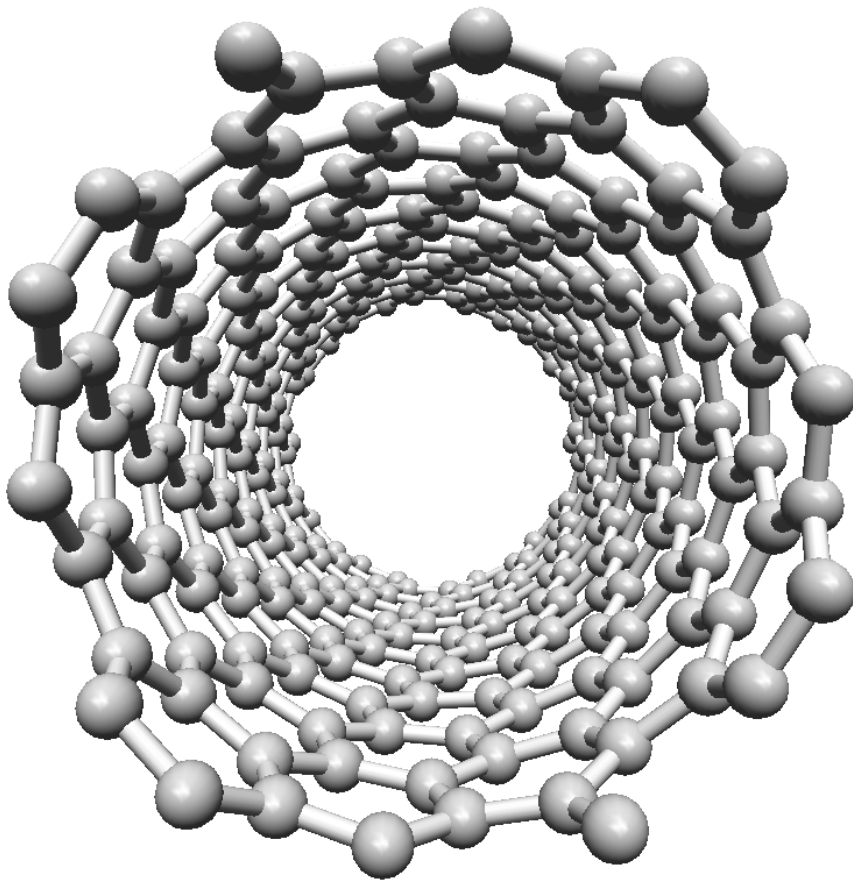


ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΟ ΙΔΡΥΜΑ ΠΑΤΡΑΣ
ΣΧΟΛΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΩΝ ΕΦΑΡΜΟΓΩΝ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΙΑΣ

ΠΤΥΧΙΑΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΑΤΟΜΙΣΤΙΚΗ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ



ΣΠΟΥΔΑΣΤΗΣ: ΤΣΙΡΟΣ ΑΛΕΞΑΝΔΡΟΣ

ΕΠΙΒΛΕΠΩΝ ΚΑΘΗΓΗΤΗΣ: Δρ ΓΙΑΝΝΟΠΟΥΛΟΣ Ι. ΓΕΩΡΓΙΟΣ

ΠΑΤΡΑ 2011

ΠΡΟΛΟΓΟΣ

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

Στην παρούσα εργασία προτείνεται πρωτότυπη αριθμητική μέθοδος πεπερασμένων στοιχείων για τη πρόβλεψη της μηχανικής συμπεριφοράς νανοσωλήνων άνθρακα και παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της εφαρμογής της σε μια σειρά από νανοσωλήνες διαφορετικών γεωμετρικών χαρακτηριστικών. Η παρούσα εργασία βοήθησε τον συγγραφέα στην απόκτηση γνώσεων στις μεθόδους αριθμητικής μοντελοποίησης νανοδομημένων υλικών αλλά και στην εξοικείωση με τη ραγδαία εξελισσόμενη τεχνολογία των νανοϋλικών. Στη παρούσα εργασία δημοσιεύονται για πρώτη φορά αριθμητικά αποτελέσματα που αφορούν την ελαστική συμπεριφορά νανοσωλήνων άνθρακα τα οποία έχουν εξαχθεί με συγκεκριμένες πρωτότυπες αριθμητικές τεχνικές.

Ευχαριστώ θερμά τον επιβλέποντα καθηγητή Δρ Γιαννόπουλο Γεώργιο, επιστημονικό συνεργάτη του Τμήματος Μηχανολογίας, για την πολύτιμη βοήθεια και καθοδήγηση και ιδέες που μου παρείχε κατά την εκπόνηση της. Επιπρόσθετα θα ήθελα να εκφράσω τις ευχαριστίες μου στον Δρ Γεωργαντζίνο Στυλιανό ο οποίος βοήθησε σημαντικά στην αυτοματοποιημένη κατασκευή των μη συμμετρικών αριθμητικών μοντέλων που αναπτύχθηκαν για τις ανάγκες της παρούσας πτυχιακής.

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.

Στη παρούσα εργασία προτείνεται μια αριθμητική μέθοδος για την μοντελοποίηση μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα η οποία βασίζεται στη αποκλειστική χρήση πεπερασμένων στοιχείων τύπου ράβδου, για την προσομοίωση των διατομικών αλληλεπιδράσεων μεταξύ των ατόμων άνθρακα οι οποίες εξαρτώνται από το δυναμικό πεδίο που αναπτύσσεται γύρω από αυτά. Για την προσομοίωση αυτών των αλληλεπιδράσεων χρησιμοποιούνται οι μαθηματικές εκφράσεις της δυναμικής ενέργειας που παρέχονται από τη μοριακή χημεία. Τα δυναμικά αυτά προσομοιώνονται έπειτα μέσω γραμμικών ελαστικών πεπερασμένων στοιχείων τύπου ράβδου κατάλληλης δυσκαμψίας. Οι νανοσωλήνες μοντελοποιούνται σε ατομιστικό επίπεδο υπό την έννοια ότι λαμβάνεται υπόψη η νανογεωμετρία τους ή διαφορετικά η σχετική θέση των ατόμων άνθρακα σε νανοεπίπεδο. Στα μοντέλα που προκύπτουν επιβάλλονται κατάλληλες φορτίσεις και στηρίξεις για την εξαγωγή αποτελεσμάτων που έχουν να κάνουν με το ενεργό και ακτινικό μέτρο ελαστικότητας καθώς και το ενεργό μέτρο διάτμησης διαφόρων τύπων και γεωμετριών μονότοιχων νανοσωλήνων. Τέλος μελετάται και η ελαστική ευστάθεια των νανοσωλήνων κάτω από θλιπτικά και στρεπτικά φορτία.

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 τις αλλοτροπικές μορφές του άνθρακα και πιο συγκεκριμένα τη δομή, τις ιδιότητες, τη χρήση αλλά και παρασκευή των νανοσωλήνων άνθρακα.

Στο δεύτερο κεφάλαιο γίνεται μια σύντομη περιγραφή των γεωμετρικών χαρακτηριστικών των νανοδομών που πρόκειται να μελετηθούν, καθώς και των διατομικών αλληλεπιδράσεων που λαμβάνουν χώρα κατά την παραμόρφωση των δεσμών μιας νανοδομής.

Στο τρίτο κεφάλαιο γίνεται περιγραφή του πεδίου δυνάμεων, βάση της συνολικής ενέργειας δυναμικού, για την γραμμική περίπτωση. Επίσης, εξηγείται η αριθμητική μοντελοποίηση των προβλημάτων. Περιγράφεται αναλυτικά τρόπος με τον οποίο πραγματοποιείται η προτυποποίηση των συγκεκριμένων νανοδομών με χρήση της μεθοδολογίας των πεπερασμένων στοιχείων.

Στο τέταρτο κεφάλαιο παρουσιάζονται ομαδοποιημένα τα αποτελέσματα που αφορούν την ελαστική μηχανική απόκριση και ευστάθεια των υπό μελέτη νανοσωλήνων άνθρακα.

Τέλος στο πέμπτο κεφάλαιο παρατίθενται τα συνολικά συμπεράσματα αυτής της προσπάθειας ενώ τονίζονται τα στοιχεία πρωτοτυπίας στην προτεινόμενη μέθοδο.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

ΤΙΤΛΟΣ ΕΝΟΤΗΤΑΣ	Σελ.
ΠΡΟΛΟΓΟΣ.....	iii
ΠΕΡΙΛΗΨΗ.....	v
ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ.....	vii
ΕΙΣΑΓΩΓΗ.....	1
1. ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΜΙΑ ΑΛΛΟΤΡΟΠΙΑ ΤΟΥ ΑΝΘΡΑΚΑ.....	7
1.1 Ο ΑΝΘΡΑΚΑΣ.....	7
1.2 ΟΙ ΑΛΛΟΤΡΟΠΙΚΕΣ ΜΟΡΦΕΣ ΤΟΥ ΑΝΘΡΑΚΑ.....	7
1.2.1 Το διαμάντι.....	7
1.2.2 Ο γραφίτης.....	8
1.2.3 Ο άμορφος άνθρακας.....	9
1.2.4 Τα φουλερένια.....	10
1.2.5 Οι νανοσωλήνες άνθρακα.....	11
1.2.6 Οι νανοϊνες άνθρακα.....	12
1.2.7 Υαλώδης άνθρακας.....	12
1.2.8 Νανοαφρός άνθρακα.....	12
1.3 ΔΟΜΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ.....	13
1.4 ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ.....	16
1.4.1 Μηχανικές ιδιότητες.....	17
1.4.2 Θερμικές ιδιότητες.....	18
1.4.3 Ηλεκτρικές ιδιότητες.....	18
1.4.4 Οπτικές ιδιότητες.....	19
1.4.5 Πιεζοηλεκτρικές ιδιότητες.....	20
1.4.6 Ηλεκτροκινητικές ιδιότητες.....	20
1.4.7 Ηλεκτροχημικές ιδιότητες.....	21
1.4.8 Παραγωγή ισχύος	21
1.5 ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΠΑΡΑΣΚΕΥΗΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ.....	21
1.5.1 Εξάχνωση ηλεκτροδίων άνθρακα με τη χρήση ηλεκτρικού τόξου εκκένωσης	22
1.5.2 Φωτοδιάσπαση γραφίτη με τη χρήση λέιζερ.....	23
1.5.3 Καταλυτική χημική εναπόθεση ατμών (CVD).....	24

1.5.4 Μετατροπή CO με υψηλή πίεση (HiPCO).....	25
1.6 ΧΡΗΣΕΙΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ.....	25
1.6.1 Αποθήκευση Ενέργειας.....	27
1.6.2 Συσκευές Εκπομπής Πεδίου.....	27
1.6.3 Τρανσίστορες.....	28
1.6.4 Σύνθετα Υλικά.....	30
1.6.5 Ιατρική και βιολογία.....	31
1.6.6 Υπολογιστές.....	31
1.6.7 Βιοαισθητήρες.....	32
2. ΔΟΜΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΑ ΑΝΘΡΑΚΑ ΚΑΙ ΔΙΑΤΟΜΙΚΕΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ.....	33
2.1 ΝΑΝΟΔΟΜΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ.....	33
2.2 ΔΙΑΤΟΜΙΚΕΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ.....	36
3. ΠΡΟΤΕΙΝΟΜΕΝΗ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΕΘΟΔΟΣ.....	41
3.1 Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ.....	41
3.2 ΠΕΔΙΟ ΔΥΝΑΜΕΩΝ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΑ ΑΝΘΡΑΚΑ.....	42
3.3 ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΡΑΒΔΟΥ.....	45
3.4 ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑΣ ΜΟΝΟΤΟΙΧΟΥ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΑ ΑΝΘΡΑΚΑ.....	47
3.4.1 Αριθμητική επίλυση ελαστικού στατικού προβλήματος.....	50
3.4.2 Αριθμητική επίλυση ελαστικού προβλήματος ευστάθειας.....	50
4. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ.....	53
4.1 ΕΛΑΣΤΙΚΕΣ ΜΗΧΑΝΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ.....	53
4.2 ΚΡΙΣΙΜΑ ΦΟΡΤΙΑ ΑΣΤΑΘΕΙΑΣ.....	62
4.2.1 Μελέτη ευστάθειας σε θλίψη.....	62
4.2.2 Μελέτη ευστάθειας σε στρέψη.....	75
5. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ.....	85
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ.....	87
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ.....	91

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 δημιουργούμαι 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 ($1\text{nm}=10^{-9}\text{m}$) 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 ανάπτυξη 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 δακτυλιδιών 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.

Στη παρούσα πτυχιακή παρέχονται αριθμητικές προβλέψεις που αφορούν τη το ενεργό και ακτινικό μέτρο ελαστικότητας καθώς και το ενεργό μέτρο διάτμησης μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα σε συνάρτηση με τη διάμετρο τους και τη μορφολογία τους. Επιπλέον, παρουσιάζονται λεπτομερείς παραμετρικές μελέτες που αφορούν την ευστάθεια των διαφόρων νανοσωλήνων άνθρακα υπό θλιπτικά και στρεπτικά στατικά φορτία. Τα αποτελέσματα αποκαλύπτουν την επίδραση της νανοδομής των νανοσωλήνων στη μηχανική τους απόκριση.

Αν και υπάρχουν πολλές πειραματικές μελέτες που σχετίζονται με το μέτρο ελαστικότητας των μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα [3,4], η ακτινική και η στρεπτική μηχανική συμπεριφορά τους δεν έχει εξεταστεί τόσο συστηματικά μέσω πειραματικών μεθόδων τα τελευταία χρόνια. Ο Barboza και άλλοι [5], διερεύνησαν τη μηχανική απόκριση των μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα υπό ακτινική θλίψη με τη βοήθεια ενός μικροσκοπίου ατομικής δύναμης. Ο Wang και άλλοι [6] μελέτησαν την ακτινική παραμόρφωση μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα διαφόρων διαμέτρων χρησιμοποιώντας νανοσκληρομετρητή άκαμπτου πυριτίου με ακμές από διαμάντι σε μικροσκόπιο ατομικής δύναμης. Οι Abrams και Hanein [7], χρησιμοποίησαν υψηλής ευκρίνειας ηλεκτρονικό μικροσκόπιο για την χαρτογράφηση και επαλήθευση της ακτινικής παραμόρφωσης μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα. Ο Yu και άλλοι [8] χρησιμοποίησαν παρόμοιες τεχνικές για τη μελέτη της ακτινικής

παραμόρφωσης ενός πολύτοιχου νανοσωλήνα άνθρακα. Ο Palaci και άλλοι [9], ασχολήθηκαν με τη πειραματική και θεωρητική μελέτη της ακτινικής ελαστικότητας πολύτοιχων νανοσωλήνων άνθρακα ως συνάρτηση της εξωτερικής ακτίνας με τη χρήση ενός μικροσκοπίου ατομικής δύναμης. Οι θεωρητικές προσεγγίσεις είναι πιο αποδοτικές και αποτελεσματικές, χωρίς τον περιορισμό του μεγέθους των δειγμάτων και τις δυσκολίες στην αντιμετώπιση των νανοδομών.

Έχουν πραγματοποιηθεί διάφορες θεωρητικές προσεγγίσεις που επικεντρώνονται στην ακτινική και στρεπτική μηχανική συμπεριφορά των μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα. Ο Li και άλλοι [10] προσδιόρισαν αναλυτικά το ισοδύναμο μέτρο ελαστικότητας ενός zigzag μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα υπό υδροστατική πίεση, με την μελέτη της παραμόρφωσης του ομοιοπολικού δεσμού. Οι Hasegawa και Nishidate [11], ανέπτυξαν μια θεωρία ενέργειας για μεμονωμένους μονότοιχους νανοσωλήνες άνθρακα υπό ακτινικές παραμορφώσεις. Εφαρμόζοντας τη θεωρία αυτή διερεύνησαν τα χαρακτηριστικά παραμόρφωσης και ευστάθειας τους υπό υδροστατική πίεση. Οι Poron και Van Doren [12] υιοθέτησαν τη θεωρία της ελαστικότητας για να καταλήξουν σε αναλυτικές εκφράσεις του μέτρου ελαστικότητας και διάτμησης των νανοσωλήνων. Άλλες, θεωρητικές προσεγγίσεις βασίζονται στις κλασικές ατομικές υπολογιστικές μεθόδους, όπως η Μοριακή Δυναμική η Μηχανική των Κατασκευών. Ο Hernández και άλλοι [13] παρουσίασαν την εξάρτηση του μέτρου ελαστικότητας με τη διάμετρο των νανοσωλήνων με τη χρήση της Μοριακής Μηχανικής. Οι Jin και Yuan [14] υπολόγισαν το μέτρο ελαστικότητας και διάτμησης χρησιμοποιώντας ανάλογες προσομοιώσεις. Ο Ye και άλλοι [15] μελέτησαν την απόκριση πολύτοιχων νανοσωλήνων άνθρακα υπό υδροστατική πίεση, χρησιμοποιώντας προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής. Ο Chen και άλλοι [16] χρησιμοποιώντας τροποποιημένη μοριακή δυναμική, προσδιόρισαν τη μηχανική συμπεριφορά νανοσωλήνων άνθρακα, κυρίως στην ακτινική διεύθυνση. Ο Chang και άλλοι [17] χρησιμοποίησαν ένα αναλυτικό μοντέλο μοριακής μηχανικής και για να προβλέψουν τις ελαστικές ιδιότητες ενός chiral μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα. Ο To [18] χρησιμοποίησε πεπερασμένα στοιχεία δοκού για τον προσδιορισμό του μέτρου ελαστικότητας και διάτμησης των συγκεκριμένων νανοδομών. Οι Tserpes και Paraniikos [19], υπολόγισαν τη μηχανική απόκριση τους χρησιμοποιώντας μία παρόμοια μέθοδο. Ο Giannopoulos και άλλοι [20], πρότειναν μία αριθμητική μέθοδο βασισμένη σε απλά ελατήρια για τη διερεύνηση του μέτρου ελαστικότητας και διάτμησης armchair και zigzag μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα. Ο Gupta και

άλλοι [21], παρουσίασαν αντίστοιχα αποτελέσματα χρησιμοποιώντας το δυναμικό Tersoff-Brenner για να προσομοιώσουν την αλληλεπίδραση μεταξύ των ατόμων του άνθρακα. Οι Li και Chou [22] προσομοίωσαν την ελαστική παραμόρφωση μονότοιχων νανοσωλήνα άνθρακα υπό την επίδραση υδροστατικής πίεσης χρησιμοποιώντας μοριακή μηχανική των κατασκευών.

Οι μελέτες που συνδέονται με την ανάλυση της ευστάθειας των νανοσωλήνων άνθρακα δεν είναι τόσο πολλές όσο εκείνες που αφορούν τον προσδιορισμό των ελαστικών μηχανικών ιδιοτήτων τους. Ένα μοντέλο συνεχούς μέσου υιοθετήθηκε από τους Wang και Varadan [23] για την ανάλυση της ευστάθειας των νανοσωλήνων άνθρακα. Ο Zhang και άλλοι [24] χρησιμοποίησαν αναλυτικές μεθόδους για την πρόβλεψη των κρίσιμων θλιπτικών φορτίων λυγισμού νανοσωλήνων άνθρακα. Οι Cao και Chen [25] εξέτασαν συστηματικά την συμπεριφορά νανοσωλήνων άνθρακα σε κάμψη και λυγισμό χρησιμοποιώντας μοριακή δυναμική και πεπερασμένα στοιχεία. Ο Anpin και άλλοι [26] ανέπτυξαν διαδικασίες μοριακής δυναμικής για την αριθμητική επίλυση προβλημάτων λυγισμού ανάλογων νανοδομών. Ο Chang και άλλοι [27] χρησιμοποίησαν προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής, προκειμένου να εξετάσουν με συστηματικό τρόπο την επίδραση στην αναλογία μήκους-ακτίνας και μορφολογίας των νανοσωλήνων στο λυγισμό τους. Ο Hu και άλλοι [28] διερεύνησαν τα χαρακτηριστικά λυγισμού των νανοσωλήνων άνθρακα χρησιμοποιώντας μηχανική των κατασκευών και πεπερασμένα στοιχεία δοκού. Οι Li και Chou [29] προέβλεψαν την ελαστική συμπεριφορά των νανοσωλήνων άνθρακα σε λυγισμό υπό αξονικό θλιπτικό και καμπτικό φορτίο μέσω αριθμητικών διαδικασιών βασισμένων σε στοιχεία δοκού. Μέσω παρόμοιων τεχνικών, οι Ansari και Rouhi [30] μελέτησαν τον λυγισμό μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα υπό διάφορες συνοριακές συνθήκες. Τέλος, οι Su και Liu [31] διερεύνησαν τον λυγισμό πολύτοιχων νανοσωλήνων άνθρακα κάτω από στρεπτικές ροπές και ακτινικές πιέσεις με τη χρήση μηχανικής του συνεχούς μέσου.

Στη παρούσα εργασία προτείνεται μια ατομιστική μέθοδος βασιζόμενη στη μηχανική των κατασκευών για την αριθμητική μοντελοποίηση των εν λόγω νανοϋλικών. Η μηχανική των κατασκευών συνδυάζεται κατάλληλα με την ατομιστική δομή των συγκεκριμένων νανοδομών. Για την προσομοίωση των διατομικών αλληλεπιδράσεων υιοθετούνται ειδικά τρισδιάστατα δίκωμα πεπερασμένα στοιχεία ράβδου τριών βαθμών ελευθερίας ανά κόμβο, κατάλληλης γραμμικής δυσκαμψίας ώστε να περιγράψουν αξιόπιστα το εμφανιζόμενο δυναμικό πεδίο μεταξύ των

ατόμων άνθρακα. Η προτεινόμενη μέθοδος που παρουσιάζεται χαρακτηρίζεται ως απλοϊκή και μικρού υπολογιστικού κόστους. Η επίλυση των εξισώσεων γίνεται μέσω του εμπορικού λογισμικού πακέτου πεπερασμένων στοιχείων Lusas Fea [32]. Με τη χρήση της συγκεκριμένης αριθμητικής τεχνικής, μελετάται η μηχανική ελαστική συμπεριφορά μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα κάτω από μονοαξονικά, στρεπτικά και ακτινικά φορτία καθώς και η ευστάθεια τους κάτω από στρεπτικά και θλιπτικά μονοαξονικά φορτία. Μελετώνται ποικίλων μεγεθών zigzag, armchair και chiral νανοσωλήνες. Σε αυτό το σημείο πρέπει να τονισθεί ότι είναι η πρώτη φορά που προτείνεται η συγκεκριμένη μέθοδος για την πρόβλεψη της μηχανικής συμπεριφοράς νανοσωλήνων άνθρακα. Για το λόγο αυτό, πολλά από τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται, συγκρίνονται με ήδη δημοσιευμένο υλικό στη βιβλιογραφία, όπου αυτό είναι δυνατό. Οι συγκρίσεις αποδεικνύουν τη σύγκλιση και τη σταθερότητα της μεθόδου στην πρόβλεψη των ελαστικών ιδιοτήτων και των κρίσιμων φορτίων που προκαλούν την αστάθεια των νανοσωλήνων. Τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται αναλύονται παραμετρικά και είναι σαφώς επεξηγημένα.

1. ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΕΣ ΜΙΑ ΑΛΛΟΤΡΟΠΙΑ ΤΟΥ ΑΝΘΡΑΚΑ

1.1 Ο ΑΝΘΡΑΚΑΣ

Το χημικό στοιχείο άνθρακας (C) είναι το τέταρτο στοιχείο σε αφθονία ως προς τη μάζα του μετά το υδρογόνο, το ήλιο και το οξυγόνο και είναι το πιο διαδεδομένο σε όλους τους τύπους ζωής, ενώ στον άνθρωπο καταλαμβάνει το 18,5% της μάζας του σώματος του και είναι δεύτερο μετά το οξυγόνο. Επίσης διακρίνεται για την ικανότητα του να κάνει δεσμούς τόσο με τον εαυτό του, όσο και με άλλα χημικά στοιχεία με διαφορετικούς τρόπους. Έχει βρεθεί πως σχηματίζει περίπου 10.000.000 διαφορετικά μίγματα, τα περισσότερα από κάθε άλλο στοιχείο, γεγονός που το καθιστά βασικό στοιχείο όχι μόνο της οργανικής χημείας αλλά και της ζωής.

Η ποικιλομορφία των δεσμών του επιτρέπει τη δημιουργία διαφορετικών τύπων άνθρακα, που όλοι όμως είναι εξαιρετικά σταθεροί και απαιτείται υψηλή θερμοκρασία για να αντιδράσουν ακόμα και με το οξυγόνο. Οι φυσικές τους ιδιότητες εξαρτώνται από τη μορφή τους, ενώ εμφανίζει τρεις κύριες αλλοτροπικές μορφές που είναι το διαμάντι, ο γραφίτης και ο άμορφος άνθρακας, αλλά και κάποιες ακόμα εξωτικές αλλοτροπικές μορφές, οι οποίες ανακαλύφθηκαν αργότερα και στις οποίες ανήκουν τα φουλερένια, οι νανοσωλήνες άνθρακα, οι νανοϊνες, ο υαλώδης άνθρακας και ο νανοαφρός άνθρακα.

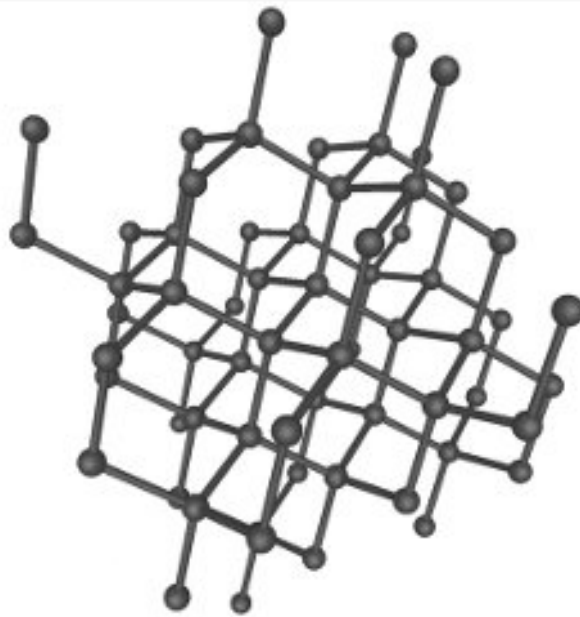
1.2 ΟΙ ΑΛΛΟΤΡΟΠΙΚΕΣ ΜΟΡΦΕΣ ΤΟΥ ΑΝΘΡΑΚΑ

1.2.1 Το διαμάντι

Η μορφή του διαμαντιού (Σχήμα 1.1) 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 [33], 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/cm³) συγκριτικά με το γραφίτη [34]. Επίσης εξαιτίας της φύσης των χημικών δεσμών δεν υπάρχουν ελεύθερα ηλεκτρόνια και συνεπώς δεν εμφανίζει θερμική και ηλεκτρική αγωγιμότητα.



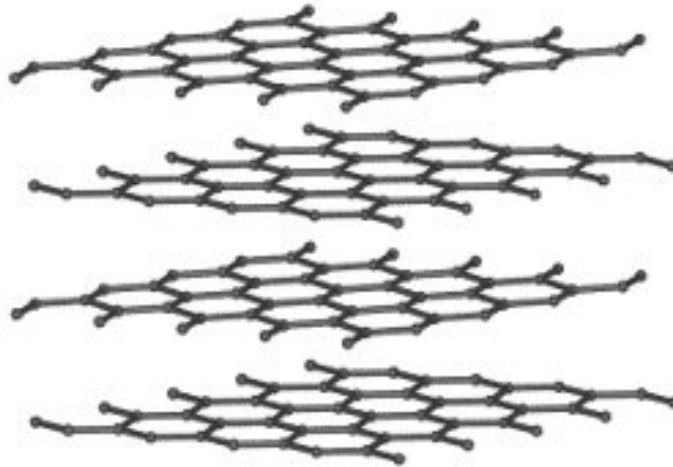
Σχήμα 1.1: Κρυσταλλική δομή διαμαντιού

Επιπρόσθετα πάνω από τους 800 °C παρουσία οξυγόνου καίγεται προς CO₂, ενώ πάνω από τους 1200 °C και απουσία O₂ μετατρέπεται σε γραφίτη.

1.2.2 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 1.2) 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).

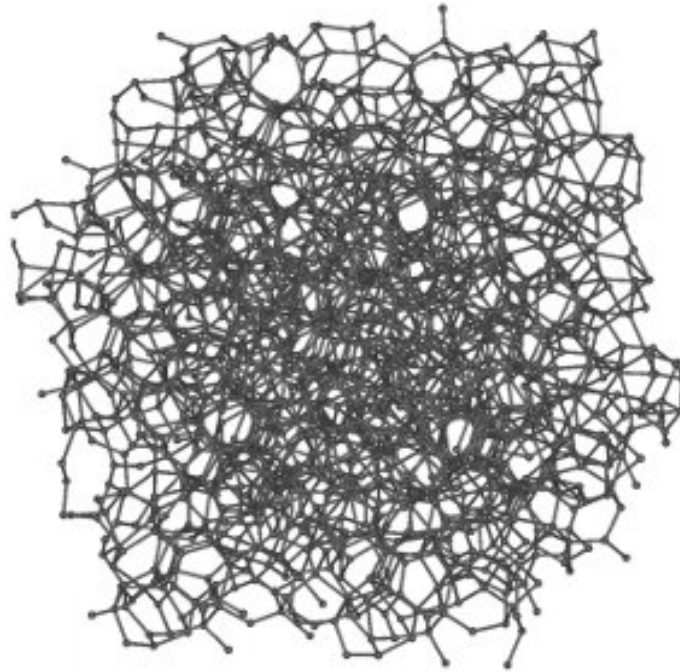


Σχήμα 1.2: Κρυσταλλική δομή γραφίτη

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 1.421Å , η σταθερά του πλέγματος είναι 2.426Å, ενώ στον κάθετο άξονα, όπου τα άτομα του άνθρακα συνδέονται με Van der Waals δυνάμεις, η σταθερά του πλέγματος είναι 6708Å και η απόσταση μεταξύ των στοιβάδων είναι 3.354Å.

1.2.3 Ο άμορφος άνθρακας

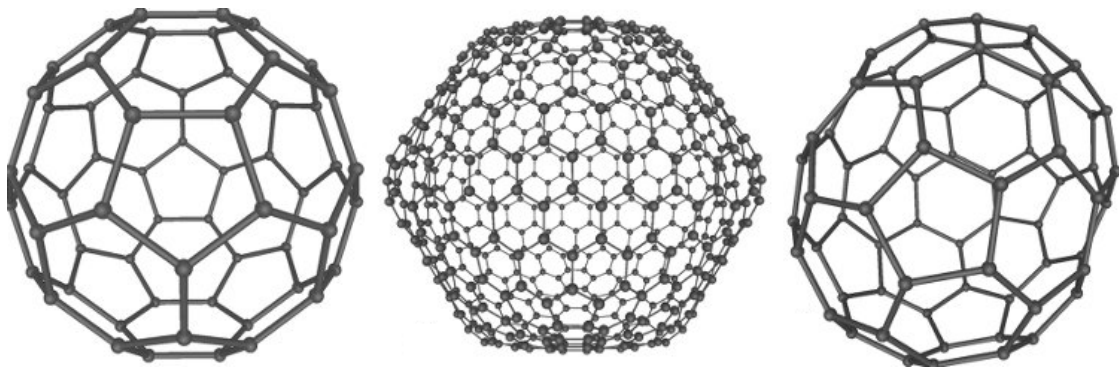
Τον όρο «άμορφος άνθρακας» τον χρησιμοποιούμε για να περιγράψουμε εκείνη τη μορφή του άνθρακα που δεν έχει κρυσταλλική δομή (Σχήμα 1.3). Όπως συμβαίνει σε όλα τα υαλώδη υλικά μπορεί να παρατηρηθεί μόνο μιας μικρής τάξης διάταξη (10Å) και όχι μιας μεγάλης κλίμακας διάταξη των ατομικών θέσεων. Πρόκειται 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 1.3: Άμορφη δομή άνθρακα

1.2.4 Τα φουλερένια

Μια από τη πιο πρόσφατη αλλοτροπική μορφή άνθρακα είναι το φουλερένια (Σχήμα 1.4). Πρόκειται για σταθερά μόρια ή συσσωματώματα ατόμων άνθρακα.



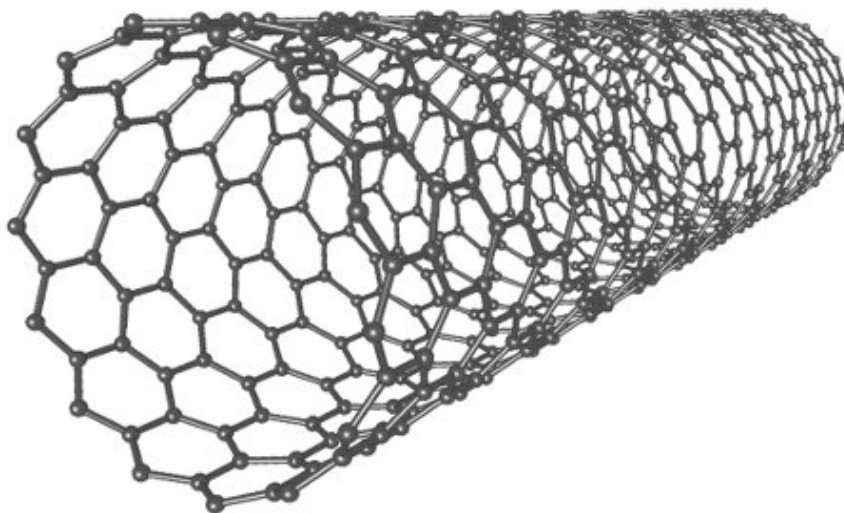
Σχήμα 1.4: Κρυσταλλική δομή φουλερενίων

Το φουλερένιο C₆₀ που ονομάζεται και φουλερίνα, πειραματικά παρατηρήθηκε το 1985 από τον Κροτο 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 γεωδαισικούς θόλους που είχαν σχεδιασθεί και κατασκευασθεί από τον αρχιτέκτονα Richard Buckminster Fuller. Το όνομα Buckminsterfullerene ή αλλιώς Buckyball δόθηκε αποκλειστικά στο μόριο C₆₀. Το 1990 η ομάδα των Kratschmer et al [35] βασιζόμενη στο C₆₀ δημιούργησε μια απλή μέθοδο για τη παραγωγή μεγάλων ποσοτήτων C₆₀ και C₇₀.

1.2.5 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 γραφικές 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 1.5).



Σχήμα 1.5: 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 [2,36], η διάμετρος των

οποίων έχει πολύ μικρότερο εύρος και κυμαίνεται μεταξύ 1 και 2 nm, 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.

1.2.6 Οι νανοϊνες άνθρακα

Οι νανοϊνες άνθρακα 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.

1.2.7 Υαλώδης άνθρακας

Ένας άλλος τύπος άνθρακα είναι ο υαλώδης, 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.

