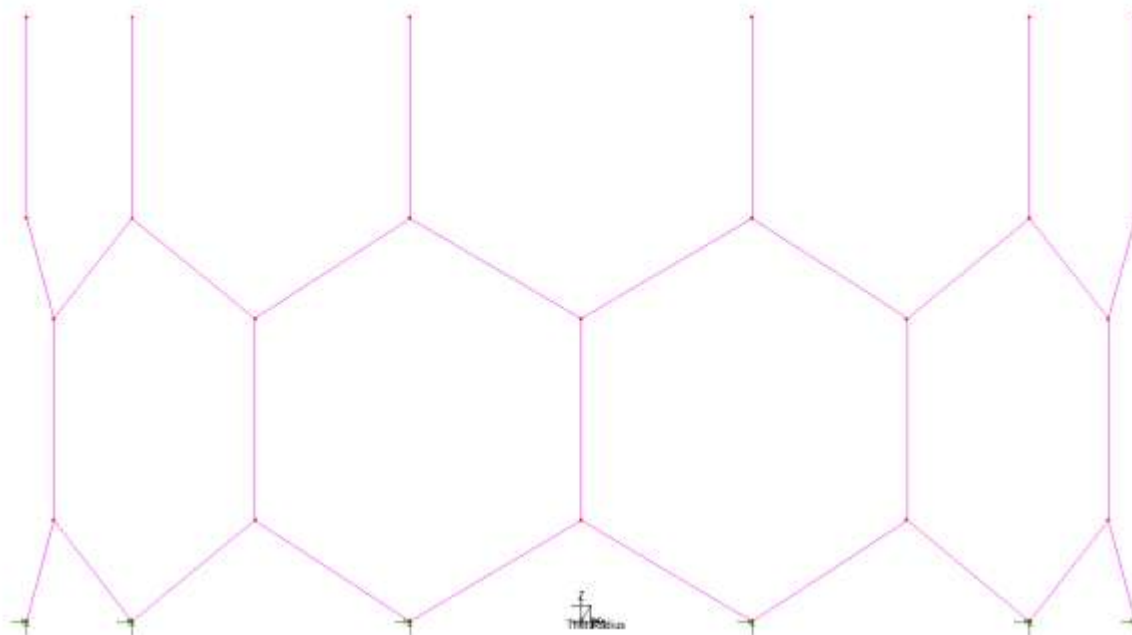
	X	Y	Z
1			

Ακολουθως πληκτρολογούμε τις συντεταγμένες για κάθε κόμβο, οι οποίες πατώντας την επιλογή OK θα έχουν ως αποτέλεσμα να εξαφανιστεί το παράθυρο διαλόγου και θα εμφανισθεί στο πρόγραμμα η απεικόνιση των σημείων στο χώρο. Καλό θα ήταν για κάθε σημείο που περνάμε να δίνουμε και ένα διαφορετικό χρώμα αναλόγως αν πρόκειται για άτομο αζώτου ή βορίου. Στην δική μας περίπτωση χρησιμοποιήσαμε πράσινο για τα άτομα αζώτου και κόκκινο για τα άτομα βορίου.

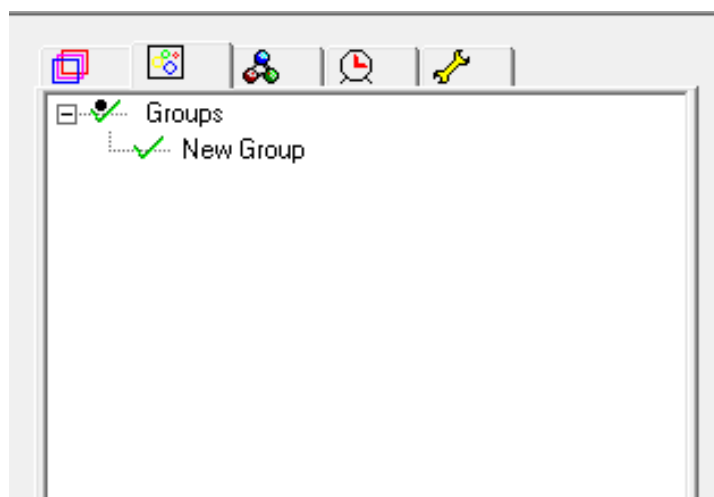


Στη συνέχεια επιλέγοντας προσεχτικά τους κόμβους ανά δύο και με τη χρήση του εικονιδίου , μπορούμε να σχηματίσουμε γραμμές από τους προεπιλεγμένους κόμβους.

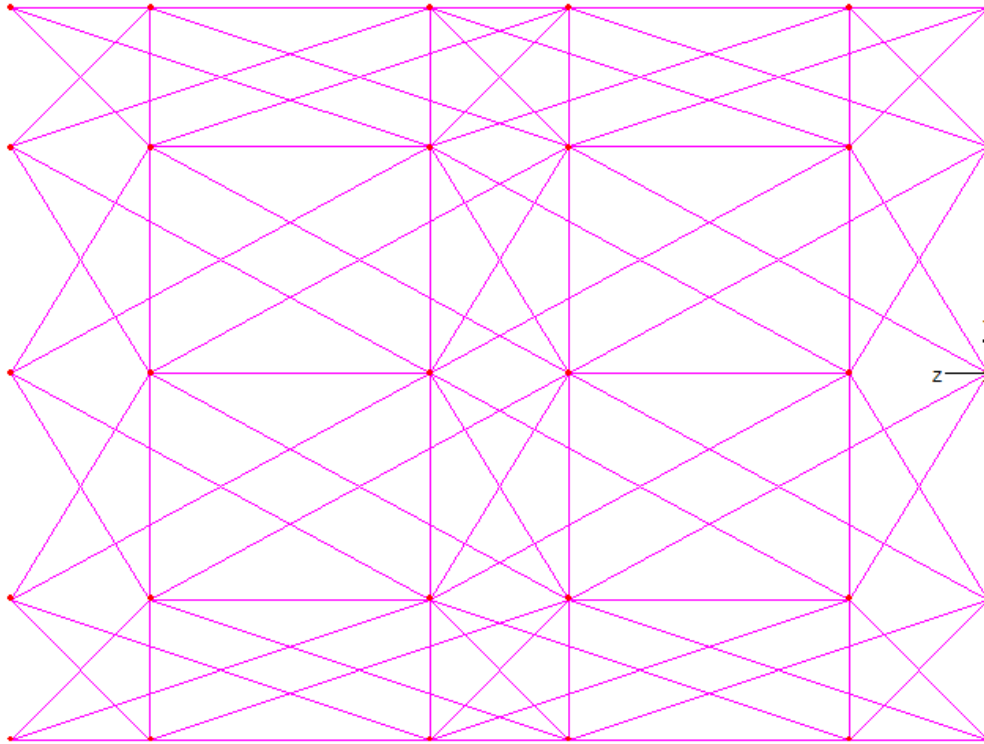
Το αποτέλεσμα που θα έχουμε από τους πρώτους δακτυλίους θα έχει ως εξής:



Το επόμενο μας βήμα είναι να σχεδιάσουμε στο παραπάνω σχήμα τις B-N-B και N-B-N γραμμές. Για να μπορούμε να τις ξεχωρίσουμε όμως από τις BN κάνουμε το εξής βήμα. Επιλέγουμε όλες τις γραμμές και μετά Geometry->Group->New Group και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα:

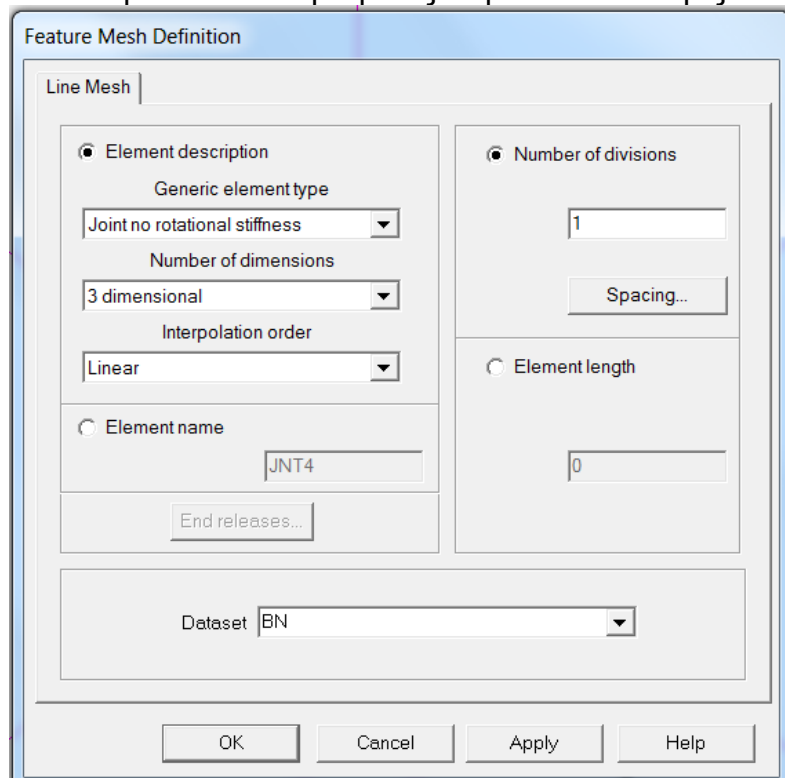


Μετονομάζουμε το New Group κάνοντας διπλό κλικ πάνω του σε BN. Τώρα είμαστε έτοιμοι να φτιάξουμε τις B-N-B και N-B-N γραμμές επιλέγοντας και ενώνοντας δύο κόμβους με γραμμή σχηματίζοντας με αυτό τον τρόπο ένα τρίγωνο. Το κάθε εξάγωνο του νανοσωλήνα θα έχει 6 γραμμές BN, 3 γραμμές B-N-B και 3 γραμμές N-B-N. Αυτές οι γραμμές όπως θα δούμε και παρακάτω λειτουργούν ως ελατήρια. Κάνοντας την παραπάνω διαδικασία θα καταλήξουμε στην παρακάτω μορφή.

