

**ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΠΑΤΡΑΣ  
ΣΧΟΛΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ  
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΙΑΣ**

**ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ**

**ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΕΛΕΤΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ  
ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ  
ΝΙΤΡΙΑΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ**



**ΣΠΟΥΔΑΣΤΗΣ:  
ΓΕΡΜΕΝΗΣ ΕΥΑΓΓΕΛΟΣ (Α.Μ.: 5438)**

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

**ΠΑΤΡΑ 2014**



## ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Το παρόν τεύχος αποτελεί την Πτυχιακή Εργασία που εκπονήθηκε στο Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών του Τεχνολογικού Εκπαιδευτικού Ιδρύματος Πάτρας και αναφέρεται στην αριθμητική πρόβλεψη των ελαστικών μηχανικών ιδιοτήτων νανοσωλήνων νιτριδίου του Βορίου με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων. Οι νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου τα τελευταία χρόνια έχουν προσελκύσει το έντονο ενδιαφέρον πολλών ερευνητικών ομάδων και επιστημόνων χάρη στις μοναδικές μηχανικές, ηλεκτρικές, θερμικές και οπτικές ιδιότητες τους, που τους κάνουν εξαιρετικά χρήσιμους σε πάρα πολλές εφαρμογές. Η αυξημένη συνεπώς ζήτηση των υλικών αυτών οδήγησε στην ανάπτυξη διαφορετικών μεθόδων προσομοίωσης της συμπεριφοράς τους.

Η παρούσα εργασία προτείνει μια πρωτότυπη αριθμητική μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων τύπου ελατηρίου για την πρόβλεψη της μηχανικής συμπεριφοράς νανοσωλήνων νιτριδίου του βορίου. Η συγκεκριμένη μέθοδος εφαρμόστηκε σε νανοσωλήνες νιτριδίου του βορίου διαφορετικών γεωμετρικών χαρακτηριστικών. Η παρούσα εργασία βοήθησε τον συγγραφέα στην απόκτηση γνώσεων στις μεθόδους αριθμητικής μοντελοποίησης νανοδομημένων υλικών αλλά και στην εξοικείωση με την ραγδαία εξελισσόμενη τεχνολογία των νανοϋλικών.

Ευχαριστώ θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή Δρ. Γιαννόπουλο Ι. Γεώργιο, επιστημονικό συνεργάτη του Τμήματος Μηχανολογίας, για την μοναδική εμπειρία και ευκαιρία που μου έδωσε να ασχοληθώ με έναν διαφορετικό κόσμο που δεν διακρίνει το γυμνό μάτι. Όμως με την βοήθεια και την καθοδήγηση του μπόρεσα να τον μελετήσω χωρίς να τον βλέπω, αλλά σίγουρα υπάρχει και θα καθορίσει τις τάσεις του μέλλοντος.



## 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 μία 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 του βορίου (B) και του αζώτου (N) 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 ατομιστικό επίπεδο, δηλαδή λαμβάνεται υπ' όψιν η σχετική θέση των ατόμων B και N σε νανοεπίπεδο. Στα μοντέλα που προκύπτουν επιβάλλονται κατάλληλες φορτίσεις και στηρίξεις για την εξαγωγή αποτελεσμάτων που έχουν να κάνουν με το μέτρο ελαστικότητας, το μέτρο διάτμησης και το λόγο Poisson.

Η παρούσα πτυχιακή είναι οργανωμένη σε κεφάλαια όπως αναλύεται παρακάτω.

Στην εισαγωγή γίνεται μία γενική και σύντομη παρουσίαση του επιστημονικού πεδίου που μελετάται και οι σχετικές βιβλιογραφικές αναφορές γύρω από το αντικείμενο που πραγματεύεται η παρούσα πτυχιακή.

Στο πρώτο κεφάλαιο γίνεται μια εισαγωγή στην νανοτεχνολογία, για τους σκοπούς της, για τις επιχειρηματικές εφαρμογές της αλλά και για την επιρροή που ασκεί στην οικονομία του 21<sup>ου</sup> αιώνα.

Στο δεύτερο κεφάλαιο αναλύονται τα χημικά στοιχεία του Βορίου (B) και του αζώτου (N) .Γίνεται εκτενή περιγραφή σχετικά με τους νανοσωλήνες BN και τους τρόπους σύνθεσής τους.

Στο τρίτο κεφάλαιο παρουσιάζονται οι Φυσικές και Χημικές ιδιότητες των νανοσωληνων BN

Στο τέταρτο κεφάλαιο αναλύονται πιθανές εφαρμογές των νανοσωλήνων BN.

Στο πέμπτο κεφάλαιο εξηγούνται οι εξισώσεις που διέπουν την δομή των νανοσωλήνων BN και που πρόκειται να μελετηθούν.

Στο έκτο κεφάλαιο γίνεται η παρουσίαση της γεωμετρίας του υπολογιστικού μοντέλου των νανοσωλήνων BN και οι εξισώσεις που ακολουθούν για την επίλυση αυτού του μοντέλου με πεπερασμένα στοιχεία.

Στο έβδομο γίνεται ομαδοποιημένη παρουσίαση των αποτελεσμάτων που αφορούν τις ελαστική και μηχανική απόκριση των νανοσωλήνων BN.

Τέλος στο όγδοο κεφάλαιο παρουσιάζονται συνολικά τα συμπεράσματα αυτής της προσπάθειας και τονίζονται τα στοιχεία πρωτοτυπίας στην προτεινόμενη μέθοδο

# ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΠΡΟΛΟΓΟΣ.....	III
ΠΕΡΙΛΗΨΗ.....	V
ΕΙΣΑΓΩΓΗ .....	1

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1: ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ & ΟΙ ΕΠΙΧΕΙΡΗΜΑΤΙΚΕΣ ΤΗΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

1.1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΚΑΙ ΣΚΟΠΟΣ.....	4
1.1.1. Εισαγωγή στο Νανοεπίπεδο.....	4
1.1.2. Πληθώρα Πιθανών Εφαρμογών.....	10
1.1.3. Τεχνολογικός Σκοπός.....	16
1.1.4. Σκοπός Εμπορευματοποίησης.....	22
1.2. Η ΠΑΓΚΟΣΜΙΑ ΧΡΗΜΑΤΟΔΟΤΗΣΗ ΤΗΣ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ & Η ΕΠΙΡΡΟΗ ΤΗΣ (ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ <i>Cientifica Ltd.</i> ΙΟΥΛΙΟΣ 2011).....	25
1.2.1. Η Ετήσια Χρηματοδότηση για την Έρευνα στην Νανοτεχνολογία.....	26
1.2.2. Σύγκριση Κίνας- Η.Π.Α. και άλλων εθνών.....	28
1.2.3. Μέτρηση της Ικανότητας των Εθνών στην Αξιοποίηση των Επενδύσεων στην Έρευνα & Ανάπτυξη της Νανοτεχνολογίας.....	30

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2: ΝΙΤΡΙΔΙΟ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ ΚΑΙ ΣΧΕΤΙΚΕΣ ΝΑΝΟΔΟΜΕΣ

2.1. ΒΟΡΙΟ.....	34
2.2. ΝΙΤΡΙΔΙΟ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ .....	35
2.2.1 Φάσης των Κρυστάλλων του Νιτριδίου του Βορίου.....	37
2.3. ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ (BNNTs) .....	39
2.4. ΜΟΝΟΤΟΙΧΟΙ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ (SW-BNNTs).....	42
2.5. ΜΕΘΟΔΟΙ ΣΥΝΘΕΣΗΣ ΒΝ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ (BNNTs).....	44

2.6. ΜΕΘΟΔΟΙ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ .....	44
2.6.1. Ηλεκτρικό Τόξο Εκκένωσης ( <i>Arch Discharge</i> ) .....	44
2.6.1. Λείζερ Εξάτμισης ( <i>Laser Vaporization</i> ) .....	46
2.7. ΜΕΘΟΔΟΙ ΜΕΣΑΙΑΣ ΚΑΙ ΧΑΜΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ.....	48
2.7.1. Καταλυτική Χημική Εναπόθεση Ατμών ( <i>Chemical Vapor Deposition</i> ) .....	48
2.7.1. Ανθρακοθερμική Μέθοδος ( <i>Carbothermal</i> ) .....	50
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3: ΦΥΣΙΚΕΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ	
3.1. ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΕΣ ΚΑΙ ΟΠΤΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΒΝ .....	51
3.2. ΘΕΡΜΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ.....	52
3.3. ΜΗΧΑΝΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ.....	53
3.4. ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΔΙΑΒΡΟΧΗΣ .....	54
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4: ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΒΝ	
4.1. ΑΠΟΘΗΚΕΥΣΗ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ ( $H_2$ ) .....	55
4.2. ΣΥΝΘΕΤΑ ΑΠΟ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΒΝ ΓΙΑ ΜΗΧ.ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ .....	57
4.3. ΜΟΡΙΑΚΕΣ ΚΑΙ ΒΙΟΛΟΓΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ.....	59
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5: ΝΑΝΟΔΟΜΕΣ ΚΑΙ ΔΙΑΤΟΜΙΚΕΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ	
5.1. ΝΑΝΟΔΟΜΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΒΝ .....	61
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6: ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ	
6.1. ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΕΞΑΓΩΝΙΚΟΥ ΒΝ .....	66
6.2. ΘΕΜΕΛΙΩΔΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗ .....	68
6.3. ΜΕΘΟΔΟΣ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ.....	74
6.3.1. Γενικά.....	74



6.3.2. Βασικές Έννοιες της Μεθόδου.....	75
6.3.3. Πεπερασμένα στοιχεία που χρησιμοποιήθηκαν.....	79
6.4. ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΚΑΙ ΣΤΑΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ.....	82
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7: ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ	
7.1. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΩΝ ΕΛΑΣΤΙΚΩΝ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ .....	89
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 8: ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	109
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....	112

## ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Ένας Μονότοιχος Νανοσωλήνας Νιτριδίου του Βορίου (SWBNNT) αποτελείται από ίσο αριθμό ατόμων βορίου (B) και αζώτου (N) και έχει παρόμοια κυψελωτή δομή με αυτή ενός νανοσωλήνα άνθρακα (CNT). Οι ιδιότητες πολύτοιχων νανοσωλήνων BN έχουν προσελκύσει το ενδιαφέρον πολλών ερευνητών τα τελευταία χρόνια. Ωστόσο μονότοιχοι νανοσωλήνες BN απομονώθηκαν και διερευνήθηκαν με ηλεκτρονικό μικροσκόπιο (Transmission Electron Microscopy) και μικροσκόπιο ατομικής δύναμης (Atomic Force Microscopy). [1] Το επιστημονικό ενδιαφέρον σχετικά με τους μονότοιχους νανοσωλήνες BN είναι περιορισμένο σε σύγκριση με την ερευνητική δραστηριότητα που υπάρχει σε σχέση με τους νανοσωλήνες άνθρακα. Η ικανότητα ελέγχου των δεσμών, των μορίων και της σύνθεσης των νανοσωλήνων BN είναι πολύ σημαντική για την δημιουργία νέων υλικών. Η πολλά υποσχόμενη χρήση των νανοσωλήνων BN σε μελλοντικές εφαρμογές όπως σε προστατευτικές επιστρώσεις, σε ηλεκτρονικά υψηλής ισχύος, στην νανοηλεκτρονική και σε συσκευές ανίχνευσης καθιστά ακόμα πιο έντονη και απαραίτητη την μελέτη τους για την νανοτεχνολογία και τις επιστήμες του 21<sup>ου</sup> αιώνα.

Έχουν γίνει σημαντικές προσπάθειες από την επιστημονική κοινότητα για τον χαρακτηρισμό της μηχανικής συμπεριφοράς των νανοσωλήνων BN μέσω θεωρητικών μελετών, προσεγγίσεων που βασίζονται στην θεωρία του συναρτησιακού της πυκνότητας (Density Functional Theory), στην προσέγγιση ισχυρής δέσμευσης (Tight Binding Approximation), στην μοριακή δυναμική (Molecular Dynamics), στην μηχανική του συνεχούς μέσου (Continuum Mechanics) και στην μοριακή μηχανική (Molecular Mechanics) [1]. Λόγω της πολυπλοκότητας διεξαγωγής πραγματικών μετρήσεων σε νανοκλίμακα υπάρχουν πολύ λιγότερες πειραματικές προσεγγίσεις σε σχέση με τις θεωρητικές.

Θεωρητικές μελέτες του Hernandez και των συνεργατών του [2] έδειξαν ότι το μέτρο ελαστικότητας (E) των νανοσωλήνων BN να κυμαίνεται μεταξύ 0,84 και 0,81 TPa με διαμέτρους που κυμαίνονται από 0,81 – 2,08 nm. Ο Chopra και ο Zettl [3] εκτίμησαν το μέτρο ελαστικότητας ενός διπλού τοιχώματος (DW) νανοσωλήνα BN μετρώντας το πλάτος των θερμικά επαγόμενων κραδασμών σε μικροσκόπιο TEM υπό θερμοκρασία δωματίου. Βρήκαν μια τιμή  $1,22 \pm 0,24$  TPa, η οποία είναι παρόμοια με αυτή των νανοσωλήνων άνθρακα. Στη συνέχεια μια μέθοδο ηλεκτρικού πεδίου (electric field induced resonance) σε ειδικό μικροσκόπιο TEM χρησιμοποιήθηκε για να υπολογιστούν οι τιμές 0,51 και 1,03 TPa [3] του μέτρου ελαστικότητας (E). Πιο πρόσφατα οι ομάδα του Golberg πραγματοποίησε εκτεταμένα πειράματα με ειδικό μικροσκόπιο TEM για κάμψη και εφελκυσμό σε ξεχωριστούς νανοσωλήνες BN πολλών τοιχωμάτων με διαμέτρους από 40-100 nm και εκτιμήθηκε το μέτρο ελαστικότητας τους από 0,5 – 0,6 TPa [4] ή πάνω από 1.3 TPa [5] και η αντοχή τους σε εφελκυσμό 33GPa. Ο Bosak και οι συνεργάτες [7] του με την μέθοδο x-ray scattering μέτρησαν το μέτρο ελαστικότητας σε νανοσωλήνες BN 0,256 TPa nm. Ο Jager κατέληξε με την μέθοδο υπερήχων σε μέτρο ελαστικότητας 0,237 TPa nm [8]. Ο Houndi και Meskini χρησιμοποιώντας μια μέθοδο προσέγγισης τοπικής πυκνότητας εκτίμησε το μέτρο ελαστικότητας για νανοσωλήνες BN σε 0,283 TPa nm [9]. Ο Verma και οι συνεργάτες του προέβλεψαν μέτρο διάτμησης G για νανοσωλήνες BN 0,165 TPa nm [10]. Οι Jiang L και Guo [11] πρόβλεψαν το μέτρο διάτμησης για νανοσωλήνες BN σε 0,09 TPa.

Σε αυτήν την εργασία, το μέτρο ελαστικότητας, το μέτρο διάτμησης, το και ο λόγος Poisson διαφόρων μεγεθών zigzag και armchair νανοσωλήνων BN μελετήθηκαν αριθμητικά χρησιμοποιώντας μία νέα ατομιστική προσέγγιση δομικής μηχανικής κατάλληλη για την πρόβλεψη της ελαστικής συμπεριφοράς των νανοσωλήνων BN. Οι προαναφερόμενες ιδιότητες διερευνήθηκαν πλήρως

σε σχέση με τις διαστάσεις των νανοσωλήνων BN για  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$  με στόχο να εκφραστούν οι αναλυτικοί κανόνες οι οποίοι διέπουν τη μηχανική συμπεριφορά των νανοσωλήνων BN στη συγκεκριμένη τάξη μεγέθους.

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 δεσμευμένων ατόμων BN (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 BN δύο γειτονικών δεσμών (B-N-B ή N-B-N νανοδομές) με τέτοιο τρόπο ώστε καταστεί εφικτή η ταυτόχρονη προσομοίωση της κάμψης και της στρέψης των δεσμών. Αυτό το αριθμητικό σχήμα αναμένεται να έχει ελατήρια που 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 N-B-N ή B-N-B νανοδομή δείχνει ότι επιτρέπει πιο ρεαλιστικές παραμορφώσεις δεσμών. Τρίτον, η προτεινόμενη μέθοδος οδηγεί σε μικρότερο υπολογιστικό κόστος

Η προτεινόμενη μέθοδος μπορεί να χαρακτηριστεί απλοϊκή και μικρού υπολογιστικού κόστους. Η επίλυση των εξισώσεων γίνεται μέσω του λογισμικού πακέτου πεπερασμένων στοιχείων Lusas Fea. Με τη χρήση της συγκεκριμένης αριθμητικής τεχνικής, μελετάται η μηχανική ελαστική συμπεριφορά νανοσωλήνων BN υπό διάφορες συνθήκες φόρτισης για ποικίλα μεγέθη zigzag και armchair.

# ΚΕΦΑΛΑΙΟ 1

## ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ & ΟΙ ΕΠΙΧΕΙΡΗΜΑΤΙΚΕΣ ΤΗΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

### 1.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΚΑΙ ΣΚΟΠΟΣ

#### 1.1.1 Εισαγωγή στο Νανoeπίπεδο

Η Νανοτεχνολογία λαμβάνει όλο και περισσότερο την προσοχή της ανθρωπότητας παγκοσμίως. Ο όρος “Nano” προέρχεται ετυμολογικά από την Ελληνική λέξη “ Νάνος ”. Ο όρος υποδηλώνει τις φυσικές διαστάσεις μέσα στο εύρος του ενός δισεκατομμυριοστού ( $10^{-9}$ ) του μέτρου. Αυτή η κλίμακα ονομάζεται κοινός *κλίμακα νανόμετρου* ή *νανοκλίμακα*. Ένα νανόμετρο είναι περίπου ίσο με το μήκος δύο ατόμων υδρογόνου. Η νανοτεχνολογία σχετίζεται με τον σχεδιασμό, τη δημιουργία και την χρήση υλικών των οποίων η δομή τους υπάρχει στο νανο επίπεδο. Η Νανοτεχνολογία είναι ένα συνεχώς αναπτυσσόμενο πεδίο που ερευνά την ηλεκτρική, οπτική και μαγνητική δραστηριότητα καθώς και την δομική συμπεριφορά σε μοριακό και υπομοριακό επίπεδο. Μία από τις πρακτικές εφαρμογές της νανοτεχνολογίας (αλλα σίγουρα όχι η μόνη) είναι η επιστήμη της κατασκευής *micro-chip* και άλλων συσκευών χρησιμοποιώντας δομικά στοιχεία νανο-κλίμακας.

Η διάσταση της νανοκλίμακας είναι σημαντική διότι οι κβαντομηχανικές (μη Νευτονικές) ιδιότητες των ηλεκτρονίων, των φωτονίων και των ατόμων είναι φανερές σε αυτό το επίπεδο. Οι κατασκευές στο Νανoeπίπεδο επιτρέπουν τον έλεγχο των θεμελιωδών ιδιοτήτων των υλικών χωρίς καμία αλλαγή στη χημική τους σύσταση. Νανοκατασκευές όπως συσκευές νανο φωτονίων (*nanophotons*), νανοσύρματα (*nano-wires*), νανοσωλήνες άνθρακα (*carbon*

nanotubes),νανοπλασματικές συσκευές (nanoplasmonic) σχεδιάζεται να ενσωματωθούν σε εξαρτήματα τηλεπικοινωνιών και μικροεπεξεργαστών στα προσεχώς έτη. Η Νανοτεχνολογία θεωρείται ως ένα υψηλού επιπέδου αναδύομενο επιστημονικό πεδίο. Οι υποστηρικτές της προβλέπουν ότι στα επόμενα χρόνια η Νανοτεχνολογία θα βρίσκει σημαντικό αντίκτυπο στην κοινωνία..Ο Charles Vest [12],Πρόεδρος του MIT,παρατήρησε : “ Η συγκέντρωση της Νανοτεχνολογικής επανάστασης θα επιτύχει ένα τεράστιο άλμα στην εξέλιξη της υπολογιστικής δύναμης,στην δημιουργία πιο ισχυρών αλλά και ταυτόχρονα πιο ελαφριών υλικών,στην εξέλιξη της τεχνολογίας πάνω στην Ιατρική καθώς και συσκευές,μεθόδους με πολύ χαμηλότερο ενεργειακό και περιβαλλοντικό κόστος”. Έχει ήδη εκτιμηθεί ότι πάνω από 20.000 ερευνητές παγκοσμίως εργάζονται πάνω στο πεδίο της νανοτεχνολογίας.

Ενώ πολλοί ορισμοί για την Νανοτεχνολογία υπάρχουν η Εθνική Νανοτεχνολογική πρωτοβουλία (National Nanotechnology Initiative) καλεί ένα πεδίο έρευνας,ανάπτυξης και μηχανικής ως “ Νανοτεχνολογία ” μόνον αν περιλαμβάνει τα παρακάτω

1. Έρευνα και τεχνολογική ανάπτυξη σε ατομικό,μοριακό και μακρομοριακό επίπεδο υπό κλίμακα και εύρος περίπου 1-100 nm
2. Δημιουργία και χρήση κατασκευών,συσκευών και συστημάτων που έχουν νέες ιδιότητες και λειτουργίες λόγω του μικρού τους μεγέθους
3. Ικανότητα ελέγχου και χειραγώγησης της ύλης σε ατομικό επίπεδο

Ως εκ τούτου, η Νανοτεχνολογία μπορεί να οριστεί ως η ικανότητα να εργάζεσαι σε μοριακό επίπεδο ,άτομο προς άτομο, με σκοπό την δημιουργία μεγάλων κατασκευών με θεμελιώδεις νέες ιδιότητες και λειτουργίες. Η Νανοτεχνολογία μπορεί να περιγραφεί ως η ακριβής δημιουργία (precision-creation) και ακριβής χειραγώγηση (precision manipulation) της ύλης σε ατομική κλίμακα [13]. Επίσης είναι γνωστή και ως Μοριακή Μηχανική ακριβείας (precision molecular engineering) .

Όπως μπορούμε να συμπεράνουμε η Νανοτεχνολογία είναι διεπιστημονική ως πεδίο και απαιτεί γνώση που προέρχεται από μια ποικιλία επιστημονικών και τεχνολογικών κλάδων. Σχεδιάζοντας σε νανοκλίμακα εργάζεσαι παράλληλα σε έναν κόσμο όπου η Φυσική, η Χημεία, η Ηλεκτρολογία , η Μηχανολογία ακόμα και η Βιολογία συσσωματώνονται σ' έναν ολοκληρωμένο τομέα. Οι “θεμέλιοι λίθοι” για τα νανουλικά περιλαμβάνουν συστατικά με βάση τον άνθρακα, οργανικά, ημιαγωγούς, μέταλλα και οξείδια των μετάλλων. Τα νανουλικά δημιουργούν το θεμέλιο ή αλλιώς τα δομικά στοιχεία για την Νανοτεχνολογία.

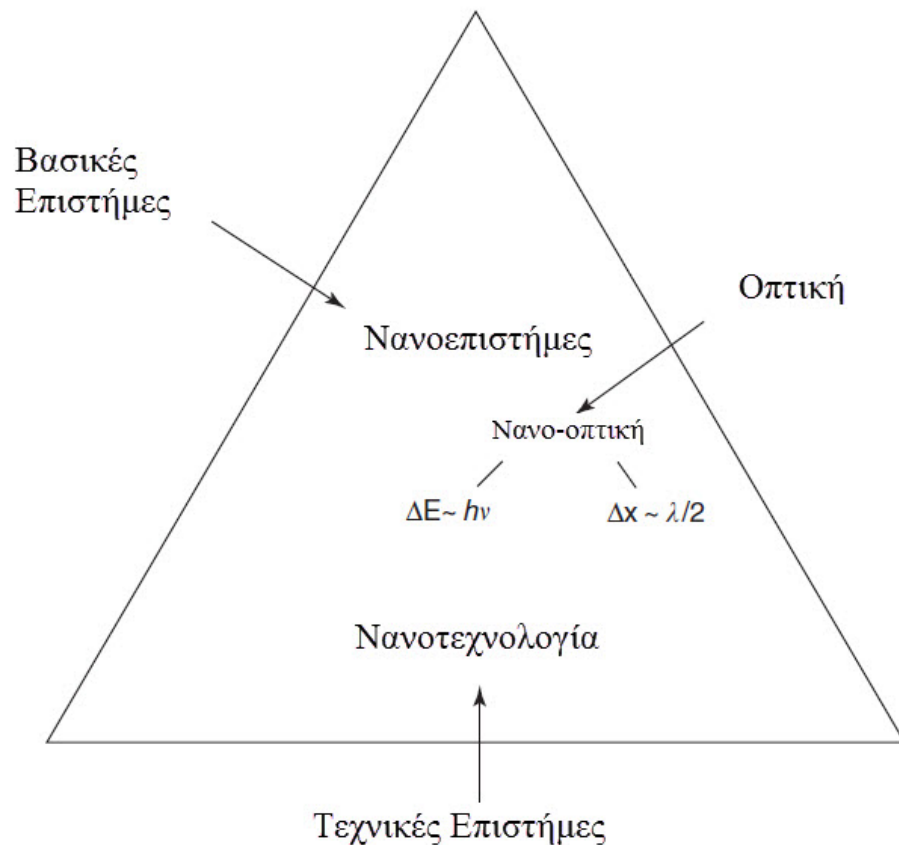
Ο όρος Νανοτεχνολογία παρουσιάστηκε από τον Nori Taniguchi το 1974 στο Διεθνές συνέδριο Μηχανικών παραγωγής στο Τόκιο (International Conference in Production Engineering). Χρησιμοποίησε την λέξη για να περιγράψει μια υψηλής ακρίβειας μηχανική κατεργασία (Ultrafine Machining), δηλαδή την επεξεργασία ενός υλικού με ακρίβεια σε νανοκλίμακα. Αυτή η εργασία επικεντρώθηκε στην μελέτη των μηχανισμών κατεργασίας σκληρών, εύθραυστων υλικών όπως κρυστάλλους χαλαζία, πυρίτιο και κεραμικά τις αλουμίνας με υπερηχητική επεξεργασία. Χρόνια νωρίτερα, σε μια διάλεξη στο ετήσιο συνέδριο του Αμερικανικού Συλλόγου Φυσικής το 1959 με τίτλο Υπάρχει πολύ χώρος στον πυθμένα (*There's Plenty of Room at the Bottom*) ο Αμερικάνος φυσικός και βραβευμένος με Nobel *Richard Feynman* υποστήριξε (παρόλο που ο ίδιος δεν χρησιμοποίησε τη λέξη νανοτεχνολογία) ότι το

μικροσκόπιο σάρωσης ηλεκτρονίων (scanning electron microscope) μπορούσε να βελτιωθεί ως προς την ανάλυση και την σταθερότητά του, έτσι ώστε κάποιος να είναι σε θέση που μπορεί να βλέπει τα άτομα. Ο Feynman προχώρησε ώστε να προβλέψει την ικανότητα να τοποθετεί και να οργανώνει τα άτομα σε όποια διάταξη θέλει ο ερευνητής, μέσα στα όρια της χημικής σταθερότητας, προκειμένου να χτίσει μικροσκοπικές κατασκευές που με την σειρά τους θα οδηγούσαν στην ατομική σύνθεση υλικών [13]. Με βάση την ιδέα του Feynman, ο K.E Drexler εξέλιξε την ιδέα της “μοριακής νανοτεχνολογίας” το 1986 στο βιβλίο *Engines of creation* όπου και αξίωσε την ιδέα της χρήσης μοριακών δομών σε νανοκλίμακα με σκοπό την λειτουργία τους σαν μηχανές ώστε κατά κάποιο τρόπο να οδηγούν και να ενεργοποιούν την σύνθεση μεγαλύτερων μορίων. Ο Drexler πρότεινε την χρήση ενός μεγάλου αριθμού (δισεκατομμύρια) μηχανών που τις ονόμασε “Συναρμολογητές” (assemblers) ή “νανορομπότ” που θα μπορούσαν να αποτελέσουν την βάση της παραγωγής μοριακής τεχνολογίας ικανής να κατασκευάσει κυριολεκτικά τα πάντα άτομο προς άτομο και μόριο προς μόριο. Αρκετή δουλειά έγινε σ’ αυτούς τους τομείς μετά την δημοσίευση του βιβλίου, αν και η έννοια των “νανορομπότ” είναι ακόμα θεωρητική.

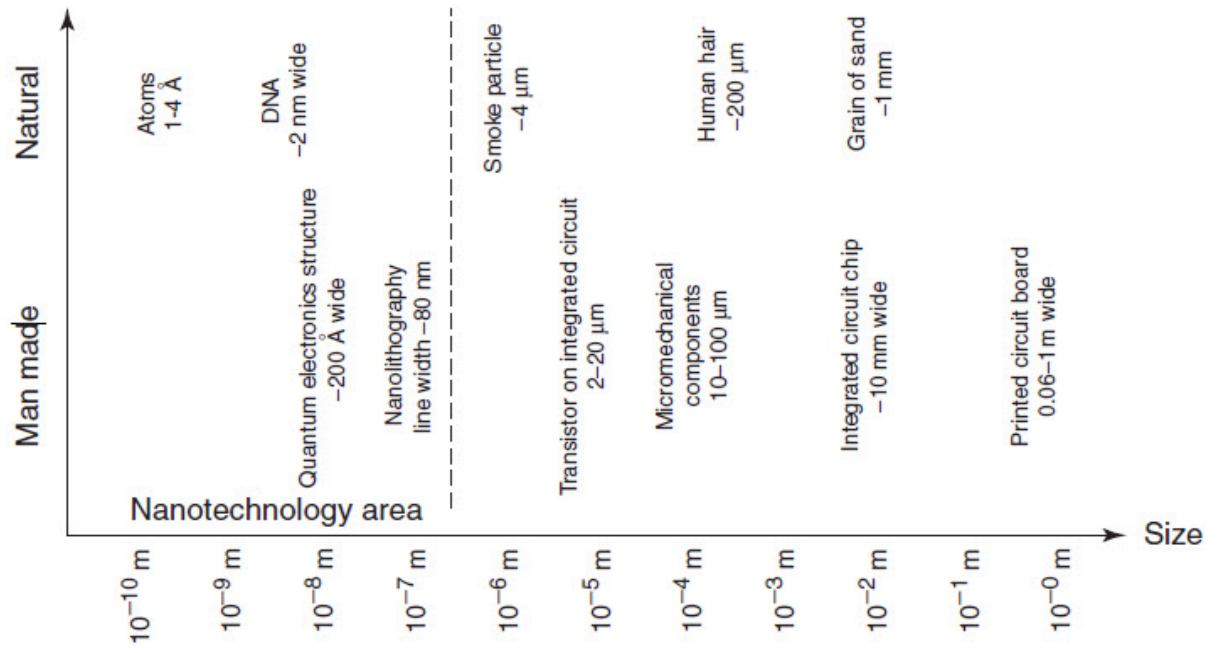
Αυτή τη στιγμή, ένα νέο πεδίο της μηχανικής έχει ήδη αναπτυχθεί μέσα από την καθαρή και εφαρμοσμένη επιστήμη. Ωστόσο η νανοεπιστήμη παραμένει κατά κάποιο τρόπο ένας τομέας προς ωρίμανση. Η Νανοτεχνολογία μπορεί να προσδιοριστεί ακριβώς με την έννοια της “μοριακής κατασκευής” (μοριακής νανοτεχνολογίας) που παρουσιάστηκε παραπάνω ή ως έναν ευρύτερο ορισμό που εμπεριέχει παράπλευρα σχετικά πεδία. Εδώ αξίζει να καταστήσουμε σαφές ποιους ορισμούς χρησιμοποιούμε. Μια βασική διαφορά μεταξύ των συστημάτων της Βιολογίας και της Νανοτεχνολογίας είναι ο στόχος κάθε επιστήμης. Η συστημική Βιολογία έχει ως στόχο να αποκαλύψει την θεμελιώδεις λειτουργία του κυττάρου σε μια προσπάθεια να προβλέψει την ακριβή απόκριση του σε συγκεκριμένα ερεθίσματα και γενετικές παραλλαγές



(εστιάζει δηλαδή σε συγκεκριμένες επιστημονικές ανακαλύψεις), απεναντίας η νανοτεχνολογία δεν επιχειρεί να είναι τόσο ακριβής ωστόσο συγκεντρωμένο ενδιαφέρον υπάρχει στον χρήσιμο σχεδιασμό (εστιάζει στον τεχνικό σχεδιασμό) [13]. Το **Σχήμα 1.1** απεικονίζει την τρέχουσα εξέλιξη των διάφορων κλάδων οδεύοντας προς την νανοκλίμακα.



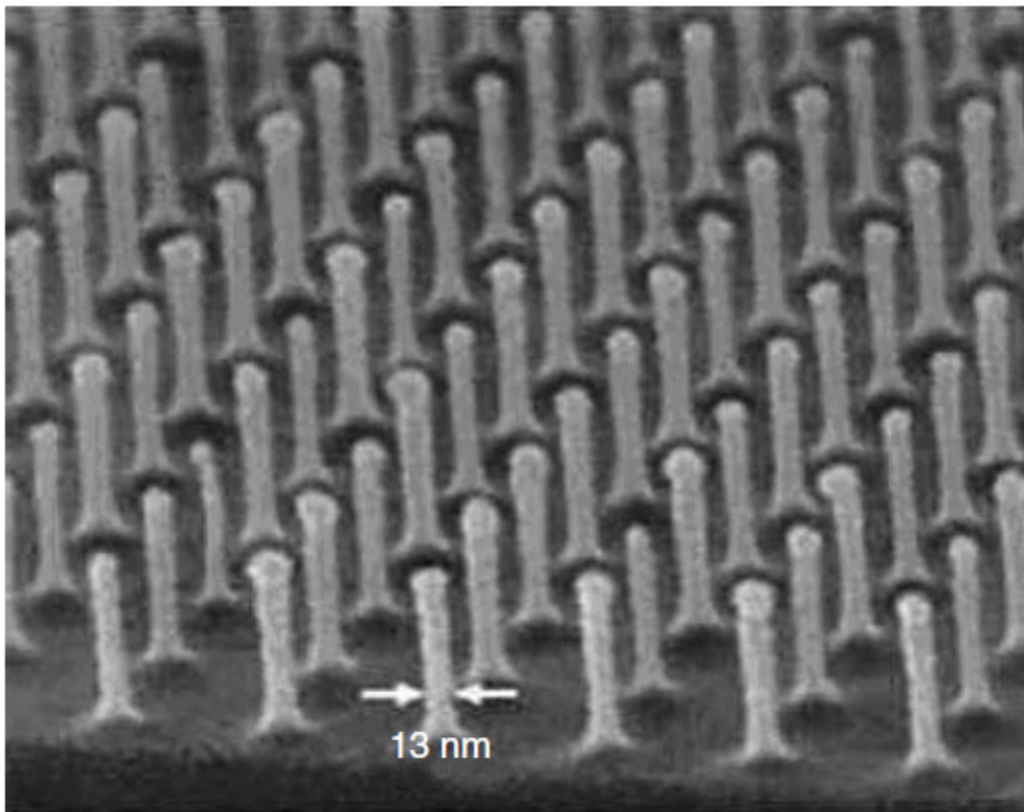
**Σχήμα 1.1** Η εξέλιξη διάφορων κλάδων εστιάζοντας προς τη νανοκλίμακα



Σχήμα 1.2 Μεγέθη κάποιων φυσικών ή από ανθρώπους αντικειμένων

### 1.1.2 Πληθώρα Πιθανών Εφαρμογών

Η Νανοτεχνολογία είναι μια πολύ ικανή τεχνολογία αλλά πολύ ασταθής και ανεξέλεγκτη ταυτόχρονα γεννώντας έτσι νέες απαιτήσεις σε πληθώρα βιομηχανιών. Η εξέλιξη της επιστήμης και της μηχανικής σε νανοκλίμακα είναι υποσχόμενη και φαίνεται ότι θα επηρεάσει σημαντικά πολλούς τομείς οδηγώντας τους σε μια νέα βάση και υποδομή που θα έχει μεγάλο αντίκτυπο στις τηλεπικοινωνίες, στους υπολογισμούς, στην πληροφορική (με την έννοια στα οπτικά δίκτυα/νανοφωτόνια, νανουπολογιστές/νανοηλεκτρονική, νανοαποθήκευση), στην Υγεία και στην Βιοτεχνολογία, στο περιβάλλον, στην ενέργεια, στα μέσα μεταφοράς και στην εξερεύνηση του διαστήματος [13].



**Σχήμα 1.3** Παράδειγμα νανοδομών

Η Νανοτεχνολογία θα ωθήσει τους παραγώγους στην κατασκευή νέων τσιπ για υπολογιστές και αισθητήρων που είναι σημαντικά μικρότεροι, ταχύτεροι, ενεργειακά αποδοτικότεροι και φθηνότεροι σε σχέση με τους ήδη υπαρχόν προκατόχους τους. Ειδικότερα η Νανοτεχνολογία δίνει την ευκαιρία σε πολλές νέες εφαρμογές να εξελιχθούν όπως στην κβαντική πληροφορική, στην τροποποίηση πολλών υλικών και επιφανειών, σε τεχνολογίες ανίχνευσης, διάγνωσης και στην Βιοϊατρική.

Η τεχνολογία θα δημιουργήσει εξολοκλήρου νέους τομείς έρευνας διότι η ύλη σε αυτό το φυσικό επίπεδο συμπεριφέρεται διαφορετικά [13]. Η σύνδεση υλικών με τη βιολογία πιστεύεται ότι θέτει ένα νέο συναρπαστικό σύνορο για την νανοτεχνολογία [13]. Για παράδειγμα, η Εθνική Υπηρεσία Αεροναυτικής και Διαστήματος (NASA) προβλέπει μια ζώνη σύγκλισης μεταξύ Βιοτεχνολογίας, νανοτεχνολογίας και Πληροφορικής τεχνολογίας και κατά συνέπεια η NASA χρηματοδοτεί τις νανοεπιστήμες καθώς και μελέτες πάνω σε νανοδομημένα υλικά, νανοηλεκτρονικά και αισθητήρες. Ένα άλλο παράδειγμα, είναι ο Αμερικάνικος στρατός που χρηματοδοτεί νανοτεχνολογίες για την ανάπτυξη προϊόντων που μειώνουν σημαντικά το βάρος που κουβαλάνε οι στρατιώτες με σκοπό την αύξηση της σωματικής τους προστασίας.

Τα νανουλικά δίνουν ώθηση σε νέες εφαρμογές διότι παρουσιάζουν νέες οπτικές, ηλεκτρικές ή μαγνητικές ιδιότητες. Η πρώτη γενιά νανοτεχνολογίας (τέλη του 1990 με αρχές του 2000) επικεντρώθηκε στην βελτίωση της απόδοσης των ήδη τότε υπαρχόν μικρουλικών. Η δεύτερη γενιά νανοτεχνολογίας (2006-2007) ξεκίνησε να χρησιμοποιεί νανουλικά σε σημαντικότερο βαθμό. Το 2010 δύο νέοι φυσικοί ρωσικής καταγωγής, ο Αντρε Γκειμ και ο Κονσταντιν Νοβοσέλοφ τιμήθηκαν με το Νόμπελ Φυσικής για τα επαναστατικά τους πειράματα που αφορούσαν το δισδιάστατο υλικό γραφένιο. Το ασυνήθιστο υλικό είναι μια μορφή άνθρακα με τη μορφή φύλλων που έχουν πάχος ενός ατόμου, εμφανίζει ιδιότητες που υπόσχονται επανάσταση στην ηλεκτρονική και σε μια ποικιλία άλλων εφαρμογών.

Οι παρατηρητές του κλάδου ισχυρίζονται ότι οι νανοτεχνολογικές πρόοδοι είναι απαραίτητες για να συνεχιστή η επανάσταση των υλικών προς όλους τους τομείς. Επιπλέον η νανοτεχνολογία θα μας επιτρέψει να κατασκευάσουμε μια ολόκληρη νέα γενιά προϊόντων τα οποία θα είναι καθαρότερα,ισχυρότερα,ελαφρύτερα και υψηλής ακρίβειας .Νανουλικά με δομικά χαρακτηριστικά σε νανοκλίμακα εντοπίζονται σε μορφές Clusters, λεπτών φύλλων,πολλαπλών στρώσεων,νανοκρυσταλλικά υλικά.Τα υλικά που παρουσιάζουν ενδιαφέρον περιλαμβάνουν τα μέταλλα,τα άμορφα και κρυσταλλικά κράματα,οι ημιαγωγοί,τα οξείδια,κεραμικά νιτριδίου και καρβιδίου υπό μορφή cluster, λεπτών φύλλων,πολυστρωματικών και νανοκρυστάλλων.

Όλα τα προϊόντα κατασκευάζονται από άτομα,ωστόσο κατά ενδιαφέροντα τρόπο οι ιδιότητες των προϊόντων αυτόν εξαρτώνται από τον τρόπο που εκείνα τα άτομα οργανώνονται. Για παράδειγμα,με την αναδιάταξη των ατόμων του άνθρακα μπορείς να κατασκευάσεις διαμάντια. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι οι τρέχουσες τεχνικές κατασκευής είναι ακόμα στοιχειώδεις σε ατομικό και μοριακό επίπεδο. Απ' την άλλη μεριά όμως η νανοτεχνολογία βρίσκεται σε θέση να συναρμολογήσει όλα τα θεμελιώδη δομικά στοιχεία της φύσης (άτομα,μόρια κτλ.) ,εντός των ορίων που θέτουν οι νόμοι της φυσικής, αλλά με τρόπους μη φυσικούς ή ξαναδημιουργώντας μια ήδη υπάρχουσα κατασκευή με την σύνθεση πιο λεπτών μορφών ή στοιχείων.

Τα νανουλικά συχνά έχουν δραματικά διαφορετικές ιδιότητες σε σχέση με μεγαλύτερης κλίμακας αντίστοιχα υλικά. Για παράδειγμα,οι νανοκρύσταλλοι χαλκού είναι πέντε φορές σκληρότερη από ένα κοινό χαλκό μες στην νανοκρυσταλλική τους δομή σε κλίμακα μικρομέτρου. Ένας στόχος της νανοτεχνολογίας είναι να μειώσει το χάσμα μεταξύ των μικρότερων λιθογραφικών δομών που έχουν κατασκευαστεί και των χημικά κατασκευασμένων μεγάλων μορίων.

Η εφεύρεση του μικροσκοπίου tunneling, η ανακάλυψη της οικογένειας μορίων του Φουλερνίου, η βελτίωση των υλικών με ιδιότητες εξαρτώμενες απ' το μέγεθος και η ικανότητα να χειραγωγήσουμε βιολογικά μόρια όπως το δεοξυροβονουκλεϊκό οξύ (DNA) και η ανακάλυψη του φύλλου από Γραφένιο είναι μερικές από τις κρίσιμες εξελίξεις που προχώρησαν την νανοτεχνολογία. Μια γκάμα προϊόντων που διαθέτει τις μοναδικές ιδιότητες των υλικών νανοκλίμακας είναι ήδη διαθέσιμα στους καταναλωτές και στην βιομηχανία αυτή τη στιγμή. Για παράδειγμα οι περισσότεροι σκληροί δισκοί υπολογιστών περιέχουν κεφαλές με γιγαντο-μαγνητοαντιστάσεις (GMR) που μέσα από λεπτά στρώματα μαγνητικών νανουλικών επιτρέπουν σημαντική αύξηση στην χωρητικότητα αποθήκευσης. Άλλες υπάρχουσες ηλεκτρονικές εφαρμογές είναι οι μαγνητικές μνήμες (nanovolatile magnetic memory), ανιχνευτές ναρκών (landmine detectors) και πυξίδες στερεάς κατάστασης (solidstate compasses). Κάποιες άλλες χρήσεις την νανοτεχνολογίας που βρίσκονται ήδη στην αγορά περιλαμβάνουν (Επίσης βλέπε Πίνακα 1.1 [13], καθώς και Πίνακα 1.2 [13]) :

- Επιδέσμους τραυμάτων και εγκαυμάτων
- Φίλτρα νερού
- Κατάλυση
- Οδοντιατρικοί δεσμοί
- Επιστρώσεις για ευκολότερο καθαρισμό του γυαλιού
- Προφυλακτήρες και καταλύτες για αυτοκίνητα
- Προστατευτική επιστρώση υποβάθμισης της φωτεινότητας για γυαλιά οράσεως και αυτοκίνητα
- Αντηλιακά και καλλυντικά

Χρήση λαμπερού φθορίου από νανοκρυστάλλους ημιαγωγούς για δυναμική αγγειογραφία σε τριχοειδή αγγεία εκατοντάδες μικρόμετρα κάτω από το δέρμα ζωντανών ποντικών, περίπου διπλάσιο σε βάθος σε σχέση με τα συμβατικά αγγειογραφικά υλικά και λαμβάνουν περίπου το ένα πέμπτο τις ισχύεις της ακτινοβολίας.

Νανοηλεκτρομηχανική αισθητήρες που μπορούν να ανιχνεύσουν και να προσδιορίσουν ένα ενιαίο μόριο. Ένα ουσιαστικό βήμα προς την υλοποίηση πρακτικών αισθητήρων πεδίου.

Ένες βασισμένες στους νανοσωλήνες που απαιτούν 3 φορές περισσότερη ενέργεια για να σπάσουν σε σχέση με τις δυνατότερες ίνες από μετάξι και 15 φορές απ' τις ίνες του Kevlar.

Νανოსύνθετα ενεργητικά υλικά για προωθητικά και εκρηκτικά τα οποία έχουν πάνω από την διπλάσια παραγωγή ενέργειας των τυπικών εκρηκτικών.

Πρωτότυπες συσκευές αποθήκευσης δεδομένων που βασίζονται στην μοριακή ηλεκτρονική με πυκνότητα δεδομένων 100 φορές μεγαλύτερη από την σημερινή υψηλότερη πυκνότητα σε εμπορικές συσκευές.

Εμπορικές αποδείξεις δείχνουν ότι τα νανοσωματίδια σιδήρου μπορούν να αφαιρέσουν έως και το 96 % μιας ρυπογόνου ουσίας (τριχλωροαιθυλένιο) από υπόγεια ύδατα σε βιομηχανική περιοχή.

---

## Πίνακας 1.2

---

TOMEΑΣ	Παραδείγματα προϊόντων που δημιούργησαν έσοδα για το 2005 και μετέπειτα
Κατασκευαστικά υλικά	Επιφάνειες που δεν χαράζονται, αύξηση της αντοχής του βινυλίου, στέγες, έπιπλα κτλ. Αυτό- καθαριζόμενα παράθυρα.
Επικοινωνίες και Υπολογιστές	Νανοδίσκοι και μνήμες, υψηλής ευκρίνειας οθόνες και ηλεκτρονικό χαρτί, φωτοτυπικά μηχανήματα και εκτυπωτές, αισθητήρες για συστήματα ασφαλείας και παρακολούθησης.
Στρατιωτικά και Διαστημικά	Υλικά, επιστρώσεις για την σκλήρυνση των προϊόντων και αισθητήρες.
Χημικά	Εξελιγμένοι καταλύτες και σύνθετα υλικά
Φαρμακευτικά προϊόντα και Ιατρικές συσκευές	Καλύτερη στόχευση φαρμάκων ,συστήματα χορήγησης φαρμάκων, προϊόντα νανοβιοτεχνολογίας.
Ενέργεια	Φίλτρα και καταλύτες για καύσιμα με βάση τους υδρογονάνθρακες.

---



### 1.1.3 Τεχνολογικός Σκοπός

Σημαντικές ανακαλύψεις έχουν λάβει χώρα τις τελευταίες δυο δεκαετίες σ' ένα ευρύ φάσμα θεμάτων που σχετίζονται με την επιστήμη και την μηχανική σε νανοκλίμακα. Υπάρχει πρόοδος στην μοριακή νανοτεχνολογία συνεχόμενα και σε διαφορετικά μέτωπα, παράγοντας καινοτομίες για τον χειρισμό και τον σχηματισμό χημικών δεσμών, την μοριακή ηλεκτρονική και την αξιοποίηση των βιομοριακών κινητήρων [13]. Τα Νανουλικά και τα διάφορα πεδία της νανοεπιστήμης έχουν εξελιχθεί ραγδαία τον τελευταίο καιρό και ταυτόχρονα έννοιες των νανοεπιστημών γίνονται ευρέως γνωστές ολοένα και περισσότερο. Η Νανοτεχνολογία είναι σήμερα μία διεπιστημονική επιστήμη που καλύπτει θέματα όπως μικρό μηχανολογίας, μηχανών ακριβείας, νανοηλεκτρονική, νανουλικών/ νανοδομών και βιοιατρικής νανοτεχνολογίας.

Οι τρεις σημαντικότεροι τομής της νανοτεχνολογίας που δίνεται και η περισσότερη έμφαση είναι : (i) τα νανουλικά, (ii) η νανοβιοτεχνολογία και η (iii) νανοηλεκτρονική/φωτονική. Μια πιο λεπτομερή προβολή των υποπεδίων παρουσιάζεται στον **Πίνακα 1.3** ο οποίος παρέχει επίσης μια αίσθηση του που επικεντρώνεται η έρευνα σε Παγκόσμιο επίπεδο (όσον αφορά μελέτες που δημοσιεύτηκαν από το 1966 έως το 2000 δεδομένα από [13]) .στον **Πίνακα 1.4** (από [13]) απεικονίζονται πεδία και υπό-ειδικότητες της νανοτεχνολογίας .

**Πίνακας 1.3****Προσανατολισμός της έρευνας (όσον αφορά μελέτες που δημοσιεύτηκαν από το 1966 έως το 2000)**

	Αριθμός των Papers	% των Papers
Ναοσωματίδια	41.918	(18,4 %)
Κβαντική Υπολογιστές	41.795	(18,4 %)
Νανοδομές ημιαγωγών	22.308	(9,8 %)
Κατάλυση	18.758	(8,2 %)
Αυτό-συναρμολόγηση	18.214	(8,0 %)
Νανοϊατρική	16.176	(7,1 %)
Φουλερένια	13.230	(5,8 %)
Νανოსύνθετα και coatings	12.237	(5,4 %)
Quantum dots	11.863	(5,2 %)
Βιοαισθητήρες	9.921	(4,4 %)
Νανοσωλήνες	9.024	(4,0 %)
Δενδριμερή και υπομοριακή χημεία	6.628	(2,9 %)
Ενεργειακή αποθήκευση και διανομή	2.883	(1,3 %)
Μαλακή λιθογραφία (nanoimprinting)	2.500	(1,1 %)

(Συνέχεια)

**Πίνακας 1.3****Προσανατολισμός της έρευνας (όσον αφορά μελέτες που δημοσιεύτηκαν από το 1966 έως το 2000)**

ΣΥΝΟΛΟ	227.455	100.0 %
--------	---------	---------

## Πίνακας 1.4

## Ταξινόμηση πεδίων και υπο-ειδικοτήτων στην Νανοτεχνολογία

---

ΝανοΔομημένα Υλικά	Νανολειτουργικά υλικά Νανოსωματίδια Νανოსωλήνες Άνθρακα Νανοςωλήνες Άνθρακα (reapod) Νανοδιαμάντι Νανοςύραμα Nanorods Νανοδομήμενα πολυμερή Χειραγώγηση των πολυμερών σε νανοκλίμακα Νανοδομημένα coating Νανοκατάλυση Νανοςωλήνες Νανοςωλήνες σε ημιαγωγούς από πυρίτιο (Si) Νανοκρυσταλλικά υλικά και Νανοσύνθετα Λεπτής στρώσης φωτονικά κρύσταλλα Βιομόρια
Σύνθεση και Συναρμολόγηση Νανουλικών	Νανοςωματίδια Νανοςωλήνες άνθρακα Νανοεπεξεργασία (Nanomachining) Nanodeposition Μέθοδοι Sol-Gel Ball milling Νανοσύνθετα
Μέθοδοι	Top-down approaches : Lithography (E-beam,

Νανοκατασκευής	extreme ultraviolet) Dip-pen nanolithography Bottom-up approaches : selective growth,self assembly,scanning tip manipulation
ΝανοΧειραγωγηση	SPM (Scanning Probe Microscope)-based Nanomanipulator Nanotweezer

(Συνέχεια)

**Πίνακας 1.4**

**Ταξινόμηση πεδίων και υπο-ειδικοτήτων στην  
Νανοτεχνολογία**

---

ΝανοΛιθογραφία	SPM (Scanning Probe Microscope) Dip-pen νανολιθογραφία (EUV) Ακραία υπεριώδη Νανολιθογραφία Δέσμης Ηλεκτρονίων / X-ray Εστιασμένη δέσμη ιόντων Light coupling nanolithography Imprint Nanolithography
ΝανοΣένσορες	Αισθητήρες Νανოსώληνων και Νανοσυρμάτων Αισθητηρες από Νανοσύνθετα
ΝανοΗλεκτρονική	Νανοηλεκτρονική Πυριτίου (Silicon) Μοριακή Νανοηλεκτρονική,Νανοηλεκτρονική άνθρακα Νανοηλεκτρονική DNA Νευρομορφική Νανοηλεκτρονική Βαλλιστική Μαγνητοαντίσταση(BMR) και νανοεπαφές Γενική Ηλεκτρονική

	Josephson Arrays
	RTD(Resonant Tunneling Diode)-based devices
	Σπιντρονική
	Μοριακή Νανοηλεκτρονική
ΝανοΜηχανική	Μικροσκόπιο Ατομικής Δύναμης
	Nanoresonators
	Νανοπρόβολοι
	Νανομηχανικά Τρανζίστορ
	Νανοακουστική
	Νανορευστά
	Νανοσκληρομέτρηση
	Νανορομπότ, Νανοηλεκτρομηχανική
ΝανοΜαγνητική	Μαγνήτες Νανοκλίμακας
	Μαγνητικά Νανοσωματίδια
	Μαγνητοαντιστάσεις (GMR)
	Σπιντρονική
	Μαγνητικοί Νανοςένσορες για πολύ υψηλής πυκνότητας μαγνητική απθήκευση
ΝανοΧημεία	Self-Assembly Νανοχημεία

(Συνέχεια)

**Πίνακας 1.4**

**Ταξινόμηση πεδίων και υπο-ειδικοτήτων στην  
Νανοτεχνολογία**

---

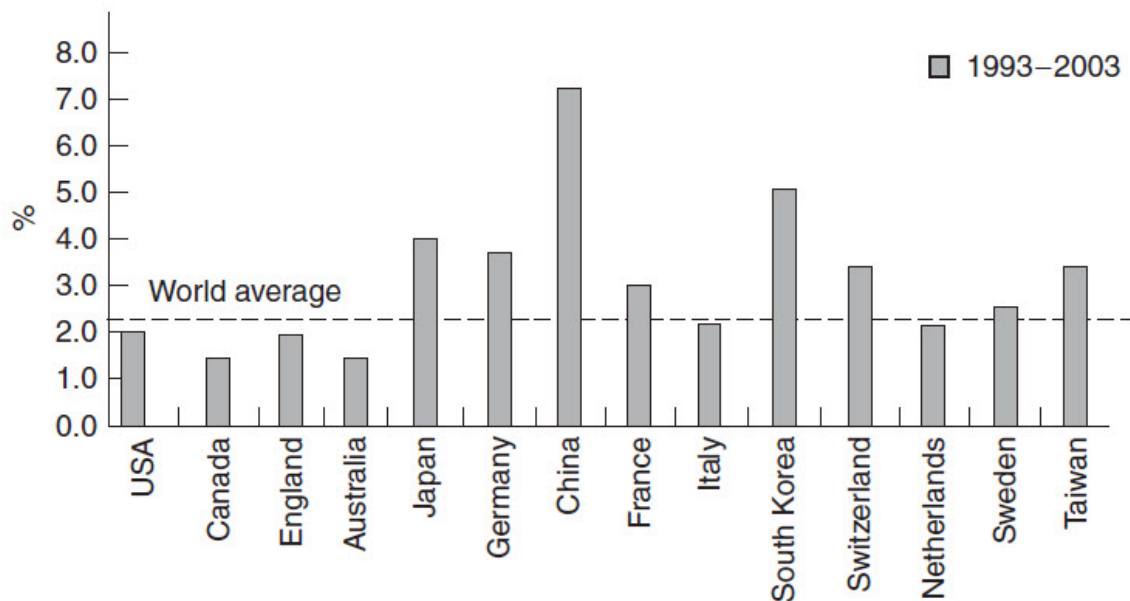
ΝανοΒιοτεχνολογία	Νανοκαταλύτες, Μπαταρίες, Κυψέλες καυσίμου, Νανοηλεκτροχημική λιθογραφία Μοριακοί κινητήρες Βομοριακή ηλεκτρονική mtDNA (μιτοχονδριακού DNA) Τεχνικές μικροχειρισμού, αυτό-οργάνωσης τσιπ γονιδίων Νανοβιοφαρμακευτική Self-Assembled Δομές βιομορίων Βιο-MEMS Βιοηλεκτρονική Νανοηλεκτρονική DNA
Νανοόργανα	Νανομετρολογία και εργαλεία για υλικά και δομές σε νανοκλίμακα SPM, TEM κτλ.

---

Όπως προαναφέρθηκε στις εισαγωγικές παραγράφους, η Νανοτεχνολογία βασίζεται στην Κβαντική Θεωρία πιο συγκεκριμένα στην κβαντική μηχανική. Η Κβαντική θεωρία, ένας κλάδος της Φυσικής, είναι η βάση της αρχής των κβάντων, δηλαδή, ότι η ενέργεια μεταφέρεται όχι ως μια συνεχή ποσότητα αλλά σε διακριτές ασυνεχείς μονάδες. Η Κβαντική Θεωρία είναι η επιστήμη όλων των πολύπλοκων στοιχείων του ατομικού και μοριακού φάσματος και της αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας και της υλης [13].

#### 1.1.4 Σκοπός Εμπορευματοποίησης

Οι έρευνα και ανάπτυξη (R&D) στο εμπόριο έχει προσανατολιστεί στον τομέα της Νανοτεχνολογίας για να μεταφράσει τις ανακαλύψεις της επιστήμης σε χρήσιμα προϊόντα. Καθώς υπάρχει πολύ σημαντικό ακαδημαϊκό και θεσμικό ενδιαφέρον υπάρχει ταυτόχρονα και ταχέως αναπτυσσόμενη εμπορική δραστηριότητα. Τα τελευταία χρόνια έχει υπάρξει μεγάλο ενδιαφέρον για την Νανοτεχνολογία σε επιστημονικά περιοδικά, σε συνέδρια, σε επιστημονικά προγράμματα, σε εκθέσεις έρευνας της αγοράς ακόμα και στον οικονομικό και επιχειρηματικό τύπο. Εταιρίες υψηλής τεχνολογίας άρχισαν να αναδεικνύουν την έρευνα τους στην Νανοτεχνολογία μέσω εταιρικών διαφημίσεων. Τώρα υπάρχουν εκατοντάδες εταιρίες και ακαδημαϊκά ιδρύματα που συμμετέχουν στο έργο αυτό ονομάζοντας κάποιες απ' αυτές όπως : IBM, NEC, HP, Perkin Elmer και FEI Corp. Ήδη από τις αρχές του 2000 υπήρχαν περισσότερες από 100 εταιρίες startup που ανέπτυσαν προϊόντα βασισμένα στην Νανοτεχνολογία που θα ήταν εμπορεύσιμα βάση χρονοδιαγράμματος το 2005-2007. Το **Σχήμα 1.4** (Βάση δεδομένων του [13]) παρουσιάζει ότι ορισμένες χώρες εστιάζουν περισσότερη έρευνα (ως ποσοστό επί του συνόλου των επιστημονικών δημοσιεύσεων) προς την Νανοτεχνολογία σε σχέση με άλλες χώρες.



**Σχήμα 1.4** Ποσοστό όλων των δημοσιεύσεων σχετικά με την Νανοτεχνολογία

Ως σημείο αναφοράς, το 2002 υπήρχαν περίπου 50 εταιρίες που ασχολούνταν με τα Νανουλικά και την επεξεργασία Νανουλικών. Οι εταιρίες αυτές βρισκόταν σε διαδικασία ανάπτυξης των υλικών και των μεθόδων για τον χειρισμό και την κατασκευή προϊόντων βασισμένα στα νανουλικά. Από εμπορικής άποψης η νανοφωτονική, η νανοηλεκτρονική και η νανοβιοτεχνολογία (μια κατηγορία υβρίδιο που συνδυάζει την Βιολογία και την νανοηλεκτρονική) θα είναι πολλά υποσχόμενες σε μικρή χρονική περίοδο. Πολλές βασικές βιολογικές λειτουργίες πραγματοποιούνται από μοριακά σύνολα (μονά ένζυμα, ριβόσωμα, μεταγραφικού συμπλόκου) τα οποία έχουν μεγέθη της κλίμακας 1-100 nm. Για να κατανοήσουμε τις λειτουργίες αυτών των συνόλων πρέπει κανείς να περιγράψει τις κινήσεις τους, τα σχήματά τους, κ.ο.κ. σε αυτή την κλίμακα. Οι εξελίξεις της Νανοτεχνολογίας και των εργαλείων της (Scanning Probe microscopy, τεχνικές μικροχειρισμού κτλ.) εφαρμόζονται στον τομέα της Βιολογίας.

Η Νανοηλεκτρονική περιλαμβάνει ηλεκτρονικές (και οπτοηλεκτρονικές) συσκευές όπου σύνολα στοιχείων νανοκλίμακας λειτουργούν ως ενεργά



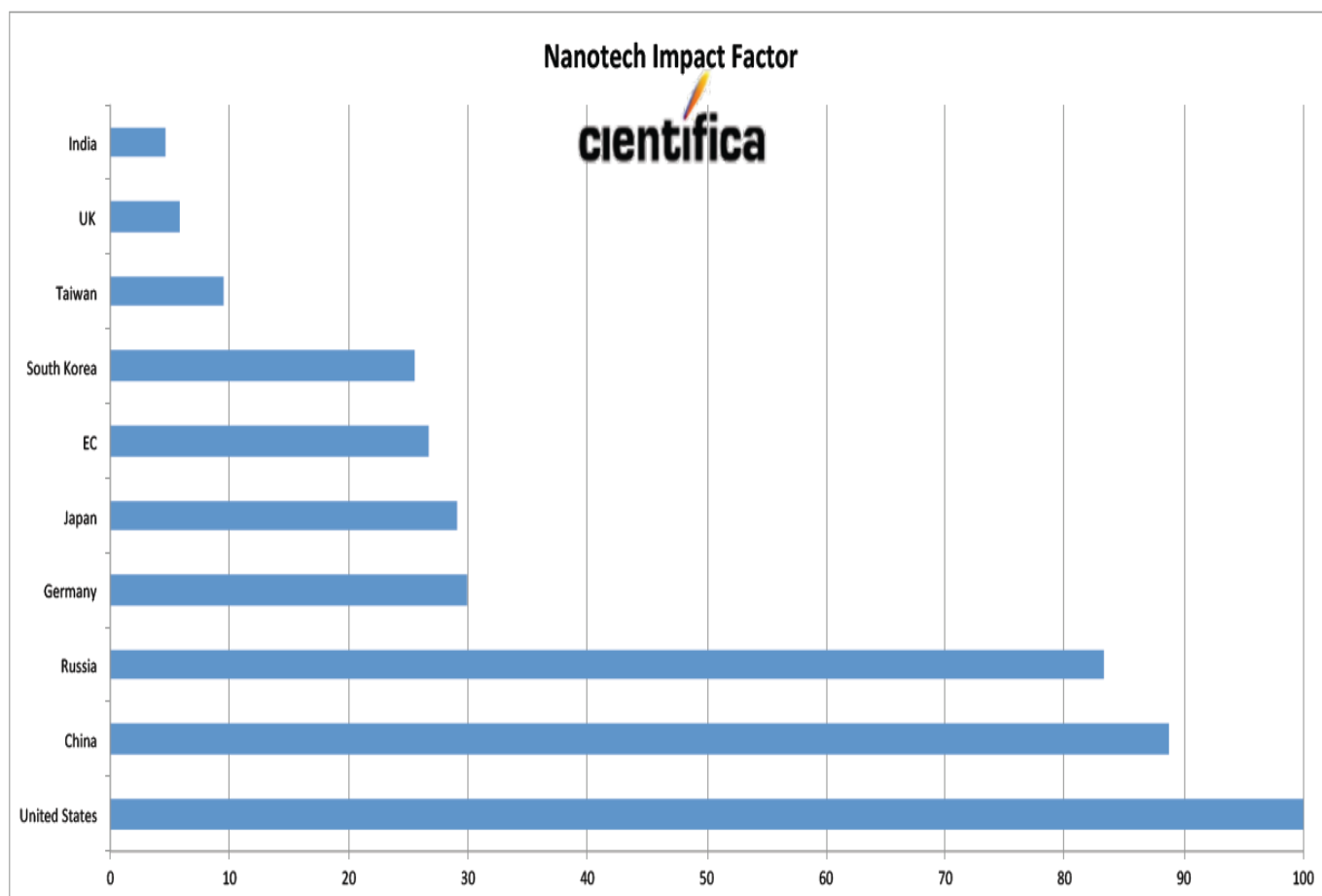
στοιχεία των συσκευών. Εφαρμογές της νανοηλεκτρονικής περιλαμβάνουν μνήμη, λογική, παθητικά οπτικά στοιχεία., συσκευές εκπομπής πεδίου και διόδους εκπομπής φωτός. Ως άλλο παράδειγμα, υπάρχουν έρευνες σε εξέλιξη για πολύ μικρής κλίμακας μαγνητισμό (Ultra small Magnetism) μια ατομική ιδιότητα που προκύπτει από την περιστροφή (σπίν) του ηλεκτρονίου. Η Νανοσπιντρονική είναι μία νέα νανοεπιστήμη που θα βοηθούσε τους μηχανικούς να χτίσουν ταχύτερους και πιο ισχυρούς υπολογιστές και ηλεκτρονικές συσκευές στο μέλλον. Η Σπιντρονική επιδιώκει να απομονώσει το “spin” από το φορτίο του ηλεκτρονίου [13]. Οι Σπιντρονικές συσκευές είναι συσκευές που βασίζονται στο “spin” του ηλεκτρονίου για να εκτελέσουν τις λειτουργίες τους. Η περιστροφή είναι θεμελιώδης ιδιότητα του ηλεκτρονίου και η βάση των μαγνητικών bits σε ένα σκληρό δίσκο υπολογιστή. Οι τωρινοί σκληροί δίσκοι υπολογιστών αποθηκεύουν την πληροφορία μέσα σε μικροσκοπικούς μαγνήτες, αλλά αυτοί οι δίσκοι χρειάζονται από εκατομμύρια συσκευές να κάνουν τη δουλειά τους. Μια βελτίωση θα ήταν να χρησιμοποιήσουμε μαγνήτες νανοκλίμακας, η χρήση αυτών των μαγνητών νανοκλίμακας αναμένεται να οδηγήσει σε μια μονάδα αποθήκευσης μία η δύο τάξεις μεγέθους μικρότερη από την σημερινή τεχνολογία. Εταιρίες Νανοβιοτεχνολογίας προσανατολίζονται ώστε να αναπτύξουν μία γκάμα βιολογικών διαγνωστικών εργαλείων, για παράδειγμα, συστοιχίες μικροσκοπικών αισθητήρων που μπορούν να ανιχνεύσουν συγκεκριμένα Βιολογικά μόρια και μεμονωμένα συστατικά του DNA.

Οι εξελίξεις της Νανοτεχνολογίας και οι τάσεις που επισημάνθηκαν μέχρι τώρα είναι αντικείμενο ενδιαφέροντος για επιχειρηματίες, ερευνητές και φοιτητές που βλέπουν τις σχετικές ευκαιρίες που προσφέρουν αυτές οι αναδυόμενες επιστημονικές εξελίξεις και προσεγγίσεις για την επόμενη μέρα της τεχνολογίας.

## 1.2 Η ΠΑΓΚΟΣΜΙΑ ΧΡΗΜΑΤΟΔΟΤΗΣΗ ΤΗΣ ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ & Η ΕΠΙΡΡΟΗ ΤΗΣ (ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ *Cientifica Ltd* ΙΟΥΛΙΟΣ 2011 [14])

Κάθε χρόνο η εταιρία *Cientifica Ltd.* αναλαμβάνει μια από τις πιο εξαντλητικές έρευνες του κόσμου με θέμα την Παγκόσμια χρηματοδότηση της Νανοτεχνολογίας, προκειμένου να προσδιοριστούν όχι μόνο τα δολάρια,ευρώ και Γεν που δαπανώνται,αλλά και να αποκτηθεί μια μοναδική εικόνα για τις τάσεις που διαμορφώνουν τις εφαρμογές του αύριο.

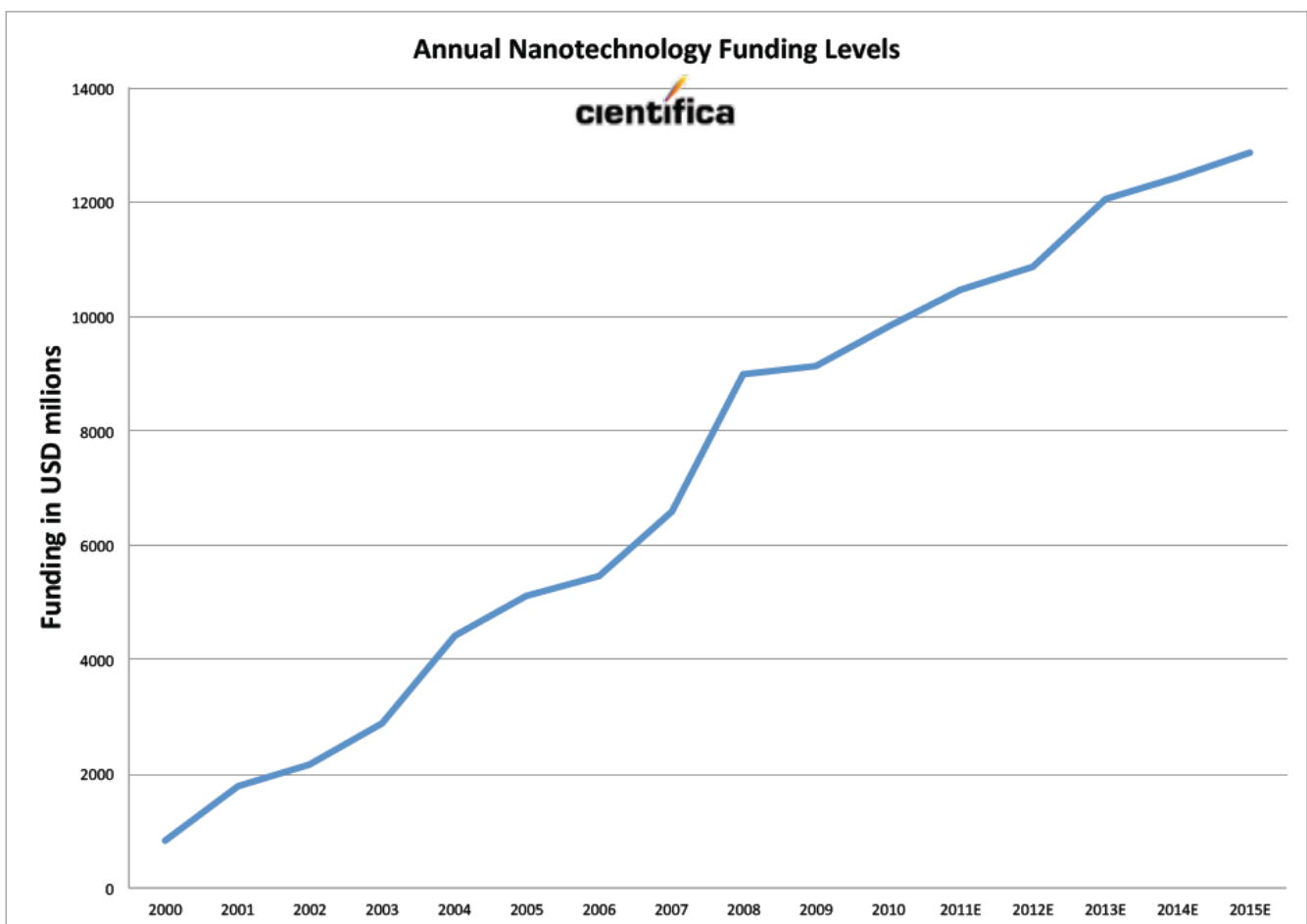
Στην έκθεση αυτή της *Cientifica Ltd* του 2011 έχουν επίσης ενσωματωθεί δεδομένα από την ετήσια έκθεση για την Παγκόσμια ανταγωνιστικότητα του Παγκόσμιου Οικονομικού Φόρουμ προκειμένου να αποκτήσουμε γνώση σχετικά με την ικανότητα κάποιων χωρών να αξιοποιήσουν τις επενδύσεις τους πάνω στην έρευνα.



Σχήμα 1.5 Συντελεστής επιρροής στην Νανοτεχνολογία

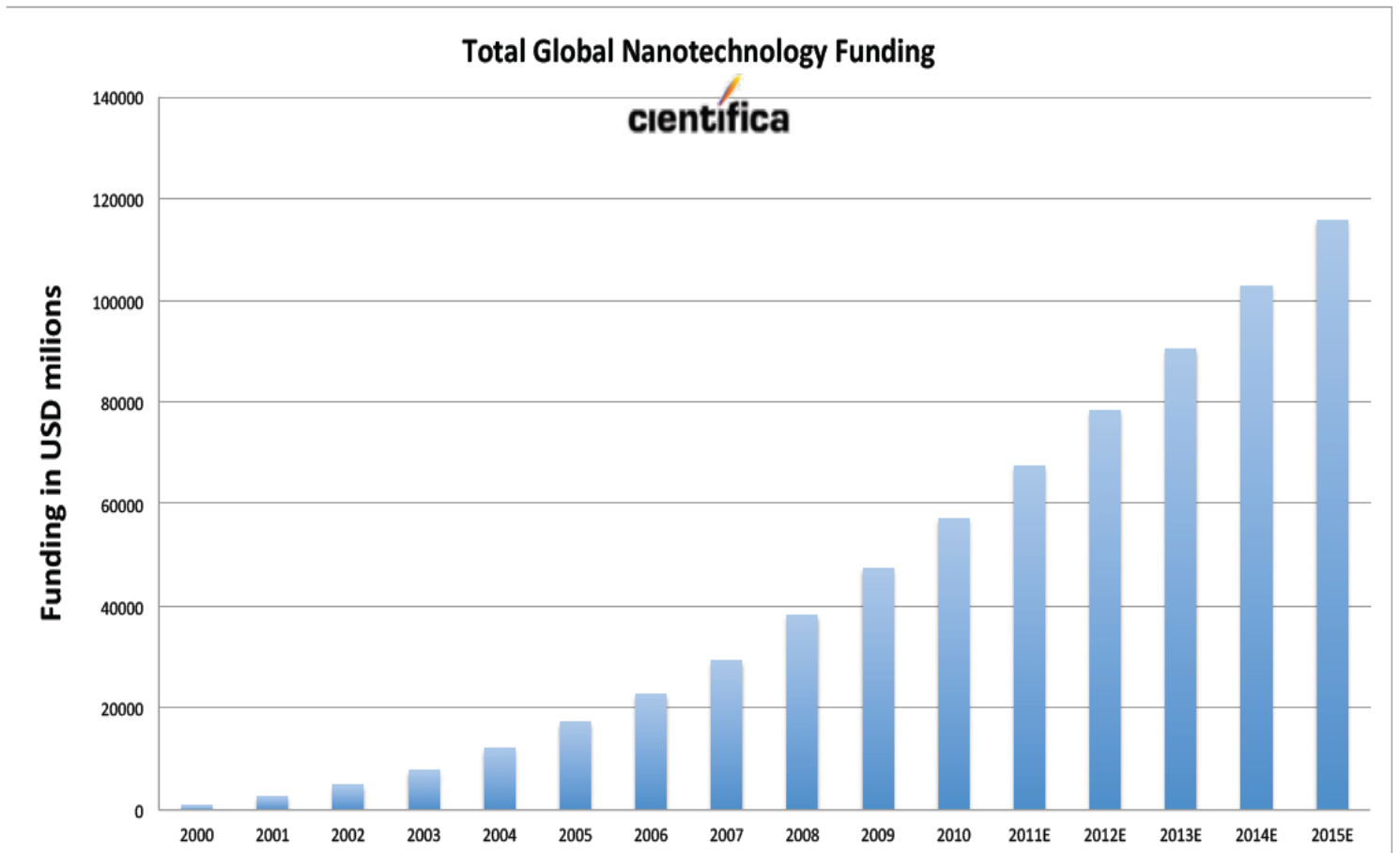
### 1.2.1 Η Ετήσια Χρηματοδότηση Για την Έρευνα στην Νανοτεχνολογία

Από την Εθνική Πρωτοβουλία Νανοτεχνολογίας (N.N.I.) των Η.Π.Α. που ανακοινώθηκε το 2000 σχεδόν κάθε αναπτυγμένη και αναπτυσσόμενη χώρα είχε ξεκινήσει εθνικά προγράμματα που αφορούσαν την Νανοτεχνολογία. Οι κυβερνήσεις του κόσμου σήμερα ξοδεύουν \$10 δισεκατομμύρια το χρόνο σε Έρευνα και Ανάπτυξη (R&D) της νανοτεχνολογίας, με αυτό το ποσοστό που αναμένεται να αυξηθεί κατά 20% τα επόμενα τρία χρόνια.



Σχήμα 1.6 Ετήσια επίπεδα δαπανών στην Νανοτεχνολογία

Η έκθεση της *Cientifica Ltd* του Ιουλίου 2011 έδειξε ότι μέχρι τα τέλη του 2011 η συνολική κρατική χρηματοδότηση για την έρευνα στην Νανοτεχνολογία σε όλο τον κόσμο θα είναι \$65 δισεκατομμύρια δολάρια, αυξανόμενη σε \$100 δισ. δολάρια μέχρι το 2014. Όταν τα στοιχεία για ιδιωτικές έρευνες και διάφορες άλλες μορφές ιδιωτικής χρηματοδότησης λαμβάνονται υπόψη, τα οποία πιστεύεται ότι έχουν ξεπεράσει αριθμητικά τα στοιχεία της κρατικής χρηματοδότησης, ήδη από το 2004, εκτιμάται ότι ένα τέταρτο του ενός τρισεκατομμυρίου δολαρίων θα έχουν επενδυθεί στη Νανοτεχνολογία από το 2015.

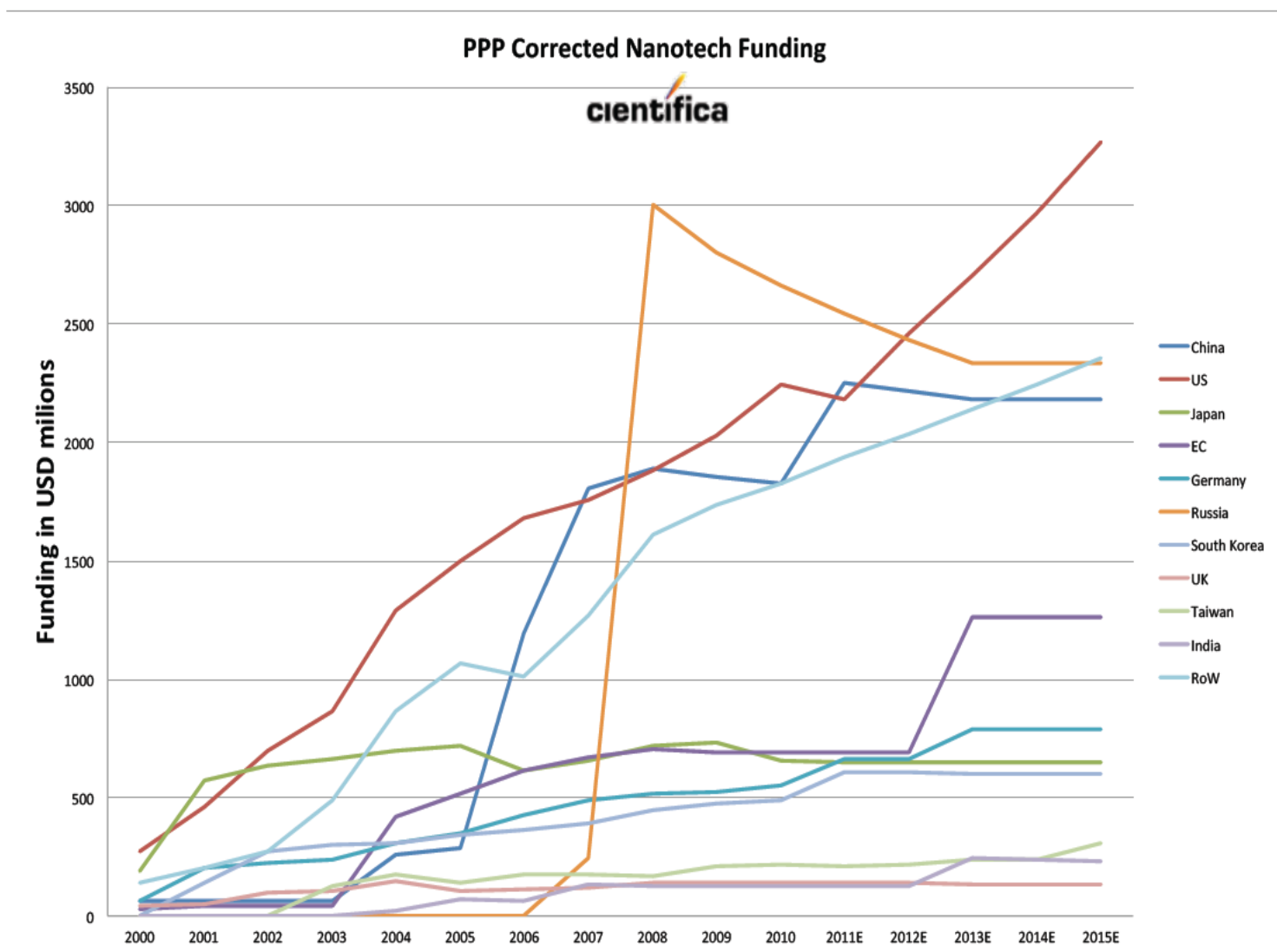


Cumulative global funding of nanotechnologies (source: Cientifica Ltd 2011)

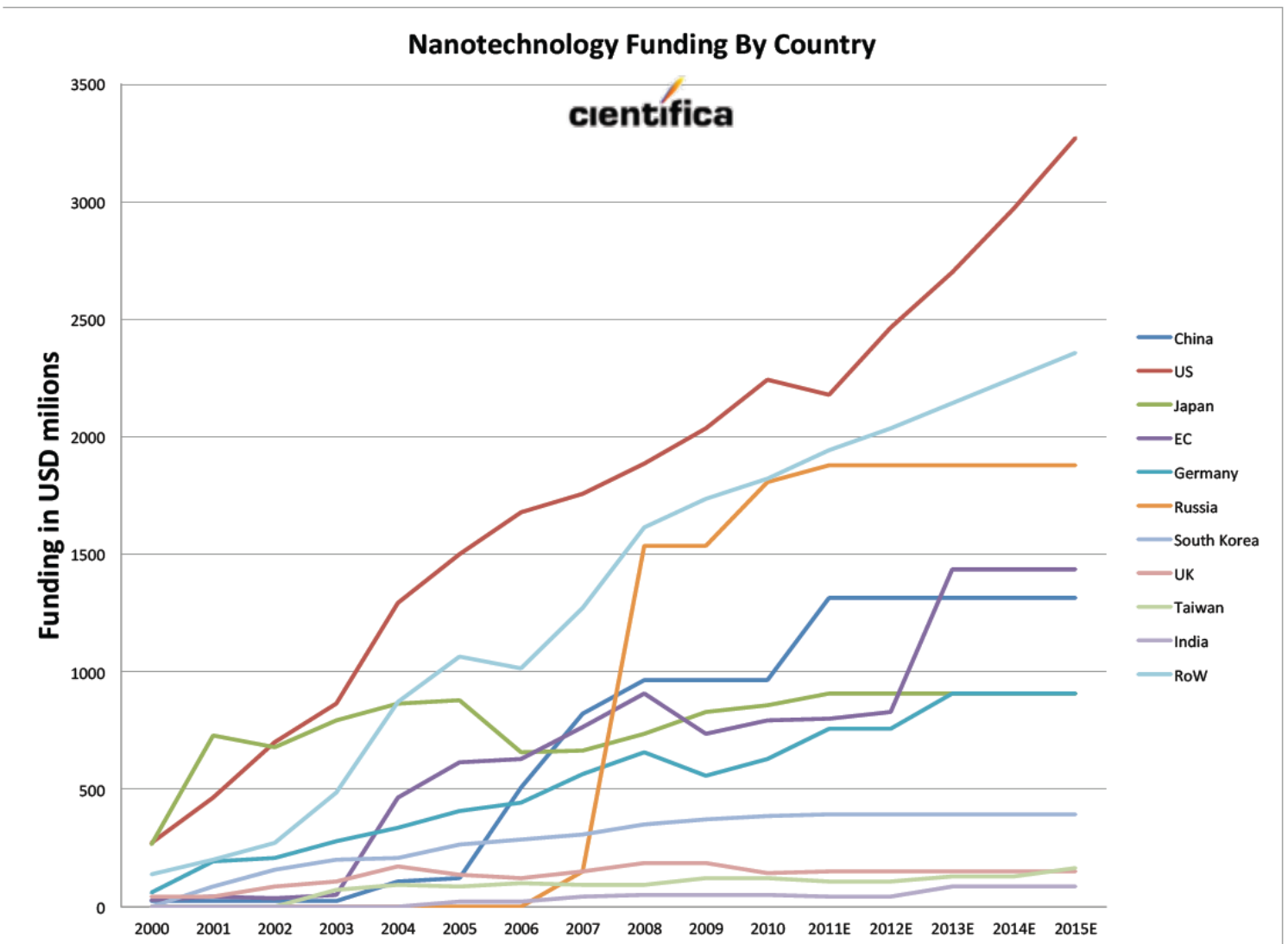
**Σχήμα 1.7** Συνολικές Παγκόσμιες δαπάνες στην Νανοτεχνολογία

## 1.2.2 Σύγκριση Κίνας - Η.Π.Α. και άλλων Εθνών

Με την κυβέρνηση των Η.Π.Α. να υποχωρεί ελαφρώς το 2011, εκτιμάται ότι η Κίνα θα δαπανήσει περισσότερα απ' ό τι οι Η.Π.Α. στην χρηματοδότηση της Νανοτεχνολογίας.