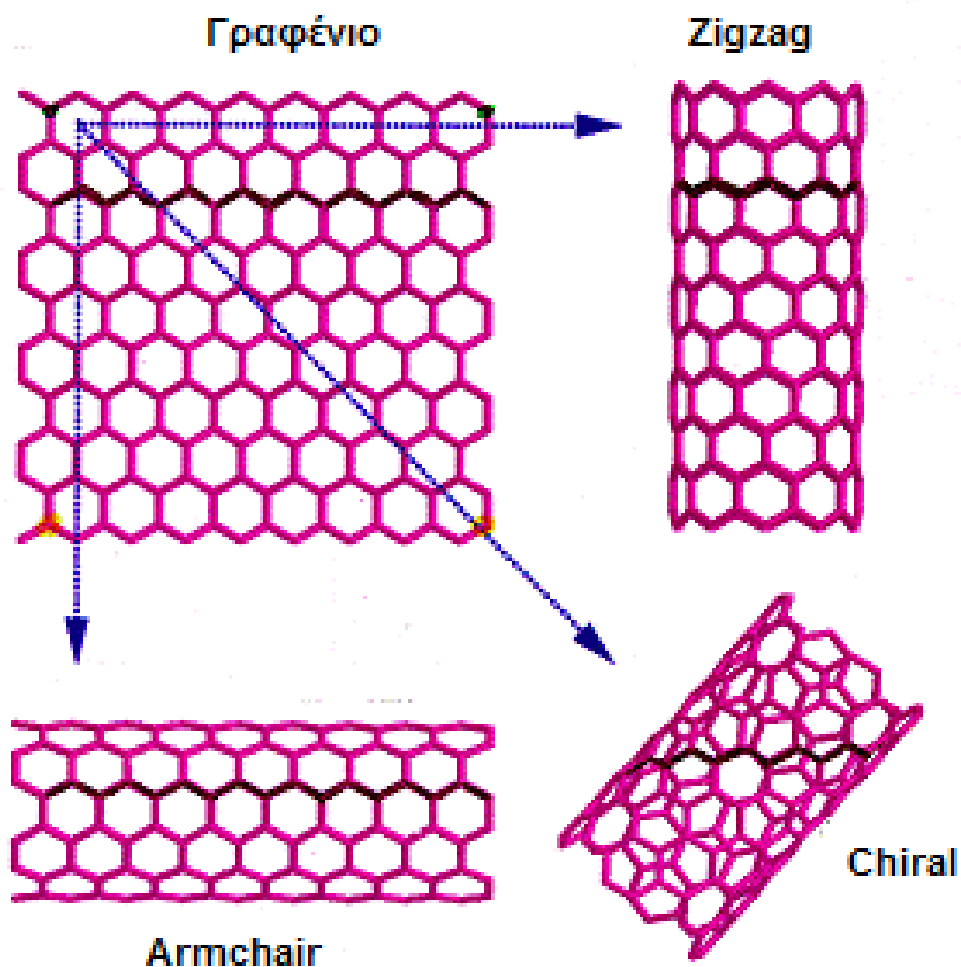
1.2.8 Νανοαφρός άνθρακα

Ο νανοαφρός άνθρακα είναι η πιο πρόσφατη αλλοτροπική μορφή άνθρακα, η οποία ανακαλύφθηκε το 1997 από τον Rode και τους συνεργάτες του [37]. 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.

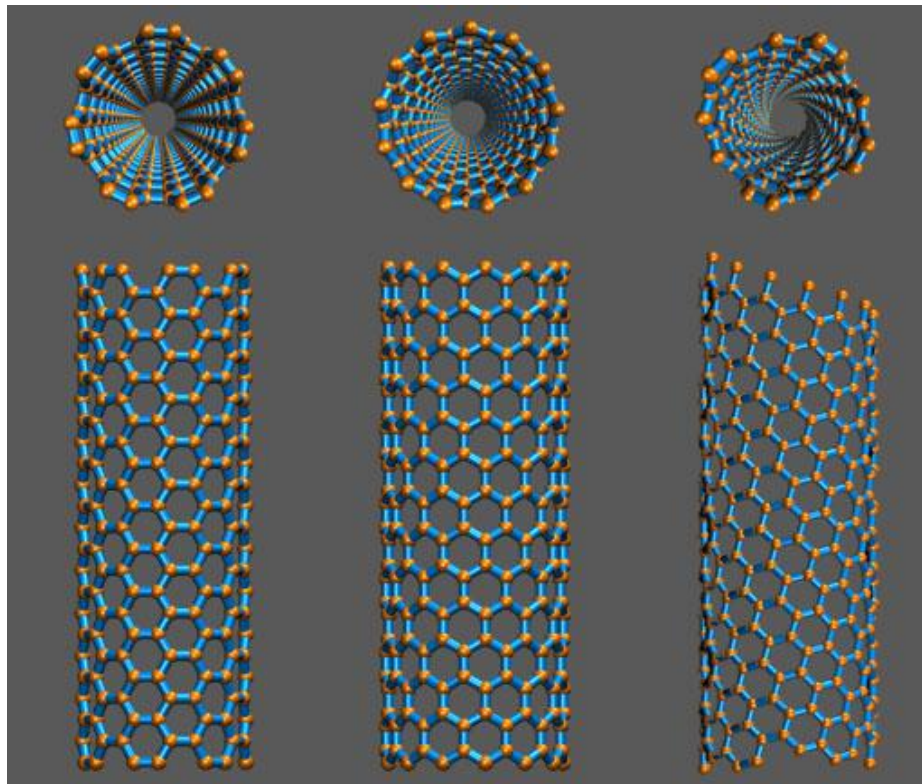
1.3 ΔΟΜΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ.

Ένας νανοσωλήνας άνθρακα προκύπτει από την τύλιξη ενός φύλλου γραφίτη (γραφένιο) σε κυλινδρική μορφή (Σχήμα 1.6).



Σχήμα 1.6: Σχηματικό διάγραμμα του τρόπου τύλιξης του εξαγωνικού πλέγματος γραφενίου για το σχηματισμό νανοσωλήνα

Βάσει της διάταξης των εξαγωνικών δακτυλίων που προσδιορίζει το βαθμό της περιστροφής στον κύλινδρο, προκύπτουν τρεις τύποι προσανατολισμού των ατόμων του άνθρακα στην περιφέρεια του νανοσωλήνα, οι οποίοι προσδιορίζονται ως α) armchair, β) zigzag και γ) chiral (Σχήμα 1.7).



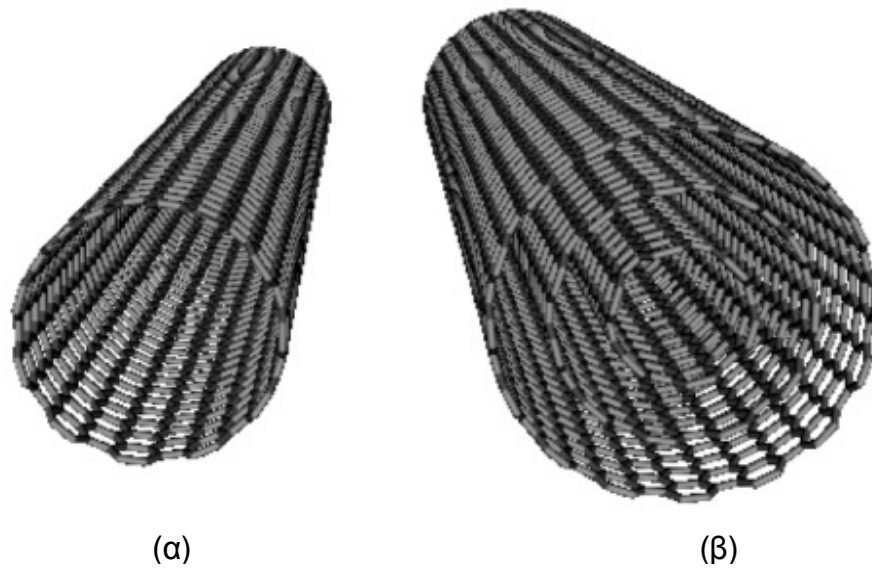
(α)

(β)

(γ)

Σχήμα 1.7: Μικροδομή ενός (α) armchair, (β) zigzag και (γ) chiral νανοσωλήνα άνθρακα

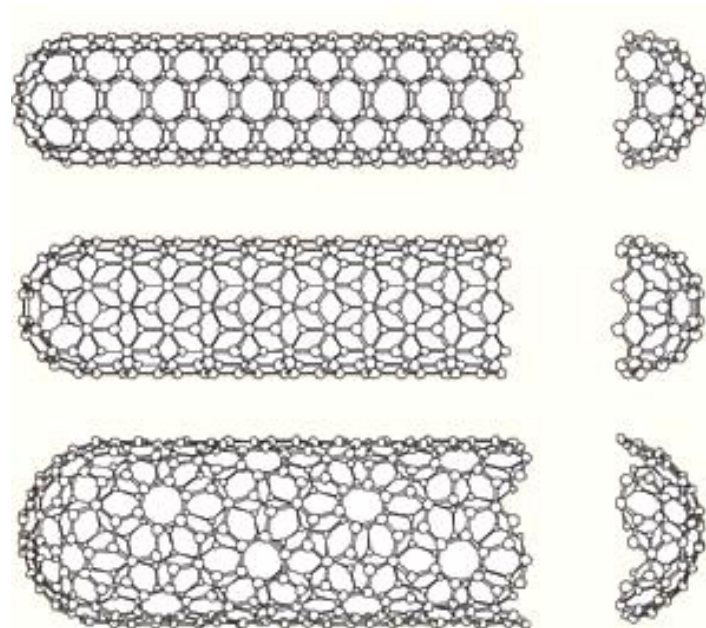
Οι νανοσωλήνες άνθρακα μπορούν να διαχωριστούν σε πολύτοιχους με ένα κεντρικό σωλήνα να περιβάλλεται από ένα ή περισσότερα στρώματα γραφίτη και σε μονότοιχους όπου υπάρχει ένας μόνο σωλήνας και καθόλου επιπλέον στρώματα γραφίτη (Σχήμα 1.8).



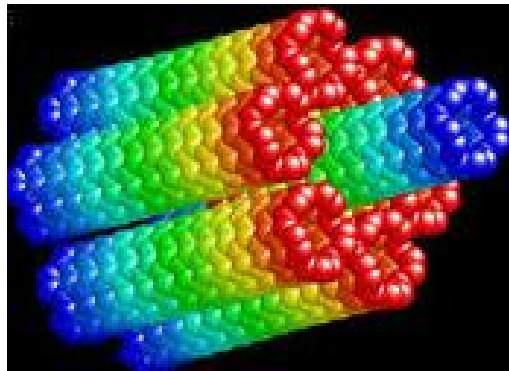
Σχήμα 1.8: Μικροδομή ενός (α) μονότοιχου και (β) ενός πολύτοιχου νανοσωλήνα άνθρακα

Όπως στο γραφίτη έτσι και στους νανοσωλήνες άνθρακα τα άτομα άνθρακα είναι sp^2 υβριδισμένα. Οι πολύτοιχοι νανοσωλήνες άνθρακα έχουν διάμετρο μέχρι 100 nm ενώ οι μονότοιχοι 1-2 nm. Τα κυλινδρικά φύλλα γραφίτη στους πολύτοιχους νανοσωλήνες απέχουν μεταξύ τους 3.4Å, όπως υπολογίστηκε από τεχνικές διάθλασης ηλεκτρονίων. Η τιμή αυτή είναι λίγο μεγαλύτερη από αυτή του γραφίτη που ισοδυναμεί με 3.35Å. Η διαφορά αυτή οφείλεται στη καμπυλότητα των κυλίνδρων αλλά και στους προαναφερθέντες δεσμούς Van der Waals μεταξύ των διαδοχικών στρωμάτων.

Τα άκρα των νανοσωλήνων μπορεί να είναι ανοιχτά ή κλειστά (Σχήμα 1.9). Τα άκρα τους είναι δυνατόν να τερματίζονται με καπάκια τα οποία προκύπτουν από συνδυασμό εξαγώνων και τουλάχιστον έξι πενταγώνων. Ο τερματισμός μπορεί να γίνει με καπάκι κωνικής μορφής ή και ημιδακτυλιοειδής μορφής. Όταν οι νανοσωλήνες ομαδοποιούνται έχουμε τις λεγόμενες συστοιχίες νανοσωλήνων άνθρακα (Σχήμα 1.10).



Σχήμα 1.9: Κλειστά άκρα νανοσωλήνα



Σχήμα 1.10: Συστοιχίες νανοσωλήνων άνθρακα

1.4 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 [38,39]. 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.

1.4.1 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 μεγάλά 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.

1.4.2 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 γραφικό φύλλο, στο οποίο όλα τα φαινόμενα μεταφοράς λαμβάνουν χώρα κατά μήκος του άξονα, η θερμική αγωγιμότητα που μετριέται 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 6500 W/mK. Συγκριτικά στο σημείο αυτό πρέπει να αναφερθεί πως η θερμική αγωγιμότητα του χαλκού, ο οποίος είναι τέλειος αγωγός έχει υπολογιστεί σε 401 W/mK.

1.4.3 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 ινών. Τέλος όσον αφορά τους μεμονωμένους νανοσωλήνες άνθρακα έχει παρατηρηθεί πως άγουν ηλεκτρόνια χωρίς καμία σκέδαση, σε μήκος μερικών μικρών, καθώς επίσης πως έχουν την ικανότητα να μεταφέρουν την υψηλότερη πυκνότητα φορτίου από οποιοδήποτε γνωστό υλικό, η οποία υπολογίζεται σε $109\text{A}/\text{cm}^2$.

1.4.4 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 υπέρυθο φάσμα. Η χρήση αυτής της ιδιότητας μπορεί να επιφέρει μεγάλη

εξέλιξη στις οπτικές συσκευές στις οποίες οι νανοσωλήνες άνθρακα μπορούν να παίξουν σημαντικό ρόλο.

1.4.5 Πιεζοηλεκτρικές ιδιότητες

Ένα πρωτοπόρο 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.

1.4.6 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.

1.4.7 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.

1.4.8 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.

1.5 ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΠΑΡΑΣΚΕΥΗΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ

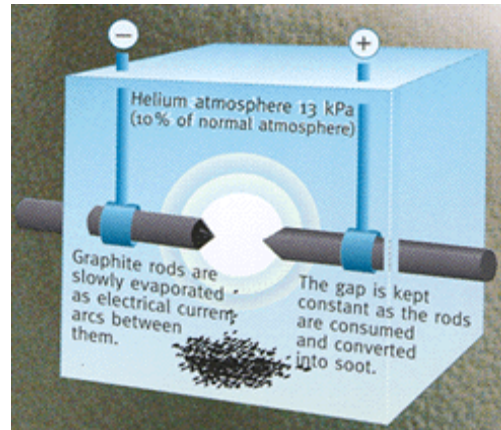
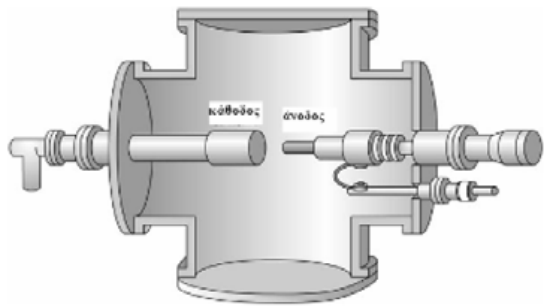
Από τότε που ανακαλύφθηκαν οι νανοσωλήνες άνθρακα περίπου πριν μία δεκαετία, έχουν αναπτυχθεί πολλές τεχνικές παραγωγής τους. Οι πρωταρχικές μέθοδοι σύνθεσης για νανοσωλήνες άνθρακα μονού και πολλαπλού τοιχίου είναι οι εξής:

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.

1.5.1 Εξάχνωση ηλεκτροδίων άνθρακα με τη χρήση ηλεκτρικού τόξου εκκένωσης

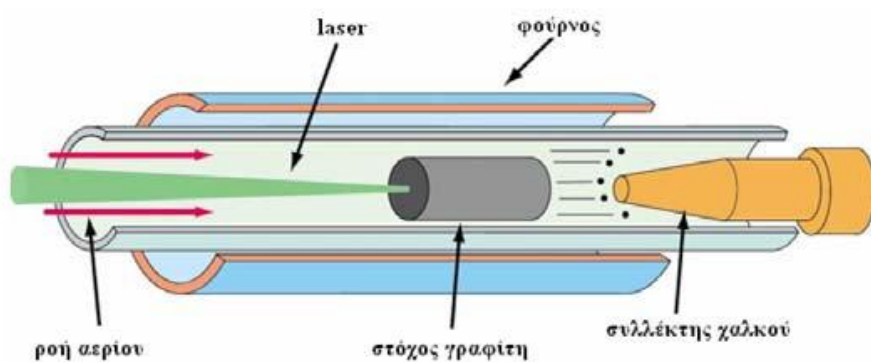
Ο Iijima πρώτος παρατήρησε τους νανοσωλήνες που παράγονται με την τεχνική ηλεκτρικής εκκένωσης τόξου. Όπως φαίνεται στο Σχήμα 1.11, αυτή η τεχνική, γενικά συνοδεύεται από την χρήση δύο υψηλής καθαρότητας γραφιτικών πόλων ως ανόδου και καθόδου. Οι πόλοι πλησιάζουν ο ένας τον άλλο υπό ατμόσφαιρα ηλίου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



Σχήμα 1.11: Σχηματική αναπαράσταση εξάχνωσης ηλεκτροδίων άνθρακα με τη χρήση ηλεκτρικού τόξου εκκένωσης

1.5.2 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.



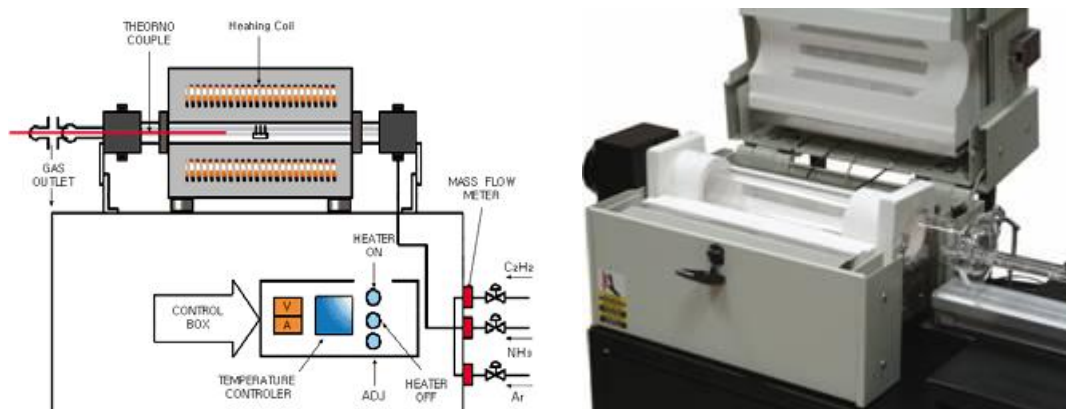
Σχήμα 1.12: Σχηματική αναπαράσταση διαδικασίας φωτοδιάσπασης γραφίτη με τη χρήση λέιζερ

Σε αυτήν την τεχνική, ένα laser χρησιμοποιείται για να φωτοδιασπά ένα γραφικό στόχο που συγκρατείται σε ένα φούρνο ελεγχόμενης ατμόσφαιρας σε θερμοκρασίες κοντά στους 1200 °C. Η διάταξη αυτής της τεχνικής φαίνεται στο Σχήμα 1.12. Για να παραχθούν νανοσωλήνες μονού τοιχώματος, ο γραφικός 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.

1.5.3 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 1.13). 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.



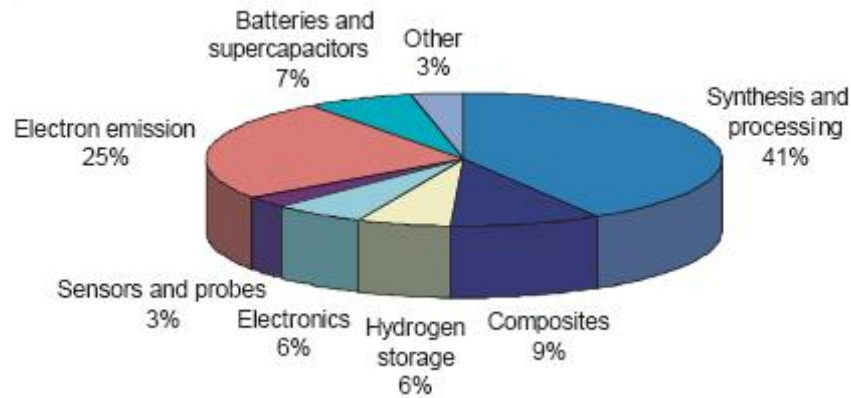
Σχήμα 1.13: Διάταξη CVD για τη παραγωγή νανοσωλήνων άνθρακα

1.5.4 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.

1.6 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 1.14 παρουσιάζεται η κατανομή των διεθνών διπλωμάτων ευρεσιτεχνίας που σχετίζονται με τους νανοσωλήνες άνθρακα.



Σχήμα 1.14: 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 ηλεκτρο-

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.

1.6.1 Αποθήκευση Ενέργειας

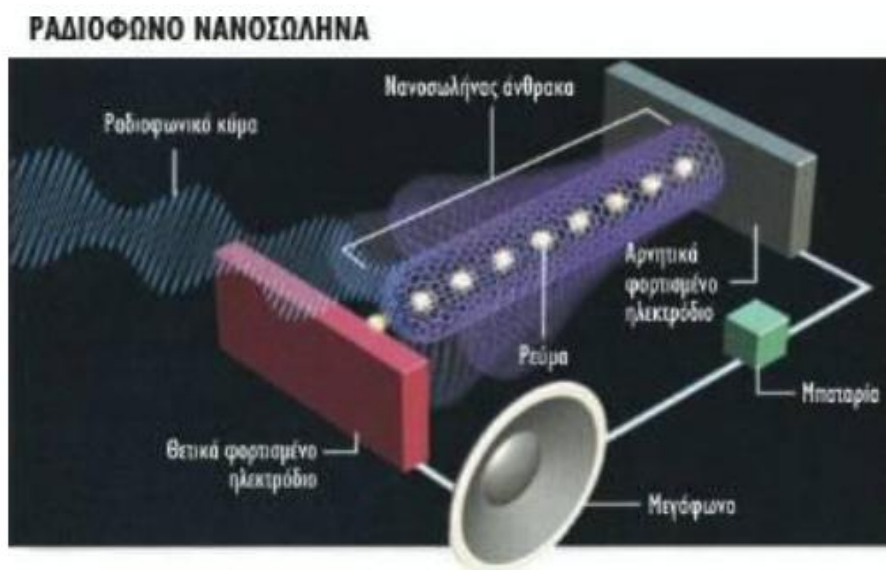
Ο γραφίτης, τα ανθρακούχα υλικά και τα ηλεκτρόδια από ίνες άνθρακα χρησιμοποιούνται συχνά στα κελιά καυσίμου (fuel cells), στις μπαταρίες και σε άλλες ηλεκτρομηχανικές εφαρμογές. Τα πλεονεκτήματα των νανοσωλήνων όσο αναφορά την αποθήκευση ενέργειας είναι οι μικρές τους διαστάσεις, η λεία επιφάνεια, και 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.

1.6.2 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 .

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



Σχήμα 1.15: Νανοσωλήνας άνθρακα ως ραδιοφωνικός δέκτης

Το ραδιόφωνο νανοσωλήνα άνθρακα (Σχήμα 1.15) 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 ναοσωλήνας άνθρακα που είναι ο πυρήνας του ναοραδιοφώνου, 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 Ζετλ και οι συνάδελφοί του κατασκεύασαν ένα πολύτοιχο ναοσωλήνα στην άκρη ενός ηλεκτροδίου, μια διάταξη όπου ο ναοσωλήνας μοιάζει με ιστό σημαίας στην κορυφή ενός λόφου. Επέλεξαν πολύτοιχο ναοσωλήνα επειδή μπορούσε να είναι μεγαλύτερος από άλλα είδη ναοσωλήνων και ήταν ευκολότερο να προσαρμοστεί στην επιφάνεια του ηλεκτροδίου. Ο ναοσωλήνας που χρησιμοποίησαν 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 ναοσωλήνα και το κοίλο ηλεκτρόδιο. Σε ένα κανονικό ραδιόφωνο, τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα επάγουν ένα ασθενές ηλεκτρικό ρεύμα μέσα στην κεραία, η οποία παραμένει σταθερή. Οι ναοσωλήνες, 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 ναοσωλήνα 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 ναοσωλήνας 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.

1.6.4 Σύνθετα Υλικά

Λόγω της υψηλής αντοχής και δυσκαμψίας τους οι νανοσωλήνες άνθρακα είναι ιδανικοί για δομικές εφαρμογές. Για παράδειγμα θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν ως ενίσχυση σε υψηλής αντοχής και χαμηλού βάρους σύνθετα υλικά.

Θεωρητικά οι μονότοιχοι νανοσωλήνες άνθρακα έχουν μέτρο ελαστικότητας 1TPa. Οι πολύτοιχοι είναι πιο αδύνατοι αφού οι διάφοροι κύλινδροι από τους οποίους αποτελούνται ολισθαίνουν ο ένας σε σχέση με τον άλλο. Σχοινιά αποτελούμενα από μονότοιχους νανοσωλήνες έχουν επίσης μικρότερη αντοχή. Αυτό συμβαίνει γιατί ο κάθε σωληνίσκος μπορεί να αποτραβηχτεί λόγω διάτμησης και τελικά το όλο σχοινί θα σπάσει. Οι νανοσωλήνες μπορούν να υπομείνουν μεγάλες παραμορφώσεις λόγω εφελκυσμού χωρίς να δείξουν σημάδια θραύσης. Σε άλλες διευθύνσεις οι νανοσωλήνες είναι εξαιρετικά ευλύγιστοι.

Βασιζόμενοι στις ιδιότητες τους μπορούμε να πούμε ότι οι νανοσωλήνες άνθρακα μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως ενισχύσεις στα σύνθετα υλικά. Παρόλα αυτά δεν έχουν υπάρξει πολλά επιτυχημένα πειράματα που να δείχνουν ότι οι νανοσωλήνες είναι καλύτερα υλικά ενίσχυσης από τις παραδοσιακές ίνες άνθρακα. Το κύριο πρόβλημα είναι η δημιουργία μιας καλής διεπιφάνειας ανάμεσα στους νανοσωλήνες και την πολυμερή μήτρα. Αυτό οφείλεται στην πολύ λεία επιφάνεια των νανοσωληνίων καθώς και στην πολύ μικρή τους διάμετρο η οποία είναι σχεδόν ίση με τη διάμετρο την πολυμερισμένης αλυσίδας. Επίσης τα συσσωματώματα των νανοσωληνίων, τα οποία σχηματίζονται κατά την ανάμιξη τους με την πολυμερή μήτρα, συμπεριφέρονται διαφορετικά στις φορτίσεις απ' ότι οι μεμονωμένοι νανοσωλήνες. Για να αντιμετωπιστεί αυτό το πρόβλημα τα συσσωματώματα θα πρέπει να σπάσουν και να διασκορπιστούν ή να δεθούν μεταξύ τους τα διάφορα

μόρια για να αποφευχθεί η ολίσθηση και να έχουμε ομαλή μεταφορά των φορτίων. Το κύριο πλεονέκτημα που αναμένεται με τη χρησιμοποίηση νανοσωλήνων άνθρακα στα σύνθετα υλικά πολυμερής μήτρας είναι η αύξηση της αντοχής τους σε κρούση. Οι νανοσωλήνες θα απορροφήσουν μεγάλο ποσοστό της ενέργειας λόγω της πολύ καλής ελαστικής συμπεριφοράς τους και της εξαιρετικής ευλυγισίας που διαθέτουν.

Άλλα πλεονεκτήματα στη χρησιμοποίηση νανοσωλήνες στα σύνθετα υλικά είναι η χαμηλή πυκνότητα, η αυξημένη ηλεκτρική αγωγιμότητα και η καλύτερη συμπεριφορά στα θλιπτικά φορτία και στην τριβολογία.

1.6.5 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 .

1.6.6 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.

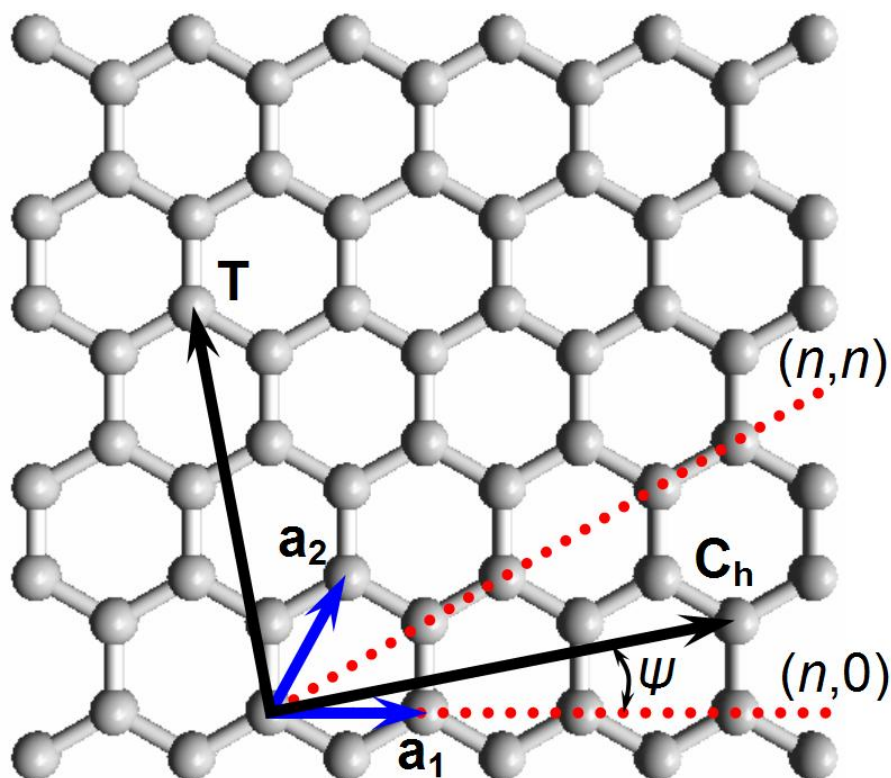
1.6.7 Βιοαισθητήρες

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. ΔΟΜΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΑ ΑΝΘΡΑΚΑ ΚΑΙ ΔΙΑΤΟΜΙΚΕΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ

2.1 ΝΑΝΟΔΟΜΗ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ

Μια αντιπροσωπευτική γεωμετρική δομή του γραφενίου φαίνεται στο Σχήμα 1.1. Οι χαρακτηριστικές διαστάσεις του είναι το μήκος κατά την κατακόρυφη διεύθυνση στην οποία υπάρχουν παράλληλες διατάξεις δεσμών τύπου armchair και την οριζόντια τύπου zigzag. Τα άτομα του άνθρακα στοιχειοθετούνται σε εξαγωνικές διατάξεις δεσμών, των οποίων το μήκος είναι r_0 και η γωνία που σχηματίζουν είναι 120° . Οι διατομικές αλληλεπιδράσεις είναι ομοιοπολικού τύπου sp^2 υβριδοποιημένων ηλεκτρονίων.



Σχήμα 2.1: Ατομική δομή ενός φύλλου γραφενίου

Οι ατομικές θέσεις (συντεταγμένες), στην κατάσταση ισορροπίας, για ένα Καρτεσιανό σύστημα συντεταγμένων, μπορούν να οριστούν από τα παρακάτω διανύσματα:

$$\mathbf{a}_1 = r_0 \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (2.1)$$

$$\mathbf{a}_2 = r_0 \begin{Bmatrix} \cos 60^\circ \\ \sin 60^\circ \end{Bmatrix} = r_0 \begin{Bmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{Bmatrix} \quad (2.2)$$

Ένας μονότοιχος νανοσωλήνας άνθρακα μπορεί να δημιουργηθεί όταν τυλίξουμε ένα φύλλο γραφίτη, το οποίο είναι ιδανικά κομμένο, ώστε να σχηματιστεί ένας κύλινδρος. Το φύλλο αυτό από γραφίτη πρέπει να είναι τυλιγμένο προς τη διεύθυνση ενός άξονα \mathbf{C}_h ο οποίος ορίζεται ως εξής (βλέπε Σχήμα 1):

$$\mathbf{C}_h = n\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 \quad (2.3)$$

Όπου το \mathbf{a}_1 και το \mathbf{a}_2 είναι τα διανύσματα που ορίζουν το κυψελοειδές πλέγμα που φαίνεται στο Σχήμα 1. Οι ακέραιοι αριθμοί (n,m) δηλώνουν τα βήματα κατά μήκος των zigzag δεσμών άνθρακα και γενικά χρησιμοποιούνται για να ονοματίσουν έναν νανοσωλήνα. Το μέγεθος του διανύσματος \mathbf{C}_h αντιπροσωπεύει την περιφέρεια των νανοσωλήνων:

$$pD = 2pR = |\mathbf{C}_h| = r_0 \sqrt{3(n^2 + nm + m^2)} \quad (2.4)$$

όπου D και R είναι η διάμετρος και η ακτίνα των νανοσωλήνων. Η παράμετρος r_0 η οποία λαμβάνεται ίση με 0.141nm δηλώνει, δηλώνει το μήκος του δεσμού άνθρακα-άνθρακα στην απαραμόρφωτη κατάσταση.

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

$$\tan y = \frac{\sqrt{3}m}{(2n+m)} \quad (2.5)$$

Είναι φανερό ότι για έναν armchair νανοσωλήνα η γωνία αυτή είναι ίση με $y = 30^\circ$, ενώ για την κατηγορία zigzag νανοσωλήνων είναι $y = 0^\circ$. Οι chiral νανοσωλήνες είναι τύπου (n,m) με $n \neq m$ και $0 < y < 30^\circ$. Η διάμετρος D των νανοσωλήνων δίδεται από τη παρακάτω εξίσωση:

$$D = \frac{r_0 \sqrt{3(n^2 + nm + m^2)}}{p} \quad (2.6)$$

Όπου r_0 είναι η απόσταση μεταξύ δύο γειτονικών ατόμων άνθρακα και είναι ίση με 0.01421 nm.

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

$$\mathbf{T} = \left(\frac{2m+n}{W} \right) \mathbf{a}_1 + \left(-\frac{2n+m}{W} \right) \mathbf{a}_2 \quad (2.7)$$

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

Στη παρούσα εργασία για λόγους απλότητας, οι αρχικές συντεταγμένες του φύλλου γραφίτη (x', y') , έχουν μετασχηματισθεί σε ένα νέο σύστημα συντεταγμένων (x, y, z) του νανοσωλήνα έτσι ώστε το \mathbf{T} ανήκει στο y' -άξονα. Οι συντεταγμένες έκαστου ατόμου του νανοσωλήνα προκύπτουν από τις αντίστοιχες ατομικές συντεταγμένες του φύλλου γραφίτη σύμφωνα με την εξίσωση μετασχηματισμού του Kojoczek και άλλων [40]:

$$(x, y, z) = \left(R \cos\left(\frac{x'}{R}\right), r \sin\left(\frac{x'}{R}\right), y' \right) \quad (2.8)$$

όπου R είναι η ακτίνα του νανοσωλήνα.

Το μέτρο του διανύσματος \mathbf{T} καθορίζει το μήκος των νανοσωλήνων άνθρακα:

$$L = |\mathbf{T}| = \frac{3r_0 \sqrt{3(n^2 + nm + m^2)}}{W} \quad (2.9)$$

Το πάχος των νανοσωλήνων θεωρείται ίσο με την απόσταση 0.34nm μεταξύ δύο φύλλων εξαγωνικών δακτυλίων σε ένα ακατέργαστο γραφίτη.

2.2 ΔΙΑΤΟΜΙΚΕΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΕΙΣ

Για να γίνει κατανοητή η απαρχή της μηχανικής συμπεριφοράς των νανοδομών, πρέπει να τονιστεί ότι υπάρχουν δυο κύριοι παράγοντες που την επηρεάζουν:

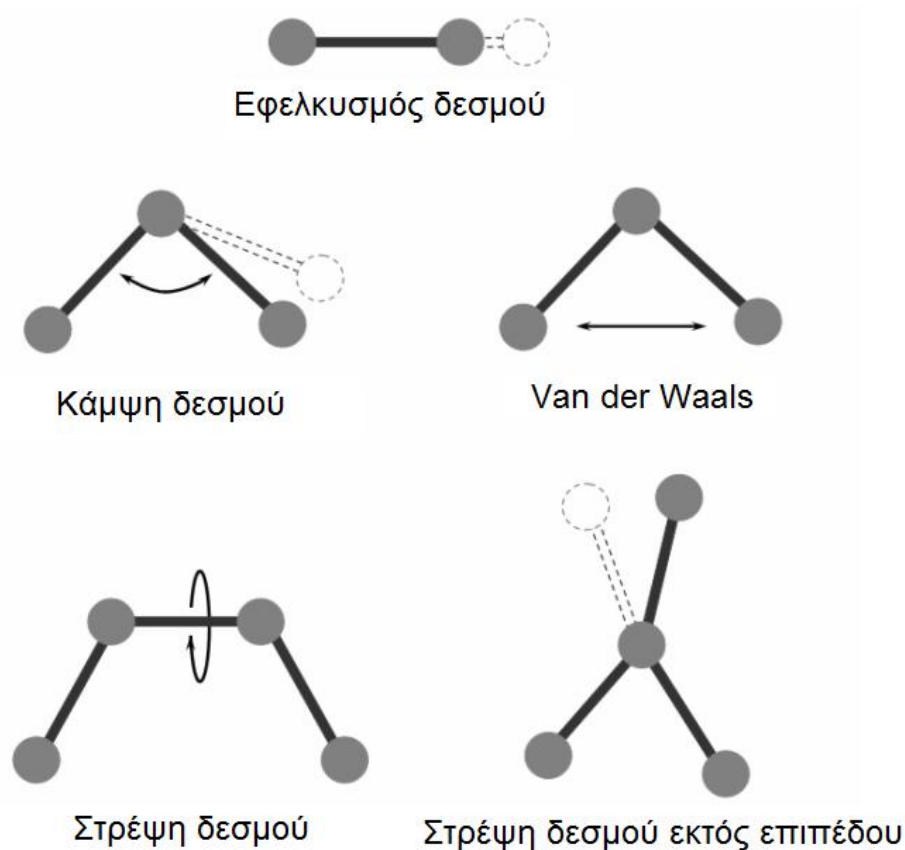
1. Οι δυνάμεις μεταξύ των ατόμων, οι οποίες και τα συγκρατούν στην συγκεκριμένη δομή.
2. Ο τρόπος διάταξης των ατόμων, δηλαδή η γεωμετρία της νανοδομής.

Υπάρχουν δυο είδη "δεσμών" μεταξύ των ατόμων: (α) οι κύριοι δεσμοί, οι οποίοι μπορεί να είναι ιοντικοί, ομοιοπολικοί ή μεταλλικοί και (β) οι δευτερεύοντες δεσμοί, οι οποίοι μπορεί να είναι αλληλεπιδράσεις van der Waals ή δεσμοί υδρογόνου. Οι δεσμοί της πρώτης κατηγορίας είναι ισχυροί, με σημείο τήξης μεταξύ των 1000 και 4000K, ενώ οι δεσμοί της δεύτερης κατηγορίας θεωρούνται ασθενείς, με σημείο τήξης μεταξύ των 100 και 500K. Τα κεραμικά και μεταλλικά υλικά δομούνται εξολοκλήρου με κύριους δεσμούς, και συγκεκριμένα με ιοντικούς και ομοιοπολικούς δεσμούς τα κεραμικά υλικά, ενώ με μεταλλικούς και ομοιοπολικούς δεσμούς τα μέταλλα. Στις αλλοτροπίες του άνθρακα, όπως το διαμάντι, το γραφένιο, οι γραφιτικές νυφάδες, οι νανοσωλήνες κτλ. οι κύριοι δεσμοί είναι ομοιοπολικού τύπου, ενώ ταυτόχρονα υπάρχουν και δευτερεύοντες αλληλεπιδράσεις και συγκεκριμένα αλληλεπιδράσεις van der Waals.

Ο ομοιοπολικός δεσμός βασίζεται στο ότι δυο άτομα μοιράζονται ηλεκτρόνια της εξωτερική στιβάδας. Η πιο απλή μορφή ενός ομοιοπολικού δεσμού βρίσκεται στο μόριο του υδρογόνου. Κατά την προσέγγιση των δυο πυρήνων υδρογόνου δημιουργείται μια νέα τροχιά, στην οποία τα δυο ηλεκτρόνια κινούνται και την οποία

μοιράζονται τα δυο άτομα. Η διαδικασία της κοινής χρήσης ηλεκτρονίων οδηγεί σε ελαχιστοποίηση της δυναμικής ενέργειας, και τη δημιουργία ενός σταθερού δεσμού.

Για την προσομοίωση της νανοδομής ενός υλικού μέσω μεθοδολογιών μοριακής μηχανικής είναι σημαντική η περιγραφή και διατύπωση των δυνάμεων που επικρατούν μεταξύ των μεμονωμένων ατόμων. Η περιγραφή αυτή χαρακτηρίζεται από το δυναμικό πεδίο. Συνήθως, το δυναμικό πεδίο εκφράζεται από μια μορφή δυναμικής ενέργειας. Η δυναμική ενέργεια, παραβλέποντας την ηλεκτροστατική αλληλεπίδραση, αποτελεί ένα άθροισμα ενεργειών που οφείλονται στις διατομικές αλληλεπιδράσεις, οι οποίες παρουσιάζονται στο Σχήμα 2.2.



Σχήμα 2.2: Διατομικές αλληλεπιδράσεις ατόμων άνθρακα

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

Το αναπτυσσόμενο πεδίο δυνάμεων χαρακτηρίζεται από μία δυναμική ενέργεια. Η συγκεκριμένη δυναμική ενέργεια, παραλείποντας τις ηλεκτροστατικές αλληλεπιδράσεις, ορίζεται ως το άθροισμα των ενεργειών ένεκα των διατομικών αλληλεπιδράσεων, οι οποίες απεικονίζονται στο Σχήμα 2 και μπορεί να εκφραστεί από την παρακάτω εξίσωση [41]:

$$U = \sum U_r + \sum U_q + \sum U_f + \sum U_w + \sum U_{vdw} \quad (2.10)$$

όπου ο όρος U_r αναπαριστά την ενέργεια εξαιτίας του εφελκυσμού του δεσμού, ο όρος U_q εκφράζει την ενέργεια εξαιτίας της κάμψης της γωνίας δεσμού, U_f είναι η ενέργεια εξαιτίας της δίεδρης γωνίας στρέψης του δεσμού, U_w είναι η ενέργεια λόγω της στρέψης εκτός επιπέδου ενός δεσμού και τέλος ο όρος U_{vdw} δηλώνει την ενέργεια που οφείλεται στους δεσμούς van der Waals.

Υποθέτοντας μικρές μετατοπίσεις, η αρμονική προσέγγιση της παραπάνω εξίσωσης είναι επαρκής για να περιγράψουμε την δυναμική ενέργεια και επομένως το αντίστοιχο αναπτυσσόμενο δυναμικό πεδίο. Υιοθετώντας τους απλούστερους δυναμικούς όρους και συγχωνεύοντας την ενέργεια U_q και U_f σε μια ισοδύναμη U_t , οι ακόλουθοι όροι είναι επαρκείς να περιγράψουν την συνολική δυναμική ενέργεια:

$$U_r = \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2 \quad (2.11)$$

$$U_q = \frac{1}{2} k_q (\Delta q)^2 \quad (2.12)$$

$$U_t = U_f + U_w = \frac{1}{2} k_t (\Delta f)^2 \quad (2.13)$$

όπου οι όροι k_r , k_q και k_t δηλώνουν την σταθερά εφελκυσμού δεσμού, την σταθερά κάμψης γωνίας δεσμού και την σταθερά στρέψης δεσμού, αντιστοίχως. Τέλος Δr , Δq και Δf αναπαριστούν τη μεταβολή του μήκους δεσμού, της γωνίας

κάμψης δεσμού και της γωνιάς στρέψης δεσμού, αντίστοιχα. Οι σταθερές δυσκαμψίας σύμφωνα με τη μοριακή χημεία έχουν τις εξής τιμές: $k_r = 6.52 \times 10^{-7} \text{ Nnm}^{-1}$, $k_q = 8.76 \times 10^{-10} \text{ Nnm rad}^{-2}$ και $k_t = 2.78 \times 10^{-10} \text{ Nnm rad}^{-2}$ [41].

Αντικαθιστώντας τις Εξισώσεις (2.11) έως (2.13) στην (2.10) προκύπτει η συνολική δυναμική ενέργεια του συστήματος:

$$U = \sum \frac{1}{2} k_r (\Delta r)^2 + \sum \frac{1}{2} k_q (\Delta q)^2 + \sum \frac{1}{2} k_t (\Delta f)^2 \quad (2.14)$$

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

3. ΠΡΟΤΕΙΝΟΜΕΝΗ ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΕΘΟΔΟΣ

Η μέθοδος που χρησιμοποιήθηκε για την αριθμητική επίλυση της εξίσωσης (2.14) που εκφράζει την κατάσταση παραμόρφωσης ενός μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα, είναι η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων. Για το σκοπό αυτό υιοθετήθηκε το εμπορικό λογισμικό πακέτο πεπερασμένων στοιχείων Lusas Fea [32] λόγω της φιλικότητας που παρουσιάζει απέναντι στην χρήση για την αντιμετώπιση προβλημάτων μηχανικής των κατασκευών.

3.1 Η ΜΕΘΟΔΟΣ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ

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

Η αναλυτική λύση των εξισώσεων με τις οποίες περιγράφονται τα διάφορα τεχνικά προβλήματα είναι δυνατή μόνο σε ειδικές περιπτώσεις, όπου οι καταπονήσεις και τα γεωμετρικά σχήματα είναι πάρα πολύ απλά. Όμως, υπήρχε η ανάγκη να λυθούν και πιο σύνθετα προβλήματα και γι' αυτό το λόγο αναπτύχθηκαν διάφορες προσεγγιστικές μέθοδοι.

Μία τέτοια μέθοδος είναι και η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων. Αυτή η μέθοδος είναι μεν προσεγγιστική, αλλά μπορεί να δώσει αξιόπιστα αποτελέσματα και έχει το πλεονέκτημα ότι μπορεί να εφαρμοστεί σε όλα τα προβλήματα. Το μειονέκτημά της είναι οι αυξημένες απαιτήσεις σε υπολογιστική ισχύ, ιδίως όταν εφαρμόζεται σε σύνθετα μοντέλα. Αυτό όμως το μειονέκτημα ξεπεράστηκε τα τελευταία χρόνια χάρη στη ραγδαία ανάπτυξη των υπολογιστών. Η επιτυχία αυτής της μεθόδου ήταν τόσο μεγάλη, που ακόμα και σήμερα χρησιμοποιείται στην έρευνα και στην βιομηχανία για τον υπολογισμό και τη μελέτη διάφορων κατασκευών.

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

Για να εφαρμοστεί η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων απαιτούνται τα εξής στάδια:

1. Εισάγεται η γεωμετρία της κατασκευής και δημιουργείται το τρισδιάστατο μοντέλο.
2. Χωρίζεται το μοντέλο σε κατάλληλα πεπερασμένα στοιχεία και αφού ετοιμαστεί το πλέγμα επιλέγεται το είδος της επίλυσης και εισάγονται τα επιπλέον δεδομένα που απαιτούνται. Παραδείγματος χάριν, αν επιλεγεί να λυθεί το μοντέλο σε στατική καταπόνηση θα πρέπει να δοθούν τα δεδομένα για τις δυνάμεις και τις στηρίξεις. Αυτή η διαδικασία γίνεται με προγράμματα που αποκαλούνται που αποκαλούνται προεπεξεργαστές.
3. Όταν ετοιμαστούν τα δεδομένα για επίλυση, εισάγονται σε ένα πρόγραμμα το ποίο θα κάνει την επίλυση του προβλήματος. Τέτοιου είδους προγράμματα λέγονται επεξεργαστές ή επιλυτές και χρησιμοποιούν για τις επιλύσεις αριθμητικές μεθόδους.
4. Όταν τελειώσει η επίλυση τα αποτελέσματα πρέπει να χρησιμοποιηθεί ένα πρόγραμμα, που αποκαλείται μετεπεξεργαστής, για να μπορέσει ο μελετητής να δει τα αποτελέσματα.

3.2 ΠΕΔΙΟ ΔΥΝΑΜΕΩΝ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΑ ΑΝΘΡΑΚΑ

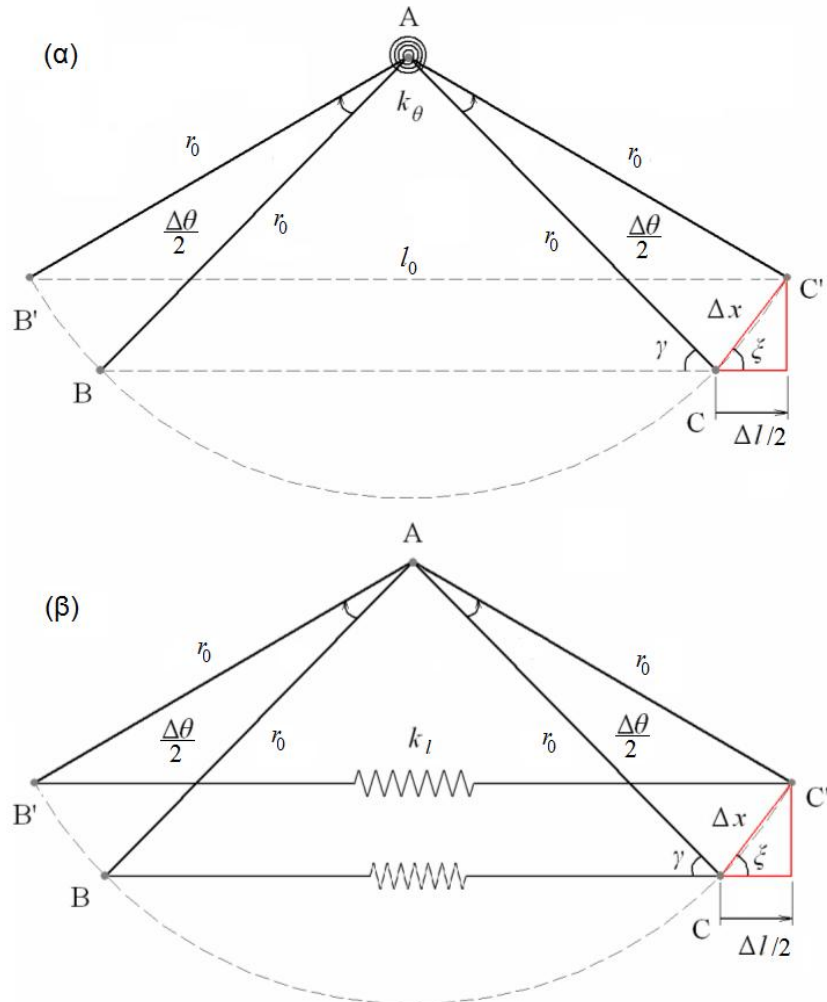
Για τον ορισμό της δύναμης εφελκυσμού του δεσμού συναρτήσει της μεταβολής του μήκους του, πρέπει να πραγματοποιηθεί μερική παραγωγή στο αντίστοιχο δυναμικό. Με διαφόριση της εξίσωσης (2.11), προκύπτει η σχέση μεταξύ δύναμης εφελκυσμού και μεταβολής μήκους δεσμού:

$$F(\Delta r) = \frac{\partial U_r}{\partial \Delta r} = k_r \Delta r \quad (3.1)$$

Διαφορίζοντας την εξίσωση (2.12), προκύπτει η σχέση μεταξύ ροπής κάμψης και μεταβολής της γωνίας κάμψης δεσμού:

$$M(\Delta \theta) = \frac{\partial U_q}{\partial \Delta q} = k_q \Delta \theta \quad (3.2)$$

Για λόγους απλοστευσης, η διατομική αλληλεπίδραση της γωνίας κάμψης δεσμού μπορεί να αναπαρασταθεί ισοδύναμα με μια αλληλεπίδραση μεταβολής του μήκους μεταξύ των απέναντι ατόμων άνθρακα μιας C-C-C νανοδομής.



Σχήμα 3.1: Η ισοδύναμη παραμόρφωση κάμψης της μικροδομής C-C-C θεωρώντας: (α) μια καμπτική δυσκαμψία και (β) μια διαμήκη δυσκαμψία

Για να γίνει αυτό εφικτό ας υποθέσουμε, βάσει το Σχήματος 3.1(α), ότι μια C-C-C νανοδομή παραμορφώνεται από την ABC μορφή στην AB'C' υπό την αντίσταση μιας καμπτικής δυσκαμψίας k_θ . Στη συνέχεια, ας υποθέσουμε βάσει του Σχήματος 3.1(β), ότι η νανοδομή C-C-C εξαναγκάζεται σε μια ταυτόσημη παραμόρφωση AB'C' από την αρχική κατάσταση ABC και ότι σε αυτή τη περίπτωση μια δυσκαμψία k_l αντιστέκεται στη σχετική μετατόπιση των απέναντι ατόμων της C-C-C νανοδομής.

Για μικρές παραμορφώσεις μπορεί να ένα αποδειχθεί ότι:

$$\Delta x = r_0 \frac{\Delta q}{2} \quad (3.3)$$

$$\cos(x) = \cos(90^\circ - g) = \sin(g) = \frac{\Delta l}{2\Delta x} \quad (3.4)$$

όπου l_0 είναι η απόσταση μεταξύ των απέναντι ατόμων στη απαραμόρφωτη C-C-C νανοδομή και Δl η μεταβολή της στη παραμορφωμένη κατάσταση.

Η δυναμική ενέργεια που αποθηκεύεται στη C-C-C νανοδομή του Σχήματος 3(α) είναι:

$$U = \frac{1}{2} k_q (\Delta q)^2 \quad (3.5)$$

Η αντίστοιχη ενέργεια για το Σχήμα 3(β) είναι:

$$U = \frac{1}{2} k_l (\Delta l)^2 \quad (3.6)$$

Εξισώνοντας τα δεξιά μέλη των εξισώσεων (3.5), (3.6) και αντικαθιστώντας τις εξισώσεις (3.3) και (3.4), προκύπτει η ακόλουθη εξίσωση όσον αφορά την ισοδύναμη σταθερά δυσκαμψίας η οποία δύναται να χρησιμοποιηθεί εναλλακτικά για τη προσομοίωση της κάμψης μεταξύ των δεσμών στη C-C-C νανοδομή :

$$k_l = \left(\frac{1}{r_0 \sin(g)} \right)^2 k_q \quad (3.7)$$

όπου $g = 30^\circ$ στο εξαγωνικούς δακτυλίους του φύλου γραφίτη. Η γωνία αυτή έχει μεταβλητή τιμή για κάθε C-C-C νανοδομή ενός νανοσωλήνα άνθρακα. Αυτό οφείλεται στην κυλινδρική μορφή του νανοσωλήνα.

Βάσει της γεωμετρίας στο Σχήμα 3.1, η (3.7) μπορεί να γραφεί και ως:

$$k_l = \left(\frac{1}{(r_0)^2 - 0.25(l_0)^2} \right) k_q \quad (3.8)$$

Επομένως η (3.2) για μικρές παραμορφώσεις μπορεί να γραφεί ισοδύναμα ως:

$$F(\Delta l) = k_l \Delta l \quad (3.9)$$

Η τελευταία εξίσωση αποτελεί μια σχέση μεταξύ δύναμης και μεταβολής της απόστασης μεταξύ των απέναντι ατόμων σε μια C-C-C νανοδομή, η οποία μπορεί να αναπαραστήσει ισοδύναμα την διατομική αλληλεπίδραση της κάμψης δεσμού. Κάθε εξαγωνικός δακτύλιος σε έναν νανοσωλήνα άνθρακα περιλαμβάνει έξι C-C-C σχηματισμούς. Ως εκ τούτου, έξι δυσκαμψίες k_l πρέπει να εφαρμοστούν σε κάθε εξαγωνικό δακτύλιο.

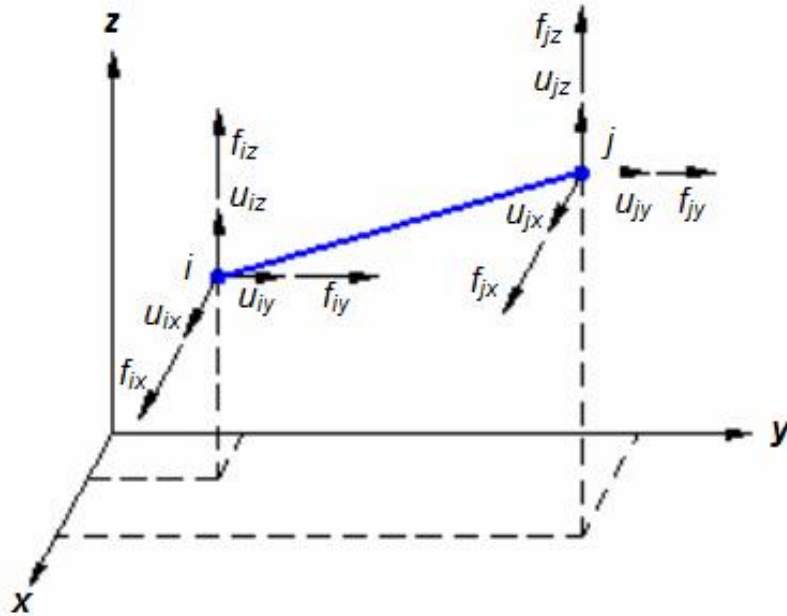
Τέλος, η σχέση μεταξύ στρεπτικής ροπής και μεταβολής της γωνίας στρέψης δεσμού προκύπτει από μερική παραγωγή της εξίσωσης (2.13):

$$M(\Delta f) = \frac{\partial U_f}{\partial \Delta f} = k_t \Delta f \quad (3.10)$$

Η τελευταία σχέση, η οποία αποδείχθηκε ότι ασκεί μικρή επιρροή στη πρόβλεψη των ελαστικών μηχανικών ιδιοτήτων των νανοσωλήνων άνθρακα [19], μπορεί να παραληφθεί εφόσον είναι απόντα στρεπτικά φαινόμενα μεταξύ των ατόμων άνθρακα. Καθότι στα προβλήματα που εξετάζονται στη παρούσα πτυχιακή δεν επιβάλλεται ή δεν παρατηρείται στρέψη δεσμού, είναι σκόπιμο να ληφθούν υπόψη μόνο οι σχέσεις (3.1) και (3.9) κατά την αριθμητική μοντελοποίηση των νανοσωλήνων.

3.3 ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΑ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΡΑΒΔΟΥ

Τα πεπερασμένα στοιχεία ράβδου που χρησιμοποιούνται στην παρούσα ανάλυση απεικονίζονται στο Σχήμα 3.2.



Σχήμα 3.2: Τρισδιάστατα στοιχεία ράβδου και βαθμοί ελευθερίας τους

Τα πεπερασμένα στοιχεία που χρησιμοποιούνται:

1. Είναι γραμμικά.
2. Είναι ευθύγραμμα.
3. Είναι τρισδιάστατα.
4. Είναι δίκομβα.
5. Έχουν τρεις βαθμούς ελευθερίας ανά κόμβο (τρεις μετατοπίσεις).
6. Οι βαθμοί ελευθερίας τους εκφράζονται σε ένα καθολικό παγκόσμιο σύστημα συντεταγμένων (x, y, z) .
7. Το τοπικό σύστημα συντεταγμένων τους $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ είναι έτσι τοποθετημένο ώστε ο \bar{x} -άξονας να περνά από τους δύο κόμβους τους.
8. Παρέχουν δυσκαμψία μόνο κατά τον \bar{x} -άξονα του τοπικού συστήματος συντεταγμένων τους.
9. Έχουν συμμετρικό μητρώο δυσκαμψίας.
10. Για τον ορισμό του μητρώου δυσκαμψίας τους απαιτείται η επιφάνεια της διατομής τους A και το μέτρο ελαστικότητας τους E .

Εφαρμόζοντας την συμβατική φόρμουλα μετατόπισης, η εξίσωση ισορροπίας ενός τέτοιου στοιχείου ράβδου εκφρασμένη στο τρισδιάστατο τοπικό σύστημα συντεταγμένων $(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z})$ του, μπορεί να γραφτεί ως εξής:

$$\mathbf{K}_{xyz}^e \mathbf{u}_{xyz}^e = \mathbf{f}_{xyz}^e \quad (3.11)$$

όπου ο εκθέτης e δηλώνει το συγκεκριμένο στοιχείο ράβδου, ο όρος \mathbf{K}_{xyz}^e δηλώνει το γενικευμένο μητρώο δυσκαμψίας του στοιχείου, ο όρος \mathbf{u}_{xyz}^e το γενικευμένο διάνυσμα μετατοπίσεων και ο όρος \mathbf{f}_{xyz}^e το γενικευμένο διάνυσμα δυνάμεων. Το γενικευμένο μητρώο δυσκαμψίας, το διάνυσμα μετατοπίσεων και δυνάμεων γράφονται αντίστοιχα:

$$\mathbf{K}_{xyz}^e = \begin{bmatrix} \mathbf{k}_{xyz}^e & -\mathbf{k}_{xyz}^e \\ -\mathbf{k}_{xyz}^e & \mathbf{k}_{xyz}^e \end{bmatrix} \quad (3.12)$$

$$\mathbf{u}_{xyz}^e = [u_{xi}^e \quad u_{yi}^e \quad u_{zi}^e \quad u_{xj}^e \quad u_{yj}^e \quad u_{zj}^e]^T \quad (3.13)$$

$$\mathbf{f}_{xyz}^e = [f_{xi}^e \quad f_{yi}^e \quad f_{zi}^e \quad f_{xj}^e \quad f_{yj}^e \quad f_{zj}^e]^T \quad (3.14)$$

όπου i και j είναι οι δύο κόμβοι του στοιχείου e και:

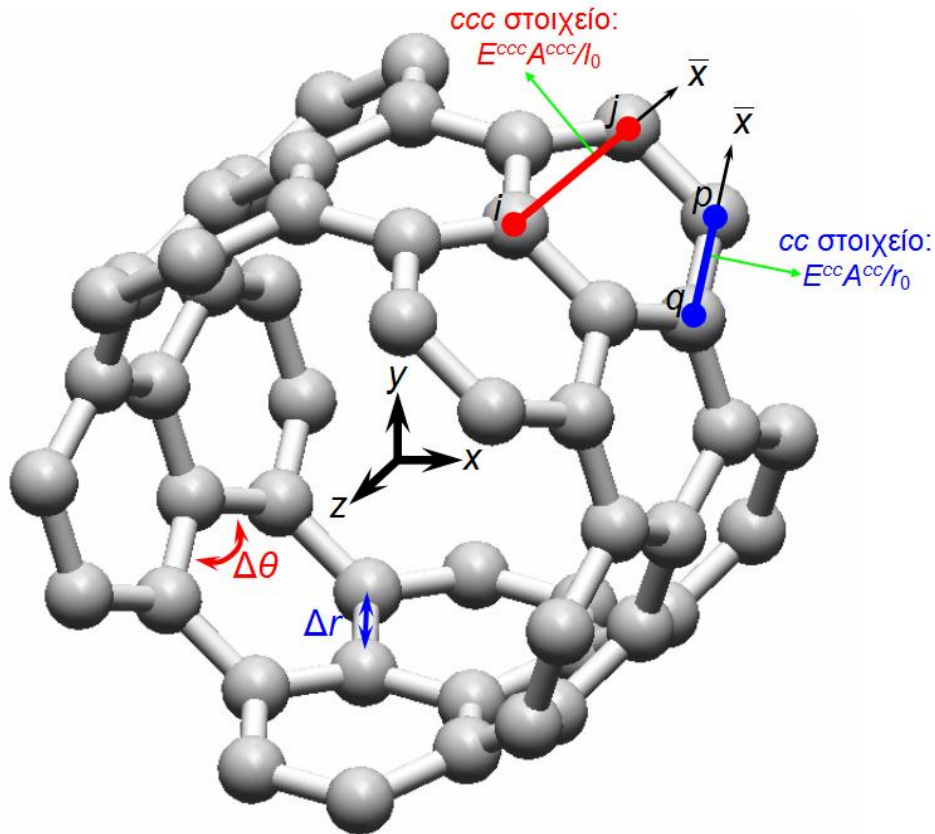
$$\mathbf{k}_{xyz}^e = \frac{E^e A^e}{L^e} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

όπου οι παράμετροι E^e , A^e και L^e υποδηλώνουν το μέτρο ελαστικότητας, την επιφάνεια διατομής και το μήκος του στοιχείου e , αντίστοιχα.

3.4 ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΜΗΧΑΝΙΚΗΣ ΣΥΜΠΕΡΙΦΟΡΑΣ ΜΟΝΟΤΟΙΧΟΥ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΑ ΑΝΘΡΑΚΑ

Τα άτομα άνθρακα αναπαρίστανται ως κόμβοι. Η θέση τους στον τρισδιάστατο χώρο για ένα συγκεκριμένο μονότοιχο νανოსωλήνα άνθρακα (n,m) καθορίζεται από

την σχέση (2.8) και από την γνωστή γεωμετρία του φύλλου γραφίτη. Αυτά τα κομβικά σημεία συνδέονται κατάλληλα πεπερασμένα στοιχεία ράβδου (Σχήμα 3.2) κατάλληλης δυσκαμψίας έτσι ώστε να περιγράψουν με ακρίβεια τις διατομικές αλληλεπιδράσεις που αναφέρθηκαν παραπάνω.



Σχήμα 3.3: Γεωμετρία ενός μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα, διατομικές αλληλεπιδράσεις και μοντελοποίηση αυτών με στοιχεία ράβδων

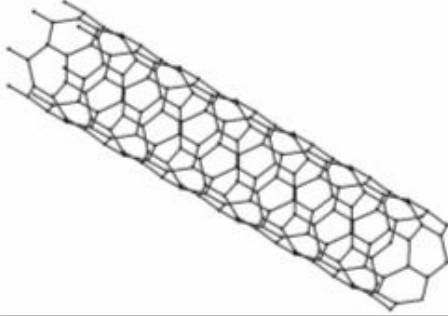
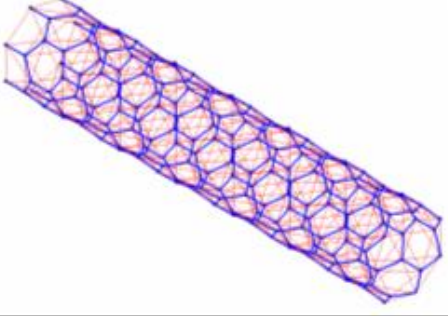
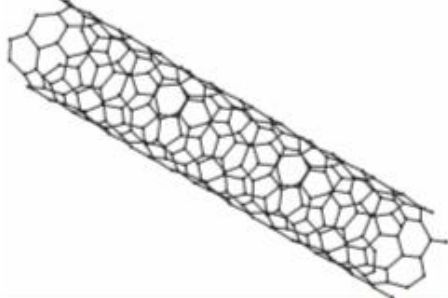
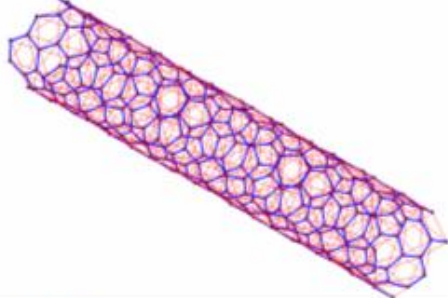
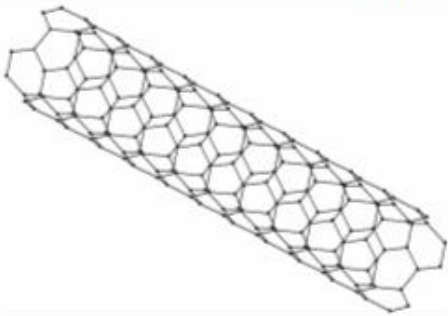
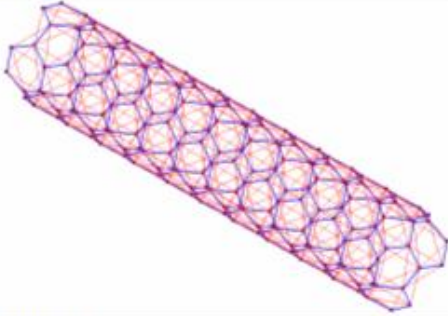
Για να προσομοιωθούν οι καταστάσεις παραμόρφωσης που εκφράζονται από τις σχέσεις (3.1) και (3.9), χρησιμοποιήθηκαν δύο τύποι στοιχείων ράβδου (Σχήμα 3.3). Για την αναπαράσταση της εξίσωσης (3.1) υιοθετήθηκε ένα στοιχείο ράβδου, που από εδώ και στο εξής θα δηλώνεται ως cc , με δυσκαμψία κατά τον \bar{x} -άξονα του τοπικού συστήματος συντεταγμένων του ίση με:

$$k_{\bar{x}}^{cc} = \frac{E^{cc}}{A^{cc} r_0} = k_r \quad (3.16)$$

Για την αναπαράσταση της εξίσωσης (3.9) υιοθετήθηκε ένα στοιχείο ράβδου, που από εδώ και στο εξής θα δηλώνεται ως ccc , με δυσκαμψία κατά τον \bar{x} -άξονα του τοπικού συστήματος συντεταγμένων του ίση με:

$$k_{\bar{x}}^{ccc} = \frac{E^{ccc}}{A^{ccc} l_0} = k_l \quad (3.17)$$

Η παραπάνω μέθοδος οδηγεί στα τρισδιάστατα μοντέλα πεπερασμένων που απεικονίζονται στο Σχήμα 3.4.

Γεωμετρία μονότοιχου νανοσωλήνα	Μοντέλο στοιχείων ράβδου
	
Zigzag (5,0), $L/D = 5$	
	
Chiral (6,3), $L/D = 5$	
	
Armchair (4,4), $L/D = 5$	

Σχήμα 3.4: Γεωμετρία και αντίστοιχα μοντέλα πεπερασμένων στοιχείων ράβδου για έναν zigzag, έναν chiral και έναν armchair μονότοιχο νανοσωλήνα άνθρακα

3.4.1 Αριθμητική επίλυση ελαστικού στατικού προβλήματος

Προκειμένου να προβλεφθούν αριθμητικά οι ελαστικές μηχανικές ιδιότητες των νανοσωλήνων, μια γραμμική ελαστική ανάλυση πρέπει να πραγματοποιηθεί. Για το λόγο αυτό, καταστρώνεται ένα σύστημα από γραμμικές αλγεβρικές εξισώσεις εκφράζοντας τις σχέσεις (3.11) έως (3.17) για κάθε cc και ccc στοιχείο ράβδου της νανοδομής στο καθολικό σύστημα συντεταγμένων (x, y, z) . Έπειτα όλες οι γραμμικές εξισώσεις συναρμολογούνται σύμφωνα τις απαιτήσεις συνέχειας των κόμβων και με τον τρόπο αυτό προκύπτει το εξής σύστημα εξισώσεων:

$$\mathbf{KU} = \mathbf{F} \quad (3.18)$$

όπου \mathbf{K} , \mathbf{U} και \mathbf{F} είναι τα συναρμολογημένα μητρώα δυσκαμψίας, μετατοπίσεων και δυνάμεων, αντίστοιχα. Η παραπάνω εξίσωση δύναται να επιλυθεί με απαλοισμό Gauss λαμβάνοντας πρώτα υπόψη όλες τις συνοριακές συνθήκες.

3.4.2 Αριθμητική επίλυση ελαστικού προβλήματος ευστάθειας

Το πρόβλημα της ελαστικής ευστάθειας (λυγισμού) λύνεται επιβάλλοντας αρχικά στη νανοδομή ένα φορτίο αναφοράς \mathbf{F}_{ref} . Έπειτα λαμβάνει χώρα μια τυποποιημένη γραμμική στατική ανάλυση για να προκύψουν οι δυνάμεις οι οποίες απαιτούνται για να καταστρωθεί γεωμετρικό μητρώο δυσκαμψίας \mathbf{K}_G . Οι δυνάμεις ευστάθειας υπολογίζονται έπειτα λύνοντας το εξής πρόβλημα ιδιοτιμών:

$$[\mathbf{K} - I\mathbf{K}_G]\mathbf{U} = \mathbf{0} \quad (3.19)$$

όπου I είναι ο πολλαπλασιαστής του φορτίου αναφοράς ενώ το ιδιοδιάνυσμα \mathbf{U} αντιστοιχεί στην ιδιοτιμή.

Στη παρούσα ανάλυση, το πρόβλημα ιδιοτιμών επιλύεται με τη χρήση της μεθόδου Lanczos. Μόνο ένας μικρός αριθμός ιδιοτιμών συνήθως υπολογίζεται σε μια ανάλυση ευστάθειας. Το μεγαλύτερο ενδιαφέρον έγκειται στο κρίσιμο φορτίο \mathbf{F}_{cr} , με

το οποίο προκαλείται αστάθεια στη νανοδομή. Το φορτίο αυτό σχετίζεται με τη μικρότερη ιδιοτιμή I_{cr} και δύναται να υπολογισθεί από την παρακάτω εξίσωση:

$$\mathbf{F}_{cr} = I_{cr} \mathbf{F}_{ref} \quad (3.20)$$

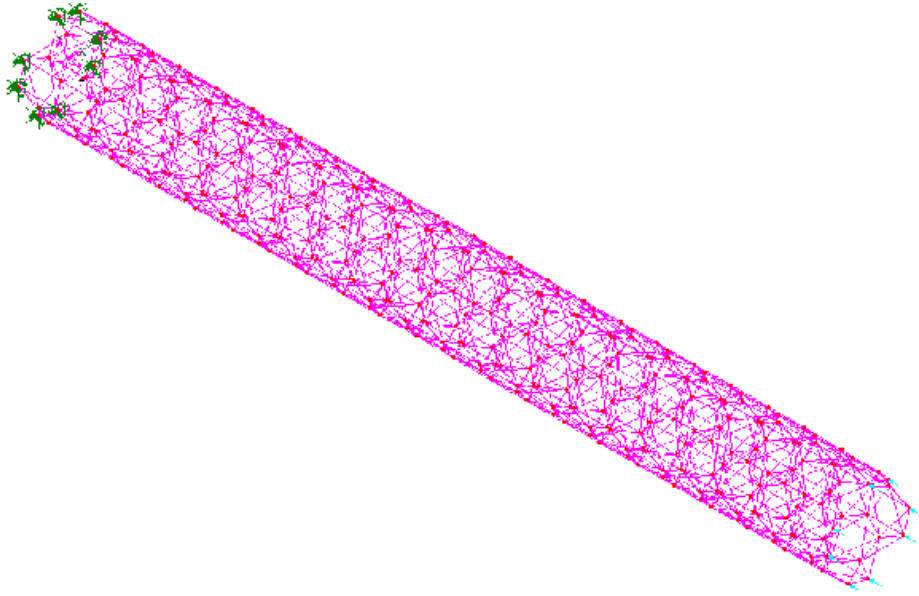
..

4. ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

Σύμφωνα με την προτεινόμενη μέθοδο, αναπτύχθηκαν διάφορα μεγέθη zigzag, armchair και chiral μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα. Συγκεκριμένα, εξετάστηκαν οι (5,0), (7,0), (9,0), (14,0), (21,0), και (4,2) zigzag, οι (4,2), (6,3), (8,4), (12,6) και (16,8) chiral και τέλος οι (3,3), (4,4), (5,5), (8,8) και (12,12) armchair μονότοιχοι νανοσωλήνες άνθρακα παραμετρικά με το μήκος τους L . Τα αριθμητικά μοντέλα που αναπτύχθηκαν, χρησιμοποιήθηκαν για την πρόβλεψη του ενεργού και ακτινικού μέτρου ελαστικότητας καθώς και του ενεργού μέτρου διάτμησης των νανοσωλήνων μέσω στατικής ανάλυσης. Πραγματοποιήθηκε επίσης ανάλυση ελαστικής ευστάθειας προκειμένου να υπολογιστούν τα κρίσιμα φορτία που προκαλούν αστάθεια στους μονότοιχους νανοσωλήνες άνθρακα κάτω από θλιπτικά και στρεπτικά φορτία. Η γεωμετρία των μοντέλων καθορίστηκε σύμφωνα με ένα (x, y, z) παγκόσμιο σύστημα συντεταγμένων. Το xy επίπεδο του συστήματος συντεταγμένων επιλέχθηκε έτσι ώστε να ταυτίζεται με το ένα άκρο των νανοσωλήνων. Η αρχή του συστήματος συντεταγμένους τοποθετήθηκε στο κέντρο της περιφέρειας των νανοσωλήνων ενώ ο z -άξονας επιλέχθηκε έτσι ώστε να ταυτίζεται με την αξονική (ενεργή) διεύθυνση των νανοσωλήνων.

4.1 ΕΛΑΣΤΙΚΕΣ ΜΗΧΑΝΙΚΕΣ ΙΔΙΟΤΗΤΕΣ

Για τον υπολογισμό του ενεργού μέτρου ελαστικότητας των νανοσωλήνων, δεσμεύονται όλοι οι βαθμοί ελευθερίας των κόμβων στο επίπεδο $z=0$ ενώ επιβάλλεται μια δύναμη f_z^i σε κάθε κόμβο i που ανήκει στο επίπεδο $z=L$ (Σχήμα 4.1).



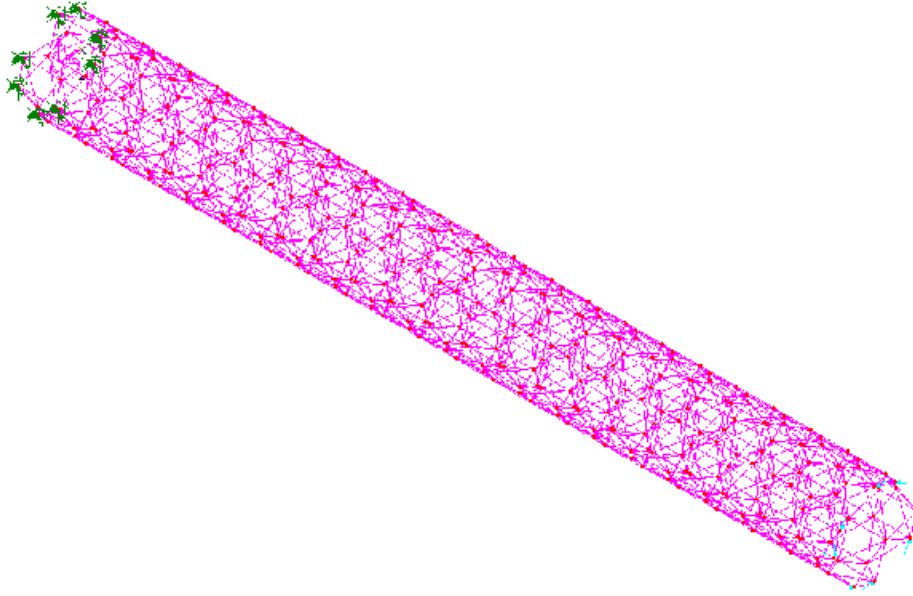
Σχήμα 4.1: Μοντέλο μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα για τον υπολογισμό του ενεργού μέτρου ελαστικότητας

Στη συνέχεια, το ενεργό μέτρο ελαστικότητας E_z υπολογίζεται από τη μέση τάση s_z , που προκύπτει από τις επικόμβιες αντιδράσεις που προκύπτουν στο επίπεδο $z=0$, και τη μέση παραμόρφωση e_z , που υπολογίζεται από τη μέση μετατόπιση των κόμβων που ανήκουν στο επίπεδο $z=L$:

$$E_z = \frac{s_z}{e_z} = \frac{\sum_{i=1}^q {}^i f_z}{\frac{\Delta L}{L}} \quad (4.1)$$

όπου q είναι ο συνολικός αριθμός των κόμβων που ανήκουν στο επίπεδο $z=0$.

Για τον υπολογισμό του ενεργού μέτρου διάτμησης των νανοσωλήνων, όλοι οι βαθμοί ελευθερίας των κόμβων στο επίπεδο $z=0$ δεσμεύονται, ενώ με τη βοήθεια ενός τοπικού συστήματος συντεταγμένων (r, s, z) μία εφαπτόμενη δύναμη ${}^i f_s$ εφαρμόζεται σε κάθε κόμβο i που ανήκει στο επίπεδο $z=h$ (Σχήμα 4.2).



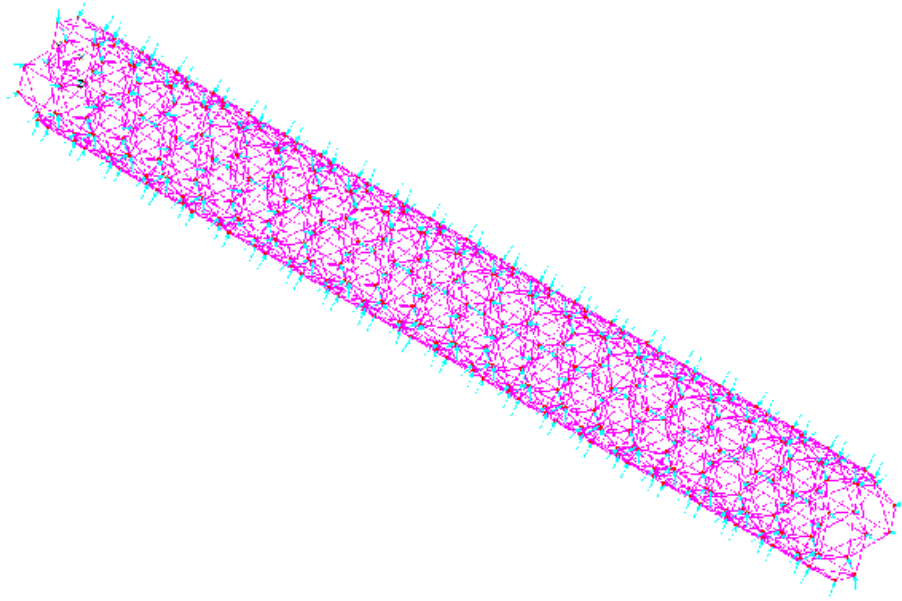
Σχήμα 4.2: Μοντέλο μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα για τον υπολογισμό του ενεργού μέτρου διάτμησης

Στη συνέχεια, το ενεργό μέτρο διάτμησης G_z των νανοσωλήνων υπολογίζεται από τη στρεπτική ροπή M_z και γωνία στρέψης q_z που εμφανίζεται στο επίπεδο $z = L$, σύμφωνα με την ακόλουθη σχέση:

$$G_z = \frac{M_z L}{q_z J} = \frac{q f_s R L}{\arctan\left(\frac{\Delta s}{R}\right) \frac{p}{2} \left(\left(R + \frac{t}{2}\right)^4 - \left(R - \frac{t}{2}\right)^4 \right)} \quad (4.2)$$

όπου J είναι η πολική ροπή αδρανείας της διατομής και Δs είναι η μέση εφαπτομενική μεταβολή της μετατόπισης των κόμβων που ανήκουν στο επίπεδο $z = L$

Προκειμένου να υπολογιστεί το ακτινικό μέτρο ελαστικότητας των νανοσωλήνων όλοι οι βαθμοί ελευθερίας όλων των κόμβων αφήνονται ελεύθεροι, ενώ με τη βοήθεια ενός κυλινδρικού συστήματος συντεταγμένων (r, s, z) επιβάλλεται μια ακτινική δύναμη $^i f_r$ σε κάθε κόμβο i των νανοσωλήνων (Σχήμα 4.3).



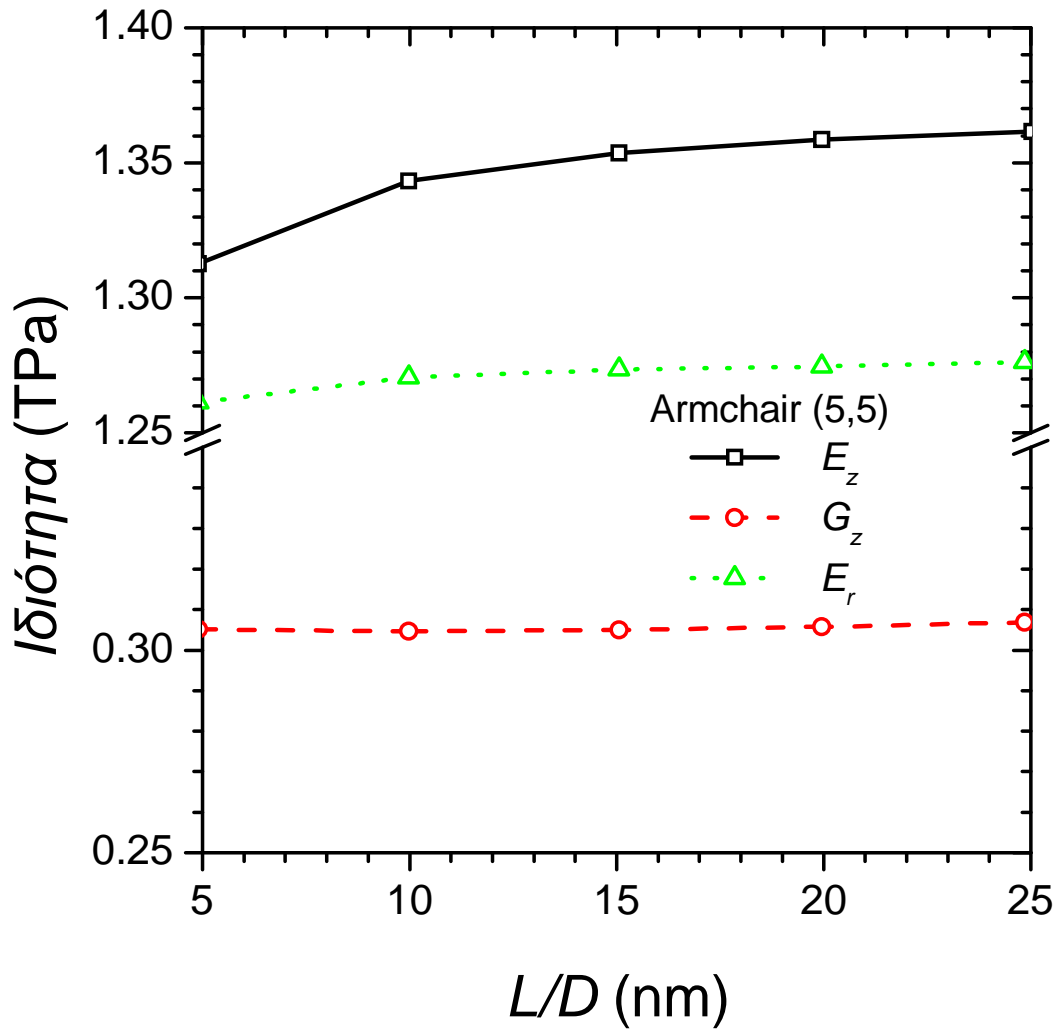
Σχήμα 4.3: Μοντέλο μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα για τον υπολογισμό του ακτινικού μέτρου ελαστικότητας

Αυτές οι συνοριακές συνθήκες προσομοιώνουν μια φόρτιση τύπου υδροστατικής πίεσης. Στη συνέχεια, το ακτινικό μέτρο ελαστικότητας E_r των νανοσωλήνων υπολογίζεται από την μέση ακτινική τάση s_r και την ακτινική παραμόρφωση e_r , σύμφωνα με την ακόλουθη σχέση:

$$E_r = \frac{s_r}{e_r} = \frac{\sum_{i=1}^p i f_r}{\frac{\Delta R}{R}} \quad (4.3)$$

όπου p είναι ο συνολικός αριθμός των κόμβων του νανοσωλήνα.

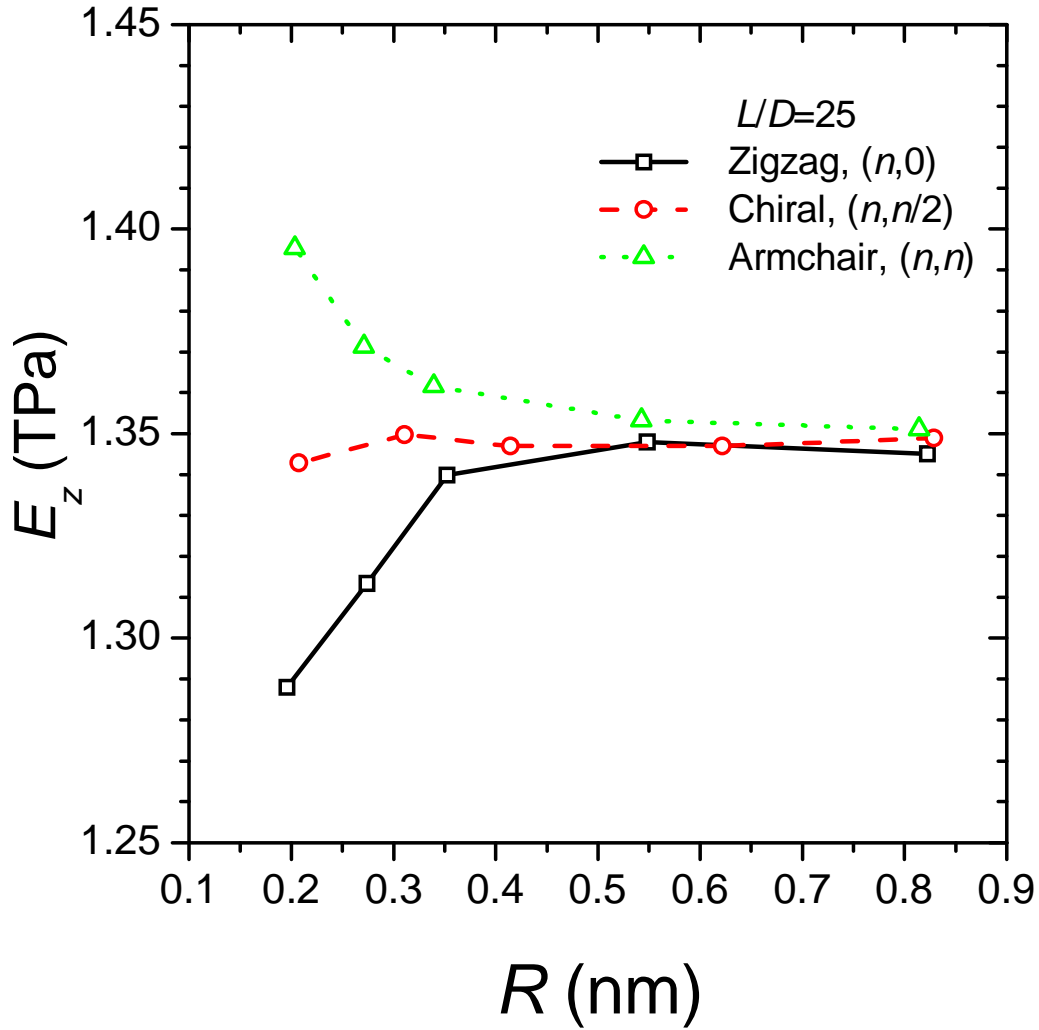
Αρχικά, διερευνήθηκε η σύγκλιση των ελαστικών ιδιοτήτων των νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με το μήκος τους L . Το Σχήμα 4.4 παρουσιάζει τη διακύμανση του ενεργού μέτρου ελαστικότητας E_z , του ενεργού μέτρου διάτμησης G_z και του ακτινικού μέτρου ελαστικότητας E_r του (5,5) armchair νανοσωλήνα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο L/D .



Σχήμα 4.4: Μεταβολή ελαστικών ιδιοτήτων του (5,5) armchair μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα σε σχέση με το γεωμετρικό λόγο του

Είναι φανερό ότι, τα μέτρα E_r και G_z δείχνουν να είναι ανεξάρτητα από το μήκος για $L/D > 5$ ενώ το μέτρο E_z δείχνει να είναι πιο ευαίσθητο σε σχέση με το μήκος L του νανοσωλήνα. Ωστόσο, τα συγκεκριμένα αυτά αριθμητικά αποτελέσματα υποδηλώνουν τη σταθερότητα των τριών ελαστικών ιδιοτήτων για $L/D \geq 25$.

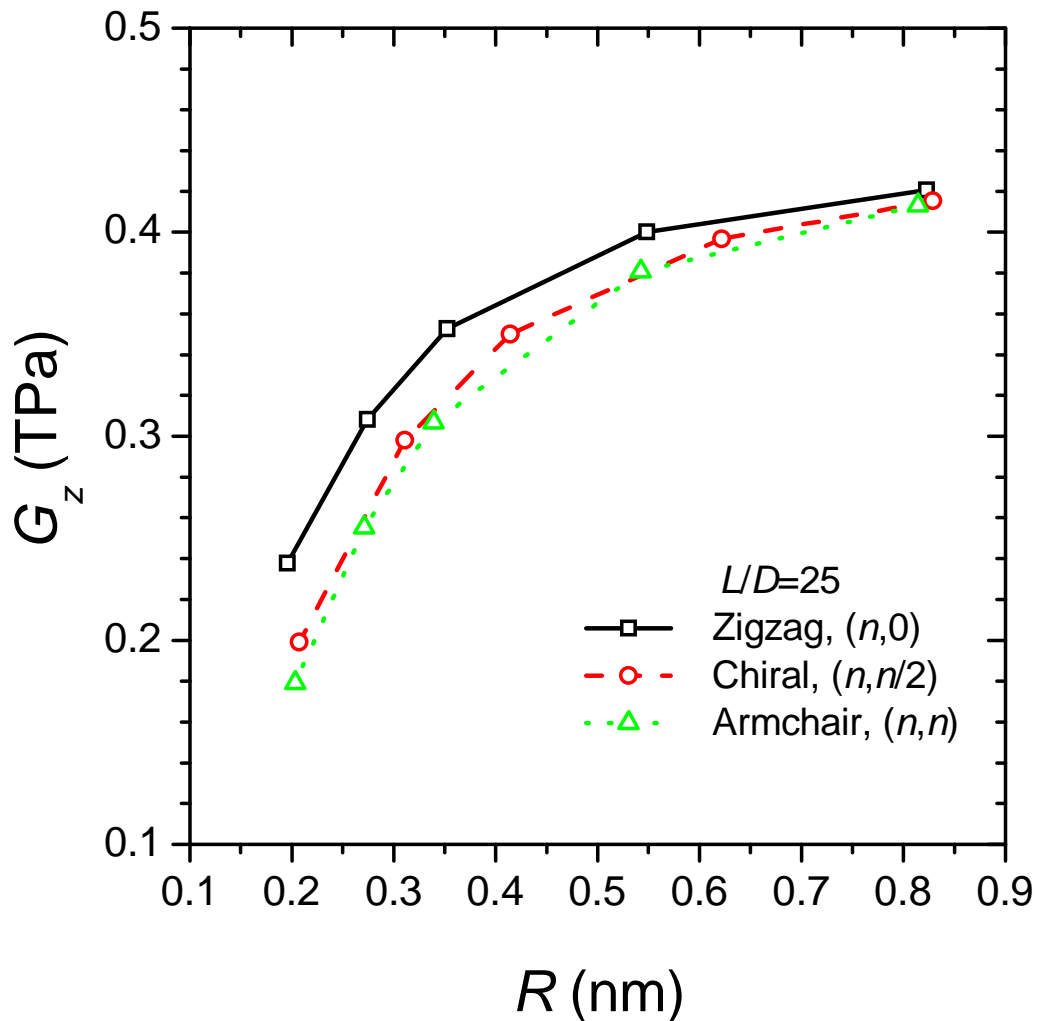
Στο Σχήμα 4.5 παρουσιάζεται το ενεργό μέτρο ελαστικότητας για μια ποικιλία από zigzag, chiral και armchair μονότοιχους νανοσωλήνες άνθρακα για τον γεωμετρικό λόγο $L/D = 25$.



Σχήμα 4.5: Ενεργό μέτρο ελαστικότητας για zigzag, chiral και armchair μονότοιχους νανοσωλήνες άνθρακα για διάφορες τιμές ακτίνας

Οι armchair νανοσωλήνες φαίνεται να παρέχουν ελαφρώς υψηλότερες τιμές E_z από ό,τι οι chiral νανοσωλήνες της ίδιας ακτίνας. Ομοίως οι chiral νανοσωλήνες φαίνεται να έχουν μεγαλύτερο E_z σε σύγκριση με τους ίδιου μεγέθους zigzag νανοσωλήνες.

Το Σχήμα 4.6 απεικονίζει το ενεργό μέτρο διάτμησης για διάφορους zigzag, chiral και armchair μονότοιχους νανοσωλήνες άνθρακα για τον ίδιο γεωμετρικό λόγο $L/D = 25$.



Σχήμα 4.6: Ενεργό μέτρο διάτμησης για zigzag, chiral και armchair μονότοιχους νανοσωλήνες άνθρακα για διάφορες τιμές ακτίνας

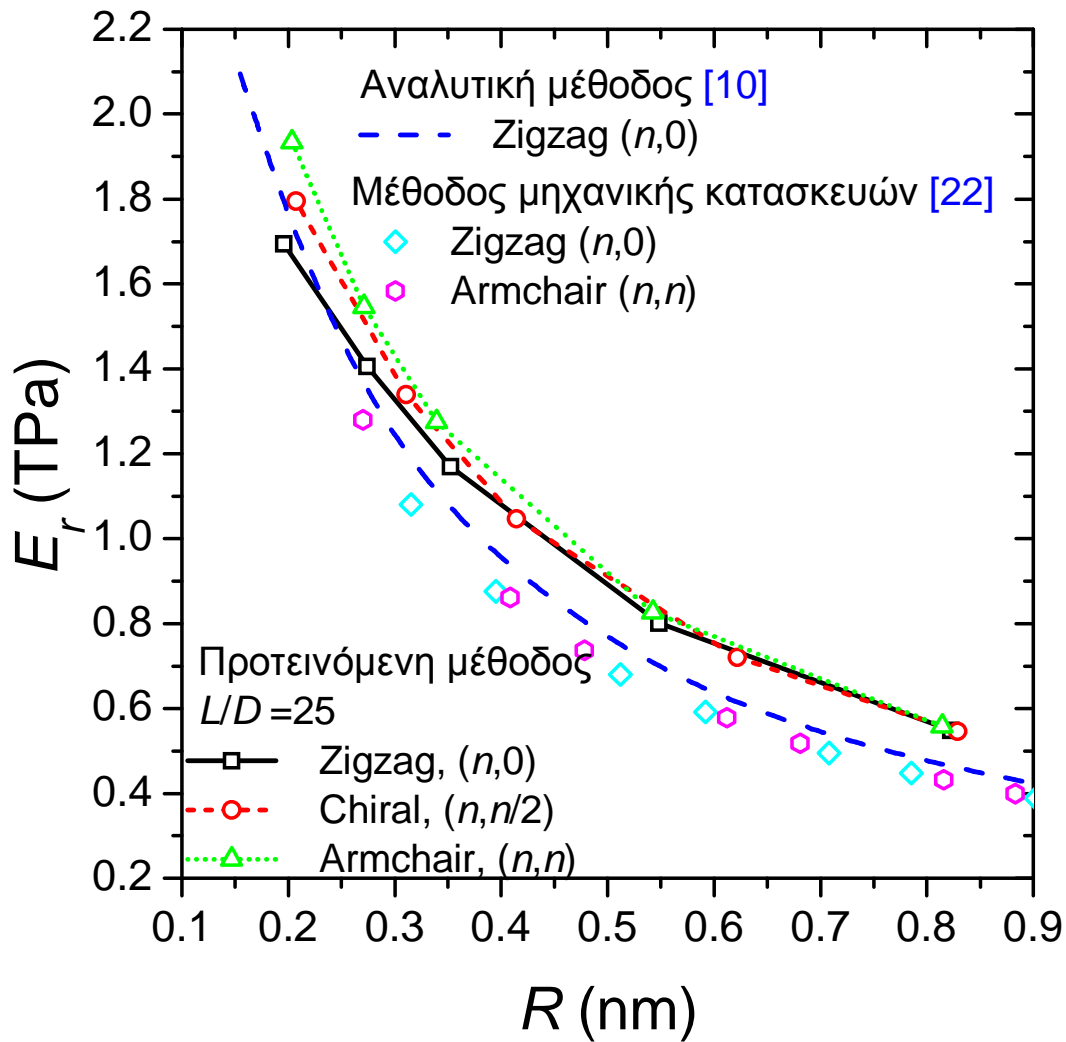
Σε αυτή τη περίπτωση, οι armchair νανοσωλήνες φαίνεται να παρέχουν ελαφρώς χαμηλότερες τιμές G_z σε σχέση με τους chiral νανοσωλήνες ίδιας ακτίνας ενώ οι chiral νανοσωλήνες παρουσιάζουν ελαφρώς μειωμένες τιμές G_z σε σχέση με τους zigzag. Ο Πίνακας 4.1 παρουσιάζει συγκρίσεις των μέσων τιμών E_z και G_z , που έχουν εξαχθεί από τους υπολογισμούς των δεκαπέντε διαφορετικών νανοσωλήνων, με τις αντίστοιχες μέσες προβλέψεις που υπάρχουν στη σχετική βιβλιογραφία, προκειμένου να επικυρωθεί η προτεινόμενη αριθμητική μέθοδος. Θα

πρέπει να σημειωθεί ότι, στην παρούσα μελέτη έχουν χρησιμοποιηθεί σημαντικά μεγαλύτερα μήκη νανοσωλήνων κατά τη διάρκεια των υπολογισμών.

Πίνακας 4.1: Μέσες τιμές μέτρου ελαστικότητας και διάτμησης προτεινόμενης μεθόδου σε σύγκριση με αντίστοιχα αποτελέσματα διαθέσιμα στην βιβλιογραφία

		E_z (TPa)	G_z (TPa)
	Προτεινόμενη μέθοδος	1.3471	0.3276
	Hernández et al. [11]	1.2400	–
	Jin and Yuan [12]	1.2360	0.4920
Θεωρητικές μέθοδοι	To [16]	1.0300	0.4750
	Tserpes and Papanikos [17]	1.0293	0.4330
	Giannopoulos et al. [18]	1.2478	0.3245
	Gupta et al. [19]	1.2238	0.3281
Πειραματικές	Krishman et al. [1]	1.3000	–
Μέθοδοι	Tomblor et al. [2]	1.2000	–

Στο Σχήμα 4.7 παρουσιάζεται ο ακτινικό μέτρο ελαστικότητας για μια σειρά από zigzag, chiral και armchair μονότοιχους νανοσωλήνες άνθρακα για την γεωμετρική αναλογία $L/D = 25$.



Σχήμα 4.7: Ακτινικό μέτρο ελαστικότητας για zigzag, chiral και armchair μονότοιχους νανοσωλήνες άνθρακα για διάφορες τιμές ακτίνας

Σε γενικές γραμμές, όλα τα είδη των νανοσωλήνων της ίδιας ακτίνας, φαίνεται να παρουσιάζουν σχεδόν την ίδια ακτινική δυσκαμψία. Ωστόσο, οι armchair νανοσωλήνες φαίνεται να είναι ελαφρώς πιο δύσκαμπτοι στην ακτινική διεύθυνση από τους chiral ενώ οι chiral νανοσωλήνες είναι πιο δύσκαμπτοι από τους zigzag. Καλή συμφωνία μεταξύ των παρόντων αποτελεσμάτων και εκείνων που παρουσιάζονται στις θεωρητικές μελέτες [10,22].

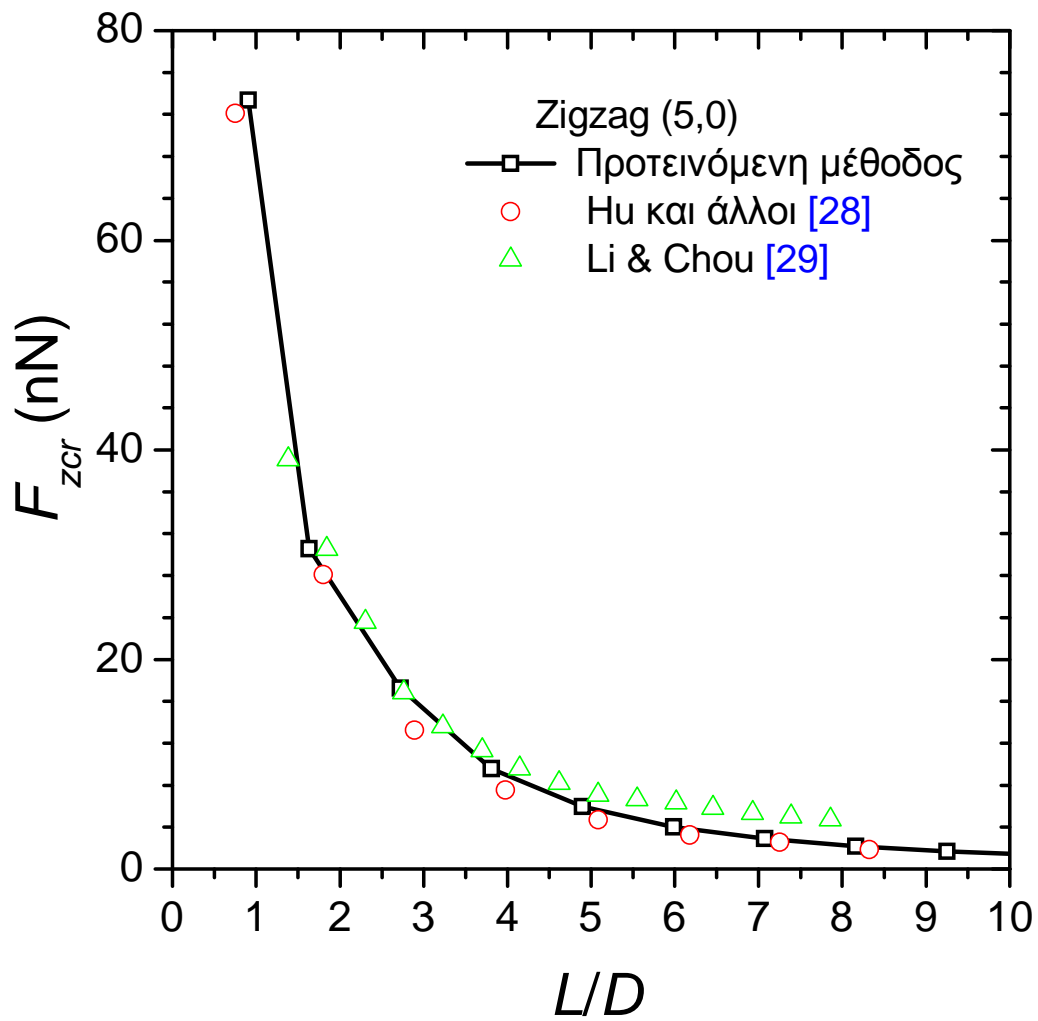
Ως γενικό συμπέρασμα, οι ελαστικές μηχανικές ιδιότητες E_z, G_z και E_r διαφέρουν σημαντικά για μικρές τιμές ακτίνας, ενώ φαίνεται να συγκλίνουν για υψηλές τιμές της.

4.2 ΚΡΙΣΙΜΑ ΦΟΡΤΙΑ ΑΣΤΑΘΕΙΑΣ

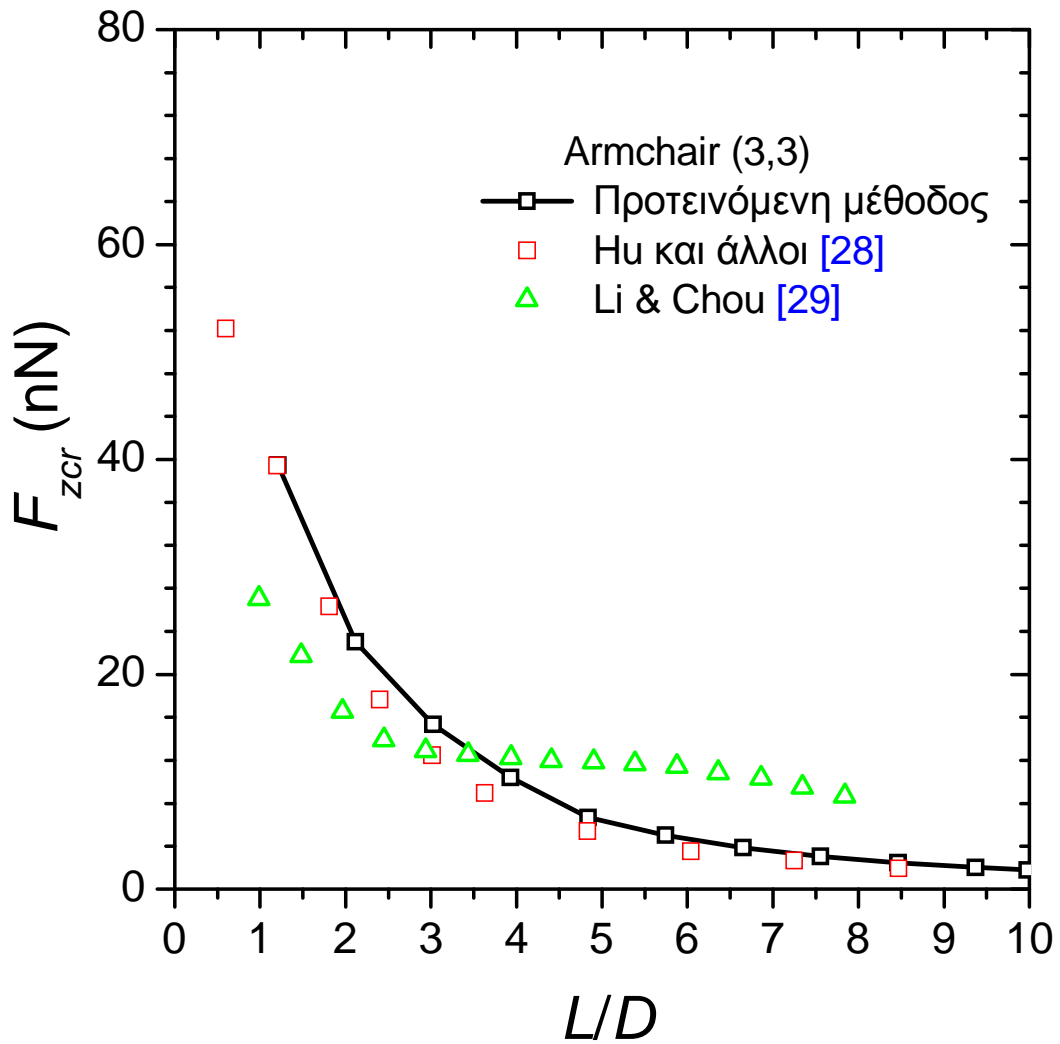
Χρησιμοποιώντας την προτεινόμενη ανάλυση ευστάθειας, μελετήθηκαν συστηματικά τα κρίσιμα φορτία που προκαλούν αστάθεια (λυγισμό) στους νανοσωλήνες κάτω από θλιπτικά και εφελκυστικά φορτία.

4.2.1 Μελέτη ευστάθειας σε θλίψη

Αρχικά, επιβλήθηκε στους νανοσωλήνες ένα ομοιόμορφο θλιπτικό φορτίο στα άτομα που ανήκουν στο ένα άκρο τους ενώ το άλλο άκρο τους διατηρήθηκε πλήρως δεσμευμένο (πάκτωση). Για την επικύρωση της μεθόδου, παρατίθενται τα Σχήματα 4.8, 4.9, 4.10 και 4.11. Στα σχήματα αυτά, τα παρόντα αποτελέσματα συγκρίνονται με αυτά του Hu και άλλων [28] και Li και Chou [29], που έχουν χρησιμοποιήσει μια διαφορετική μέθοδο μηχανικής των κατασκευών βασισμένη σε στοιχεία δοκού. Στα Σχήματα 4.8 και 4.9 απεικονίζεται κρίσιμη θλιπτική δύναμη αστάθειας για τον (5,0) zigzag και τον (3,3) armchair νανοσωλήνα άνθρακα, αντίστοιχα, για μικρούς γεωμετρικούς λόγους L/D .

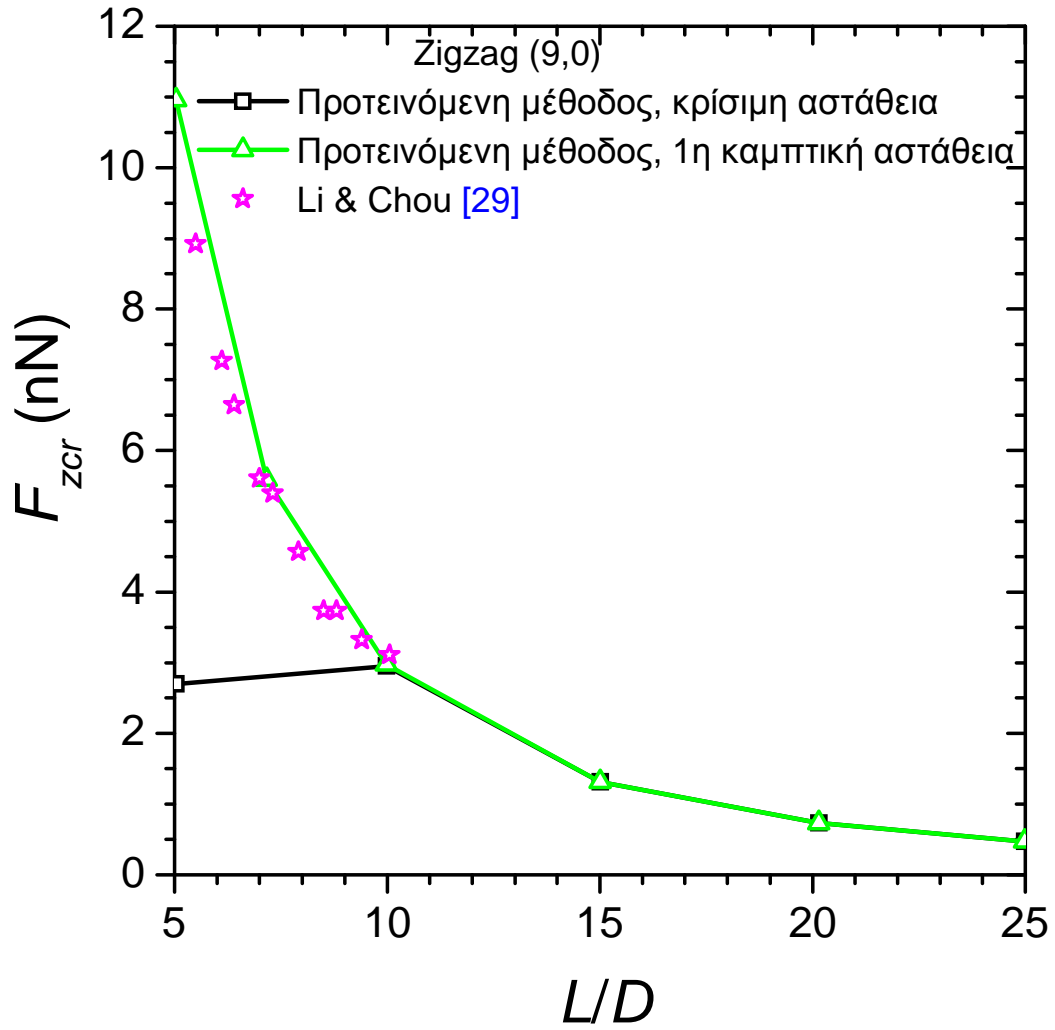


Σχήμα 4.8: Κρίσιμη θλιπτική δύναμη αστάθειας του (5,0) zigzag μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο του

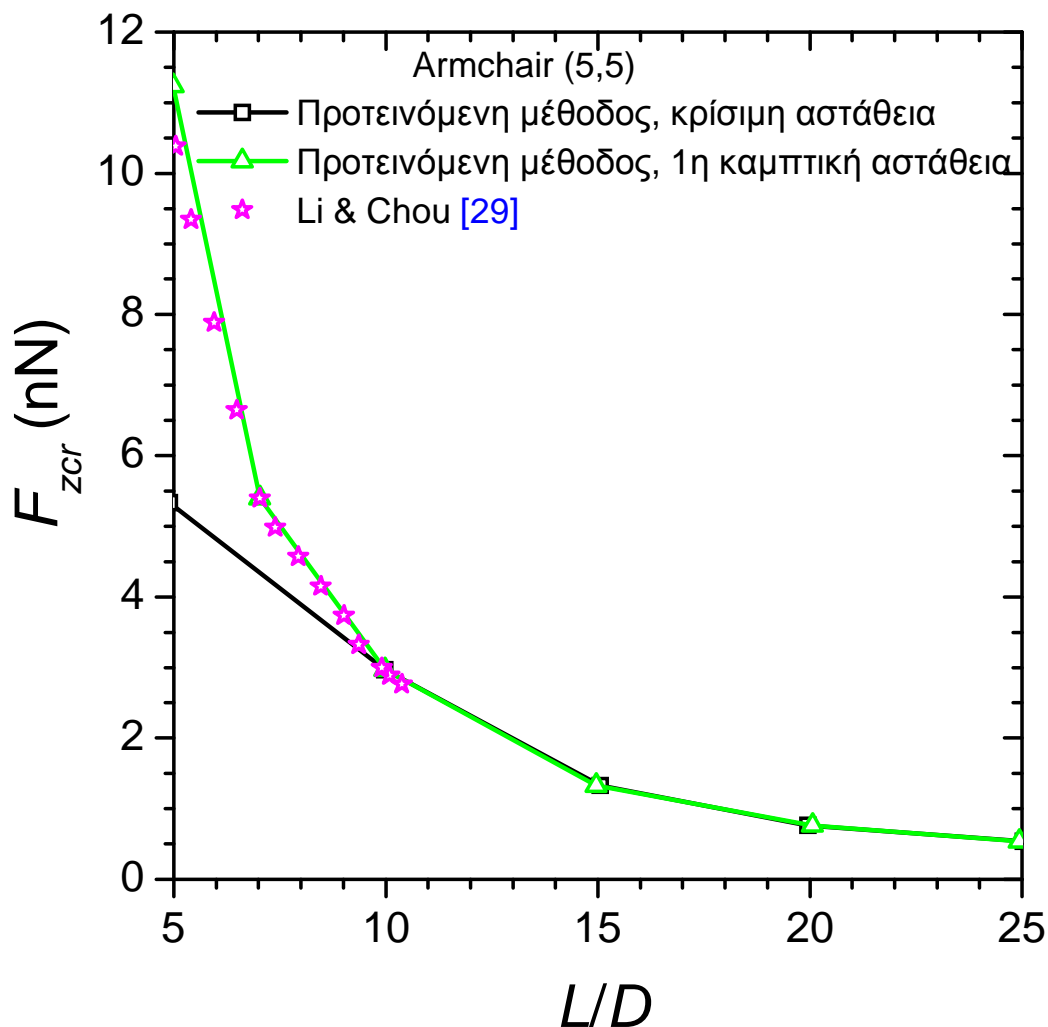


Σχήμα 4.9: Κρίσιμη θλιπτική δύναμη αστάθειας του (3,3) armchair μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο του

Η καλή συμφωνία μεταξύ των τριών διαφορετικών μεθόδων γίνεται αντιληπτή. Στα Σχήματα 4.10 και 4.11 παρουσιάζεται η κρίσιμη θλιπτική δύναμη αστάθειας για τον (7,0) zigzag και τον (5,5) νανοσωλήνα άνθρακα, αντίστοιχα, για ένα ευρύτερο φάσμα γεωμετρικών λόγων.



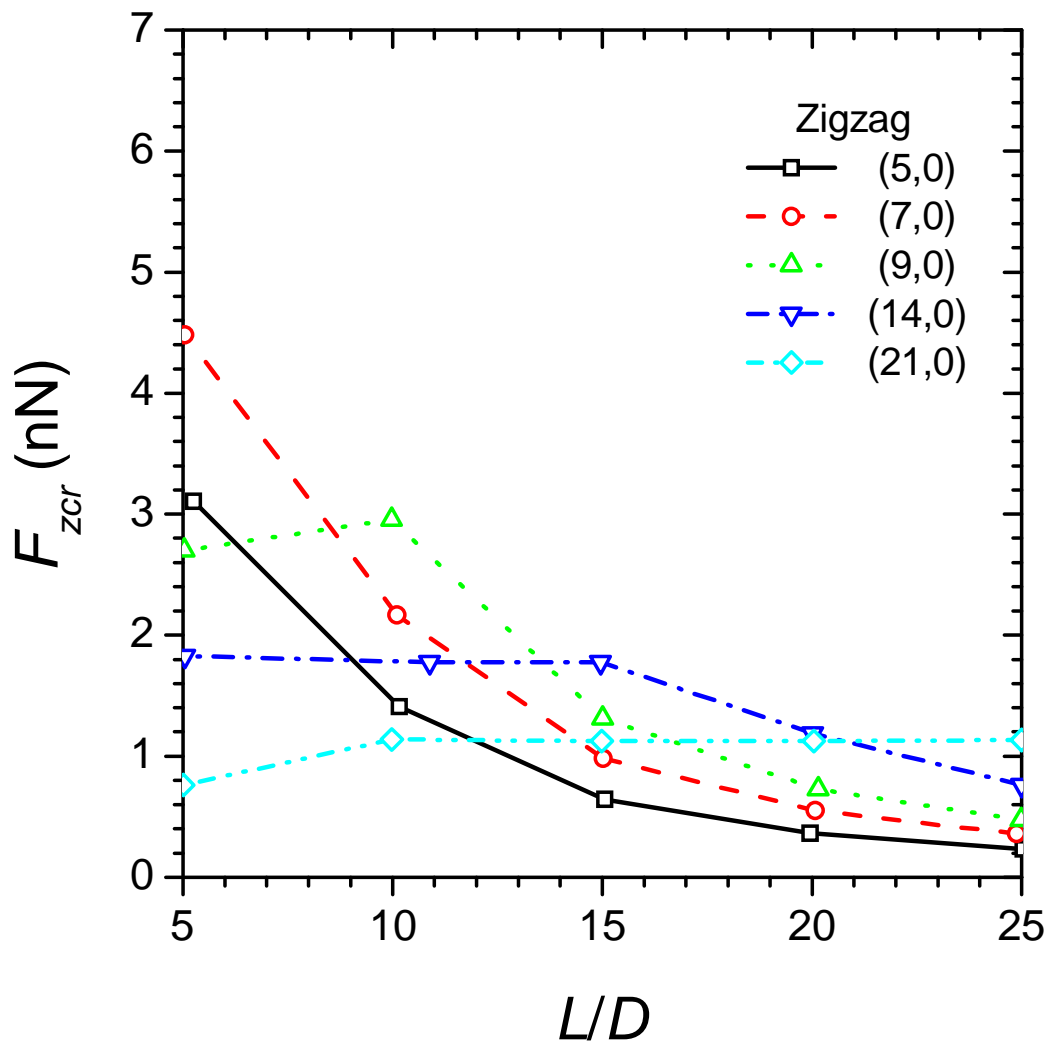
Σχήμα 4.10: Κρίσιμη θλιπτική δύναμη αστάθειας του (9,0) zigzag μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο του



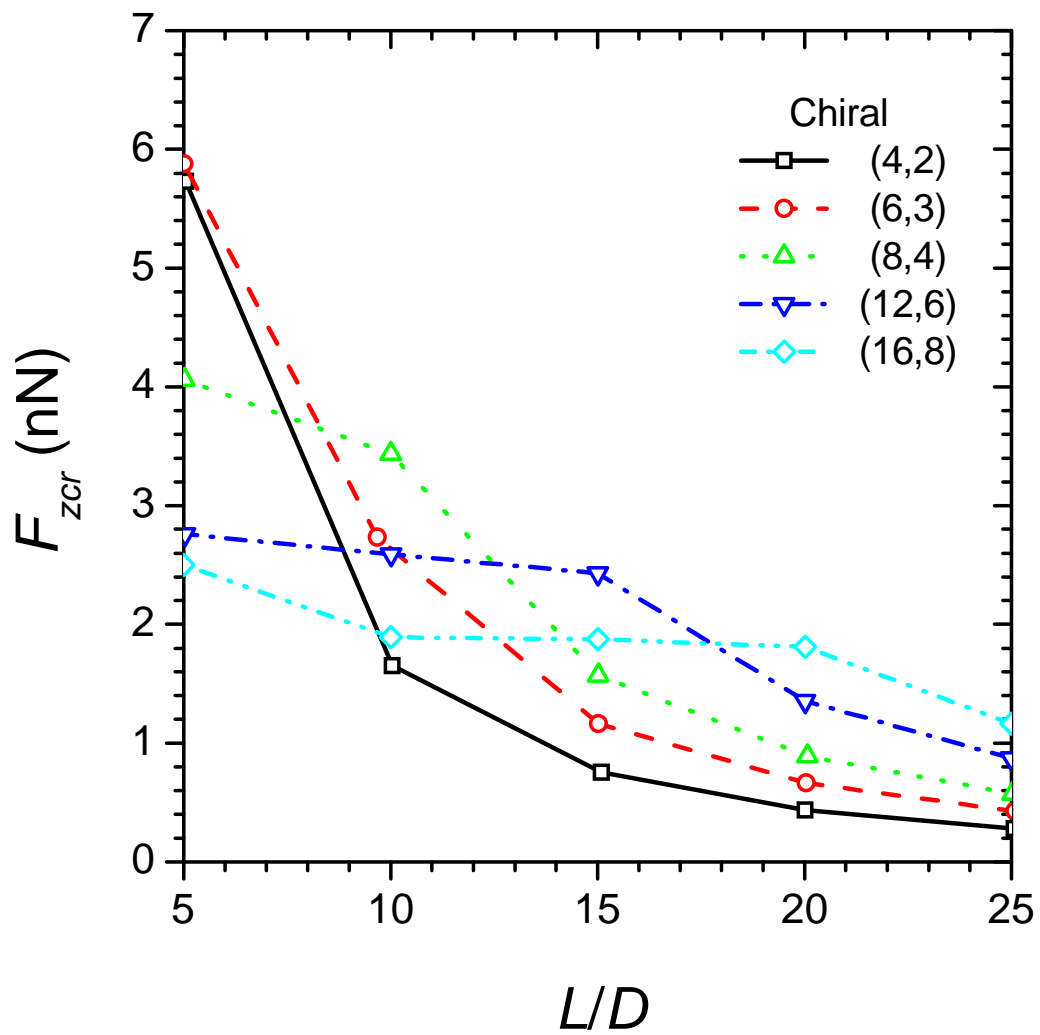
Σχήμα 4.11: Κρίσιμη θλιπτική δύναμη αστάθειας του (5,5) armchair μονότοιχου νανοσωλήνα άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο του

Η διαφορά που παρατηρείται μεταξύ των διαφορετικών μεθόδων στα Σχήματα 4.10 και 4.11 οφείλεται στο γεγονός ότι για τις συγκεκριμένες περιπτώσεις δοκιμών η παρούσα μέθοδος δεν παρουσιάζει κρίσιμη καμπτική παραμόρφωση αστάθειας, όπως συμβαίνει στην μελέτη [29]. Η πρώτη ιδιομορφή που λαμβάνεται με τη παρούσα μέθοδο αντιστοιχεί σε παραμόρφωση διατομής ενώ η δεύτερη είναι καμπτικής μορφής. Ωστόσο, η σύγκλιση των δύο μεθόδων είναι προφανής όταν συγκρίνονται αποκλειστικά τα χαμηλότερα φορτία θλίψης που προκαλούν καμπτικές παραμορφώσεις αστάθειας.

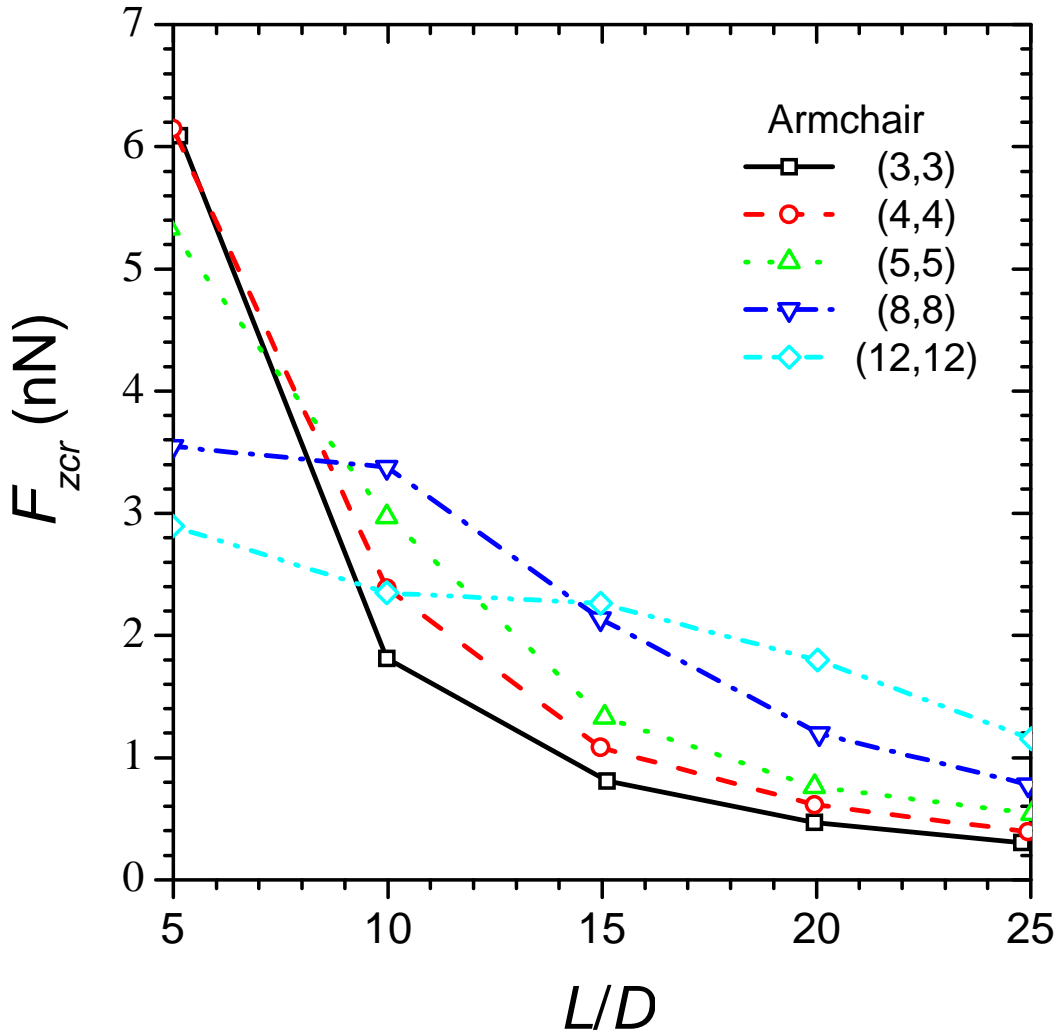
Στα Σχήματα 4.12, 4.13, και 4.15 παρουσιάζονται αποτελέσματα που αφορούν την κρίσιμη θλιπτική δύναμη που προκαλεί αστάθεια στους armchair, chiral και zigzag μονότοιχους νανοσωλήνες άνθρακα, αντίστοιχα, για διάφορους γεωμετρικές.



Σχήμα 4.12: Κρίσιμη θλιπτική δύναμη αστάθειας των zigzag μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο τους



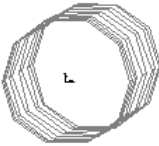
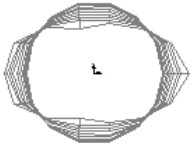
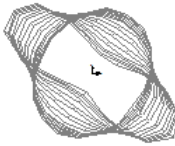

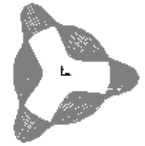
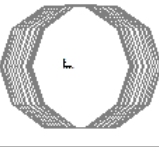
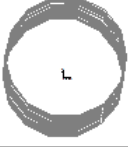
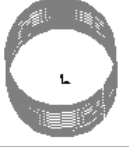

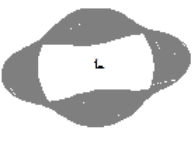
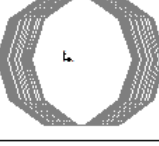


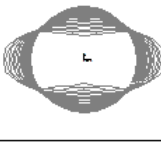
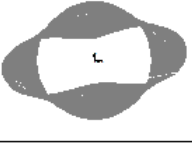
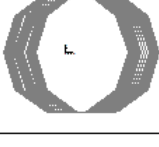
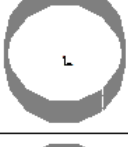
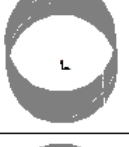
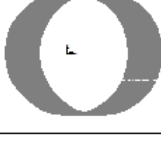
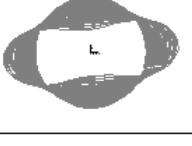
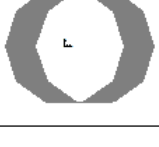
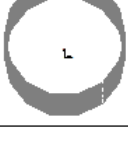
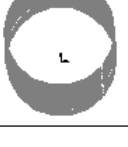
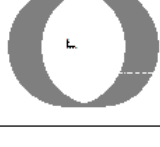
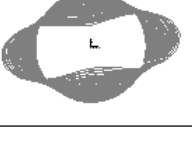
Σχήμα 4.13: Κρίσιμη θλιπτική δύναμη των chiral μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο τους



Σχήμα 4.14: Κρίσιμη θλιπτική δύναμη αστάθειας των armchair μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο τους

Από τα παραπάνω σχήματα καθίσταται εμφανές ότι για τις υψηλούς γεωμετρικούς λόγους, οι νανοσωλήνες των υψηλότερων διαμέτρων και της ίδιας χειρομορφίας (κατανομή εξαγωνικών δακτυλίων) παρουσιάζουν ελαφρώς χαμηλότερα κρίσιμα φορτία.

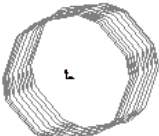

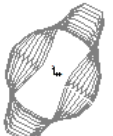

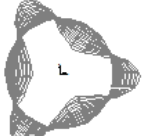
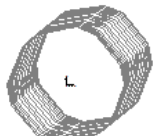

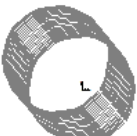
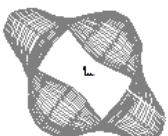
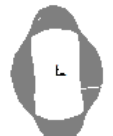
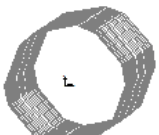

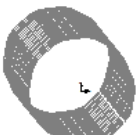




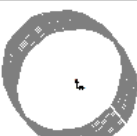
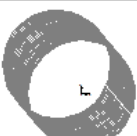
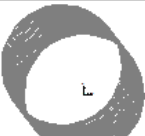

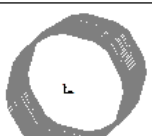
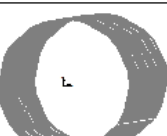
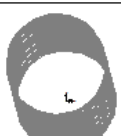

Τα Σχήματα 4.15, 4.16 και 4.17 απεικονίζουν τις αντίστοιχες κρίσιμες ιδιομορφές παραμόρφωσης σε πρόσοψη.

L/D	Κρίσιμες θλιπτικές ιδιομορφές αστάθειας				
	(5,0)	(7,0)	(9,0)	(14,0)	(21,0)
5					
10					
15					
20					
25					

Σχήμα 4.15: Κρίσιμες θλιπτικές ιδιομορφές zigzag μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο τους

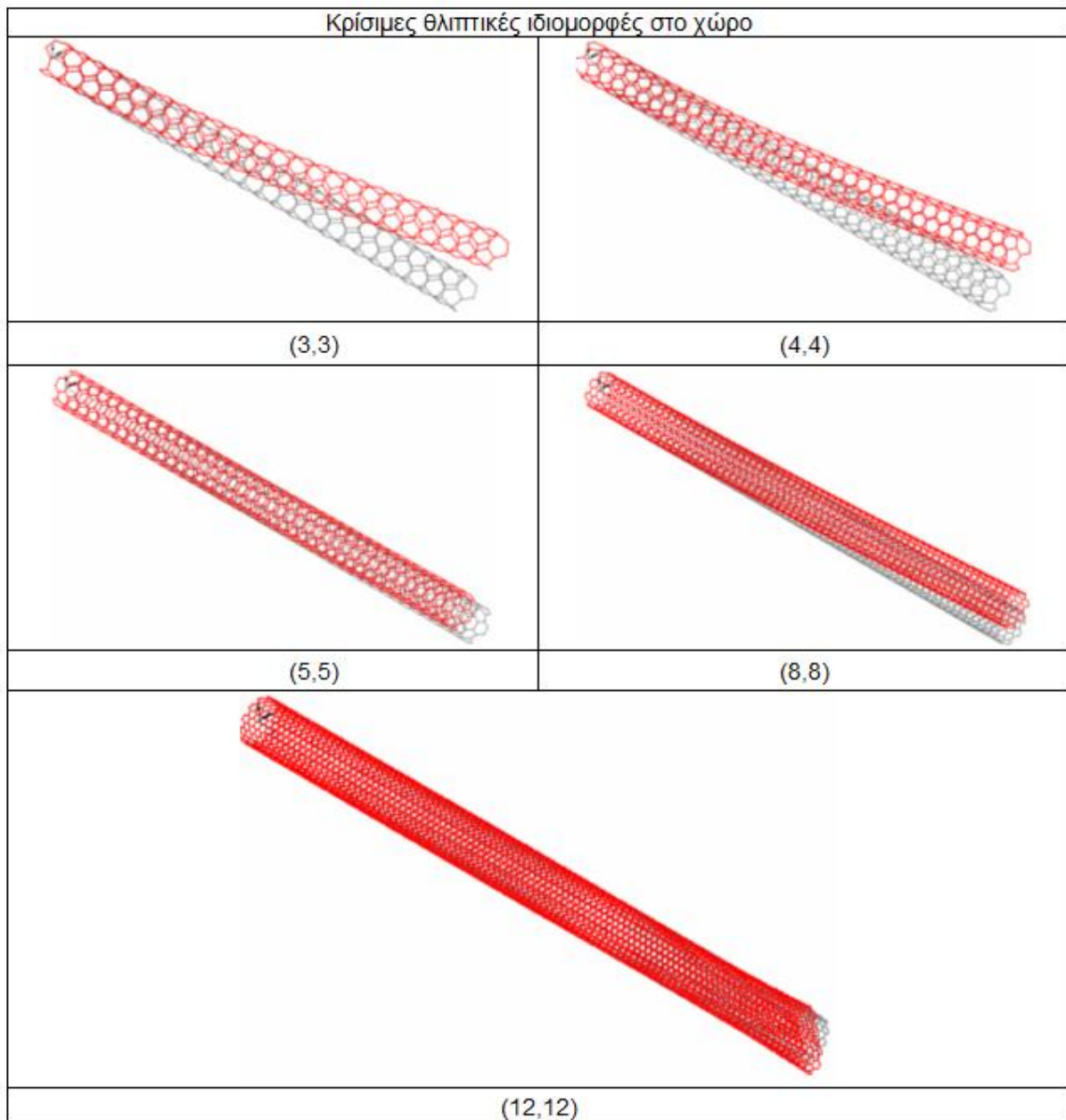
L/D	Κρίσιμες θλιπτικές ιδιομορφές αστάθειας				
	(4,2)	(6,3)	(8,4)	(12,6)	(16,8)
5					
10					
15					
20					
25					

Σχήμα 4.16: Κρίσιμες θλιπτικές ιδιομορφές chiral μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο τους

L/D	Κρίσιμες θλιπτικές ιδιομορφές αστάθειας				
	(3,3)	(4,4)	(5,5)	(8,8)	(12,12)
5					
10					
15					
20					
25					

Σχήμα 4.17: Κρίσιμες θλιπτικές ιδιομορφές armchair μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο τους

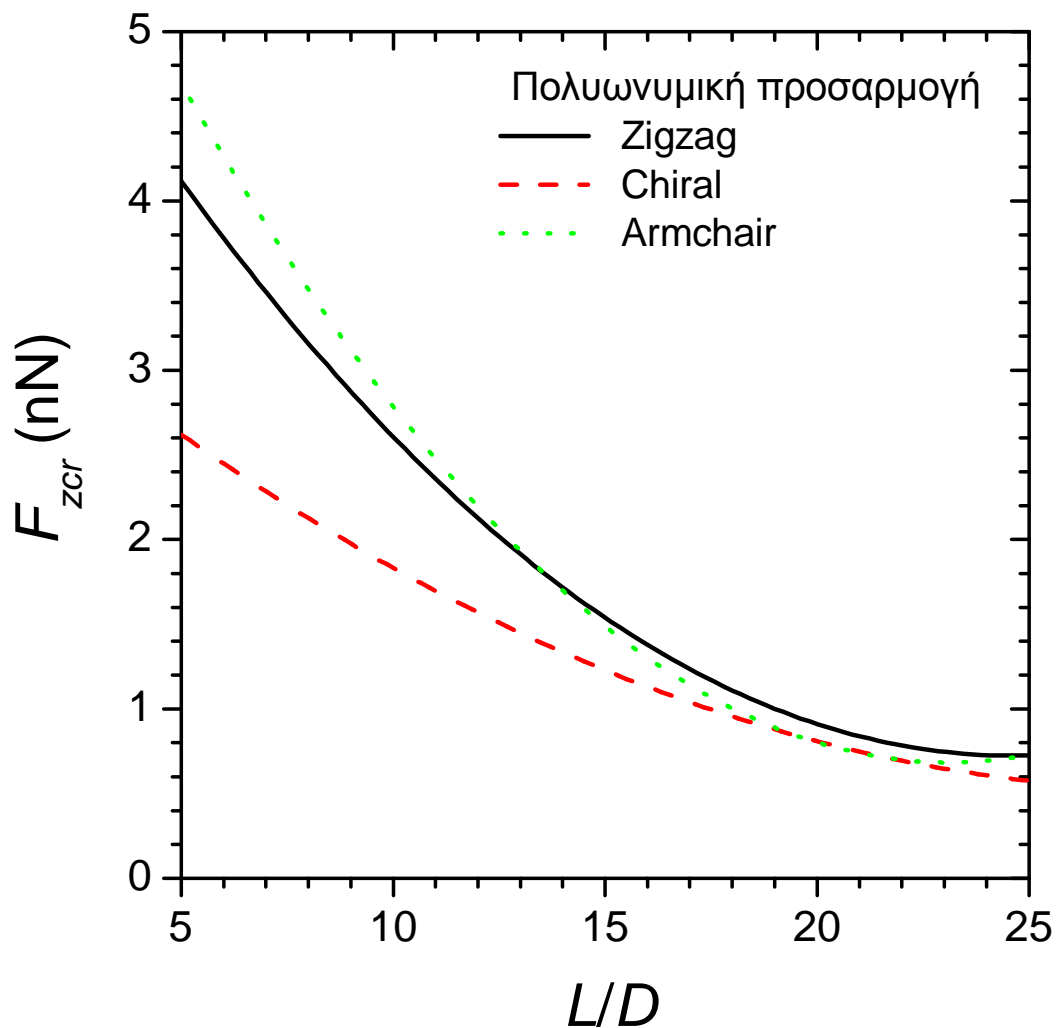
Για να γίνουν πιο κατανοητές οι ιδιομορφές στο χώρο, παρατίθεται το Σχήμα 4.16 για την περίπτωση armchair νανοσωλήνων γεωμετρικού λόγου $L/D = 15$.



Σχήμα 4.18: Κρίσιμες θλιπτικές ιδιομορφές armchair μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα με $L/D=15$ στο χώρο

Στις περισσότερες περιπτώσεις εμφανίζεται κρίσιμη καμπτική παραμόρφωση αστάθειας. Ωστόσο για νανοσωλήνες με μεγαλύτερη διάμετρο και λόγους γεωμετρίας, παρουσιάζονται κρίσιμες παραμορφώσεις διατομής στο άκρο φόρτισης. Ως αποτέλεσμα, παρατηρείται μια σημαντική πτώση σε κρίσιμη θλιπτική δύναμη δεδομένου ότι οι κρίσιμες παραμορφώσεις κοντά στο άκρο τείνουν να εμφανίζονται για μικρότερα θλιπτικά φορτία.

Προκειμένου να επιτευχθούν ορισμένα σημαντικά συμπεράσματα σχετικά με την επίδραση της χειρομορφίας στην ευστάθεια των νανοσωλήνων παρουσιάζεται το Σχήμα 4.17. Το συγκεκριμένο σχήμα παρουσιάζει τη μέση διακύμανση των κρίσιμων θλιπτικών φορτίων των zigzag, chiral και armchair νανοσωλήνων σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο τους. Κάθε καμπύλη έχει προκύψει από την πολυωνυμική προσαρμογή όλων των υπολογισμένων αποτελεσμάτων που αντιστοιχούν σε νανοσωλήνες ίδιας χειρομορφίας.



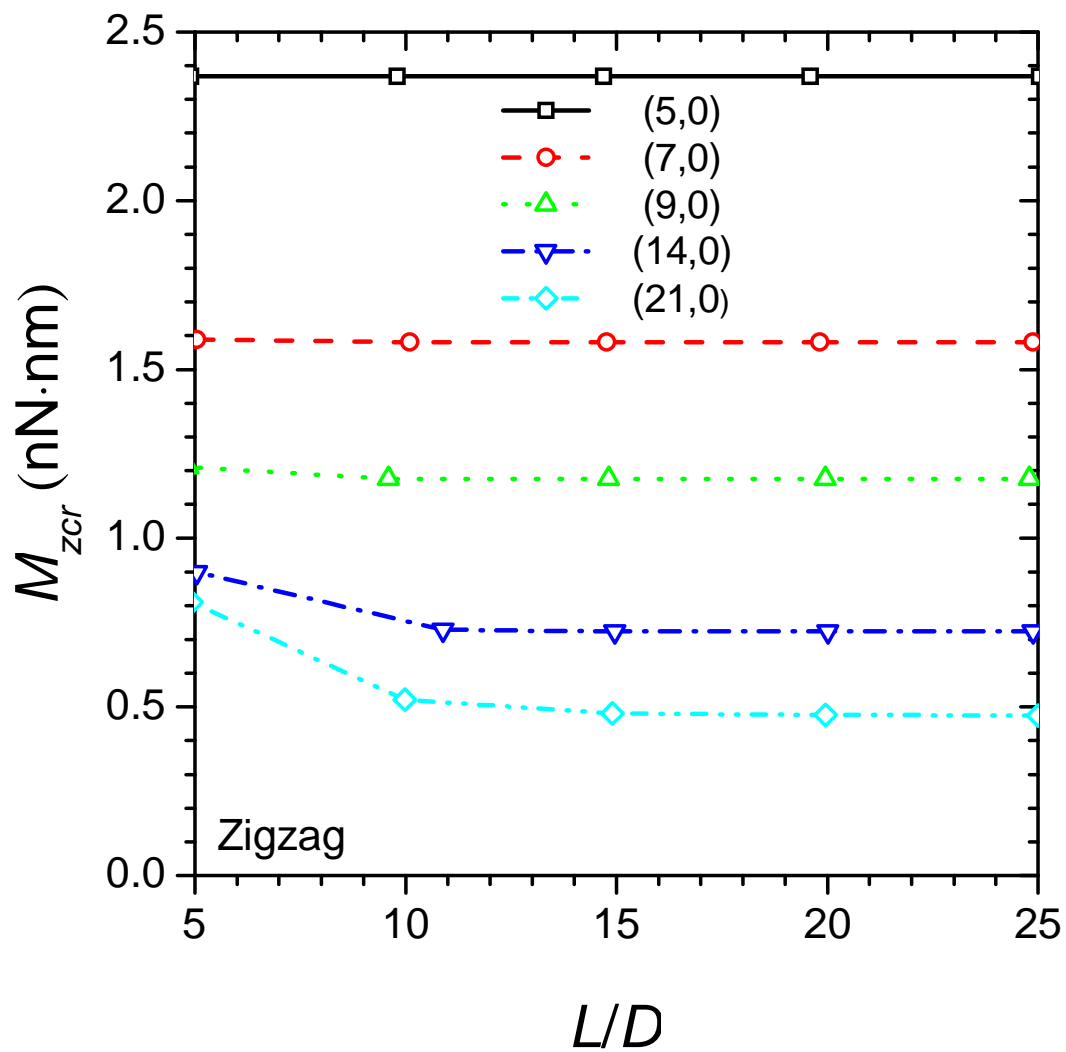
Σχήμα 4.19: Μέση κρίσιμη θλιπτική δύναμη αστάθειας σε σχέση με το λόγο γεωμετρίας των νανοσωλήνων

Προκύπτει ότι η κρίσιμη θλιπτική δύναμη ενός zigzag νανοσωλήνα είναι γενικά χαμηλότερη από εκείνη ενός armchair. Αυτή η συμπεριφορά είναι σύμφωνη με αυτό

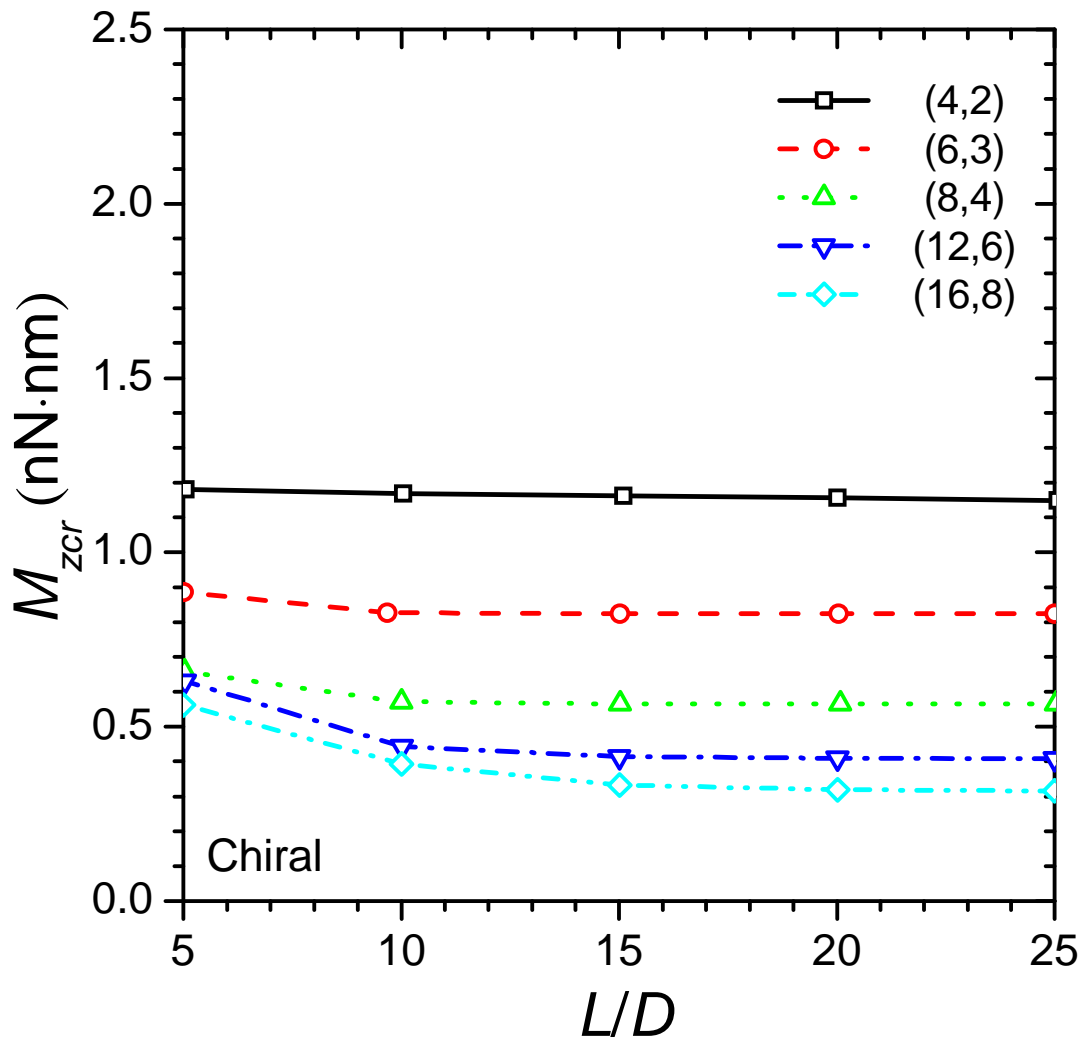
που παρατηρήθηκε για την ενεργή δυσκαμψία των zigzag και armchair νανοσωλήνων (Σχήμα 4.5). Ωστόσο, η κρίσιμη θλιπτική δύναμη ενός chiral νανοσωλήνα είναι σημαντικά χαμηλότερη από εκείνη ενός zigzag ή ενός armchair, κυρίως για μικρούς λόγους γεωμετρίας L/D . Ίσως αυτό το φαινόμενο παρατηρείται λόγω της γεωμετρικής ανωμαλίας που παρουσιάζεται κατά μήκος της αξονικής κατεύθυνσης των chiral νανοσωλήνων.

4.2.2 Μελέτη ευστάθειας σε στρέψη

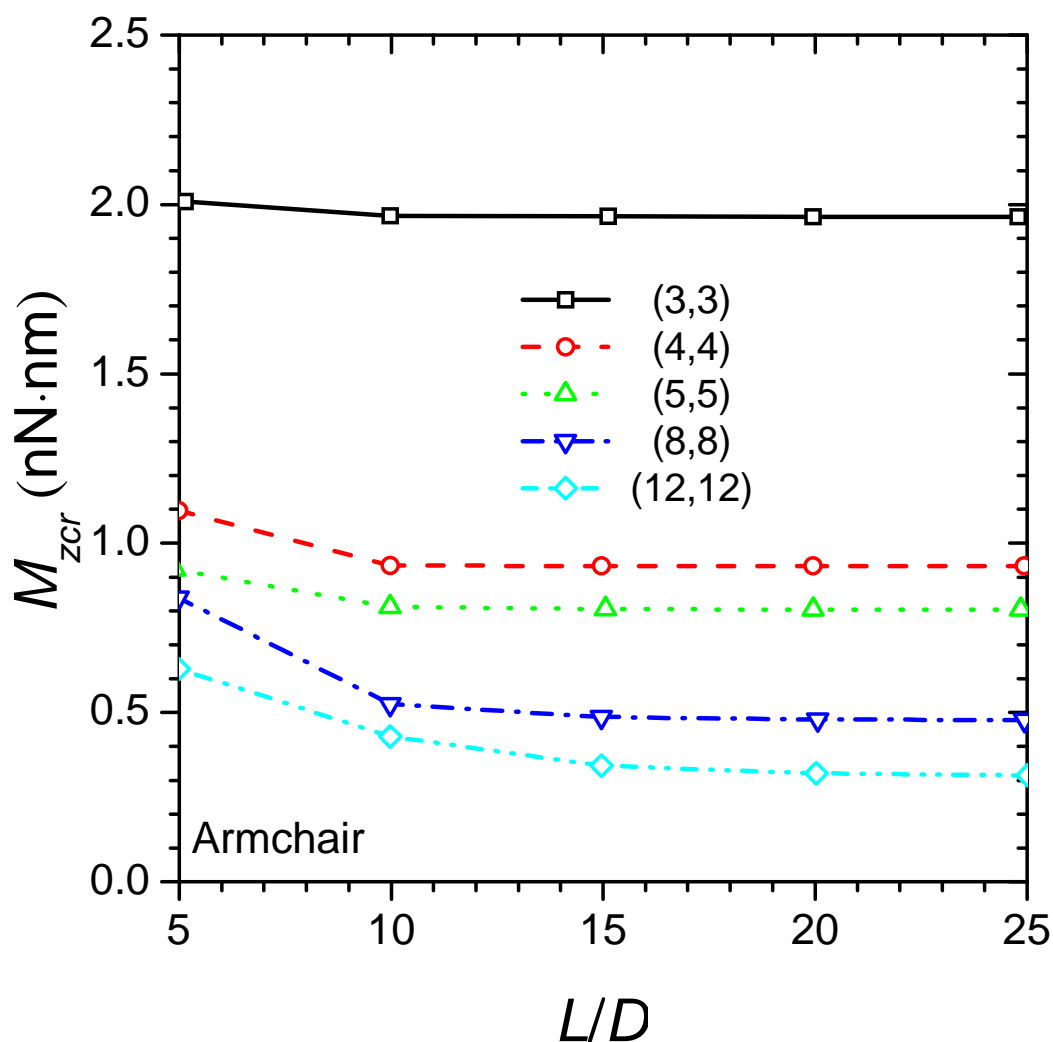
Στη περίπτωση αυτή επιβάλλεται ένα φορτίο στρέψης στο ένα άκρο των νανοσωλήνων, εφαρμόζοντας την ίδια εφαπτόμενη δύναμη σε κάθε κόμβο του άκρου, ενώ το άλλο άκρο του νανοσωλήνα διατηρείται πακτωμένο. Στα Σχήματα 4.20, 4.21 και 4.22 απεικονίζεται η κρίσιμη στρεπτική ροπή που προκαλεί αστάθεια στους armchair, chiral και zigzag νανοσωλήνων, αντίστοιχα, σε σχέση με το γεωμετρικό λόγο τους L/D .



Σχήμα 4.20: Κρίσιμη στρεπτική ροπή αστάθειας των zigzag μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο τους



Σχήμα 4.21: Κρίσιμη στρεπτική ροπή αστάθειας των chiral μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο τους



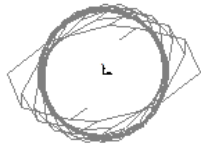
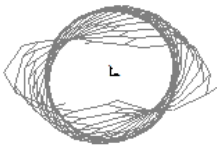
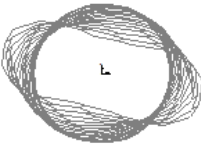


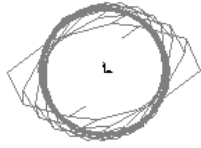
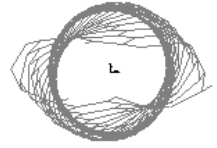
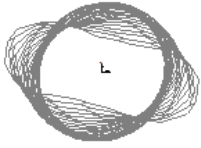

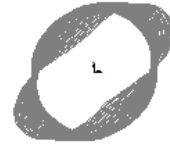
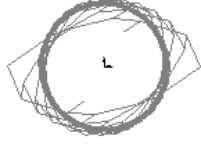
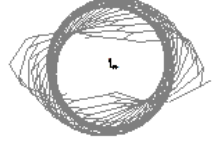




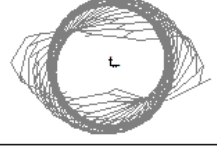
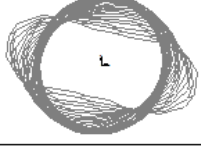

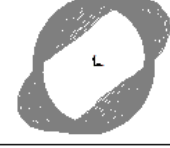

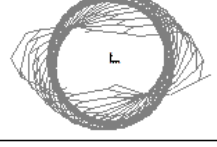
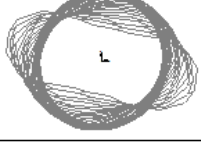


Σχήμα 4.22: Κρίσιμη στρεπτική ροπή αστάθειας των armchair μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο τους

Από τα παραπάνω γραφήματα προκύπτει ότι όσο μικρότερη είναι η διάμετρος, τόσο μεγαλύτερη είναι η κρίσιμη στρεπτική ροπή, ανεξάρτητα από το μήκος. Το κρίσιμο στρεπτικό φορτίο μεταβάλλεται έντονα μόνο για μικρούς λόγους γεωμετρίας.



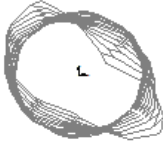
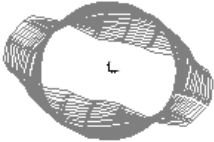













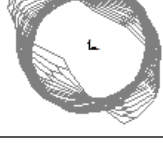




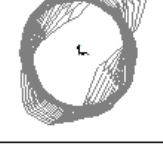


Τα Σχήματα 4.23, 4.24 και 4.25 απεικονίζουν τις αντίστοιχες κρίσιμες ιδιομορφές.

L/D	Κρίσιμες στρεπτικές ιδιομορφές αστάθειας				
	(5,0)	(7,0)	(9,0)	(14,0)	(21,0)
5					
10					
15					
20					
25					

Σχήμα 4.23: Κρίσιμες στρεπτικές ιδιομορφές zigzag μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο τους

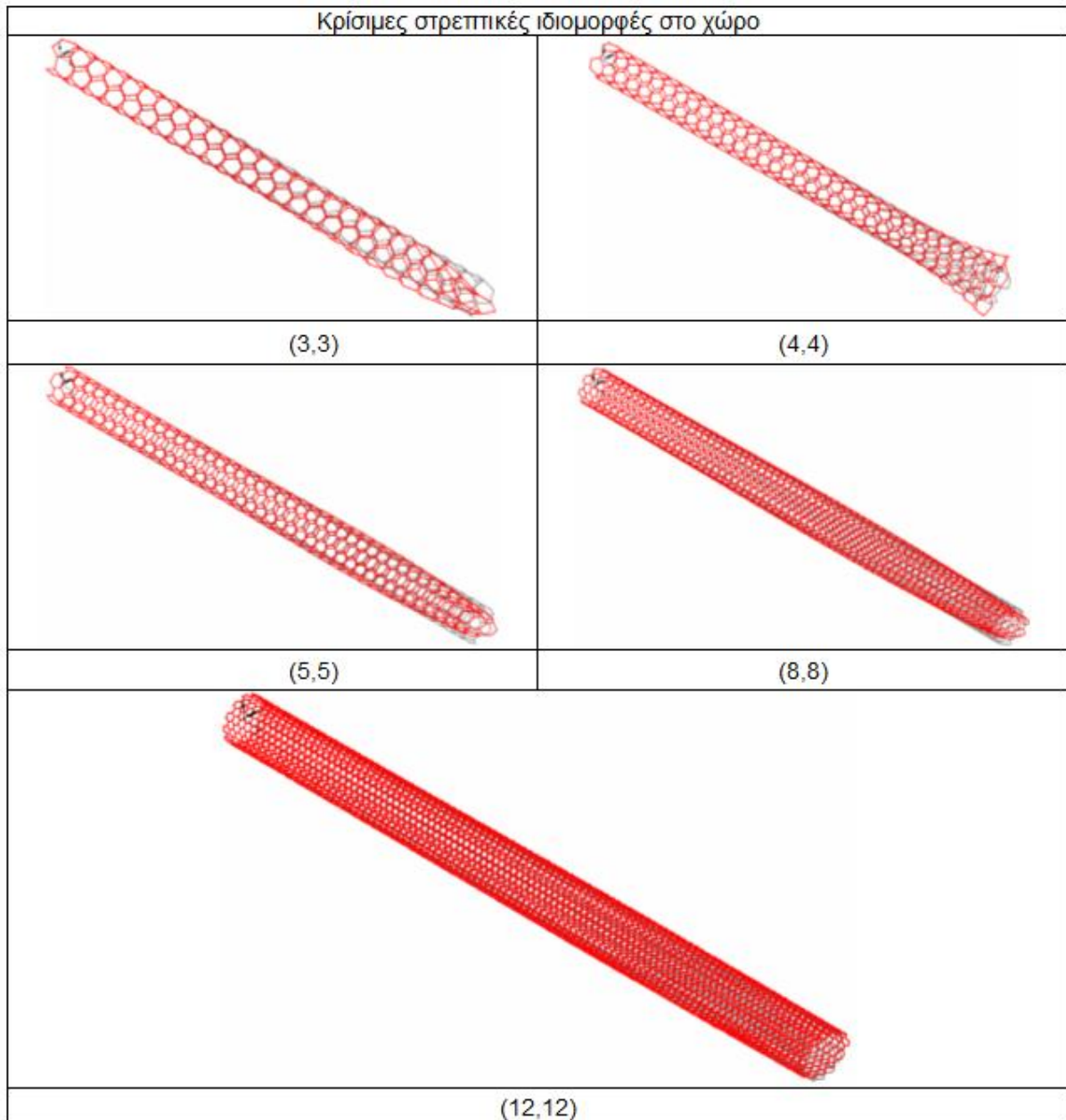
L/D	Κρίσιμες στρεπτικές ιδιομορφές αστάθειας				
	(4,2)	(6,3)	(8,4)	(12,6)	(16,8)
5					
10					
15					
20					
25					

Σχήμα 4.24: Κρίσιμες στρεπτικές ιδιομορφές chiral μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο τους

L/D	Κρίσιμες στρεπτικές ιδιομορφές αστάθειας				
	(3,3)	(4,4)	(5,5)	(8,8)	(12,12)
5					
10					
15					
20					
25					

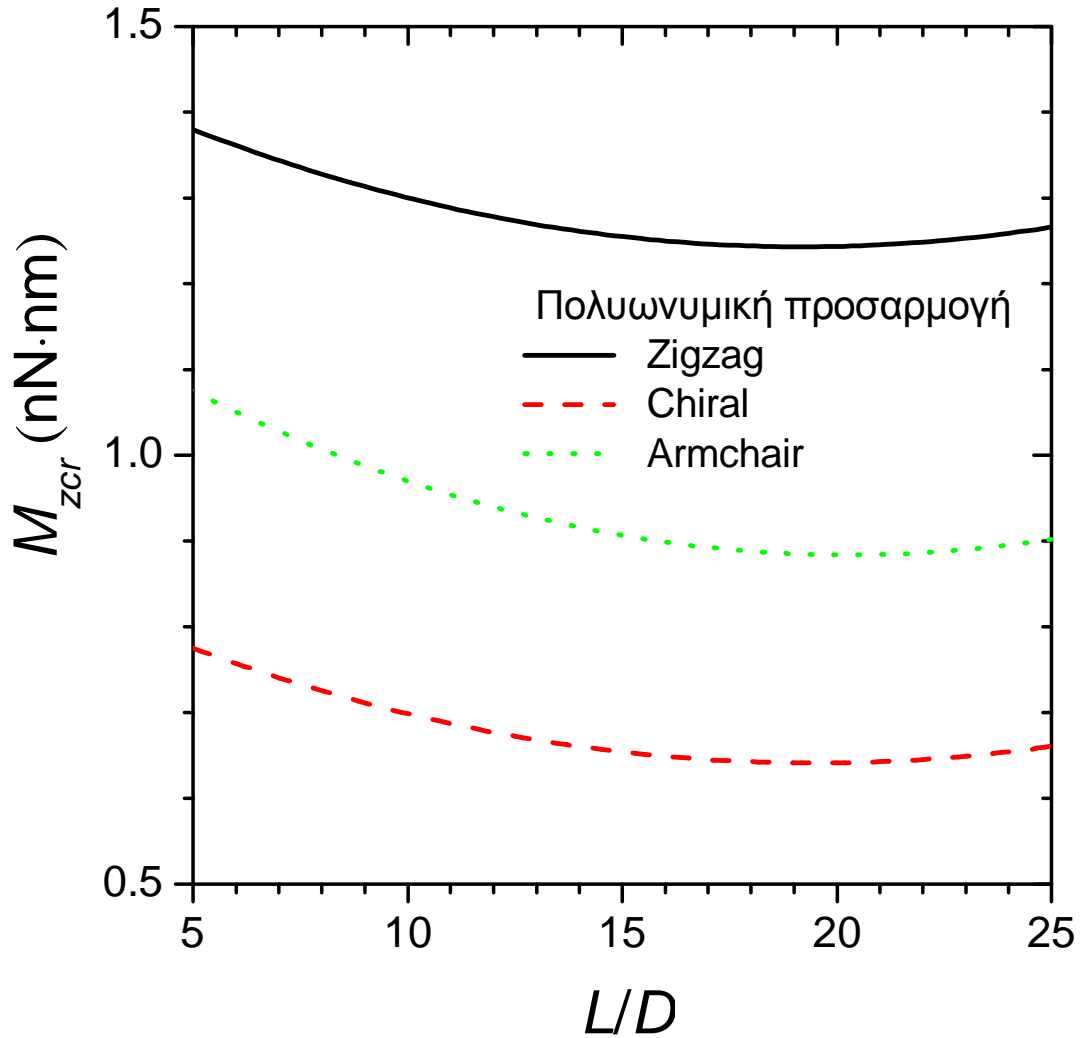
Σχήμα 4.25: Κρίσιμες στρεπτικές ιδιομορφές armchair μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο τους

Σε όλες τις περιπτώσεις παρατηρήθηκε μια κρίσιμη παραμόρφωση διατομής στο φορτιζόμενο άκρο. Για να γίνουν πιο κατανοητές οι ιδιομορφές στο χώρο, παρατίθεται το Σχήμα 4.24 για την περίπτωση armchair νανοσωλήνων γεωμετρικού λόγου $L/D = 15$.



Σχήμα 4.26: Κρίσιμες στρεπτικές ιδιομορφές armchair μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα με $L/D=15$ στο χώρο

Το Σχήμα 4.25 παρουσιάζει τη μέση διακύμανση των κρίσιμων στρεπτικών φορτίων των zigzag, chiral και armchair νανοσωλήνων σε σχέση με τον γεωμετρικό λόγο τους. Κάθε καμπύλη έχει προκύψει από την πολυωνυμική προσαρμογή όλων των υπολογισμένων αποτελεσμάτων που αντιστοιχούν σε νανοσωλήνες ίδιας χειρομορφίας.



Σχήμα 4.27: Μέση στρεπτική κρίσιμη ροπή αστάθειας σε σχέση με το λόγο γεωμετρίας των νανοσωλήνων

Από το Σχήμα 4.25 καθίσταται σαφές ότι η κρίσιμη στρεπτική ροπή ενός zigzag νανοσωλήνα είναι γενικά υψηλότερη από αυτή του armchair νανοσωλήνα του ίδιου μεγέθους. Παρόμοια επίδραση της χειρομορφίας παρατηρήθηκε και στην ενεργή στρεπτική δυσκαμψία (Σχήμα 4.6). Ωστόσο, οι chiral νανοσωλήνες φαίνεται ότι παρουσιάζουν υψηλότερη αστάθεια υπό στρεπτικές φορτίσεις λόγω της ιδιόμορφης αξονικής κατανομής των ατόμων τους.

5. ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Μια μέθοδος μηχανικής των κατασκευών που βασίζεται στη χρήση απλών, τρισδιάστατων, δίκομβων, γραμμικών πεπερασμένων στοιχείων ράβδου αναπτύχθηκε για την προσομοίωση της γραμμικής ελαστικής μηχανικής συμπεριφοράς και ευστάθειας των zigzag, chiral και armchair μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα, για ένα ευρύ φάσμα γεωμετρικών χαρακτηριστικών τους. Για τη μοντελοποίηση των συγκεκριμένων νανοδομών, οι διατομικές αλληλεπιδράσεις που περιγράφει η μοριακή χημεία προσομοιώθηκαν με τη χρήση στοιχείων ράβδου συγκεκριμένης δυσκαμψίας τα οποία τοποθετήθηκαν και συναρμολογήθηκαν κατάλληλα στο τρισδιάστατο χώρο για να περιγράψουν επακριβώς την ατομική δομή των νανοσωλήνων.

Με την προτεινόμενη μέθοδο υπολογίσθηκαν σημαντικές ιδιότητες των μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα όπως το ενεργό μέτρο ελαστικότητας, το ενεργό μέτρο διάτμησης και το ακτινικό μέτρο ελαστικότητας. Επιπρόσθετα μελετήθηκε η ελαστική ευστάθεια των νανοσωλήνων κάτω από θλιπτικά και στρεπτικά φορτία. Προβλέφθηκαν οι σχέσεις μεταξύ των γεωμετρικών χαρακτηριστικών των νανοσωλήνων και του κρίσιμου φορτίου που προκαλεί την αστάθεια τους.

Η αξιοπιστία της μεθόδου αποδείχθηκε από συγκρίσεις με αντίστοιχα αποτελέσματα από την διεθνή βιβλιογραφία.

Η προτεινόμενη αριθμητική τεχνική φαίνεται να είναι πολύ ελκυστική σε σχέση με άλλες θεωρητικές ή πειραματικές και αυτό οφείλεται στην υπολογιστική απόδοση και απλοϊκότητα της.

Από τα αριθμητικά αποτελέσματα προέκυψαν κάποια καίρια συμπεράσματα όσον αφορά τη μηχανική συμπεριφορά των μονότοιχων νανοσωλήνων άνθρακα:

Οι zigzag μονότοιχοι νανοσωλήνες άνθρακα παρέχουν ελαφρώς χαμηλότερη ενεργή και ακτινική δυσκαμψία από τους chiral ενώ παράλληλα οι chiral μονότοιχοι νανοσωλήνες άνθρακα παρουσιάζουν ελαφρώς χαμηλότερη ενεργή και ακτινική δυσκαμψία σε σχέση με τους armchair, κυρίως για μικρές διαμέτρους. Ακριβώς το αντίθετο ισχύει για την ενεργό στρεπτική δυσκαμψία.

Ειδικά για μικρές αναλογίες μήκους διαμέτρου και υπό θλιπτική φόρτιση, οι zigzag μονότοιχοι νανοσωλήνες άνθρακα είναι λιγότερο ευσταθείς από τους armchair. Αντίθετα, ανεξάρτητα από την αναλογία και υπό στρεπτική φόρτιση, οι zigzag μονότοιχοι νανοσωλήνες άνθρακα παρέχουν μεγαλύτερη σταθερότητα από ό,τι οι armchair. Οι chiral νανοσωλήνες είναι λιγότερο σταθεροί υπό θλιπτικές ή στρεπτικές φορτίσεις σε σύγκριση με τους zigzag και armchair νανοσωλήνες του ίδιου μεγέθους.

Έχοντας ως βάση την προτεινόμενη μέθοδο, η μη γραμμική μηχανική απόκριση και ευστάθεια των μονότοιχων αλλά και πολύτοιχων νανοσωλήνων άνθρακα δύναται να αντιμετωπισθεί στο μέλλον.

Στο σημείο αυτό πρέπει να τονισθεί η μέθοδος και τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται στην συγκεκριμένη πτυχιακή θεωρούνται πρωτότυπα και για το λόγο αυτό έχουν ήδη υποβληθεί για δημοσίευση σε διεθνές περιοδικό με κριτές με τους εξής συγγραφείς και τίτλο:

G.I. Giannopoulos, A.P. Tsiros, S.K. Georgantzinou. Prediction of elastic mechanical behavior and stability of single-walled carbon nanotubes using bar elements.

BIBΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Kroto H.W., Heath J.R., Brien S.C., Curl R.F., Smalley R.E., C60: Buckminsterfullerene, *Nature*, Vol. 318, pp. 162-163, 1985.
- [2] Iijima S., Ichihashi T., *Single-shell carbon nanotubes of 1-nm diameter*, *Nature*, Vol. 363, pp. 603-605, 1993.
- [3] Krishnan A., Dujardin E., Ebbesen T.W., Yianilos P.N., Treacy M.M.J., *Young's modulus of single-walled nanotubes*, *Physical Review B*, Vol. 58(20), pp.14013–14019, 1998.
- [4] Tomblor W., Zhou C., Kong J., Dai H., Liu L., Jayanthi C.S., Tang M., Wu S.Y., *Reversible electromechanical characteristics of carbon nanotubes under local probe manipulation*, *Nature*, Vol. 405, pp.769–772, 2000.
- [5] Barboza A.P.M., Chacham H., Neves B.R.A., *Universal response of single-wall carbon nanotubes to radial compression*, *Physical Review Letters*, Vol. 102 pp. 025501, 2009.
- [6] Wang H.-Y., Zhao M., Mao S.X., *Radial moduli of individual single-walled carbon nanotubes with and without electric current flow*, *Applied Physics Letters*, Vol. 89, pp. 211906, 2006.
- [7] Abrams Z.R., Hanein Y., *Radial deformation measurements of isolated pairs of single-walled carbon nanotubes*, *Carbon*, Vol. 45, pp. 738–743, 2007.
- [8] Yu M.-F., Kowalewski T., Ruoff R.S., *Investigation of the Radial Deformability of Individual Carbon Nanotubes under Controlled Indentation Force*, *Physical Review Letters*, Vol. 85(7), pp. 1456–1459, 2000.
- [9] Palaci I., Fedrigo S., Brune H., Klinke C., Chen M., Riedo E., *Radial Elasticity of Multiwalled Carbon Nanotubes*, *Physical Review Letters*, Vol 94, pp. 175502, 2005.
- [10] Li Y., Qiu X., Yina Y., Yanga F., Fan Q., *Equivalent elastic moduli of a zigzag single-walled carbon nanotube given by uniform radial deformation*, *Physics Letters A*, Vol. 373, pp. 2368–2373, 2009.
- [11] Hasegawa M., Nishidate K., *Radial deformation and stability of single-wall carbon nanotubes under hydrostatic pressure*, *Physical Review B*, Vol. 74, pp. 115401, 2006.

- [12] Popov V.N., Van Doren V.E., *Elastic properties of single-walled carbon nanotubes*, Physical Review B, Vol. 61(4), pp. 3078–3084, 2000.
- [13] Hernández E., Goze C., Bernier P., Rubio A., *Elastic properties of C and BxCyNz composite nanotubes*, Physical Review Letters, Vol. 80, pp. 4502–4505, 1998.
- [14] Jin Y., Yuan F.G., *Simulation of elastic properties of single-walled carbon nanotubes*, Composites Science and Technology, Vol 63, pp. 1507–1515, 2003.
- [15] Ye X., Sun D.Y., Gong X.G., *Molecular dynamics study of radial pressure transmission in multiwalled carbon nanotubes*, Physical Review B, Vol 75, pp. 073406, 2007.
- [16] Chen W.-H., Cheng H.-C., Liu Y.-L., *Radial mechanical properties of single-walled carbon nanotubes using modified molecular structure mechanics*, Computational Materials Science, Vol. 47, pp. 985–993, 2010.
- [17] Chang T., Geng J., Guo X., *Prediction of chirality- and size-dependent elastic properties of single-walled carbon nanotubes via a molecular mechanics model*, Proceeding of the Royal Society A, Vol. 462, pp. 2523–2540, 2006.
- [18] To C.W.S., *Bending and shear moduli of single-walled carbon nanotubes*, Finite Elements in Analysis and Design, Vol. 42, pp. 404–413, 2006.
- [19] Tsepres K.I., Papanikos P., *Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes*, Composites Part B, Vol. 36, pp. 468–477, 2005.
- [20] Giannopoulos G.I., Kakavas P.A., Anifantis N.K., *Evaluation of the effective mechanical properties of single walled carbon nanotubes using a spring based finite element approach*, Computational Materials Science, Vol. 41, pp. 561-569. 2008.
- [21] Gupta S., Dharamvir K., Jindal V.K., *Elastic moduli of single-walled carbon nanotubes and their ropes*, Physical Review B, Vol. 72, pp. 165428, 2005.
- [22] Li C., Chou T.-W., *Elastic properties of single-walled carbon nanotubes in transverse directions*, Physical Review B, Vol. 69, pp. 073401, 2004.
- [23] Wang Q., Varadan V.K., *Stability analysis of carbon nanotube probes for an atomic force microscope via a continuum model*, Smart Materials and Structures, Vol. 14, pp. 1196–1203, 2005.

- [24] Zhang Y.Y., Wang C.M., Duan W.H., Xiang Y., Zong Z., *Assessment of continuum mechanics models in predicting buckling strains of single-walled carbon nanotubes*, Nanotechnology, Vol. 20, pp.395707, 2009.
- [25] Cao G., Chen X., *Buckling of single-walled carbon nanotubes upon bending: Molecular dynamics simulations and finite element method*, Physical Review B, Vol. 73, pp. 155435, 2006.
- [26] Annin B.D., Korobeynikov S.N., Babichev A.V., *Computer simulation of a twisted nanotube buckling*, Journal of Applied and Industrial Mathematics, Vol. 3(3), pp. 318–333, 2009.
- [27] Chang I-L., Chiang B.-C., *Mechanical buckling of single-walled carbon nanotubes: Atomistic simulations*, Journal of Applied Physics, Vol. 106, pp. 114313, 2009.
- [28] Hu N., Nunoya K., Pan D., Okabe T., Fukunaga H., *Prediction of buckling characteristics of carbon nanotubes*, International Journal of Solids and Structures, Vol. 44, pp. 6535–6550, 2007.
- [29] Li C., Chou T.-W., *Modeling of elastic buckling of carbon nanotubes by molecular structural mechanics approach*, Mechanics of Materials, Vol. 36 pp. 1047–1055, 2004.
- [30] Ansari R., Rouhi S., *Atomistic finite element model for axial buckling of single-walled carbon nanotubes*, Physica E, Vol. 43, pp. 58–69, 2010.
- [31] Su C.Q., Liu K.X., *Combined torsional buckling of multi-walled carbon nanotubes coupling with radial pressures*, Journal of Physics D: Applied Physics, Vol. 40, pp. 4027–4033, 2007.
- [32] LUSAS user's manual. FEA Ltd, Forge House, 66 High Street, Kingston upon Thames, Surrey KT1 1HN, UK, 1999.
- [33] Ebbesen T. W., *Carbon nanotubes: Preparation and properties*, CRC Press, 1997.
- [34] Χαριστός Δ.Α., Γιούρη- Τσοχατζή Α., Μανουσάκη Γ.Ε., *Γενική και ανόργανη χημεία γεολόγων*, Εκδόσεις ΖΗΤΗ, 1998.
- [35] Kratchmer W., Lamb L.D., Fostiropoulos K., Huffman D.R., *Solid C₆₀: a new form of Carbon*, Nature, Vol. 347, pp. 354, 1990.

- [36] Betune D.S., Clang C.H., de Vries M.S., Gorman G., Savoy R., Vazquez J., Beyers R., *Cobalt-catalysed growth of carbon nanotubes with single-atomic-layer walls*, Nature, Vol. 363, pp. 605, 1993.
- [37] Rode A.V., Hyde S.T., Gamaly E.G., Elliman R.J., McKenzie D.R., Bulcock S., *Structural analysis of a carbon foam formed by high pulse-rate laser ablation*, Applied Physics A, Vol. 69, pp. 755-758, 1999.
- [38] Iijima S., *Helical microtubules of graphitic carbon*, Nature, Vol. 354, pp.56-58, 1991.
- [39] Dresselhaus MS, Dresselhaus G., Avouris P., *Carbon Nanotubes*, Springer, Berlin, Germany, 2001.
- [40] Kołoczek J., Young-Kyun K., Burian A., *Characterization of spatial correlations in carbon nanotubes-modelling studies*, Journal of Alloys and Compounds, Vol. 28, pp. 222–225, 2001.
- [41] Cornell W.D., Cieplak P., Bayly C.I., Gould I.R., Merz Jr. K.M., Ferguson D.M., Spellmeyer D.C., Fox T., Caldwell J.W., Kollman P.A., *A second generation force-field for the simulation of proteins, nucleic-acids, and organic-molecules*, Journal of American Chemical Society, Vol. 117, pp. 5179–5197, 1995.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ

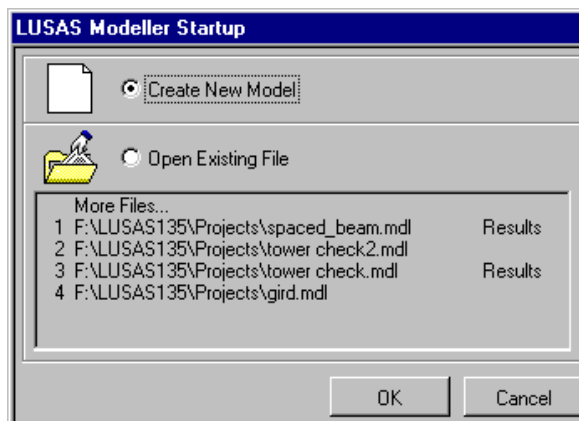
ΠΑΡΑΘΕΣΗ ΟΔΗΓΙΩΝ ΚΑΤΑΣΚΕΥΗΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΑ

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 (9,0) 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.

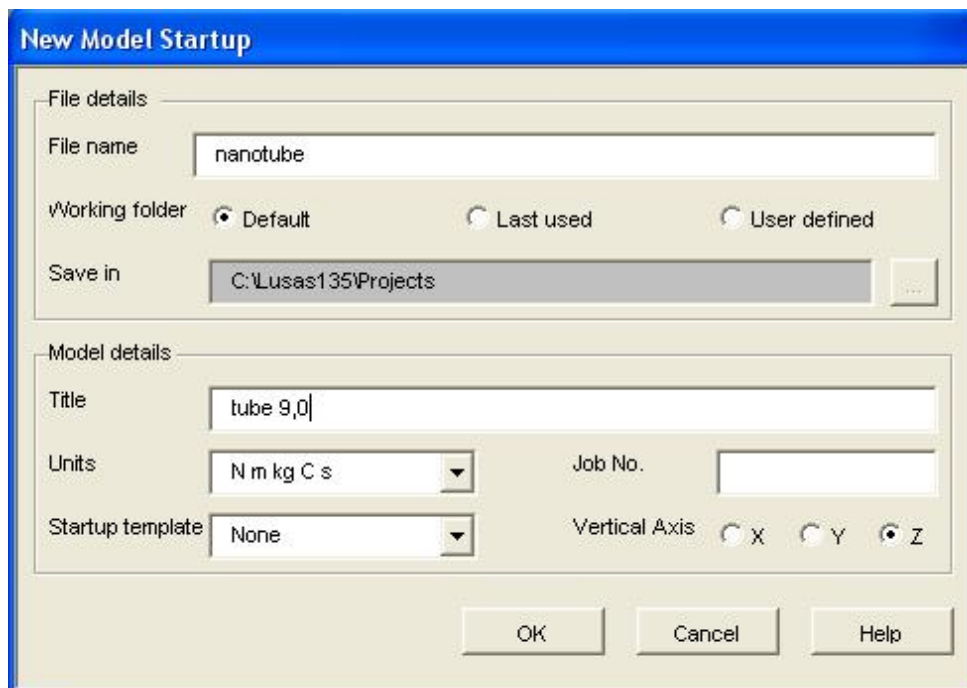
ΕΙΣΑΓΩΓΗ

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




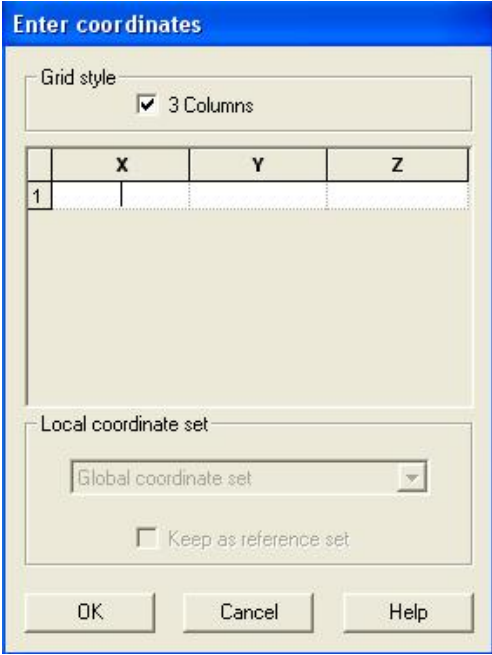
Για ένα νέο μοντέλο θα εμφανιστεί το New Model Startup παράθυρο διαλόγου στο οποίο καλείτε ο χρήστης να δηλώσει κάποια βασικά στοιχεία ως εξής:

- Ως όνομα πληκτρολογούμε “nanotube”.
- Χρησιμοποιούμε Default working folder.
- Ως τίτλο πληκτρολογούμε “tube 9,0”.
- Ως σύστημα μονάδων ορίζουμε N mm t 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 (9,0). 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. Καθώς αυτή είναι γνωστή είμαστε σε θέση να αρχίσουμε τη μοντελοποίηση.


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:



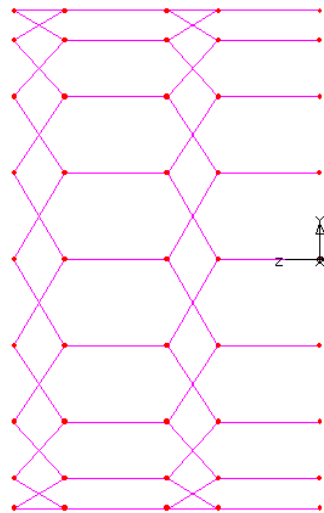
	X	Y	Z
1			

Ακολούθως 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.

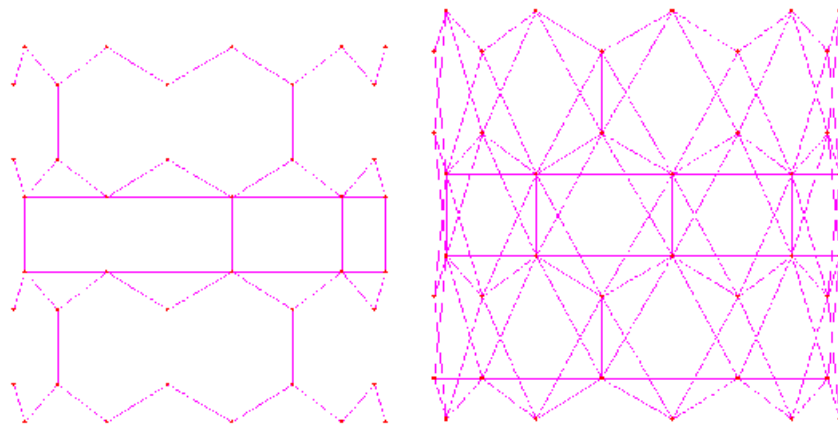
Αυτό συνεχίζεται μέχρι να περαστούν τα σημεία τα οποία θα σχηματίσουν τον πρώτο δακτύλιο.

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:



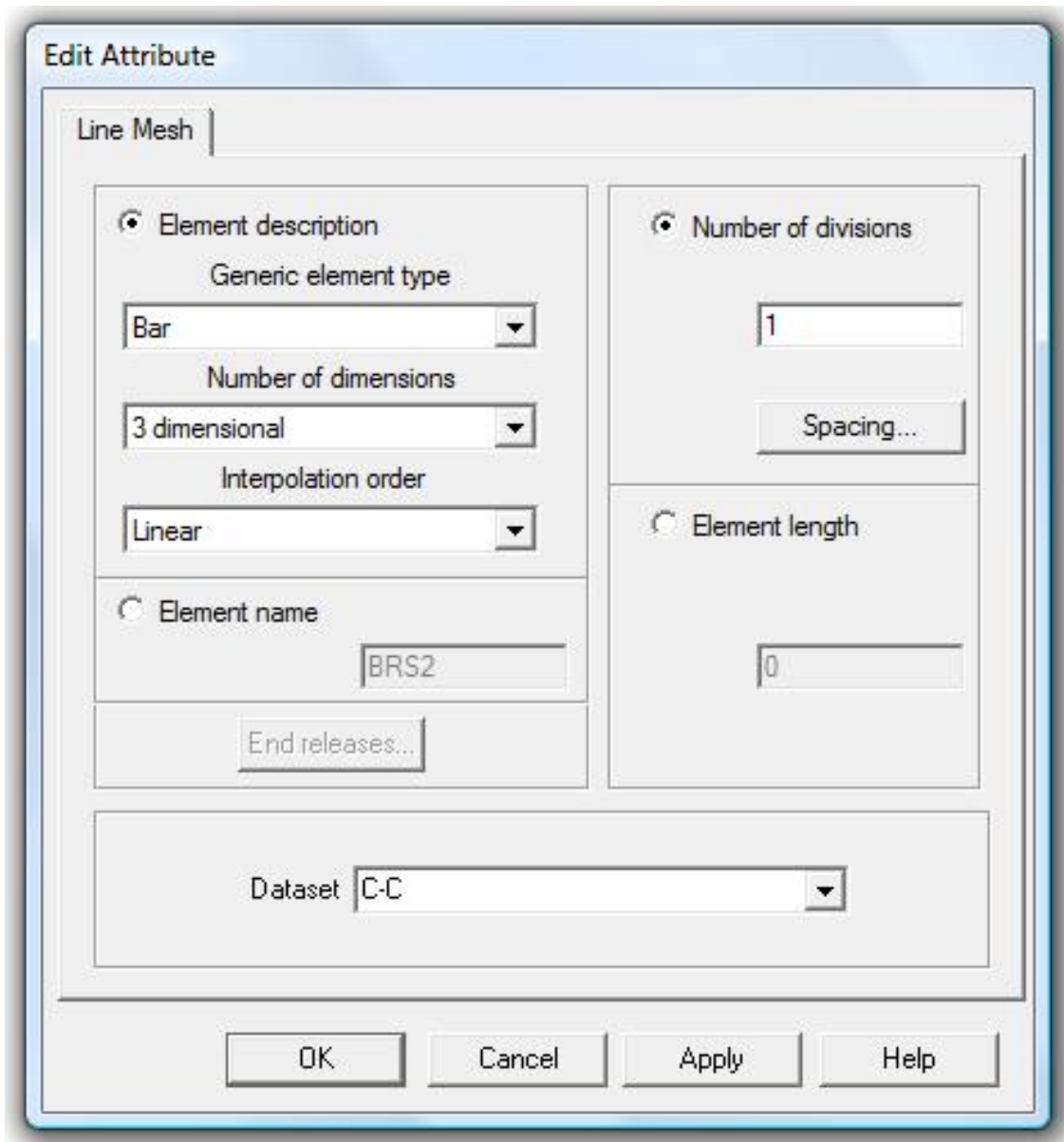
Επόμενο βήμα είναι να σχεδιάσουμε στο παραπάνω σχήμα ,τις C-C-C (straight) και C-C-C (slant) γραμμές:



Στη συνέχεια θα πρέπει να αυξήσουμε το μήκος του νανοσωλήνα ώστε $L/D \geq 10$. Πριν προχωρήσουμε όμως θα ήταν συνετό να δηλώσουμε στο πρόγραμμα τα C-C, C-C-C (straight) και C-C-C (slant) πεπερασμένα στοιχεία ράβδου, το οποίο γίνεται ως εξής:

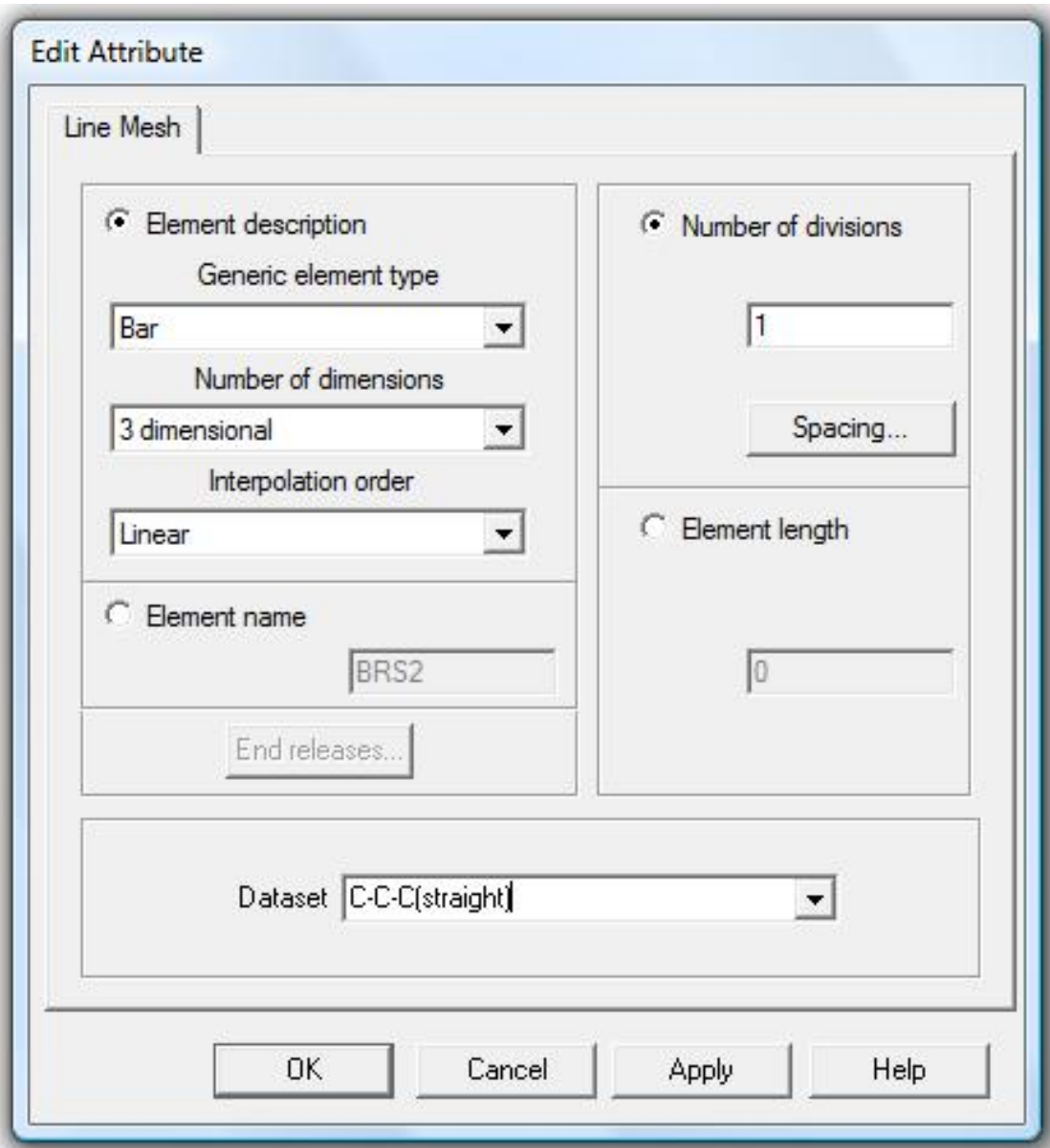
Αρχικά δηλώνουμε τα C-C στοιχεία πηγαίνοντας Attributes-Mesh-Line όπου θα εμφανιστεί το Feature Mesh Definition παράθυρο διαλόγου.

Στο οποίο καταγράφονται τα παρακάτω:



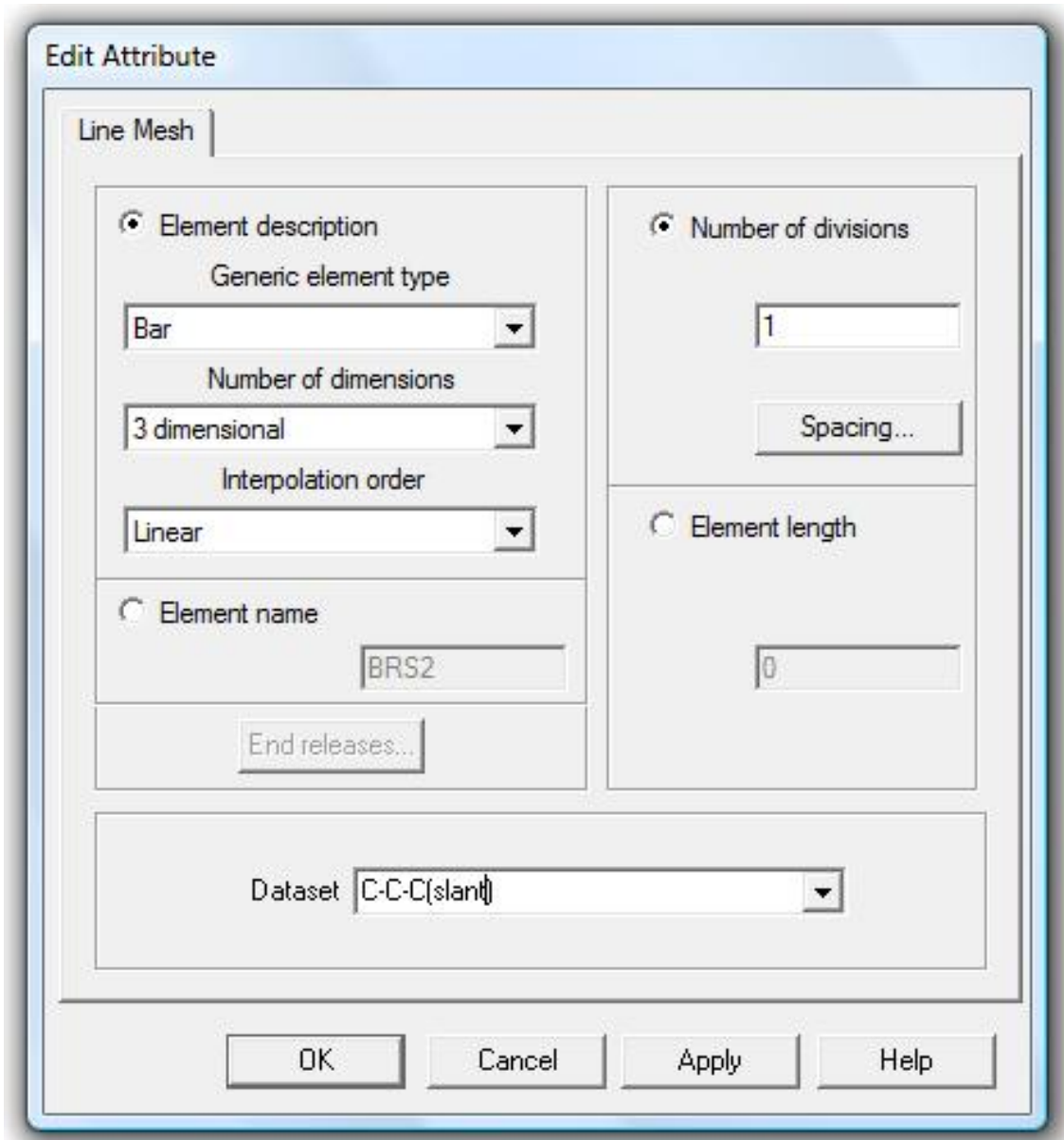
Τώρα έχοντας δηλώσει τα C-C μπορούμε επιλέγοντας όλες τις γραμμές και κάνοντας drag and drop να τα περάσουμε με αυτόν τον τρόπο και στο νανοσωλήνα.

Στη συνέχεια δηλώνουμε τα C-C-C (straight) πηγαίνοντας Attributes- Mesh- Line όπου θα εμφανιστεί το Feature Mesh Definition παράθυρο διαλόγου και συμπληρώνουμε τα εξής:



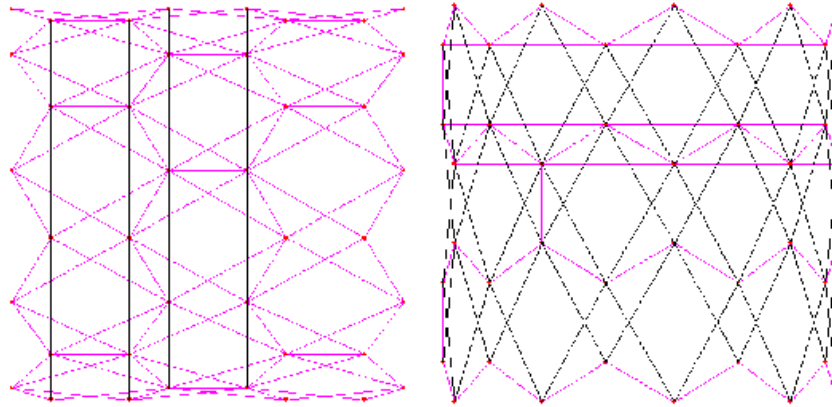
Πατώντας Apply και Close έχουν καταγραφεί τα C-C-C (straight).

Με τον ίδιο τρόπο δηλώνουμε και τα C-C-C(slant) στοιχεία συμπληρώνοντας το παράθυρο διαλόγου ως εξής:



Πατώντας Apply και Close έχουν καταγραφεί τα C-C-C (slant).

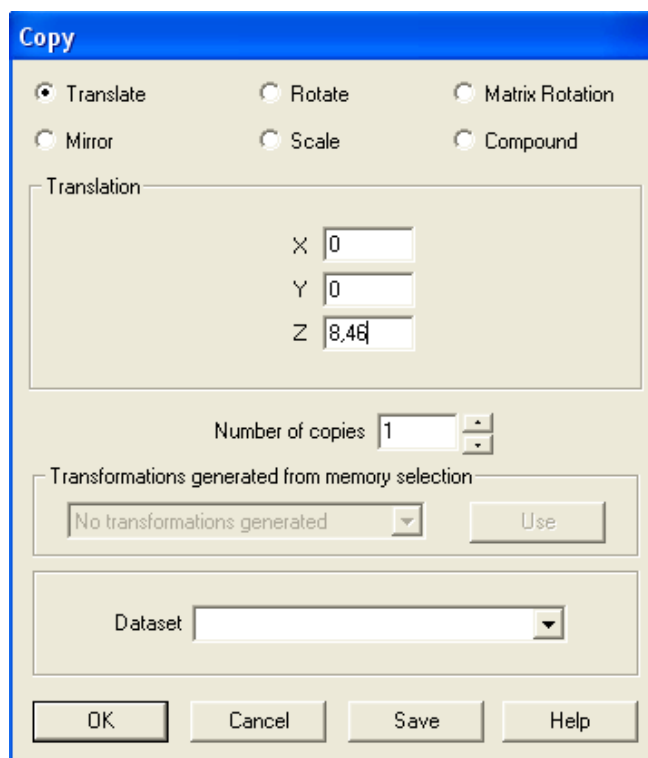
Αυτό που μένει να κάνουμε είναι να επιλέξουμε ξεχωριστά τα straight και τα slant και με drag and drop να περάσουμε στο καθένα το κατάλληλο Mesh αρχείο ως εξής:



Στη συνέχεια 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:



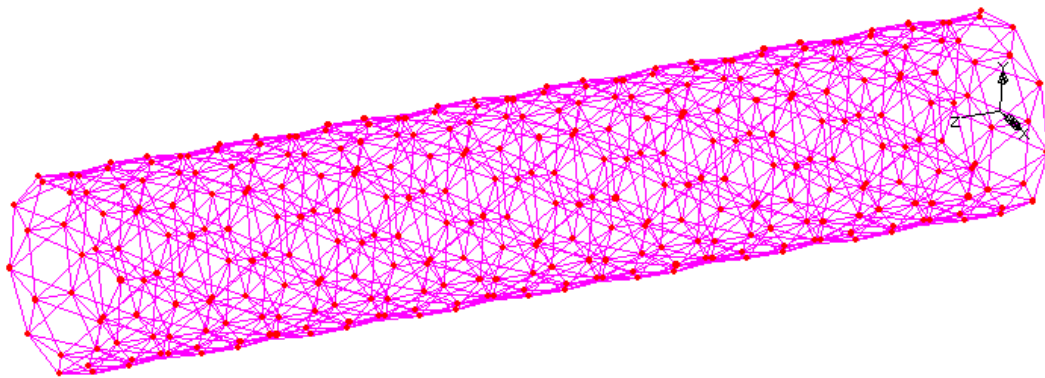
Πατώντας OK ο νανοσωλήνας θα διπλασιαστεί. Αυτή η διαδικασία επαναλαμβάνεται ωςότου $L/D \geq 10$.

Επιπλέον κατά τη διάρκεια της αντιγραφής έχουν δημιουργηθεί διπλά σημεία και γραμμές που εμείς θα ενώσουμε με τον παρακάτω τρόπο:

Πατάμε Geometry- Line-Merge

Πατάμε Geometry-Point-Merge

Το αποτέλεσμα θα είναι ο παρακάτω νανοσωλήνας:

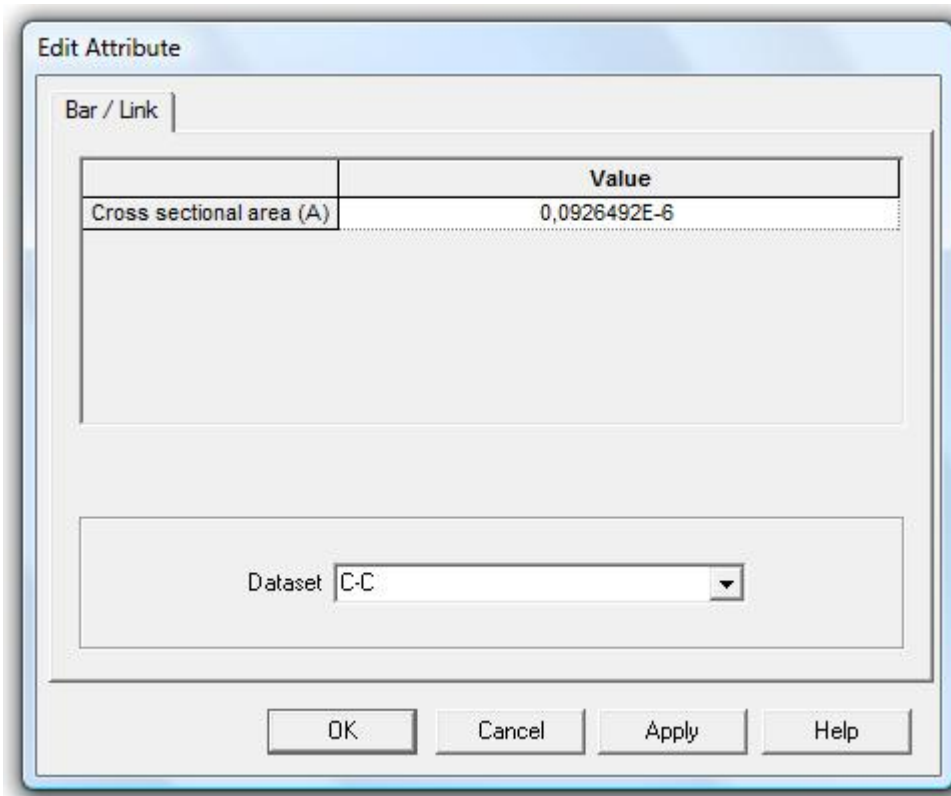


Στο επόμενο στάδιο θα δηλώσουμε την επιφάνεια διατομής των στοιχείων ράβδου με τον παρακάτω τρόπο:

Πατάμε Attributes- Geometric- line – bar/link.

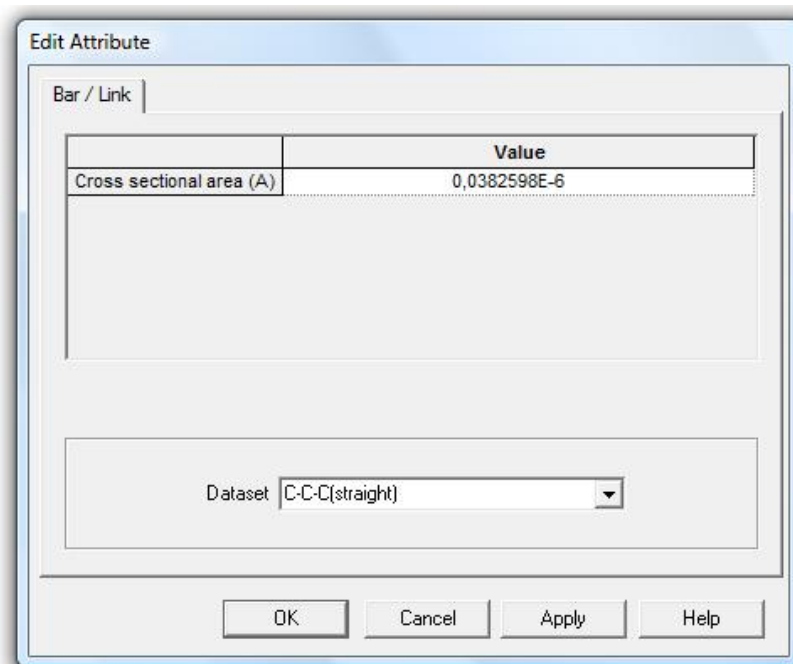
Θα εμφανιστεί το παρακάτω παράθυρο διαλόγου, όπου θα συμπληρωθούν τα κάτωθεν.

Για το C-C bar:



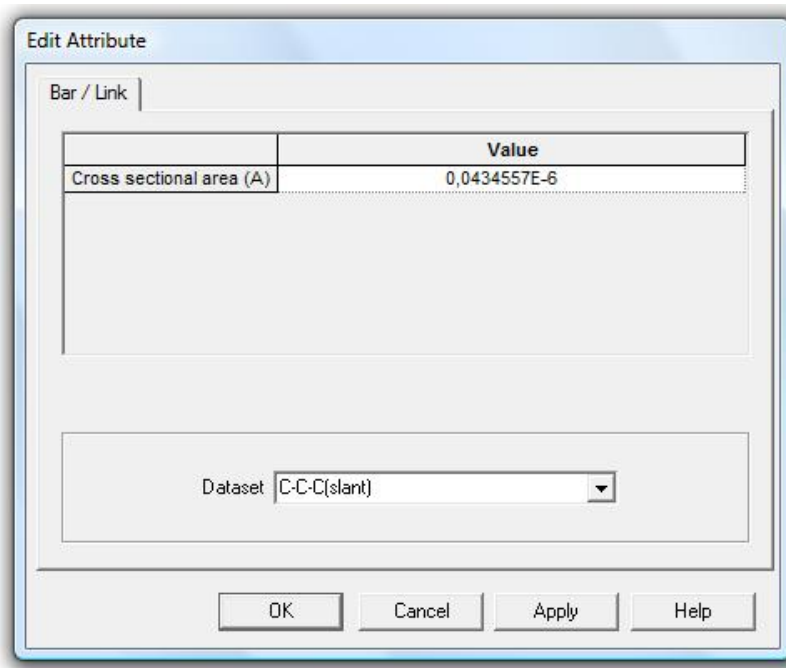
Κατόπιν πατάμε Apply και Close και η εκκεντρότητα θα δηλωθεί με τον ίδιο τρόπο, δηλαδή επιλέγουμε όλες τις γραμμές C-C και με drag and drop θα περαστεί σε αυτές.

Για το C-C-(straight) bar:



Κατόπιν πατάμε Apply και Close και η εκκεντρότητα θα δηλωθεί με τον ίδιο τρόπο, δηλαδή επιλέγουμε όλες τις γραμμές C-C-C (straight) με drag and drop θα περαστεί σε αυτές.

Για το C-C-(slant) bar:

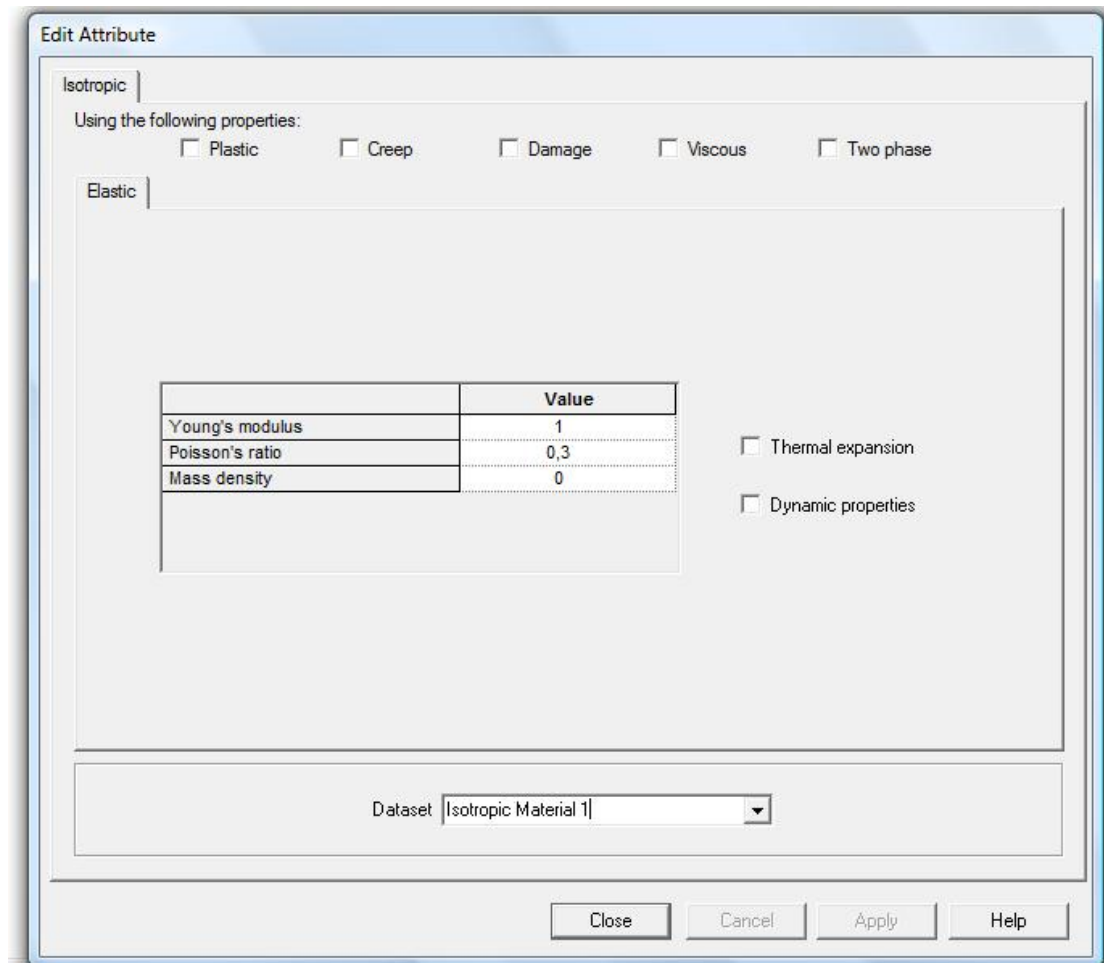


Κατόπιν πατάμε Apply και Close και η εκκεντρότητα θα δηλωθεί με τον ίδιο τρόπο, δηλαδή επιλέγουμε όλες τις γραμμές C-C-C (slant) και τους κόμβους και με drag and drop θα περαστεί σε αυτές.

Παρακάτω θα δηλώσουμε το υλικό για τα bar στοιχεία:

Πατάμε Attributes- Material- isotropic.

Θα εμφανιστεί το παρακάτω παράθυρο διαλόγου όπου θα συμπληρωθούν τα εξής:



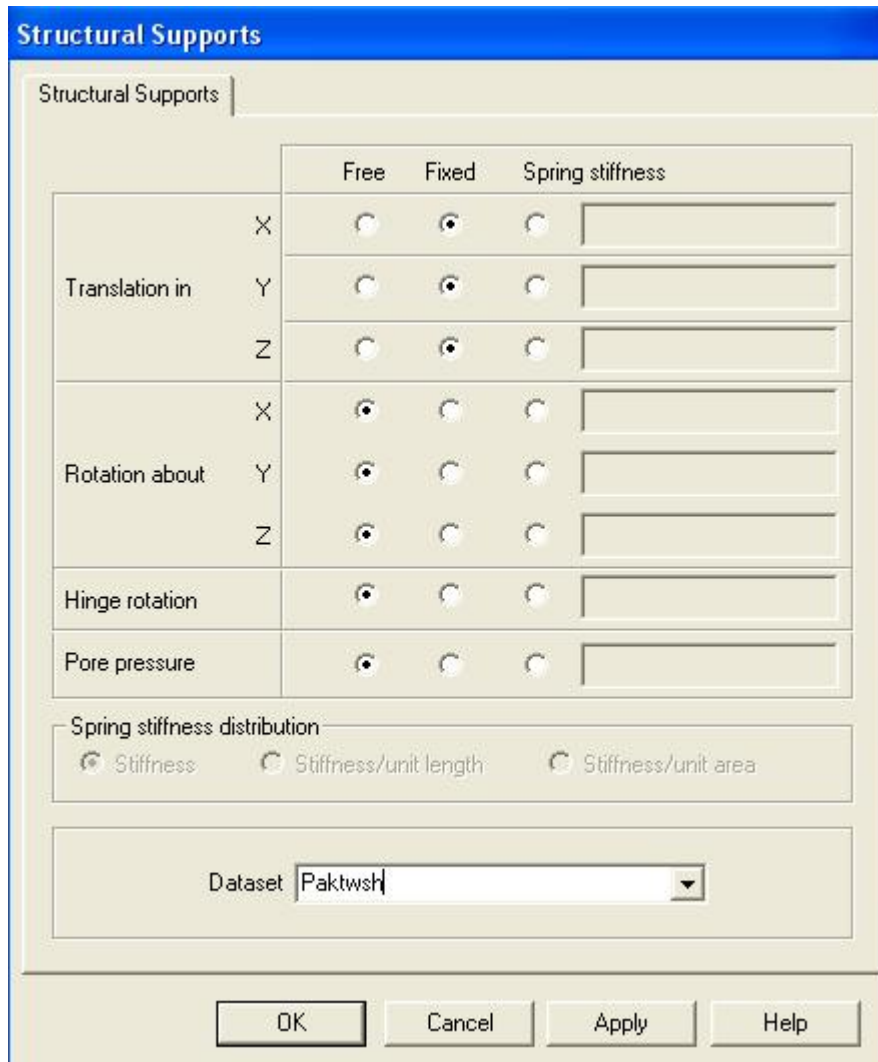
Κατόπιν πατάμε Apply και Close και οι ιδιότητες έχουν δηλωθεί

Κατόπιν επιλέγουμε όλα τα στοιχεία και με drag and drop περνάμε τις ιδιότητες.


ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΑΣ ΣΕ ΕΛΕΓΧΟ ΘΛΙΨΗΣ

Παρακάτω θα παρουσιαστούν τα βήματα που ακολουθήθηκαν ώστε να γίνει αναπαράσταση ελέγχου σε εφελκυσμό του νανοσωλήνα. Αυτό είναι εφικτό αν καταφέρουμε να δεσμεύσουμε το ένα το άκρο του με μία πάκτωση και στο άλλο άκρο του εφαρμόσουμε ένα φορτίο. Αυτό γίνεται με τον εξής τρόπο:

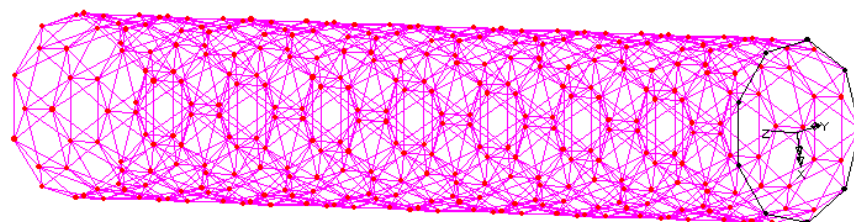
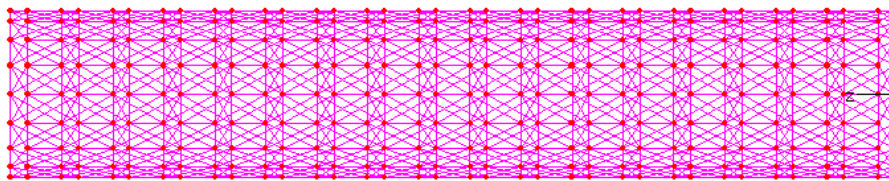
Πατάμε Attributes-Support-Structural όπου στη συνέχεια θα εμφανιστεί το Structural Supports παράθυρο διαλόγου στο οποίο θα προβούμε στις εξής ενέργειες



Κατόπιν πατάμε Apply και Close.

Στη συνέχεια αυτό θα περαστεί στο νανοσωλήνα επιλέγοντας το άκρο που ξεκινάνε οι άξονες, από τη πλευρά δηλαδή με αυτό το σήμα , όπως παρακάτω.

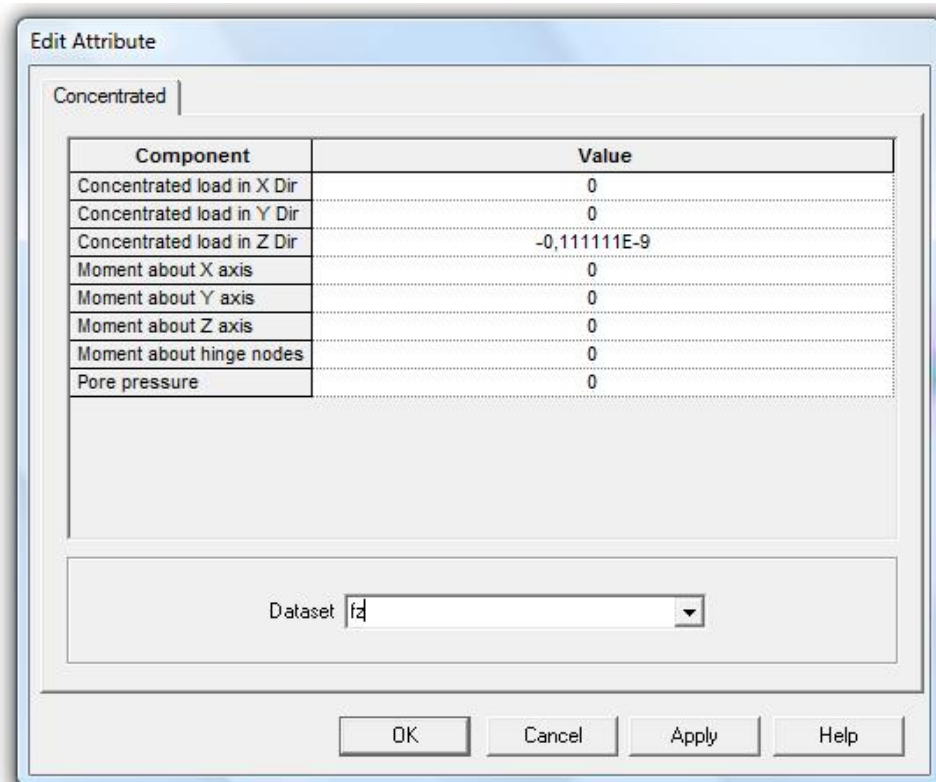
Εδώ θα παρουσιαστεί ένας τρόπος να επιλέγονται και πως φαίνεται ο νανοσωλήνας έχοντας δεσμεύσει το ένα του άκρο σε πάκτωση.



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

Για να γίνει ο έλεγχος σε εφελκυσμό χρειαζόμαστε μια δύναμη που θα εφελκύει το νανοσωλήνα . Αυτό μπορεί να γίνει με τον εξής τρόπο:

Πατάμε Attributes- Loading- Structural - Concentrated όπου θα εμφανιστεί το Prescribed Loading Datasets παράθυρο διαλόγου στο οποίο θα συμπληρωθούν τα εξής:



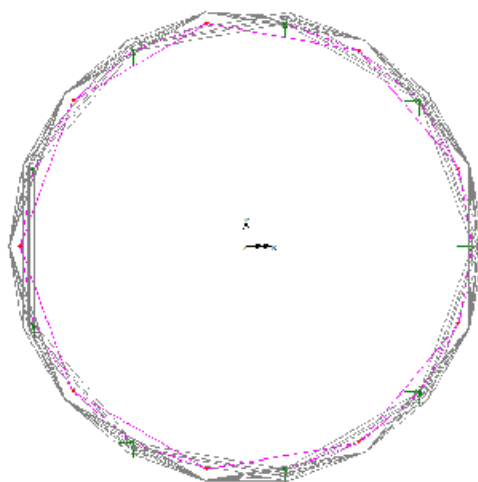
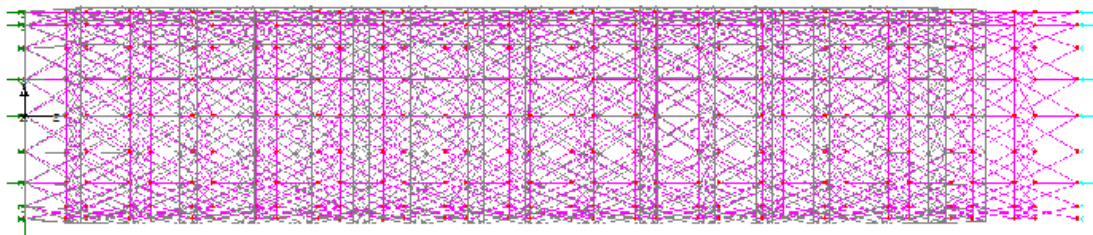
Κατόπιν πατάμε Apply και Close.

Για να περαστεί στο ναοσωλήνα αυτή τη φορά δεσμεύουμε το άλλο άκρο με τον ίδιο ακριβώς τρόπο όπως έγινε και με την Πάκτωση

Στη συνέχεια το συγκεντρωμένο φορτίο θα περαστεί με drag and drop στο ναοσωλήνα.

Κάνουμε αποθήκευση του αρχείου

Στη συνέχεια πρέπει να τρέξουμε το πρόγραμμα για να έχουμε αποτελέσματα και αυτό γίνεται πηγαίνοντας File-Lusas Datafile και πατώντας Αποθήκευση. Τότε το πρόγραμμα θα αναλύσει τα δεδομένα και τα πεπερασμένα στοιχεία του ναοσωλήνα και το αποτέλεσμα θα είναι το παρακάτω:



ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΑΣ ΣΕ ΕΛΕΓΧΟ ΣΤΡΕΨΗΣ

Παρακάτω θα παρουσιαστούν τα βήματα που ακολουθήθηκαν ώστε να γίνει αναπαράσταση ελέγχου σε στρέψη του νανοσωλήνα. Αυτό είναι εφικτό αν καταφέρουμε να δεσμεύσουμε το ένα το άκρο του με μία πάκτωση και στο άλλο άκρο του εφαρμόσουμε στρέψη. Αυτό γίνεται με τον εξής τρόπο:

Πατάμε Attributes- Support- Structural όπου στη συνέχεια θα εμφανιστεί το Structural Supports παράθυρο διαλόγου στο οποίο θα προβούμε στις εξής ενέργειες:


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

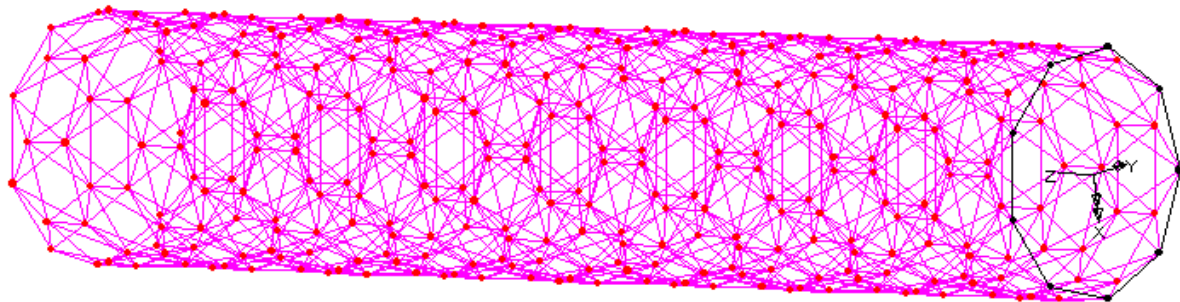
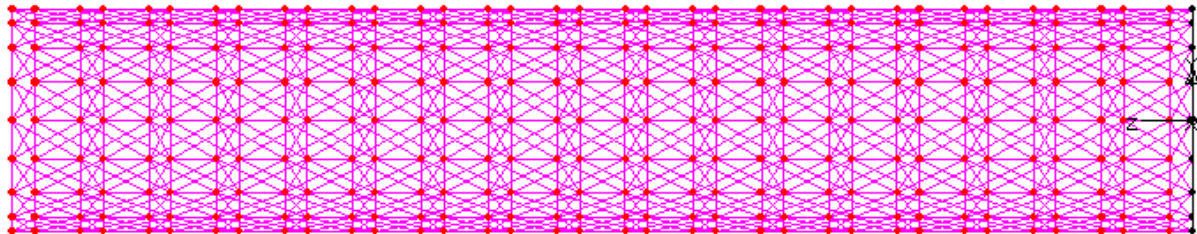
Spring stiffness distribution
 Stiffness Stiffness/unit length Stiffness/unit area

Dataset: Paktwsh

OK Cancel Apply Help

Κατόπιν πατάμε Apply και Close.

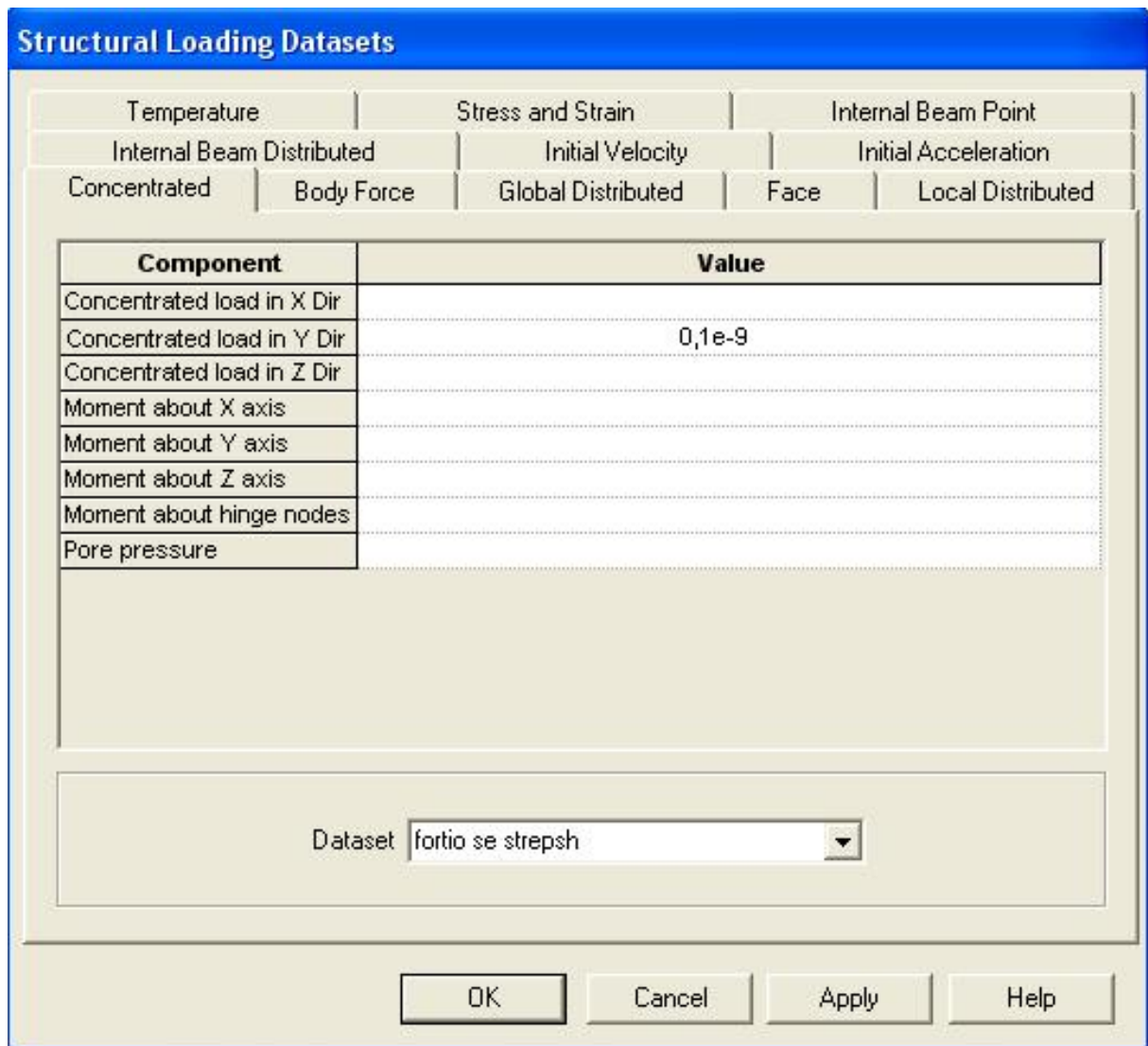
Στη συνέχεια αυτό θα περαστεί στο νανοσωλήνα επιλέγοντας το άκρο που ξεκινάνε οι άξονες, από τη πλευρά δηλαδή με αυτό το σήμα , όπως παρακάτω. Εδώ θα παρουσιαστεί ένας τρόπος να επιλέγονται και πως φαίνεται ο νανοσωλήνας έχοντας δεσμεύσει το ένα του άκρο σε πάκτωση.



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

Επόμενο βήμα είναι να δηλώσουμε τη στρέψη και αυτό γίνεται με τον παρακάτω τρόπο:

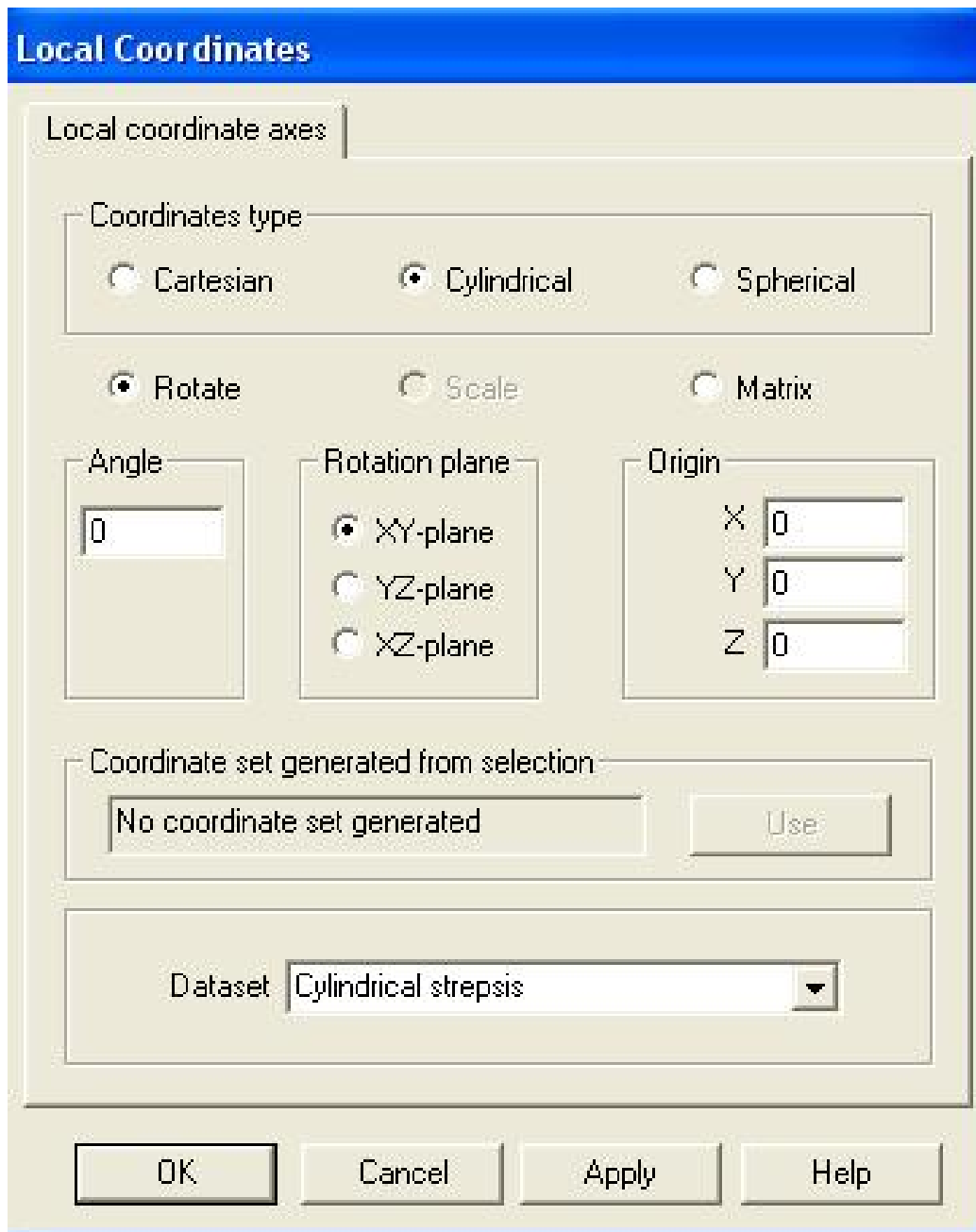
Πατάμε Attributes>Loading-Structural-Concentrated όπου θα εμφανιστεί το Structural Loading Datasets παράθυρο διαλόγου και θα συμπληρωθούν τα εξής:



Κατόπιν πατάμε Apply και Close.

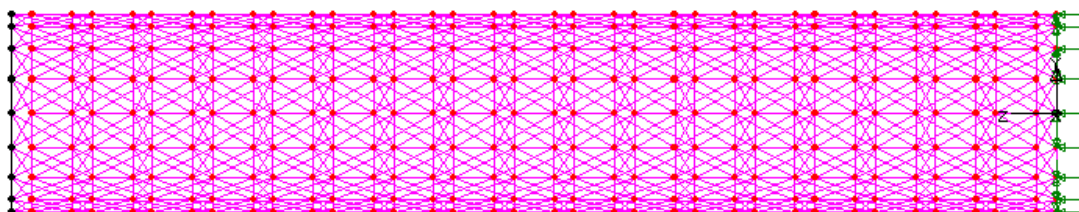
Για να εμφανίσουμε τη στρέψη στο άλλο άκρο του ναοσωλήνα θα πρέπει να δηλωθεί ένα τοπικό κυλινδρικό σύστημα συντεταγμένων με τον τρόπο που ακολουθεί:

Πατάμε Attribute- Local Coordinate όπου θα εμφανιστεί το Local Coordinates παράθυρο διαλόγου στο οποίο θα προβούμε στις παρακάτω ενέργειες:



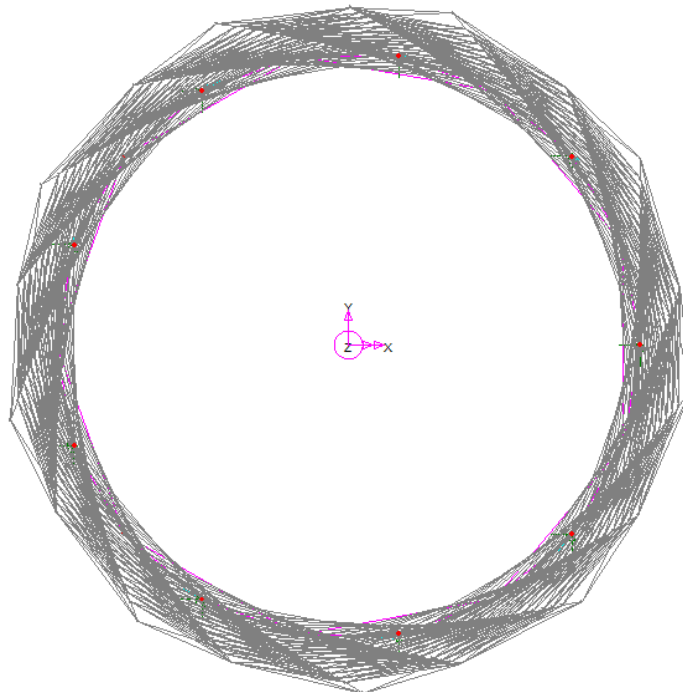
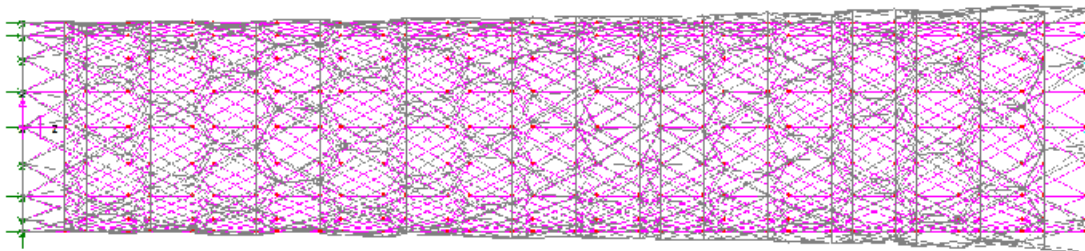
Κατόπιν πατάμε Apply και Close.

Κατόπιν επιλέγουμε το ελεύθερο άκρο του νανοσωλήνα όπως φαίνεται παρακάτω



Στη συνέχεια περνάμε τα στοιχεία “fortio se strepsh” και “Cylindrical strepsis” στο νανοσωλήνα με drag and drop.

Τέλος κάνουμε αποθήκευση του αρχείου και στη συνέχεια πάμε File-Lusas Datafile και πατώντας Αποθήκευση το πρόγραμμα λύνει τα δεδομένα με το εξής αποτέλεσμα

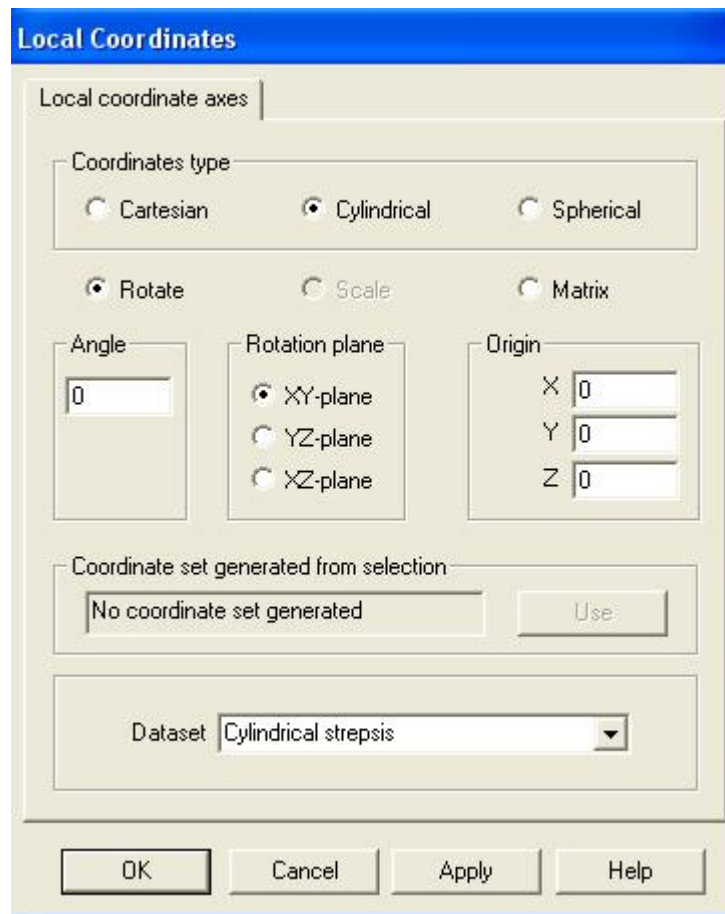


ΕΛΕΓΧΟΣ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΑ ΣΕ ΑΚΤΙΝΙΚΗ ΣΥΜΠΙΕΣΗ

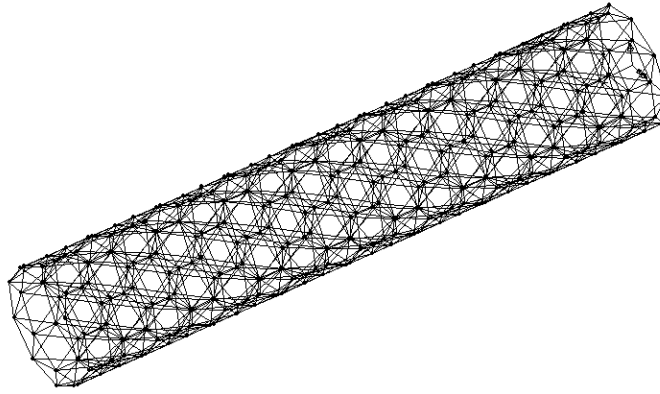
Σε αυτή τη παράγραφο θα αναλυθεί ο τρόπος με τον οποίο μπορεί να γίνει ο έλεγχος σε συμπίεση ενός νανοσωλήνα σε όλο το μήκος του και τα αποτελέσματα αυτού.. Ακολουθούν τα βήματα για την πραγματοποίησή του:

Αρχικά ορίζουμε κυλινδρικό σύστημα συντεταγμένων με το παρακάτω τρόπο

Attribute-Local Coordinate όπου θα εμφανιστεί το Local Coordinates παράθυρο διαλόγου στο οποίο θα προβούμε στις παρακάτω κινήσεις



Στη συνέχεια έχουμε τον αρχικό νανοσωλήνα στον οποίο επιλέγουμε όλους τους κόμβους και όλες τις γραμμές όπως φαίνεται παρακάτω



Με drag and drop περνάμε το κυλινδρικό σύστημα στο νανοσωλήνα.

Επόμενη κίνηση είναι να βάλουμε το φορτίο σε όλο το νανοσωλήνα με τον εξής τρόπο:

Πατάμε Attributes- Loading- Structural- Concentrated όπου θα εμφανιστεί το Structural Loading Datasets παράθυρο διαλόγου και θα συμπληρωθούν τα εξής:

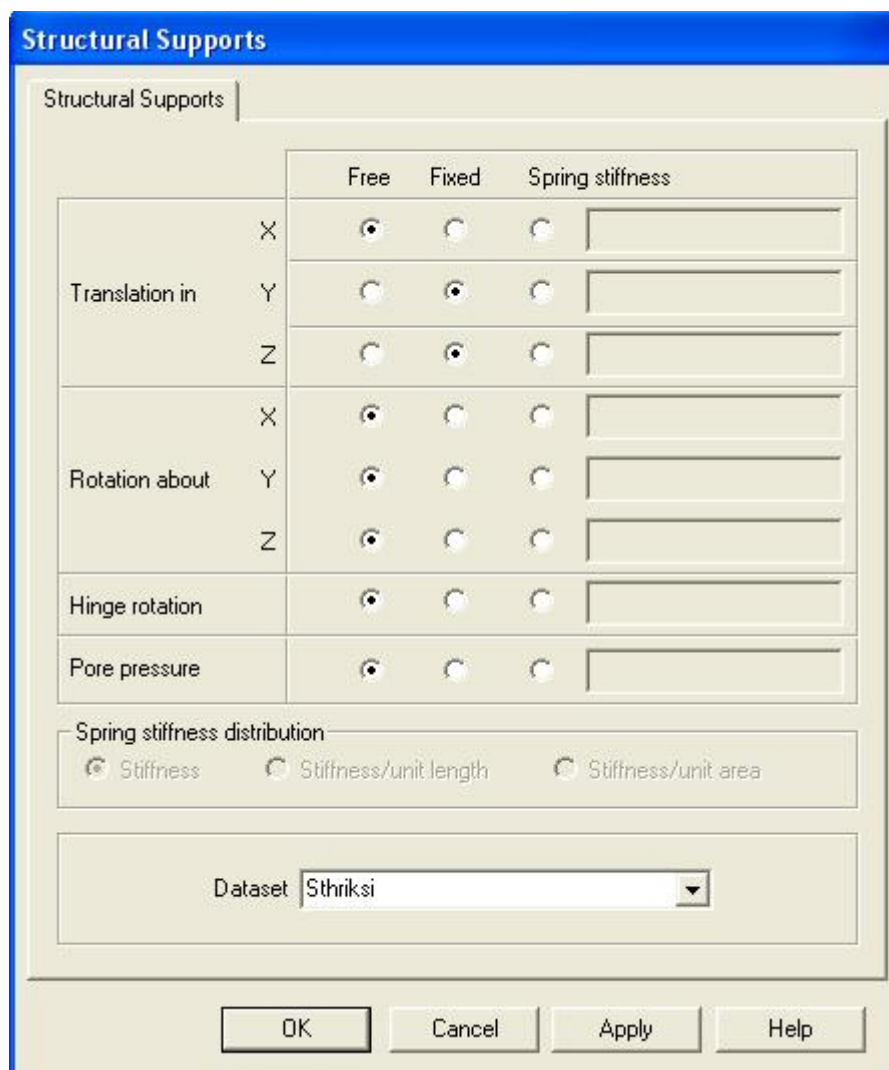
Component	Value
Concentrated load in X Dir	-0,1e-9
Concentrated load in Y Dir	
Concentrated load in Z Dir	
Moment about X axis	
Moment about Y axis	
Moment about Z axis	
Moment about hinge nodes	
Pore pressure	

Dataset: Concentrated load

Κατόπιν πατάμε Apply και Close.

Στη συνέχεια θα δημιουργήσουμε μια πάκτωση για λόγους σταθερότητας:

Πατάμε Attributes- Support- