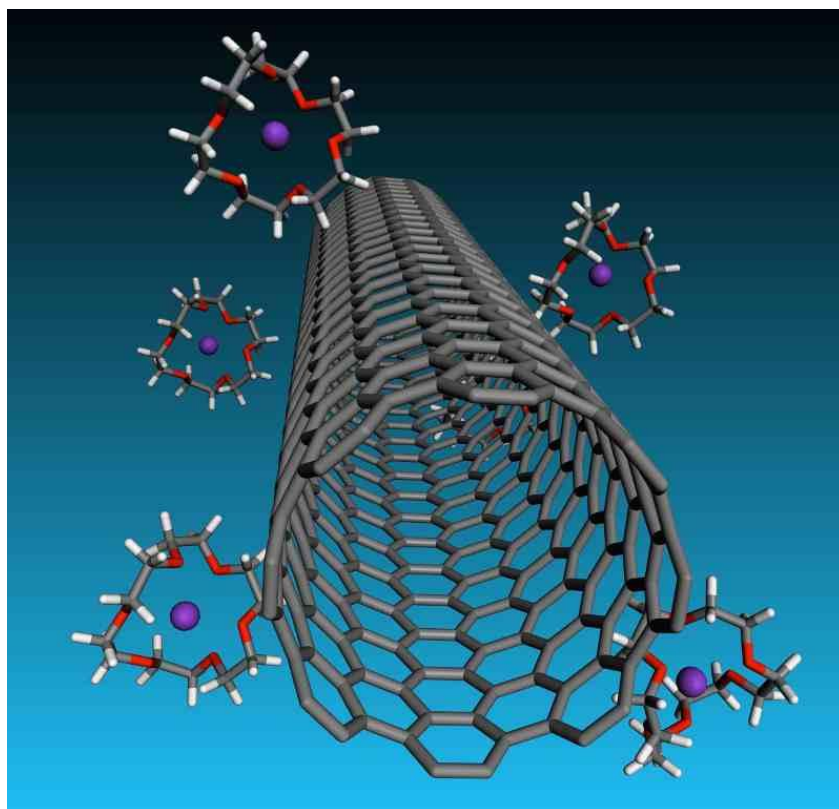


ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΔΥΤΙΚΗΣ ΕΛΛΑΔΑΣ  
ΣΧΟΛΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ  
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ Τ.Ε.

ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

# ΟΙ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΑΝΘΡΑΚΑ ΩΣ ΑΙΣΘΗΤΗΡΕΣ ΜΑΖΑΣ



ΣΠΟΥΔΑΣΤΕΣ:  
ΠΑΠΑΔΙΟΝΥΣΙΟΥ ΑΡΣΕΝΙΟΣ (Α.Μ.: 5767)  
ΚΑΡΑΓΙΑΝΝΗ ΙΩΑΝΝΑ (Α.Μ.: 5739)

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ: Δρ ΓΙΑΝΝΟΠΟΥΛΟΣ Ι. ΓΕΩΡΓΙΟΣ

ΠΑΤΡΑ 2014



## ΠΡΟΛΟΓΟΣ

Το παρόν τεύχος αποτελεί την Πτυχιακή Εργασία που εκπονήθηκε στο Τμήμα Μηχανολογίας του Τεχνολογικού Εκπαιδευτικού Ιδρύματος Πάτρας και αφορά την μελέτη της ταλάντωσης ναοσωλήνων άνθρακα στους οποίους έχει εναποτεθεί μια εξωτερική μάζα. Η ανάλυση εστιάζει στον υπολογισμό των ιδιοσυχνοτήτων και των ιδιομορφών του εν λόγω συστήματος με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων. Οι ναοσωλήνες άνθρακα τα τελευταία χρόνια έχουν προσελκύσει το έντονο ενδιαφέρον πολλών ερευνητικών ομάδων και επιστημόνων χάρη στις μοναδικές μηχανικές, ηλεκτρικές, θερμικές και οπτικές ιδιότητες τους, που τα κάνουν εξαιρετικά χρήσιμα σε πάρα πολλές εφαρμογές. Η αυξημένη ζήτηση των υλικών αυτών οδήγησε στην ανάπτυξη διαφορετικών μεθόδων προσομοίωσης της συμπεριφοράς τους.

Σκοπός της προτεινόμενης πτυχιακής είναι η αριθμητική μελέτη ενός αισθητήρα μάζας που βασίζεται σε ναοσωλήνες άνθρακα ποικίλων διαστάσεων. Οι ναοσωλήνες άνθρακα ουσιαστικά συμπεριφέρονται όπως ένας σωλήνας, ο οποίος όμως ταλαντώνεται σε εξαιρετικά υψηλή συχνότητα. Τα αντικείμενα που δύναται να τοποθετηθούν στο ναοσωλήνα ή και μόρια που δύναται να δεσμευτούν σε κάποιους από τους ελεύθερους δεσμούς των ατόμων άνθρακα που τον αποτελούν, αλλάζουν την ιδιοσυχνότητά του, αναγκάζουν δηλαδή τον ναοσωλήνα να δονείται σε διαφορετική συχνότητα. Μετρώντας τη μεταβολή της συχνότητας, ο χρήστης του αισθητήρα μπορεί να υπολογίσει με μεγάλη ακρίβεια τη μάζα του δείγματος. Η δυναμική ανάλυση του συστήματος ναοσωλήνα -εναποτιθέμενης μάζας γίνεται σε ατομιστικό επίπεδο, χρησιμοποιώντας θεωρήσεις της μοριακής χημείας περί δυναμικής ενέργειας των διατομικών αλληλεπιδράσεων σε συνδυασμό με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων και χρησιμοποιώντας στοιχεία τύπου ελατηρίου.

Στο σημείο αυτό θα θέλαμε να ευχαριστήσουμε θερμά των επιβλέποντα καθηγητή Δρ. Γιαννόπουλο Ι. Γεώργιο, επιστημονικό συνεργάτη του Τμήματος Μηχανολογίας, για την πολύτιμη βοήθεια και καθοδήγηση καθώς και για τις ιδέες που μου παρείχε κατά την εκπόνηση της πτυχιακής αυτής εργασίας.



## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η νανοτεχνολογία πραγματεύεται υλικά και κατασκευές καθώς και εφαρμογές αυτών, 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 αυτών 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 μια σειρά από σημαντικές εξελίξεις σε διάφορους συμπληρωματικούς τομείς, όπως οι ανακαλύψεις του γραφενίου, των νανοσωλήνων και των φουλερενίων.

Στην παρούσα πτυχιακή εργασία εξετάζουμε τη νέα εξέλιξη ενός, ευαίσθητου σε προσθήκη μάζας, νανοαισθητήρα ο οποίος βασίζεται στη χρήση νανοσωλήνων άνθρακα. Η μελέτη διεξάγεται με τη χρήση ενός υπολογιστικά αποτελεσματικού αριθμητικού μοντέλου βασισμένο στην υιοθέτηση γραμμικών στοιχείων ελατηρίου με τρεις βαθμούς ελευθερίας καθώς και στοιχεία σημειακής μάζας, τα οποία προσομοιώνουν την ατομιστική δομή των νανοσωλήνων άνθρακα και τις διατομικές αλληλεπιδράσεις που εμφανίζονται μεταξύ των ατόμων άνθρακα. Η ελεύθερη ταλάντωση των μορίων των νανοσωλήνων άνθρακα αναλύεται αρχικά χωρίς και έπειτα με προσκολλημένο νανοσωματίδιο συγκεκριμένης μάζας πάνω στη δομή τους, ούτως ώστε να υπολογιστεί η αλλαγή που προκύπτει στις φυσικές συχνότητες και στις αντίστοιχες ιδιομορφές.

Η παρούσα πτυχιακή είναι οργανωμένη σε κεφάλαια όπως αναλύεται παρακάτω.

Στην εισαγωγή γίνεται μια γενική και σύντομη παρουσίαση του προς μελέτη επιστημονικού τομέα καθώς και μια βιβλιογραφική ανασκόπηση γύρω από το αντικείμενο το οποίο πραγματεύεται η παρούσα πτυχιακή.

Στο πρώτο κεφάλαιο παρουσιάζονται εισαγωγικά στοιχεία που αφορούν τη νανοτεχνολογία και συγκεκριμένα την ιστορία και τις ιδιότητες της νανοτεχνολογίας ενώ γίνεται μια εκτενής αναφορά για τις αλλοτροπικές μορφές του άνθρακα, την ιστορία τους, τους τρόπους παρασκευής τους, κλπ..

Στο δεύτερο γίνεται μια ειδική αναφορά στους νανοσωλήνες άνθρακα. Παρουσιάζονται τα ειδικά χαρακτηριστικά του υλικού, οι ιδιότητες, η δομή του νανοσωλήνα, οι εφαρμογές και οι προοπτικές του στην αγορά.

Στο τρίτο κεφάλαιο γίνεται λόγος για τους νανοαισθητήρες και ειδικότερα στην ανάπτυξη, στην αρχιτεκτονική, στον τρόπο παρασκευής και στον τρόπο λειτουργίας τους. Επιπλέον, αναφέρονται οι εφαρμογές που βρίσκει η τεχνολογία του νανοαισθητήρα, όπως η ιατρική στα φάρμακα, στη μεταφορά των φαρμάκων ή την γρηγορότερη απορρόφηση από τον οργανισμό των φαρμάκων, στην ύφανση, στη βιομηχανία κ.α..

Στο τέταρτο κεφάλαιο γίνεται περιγραφή της προτεινόμενης μεθόδου προσομοίωσης ενός νανομηχανικού αισθητήρα μάζας με βάση τους νανοσωλήνες άνθρακα. Εξηγείται ο τρόπος με τον οποίο πραγματοποιείται η μοντελοποίηση των συγκεκριμένων νανοδομών με χρήση της μεθοδολογίας των πεπερασμένων στοιχείων.

Στο πέμπτο κεφάλαιο παρατίθενται ομαδοποιημένα τα αριθμητικά αποτελέσματα που προέκυψαν από την μελέτη του συστήματος νανοσωλήνα άνθρακα-εναποτιθέμενης μάζας.

Στο έκτο κεφάλαιο παρατίθενται τα συνολικά συμπεράσματα αυτής της προσπάθειας.

Στο τέλος του τεύχους παρατίθενται όλες οι απαραίτητες για την ανάπτυξη της παρούσας μελέτης βιβλιογραφικές αναφορές ενώ παρέχεται και παράτημα στο οποίο εξηγείται λεπτομερώς η μοντελοποίηση του εν λόγω προβλήματος στον υπολογιστή με τη χρήση των πεπερασμένων στοιχείων.

# ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

<b>ΤΙΤΛΟΣ ΕΝΟΤΗΤΑΣ</b>	<b>Σελ.</b>
<b>ΠΡΟΛΟΓΟΣ</b> .....	<b>iii</b>
<b>ΠΕΡΙΛΗΨΗ</b> .....	<b>v</b>
<b>ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ</b> .....	<b>vii</b>
<b>ΕΙΣΑΓΩΓΗ</b> .....	<b>1</b>
<b>1.ΝΑΝΟΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑ</b> .....	<b>5</b>
1.1ΙΣΤΟΡΙΚΗ ΑΝΑΔΡΟΜΗ.....	6
1.2 ΓΕΝΙΚΑ ΓΙΑ ΤΟΝ ΑΝΘΡΑΚΑ.....	8
1.3 ΑΛΛΟΤΡΟΠΙΚΕΣ ΜΟΡΦΕΣ ΤΟΥ ΑΝΘΡΑΚΑ .....	9
1.3.1 Το διαμάντι.....	9
1.3.2 Ο γραφίτης.....	10
1.3.3 Ο άμορφος άνθρακας .....	10
1.3.4 Το φουλερένιο .....	11
1.3.5 Νανοσωλήνες άνθρακα .....	12
1.3.6 Νανοϊνες άνθρακα.....	12
1.3.7 Υαλώδης άνθρακας .....	13
1.3.8 Νανοαφρός άνθρακα .....	13
1.3.9 Νανοβλαστοί άνθρακα .....	14
1.3.10 Καρβύνιο .....	15
<b>2.ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ</b> .....	<b>17</b>
2.1 ΙΣΤΟΡΙΚΗ ΑΝΑΔΡΟΜΗ.....	17
2.2 ΕΙΔΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ .....	18
2.2.1 Νανοσωλήνες άνθρακα .....	19
2.2.2 Μονότοιχοι νανοσωλήνες άνθρακα .....	20
2.2.3 Πολύτοιχοι νανοσωλήνες άνθρακα.....	21
2.2.4 Νανοσωλήνες με ανόργανες ύλες χωρίς άνθρακα .....	22
2.3 ΑΤΕΛΕΙΕΣ ΣΤΗ ΝΑΝΟΔΟΜΗ ΤΩΝ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ .....	23
2.4 ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ .....	23
2.4.1 Μηχανικές ιδιότητες.....	24
2.4.2 Θερμικές ιδιότητες .....	26
2.4.3 Ηλεκτρικές ιδιότητες.....	26
2.4.4 Οπτικές ιδιότητες .....	27
2.4.5 Πιεζοηλεκτρικές ιδιότητες .....	27

2.4.6 Ηλεκτροκινητικές ιδιότητες .....	27
2.4.7 Ηλεκτροχημικές ιδιότητες.....	28
2.4.8 Παραγωγή ισχύος.....	28
2.4.9 Χημική ενεργότητα .....	28
2.5 ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΠΑΡΑΣΚΕΥΗΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ .....	29
2.5.1 Εξάχνωση ηλεκτροδίων άνθρακα με τη χρήση ηλεκτρικού τόξου εκκένωσης .....	29
2.5.2 Φωτοδιάσπαση γραφίτη με τη χρήση λέιζερ .....	30
2.5.3 Καταλυτική χημική εναπόθεση ατμών (CVD) .....	31
2.5.4 Μετατροπή CO με υψηλή πίεση (HiPCO).....	32
2.6 ΧΡΗΣΕΙΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ .....	32
2.6.1 Αποθήκευση Ενέργειας.....	33
2.6.2 Συσκευές Εκπομπής Πεδίου.....	34
2.6.3 Τρανζίστορς.....	34
2.6.4 Νανοσύνθετα υλικά.....	36
2.6.5 Ιατρική και βιολογία .....	38
2.6.6 Υπολογιστές .....	38
2.6.7 Βιοαισθητήρες.....	39
2.6.8 Άλλες εφαρμογές.....	39
<b>3.ΝΑΝΟΑΙΣΘΗΤΗΡΕΣ .....</b>	<b>45</b>
3.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	45
3.2 ΑΣΥΡΜΑΤΟΙ ΝΑΝΟΑΙΣΘΗΤΗΡΕΣ .....	46
3.2.1 Από πάνω προς τα κάτω.....	46
3.2.2 Από κάτω προς τα πάνω.....	47
3.2.3 DNA scaffolding .....	48
3.2.4 ΒΙΟΥΒΡΙΔΙΚΗ ΠΡΟΣΕΓΓΙΣΗ .....	49
3.3 ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΗ ΝΑΝΟΑΙΣΘΗΤΗΡΩΝ.....	49
3.3.1 Φυσικοί Νανοαισθητήρες.....	51
3.3.2 Χημικοί Νανοαισθητήρες .....	52
3.3.3 Βιολογικοί Νανοαισθητήρες .....	52
3.4 ΜΟΝΑΔΑ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΑΣ-ΝΑΝΟΚΕΡΑΙΕΣ .....	55
3.5 ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΟΙ ΜΕΤΑΒΙΒΑΣΤΕΣ .....	56
3.6 ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΤΩΝ ΑΣΥΡΜΑΤΩΝ ΝΑΝΟΑΙΣΘΗΤΗΡΩΝ.....	57
3.6.1 Φάρμακα.....	58
3.6.2 Μεταφορά φαρμάκων .....	58
3.6.3 Διάγνωση ασθενειών.....	60
3.6.4.Βιοσυμβατά χειρουργικά νανορομπότ.....	60
3.6.5 Βιοϋβριδικά μοσχεύματα και εμφυτεύματα.....	61
3.6.6 Μηχανική ιστών .....	62
3.6.7 Μηχανική πρωτεϊνών .....	62
3.6.8 Βιομηχανία και αγοραστικά αγαθά.....	62
3.6.9 Λειτουργικά υλικά και υφάσματα.....	63



3.6.10 Επιφάνειες αφής με υψηλή ευαισθησία .....	65
3.6.11 Απτική διασύνδεση .....	65
3.6.12 Διαγνωστική Ιατρική.....	65
<b>4. ΜΕΘΟΔΟΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ.....</b>	<b>67</b>
4.1 ΓΕΝΙΚΑ ΠΕΡΙ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ.....	67
4.2 ΠΡΟΤΕΙΝΟΜΕΝΗ ΜΕΘΟΔΟΣ .....	67
4.2.1 Γεωμετρία μεσότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα.....	68
4.2.2 Θεμελιώδης εξίσωση.....	71
4.2.3 Υιοθετούμενα πεπερασμένα στοιχεία και εξισώσεις.....	74
<b>5. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ.....</b>	<b>79</b>
5.1 ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΧΩΡΙΣ ΠΡΟΣΤΙΘΕΜΕΝΗ ΜΑΖΑ.....	80
5.2 ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΜΕ ΠΡΟΣΤΙΘΕΜΕΝΗ ΜΑΖΑ .....	87
5.2.1 Μονόπακτοι armchair νανοσωλήνες.....	87
5.2.2 Μονόπακτοι zigzag νανοσωλήνες.....	91
5.2.3 Αμφίπακτοι armchair νανοσωλήνες.....	94
5.2.4 Αμφίπακτοι zigzag νανοσωλήνες.....	97
<b>6. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....</b>	<b>101</b>
<b>ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....</b>	<b>103</b>
<b>ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ.....</b>	<b>105</b>



## ΕΙΣΑΓΩΓΗ

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

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

Σκοπός της νανοεπιστήμης και της νανοτεχνολογίας αποτελεί η κατανόηση αυτών των ιδιοτήτων που θα οδηγήσει στην αποδοτικότερη και αποτελεσματικότερη σύνθεση των δομών αυτών, το μέγεθος των οποίων κυμαίνεται μεταξύ 1 και 100nm (1nm=10<sup>-9</sup>m) και αναλογεί πρακτικά σε διάσταση 100.000 φορές μικρότερη από το πλάτος μιας ανθρώπινης τρίχας. Η αρχή της είναι απλή και στηρίζεται στο ότι αντί να σμικρύνεται η ύλη μέχρις ότου επιτευχθεί η μικρότερη μονάδα, η τελευταία αποσπάται από αυτήν, ενώ σημαντικό ρόλο στη μέχρι τώρα ανάπτυξή της κατέχει η πολύ σημαντική βελτίωση του ηλεκτρονικού μικροσκοπίου τις τελευταίες δεκαετίες.

Σταθμός στην ανάπτυξη της νανοτεχνολογίας θα μπορούσε να θεωρηθεί η ανακάλυψη νέων μορφών του άνθρακα, με πρώτη αυτή της ανακάλυψης των φουλερενίων το 1985 από τους Kroto και άλλους [1]. Το ενδιαφέρον όμως των ερευνητών εστιάζεται περισσότερο στη νανοτεχνολογία και κυρίως στα νανοϋλικά άνθρακα μετά το 1991, οπότε έγιναν ευρέως γνωστοί οι νανοσωλήνες άνθρακα μετά την ανακοίνωση του καθηγητή Sumio Iijima στο περιοδικό Nature [2].

Η ανακάλυψη ότι ο άνθρακας θα μπορούσε να διαμορφώσει σταθερή, διατεταγμένη δομή όπως ο γραφίτης και το διαμάντι ενθάρρυνε πολλούς ερευνητές στον κόσμο για να αναζητήσουν αλλοτροπικές μορφές του άνθρακα, όπως οι μονότοιχοι νανοσωλήνες άνθρακα. Οι ιδιότητες της συγκεκριμένης αλλοτροπικής μορφής παρέχει σημαντικές μηχανικές ιδιότητες ανάλογα με την διάμετρο τους και τη διεύθυνση των δακτυλιδίων γραφίτη. Στη σημερινή εποχή γεννιέται η ανάγκη διατύπωσης σαφών σχέσεων μεταξύ της δομής και μηχανικών ιδιοτήτων των νανοσωλήνων άνθρακα, λόγω του δραματικά αυξανόμενου αριθμού των εφαρμογών τους στη σύγχρονη επιστήμη και την τεχνολογία στις οποίες απαιτείται μεγάλη ακρίβεια και αξιοπιστία. Οι νανοσωλήνες άνθρακα παρομοιάζονται ως ένα καταπληκτικό υλικό χάρη στις μοναδικές ιδιότητες τους. Χαρακτηρίζονται για την αντοχή τους που είναι 100

φορές μεγαλύτερη από εκείνη που έχει ο χάλυβας, για τη θερμική αγωγιμότητά τους που είναι καλύτερη από εκείνη του διαμαντιού, ενώ η ηλεκτρική τους αγωγιμότητα είναι ίδια και μεγαλύτερη από αυτή του χαλκού, αλλά με δυνατότητα μεταφοράς περισσότερου ρεύματος. Οι ιδιότητες τους αυτές είναι που κάνουν τους νανοσωλήνες άνθρακα να βρίσκουν εφαρμογή σε πάρα πολλούς τομείς, στρέφοντας έτσι και ένα τμήμα των ερευνητών προς την αναζήτηση ικανοποιητικών μεθόδων για την παραγωγή τους, αλλά και τρόπων που θα οδηγούν σε νανοσωλήνες άνθρακα με συγκεκριμένες ιδιότητες.

Στην παρούσα πτυχιακή εργασία, μελετήθηκαν αριθμητικά οι ιδιοσυχνότητες νανοσωλήνων άνθρακα, διαφόρων μεγεθών, χρησιμοποιώντας μία νέα ατομιστική προσέγγιση δομικής μηχανικής κατάλληλη για την πρόβλεψη των δυναμικών ιδιοτήτων των νανοσωλήνων άνθρακα. Θεωρήθηκε ότι σε διάφορες θέσεις της επιφάνειας του νανοσωλήνα είναι προσκολλημένη μία σημειακή μάζα. Οι διαφορές στη δυναμική απόκριση μεταξύ καθαρού νανοσωλήνα και συστήματος νανοσωλήνα-εναποτιθέμενης μάζας, δύναται να δώσουν τις απαραίτητες σχεδιαστικές κατευθύνσεις για την ανάπτυξη ενός νανοαιθητήρα μάζας με βάση το νανοσωλήνα άνθρακα.

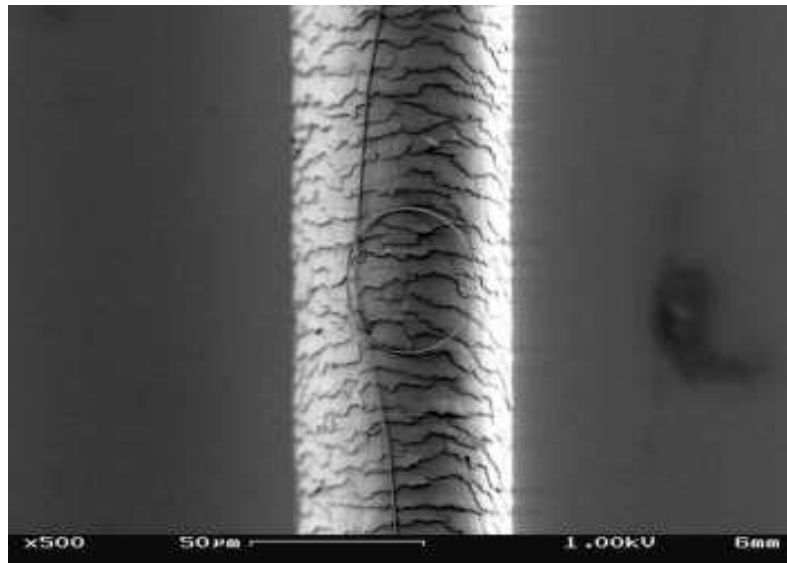
Η προτεινόμενη μέθοδος υιοθετεί τρισδιάστατα, γραμμικά, δίκομβρα πεπερασμένα στοιχεία ελατηρίου, τριών βαθμών ελευθερίας ανά κόμβο. Συγκεκριμένα, χρησιμοποιούνται ελατήρια που έχουν συγκεκριμένη δυσκαμψία κατά μήκος της διεύθυνσης του δεσμού και μηδενική δυσκαμψία στις άλλες διευθύνσεις, για την διασύνδεση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

σημειακών μαζών στις ατομικές θέσεις χρησιμοποιήθηκαν σημειακά στοιχεία μάζας τριών βαθμών ελευθερίας. Η μοντελοποίηση και επίλυση των εξισώσεων γίνεται μέσω του λογισμικού πακέτου πεπερασμένων στοιχείων Lusas Fea. Με τη χρήση της συγκεκριμένης αριθμητικής τεχνικής, μελετάται η ταλαντωτική συμπεριφορά νανοσωλήνων άνθρακα υπό διάφορες συνθήκες στήριξης του συστήματος νανοσωλήνα-μάζας. Τα πολυάριθμα αποτελέσματα επικεντρώνονται στις πρώτες τρεις ιδιοσυχνότητες και ιδιομορφές ενώ παρουσιάζονται-αναλύονται παραμετρικά όσον αφορά το μέγεθος του νανοσωλήνα, το μέγεθος της προστιθέμενης μάζας καθώς και τη θέση της μάζας. Σε αυτό το σημείο αξίζει να τονισθεί ότι είναι η πρώτη φορά που προτείνεται η συγκεκριμένη μέθοδος για την πρόβλεψη των μηχανικών ιδιοσυχνοτήτων και ιδιομορφών νανοσωλήνων άνθρακα.



# 1. NANOTEΧΝΟΛΟΓΙΑ

Ο όρος Νανοτεχνολογία χρησιμοποιείται για να περιγράψει τη δημιουργία και τη χρήση λειτουργικών δομών διαστάσεων που κυμαίνονται μεταξύ των 1-100 νανομέτρων, της τάξεως δηλαδή των  $10^{-9}$  μέτρων. Ενδεικτικά το ένα νανόμετρο ισούται περίπου με το 1/80000 μιας ανθρώπινης τρίχας (Σχήμα 1.1) ή με το μήκος 10 ατόμων υδρογόνου στη σειρά. Έτσι και ο όρος νανοεπιστήμη αναφέρεται σε επιστήμες που διερευνούν φαινόμενα σε αυτή τη κλίμακα.



**Σχήμα 1.1:** Τμήμα ανθρώπινης τρίχας και βρόγχος νανοσωλήνα άνθρακα

Οι εξαιρετικά μικρές διαστάσεις των υλικών αυτών (νανοϋλικών) δικαιολογούν το ενδιαφέρον που παρουσιάζει η παγκόσμια επιστημονική κοινότητα καθώς η νανοκλίμακα προσδίδει ιδιαίτερες ιδιότητες στα υλικά, διαφορετικές από αυτές που παρουσιάζονται στο μακρόκοσμο. Το ενδιαφέρον προς τον κλάδο αυτό δεν θα σταματήσει στα επόμενα χρόνια και οι προσδοκίες για σημαντικές ανακαλύψεις είναι μεγάλες.

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

1. Οι ιδιότητες των ηλεκτρονίων στα υλικά επηρεάζονται από αλλαγές στη νανοκλίμακα. Έτσι, είναι δυνατό να διαφοροποιηθούν οι βασικές ιδιότητες των υλικών (π.χ. θερμοκρασία τήξης, μαγνητισμός κ.λπ.) χωρίς αλλαγή της χημικής τους σύνθεσης.
2. Η ζωή εξελίσσεται σε νανοκλίμακα. Η συστηματική οργάνωση των υλικών στη νανοκλίμακα είναι ένα κύριο χαρακτηριστικό των βιολογικών συστημάτων. Η νανοτεχνολογία υπόσχεται να μας επιτρέψει να τοποθετούμε τεχνητά στοιχεία και συναρμολογημένες διατάξεις μέσα στα κύτταρα.

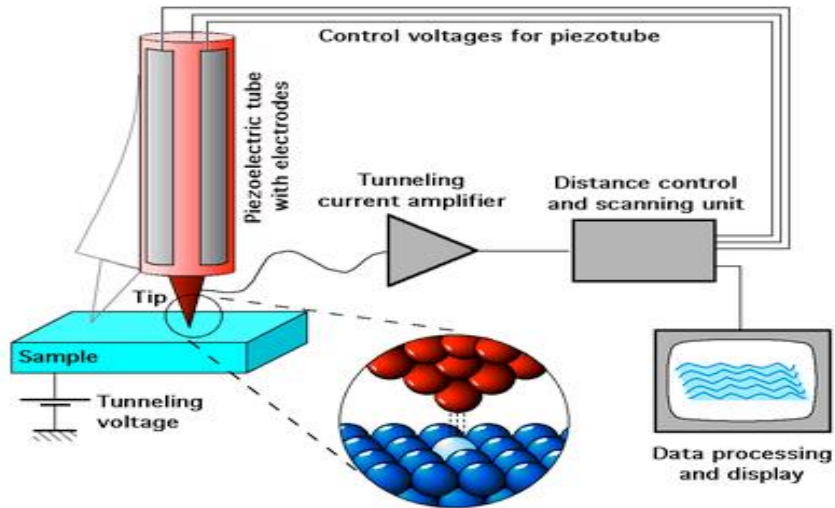
3. Λόγω του μεγέθους τους, τα διάφορα στοιχεία σε νανοκλίμακα προσφέρουν συνολικά πολύ μεγάλη επιφάνεια. Έτσι είναι ιδανικά για χρήση σε σύνθετα υλικά, στην απορρόφηση των φαρμάκων, σε ηλιακές κυψέλες και στην ενεργειακή αποθήκευση.
4. Τα νανοδομημένα υλικά είναι σκληρότερα και λιγότερο εύθραυστα.
5. Τα νανοδομημένα υλικά μπορούν να χρησιμοποιηθούν για διάφορες οπτικοηλεκτρονικές εφαρμογές.

## 1.1 ΙΣΤΟΡΙΚΗ ΑΝΑΔΡΟΜΗ

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

Η έννοια της Νανοτεχνολογίας εμφανίζεται σε μια ιστορική ομιλία του νομπελίστα φυσικού Richard P. Feynman [3] την οποία έδωσε το 1959 στο ετήσιο συνέδριο της Αμερικανικής Ένωσης Φυσικών που διεξήχθη στο Τεχνολογικό Ινστιτούτο της Καλιφόρνια, με τίτλο Υπάρχει πολύς χώρος στον πυθμένα (There's Plenty of Room at the Bottom). Το 1965 ο Gordon Moore [4] προέβλεψε ότι ο αριθμός των τρανζίστορ σε ένα μικροεπεξεργαστή θα διπλασιάζεται κάθε 18 μήνες, κάτι που επαληθεύτηκε στη πράξη και ονομάστηκε νόμος του Moore. Επίσης, το 1974 ο Norio Taniguchi [5], καθηγητής στο πανεπιστήμιο του Τόκιο δημοσιεύει μια από τις πλέον γνωστές εργασίες στην οποία αναφέρει ότι «η νάνο-τεχνολογία κυρίως συνίσταται στον διαχωρισμό, τη συνένωση και την παραμόρφωση υλικών σε ατομικό ή μοριακό επίπεδο». Έπειτα κομβικής σημασίας σταθμοί για την εξέλιξη της Νανοτεχνολογίας είναι το 1981 η ανακάλυψη του Ηλεκτρονικού Μικροσκοπίου Σάρωσης (Scanning Electron Microscopy, SEM) (Σχήμα 1.2), καθώς και η πρώτη δημοσίευση με αντικείμενο τη κατασκευή προϊόντων με ακρίβεια ατόμου από τον K. Eric Drexler (Σχήμα 1.3).





**Σχήμα 1.2:** Ηλεκτρονικό Μικροσκόπιο Σάρωσης

Ακόμα, σημαντικά χρονολογικά σημεία είναι το 1985 η ανακάλυψη των φουλερενίων και το 1986 η ανακάλυψη του Μικροσκοπίου Ατομικής Δύναμης (AFM), που συντέλεσαν στις ερευνητικές προσπάθειες στη νανοκλίμακα. Τέλος οι ανακαλύψεις των νανοσωλήνων άνθρακα το 1991 από τον S.Iijima [1] και του φύλλου γραφενίου από τους A.K. Geim και K.S. Novoselov [6] αποτελούν από τους σημαντικότερους σταθμούς στη πορεία της εξέλιξης της νανοτεχνολογίας.



**Σχήμα 1.3:** Μηχανική σε μικρο-διαστάσεις

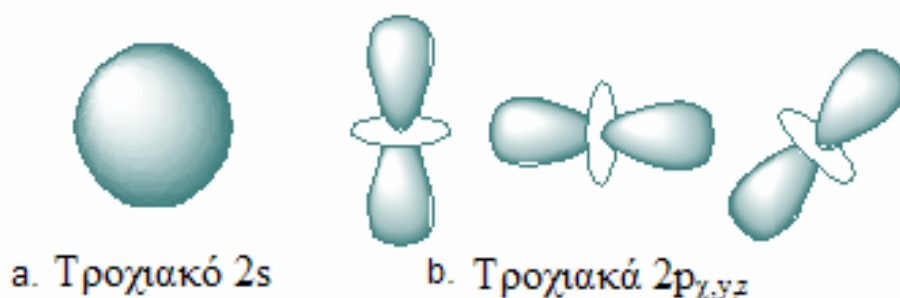
## 1.2 ΓΕΝΙΚΑ ΓΙΑ ΤΟΝ ΑΝΘΡΑΚΑ

Ο άνθρακας, με σύμβολο 'C', είναι από τα λίγα χημικά στοιχεία γνωστά από την αρχαιότητα στον άνθρωπο. Τόσο ελεύθερος, όσο και κάτω από τη μορφή των πολυάριθμων ενώσεών του, είναι ευρύτατα διαδεδομένος στη φύση.

Ενωμένος βρίσκεται στον ατμοσφαιρικό αέρα κυρίως σαν διοξείδιο του άνθρακα, στα ανθρακικά ορυκτά (ασβεστίτης, μάρμαρο κλπ), στο φυσικό αέριο και στο πετρέλαιο σαν υδρογονάνθρακας, καθώς και σε όλες ανεξαιρέτως τις ενώσεις του φυτικού και ζωικού βασιλείου.

Ο άνθρακας είναι το έκτο στοιχείο του Περιοδικού Πίνακα και βρίσκεται στη κορυφή της IV<sub>A</sub> Ομάδας. Αποτελεί το 15<sup>ο</sup> σε αφθονία κατά μάζα χημικό στοιχείο στο φλοιό της Γης και το 4<sup>ο</sup> σε αφθονία στο σύμπαν, μετά το υδρογόνο, το ήλιο και το οξυγόνο. Στο ανθρώπινο σώμα ο άνθρακας είναι το δεύτερο πιο άφθονο χημικό στοιχείο κατά μάζα με 18.5% μετά το υδρογόνο, και βρίσκεται σε όλες τις γνωστές μορφές ζωής. Η υψηλή αφθονία του στοιχείου αυτού στη Γη σε συνδυασμό με την ικανότητα του να αναπτύσσει μεγάλη ποικιλία οργανικών ενώσεων, το έκαναν να αποτελεί τη βάση κάθε γνωστής μορφής ζωής.

Κάθε άτομο άνθρακα αποτελείται από 6 ηλεκτρόνια που καταλαμβάνουν τα  $1s^2$ ,  $2s^2$  και  $2p^2$  ατομικά τροχιακά. Το  $1s^2$  τροχιακό περιλαμβάνει δύο ισχυρά συνδεδεμένα ηλεκτρόνια, τα οποία ονομάζονται πυρηνικά ηλεκτρόνια. Επίσης 4 ηλεκτρόνια καταλαμβάνουν τα  $2s^2$ ,  $2p^2$  τροχιακά τα οποία είναι πιο ασθενώς συνδεδεμένα. Τα ηλεκτρόνια των εξωτερικών στοιβάδων κατανέμονται στα  $2s$ ,  $2p_x$ ,  $2p_y$  και  $2p_z$  τροχιακά (Σχήμα 1.4), τα οποία έχουν σημαντικό ρόλο στο σχηματισμό ομοιοπολικών δεσμών στα υλικά άνθρακα.



**Σχήμα 1.4:** Απεικόνιση των  $s$  και  $p$  τροχιακών στη στοιβάδα σθένους του άνθρακα

Ο  $sp^n$  υβριδισμός, προκύπτει από το συνδυασμό ενός ηλεκτρονίου  $2s$  με  $n=1,2,3$  ηλεκτρόνια  $2p$ . Στον  $sp$  υβριδισμό, δύο  $\sigma$  δεσμοί σχηματίζουν μια μονοδιάστατη μορφή αλυσίδας γνωστή ως *καρβύνη*. Ενώνοντας τις καρβυνικές αλυσίδες σχηματίζεται ένα τρισδιάστατο υλικό. Στον  $sp^3$  υβριδισμό τέσσερις  $\sigma$

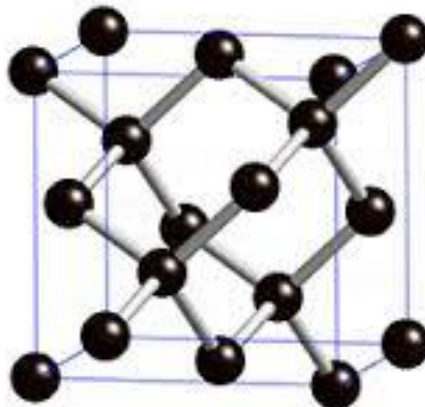
δεσμοί ορίζουν ένα κανονικό τετράεδρο και αρκούν για το σχηματισμό μιας τρισδιάστατης δομής. Τέλος στον  $sp^2$  υβριδισμό σχηματίζεται επίπεδη δομή.

## 1.3 ΟΙ ΑΛΛΟΤΡΟΠΙΚΕΣ ΜΟΡΦΕΣ ΤΟΥ ΑΝΘΡΑΚΑ

### 1.3.1 Το διαμάντι

Η μορφή του διαμαντιού (Σχήμα 1.5) είναι η πιο μελετημένη από τις κρυσταλλικές μορφές του άνθρακα. Το κρυσταλλικό πλέγμα αποτελείται από άτομα άνθρακα, τα οποία χαρακτηρίζονται από  $sp^3$  τετραεδρικό υβριδισμό, δηλαδή κάθε άτομο άνθρακα βρίσκεται ενωμένο τετραεδρικά με τέσσερα άλλα άτομα άνθρακα με ομοιοπολικούς δεσμούς, στους οποίους το μήκος του δεσμού C-C είναι 1,544 Å, τα τετράεδρα αυτά συνδέονται μεταξύ τους ως προς τις κορυφές και σχηματίζουν το κρυσταλλικό πλέγμα. Το διαμάντι κρυσταλλώνεται στο κυβικό σύστημα και κάθε τρίτη στοιβάδα του πλέγματος είναι όμοια, οπότε έχουμε τη συνήθη κυβική μορφή του διαμαντιού.

Η κρυσταλλική του δομή και η φύση των χημικών δεσμών μεταξύ των ατόμων του άνθρακα εξηγούν τη μεγάλη συνεκτικότητα και τη σκληρότητα του (10 στη κλίμακα του Mohs), το πολύ υψηλό σημείο τήξης του (3.750 °C) και τη μεγάλη πυκνότητα του (3,51 gr/cm<sup>3</sup>) συγκριτικά με το γραφίτη. Επίσης εξαιτίας της φύσης των χημικών δεσμών δεν υπάρχουν ελεύθερα ηλεκτρόνια και συνεπώς δεν εμφανίζει θερμική και ηλεκτρική αγωγιμότητα.

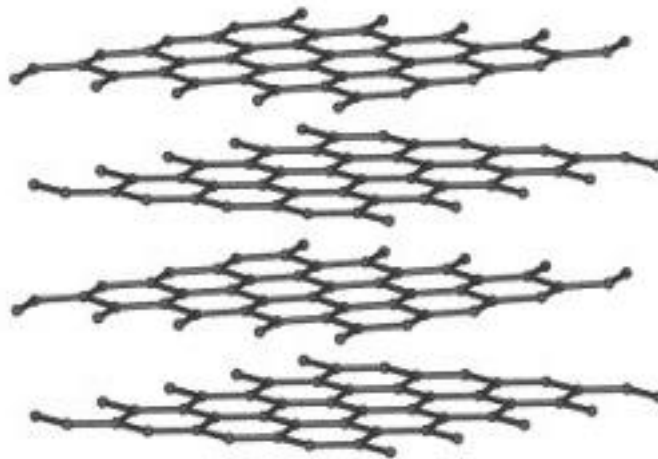


**Σχήμα 1.5:** Κρυσταλλική δομή διαμαντιού

Επιπρόσθετα πάνω από τους 800°C παρουσία οξυγόνου καίγεται προς CO<sub>2</sub>, ενώ πάνω από τους 1200°C και απουσία O<sub>2</sub> μετατρέπεται σε γραφίτη.

### 1.3.2 Ο γραφίτης

Η πιο γνωστή αλλοτροπική μορφή του άνθρακα είναι ο γραφίτης. Πήρε το όνομά του το 1789 από τον Abraham Gottlob Werner από την ελληνική λέξη γράφειν. Σε κανονικές συνθήκες είναι η πιο σταθερή από τις μορφές του άνθρακα που γνωρίζουμε και το κρυσταλλικό του πλέγμα (Σχήμα 1.6) αποτελείται από στρώματα εξαμελών δακτυλίων σε κάθε κορυφή των οποίων υπάρχει ένα άτομο άνθρακα. Κάθε ένα από αυτά συνδέεται με δεσμό με άλλα τρία άτομα άνθρακα της ίδιας στοιβάδας και σχηματίζει δακτυλίους με αλληλουχία στοιβάδων ABAB... ( Bernal διάταξη).

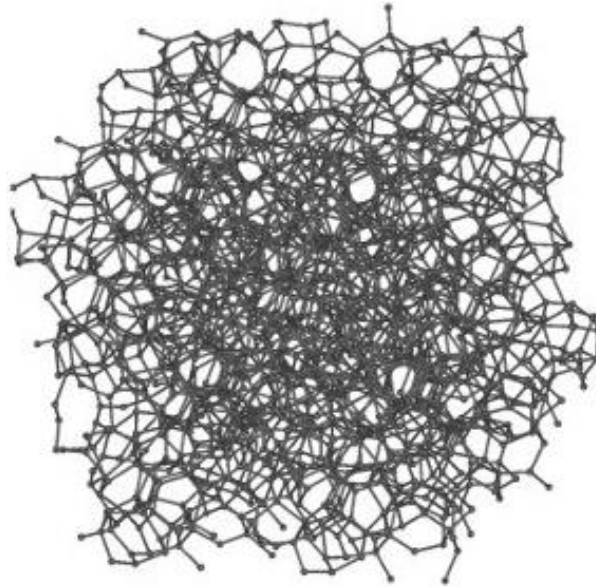


Σχήμα 1.6: Κρυσταλλική δομή γραφίτη

Μετά το σχηματισμό των δεσμών κάθε άτομο άνθρακα διαθέτει ακόμα ένα ηλεκτρόνιο στο απομένον αμιγές ατομικό τροχιακό και αυτά τα ηλεκτρόνια σε κάθε εξαμελή δακτύλιο κατανέμονται σε ένα ενιαίο σύστημα δεσμών. Το μήκος του δεσμού είναι  $1.421\text{\AA}$ , η σταθερά του πλέγματος είναι  $2.426\text{\AA}$ , ενώ στον κάθετο άξονα, όπου τα άτομα του άνθρακα συνδέονται με van der Waals δυνάμεις, η σταθερά του πλέγματος είναι  $6708\text{\AA}$  και η απόσταση μεταξύ των στοιβάδων είναι  $3.354\text{\AA}$ .

### 1.3.3 Ο άμορφος άνθρακας

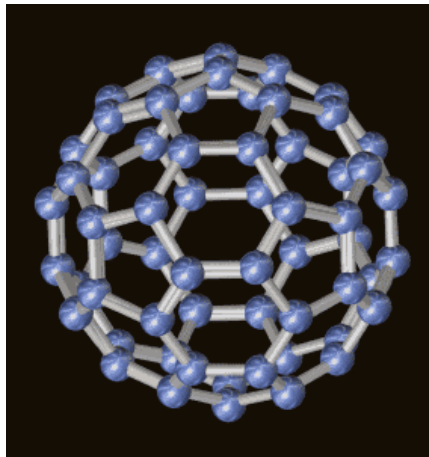
Τον όρο «άμορφος άνθρακας» τον χρησιμοποιούμε για να περιγράψουμε εκείνη τη μορφή του άνθρακα που δεν έχει κρυσταλλική δομή (Σχήμα 1.7). Όπως συμβαίνει σε όλα τα υαλώδη υλικά μπορεί να παρατηρηθεί μόνο μιας μικρής τάξης διάταξη ( $10\text{\AA}$ ) και όχι μιας μεγάλης κλίμακας διάταξη των ατομικών θέσεων. Πρόκειται για ένα δίκτυο ατόμων άνθρακα με πολύ υψηλή αταξία στο οποίο όμως κυριαρχούν  $sp^2$  δεσμοί, ενώ μόνο το 10% των δεσμών που λαμβάνουν χώρα είναι  $sp^3$  και δεν εμφανίζονται καθόλου  $sp^1$  δεσμοί.



**Σχήμα 1.7:** Άμορφη δομή άνθρακα

### 1.3.4 Τα φουλερένια

Μια από τη πιο πρόσφατη αλλοτροπική μορφή άνθρακα είναι το φουλερένιο (Σχήμα 1.8). Πρόκειται για σταθερά μόρια ή συσσωματώματα ατόμων άνθρακα.



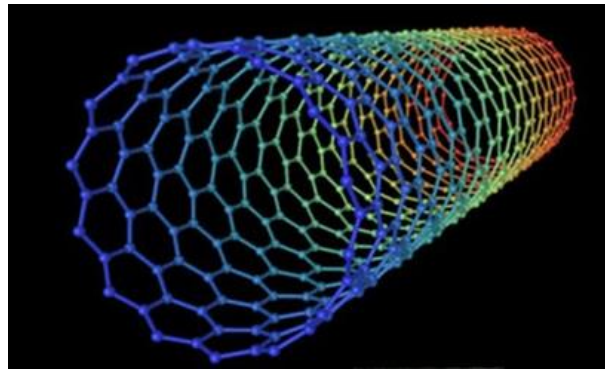
**Σχήμα 1.8:** Κρυσταλλική δομή φουλερενίων

Το φουλερένιο C<sub>60</sub> που ονομάζεται και φουλερίνα, πειραματικά παρατηρήθηκε το 1985 από τον Kroto και άλλους [1], οι οποίοι και τιμήθηκαν το 1996 για αυτή τους την ανακάλυψη με το βραβείο Nobel. Υπέθεσαν πως πρόκειται για ένα μόριο με συμμετρία εικοσαέδρου, το οποίο ονόμασαν φουλερίνα (fullerene), εξαιτίας της ομοιότητάς του με τους γεωδесικούς θόλους που είχαν σχεδιασθεί και κατασκευασθεί από τον αρχιτέκτονα Richard Buckminster Fuller. Το όνομα Buckminster fullerene ή αλλιώς Buckyball

δόθηκε αποκλειστικά στο μόριο C<sub>60</sub>. Το 1990 η ομάδα των Krätschmer και άλλους [7] βασιζόμενη στο C<sub>60</sub> δημιούργησε μια απλή μέθοδο για τη παραγωγή μεγάλων ποσοτήτων C<sub>60</sub> και C<sub>70</sub>.

### 1.3.5 Οι νανοσωλήνες άνθρακα

Η ανακάλυψη των φουλερενίων αποτέλεσε το πρόδρομο για την ανακάλυψη και των νανοσωλήνων άνθρακα, που είναι ακόμα μία από τις αλλοτροπικές μορφές του άνθρακα. Πρόκειται για γραφιτικές δομές οι οποίες παράχθηκαν κατά τη διεργασία παραγωγής φουλερενίων με τη μέθοδο του ηλεκτρικού τόξου εκκένωσης και ονομάστηκαν «νανοσωλήνες άνθρακα» λόγω της κυλινδρικής τους δομής και της διαμέτρου τους, που είναι της τάξης του νανομέτρου (Σχήμα 1.9).



**Σχήμα 1.9:** Κρυσταλλική δομή μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα

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

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

### 1.3.6 Οι νανοϊνες άνθρακα

Οι νανοϊνες άνθρακα (Σχήμα 1.10) είναι επίσης μία σημαντική μορφή των υλικών που μοιάζουν στο γραφίτη και έχουν παρόμοια δομή και ιδιότητες με τους νανοσωλήνες άνθρακα. Παρά τους πολλούς προδρόμους που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη σύνθεση, των ινών άνθρακα, κάθε μία έχει

διαφορετική μορφολογία. Ο προτιμότερος προσανατολισμός των γραφιτικών φύλλων είναι ο παράλληλος στον άξονα της ίνας, γιατί έτσι επιτυγχάνεται μεγαλύτερη μηχανική αντοχή των ινών. Παρασκευάζονται κυρίως με χημική απόθεση ατμών υδρογονανθράκων σε θερμοκρασίες μεταξύ 700 και 2500°C, συχνά παρουσία υδρογόνου.



**Σχήμα 1.10:** Νανοϊνα άνθρακα με δομή ψαροκόκαλο’

### **1.3.7 Υαλώδης άνθρακα**

Ένας άλλος τύπος άνθρακα είναι ο υαλώδης (Σχήμα 1.11), ο οποίος παράγεται με ελεγχόμενη αποδόμηση συγκεκριμένων πολυμερών σε θερμοκρασίες μεταξύ 900 και 1000°C. Πρόκειται για ένα υλικό με αταξία στη δομή, κοκκώδες, μέτρια σκληρό, που μπορεί εύκολα να γυαλιστεί, είναι θερμικά αγωγίμο, αδιάβροχο, βιοσυμβατό και σταθερό σε υψηλές θερμοκρασίες.

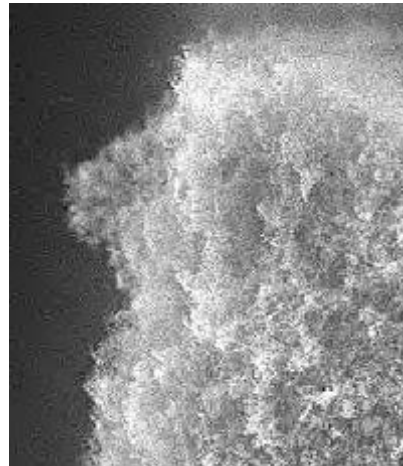


**Σχήμα 1.11:** Υαλώδης άνθρακας

### **1.3.8 Νανοαφρός άνθρακα**

Ο νανοαφρός άνθρακα (Σχήμα 1.12) είναι μια αλλοτροπική μορφή άνθρακα. Αποτελείται από συσσωμάτωμα χαμηλής πυκνότητας ατόμων

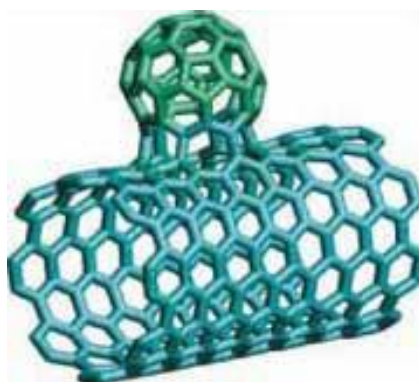
άνθρακα δεμένα μαζί σε ένα ασαφές τρισδιάστατο δίκτυο. Μοιάζει κατά κάποιο τρόπο με τα αεροπυκτώματα (aerogels) άνθρακα και πυριτίου αλλά έχει 10 φορές μικρότερη πυκνότητα, πολύ μεγάλη ειδική επιφάνεια και λειτουργεί ως καλός μονωτής. Είναι πρακτικά διαφανής, αποτελείται κυρίως από αέρα και είναι αρκετά εύθραυστος. Μία από τις πιο χαρακτηριστικές του ιδιότητες είναι ο σιδηρομαγνητισμός. Ο νανοαφρός άνθρακα έλκεται από το μαγνήτη όπως και ο σίδηρος.



**Σχήμα 1.12:** Νανοαφρός άνθρακα

### **1.3.9 Νανοβλαστοί άνθρακα (Carbon NanoBuds)**

Οι νανοβλαστοί άνθρακα ανακαλύφθηκαν το 2006 και πρόκειται για ένα υλικό που συνδυάζει δυο αλλοτροπικές μορφές άνθρακα, όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.13, τη φουλερίνα και το νανοσωλήνα άνθρακα. Στους νανοβλαστούς, οι φουλερίνες συνδέονται ομοιοπολικά με την εξωτερική επιφάνεια των νανοσωλήνων. Εμφανίζουν ιδιότητες και των δυο μορφών. Ωστόσο, εμφανίζουν βελτιωμένη χημική ενεργότητα και καλύτερα χαρακτηριστικά εκπομπής πεδίου, λόγω του μεγάλου αριθμού των κέντρων εκπομπής ηλεκτρονίων που διαθέτουν οι φουλερίνες.

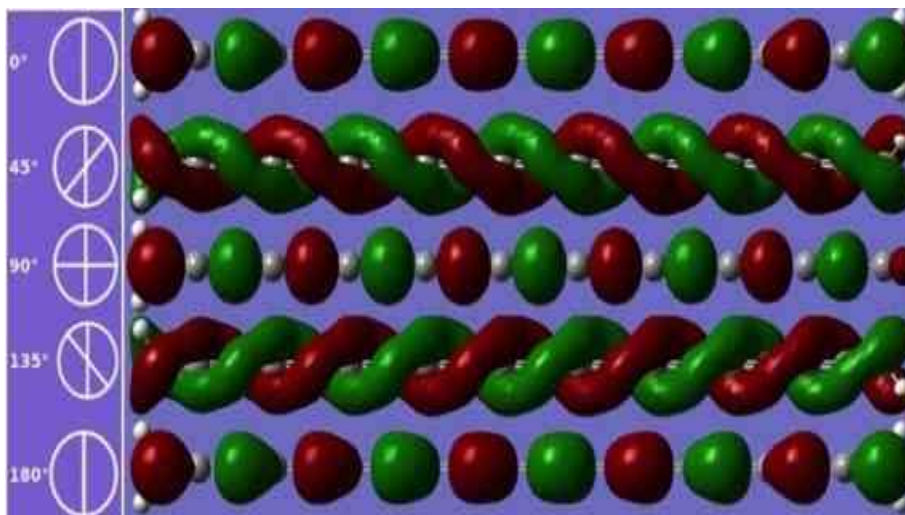


**Σχήμα 1.13:** Νανοβλαστός άνθρακα



### 1.3.10 Καρβόνιο

Το καρβόνιο (Σχήμα 1.14) είναι μία αλυσίδα ατόμων άνθρακα, που συνδέονται μεταξύ τους είτε με διπλούς είτε -εναλλάξ- με μονούς ή τριπλούς ατομικούς δεσμούς. Αυτό το καθιστά ένα μονοδιάστατο υλικό, σε αντίθεση με το γραφένιο (το οποίο θεωρείται έως τώρα το ισχυρότερο υλικό στον κόσμο) που είναι ένα δισδιάστατο υλικό με το πάχος ενός ατόμου.



Σχήμα 1.14: Καρβόνιο

Παρά το ότι είναι μία αλυσίδα ατόμων άνθρακα (ένα σπάνιο είδος του η αλήθεια), το καρβόνιο έχει τη διπλή αντοχή στον εφελκυσμό (τέντωμα) από τον προκάτοχο του το γραφένιο, ξεπερνώντας αυτήν κάθε γνωστού υλικού έως σήμερα. Επιστήμονες έχουν ήδη υπολογίσει ότι χρειάζεται ένας ελέφαντας που ισορροπεί πάνω σε ένα μολύβι για να σπάσει ένα φύλλο γραφενίου. Το καρβόνιο, σύμφωνα με τους ερευνητές, έχει, επίσης, τρεις φορές μεγαλύτερη αντοχή στην ακαμψία από το διαμάντι.