Σχήμα 1.8 Δαπάνες στην Νανοτεχνολογία με Purchase Power Parity



Funding of nanotechnologies by country (source: Cientifica Ltd 2011)

### Σχήμα 1.8 Δαπάνες στην Νανοτεχνολογία ανα Χώρα

Το 2011, σύμφωνα με τις εκτιμήσεις της *Cientifica Ltd* σε όρους (Purchase Power Parity) η Κίνα θα δαπανούσε US \$ 2,25 δις. στην Νανοτεχνολογία, όταν οι Η.Π.Α. θα δαπανούσαν US \$ 2,18 δις. Ωστόσο, σε όρους πραγματικών δολαρίων, προσαρμοσμένα με τις συναλλαγματικές ισοτιμίες, η Κίνα δαπανά περίπου 1,3 δις. δολάρια σε σχέση με τα 2,18 δις.

δολ. των Η.Π.Α. Αλλά η Κίνα δεν είναι η πρώτη χώρα που αφήνει πίσω τις Η.Π.Α.. Η Ιαπωνία και η Ρωσία έχουν επίσης καταφέρει να πάρουν την πρωτιά προσωρινά πριν υποχωρήσουν και αυτές. Σε απόλυτους αριθμούς οι Η.Π.Α. ακόμα ξεοδεύουν συνολικά τα περισσότερα σε σχέση με τις υπόλοιπες χώρες. Μια σαφής τάση αναδύεται : όταν οι δαπάνες για την έρευνα στην Νανοτεχνολογία στην Ευρώπη και στην Βόρεια Αμερική εξακολουθούν να αυξάνονται, παρατηρούνται ταχείς ρυθμοί ανάπτυξης στην Ασία. Οι Ασιατικές επενδύσεις στην Νανοτεχνολογία σημειώθηκαν ως οι μεγαλύτερες στον κόσμο εωσότου η RusNano σχηματίστηκε με τεράστιο Budget.

### **1.2.3 Μέτρηση της Ικανότητας των Εθνών στην Αξιοποίηση των Επενδύσεων στην Έρευνα & Ανάπτυξη της Νανοτεχνολογίας.**

Απλά κοιτάζοντας τα ποσά χρηματοδότησης –είτε σε δολάρια είτε διορθωμένα βάση του Purchase Power Parity- δεν υπάρχει σαφής εικόνα. Μόνο επειδή μια χώρα ρίχνει τεράστια ποσά στην έρευνα δεν σημαίνει και ότι απαραίτητα η έρευνα θα έχει και αντίκτυπο στην οικονομία. Μερικές χώρες έχουν εξαιρετικά ερευνητικά ιδρύματα, αλλά πολύ μικρή συνεργασία των ιδρυμάτων με την βιομηχανία, όταν άλλοι έχουν μεγάλες εταιρίες που ξεοδεύουν λίγα στην έρευνα και ανάπτυξη. Για να αποκτηθεί μια πιο σαφής εικόνα στο ποιες οικονομίες τοποθετούνται καλύτερα στο να μετατρέψουν τη χρηματοδότηση της έρευνας σε οικονομικό όφελος, χρησιμοποιήθηκαν στοιχεία από την ετήσια έκθεση για την Παγκόσμια Ανταγωνιστικότητα του Παγκόσμιου Οικονομικού Φόρουμ. Με τον συνδυασμό μακροοικονομικών δεδομένων : όπως η συνολική παγκόσμια ανταγωνιστικότητα, την ποιότητα των επιστημονικών ιδρυμάτων, την ικανότητα για καινοτομία και τα επίπεδα δαπανών των εταιριών στην E & A με μια σειρά άλλων σχετικών συντελεστών πράχθηκε ο συντελεστής Αξιοποίησης Ανερχόμενης Τεχνολογίας (Emerging Technology Exploitation Factor). Ένας συντελεστής που μετρά το αντίκτυπο

των ανερχόμενων τεχνολογιών και την αποτελεσματικότητα της μετατροπής της τεχνολογικής χρηματοδότησης σε οικονομία.

Country	EmTech Exploitation Index
US	5.00
Germany	4.93
Taiwan	4.90
Japan	4.88
S.Korea	4.60
UK	4.55
China	4.30
EC	4.23
India	3.95
Russia	3.57

The ability of countries to exploit emerging technologies (source: Cientifica Ltd 2011)

Σε γενικές γραμμές, οι Η.Π.Α., η Γερμανία, η Ταϊβάν και η Ιαπωνία έχουν το συνδυασμό της ακαδημαϊκής αριστείας, της δίψας των εταιριών για τεχνολογία, του ειδικευμένου εργατικού δυναμικού και των διαθέσιμων κεφαλαίων που διασφαλίζει την αποτελεσματική μετατροπή της τεχνολογίας. Ενώ το μετρό αυτό ισχύει για ένα ευρύ φάσμα τεχνολογιών που βασίζονται στην έρευνα δεν λαμβάνει υπόψη το επίπεδο της χρηματοδότησης της Νανοτεχνολογίας που ποικίλει ευρέως μεταξύ των διάφορων χωρών. Όταν μπαίνει ο συντελεστής Purchase Power Parity τα επίπεδα χρηματοδότησης αλλάζουν δραματικά. Η αναπροσαρμογή του συντελεστή Αξιοποίησης Ανερχόμενης Τεχνολογίας (Emerging Technology Exploitation Factor) με τις Η.Π.Α.(=100) δίνει μια σαφέστερη εικόνα για το που αναμένουμε ότι η



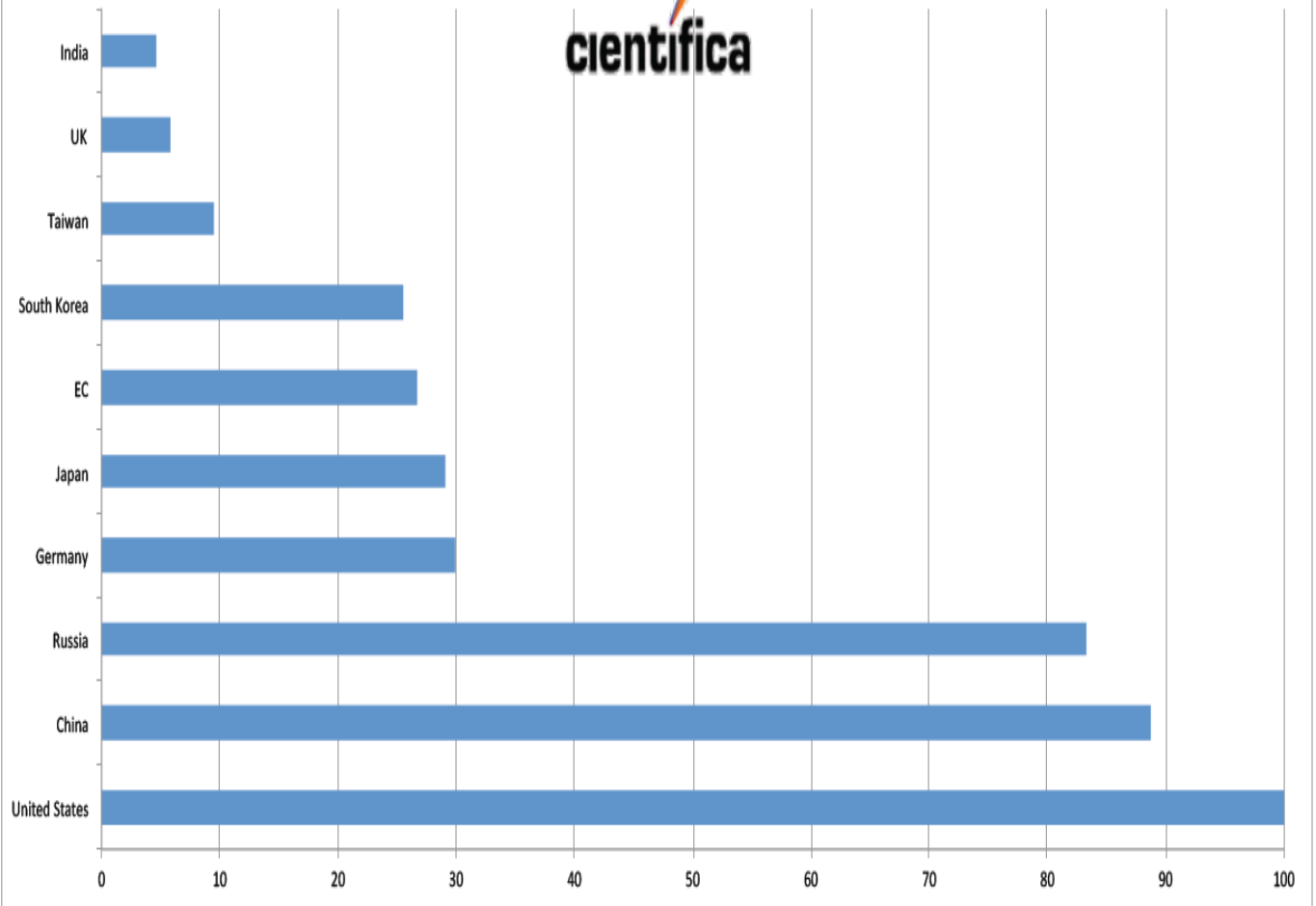
τεχνολογία θα έχει το μεγαλύτερο αντίκτυπο. Φυσικά η Νανοτεχνολογία στις Η.Π.Α. βρίσκεται σε έντονο ανταγωνισμό με αριθμό άλλων τεχνολογιών από την συνθετική Βιολογία μέχρι και την Κοινωνική δικτύωση, ενώ στη Ρωσία είναι ένα υψηλού επιπέδου αυτοδύναμο project.

<b>Country</b>	<b>Nanotech Impact Factor</b>
<b>United States</b>	<b>100</b>
<b>China</b>	<b>89</b>
<b>Russia</b>	<b>83</b>
<b>Germany</b>	<b>30</b>
<b>Japan</b>	<b>29</b>
<b>EC</b>	<b>27</b>
<b>South Korea</b>	<b>25</b>
<b>Taiwan</b>	<b>9</b>
<b>UK</b>	<b>6</b>
<b>India</b>	<b>5</b>

The economic impact of nanotechnologies (source: Cientifica Ltd 2011)

Λαμβάνοντας υπόψη τη συνολική παγκόσμια ανταγωνιστικότητα και την τεχνολογική υπεροχή των Η.Π.Α. δεν αποτελεί έκπληξη ότι βρίσκονται στην κορυφή της λίστας. Επίσης τα διαθέσιμα μεγάλα χρηματικά ποσά έρευνας και ανάπτυξης στην Ρωσία και στη Κίνα τους τοποθετούνε ήδη στο ίδιο επίπεδο με αυτό των Η.Π.Α., ενώ ένα δεύτερο σκέλος εμφανίζεται συμπεριλαμβανομένης της Ιαπωνίας, της Ευρωπαϊκής Ένωσης και των μεγάλων οικονομιών της Ασίας. Την ίδια στιγμή που το Ηνωμένο Βασίλειο έχει μια καλά ανεπτυγμένη υποδομή αλλά η έλλειψη χρηματοδότησης σε σχέση με την Νανοτεχνολογία την τοποθετεί σε μια Τρίτη κατηγορία, μαζί με την Ινδία.

# Nanotech Impact Factor

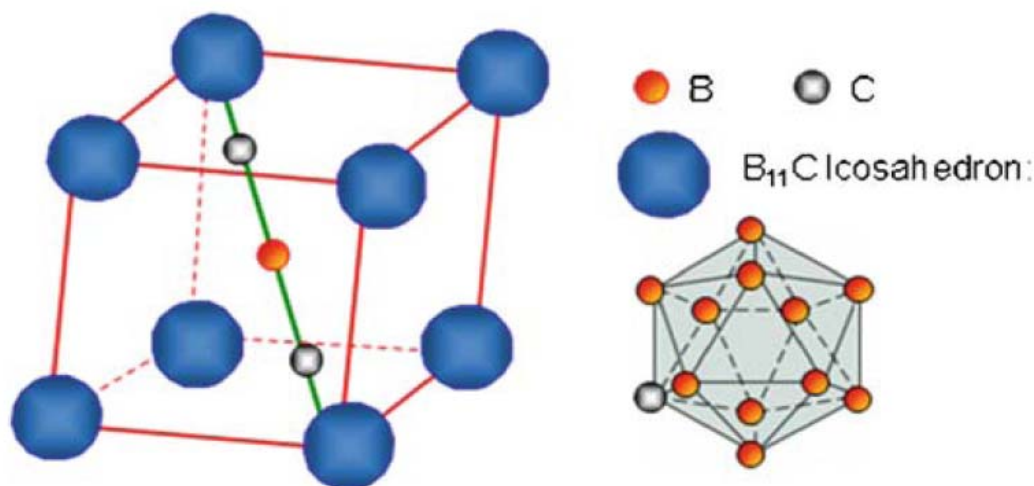


## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 2

# ΝΙΤΡΙΔΙΟ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ ΚΑΙ ΣΧΕΤΙΚΕΣ ΝΑΝΟΔΟΜΕΣ

### 2.1 ΒΟΡΙΟ

Το Βόριο είναι το μικρότερο και ελαφρύτερο άτομο που μπορεί να σχηματίσει στερεά με υψηλής αντοχής ομοιοπολικούς δεσμούς. Το β-ρομβοεδρικό βόριο είναι το σκληρότερο στοιχειώδη μέταλλο μετά το διαμάντι. Επίσης τα στερεά του βορίου έχουν μια σειρά από εντυπωσιακές ιδιότητες [15]. Όλες οι μορφές του βορίου (αλλοτροπικές) έχουν πολύ υψηλά σημεία τήξης από 2000 °C μέχρι 2.300 °C (4.000-4.200 °F). Δεν αντιδρούν με το



Εικόνα 2.1

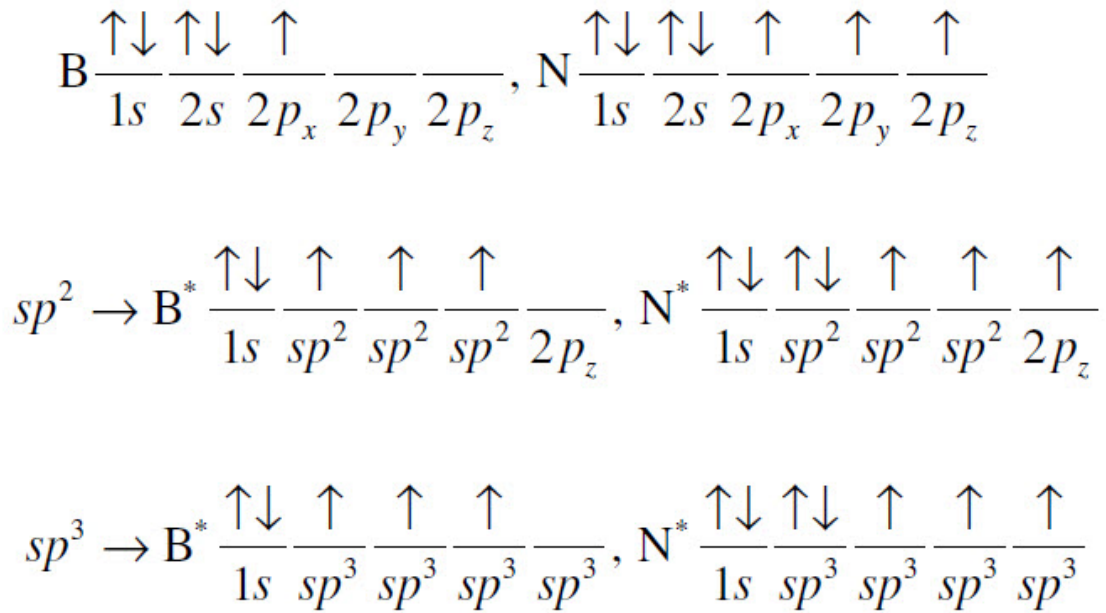
οξυγόνο, το νερό, τα οξέα, τα αλκάλια και γι' αυτό παρουσιάζουν μεγάλη αντοχή σε χημικές επιθέσεις. Το βόριο μπορεί να εμφανιστεί σε πολλές μορφές και δομές, από τις άμορφες και κρυσταλλικές φάσεις έως τις νανοδομές τύπου

Clusters και Νανοσωλήνων.

Η άτακτη δεσμοί μεταξύ των ατόμων του βορίου σχηματίζουν άμορφες δομές που είναι χρώματος καφέ. Ωστόσο οι κρυσταλλικές φάσης του βορίου είναι σε μαύρο χρώμα και αποτελούνται από τρεις γνωστές δομές : α-ρομβοεδρικά ,β-ρομβοεδρικά και τετραγωνικά [15].Οι φυσικές και χημικές ιδιότητες των στερεών του βορίου αναμένεται ότι ενισχύονται με την διαμόρφωση νανο σωλήνων βορίου (BNTs),Clusters Βορίου,και Φουλερενίων του βορίου. Αυτές οι νανοδομές κλειστού-κελύφους (closed-shell) θα εξαλείψουν τους ασταθής δεσμούς στην επιφάνεια τους και έτσι θα αποφευχθούν ανεξέλεγκτες χημικές αντιδράσεις.

## 2.2 ΝΙΤΡΙΔΙΟ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ

Το BN κατασκευάζεται από άτομα Βορίου (B) και αζώτου (N),τα στοιχεία της ομάδας III και V δίπλα από την ομάδα IV του άνθρακα (C) του Περιοδικού Πίνακα των Στοιχείων. Δεδομένου ότι οι δεσμοί B-N και οι δεσμοί C-C είναι ισοηλεκτρονιακοί (έχουν το ίδιο αριθμό ηλεκτρονίων), τα υλικά από BN αναμένουμε να σχηματίσουν παρόμοιες ομοιοπολικές δομές σαν αυτές των αλλοτροπιών του άνθρακα. Η ηλεκτρονιακή διαμόρφωση των ατόμων B και N και υβριδοποιημένοι δεσμοί B-N παρουσιάζονται παρακάτω :

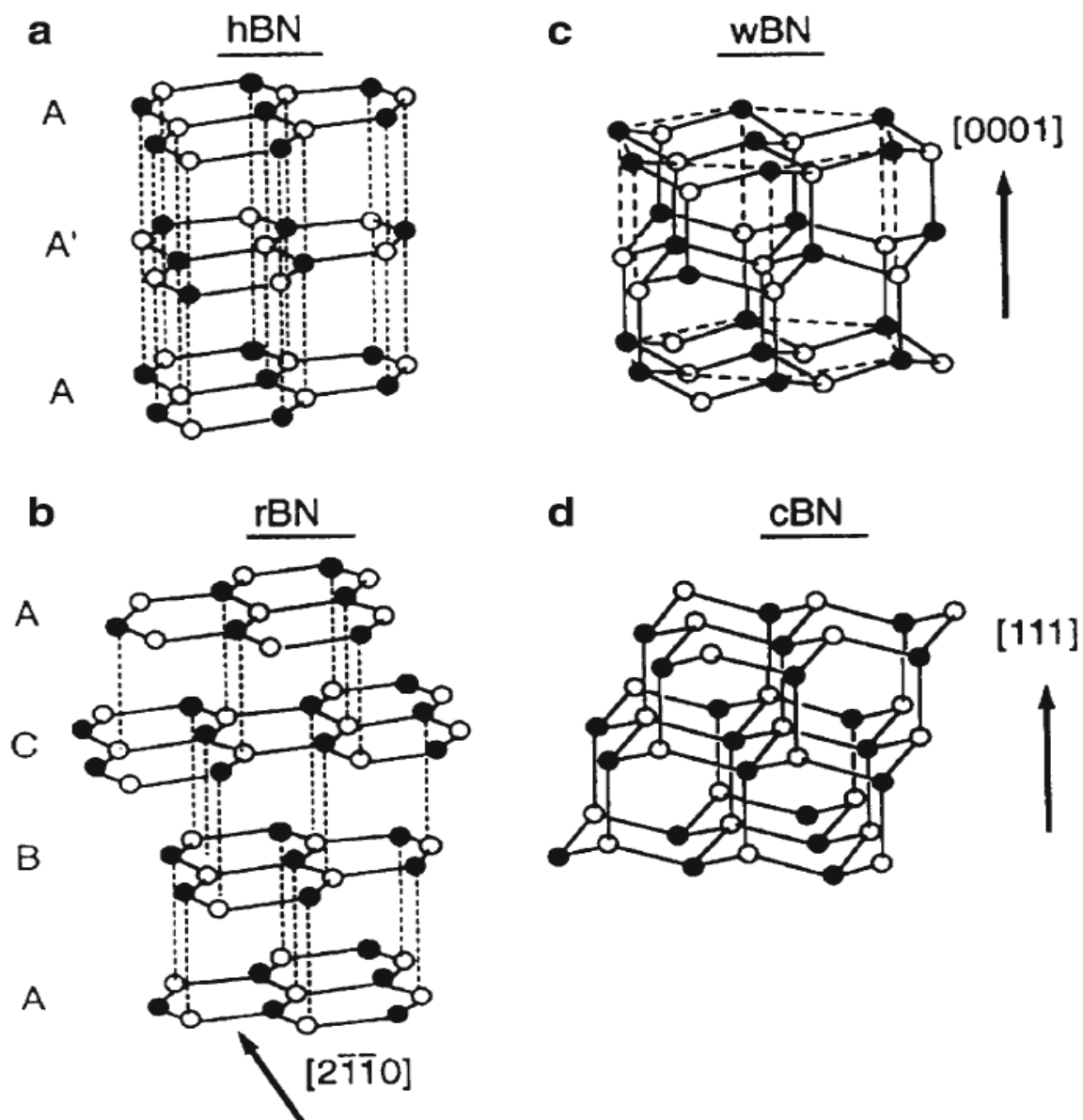


**Εικόνα 2.2**

Για τις δύο περιπτώσεις  $sp^2$  και  $sp^3$  μπορεί κανείς να παρατηρήσει ότι ένα πρόσθετο ηλεκτρόνιο εντοπίζεται στα άτομα του αζώτου. Αν και όλα τα ηλεκτρόνια που βρίσκονται στις υβριδοποιημένες τροχιές θα επαναπροσδιοριστούν και θα σχηματίσουν τους επιθυμητούς δεσμούς, αυτοί οι ομοιοπολικοί δεσμοί έχουν κάποια ιοντική φύση, πιο ηλεκτραρνητικούς από την μεριά του Αζώτου (N). Πράγματι, Το BN μπορεί εμφανιστεί σε εξαγωνική φάση (h-BN), κυβική φάση (c-BN), ρομβοεδρική φάση (r-BN) και σε φάση βουρτσίτη (wurzite) (w-BN) όπως φαίνεται στην παρακάτω **Εικόνα 2.3** [15]. Αυτές οι φάσεις είναι παρόμοιες με τον εξαγωνικό γραφίτη (ABAB), κυβικά διαμάντια (ABCABC...) και εξαγωνικά διαμάντια.

### 2.2.1 Φάσεις των Κρυστάλλων του Νιτριδίου του Βορίου

Τα h-BN είναι κατασκευασμένα από στρώσεις εξαγωνικών BN δικτύων με σταθερές πλέγματος ( $a_0 = 2.504 \text{ \AA}$ ,  $c_0 = 6.661 \text{ \AA}$ ) συγκρίσιμες με αυτές του γραφίτη ( $a_0 = 2.458 \text{ \AA}$ ,  $c_0 = 6.696 \text{ \AA}$ ).



**Εικόνα 2.3** Γραφική απεικονίσει των φάσεων (a) h-BN, (b) r-BN, (c) w-BN and (d) c-BN (Από [32])

Οι στιβάδες h-BN είναι τοποθετημένες η μία πάνω στην άλλη σε μια αλληλουχία AA'AA'...., τέτοια ώστε τα B άτομα στην μία στιβάδα να δεσμεύονται με τα N άτομα στην παρακείμενη στιβάδα με ηλεκτροστατική αλληλεπίδραση όπως φαίνεται στην **Εικόνα 2.3**. Η ρομβοεδρική φάση του BN (r-BN) είναι διαφορετική από την h-BN κυρίως στην αλληλουχία των στιβάδων όπως φαίνεται στην **Εικόνα 2.3 (b)** [15]. Η σειρά στοίβαξης του r-BN είναι τριπλή (ABCABC...), και τα εξαγωνικά του δαχτυλίδια δεν επικαλύπτονται απόλυτα με εκείνα των παρακείμενων στρωμάτων BN στρωμάτων.

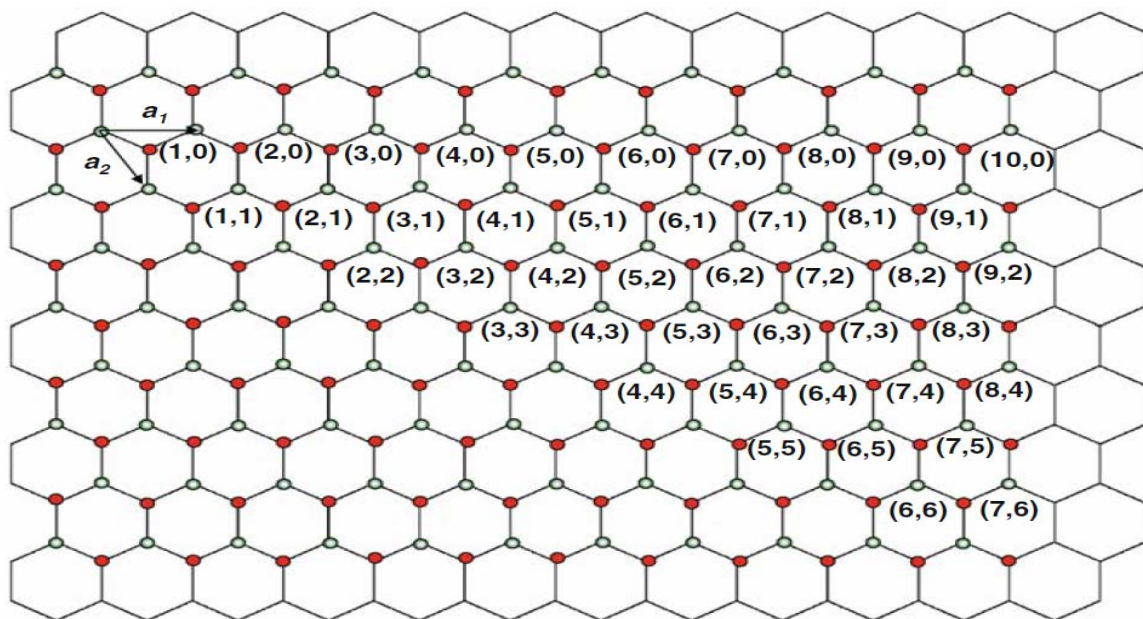
Και οι δύο φάσεις του w-BN και του c-BN ανήκουν στις  $sp^3$  φάσης δεσμών. Το w-BN είναι διατεταγμένο σε μια εξαγωνική μονάδα με συμπιεσμένες στρώσεις εξαγωνικών δικτύων όπως βλέπουμε στην **Εικόνα 2.3 (c)**. Οι δομικοί παράμετροι των τεσσάρων BN φάσεων συνοψίζονται στον παρακάτω **Πίνακα 2**.

**Πίνακας 2**

Phase	Hybridization	$a$ (Å)	$b$ (Å)	Space group	Stacking sequence
<i>h</i> -BN	$Sp^2$	2.5043	6.6562	$P6_3/mmc$ (194)	AA'AA'...
<i>c</i> -BN	$Sp^3$	3.6153		$F43m$ (216)	ABCABC...
<i>r</i> -BN	$Sp^2$	2.5042	9.99	$R3m$ (160)	ABCABC...
<i>w</i> -BN	$Sp^3$	2.5505	4.21	$P6_3mc$ (186)	AA'AA'...

### 2.3 ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ (BNNTs)

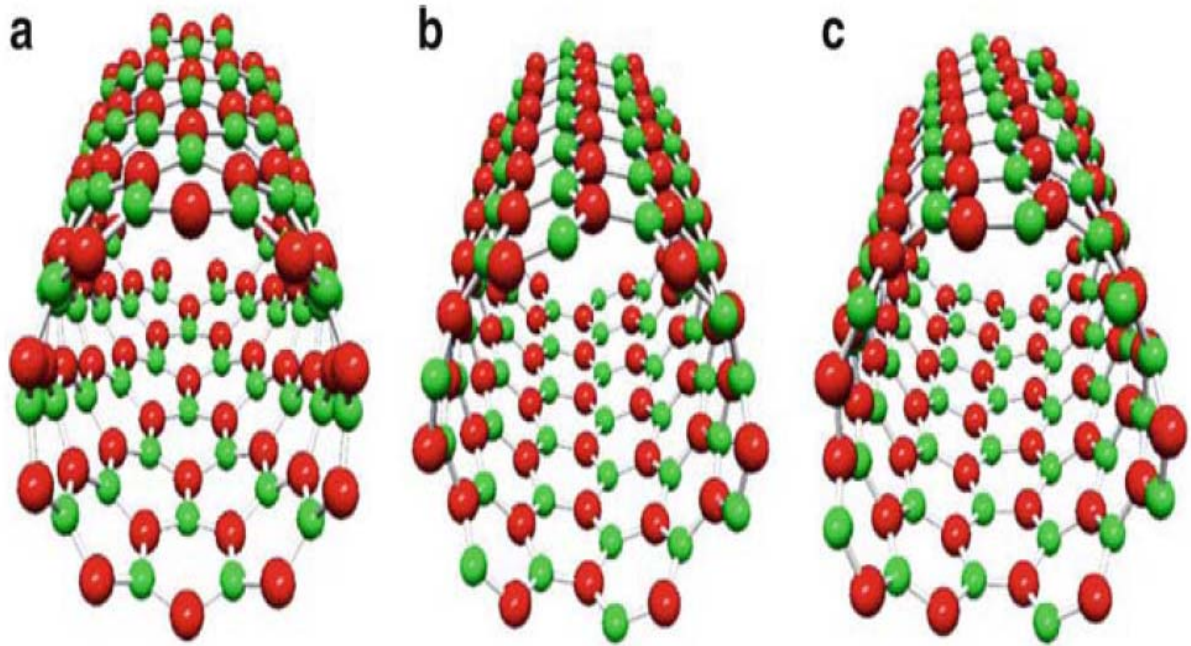
Νανοκυλινδρικά ρολά μπορούν να σχηματιστούν από φύλλα h-BN αποκαλώντας τα Νανოსωλήνες Νιτρίου του Βορίου (Boron Nitride NanoTubes) ή BNNTs. Ανάλογα με τον αριθμό των h-BN φύλλων που εμπλέκονται σχηματίζονται είτε μονότοιχοι νανοςωλήνες (SingleWalled) με μονό ενιαίο στρώμα από φύλλο h-BN, είτε πολύτοιχοι (MultiWalled) που κατασκευάζονται από πολλά ομόκεντρα φύλλα h-BN. Μια σημαντική διαφορά μεταξύ των BNNTs και των CNTs (Carbon Nanotubes) έγκειται στο ότι η ενεργειακή διαφορά των BNNTs ( $\sim 5$  eV, θεωρητικά) είναι ανεξάρτητη της χειρομορφίας τους (Chirality), του αριθμού των στρώσεων και της διαμέτρου. Όπως φαίνεται στην **Εικόνα 2.4** η χειρομορφία (Chirality) των SWBNNTs μπορεί να αποδοθεί κατά τον ίδιο τρόπο όπως και για τους SWCNTs. Τα  $(n,m)$  είναι ακέραιοι αριθμοί που εκπροσωπούν τις δομές των SWBNNTs. Οι SWBNNTs με  $(n,0)$  είναι τύπου Zig-Zag νανοςωλήνες, οι SWBNNTs με  $(n,n)$  είναι νανοςωλήνες τύπου Armchair και οι υπόλοιποι είναι Chiral νανοςωλήνες.



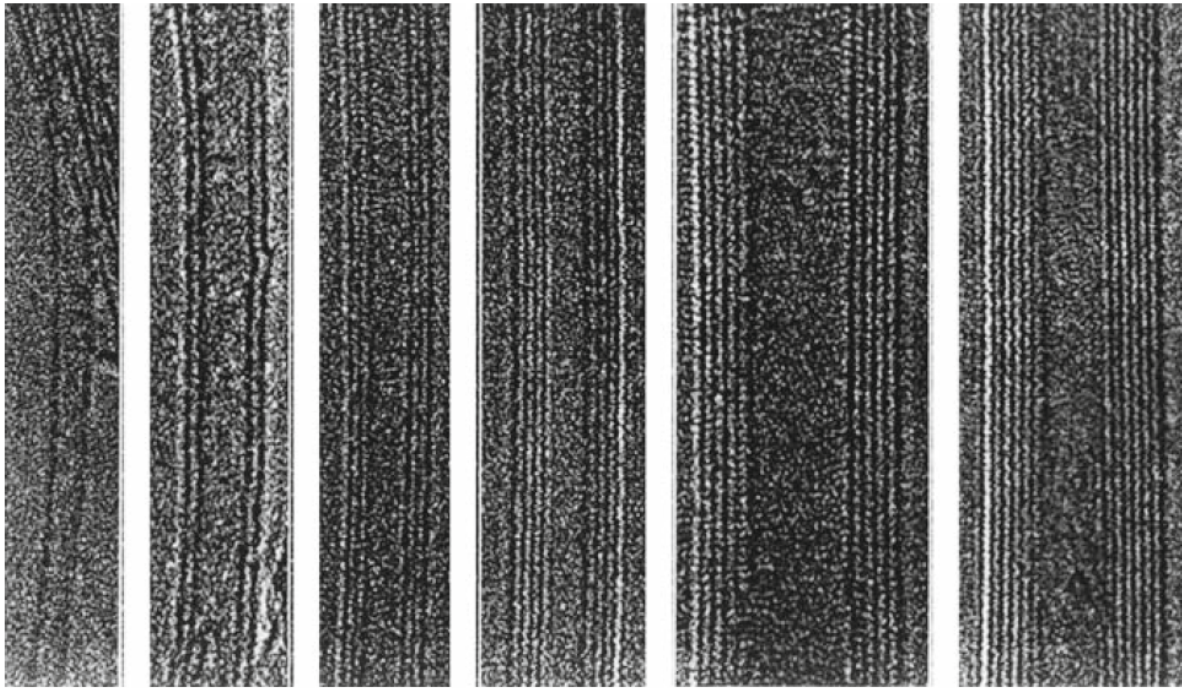
**Εικόνα 2.4** Διάγραμμα  $(n,m)$  ενός μονότοιχου BN νανοςωλήνα σε h-BN φύλλο



Ως παραδείγματα ατομικών διαμορφώσεων των SWBNNTs (a) zigzag (10,0),(b) armchair (6,6) και (c) chiral (7,5) απεικονίζονται στο στην **Εικόνα 2.5**. Εικόνες από SWBNNTs, double-Walled BNNTs και MWBNNTs εντοπίζονται από ειδικό μικροσκόπιο (TEM) στην **Εκόνα 2.6** [15].



**Εικόνα 2.5** (a) zigzag (10,0),(b) armchair (6,6) και (c) chiral (7,5) BNNTs



**Εικόνα 2.6** Εικόνες από το ειδικό μικροσκόπιο (TEM) από μονό έως και έξι στρώσεων νανωσωλήνα BN (από τα αριστερά προς τα δεξιά). (Πραγματικές εικόνες από [15])

Ο Golberg και οι συνεργάτες του έχουν δείξει ότι οι BN νανωσωλήνες έχουν υψηλή αντοχή στη οξείδωση [8], η οποία επιβεβαιώθηκε αργότερα από άλλους. Αποτελέσματα δείχνουν ότι καθαρή νανωσωλήνες BN αντιστέκονται στην οξείδωση έως και 1100 °C. Επιπλέον οι BNNTs προβλέπεται ότι έχουν πιεζοηλεκτρικές ιδιότητες και είναι εφαρμόσιμοι για την αποθήκευση Υδρογόνου σε θερμοκρασία δωματίου. Προφανώς αυτές οι ιδιότητες καθιστούν τους BNNTs πολύ ελκυστικούς για τις καινοτόμες εφαρμογές σε διάφορους κλάδους της επιστήμης και της τεχνολογίας.

Ωστόσο η ανάπτυξη των BNNTs είναι πρόκληση. Τα τελευταία 10 χρόνια οι BNNTs κατασκευάζονταν με τη χρήση ηλεκτρικού τόξου εκκένωσης (Arc discharge) [με χρήση λέιζερ (Laser ablation) [8], με Ball-milling [8], με

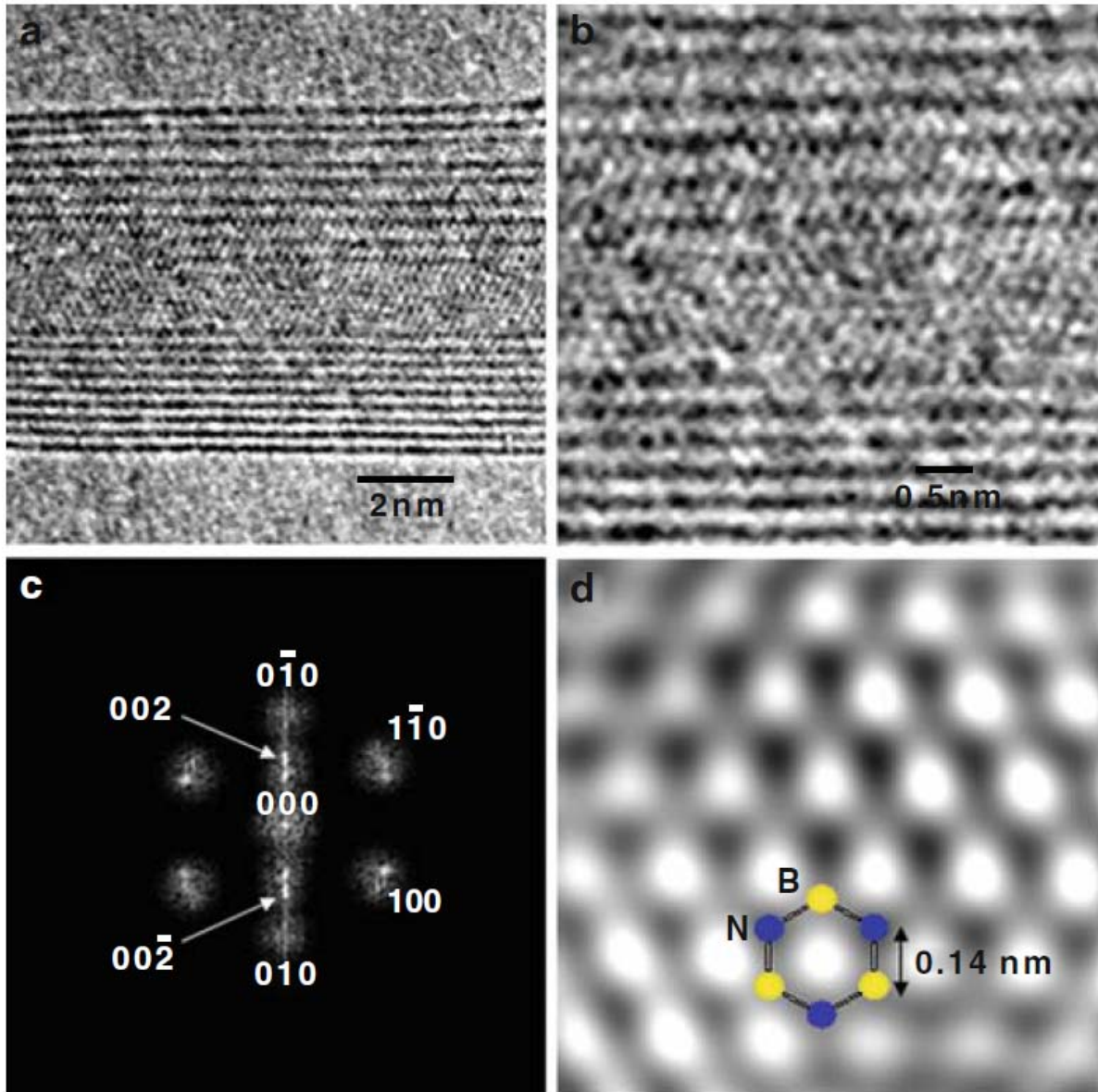
καταλυτική εναπόθεση ατμών (CVD) και με καταλυτική εναπόθεση ατμών οξειδίου του βορίου (BOCVD), κ.α. Αυτοί οι νανοσωλήνες BN περιέχουν ακαθαρσίες όπως άμορφο νιτρίδιο του βορίου (a-BN), σκόνες και άλλα σε στερεά κατάσταση υποπροϊόντα. Καθαρούς νανοσωλήνες BN απέκτησαν ο Yarp και οι συνεργάτες του σε υποστρώματα πολύ χαμηλής θερμοκρασίας (~600 °C).

## 2.4 ΜΟΝΟΤΟΙΧΟΙ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΝΙΤΡΙΔΙΟΥ ΤΟΥ ΒΟΡΙΟΥ (SW-BNNTs)

Τις τελευταίες δύο δεκαετίες έχει εκδηλωθεί μεγάλο ενδιαφέρον από την επιστημονική κοινότητα για την μελέτη των Νανουλικών. Οι νανοσωλήνες είναι το πιο αντιπροσωπευτικό παράδειγμα αυτών των νανουλικών που ηγούνται της έρευνας και της βιομηχανίας λόγω των μοναδικών ιδιοτήτων τους. Παρά το γεγονός ότι οι νανοσωλήνες άνθρακα (CNTs) ήταν οι πρώτοι που συντέθηκαν και παραμένουν και οι πιο δημοφιλείς, δεν είναι η μοναδική μορφή νανοσωλήνων. Άλλες μορφές νανοσωλήνων επίσης κατασκευάστηκαν όπως για παράδειγμα  $MoS_2$ ,  $WS_2$ ,  $TiO_2$ , B-C, C-N, B-C-N και BN.

Μεταξύ αυτών των νανοσωλήνων οι τελευταίοι (B-C, C-N, B-C-N και BN) δημιούργησαν υψηλό ενδιαφέρον, λόγω των νέων ιδιοτήτων τους, που τους έκανε ελκυστικούς και εναλλακτικούς σε σχέση με τους CNTs. Οι νανοσωλήνες BN ανακαλύφθηκαν λίγο μετά την ανακάλυψη των CNTs από τον Iijima και έγιναν οι πολύ δημοφιλείς έπειτα. Έχουν εξαγωνική μορφή, με άτομα B και N σε εναλλασσόμενες θέσεις πάνω στο πλέγμα τους.

Αυτοί οι σωλήνες έχουν υψηλό ενδιαφέρον ως πομποί υπεριώδους ακτινοβολίας (UV) και για υψηλής ισχύος και υψηλής συχνότητας ηλεκτρονικές συσκευές, έχουν επίσης εξαιρετικές μηχανικές ιδιότητες, είναι χημικώς αδρανής και μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως προστατευτικοί κλωβοί για άλλα νανουλικά.



**Εικόνα 2.7** (a) HREM εικόνα από τύπου zigzag νανωσολήνα BN, (b) Μεγεθυμένη HREM φωτογραφία της εικόνας (a), (c) Φιλτραρισμένη με μετατροπή Fourier της (b), Αντίστροφη μετατροπή Fourier του (c)

Από την ανακάλυψη των νανωσολήνων BN και μετά, διάφορα είδη νανοδομημένων υλικών έχουν προταθεί λόγω των δυνατοτήτων χρήσης αυτών των υλικών σε απομονωμένο περιβάλλον. Πολλές μελέτες κάνουν αναφορές σε διάφορα BN νανουλικά όπως, νανωσολήνες, νανοκόνοι, nanocorns, νανοκάψουλες, νανωσωματίδια, BN clusters και BN μεταλλοφουλερένια τα

οποία αναμένεται να είναι χρήσιμα σε ηλεκτρονικές συσκευές, τρανζίστορ επίδρασης σε πεδίο, ημιαγωγούς με αντοχή σε υψηλές θερμοκρασίες, υλικά αποθήκευσης αερίων και οπτοηλεκτρονικές εφαρμογές .

## **2.5 ΜΕΘΟΔΟΙ ΣΥΝΘΕΣΗΣ BN ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ (BNNTs)**

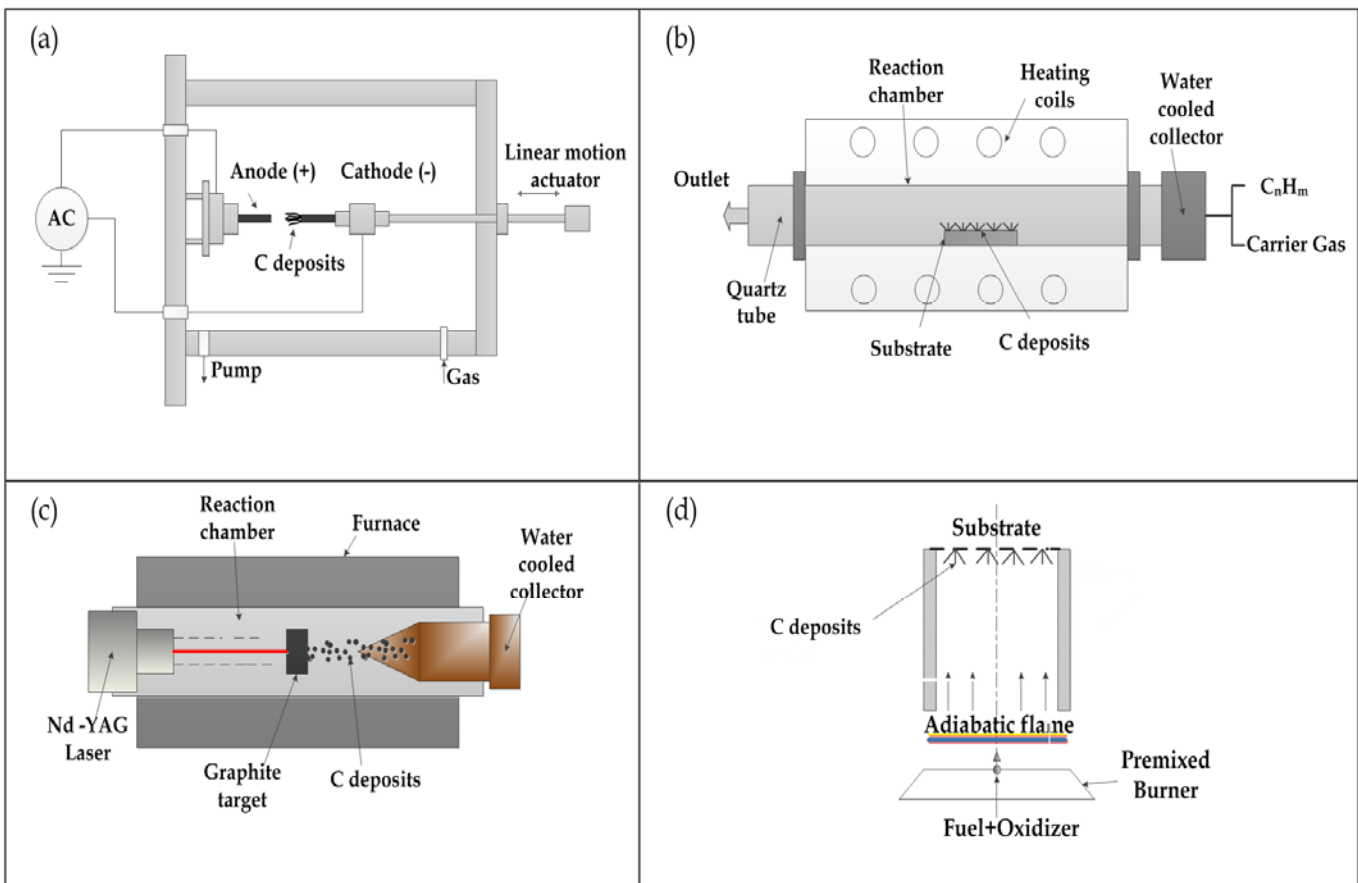
Οι περισσότερες τεχνικές που είναι ήδη γνωστές από την ανάπτυξη των CNTs έχουν τροποποιηθεί για να συνθέσουν BNNTs. Αυτές οι μέθοδοι μπορούν να ταξινομηθούν σε δύο ευρείς κατηγορίες : (1) σύνθεση υψηλής θερμοκρασίας ( $>2000\text{ }^{\circ}\text{C}$ ), όπως η χρήση ηλεκτρικού τόξου εκκένωσης (Arch discharge) και Laser , (2) σύνθεση μεσαίας/χαμηλής θερμοκρασίας ( $<2000\text{ }^{\circ}\text{C}$ ), όπως carbothermal μέθοδοι, ball milling και χημικής εναπόθεσης ατμών (CVD)

## **2.6 ΜΕΘΟΔΟΙ ΥΨΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ**

### **2.6.1 Ηλεκτρικό Τόξο Εκκένωσης (Arch Discharge)**

Η πρώτη επιτυχημένη σύνθεση νανოსωλήνων BN αναφέρθηκε το 1995 από τον Chopra [43] και τους συνεργάτες του. Χρησιμοποίησαν ηλεκτρόδιο γεμισμένο με σκόνη h-BN στην άνοδο και ηλεκτρόδιο χαλκού (Cu) στην κάθοδο για να παραχθούν πολλών στρώσεων νανοςωλήνες BN (MWBNTs) οι όποιοι είχαν μεταλλικά σωματίδια στις άκρες τους. Στη συνέχεια SW, DW BNNTs συντέθηκαν με ηλεκτρικό τόξο από ηλεκτρόδιο με Άφνιο διβωριδίου ( $\text{HfB}_2$ ) σε αδρανή ατμόσφαιρα. Διπλού τοιχώματος BNNTs παράχθηκαν μαζικά από τόξο B ηλεκτροδίου που περιέχει νικέλιο (Ni) ή κοβάλτιο (Co) μέσα σε  $\text{N}_2$  ατμόσφαιρα. Παρόλα αυτά μια προσέγγιση παραλλαγής της

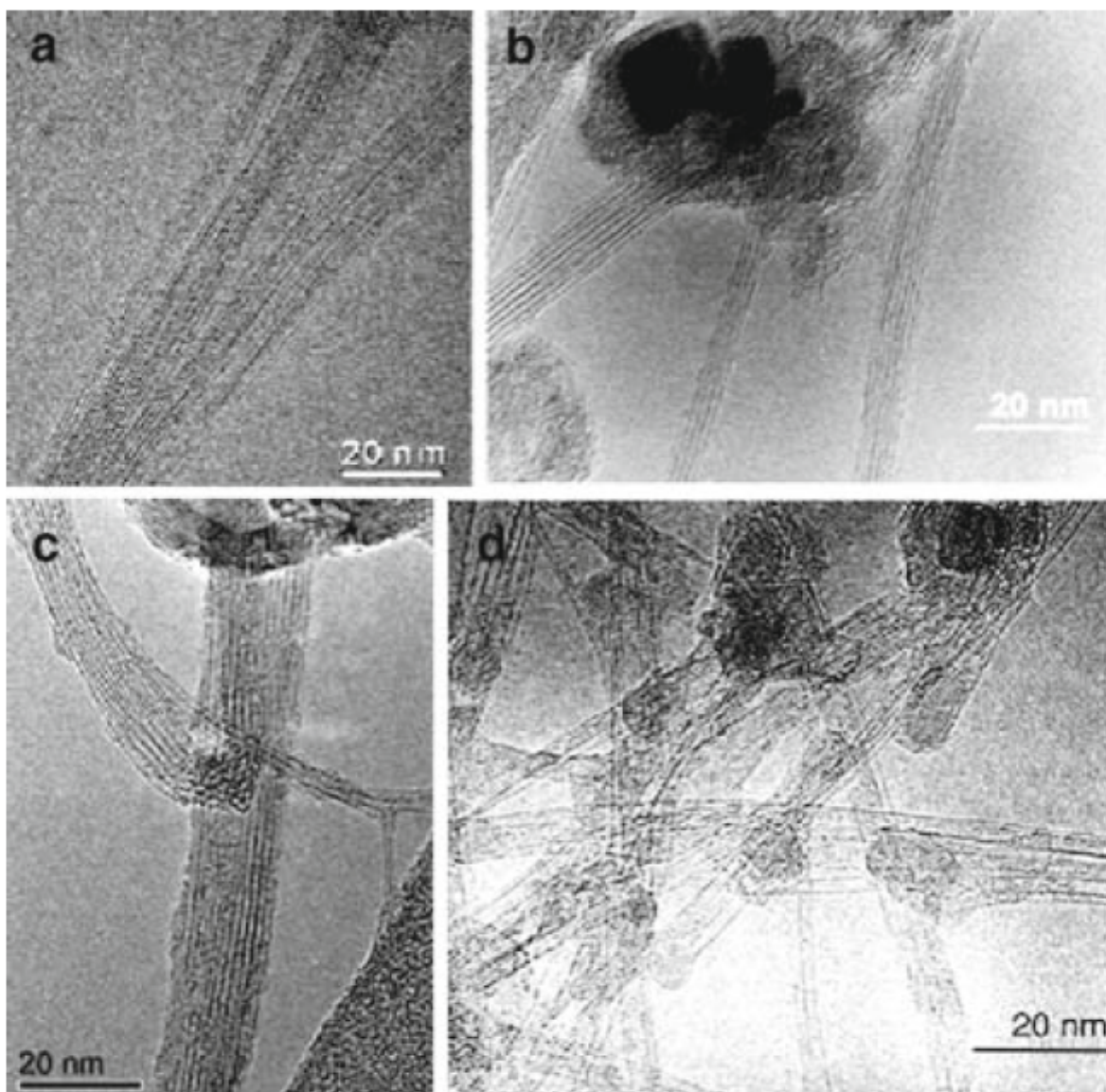
συμβατικής εκκένωσης τόξου ανατήχθηκε από τον Lee και του συνεργάτες του[ η οποία φαίνεται ότι είναι μια πολλά υποσχόμενη μέθοδος για την μεγάλης κλίμακας παραγωγή σε νανοσωλήνες. Αυτή η μέθοδος χρησιμοποιεί μια τεχνική τζέτ τόξου (arc jet, γνωστή και ως Plasma torch) η οποία έχει το πλεονέκτημα να είναι μια συνεχής διαδικασία, κατά την οποία το υλικό συνυπάρχει σε ένα μίγμα από h-BN και καταλυτικών σκονών (Ni και Y) και το αέριο πλάσμα διαμόρφωσης είναι μίγμα Ar και N<sub>2</sub> σε θερμοκρασίες μεταξύ 5000 – 20.000 Kelvin. Το προϊόν αυτής της διαδικασίας είναι μίγμα SW-BNNTs και MW-BNNTs υψηλής κρυσταλλοποίησης.



**Εικόνα 2.8** Arch discharge μέθοδος για CNTs

### 2.6.1 Λείζερ Εξάτμισης (Laser Vaporization)

Η μέθοδος με λείζερ εξάτμισης είναι μια εναλλακτική τεχνική υψηλής θερμοκρασίας προσεγγίζοντας αυτή του ηλεκτρικού τόξου εκκένωσης (arc discharge) για την σύνθεση μονότοιχων νανοσωλήνων. Ο Lee και οι συνεργάτες του [44] και ο Arenal και οι συνεργάτες του [45,46] έδειξαν ότι οι υψηλής απόδοσης SW-BNNTs με υψηλής ποιότητας κρυσταλλοποίηση μπορούν να παραχθούν με αυτή την μέθοδο. Αυτή η τεχνική είναι μέχρι στιγμής η μοναδική οδός για να παράγουμε μεγάλες ποσότητες από SW-BNNTs. Η σύνθεση αυτών μονότοιχων νανοσωλήνων επιτυγχάνεται με την στόχευση και εξάτμιση εξαγωνικών-BN μέσω συνεχούς λείζερ CO<sub>2</sub> υπό την ροή αζώτου σε πίεση 1 bar. Η θερμοκρασία πάνω στην επιφάνεια της στόχευσης κυμαίνεται από του 3.200 έως 3.500 Kelvin. Το μίγμα που συλλέγουμε αποτελείται από νανοσωλήνες και νανοσωματίδια. Οι νανοσωλήνες που παράγονται είναι μονότοιχοι (SW) με μερικούς (περίπου 20%) πολλών τοίχων (κατά το πλείστον διπλού τοιχώματος). Οι μονότοιχοι νανοσωλήνες είτε απομονώνονται ή οργανώνονται σε μικρές δέσμες 2-10 νανοσωλήνων, όπως φαίνεται στην **Εικόνα 2.9**. Το μήκος του νανοσωλήνα είναι συνήθως εκατοντάδες νανόμετρα με κάποιους σωλήνες να ξεπερνούν και το 1mm.



**Εικόνα 2.9** Υψηλής ευκρίνειας εικόνες (HRTEM) από καθαρών SWBNNTs και μονού τοιχώματος νανοσωλήνες άνθρακα (SWCNTs)

Συνοψίζοντας ,η τεχνική εξάτμισης με λέιζερ έχει αποδείξει την ικανότητα και την ευελιξία της για την σύνθεση πολλών ειδών μονότοιχων νανοσωλήνων.Επιπλέον αυτή η μέθοδος είναι πολύ κατάλληλη διότι προσφέρει πολύ καλό έλεγχο σε διαφορετικές παραμέτρους σύνθεσης. Παρόλα αυτά όμως αυτό το είδος τεχνικής παρουσιάζει κάποιους σημαντικούς παράγοντες που την περιορίζουν για μεγάλης κλίμακας παραγωγή όπως το κόστος και η αδυναμία του να λειτουργεί συνεχόμενα.



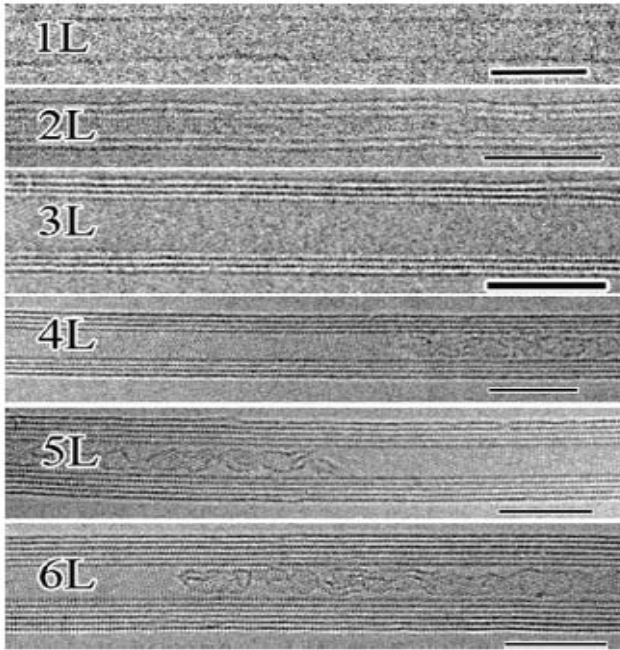
## 2.7 ΜΕΘΟΔΟΙ ΜΕΣΑΙΑΣ ΚΑΙ ΧΑΜΗΛΗΣ ΘΕΡΜΟΚΡΑΣΙΑΣ

Η μέθοδοι σύνθεσης μεσαίας και χαμηλής θερμοκρασίας αφορούν τεχνικές που διεξάγονται σε θερμοκρασίες μικρότερες από 2000 °C, όπως η περίπτωση της CVD και carbothermal αντίδρασης.

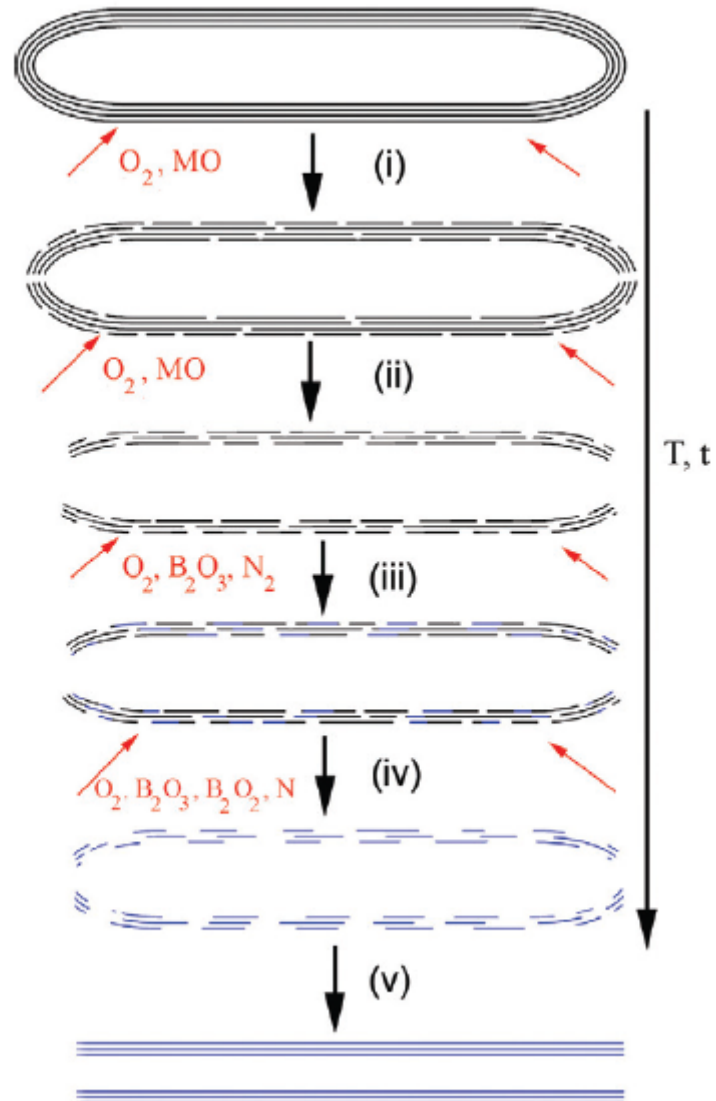
### 2.7.1 Καταλυτική Χημική Εναπόθεση Ατμών (Chemical Vapor Deposition)

Μια εναλλακτική μέθοδος για την σύνθεση BNNTs αναπτύχθηκε από τον Hans και του συνεργάτες του το 1998. Βασίστηκε στην ιδέα της μετατροπής των CNTs σε BNNTs μέσω της αντικατάστασης των ατόμων C με B και N άτομα. Στην μέθοδο χρησιμοποιήθηκαν σκόρες από τριοξείδιο του Βορίου ( $B_2O_3$ ) καλυμμένες από νανοσωλήνες άνθρακα υπό την ροή  $N_2$  στους 1500 °C μέσα σε επαγωγικό φούρνο. Όταν οι νανοσωλήνες άνθρακα οξειδώθηκαν από το  $B_2O_3$ , τα B και N άτομα γέμισαν τις κενές θέσεις που δημιουργήθηκαν στην εξαγωνική δομή. Το αποτέλεσμα ήταν η παραγωγή πολλαπλών τοιχώματων (MW) BNNTs με διαμέτρους όμοιες των αρχικών CNTs. Αυτή η τεχνική βελτιώθηκε ώστε να παράγει μονού τοιχώματος BNNTs χρησιμοποιώντας μονού τοιχώματος CNTs. Ωστόσο τα προϊόντα της μεθόδου εμπεριείχαν B-C και B-C-N ενώσεις σε μονού τοιχώματος νανοσωλήνες. Περαιτέρω εργασίες έδειξαν ότι η περιεκτικότητα σε C άτομα μπορεί να μειωθεί με την προσθήκη παραπάνω οξειδωτικών στο σύστημα. Αυτό μπορεί να οδηγήσει και σε παραγωγή BNNTs με μικρότερες διαμέτρους απ' αυτούς των CNTs. Στις **Εικόνες (a),(b) [8]** από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο (TEM) απεικονίζονται (a) BNNTs με 1 έως 6 τοιχώματα και (b) η διαδικασία αντικατάστασης.

(a)



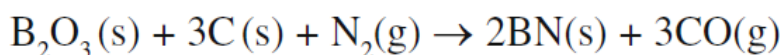
(b)



Συνοψίζοντας, το κύριο πλεονέκτημα της μεθόδου CVD για την σύνθεση μονότοιχων νανοσωλήνων είναι ότι θα μπορούσε εύκολα να κλιμακωθεί για μαζική παραγωγή με σχετικά χαμηλό κόστος. Παρ' όλα αυτά όμως το σημαντικό της μειονέκτημα είναι ότι οι νανοσωλήνες που παράγονται με αυτή την μέθοδο παρουσιάζουν υψηλής πυκνότητας ελαττώματα στην δομή τους.

### 2.7.2 Ανθρακοθερμική Μέθοδος (Carbothermal)

Η ανθρακοθερμική μέθοδος είναι μια τροποποίηση μιας από τις πιο ευρέως σε χρήση μεθόδους για h-BN, η οποία είναι γνωστή ως “amide” μέθοδος. Το h-BN λαμβάνεται από την αντίδραση του οξειδίου του βορίου (ή βορικό οξύ) με αμμωνία σε θερμοκρασία κοντά στου 900 °C. Έτσι η ανθρακοθερμική μέθοδος βασίζεται στην ανθρακοθερμική μείωση του οξειδίου του βορίου χρησιμοποιώντας καθαρό άνθρακα υπό την παρουσία αζώτου σε θερμοκρασίες μεταξύ 1000 – 1450 °C. Λόγο τις υψηλής του ενθαλπίας, το οξείδιο του βορίου είναι πολύ σταθερό και μπορεί να μειωθεί μόνο με άνθρακα σε υψηλές θερμοκρασίες (>1000 °C). Μία από τις πιθανές αντιδράσεις που λαμβάνουν χώρα είναι :



Συνοψίζοντας η τεχνική φαίνεται ότι είναι πολλά υποσχόμενη και ευέλικτη για την παραγωγή διαφόρων ειδών νανοσωλήνων. Σ’ αυτή την μέθοδο κάποιος μπορεί να είναι σε θέση να παράγει διαφορετικές χωρικές κατανομές των B και N μέσα στα τοίχοι σε σχέση με αυτά που παράγει από τις άμεσες τεχνικές σύνθεσης.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

### ΦΥΣΙΚΕΣ ΚΑΙ ΧΗΜΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ

Το εξαγωνικής μορφής-BN ήταν ένα θέμα που απασχολούσε πάντα λόγω της χαμηλής του πυκνότητας, της υψηλής του θερμικής αγωγιμότητας, της ηλεκτρικής του μόνωσης, της εξαιρετικής αντοχής του στην οξείδωση, της εξαιρετικής του αδράνειας (παθητικότητα σε αντιδράσεις με οξέα και αλκάλια) και του χαμηλού συντελεστή τριβής. Οι νανοσωλήνες BN και τα φύλλα BN, ως κληρονόμοι των h-BN, κατέχουν ομοίως τα πλεονεκτήματά τους στις ιδιότητες.

#### 3.1 ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΕΣ ΚΑΙ ΟΠΤΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ BN

Οι νανοδομές BN έχουν αναγνωριστεί ως μονωτές με εύρος από 5.0 – 6.0 eV. Θεωρητικές αναλύσεις για τις ηλεκτρικές ιδιότητες των BNNTs και των φύλλων BN έγιναν από των Arenal et al [16]. δείχνοντας ότι ενεργειακή διαφορά τους είναι πρώτης τάξεως ανεξάρτητη από τα χαρακτηριστικά της ατομικής τους δομής. Αυτό εξηγεί τη λεγόμενη σταθερότητα του ενεργειακού τους εύρους το οποίο με δυσκολία εξαρτάται από την καμπυλότητα και την ελίκωση [17] τους, εκτός από κάποιες οριακές καταστάσεις πολύ μικρών διαμέτρων. Πρόσφατες πειραματικές μελέτες από τους Lee et al. και των Pakdel et al. [18] έχουν επισημάνει οπτικές ενεργειακές διαφορές ~6 και ~5,7 eV για τους νανοσωλήνες και φύλλα BN αντίστοιχα, οι οποίες πλησιάζουν εκείνες των μονοκρυσταλλικών h-BN. Αυτή η μονωτική συμπεριφορά των BN νανοδομών ενθαρρύνει τις εφαρμογές τους ως προστατευτικές ασπίδες σε νανοϋλικά. Πάνω σ' αυτή τους τη συμπεριφορά πραγματοποιήθηκαν πολλές έρευνες με

προσπάθειες να γεμίσουν τους νανοσωλήνες BN κατά τη διάρκεια ή μετά τη σύνθεση τους με φουλερένια ή με κρυσταλλικές ενώσεις όπως το κοβάλτιο, ο σίδηρος, το νικέλιο και το οξείδιο του μαγνησίου [19]. Ωστόσο ο Terrones και οι συνεργάτες [20] του έχουν θεωρητικά και πειραματικά αποδείξει ότι τα Nanoribbons με zigzag άκρα μπορούν να δείξουν μεταλλική συμπεριφορά. Οι πορώδεις BN νανοσφαίρες έδειξαν σταθερές ιδιότητες στο ηλεκτρικό τους πεδίο σε χαμηλές τάσεις (π.χ. 1 έως 1,3 V/μm) λόγω της παρουσίας των ribbons που προεξέχουν από την επιφάνεια των σφαιρών. Αυτές οι νανοδομές BN θα βρίσκουν εφαρμογές ως καταλύτες ή ως πομποί ηλεκτρικών πεδίων στο μέλλον. Επιπλέον οι νανοδομές BN εμφανίζουν σημαντική φωτεινότητα και εκπομπή υπεριώδους ακτινοβολίας (UV), που προωθεί εφαρμογές όπως συσκευές αποστείρωσης με λέιζερ UV, χειρουργικής επέμβασης, φωτοκατάλυσης και οπτικής αποθήκευσης [21].

### 3.2 ΘΕΡΜΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ

Τα h-BN κατέχουν αξιοσημείωτη θερμική αγωγιμότητα και υψηλή ειδική θερμότητα. Θεωρητικοί υπολογισμοί από τον Xiao και τους συνεργάτες του [22] απέδειξαν την υψηλή ειδική θερμότητα των BNNTs και προέβλεψαν ότι θερμική τους αγωγιμότητα είναι μεγαλύτερη απ' αυτή των CNTs. Απέδειξαν επίσης ότι η θερμική αγωγιμότητα των νανοσωλήνων BN μονού τοιχώματος σε χαμηλή θερμοκρασία είναι ανεξάρτητη από τη διάμετρο και την χειραλικότητα του σωλήνα [23]. Πειραματικά ο Chang και οι συνεργάτες του [24] μέτρησαν τις τιμές της θερμικής αγωγιμότητας των νανοσωλήνων BN ~350 W/m/K σε θερμοκρασία δωματίου και απέδειξαν ότι άμα ήταν μαζικά φορτισμένοι εξωτερικά με βαριά μόρια (π.χ. C<sub>9</sub>, H<sub>16</sub>Pt) θα εμφάνιζαν ασύμμετρες αξονικές θερμικές ιδιότητες. Γι' αυτό και οι νανοσωλήνες BN προτάθηκαν για διάφορες εφαρμογές όπως νανοκλίμακας θερμοδομητητές, μικροηλεκτρονική

επεξεργαστές, μακροσκοπικοί καταψύκτες και ενεργειακά αποδοτικές κατασκευές.

Πειράματα θερμικής σταθερότητας πραγματοποιήθηκαν σε πολλών τοίχων (MW) νανοσωλήνες BN από τον Golberg και τους συνεργάτες του [25] και έδειξαν εξαιρετική αντοχή στην οξείδωση πάνω από 830 °C στον αέρα. Επιπλέον ανάλυση έδειξε ότι θερμοκρασία έναρξης για την οξείδωση των νανοσωλήνων BN (800 °C) ήταν πολύ υψηλότερη απ' εκείνη των νανοσωλήνων άνθρακα (400 °C) υπό τις ίδιες συνθήκες. Αργότερα αποδείχθηκε ότι νανοσωλήνες BN με διάμετρο μικρότερη από 20 nm μπορούν να αντισταθούν σε οξείδωση πάνω από 900 °C [26].

### 3.3 ΜΗΧΑΝΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ

Θεωρητικές μελέτες του Hernandez και των συνεργατών του [2] έδειξαν ότι το μέτρο ελαστικότητας (E) των νανοσωλήνων BN να κυμαίνεται μεταξύ 0,84 και 0,81 TPa με διαμέτρους που κυμαίνονται από 0,81 – 2,08 nm. Ο Chopra και ο Zettl [3] εκτίμησαν το μέτρο ελαστικότητας ενός διπλού τοιχώματος (DW) νανοσωλήνα μετρώντας το πλάτος των θερμικά επαγόμενων κραδασμών σε μικροσκόπιο TEM υπό θερμοκρασία δωματίου. Βρήκαν μια τιμή  $1,22 \pm 0,24$  TPa, η οποία είναι παρόμοια με αυτή των νανοσωλήνων άνθρακα. Στη συνέχεια μια μέθοδο ηλεκτρικού πεδίου (electric field induced resonance) σε ειδικό μικροσκόπιο TEM χρησιμοποιήθηκε για να υπολογιστούν οι τιμές 0,51 και 1,03 TPa [4] του μέτρου ελαστικότητας (E). Πιο πρόσφατα οι ομάδα του Golberg πραγματοποίησε εκτεταμένα πειράματα με ειδικό μικροσκόπιο TEM για κάμψη και εφελκυσμό σε ξεχωριστούς νανοσωλήνες πολλών τοιχωμάτων με διαμέτρους από 40-100 nm και εκτιμήθηκε το μέτρο ελαστικότητας τους από 0,5 – 0,6 TPa [5] ή πάνω από 1.3 TPa [6] και η αντοχή τους σε εφελκυσμό 33 GPa.

Οι ανώτερες μηχανικές ιδιότητες και οι ανώτερη θερμική αγωγιμότητα

των BN νανοδομών ,τις καθιστούν ελκυστικές για χρήση αυτών ως νανο φίλερς σε σύνθετα υλικά. Για παράδειγμα,οι νανοσωλήνες BN μπορούν να ενισχύσουν τις μήτρες πολυμερών και να βελτιώσουν τη θερμική τους αγωγιμότητα,όταν διατηρείται η διαφάνεια των πολυμερών. Ο Zhi και οι συνεργάτες του [47] ξεκίνησαν να ερευνούν σύνθετα πολυμερή με μήτρες ενισχυμένες από νανοσωλήνες BN και έδειξαν αποτελεσματική βελτίωση στο μέτρο ελαστικότητας του PMMA(Poly methyl methacrylate) κατά 20% με ανάμειξη 1% κατά βάρος από νανοσωλήνες. Μια πολύ πρόσφατη εργασία με θέμα τον χαρακτηρισμό των μηχανικών ιδιοτήτων μονού τοιχώματος νανοσωλήνων BN(SW-BNNTs) αποκάλυψε ότι είναι αξονικά ανθεκτικοί αλλά ακτινικά περισσότερο εύκαμπτοι και πρότειναν ότι θα μπορούσαν να είναι ανώτεροι από τους νανοσωλήνες άνθρακα μονού τοιχώματος(SW-CNTs) ως ενίσχυση για νανოსύνθετες εφαρμογές.

### 3.4 ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΔΙΑΒΡΟΧΗΣ

Όταν φιλμ από h-BN βρέχονται μερικώς από νερό με γωνία επαφής  $\sim 50^\circ$  ,οι νανοσωλήνες BN μπορούν να επιτύχουν υπερυδροφοβικές ιδιότητες με γωνία επαφής  $150^\circ$  [27,28] .Σε μια συμμετρική προσέγγιση κατάφεραν να δημιουργήσουν μερικώς κάθετα ευθυγραμμισμένα φύλλα από BN σε Si υποστρώματα με ελεγχόμενα επίπεδα υδροαπωθητικότητας [29]. Ως αποτέλεσμα γωνίες επαφής από  $\sim 51^\circ$  έως  $159^\circ$  εξασφαλίστηκαν,υποδεικνύοντας την σημαντική αλλαγή από υδροφιλία σε υπερυδροφοβία. Λόγο της εξαιρετικής χημικής συμπεριφοράς του BN,η τιμή του pH του νερού δεν επηρεάζει τα χαρακτηριστικά ύγρανσης των φύλλων BN και φιλμ νανοσωλήνων BN [29,30]. Επομένως νανοδομές σε φιλμ αναμένεται να βρουν βιομηχανικές εφαρμογές σε αντιδιαβρωτικά,υδροαπωθητικά και αυτό-καθαριζόμενα συστήματα.

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 4

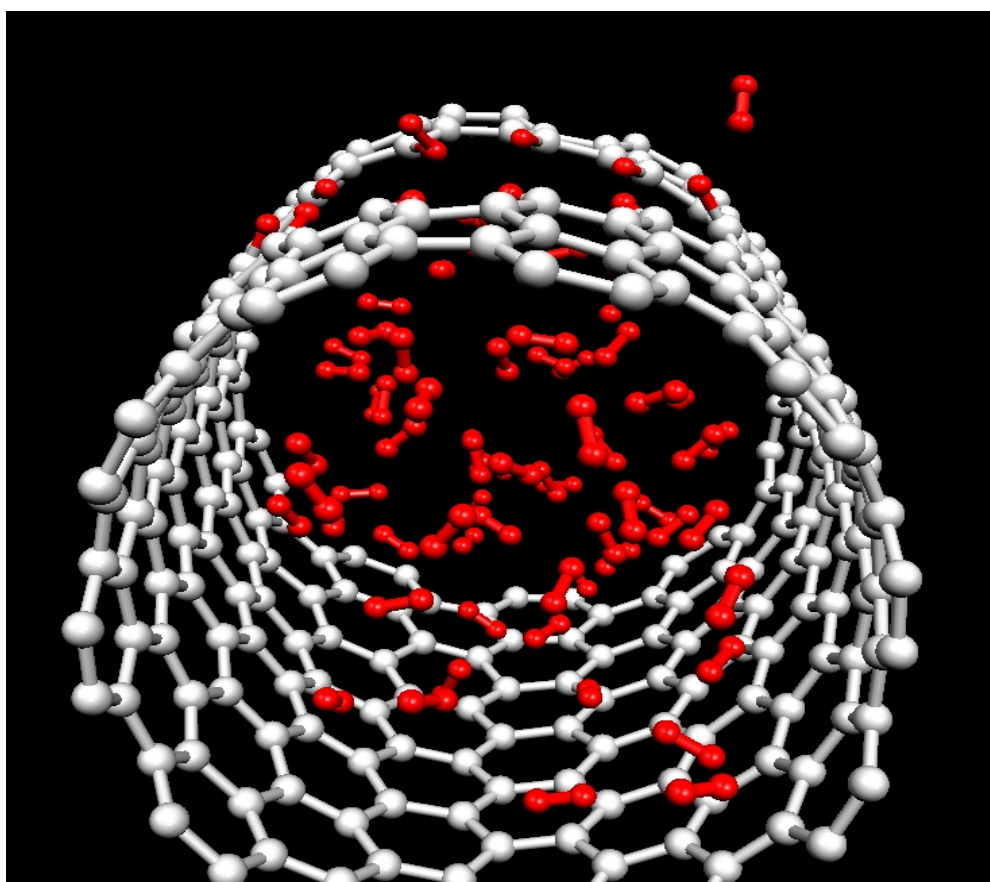
### ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ BN

#### 4.1 ΑΠΟΘΗΚΕΥΣΗ ΥΔΡΟΓΟΝΟΥ ( $H_2$ )

Το υδρογόνο θεωρείται μια ιδανική μη ρυπογόνος πηγή ενέργειας που μπορεί να γίνει μια εναλλακτική λύση αντικατάστασης των τρέχων πηγών ενέργειας. Ωστόσο η αποθήκευση του υδρογόνου είναι μερικά από τα εμπόδια στην εξέλιξη των τεχνολογιών που θα βασίζονται στο υδρογόνο. Οι νανοσωλήνες άνθρακα θεωρήθηκαν εν δυνάμει υλικά για αποθήκευση υδρογόνου λόγω της καλής χημικής τους συμπεριφοράς με το υδρογόνο, της υψηλής τους αναλογίας επιφάνειας προς όγκο και τις πυκνότητας τους. Ωστόσο τα υλικά με βάση των άνθρακα δημιουργούν ασθενείς δεσμούς με το υδρογόνο και αυτό περιορίζει αρκετά πιθανές βελτιώσεις.

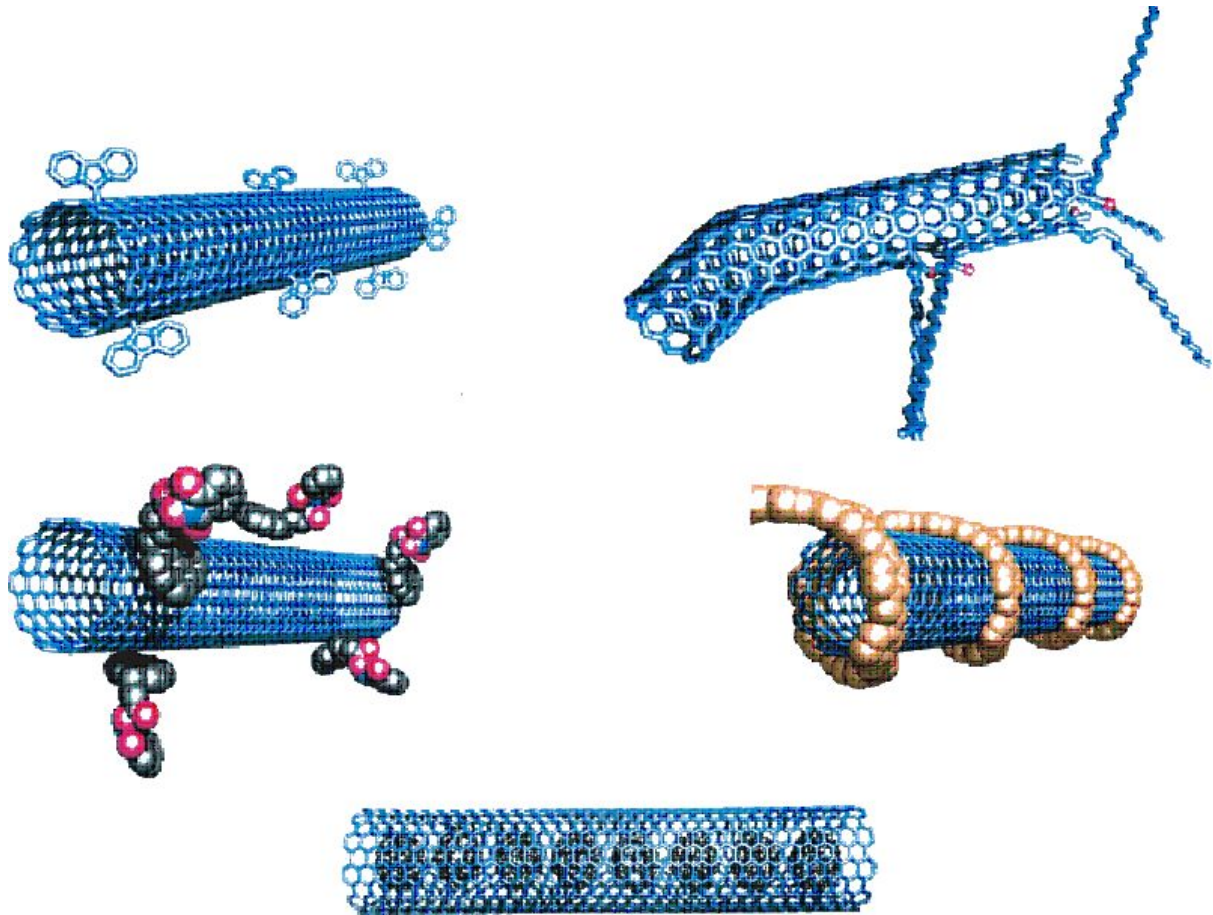
Οι νανοσωλήνες BN είναι ημιαγωγοί με πλατύ ενεργειακό εύρος το οποίο είναι σχεδόν ανεξάρτητο από την διάμετρο και την χειραλικότητα του σωλήνα. Επιπλέον ο ιονικός χαρακτήρας των BN δεσμών μπορεί να επάγει επιπλέον διπολικές ροπές ευνοϊκές για ισχυρότερη προσρόφηση του υδρογόνου. Οι ενέργειες των δεσμών και της διάχυσης του προσροφημένου υδρογόνου έχουν υπολογιστεί [31], και οι νανοσωλήνες BN βρέθηκαν να είναι κατάλληλοι για αποθήκευση υδρογόνου σε θερμοκρασία δωματίου. Επιπλέον η διάχυση διαμέσω των ενεργών θέσεων καθιστά ικανή την διείσδυση του υδρογόνου προς την εσωτερική επιφάνεια του νανοσωλήνα BN και αυξάνει την ικανότητα αποθήκευσης.