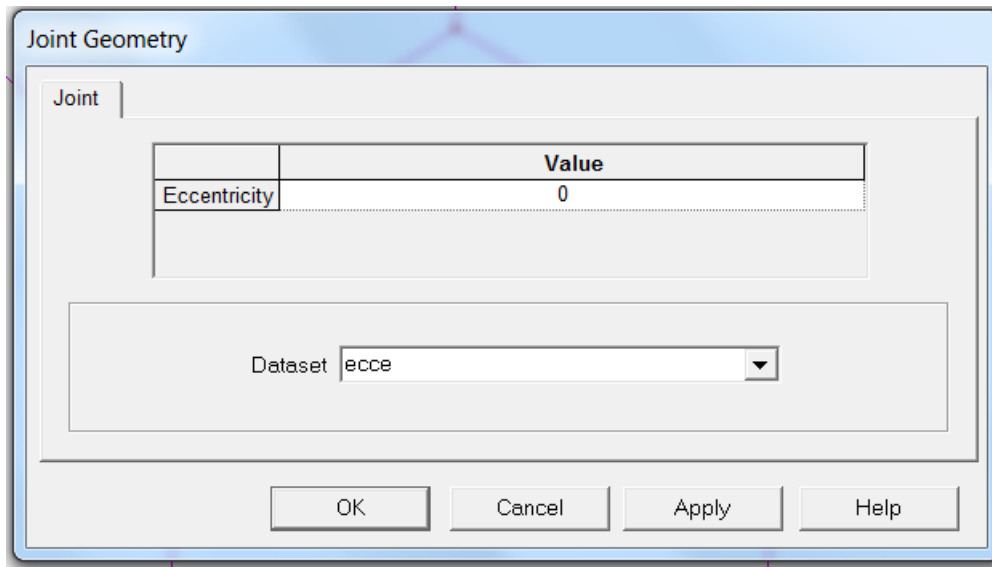


Έπειτα για να μπορούμε να ξεχωρίζουμε τις γραμμές B-N-B, N-B-N και BN μεταξύ τους θα κάνουμε Group όπως κάναμε παραπάνω για τις γραμμές B-N-B και ένα ακόμα για τις γραμμές N-B-N.

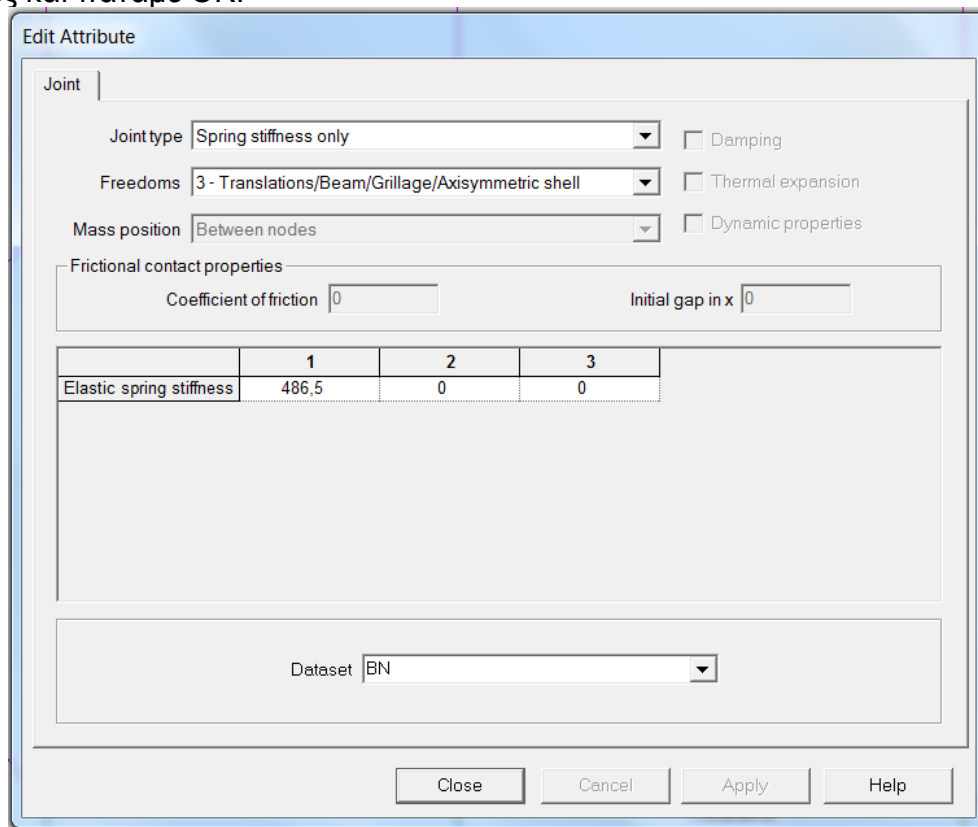
Αφού ετοιμάσουμε τα group είμαστε έτοιμοι να βάλουμε ιδιότητες στις γραμμές μας. Επιλέγουμε από την γραμμή εργαλείων Attributes->Mesh->Line και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα στην οποία εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε OK.



Τώρα έχοντας δηλώσει τα BN μπορούμε επιλέγοντας όλες τις γραμμές και κάνοντας drag and drop να τα περάσουμε με αυτό τον τρόπο στο ναοσωλήνα.  
 Έπειτα επιλέγουμε από την γραμμή εργαλείων Attributes->Geometric->Joint και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε OK.



Περνάμε και αυτή την ιδιότητα στον ναοσωλήνα με την ίδια drag and drop διαδικασία που ακολουθήσαμε και παραπάνω.  
 Επόμενο βήμα είναι να επιλέξουμε από τη γραμμή εργαλείων Attributes->Material->Joint και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα στην οποία και εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε OK.



Περνάμε και αυτή την ιδιότητα στον νανοσωλήνα με διαδικασία drag and drop επιλέγοντας όλες τις γραμμές BN.

Ακολουθώντας την ίδια ακριβώς διαδικασία αλλά με τις παρακάτω επιλογές δίνουμε τις αντίστοιχες ιδιότητες στα στοιχεία B-N-B και N-B-N.

The 'Edit Attribute' dialog box for a Line Mesh element is shown. It has a 'Line Mesh' tab selected. The 'Element description' section is active, showing 'Generic element type' set to 'Joint no rotational stiffness', 'Number of dimensions' set to '3 dimensional', and 'Interpolation order' set to 'Linear'. The 'Element name' is 'JNT4'. The 'Number of divisions' is set to '1'. The 'Element length' is set to '0'. The 'Dataset' is 'BNB'. Buttons for 'Close', 'Cancel', 'Apply', and 'Help' are at the bottom.

The 'Edit Attribute' dialog box for a Joint element is shown. It has a 'Joint' tab selected. The 'Joint type' is 'Spring stiffness only'. 'Freeoms' is '3 - Translations/Beam/Grillage/Axisymmetric shell'. 'Mass position' is 'Between nodes'. 'Frictional contact properties' are set to 'Coefficient of friction' 0 and 'Initial gap in x' 0. A table for 'Elastic spring stiffness' is shown below:

	1	2	3
Elastic spring stiffness	33.0558	33.0558	0

The 'Dataset' is 'BNB'. Buttons for 'Close', 'Cancel', 'Apply', and 'Help' are at the bottom.

**Edit Attribute**

Line Mesh

Element description

Generic element type  
 Joint no rotational stiffness

Number of dimensions  
 3 dimensional

Interpolation order  
 Linear

Element name  
 JNT4

End releases...

Number of divisions  
 1  
 Spacing...

Element length  
 0

Dataset NBN

Close Cancel Apply Help

**Edit Attribute**

Joint

Joint type Spring stiffness only  Damping

Freedom 3 - Translations/Beam/Grillage/Axissymmetric shell  Thermal expansion

Mass position Between nodes  Dynamic properties

Frictional contact properties

Coefficient of friction 0 Initial gap in x 0

	1	2	3
Elastic spring stiffness	29.7503	29.7503	0

Dataset NBN

Close Cancel Apply Help

Για να εισάγουμε στοιχεία στα άτομα αζώτου και βορίου θα πρέπει να κάνουμε τους κόμβους γραμμές έτσι ώστε να εισάγουμε τα στοιχεία

Αρχικά πηγαίνουμε στην μπάρα εργαλείων και επιλέγουμε Attributes->Local Coordinate και θα μας εμφανιστεί η παρακάτω καρτέλα επιλέγουμε Cylindrical και πατάμε ok.

Local Coordinates

Local coordinate axes

Coordinates type

Cartesian  Cylindrical  Spherical

Rotate  Scale  Matrix

Angle

0

Rotation plane

XY-plane  YZ-plane  XZ-plane

Origin

Radius 0

Theta 0

Z 0

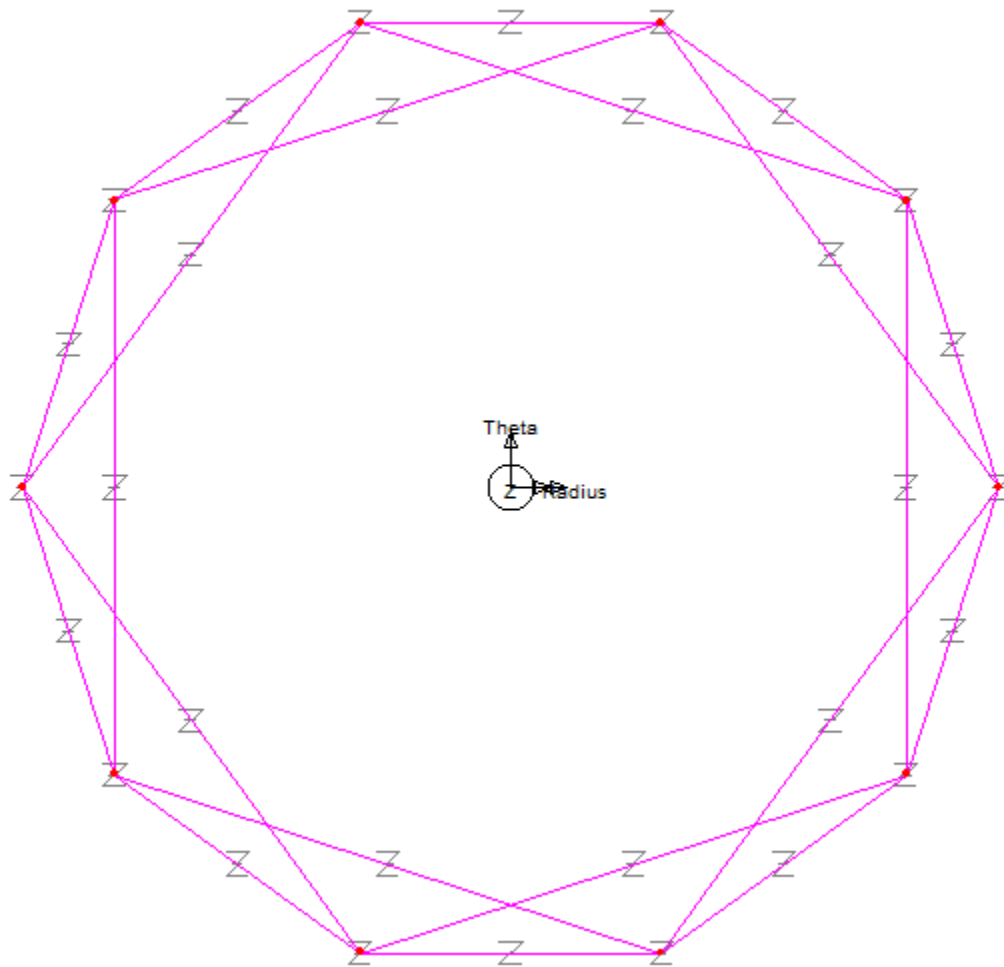
Coordinate set generated from selection

No coordinate set generated Use

Dataset

OK Cancel Apply Help

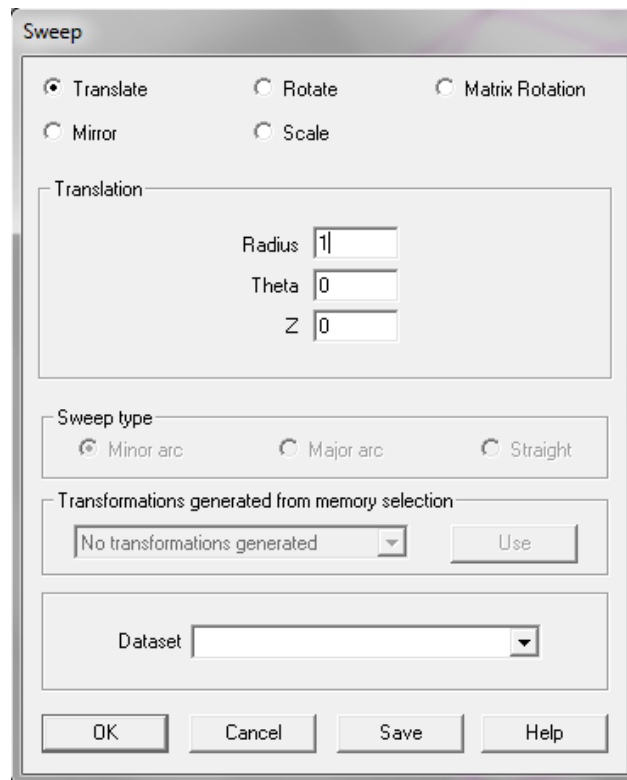
Κάνοντας αυτήν την εντολή μας εμφανίζεται ο άξονας:



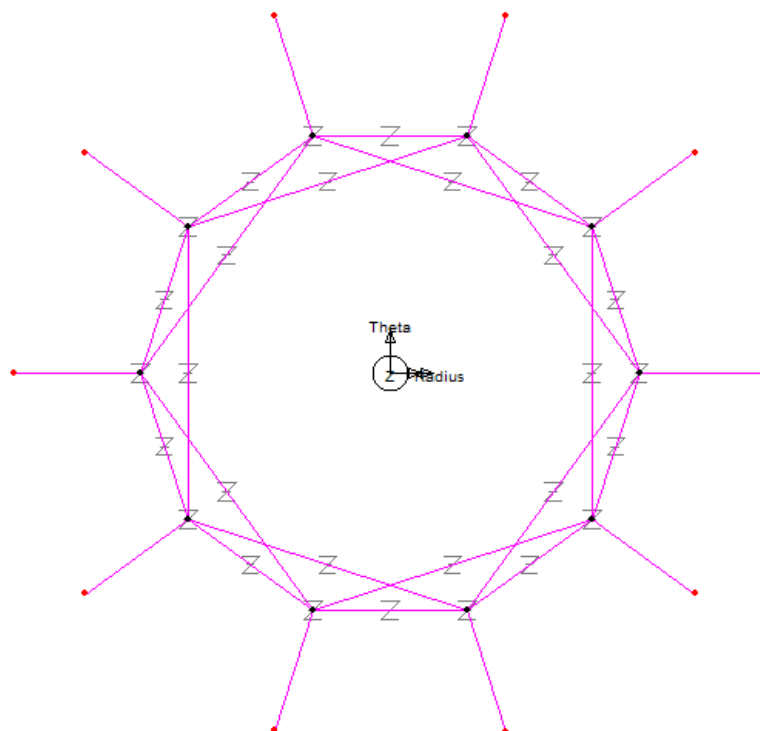
Επιλέγουμε όλο το νανοσωλήνα και μετά Geometry->Group->New Group και ονομάζουμε το group "ολίκο".

Επιλέγουμε όλα τα σημεία του νανοσωλήνα τα οποία είναι βορίου κάνουμε δεξί κλικ και πατάμε Sweep και μας εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και βάζουμε μια ενδεικτική τιμή σαν radius 1.

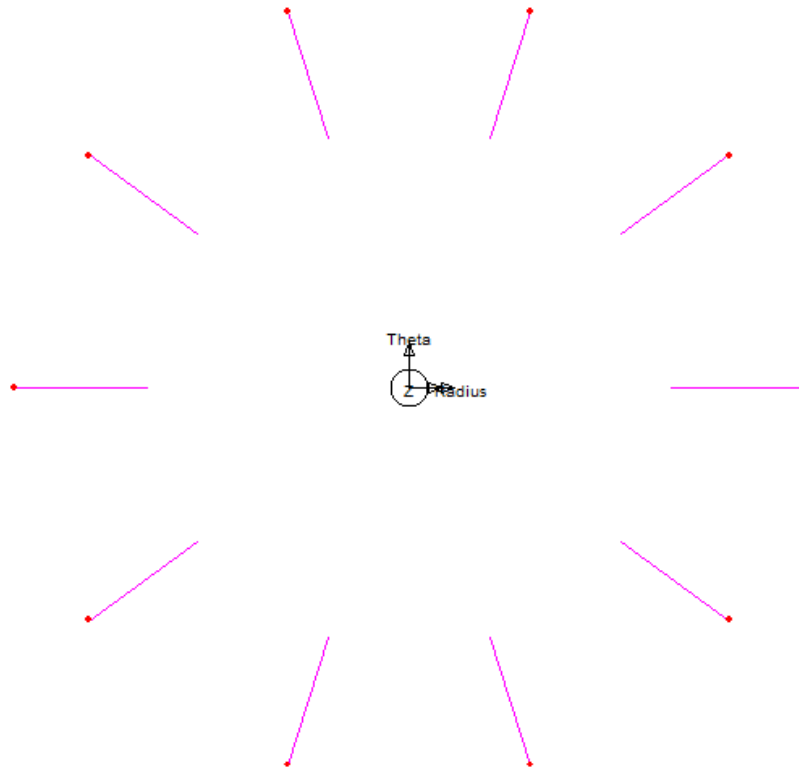




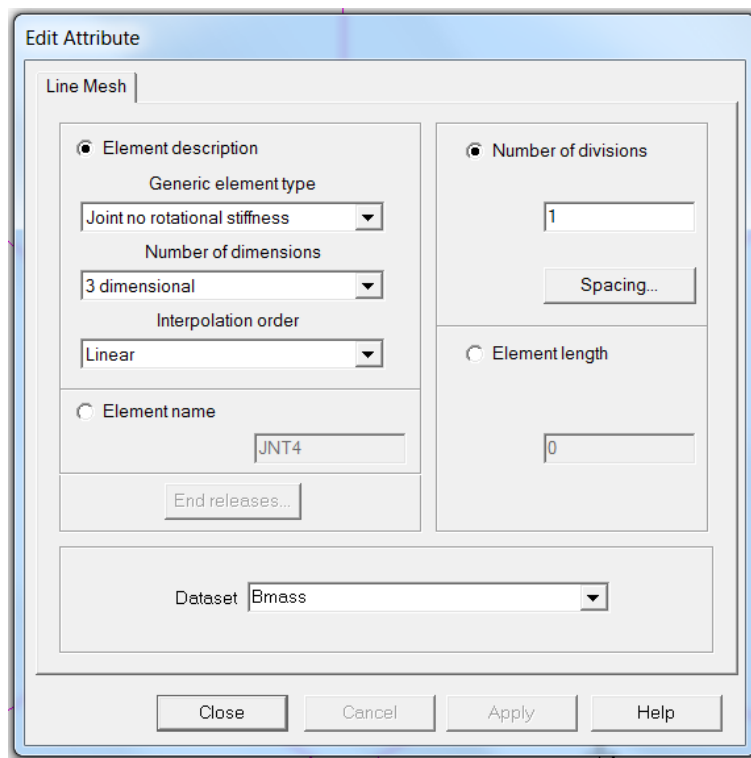
Κάνοντας αυτή την διαδικασία θα εμφανιστούν ακτινικά κάποια σημεία που ενώνονται με τα αρχικά σημεία με μια γραμμή. Σε αυτή την γραμμή θα περάσουμε τις παρακάτω ιδιότητες:



Πηγαίνουμε στην καρτέλα των groups και, με δεξί κλικ και στη συνέχεια την επιλογή Invisible, κάνουμε αόρατα όλα τα στοιχεία που δεν μας χρειάζονται την παρούσα στιγμή. Το αποτέλεσμα θα είναι κάπως έτσι:

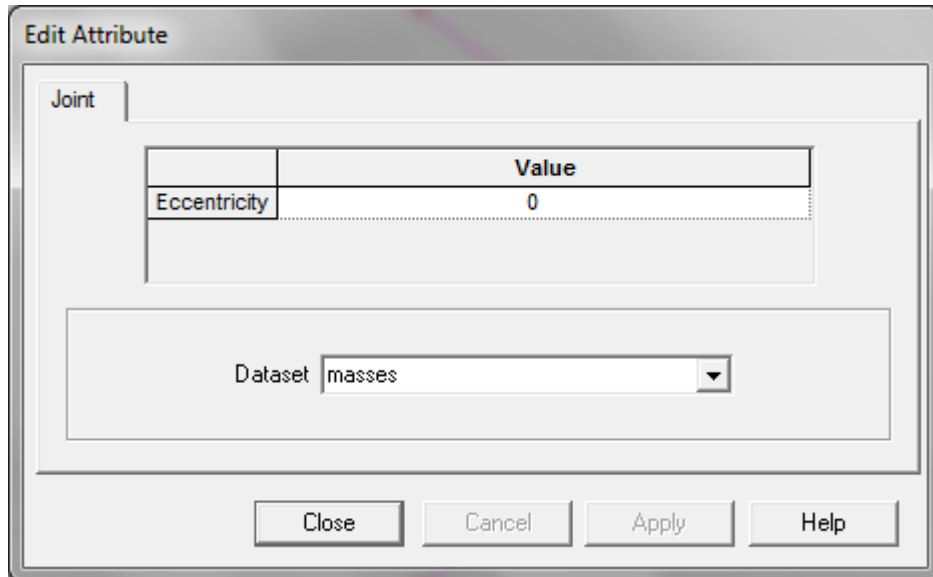


Τώρα μπορούμε να εργαστούμε πάνω στις γραμμές αυτές και να περάσουμε τις παρακάτω ιδιότητες:  
 Επιλέγουμε από την γραμμή εργαλείων Attributes->Mesh->Line και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε OK.

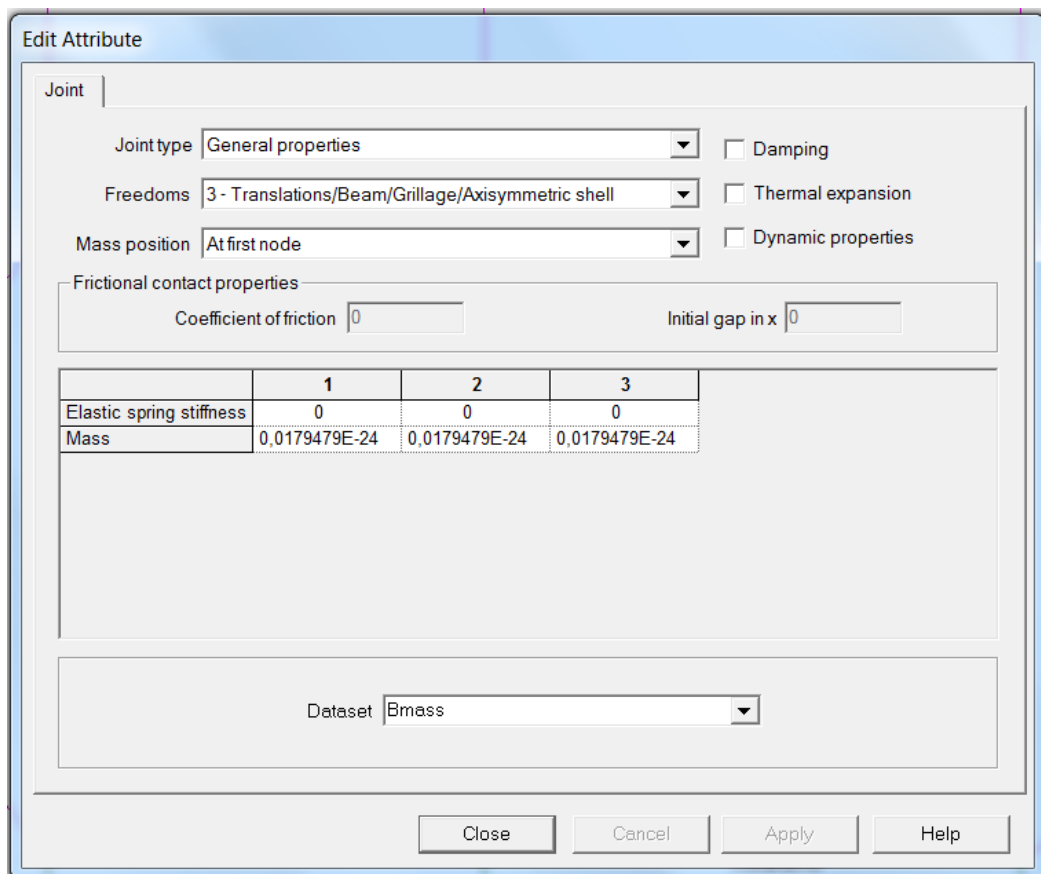


Τώρα έχοντας δηλώσει τα Bmass (μάζα Βορίου σε Kg) μπορούμε επιλέγοντας όλες τις γραμμές που έχουμε και κάνοντας drag and drop να τα περάσουμε με αυτό τον τρόπο και στο νανοσωλήνα.

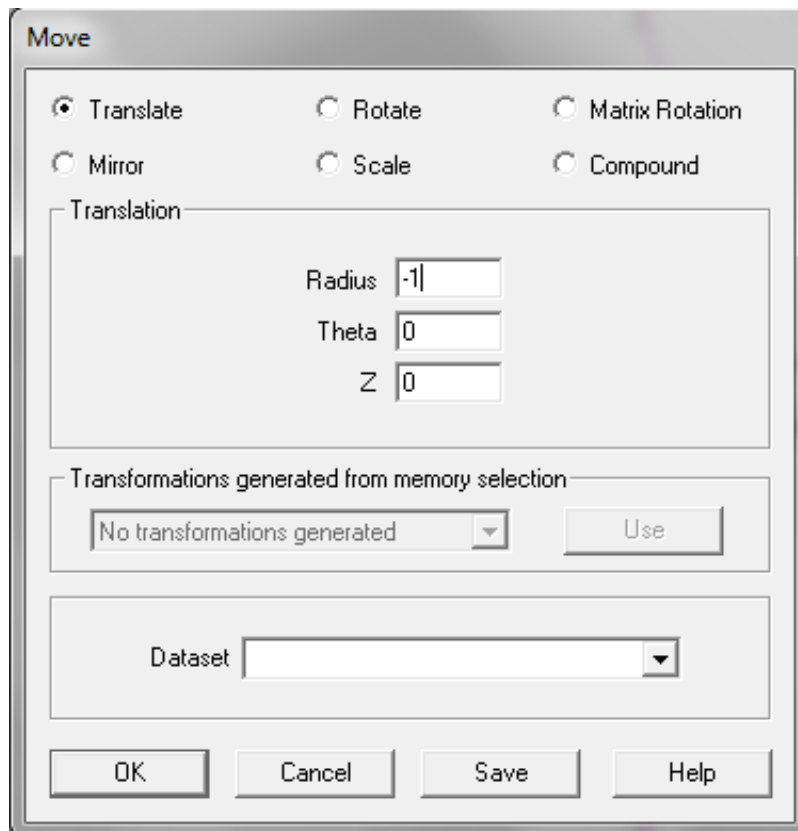
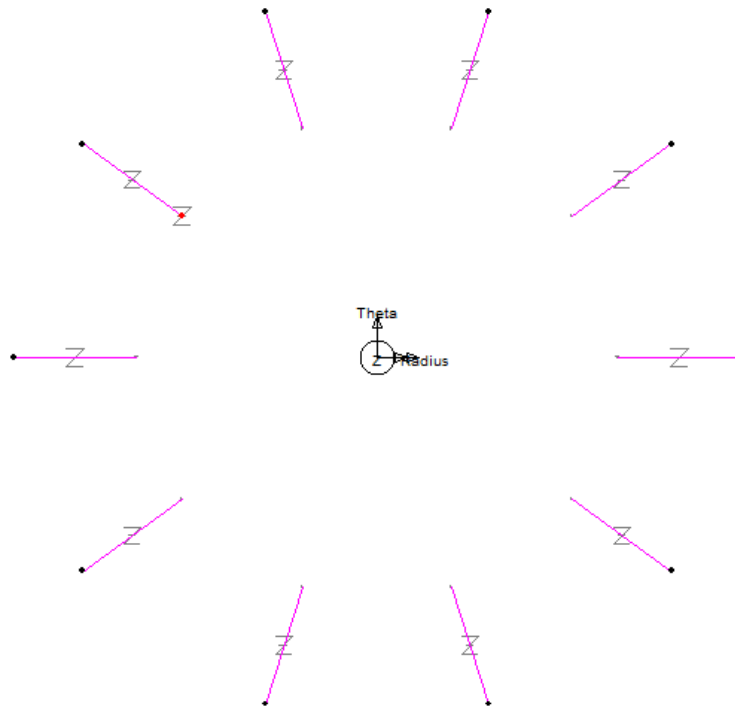
Έπειτα επιλέγουμε από την γραμμή εργαλείων Attributes->Geometriψ->Joint και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε OK.



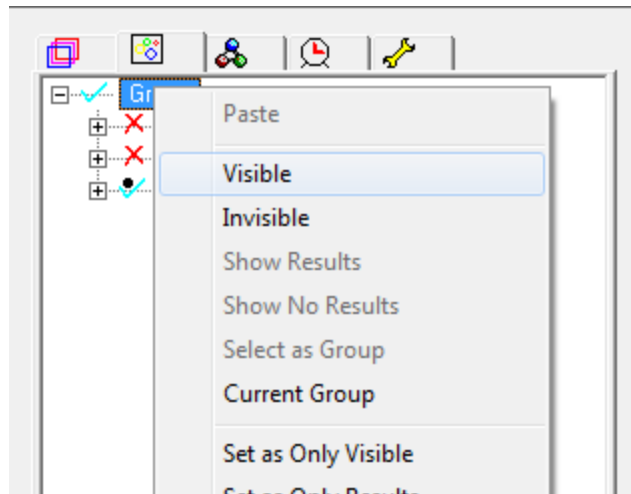
Αφού περάσουμε και αυτή την ιδιότητα στον νανοσωλήνα επιλέγουμε από την γραμμή εργαλείων Attributes->Material->Joint και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε OK.



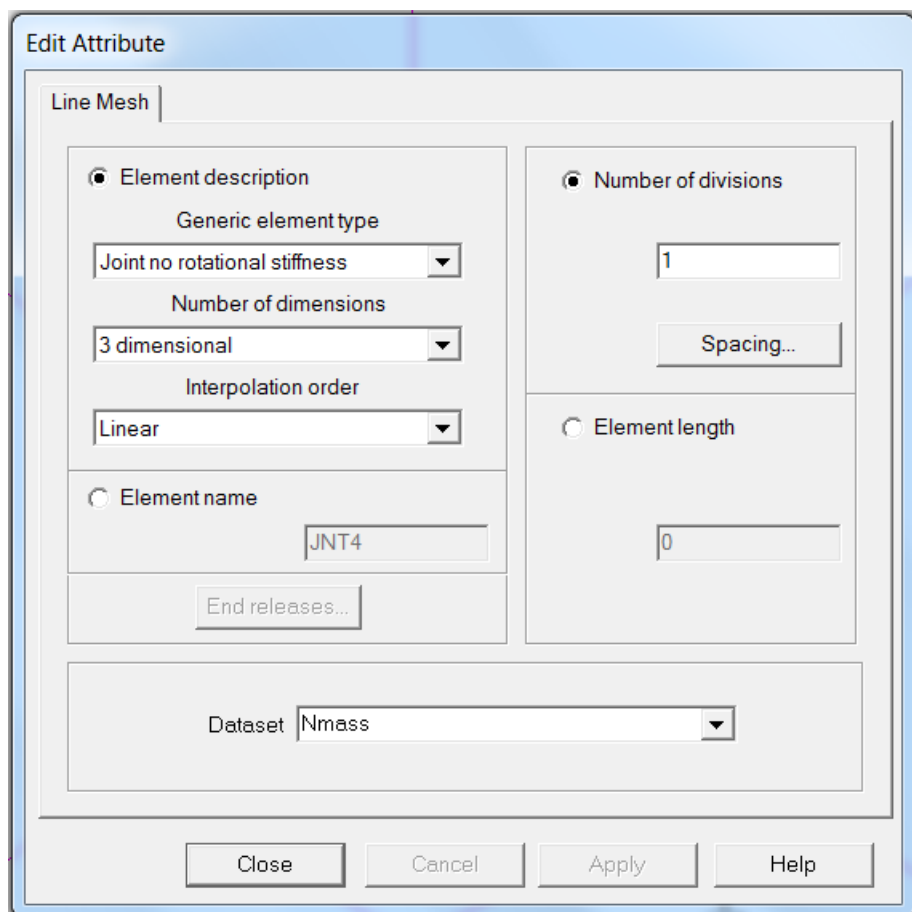
Αφού τελειώσαμε και με την τελευταία καρτέλα μπορούμε να κάνουμε drag and drop όλες τις ιδιότητες στον ναοσωλήνα.  
Επιλέγουμε όλα τα σημεία και κάνουμε δεξί κλικ και επιλέγουμε move και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και βάζουμε τώρα σαν Radius -1 και πατάμε OK. Με τον τρόπο αυτό έχουμε αποδώσει ιδιότητες και στα άτομα βορίου.



Κάνουμε δεξί κλικ στο Groups και πατάμε Visible για να εμφανιστεί και ο υπόλοιπος νανοσωλήνας.



Ακολουθούμε την παραπάνω διαδικασία και για τα N σημεία δηλαδή τα άτομα αζώτου αλλά στις καρτέλες που πρέπει να ανοίξουμε θα βάλουμε τις παρακάτω επιλογές:



**Edit Attribute**

Line Mesh

Element description

Generic element type  
 Joint no rotational stiffness

Number of dimensions  
 3 dimensional

Interpolation order  
 Linear

Element name  
 JNT4

End releases...

Number of divisions  
 1  
 Spacing...

Element length  
 0

Dataset Nmass

Close Cancel Apply Help

**Edit Attribute**

Joint

	Value
Eccentricity	0

Dataset masses

Close Cancel Apply Help

Τώρα θα πρέπει να αλλάξουμε το τοπικό σύστημα συντεταγμένων για τις B-N-B ή N-B-N γραμμές. Αρχικά επιλέγουμε τα δύο σημεία που ορίζουν την B-N-B ή N-B-N γραμμή και στη συνέχεια το απέναντι από τη γραμμή σημείο. Μετά Attributes->Local Coordinates->Use και OK.

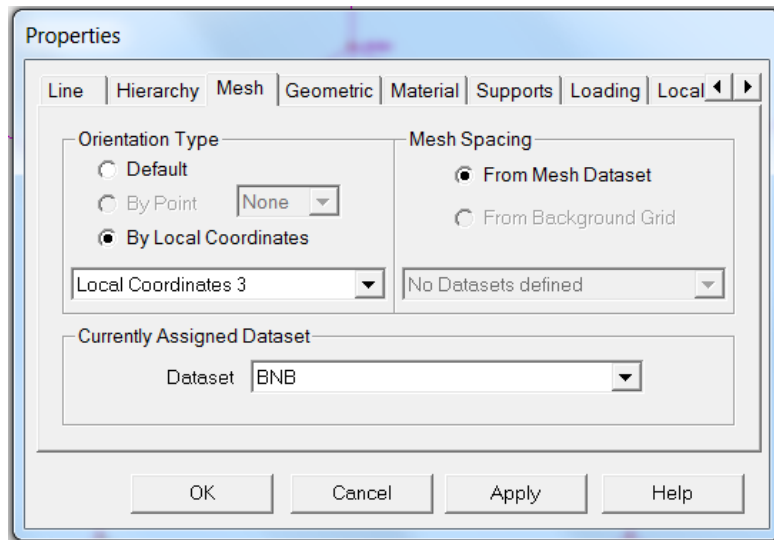
Transformation matrix		
1	0,175683E-	-0,650841E-
0,674135E-	-0,260605	0,965446
0	-0,965446	-0,260605

Origin	
Radius	0,39971
Theta	-108
Z	0,29

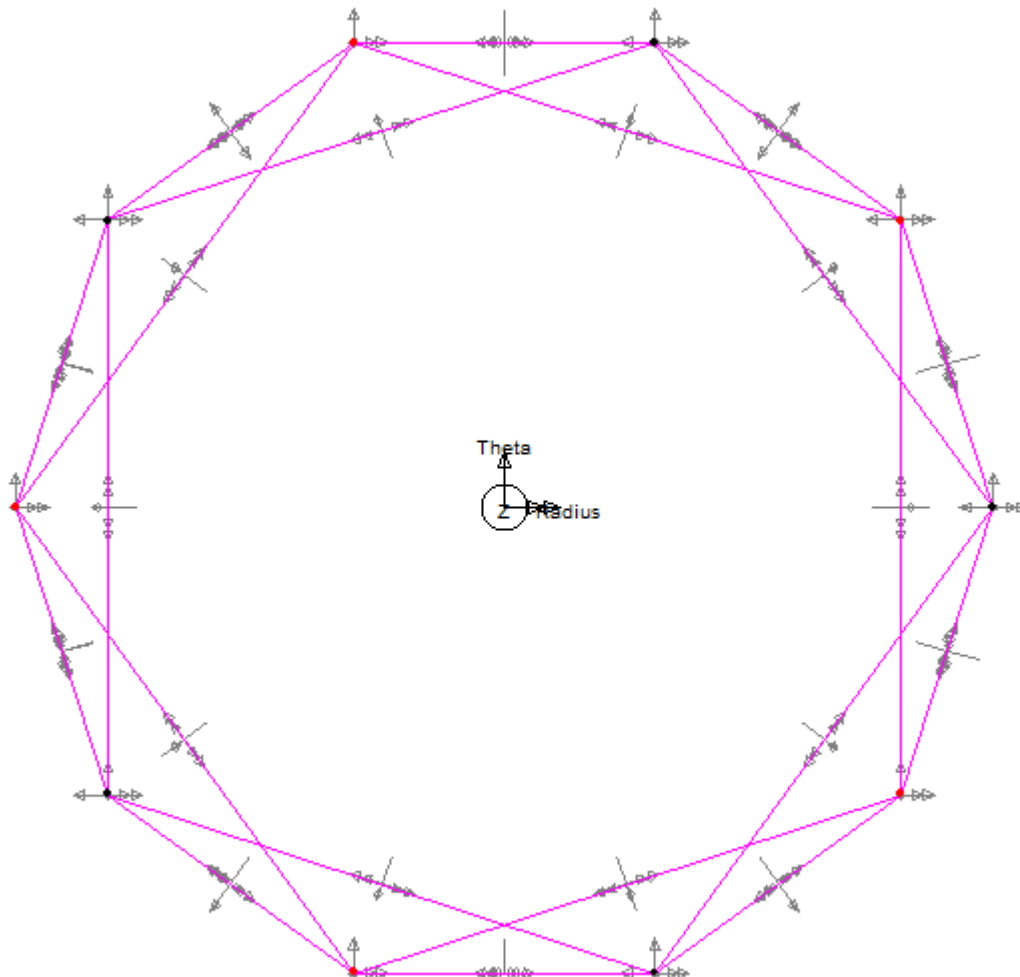
Coordinate set generated from selection: Rotation Matrix 1 - points 789 790 39

Dataset: [Empty dropdown]

Έπειτα επιλέγουμε την γραμμή B-N-B ή N-B-N κάνουμε δεξί κλικ Properties επιλέγουμε By Local Coordinates ακριβώς από κάτω κάνοντας κλικ στο βελάκι επιλέγουμε Local Coordinates 1. Σε αυτό το σημείο έχει ολοκληρωθεί η διαδικασία για την πρώτη γραμμή B-N-B ή N-B-N, κάνοντας ακριβώς την ίδια διαδικασία για την επόμενη γραμμή B-N-B ή N-B-N του εξαγώνου στο παραπάνω βήμα επιλέγουμε Local Coordinates 2 και ούτε καθεξής για τις υπόλοιπες.



Ένας τρόπος για να δούμε εάν όλη αυτή η διαδικασία είναι σωστή επιλέγουμε την πρόσοψη του Z άξονα και θα πρέπει όλες αυτές οι μικρές γραμμές να έχουν διεύθυνση προς το κέντρο του κύκλου ή ακριβώς αντίθετη από αυτόν.



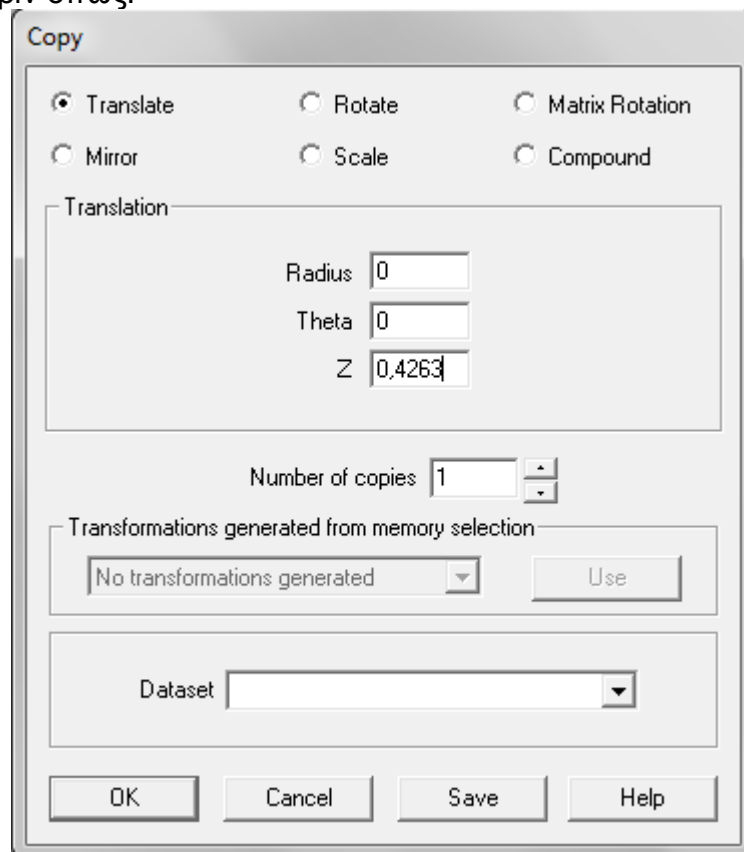
Σε αυτό το σημείο έχουν περαστεί σωστά όλες οι ιδιότητες στα μέλη που αποτελούν τον νανοσωλήνα (BN, B-N-B, N-B-N, κόμβοι B, κόμβοι N). Επόμενο βήμα είναι να δημιουργήσουμε για τον συγκεκριμένο νανοσωλήνα ένα μήκος  $L/D=10$  δηλαδή επιλέγουμε έναν κόμβο και κάνουμε δεξί κλικ και μας



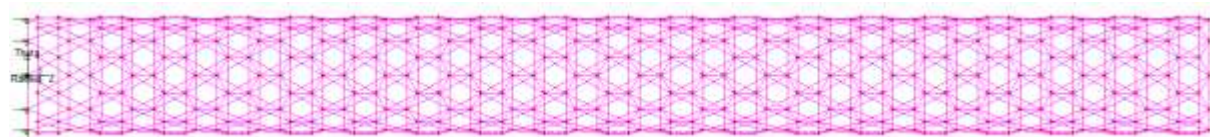
εμφανίζει στην καρτέλα το Radius και το πολλαπλασιάζουμε επι δύο. Έτσι βρίσκουμε εύκολα το D και το πολλαπλασιάζουμε με το 10 και βρίσκουμε το L.

Για να πραγματοποιηθεί αυτό θα πρέπει να αυξήσουμε το μήκος του νανοσωλήνα με τον παρακάτω τρόπο:

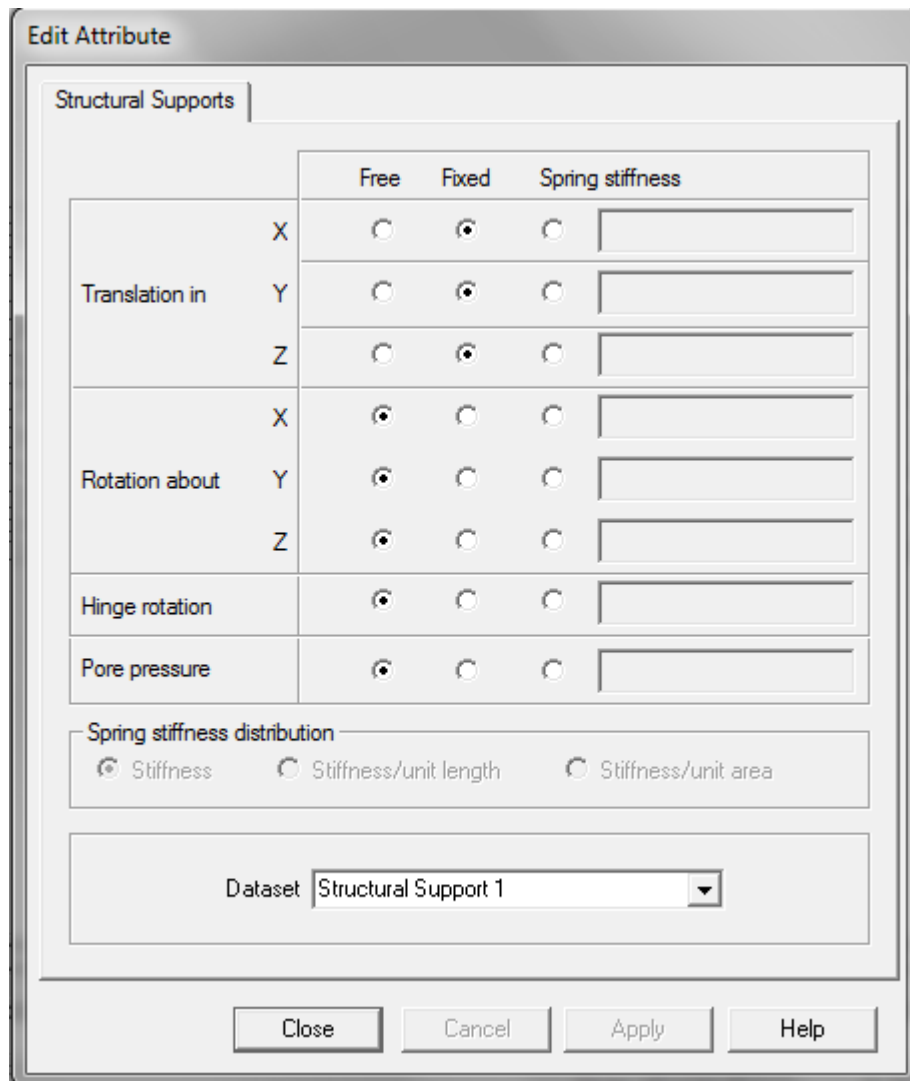
Αρχικά επιλέγουμε έναν ακριανό κόμβο και κάνοντας δεξί κλικ και πηγαίνοντας Properties μαθαίνουμε την τιμή του z την οποία και καταγράφουμε. Στη συνέχεια επιλέγοντας όλους τους κόμβους και τις γραμμές, κάνουμε δεξί κλικ-Copy και εμφανίζεται το παρακάτω παράθυρο διαλόγου, όπου στο z καταγράφουμε την τιμή που βρήκαμε πριν όπως:



Πατώντας OK ο νανοσωλήνας θα διπλασιαστεί. Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται έως ότου το μήκος του φτάσει στο επιθυμητό.

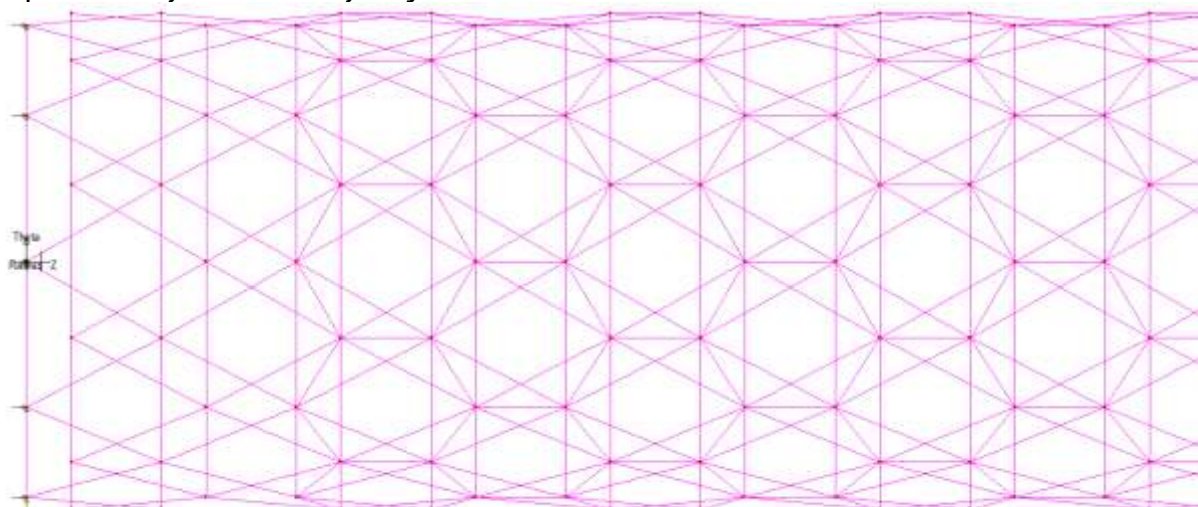


Σε αυτό το σημείο θα πακτώσουμε τον νανοσωλήνα στην πλευρά που είναι και η αρχή των αξόνων. Αρχικά πατάμε Attributes->Support->Structural όπου στη συνέχεια θα εμφανιστεί το Structural Supports παράθυρο διαλόγου στο οποίο θα προβούμε στις εξής ενέργειες:



Κατόπιν πατάμε Apply και Close.

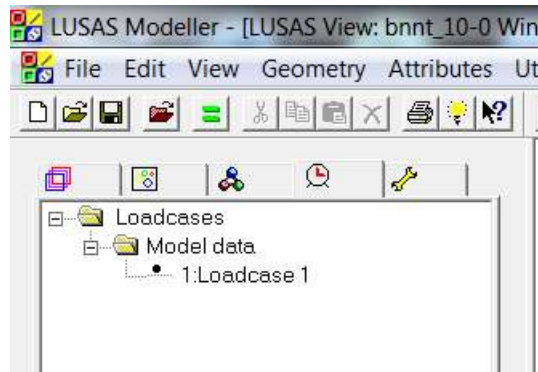
Στη συνέχεια αυτό θα περαστεί στο νανοσωλήνα επιλέγοντας τους κόμβους του άκρου που ξεκινάνε οι άξονες.



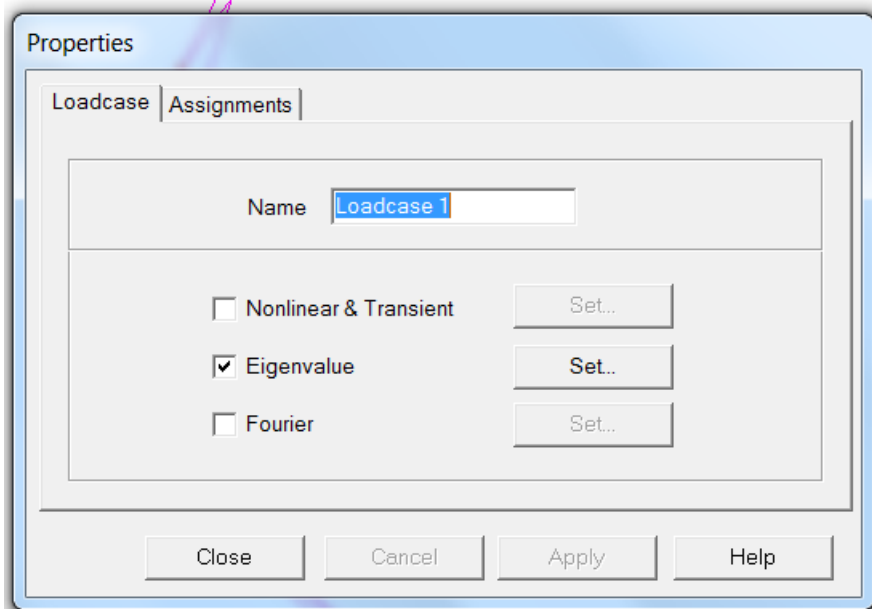
Τα πράσινα βελάκια μας δείχνουν πως η στήριξη έχει μπει εκεί που τη θέλαμε.

Τώρα είμαστε έτοιμοι να δούμε τα αποτελέσματα της ελεύθερης ταλάντωσης κάνοντας τα παρακάτω βήματα.

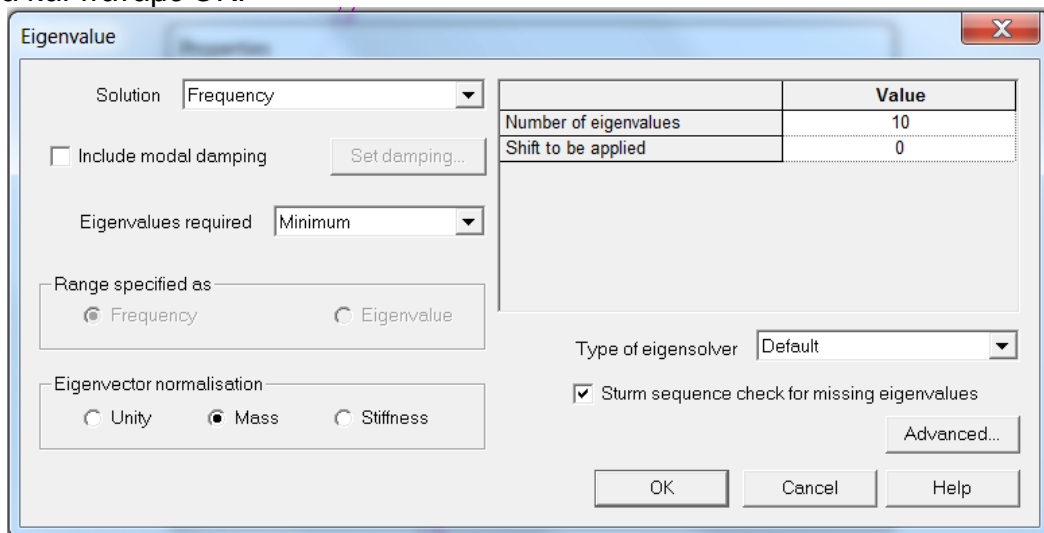
Πηγαίνουμε στο μενού αριστερά στην καρτέλα με το «ρολογάκι» όπου και πατάμε διπλό κλικ στο Loadcase 1.



Μας ανοίγει το παρακάτω παράθυρο όπου και επιλέγουμε όπως βλέπουμε Eigenvalue και πατάμε Set.



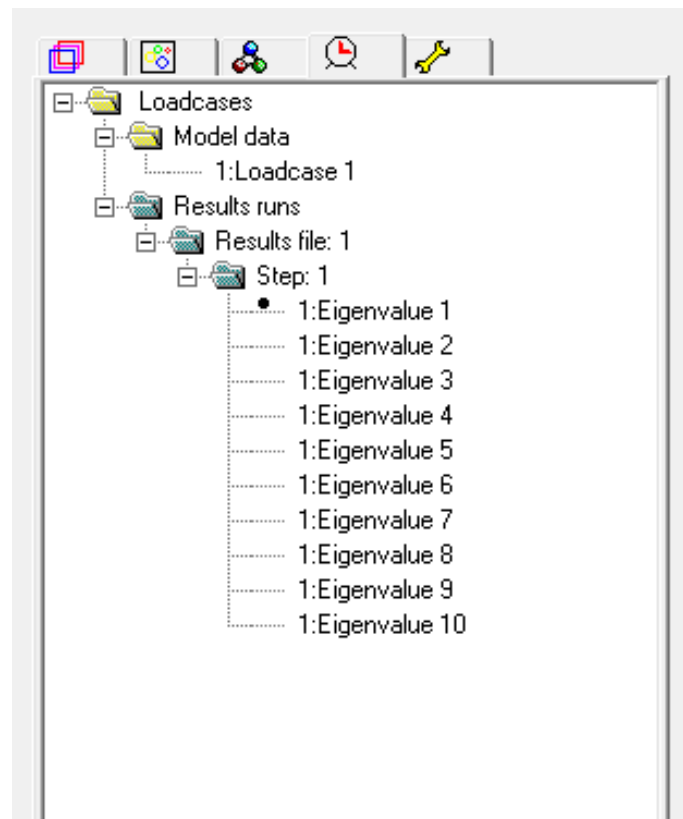
Στην καρτέλα που μας ανοίγει δίνουμε τα δεδομένα όπως φαίνονται στο επόμενο σχήμα και πατάμε OK.



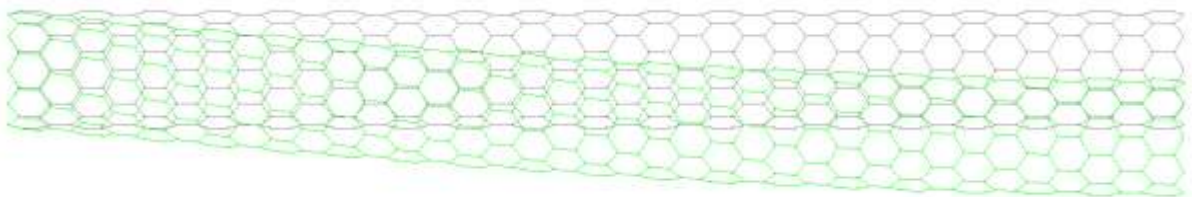
Τώρα πρέπει να πατήσουμε στη γραμμή εργαλείων File->Save as και στη συνέχεια LUSAS Datafile.

Για να δούμε τα αποτελέσματα της διαδικασίας μας θα πρέπει να ανοίξουμε το αρχείο με το ίδιο όνομα που έχει το αρχείο που δουλεύαμε ως τώρα αλλά ο τύπος του θα είναι Lusas Results Model.

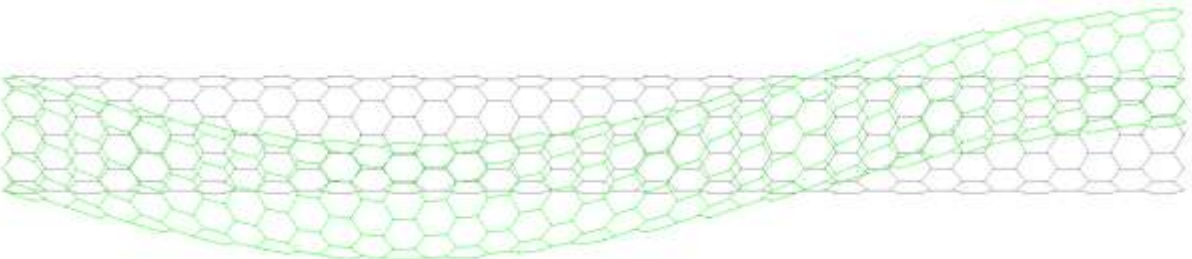
Ανοίγοντας το αρχείο και πηγαίνοντας πάλι στην τέταρτη από αριστερά καρτέλα και κάνοντας δεξί κλικ και Set Active στο Eigenvalue 1 μπορούμε να δούμε τα αποτελέσματα της πρώτης ιδιομορφής.



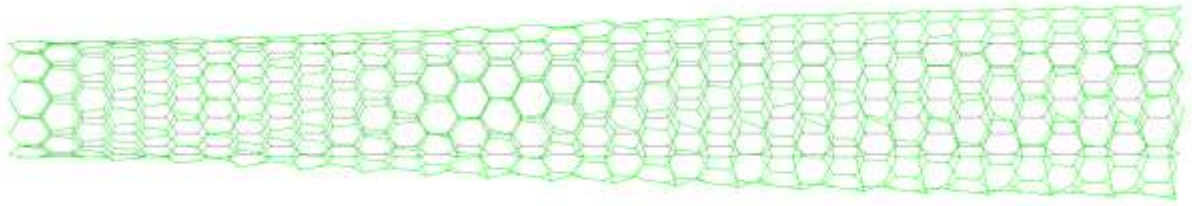
Πρώτη Ιδιομορφή



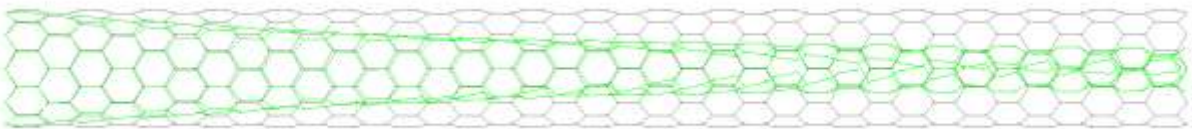
Δευτερη Ιδιομορφή



### Τρίτη Ιδιομορφή



### Τέταρτη Ιδιομορφή



Ανακεφαλαιώνοντας:

Όλη αυτή η διαδικασία πραγματοποιήθηκε για τον νανοσωλήνα νιτριδίου του βορίου zigzag (10,0) με aspect ratio 10 και με μονόπλευρη πάκτωση. Έχουμε εργαστεί επίσης για aspect ratio 5, 15 και 20. Επίσης έχουμε εργαστεί για νανοσωλήνες με αμφίπλευρη πάκτωση.

Σε αυτές τις περιπτώσεις τα μόνα που αλλάζουν είναι ο υπολογισμός του μήκους (L) και τα cories που πρέπει να κάνουμε στο νανοσωλήνα για να φτάσουμε τα επιθυμητά aspect ratio και για την αμφίπλευρη πάκτωση απλά κάνουμε drag and drop την στήριξη που έχουμε δημιουργήσει και στην άλλη πλευρά του σωλήνα.

Επίσης έχουμε πειραματιστεί και σε σωλήνες τύπου armchair οι οποίοι μοντελοποιούνται ακριβώς με την ίδια διαδικασία που περιγράψαμε παραπάνω.