Οι επιστήμονες παρατήρησαν, μάλιστα, ότι παραμένει σταθερό σε θερμοκρασία δωματίου, καθώς αντιστέκεται σε μεγάλο βαθμό στους χημικούς δεσμούς με κοντινές αλυσίδες, ερχόμενοι σε αντίθεση με προηγούμενες μελέτες που αμφισβητούσαν αυτή του την ιδιότητα. Στόχος τους τώρα είναι να καταφέρουν να το συνθέσουν σε μεγάλη ποσότητα, ώστε να έχουν γι' αυτό μία ολοκληρωμένη μηχανική εικόνα που θα επιβεβαιώσει τα συμπεράσματά τους.

Όσο για το πού μπορεί να είναι χρήσιμο το καρβόνιο, οι επιστήμονες σημειώνουν: "Θα μπορούσε να το δει κάποιος σαν μία πολύ λεπτή κορδέλα γραφενίου, σε ένα μόνο άτομο ή ένα πολύ λεπτό νανοσωλήνα. Θα μπορούσε να είναι χρήσιμο σε συστήματα νανομηχανικής, σε συσκευές όπως αισθητήρες ή ισχυρά και ελαφριά υλικά για μηχανικές εφαρμογές και αποθήκευση ενέργειας."

Θεωρίες για το καρβόνιο εμφανίστηκαν για πρώτη φορά το 19ο αιώνα και το υλικό συντέθηκε για πρώτη φορά στην πρώην ΕΣΣΔ, το 1960. Από τότε το έχουμε δει σε συμπιεσμένο γραφίτη, έχει ανιχνευτεί σε διαστρική σκόνη και έχει δημιουργηθεί σε μικρές ποσότητες σε πειράματα.

## 2. ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ

### 2.1 ΙΣΤΟΡΙΚΗ ΑΝΑΔΡΟΜΗ

Οι νανοσωλήνες έχουν εξελιχθεί σε ένα από τα πιο εντατικά μελετώμενα υλικά αυτής της δεκαετίας. Η ανακάλυψή τους πραγματοποιήθηκε μόλις είκοσι χρόνια πριν, ωστόσο παρόλο το μικρό διάστημα ύπαρξης, ακόμη και η πίστωση του εφευρέτη έχει γίνει αντικείμενο συζήτησης στην επιστημονική κοινότητα.

Το 1956 ο Roger Bacon μελετούσε την τήξη γραφίτη υπό συνθήκες υψηλής θερμοκρασίας και πίεσης. Τα αποτελέσματα των πειραμάτων επέφεραν μακριές λεπτές ίνες από γραφίτη, όπως ανέφερε ο ίδιος, που είχαν δομή “σαν καλαμάκια ενταγμένα σε τούβλο”. Η ιδιότητες του προϊόντος ήταν ενδιαφέρουσες, μιας και δεν υπερέβαιναν το ένα δέκατο μιας τρίχας ανθρώπου, ήταν εύκαμπτες και επιπλέον δεν ήταν εύθραυστες. Δύο χρόνια αργότερα ο Bacon είχε αποδείξει τις ιδιότητες της ίνας άνθρακα που είχε παρασκευάσει. Σε ινώδη μορφή, ο γραφίτης και ο άνθρακας είναι τα ισχυρότερα και πιο άκαμπτα υλικά, για το βάρος τους, που έχουν ποτέ παραχθεί. Ωστόσο η έλλειψη ισχυρών ηλεκτρονικών μικροσκοπιών την εποχή εκείνη απέτρεψαν την ανακάλυψη των νανοσωλήνων άνθρακα κατά την διαδικασία παρασκευής της ίνας. Χαρακτηριστικά ο Bacon μεταγενέστερα είπε: «Μπορεί να παρήγαγα νανοσωλήνες, αλλά εγώ δεν τους ανακάλυψα».

Η ιστορία των νανοσωλήνων συνεχίζει στη δεκαετία του '70 όπου υπήρξε μια αξιοσημείωτη εξέλιξη, αλλά αναφέρουμε από εδώ ότι δεν είχε έρθει ακόμα το πλήρωμα του χρόνου για τη δημιουργία. Έτσι ο Morinobu Endo στο Πανεπιστήμιο της Ορλεάνης ανέπτυξε ίνες άνθρακα που αρχικά θεωρήθηκαν ως οι πρώτοι νανοσωλήνες άνθρακα. Ωστόσο, δεν πληρούσαν τις απαιτήσεις για το πλάτος στις μετρήσεις και ως εκ τούτου κρίθηκαν ανεπαρκείς. Ήταν ωστόσο μια σημαντική στιγμή στην εξέλιξη της ιστορίας των νανοσωλήνων [8].

Η πραγματική ανακάλυψη νανοσωλήνων άνθρακα έγινε είκοσι χρόνια αργότερα, το έτος 1991 [2]. Φαίνεται ότι υπήρχε ένας αγώνας δρόμου μεταξύ Ρώσων νανοτεχνολόγων και του Sumio Iijima της IBM με επικράτηση του τελευταίου. Ήταν το 1993 όταν ο Iijima [9] και ο Donald Bethune [10] ανακάλυψαν έναν μονοφλοϊικό σωλήνα άνθρακα γνωστό ως buckytube. Με αυτήν την πληροφορία, η ανακάλυψη των νανοσωλήνων άνθρακα πραγματοποιήθηκε και πιστώθηκε στους Iijima και Bethune στο σύνολό της. Ρώσοι νανοτεχνολόγοι είχαν ανακαλύψει ανεξάρτητα την ίδια οπτική επιβεβαίωση, την οποία ανακοίνωσαν μόλις λίγο αργότερα. Η συνέχεια της έρευνας αποκάλυψε πολλά για τους νανοσωλήνες και τη θέση τους στις επιστημονικές ανακαλύψεις.

## 2.2 ΕΙΔΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ

Η ανάπτυξη των επιστημών τις τελευταίες δεκαετίες παρουσιάζει μεγάλα άλματα σε όλους σχεδόν τους τομείς. Από τα βασικότερα ευρήματα ωστόσο μπορούν να θεωρηθούν οι ανακαλύψεις που έγιναν στον τομέα της νανοτεχνολογίας. Οι νανοδομές είναι τα μικρότερα κατασκευάσματα του ανθρώπου και παρουσιάζουν μεγάλο ενδιαφέρον λόγω των ιδιοτήτων τους. Πολλά από τα υπάρχοντα υλικά έχουν διάφορους περιορισμούς που τα εμποδίζουν στην υλοποίηση πρακτικών εφαρμογών. Οι περιορισμοί αφορούν συνήθως τις ιδιότητές τους, όπως η αγωγιμότητα ενός υλικού, το βάρος του ή η ανθεκτικότητά του.

Ανάμεσα στα διάφορα νανοϋλικά, οι νανοσωλήνες άνθρακα (CNTs) παρουσιάζουν εξαιρετικές μηχανικές ιδιότητες. Για παράδειγμα, οι CNTs αποτελούν από τα πιο ανθεκτικά και το πιο ευέλικτα υλικά που είναι γνωστά, λόγω της μοναδικής C-C ομοιοπολικής σύνδεσης. Οι νανοσωλήνες έχουν επίσης ηλεκτρική αγωγιμότητα και υψηλή θερμική αγωγιμότητα.

Η ανακάλυψη των πολυφλοϊικών νανοσωλήνων άνθρακα από τον Iijima [9] και του μονοφλοϊικού νανοσωλήνα άνθρακα άνοιξε το δρόμο για μία νέα τάξη υλικών βασισμένα σε υλικά νανοκλίμακας. Τα δομικά και ηλεκτρικά χαρακτηριστικά των νανοσωλήνων άνθρακα έδωσαν την υπόσχεση για ανάπτυξη μοναδικών και επαναστατικών υλικών.

Από την αρχή ακόμη ανακάλυψης του νανοσωλήνα άνθρακα είχε αναπτυχθεί η ιδέα παραγωγής νανοσωλήνα με βάση άλλο υλικό. Οι συγκεκριμένοι ονομάστηκαν non-carbon nanotubes (non-carbon NT). Ήδη έχει συντεθεί ένα μεγάλο πλήθος αυτής της κατηγορίας και έχει προβλεφθεί η ύπαρξη κι άλλων. Επιγραμματικά αναφέρουμε ότι έχουν δημιουργηθεί νανοσωλήνες με βάση κράματα γερμανίου-πυριτιδίου (germanium silicide) και την μετατροπή μεταλλικών διχάλκογώνων (metal dichalcogenides), σουλφιδίων (sulfides) και χλωριδίων (chlorides). Αξίζει να αναφερθεί ότι έχουν προσομοιωθεί οι μοριακές και ηλεκτρικές δομές των διαφόρων υποθετικών νανοσωλήνων που περιέχουν βόριο, φώσφορο, πυρίτιο και γερμάνιο. Συζητήθηκαν οι μηχανισμοί ανάπτυξης τους και μελετήθηκαν οι ιδιότητες και οι δομές τους.

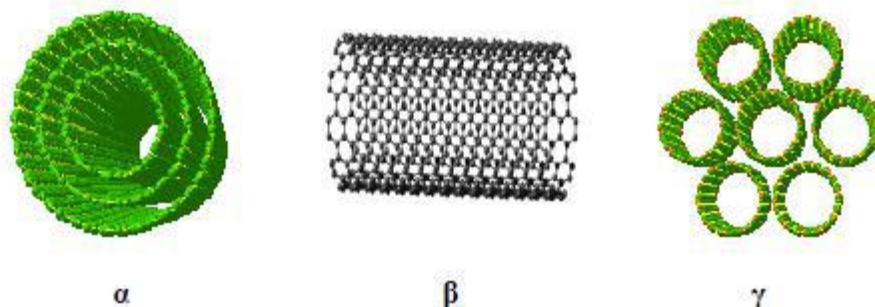
Στο κεφάλαιο αυτό αναφέρονται οι νανοσωλήνες άνθρακα που πιο συγκεκριμένα χωρίζονται σε δύο μεγάλες κατηγορίες: τους μονοφλοϊικούς νανοσωλήνες (Single-walled nanotubes, SWNT) και τους πολυφλοϊικούς νανοσωλήνες (Multi-walled nanotubes, MWNT). Στη συνέχεια μελετούνται οι non-carbon NT και παρατίθεται υπάρχουσα κατηγοριοποίηση στους νανοσωλήνες που δεν χρησιμοποιούν τον άνθρακα.

## 2.2.1 Νανοσωλήνες άνθρακα

Υπάρχουν δύο κύριοι τύποι νανοσωλήνων άνθρακα οι μονοφλοιϊκοί νανοσωλήνες (Single-walled nanotubes, SWNT), που αποτελούνται από ένα μοναδικό φύλλο γραφενίου τυλιγμένο έτσι ώστε να σχηματίζουν ένα κύλινδρο διαμέτρου της τάξης του 1nm και μήκους μέχρι και 1 cm και οι πολυφλοιϊκοί νανοσωλήνες (Multi-walled nanotubes, MWNT) που σχηματίζονται από περισσότερους κυλίνδρους, ο ένας μέσα στον άλλο ανάλογα με τη διάμετρο. Η απόσταση των κυλίνδρων είναι περίπου 0.35nm, όμοια δηλαδή με τη διευθέτηση των επιπέδων στο γραφίτη. Οι MWNTs μπορούν να έχουν διάμετρο από 2 έως 100nm και μήκος κάποιων δεκάδων μικρομέτρων.

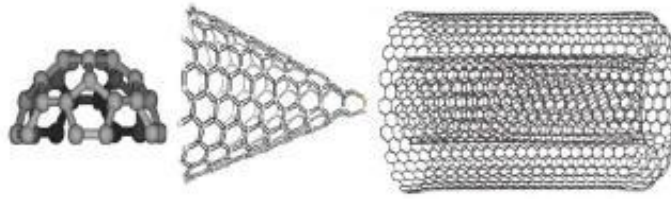
Οι SWNTs νανοσωλήνες διαχωρίζονται σε τρεις τύπους. Στην κατηγορία armchair, στη κατηγορία zigzag και στη κατηγορία chiral. Οι MWNTs νανοσωλήνες αποτελούνται από πολλαπλούς ομοαξονικούς.

Τα κυλινδρικά φύλλα γραφίτη στους πολυφλοιϊκούς νανοσωλήνες άνθρακα απέχουν μεταξύ τους 3.4 Å, όπως υπολογίστηκε με τεχνικές διάθλασης ηλεκτρονίων. Αυτή η τιμή είναι λίγο μεγαλύτερη από την τιμή των 3.35 Å για τον γραφίτη. Η διαφορά αυτή οφείλεται στην καμπυλότητα των κυλίνδρων αλλά και στην ύπαρξη δυνάμεων van der Waals μεταξύ των διαδοχικών στρωμάτων. Στο Σχήμα 2.1 παρακάτω αναπαρίστανται πολυφλοιϊκοί και μονοφλοιϊκοί νανοσωλήνες καθώς και η περίπτωση όπου νανοσωλήνες ομαδοποιούνται κι έχουμε τις λεγόμενες συστοιχίες νανοσωλήνων.



**Σχήμα 2.1:** Νανοσωλήνες Άνθρακα: α) Πολυφλοιϊκοί, β) Μονοφλοιϊκοί, γ) σε Συστοιχία

Τα άκρα των νανοσωλήνων μπορεί να είναι είτε ανοικτά είτε κλειστά (Σχήμα 1.2). Μπορεί αυτά να τερματίζονται με τα ημισφαίρια διαφόρων φουλερενίων. Τα τερματικά προκύπτουν από συνδυασμό εξαγώνων και τουλάχιστον 6 πενταγώνων. Ο τερματισμός μπορεί να γίνει με κωνική μορφή ή και ημιδακτυλιοειδής μορφή. Παρακάτω στην εικόνα φαίνεται αναπαράσταση των πιθανών καταστάσεων του άκρου ενός νανοσωλήνα.



**Σχήμα 2.2:** Άκρα νανοσωλήνων άνθρακα

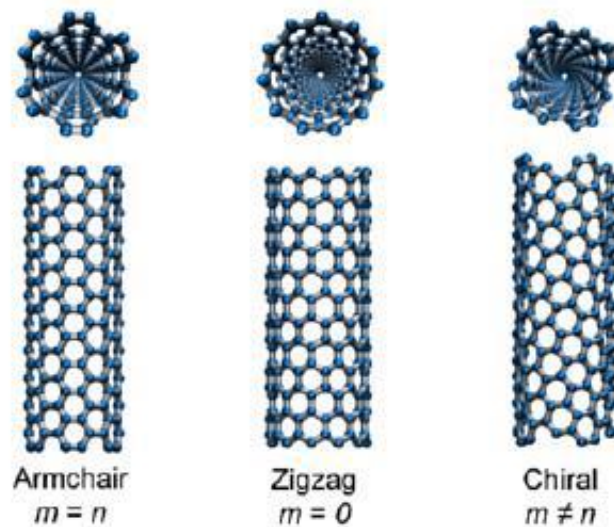
Ανάλογα με τη διάμετρο, τη δομή και τις διαστάσεις των τοιχωμάτων του δακτυλίου γραφίτη, οι CNTs αποκτούν ηλεκτρονικές, μαγνητικές, θερμικές και μηχανικές ιδιότητες. Εξετάζοντας στατιστικά το σύνολο των CNTs έχει καταμετρηθεί ότι το 33% από τα CNTs είναι μεταλλικά και τα υπόλοιπα δύο τρίτα είναι ημιαγώγιμα. Οι ηλεκτρονικές ιδιότητες των CNT σχετίζονται άμεσα με την δομή τους. Πειραματικά αποτελέσματα απέδειξαν ότι η ακόμη και μικρές αλλαγές στη δομή ενός SWNT οδηγούν σε αλλαγή του τύπου του νανοσωλήνα άνθρακα. Με τις υπάρχουσες όμως μεθόδους σύνθεσης των CNTs, είναι πολύ δύσκολο να ελεγχθεί η δομή. Πλέον η πιο σημαντική πρόοδος θα είναι ο έλεγχος της διαμέτρου των CNTs μέσω της μεθόδου σύνθεσης της απόθεσης χημικού ατμού σε πορώδη πρότυπα. Επιπλέον, οι CNTs που προέρχονται από διάφορες μεθόδους σύνθεσης και συχνά τα προϊόντα της παραγωγής είναι ένα μείγμα περισσοτέρων CNTs με διαφορετικές δομές. Επίσης, πολλά υλικά από νανοσωλήνες άνθρακα συνθέτονται από τυχαίες συνθέσεις νανοσωλήνων και το μήκος τους είναι πολλές φορές μικρό. Τα παραπάνω προβλήματα ουσιαστικά επηρεάζουν την έρευνα και τις εφαρμογές των νανοσωλήνων άνθρακα. Ως εκ τούτου, η γνώση για την απόκτηση καθαρού SWNT, καθαρού MWNT, με συγκεκριμένη γεωμετρία είναι πολύ σημαντική. Στις μέρες μας, η μελέτη για ελεγχόμενη σύνθεση νανοσωλήνων άνθρακα παρουσιάζει σημαντική ανάπτυξη.

### **2.2.2 Μονότοιχοι νανοσωλήνες άνθρακα**

Οι μονοφλοιϊκοί νανοσωλήνες μπορούν να παραχθούν με περισσότερους τρόπους. Η αρχική παραγωγή τους στηρίχθηκε σε μια τροποποιημένη εκδοχή τόξων εκκένωσης (arc-discharge), που χρησιμοποιούνταν για τη σύνθεση φουλερενίων. Ωστόσο σήμερα η πιο συνηθισμένη μέθοδος σύνθεσης βασίζεται στην εξάχνωση με χρήση λέιζερ (laser ablation) και στη χημική εναπόθεση με ατμό (Chemical Vapor Deposition, CVD) και πιο συγκεκριμένα στην αποσύνθεση CO. Πρέπει στο σημείο αυτό να αναφερθεί ότι ενώ είναι δυνατή η παραγωγή υψηλής ποιότητας SWNTs, κάποιες ατέλειες πάντα είναι παρούσες, οι οποίες μπορούν να επηρεάσουν σημαντικά τις φυσικές και χημικές ιδιότητες των νανοσωλήνων.

Ένα φύλλο γραφενίου μπορεί να τυλιχτεί με διάφορους τρόπους για να σχηματίσει έναν νανοσωλήνα SWNT. Για την περιγραφή της δομής του μπορεί να χρησιμοποιηθεί η έννοια του χειραλικού διανύσματος (chiral vector), το

μέτρο του οποίου είναι το μήκος της περιφέρειας του νανοσωλήνα. Όπως έχουμε ήδη αναφέρει υπάρχουν armchair, zigzag και chiral νανοσωλήνες (Σχήμα 2.3).



**Σχήμα 2.3:** Τα είδη των SWNT

Εξαιτίας της συμμετρίας και της ηλεκτρονικής δομής του γραφενίου, η δομή του νανοσωλήνα επηρεάζει σημαντικά και τις ηλεκτρικές του ιδιότητες. Ο γενικός κανόνας έχει ως εξής: όλοι οι νανοσωλήνες τύπου armchair εμφανίζουν μεταλλική συμπεριφορά. Όλοι οι υπόλοιποι είναι ημιαγωγοί. Οι ημιαγωγάμοι νανοσωλήνες παίρνουν τιμές ενεργειακού χάσματος αντιστρόφως ανάλογα με τη διάμετρό τους. Έτσι, έχουμε ενεργειακό χάσμα περίπου 1.8eV για σωλήνες μικρής διαμέτρου, και 0.18eV για πιο μεγάλης.

### 2.2.3 Πολύτοιχοι νανοσωλήνες άνθρακα

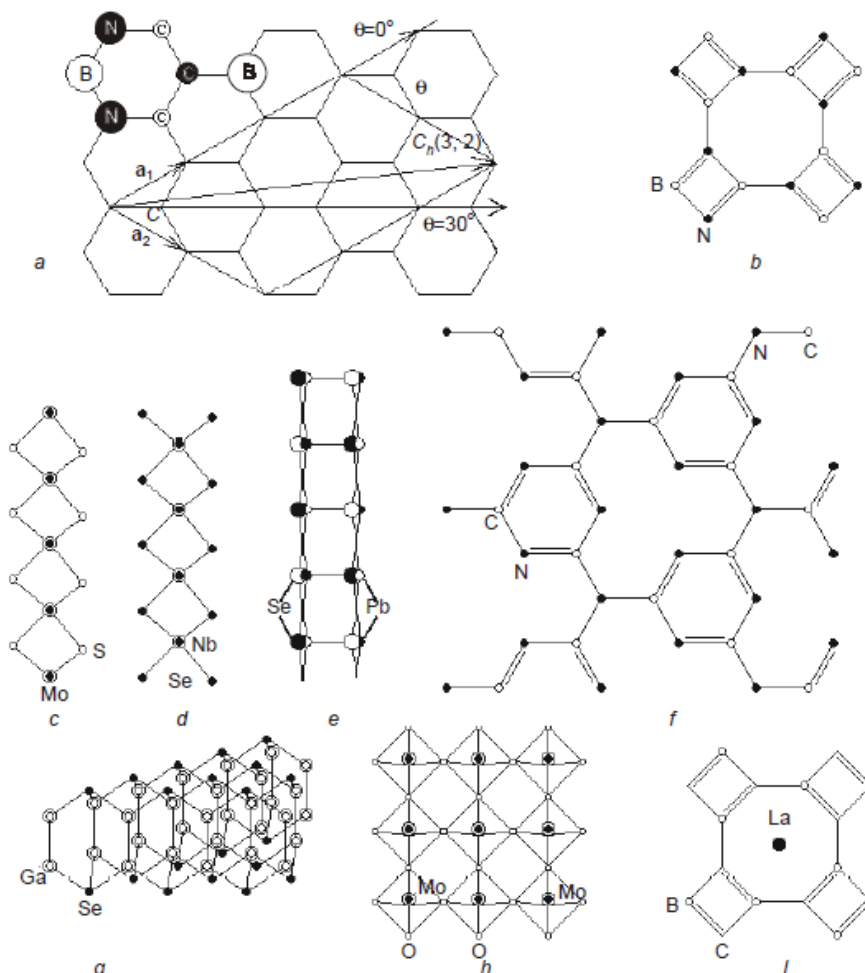
Οι πολυφλοιϊκοί νανοσωλήνες (MWNT), είναι καλοσχηματισμένοι και χωρίς ατέλειες και μπορούν να παραχθούν με τη μέθοδο τόξου εκκένωσης. Σε μερικές περιπτώσεις οι παραγόμενοι νανοσωλήνες είναι παρόμοιοι με τους τέλειους SWNT, καθώς η διασύνδεση των τοιχωμάτων είναι πολύ ασθενής. Ηλεκτρονικά, συμπεριφέρονται είτε σαν μέταλλα είτε σαν ημιαγωγοί μικρού ενεργειακού χάσματος, ενώ όσο αφορά τη θερμική αγωγιμότητα έχουν μετρηθεί τιμές έως και 3000 W/mK.

Εντούτοις ο πιο συνηθισμένος μηχανισμός παραγωγής MWNT είναι αδιαμφισβήτητα η χημική εναπόθεση ατμών (CVD). Οι νανοσωλήνες που παράγονται με αυτή τη μέθοδο γενικά έχουν πάρα πολλές ατέλειες. Αυτό σημαίνει ότι η δομή τους απέχει πολύ από το ιδανικό κυλινδρικό εξαγωνικό πλέγμα. Οι φυσικές τους ιδιότητες υποβαθμίζονται εξαιτίας της παρουσίας των ατελειών και οι μηχανικές, θερμικές και ηλεκτρονικές ιδιότητες υπολείπονται

σημαντικά από αυτές των άθικτων νανοσωλήνων. Ωστόσο η μέθοδος αυτή είναι πολύ σημαντική γιατί έχει το πλεονέκτημα ότι μπορεί να παράγει μεγάλες ποσότητες με χαμηλό κόστος.

## 2.2.4 Νανοσωλήνες με ανόργανες ύλες χωρίς άνθρακα

Η συντριπτική πλειοψηφία των νανοσωλήνων με ανόργανες ύλες χωρίς άνθρακα έχουν ήδη παρασκευαστεί με βάση στοιχεία που, όπως ο άνθρακας, έχουν πεταλοειδή κρυσταλλική δομή. Ως εκ τούτου, οι ταξινομήσεις και οι περιγραφές των ατομικών δομών που γίνονται για τους ανόργανους νανοσωλήνες, είναι βασισμένες στα γεωμετρικά μοντέλα των νανοσωλήνων άνθρακα. Το Σχήμα 2.4 δείχνει τις ατομικές δομές BC<sub>2</sub>N, BN, MoS<sub>2</sub>, NbSe<sub>2</sub>, PbSe, β-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub>, GaSe, MoO<sub>3</sub>, και LaB<sub>2</sub>C<sub>2</sub> οι οποίες χρησιμεύουν ως δομικά στοιχεία για τους ανόργανους νανοσωλήνες.

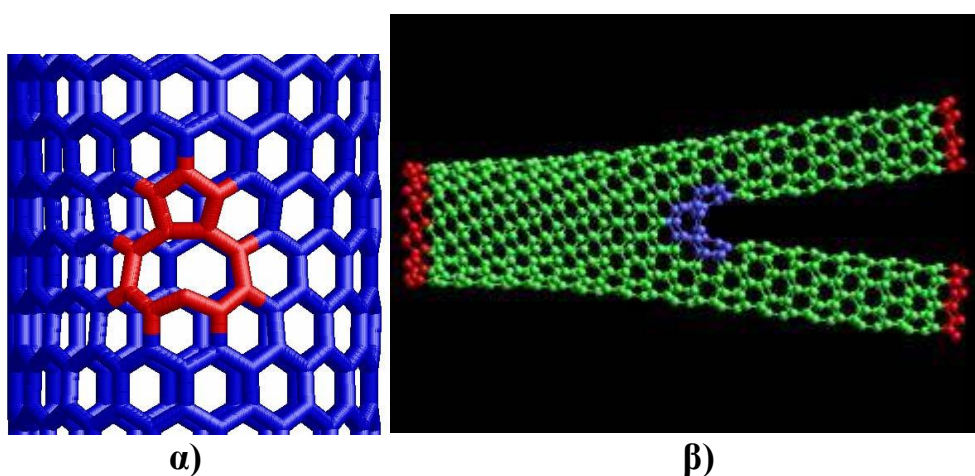


**Σχήμα 2.4:** Στοιχειώδεις ατομικές δομές για την παρασκευή ανόργανων νανοσωλήνων



### 2.3 ΑΤΕΛΕΙΕΣ ΣΤΗ ΝΑΝΟΔΟΜΗ ΤΩΝ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ

Όπως και σε κάθε άλλο υλικό, έτσι και στους νανοσωλήνες άνθρακα εντοπίζονται πληθώρα από ατέλειες, οι οποίες μπορούν να υφίστανται με τη μορφή των ατομικών κενών, όπως δείχνει το σχήμα Σχήμα 2.5α. Επίσης, μπορούν να παρατηρηθούν νέες δομές όπως Y- ή T- διακλαδώσεις (Σχήμα 2.5β) καθώς και αλλοίωση του κυλινδρικού σχήματός τους, όταν αντικαθίστανται εξάγωνα με επτάγωνα ή πεντάγωνα στο πλέγμα των νανοσωλήνων. Άλλη κατηγορία ατελειών προκαλείται από ακαθαρσίες που ενσωματώνονται στη δομή τους κατά τη διάρκεια της ανάπτυξης των νανοσωλήνων, όπως είναι τα καταλυτικά σωματίδια. Μια άλλη βασική μορφή ατελειών αποτελεί η παρουσία άμορφου άνθρακα στα τοιχώματα των νανοσωλήνων

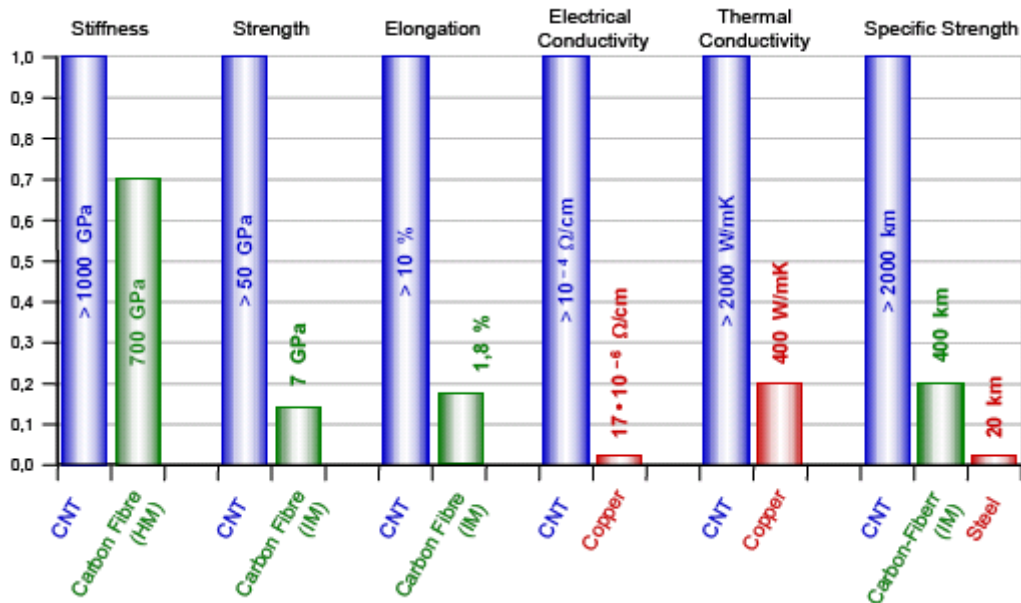


Σχήμα 2.5: Ατέλειες στη δομή των νανοσωλήνων: α) Ατομικό κενό  
β) Y-διακλάδωση

### 2.4 ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ

Οι εξαιρετικά καλές ενδογενείς ιδιότητες των νανοσωλήνων άνθρακα έχουν σαν αποτέλεσμα την έξαρση ερευνών, που αποσκοπούν στην καλύτερη κατανόηση τους καθώς και στην εκμετάλλευσή τους σε ενδεχόμενες εφαρμογές σε ολόκληρο τον κόσμο. Θεωρητικές και πειραματικές μελέτες έχουν επικεντρωθεί α) στην σχέση της ηλεκτρονικής και της ατομικής δομής των νανοσωλήνων, β) στις ιδιότητες μεταφοράς και γ) στις επιδράσεις των αλληλεπιδράσεων μεταξύ ηλεκτρονίου-ηλεκτρονίου και ηλεκτρονίων-φωτονίων. Μεγάλη προσπάθεια καταβάλλεται επίσης για την κατανόηση των μηχανικών ιδιοτήτων τους συμπεριλαμβανομένου του μέτρου ελαστικότητας  $E$ , της αντοχής τους σε εφελκυσμό, καθώς και του μηχανισμού αστοχίας τους. Εκτός των άλλων ένα σημαντικά θεμελιώδες ερώτημα που τίθεται και χρίζει

περαιτέρω θεωρητικής και πειραματικής έρευνας είναι πώς η μηχανική παραμόρφωση ενός νανοσωλήνα άνθρακα επιδρά στις ηλεκτρικές ιδιότητές του. Κύριο χαρακτηριστικό τους είναι η ιδιαίτερη σωληνοειδής δομή τους καθώς και οι πολύ καλές ιδιότητες που εμφανίζουν συγκριτικά με τα συμβατικά υλικά που χρησιμοποιούνται μέχρι σήμερα (Σχήμα 2.6).



**Σχήμα 2.6:** Οι εξαιρετικές ιδιότητες των νανοσωλήνων σε σύγκριση με αυτές των ινών άνθρακα, του χαλκού και του χάλυβα.

### 2.4.1 Μηχανικές ιδιότητες

Από τη στιγμή που οι νανοσωλήνες άνθρακα ανακαλύφθηκαν αναμενόταν ότι θα παρουσίαζαν εκπληκτικές μηχανικές ιδιότητες, κατ' αναλογία με το γραφίτη. Ήταν για αρκετό καιρό γνωστό ότι ο γραφίτης είχε μέτρο ελαστικότητας στη διεύθυνση των επιπέδων του περίπου 1.06TPa και οι νανοσωλήνες αναμενόταν να εμφανίζουν παρόμοια τιμή.

Οι νανοσωλήνες άνθρακα έχουν πολύ μεγάλο μέτρο ελαστικότητας στη διεύθυνση του άξονά τους το οποίο θεωρητικά μπορεί να φτάσει το 1TPa. Για αυτό και τέτοιες δομές είναι κατάλληλες για χρήση στα σύνθετα υλικά τα οποία χρειάζονται ανισότροπες ιδιότητες σαν αυτές των νανοσωλήνων άνθρακα. Οι νανοσωλήνες άνθρακα θεωρούνται οι πιο δύσκαμπτες ίνες με μέτρο ελαστικότητας από 1 έως 1.4TPa, με αντοχή σε εφελκυσμό μεγαλύτερη των 500MPa. Σε σύγκριση με τις κλασικές ενισχυτικές ίνες άνθρακα, ο λόγος της αντοχής προς το βάρος των νανοσωλήνων στην αξονική διεύθυνση είναι περισσότερο από τέσσερις φορές μεγαλύτερος. Πιο ενδιαφέροντα είναι τα αποτελέσματα που αφορούν την παραμόρφωση, η οποία φτάνει μέχρι και 12 % πριν τη θραύση. Στη περίπτωση των πολύτοιχων νανοσωλήνων άνθρακα η

θραύση παρατηρήθηκε μόνο στο εξωτερικό τοίχωμα τους, με τα εσωτερικά τοιχώματα να αυξομειώνουν το μήκος τους σαν ένα μηχανισμό «ξίφους-θήκης».

Επιπρόσθετα έχει βρεθεί ότι οι νανοσωλήνες άνθρακα, για μεγάλα μήκη ή διαμέτρους, είναι πολύ ευλύγιστοι και έτσι δύναται να διπλώσουν, να γίνουν επίπεδοι ή και ακόμα να δημιουργήσουν κύκλους πριν σπάσουν. Οι μηχανικές ιδιότητες των νανοσωλήνων είναι εξαιρετικές. Ήταν αναμενόμενο λοιπόν να προκαλέσουν αμέσως το ενδιαφέρον των ερευνητών για την εκμετάλλευσή τους σε εφαρμογές που απαιτούν υλικά υψηλής μηχανικής απόδοσης. Και αυτό μπορεί να γίνει με τον προσεκτικό σχεδιασμό και κατασκευή συνθέτων υλικών που περιλαμβάνουν νανοσωλήνες άνθρακα. Στο Σχήμα 2.7 απεικονίζονται κάποιες μηχανικές ιδιότητες των νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με άλλα υλικά.

Υλικό	Μέτρο ελαστικότητας (TPa)	Αντοχή σε εφελκυσμό (GPa)	Επιμήκυνση πριν τη θραύση (%)
Armchair SWCNT	0.94 (Θ)	126.2 (Θ)	23.1
Chiral SWCNT	0.92		
Zigzag SWCNT	0.94 (Θ)	94.5 (Θ)	15.6 – 17.5
MWCNT	0.8 – 0.9	150	
Ανοξειδωτο ατσάλι	0.2	0.65 - 1	15-50
Kevlar29	0.062	3.8	3.5
Kevlar49	0.13	3.6	2.5
Kevlar149	0.18	3.6	1.9

ΥΛΙΚΟ	ΑΝΤΟΧΗ ΣΕ ΕΦΕΛΚΥΣΜΟ (MPa)	ΠΥΚΝΟΤΗΤΑ (gr/cm <sup>3</sup> )
Ανθρακονήματα	5600	1.75
Αλουμίνιο	200	2.7
Κατασκευαστικός χάλυβας	370	7.8
CNT	35000	1.2

Υλικό	Young modulus (GPa)	Αντοχή σε εφελκυσμό (GPa)	Πυκνότητα (g/cm <sup>3</sup> )
SWNT	1054	150	
MWNT	1200	150	2.6
Χάλυβας	208	0.4	7.8
Εποξική κόλλα	3.5	0.005	1.25
Ξύλο	16	0.008	0.6

**Σχήμα 2.71:** Μηχανικές ιδιότητες διάφορων υλικών σε σχέση με τους νανοσωλήνες άνθρακα

## 2.4.2 Θερμικές ιδιότητες

Έχουν πραγματοποιηθεί μελέτες για τη θερμική αγωγιμότητα των νανοσωλήνων άνθρακα. Και σε αυτή τη περίπτωση αν θεωρήσουμε τον μονότοιχο νανοσωλήνα άνθρακα ως ένα διπλωμένο γραφίτικο φύλλο, στο οποίο όλα τα φαινόμενα μεταφοράς λαμβάνουν χώρα κατά μήκος του άξονα, η θερμική αγωγιμότητα που μετρείται σε αυτήν την κατεύθυνση είναι πολύ υψηλότερη από την αντίστοιχη στην κάθετη διεύθυνση. Η θερμική αγωγιμότητα για μονότοιχους νανοσωλήνες άνθρακα έχει υπολογιστεί τόσο από πειραματικές όσο και από θεωρητικές μελέτες ότι κυμαίνεται από 3000 ως 6500W/mK. Συγκριτικά στο σημείο αυτό πρέπει να αναφερθεί πως η θερμική αγωγιμότητα του χαλκού, ο οποίος είναι τέλειος αγωγός έχει υπολογιστεί σε 401W/mK.

## 2.4.3 Ηλεκτρικές ιδιότητες

Οι ηλεκτρονικές ιδιότητες των νανοσωλήνων παρουσιάζουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον λόγω των πολλών τεχνολογικών εφαρμογών όπου μπορεί αυτοί να έχουν. Όπως και στα φουλερένια, η καμπυλότητα των φύλλων γραφίτη περιμένουμε να επηρεάζει σημαντικά τις ηλεκτρονικές ιδιότητες των νανοσωλήνων. Ο κυριότερος παράγοντας ο οποίος καθορίζει τις ηλεκτρονικές ιδιότητες ενός νανοσωλήνα είναι ότι τα ηλεκτρόνια του είναι χωρικά περιορισμένα. Μπορούν να κινηθούν μόνο στο χώρο του γραφίτη κι όχι κατά την κάθετη στον άξονα του διεύθυνση στο φύλλο του γραφίτη.

Επιπλέον, καθώς το μήκος του είναι πολύ μεγαλύτερο από τη διάμετρο του, οι επιτρεπόμενες ηλεκτρονικές καταστάσεις κατά την αξονική διεύθυνση είναι πολύ περισσότερες από αυτές κατά την περιφερειακή. Μπορούμε επομένως να θεωρήσουμε πως τα ηλεκτρόνια του νανοσωλήνα χαρακτηρίζονται από κυματανύσματα αξονικής διεύθυνσης.

Η πεπερασμένη περιφέρεια και μήκος του νανοσωλήνα εισάγουν οριακές συνθήκες οι οποίες έχουν ως αποτέλεσμα διακριτές ενεργειακές στάθμες και οι νανοσωλήνες παρουσιάζουν τόσο μεταλλική όσο και ημιαγώγιμη συμπεριφορά. Για μικρή διάμετρο ο νανοσωλήνας μπορεί να παρουσιάσει μεταλλική ή ημιαγώγιμη συμπεριφορά.

Επιπλέον, έχει δειχθεί ότι στους πολύτοιχους νανοσωλήνες το ρεύμα άγεται από το εξωτερικό στρώμα μόνο και όχι από όλο τον όγκο του νανοσωλήνα.

Τέλος, είναι δυνατόν να εισαχθούν προσμίξεις στους νανοσωλήνες αντικαθιστώντας άτομα άνθρακα από άλλα άτομα, όπως το Βόριο ή το άζωτο προκειμένου να δοθούν στο νανοσωλήνα ημιαγώγιμες ιδιότητες.

Οι νανοσωλήνες άνθρακα ανάλογα με την ελικοειδή διαμόρφωσή τους (χειρογραφία-chirality) είναι δυνατόν να παρουσιάσουν είτε μεταλλική συμπεριφορά, είτε συμπεριφορά ημιαγωγού. Χαρακτηρίζονται επίσης από την

ικανότητά τους να άγουν το ηλεκτρικό φορτίο χωρίς την εκπομπή θερμότητας. Η θερμοκρασία και η ύπαρξη μαγνητικών πεδίων είναι παράγοντες που μπορούν να επηρεάσουν την ηλεκτρική αντίσταση των νανοσωλήνων. Δεσμίδες νανοσωλήνων άνθρακα έχουν μετρηθεί και έχει βρεθεί ότι παρουσιάζουν ειδική αντίσταση  $10^{-4}\Omega\text{cm}$  στους 300K. Το γεγονός αυτό, τους κατατάσσει στον πιο αγώγιμο τύπο ιών. Τέλος όσον αφορά τους μεμονωμένους νανοσωλήνες άνθρακα έχει παρατηρηθεί πως άγουν ηλεκτρόνια χωρίς καμία σκέδαση, σε μήκος μερικών μικρών, καθώς επίσης πως άγουν την ικανότητα να μεταφέρουν την υψηλότερη πυκνότητα φορτίου από οποιοδήποτε γνωστό υλικό, η οποία υπολογίζεται σε  $109\text{A}/\text{cm}^2$ .

#### **2.4.4 Οπτικές ιδιότητες**

Ένα ακόμα από τα χαρακτηριστικά των νανοσωλήνων άνθρακα είναι ότι μπορούν να απορροφούν ή να σκεδάζουν το φως, αλλά και να φθορίζουν, ανάλογα με τη διάμετρο και τη χειρομορφία τους (κατανομή εξαγωνικών δακτυλίων). Δηλαδή οπτικές μετρήσεις μπορούν να οδηγήσουν στον καθορισμό των γεωμετρικών χαρακτηριστικών τους. Επιπρόσθετα έχει αναφερθεί πως και το μήκος του νανοσωλήνα επηρεάζει τις οπτικές του ιδιότητες και μάλιστα η αύξησή του εμπλουτίζει την ικανότητα του να απορροφά το φως, αλλά και να φθορίζει στο κοντινό υπέρυθρο φάσμα. Η χρήση αυτής της ιδιότητας μπορεί να επιφέρει μεγάλη εξέλιξη στις οπτικές συσκευές στις οποίες οι νανοσωλήνες άνθρακα μπορούν να παίξουν σημαντικό ρόλο.

#### **2.4.5 Πιεζοηλεκτρικές ιδιότητες**

Ένα πρωτόπορο πείραμα σε ένα νανοσωλήνα έδειξε ότι η ηλεκτρική αγωγιμότητα του είναι δυνατόν να μειωθεί τάξεις μεγέθους όταν παραμορφωθεί υπό την επίδραση μιας ατομικής δύναμης προερχόμενη μεταλλικό άκρο μικροσκοπίου. Το φαινόμενο αυτό φανερώνει πως οι ενεργειακές ζώνες της δομής του νανοσωλήνα άνθρακα αλλάζουν εντυπωσιακά με τη μηχανική παραμόρφωση. Η ιδιότητα αυτή των νανοσωλήνων βρίσκει εφαρμογή στο πεδίο των αισθητήρων.

#### **2.4.6 Ηλεκτροκινητικές ιδιότητες**

Όπως είναι γνωστό η εφαρμογή ενός εξωτερικού ηλεκτρικού πεδίου μπορεί να προκαλέσει την κίνηση των σωματιδίων ενός ρευστού που εξαρτάται από το χρόνο εφαρμογής του πεδίου. Οι ηλεκτρικές ιδιότητές (αγωγιμότητα και διηλεκτρική σταθερά) των νανοσωλήνων άνθρακα διαφέρουν συνήθως από αυτές των ρευστών. Στην περίπτωση που ένας νανοσωλήνας βρεθεί μέσα σε έναν ηλεκτρολύτη έχει την ιδιότητα να έλκει τα ιόντα με αντίθετη ηλεκτρική πόλωση σχηματίζοντας έτσι ένα διπολικό ηλεκτρικό πεδίο. Αν ένα ομοιόμορφο

πεδίο συνεχούς ηλεκτρικού ρεύματος εφαρμοστεί σε νανοσωλήνες άνθρακα που αιωρούνται μέσα σε έναν ηλεκτρολύτη, το διπολικό ηλεκτρικό πεδίο που περιβάλλει τους νανοσωλήνες παραμορφώνεται και τα ηλεκτρικά φορτία που προσδιορίζονται από τη δομή τους επάγονται στις διεπιφάνειες. Η παραμόρφωση του διπολικού ηλεκτρικού πεδίου και η δημιουργία διεπιφανειακών ηλεκτρικών πεδίων προκαλούν ηλεκτρική διπολική ροπή στους νανοσωλήνες γεγονός που τους επιτρέπει να κινούνται μέσα στο εφαρμοζόμενο ηλεκτρικό πεδίο.

#### **2.4.7 Ηλεκτροχημικές ιδιότητες**

Η επιβολή σημαντικού ηλεκτρικού φορτίου στους νανοσωλήνες έχει ως αποτέλεσμα τη δημιουργία μηχανικών παραμορφώσεων, οι οποίες οδηγούν στη παραγωγή μηχανικού έργου. Το ηλεκτρικό φορτίο που εισάγεται στις ζώνες σθένους και αγωγιμότητας τους έχει ως αποτέλεσμα τη μεταβολή της ηλεκτρονιακής δομής τους. Αυτή η ηλεκτροχημική ιδιότητα των νανοσωλήνων είναι δυνατόν να προκαλέσει μεγάλες παραμορφώσεις και δυνάμεις με την εφαρμογή μικρών διαφορών δυναμικού και βρίσκει εφαρμογή στο πεδίο των ενεργοποιητών.

#### **2.4.8 Παραγωγή ισχύος**

Η ιδιότητα αυτή οφείλεται στη ροή ιόντων πάνω στην επιφάνεια των νανοσωλήνων. Ένας νανοσωλήνας που βρίσκεται μέσα σε ένα ηλεκτρολύτη διαρρέεται από ηλεκτρικό φορτίο λόγω του φαινομένου του Coulomb. Η ροή του ρεύματος εξαρτάται τόσο από το ρευστό μέσο και από τη ταχύτητα της ροής. Η παραγωγή ισχύος σε αυτή την περίπτωση είναι μικρή, παρόλα αυτά υπόσχεται πολλά στις ιατρικές εφαρμογές και στους αισθητήρες ροής λόγω της συνεχής παραγωγής ισχύος η οποία βασίζεται κατά αποκλειστικότητα στη ροή.

#### **2.4.9 Χημική ενεργότητα**

Η χημική ενεργότητα των νανοσωλήνων είναι υψηλότερη από αυτήν ενός γραφιτικού πλέγματος και αυξάνεται με την καμπυλότητά του. Συνεπώς, ένας μικρής διαμέτρου νανοσωλήνας έχει μεγαλύτερη χημική ενεργότητα. Ομοιοπολική χημική τροποποίηση είτε στα πλευρικά τοιχώματα, είτε στα 'καπάκια' του νανοσωλήνα είναι δυνατή. Για παράδειγμα, η διαλυτότητα των νανοσωλήνων σε διάφορους διαλύτες μπορεί να ελεγχθεί με αυτόν τον τρόπο.

## 2.5 ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΠΑΡΑΣΚΕΥΗΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ

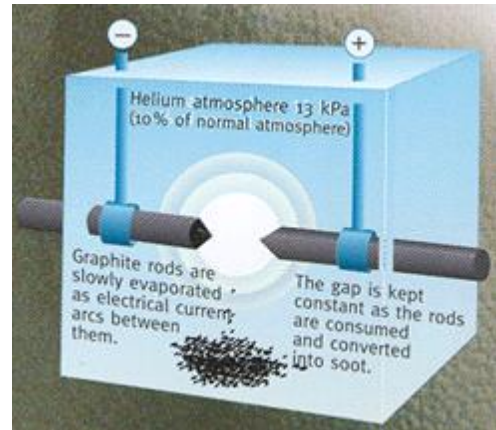
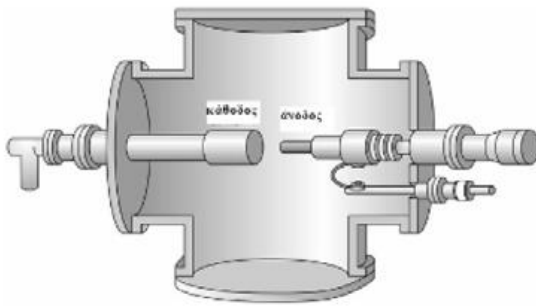
Από τότε που ανακαλύφθηκαν οι νανοσωλήνες άνθρακα περίπου πριν μία δεκαετία, έχουν αναπτυχθεί πολλές τεχνικές παραγωγής τους. Οι πρωταρχικές μέθοδοι σύνθεσης για νανοσωλήνες άνθρακα μονού και πολλαπλού τοιχίου είναι οι εξής:

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

Τα προϊόντα μπορεί να είναι πολύτοιχοι νανοσωλήνες ή μονότοιχοι ανάλογα με τις παραμέτρους της μεθόδου. Γενικά, ενώ οι πολύτοιχοι νανοσωλήνες μπορούν να συντεθούν και χωρίς τη χρήση καταλύτη, οι μονότοιχοι απαιτούν την παρουσία του. Το μέγεθος μάλιστα των καταλυτικών σωματιδίων καθορίζει και τη διάμετρο του νανοσωλήνα. Οι διαδικασίες αέριας φάσης τείνουν να παράγουν νανοσωλήνες άνθρακα λιγότερες προσμίξεις και είναι ιδανικές για παραγωγή μεγάλης κλίμακας ενώ προσφέρουν μεγαλύτερες δυνατότητες για εφαρμογές με σύνθετα υλικά. Σε αυτή την ενότητα, γίνεται ανασκόπηση στις κύριες τεχνικές για την παραγωγή νανοσωλήνων άνθρακα.

### 2.5.1 Εξάχνωση ηλεκτροδίων άνθρακα με τη χρήση ηλεκτρικού τόξου εκκένωσης

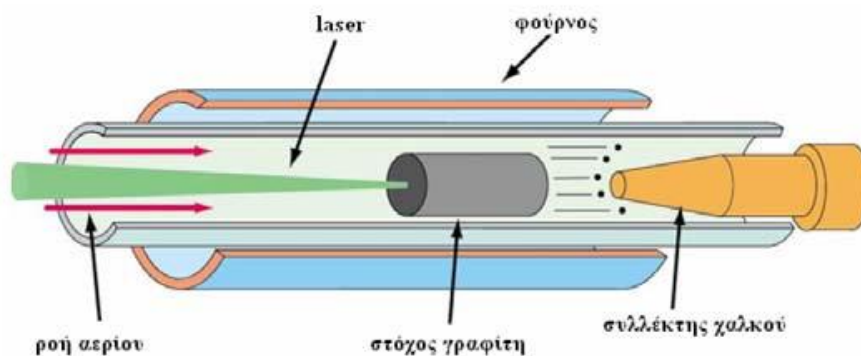
Ο Iijima πρώτος παρατήρησε τους νανοσωλήνες που παράγονται με την τεχνική ηλεκτρικής εκκένωσης τόξου. Όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.8, αυτή η τεχνική, γενικά συνοδεύεται από την χρήση δύο υψηλής καθαρότητας γραφιτικών πόλων ως ανόδου και καθόδου. Οι πόλοι πλησιάζουν ο ένας τον άλλο υπό ατμόσφαιρα ηλίου και εφαρμόζεται μια τάση, μέχρι να επιτευχθεί ένα σταθερό ηλεκτρικό τόξο. Η ακριβής διαδικασία ποικίλει ανάλογα το μέγεθος των γραφιτικών πόλων. Καθώς καταναλώνεται η άνοδος, ένα σταθερό κενό μεταξύ της ανόδου και της καθόδου διατηρείται προσαρμόζοντας την θέση της ανόδου. Το υλικό έπειτα εναποτίθεται πάνω στην κάθοδο για να σχηματίσει μία ανάπτυξη που αποτελείται από ένα εξωτερικό κέλυφος από τηγμένο υλικό και ένα μαλακότερο ινώδη πυρήνα που περιέχει νανοσωλήνες και άλλα σωματίδια άνθρακα. Για να παραχθούν νανοσωλήνες άνθρακα, τα ηλεκτρόδια εμποτίζονται με μια μικρή ποσότητα από σωματίδια μεταλλικού καταλύτη.



**Σχήμα 2.8:** Σχηματική αναπαράσταση εξάχνωσης ηλεκτροδίων άνθρακα με τη χρήση ηλεκτρικού τόξου εκκένωσης

### 2.5.2 Φωτοδιάσπαση γραφίτη με τη χρήση λέιζερ

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



**Σχήμα 2.9:** Σχηματική αναπαράσταση διαδικασίας φωτοδιάσπασης γραφίτη με τη χρήση λέιζερ

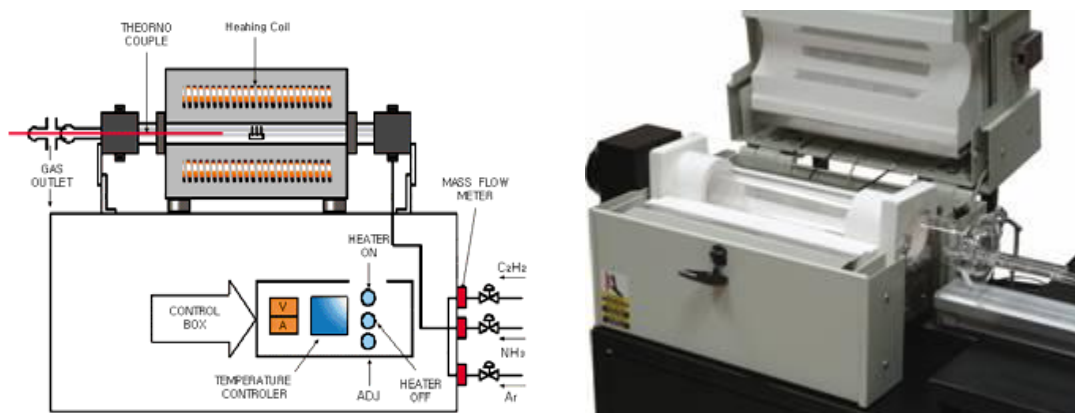
Σε αυτήν την τεχνική, ένα laser χρησιμοποιείται για να φωτοδιασπά ένα γραφιτικό στόχο που συγκρατείται σε ένα φούρνο ελεγχόμενης ατμόσφαιρας σε θερμοκρασίες κοντά στους 1200 °C. Η διάταξη αυτής της τεχνικής φαίνεται στο Σχήμα 2.9. Για να παραχθούν νανοσωλήνες μονού τοιχώματος, ο γραφιτικός στόχος εμποτίζεται με καταλύτη κοβάλτιο και νικέλιο. Το συμπυκνωμένο υλικό έπειτα συλλέγεται πάνω σε ένα υδρόψυκτο στόχο.



Και οι δύο προηγούμενες τεχνικές περιορίζονται από τον όγκο του δείγματος που μπορούν να παράγουν σε σχέση με το μέγεθος της πηγής άνθρακα (η άνοδος στη ηλεκτρικής εκκένωσης τόξου και ο στόχος στη τεχνική εξάχνωσης γραφίτη με χρήση δεσμών Laser). Επιπρόσθετα, απαιτούνται επιπλέον βήματα καθαρισμού για να διαχωρίσουμε τους νανοσωλήνες από ανεπιθύμητα παραπροϊόντα. Αυτοί οι περιορισμοί έχουν υποκινήσει την ανάπτυξη των τεχνικών αέριας φάσης, όπως τη μέθοδο χημικής εναπόθεσης με ατμό, όπου οι νανοσωλήνες σχηματίζονται από την αποσύνθεση ενός αερίου που περιέχει άνθρακα. Οι τεχνικές αέριας φάσης είναι αποδεκτές για συνεχείς διαδικασίες αφού η πηγή άνθρακα αντικαθίσταται συνεχώς από ρέον αέριο. Επί πρόσθετα, η τελική καθαρότητα των νανοσωλήνων που παράγονται μπορεί να είναι αρκετά υψηλή, ελαχιστοποιώντας έτσι τα επιπλέοντα βήματα καθαρισμού.

### 2.5.3 Καταλυτική χημική εναπόθεση ατμών (CVD)

Οι τεχνικές αέριας φάσης χρησιμοποιούν αέριους υδρογονάνθρακες ως πηγή άνθρακα για την παραγωγή νανοσωλήνων άνθρακα μονού και πολλαπλού τοιχώματος μέσω της CVD (Σχήμα 2.10). Οι υδρογονάνθρακες πυρολύονται γρήγορα πάνω σε επιφάνειες γύρω στους 600-700 °C. Ως συνέπεια αυτού, οι νανοσωλήνες που αναπτύσσονται από υδρογονάνθρακες μπορούν να έχουν ουσιαστικά αποθέματα άμορφου άνθρακα πάνω στην επιφάνεια των σωλήνων και θα απαιτούσαν περισσότερα βήματα καθαρισμού. Παρόλο που η αδράνεια των υδρογονανθράκων σε χαμηλές θερμοκρασίες επιδρά στην καθαρότητα των παραγόμενων νανοσωλήνων, η χαμηλότερη θερμοκρασία επεξεργασίας ενεργοποιεί την ανάπτυξη νανοσωλήνων άνθρακα σε μια ποικιλία υποστρωμάτων, περιλαμβανομένου και του γυαλιού.



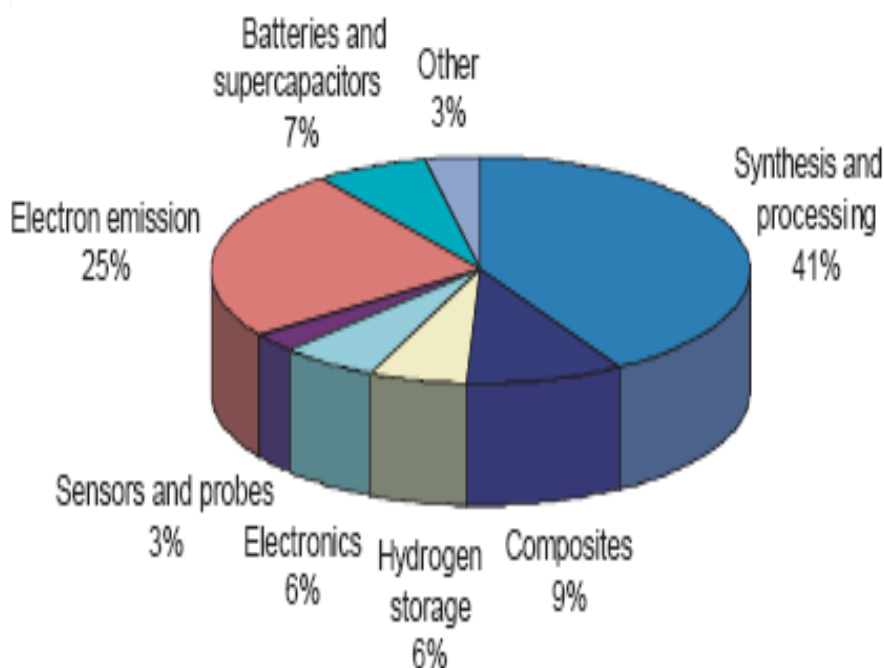
Σχήμα 2.10: Διάταξη CVD για τη παραγωγή νανοσωλήνων άνθρακα

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

Πρόκειται για την ανάπτυξη αέριας φάσης των νανοσωλήνων μονού τοιχώματος με το μονοξείδιο του άνθρακα ως πηγή άνθρακα σε υψηλές θερμοκρασίες και πιέσεις (1200°C και 10atm). Οι νανοσωλήνες HiPCO (high-pressure conversion of carbon monoxide) είναι ιδιαίτερα προσεγμένοι και έχουν εμπορευματοποιηθεί από την Carbon Nanotechnologies Inc (Houston, TX) η οποία ασχολείται με την παραγωγή μεγάλης κλίμακας νανοσωλήνων άνθρακα μονού τοιχώματος υψηλής καθαρότητας.

### 2.6 ΧΡΗΣΕΙΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ

Οι νανοσωλήνες άνθρακα έχουν συγκεντρώσει το ενδιαφέρον των ερευνητών και των επενδυτών σε παγκόσμιο επίπεδο, λόγω των πολυάριθμων θεωρητικών εφαρμογών τους. Στο Σχήμα 2.11 παρουσιάζεται η κατανομή των διεθνών διπλωμάτων ευρεσιτεχνίας που σχετίζονται με τους νανοσωλήνες άνθρακα.



**Σχήμα 2.11:** Κατανομή των διεθνών διπλωμάτων ευρεσιτεχνίας που σχετίζονται με τους νανοσωλήνες άνθρακα.

Ενδεικτικά αναφέρονται οι κυριότερες πιθανές χρήσεις τους στο άμεσο μέλλον (στην προσεχή 20ετία):

1. Τρανζίστορς, αντικατάσταση του πυριτίου, δίοδοι, νανοπυκνωτές.
2. Κβαντικοί υπολογιστές.
3. Επίπεδες οργανικές οθόνες.
4. Βαφή εκτροπής της ακτινοβολίας ραντάρ.
5. Ενίσχυση σήματος σε κινητά τηλέφωνα (και όχι μόνο).
6. Αντικατάσταση οπτικών ινών (αργότερα), ηλεκτρικών καλωδίων.
7. Νανοαισθητήρες εξαιρετικής ευαισθησίας.
8. Ενίσχυση υλικών: ισχυρότερα κράματα και πολυμερή, σε οχήματα (διαστημόπλοια, αεροπλάνα, αυτοκίνητα), σε αλεξίσφαιρα, εργαλεία, κ.ά.
9. Διαστημικός ανελκυστήρας.
10. Κυψέλες αποθήκευσης υπερσυμπυκνωμένου υδρογόνου.
11. Τεχνητοί μύες.

Οι προοπτικές εφαρμογών αυτού του επιπέδου είναι πολύ σημαντικές. Αυτή τη στιγμή κυριότερα εμπόδια στην προώθησή τους είναι η περιορισμένη στη μονάδα του χρόνου δυνατότητα παραγωγής των νανοσωλήνων, καθώς και η δυσκολία συνένωσής τους σε μακροδομές (νήματα) που θα διατηρούν τις ιδιότητές τους. Τελευταίες έρευνες και πειράματα δείχνουν πως αυτά τα εμπόδια είναι εφικτό να ξεπεραστούν.

Οι νανοσωλήνες σε μορφή συνόλων βρίσκουν εφαρμογή σε σύνθετα υλικά ως φάση ενίσχυσης με βελτιωμένες μηχανικές ιδιότητες και σε ήλεκτρο-μηχανολογικούς εκκινητές. Επίσης έχει προταθεί η χρήση μαζικών ποσοτήτων νανοσωλήνων ως μέσα αποθήκευσης υδρογόνου υψηλής χωρητικότητας. Όσον αφορά στους μεμονωμένους νανοσωλήνες είναι δυνατόν να βρουν εφαρμογή ως πηγές πεδίων εκπομπής (field emission sources), ως άκρα σε ηλεκτρονικό μικροσκόπιο μετάδοσης (TEM), ως νανολαβίδες (nano-tweezers) ακόμα και ως χημικοί αισθητήρες. Τέλος επισημαίνεται πως οι νανοσωλήνες θα αποτελέσουν τα κεντρικά στοιχεία των μελλοντικών μικροσκοπικών ηλεκτρονικών συσκευών.

### 2.6.1 Αποθήκευση Ενέργειας

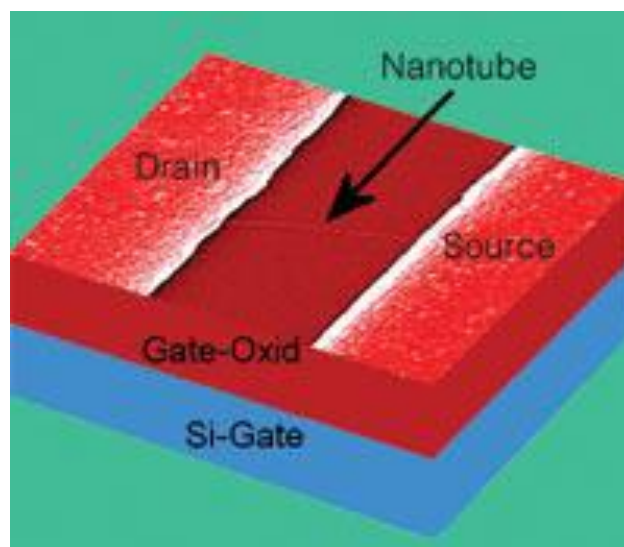
Ο γραφίτης, τα ανθρακούχα υλικά και τα ηλεκτρόδια από ίνες άνθρακα χρησιμοποιούνται συχνά στα κελιά καυσίμου (fuel cells), στις μπαταρίες και σε άλλες ηλεκτρομηχανικές εφαρμογές. Τα πλεονεκτήματα των νανοσωλήνων όσο αναφορά την αποθήκευση ενέργειας είναι οι μικρές τους διαστάσεις, η λεία επιφάνεια, και η τέλεια γνώση της δομής της επιφάνειας. Η αποτελεσματικότητα των κελιών καυσίμου καθορίζεται από τον ρυθμό μεταφοράς των ηλεκτρονίων στα ηλεκτρόδια του άνθρακα, κάτι που είναι ταχύτερο στους νανοσωλήνες σύμφωνα με την αρχή του Nernstian.

## 2.6.2 Συσκευές Εκπομπής Πεδίου

Ο ιδανικός πομπός για τέτοιου είδους συσκευές πρέπει να έχει διάμετρο της τάξεως των νανομέτρων, δομική ακεραιότητα, υψηλή ηλεκτρική αγωγιμότητα, μικρή διασπορά ενέργειας και μεγάλη χημική σταθερότητα. Οι νανοσωλήνες άνθρακα πληρούν όλες αυτές τις προϋποθέσεις. Παρόλα αυτά τροχοπέδη στη χρησιμοποίηση των νανοσωλήνων σε τέτοιου είδους εφαρμογές είναι η εξάρτηση της αγωγιμότητας των σωληνίσκων από τη διαδικασία παραγωγής.

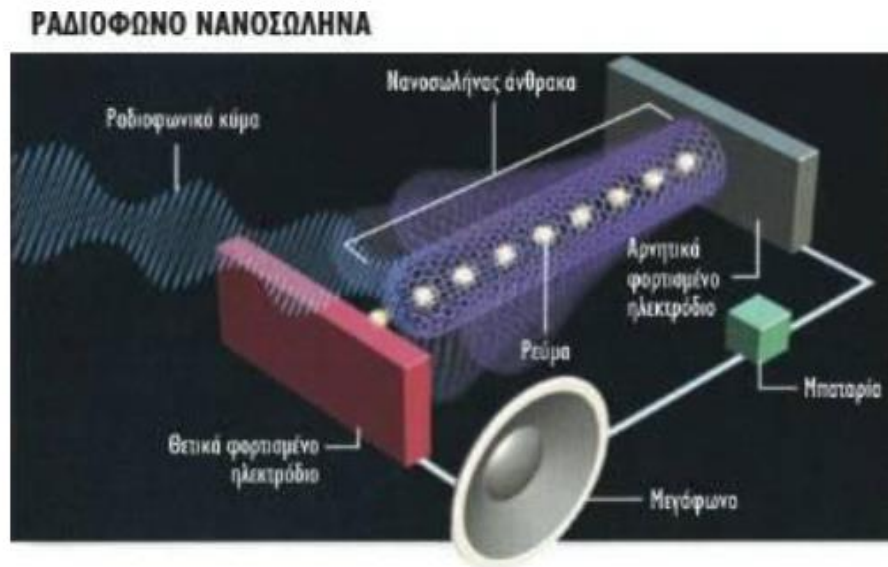
## 2.6.3 Τρανζίστορς

Ένας διακόπτης τριών θέσεων μπορεί να κατασκευαστεί από ένα και μόνο ημιαγώγιμο μονότοιχο νανοσωλήνα άνθρακα. Εφαρμόζοντας τάση σε ένα ηλεκτρόδιο εισόδου ο νανοσωλήνας μπορεί να μετατραπεί από αγωγίμος σε μη αγωγίμος. Τέτοια μικρά τρανζίστορς από νανοσωλήνα άνθρακα αν ενωθούν μαζί μπορούν να δουλέψουν ως λογικοί διακόπτες οι οποίοι είναι το βασικό συστατικό των υπολογιστών (Σχήμα 2.12).



**Σχήμα 2.12:** Τρανζίστορ από νανοσωλήνα άνθρακα

Ένας νανοσωλήνας άνθρακα μπορεί να λειτουργήσει ως ραδιοφωνικός δέκτης, αλλά και πομπός.



**Σχήμα 2.13:** Νανοςωλήνας άνθρακα ως ραδιοφωνικός δέκτης

Το ραδιόφωνο νανοςωλήνα άνθρακα (Σχήμα 2.13) που εφηύραν το 2007 ο φυσικός Αλεξ Ζεττλ και οι συνάδελφοί του στο Πανεπιστήμιο Μπέρκλεϊ της Καλιφόρνια πετυχαίνει κάτι εκπληκτικό και απρόσμενο: Ένας και μόνο νανοςωλήνας συντονίζεται στο ηλεκτρομαγνητικό σήμα που εκπέμπει κάποιος ραδιοφωνικός σταθμός, το ενισχύει, το μετατρέπει σε ηχητικό σήμα (το αποδιαμορφώνει) και το στέλνει σε ένα μεγάφωνο όπου μπορεί να ακουστεί καθαρά. Σύμφωνα με τους κατασκευαστές του, το νανοραδιόφωνο μπορεί να γίνει η βάση για πολλές εφαρμογές στην καθημερινότητα, όπως βοηθήματα για τη βαρηκοΐα, κινητά τηλέφωνα και ραδιόφωνα που να χωράνε ολόκληρα μέσα στον ακουστικό πόρο. Ένα απλό ραδιόφωνο χαμηλής πιστότητας αποτελείται από τέσσερα βασικά μέρη: Μια κατάλληλη κεραία που να συλλαμβάνει τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα των ραδιοφωνικών σταθμών, ένα σύστημα συντονισμού σε κάποιο συγκεκριμένο σταθμό, έναν ενισχυτή που αυξάνει την ένταση του σήματος και έναν αποδιαμορφωτή, που διαχωρίζει το ηχητικό σήμα από το φέρον κύμα μέσω του οποίου μεταδίδεται. Το ηχητικό σήμα (με μορφή ηλεκτρικού κύματος) μεταφέρεται σε κάποιο μεγάφωνο, όπου τελικά παράγεται ο ήχος που εκπέμφθηκε από το σταθμό. Ο νανοςωλήνας άνθρακα που είναι ο πυρήνας του νανοραδιοφώνου, αποδείχτηκε συνδυασμός τέτοιων εξαιρετικά ευνοϊκών χημικών, γεωμετρικών και ηλεκτρικών ιδιοτήτων, ώστε όταν τοποθετήθηκε ανάμεσα σε δύο ηλεκτρόδια, αυτό το μικροσκοπικό στοιχείο πέτυχε και τις τέσσερις λειτουργίες που απαιτεί ένας ραδιοφωνικός δέκτης. Δεν χρειάστηκε κανένα άλλο εξάρτημα!

Ο Ζεττλ και οι συνάδελφοί του κατασκεύασαν ένα πολύτοιχο νανοςωλήνα στην άκρη ενός ηλεκτροδίου, μια διάταξη όπου ο νανοςωλήνας μοιάζει με ιστό σημαίας στην κορυφή ενός λόφου. Επέλεξαν πολύτοιχο νανοςωλήνα επειδή μπορούσε να είναι μεγαλύτερος από άλλα είδη νανοςωλήνων και ήταν ευκολότερο να προσαρμοστεί στην επιφάνεια του ηλεκτροδίου. Ο νανοςωλήνας

που χρησιμοποιήσαν αρχικά είχε μήκος 500 νανόμετρα και διάμετρο 10 (περίπου όσο και ένας βιολογικός ιός). Σε μικρή απόσταση από την ελεύθερη άκρη του τοποθέτησαν κοίλο ηλεκτρόδιο, ώστε εφαρμόζοντας μικρή διαφορά δυναμικού και αξιοποιώντας ένα κβαντομηχανικό φαινόμενο να πετύχουν ροή ηλεκτρονίων μέσα από το διάκενο ανάμεσα στην άκρη του νανοσωλήνα και το κοίλο ηλεκτρόδιο. Σε ένα κανονικό ραδιόφωνο, τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα επάγουν ένα ασθενές ηλεκτρικό ρεύμα μέσα στην κεραία, η οποία παραμένει σταθερή. Οι νανοσωλήνες, όμως, είναι τόσο ευαίσθητοι και ελαφριοί, ώστε τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα που πέφτουν πάνω τους μπορούν να τους προκαλέσουν μηχανική ταλάντωση. Στο νανόκοσμο η βαρύτητα και η δύναμη της αδράνειας παίζουν ασήμαντο ρόλο, ενώ κυριαρχούν οι ηλεκτρομαγνητικές αλληλεπιδράσεις. Η ταλάντωση του νανοσωλήνα μεταβάλλει την ένταση του ηλεκτρικού ρεύματος εκπομπής πεδίου, κατά το οποίο ακόμα και μια μικρή διαφορά δυναμικού προκαλεί μεγάλη ροή ηλεκτρονίων από μια ακίδα σε κοντινό αντιηλεκτρόδιο. Έτσι ο νανοσωλήνας εκτός από κεραία λειτουργεί και ως ενισχυτής. Στα συμβατικά ραδιόφωνα, η αποδιαμόρφωση, δηλαδή ο διαχωρισμός από το φέρον κύμα, του ενσωματωμένου σ' αυτό κύματος με τη μεταφερόμενη πληροφορία, γίνεται από ένα κύκλωμα ανόρθωσης και φιλτραρίσματος, με τη βοήθεια κατ' ελάχιστον μιας διόδου και ενός πυκνωτή. Όμως η ανόρθωση είναι ένα από τα χαρακτηριστικά του κβαντομηχανικού φαινομένου της εκπομπής πεδίου, που σημαίνει ότι αυτόματα η ηλεκτρική διακύμανση που προκαλείται από την ταλάντωση του νανοσωλήνα αντιστοιχεί μόνο στο ηχητικό τμήμα του ραδιοφωνικού σήματος. Τέλος, ο συντονισμός σε κάποιο σταθμό που στα κανονικά ραδιόφωνα γίνεται με τη βοήθεια ενός μεταβλητού πυκνωτή, στο νανοραδιόφωνο πετυχαίνεται με το τέντωμα του νανοσωλήνα - κάτω από την επίδραση διαφορετικής ισχύος ηλεκτρικού πεδίου - σα να ήταν χορδή κιθάρας. Με κάποιες τροποποιήσεις, οι ερευνητές πέτυχαν τελικά να χρησιμοποιήσουν το νανοραδιόφωνο και ως πομπό με εμβέλεια αρκετών μέτρων.

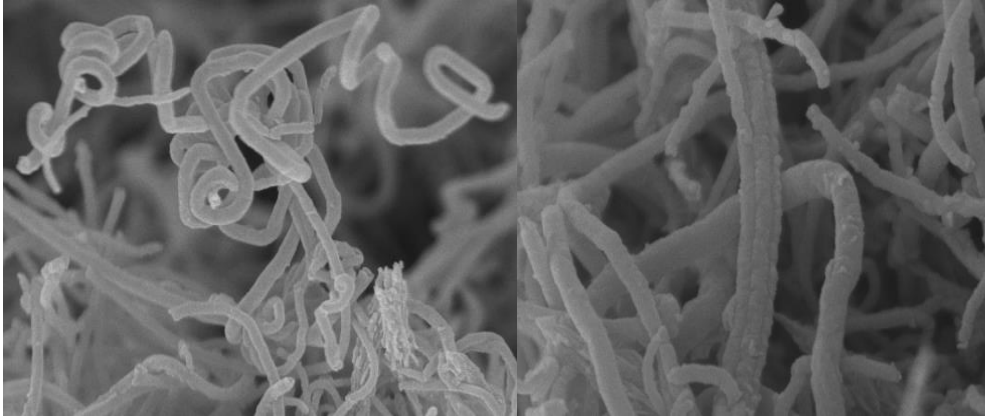
#### **2.6.4 Νανοσύνθετα υλικά**

Τα νανοσύνθετα υλικά (Σχήμα 2.14) είναι υλικά ευρείας κλίμακας, τα οποία αποτελούνται από δύο ή περισσότερες συνιστώσες εκ των οποίων τουλάχιστο μία πρέπει να βρίσκεται σε νάνο-κλίμακα. Για παράδειγμα, ένα πολυμερές που παίζει το ρόλο του μητρικού υλικού, όταν αναμιχθεί με ένα έγκλεισμα, που βρίσκεται σε νάνο-διάσταση, όπως νανοσωλήνες άνθρακα, φουλερένιο ή γραφένιο, δημιουργεί ένα σύνθετο υλικό το οποίο χαρακτηρίζεται ως νανοσύνθετο.

Τα νάνο-εγκλείσματα μπορεί να είναι:

- Νάνο-σωματίδια σε μορφή κόκκου, τα οποία είναι μηδενικής διάστασης
- Νάνο-ίνες και νανοσωλήνες, τα οποία είναι μίας διάστασης (1D)
- Λεπτά στρώματα επικάλυψης δύο διαστάσεων (2D)

- Ενσωματωμένα δίκτυα και συμπολυμερή τα οποία μπορεί να είναι δύο ή τριών διαστάσεων (3D)



**Σχήμα 2.14:** Εικόνες ηλεκτρονικής μικροσκοπίας σάρωσης νανοσωλήνων άνθρακα χωρίς επαρκή διασπορά σε μήτρα από τσιμεντοπολτό.

Τα νανοςύνθετα υλικά ξεχωρίζουν από όλα τα υπόλοιπα σύνθετα γιατί εμφανίζουν εξαιρετικές ιδιότητες που τα κοινά σύνθετα δεν μπορούν να προσεγγίσουν. Αυτό που τα κάνει τόσο ξεχωριστά είναι τα εγκλείσματα τα οποία βρίσκονται σε νάνο κλίμακα και εμφανίζουν αξιοσημείωτες ιδιότητες ως αυτόνομα συστατικά. Αρκεί το μητρικό υλικό να ενισχυθεί με 5 έως 6% κατά βάρος σε νάνο εγκλείσματα για την επίτευξη βέλτιστων ιδιοτήτων. Οι ιδιότητες, όμως, των νανοσυνθέτων δεν εξαρτώνται μόνο από τις ιδιότητες των νάνο εγκλεισμάτων αλλά και από τη μορφολογία και τα χαρακτηριστικά των διεπιφανειών εγκλείσματος-μήτρας. Η διεπιφάνεια στην περίπτωση των νανοσυνθέτων υλικών είναι ουσιαστικά άπειρη, καθώς η επιφάνεια επαφής των εγκλεισμάτων με το μητρικό υλικό είναι τεράστια. Αυτό μπορεί να γίνει αντιληπτό αν σκεφτεί κανείς πόσες νάνο ίνες θα μπορούσαν να προκύψουν από μία μικρο-ίνα. Στην περίπτωση αυτή το βάρος της ενίσχυσης θα παρέμενε ίδιο αλλά η διεπιφάνεια του νάνο-συνθέτου θα ήταν τάξεις μεγέθους μεγαλύτερη από αυτή του μικρο-συνθέτου. Τέλος, εξίσου σημαντικό είναι το γεγονός ότι στη νάνο κλίμακα εμφανίζονται μοριακά, ατομικά και πυρηνικά φαινόμενα.

Τα νανοςύνθετα υλικά αν και παρουσιάζουν πολλά και σημαντικά πλεονεκτήματα έναντι των κοινών συνθέτων υλικών, παράλληλα παρουσιάζουν και κάποια μειονεκτήματα, τα οποία όμως δεν μπορούν να γενικευτούν. Το βασικότερο μειονέκτημα που παρουσιάζουν τα νανοςύνθετα υλικά πολυμερικής μήτρας είναι οι δυσκολίες που παρουσιάζονται στην κατασκευή τους. Ο λόγος έγκειται στο ότι τα νάνο-εγκλείσματα έχουν την τάση να έλκονται μεταξύ τους, έλξη η οποία οφείλεται κυρίως σε δυνάμεις van der Waals, δημιουργώντας συσσωματώματα. Τα συσσωματώματα πρέπει να «σπάσουν» κατά τη διαδικασία κατασκευής του συνθέτου, γεγονός που αποτελεί πονοκέφαλο για

τους ερευνητές. Η ύπαρξη συσσωματωμάτων επιδρά αρνητικά στην μηχανική συμπεριφορά των νανοσυνθέτων.

Τα νανοϋλικά αποτελούν στο σύνολό τους αντιμαχόμενο ζήτημα στην επιστημονική κοινότητα. Αυτό προκύπτει από το ότι οι ατομικής ή μοριακής κλίμακας διαστάσεις τους μπορεί να είναι επικίνδυνες για τον άνθρωπο και τη φύση. Τα νανοϋλικά μπορούν να εισχωρήσουν στον ανθρώπινο οργανισμό με μεγάλη ευκολία με αποτέλεσμα να υπάρχει κίνδυνος καρκινογένεσεων, οπότε και πρέπει να τηρούνται οι συνθήκες ασφαλείας. Όπως καθετί νέο, έτσι και τα νανοϋλικά και κατ' επέκταση τα νανοςύνθετα έχουν προσελκύσει τόσο το επιστημονικό όσο και το βιομηχανικό ενδιαφέρον. Η χρήση τους, όμως, πρέπει να είναι ορθολογική, να γίνεται με μέτρο και να στοχεύει στη βελτίωση της ποιότητας ζωής του ανθρώπου και όχι στο υπερκέρδος. Το γεγονός αυτό τονίζεται από επιστήμονες καθώς υπάρχει εμπειρία από το παρελθόν. Για παράδειγμα, τα πλαστικά μπήκαν στη ζωή του ανθρώπου και κατέκλυσαν τον κόσμο χωρίς να υπάρχει ενδιαφέρον για το περιβάλλον και μόνο ύστερα από πολύ μεγάλες πιέσεις χρησιμοποιούνται, πλέον, πλαστικά που είναι ανακυκλώσιμα και φιλικότερα προς το περιβάλλον.

### **2.6.5 Ιατρική και βιολογία**

Από το 2002 και έπειτα αρκετοί ερευνητές ενασχολήθηκαν με την συνένωση νανοσωλήνων άνθρακα και μορίων DNA και την τροποποίηση των νανοσωλήνων άνθρακα με διάφορους τύπους DNA. Συγκεκριμένα οι μονότοιχοι νανοσωλήνες έχουν μέγεθος παρόμοιο αυτού του DNA και έτσι είναι εφικτό στα άκρα των νανοσωλήνων να "αγκιστρωθούν" μόρια DNA καθώς και άλλες βιοχημικές ουσίες. Ο παραπάνω τρόπος καθιστά εφικτό οι νανοσωλήνες άνθρακα με DNA να σχετιστούν με την αποκωδικοποίηση του DNA χρησιμοποιώντας την αγωγιμότητα των νανοσωλήνων. Διαφορετικά είδη DNA έχουν διαφορετική δομή και κατά προέκταση διαφορετική αγωγιμότητα έτσι οι νανοσωλήνες με DNA θα απωθήσουν ή θα ελκύσουν μόνο συγκεκριμένα μόρια DNA. Επίσης λόγω της παραπάνω ιδιότητας οι νανοσωλήνες με DNA μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε εξελιγμένες θεραπείες με φάρμακα ή αντιβιοτικά όπου ο νανοσωλήνας άνθρακα θα είναι ο κομιστής της φαρμακευτικής ουσίας και θα τη απελευθερώνει μόνο όταν έρθει σε επαφή με τα ασθενή κύτταρα ή μύες του οργανισμού αυξάνοντας έτσι την απόδοση των φαρμάκων και μειώνοντας ταυτόχρονα τον χρόνο θεραπείας .

### **2.6.6 Υπολογιστές**

Οι τομείς που υπάρχει δυναμικό για τη χρήση της νανοτεχνολογίας είναι οι ηλεκτρονικοί υπολογιστές, ηλεκτρονικές συσκευές και αισθητήρες, όπου η μείωση του μεγέθους και βάρους αυτών των συσκευών με ταυτόχρονη αύξηση των δυνατοτήτων είναι δυνατή.

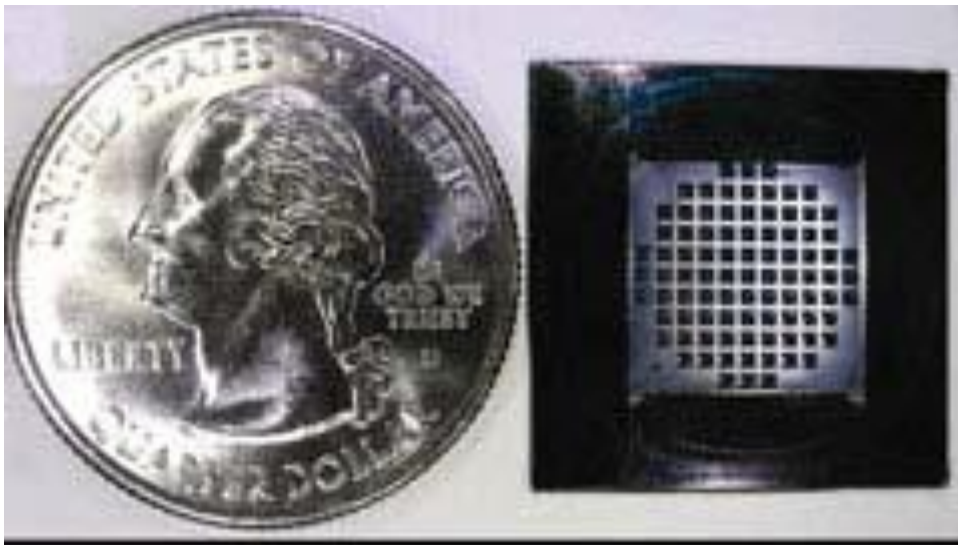


### 2.6.7 Βιοαισθητήρες

Ρουχισμός βασισμένος στη χρήση νανοσωλήνων άνθρακα θα έχει τη δυνατότητα να παρακολουθεί τις ζωτικές ενδείξεις του ατόμου και σε περίπτωση που αυτός πληγωθεί να αλλάξει σχήμα έτσι ώστε να σταματήσει την αιμορραγία ή ακόμα να του χορηγήσει φάρμακα ή ηρεμιστικά και ορμόνες και να διατηρεί σταθερή τη θερμοκρασία του σώματος σταθερή.

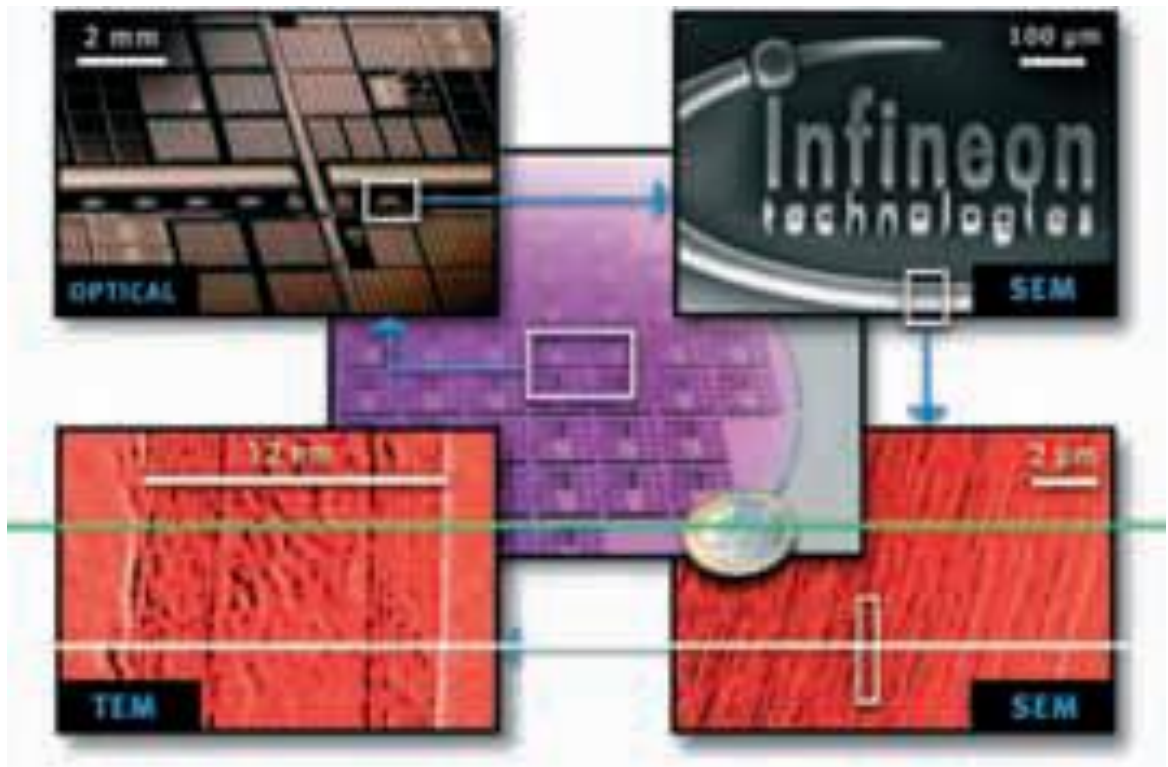
### 2.6.8 Άλλες εφαρμογές

Οι νανοσωλήνες άνθρακα, λόγω της μεγάλης ειδικής τους επιφάνειας και της ικανότητάς τους να προσκολλούν σχεδόν κάθε χημικό είδος στα τοιχώματά τους, χρησιμοποιούνται ευρέως ως καταλυτικά υποστρώματα. Επίσης χρησιμοποιούνται για την μεταφορά και την απαγωγή θερμότητας στην ηλεκτρονική και ειδικά στα μικροκυκλώματα. Άλλες εφαρμογές αφορούν στη χρήση τους στα φωτοβολταϊκά κελιά και την δημιουργία νανοπορώδων μεμβρανών π.χ. για καθαρισμό και αφαλάτωση νερού. Μια τέτοια μεμβράνη απεικονίζεται στο Σχήμα 2.15, με μέγεθος μικρότερο και από αυτό του κέρματος. Οι νανοσωλήνες τοποθετούνται στο κέντρο κάθε τετραγώνου.

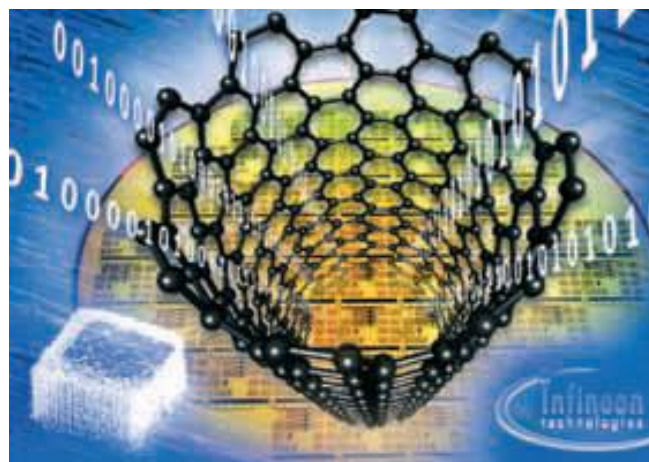


**Σχήμα 2.15:** Μεμβράνη από νανοσωλήνες άνθρακα

Στα Σχήματα 2.16 έως 2.23 απεικονίζονται και επεξηγούνται μια σειρά από πρωτότυπες εφαρμογές των νανοσωλήνων άνθρακα.



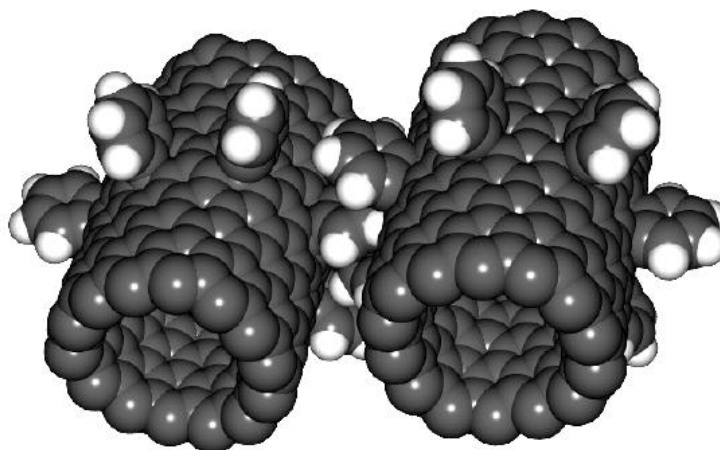
**Σχήμα 2.16:** Προγραμματισμένη ανάπτυξη νανοσωλήνων άνθρακα σε προκαθορισμένες θέσεις μιας πλάκας πυριτίου με διεργασία συμβατή με τη μικροηλεκτρονική



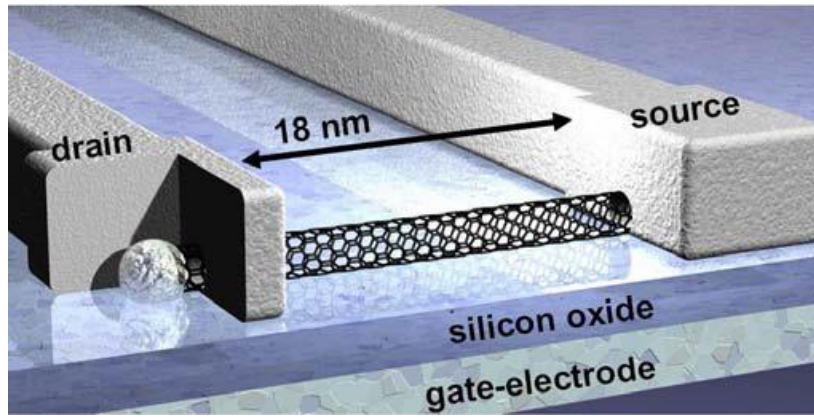
**Σχήμα 2.17:** Γιγάντια μόρια ως πρωταθλητές υπολογισμών: οι νανοσωλήνες μπορούν να αποτελέσουν τη βάση για τα μελλοντικά τσιπ υψηλών επιδόσεων



Σχήμα 2.18: Εφαρμογές από τη Nasa.



Σχήμα 2.19: Οι νανοσωλήνες ως νανογρανάζια



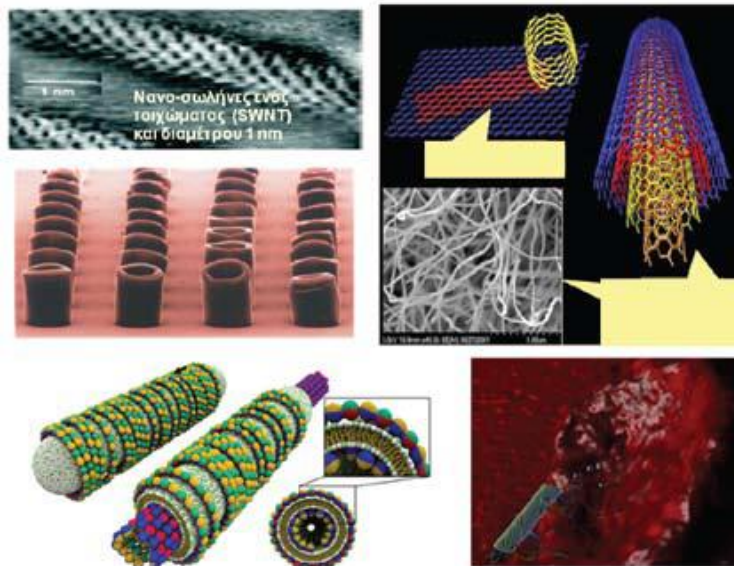
**Σχήμα 2.20:** Ο νανოსωλήνας ως νανοκαλώδιο σε νανοκυκλώματα.

### Τεχνολογίες φιλτραρίσματος νερού

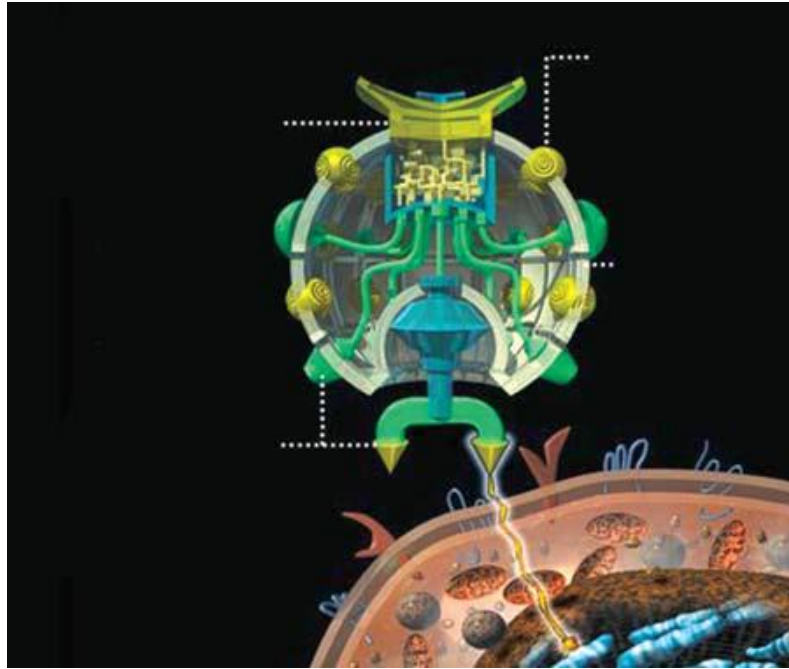


Οι ερευνητές πειραματίζονται με μεμβράνες που αποτελούνται από νανοςωλήνες άνθρακα για την αφαλάτωση και μέσω νανοαισθητήρων για τον προσδιορισμό μολυσματικών παραγόντων στο νερό. Άλλα νανούλικά, όπως το διοξείδιο του τιτανίου σε νανοκλίμακα, έχουν μεγάλη δυνατότητα στο φιλτράρισμα και καθαρισμό του νερού.

**Σχήμα 2.21:** Ο νανοςωλήνας ως σε φίλτρα

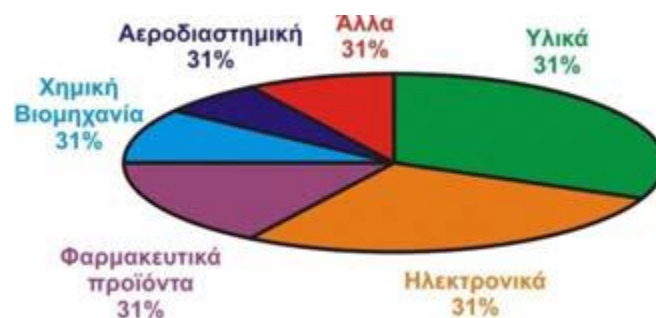


**Σχήμα 2.22:** Νανοςωλήνες. Κάτω αριστερά: νανοςωλήνας που καλύπτεται από λιπίδια και πρωτεΐνες στόχευσης των πασχόντων κυττάρων στην επιφάνεια. Το φάρμακο βρίσκεται στον πυρήνα του νανοςωλήνα και απελευθερώνεται με την είσοδό του στα κύτταρα.



**Σχήμα 2.23:** Νανορομπότ για τη διάγνωση και θεραπεία σε επίπεδο κυττάρου.

Ο αριθμός των νέων εφαρμογών της νανοτεχνολογίας φαντάζει δηλαδή σχεδόν απεριόριστος. Η βιομηχανία της νανοτεχνολογίας είναι ήδη στο δρόμο για να προσφέρει τα αποτελέσματά της από τα εργαστήρια στην αγορά. Οι εφαρμογές της υπολογίζεται ότι θα αντιπροσωπεύσουν μια αγορά τρισεκατομμυρίων δολαρίων μέχρι το 2015 και μάλιστα κατανεμημένες σύμφωνα με το παρακάτω διάγραμμα:



**Σχήμα 2.24:** Πηγή:National Science Foundation (NSF)

Όσο αφορά στις διαστημικές εφαρμογές των νανοσωλήνων άνθρακα, η Nasa τους έχει χρησιμοποιήσει στην κατασκευή διαστημικών οχημάτων, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.24.



## 3. ΝΑΝΟΑΙΣΘΗΤΗΡΕΣ

### 3.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η είσοδος στον 21<sup>ο</sup> αιώνα σηματοδοτεί την είσοδο στην εποχή της πληροφορίας. Η εμφάνιση νέων δυνατοτήτων ταυτόχρονου χειρισμού πολυάριθμων πηγών πληροφοριών, καθώς επίσης και εφαρμογής ιδιαίτερα αποτελεσματικών μεθόδων ταξινόμησης και ανάκτησης δεδομένων δημιούργησαν νέες απαιτήσεις στις ήδη υπάρχουσες μεθόδους άντλησης και επεξεργασίας πληροφοριών.

Τη σημερινή εποχή πλέον είναι δυνατή η χρήση συστημάτων αντίληψης και μέτρησης των λεγόμενων αισθητήρων ικανών να μετρήσουν φυσικά μεγέθη, όπως θερμοκρασία, πίεση, ηλεκτρικό δυναμικό, ένταση φωτός, ιξώδες. Οι φυσικοί αισθητήρες όπως αυτοί που απαντώνται στους φυσικούς οργανισμούς, συνήθως αποκρίνονται σε ερεθίσματα ηλεκτροχημικού χαρακτήρα, δηλαδή η λειτουργία τους βασίζεται στη μεταφορά ιόντων, όπως συμβαίνει στις νευρικές ίνες. Οι πρώτοι αισθητήρες που χρησιμοποιήθηκαν ήταν μηχανικής φύσεως. Η συστηματική μελέτη του ηλεκτρισμού οδήγησε στην ανάπτυξη νέων αισθητήρων, ηλεκτρικής φύσεως, οι οποίοι οδηγούσαν στην παραγωγή αναλογικού σήματος. Στους τεχνητούς αισθητήρες, η μετάδοση των πληροφοριών διεξάγεται υπό ηλεκτρική μορφή επίσης, αλλά και μέσω της μεταφοράς ηλεκτρονίων.

Σημαντική ώθηση στην εξέλιξη των αισθητήρων έδωσε η ανάγκη εξέλιξης της τεχνολογίας καθώς και αντιμετώπισης και επίλυσης ποικίλων προβλημάτων της σύγχρονης έρευνας στο πεδίο των θετικών επιστημών. Οι αισθητήρες είναι ένα από τα βασικότερα στοιχεία των σύγχρονων συστημάτων, δεδομένου ότι καθορίζουν την ποιότητα των πληροφοριών που προκύπτουν από την πραγματική ζωή και χρησιμοποιούνται για τον έλεγχο και την λήψη καθοριστικών αποφάσεων. Αποτελούν ζωτικής σημασίας τμήμα των περισσότερων βιομηχανικών οργάνων και οργάνων μεταφοράς κ.α. και ο ρόλος τους στα περιβαλλοντικά συστήματα, στα συστήματα υγείας και άλλους τομείς, γίνεται όλο και πιο σημαντικός. Η παγκόσμια αγορά αισθητήρων αναπτύσσεται γρήγορα και ο βαθμός καινοτομίας είναι εξαιρετικά υψηλός. Οι αισθητήρες, οι οποίοι λειτουργούν με βάση τις νέες αρχές και βασίζονται στη χρήση νέων υλικών και καινοτόμων τεχνολογικών μεθόδων, είναι ακριβέστεροι, γρηγορότεροι, μικρότερου μεγέθους, χαμηλότερης ισχύος και οικονομικότεροι.

Η έρευνα στη νανοτεχνολογία και στην βιοτεχνολογία θα συμβάλει σημαντικά, στην βελτίωση των ήδη υπαρχόντων εξελιγμένων αισθητήρων και στην εμφάνιση των μελλοντικών. Η ταξινόμηση των αισθητήρων μπορεί να γίνει με βάση τη λειτουργία που διάγουν, (μέτρηση πίεσης, θερμοκρασίας), τη φυσική αρχή στην οποία στηρίζεται η λειτουργία τους ή τον τύπο του μεταγωγέα σήματος που διαθέτουν. Βάσει της κύριας μορφής ενέργειας που

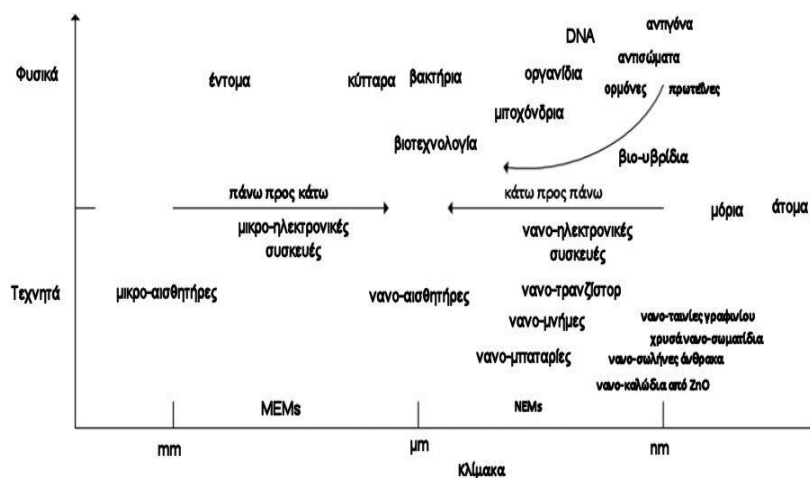
μεταφέρει το σήμα τους, κατηγοριοποιούνται σε: i) μηχανικούς, ii) θερμικούς, iii) ηλεκτρικούς, iv) μαγνητικούς, v) ακτινοβολίας και vi) (βιο-) χημικούς [11].

### 3.2 ΑΣΥΡΜΑΤΟΙ ΝΑΝΟΑΙΣΘΗΤΗΡΕΣ

Οι νανομηχανές, είτε μιλάμε για αυτές που ήδη υπάρχουν στη φύση, είτε για αυτές που δημιουργούνται τεχνητά, είναι συσκευές οι οποίες αποτελούνται από εξαρτήματα με μέγεθος ανοιγμένο στην νανοκλίμακα, και οι οποίες μπορούν να επιτελέσουν μια συγκεκριμένη διεργασία σε επίπεδο νάνο, όπως είναι να λειτουργήσουν ως αισθητήρες, να αποθηκεύσουν δεδομένα, να μπορούν να μετατοπιστούν, να εκτελέσουν απλούς υπολογισμούς και να επικοινωνήσουν με άλλες αντίστοιχες μηχανές.

Για την κατασκευή των νανομηχανών υπάρχουν διαφορετικές τεχνικές και προσεγγίσεις προκειμένου να κατασκευάσουμε επιμέρους εξαρτήματα και να τα ενσωματώσουμε στους νανοαισθητήρες. Αυτές κατηγοριοποιούνται (Σχήμα 3.1) ακολούθως:

- (i) από πάνω προς τα κάτω,
- (ii) από κάτω προς τα πάνω και
- (iii) με μεθόδους βιο-υβριδισμού.



**Σχήμα 3.1:** Τεχνικές κατασκευής και ενσωμάτωσης νανοαισθητήρων

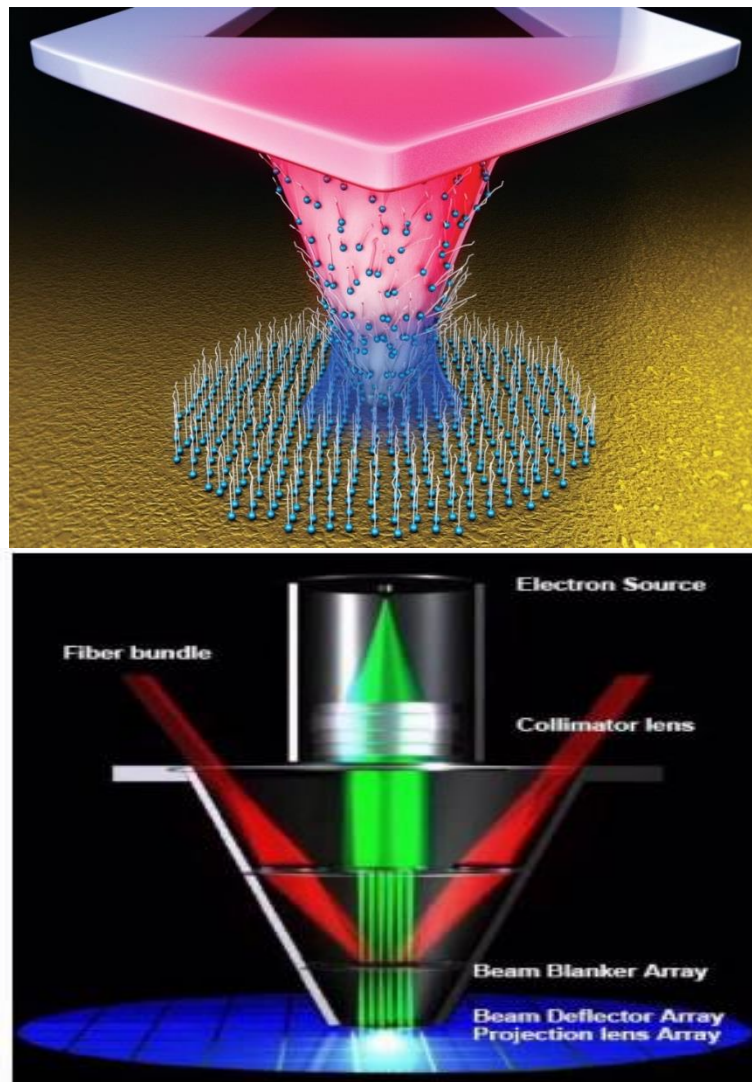
#### 3.2.1 Από πάνω προς τα κάτω

Στην περίπτωση αυτή, τα νανο-εξαρτήματα μπορούν να κατασκευαστούν με τη χρήση μεγαλύτερων, εξωτερικά ελεγχόμενων εργαλείων ώστε να υποβιβάζουν το μέγεθος ήδη υπαρχόντων συσκευών, κρατώντας όμως την αρχιτεκτονική των προγόνων τους.

Κάποιες διαδικασίες με τις οποίες μπορεί να επιτευχθεί αυτό είναι η εκτύπωση μικροεπαφών, η νανολιθογραφία αποτυπωμάτων, η νανολιθογραφία



με πένα βύθισης και η νανολιθογραφία με χρήση ηλεκτρονίων (Σχήμα 3.2). Προς το παρόν όμως, η ανάπτυξη, η κατασκευή και η συναρμολόγηση συσκευών κατά αυτόν τον τρόπο βρίσκεται σε πολύ πρώιμο στάδιο.



**Σχήμα 3.2:** Νανολιθογραφία με χρήση ηλεκτρονίων.

### 3.2.2 Από κάτω προς τα πάνω

Στη περίπτωση της προσέγγισης από κάτω προς πάνω, χρησιμοποιούμε μια νανομετρική υποδομή, όπως είναι ένα μόριο, και μέσω μιας διαδικασίας σύνταξης ή ακόμα και αυτό-σύνταξης, δημιουργούμε έναν μεγαλύτερο μηχανισμό από τον ήδη υπάρχοντα.

Η μοριακή παραγωγή, δηλαδή η διαδικασία παραγωγής νανοσυσκευών μόριο-μόριο αποτελεί τον απόλυτο μηχανισμό δημιουργίας υλικών μέσω μιας διαδικασίας εκθετικής σύνταξης ατόμων και μορίων που ελέγχονται με ακρίβεια.

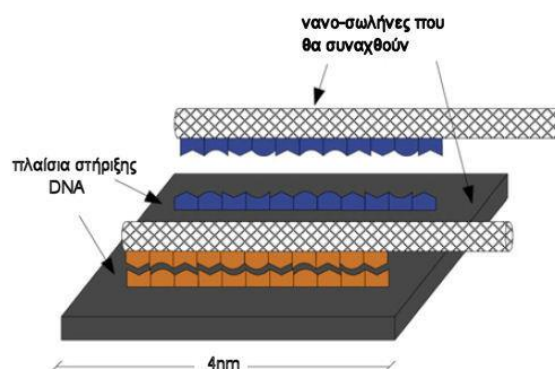
### 3.2.3 DNA scaffolding

Αναγνωρίζοντας τα πλεονεκτήματα του DNA έχει δοθεί ειδικό βάρος στη χρήση του DNA ως μοριακός δομικό λίθος για την κατασκευή νανοδομών και ηλεκτρονικών συσκευών. Η δομή του DNA έχει μελετηθεί εκτενέστατα, ενώ μοριακά είναι και σκληρή αλλά και ευέλικτη.

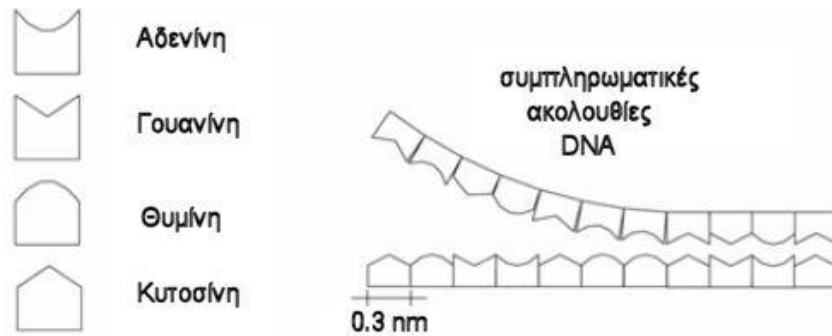
Η τεχνική του DNA origami, όπως ονομάζεται, στηρίζεται στο γεγονός στη δυνατότητα που έχουν οι αντιτακτοί κλώνοι DNA να ενώνονται μεταξύ τους από μόνοι τους όταν συναντούν απέναντι τους τις συμπληρωματικές βάσεις. Τα ζευγάρια είναι πάντα προκαθορισμένα, με την γουανίνη να ενώνεται με την κυτοσίνη, και τη θυμίνη με την αδενίνη. Έτσι λοιπόν, δημιουργείται αρχικά το πολυγωνικό περίγραμμα της δομής, το οποίο και πλαισιώνεται από μονόκλωνο DNA. Στη συνέχεια ενσωματώνονται στη δομή μικρές ακολουθίες DNA, που λειτουργούν ως κόλλα μεταξύ των δύο κλώνων, προκειμένου να σταθεροποιηθεί η δομή.

Μέσω αυτών των πρωτεϊνικών πλαισίων στήριξης και τις αυτό-συντασσόμενες δομές DNA έχουν κατασκευαστεί με μεγάλη ακρίβεια νανοσωλήνες άνθρακα που περιβάλλουν καταστραμμένους ιστούς, νανοκινητήρες που χρησιμοποιούν φως ως την πηγή κίνησής τους και εν γένει νανοσωματίδια.

Στο Σχήμα 3.3 δύο νανοσωλήνες άνθρακος συνενώνονται με ακρίβεια σε μια επιφάνεια σιλικόνης μέσω πλαισίων στήριξης DNA. Κάθε νανοσωλήνας έχει έναν διαφορετικό κλώνο DNA συμπληρωματικό με αυτόν που βρίσκεται πάνω στην επιφάνεια σιλικόνης. Μιας και η κάθε ακολουθία νουκλεοτιδίων είναι συμπληρωματική ανά δύο, αυτό σημαίνει ότι υπάρχει ένας μοναδικός κλώνος που ταιριάζει στη δεδομένη ακολουθία DNA, όπως φαίνεται και στο Σχήμα 3.4.



**Σχήμα 3.3:** Συνένωση νανοσωλήνων άνθρακος σε επιφάνεια σιλικόνης μέσω πλαισίων στήριξης DNA



**Σχήμα 3.4:** συνένωση νουκλεοτιδίων DNA και δύο συμπληρωματικών ακολουθιών.

Αρκετές βιολογικές δομές που συναντώνται σε ζωντανούς οργανισμούς μπορούν να θεωρηθούν ως νανοσυσκευές. Οι πιο πολλές από αυτές τις δομές βρίσκονται στο εσωτερικό κυττάρων και αποτελούνται από νανοβιοαισθητήρες, βιολογικές δομές αποθήκευσης δεδομένων, και μονάδες ελέγχου ενώ ταυτόχρονα πολλές από αυτές τις δομές διασυνδέονται ώστε να σχηματίσουν μεγαλύτερες και πιο πολύπλοκες δομές και να επιτελέσουν εργασίες όπως είναι η κυτταρική διαίρεση.

### 3.2.4 Βιο-υβριδική προσέγγιση

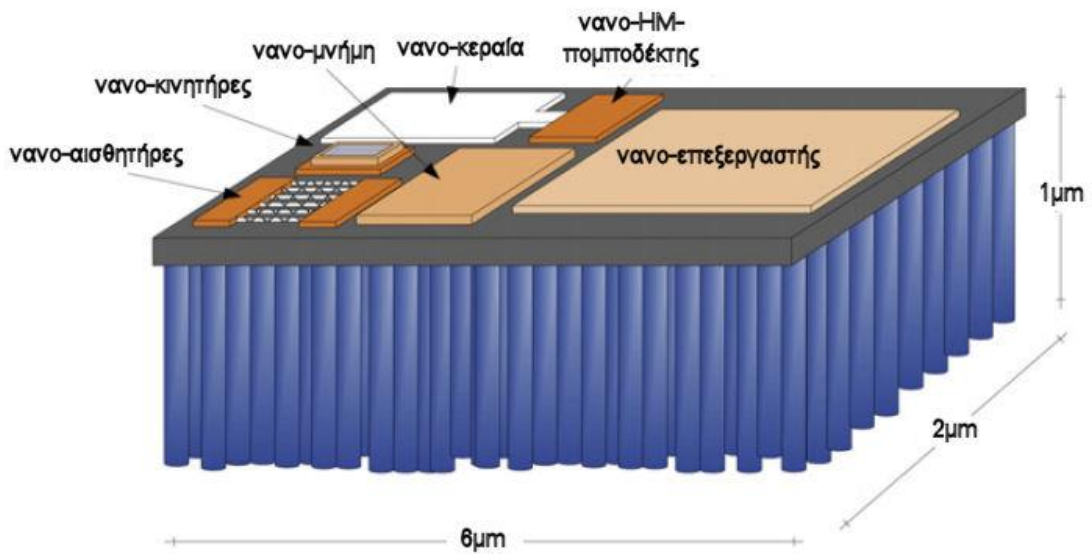
Η βιο-υβριδική προσέγγιση λαμβάνει υπόψη της τα παραπάνω ώστε να δημιουργήσει μοντέλα που να βασίζονται στα βιολογικά μοντέλα ή ακόμα για να ενσωματώσει τις βιολογικές δομές σε τεχνητές και να παράξει πολύπλοκα συστήματα όπως είναι τα νανορομπότ καθώς και να μπορέσει να αίρει προβλήματα ασυμβατότητας. Αρκετά χαρακτηριστικά που θέλουμε να έχουν οι νανοσυσκευές είναι ήδη παρόντα στο εσωτερικό των ζωντανών κυττάρων. Κάποια από αυτά είναι η δυνατότητα των κυττάρων να αναπαράγονται από μόνα τους και η διασύνδεσή τους προκειμένου να φέρουν εις πέρας πολύπλοκες λειτουργίες.

## 3.3 ΑΡΧΙΤΕΚΤΟΝΙΚΗ ΝΑΝΟΑΙΣΘΗΤΗΡΩΝ

Ένας νανοαισθητήρας είναι μια ολοκληρωμένη συσκευή με μέγεθος γύρω στα  $10-100\mu\text{m}^2$  που μπορεί να επιτελεί απλές εργασίες, όπως το να εκτελεί απλούς υπολογισμούς ή να ενεργοποιεί τοπικά με τη δράση του άλλες διεργασίες.

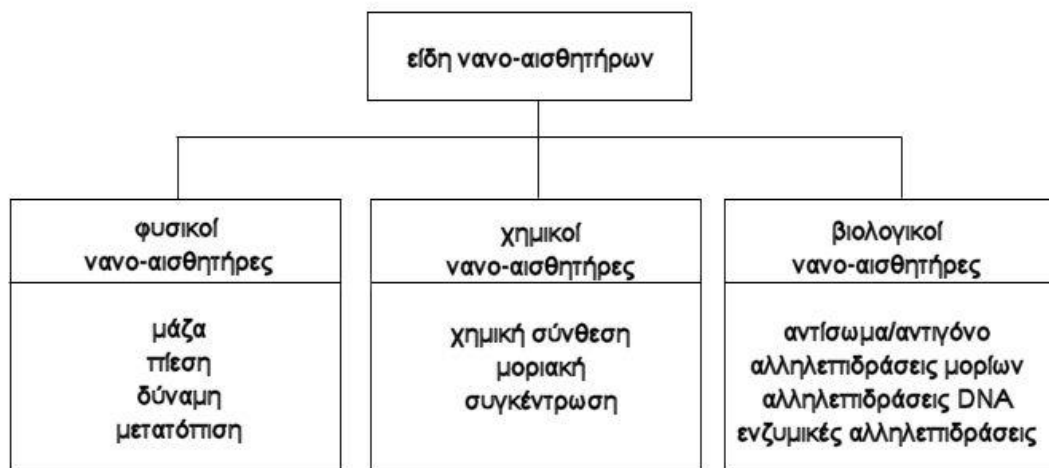
Στο Σχ. 3.5 φαίνεται η εσωτερική αρχιτεκτονική μιας ολοκληρωμένης συσκευής νανοαισθητήρα. Πρέπει να ληφθεί υπόψη ότι εξαιτίας του πολύ μικρού μεγέθους των συσκευών αυτών, οι νόμοι της φυσικής αλλά και οι

υπάρχουσες τεχνολογίες κατασκευής δεν μπορούν να εφαρμοστούν με τους ίδιους τρόπους που εφαρμόζονται στους μικρο-αισθητήρες.



**Σχήμα 3.5:** Ένας ολοκληρωμένος νανοαισθητήρας

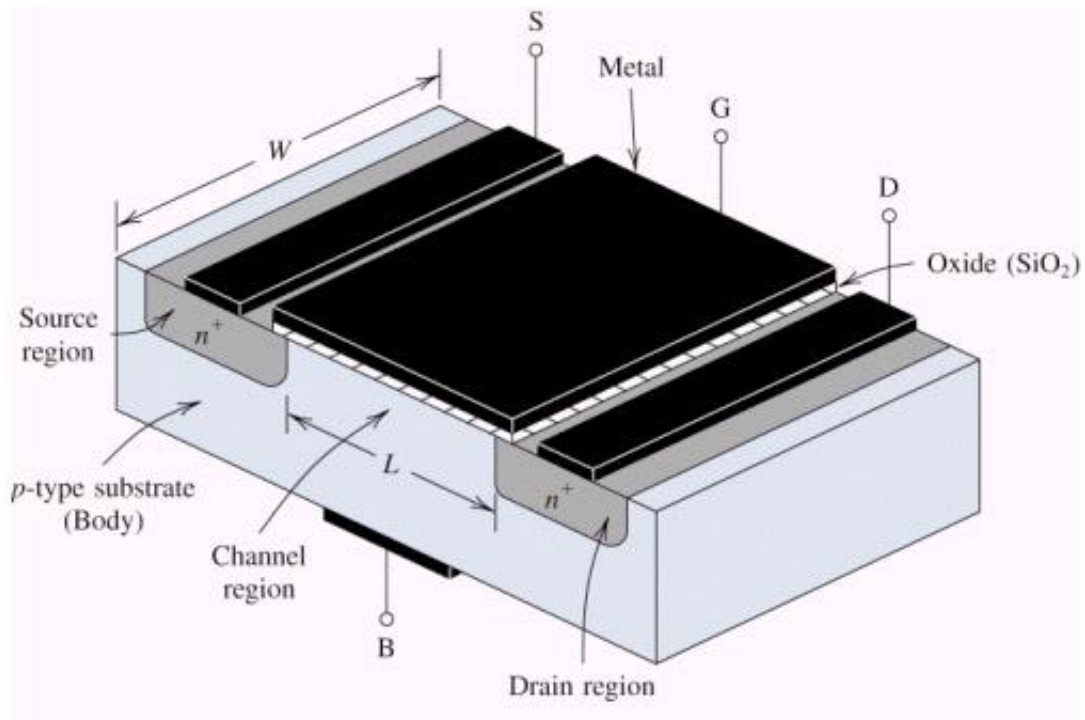
Ένας νανοαισθητήρας ανιχνεύει και λαμβάνει πληροφορίες για τα νανσωματίδια και τις μεταφέρει σε άλλες μικροσκοπικές ή μακροσκοπικές συσκευές. Ανάλογα λοιπόν με το είδος των μεγεθών που μετράνε οι νανοαισθητήρες, κατηγοριοποιούνται ακολούθως:



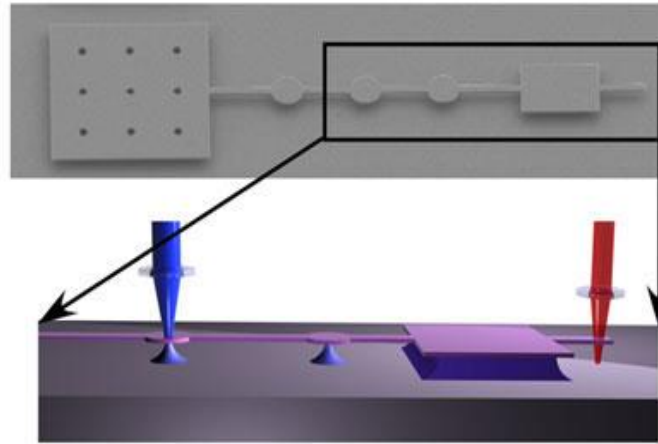
**Σχήμα 3.6:** Είδη νανοαισθητήρων.

### 3.3.1 Φυσικοί νανοαισθητήρες

Χρησιμοποιούνται για να μετρήσουν μεγέθη όπως είναι η μάζα, πίεση, δύναμη ή μετατόπιση. Η βασική αρχή λειτουργίας τους στηρίζεται στο γεγονός ότι οι ηλεκτρονικές ιδιότητες των φύλλων γραφενίων (graphene nanoribbons-GNRs) και των νανοσωλήνων άνθρακα (carbon nanotubes-CNTs) αλλάζουν όταν λυγίζονται ή παραμορφώνονται. Για παράδειγμα ένας CNT μπορεί να χρησιμοποιηθεί για να κατασκευαστεί ένα τρανζίστορ επίδρασης πεδίου (Σχήμα 3.7) σε νανομέγεθος, του οποίου το κατώφλι εξαρτάται από τις διαστάσεις, τη θερμοκρασία και το μέγεθος του σωλήνα. Μια τοπική παραμόρφωση του σωλήνα προκαλεί αλλαγή στην τιμή των βολτ του κατωφλίου. Έχοντας ως αρχή τη βασική αυτή ιδέα μπορούν να κατασκευαστούν διαφορετικά είδη νανοηλεκτρομηχανικών συστημάτων με διαφορετικές εφαρμογές ανάλογα με τα μεγέθη που δέχονται ως είσοδο (Σχήμα 3.8).



Σχήμα 3.7: Φυσική δομή τρανζίστορ επίδρασης πεδίου



**Σχήμα 3.8:** Αναπαράσταση νανοηλεκτρομηχανικού ταλαντωτή με μια αρθρωτή γέφυρα στα δεξιά.

### 3.3.2 Χημικοί νανοαισθητήρες

Χρησιμοποιούνται για να μετρήσουν μεγέθη όπως είναι η συγκέντρωση ενός δεδομένου αερίου, την παρουσία ενός συγκεκριμένου τύπου μορίων ή τη μοριακή σύσταση μιας ουσίας. Στην περίπτωση αυτή η υλοποίηση των συγκεκριμένων αισθητήρων βασίζεται στο ότι οι ηλεκτρονικές ιδιότητες των CNTs και GNRs μεταβάλλονται όταν απορροφούν διαφορετικά είδη μορίων, γεγονός που αυξάνει ή μειώνει τοπικά τον αριθμό των ηλεκτρονίων που μπορούν να διαπεράσουν τη δικτυωτή δομή τους από άνθρακα. Παρόμοια με τους φυσικούς αισθητήρες, όταν νανοσωλήνες ή νανοράβδοι χρησιμοποιηθούν για να διαμορφώσουν μια διάταξη από τρανζίστορς, η παρουσία ενός συγκεκριμένου είδους μορίων αλλάζει το κατώφλι του τρανζίστορ.

### 3.3.3 Βιολογικοί νανοαισθητήρες

Χρησιμοποιούνται για να παρακολουθούν βιομοριακές διαδικασίες, όπως είναι οι αλληλεπιδράσεις αντισωμάτων/αντιγόνων, του DNA, των ενζύμων ή οι διεργασίες μοριακής επικοινωνίας. Ένας βιολογικός νανοαισθητήρας συνήθως αποτελείται (i) από ένα βιολογικό σύστημα αναγνώρισης ή βιο-υποδοχέα, όπως είναι ένα αντίσωμα, ένα ένζυμο, μια πρωτεΐνη ή ένα τμήμα DNA και (ii) από έναν μηχανισμό μετατροπής, πχ έναν ηλεκτροχημικό ανιχνευτή ή έναν οπτικό μετατροπέα.

Υπάρχουν κυρίως δύο υποκατηγορίες βιολογικών αισθητήρων ανάλογα με την αρχή λειτουργίας τους: οι ηλεκτροχημικοί και οι φωτομετρικοί αισθητήρες.

Οι ηλεκτροχημικοί νανοαισθητήρες λειτουργούν παρόμοια με τους χημικούς νανοαισθητήρες, όμως στην περίπτωση αυτή οι αλλαγές στις ηλεκτρονικές ιδιότητες της νανοδιάταξης προκαλούνται είτε

(α) από μια πρωτεΐνη ή από οποιοδήποτε άλλη χημική ένωση που προσδένεται με τον νανοσωλήνα, είτε

(β) από ένα συγκεκριμένο αντιγόνο που προσδένεται σε ένα αντίσωμα που βρίσκεται πάνω στον νανοσωλήνα, είτε

(γ) από μια μονόκλωνη αλυσίδα DNA που ενώνεται με μία άλλη αλυσίδα DNA που είναι προσδεσμένη στον νανοσωλήνα.

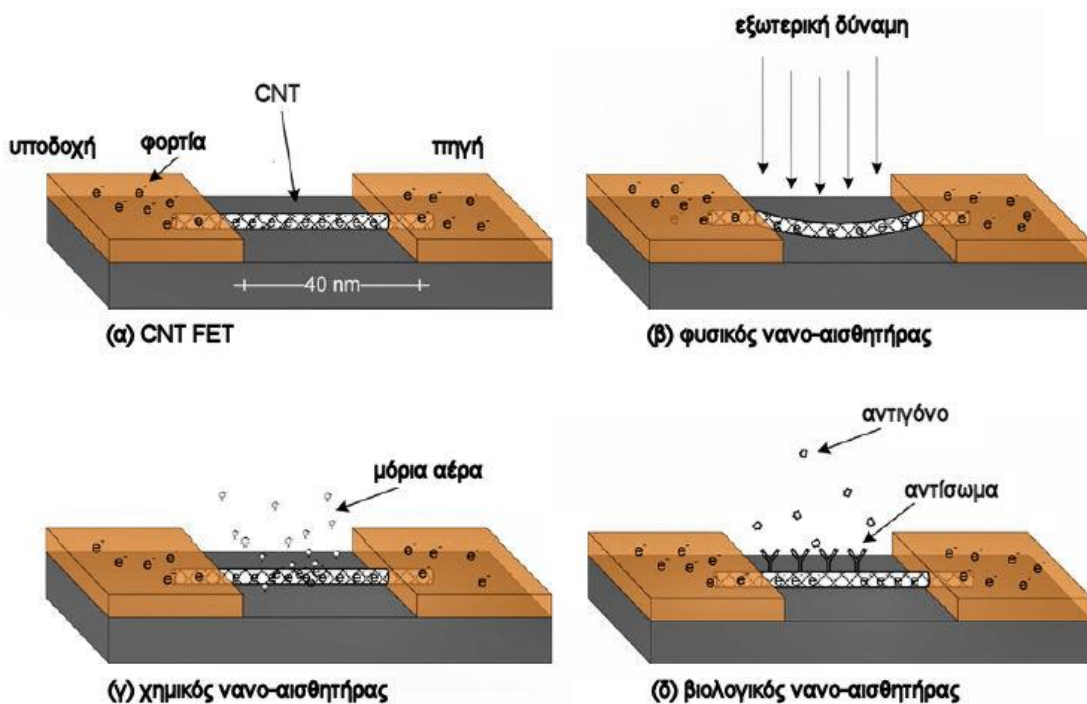
Βάση αυτών, έχουν ήδη κατασκευαστεί επιτυχώς νανοαισθητήρες που ανιχνεύουν καρκίνο του πνεύμονα, κρίσεις άσθματος και διάφορα είδη ιών, όπως είναι ο ιός της γρίπης ή το παράσιτο που συνδέεται με τη μάλαια.

Η δεύτερη υποκατηγορία βιολογικών αισθητήρων βασίζεται στη χρήση καινούριων μεταλικών νανοσωματιδίων και τη μέσω οπτικών κυμάτων διέγερση των επιφανειακών πλασμονίων.

Τα πλασμόνια είναι επιφανειακά ηλεκτρομαγνητικά κύματα που διαδίδονται παράλληλα στις διεπαφές μεταξύ των μεταλικών νανοσωματιδίων, τα οποία και αποτελούν τα όρια μεταξύ των οποίων διαδίδονται τα κύματα. Η συχνότητα συντονισμού των επιφανειακών πλασμονίων που προκύπτει από το φως που προσπίπτει πάνω τους αλλάζει όταν μόρια διαφορετικών υλικών (πολυμερή, πρωτεΐνες, DNA) απορροφούνται ενδιάμεσα και πάνω στα σωματίδια. Αυτή η τεχνική (Localized Surface Plasmon Resonance) αποτελεί την κύρια αρχή βάσει της οποίας λειτουργούν πολλοί βιολογικοί νανοαισθητήρες.

Ένας από τους κύριους περιορισμούς αυτής της μεθόδου είναι ότι απαιτείται μια εξωτερική πηγή φωτός και μια συσκευή η οποία να μπορεί να μετρά και να συγκρίνει διαφορετικές συχνότητες συντονισμού των σωματιδίων. Αυτό μπορεί όμως να επιλυθεί μέσω του συντονισμού και της επικοινωνίας νανοαισθητήρων, οι οποίοι θα μπορούσαν τοπικά να ακτινοβολούν τα ίδια σωματίδια με πολύ μικρότερη ισχύ και μετρούν την επανεκπεμπόμενη ενέργεια σε διαφορετικές συχνότητες. Το αποτέλεσμα αυτής της διεργασίας θα το επεξεργαστούν συσκευές διαχείρισης δεδομένων.

Στο Σχήμα 3.9(α) απεικονίζεται σε αδράνεια ένα FET που βασίζεται σε CNT, η δομή του οποίου βασίζεται σε νανοσωλήνες άνθρακα και αποτελείται κυρίως από έναν νανοσωλήνα που βρίσκεται πάνω σε δύο ηλεκτρόδια. Δίνοντας την κατάλληλη γεωμετρία στη δομή του CNT μπορούμε να του προσδώσουμε τις ιδιότητες ημιαγωγού, κι έτσι ηλεκτρόνια φεύγουν από την πηγή και φτάνουν στην υποδοχή μόνο αν εφαρμοστεί ενέργεια μεγαλύτερης τιμής από το κατώφλι για το οποίο άγει. Το κατώφλι αυτό μπορεί να μεταβληθεί είτε όταν ασκηθεί πίεση πάνω στο CNT όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.9(β), είτε όταν η ποσότητα των ελευθέρων φορτίων του σωλήνα αυξηθεί ή μειωθεί μέσω της παρουσίας μορίων δοτών ή αποδοχέων συγκεκριμένων αερίων ή στοιχείων, Σχήμα 3.9(γ), είτε όταν ο σωλήνας έχει κάποιον βιολογικό υποδοχέα, όπως ένα αντίσωμα, ο οποίος προσδένεται σε συγκεκριμένο αντιγόνο ασθένειας, αλλάζοντας τοπικά τον αριθμό του ελεύθερου φορτίου του σωλήνα, Σχ. 3.9(δ).



**Σχήμα 3.9:** Αναπαράσταση των βασικών αρχών των νανοαισθητήρων που βασίζονται σε CNT

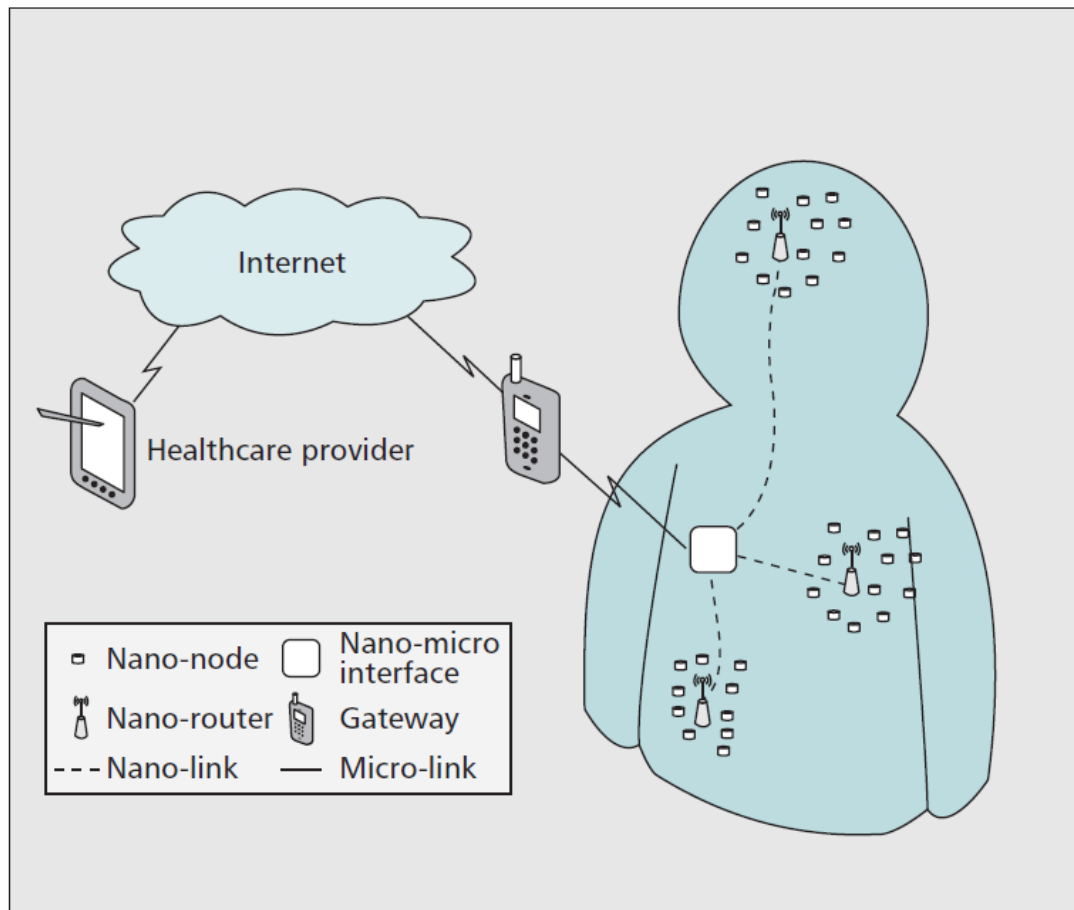
Υπάρχουν αρκετές δυσκολίες στο σχεδιασμό των νανοαισθητήρων. Αρχικά, ο χρόνος επαναφοράς των χημικών και βιολογικών νανοαισθητήρων θα πρέπει να μειωθεί. Η πλειονότητα των νανοαισθητήρων είναι επαναχρησιμοποιήσιμη, δηλαδή όταν το καταγραφέν φαινόμενο σταματήσει, οι αισθητήρες επανέρχονται στην αρχική τους κατάσταση μετά από κάποιο χρονικό διάστημα, χρόνος που αναφέρεται ως χρόνος επαναφοράς. Με την παρούσα τεχνολογία, ο χρόνος συλλογής δεδομένων των χημικών και βιολογικών αισθητήρων είναι κάτω του ενός λεπτού, ενώ ο χρόνος που χρειάζεται για να επανέλθουν στην αρχική τους κατάσταση ανήκει στην τάξη της δεκάδας των λεπτών, χρόνος αρκετά μεγάλος για συγκεκριμένες εφαρμογές, όπως για την αποτροπή χημικών επιθέσεων.

Δεύτερον, η επιλεκτικότητα των χημικών νανοαισθητήρων πρέπει να αυξηθεί, γιατί είναι δυνατόν διαφορετικοί τύποι μορίων να προκαλέσουν την ίδια έξοδο στη μονάδα συλλογής δεδομένων. Αυτό επιλύεται με τη χρήση νανοράβδων, νανοσωλήνων και νανοσωματιδίων στα οποία έχουν ενσωματωθεί βιολογικές οντότητες που αλληλεπιδρούν μόνο με συγκεκριμένες άλλες οντότητες.



### 3.4 ΜΟΝΑΔΑ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΑΣ – ΝΑΝΟΚΕΡΑΙΕΣ

Η επικοινωνία μέσω ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων μεταξύ νανοαισθητήρων επιτυγχάνεται μέσω κεραιών της κλίμακας νάνο και των αντίστοιχων ηλεκτρομαγνητικών πομποδεκτών (Σχήμα 3.10).



**Σχήμα 3.10:** Τρόπος επικοινωνίας με αισθητήρα.

Το να υποβαθμίσουμε το μέγεθος ενός συμβατικού αισθητήρα σε κάποιες εκατοντάδες νανόμετρα απαιτεί τη χρησιμοποίηση εξαιρετικά υψηλών συχνοτήτων, κάτι το οποίο δεν άμεσα εφικτό. Με τη χρήση ωστόσο του γραφενίου η κατασκευή νανοκεραιών περνά σε άλλο επίπεδο και υπερνικά αυτή τη δυσκολία.

Αυτό συμβαίνει γιατί η ταχύτητα διάδοσης των κυμάτων σε CNTs και GNRs φτάνει μέχρι και εκατό φορές κάτω της ταχύτητας του φωτός στο κενό ανάλογα με τη γεωμετρία, τη θερμοκρασία και την ενέργεια Fermi, η οποία ταχύτητα είναι αρκετά μεγαλύτερη σε σχέση με τα ηλεκτρόνια σε έναν κανονικό αγωγό. Σαν αποτέλεσμα, η συχνότητα συντονισμού νανοκεραιών που βασίζονται σε γραφένιο μπορεί να είναι μέχρι και δύο τάξεις μεγέθους κάτω σε σχέση με άλλες κεραιές που έχουν κατασκευαστεί με άλλα υλικά.

Με τη χρήση του γραφενίου λοιπόν, μπορεί να κατασκευαστεί ένα νανο-δίπολο από έναν ή παραπάνω νανοσωλήνες άνθρακος, ενώ μέσω μιας νανοράβδου γραφένιο μπορεί να κατασκευαστεί μια κεκαλυμμένη κεραία. Η ποσοτική σύγκριση αυτών των κεραιών έδειξε ότι μια νανοκεραία από γραφένιο μήκους 1μm μπορεί αποδοτικά να εκπέμπει ΗΜ κύματα στο φάσμα των THz (0.1 -10 THz), μεταξύ των υπερύθρων και των μικροκυμάτων δηλαδή. Αν και η αυτή καθαυτή παραγωγή τόσο υψηλών συχνοτήτων, δηλαδή από 100 GHz μέχρι και 1-10 THz, είναι δύσκολη εξαιτίας έλλειψης καταλλήλων πηγών, μέσω μιας διαδικασίας που ονομάζεται μετασχηματισμός συχνότητας μπορούμε εμμέσως να τις παράγουμε.

Με την τεχνική αυτή μπορούμε να πολλαπλασιάσουμε μικροκυματικές συχνότητες, τις οποίες μπορούμε εύκολα να παράγουμε, μέσω του γραφένιο. Τα κύματα σε συχνότητες THz έχουν χαμηλή ενέργεια φωτονίων, γύρω στο ένα εκατομμύριο φορές μικρότερη από αυτή των ακτινών X και δεν προκαλούν επιβλαβή φωτοϊονισμό στους βιολογικούς ιστούς, και μπορούν να χρησιμοποιηθούν για παράδειγμα για την απεικόνιση καρκινικών όγκων σε πρώιμο στάδιο. Επίσης, μπορούν να διεισδύσουν σε πολλά μη πολωτικά διηλεκτρικά υλικά όπως είναι το πλαστικό, το ξύλο, το δέρμα, τα κεραμικά και το χαρτί με μεσαία απόσβεση.

Από την άλλη πλευρά, η εκπομπή φωτονίων από τις νανοδομές και η αλληλεπίδραση που έχουν με τα ηλεκτρόνια, καθώς τα συγκρούονται μαζί τους και τα διεγείρουν, έχει οδηγήσει στη μελέτη των GNRs και των CNTs ως οπτικοί πομποί και ανιχνευτές. Μια οπτική νανοκεραία είναι μια συσκευή που εκπέμπει ενέργεια στον ελεύθερο χώρο από μια περιορισμένη περιοχή μεγέθους της τάξεως του μήκους κύματος του φωτός.

### **3.5 ΗΛΕΚΤΡΟΜΑΓΝΗΤΙΚΟΙ ΜΕΤΑΒΙΒΑΣΤΕΣ**

Οι ηλεκτρομαγνητικοί πομποδέκτες ενός νανοαισθητήρα θα έχουν ενσωματωμένα τα απαραίτητα ηλεκτρικά κυκλώματα για να εκτελούν επεξεργασία βασικής ζώνης, μετατροπή συχνότητας, φιλτράρισμα και ενίσχυση ισχύος των σημάτων που πρέπει να μεταδοθούν ή αυτών που έχουν ληφθεί μέσω των νανοκεραιών. Θα πρέπει να ληφθεί υπόψη ότι εφόσον οι νανοκεραίες θα λειτουργούν σε συχνότητες THz, θα πρέπει να αναπτυχθούν RF FET τρανζίστορ που θα μπορούν να λειτουργούν και σε υψηλές συχνότητες.

Έχουν κατασκευαστεί αρκετά τρανζίστορ FET βασισμένοι σε γραφένιο που λειτουργούν στις κάτω περιοχές των THz. Η IBM δημιούργησε έναν RF τρανζίστορ από γραφένιο που μπορεί να λειτουργήσει στα 100 GHz, ενώ κατάφερε να τον ενσωματώσει σε κύκλωμα.

Ωστόσο, υπάρχουν αρκετές δυσκολίες που πρέπει να λυθούν. Θα πρέπει να μοντελοποιηθεί ο ηλεκτρονικός θόρυβος στις ηλεκτρονικές συσκευές με γραφένιο, καθώς επηρεάζει το σηματοθορυβικό λόγο στον δέκτη και περιορίζει

το εύρος λειτουργίας των νανοσυσκευών. Η βαλλιστική κίνηση των ηλεκτρονίων για μεγάλα μήκη ναι μεν δημιουργεί θερμικό θόρυβο, ωστόσο κατά πολύ μικρότερο σε σχέση με άλλα υλικά. Για το λόγο αυτό όμως θα πρέπει να αναπτυχθούν πιο ακριβή μοντέλα θορύβου.

Εναλλακτικά, αντί για νανοκεραίες μπορούν να χρησιμοποιηθούν ηλεκτρομηχανικοί συντονιστές. Είναι δυνατό λοιπόν ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα να ληφθεί και να αποδιαμορφωθεί μέσω νανοσωλήνων άνθρακος που συντονίζονται στη συχνότητα του κύματος. Όταν ένας CNT έχει συνδεδεμένο ένα από τα άκρα του σε μια πηγή ισχύος και το άλλο άκρο ελεύθερο, και ακτινοβοληθεί από ένα ηλεκτρομαγνητικό κύμα, τα ηλεκτρόνια στο ελεύθερο άκρο θα δονηθούν. Αν η συχνότητα του ΗΜ κύματος ταυτίζεται με τη φυσική συχνότητα του CNT, οι δονήσεις αυτές γίνονται ολοένα και πιο σημαντικές και ο νανοσωλήνας μπορεί να αποδιαμορφώσει το εισερχόμενο σήμα.

Ωστόσο, ενώ ένας μηχανικός συντονιστής μπορεί στον μακρόκοσμο και μικρόκοσμος να δεχθεί ηλεκτρομαγνητικά κύματα υψηλής ενέργειας, ένα ΗΜ κύμα που παράγεται από μια νανοσυσκευή περιορισμένης ακόμα ενέργειας μπορεί να μην οδηγήσει στο συντονισμό του. Επιπλέον, ακόμα και στη λήψη του κύματος, ο CNT απαιτεί υψηλή DC τάση, ώστε να μην αλλάξει πολικότητα, και να απεικονιστεί η λογική του 1 και του 0, και να καταφέρει να συντονιστεί καθώς και να διαμορφώσει/αποδιαμορφώσει. Για την ώρα οι νανομπαταρίες δεν μπορούν να αποδώσουν τόσο υψηλές τάσεις. Επιπλέον, θα πρέπει να καθοριστεί ο θόρυβος κατά τη λήψη του σήματος και σε τι βαθμό επηρεάζει την αποδιαμόρφωση του σήματος. Πέρα από αυτό, θα πρέπει να βρεθούν τεχνικές ώστε να μπορέσουμε να χρησιμοποιήσουμε νανοσωλήνες διαφορετικού μήκος συνδυαστικά, ώστε το συζευγμένο σύστημα να μπορεί να συντονίζεται για πολλές συχνότητες, να αυξηθεί τοπικά το εύρος εφαρμογών και να μειωθεί η πολυπλοκότητα του συστήματος, κάτι το οποίο απαιτεί αναγνώριση των φαινομένων σύζευξης των νανοσωλήνων και πως αυτά επηρεάζουν την ολική απόδοση του συστήματος.

### **3.6 ΕΦΑΡΜΟΓΕΣ ΤΩΝ ΑΣΥΡΜΑΤΩΝ ΝΑΝΟΑΙΣΘΗΤΗΡΩΝ**

Οι εφαρμογές των νανοδομών και των νανοδικτύων είναι άμεσα συνδεδεμένες με τον τομέα της βιοϊατρικής, καθώς εξ ορισμού η κλίμακα νάνο είναι η φυσική κλίμακα όλων των θεμελιωδών ζωτικών διεργασιών και είναι το επίπεδο αυτό, στο οποίο στοχευμένα απευθύνεται πρωτίστως η νανοτεχνολογία.

Κατά την εφαρμογή οποιασδήποτε τεχνολογίας στο εσωτερικό ενός βιολογικού ιστού ανακύπτουν πολλά ζητήματα. Ένα από τα πιο βασικά είναι η λεγόμενη βιοσυμβατότητα. Αποτελεί κύριο μέλημα, καθώς το ανοσοποιητικό μας σύστημα είναι σχεδιασμένο έτσι ώστε να αναγνωρίζει και να αντιδρά σε κάθε ξένο σώμα που εισέρχεται μέσα μας. Η ανοσοδραστικότητα μιας ουσίας είναι το μέτρο της βιοσυμβατότητας της ουσίας.

Πρέπει να υπάρχει μεγάλη προσοχή προτού εισαχθεί οτιδήποτε σε κάποιον βιολογικό ιστό ώστε να μην επιδράσει αρνητικά, καθώς σε αντίθετη περίπτωση μπορεί όχι μόνο να αποτύχει η ιαματική προσπάθεια αλλά και να προκληθούν ετερογενή προβλήματα εξαιτίας κάποιας ασυμβατότητας. Βάσει αυτών, οι αναμενόμενοι τομείς εφαρμογής της νανοτεχνολογίας στη βιοϊατρική είναι οι ακόλουθοι:

### **3.6.1 Φάρμακα**

Ως τώρα η ανάπτυξη φαρμάκων προέκυπτε κυρίως ως απόρροια εμπειρικής γνώσης ή συγκυριών και όχι ως προσεκτικός και συγκεκριμένος σχεδιασμός, για αυτό και οι παρενέργειες τους συχνά γίνονται αντιληπτές στις κλινικές δοκιμές ή πολύ μετά αφού προωθηθούν στην αγορά. Εκεί προσπαθούν να διαφοροποιηθούν τα νάνο-φάρμακα τα οποία θα παράγονται από συγκεκριμένους και κατανοητούς μηχανισμούς, μέσω υπολογιστικών και εμπειρικών μεθόδων και οδηγώντας σε φάρμακα με λιγότερες συνέπειες και καλύτερη δράση.

Για παράδειγμα η κατάθλιψη, που πολύ συχνά οφείλεται στην υψηλή ή χαμηλή συγκέντρωση των μορίων των νευροδιαβιβαστών, μπορεί να καταπολεμηθεί ρυθμίζοντας τη συγκέντρωση αυτή και επαναφέροντάς την σε κανονικά επίπεδα αλλάζοντας τις ιδιότητες των μοριακών δεσμών τους. Αντίστοιχη προσέγγιση έχει ήδη εφαρμοστεί στην παθητική αντιμετώπιση του AIDS μέσω τέτοιων φαρμάκων.

### **3.6.2 Μεταφορά φαρμάκων**

Είναι ύψιστης σημασίας τα μόρια των φαρμάκων να βρίσκονται στις περιοχές του σώματος που πρέπει και μόνο (πχ τα αντικαταθλιπτικά πρέπει να πηγαίνουν στον εγκέφαλο, τα αναλγητικά στις περιοχές που συγκεντρώνεται ο πόνος και τα αντικαρκινικά στους όγκους). Αυτή την ανάγκη εκφράζει ο όρος βιοδιαθεσιμότητα και αυτή στοχεύει να αυξήσει η νανοεπιστήμη. Η αύξηση όμως της βιοδιαθεσιμότητας δε σημαίνει αύξηση της ποσότητας των φαρμάκων που χρησιμοποιούνται, αλλά διαφορετικές προσεγγίσεις για την βέλτιστη απορρόφηση και δράση των δραστικών ουσιών.

Για παράδειγμα, μόρια μπορούν να ενσωματωθούν μέσα σε νανο-κοιλότητες στο εσωτερικό πολυμερών. Στη συνέχεια το πολυμερές μπορεί να εισχωρήσει στο σώμα μέσω κάποιας κάψουλας, να διαλυθεί η δομή του και τελικά το φάρμακο να απελευθερωθεί, ώστε πχ χάπια που πρέπει να λαμβάνονται μία ή δύο φορές τη μέρα να συνεχίζουν την ομαλή μεταφορά τους σε μεγάλη χρονική περίοδο.

Πέρα από αυτό, είναι γνωστό πως πάνω από τα μισά φάρμακα δε διαλύονται σωστά στο νερό με αποτέλεσμα να μην είναι ιδιαίτερα αποτελεσματικά αν καταπωθούν. Έχει δειχθεί σε πειραματικό στάδιο πως η

παραγωγή φαρμακευτικού προϊόντος σε νανο-κρυσταλλική μορφή μπορεί να το κάνει υδατοδιαλυτό ακόμα κι αν δεν είναι η δραστική ουσία αυξάνοντας έτσι τη βιοδιαθεσιμότητα του φαρμάκου.

Επίσης, υπάρχουν ασθένειες που εξαρτώνται από διεργασίες που γίνονται στο εσωτερικό του κυττάρου, όπου δεν μπορούν να φτάσουν τα κοινά φάρμακα, γιατί προστατεύεται από την πλασματική μεμβράνη. Η λειτουργία της μεμβράνης είναι να κρατά στο εξωτερικό της ιόντα, πρωτεΐνες και μόρια. Η μεμβράνη οποιουδήποτε ζωντανού οργανισμού και πολλών ιών αποτελείται από δυο στρώσεις μορίων λιπιδίων, οι οποίες δεν επιτρέπουν την είσοδο ιόντων και πολικών μορίων στο εσωτερικό του κυττάρου. Έτσι πολλά μόρια φαρμάκων δεν μπορούν να διαπεράσουν την πλασματική μεμβράνη λόγω πολικότητας.

Σε αυτή την περίπτωση το πολικό νανοφάρμακο μπορεί να ενθυλακωθεί σε ένα μη πολικό κάλυμμα με τέτοιο τρόπο ώστε να μπορεί να περάσει ανενόχλητο από την κυτταρική μεμβράνη. Αυτό μπορεί να γίνει πχ μέσω μορίων χοληστερόλης, δηλαδή λιπαρών υδροφοβικών μορίων ή λιποσωμικών δομών, που ήδη χρησιμοποιούνται σε καρκινικές θεραπείες μεταφέροντας διαλυτές πρωτεΐνες όπως είναι οι ιντερφερόνες στα καρκινικά κύτταρα.

Για τη μεταφορά φαρμάκων μπορούν επίσης να χρησιμοποιηθούν μαγνητικά νανοσωματίδια, τα οποία μπορούν να συνδεθούν μονομορφικά με το φάρμακο που πρέπει να εισαχθεί. Εξωτερικά μαγνητικά πεδία μπορούν να ελέγξουν τη θέση των νανοσωματιδίων κι επομένως τη βιοδιαθεσιμότητα του φαρμάκου.

Άλλη εφαρμογή είναι η τοποθέτηση μορίων σε κατάσταση ύπνου τα οποία θα ξυπνήσουν όταν λάβουν το κατάλληλο έναυσμα - σήμα. Ως παράδειγμα μπορούμε να έχουμε μια αντιόξινη ουσία ενθυλακωμένη στο εσωτερικό ενός πολυμερούς που διαλύεται μόνο σε όξινες συνθήκες και το αντιόξύ εκλύεται όταν το εξωτερικό κάλυμμα του πολυμερούς συναντήσει όξινες περιοχές κατά μήκος του πεπτικού σωλήνα.

Οι λεγόμενοι αναστολείς αυτοκτονίας έχουν σχεδιαστεί για να αναστέλλουν τη δράση συγκεκριμένων ενζύμων προκαλώντας τα ένζυμα να αυτοκτονήσουν και λειτουργούν με το να περιορίσουν την ενζυμική δραστηριότητα με αποτέλεσμα να μηδενίσουν τα συμπτώματα κάποιων ασθενειών. Ευρεία εφαρμογή συναντάται σε περιπτώσεις κατάθλιψης, επιληψίας, γάγγραινας καθώς και για την αγωγή κατά του HIV μέσω της αναστολής της HIV-1 ανάστροφης τρανσκριπτάσης.

Η θεραπεία μέσω μορίων DNA εκμεταλλεύεται τη μοναδική ιδιότητα του DNA να προσδένεται με συγκεκριμένα συμπληρωματικά μόρια. Οι αισθητήρες DNA έχουν την ικανότητα να ανιχνεύσουν μια βιολογική οντότητα δημιουργώντας μία άλλη συμπληρωματική οντότητα για το αποτύπωμα της. Αυτό μπορεί να καταστήσει την ένωση αυτή μη αναστρέψιμη, με αποτέλεσμα να αποτραπεί η αναπαραγωγή των μορίων DNA που προκαλούν τις ασθένειες. Αυτή η προσέγγιση μπορεί να χρησιμοποιηθεί δυνητικά για τη δημιουργία αντιϊκών φαρμάκων.

### 3.6.3 Διάγνωση ασθενειών

Οι τρέχουσες μέθοδοι διάγνωσης βασίζονται στην ανίχνευση των συμπτωμάτων μιας ασθένειας, αφού δηλαδή έχει ήδη προσβληθεί ο ασθενής. Η νανοτεχνολογία προσφέρει τη δυνατότητα ανάλυσης ολόκληρων γονιδιωμάτων σε λίγα λεπτά και βασιζόμενοι σε ακολουθίες DNA που αποκλίνουν από το κανονικό, οι γιατροί θα μπορούν να καθορίσουν την προδιάθεση ενός ατόμου να αναπτύξει καρκίνο ή κάποια άλλη ασθένεια.

Έχουν αναπτυχθεί chips τα οποία δέχονται αίμα ως δείγμα, το οποίο και ανιχνεύουν για γνωστές ακολουθίες DNA, μέσω μιας διαδικασίας που ονομάζεται υβριδισμός. Στη συνέχεια, τα μόρια DNA που υβριδοποιούνται με τις ακολουθίες που θέλουμε να συγκρίνουμε φωσφορίζουν, και ανιχνεύονται από ένα σύστημα το οποίο βρίσκεται ενσωματωμένο πάνω στο chip. Έτσι, εφόσον η μετάλλαξη σε μια ακολουθία DNA είναι γνωστή, μπορούμε να αποφανθούμε για το κατά πόσο προδιατεθειμένος είναι κάποιος σε μια ασθένεια, σύμφωνα με το αν θα υβριδοποιηθεί το αίμα του ασθενούς.

Το ρεύμα μέσα στο nanopip μπορεί επίσης να χρησιμοποιηθεί για να διαχωρίσει διαφορετικούς τύπους κυττάρων από ένα δείγμα αίματος. Τα κύτταρα διαχωρίζονται, καταστρέφονται και οι πρωτεΐνες που μένουν πίσω τους χρησιμοποιούνται ως τροφή από το περιβάλλον, διαδικασίες που προωθούνται μόνο μέσω ενός chip. Μέσω της διαδικασίας αυτής είναι δυνατό να γίνεται στοχευμένη μεταφορά φαρμάκων σε βλαβερά κύτταρα αφήνοντας τα υγιή ανέπαφα.

Επίσης, έχουν αναπτυχθεί τεχνολογίες ανίχνευσης πλήρως αγνώστου DNA με συστήματα «lab-on-a chip», όπου ο συνδυασμός πολυπληθών διαδικασιών ανάλυσης DNA συνενώνονται σε ένα μόνο chip που αποτελείται από γυαλί και υπόστρωμα σιλικόνης.

### 3.6.4 Βιοσυμβατά χειρουργικά νανορομπότ

Ο τομέας της χειρουργικής κινείται διαρκώς προς την κατεύθυνση μη επεμβατικών ή έστω ελάχιστα επεμβατικών μεθόδων. Ο κύριος λόγος πίσω από αυτό είναι η μείωση του χρόνου ίασης και επαναφοράς του ασθενούς. Η κατασκευή νανορομπότ αποτελεί μια νέα προσέγγιση προκειμένου να αντιμετωπιστούν με διαφορετικό τρόπο οι χειρουργικές επεμβάσεις.

Αυτά θα τοποθετούνται μέσω του αγγειακού συστήματος ή μέσω καθετήρων σε διάφορες κοιλότητες και περιοχές του ανθρωπίνου σώματος και θα είναι εκ των προτέρων προγραμματισμένα να δρουν βάσει συγκεκριμένων ερεθισμάτων ή θα καθοδηγούνται συντονισμένα από έναν χειρουργό την ώρα του χειρουργείου. Θα δρουν σαν ημιαυτόνομες χειρουργικές μονάδες στο σώμα και θα εκτελούν διάφορες λειτουργίες, συλλέγοντας πληροφορίες από την παθολογία του κάθε βιολογικού ιστού. Η διόρθωση των βλαβών θα γίνεται είτε από τον χειριστή του ρομπότ είτε από κάποιον υπολογιστή, μέσω

κωδικοποιημένων υπερηχητικών σημάτων. Μπορεί ακόμα να είναι εφοδιασμένα με όργανα που θα μπορούν με ακρίβεια να χειρουργούν ενδοκυτταρικά, κάτι το οποίο δεν είναι δυνατό με άμεσο ανθρώπινο χειρισμό, με απώτερο σκοπό να εξοντώσουν απομονωμένα καρκινικά κύτταρα ή άλλες δυσπλασίες.

Μία από τις τελευταίες εξελίξεις προς τη δημιουργία νανορομπότ είναι η πρόσφατη κατασκευή ενός στυλό από νανοσωλήνα άνθρακα που μπορεί γράφοντας να «εκτυπώσει» πολύπλοκες τρισδιάστατες μικροσκοπικές δομές. Το μέγεθος του στυλό είναι μικρότερο από μια ανθρώπινη τρίχα, ενώ σαν μελάνι χρησιμοποιούνται μεταλλικά άτομα. Το σχήμα των νανοσωλήνων άνθρακα λειτουργεί ως στόμιο, μέσω του οποίου ένα προς ένα τα άτομα διοχετεύονται προς τη δημιουργία της κάθε δομής, χαράσσοντας έτσι το δρόμο προς την κατασκευή δομών οποιουδήποτε μεγέθους.

### **3.6.5 Βιοϋβριδικά μοσχεύματα και εμφυτεύματα**

Τα προσθετικά μέρη, αλλά και γενικότερα όλες οι βιοϊατρικές συσκευές που εισάγονται σε βιολογικούς ιστούς θα πρέπει να είναι βιοσυμβατές, ώστε να μην αποβληθούν ή προκαλέσουν προβλήματα στον ξενιστή και να μπορέσουν να δράσουν υποστηρικτικά ή να αντικαταστήσουν όργανα και καταστραμμένους ιστούς. Τα νανοδίκτυα προσφέρουν την κατάλληλη διεπαφή μεταξύ του εμφυτεύματος και του παρακείμενου βιολογικού περιβάλλοντος.

Όσον αφορά στα εμφυτεύματα, ευρεία εφαρμογή συναντάται στα εμφυτεύματα οστών, αφού τα ανθρώπινα οστά και οι πρωτεΐνες που βρίσκονται εξωκυτταρικά των οστών, αποτελούν νανο-οργανικές δομές από τη φύση τους και για αυτό και αλληλεπιδρούν επιτυχώς με άλλα νανο-υλικά. Προκειμένου να αφομοιωθεί το πρόσθετο μέρος και τελικά να θεωρηθεί ενιαίο με τον βιολογικό ιστό θα πρέπει η επιφάνεια του να είναι τέτοια ώστε τα εξωκυτταρικά μόρια που εκκρίνονται από τον ιστό να μπορούν να προσδεθούν πάνω του.

Προσοχή θα πρέπει να δοθεί επίσης στο σχεδιασμό των προσθετικών μέρων για να μην αναπτυχθούν ξαφνικές μολύνσεις από βακτηρίδια, γιατί με την πάροδο του χρόνου αλλάζει το φαινότυπό τους και μπορεί να αποκτήσει ανοχή στα αντιβιοτικά ή ακόμα και στην ίδια την προσοχή από το ανοσοποιητικό σύστημα. Επίσης, προσοχή χρειάζεται στην περίπτωση που τα εμφυτεύματα έχουν επιφάνειες που έρχονται σε επαφή (όπως είναι η αντικατάσταση αρθρώσεων και χόνδρων) και παράγουν νανοσωματίδια που μπορεί να προκαλέσουν φλεγμονές ή αποτελέσματα που ως τώρα είναι άγνωστα.

### **3.6.6 Μηχανική ιστών**

Βάσει για τη μηχανική ιστών αποτελεί η δημιουργία ικριωμάτων, τεχνικών δομών δηλαδή που χρησιμοποιούνται ως βάση για την ανάπτυξη και αναγέννηση ιστών, κόκκαλων και οργάνων.

Η εξωκυτταρική μήτρα είναι το εξωκυτταρικό τμήμα κάθε ζωικού ιστού που προσφέρει υποστηρικτικές λειτουργίες στα κύτταρα. Είναι μια σχετικά σταθερή δομή, αποτελούμενη από ίνες και πολυσακχαρίτες, που βρίσκεται κάτω από το επιθήλιο και περιτριγυρίζει συνδετικούς ιστούς. Έχει βρεθεί ότι προκαλεί την ανάπτυξη και ίαση των ιστών, με το να αποτρέπει το ανοσοποιητικό σύστημα από το να εκδηλώνει φλεγμονές ή να προκαλεί ουλές και να διευκολύνει τα γειτονικά κύτταρα στην αποκατάσταση του βιολογικού ιστού.

Έχει δοθεί λοιπόν ειδικό βάρος προς τη δημιουργία τεχνητών δομών από νανοϊνες που να μπορούν να μιμηθούν την εξωκυτταρική μήτρα και να δημιουργήσουν ικρίωματα, υπόβαθρα δηλαδή που θα μιμούνται το κολλαγόνο και την ελαστίνη και θα παρέχουν καλύτερες συνθήκες για τη δημιουργία και ίαση των ιστών.

### **3.6.7 Μηχανική πρωτεϊνών**

Πολλές ασθένειες οφείλονται σε λανθασμένη διάταξη των πρωτεϊνών, πχ όταν δεν είναι σωστά διπλωμένες στη δομή που πρέπει, κι αποτελούν την πηγή αρκετών κληρονομικών ασθενειών. Μερικά παραδείγματα τέτοιων ασθενειών αποτελούν η νόσος του Alzheimer, του Parkinson, του Huntington, του Creutzfeldt-Jacob ή η δρεπανοκυτταρική αναιμία. Η σύνθεση τεχνητών πρωτεϊνών και ειδικά ο αναγνώριση του αλγορίθμου με τον οποίο διπλώνονται οι πρωτεΐνες είναι μια πολύπλοκη διαδικασία, καθώς απαιτούνται αυτοελεγχόμενοι υπολογισμοί και μηχανισμοί, ενώ πρέπει να καταφέρουμε να συνθέσουμε γονίδια και τεχνητό DNA.

Προκειμένου να κατασκευαστούν τεχνητές πρωτεΐνες χρειαζόμαστε μηχανισμούς που είναι υπάρχοντες στο σώμα, όπως είναι τα ριβοσώματα που λειτουργία τους είναι η συναρμολόγηση των αμινοξέων για να σχηματίσουν ένα συγκεκριμένο μόριο πρωτεΐνης βασιζόμενα σε ακολουθίες ενός μορίου RNA. Από τα παραπάνω διαφαίνεται πως η τεχνητή σύνθεση πρωτεϊνών θα ανοίξει νέους δρόμους προς την ίαση ασθενειών που μέχρι τώρα φαίνονται τρομακτικές.

### **3.6.8 Βιομηχανία και αγοραστικά αγαθά**

Η διασύνδεση των μικροσκοπικών αυτών συσκευών μπορεί να εφαρμοστεί στη βιομηχανία και την παραγωγή καταναλωτικών αγαθών, ώστε

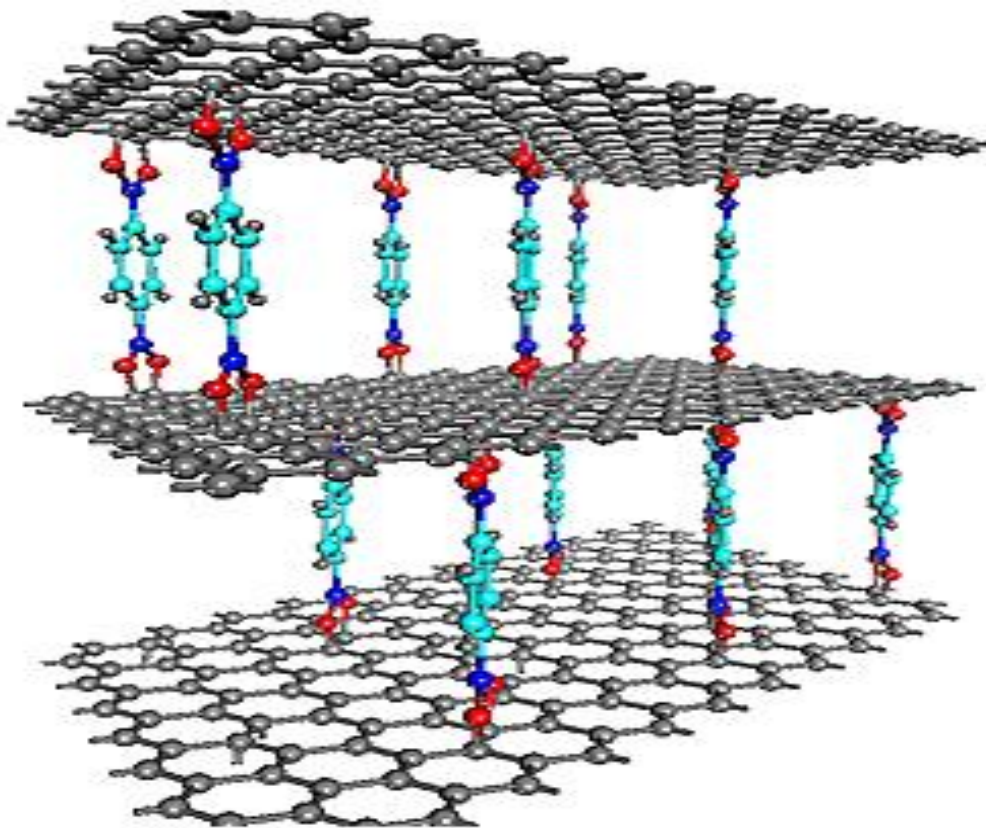


να ενσωματωθούν σε ήδη υπάρχοντα προϊόντα προσδίδοντάς τους νέα λειτουργικότητα ή να συνδράμουν στην ανάπτυξη καινούριων.

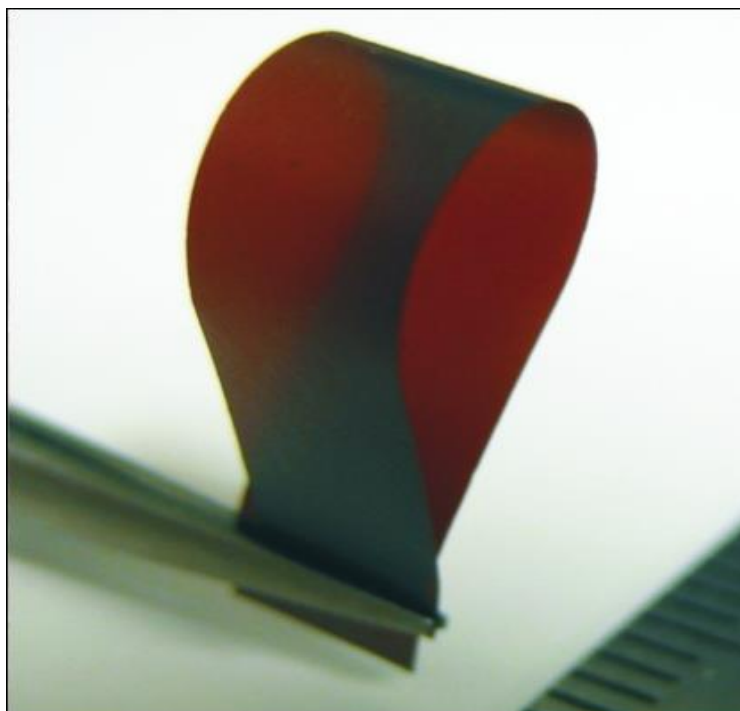
### 3.6.9 Λειτουργικά υλικά και υφάσματα

Τα νανοδίκτυα μπορούν να εφαρμοστούν σε διάφορα υλικά ώστε να τους προσφέρουν αναπτυγμένες λειτουργίες, όπως για παράδειγμα η υλοποίηση αντι-μικροβιακών υφασμάτων και απωθητικών ως προς του λεκέδες. Οι νανο-συσκευές αυτές αντιδρούν σε εξωτερικά ερεθίσματα και ανάλογα προσαρμόζουν τη συμπεριφορά τους.

Ένα νέο υλικό που δημιουργήθηκε, το οξειδίο του γραφενίου (Σχήμα 3.11), μπορεί να διπλωθεί, να ζαρωθεί και να τεντωθεί, παρόλο ότι έχει το ίδιο πάχος με το συνηθισμένο χαρτί (μόλις ένα χιλιοστό του χιλιοστού) είναι πολύ δύσκαμπτο και εξαιρετικά ανθεκτικό. Επιπλέον, θεωρείται ότι το υλικό αυτό που βασίζεται σε μια ένωση του άνθρακα μπορεί να προσαρμοστεί για πολλές εφαρμογές, συμπεριλαμβανομένης και της μοριακής αποθήκευσης, σαν ιοντικού αγωγού και σαν υπερπυκνωτή.



Σχήμα 3.11: Απεικόνιση οξειδίου του γραφενίου



**Σχήμα 3.12:** Χαρτί από φύλλα γραφενίου

Εντούτοις, μια ομάδα από το Βορειοδυτικό Πανεπιστήμιο στο Σικάγο συμπεριλαμβανομένου και του Rodney Ruoff έχει ανακαλύψει ότι μεγάλες ποσότητες οξειδωμένου γραφενίου μπορούν να 'υφανθούν' μαζί, και να δημιουργήσουν έναν νέο τύπο «χαρτιού» (Σχήμα 3.12) που είναι πιο δύσκαμπτο και ισχυρότερο από άλλα λεπτά υλικά. Συγκεκριμένα δημιούργησαν το νέο υλικό από επικαλυπτόμενα φύλλα οξειδίου του γραφενίου, ενωμένα όπως τα κεραμίδια μιας στέγης χάρη σε δεσμούς υδρογόνου. Επίσης, διπλώνεται σχετικά εύκολα αλλά σκίζεται πολύ δύσκολα.

Η διαδικασία ξεκίνησε με την οξείδωση του γραφίτη, με σκοπό να αντικαταστήσει κατά προσέγγιση τα μισά από τα άτομα άνθρακα με άτομα οξυγόνου. Όταν το οξείδιο του γραφίτη αναμιγνύεται με νερό, αυτά τα άτομα του οξυγόνου απωθούν τα μόρια του νερού, αναγκάζοντας τα μεμονωμένα στρώματα, του οξειδίου του γραφενίου, να διασκορπιστούν ή να γίνουν 'φύλλα'. Οι ερευνητές ακολούθως φίλτραραν αυτό το μίγμα (με τα φύλλα) με τη βοήθεια μιας μεμβράνης, η οποία συλλέγει τα στρώματα με μια τέτοια ρύθμιση ώστε να παραχθεί οξείδιο του γραφενίου λεπτό σαν χαρτί.

Ο κανονικός γραφίτης έχει μια λεπτή δομή, που χρειάζεται μόνο μια μικρή πλευρική δύναμη για να διασπαστεί σε κανονικά λεπτά στρώματα. Αντιθέτως, τα στρώματα στο οξείδιο του γραφενίου αναμειγνύονται το ένα με το άλλο και 'ρυτιδώνουν' σε μεγαλύτερες κλίμακες. Αυτό επιτρέπει στο φορτίο να κατανομηθεί σε όλη τη δομή, γι αυτό και η δομή αυτή γίνεται πιο ισχυρή από το φύλλο του γραφίτη και το φύλλο από νανοσωλήνες άνθρακα.

Η περιπλεγμένη δομή αφήνει, επίσης, μεμονωμένη μετατόπιση των στρωμάτων το ένα πάνω από το άλλο, έτσι ώστε τα συλλογικά στρώματα να γίνονται εύκαμπτα. Αλλά το πιο σπουδαίο είναι ότι το 'χαρτί' μπορεί χημικά να συντονιστεί με την αλλαγή της ποσότητας του οξυγόνου στα στρώματα. Η μείωση της περιεκτικότητας σε οξυγόνο, παραδείγματος χάριν, θα το έκανε μονωτή μέσα σε έναν καλό αγωγό, έτσι η ηλεκτρική αγωγιμότητα των υλικών αυτών στο μέλλον θα είναι δυνατόν να ρυθμιστεί κατά βούληση. Επιπλέον, το ειδικό αυτό χαρτί θα μπορούσε να εμποτιστεί με πολυμερή, κεραμικά ή μέταλλα, για να δημιουργήσει σύνθετα υλικά που να ξεπερνούν σε πολύτιμες ιδιότητες τα καθαρά αντίστοιχά τους.

Αυτή η μεγάλη γκάμα των ιδιοτήτων του θα μπορούσε να σημαίνει ότι υπάρχουν εφαρμογές τόσο διαφορετικές, όσο και οι μεμβράνες με ελεγχόμενη διαπερατότητα στους υπερπυκνωτές για την αποθήκευση της ενέργειας .

### **3.6.10 Επιφάνειες αφής με υψηλή ευαισθησία**

Οι νανο-αισθητήρες μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε κατανεμημένο τρόπο ώστε να αναπτυχθούν επιφάνειες αφής μεγάλης έκτασης με υψηλή ευαισθησία και ακρίβεια. Για παράδειγμα, νανο-αισθητήρες αφής μπορούν να τοποθετούνται τυχαία πάνω σε επιφάνειες όπως είναι μια επιφάνεια από γυαλί ή ένα γραφείο. Πριν την ενεργοποίηση της λειτουργίας των νανο-αισθητήρων και την εφαρμογή τους, θα λαμβάνει χώρα μια διαδικασία βαθμονόμησης, ώστε να καθοριστούν τα όρια και η θέση των διαφόρων νανο-αισθητήρων μέσω κάποιας κεντρικής μονάδας. Επίσης, η όλη διάταξη μπορεί να απορροφά ενέργεια από την τριβή που θα παράγεται μέσω της κίνησης του χρήστη.

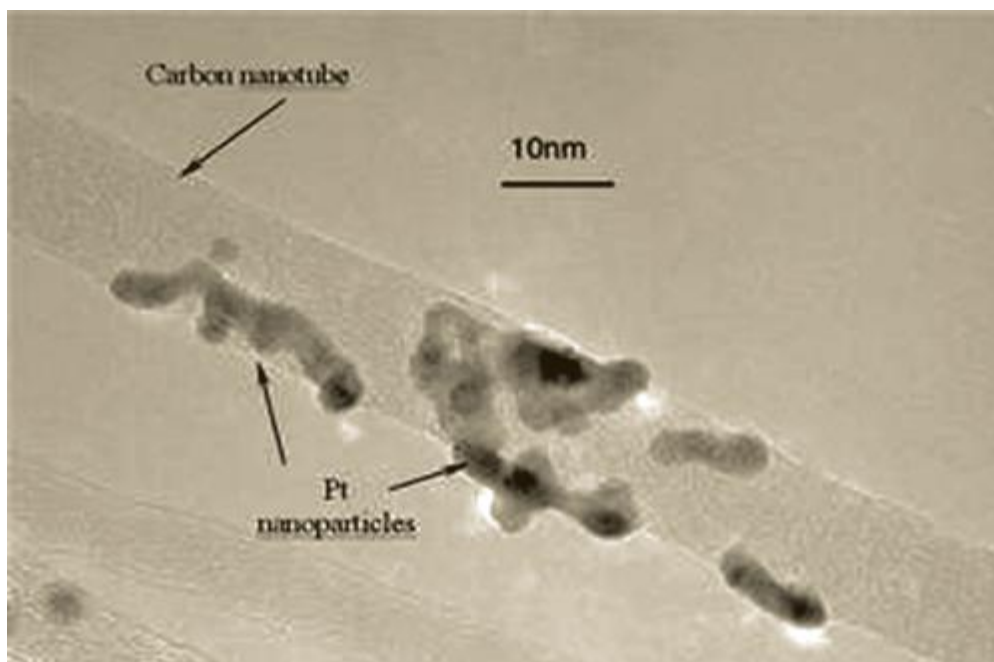
### **3.6.11 Απτική διασύνδεση**

Η απτική τεχνολογία αλληλεπιδρά με τον χρήστη μέσω κινήσεων, πιέσεων και δονήσεων που συνδέονται με την αίσθηση της αφής του χρήστη. Νανο-αισθητήρες και νανο-μοτέρ μπορούν να ενισχύσουν τον απομακρυσμένο έλεγχο και χειρισμό πολύπλοκων και μη συσκευών, ώστε να συμβάλλουν στην ανάπτυξη του ασύρματου περιφερειακού περιβάλλοντος συσκευών όπως είναι κάποιο πληκτρολόγιο σε κινητό τηλέφωνο, σε φορητούς Η/Υ ή σε κονσόλες για videogames.

### **3.6.12 Διαγνωστική ιατρική**

Η εφαρμογή της νανοτεχνολογίας στη διαγνωστική ιατρική έχει οδηγήσει στην ανάπτυξη μίας νέας γενιάς διαγνωστικών τα οποία έχουν μικρό μέγεθος, απαιτούν μικρή ποσότητα δείγματος και παρέχουν σε σύντομο χρονικό διάστημα ακριβή βιολογικά δεδομένα μέσω μίας απλής μέτρησης. Επιπλέον, η σύγκλιση της νανοτεχνολογίας και της ιατρικής απεικόνισης αναμένεται στο

μέλλον να καταστήσει δυνατή την ανίχνευση ενός μόνο μορίου ή ενός κυττάρου μέσα σε ένα πολύπλοκο βιολογικό περιβάλλον. Ένα *in vitro* διαγνωστικό εργαλείο μπορεί να είναι ένας απλός χημικός ή βιοχημικός αισθητήρας ή μία ολοκληρωμένη συσκευή πολλαπλών αισθητήρων. Ο αισθητήρας φέρει ένα στοιχείο, ικανό να αναγνωρίζει την παρουσία, δραστηριότητα ή συγκέντρωση ενός συγκεκριμένου βιομορίου σε ένα διάλυμα και να παράγει σήμα μέσω κάποιας βιοχημικής αλλαγής (Σχήμα 3.13). Ένας μετατροπέας σήματος χρησιμοποιείται για την ποσοτικοποίηση του βιοχημικού αυτού σήματος. Ο συνδυασμός της ελαχιστοποίησης του μεγέθους των συσκευών και της ενσωμάτωσης διαφόρων λειτουργιών σε μία μοναδική συσκευή, με βάση προηγμένες τεχνικές της βιομηχανίας ηλεκτρονικών, έχει οδηγήσει στην ανάπτυξη μιας νέας γενιάς συσκευών οι οποίες είναι μικροσκοπικές, γρήγορες, έχουν χαμηλό κόστος, δεν απαιτούν εξειδικευμένο προσωπικό για τη χρήση τους, χρειάζονται μικρά δείγματα, το οποίο συνεπάγεται λιγότερο επώδυνες και τραυματικές μεθόδους λήψης δειγμάτων αίματος, βιολογικών υγρών και ιστών, και εξάγουν ολοκληρωμένα και ακριβή δεδομένα από μία μοναδική μέτρηση. Αξίζει να σημειωθεί ότι έχουν ήδη αναπτυχθεί νανοσυσκευές διάγνωσης σε μορφή πλακιδίου (*chip*), ικανές να αναγνωρίσουν και να ποσοτικοποιήσουν συγκεκριμένα τμήματα του ανθρώπινου γονιδιώματος, καθώς και των εκφρασμένων πρωτεϊνών τους χρησιμοποιώντας ως ανιχνευτές τα αντίστοιχα συμπληρωματικά DNA τμήματα ή κατάλληλα αντισώματα.



**Σχήμα 3.13:** Βιοαισθητήρας υψηλής ευαισθησίας για την ανίχνευση της γλυκόζης στο αίμα σε σχεδόν πραγματικό χρόνο. Αποτελείται από νανοσωλήνες άνθρακα με επικάλυψη από σωματίδια λευκόχρυσου διαμέτρου 1-5nm (University of Arkansas, USA).

## **4. ΜΕΘΟΔΟΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ**

### **4.1 ΓΕΝΙΚΑ ΠΕΡΙ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ**

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

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

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

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

### **4.2 ΠΡΟΤΕΙΝΟΜΕΝΗ ΜΕΘΟΔΟΣ**

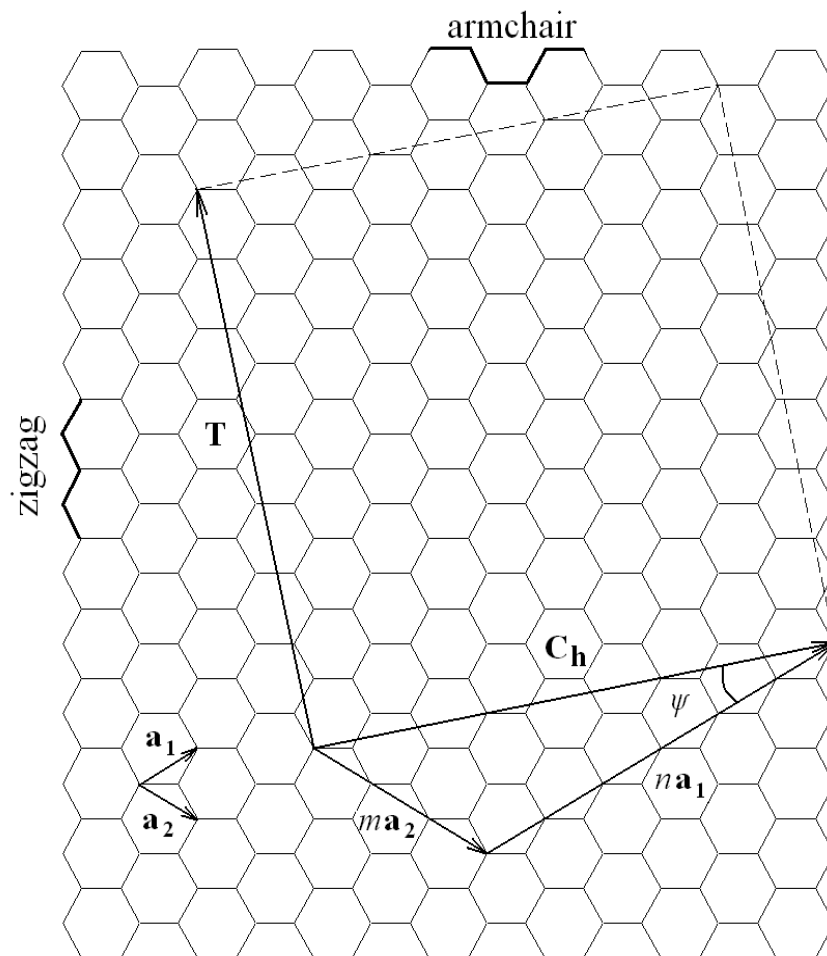
Στην παρούσα πτυχιακή εργασία η μέθοδος που ακολουθείται για την αριθμητική ανάλυση ενός αισθητήρα μάζας που βασίζεται έναν νανοσωλήνα άνθρακα είναι η μέθοδος της δομικής μοριακής μηχανικής. Βάση αυτής της μεθόδου και με τη χρήση των πεπερασμένων στοιχείων προσομοιώνουμε τους δεσμούς που δημιουργούνται ανάμεσα στα άτομα άνθρακα με ελατήρια.

### 4.2.1 Γεωμετρία μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα

Η δομή ενός μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα μπορεί να αναπαραχθεί με την περιστροφή ενός φύλλου γραφενίου, το οποίο ιδεατά κόβεται με τέτοιο τρόπο ώστε να μπορεί να σχηματιστεί ένας κύλινδρος. Το γραφένιο πρέπει να περιστραφεί στην κατεύθυνση που ορίζει το διάνυσμα (chiral vector)  $\mathbf{c}_h$ , το οποίο με την σειρά του ορίζεται ως (βλέπε Σχήμα 4.1):

$$\mathbf{c}_h = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 \quad (4.1)$$

όπου  $\mathbf{a}_1$  και  $\mathbf{a}_2$  είναι τα διανύσματα βάσης του κυψελοειδούς δικτυώματος και οι μεταβλητές  $(n, m)$  είναι ακέραιοι αριθμοί που αντιστοιχούν σε αριθμούς βημάτων κατά μήκος δεσμών άνθρακα μορφής zigzag και γενικά χρησιμοποιούνται για να ονοματίσουν έναν συγκεκριμένο τύπο νανοσωλήνα (Σχήμα 4.1).



Σχήμα 4.1: Δημιουργία ενός μονότοιχου νανοσωλήνα από ένα φύλλο γραφενίου

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

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

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

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

όπου  $r_0$  είναι η απόσταση ισορροπίας μεταξύ δυο γειτονικών ατόμων άνθρακα και για με βάση το πεδίο δυνάμεων που αντιστοιχεί στην απλή αρμονική προσέγγιση είναι ίσο με 0.1421nm.

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

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

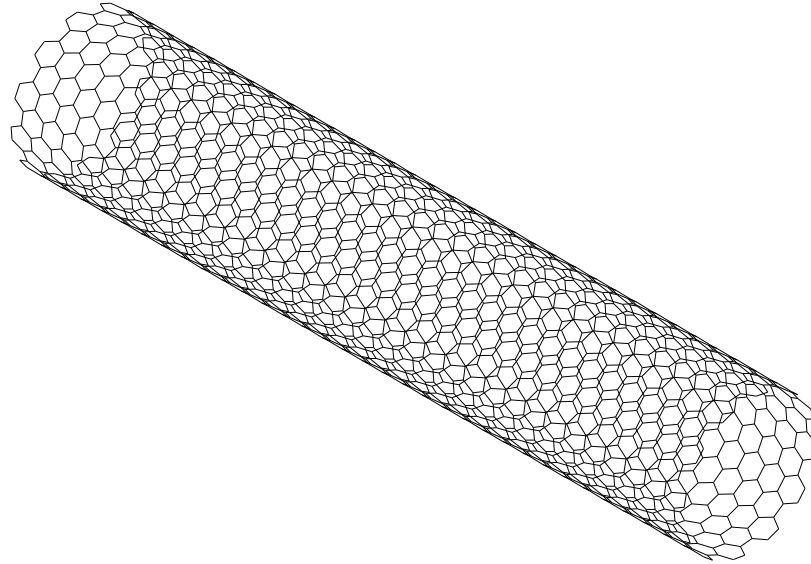
όπου το  $W$  ορίζει τον μέγιστο κοινό διαιρέτη μεταξύ των ποσοτήτων  $2m+n$  και  $2n+m$ .

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

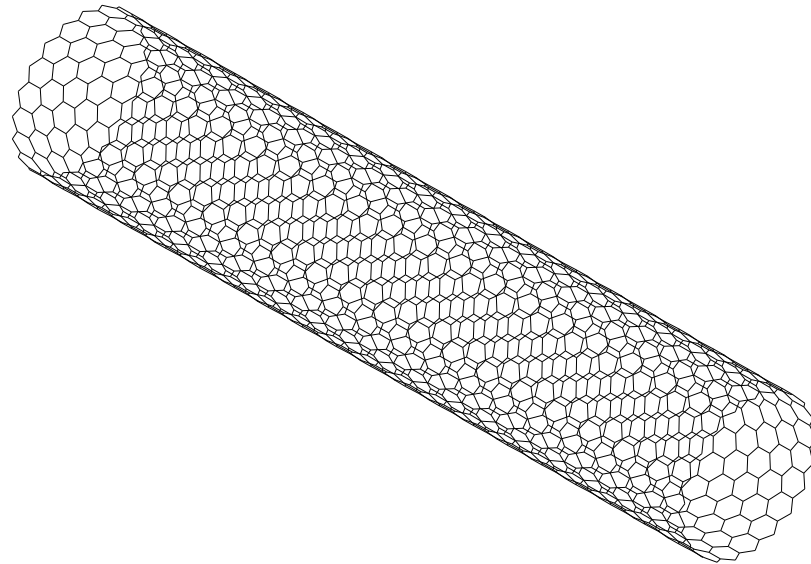
$$(x, y, z) = \left( R \cos\left(\frac{x'}{R}\right), r \sin\left(\frac{x'}{R}\right), y' \right) \quad (4.5)$$

όπου  $R$  είναι η ακτίνα του νανοσωλήνα.

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



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



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



## 4.2.2 Θεμελιώδης εξίσωση

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

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

όπου το  $U_r$  παρουσιάζει την ενέργεια λόγω εφελκυσμού των δεσμών, το  $U_\theta$  την ενέργεια λόγω της κάμψης των δεσμών και το  $U_\tau$  την ενέργεια λόγω της στρέψης των δεσμών. Με την υιοθέτηση μόνο των απλών αρμονικών μορφών οι δυναμικές ενέργειες μπορούν να εκφραστούν, αντίστοιχα ως [12]:

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

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

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

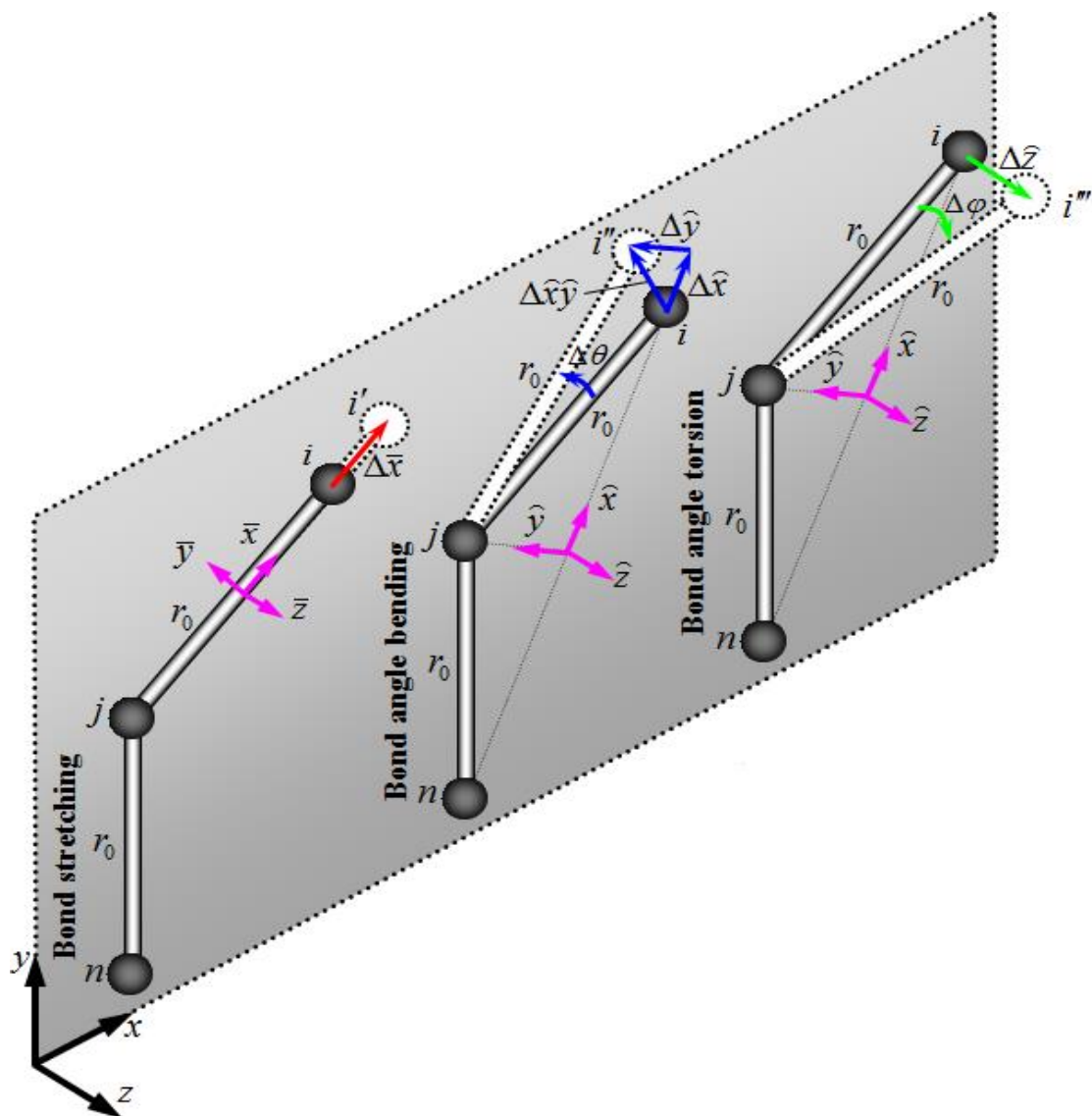
όπου  $k_r$ ,  $k_\theta$  και  $k_\tau$  είναι οι σταθερές δύναμης ένεκα του εφελκυσμού των δεσμών, της κάμψης των δεσμών και της στρέψης των δεσμών οι οποίες λαμβάνονται ίσες με  $k_r = 652 \text{ nN nm}^{-1}$ ,  $k_\theta = 0.876 \text{ nN nm rad}^{-2}$  και  $k_\tau = 0.278 \text{ nN nm rad}^{-2}$ , αντίστοιχα. Παρομοίως, οι παράμετροι  $\Delta r$ ,  $\Delta \theta$  και  $\Delta \phi$  εκφράζουν τη μεταβολή του μήκους του δεσμού, τη μεταβολή της γωνίας κάμψης του δεσμού και τη μεταβολή της γωνίας στρέψης των δεσμών, αντίστοιχα.

Ας υποθέσουμε ότι η νανοδομή  $ijn$  του Σχήματος 4.4 είναι σε ισορροπία. Η νανοδομή αποτελείται από 3 άτομα άνθρακα τα οποία είναι τοποθετημένα στα σημεία  $i$ ,  $j$ , και  $n$ . Η απόσταση μεταξύ των συνδεδεμένων ατόμων όταν βρίσκονται σε ισορροπία είναι  $r_0$ .

Παρατηρούμε μια μεταφορά στο χώρο του ανώτερου ατόμου άνθρακα από το σημείο  $i$  στα σημεία  $i'$ ,  $i''$ , και  $i'''$  λόγω του εφελκυσμού των δεσμών, λόγω κάμψης των δεσμών και λόγω στρέψης των δεσμών, αντίστοιχα. Το Σχήμα 4.4 παρουσιάζει ξεχωριστά τις τρεις αλληλεπιδράσεις μεταξύ των ατόμων. Προκειμένου να απλοποιηθεί η αριθμητική ανάλυση του προβλήματος,

υιοθετήθηκαν δυο διαφορετικά τοπικά συστήματα συντεταγμένων τα οποία φαίνονται στο Σχήμα 4.4.

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



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

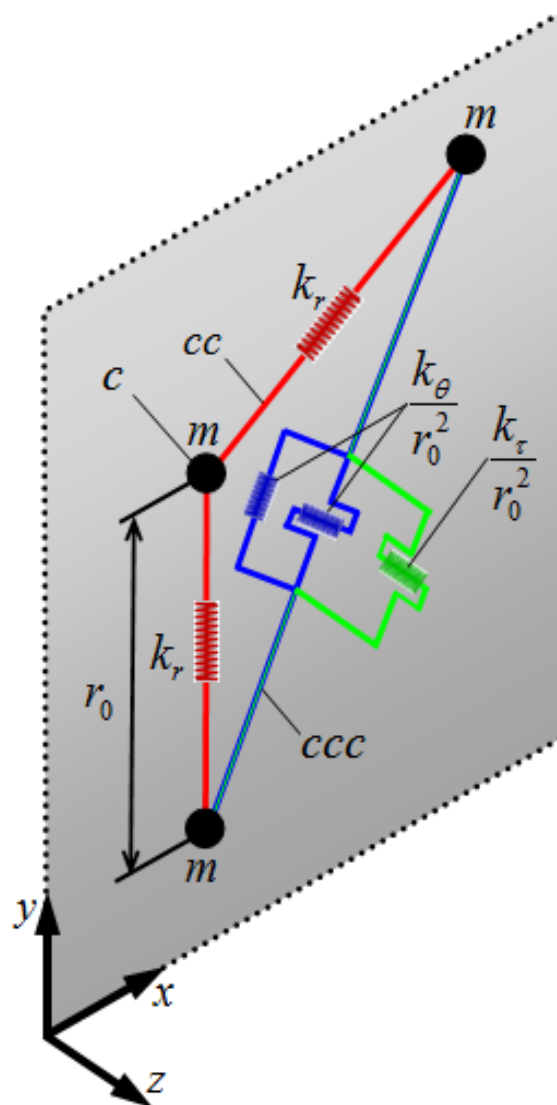
$$k_{\bar{x}} = \frac{k_\theta}{r_0^2} \quad (4.15)$$

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

$$k_z = \frac{k_r}{r_0^2} \quad (4.17)$$

### 4.2.3 Υιοθετούμενα πεπερασμένα στοιχεία και εξισώσεις

Προκειμένου να συμπεριλάβουμε τους προαναφερόμενες παραμέτρους δυσκαμψίας στην ανάλυση των νανοσωλήνων άνθρακα, θα χρησιμοποιηθούν δύο είδη πεπερασμένων στοιχείων τύπου ελατηρίου. Τα στοιχεία αυτά τα οποία δηλώνονται σαν *cc* και *ccc* στο Σχήμα 4.5, είναι γραμμικά στοιχεία, ορίζονται από δυο κόμβους και έχουν έξι βαθμούς ελευθερίας ανά κόμβο δηλαδή τις τρεις μετατοπίσεις [12].



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

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

$$\mathbf{K}_{\bar{xyz}}^{cc} = \begin{bmatrix} \mathbf{k}_{\bar{xyz}}^{cc} & -\mathbf{k}_{\bar{xyz}}^{cc} \\ -\mathbf{k}_{\bar{xyz}}^{cc} & \mathbf{k}_{\bar{xyz}}^{cc} \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

όπου:

$$\mathbf{k}_{\bar{xyz}}^{cc} = \begin{bmatrix} k_r & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

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

$$\mathbf{K}_{\bar{xyz}}^{ccc} = \begin{bmatrix} \mathbf{k}_{\bar{xyz}}^{ccc} & -\mathbf{k}_{\bar{xyz}}^{ccc} \\ -\mathbf{k}_{\bar{xyz}}^{ccc} & \mathbf{k}_{\bar{xyz}}^{ccc} \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

όπου:

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

Καταλήγοντας, ειδικά σημειακά πεπερασμένα στοιχεία μάζα τριών βαθμών ελευθερίας, τα οποία συμβολίζονται με  $c$ , τοποθετούνται στις ατομικές θέσεις άνθρακα προκειμένου να προσομοιώσουν την αδρανειακή επίδραση των ατόμων άνθρακα..

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

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

όπου:

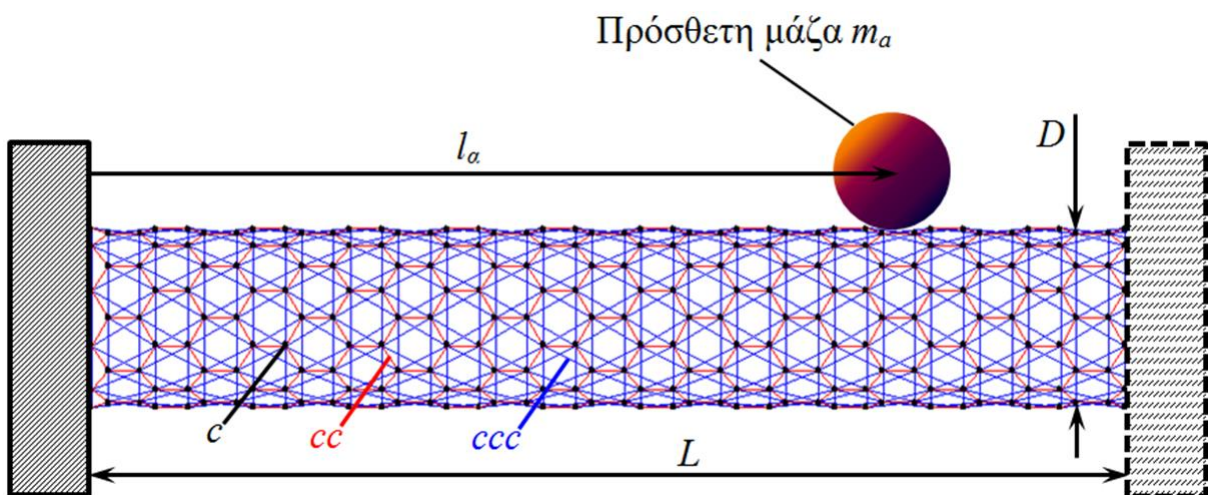
$$\mathbf{m}_{xyz}^c = \begin{bmatrix} m & 0 & 0 \\ 0 & m & 0 \\ 0 & 0 & m \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

Το ποσό της μάζας  $m$  του παραπάνω μητρώου ισούται με τη μάζα του ατόμου άνθρακα  $m_c = 1.9943 \times 10^{-26}$  kg όταν δεν είναι προσκολλημένο κάποιο άλλο πρόσθετο νανοσωματίδιο στο συγκεκριμένο σημείο. Στην αντίθετη περίπτωση θεωρούμε  $m = m_c + m_a$  όπου  $m_a$  είναι το μέγεθος της μάζας του πρόσθετου προς ανίχνευση νανοσωματιδίου. Για λόγους ευκολίας, ας εισάγουμε σε αυτό το σημείο το αδιάστατο μέγεθος της προστιθέμενης μάζας  $m_a$  :

$$m_a^* = \frac{m_a}{m_c} \quad (4.24)$$

Στο Σχ. 4.6 απεικονίζεται ένα ολοκληρωμένο πλέγμα πεπερασμένων στοιχείων για έναν νανοσωλήνα άνθρακα με μια μάζα στην επιφάνεια του στη θέση  $l_a$  κατά το μήκος του νανοσωλήνα  $L$ . Για λόγους ευκολίας, εισάγουμε σε στο σημείο αυτό την αδιάστατη θέση της προστιθέμενης μάζας :

$$l_a^* = \frac{l_a}{L} \quad (4.25)$$



**Σχήμα 4.4:** Πλέγμα πεπερασμένων στοιχείων για τη προσομοίωση του νανοσωλήνα άνθρακα.

Στη συνέχεια, προκειμένου να ολοκληρωθεί η αριθμητική διατύπωση του υπό εξέταση προβλήματος, κατασκευάζουμε το σύστημα γραμμικών εξισώσεων

λαμβάνοντας υπ' όψη τη γνωστή γεωμετρία του νανοσωλήνα άνθρακα, δηλαδή τις θέσεις των ατόμων άνθρακα. Έπειτα οι μητρικές εξισώσεις όλων των στοιχείων  $c$ ,  $cc$  και  $ccc$  του νανοσωλήνα αφού μετασχηματισθούν στο παγκόσμιο σύστημα συντεταγμένων  $(x, y, z)$  συναρμολογούνται στην ακόλουθη μητρική εξίσωση ελεύθερης ταλάντωσης:

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{U}} + \mathbf{K}\mathbf{U} = \mathbf{0} \quad (4.26)$$

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

Το πρόβλημα των ιδιοτιμών μπορεί να λυθεί με την εφαρμογή των συνοριακών συνθηκών στην τελευταία εξίσωση και έτσι οι φυσικές συχνότητες και οι αντίστοιχες ιδιομορφές μπορούν να καθοριστούν [12].





## 5. ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

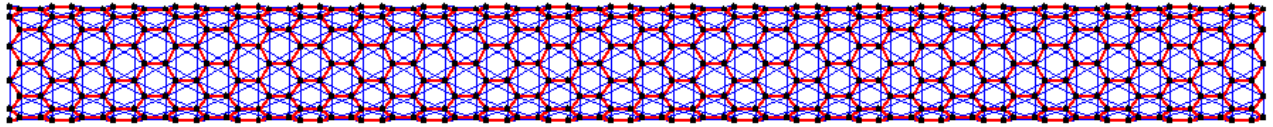
Κατά τη διάρκεια της παρούσας πτυχιακής αναπτύχθηκαν διάφορα μοντέλα νανοσωλήνων άνθρακα διαμέτρου  $D$  και συνολικού μήκους  $L$  τόσο τύπου zigzag όσο και τύπου armchair. Ο γεωμετρικός τους λόγος  $L/D$  πάρθηκε ίσος περίπου με 10 για να γίνει εφικτή η μεταξύ τους σύγκριση. Στον Πίνακα 5.1 παρατίθενται όλοι οι υπό εξέταση νανοσωλήνες καθώς και τα αντίστοιχα γεωμετρικά τους στοιχεία.

**Πίνακας 5.1:** Υπό εξέταση νανοσωλήνες άνθρακα

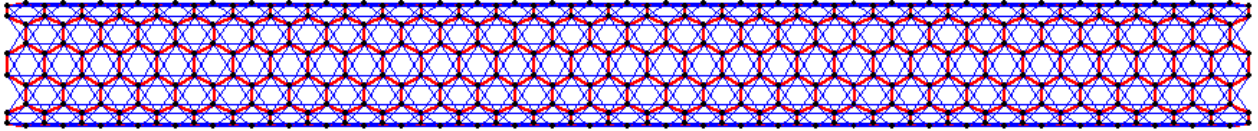
Μονότοιγοι Νανοσωλήνες Άνθρακα							
armchair				zigzag			
Ονομασία	$D$ (nm)	$L$ (nm)	$L/D$	Ονομασία	$D$ (nm)	$L$ (nm)	$L/D$
(3,3)	0.40708	4.06099	9.97590	(5,0)	0.39172	3.90775	9.97588
(6,6)	0.81418	8.12229	9.97604	(10,0)	0.77738	7.6845	9.88513
(12,12)	1.62834	16.2439	9.97574	(20,0)	1.56680	15.631	9.97638
(24,24)	3.25670	32.6109	10.01348	(40,0)	3.13376	31.4041	10.02122

Για όλους τους νανοσωλήνες εξετάστηκαν δύο περιπτώσεις στηρίξεων η μονή και η διπλή πάκτωση. Εξετάστηκε εκτενώς η ταλαντωτική συμπεριφορά των συγκεκριμένων νανοσωλήνων για την περίπτωση κατά την οποία οι νανοσωλήνες είναι αυτούσιοι χωρίς κάποια άλλη προσθήκη και η περίπτωση κατά την οποία σε κάποια θέση  $l_a$  (Σχήμα 4.4.) του συνολικού τους μήκους  $L$  έχει επικαθήσει μια μάζα  $m_a$ .

Στο Σχήμα 5.1 (α) και (β) απεικονίζονται ένας zigzag και ένας armchair νανοσωλήνας, αντίστοιχα, όπως αυτοί έχουν μοντελοποιηθεί με βάσει την προτεινόμενη μεθοδολογία πεπερασμένων στοιχείων που αναλύθηκε στη προηγούμενη παράγραφο.



(α)

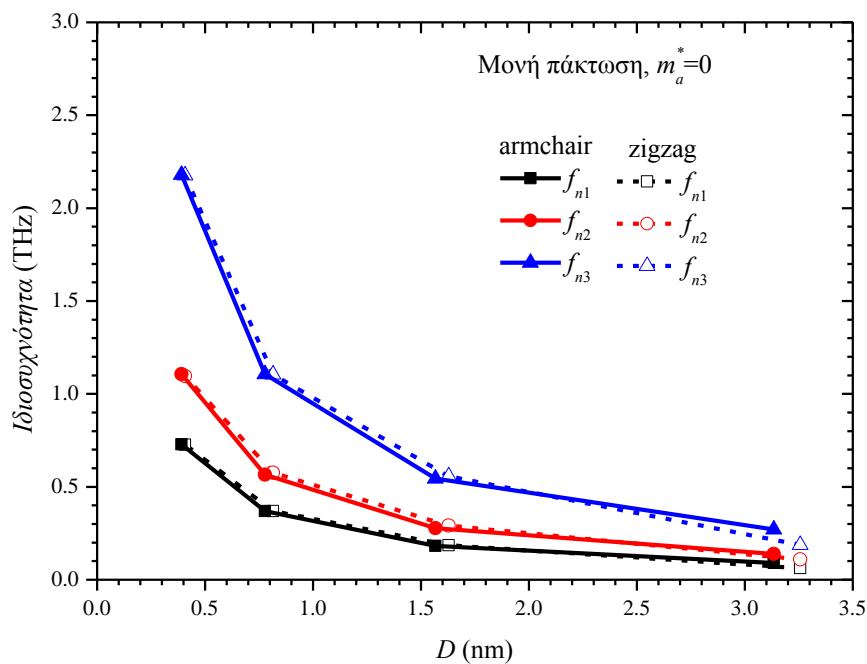


(β)

**Σχήμα 5.1:** Μοντέλα νανοσωλήνων άνθρακα: (α) Ο zigzag (10,0) και (β) ο armchair (6,6).

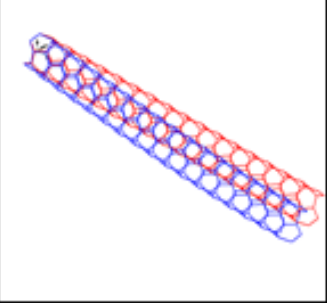
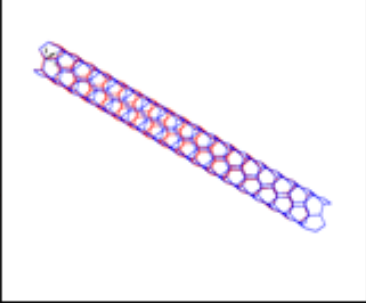
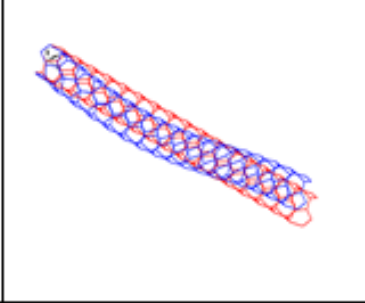
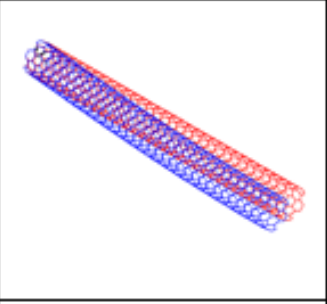
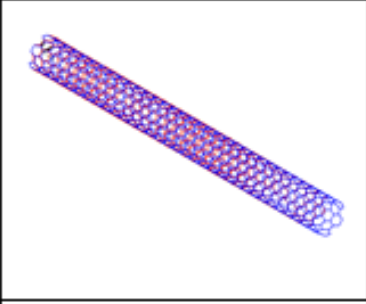
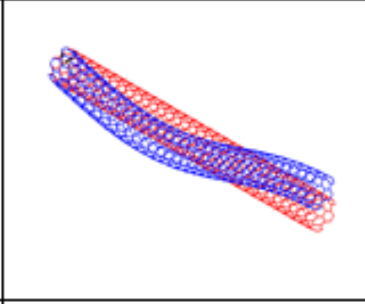

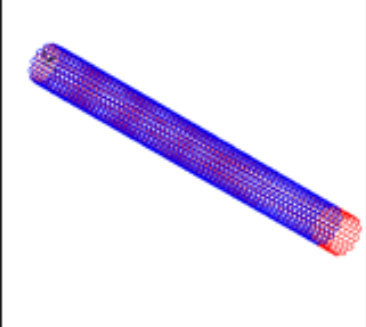
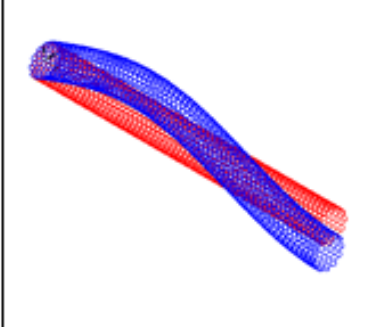
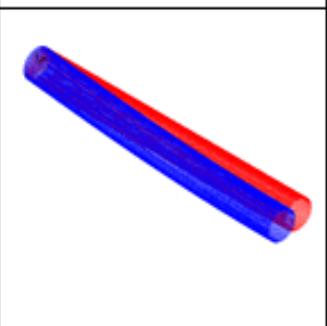
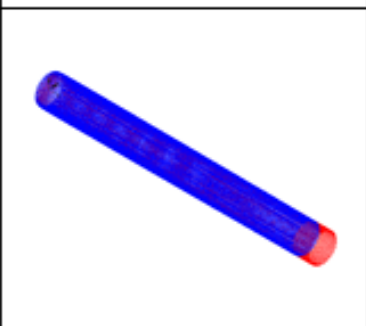
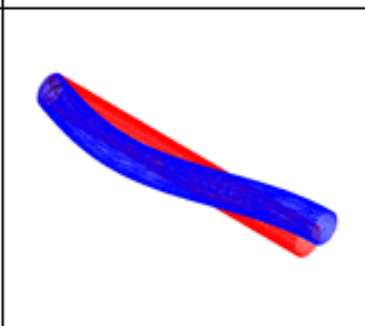
## 5.1 ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΧΩΡΙΣ ΠΡΟΣΤΙΘΕΜΕΝΗ ΜΑΖΑ

Αρχικά υπολογίζονται οι τρεις πρώτες ιδιοσυχνότητες των καθαρών νανοσωλήνων για τη περίπτωση μονόπακτης και αμφίπακτης στήριξης. Η μεταβολή των τριών πρώτων ιδιοσυχνοτήτων  $f_{n1}, f_{n2}, f_{n3}$  σε σχέση με τη διάμετρο των μονόπακτων νανοσωλήνων απεικονίζεται στο Σχήμα 5.2

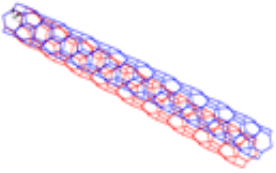
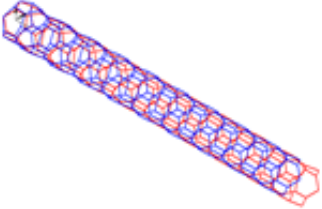
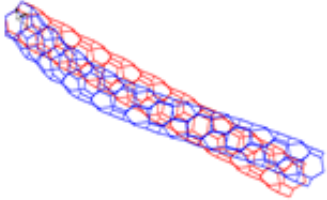
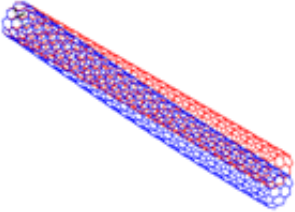
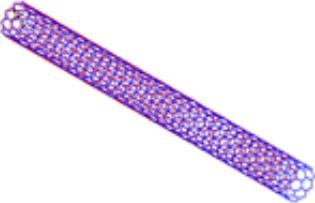
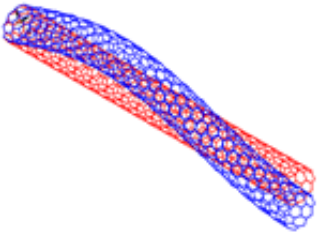
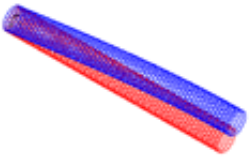
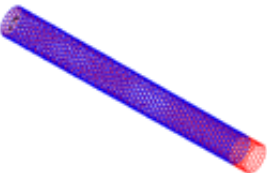
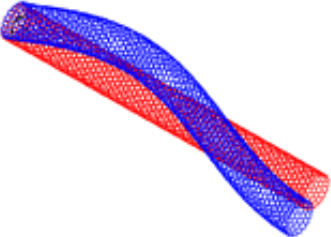
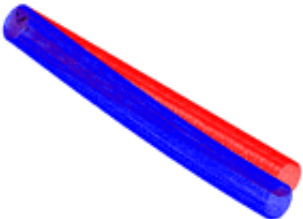
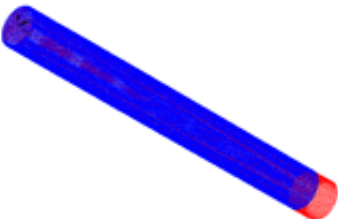
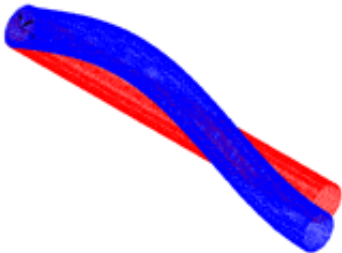


**Σχήμα 5.2:** Τρεις πρώτες ιδιοσυχνότητες καθαρών μονόπακτων νανοσωλήνων σε σχέση με διάμετρο

Είναι φανερό ότι για την περίπτωση του μονόπακτου νανοσωλήνα η γραμμική αύξηση της διαμέτρου οδηγεί σε εκθετική σχεδόν μείωση των ιδιοσυχνοτήτων του. Για μεγαλύτερους κατά διάμετρο νανοσωλήνες λαμβάνονται εμφανώς μικρότερες ιδιοσυχνότητες λόγω των περισσότερων ατόμων άνθρακα που υπάρχουν στη νανοδομή και άρα της μεγαλύτερης συνολικής μάζας. Επίσης παρατηρείται ότι γενικά για μικρούς σε διάμετρο νανοσωλήνες η armchair μορφή παρέχει ελάχιστα μεγαλύτερες ιδιομορφές σε σχέση με τον zigzag, φαινόμενο που αντιστρέφεται για μεγάλες διαμέτρους. Στο Σχήμα 5.3 και 5.4 παρουσιάζονται οι αντίστοιχες ιδιομορφές που ελήφθησαν για τη περίπτωση των armchair και zigzag νανοσωλήνων, αντίστοιχα. Η πρώτη ιδιομορφή είναι καμπτικές, οι δεύτερες θλιπτικές ενώ οι τρίτες καμπτικές ανώτερης μορφής. Η ομοιότητα στην ταλαντωτική συμπεριφορά και για τους δύο τύπους νανοσωλήνα γίνεται αντιληπτή.

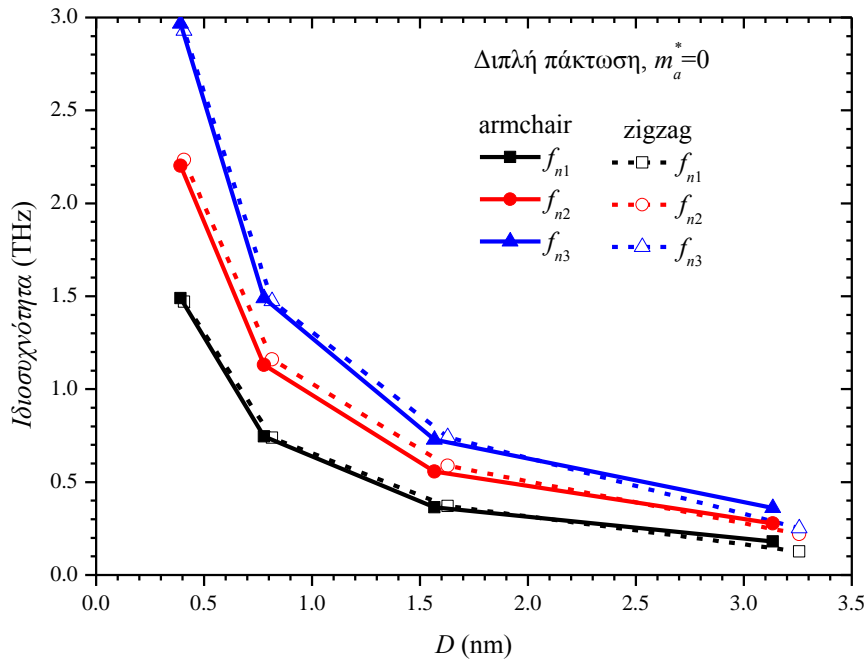
	<b>Ιδιομορφές μονόπακτων armchair νανοσωλήνων άνθρακα</b>		
	1η	2η	3η
<b>(3,3)</b>			
<b>(6,6)</b>			
<b>(12,12)</b>			
<b>(24,24)</b>			

**Σχήμα 5.3:** Ιδιομορφές μονόπακτων καθαρών armchair νανοσωλήνων άνθρακα

	Ιδιομορφές μονόπακτων zigzag νανοσωλήνων άνθρακα		
	1η	2η	3η
(5,0)			
(10,0)			
(20,0)			
(40,0)			

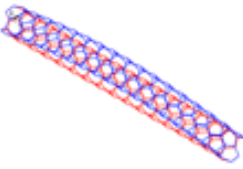
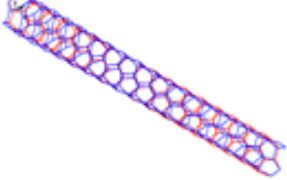
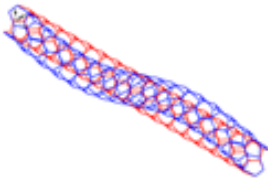
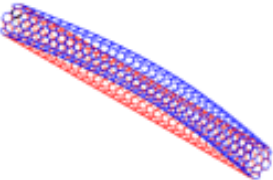
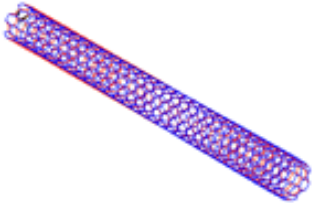
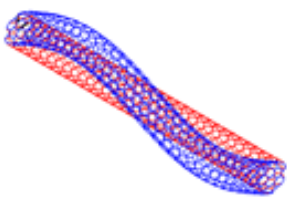
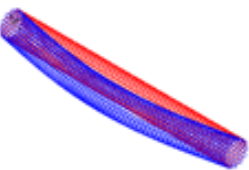
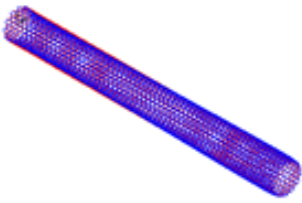
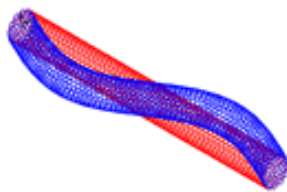

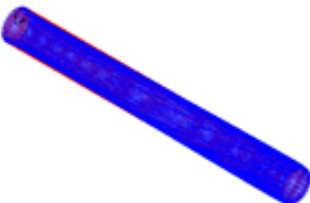
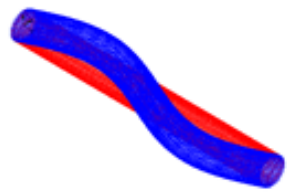
**Σχήμα 5.4:** Ιδιομορφές μονόπακτων καθαρών zigzag νανοσωλήνων άνθρακα

Εν συνεχεία υπολογίζονται οι τρεις πρώτες ιδιοσυχνότητες των καθαρών νανοσωλήνων για τη περίπτωση αμφίπακτης στήριξης. Η μεταβολή των τριών πρώτων ιδιοσυχνοτήτων  $f_{n1}, f_{n2}, f_{n3}$  σε σχέση με τη διάμετρο των αμφίπακτων νανοσωλήνων απεικονίζεται στο Σχήμα 5.5

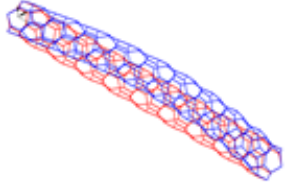
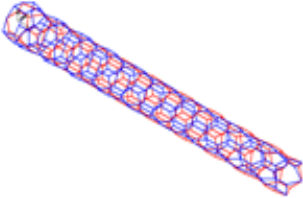
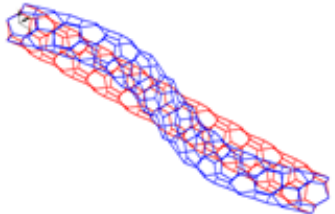
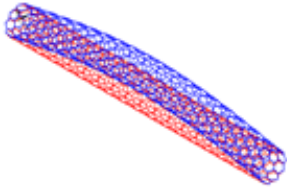
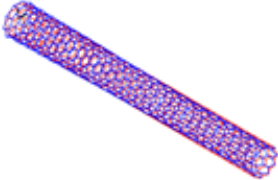
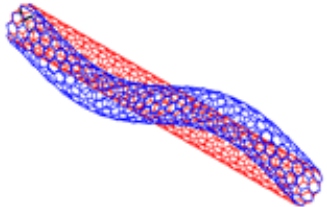
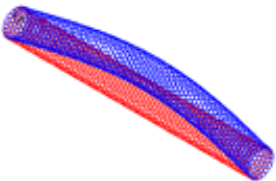
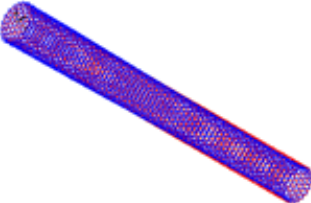
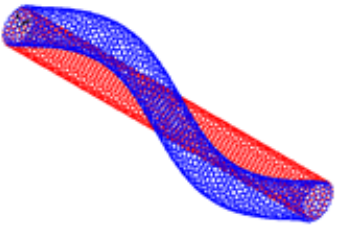

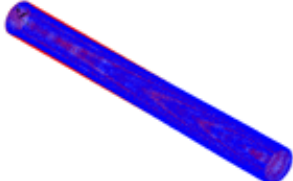



**Σχήμα 5.5:** Τρεις πρώτες ιδιοσυχνότητες καθαρών αμφίπακτων νανοσωλήνων σε σχέση με διάμετρο

Είναι εμφανές ότι για την περίπτωση των αμφίπακτων νανοσωλήνων λαμβάνονται μεγαλύτερες ιδιοσυχνότητες εξαιτίας της αύξησης της δυσκαμψίας του συστήματος που προκύπτει λόγω των επιπλέον περιορισμών μετατόπισης που υφίστανται στα άκρα. Η αύξηση της διαμέτρου οδηγεί σε εκθετική σχεδόν μείωση των ιδιοσυχνοτήτων των νανοσωλήνων. Και σε αυτή τη περίπτωση η armchair μορφή οδηγεί σε ελάχιστα μεγαλύτερες ιδιοτιμές για μικρότερες διαμέτρους. Στο Σχήμα 5.6 και 5.7 παρουσιάζονται οι αντίστοιχες ιδιομορφές που ελήφθησαν για τη armchair και zigzag περίπτωση. Η πρώτη ιδιομορφή είναι καμπτική, η δεύτερη τείνει προς θλιπτική ενώ η τρίτη καμπτική ανώτερης μορφής.

Ιδιομορφές αμφίπακτων armchair νανοσωλήνων άνθρακα			
	1η	2η	3η
(3,3)			
(6,6)			
(12,12)			
(24,24)			

Σχήμα 5.6: Ιδιομορφές αμφίπακτων καθάρων armchair νανοσωλήνων άνθρακα

	Ιδιομορφές αμφίπακτων zigzag νανοσωλήνων άνθρακα		
	1η	2η	3η
(5,0)			
(10,0)			
(20,0)			
(40,0)			

**Σχήμα 5.7:** Ιδιομορφές αμφίπακτων καθαρών zigzag νανοσωλήνων άνθρακα



## 5.2 ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΜΕ ΠΡΟΣΤΙΘΕΜΕΝΗ ΜΑΖΑ

Στη παράγραφο αυτή γίνεται η θεώρηση ότι σε κάποια ατομική θέση η οποία καθορίζεται από τις συντεταγμένες  $(x, y, z)$  εναποτίθεται μία μάζα  $m_a$  όπως ακριβώς απεικονίζεται στο Σχήμα 4.4. Να τονισθεί ότι όλοι οι εξεταζόμενοι νανოსωλήνες αντιστοιχούν σε γεωμετρικό λόγο  $L/D \approx 10$ .

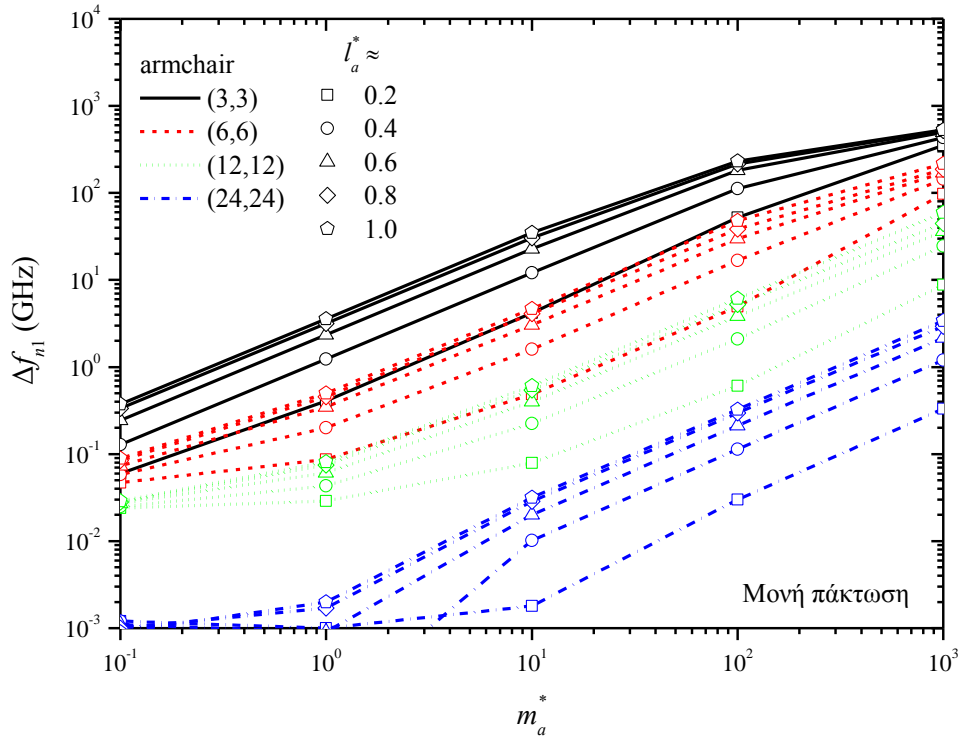
Όπως ήδη αναφέρθηκε, η μάζα αυτή για λόγους ευκολίας στα διαγράμματα που ακολουθούν θα προσδιορίζεται από την αδιάστατη παράμετρο  $m_a^* = m_a / m_c$  όπου  $m_c$  είναι η μάζα ενός ατόμου άνθρακα. Επιπρόσθετα, η θέση της πρόσθετης μάζας  $l_a$  κατά το μήκος κάθε νανოსωλήνα  $L$  θα εκφράζεται βάσει της αδιάστατης παραμέτρου  $l_a^* = l_a / L$  χάριν γενικότητας.

Για να φανερωθεί η επίδραση της μάζας τα αποτελέσματα επικεντρώνονται στον υπολογισμό της μεταβολής  $\Delta f_{ni}$  των πρώτων τριών ιδιοσυχνοτήτων  $i = 1, 2, 3$  οι οποίες δύναται να υπολογισθούν βάσει της παρακάτω σχέσης:

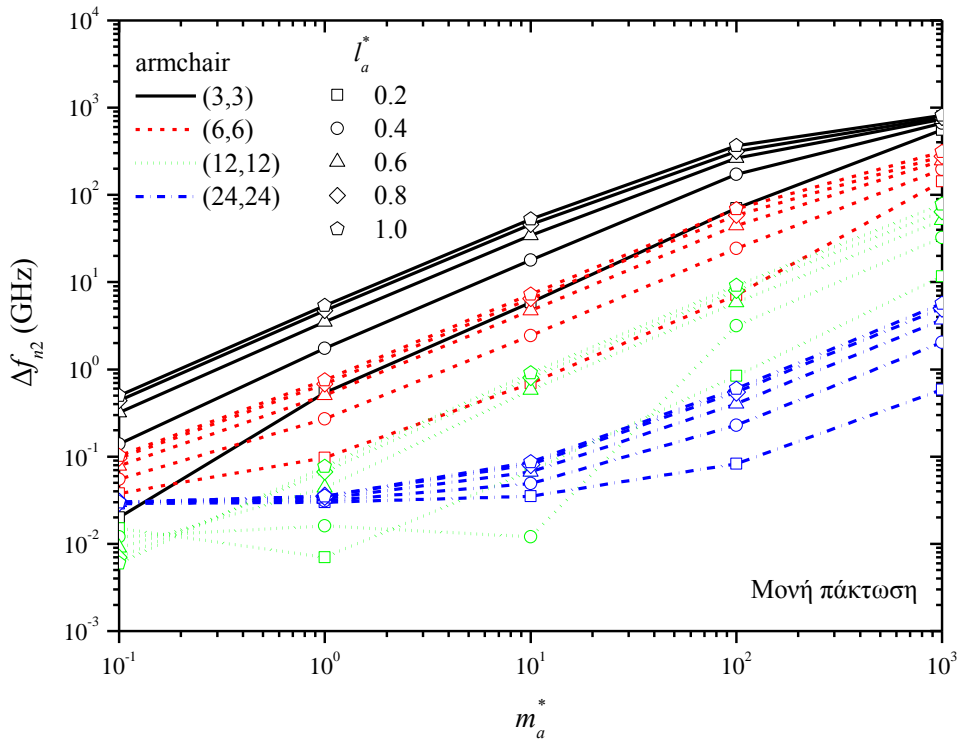
$$\Delta f_{ni} = f_{ni}(m_a^* = 0) - f_{ni}(m_a^* > 0) \quad (5.1)$$

### 5.2.1 Μονόπακτοι armchair νανοςωλήνες

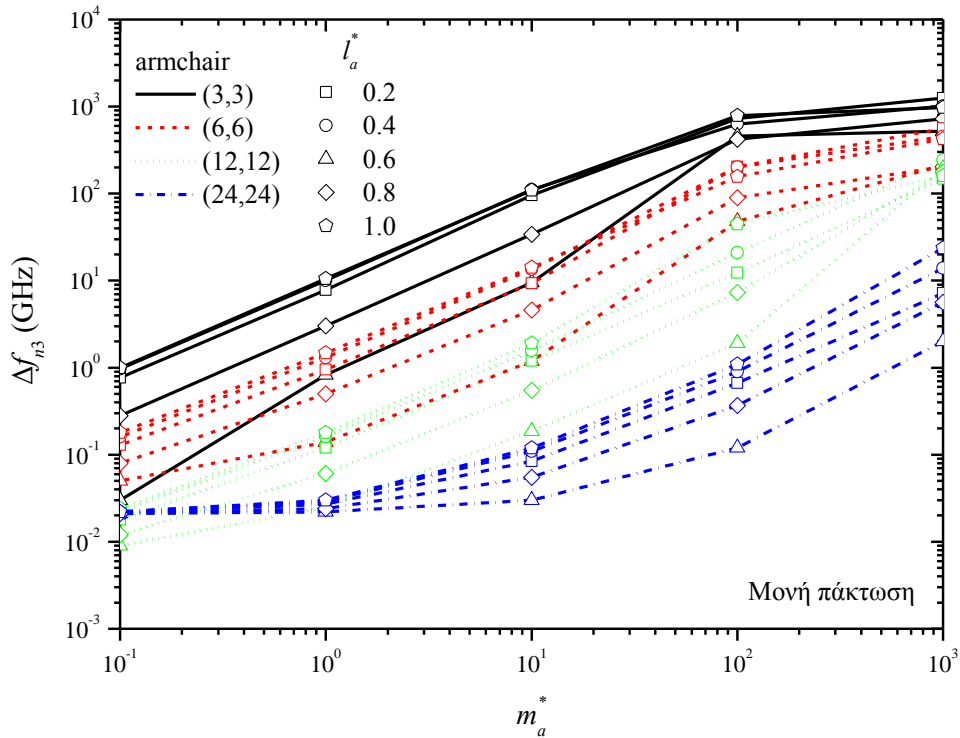
Στα Σχ. 5.1, 5.2 και 5.3 απεικονίζεται η μεταβολή της πρώτης, της δεύτερης και της τρίτης, αντίστοιχα, ιδιοσυχνότητας των armchair νανοςωλήνων άνθρακα για διάφορες θέσεις εναπόθεσης της μάζας  $l_a^*$ . Οι armchair νανοςωλήνες (3,3), (6,6), (12,12) και (24,24) θεωρούνται πακτωμένοι στο αριστερό τους άκρο (Σχήμα 4.4). Όπως μπορεί να παρατηρηθεί, χρησιμοποιείται δεκαδική λογαρίθμηση και στους δύο άξονες των διαγραμμάτων για την καλύτερη θέασης των αποτελεσμάτων και των αντίστοιχων συμπεριφορών. Είναι προφανές ότι καθώς αυξάνει η μάζα εναπόθεσης, αυξάνουν και οι παρατηρούμενες μεταβολές στις ιδιοσυχνότητες. Από τα συγκεκριμένα διαγράμματα εύκολα γίνεται αντιληπτό ότι οι μικρότεροι σε διάμετρο armchair νανοςωλήνες παρουσιάζουν μεγαλύτερες μεταβολές μάζας όταν μια μάζα εναποτίθεται πάνω στην επιφάνεια τους. Αυτό σημαίνει ότι μπορούν να δράσουν καλύτερα ως αισθητήρες μάζας καθώς αποδεικνύονται πιο ευαίσθητοι στο να αλλάζουν ταλαντωτική συμπεριφορά όταν εξωτερικά επικάθεται ένα άλλο μόριο ή ουσία. Γίνεται επίσης εμφανές ότι μεγαλύτερες μεταβολές ιδιοσυχνοτήτων παρουσιάζονται καθώς η εξωτερική μάζα εναποτίθεται μακριά από την πάκτωση του νανοςωλήνα. Όταν η μάζα προστίθεται στο ελεύθερο άκρο οι μεταβολές στις ιδιοσυχνότητες μεγιστοποιούνται. Ένα τελευταίο συμπέρασμα είναι ότι οι μεταβολές που παρατηρούνται στη δεύτερη και ειδικά στη τρίτη ιδιοσυχνότητα είναι μεγαλύτερες σε σχέση με την πρώτη.



**Σχήμα 5.1:** Μεταβολή 1<sup>ης</sup> ιδιοσυχνότητας του συστήματος armchair νανοσωλήνα-μάζας σε σχέση με το μέγεθος της προστιθέμενης μάζας και την επιμήκη θέση της, για μονή πάκτωση.

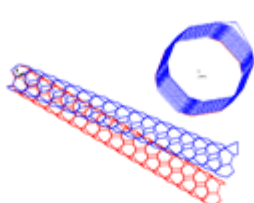
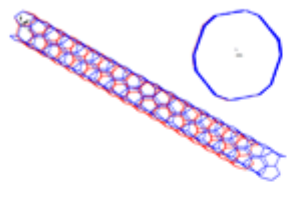
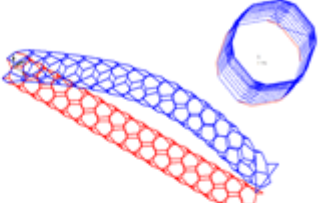
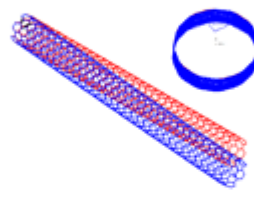
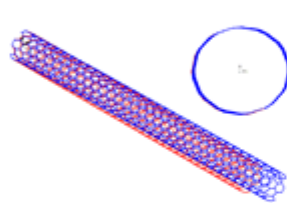
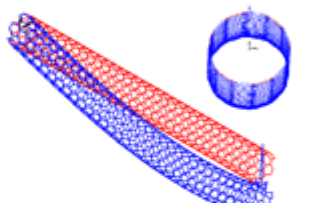
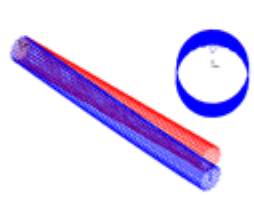
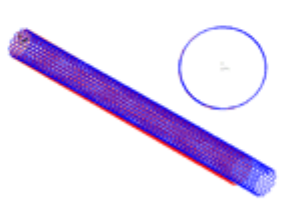
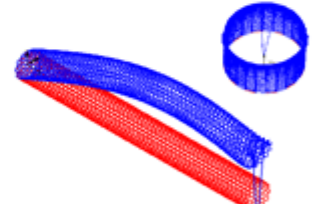
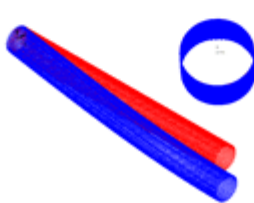
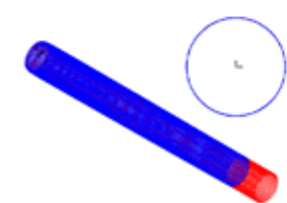
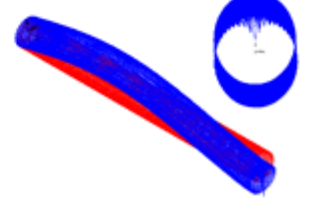


**Σχήμα 5.2:** Μεταβολή 2<sup>ης</sup> ιδιοσυχνότητας του συστήματος armchair νανοσωλήνα-μάζας σε σχέση με το μέγεθος της προστιθέμενης μάζας και την επιμήκη θέση της, για μονή πάκτωση.



**Σχήμα 5.3:** Μεταβολή  $3^{ηs}$  ιδιοσυχνότητας του συστήματος armchair νανωσωλήνα-μάζας σε σχέση με το μέγεθος της προστιθέμενης μάζας και την επιμήκη θέση της, για μονή πάκτωση.

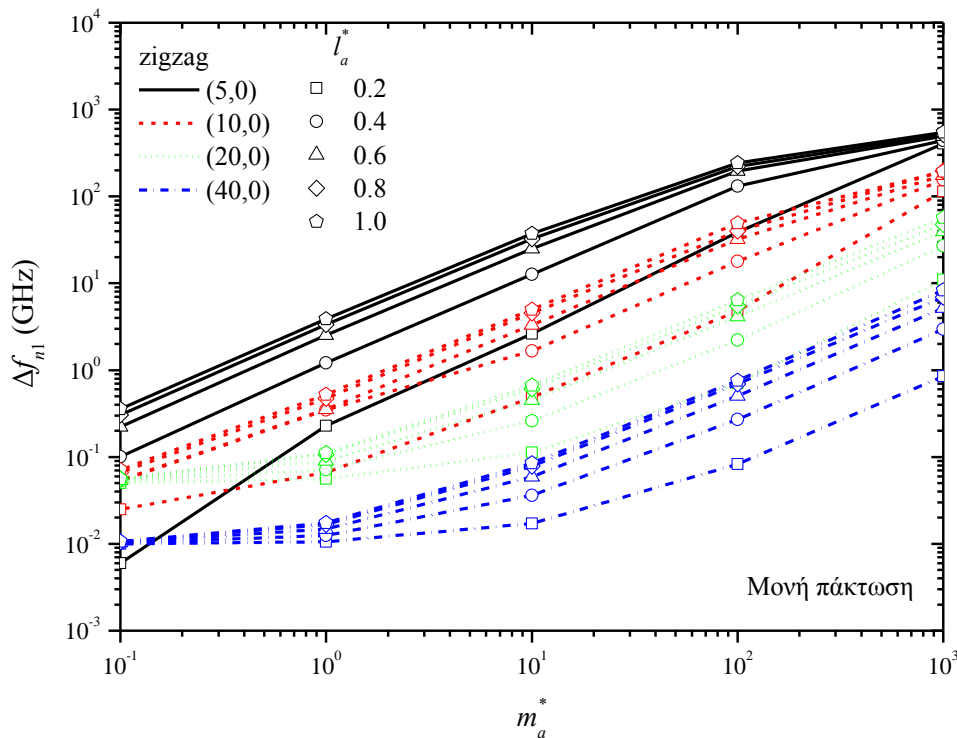
Στο Σχήμα 5.4 παρουσιάζονται οι διάφορες ιδιομορφές που ελήφθησαν για τους μονόπακτους armchair νανωσωλήνες για το μέγιστο εξεταζόμενο μέγεθος προστιθέμενης μάζας και για τη περίπτωση που αυτή βρίσκεται στο ελεύθερο άκρο. Η επίδραση της μάζας γίνεται εμφανής για όλους τους τύπους νανωσωλήνα.

	Ιδιομορφές μονόπακτων armchair νανοσωλήνων άνθρακα		
	1η	2η	3η
(3,3)			
(6,6)			
(12,12)			
(24,24)			

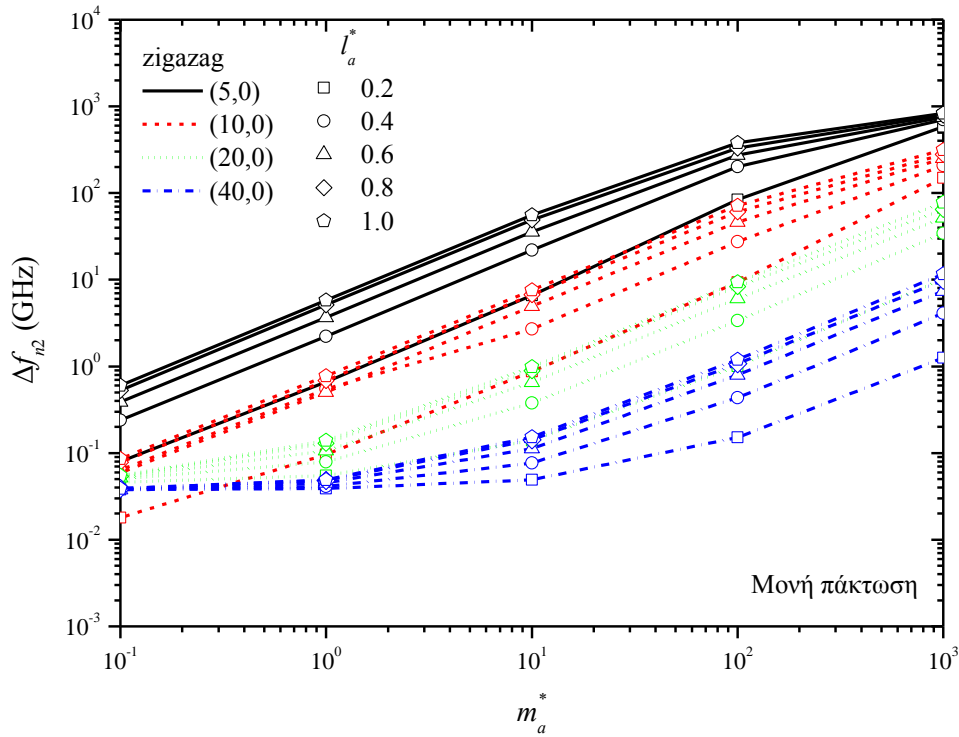
**Σχήμα 5.4:** Ιδιομορφές μονόπακτων armchair νανοσωλήνων άνθρακα με μάζα  $m_a^* = 1000$  στη θέση  $l_a^* = 1$

## 5.2.2 Μονόπακτοι zigzag νανοσωλήνες

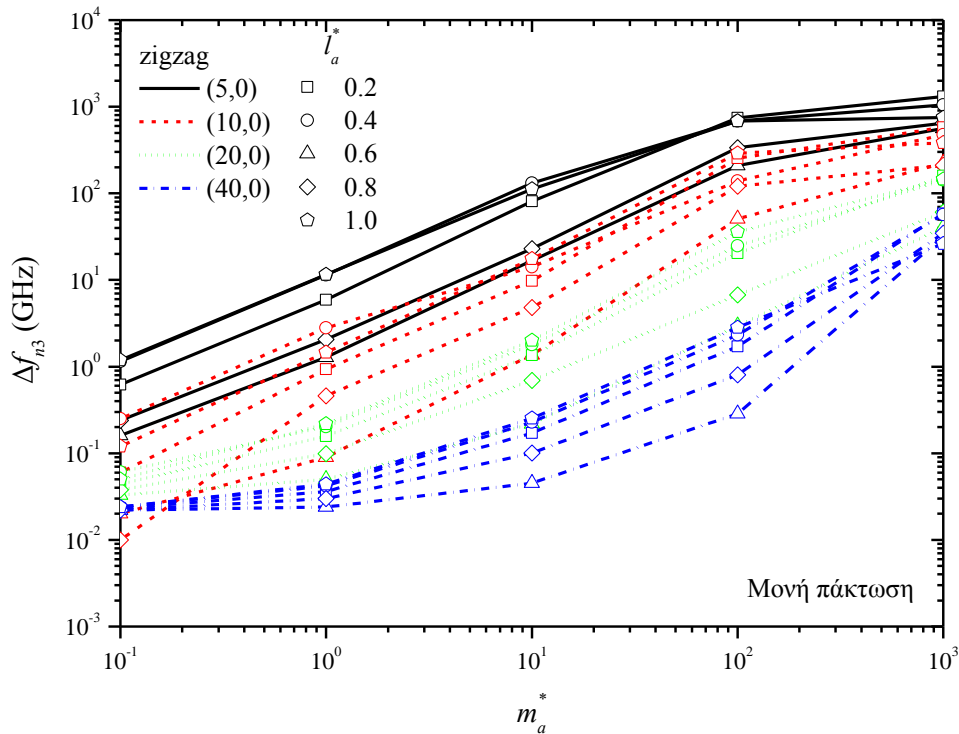
Στα Σχ. 5.5, 5.6 και 5.7 απεικονίζεται η μεταβολή της πρώτης, της δεύτερης και της τρίτης, αντίστοιχα, ιδιοσυχνότητας των zigzag νανοσωλήνων άνθρακα για διάφορες θέσεις εναπόθεσης της μάζας  $l_a^*$ . Οι zigzag νανοσωλήνες (5,0), (10,0), (20,0) και (40,0) θεωρούνται και εδώ πακτωμένοι στο αριστερό τους άκρο. Όσο μεγαλύτερη είναι η μάζα εναπόθεσης τόσο υψηλότερες είναι και οι παρατηρούμενες μεταβολές στις ιδιοσυχνότητες. Και για αυτό τον τύπο νανοσωλήνων η διάμετρος παίζει σημαντικό ρόλο. Όσο μικρότερη είναι αυτή τόσο πιο ευαίσθητοι γίνονται οι νανοσωλήνες στην προσθήκης μάζας. Όταν η μάζα τοποθετηθεί στο ελεύθερο άκρο των νανοσωλήνων οι μεταβολές μεγιστοποιούνται. Μεγαλύτερες μεταβολές υφίστανται οι ιδιομορφές ανωτέρας τάξης. Τέλος, οι armchair και οι zigzag νανοσωλήνες ίδιας περίπου διαμέτρου δείχνουν να είναι περίπου το ίδιο ευαίσθητοι στη προσθήκη μάζας, αν και ο zigzag τύπος δείχνει ελάχιστα πιο επηρεαζόμενος.



**Σχήμα 5.5:** Μεταβολή  $1^{ηs}$  ιδιοσυχνότητας του συστήματος zigzag νανοσωλήνα-μάζας σε σχέση με το μέγεθος της προστιθέμενης μάζας και την επιμήκη θέση της, για μονή πάκτωση.



**Σχήμα 5.6:** Μεταβολή 2<sup>ης</sup> ιδιοσυχνότητας του συστήματος zigzag νανοσωλήνα-μάζας σε σχέση με το μέγεθος της προστιθέμενης μάζας και την επιμήκη θέση της, για μονή πάκτωση.



**Σχήμα 5.7:** Μεταβολή 3<sup>ης</sup> ιδιοσυχνότητας του συστήματος zigzag νανοσωλήνα-μάζας σε σχέση με το μέγεθος της προστιθέμενης μάζας και την επιμήκη θέση της, για μονή πάκτωση.

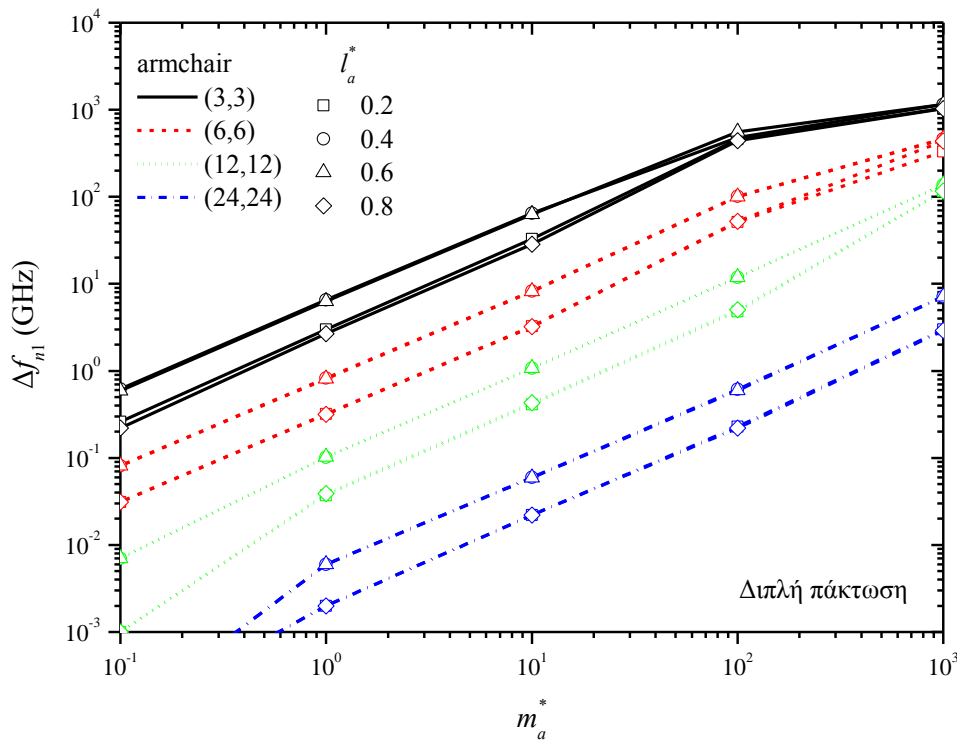
Στο Σχήμα 5.8 παρουσιάζονται οι διάφορες ιδιομορφές που ελήφθησαν για τους μονόπακτους zigzag νανοσωλήνες για το μέγιστο εξεταζόμενο μέγεθος προστιθέμενης μάζας και για τη περίπτωση που αυτή βρίσκεται στο ελεύθερο άκρο.

Ιδιομορφές μονόπακτων zigzag νανοσωλήνων άνθρακα			
	1η	2η	3η
(5,0)			
(10,0)			
(20,0)			
(40,0)			

**Σχήμα 5.8:** Ιδιομορφές μονόπακτων zigzag νανοσωλήνων άνθρακα με μάζα  $m_a^* = 1000$  στη θέση  $l_a^* = 1$

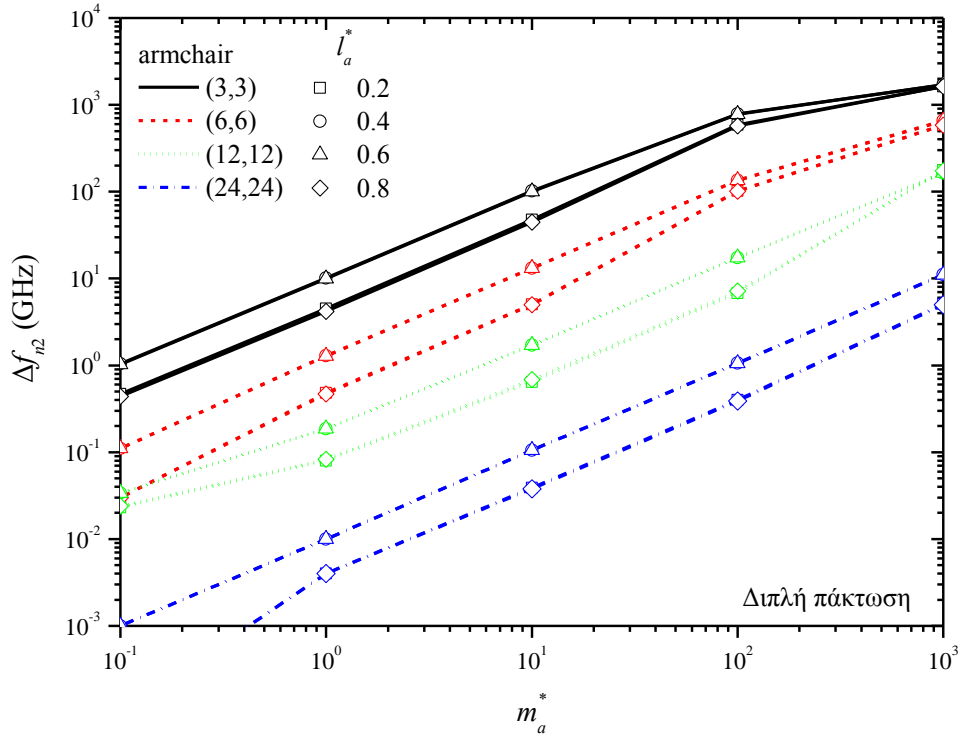
### 5.2.3 Αμφίπακτοι armchair νανοσωλήνες

Στα Σχ. 5.9, 5.10 και 5.11 απεικονίζεται η μεταβολή της πρώτης, της δεύτερης και της τρίτης, αντίστοιχα, ιδιοσυχνότητας των armchair νανοσωλήνων άνθρακα για διάφορες θέσεις εναπόθεσης της μάζας  $l_a^*$ . Οι zigzag νανοσωλήνες θεωρούνται πακτωμένοι στα δύο άκρα τους. Υψηλότερες παρατηρούμενες μεταβολές στις ιδιοσυχνότητες υφίστανται για μεγάλα μεγέθη εναποτιθέμενης μάζας. Όσο μικρότερη είναι η διάμετρος των νανοσωλήνων τόσο πιο μεγάλες μεταβολές λαμβάνονται. Όταν η μάζα τοποθετηθεί μακριά από τις δύο πακτώσεις και προς κεντρικές θέσεις οι μεταβολές μεγιστοποιούνται. Ταυτόσημες αποκρίσεις λαμβάνονται όταν οι μάζες τοποθετούνται σε συμμετρικές θέσεις γύρω από το μέσο του μήκους του νανοσωλήνα. Μεγαλύτερες μεταβολές υφίστανται οι ιδιομορφές ανωτέρας τάξης. Συγκρίνοντας τα συγκεκριμένα αποτελέσματα με τα αντίστοιχα αποτελέσματα μονής πάκτωσης εξάγεται το συμπέρασμα ότι η διπλή πάκτωση οδηγεί σε μεγαλύτερη ευαισθησία νανοσωλήνα στη προσθήκη μάζας.

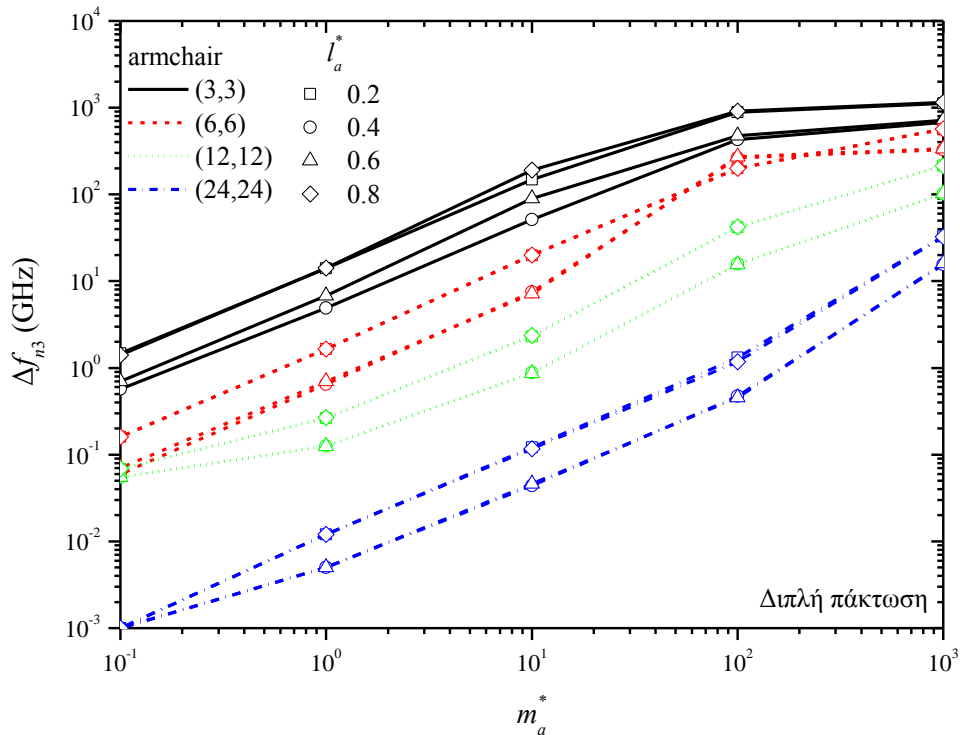


**Σχήμα 5.9:** Μεταβολή  $1^{η}$ ς ιδιοσυχνότητας του συστήματος armchair νανοσωλήνα-μάζας σε σχέση με το μέγεθος της προστιθέμενης μάζας και την επιμήκη θέση της, για διπλή πάκτωση.



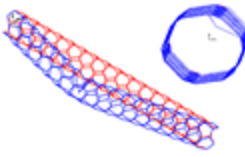
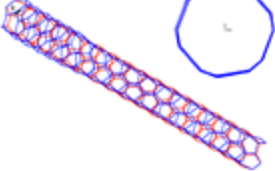
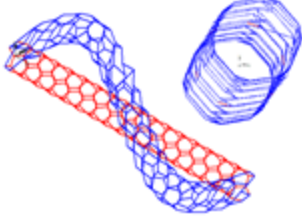
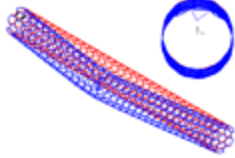
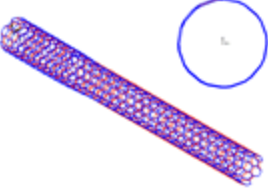
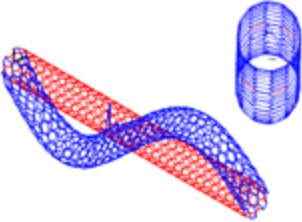
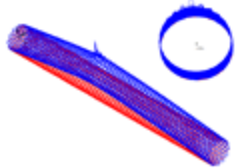
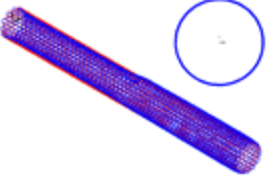
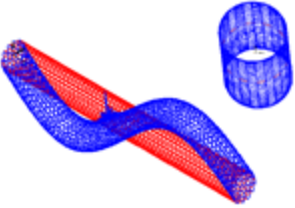

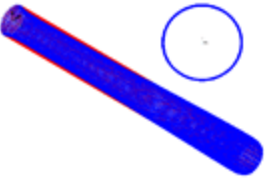



**Σχήμα 5.10:** Μεταβολή  $2^{n_2}$  ιδιοσυχνότητας του συστήματος armchair νανοσωλήνα-μάζας σε σχέση με το μέγεθος της προστιθέμενης μάζας και την επιμήκη θέση της, για διπλή πάκτωση.



**Σχήμα 5.11:** Μεταβολή  $3^{n_3}$  ιδιοσυχνότητας του συστήματος armchair νανοσωλήνα-μάζας σε σχέση με το μέγεθος της προστιθέμενης μάζας και την επιμήκη θέση της, για διπλή πάκτωση.

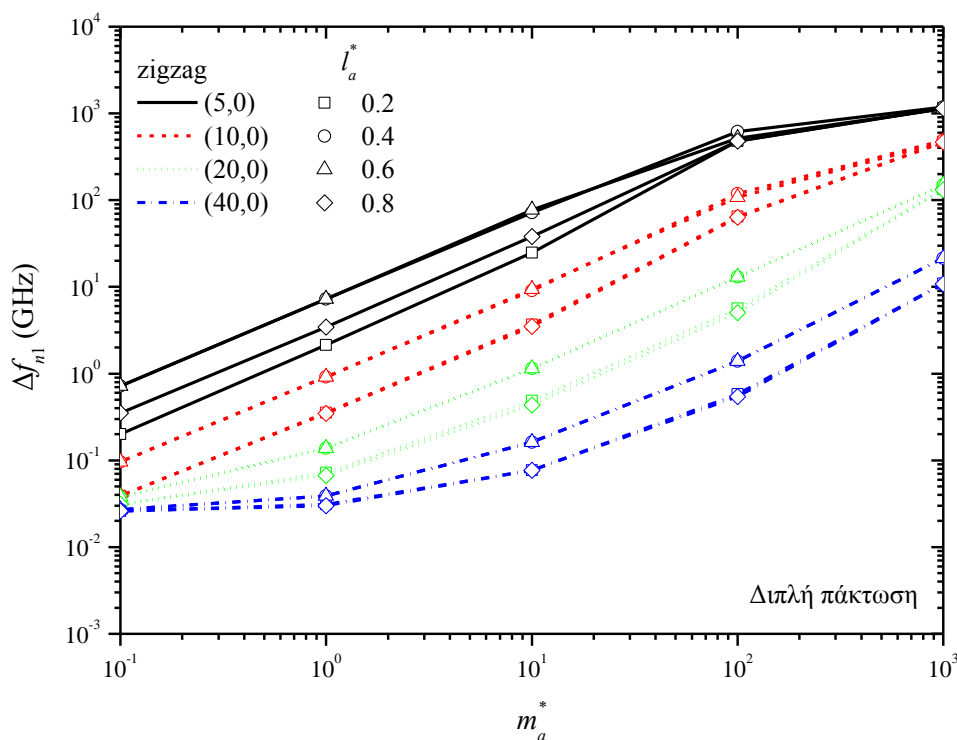
Στο Σχήμα 5.12 παρουσιάζονται οι διάφορες ιδιομορφές που ελήφθησαν για τους αμφίπακτους armchair νανοσωλήνες για το μέγιστο εξεταζόμενο μέγεθος προστιθέμενης μάζας και για τη περίπτωση που αυτή βρίσκεται κοντά στο μέσο του νανοσωλήνα. Η επίδραση της μάζας γίνεται εμφανής για όλους τους τύπους νανοσωλήνα.

		Ιδιομορφές αμφίπακτων armchair νανοσωλήνων άνθρακα		
		1η	2η	3η
(3,3)				
(6,6)				
(12,12)				
(24,24)				

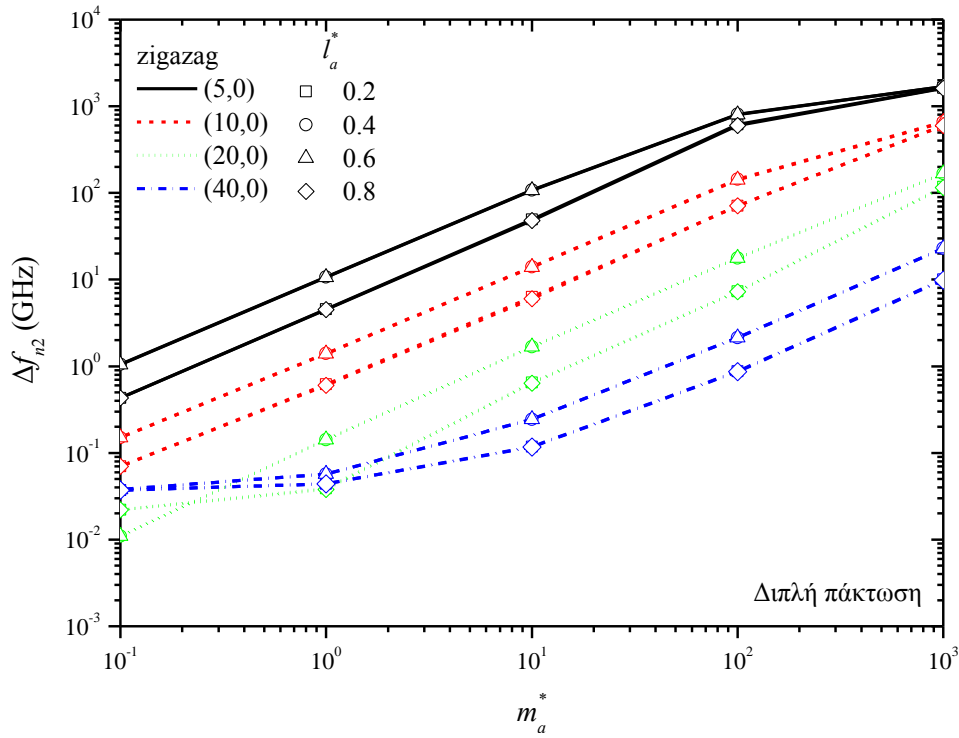
Σχήμα 5.12: Ιδιομορφές αμφίπακτων armchair νανοσωλήνων άνθρακα με μάζα  $m_a^* = 1000$  στη θέση  $l_a^* = 0.4$

## 5.2.4 Αμφίπακτοι zigzag νανοσωλήνες

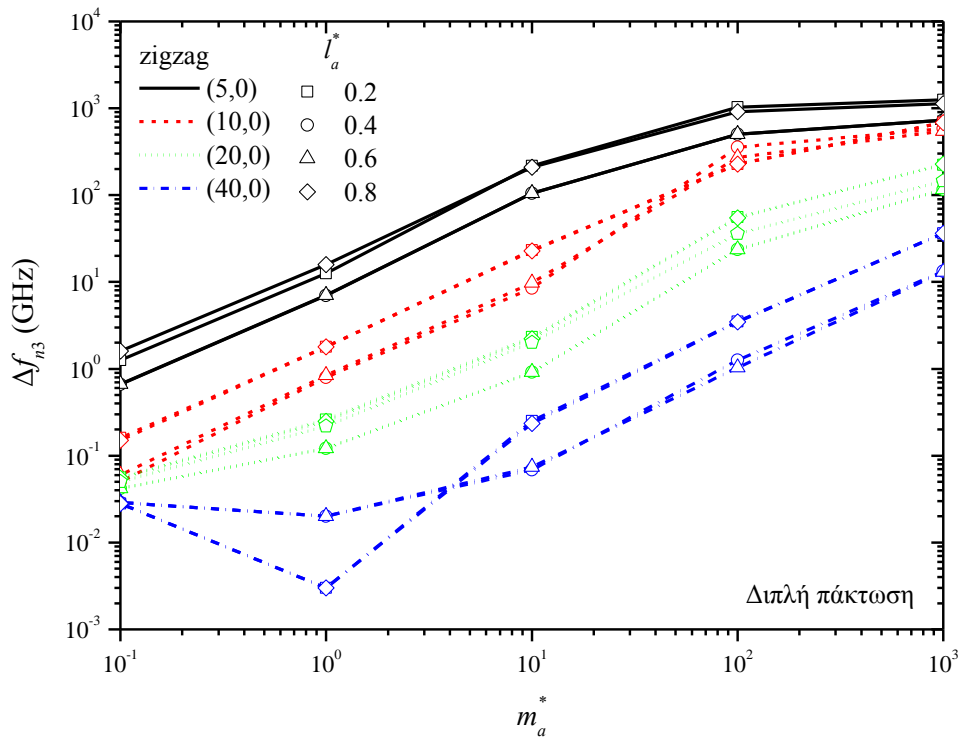
Στα Σχ. 5.13, 5.14 και 5.15 απεικονίζεται η μεταβολή της πρώτης, της δεύτερης και της τρίτης, αντίστοιχα, ιδιοσυχνότητας των αμφίπακτων zigzag νανοσωλήνων άνθρακα για διάφορες θέσεις εναπόθεσης της μάζας  $l_a^*$ . Μεγάλη μέγεθος μάζας, μεγάλη διάμετρος νανοσωλήνα, εναπόθεση της εξωτερικής μάζας στο κέντρο του νανοσωλήνα οδηγούν σε μεγιστοποίηση των μεταβολών. Μεγαλύτερες μεταβολές υφίστανται οι πιο υψηλές μεταβολές. Η διπλή πάκτωση φαίνεται να πλεονεκτεί της μονής. Επίσης ο zigzag τύπος και για τη περίπτωση διπλής πάκτωσης φαίνεται έστω και ελάχιστα να οδηγεί σε μεγαλύτερες μεταβολές ιδιοσυχνοτήτων.



**Σχήμα 5.13:** Μεταβολή  $1^{η}$  ιδιοσυχνότητας του συστήματος zigzag νανοσωλήνα-μάζας σε σχέση με το μέγεθος της προστιθέμενης μάζας και την επιμήκη θέση της, για διπλή πάκτωση.



**Σχήμα 5.14:** Μεταβολή  $2^{\text{ης}}$  ιδιοσυχνότητας του συστήματος zigzag νανοσωλήνα-μάζας σε σχέση με το μέγεθος της προστιθέμενης μάζας και την επιμήκη θέση της, για διπλή πάκτωση.



**Σχήμα 5.15:** Μεταβολή  $3^{\text{ης}}$  ιδιοσυχνότητας του συστήματος zigzag νανοσωλήνα-μάζας σε σχέση με το μέγεθος της προστιθέμενης μάζας και την επιμήκη θέση της, για διπλή πάκτωση.

Στο Σχήμα 5.16 παρουσιάζονται οι διάφορες ιδιομορφές που ελήφθησαν για τους αμφίπακτους zigzag νανοσωλήνες για το μέγιστο εξεταζόμενο μέγεθος προστιθέμενης μάζας και για τη περίπτωση που αυτή βρίσκεται κοντά στο μέσο του νανοσωλήνα.

	Ιδιομορφές αμφίπακτων zigzag νανοσωλήνων άνθρακα		
	1η	2η	3η
(5,0)			
(10,0)			
(20,0)			
(40,0)			

**Σχήμα 5.16:** Ιδιομορφές αμφίπακτων zigzag νανοσωλήνων άνθρακα με μάζα  $m_a^* = 1000$  στη θέση  $l_a^* = 0.4$



## 6. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στη παρούσα πτυχιακή προτάθηκε και διερευνήθηκε αριθμητικά η χρήση νανοσωλήνων άνθρακα ως νανοαισθητήρες μάζας. Για το σκοπό αυτό υιοθετήθηκε η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων για τη μοντελοποίηση ενός συστήματος νανοσωλήνα άνθρακα - επικαθήμενης μάζας σε ατομικό επίπεδο. Για την προσομοίωση των διατομικών αλληλεπιδράσεων υιοθετήθηκαν αντίστοιχες δυναμικές εξισώσεις ενέργειας που προτείνονται στη μοριακή χημεία. Οι εξισώσεις αυτές οδήγησαν στην υιοθέτηση πεπερασμένων στοιχείων τύπου ελατηρίου κατάλληλων συντελεστών δυσκαμψίας. Για την προσέγγιση των αδρανειακών φαινομένων λήφθηκε υπόψη η ατομική μάζα του άνθρακα στις αντίστοιχες ατομικές θέσεις. Η εναποτιθέμενη μάζα θεωρήθηκε ότι εντοπίζεται σε διάφορες ατομικές θέσεις ενώ το μέγεθός της ορίστηκε παραμετρικά σε σχέση με τη μάζα του ατόμου του άνθρακα. Εξετάσθηκαν τόσο armchair όσο και zigzag τύποι νανοσωλήνων και διαφορετικών διαμέτρων για να φανεί η επίδραση της γεωμετρίας του νανοαισθητήρα στην ευαισθησία του να εντοπίζει μάζα. Επίσης η επιρροή του τρόπου στήριξης του προτεινόμενου αισθητήρα μάζας εξετάστηκε με τη χρήση μονόπακτων και αμφίπακτων συνοριακών συνθηκών. Στο τεύχος παρατέθηκαν πλήθος αποτελεσμάτων παραμετρικά δοσμένων όσον αφορά τις μεταβολές των τριών πρώτων ιδιοσυχνοτήτων καθώς και των αντίστοιχων ιδιομορφών για να δοθούν οι αισθητήριοι «χάρτες» και άρα οι σχεδιαστικές κατευθύνσεις για την μελλοντική ανάπτυξη ενός τέτοιου αισθητήρα. Από τα αποτελέσματα που παρουσιάσθηκαν εξάχθηκαν μια σειρά από σημαντικά συμπεράσματα:

- Ο νανοσωλήνας άνθρακας δύναται να ανιχνεύσει μια μάζα που εναποτίθεται πάνω σε αυτό καθώς με την προσθήκη αυτή μεταβάλλεται η δυναμική του συμπεριφορά.
- Η αισθητήρια ικανότητα του νανοσωλήνα αυξάνει λογαριθμικά καθώς και η μάζα εναπόθεσης αυξάνει σε μέγεθος με τον ίδιο τρόπο.
- Από τη μεταβολή των τριών πρώτων ιδιοσυχνοτήτων μπορεί να καθορισθεί η μάζα εναπόθεσης.
- Μικρότεροι διάμετροι νανοσωλήνων άνθρακα είναι πιο ευαίσθητα στη ανίχνευση μιας μάζας
- Η αμφίπακτη στήριξη του νανοσωλήνα άνθρακα παρέχει ελάχιστα μεγαλύτερες μεταβολές ιδιοσυχνοτήτων.
- Η μεταβολή τόσο της  $1^{η}$  όσο και της  $2^{η}$  αλλά και  $3^{η}$  ιδιοσυχνότητας μπορεί να αποτελέσει θεμελιώδη αισθητήρια ιδιότητα.
- Οι ανώτερες ιδιοσυχνότητες δείχνουν να είναι πιο ευαίσθητες στη προσθήκη μάζας.

- Ο zig zag τύπος έστω και ποιο ελάχιστα φαίνετε ποιο ευαίσθητος στην προσθήκη μάζας.
- Η ικανότητα ενός μονόπακτου ναοσωλήνα να ανιχνεύει εναποτιθέμενες μάζες αυξάνει όταν η θέση της μάζας βρίσκεται στο ελεύθερο άκρο του.
- Η ικανότητα ενός αμφίπακτου ναοσωλήνα να ανιχνεύει εναποτιθέμενες μάζες αυξάνει όταν η θέση της μάζας βρίσκεται στο κέντρο των στηρίξεων.



## BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

1. Kroto H.W., Heath J.R., O'Brien S.C., Curl R.F. and Smalley R.E., C60: *Buckminster fullerene*, Nature, Vol. 318, pp. 162-163, 1985.
2. Iijima S., *Helical microtubules of graphitic carbon*, Nature, Vol. 354(6348), pp. 56-58, 1991.
3. Feynman, R., *Theory of Fundamental Processes*, Vol. I, 1st Edition, Addison Wesley Publishing Company, New York, 1961.
4. Moore G.E., *Cramming more components onto integrated circuits*, Electronics, Vol. 38(8), pp.114 -117,1965.
5. Taniguchi N., *On the Basic Concept of "Nano-Technology*, Proceeding of the Production Engineering International Conference, Part II, Japan Society of Precision Engineering, Tokyo, 1974.
6. Geim A.K., Novoselov K.S., *The Rise of Graphene*, Nature Materials, Vol. 6, pp. 183-191, 2007.
7. Krätschmer W., Fostiropoulos K. and D. R. Huffman, *The infrared and ultraviolet absorption spectra of laboratory-produced carbon dust: evidence for the presence of the C molecule*, Chemical Physics Letters, Vol. 170(2-3), pp. 167-170, 1990.
8. Endo M., Oberlin A. and Koyama T., *High resolution electron microscopy of graphitizable carbon fiber prepared by benzene decomposition*. Jpn J Appl Phys, Vol. 16 (9), pp. 1519-1523, 1977.
9. Iijima S.and Ichlhashi T., *Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter*, Nature, Vol. 363, pp.603–605, 1993.
10. Bethune D.S., Kiang C.H., Devries M.S., Gorman G., Savoy R., Vazquez J. et al., *Cobaltcatalyzed growth of carbon nanotubes with single-atomic-layer walls*, Nature, Vol. 363, pp. 605–607, 1993.
11. Wong H.-S.P., Akinwande D., *Carbon nanotube and graphene Device physics*, Cambridge University Press, 2010.

12. Giannopoulos G.I., *Fullerenes as mass sensors: A numerical investigation*, Computational Materials Science, Vol 56,pp. 36-42, 2013.

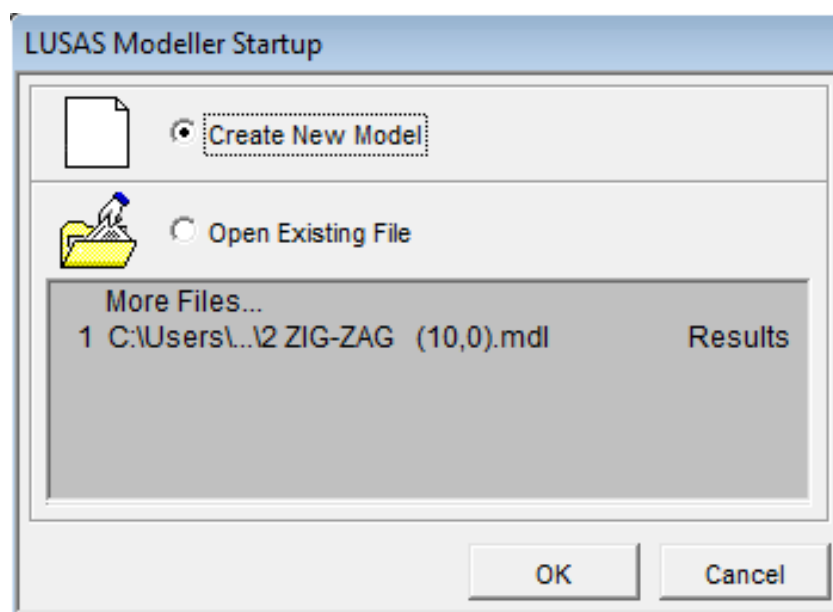
## ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

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

Με το LUSAS όπως και με κάθε άλλο πρόγραμμα ανάλυσης, ο χρήστης μηχανικός είναι ο μόνος υπεύθυνος για τυχόν λάθη που θα παρουσιάσει το πρόγραμμα στα αποτελέσματα, αφού πρέπει να γνωρίζει με βεβαιότητα τι εισάγει σε αυτό. Για τον λόγο αυτό δεν πρέπει να παρασύρεται από τα όμορφα γραφικά και ευκολία χρήσης του προγράμματος.

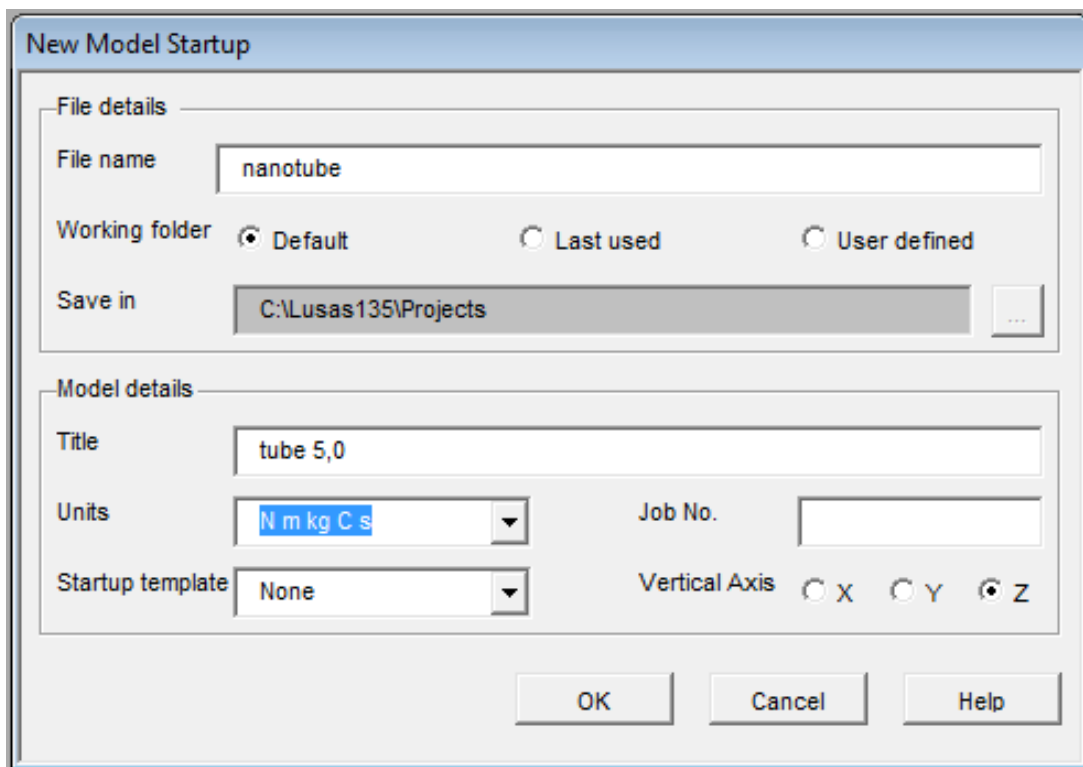
Ακολουθεί ένας οδηγός όπου παρατίθεται βήμα-βήμα η κατασκευή του zigzag μονότοιχου νανοσωλήνα (10,0) με τη βοήθεια του εμπορικού πακέτου πεπερασμένων στοιχείων LUSAS. Μέσω αυτού δίνεται η δυνατότητα στον αναγνώστη να κατανοήσει σχετικώς τη λειτουργία του προγράμματος, καθώς επίσης και να αποτελέσει έναυσμα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

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

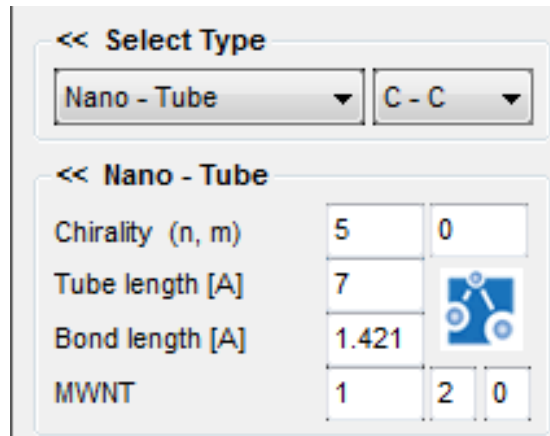


Για ένα νέο μοντέλο θα εμφανιστεί το New Model Startup παράθυρο διαλόγου στο οποίο καλείτε ο χρήστης να δηλώσει κάποια βασικά στοιχεία ως εξής:

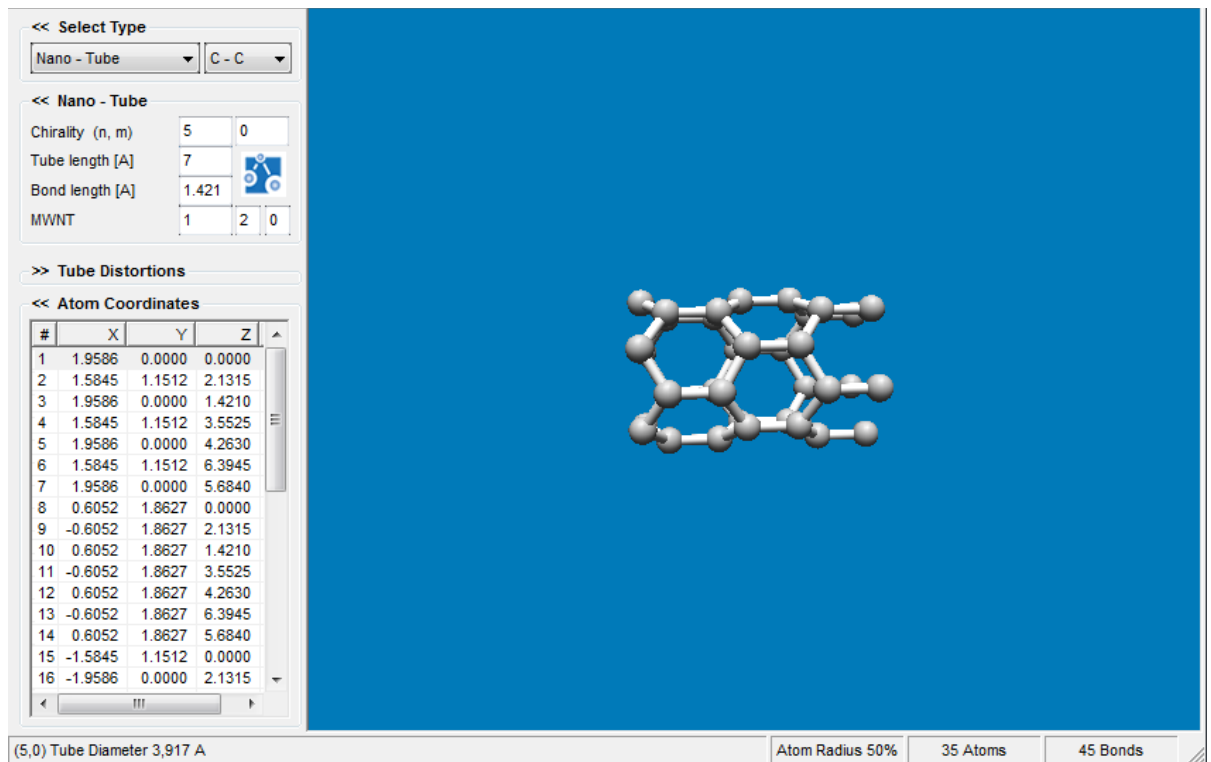
- Ως όνομα πληκτρολογούμε “nanotube”.
- Χρησιμοποιούμε Default working folder.
- Ως τίτλο πληκτρολογούμε “tube 5,0”.
- Ως σύστημα μονάδων ορίζουμε N m kg C s.
- Επιλέγουμε ως startup template το none από τη λίστα επιλογών.
- Κάνουμε κλικ στο OK.



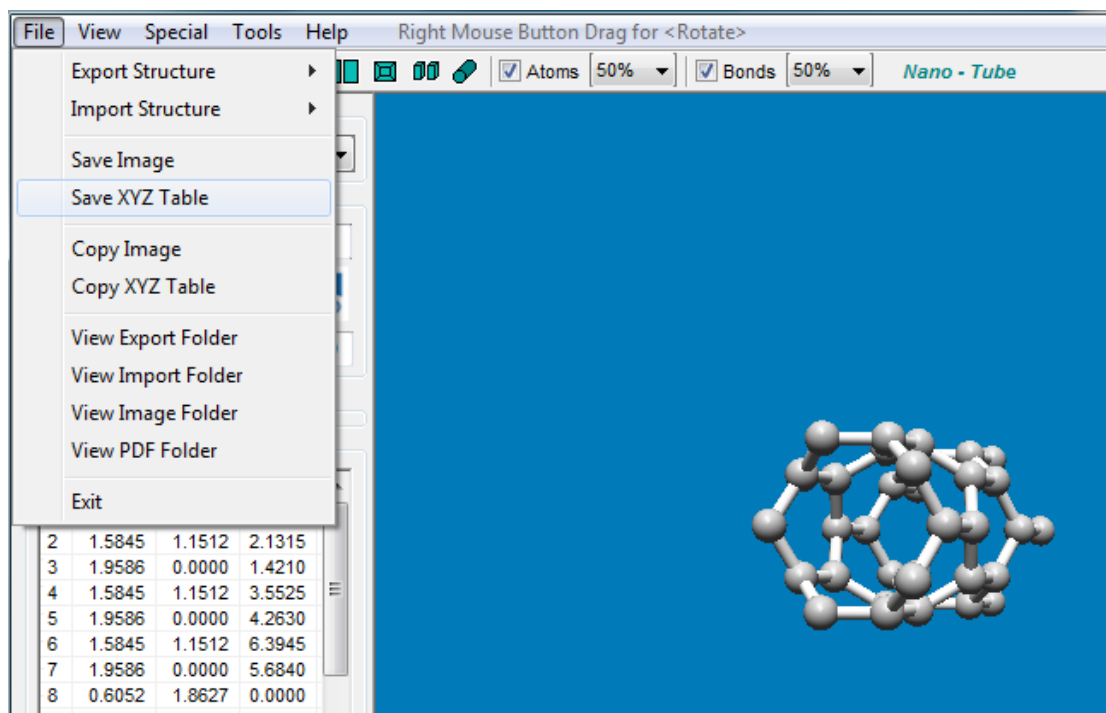
Μόλις πατηθεί η επιλογή OK θα βρεθούμε στο περιβάλλον του προγράμματος. Τώρα θα ξεκινήσουμε το στάδιο όπου θα αρχίσει το χτίσιμο του νανοσωλήνα (5,0). Βασικό και αναπόσπαστο κομμάτι της επίτευξης αυτού είναι να μας είναι γνωστή η γεωμετρία του νανοσωλήνα, η θέση δηλαδή των ατόμων (τα οποία στο πρόγραμμα αναπαρίστανται με κόμβους) στο χώρο των τριών διαστάσεων. Για να επιτευχθεί αυτό χρησιμοποιούμε το πρόγραμμα Nanotube Modeler. Με αυτό το πρόγραμμα μπορούμε να βρούμε τις συντεταγμένες (x,y,z) του κάθε ατόμου άνθρακα (κόμβους), για οποιονδήποτε νανοσωλήνα άνθρακα. Ανοίγοντας το πρόγραμμα αυτό εμφανίζεται ένα παράθυρο διαλόγου στο οποίο καλείτε ο χρήστης να δηλώσει κάποια βασικά στοιχεία ως εξής:



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



Έπειτα επιλέγοντας από το μενού File Save XYZ Table θα αποθηκευτούν σαν σημειωματάριο τα 35 άτομα άνθρακα που έχουν δημιουργηθεί μαζί με τις συντεταγμένες του καθενός ατόμου όπως βλέπουμε και παρακάτω.



Nanotube\_CC - Σημειωματάριο


Αρχείο Επεξεργασία Μορφή Προβολή Βοήθεια

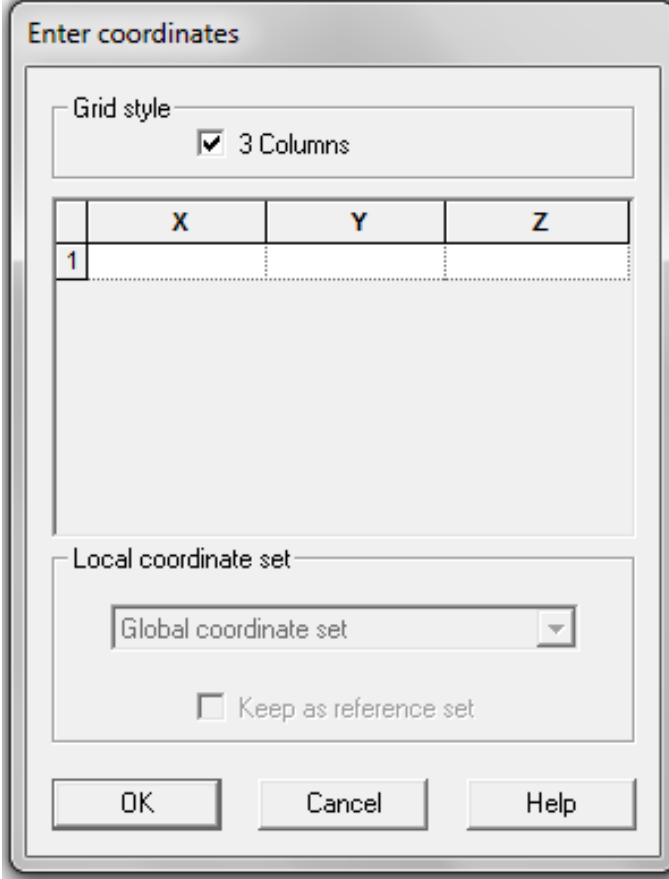
```

35
C      1.9586      0.0000      0.0000
C      1.5845      1.1512      2.1315
C      1.9586      0.0000      1.4210
C      1.5845      1.1512      3.5525
C      1.9586      0.0000      4.2630
C      1.5845      1.1512      6.3945
C      1.9586      0.0000      5.6840
C      0.6052      1.8627      0.0000
C     -0.6052      1.8627      2.1315
C      0.6052      1.8627      1.4210
C     -0.6052      1.8627      3.5525
C      0.6052      1.8627      4.2630
C     -0.6052      1.8627      6.3945
C      0.6052      1.8627      5.6840
C     -1.5845      1.1512      0.0000
C     -1.9586      0.0000      2.1315
C     -1.5845      1.1512      1.4210
C     -1.9586      0.0000      3.5525
C     -1.5845      1.1512      4.2630
C     -1.9586      0.0000      6.3945
C     -1.5845      1.1512      5.6840
C     -1.5845     -1.1512      0.0000
C     -0.6052     -1.8627      2.1315
C     -1.5845     -1.1512      1.4210
C     -0.6052     -1.8627      3.5525

```

Καθώς έχουμε αυτά τα σημεία είμαστε σε θέση να αρχίσουμε τη μοντελοποίηση.

Επιστρέφοντας στο πρόγραμμα LUSAS στο πάνω μέρος της μπάρας επιλογών επιλέγουμε Geometry- Surface- Coordinates ή πατώντας το εικονίδιο  εμφανίζεται το παράθυρο διαλόγου Enter your coordinates στο οποίο περνάμε τις συντεταγμένες κάθε κόμβου. Το πλήκτρο Tab χρησιμοποιείτε για να δημιουργήσει νέες γραμμές:



	X	Y	Z
1			

Ακολουθώντας πληκτρολογούμε τις συντεταγμένες για κάθε κόμβο, οι οποίες πατώντας την επιλογή OK θα έχουν ως αποτέλεσμα να εξαφανιστεί το παράθυρο διαλόγου και θα εμφανισθεί στο πρόγραμμα η απεικόνιση των σημείων στο χώρο.

Enter coordinates

Grid style  
 3 Columns


	X	Y	Z
1	1.9586	0.0000	0.0000
2	1.5845	1.1512	2.1315
3	1.9586	0.0000	1.4210
4	1.5845	1.1512	3.5525
5	1.9586	0.0000	4.2630
6	0.6052	1.8627	0.0000
7	-0.6052	1.8627	2.1315

Local coordinate set  
 Global coordinate set  
 Keep as reference set

OK Cancel Help

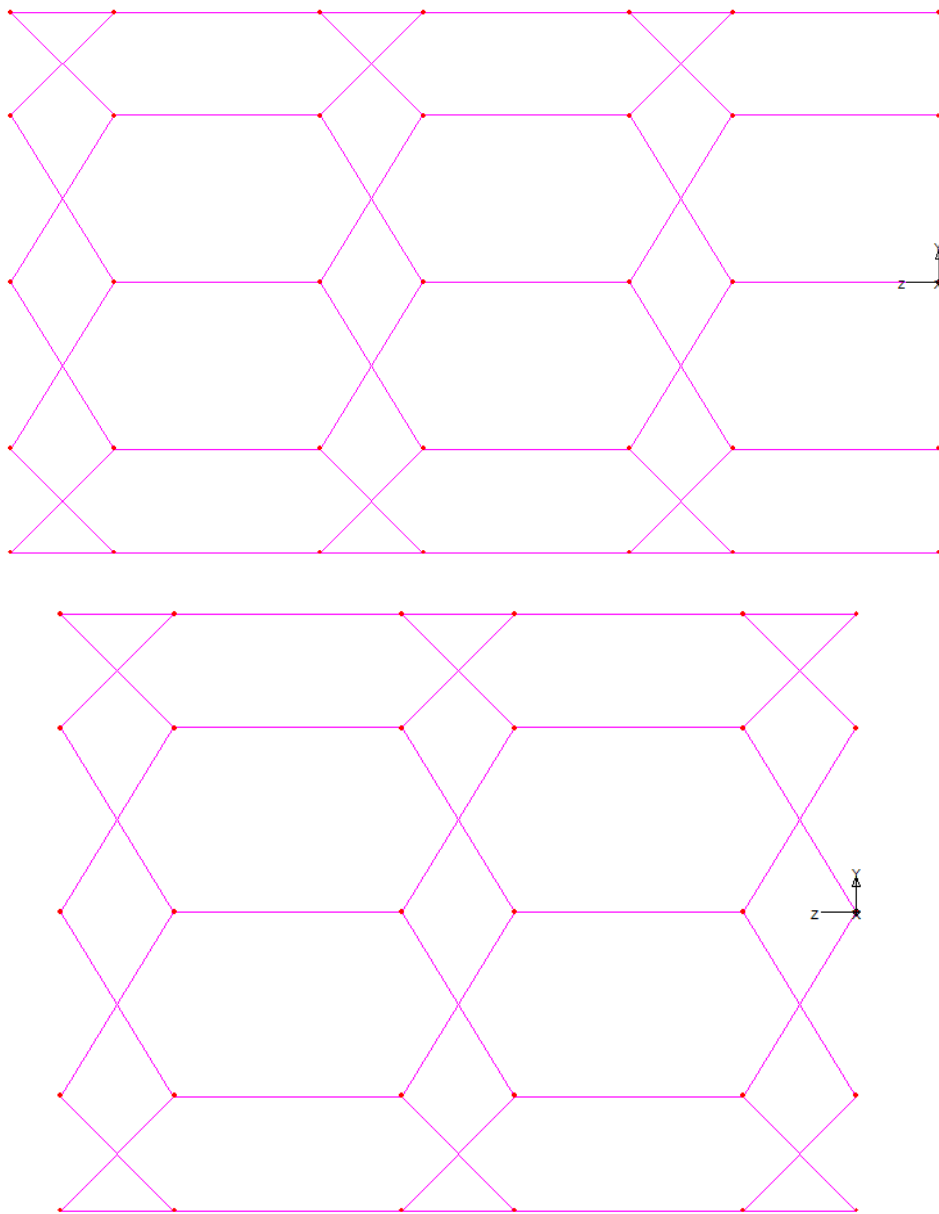
Αυτό συνεχίζεται μέχρι να περαστούν τα σημεία τα οποία θα σχηματίσουν τους παρακάτω δακτυλίους.



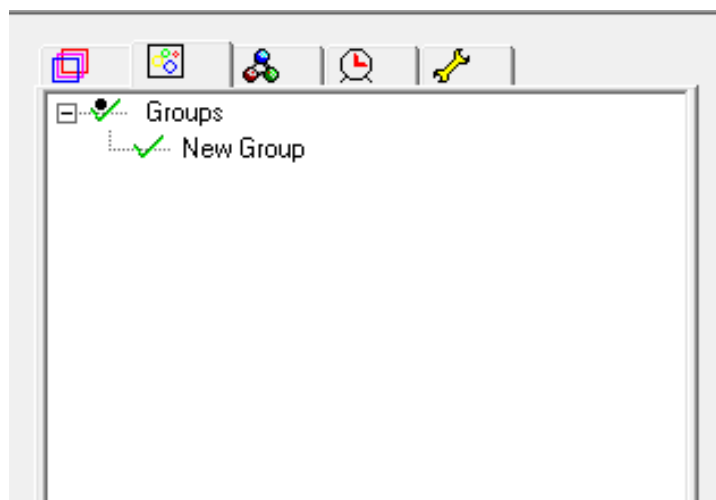
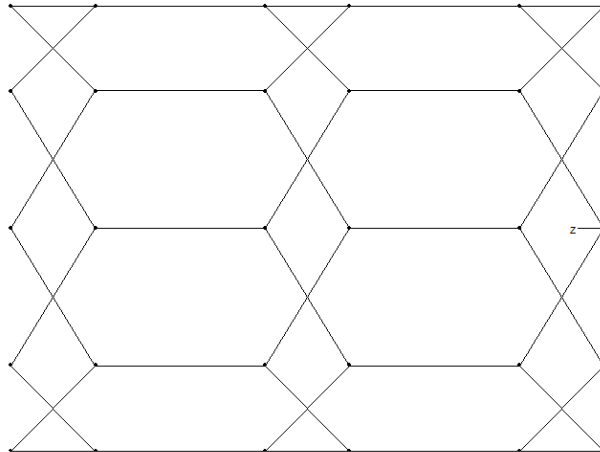
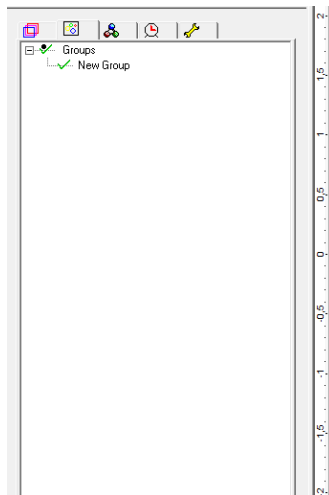
Στη συνέχεια επιλέγοντας προσεχτικά τους κόμβους ανά δύο και με τη χρήση του εικονιδίου , μπορούμε να σχηματίσουμε γραμμές από τους προεπιλεγμένους κόμβους.



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



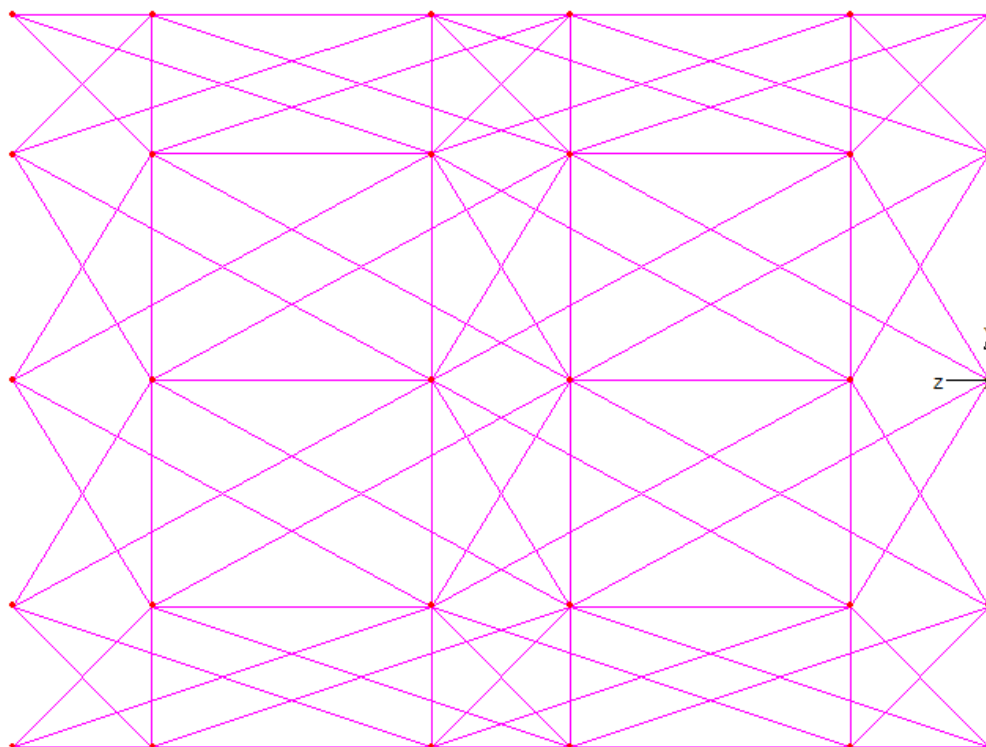
Επόμενο βήμα είναι να σχεδιάσουμε στο παραπάνω σχήμα ,τις C-C-C γραμμές. Για να μπορούμε όμως αργότερα να ξεχωρίζουμε τις C-C από τις C-C-C κάνουμε το εξής βήμα: Επιλέγουμε όλες τις γραμμές και μετά Geometry Group New Group και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα:



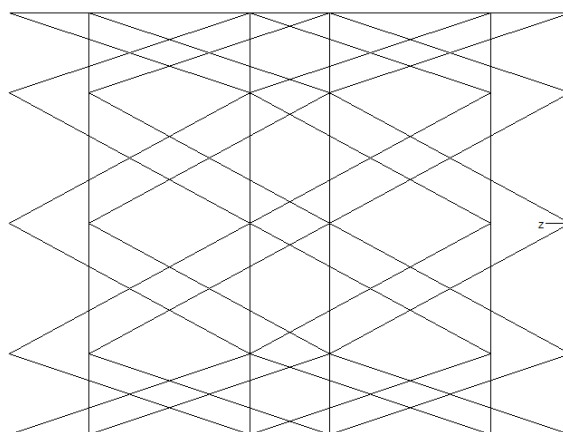
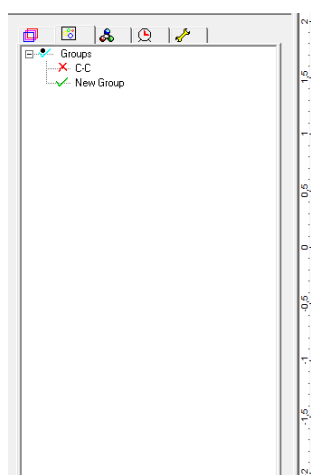
Μετονομάζουμε το New Group κάνοντας διπλό κλικ πάνω του σε C-C.

Τώρα είμαστε έτοιμοι να φτιάξουμε τις C-C-C γραμμές επιλέγοντας και ενώνοντας δύο κόμβους με γραμμή σχηματίζοντας με αυτό τον τρόπο ένα τρίγωνο. Το κάθε εξάγωνο του νανοσωλήνα θα έχει 6 γραμμές C-C και 6 γραμμές C-C-C. Αυτές οι γραμμές όπως θα δούμε και παρακάτω λειτουργούν ως ελατήρια.

Κάνοντας την παραπάνω διαδικασία θα καταλήξουμε στην παρακάτω μορφή.



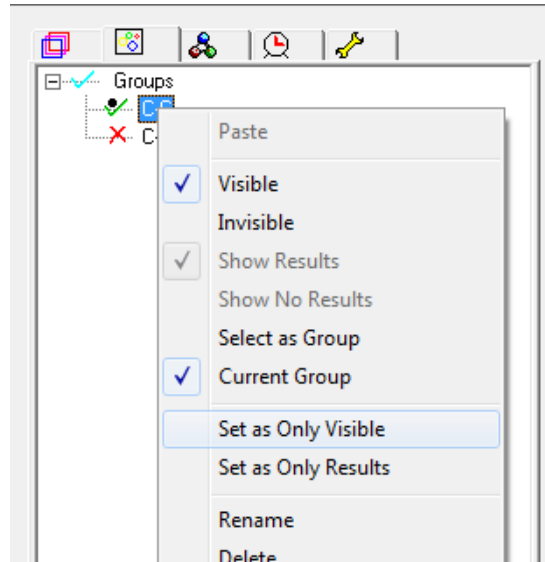
Έπειτα για να μπορούμε να ξεχωρίζουμε τις C-C-C από τις C-C γραμμές κάνουμε δεξί κλικ στην καρτέλα του C-C και μετά Invisible. Με αυτό τον τρόπο αποκρύπτονται οι C-C γραμμές και μένουν οι C-C-C, επιλέγοντας τες κάνουμε Geometry Group New Group και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα



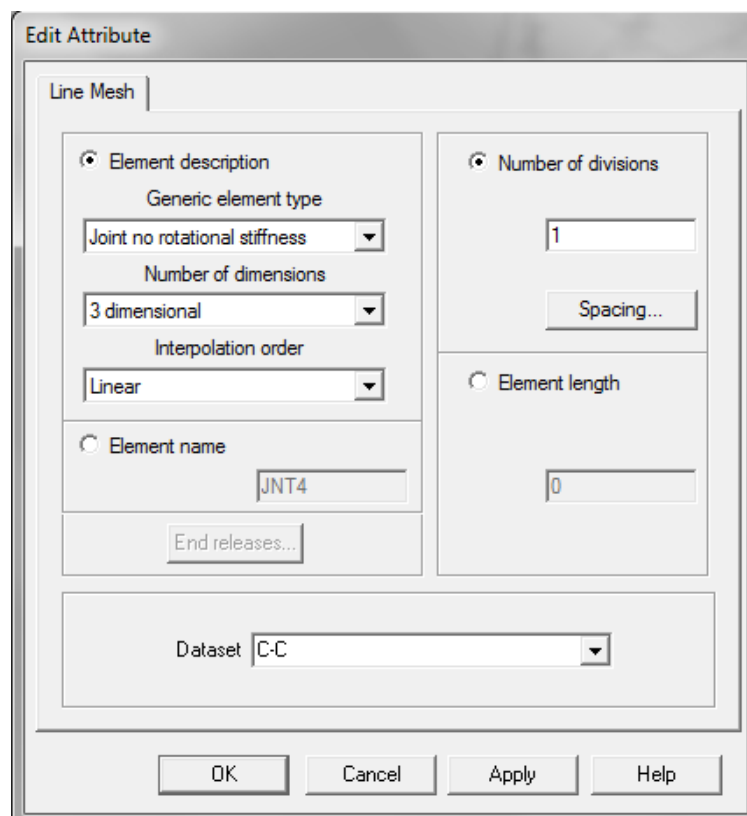
Μετονομάζουμε το New Group σε C-C-C κάνοντας διπλό κλικ πάνω του. Κάνοντας Group τα δυο είδη γραμμών μπορούμε πολύ εύκολα να περάσουμε ιδιότητες σε ένα από τα δυο είδη γραμμών (C-C ή C-C-C).

## ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ ΣΤΙΣ C-C ΓΡΑΜΜΕΣ

Δεξί κλικ στο C-C και επιλέγουμε Set as Only Visible, με τον τρόπο αυτό εργαζόμαστε μόνο στις C-C γραμμές.

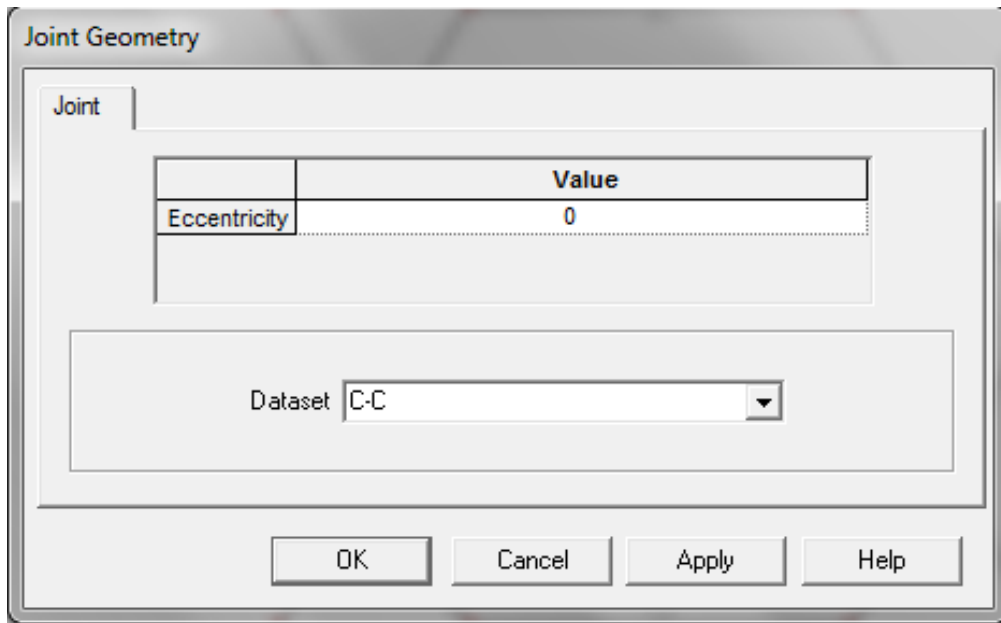


Επιλέγουμε από την γραμμή εργαλείων Attributes Mesh Line και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε ok.



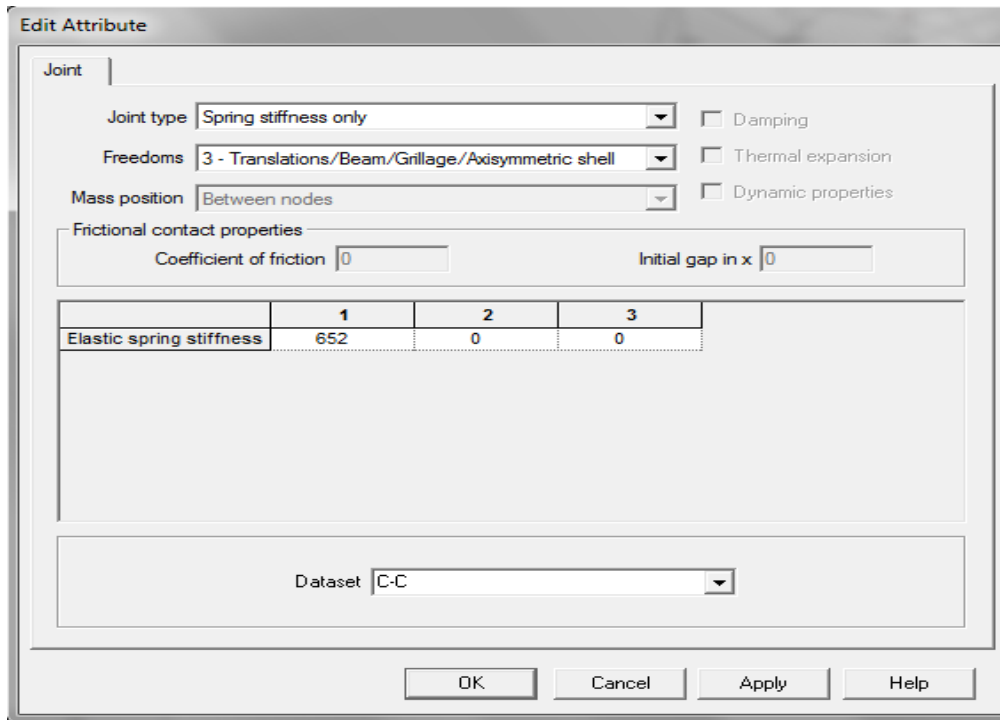
Τώρα έχοντας δηλώσει τα C-C μπορούμε επιλέγοντας όλες τις γραμμές και κάνοντας drag and drop να τα περάσουμε με αυτόν τον τρόπο και στο νανοσωλήνα.

Έπειτα επιλέγουμε από την γραμμή εργαλείων Attributes Geometric Joint και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε ok.



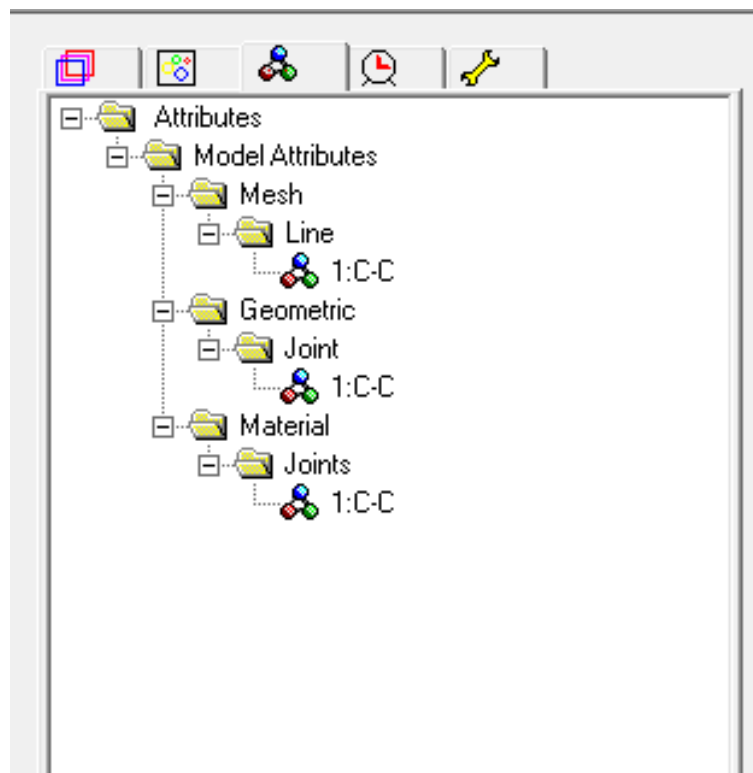
Τώρα έχοντας δηλώσει τα C-C μπορούμε επιλέγοντας όλες τις γραμμές και κάνοντας drag and drop να τα περάσουμε με αυτόν τον τρόπο και στο νανοσωλήνα.

Έπειτα επιλέγουμε από την γραμμή εργαλείων Attributes Material Joint και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε ok.



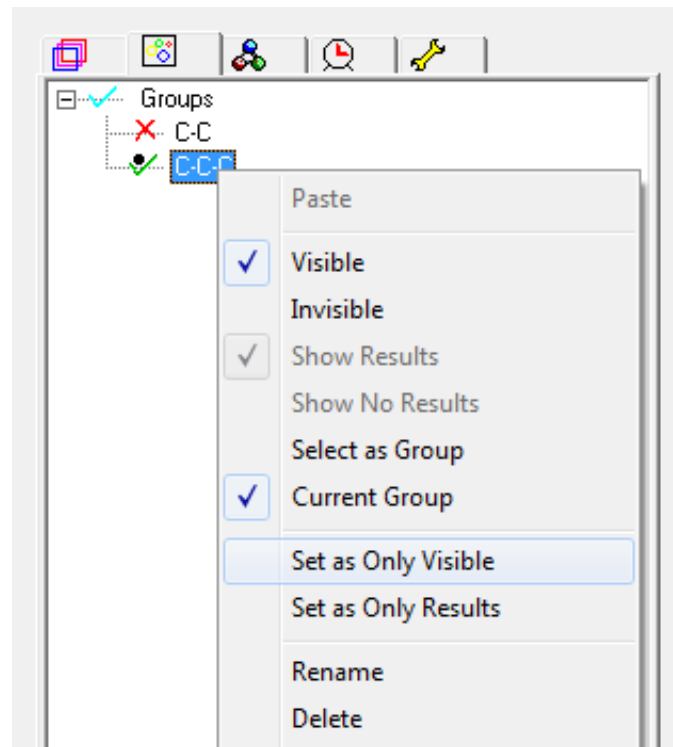
Τώρα έχοντας δηλώσει τα C-C μπορούμε επιλέγοντας όλες τις γραμμές και κάνοντας drag and drop να τα περάσουμε με αυτόν τον τρόπο και στο νανοσωλήνα.

Συνοπτικά έχουμε εργαστεί στα παρακάτω:

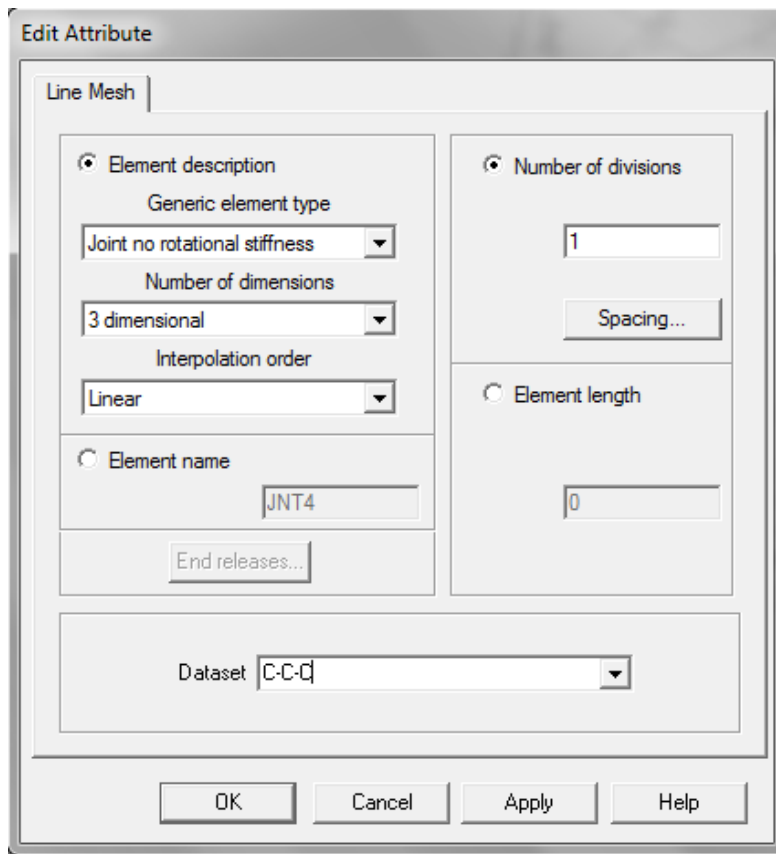


## ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ ΣΤΙΣ C-C-C ΓΡΑΜΜΕΣ

Δεξί κλικ στο C-C-C και επιλέγουμε Set as Only Visible, με τον τρόπο αυτό εργαζόμαστε μόνο στις C-C-C γραμμές.

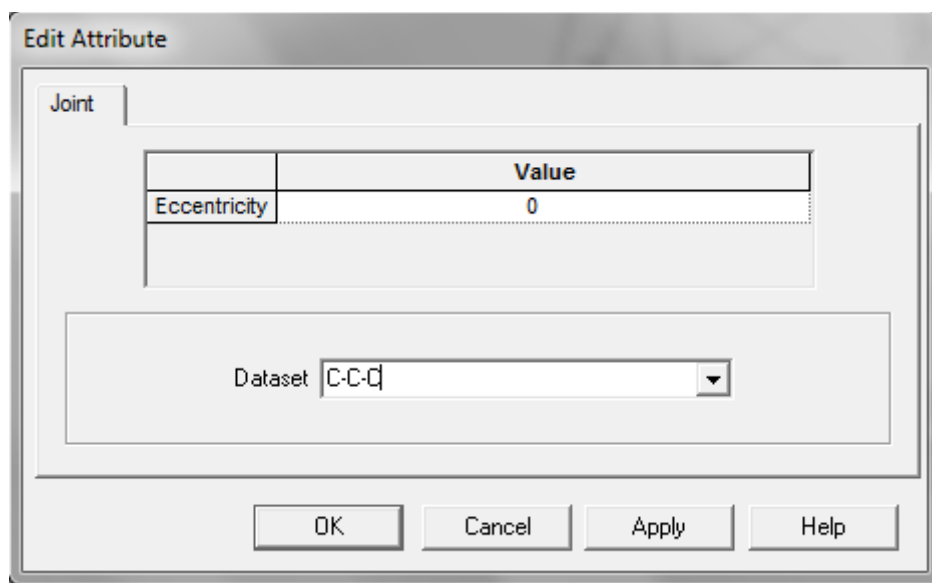


Επιλέγουμε από την γραμμή εργαλείων Attributes Mesh Line και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε ok.



Τώρα έχοντας δηλώσει τα C-C-C μπορούμε επιλέγοντας όλες τις γραμμές και κάνοντας drag and drop να τα περάσουμε με αυτόν τον τρόπο και στο νανοσωλήνα.

Έπειτα επιλέγουμε από την γραμμή εργαλείων Attributes Geometric Joint και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε ok.





Τώρα έχοντας δηλώσει τα C-C-C μπορούμε επιλέγοντας όλες τις γραμμές και κάνοντας drag and drop να τα περάσουμε με αυτόν τον τρόπο και στο νανοσωλήνα.

Έπειτα επιλέγουμε από την γραμμή εργαλείων Attributes Material Joint και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε ok.

The 'Edit Attribute' dialog box is shown with the following settings:

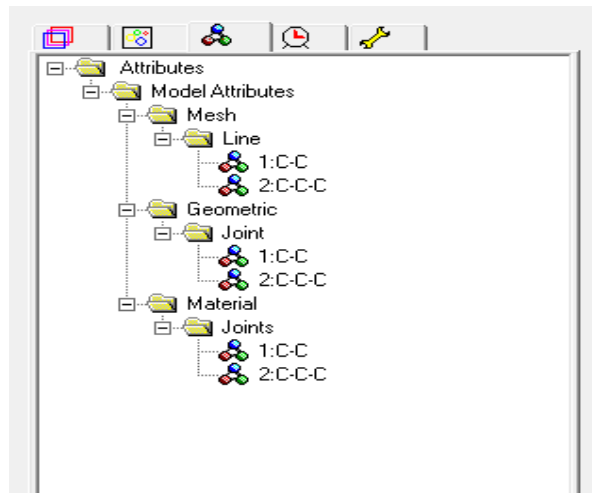
- Joint type: Spring stiffness only
- Freedoms: 3 - Translations/Beam/Grillage/Axisymmetric shell
- Mass position: Between nodes
- Frictional contact properties:
  - Coefficient of friction: 0
  - Initial gap in x: 0
- Elastic spring stiffness table:

	1	2	3
Elastic spring stiffness	44,4655	44,4655	14,11

Dataset: C-C-C

Τώρα έχοντας δηλώσει τα C-C-C μπορούμε επιλέγοντας όλες τις γραμμές και κάνοντας drag and drop να τα περάσουμε με αυτόν τον τρόπο και στο νανοσωλήνα.

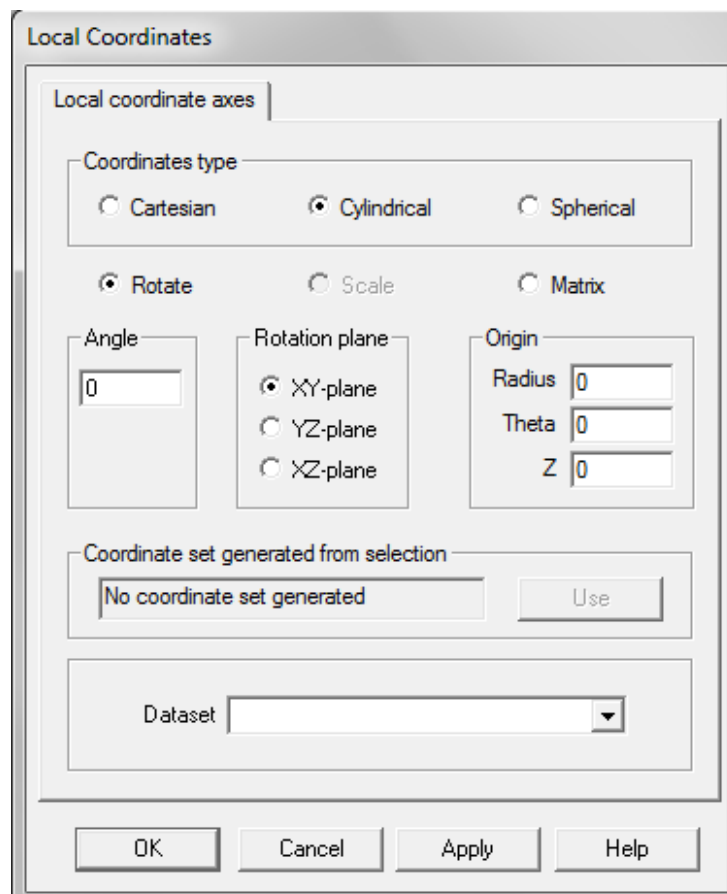
Συνοπτικά έχουμε εργαστεί συνολικά στα παρακάτω:



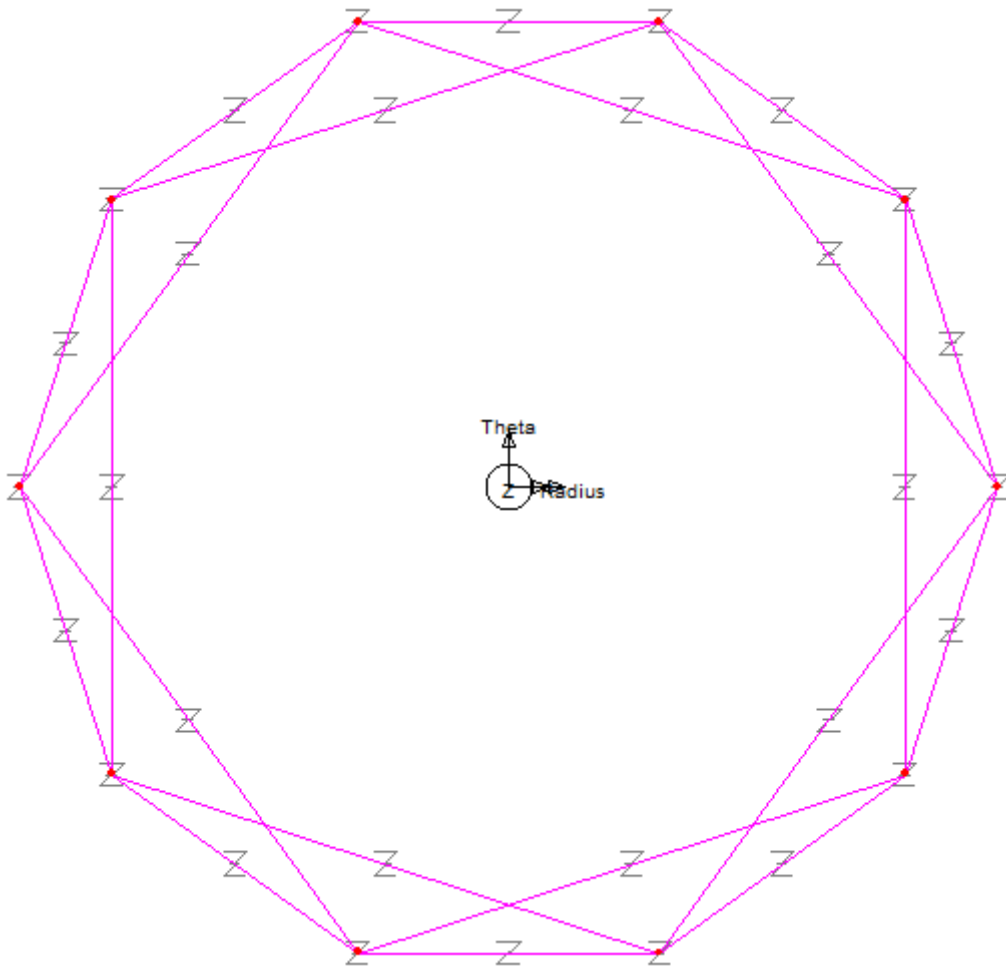
## ΕΙΣΑΓΩΓΗ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ ΣΤΑ ΑΤΟΜΑ ΑΝΘΡΑΚΑ

Για να εισάγουμε στοιχεία στα άτομα άνθρακα θα πρέπει να κάνουμε τους κόμβους γραμμές έτσι ώστε να εισάγουμε τα στοιχεία

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

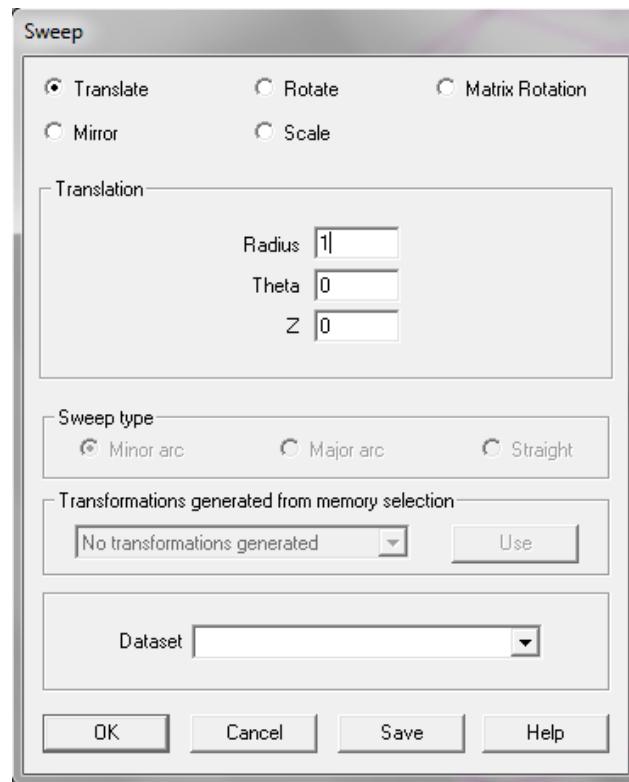


Κάνοντας αυτήν την εντολή μας εμφανίζεται ο άξονας:

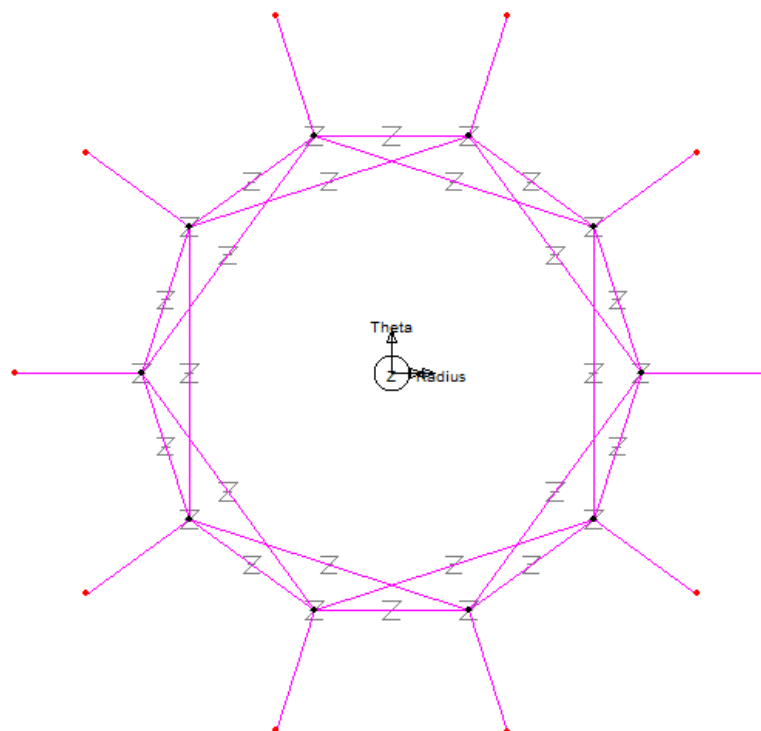


Επιλέγουμε όλο τον νανοσωλήνα και μετά Geometry Group New Group και ονομάζουμε το Groups oliko.

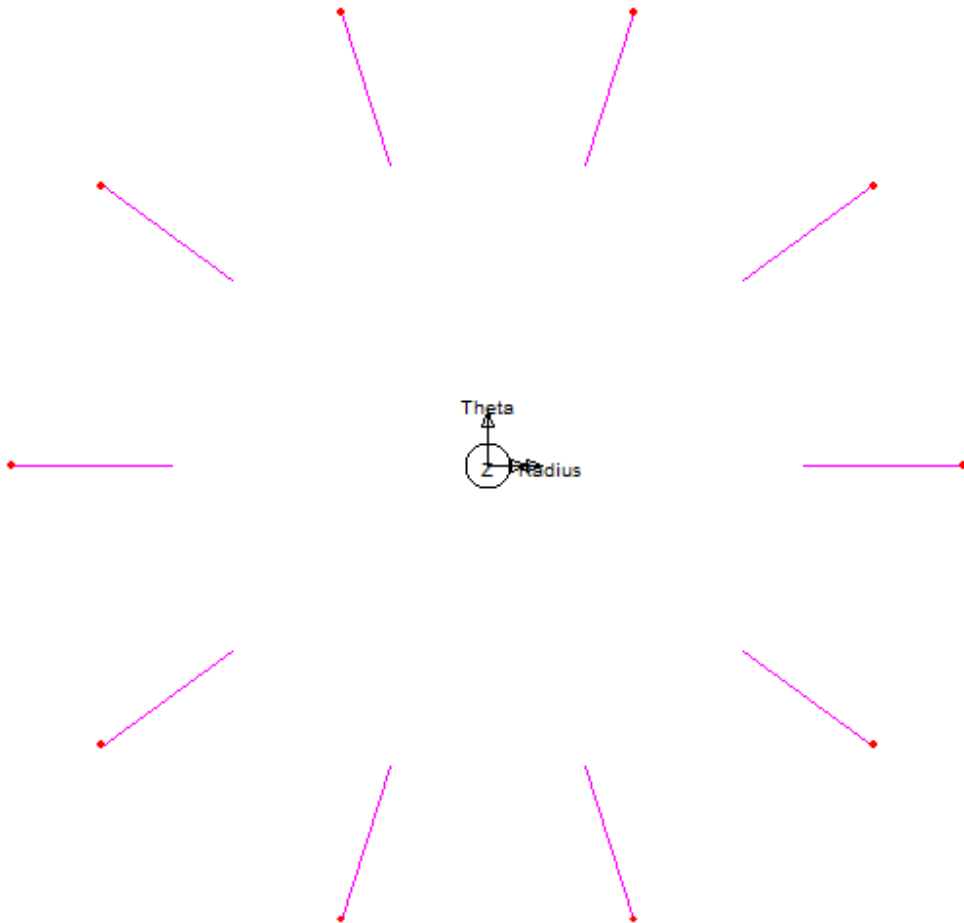
Επιλέγουμε όλα τα σημεία του νανοσωλήνα κάνουμε δεξί κλικ και πατάμε Sweep και μας εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και βάζουμε μια ενδεικτική τιμή σαν radius 1.



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

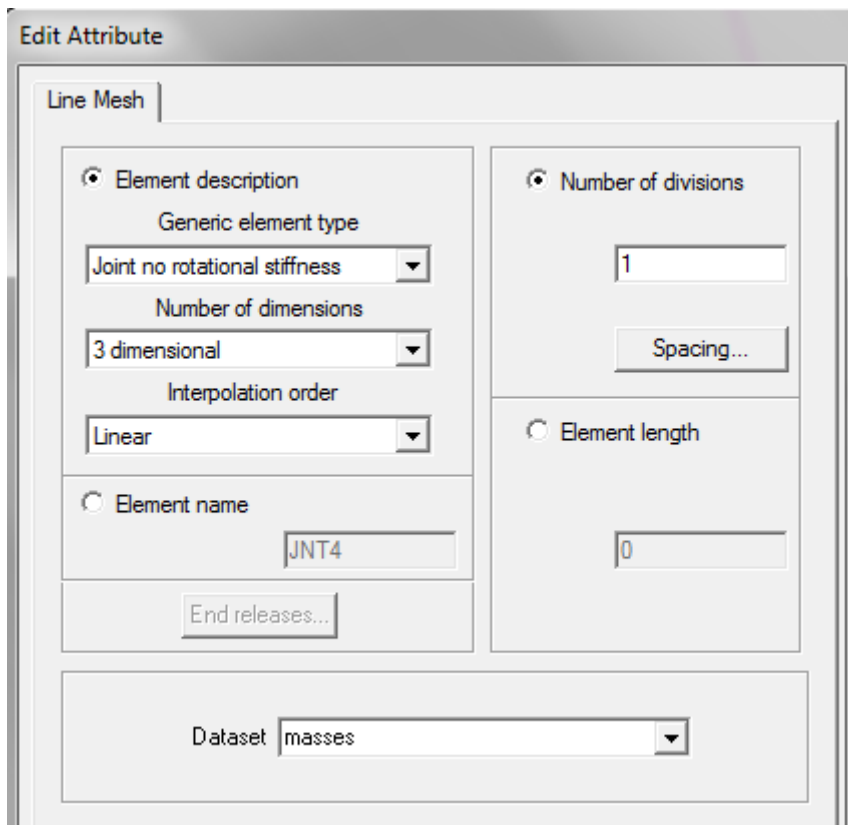


Πηγενομε στην καρτελα των Groups και κάνουμε δεξί κλικ στο C-C και μετά στον C-C-C και επιλέγουμε Invisible με τον τρόπο αυτό μένουν στην οθόνη μόνο οι γραμμές των σημείων όπως φαίνεται και παρακάτω



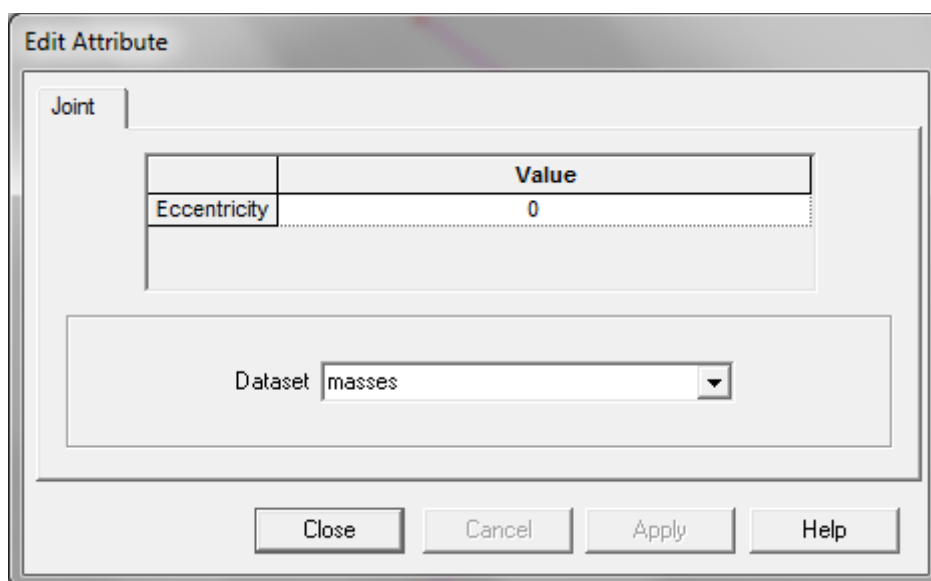
Τώρα μπορούμε να εργαστούμε πάνω στις γραμμές αυτές και να περάσουμε τις παρακάτω ιδιότητες:

Επιλεγουμε από την γραμμή εργαλείων Attributes Mesh Line και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε ok.



Τώρα έχοντας δηλώσει τα masses μπορούμε επιλέγοντας όλες τις γραμμές και κάνοντας drag and drop να τα περάσουμε με αυτόν τον τρόπο και στο νανοσωλήνα.

Έπειτα επιλέγουμε από την γραμμή εργαλείων Attributes Geometric Joint και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε ok.



Τώρα έχοντας δηλώσει τα masses μπορούμε επιλέγοντας όλες τις γραμμές και κάνοντας drag and drop να τα περάσουμε με αυτόν τον τρόπο και στο νανοσωλήνα.

Έπειτα επιλέγουμε από την γραμμή εργαλείων Attributes Material Joint και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε ok.

Joint

Joint type: General properties  Damping

Freedoms: 3 - Translations/Beam/Grillage/Axisymmetric shell  Thermal expansion

Mass position: Between nodes  Dynamic properties

Frictional contact properties

Coefficient of friction: 0 Initial gap in x: 0

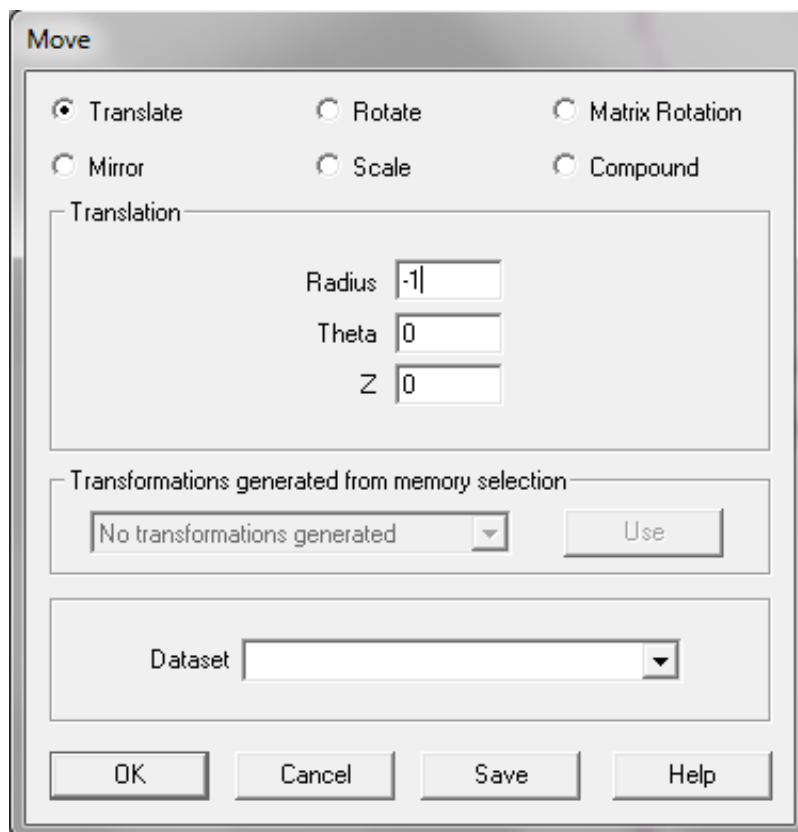
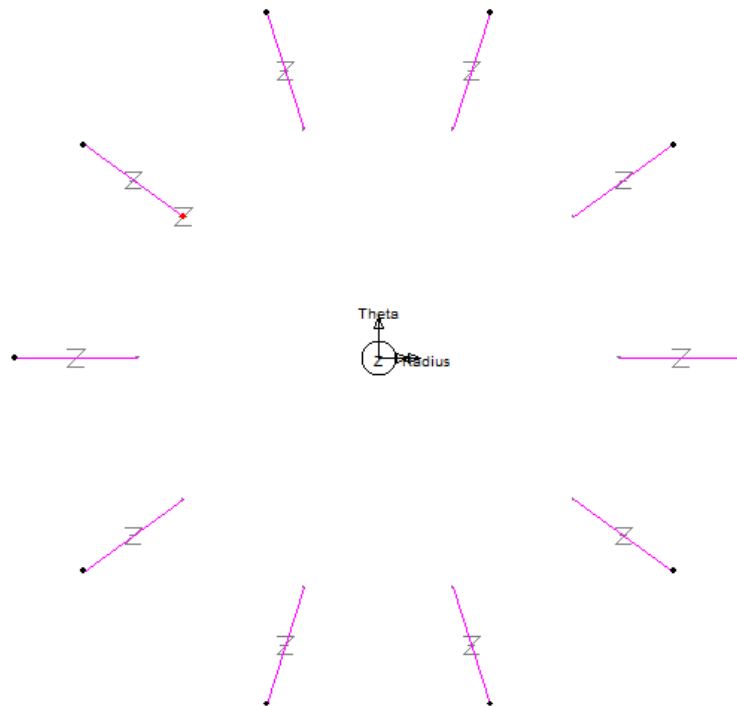
	1	2	3
Elastic spring stiffness	0	0	0
Mass	0,019943E-2	0,019943E-2	0,019943E-2

Dataset: masses

Close Cancel Apply Help

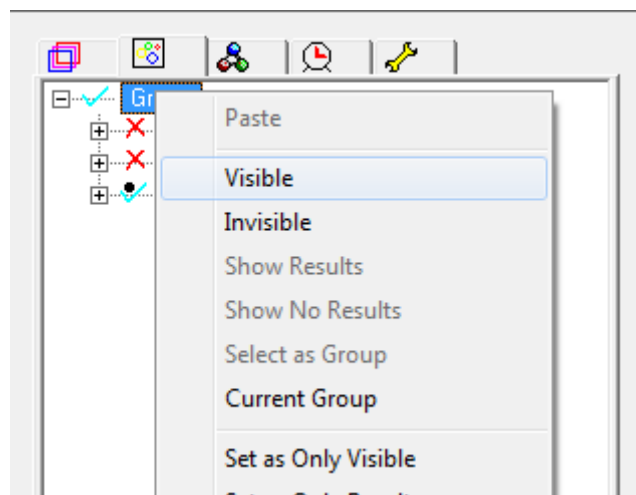
Τώρα έχοντας δηλώσει τα masses μπορούμε επιλέγοντας όλες τις γραμμές και κάνοντας drag and drop να τα περάσουμε με αυτόν τον τρόπο και στο νανοσωλήνα.

Επιλέγουμε όλα τα σημεία και κάνουμε δεξί κλικ και επιλέγουμε move και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και βάζουμε τώρα σαν Radius -1 και πατάμε ok. Με τον τρόπο αυτό έχουμε αποδώσει ιδιότητες και στα άτομα άνθρακα.



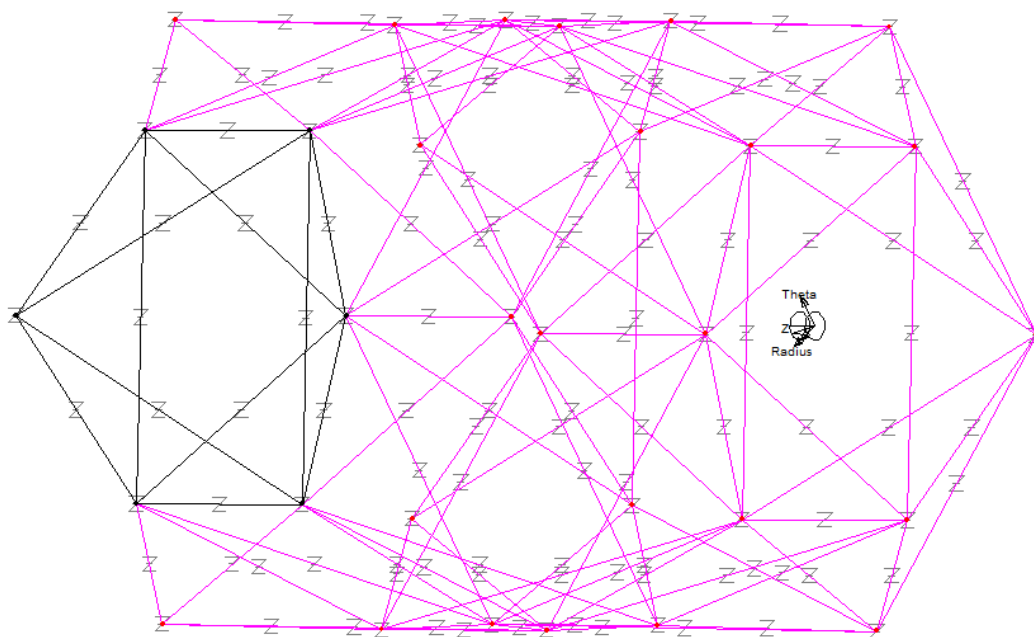
Κάνουμε δεξί κλικ στο Groups και πατάμε Visible για να εμφανιστεί και ο υπόλοιπος νανοσωλήνας.



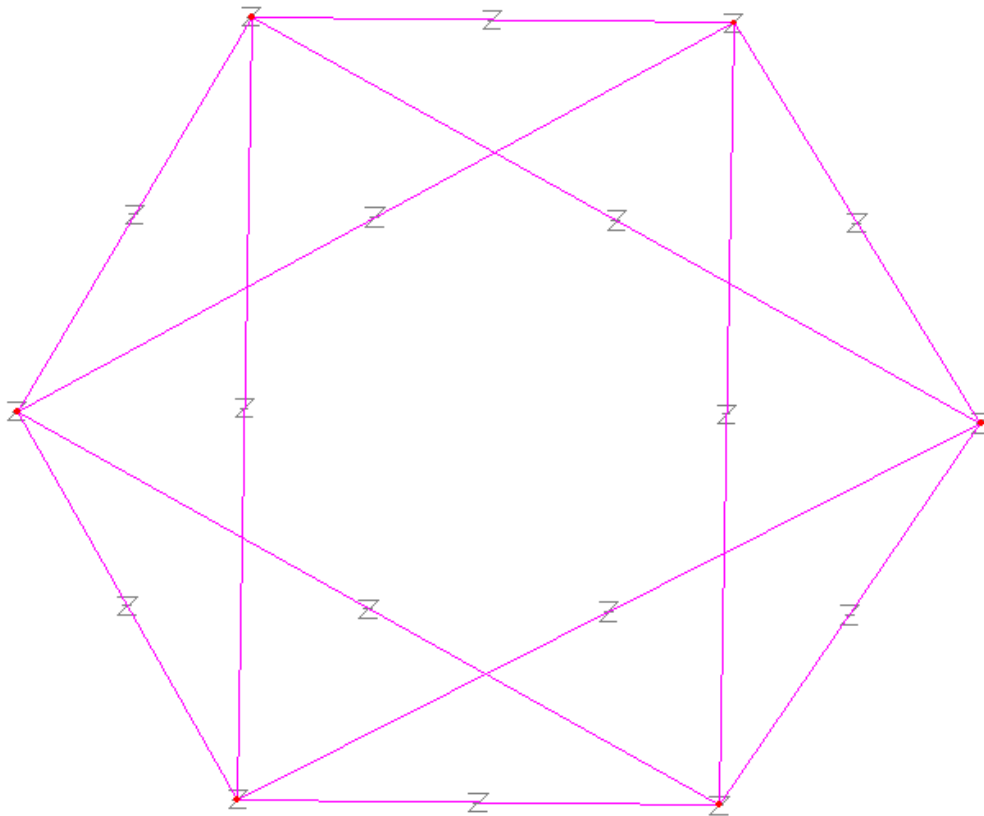


Σε αυτό το σημείο θα πρέπει να αλλάξουμε το τοπικό σύστημα συντεταγμένων στις C-C-C γραμμές.

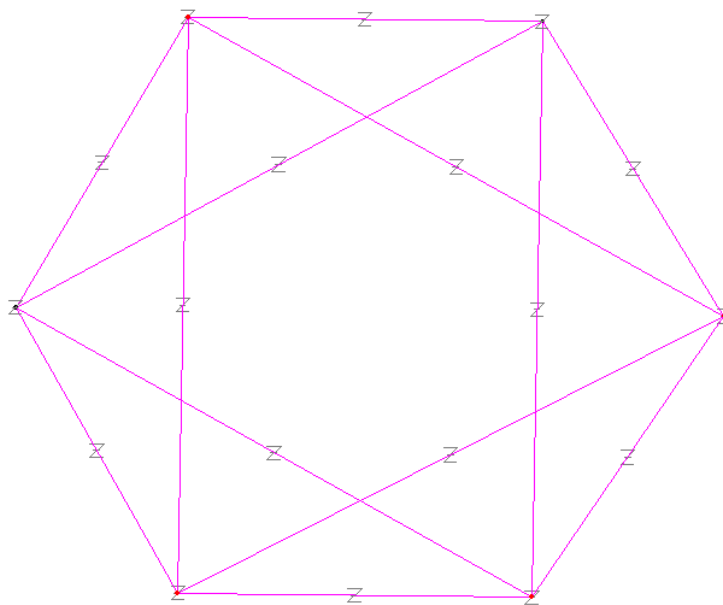
Αρχικά θα πρέπει να κάνουμε Group σε κάθε εξάγωνο του νανοσωλήνα έτσι ώστε να μπορούμε να εργαζόμαστε χωρίς την πιθανότητα κάποιου λάθους. Επομένως επιλέγουμε το πρώτο εξάγωνο και μετά Geometry Group New Group.

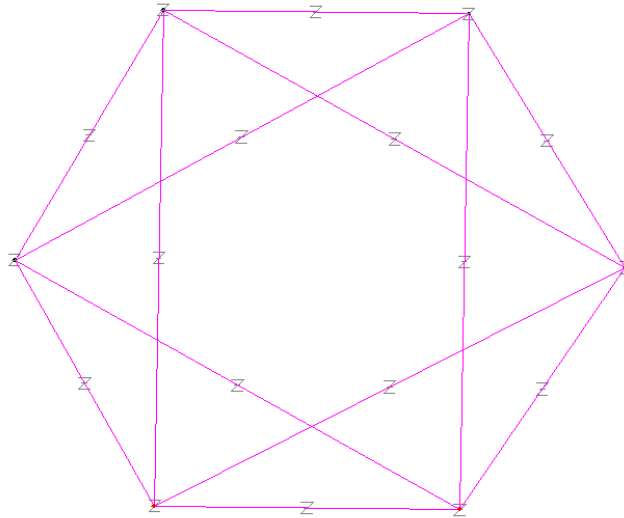


Κάνοντας δεξί κλικ στο New Group και έπειτα Set as only Visible εμφανίζετε το εξάγωνο πάνω στο οποίο θα εργαστούμε.



Επιλέγουμε αρχικά τα δυο σημεία που δημιουργούν την C-C-C και έπειτα το απέναντι σημείο

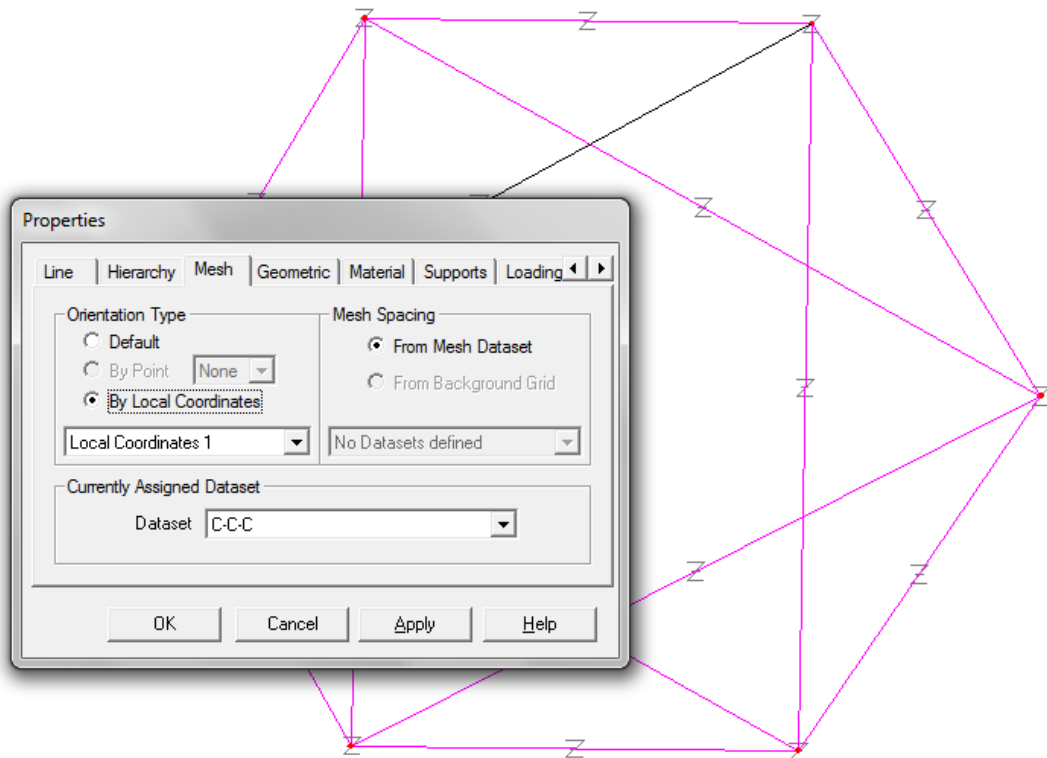




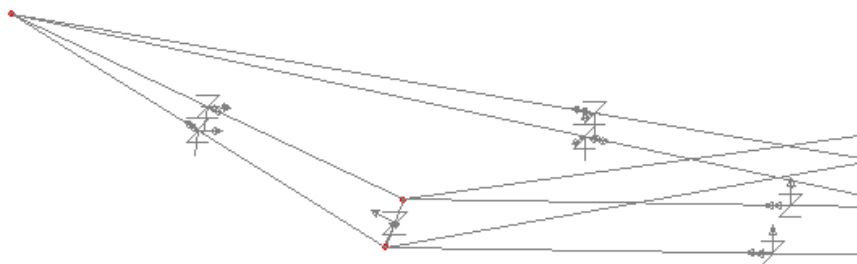
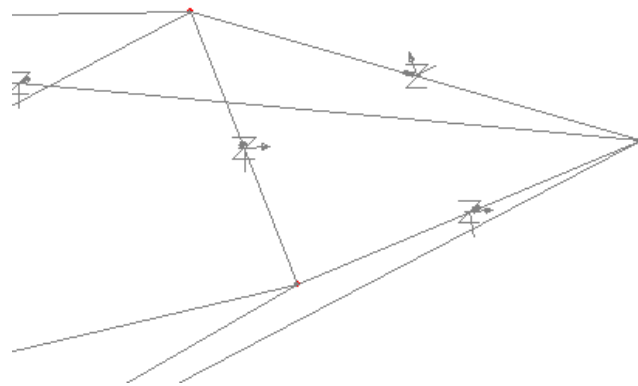
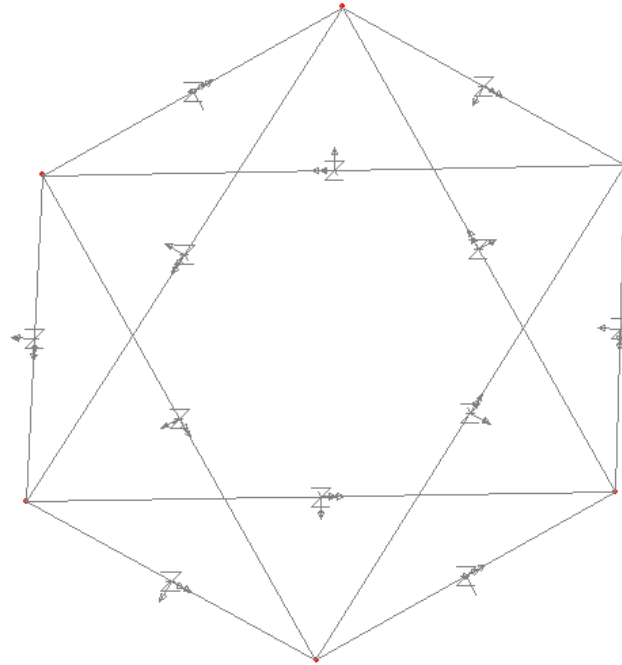
Μετά Attributes Local Cordinates Use και πατάμε ok.

Έπειτα επιλέγουμε την γραμμή C-C-C κάνουμε δεξί κλικ Properties επιλέγουμε By Local Cordinates ακριβώς από κάτω κάνοντας κλικ στο βελάκι επιλέγουμε Local Cordinates 1.

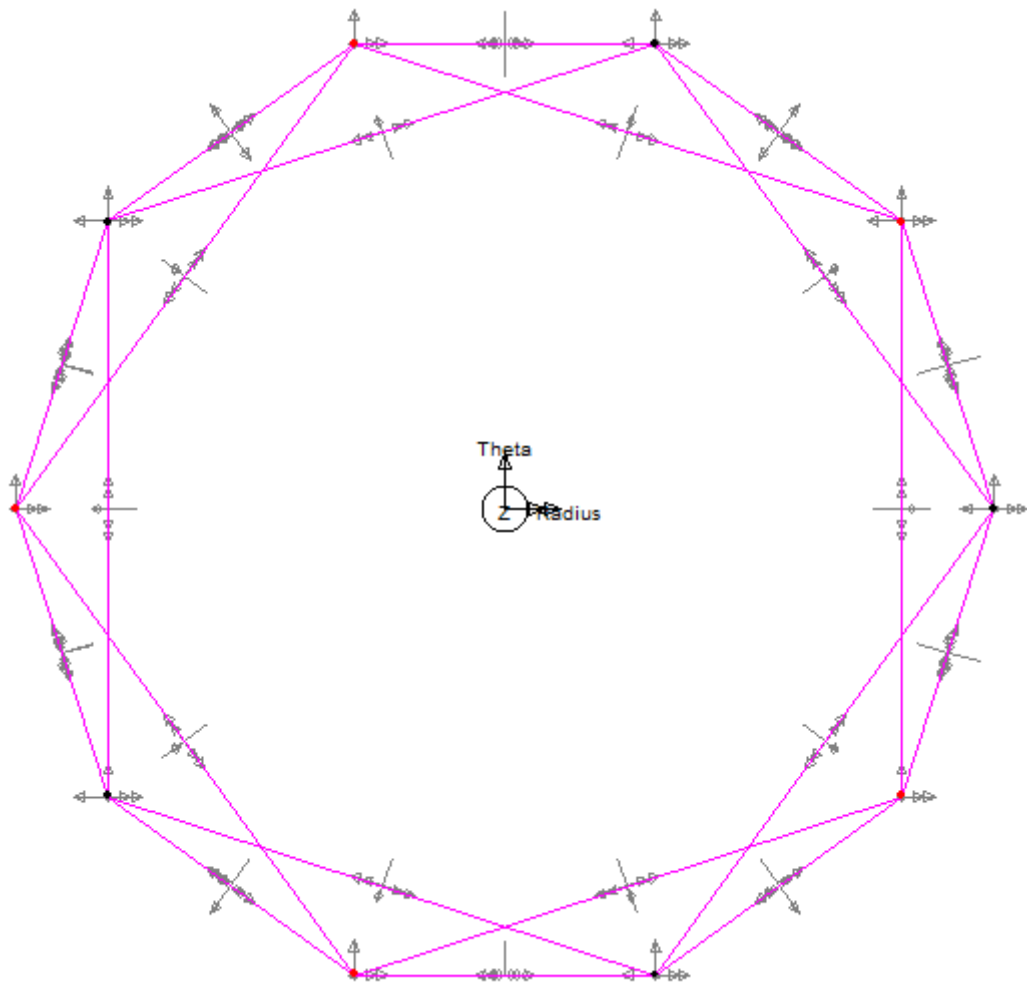
Σε αυτό το σημείο έχει ολοκληρωθεί η διαδικασία για την πρώτη γραμμή C-C-C, κάνοντας ακριβώς την ίδια διαδικασία για την επόμενη γραμμή C-C-C του εξαγώνου στο παραπάνω βήμα επιλέγουμε Local Cordinates 2 και ούτε καθεξής για τις υπόλοιπες. Στον συγκεκριμένο νανοσωλήνα θα κάνουμε αυτή την διαδικασία 65 φορές όσες είναι και οι C-C-C γραμμές.



Μετά από αυτή την διαδικασία θα πρέπει τα μονά βελάκια που βρίσκονται επάνω στις C-C-C όπως θα δούμε και παρακάτω να είναι στραμμένα προς το τρίτο απέναντι τους σημείο, το διπλό βελάκι παράλληλο στην ευθεία και η γραμμή κάθετη στο μονό βελάκι.



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



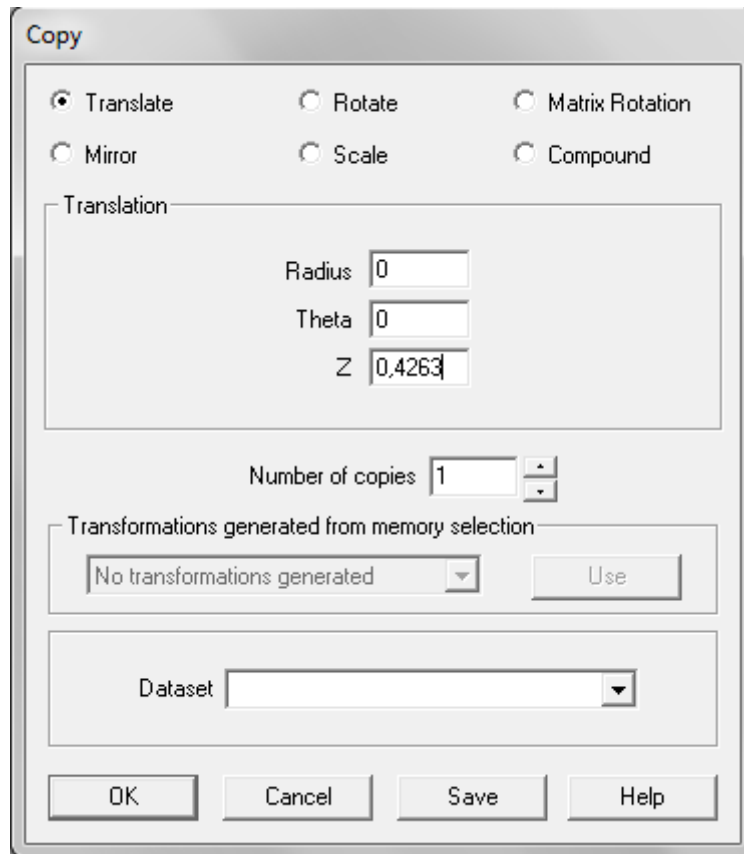
Σε αυτό σημείο έχουν περαστεί σωστά όλες οι ιδιότητες στα μέλη που αποτελούν τον νανοσωλήνα (C-C-C, C-C, κόμβους).

Επόμενο βήμα είναι να δημιουργήσουμε για τον συγκεκριμένο νανοσωλήνα ένα μήκος  $L/D=5$  δηλαδή επιλέγουμε έναν κόμβο και κάνουμε δεξί κλικ και μας εμφανίζει στην καρτέλα το Radius και το πολλαπλασιάζουμε επι δύο. Έτσι βρίσκουμε εύκολα το D και το πολλαπλασιάζουμε με το 5 και βρίσκουμε το L.

Έτσι θα έχουμε  $D*5=0,39171*5=1,95855=L$  αυτό θα είναι το τελικό L του νανοσωλήνα για  $L/D=5$ .

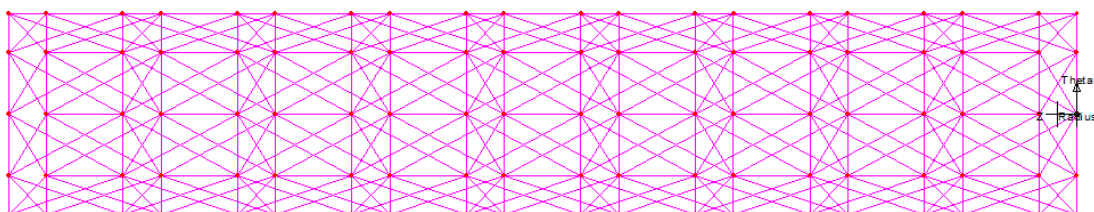
Για να πραγματοποιηθεί αυτό θα πρέπει να αυξήσουμε το μήκος του νανοσωλήνα με τον παρακάτω τρόπο:

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



Πατώντας OK ο νανοσωλήνας θα διπλασιαστεί. Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται ωστόσο το μήκος του φτάσει  $L=1,95855$

Το αποτέλεσμα θα είναι ο παρακάτω νανοσωλήνας:



Σε αυτό το σημείο θα πακτώσαμε τον νανοσωλήνα στην πλευρά που είναι και η αρχή των αξόνων. Αρχικά πατάμε Attributes-Support-Structural όπου στη

συνέχεια θα εμφανιστεί το Structural Supports παράθυρο διαλόγου στο οποίο θα προβούμε στις εξής ενέργειες:

The image shows a software dialog box titled "Edit Attribute" with a tab labeled "Structural Supports". The dialog contains a table for defining support conditions for different degrees of freedom (DOFs). The table has columns for "Free", "Fixed", and "Spring stiffness", each with a radio button and a text input field. The "Fixed" radio button is selected for all DOFs. Below the table, there are three radio buttons for "Spring stiffness distribution": "Stiffness" (selected), "Stiffness/unit length", and "Stiffness/unit area". At the bottom, there is a "Dataset" dropdown menu set to "Structural Support 1" and four buttons: "Close", "Cancel", "Apply", and "Help".

		Free	Fixed	Spring stiffness	
Translation in	X	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="text"/>
	Y	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="text"/>
	Z	<input type="radio"/>	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="text"/>
Rotation about	X	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="text"/>
	Y	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="text"/>
	Z	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="text"/>
Hinge rotation	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="text"/>	
Pore pressure	<input checked="" type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="radio"/>	<input type="text"/>	

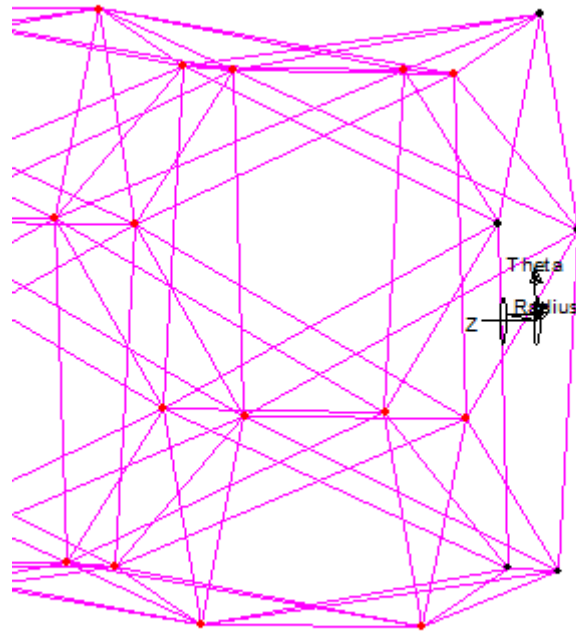
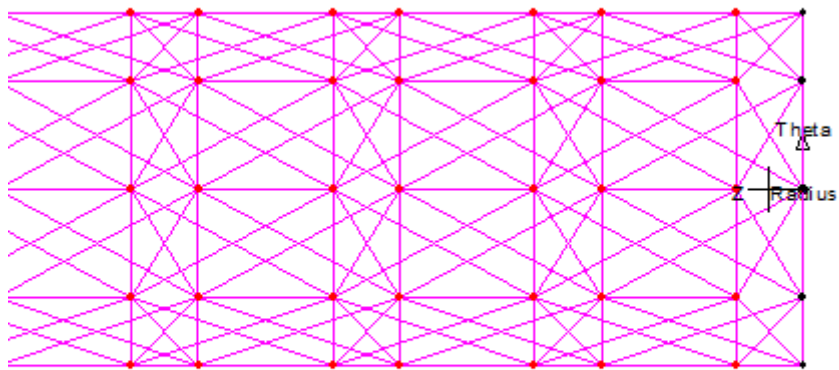
Spring stiffness distribution  
 Stiffness     Stiffness/unit length     Stiffness/unit area

Dataset:

Buttons: Close, Cancel, Apply, Help

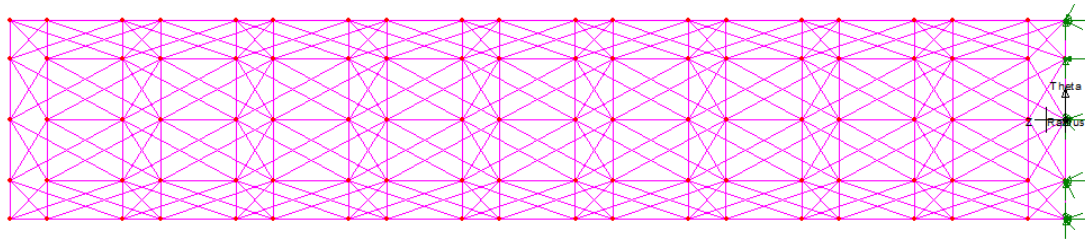
Κατόπιν πατάμε Apply και Close.

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



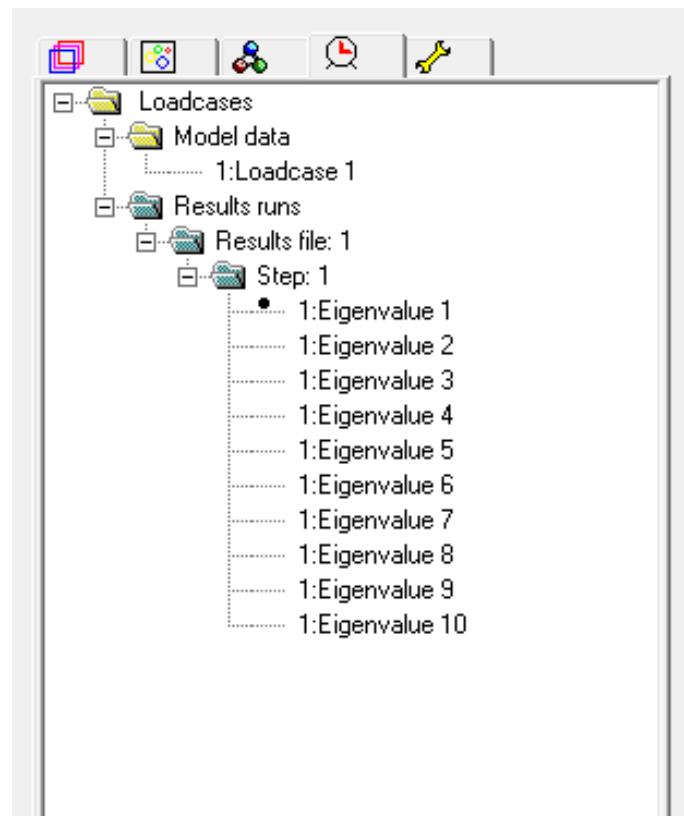
Επομένως τώρα μπορούμε να περάσουμε στο νανοσωλήνα με drag and drop τη πάκτωση.



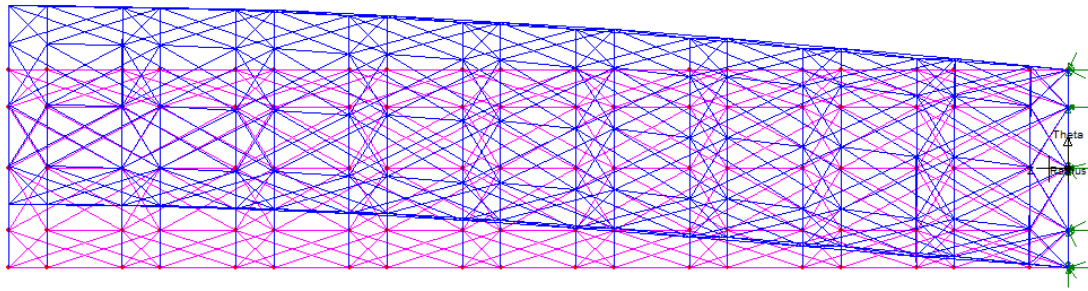


Σε αυτό το σημείο είμαστε σε θέση να δούμε τα αποτελέσματα της ελεύθερης ταλάντωσης κάνοντας τα παρακάτω βήματα.

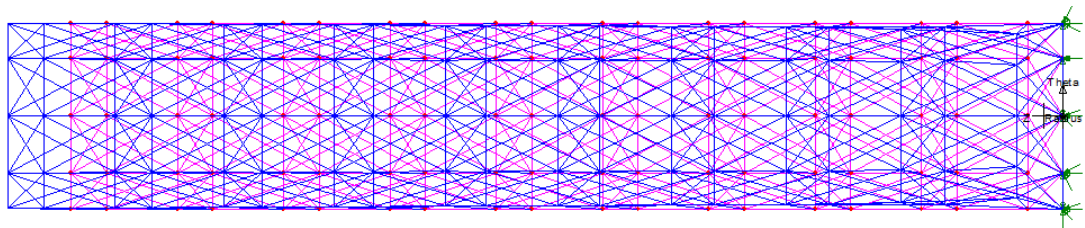
Πάμε στην γραμμή εργαλείων και κάνουμε File Save As και έπειτα LUSAS Datafile.



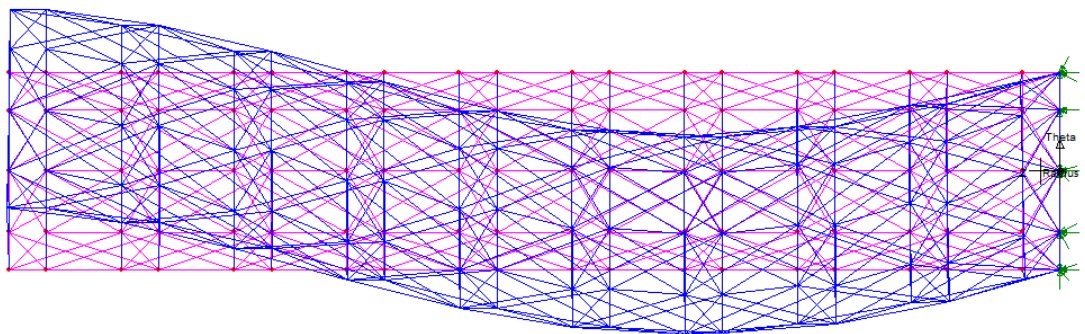
Κάνοντας δεξί κλικ στο Eigenvalue 1 και μετά Set Active βλέπουμε την πρώτη ιδιομορφή.



Δεύτερη ιδιομορφή



Τρίτη ιδιομορφή



Ανακεφαλαιώνοντας: όλη αυτή η διαδικασία πραγματοποιήθηκε για τον νανοσωλήνα ZIG ZAG (5,0) με  $L/D=5$  και με μια πάκτωση και χωρίς πρόσθετη μάζα. Έχουμε εργαστεί επίσης για μήκη εκτός από  $L/D=5$  και σε  $L/D=10$   $L/D=15$   $L/D=20$ .

Το επόμενο βήμα είναι η πρόσθεση μάζας κατά μήκος στον νανοσωλήνα σε  $L*0,2=1,95855*0,2=0,39171$ .

Η μάζα αυτή θα είναι 0,1 φορές την μάζα του ατόμου άνθρακα δηλαδή  $0,019943E-24*0,1=0,021938E-24$ .

Έπειτα επιλέγουμε από την γραμμή εργαλείων Attributes Material Joint και εμφανίζεται η παρακάτω καρτέλα και εισάγουμε τις παρακάτω επιλογές και πατάμε ok.

Joint

Joint type: General properties  Damping

Freemoms: 3 - Translations/Beam/Grillage/Axisymmetric shell  Thermal expansion

Mass position: At first node  Dynamic properties

Frictional contact properties

Coefficient of friction: 0 Initial gap in x: 0

	1	2	3
Elastic spring stiffness	0	0	0
Mass	0,021938E-2	0,021938E-2	0,021938E-2

Dataset: extra

Close Cancel Apply Help

Τώρα έχοντας δηλώσει την extra μάζα μπορούμε επιλέγοντας το σημείο με  $L=0,39171$  και κάνοντας drag and drop να το περάσουμε με αυτόν τον τρόπο και στο νανοσωλήνα.

Τρέχουμε το πρόγραμμα όπως παραπάνω και παίρνουμε τις τρεις ιδιομορφές, επαναλαμβάνουμε τη διαδικασία αυτή για μάζες :

$0,019943E-24*1$   $0,019943E-24*10$   $0,019943E-24*100$   $0,019943E-24*1000$  στο ίδιο σημείο.

Όταν τελειώσουμε τη διαδικασία αυτή για  $L*0,2$  κάνουμε για μήκη  $L*0,4$   $L*0,6$   $L*0,8$   $L*1$ .

Στην παρούσα πτυχιακή κάνουμε την διαδικασία αυτή με τις μάζες και τα μήκη του νανοσωλήνα μόνο για  $L/D=10$

Στην πτυχιακή έχουμε εργαστεί για νανοσωλήνες ZIG ZAG (5,0) , ZIG ZAG(10,0) ZIG ZAG(20,0) ZIG ZAG(40,0) επίσης ARMCHAIR(3,3) ARMCHAIR(6,6) ARMCHAIR(12,12) ARMCHAIR(24,24).

Όλα αυτά πραγματοποιούνται αρχικά σε μονή πάκτωση και έπειτα σε διπλή πάκτωση.