**Εικόνα 4.1** Αποθήκευση Υδρογόνου

## 4.2 ΣΥΝΘΕΤΑ ΑΠΟ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΒΝ ΓΙΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ



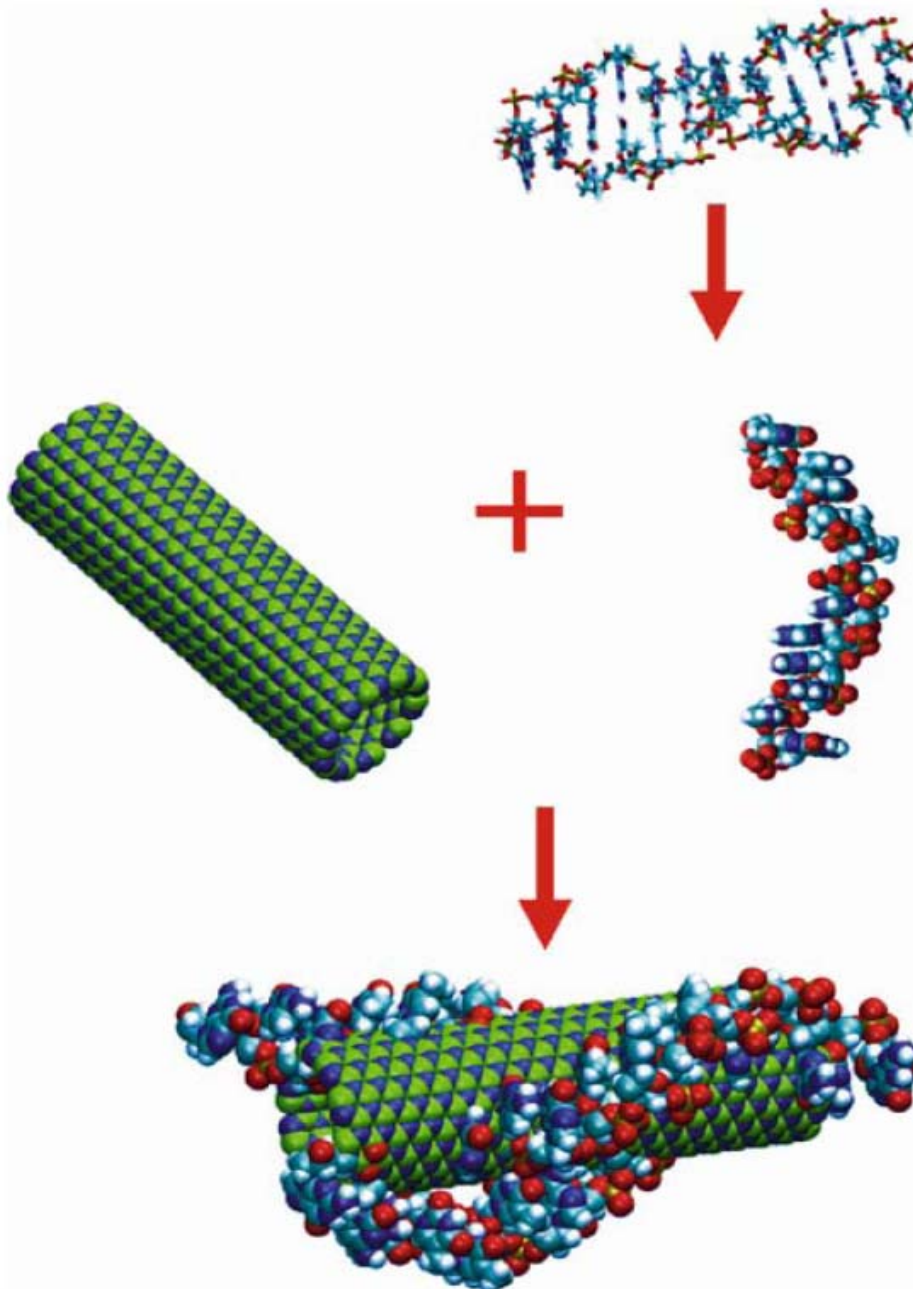
**Εικόνα 4.2** Τύλιξη νανοσωλήνα με πολυμερές

Λειτουργικοί νανοσωλήνες BN μπορούν να επιτευχθούν μέσω ομοιοπολικών αλληλεπιδράσεων, δηλαδή τυλίγοντας ένα νανοσωλήνα BN με ένα πολυμερές. Λόγω της  $sp^2$  υβριδοποίησης του εξαγωνικού πλέγματος BN, τα περισσότερα πολυμερή με μακριά αλυσίδα από δακτυλίους Βενζολίου μπορούν να αλληλεπιδράσουν με πλευρικά τοιχώματα των νανοσωλήνων BN. Έχει αποδειχθεί επίσης ότι οι νανοσωλήνες BN μπορούν να διαλυθούν τέλεια με πολλούς οργανικούς διαλύτες. Για παράδειγμα το PmPV τυλιγμένο με νανοσωλήνες BN είναι πλήρως διαλυτό σε χλωροφόρμιο, σε N-

διμεθυλακεταμίδιο και τετραϋδροφουράνιο, αλλά αδιάλυτο σε νερό και αιθανόλη. Επιπλέον διαπιστώθηκε ότι σύνθετα από νανοσωλήνες BN με PmPV διαθέτουν τροποποιημένες ιδιότητες φωτεινότητας και απορρόφησης, οι οποίες είναι διαφορετικές απ' αυτές του καθαρού PmPV, λόγω των μη ομοιοπολικών αλληλεπιδράσεων κάτω απ' το τύλιγμα του πολυμερούς.

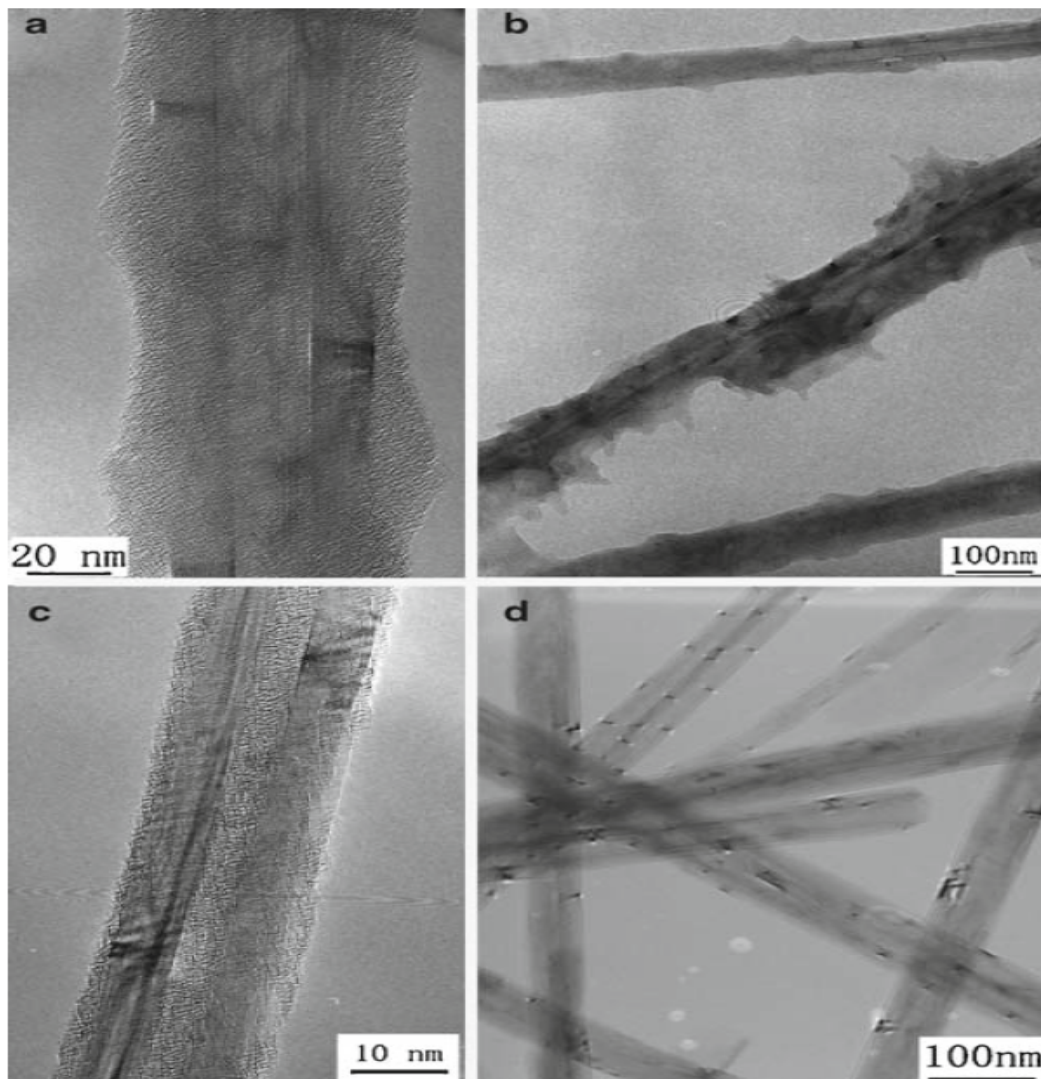
### 4.3 ΜΟΡΙΑΚΕΣ ΚΑΙ ΒΙΟΛΟΓΙΚΕΣ ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ

Οι νανοσωλήνες BN παρατηρήθηκε ότι αλληλεπιδρούν με βιολογικά μόρια όπως πρωτεΐνες ή μονής έλικας δεοξυριβονουκλεϊκού οξέος (ss-DNA)



**Εικόνα 4.3** Η διαδικασία κατασκευής ενός υβριδίου μεταξύ DNA και BNNT.

Η **Εικόνα 4.3** απεικονίζει μια σχηματοποίηση της τύλιξης ενός μορίου ss-DNA με ένα νανοσωλήνα BN. Πειραματικά αυτό φαίνεται στην παρακάτω **Εικόνα 4.4 (a),(b)** μέσα από μικροσκόπιο (TEM). Επίσης ανοιχτοί νανοσωλήνες BN μπορούν να τους γεμίσουν με DNA όπως φαίνεται στην **Εικόνα 4.4 (c)**. Τα DNA μπορούν να απομακρυνθούν με οξείδωση (ανόπτηση στους 700 °C για 30 λεπτά στον αέρα). Στην **Εικόνα 4.4 (d)** τα DNA έχουν οξειδωθεί και εντελώς απομακρυνθεί ώστε να παραμείνει μια καθαρή επιφάνεια νανοσωλήνα BN.



**Εικόνα 4.4**

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5

### ΝΑΝΟΔΟΜΕΣ

### ΚΑΙ

### ΔΙΑΤΟΜΙΚΕΣ

### ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ

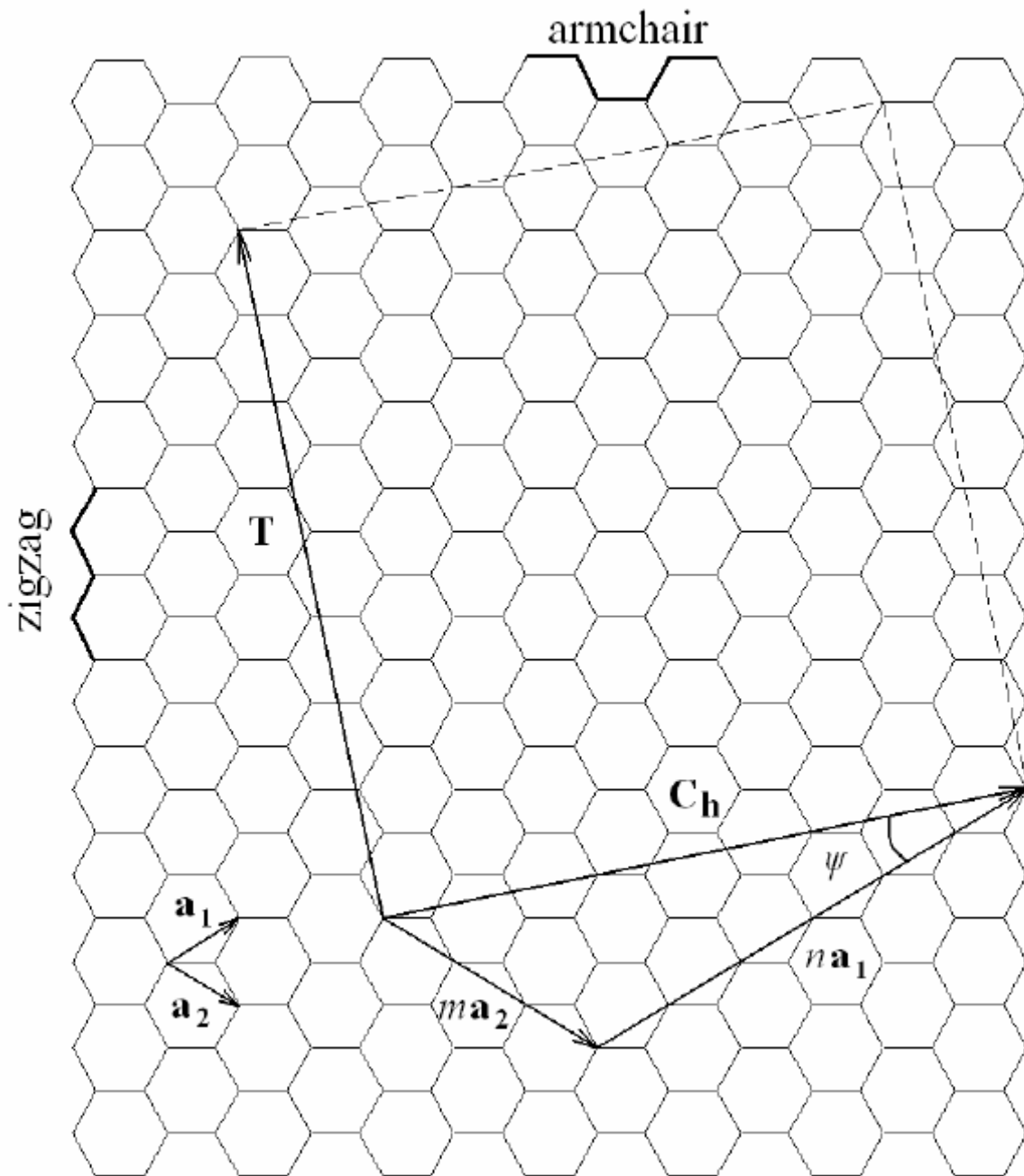
Στο παρών κεφάλαιο γίνεται μια παρουσίαση βασικών νανοδομών. Οι δομές αποτελούν την ιδεατή κατάσταση ισορροπίας που προκύπτει από την ελαχιστοποίηση της δυναμικής ενέργειας, βάση της οποίας βρίσκονται οι συντεταγμένες των ατόμων σε ένα ορισμένο καρτεσιανό σύστημα. Στην συνέχεια, παρουσιάζονται οι διατομικές αλληλεπιδράσεις και οι διατυπώσεις του πεδίου δυνάμεων, όπως προκύπτει από τη χρήση γνωστών βιβλιογραφικά δυναμικών ενεργειών.

#### 5.1 ΝΑΝΟΔΟΜΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ BN

Όπως έχει γίνει γνωστό και από άλλες μελέτες [15] η δομή ενός μονότοιχου νανოსωλήνα BN μπορεί να αναπαραχθεί με την περιστροφή ενός φύλλου h-BN (Σχήμα 5.1), το οποίο ιδεατά κόβεται με τέτοιο τρόπο ώστε να μπορεί να σχηματιστεί ένας κύλινδρος. Το B και N στοιχεία πρέπει να περιστραφεί στην κατεύθυνση που ορίζει το διάνυσμα (chiral vector)  $C_h$ , το οποίο με την σειρά του ορίζεται ως:

$$C_h = n a_1 + m a_2 \quad (5.1)$$

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 B και N μορφής zigzag και γενικά χρησιμοποιούνται για να ονοματίσουν έναν συγκεκριμένο τύπο νανοςωλήνα.



**Εικόνα 5.1** Δημιουργία ενός μονότοιχου νανοςωλήνα από ένα φύλλο h-BN

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

$$\tan \psi = \frac{\sqrt{3}m}{(2n+m)} \quad (5.2)$$

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:

$$D = \frac{r_{B-N} \sqrt{3(n^2 + nm + m^2)}}{\pi} \quad (5.3)$$

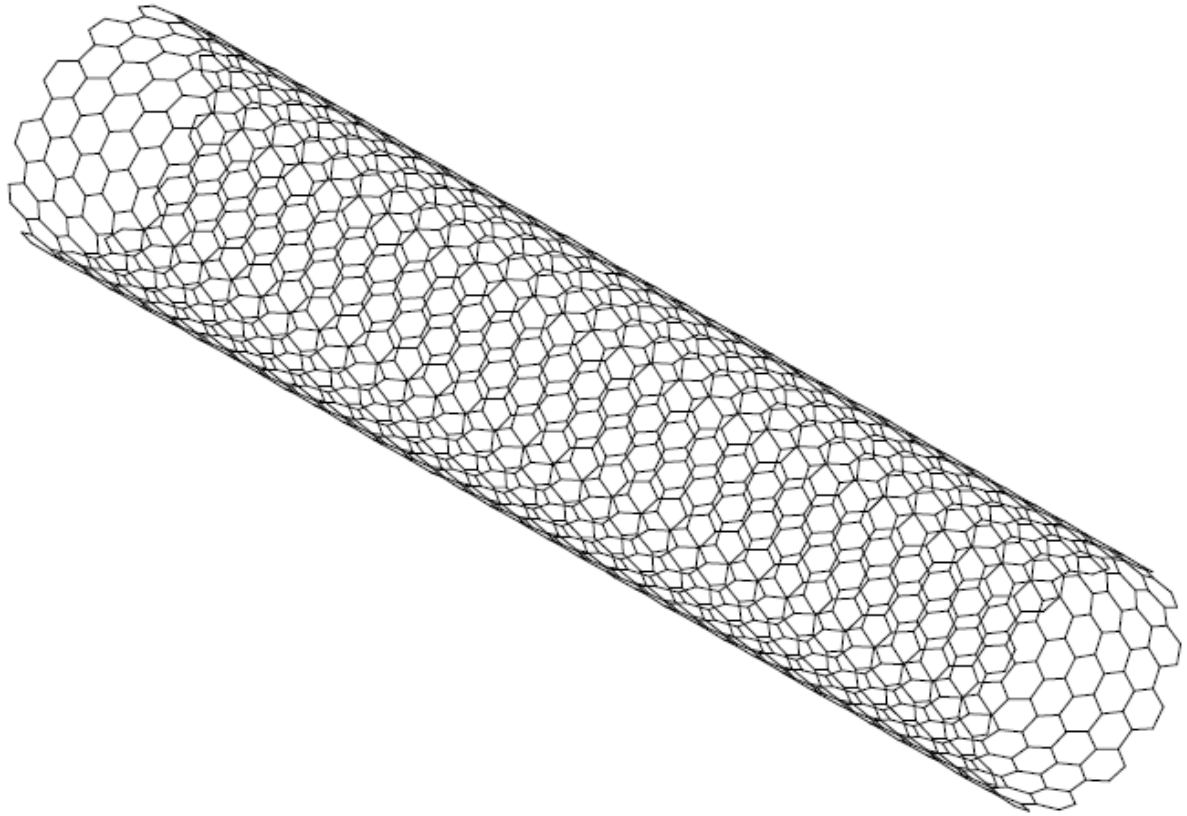
όπου  $r_{B-N}$  ή  $r_0$  είναι η απόσταση ισορροπίας μεταξύ δυο γειτονικών ατόμων B και N, ίση με 0.145 nm με βάση το δυναμικό που αντιστοιχεί στην απλή αρμονική προσέγγιση.

Η ιδεατή επιφάνεια ενός φύλλου h-BN η οποία μπορεί να δημιουργήσει έναν νανοσωλήνα BN ορίζεται από το διάνυσμα  $\mathbf{Ch}$  και το ακόλουθο διάνυσμα μετατόπισης  $\mathbf{T}$ :

$$\mathbf{T} = \left( \frac{2m+n}{W} \right) \mathbf{a}_1 + \left( -\frac{2n+m}{W} \right) \mathbf{a}_2 \quad (5.4)$$

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





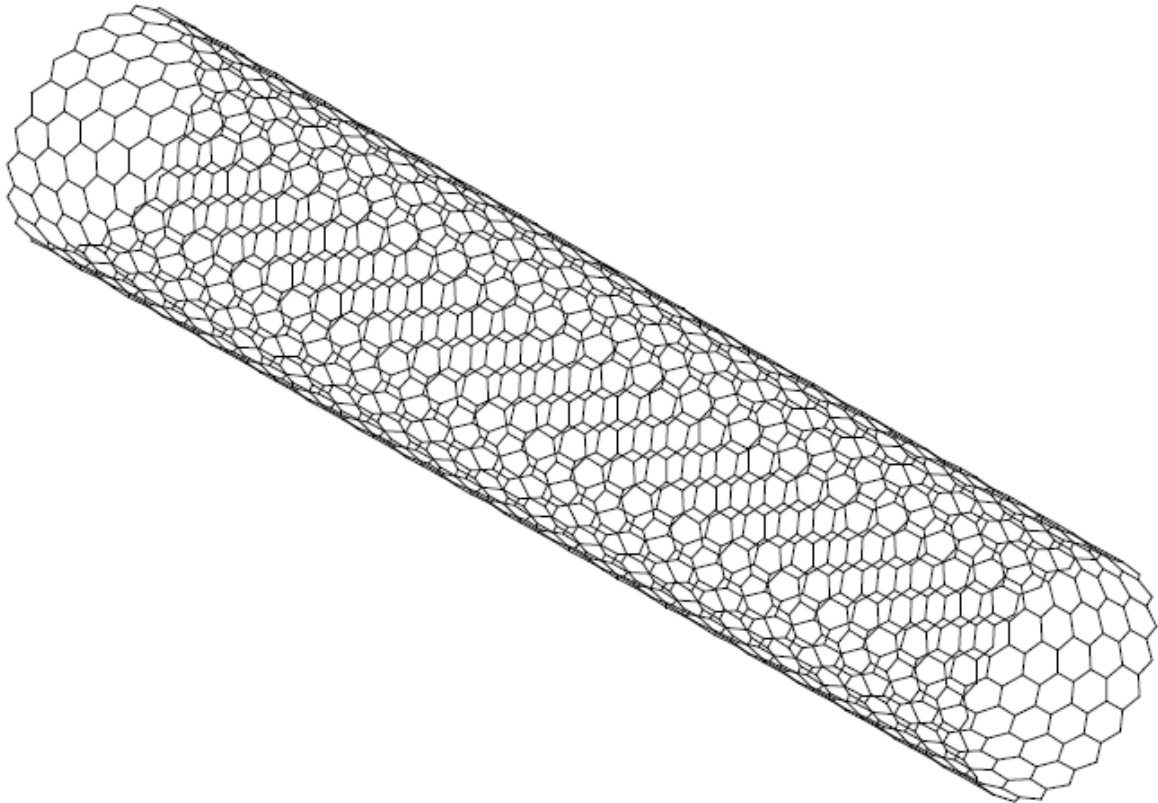
**Εικόνα 5.2** Δομή μονότοιχου νανοσωλήνα τύπου Armchair

Για λόγους απλότητας, το αρχικό σύστημα συντεταγμένων του φύλλου h-BN  $(x', y')$  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 h-BN μετατρέπονται σε συντεταγμένες νανοσωλήνα σύμφωνα με την εξίσωση:

$$(x, y, z) = \left( R \cos\left(\frac{x'}{R}\right), r \sin\left(\frac{x'}{R}\right), y' \right) \quad (5.5)$$

όπου  $R$  είναι η ακτίνα του νανοσωλήνα.

Τα Σχήματα 5.2 και 5.3 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.



**Εικόνα 5.3** Δομή μονότοιχου νανοσωλήνα τύπου zigzag

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6

### ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΟ ΜΟΝΤΕΛΟ

#### 6.1 ΓΕΩΜΕΤΡΙΑ ΕΞΑΓΩΝΙΚΟΥ BN

Η δικτυωτή κυψέλη του h-BN, η οποία θεωρείται ότι έχει πάχος  $t = 0.333\text{nm}$  στην συγκεκριμένη ανάλυση, χαρακτηρίζεται από μία επαναλαμβανόμενη στοιχειώδη κυψελίδα η οποία απεικονίζεται στην Σχήμα 6.1. Η στοιχειώδης αυτή κυψελίδα ορίζεται γεωμετρικά από τα διανύσματα  $\mathbf{r}_1$  και  $\mathbf{r}_2$  με το παρακάτω μέτρο:

$$|\mathbf{r}_1| = |\mathbf{r}_2| = \sqrt{3}r_0 \quad (6.1)$$

όπου  $r_0$  είναι η απόσταση μεταξύ δύο ατόμων B και N και λαμβάνεται ίση με  $0.145\text{nm}$  στην παρούσα εργασία. Υπό αυτό το δεδομένο, οποιοδήποτε διάνυσμα  $\mathbf{r}$  εκφράζεται ως:

$$\mathbf{r} = n \mathbf{a}_1 + m \mathbf{a}_2 \quad (6.2)$$

όπου  $n, m$  είναι ακέραιοι. Σε Καρτεσιανές συντεταγμένες τα διανύσματα αυτά ορίζονται ως εξής:

$$\mathbf{r}_1 = r_0 [3/2 \quad \sqrt{3}/2 \quad 0]^T \quad (6.3)$$

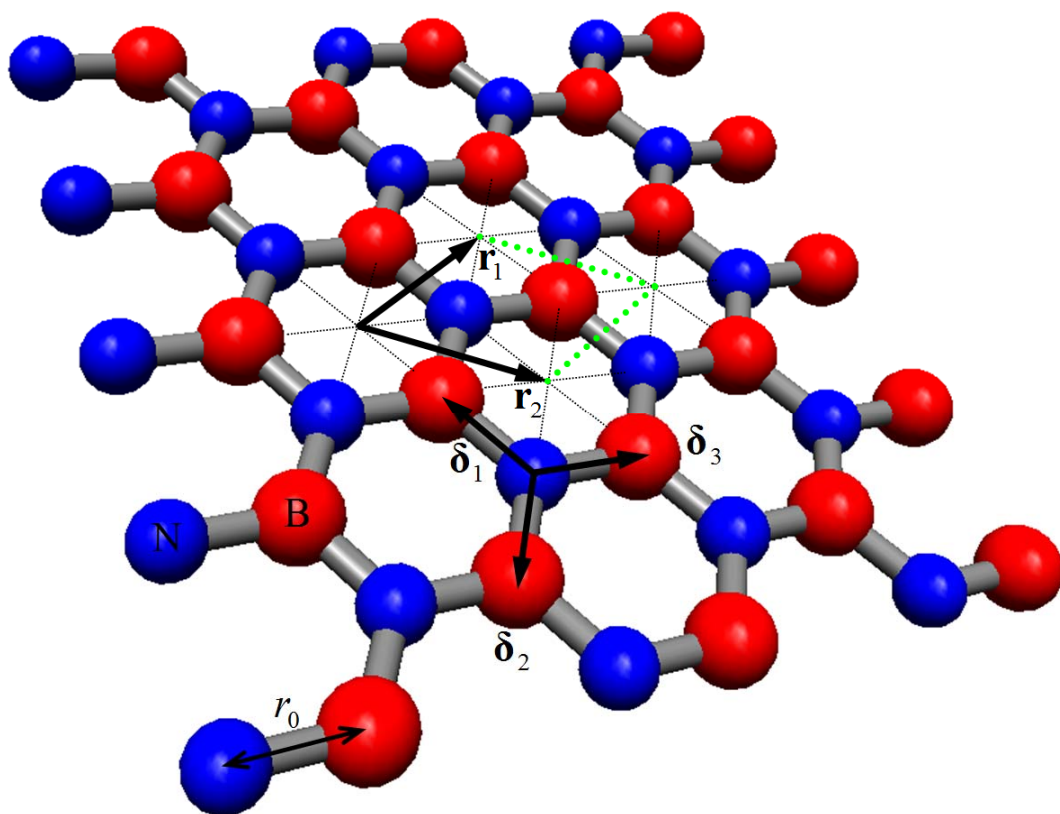
$$\mathbf{r}_2 = r_0 [3/2 \quad -\sqrt{3}/2 \quad 0]^T \quad (6.4)$$

Τα διανύσματα που ενώνουν το κάθε άτομο με το πλησιέστερο γειτονικό δύνανται να εκφραστούν ως εξής:

$$\delta_1 = (\mathbf{r}_1 - 2\mathbf{r}_2)/3 \quad (6.5)$$

$$\delta_2 = (\mathbf{r}_2 - 2\mathbf{r}_1)/3 \quad (6.6)$$

$$\delta_3 = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/3 \quad (6.7)$$



Σχήμα 6.1 Γεωμετρία εξαγωνικού μονότοιχου BN

## 6.2 ΘΕΜΕΛΙΩΔΗΣ ΕΞΙΣΩΣΗ

Η συνολική δυναμική ενέργεια ενός μονότοιχου h-BN λόγω των διατομικών τους αλληλεπιδράσεων, αγνοώντας τις αμελητέες δυνάμεις van der Waals γράφεται ως :

$$U = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum U_\tau \quad (6.8)$$

όπου το  $U_r$  εκφράζει την ενέργεια λόγω του εφελκυσμού των δεσμών, το  $U_\theta$  εκφράζει την ενέργεια λόγω κάμψης της γωνίας των δεσμών και το  $U_\tau$  την ενέργεια λόγω στρέψης γωνίας των δεσμών και την περιστροφή τους εκτός επιπέδου. Οι παραπάνω ενέργειες δίνονται από τις ακόλουθες εξισώσεις, αντίστοιχα :

$$U_r = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2 \quad (6.9)$$

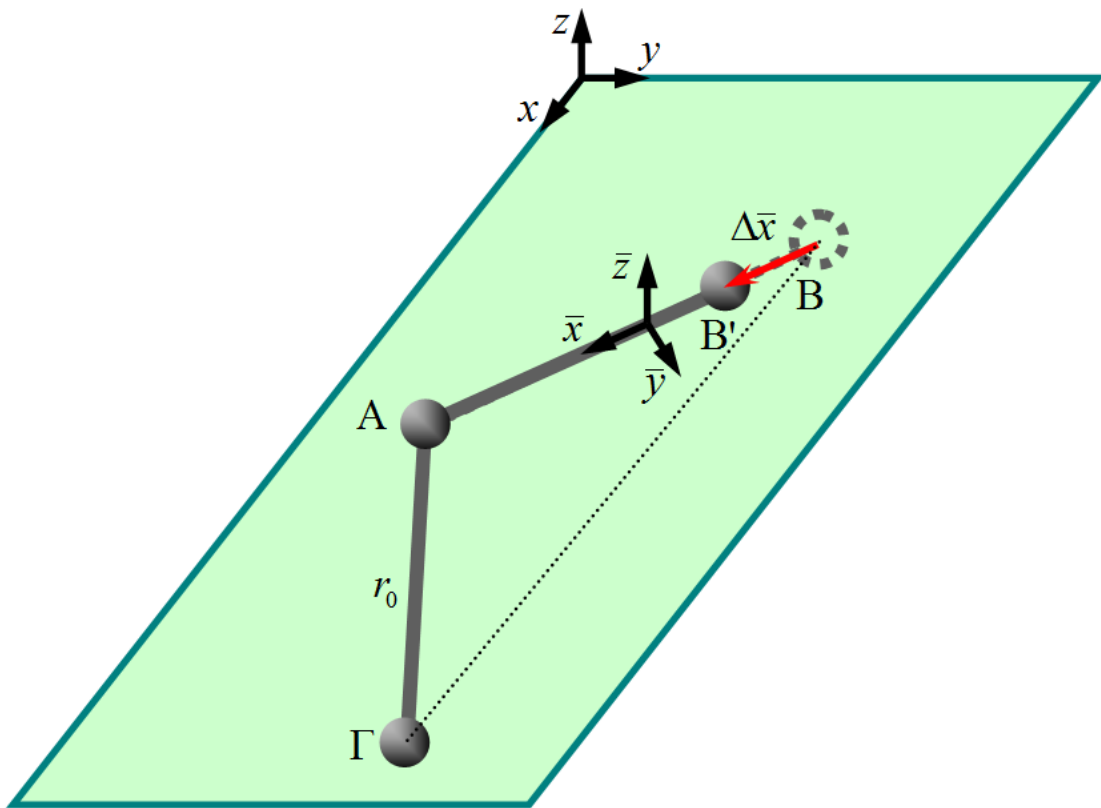
$$U_\theta = \frac{1}{2} k_\theta (\Delta \theta)^2 \quad (6.10)$$

$$U_\tau = \frac{1}{2} k_\tau (\Delta \phi)^2 \quad (6.11)$$

όπου  $k_r$ ,  $k_\theta$  και  $k_\tau$  είναι οι σταθερές δύναμης ένεκα του εφελκυσμού των δεσμών, της κάμψης της γωνίας των δεσμών, της στρέψης της γωνίας των δεσμών, αντίστοιχα και  $\Delta r$ ,  $\Delta \theta$  και  $\Delta \phi$  εκφράζουν τη μεταβολή του μήκους του δεσμού, την μεταβολή της γωνίας κάμψης των δεσμού και τη μεταβολή της γωνίας στρέψης των δεσμών, αντίστοιχα. Οι τιμές που χρησιμοποιήθηκαν στην παρούσα μελέτη για την πρώτη περίπτωση είναι  $k_r=675,7\text{nN nm}^{-1}$ ,  $k_\theta=82,75\text{nN}$

$\text{nm rad}^{-2}$  και  $k_t = 29,75 \text{ nN nm rad}^{-2}$  [32]. Για την δεύτερη περίπτωση πήραμε  $k_r = 486,5 \text{ nN nm}^{-1}$ ,  $k_\theta = 33,065 \text{ nN nm rad}^{-2}$  και  $k_t = 29,75 \text{ nN nm rad}^{-2}$  [32].

Ας υποθέσουμε ότι η νανοδομή N-B-N του Σχήματος 6.2 βρίσκεται σε ισορροπία. Οι αρχικές θέσεις των ατόμων του B,N δηλώνονται με τα γράμματα A, B και Γ και ορίζονται στο γενικό καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων  $(x,y,z)$ . Οι αποστάσεις AB και AΓ είναι προφανώς ίσες με  $r_0$ . Το Σχήμα 6.2 α παρουσιάζει τον εφελκυσμό του ενός δεσμού που οδηγεί σε παραμόρφωση της N-B-N νανοδομής από το αρχικό της σχήμα ABΓ στο παραμορφωμένο AB'Γ.



**Σχήμα 6.2α** Εφελκυσμός των δεσμών (Bond Stretching) των ατόμων B και N σε τοπικό σύστημα συντεταγμένων (local coordinate)

Να σημειωθεί στο σημείο αυτό, ότι όλες οι θέσεις των ατόμων B και N παραμένουν στο επίπεδο  $xy$  παρά την παραμόρφωση. Η συγκεκριμένη παραμόρφωση θα μπορούσε να εκφραστεί σε ένα τοπικό σύστημα συντεταγμένων  $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$  όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.2α. Ο άξονας  $\bar{x}$  του συγκεκριμένου τοπικού συστήματος συντεταγμένων συμπίπτει με την γραμμή όπου ενώνει τις αρχικές θέσεις των BN A και B. Η δυναμική ενέργεια που αποθηκεύεται στην νανοδομή δίνεται από την Εξίσωση (6.9) η οποία μπορεί να ξαναγραφτεί με βάση το προαναφερθέν σύστημα συντεταγμένων ως:

$$U_r = \frac{1}{2} k_r (\Delta \bar{x})^2 \quad (6.12)$$

όπου  $\Delta \bar{x}$  είναι η μετατόπιση του σημείου B' κατά μήκος του άξονα  $\bar{x}$ .

Τώρα ας υποθέσουμε ότι η νανοδομή N-B-N υποβάλλεται σε μία παραμόρφωση της γωνίας των δεσμών από τη μορφή ABΓ στη μορφή AB'Γ' όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.2β. Να σημειωθεί ότι ο παραμορφωμένος δεσμός παραμένει στο επίπεδο  $xy$  και διατηρεί το μήκος του  $r_0$ . Αυτή η κάμψη της γωνίας των δεσμών μπορεί να εκφραστεί σε ένα νέο σύστημα τοπικών συντεταγμένων  $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$  όπως φαίνεται στο Σχήμα 6.2β. Ο άξονας  $\bar{x}$  του συγκεκριμένου συστήματος συμπίπτει με την γραμμή που ενώνει τις αρχικές θέσεις των αντικριστών ατόμων BN, B και Γ ενώ ο  $\bar{y}$  άξονας είναι κάθετος στο επίπεδο ABΓ. Για μικρές τάσεις η γωνιακή μεταβολή των δεσμών είναι:

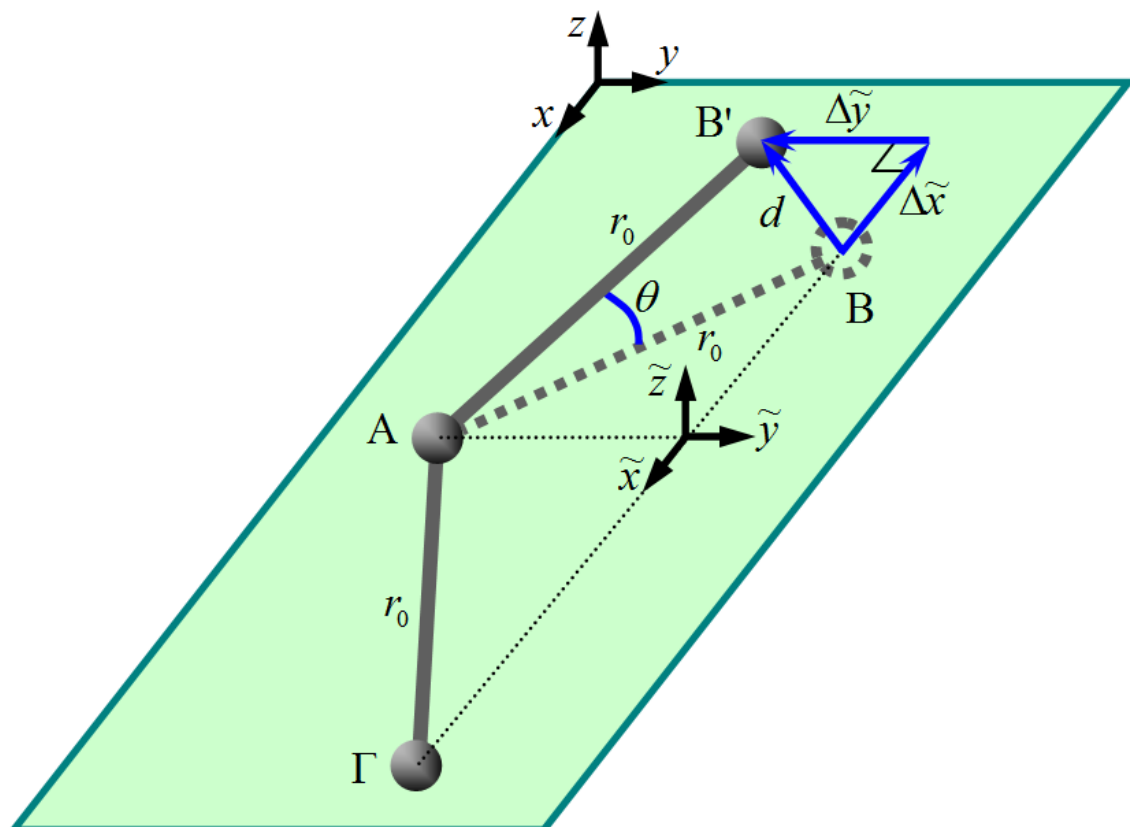
$$\Delta \theta = \frac{d}{r_0} \quad (6.13)$$

ή

$$\Delta\theta = \frac{\sqrt{(\Delta\tilde{x})^2 + (\Delta\tilde{y})^2}}{r_0} \quad (6.14)$$

όπου  $d$  είναι η απόσταση  $BB'$ . Οι όροι  $\Delta\tilde{x}$  και  $\Delta\tilde{y}$  υποδηλώνουν την μετατόπιση της θέσης B κατά μήκος των αξόνων  $\tilde{x}$  και  $\tilde{y}$ , αντίστοιχα. Η δυναμική ενέργεια που αποθηκεύεται στην νανοδομή δίνεται από την Εξίσωση (6.10). Λαμβάνοντας υπ' όψιν την Εξίσωση (6.14) και σύμφωνα με το τοπικό σύστημα συντεταγμένων  $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$  μπορεί να πάρει την μορφή:

$$U_\theta = \frac{1}{2} \frac{k_\theta}{r_0^2} (\Delta\tilde{x})^2 + \frac{1}{2} \frac{k_\theta}{r_0^2} (\Delta\tilde{y})^2 \quad (6.15)$$



**Σχήμα 6.2α** Κάμψη γωνίας των δεσμών (Bond Bending) των ατόμων B και N.



Τελικά ας υποθέσουμε την παραμόρφωση της γωνίας στρέψης των δεσμών της νανοδομής N-B-N η οποία οδηγεί στην μορφή AB'Γ που φαίνεται στο Σχήμα 6.2γ. Να τονισθεί στο σημείο αυτό ότι η νέα θέση B' του άνθρακα δεν ανήκει στο επίπεδο xy και ότι οι παραμορφωμένοι δεσμοί διατηρούν το αρχικό τους μήκος  $r_0$ . Με βάση το τοπικό σύστημα συντεταγμένων και την υπόθεση μικρών μετατοπίσεων η μεταβολή της γωνίας στρέψης των δεσμών δύναται να εκφραστεί ως εξής:

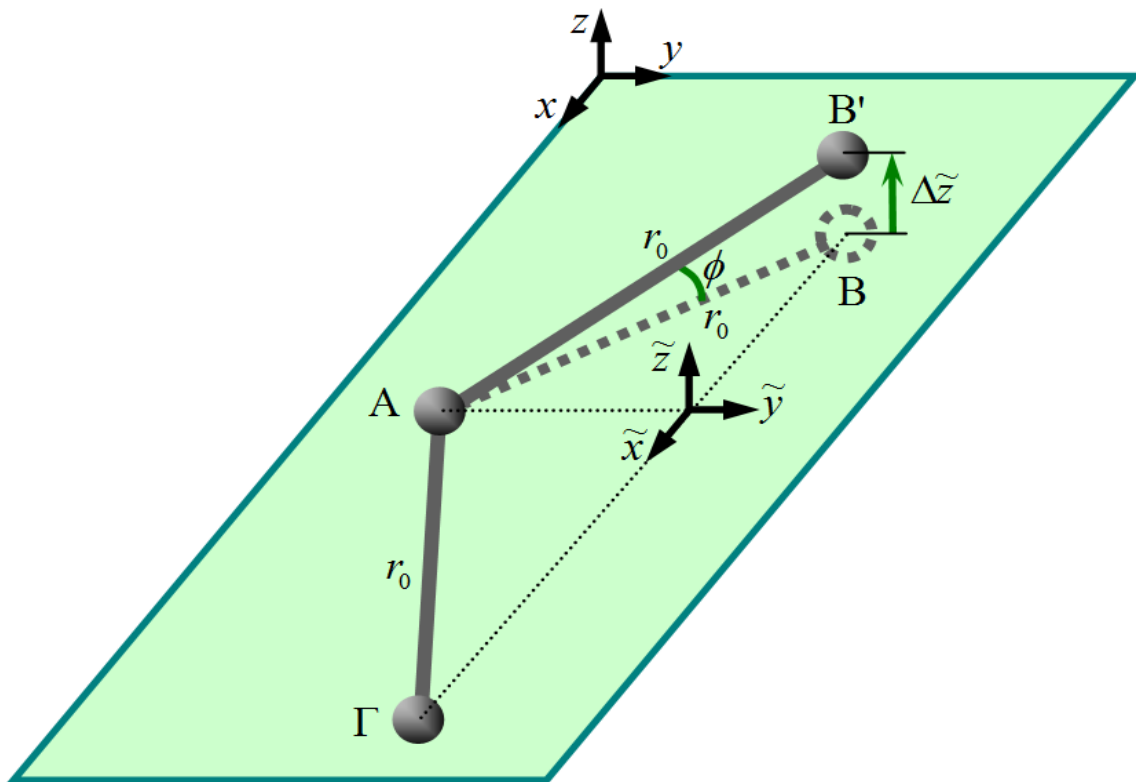
$$\Delta\phi = \frac{\Delta\tilde{z}}{r_0} \quad (6.16)$$

όπου  $\Delta\tilde{z}$  είναι η μετατόπιση της θέσης B κατά μήκος του άξονα z. Για αυτού του τύπου την παραμόρφωση, η δυναμική ενέργεια που αποθηκεύεται στην νανοδομή δίνεται από την Εξίσωση (6.11) η οποία μπορεί να εκφραστεί, λαμβάνοντας υπ' όψιν το τοπικό σύστημα συντεταγμένων ( $\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}$ ) ως:

$$U_\phi = \frac{1}{2} \frac{k_\tau}{r_0^2} (\Delta\tilde{z})^2 \quad (6.17)$$

Αντικαθιστώντας τις Εξισώσεις (6.12), (6.15) και (6.17) στην Εξίσωση (6.8), προκύπτει η θεμελιώδης εξίσωση ενός h-BN, η οποία εμπεριέχει πολυάριθμες νανοδομές N-B-N και B-N-B αντίστοιχα:

$$U = \sum \frac{1}{2} k_r (\Delta\bar{x})^2 + \sum \frac{1}{2} \frac{k_\theta}{r_0^2} (\Delta\tilde{x})^2 + \sum \frac{1}{2} \frac{k_\theta}{r_0^2} (\Delta\tilde{y})^2 + \sum \frac{1}{2} \frac{k_\tau}{r_0^2} (\Delta\tilde{z})^2 \quad (6.18)$$



**Σχήμα 6.2γ** Στρέψη γωνίας των δεσμών (Bond Angle Twisting) των ατόμων BN

Είναι προφανές ότι οι δεύτερες παράγωγοι όλων των όρων δυναμικών ενεργειών που παρουσιάζονται στην παραπάνω εξίσωση δίνουν αντίστοιχους συντελεστές δυσκαμψίας σύμφωνα με την θεωρία του Castigliano.

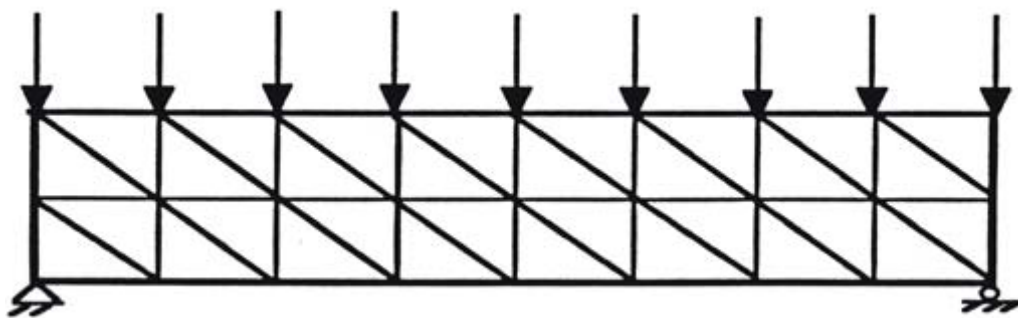
## 6.3 ΜΕΘΟΔΟΣ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ

### 6.3.1 Γενικά

Στο σημείο αυτό θα δοθεί μία εισαγωγή στη *μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων* (ΜΠΣ) και στη χρήση της στην ανάλυση και το σχεδιασμό των λεπτότοιχων κατασκευών. Η μέθοδος αυτή αποτελεί ισχυρό εργαλείο στη μελέτη των κατασκευών και βρίσκει μεγάλο αριθμό εφαρμογών. Στο πεδίο της ανάλυσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί όχι μόνο στο (συμβατικό) ελαστικό πεδίο (θεωρία μικρών μετατοπίσεων) αλλά και για μη-γραμμικά προβλήματα, λυγισμό, δυναμική συμπεριφορά κ.ά. Η μέθοδος χρησιμοποιείται γενικότερα σε προβλήματα που επιδέχονται μεταβολική διατύπωση της μηχανικής του υλικού μέσου.

Η σχετική βιβλιογραφία είναι εκτενέστατη, και συνεχώς αυξάνεται με την πρόταση νέων τεχνικών αλλά και εφαρμογών. Στο παρόν κείμενο η περιγραφή θα περιορίσει στη μελέτη λεπτότοιχων κατασκευών και θα καλύψει τις βασικές αρχές της μεθόδου και τη θεωρία της μητρικής άλγεβρας.

Το χαρακτηριστικό της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων είναι η χρήση δισδιάστατων και τρισδιάστατων στοιχείων για την προσομοίωση συνεχών μέσων. Μια από τις πρώτες δημοσιεύσεις στις οποίες παρουσιάστηκε η ιδέα αυτή είναι των Turner, Clough, Martin, και Topp (1956), ορισμένα όμως χαρακτηριστικά της είχαν ήδη περιγραφεί από τους Courant (1943), Hrenikoff (1941), McHenry (1943) και άλλους. Τα πρώτα πεπερασμένα στοιχεία χρησιμοποιήθηκαν σε προβλήματα επίπεδης εντατικής κατάστασης, αργότερα όμως διατυπώθηκαν στοιχεία και για τρισδιάστατα στερεά, ελάσματα υπό κάμψη, παχιά κελύφη, και άλλες μορφές κατασκευών. Μετά την καθιέρωσή τους στη γραμμική ελαστική περιοχή εφαρμόστηκαν και σε δυσκολότερα προβλήματα όπως η δυναμική συμπεριφορά, ο λυγισμός και η μη-γραμμική απόκριση και συμπεριφορά του υλικού. Για να επιλυθούν δε προβλήματα με μη-γραμμική συμπεριφορά του υλικού απαιτείται επαναληπτική διαδικασία.



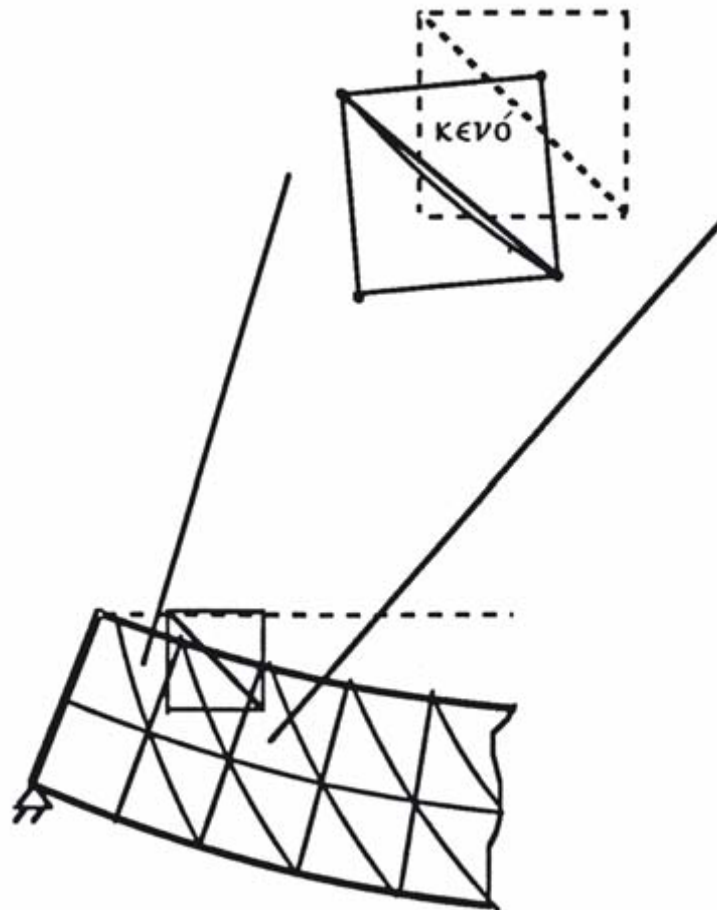
**Σχήμα 6.3** Χρήση τριγωνικών στοιχείων για διακριτοποίηση αμφιέρεστης δοκού υπό καμπτική φόρτιση.

### 6.3.2 Βασικές έννοιες της μεθόδου

Η βασική έννοια της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων είναι, όπως και στη μητρική ανάλυση, η δυνατότητα προσομοίωσης της πραγματικής κατασκευής με συστατικά στοιχεία τα οποία συνδέονται σε ένα πεπερασμένο αριθμό κόμβων. Η μεθοδολογία αυτή αποτελεί φυσιολογική προσομοίωση των πλαισίων, καθώς αυτά αποτελούνται από δοκούς που είναι συνδεδεμένες στα άκρα τους. Σε μία συνεχή όμως κατασκευή δεν υπάρχουν φυσικοί διαχωρισμοί και συνεπώς απαιτείται να γίνει τεχνητός διαχωρισμός σε στοιχεία, τα οποία να συνδέονται κατά μήκος των άκρων (πλευρών) τους. Τα τεχνητά αυτά στοιχεία, ή *πεπερασμένα στοιχεία* είναι συνήθως τετράπλευρα ή τριγωνικά και οι κόμβοι συνήθως βρίσκονται στα άκρα. Το Σχήμα 6.3 δείχνει τον κορμό δοκού υποδιαιρεμένο σε τριγωνικά στοιχεία. Για να γίνει χρήση μητρικών μεθόδων απαιτείται να προσομοιωθεί η συνεχής κατασκευή με ένα πεπερασμένο αριθμό διακριτών μεταβλητών. Οι μεταβλητές αυτές είναι οι μετατοπίσεις των κόμβων και σε ορισμένες περιπτώσεις και οι παράγωγοί τους. Εάν περιλαμβάνονται και οι παράγωγοι γίνεται λόγος για *βαθμούς ελευθερίας* αντί για *μετατοπίσεις κόμβων*. Οι μετατοπίσεις στο εσωτερικό των στοιχείων πρέπει να είναι

συμβατές με τις μετατοπίσεις των κόμβων και όλες οι αλληλεπιδράσεις των στοιχείων εκφράζονται σε σχέση με τις κομβικές μετατοπίσεις.

Με αυτό τον τρόπο οι μόνοι άγνωστοι είναι οι μετατοπίσεις στους κόμβους και το πρόβλημα μετατρέπεται από συνεχές σε διακριτό. Παρ' όλο που μπορεί να υπάρχει μεγάλος αριθμός κομβικών μετατοπίσεων ο αριθμός τους είναι πεπερασμένος. Το πρόβλημα εκφράζεται τότε ως ένα σύνολο (σύστημα) γραμμικών εξισώσεων οι οποίες επιλύονται με αριθμητικές (μητρικές) μεθόδους.



**Σχήμα 6.4** Παραμόρφωση στοιχείων

Για να επιτευχθεί ακριβής λύση ενός συγκεκριμένου προβλήματος στη διακριτοποιημένη μορφή του, θα πρέπει να ικανοποιούνται οι συνθήκες ισορροπίας και γεωμετρικής συμβατότητας στο εσωτερικό των στοιχείων αλλά και στα σύνορά τους. Οι απαιτήσεις αυτές ανάγονται στην ικανοποίηση τεσσάρων συνθηκών. Ας θεωρηθεί, για παράδειγμα, η συμβατότητα μεταξύ των στοιχείων. Σε μία συνεχή κατασκευή όπως το έλασμα του Σχήματος 6.4 ισχύει συνέχεια των μετατοπίσεων στα κοινά όρια των στοιχείων. Συνεπώς στο αριθμητικό μοντέλο (πεπερασμένα στοιχεία) δεν επαρκεί να ικανοποιείται η συνθήκη της συνέχειας των μετατοπίσεων στους κόμβους και μόνο.

Εάν δηλαδή δεν διατυπωθούν περιορισμοί στις μετατοπίσεις κατά μήκος των ορίων των στοιχείων το θεωρητικό μοντέλο της κατασκευής θα είναι περισσότερο εύκαμπτο επειδή θα δημιουργηθούν κενά, όπως δείχνει το Σχήμα 6.4. Ένας τρόπος να περιορισθεί το σφάλμα είναι να χρησιμοποιηθούν μικρότερα και περισσότερα στοιχεία διότι έτσι θα δημιουργηθούν περισσότεροι κόμβοι και συνεπώς περισσότερα σημεία στα οποία θα ικανοποιείται η συμβατότητα.

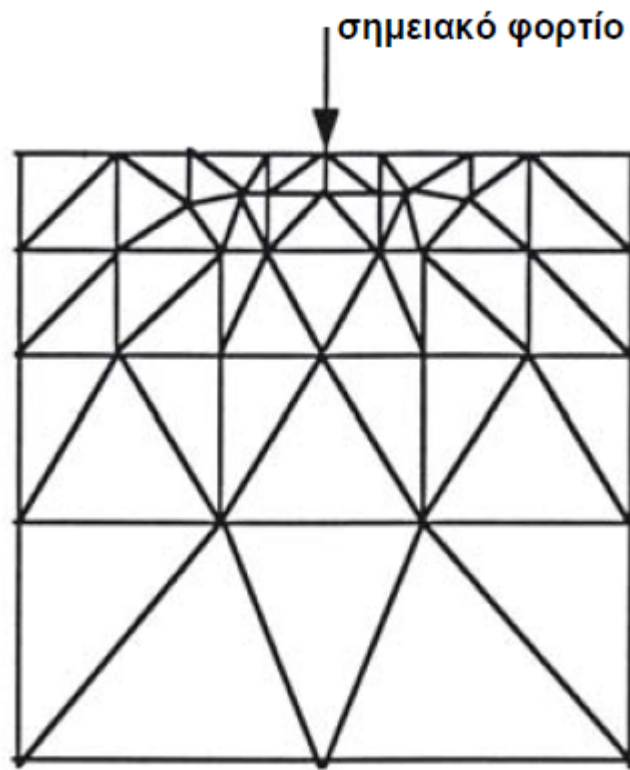
Μία διακριτή προσομοίωση δεν μπορεί όμως να αποδώσει με απόλυτη ακρίβεια την συμπεριφορά ενός συνεχούς μέσου, ανεξαρτήτως του αριθμού των διακριτών μεταβλητών που χρησιμοποιούνται. Υπάρχει δηλαδή πάντοτε ένα σφάλμα, το οποίο όμως μπορεί να περιορισθεί και να γίνει αμελητέο και τοπικό. Δεν είναι συνεπώς δυνατόν να ικανοποιηθούν όλες οι προαναφερθείσες συνθήκες με απόλυτη ακρίβεια, έστω και αν γίνει χρήση μεγάλου αριθμού στοιχείων. Είναι όμως δυνατό, με σωστή επιλογή των ιδιοτήτων των στοιχείων και κατάλληλη διακριτοποίηση, να περιορισθεί το αριθμητικό σφάλμα. Ο προσδιορισμός των ιδιοτήτων των στοιχείων αποτελεί ένα από τα βασικότερα στάδια διατύπωσης μιας λύσης. Θα πρέπει τότε να γίνεται αυτό έτσι ώστε να ικανοποιούνται επαρκώς οι συνθήκες συμβατότητας χωρίς να χρειασθεί να γίνει χρήση υπερβολικά μικρών στοιχείων.

Η συμπεριφορά των στοιχείων καθορίζεται από συναρτήσεις οι οποίες ορίζουν τον τρόπο μεταβολής των τάσεων ή των μετατοπίσεων στο εσωτερικό τους. Με άλλα λόγια, προκαθορίζεται ο τρόπος συμπεριφοράς των διαφόρων μεταβλητών. Το αποτέλεσμα είναι ότι, παρ'όλο που οι συνθήκες ισορροπίας και συμβατότητας ικανοποιούνται μόνο στους κόμβους, η προδιαγεγραμμένη συμπεριφορά στο εσωτερικό κάθε στοιχείου εξασφαλίζει ότι η συμβατότητα ικανοποιείται επαρκώς στο εσωτερικό και στα σύνορά τους.

Συμπεραίνεται λοιπόν ότι απαιτείται προσοχή κατά την υποδιαίρεση (διακριτοποίηση) της κατασκευής, καθώς επίσης και κατά την επιλογή της συνάρτησης που περιγράφει τη συμπεριφορά στο εσωτερικό του κάθε στοιχείου.

Όπως έχει ήδη αναφερθεί, η ακρίβεια της μεθόδου αυξάνεται όταν αυξάνεται ο αριθμός των στοιχείων, ή καλύτερα, των κόμβων. Όσο αυξάνεται όμως ο αριθμός των στοιχείων, τόσο αυξάνονται ο χρόνος υπολογισμού και το κόστος.

Σε πολλές περιπτώσεις η βαθμιαία μεταβολή του μεγέθους των στοιχείων χρησιμοποιείται για να αποκτηθεί ακριβέστερη εικόνα της τοπικής συμπεριφοράς (σε συγκεντρώσεις τάσεων, σε ανοίγματα, κοντά στο σημείο εφαρμογής του εξωτερικού φορτίου, κλπ). Η βαθμιαία μεταβολή του μεγέθους των στοιχείων είναι ένας εφικτός τρόπος ελάττωσης του κόστους χωρίς να μειωθεί ακρίβεια της λύσης του προβλήματος. Λόγω όμως της μεγάλης ποικιλίας κατασκευών και φορτίσεων δεν είναι δυνατό να δοθεί γενικός κανόνας σχετικά με τον αριθμό ή το μέγεθος των στοιχείων ή τον τρόπο διακριτοποίησης που απαιτούνται για επαρκή ακρίβεια. Σε κάθε περίπτωση ο τρόπος διακριτοποίησης πρέπει να βασίζεται στην εμπειρία συμπεριφοράς και μελέτης παρόμοιων κατασκευών. Εάν αυτό δεν είναι εφικτό πρέπει να επιλυθεί σειρά προβλημάτων με διαφορετικές διακριτοποιήσεις και να υπολογιστεί ο βαθμός σύγκλισης στην ακριβή λύση. Με αυτό τον τρόπο διασφαλίζεται η ακρίβεια της λύσης για το συγκεκριμένο πρόβλημα (Σχήμα 6.5).



Σχήμα 6.5 Βαθμιαία ελάττωση του μεγέθους των στοιχείων.

### 6.3.3 Πεπερασμένα στοιχεία που χρησιμοποιήθηκαν

Για την παρουσίαση των δυναμικών όρων της Εξίσωσης (6.18) χρησιμοποιήθηκαν τριών ειδών τρισδιάστατα, δίκωμα, πεπερασμένα στοιχεία τύπου ελατηρίου, με έξι βαθμούς ελευθερίας ανά κόμβο και συγκεκριμένου τοπικού συστήματος συντεταγμένων.

Πρώτον, στοιχεία ελατηρίου, που ονομάζονται εφεξής BN, χρησιμοποιήθηκαν για την προσομοίωση της αλληλεπίδρασης του εφελκυσμού των δεσμών (Σχήμα 6.6). Εφαρμόζοντας την συμβατική διατύπωση μετατόπισης, η εξίσωση ισορροπίας τους στο τοπικό σύστημα συντεταγμένων τους  $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$  μπορεί να γραφτεί ως:



$$\mathbf{K}_{xyz}^{BN} \mathbf{u}_{xyz}^{BN} = \mathbf{f}_{xyz}^{BN} \quad (6.19)$$

όπου το  $\mathbf{K}_{xyz}^{BN}$  υποδηλώνει το μητρώο δυσκαμψίας του στοιχείου, το  $\mathbf{u}_{xyz}^{BN}$  το γενικό διάνυσμα μετατόπισης και το  $\mathbf{f}_{xyz}^{BN}$  το γενικό διάνυσμα δύναμης. Το μητρώο δυσκαμψίας των στοιχείων, το γενικό διάνυσμα μετατόπισης δύναμης, είναι αντίστοιχα:

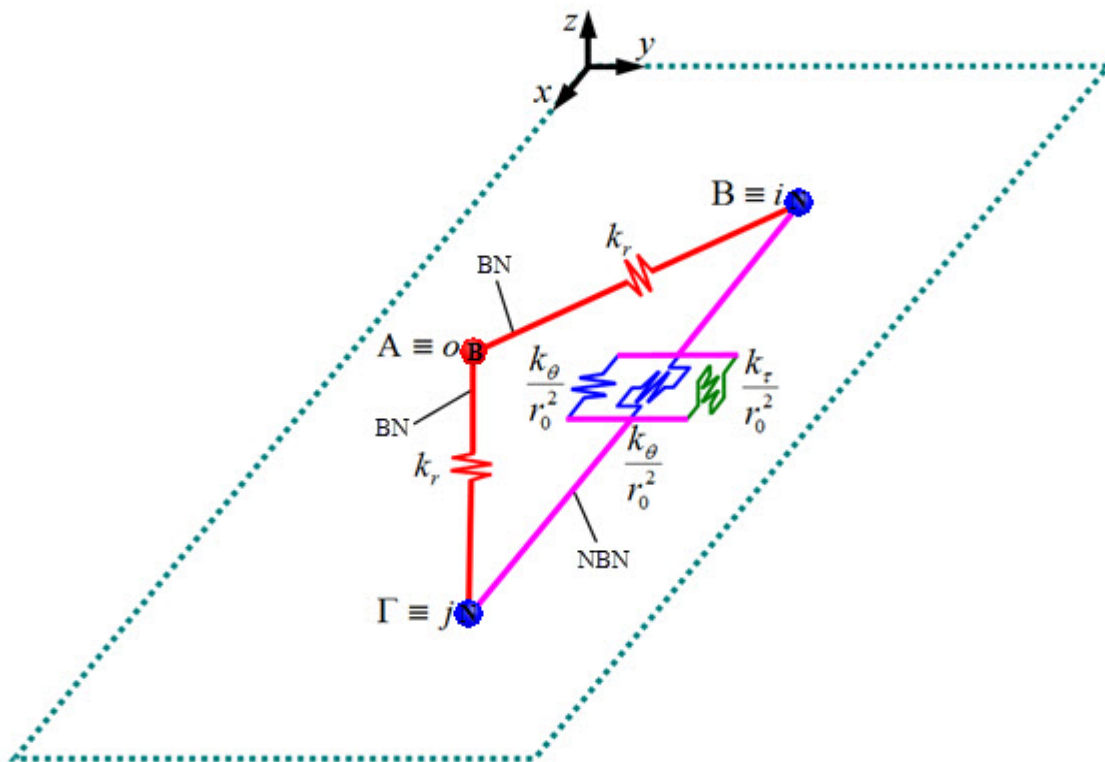
$$\mathbf{K}_{xyz}^{BN} = \begin{bmatrix} \mathbf{k}_{xyz}^{BN} & -\mathbf{k}_{xyz}^{BN} \\ -\mathbf{k}_{xyz}^{BN} & \mathbf{k}_{xyz}^{BN} \end{bmatrix} \quad (6.20)$$

$$\mathbf{u}_{xyz}^e = \left[ u_{\bar{x}o}^e \quad u_{\bar{y}o}^e \quad u_{\bar{z}o}^e \quad u_{\bar{x}i}^e \quad u_{\bar{y}i}^e \quad u_{\bar{z}i}^e \right]^T \quad (6.21)$$

$$\mathbf{f}_{xyz}^e = \left[ f_{\bar{x}o}^e \quad f_{\bar{y}o}^e \quad f_{\bar{z}o}^e \quad f_{\bar{x}i}^e \quad f_{\bar{y}i}^e \quad f_{\bar{z}i}^e \right]^T \quad (6.22)$$

όπου  $o$  και  $i$  είναι οι δύο κόμβοι των στοιχείων  $BN$  και:

$$\mathbf{k}_{xyz}^{BN} = \begin{bmatrix} k_r & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6.23)$$



**Σχήμα 6.6** Προσομοίωση διατομικών αλληλεπιδράσεων ατόμων BN με πεπερασμένα στοιχεία ελατηρίου(Spring Elements).

Δεύτερον, στοιχεία ελατηρίου, που εφεξής ονομάζονται  $NBN$ , χρησιμοποιήθηκαν για την προσομοίωση της κάμψης της γωνίας των δεσμών αλλά και των στρεπτικών αλληλεπιδράσεων (Σχήμα 6.6). Η εξίσωση ισοροπίας των συγκεκριμένων στοιχείων στο τοπικό τους σύστημα συντεταγμένων  $(\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$  είναι:

$$\mathbf{K}_{\hat{x}\hat{y}\hat{z}}^{NBN} \mathbf{u}_{\hat{x}\hat{y}\hat{z}}^{NBN} = \mathbf{f}_{\hat{x}\hat{y}\hat{z}}^{NBN} \quad (6.24)$$

Όπου το  $\mathbf{K}_{\hat{x}\hat{y}\hat{z}}^{NBN}$  υποδηλώνει το μητρώο δυσκαμψίας των στοιχείων, το  $\mathbf{u}_{\hat{x}\hat{y}\hat{z}}^{NBN}$  το γενικό διάνυσμα μετατόπισης και το  $\mathbf{f}_{\hat{x}\hat{y}\hat{z}}^{NBN}$  το γενικό διάνυσμα δύναμης των στοιχείων. Το μητρώο δυσκαμψίας των στοιχείων, το διάνυσμα μετατόπισης και δύναμης, είναι αντίστοιχα:

$$\mathbf{K}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{NBN} = \begin{bmatrix} \mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{NBN} & -\mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{NBN} \\ -\mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{NBN} & \mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{NBN} \end{bmatrix} \quad (6.25)$$

$$\mathbf{u}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{NBN} = \left[ u_{\bar{x}i}^{NBN} \quad u_{\bar{y}i}^{NBN} \quad u_{\bar{z}i}^{NBN} \quad u_{\bar{x}j}^{NBN} \quad u_{\bar{y}j}^{NBN} \quad u_{\bar{z}j}^{NBN} \right]^T \quad (6.26)$$

$$\mathbf{f}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{NBN} = \left[ f_{\bar{x}i}^{NBN} \quad f_{\bar{y}i}^{NBN} \quad f_{\bar{z}i}^{NBN} \quad f_{\bar{x}j}^{NBN} \quad f_{\bar{y}j}^{NBN} \quad f_{\bar{z}j}^{NBN} \right]^T \quad (6.27)$$

όπου  $i$  και  $j$  είναι οι δύο κόμβοι των στοιχείων  $NBN$  και:

$$\mathbf{k}_{\bar{x}\bar{y}\bar{z}}^{NBN} = \frac{1}{r_0^2} \begin{bmatrix} k_\theta & 0 & 0 \\ 0 & k_\theta & 0 \\ 0 & 0 & k_\tau \end{bmatrix} \quad (6.28)$$

## 6.4 ΓΡΑΜΜΙΚΗ ΚΑΙ ΣΤΑΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ

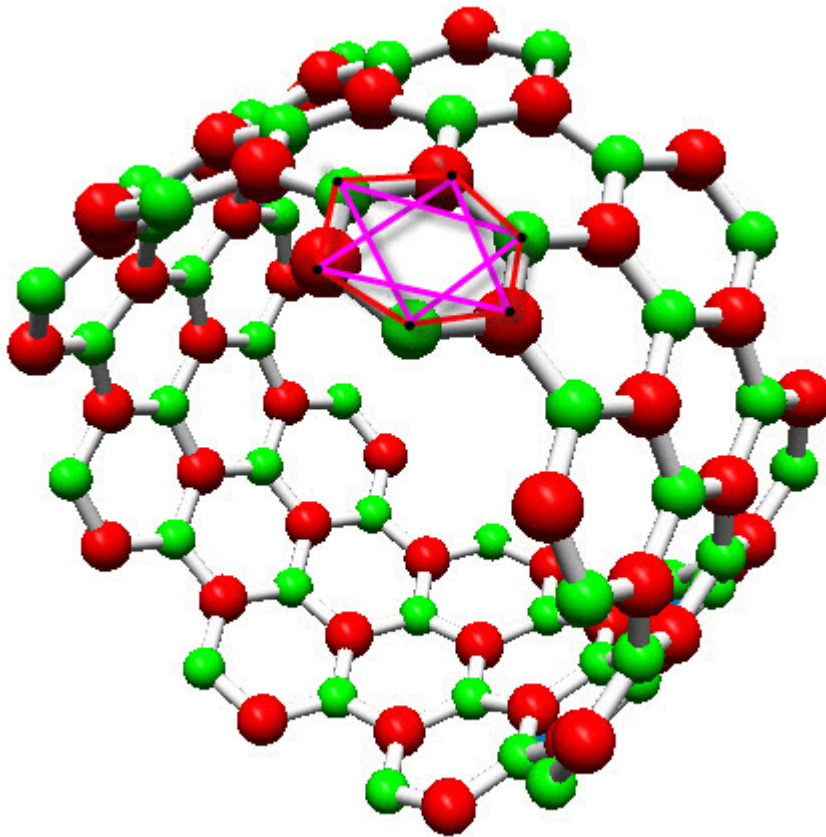
Προκειμένου να προβλέψουμε τις ελαστικές μηχανικές ιδιότητες των Νανοσωλήνων BN, θα πρέπει να γίνει μία γραμμική στατική ανάλυση. Έτσι, το σύστημα των γραμμικών εξισώσεων κατασκευάζεται χρησιμοποιώντας τις μητρικές Εξισώσεις ισορροπίας (6.19) και (6.24) όλων των στοιχείων  $BN$  και  $NBN$  ή  $BNB$  του σωλήνα εκφρασμένες στο παγκόσμιο σύστημα συντεταγμένων  $(x,y,z)$ . Έπειτα όλες οι γραμμικές εξισώσεις συναρμολογούνται σύμφωνα με τις απαιτήσεις κομβικής συμβατότητας ώστε να προκύψει το παρακάτω σύστημα των εξισώσεων:

$$\mathbf{KU} = \mathbf{F} \quad (6.29)$$

όπου  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{U}$  και  $\mathbf{F}$  είναι το συναρμολογημένο γενικό μητρώο δυσκαμψίας, το διάνυσμα μετατόπισης και το διάνυσμα δύναμης του νιτριδίου του βορίου, αντίστοιχα. Η Εξίσωση (6.29) μπορεί να λυθεί μέσω τυπικών αριθμητικών

τεχνικών απαλοιφής (Gauss,LU decomposition κ.α.) λαμβάνοντας υπ' όψιν της επιβαλλόμενες συνοριακές συνθήκες.

Τέλος είναι σημαντικό εδώ να δείξουμε την εφαρμογή αυτής της μεθόδου πάνω σε νανοςωλήνα BN η οποία φαίνεται καθαρά στο Σχήμα 6.7



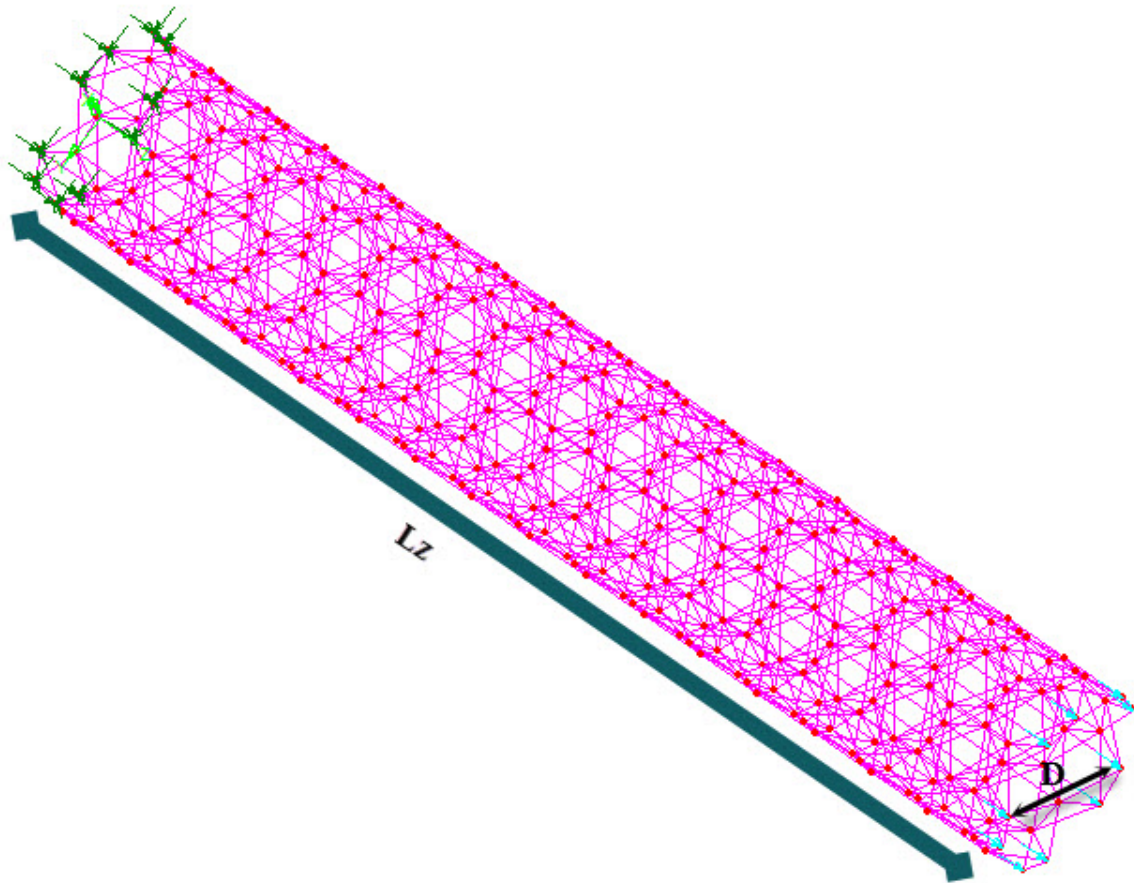
**Σχήμα 6.7** Μία άλλη όψη της προσομοίωσης διατομικών αλληλεπιδράσεων των ατόμων BN στο επίπεδο του νανοςωλήνα με global συντεταγμένες έχοντας ως βάση το Σχήμα 6.6 με πεπερασμένα στοιχεία ελατηρίου

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7

### ΠΑΡΟΥΣΙΑΣΗ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΩΝ

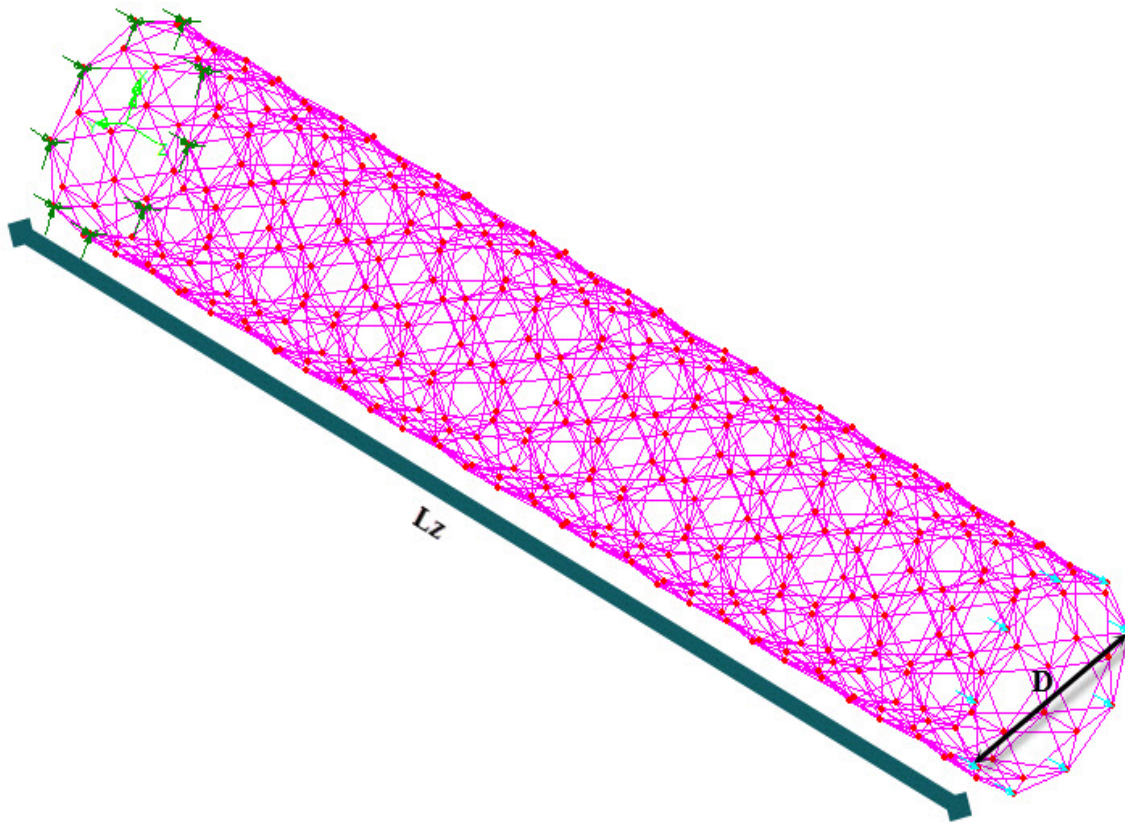
Στα πλαίσια της παρούσας πτυχιακής αναπτύχθηκαν πολυάριθμα μοντέλα Νανοσωλήνων Νιτριδίου του βορίου zigzag και armchair διαφορετικού μεγέθους σύμφωνα με την προτεινόμενη μέθοδο δομικής μηχανικής η οποία βασίζεται στη χρήση στοιχείων ελατηρίου (spring elements). Συγκεκριμένα εξετάσθηκαν οι μονότοιχοι νανοσωλήνες (5,0), (7,0), (9,0), (14,0), (21,0) τύπου zigzag και οι (3,3), (4,4), (5,5), (8,8) και (12,12) τύπου armchair, παραμετρικά για διαφορετικούς λόγους  $L_z/D$  (μήκος κατά την  $Z$  διεύθυνση / διάμετρο). Οι γεωμετρία των μοντέλων καθορίστηκε σύμφωνα με ένα  $(x, y, z)$  global σύστημα συντεταγμένων. Το  $xy$  επίπεδο του συστήματος επιλέχθηκε έτσι ώστε να ταυτίζεται με το ένα άκρο του σωλήνα (αριστερό). Η αρχή του συστήματος συντεταγμένων τοποθετήθηκε στο κέντρο της περιφέρειας των νανοσωλήνων, ενώ ο  $z$  άξονας επιλέχθηκε έτσι ώστε να ταυτίζεται με την αξονική ενεργή διεύθυνση των νανοσωλήνων. Για όλες τις περιπτώσεις που δοκιμάστηκαν, όλοι οι βαθμοί ελευθερίας των κόμβων που ανήκουν στο αριστερό άκρο της πάκτωσης του σωλήνα BN δεσμεύθηκαν πλήρως ενώ στους κόμβους του δεξιού άκρου εφαρμόσθηκαν διάφορες συνθήκες φόρτισης ανάλογα με την προς μελέτη ιδιότητα. Όλοι οι ανωτέρω σωλήνες zigzag και armchair δοκιμάστηκαν συγκεκριμένα για λόγους  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$  υπό διαφορετικές φορτίσεις έτσι ώστε να προβλεφθούν αριθμητικά ιδιότητες όπως : το μέτρο ελαστικότητας, το μέτρο διάτμησης και ο λόγος Poisson,.

Στα παρακάτω Σχήματα : (7.1) για Armchair και (7.2) για Zigzag φαίνονται καθαρά και οι συνοριακές συνθήκες των αριθμητικών μοντέλων ,αριστερά στην πάκτωση και δεξιά το ανάλογο φορτίο.



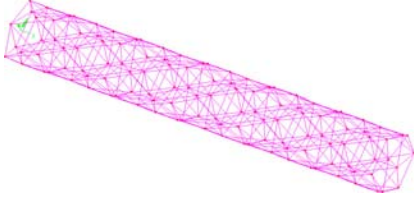
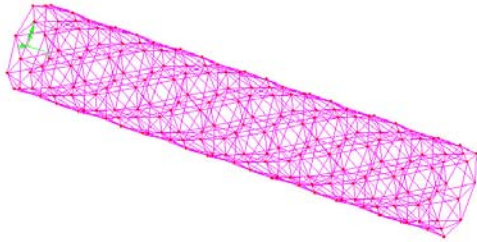
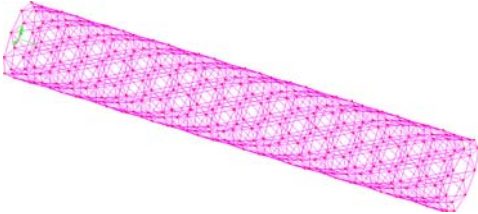
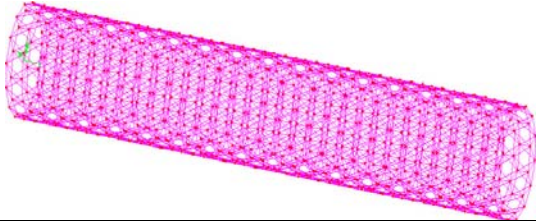
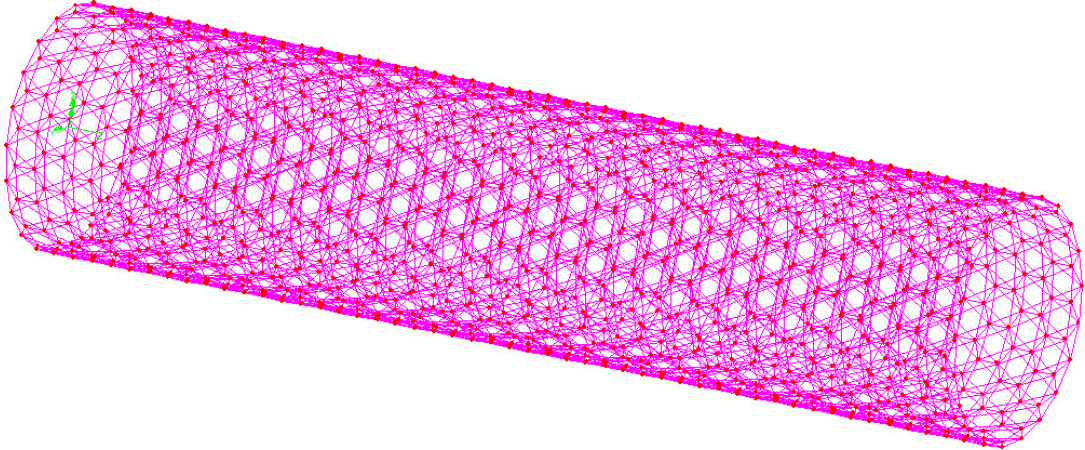
**Σχήμα 7.1:** Μοντέλο μονότοιχου νανωσολήνα BN Armchair (ορίζεται το μήκος

$L_z$  και η διάμετρος  $D$ )



**Σχήμα 7.2:** Μοντέλο μονότοιχου νανოსωλήνα BN Zigzag (ορίζεται το μήκος

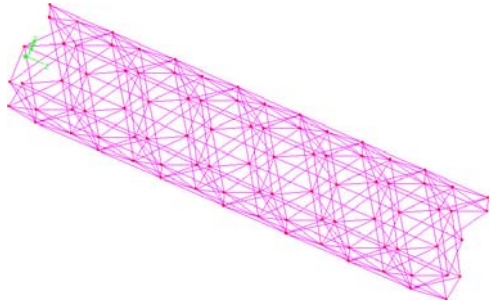
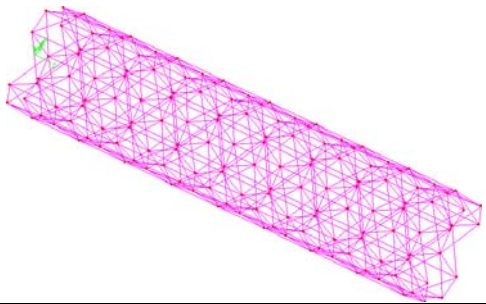
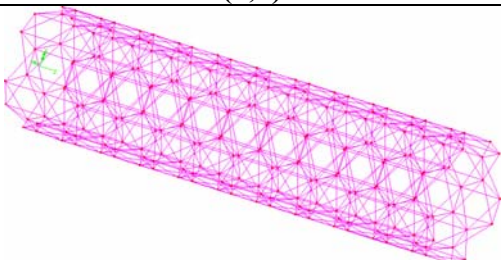
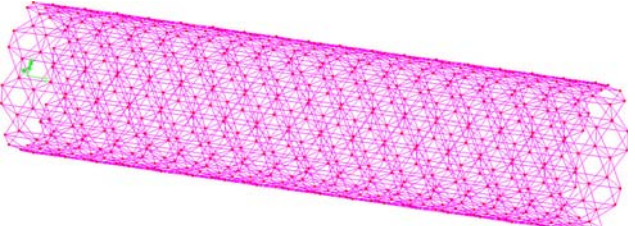
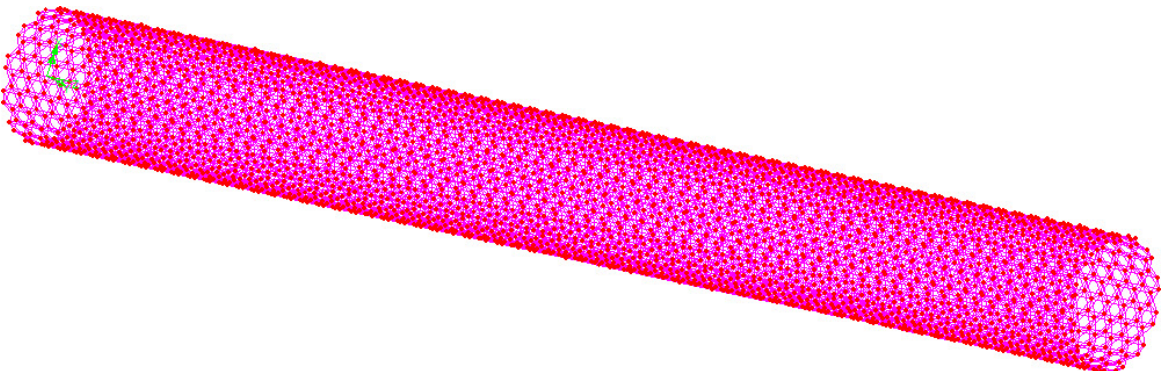
$L_z$  και η διάμετρος D)

<b>Μοντέλα zigzag</b>	
	
<b>(5,0)</b>	<b>(7,0)</b>
	
<b>(9,0)</b>	<b>(14,0)</b>
	
<b>(21,0)</b>	

**Πίνακας 7.1:** Απεικόνιση των zigzag νανοσωλήνων BN που χρησιμοποιήθηκαν

για  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$



<b>Μοντέλα Armchair</b>	
	
<b>(3,3)</b>	<b>(4,4)</b>
	
<b>(5,5)</b>	<b>(8,8)</b>
	
<b>(12,12)</b>	

**Πίνακας 7.2:** Απεικόνιση των Armchair νανοσωλήνων BN που χρησιμοποιήθηκαν για  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$

## 7.1 ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΕΚΤΙΜΗΣΗ ΤΩΝ ΕΛΑΣΤΙΚΩΝ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ

Για τον υπολογισμό του ενεργού μέτρου ελαστικότητας των νανοσωλήνων BN, εφαρμόστηκε μία ομοιόμορφη κομβική μετατόπιση  $\Delta u_z$  κατά μήκος του  $z$  άξονα σε όλους τους κόμβους του δεξιού άκρου όπως φαίνεται και στα Σχήματα (7.1), (7.2)

$$E_z = \frac{\sigma_z}{\varepsilon_z} = \frac{\sum_{i=1}^q {}^i f_z}{\frac{\Delta u_z}{L_z}} \quad (7.1)$$

όπου  ${}^i f_z$  είναι η αντίδραση κατά μήκος του άξονα  $z$  του κόμβου  $i$  και  $q$  ο συνολικός αριθμός των κόμβων που ανήκουν στο αριστερό πακτωμένο άκρο του νανοσωλήνα BN

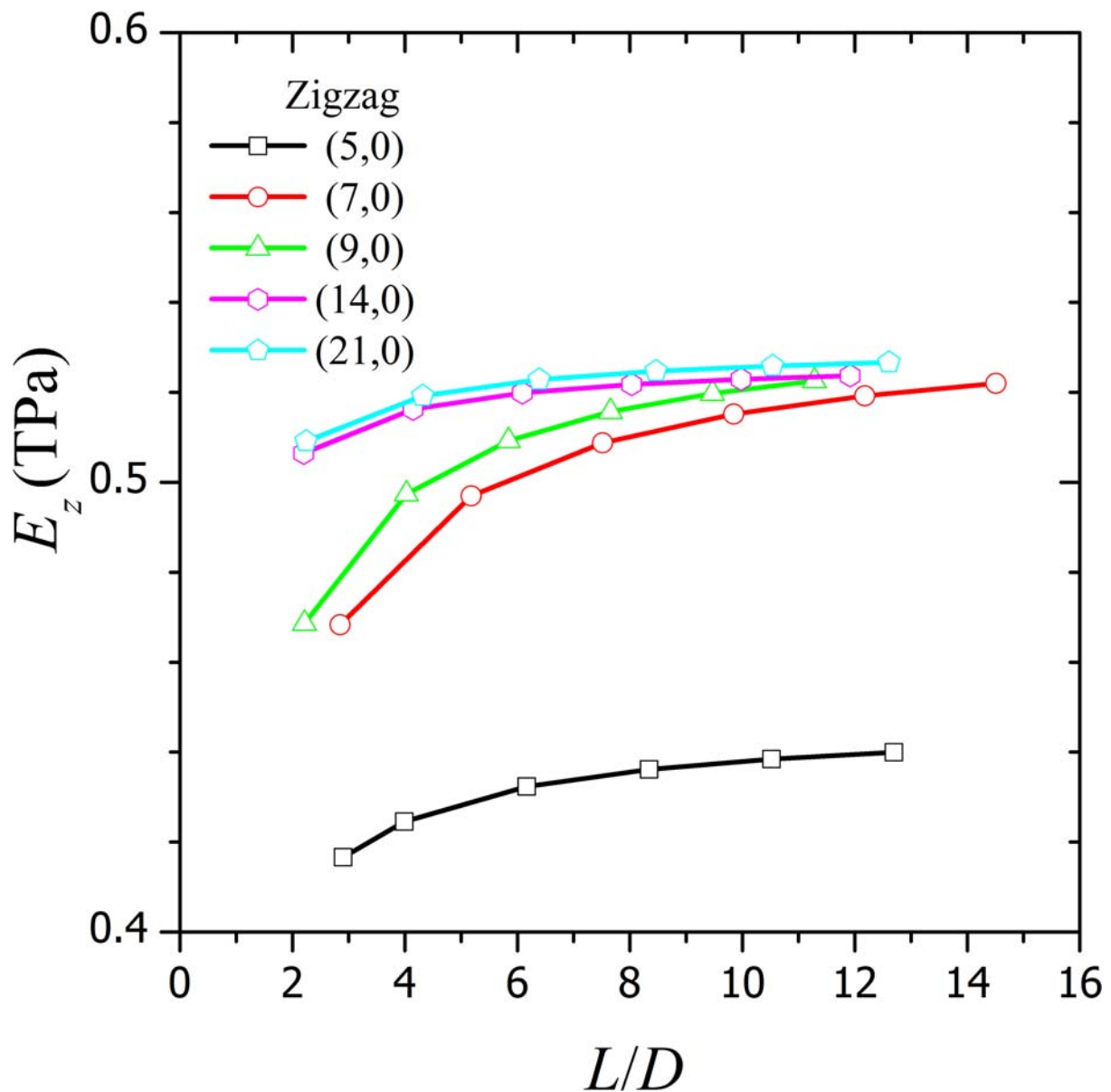
Το Σχήμα 7.3α παρουσιάζει την μεταβολή του μέτρου ελαστικότητας  $E_z$  στην  $z$  διεύθυνση των zigzag νανοσωλήνων BN σε σχέση με τον λόγο  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$ . Για μικρές τιμές του  $\frac{L_z}{D}$  βλέπουμε τοπικά ότι έχουμε αυξανόμενη τάση του  $E_z$ , αλλά οδεύοντας προς μεγαλύτερες τιμές  $\frac{L_z}{D}$  παρατηρείται σύγκλιση των  $E_z$  σε μια σταθερή τιμή. Τα ίδια ισχύουν και για νανοσωλήνες BN τύπου armchair με την μόνη διαφορά ότι για τις περιπτώσεις των νανοσωλήνων (8,8) και (12,12) στο Σχήμα 7.3β παρατηρείται πτώση του  $E_z$  τοπικά όσο αυξάνεται το  $\frac{L_z}{D}$  ενώ αργότερα συγκλίνει και αυτό σε μια σταθερή τιμή κοντά σε αυτήν των υπολοίπων. Επίσης από τα παρακάτω σχήματα συμπεραίνονται ότι για μικρού μεγέθους σωλήνες όπως (5,0) έχουμε μικρά  $E_z$  και όσο το μέγεθος τους αυξάνεται και το  $E_z$ .

**ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΑ ( $E$ ) ΓΙΑ Κ :**

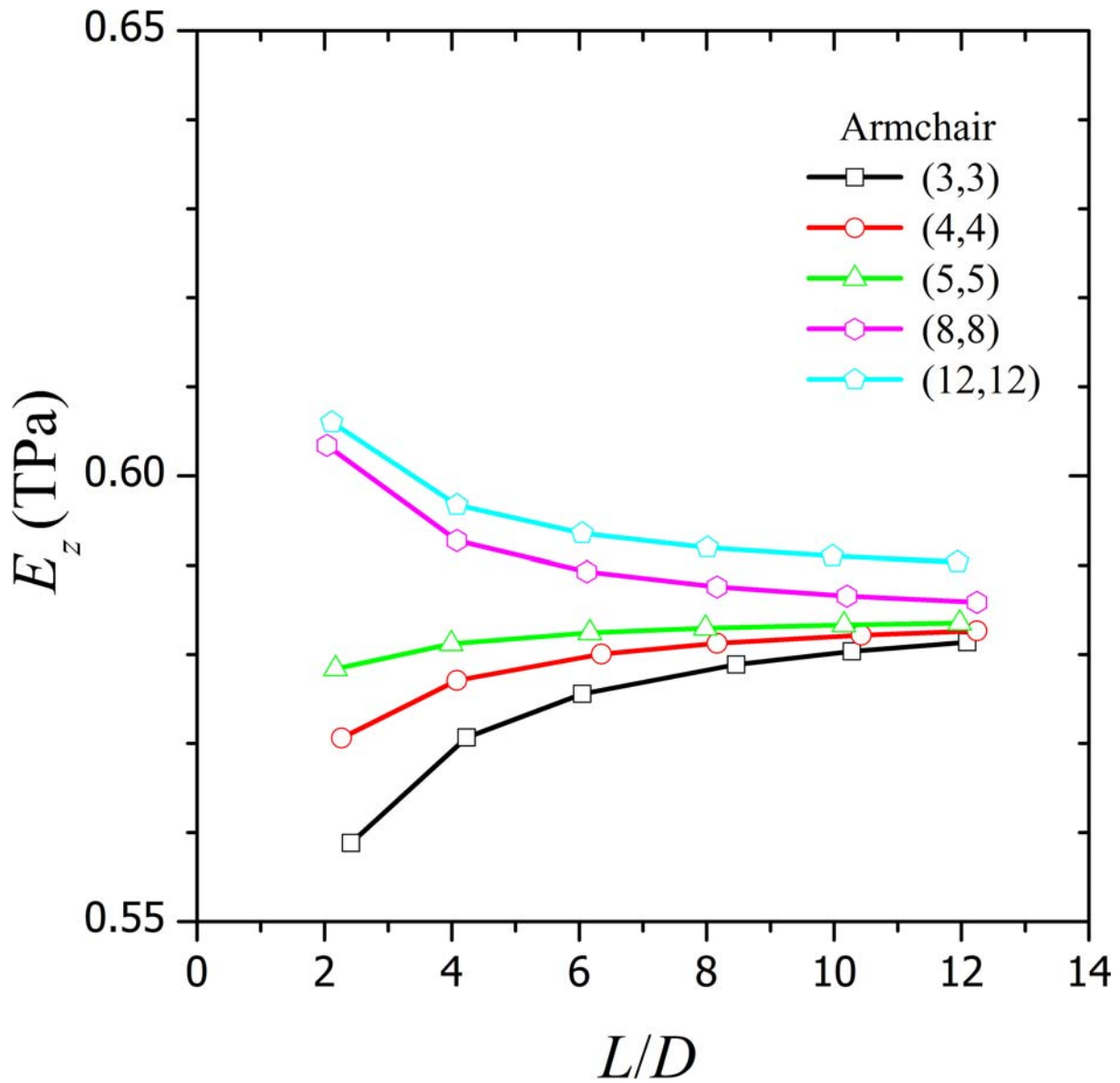
$$k_r = 486,5 \text{ nN nm}^{-1},$$

$$k_\theta = 33,065 \text{ nN nm rad}^{-2} \text{ και}$$

$$k_\tau = 29,75 \text{ nN nm rad}^{-2}$$



**Σχήμα 7.3α:** Μεταβολή του μέτρου ελαστικότητας στην  $z$  διεύθυνση zigzag νανοσωλήνων BN σε σχέση με τον λόγο  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$



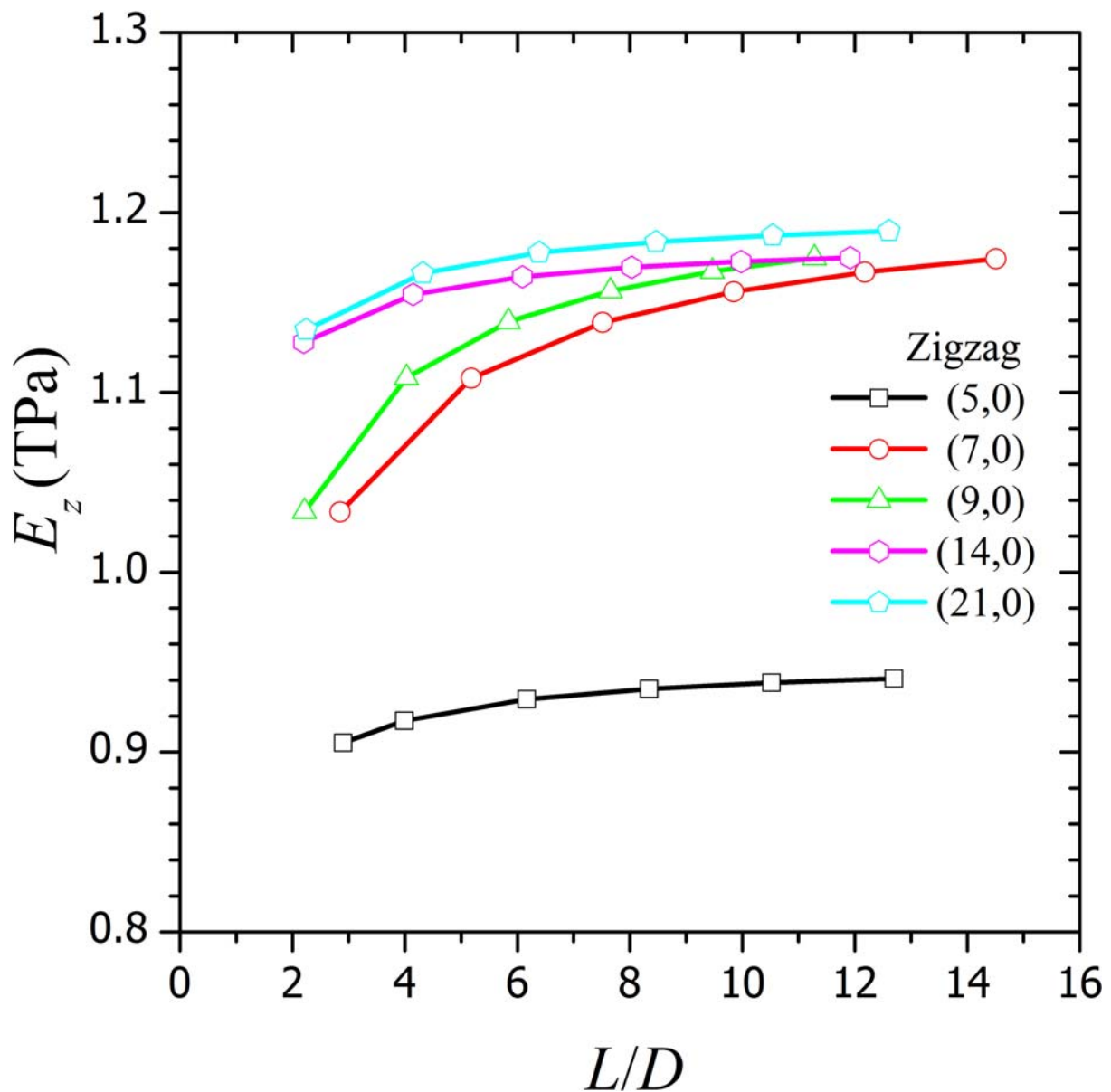
**Σχήμα 7.3β:** Μεταβολή του μέτρου ελαστικότητας στην  $z$  διεύθυνση Armchair νανοσωλήνων BN σε σχέση με τον λόγο  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$

**ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΑ ( $E$ ) ΓΙΑ Κ :**

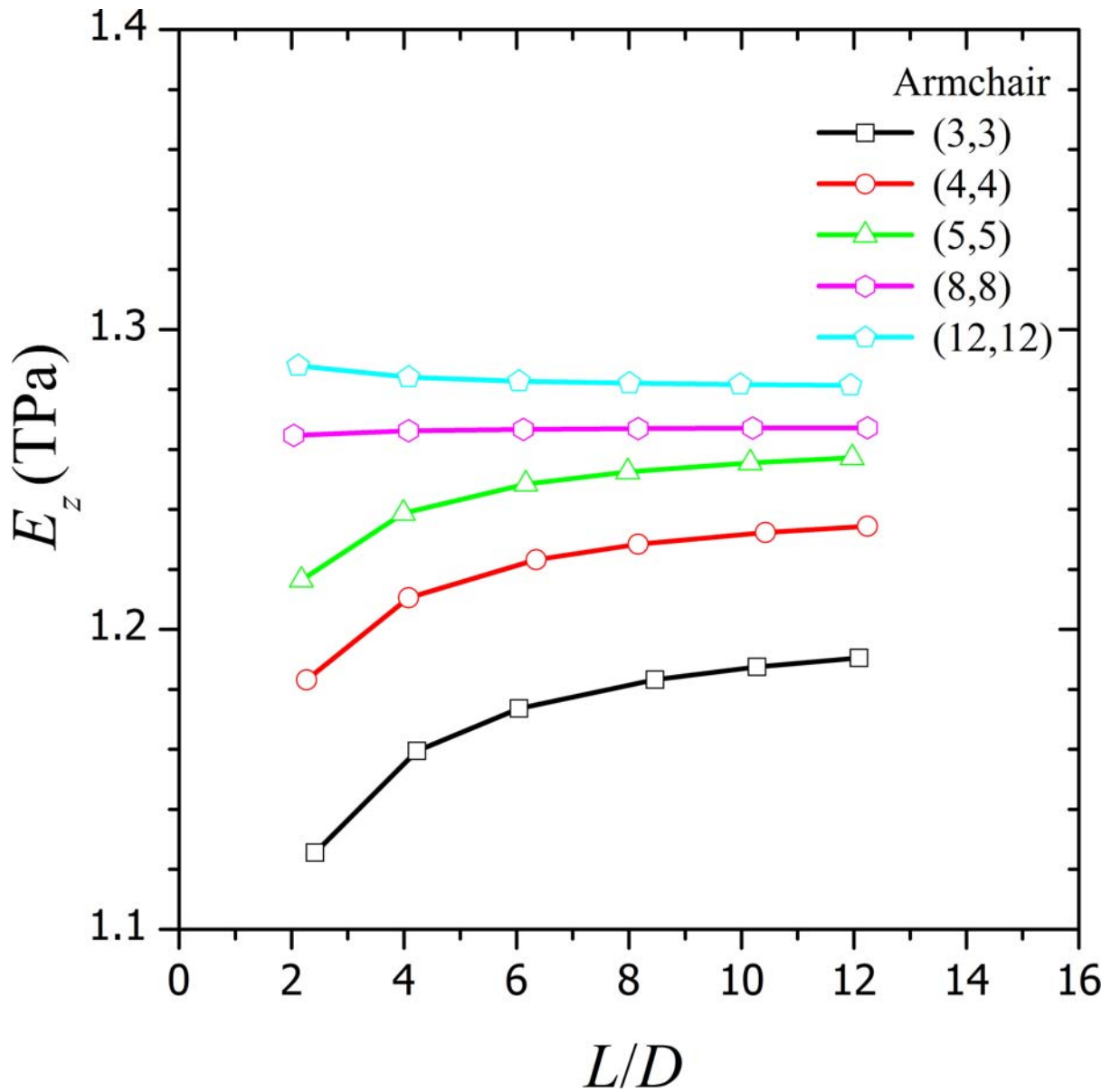
$$k_r = 675,7 \text{ nN nm}^{-1},$$

$$k_\theta = 82,75 \text{ nN nm rad}^{-2}$$

$$k_\tau = 29,75 \text{ nN nm rad}^{-2}$$



**Σχήμα 7.3γ:** Μεταβολή του μέτρου ελαστικότητας στην  $z$  διεύθυνση zigzag νανοσωλήνων BN σε σχέση με τον λόγο  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$  για Κ από [35]



**Σχήμα 7.3δ:** Μεταβολή του μέτρου ελαστικότητας στην  $z$  διεύθυνση zigzag νεροσωλήνων BN σε σχέση με τον λόγο  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$  για διαφορετικά  $K$  από [35].

Με βάση τις παραπάνω συνοριακές συνθήκες, ο λόγος Poisson  $\nu_{rz}$  υπολογίστηκε ως:

$$\nu_{rz} = -\frac{E_x}{E_z} = \frac{\frac{\Delta R}{R}}{\frac{\Delta u_z}{l_z}} \quad (7.2)$$

όπου  $\Delta R$  είναι η μείωση της ακτίνας κατά την  $D_r$  διεύθυνση

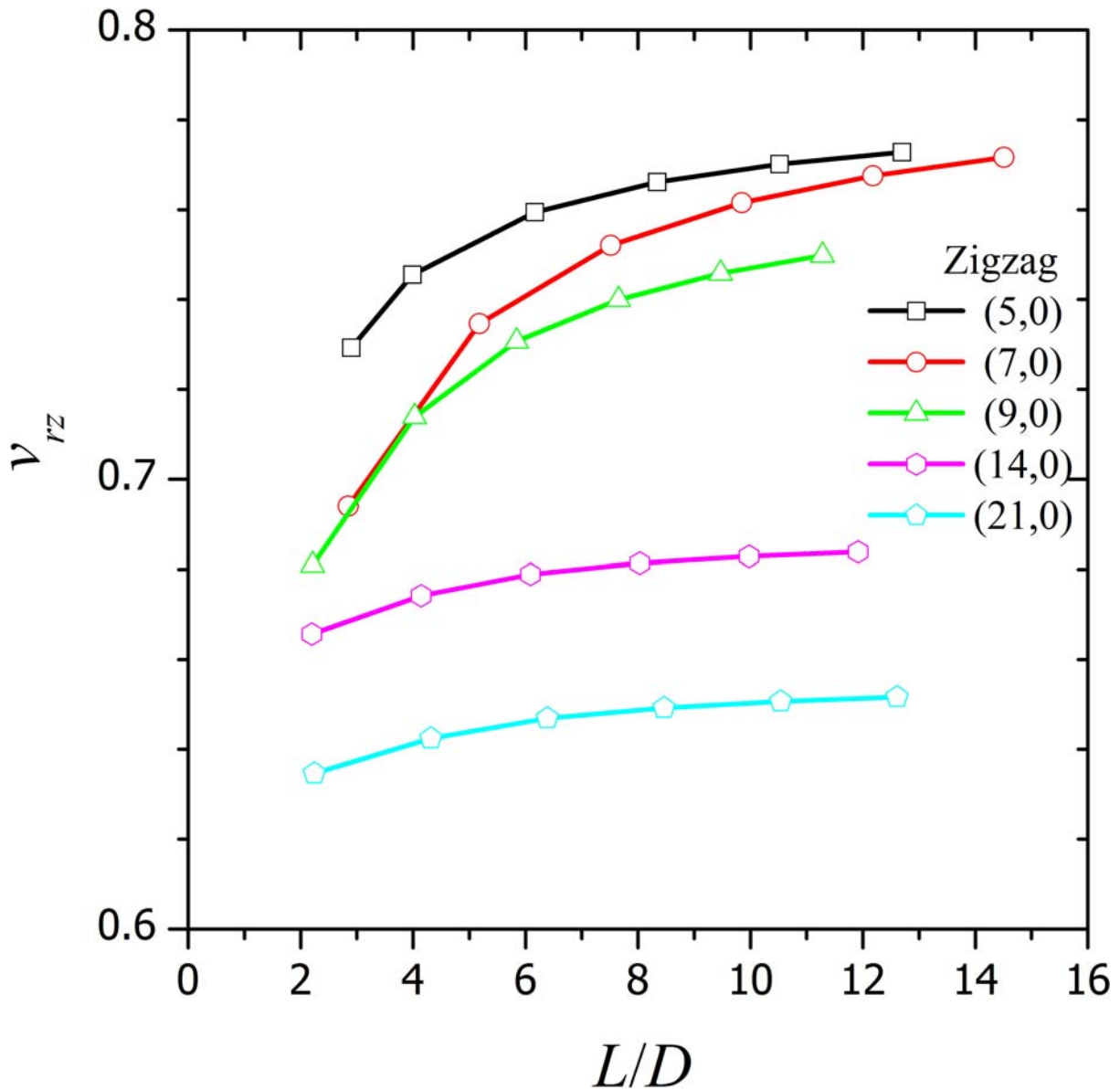
Στο Σχήμα 7.4α παρουσιάζεται η μεταβολή του λόγου Poisson νανοσωλήνων BN τύπου zigzag σε σχέση με τον λόγο  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$ . Για μικρές τιμές του  $\frac{L_z}{D}$  βλέπουμε τοπικά ότι έχουμε αυξανόμενη τάση του  $\nu_{rz}$ , αλλά οδεύοντας προς μεγαλύτερες τιμές  $\frac{L_z}{D}$  παρατηρείται σύγκλιση των  $\nu_{rz}$  σε μια σταθερή τιμή. Τα ίδια ισχύουν και για νανοσωλήνες BN τύπου armchair με την μόνη διαφορά ότι για τις περιπτώσεις των νανοσωλήνων (8,8) και (12,12) στο Σχήμα 7.4β παρατηρείται πτώση του  $\nu_{rz}$  τοπικά όσο αυξάνεται το  $\frac{L_z}{D}$  ενώ αργότερα συγκλίνει και αυτό σε μια σταθερή τιμή κοντά σε αυτήν των υπολοίπων. Επίσης από τα παρακάτω σχήματα συμπεραίνονται ότι για μικρού μεγέθους σωλήνες όπως (5,0) έχουμε μικρότερο μέτρο  $\nu_{rz}$  και όσο το μέγεθος αυτών αυξάνεται και το μέτρο του  $\nu_{rz}$  αυξάνεται επίσης.

**ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΑ ( $\nu_{rz}$ ) ΓΙΑ Κ :**

$$k_r = 486,5 \text{ nN nm}^{-1},$$

$$k_\theta = 33,065 \text{ nN nm rad}^{-2} \text{ και}$$

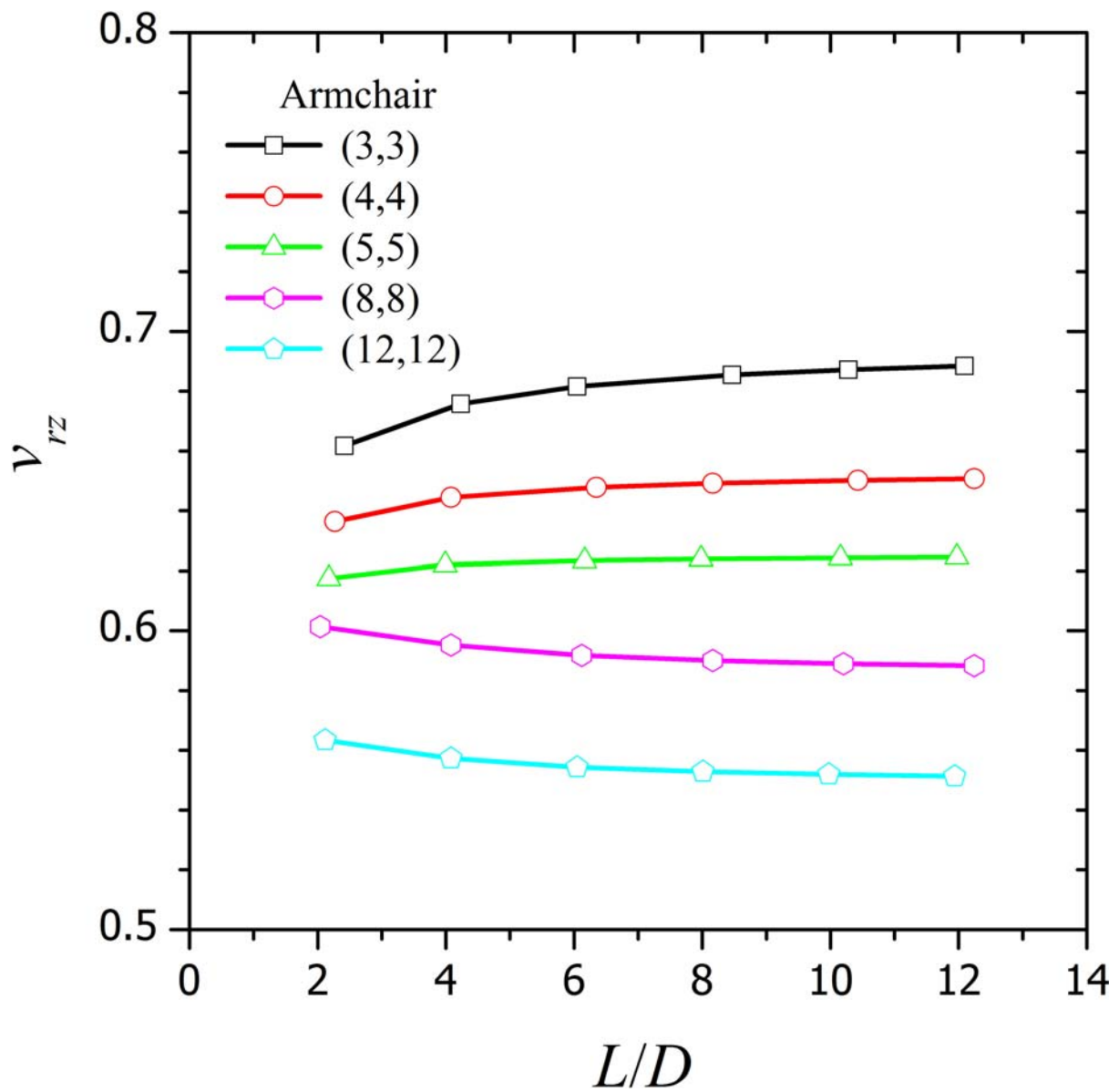
$$k_\tau = 29,75 \text{ nN nm rad}^{-2}$$



**Σχήμα 7.4α:** Μεταβολή του λόγου Poisson νανοσωλήνων BN τύπου zigzag σε

σχέση σε σχέση με τον λόγο  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$





**Σχήμα 7.4β:** Μεταβολή του λόγου Poisson νανοσωλήνων BN τύπου Armchair

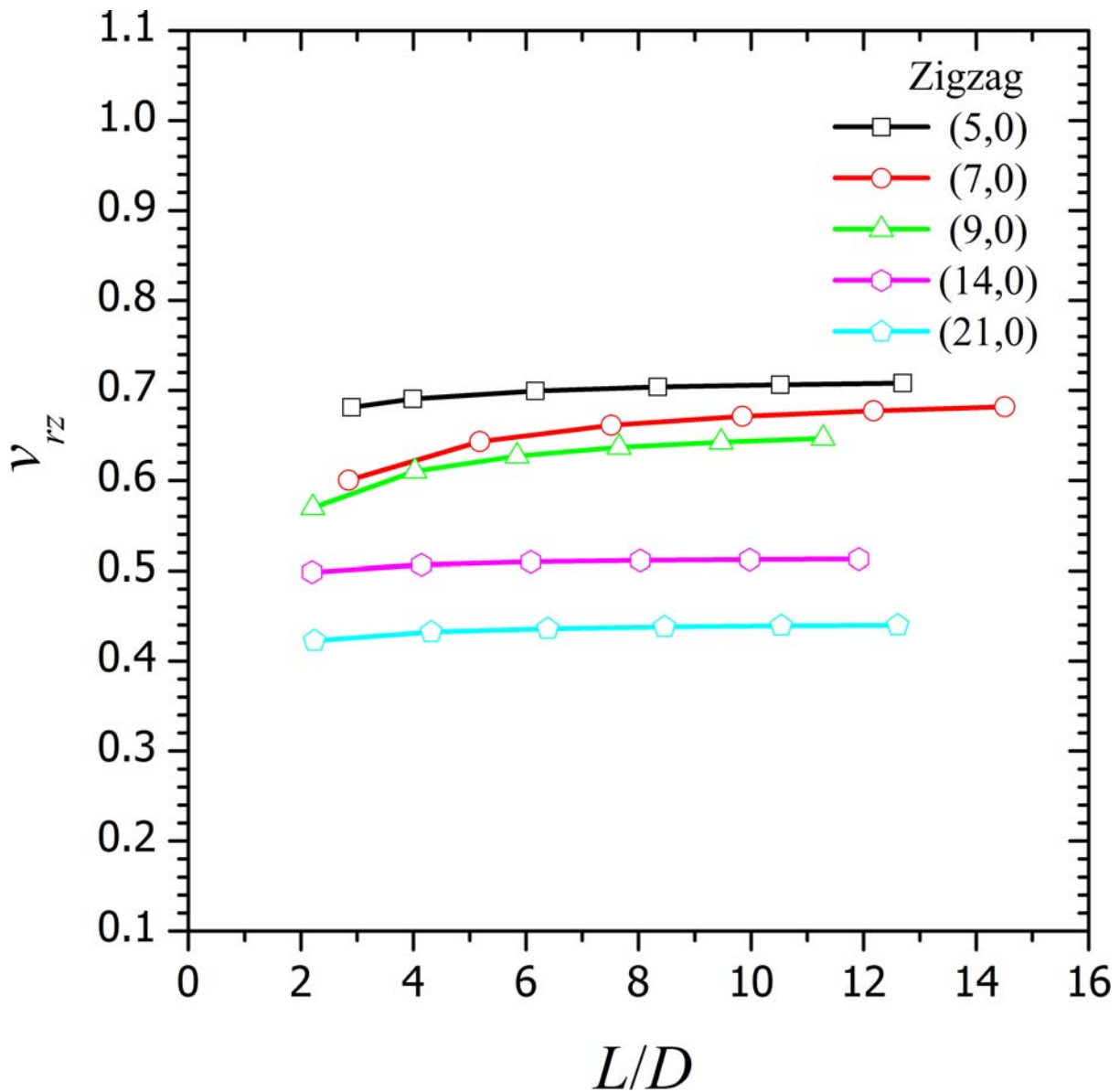
σε σχέση σε σχέση με τον λόγο  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$

**ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΑ ( $\nu_{rz}$ ) ΓΙΑ Κ :**

$$k_r = 675,7 \text{ nN nm}^{-1},$$

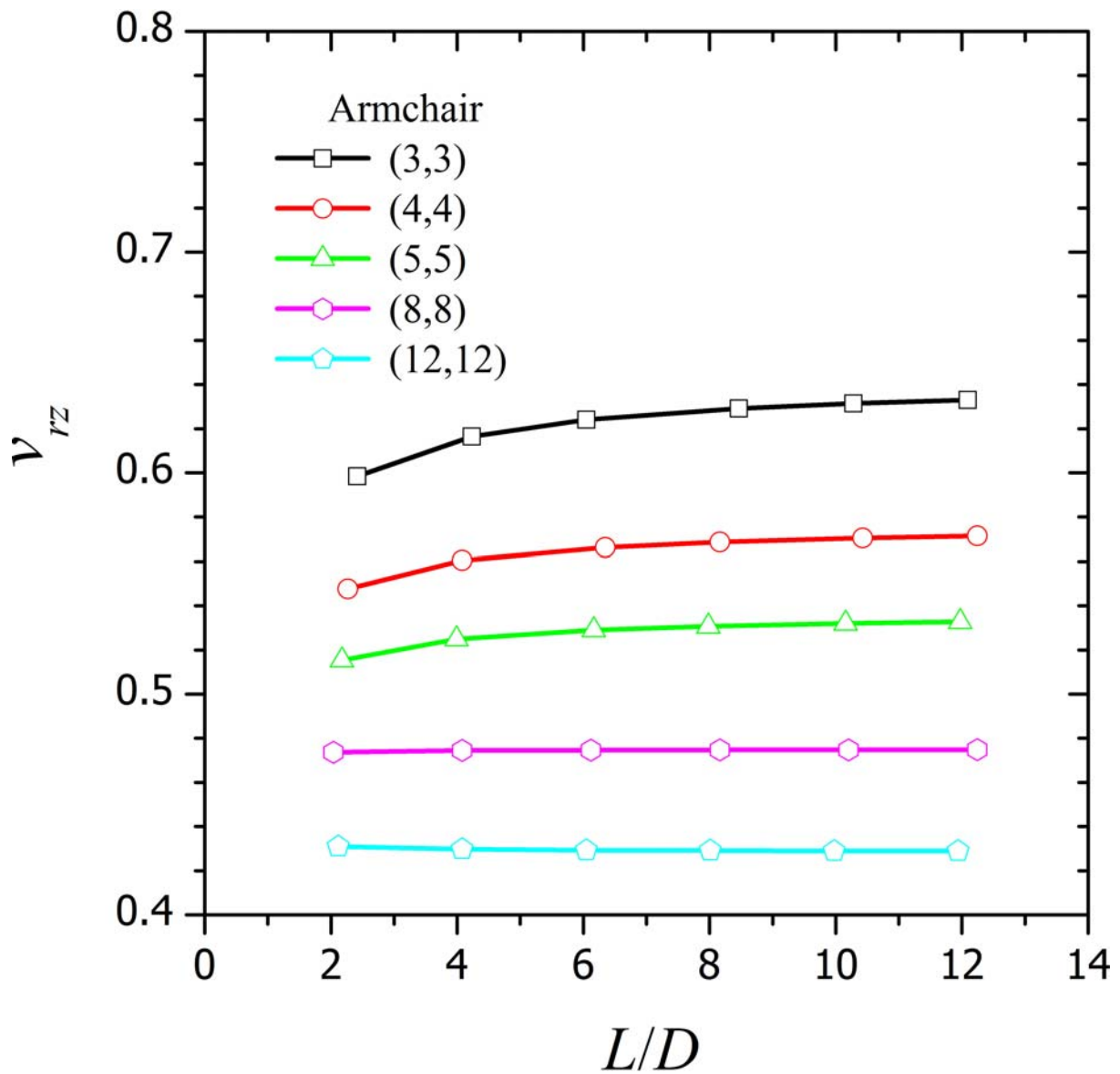
$$k_\theta = 82,75 \text{ nN nm rad}^{-2}$$

$$k_\tau = 29,75 \text{ nN nm rad}^{-2}$$



**Σχήμα 7.4γ:** Μεταβολή του λόγου Poisson νανοσωλήνων BN τύπου zigzag σε

σχέση σε σχέση με τον λόγο  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$  για διαφορετικά Κ



**Σχήμα 7.4δ:** Μεταβολή του λόγου Poisson νανοσωλήνων BN τύπου Armchair

σε σχέση με τον λόγο  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$  για διαφορετικά  $K$

Προκειμένου να υπολογίσουμε το μέτρο διάτμησης  $G_z$  των νανοσωλήνων BN ,αντλήθηκαν τα στοιχεία από τις προβλέψεις των γραμμικών ελαστικών μοντέλων για τον λόγο Poisson και εφαρμόστηκαν στην παρακάτω γνωστή εξίσωση :

$$G_z = \frac{E_z}{2(1 + \nu_{rz})} \quad (7.3)$$

ή από την σχέση

$$G_z = \frac{M_z L}{\theta_z J} = \frac{q f_z R L_z}{\arctan\left(\frac{\Delta u_z}{R}\right) \frac{\pi}{2} \left( \left(R + \frac{t}{2}\right)^4 - \left(R - \frac{t}{2}\right)^4 \right)} \quad (7.4)$$

Όπου  $E_z$  έχω το μέτρο ελαστικότητας κατά την  $z$  διεύθυνση και όπου  $\nu_{rz}$  τον λόγο Poisson από τις ανωτέρω προβλέψεις.

Στην παρούσα μελέτη έγινε χρήση και των δύο σχέσεων αλλά τα αποτελέσματα και τα διαγράμματα είναι βασισμένα στην σχέση (7.3)

Στο σχήμα 7.5α: παρουσιάζεται η μεταβολή του μέτρου διάτμησης  $G_z$  νανοσωλήνων BN τύπου zigzag σε σχέση σε σχέση με τον λόγο  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$ . Για μικρές τιμές του  $\frac{L_z}{D}$  βλέπουμε τοπικά ότι έχουμε αυξανόμενη τάση του  $G_z$ , αλλά οδεύοντας προς μεγαλύτερες τιμές  $\frac{L_z}{D}$  παρατηρείται σύγκλιση των  $G_z$  σε μια σταθερή τιμή. Τα ίδια ισχύουν και για τους νανοσωλήνες BN τύπου armchair με την μόνη διαφορά ότι για τις περιπτώσεις των νανοσωλήνων (8,8) και (12,12) στο Σχήμα 7.5β παρατηρείται

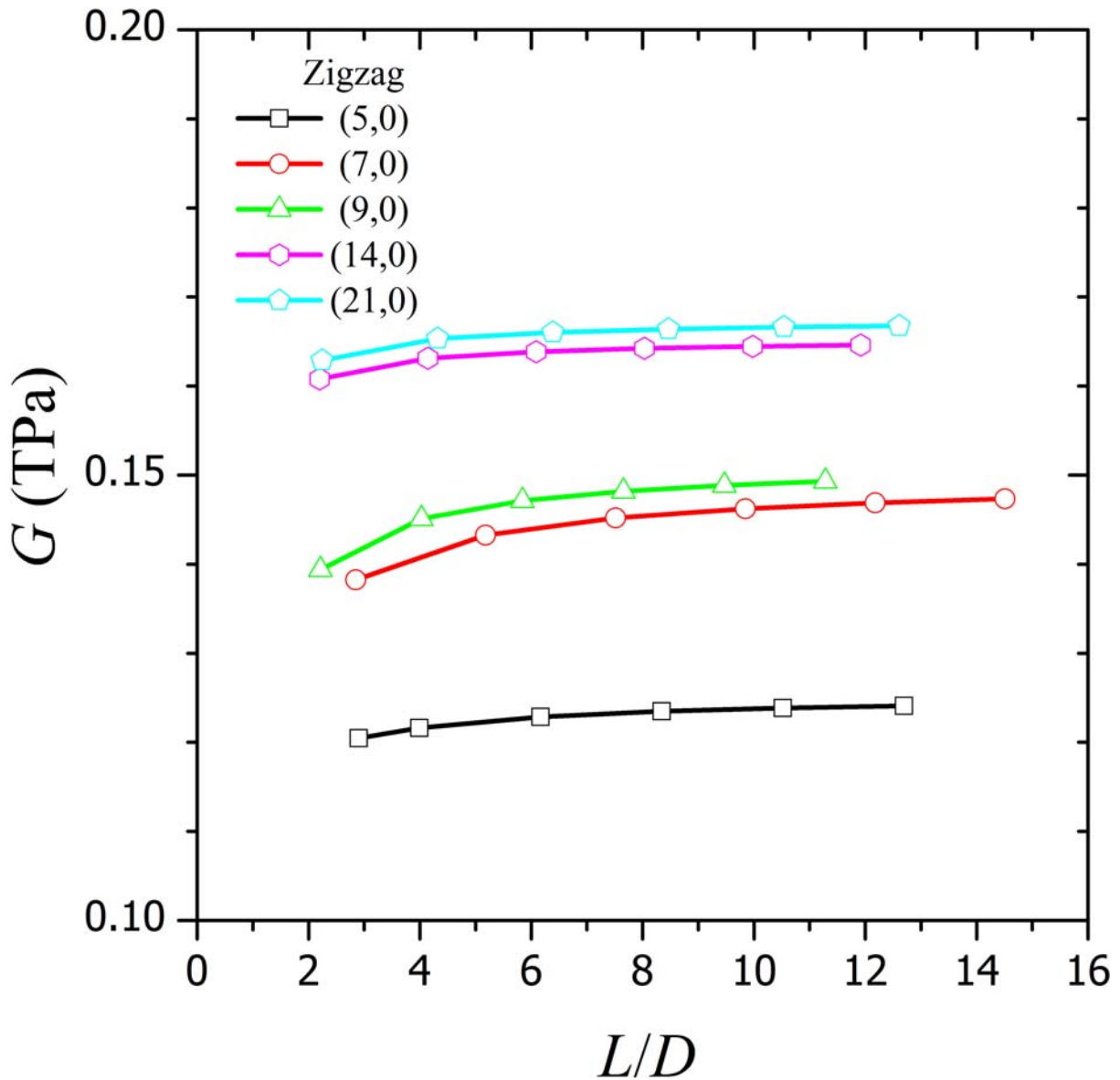
πτώση του  $G_z$  τοπικά όσο αυξάνεται το  $\frac{L_z}{D}$  ενώ αργότερα συγκλίνει και αυτό σε μια σταθερή τιμή κοντά σε αυτήν των υπολοίπων. Επίσης από τα παρακάτω σχήματα συμπεραίνομαι ότι για μικρού μεγέθους σωλήνες όπως (5,0) έχουμε μικρότερο μέτρο  $G_z$  και όσο το μέγεθος αυτών αυξάνεται και το μέτρο του  $G_z$  αυξάνεται επίσης.

ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΑ  $G_z$  ΓΙΑ Κ :

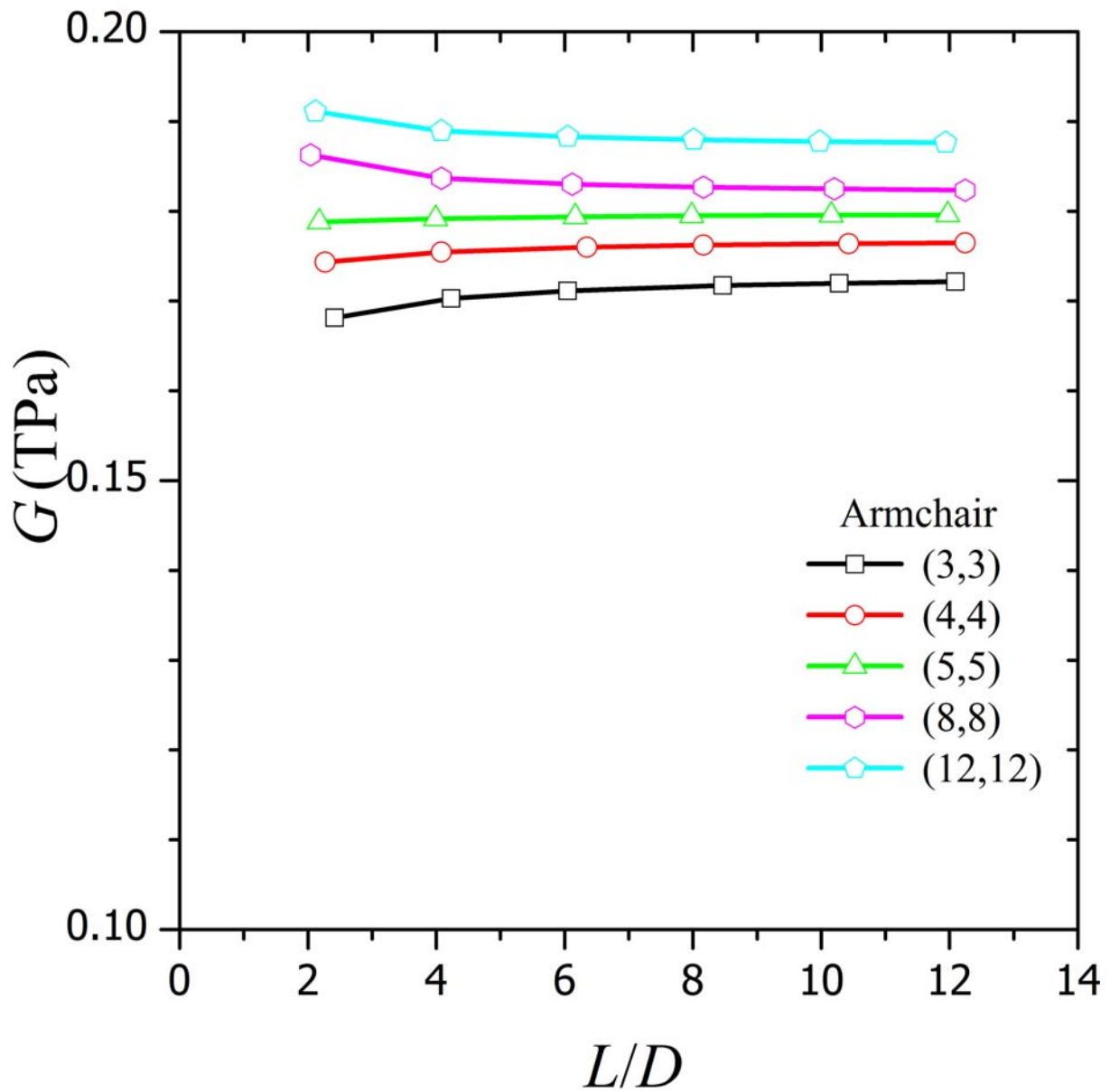
$$k_r = 486,5 \text{ nN nm}^{-1},$$

$$k_\theta = 33,065 \text{ nN nm rad}^{-2} \text{ και}$$

$$k_\tau = 29,75 \text{ nN nm rad}^{-2}$$



Σχήμα 7.5α: Μεταβολή του μέτρου διάτμησης  $G_z$  νανοσωλήνων BN τύπου zigzag σε σχέση με τον λόγο  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$



**Σχήμα 7.5β:** Μεταβολή του μέτρου διάτμησης  $G_z$  νανοσωλήνων BN τύπου

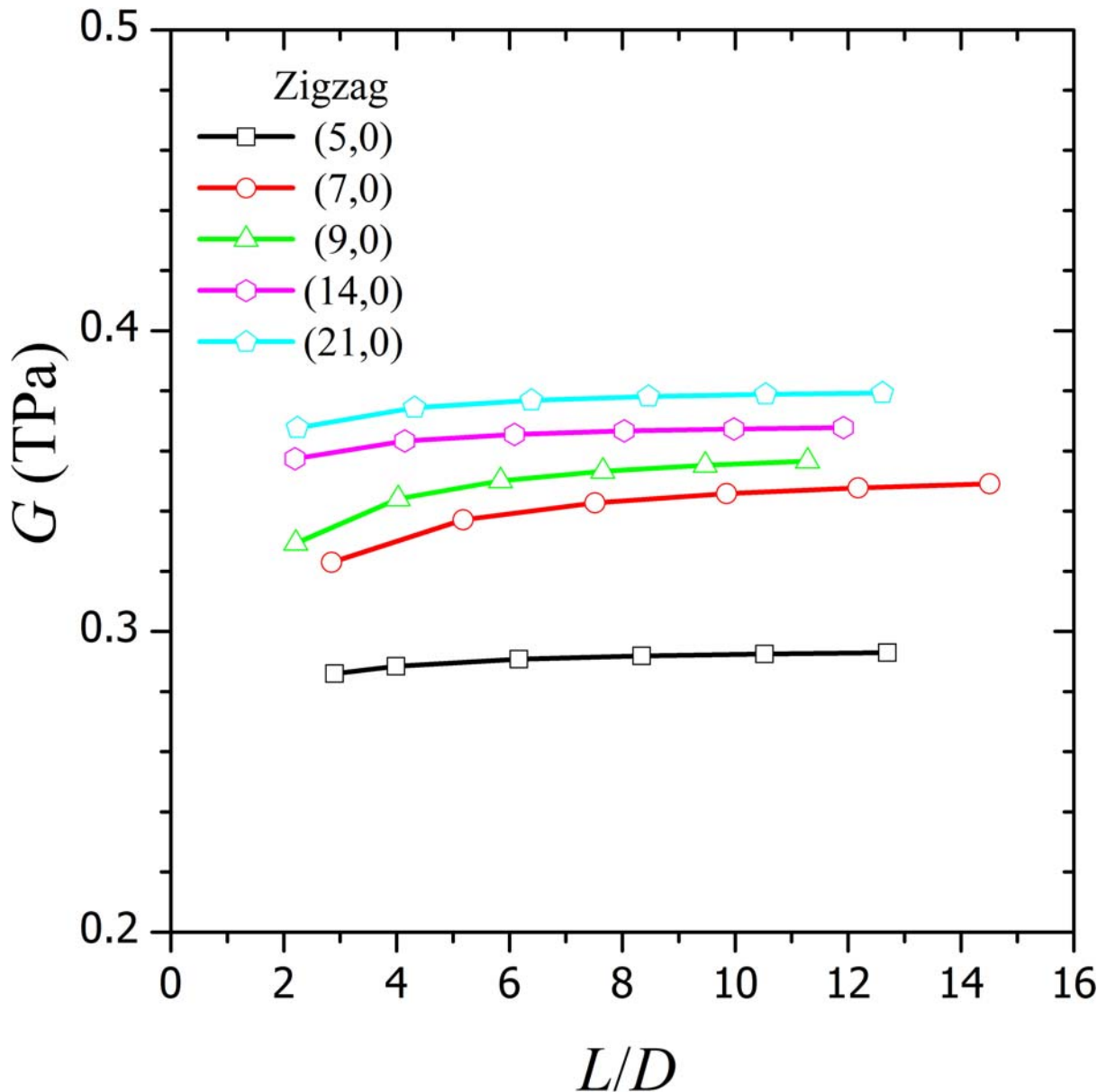
Armchair σε σχέση με τον λόγο  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$

ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΑ  $G_z$  ΓΙΑ Κ :

$$k_r = 675,7 \text{ nN nm}^{-1},$$

$$k_\theta = 82,75 \text{ nN nm rad}^{-2}$$

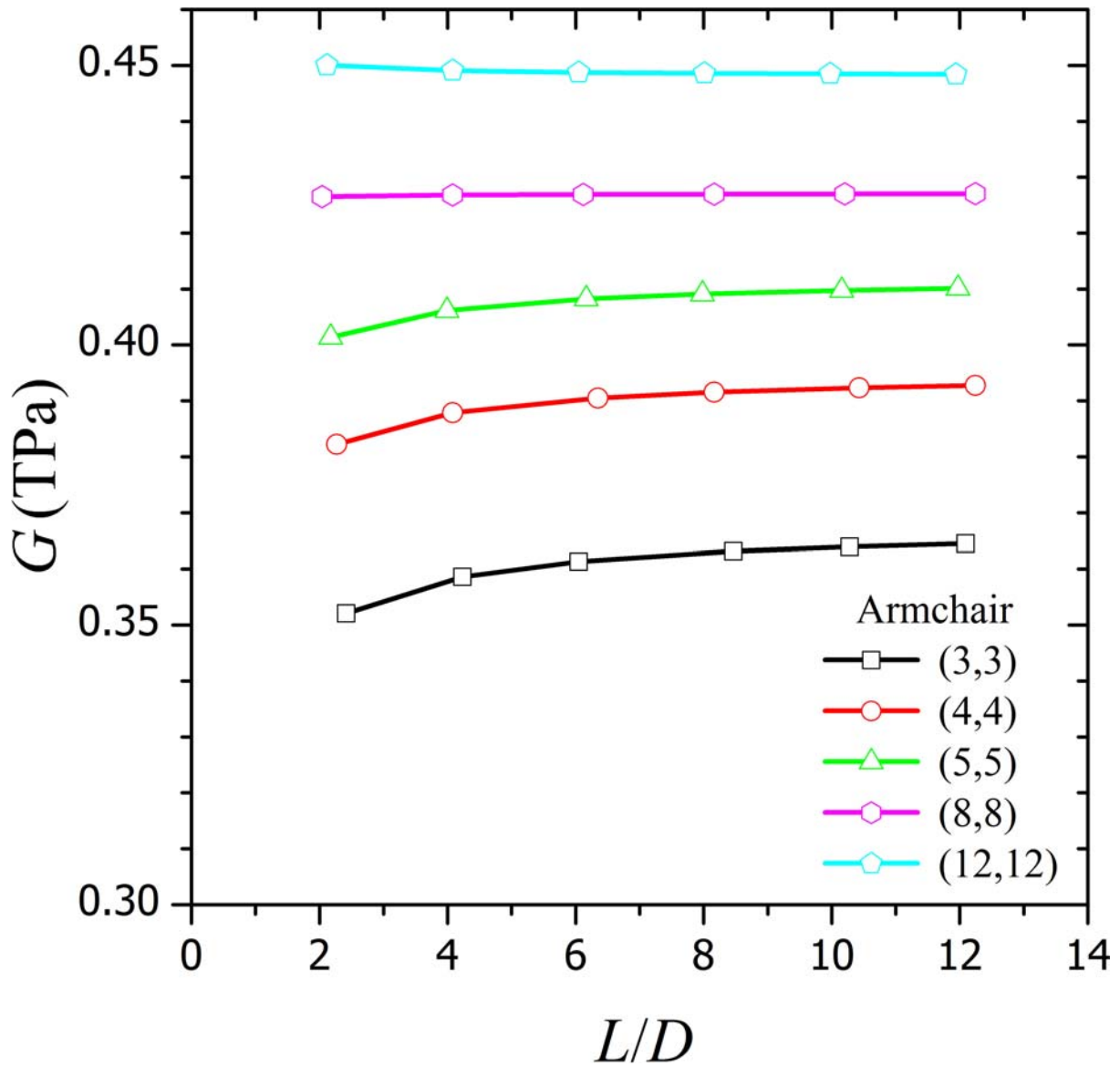
$$k_\tau = 29,75 \text{ nN nm rad}^{-2}$$



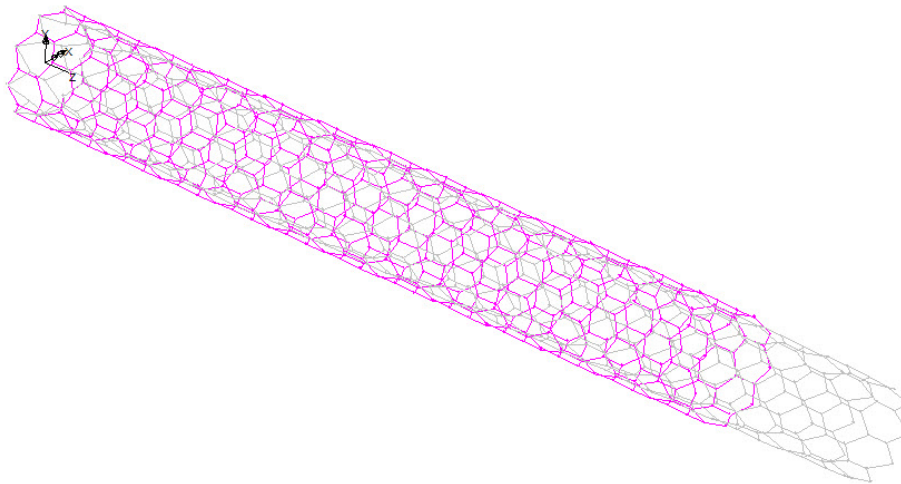
Σχήμα 7.5γ: Μεταβολή του μέτρου διάτμησης  $G_z$  νανοσωλήνων BN τύπου

zigzag σε σχέση σε σχέση με τον λόγο  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$  για διαφορετικά Κ



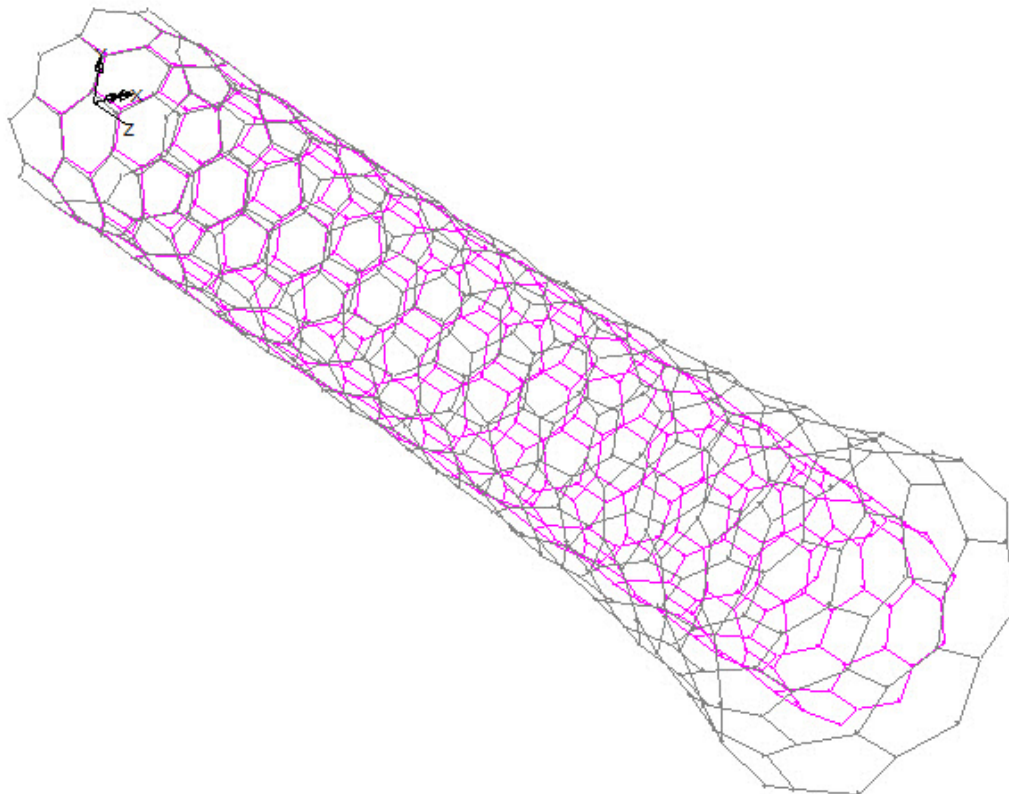


**Σχήμα 7.5δ:** Μεταβολή του μέτρου διάτμησης  $G_z$  νανοσωλήνων BN τύπου Armchair σε σχέση με τον λόγο  $\frac{L_z}{D} = 2, 4, 6, 8, 12$  για διαφορετικά  $K$



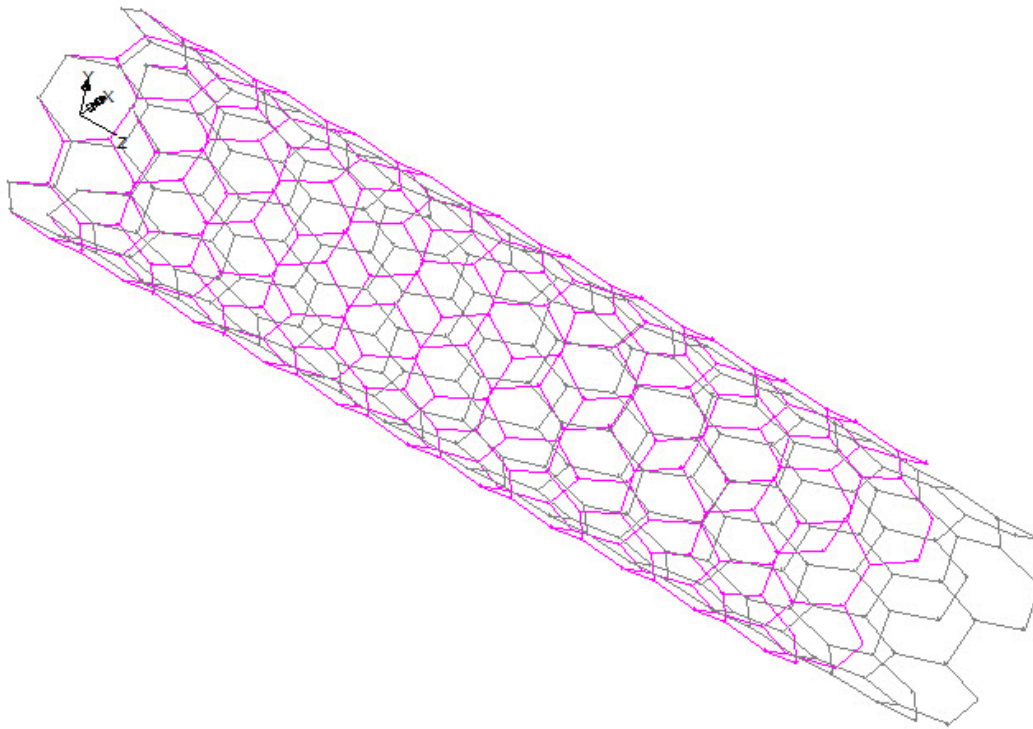
**Σχήμα 7.6:** Παραμόρφωση Zigzag νανοσωλήνα BN υπό εφελκυσμό

Στο Σχήμα 7.6 απεικονίζεται το μοντέλο νανοσωλήνα BN τύπου zigzag υπό την παραμόρφωση που απέκτησε λόγω της δύναμης  $Fz$  που του εφαρμόσαμε στους κόμβους του δεξιού άκρου. Ενώ απ' το αντίθετο άκρο το πακτώσαμε κατά  $x,y,z$  διεύθυνση. Κατά αυτόν τον τρόπο υπολογίσθηκε το μέτρο ελαστικότητας  $Ez$  και ο λόγος Poisson  $\nu_{rz}$  για όλα τα μοντέλα.



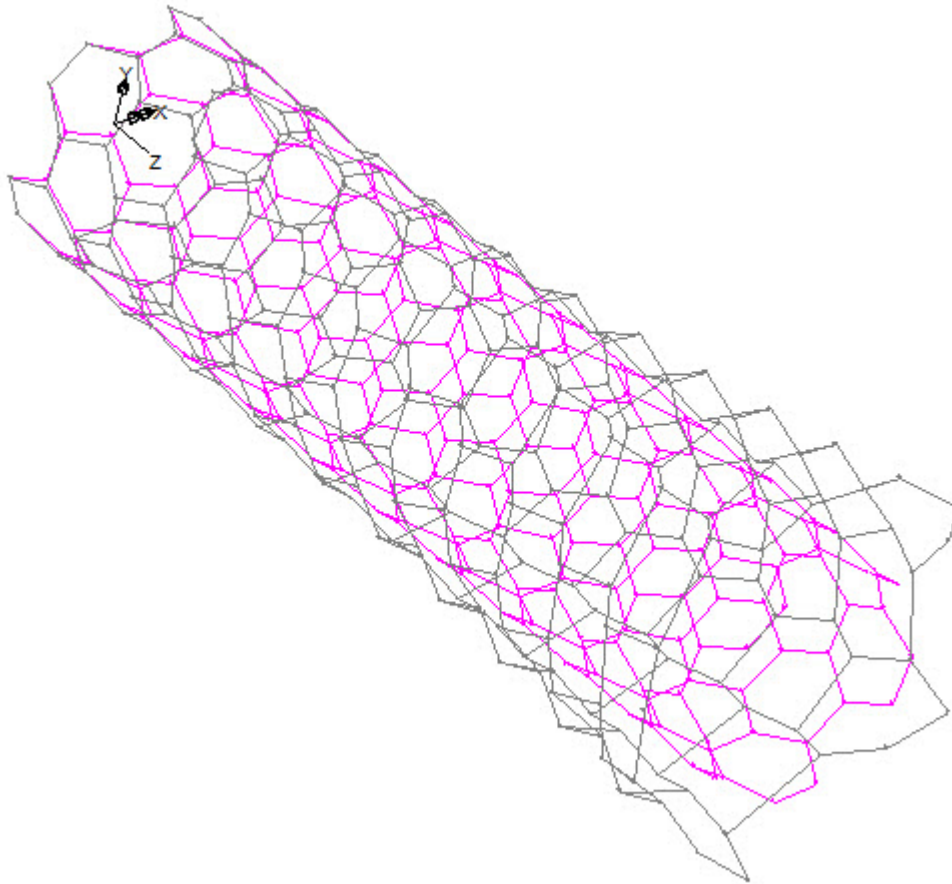
**Σχήμα 7.7:** Παραμόρφωση νανοσωλήνα BN τύπου zigzag υπό Διάτμηση

Στο Σχήμα 7.7 απεικονίζεται το μοντέλο νανοσωλήνα BN τύπου zigzag υπό την παραμόρφωση που απέκτησε λόγω της δύναμης  $F$  tangential, δηλαδή της εφαπτομενικής δύναμης που του εφαρμόστηκε στους κόμβους του δεξιού άκρου κατά τη διεύθυνση  $D_t$ . Με αυτό τον τρόπο υπολογίστηκε το μέτρο διάτμησης  $G_z$  εναλλακτικά βάση της σχέσης (7.3).



**Σχήμα 7.8:** Παραμόρφωση Armchair νανοσωλήνα BN υπό εφελκυσμό

Στο Σχήμα 7.8 απεικονίζεται το μοντέλο νανοσωλήνα BN τύπου Armchair υπό την παραμόρφωση που απέκτησε λόγω της δύναμης  $F_z$  που του εφαρμόσαμε στους κόμβους του δεξιού άκρου. Ενώ απ' το αντίθετο άκρο το πακτώσαμε κατά  $x, y, z$  διεύθυνση. Κατά αυτόν τον τρόπο υπολογίσθηκε το μέτρο ελαστικότητας  $E_z$  και ο λόγος Poisson  $\nu_{rz}$  για όλα τα μοντέλα



**Σχήμα 7.9:** Παραμόρφωση νανοσωλήνα BN τύπου Armchair υπό Διάτμηση

Στο Σχήμα 7.9 απεικονίζεται το μοντέλο νανοσωλήνα BN τύπου Armchair υπό την παραμόρφωση που απέκτησε λόγω της δύναμης  $F$  tangential, δηλαδή της εφαπτομενικής δύναμης που του εφαρμόστηκε στους κόμβους του δεξιού άκρου κατά τη διεύθυνση  $D_t$ . Με αυτό τον τρόπο υπολογίστηκε το μέτρο διάτμησης  $G_z$  εναλλακτικά βάση της σχέσης (7.3).

## ΚΕΦΑΛΑΙΟ 8

### ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Είναι σημαντικό στο σημείο αυτό να τονισθεί ότι με την συγκεκριμένη προτεινόμενη μέθοδο και με σχετικά μικρό υπολογιστικό κόστος γεφυρώθηκε το χάσμα μεταξύ μοριακής χημείας και κλασικής μηχανικής. Οι δύο επιστήμες βρήκαν ένα κοινό χώρο συνεργασίας και αλληλεπίδρασης με σκοπό την μελέτη των ίδιων δομών υπό άλλη οπτική και υπολογιστική πλευρά. Το output της μιας επιστήμης έγινε input για την άλλη με σκοπό την υπερπήδηση σημαντικών εμποδίων στην εξέλιξη και των δύο κλάδων. Διότι χωρίς την έρευνα, την συνεργασία, τον συνδυασμό διαφορετικών επιστημονικών κλάδων, τον σχεδιασμό και την ανάπτυξη τίποτα από τα ανωτέρω δεν ισχύει.

Για την προσομοίωση της γραμμικής ελαστικής συμπεριφοράς των μονότοιχων νανοσωλήνων BN αναπτύχθηκε μία μέθοδος δομικής μηχανικής, βασισμένη στην χρήση τρισδιάστατων, ευθύγραμμων, πεπερασμένων στοιχείων τύπου ελατηρίου, τριών βαθμών ελευθερίας ανά κόμβο. Για την μοντελοποίηση των συγκεκριμένων νανοδομών, οι διατομικές αλληλεπιδράσεις που περιγράφει η μοριακή χημεία προσομοιώθηκαν με την χρήση στοιχείων τύπου ελατηρίου συγκεκριμένων σταθερών  $K$  τα οποία τοποθετήθηκαν κατάλληλα σε τρισδιάστατο χώρο ώστε να περιγράφουν ακριβώς την ατομική δομή των νανοσωλήνων BN.

Με την προτεινόμενη μέθοδο υπολογίστηκαν σημαντικές ιδιότητες των μονότοιχων νανοσωλήνων BN όπως το μέτρο ελαστικότητας  $E$ , το μέτρο διάτμησης  $G$  και λόγος Poisson  $\nu$ .

Μελετήθηκαν αριθμητικά μεγάλος αριθμός νανοσωλήνων BN τύπου zigzag και armchair. Συνολικά επιλύθηκαν, για τους δύο τύπους νανοσωλήνων BN και για δύο διαφορετικά σετ σταθερών ελατηρίου  $K$  (σετ πρώτο :  $k_r = 486,5 \text{ nN nm}^{-1}$ ,  $k_\theta = 33,065 \text{ nN nm rad}^{-2}$  και  $k_\tau = 29,75 \text{ nN nm rad}^{-2}$ , σετ

δεύτερο :  $k_r = 675,7 \text{ nN nm}^{-1}$ ,  $k_\theta = 82,75 \text{ nN nm rad}^{-2}$ ,  $k_\tau = 29,75 \text{ nN nm rad}^{-2}$ ), 120 διαφορετικά μοντέλα σωλήνων για την παραγωγή των αποτελεσμάτων. Από τα αποτελέσματα των 120 προσομοιώσεων προέκυψαν σημαντικά συμπεράσματα για την γραμμική ελαστική συμπεριφορά των νανοσωλήνων BN όπως παρουσιάζονται παρακάτω

- Οι ελαστικές ιδιότητες των νανοσωλήνων BN είναι άμεσα εξαρτημένες από το μέγεθος τους.
- Οι ελαστικές ιδιότητες των νανοσωλήνων BN συγκλίνουν σταδιακά σε μια τιμή όσο αυξάνεται  $\frac{L_z}{D}$
- Τα μέτρα ελαστικότητας κατά την z διεύθυνση των νανοσωλήνων BN παρουσιάζουν να αυξάνονται για μικρά  $\frac{L_z}{D}$  αλλά να σταθεροποιούνται σταδιακά για μεγάλα  $\frac{L_z}{D}$
- Οι νανοσωλήνες BN παρουσιάζουν μείωση στον λόγο Poisson κατά την z διεύθυνση όσο αυξάνεται μέγεθος τους. Για παράδειγμα μέγεθος για zigzag από (5,0) έως (21,0).
- Στους νανοσωλήνες BN ο λόγος Poisson κατά την z διεύθυνση τείνει να συγκλίνει σε μια σταθερή τιμή για μεγάλα  $\frac{L_z}{D}$  αλλά δείχνει ανοδική τάση τοπικά για μικρά  $\frac{L_z}{D}$
- Οι νανοσωλήνες BN παρουσιάζουν αυξανόμενο μέτρο διάτμησης κατά την z διεύθυνση σε σχέση με το μέγεθος τους.
- Το μέτρο διάτμησης κατά την z διεύθυνση τείνει να συγκλίνει σε μία σταθερή τιμή όταν αυξάνεται  $\frac{L_z}{D}$ , όμως για κάθε διαφορετικό μέγεθος η τιμή που συγκλίνει αλλάζει ελαφρώς.

- Οι νανοσωλήνες BN τύπου Armchair παρουσιάζουν ελαφρώς αυξημένα μέτρα ελαστικότητας κατά την z διεύθυνση σε σχέση με τα αντίστοιχα των Zigzag
- Οι zigzag νανοσωλήνες BN παρουσιάζουν ελαφρώς πιο αυξημένο λόγο Poisson σε σχέση με αυτόν των armchair.
- Οι armchair νανοσωλήνες BN παρουσιάζουν ελαφρώς πιο αυξημένα μέτρα διάτμησης κατά την z διεύθυνση σε σχέση με τους zigzag.

Στο σημείο αυτό είναι σημαντικό να γνωρίζουμε επίσης ότι η προτεινόμενη μέθοδος συγκεκριμένα για τους νανοσωλήνες BN και τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται για την υπάρχουσα μελέτη είναι πρωτότυπα.



## BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] G.I.Giannopoulos,S.K.Georgantzinou, D.-P.N. Kontoni and P.A. Kakavas  
Tensile behavior of boron-nitride nanoribbons via a non linear spring based  
structural mechanics approach,6<sup>th</sup> IC-SCCE (2014).
- [2] Hernandez, E. et al., Phys. Rev. Lett. (1998) 80 ,4502.
- [3] Chopra, N. G., and Zettl, A., Solid State Commun (1998) 105, 297.
- [4] Suryavanshi, A.P., et al., Appl. Phys. Lett. (2004) 84, 2527.
- [5] Golberg D., et al., Nano lett. (2007) 7 ,2146.
- [6] Wei, X. L., et al., Adv. mater. (2010) 22, 4895.
- [7] Bosak A, Serrano J, Krisch M, Watanabe K, Taniguchi T and Kanda H  
2006 Phys.Rev. B 73 041402.
- [8] Amir pakdel, Chunyi Zhi, Yoshio Bando, and Dimitri Golberg Low-  
dimensional boron nitride nanomaterials (2012), volume 15, 1369 7021,  
256-265.
- [9] Hamdi I and Meskini N 2010 Physica B 405 2785
- [10] Verma V, Jindal V K and Dharamvir K 2007 Nanotechnology 18 435711
- [11] Jiang L and Guo W 2011 J.Mech. Phys. Solids 59 1204
- [12] C. M. Vest, Societal Implications of Nanoscience and Nanotechnology,  
National Science Foundation Workshop, Sept. 28–29, 2000. National  
Science Foundation.
- [13] Daniel Minoli,Nanotechnology applications to telecommunications and  
Networking. John Wiley & sons,INC., publication (2006)
- [14] Cientifica Ltd,Global nanotechnology funding & its impact report 2011.  
[www.cientifica.com](http://www.cientifica.com)
- [15] Yoke Khin Yap,Lecture notes in nanoscale science and technology,  
volume 6,B-C-N Nanotubes and related nanostructures (2009).

- [16] Arenal et al., *Advance Physics* (2010) 59 101.
- [17] Blasé, X., et al. *Europhys. Lett.* (1994) 28 335.
- [18] Pakdel, A., et al., *J. mater. Chem.* (2012) 22 ,4818.
- [19] Mickelson,W., et al. *Science* (2003) 300, 467.
- [20] Terrones, M., et al., *Nano. Lett.* (2008) 8 ,1026.
- [21] Golberg D., et al., *Adv. Mater.* (2007) 19 2413.
- [22] Xiao, Y.,et al., *Applied Physics Letter*(2004) 84 4626.
- [23] Xiao ,Y., et al. *Phys. Rev. B* (2004) 69,205415.
- [24] Chang C.W.,et al.,*Phys. Rev. Lett.* (2006) 97, 85901.
- [25] Golberg D. et al. *Scripta Mater* (2001) 44 ,1561.
- [26] Chen,Y.,et al.,*Applied Physics letter* (2004).
- [27] Lee, C.H., et al., *Langmuir* (2009) .
- [28] Li, L.H., and Chen ,Y., *Langmuir* (2010).
- [29] Pakdel, A., et al., *ACS Nano* (2011) 5, 6507.
- [30] Pakdel, A. et al., *J Mater. Chem.* (2012) 22, 4818.
- [31] S.H Jhi, *Phys. Rev. B*74 (2006) 155424.
- [32] L Boldrin,F Scarpa ,R Chowdhury and S Adhikari,Effective mechanical properties of hexagonal boron nitride nanosheets (2011),505702.
- [33] D. Vahedi Fakhrabad,N. Shahtahmassebi,First-principles calculations of the Young's modulus of double wall boron-nitride nanotubes, *Journal Materials Chemistry and Physics* 138 (2013) 963-966.
- [34] Abhijit P. Suryavanshi and Min Feng Yu, Jianguo Wen, Chengchun Tang and Yoshio Bando, *Applied physics letter*, Elastic modulus and resonance behaviour of boron nitride nanotubes (2004),volume 84, number 14
- [35] Jiesheng Wang, Chee Huei lee and Yoke Khin Yap, *Recent advancements in boron nitride nanotubes* (2010).
- [36] Mitesh B. Panchal & S.H. Upadhyay, *Boron Nitride Nanotube-Based Mass sensing of Zeptogram scale*, (2014)

- [37] Kalyan Raindogia, A. Gomathi, and C.N.R. Rao, Israel journal of Chemistry, Synthesis and Characterization of Nanoparticles, Nanotubes, Nanopans, and Graphene-like Structures of Boron Nitride (2010), 50, 399-404 .
- [38] Gianni Ciofani, Vittoria Raffa, Jun Yu, Ying Chen, Yosuke Obata, Shinji Takeoka, Arianna Menciassi and Alfred Cuschieri, Boron Nitride Nanotubes : A novel Vector for Targeted Magnetic Drug Delivery,(2009), 5,33-38
- [39] Chuhei Oshima and Ayato Nagashima,Ultra thin epitaxial films of graphite and hexagonal boron nitride on solid surfaces, J.Phys. Condens. Matter 9 (1997) 1-20
- [40] Dmitri Golberg, Yoshio Bando, Yang Huang, Zhi Xu, Xialong Wei, Laure Bourgeois, Ming-Sheng Wang, Haibo Zeng, Jing Lin and Chunyi Zhi, Recent Advances in Boron Nitride Nanotubes and Nanosheets, Israel Journal of Chemistry (2010), 50, 405- 416
- [41] Zohreh Ahadi, Muhammad Shadman, Saeed Yeganegi, Farid Asgari, Hydrogen adsorption capacities of multi-walled boron nitride nanotubes and nanotube arrays : a grand canonical Monte Carlo study, J. mol. Mod. (2012) 18, 2981-2991
- [42] Gianni Ciofani, Serena Danti, Giada Graziana Genchi, Barbara Mazzolai and Virgilio Mattoli, Boron Nitride Nanotubes : Biocompatibility and potential spill-over in Nanomedicine (2013).
- [43] Chopra N.G., et al. Science (1995)
- [44] Golber D., et al., Appl. Phys. Lett.(1996) 69 ,2045
- [45] Yu, D., P., et al. Appl. Phys. Lett.(1998)72, 1966
- [46] Lee, R., S., et al., Phys Rev B (2001) 64, 121405
- [47] Zhi, C., et al., Mat. Sci. Eng. R (2010) 70, 92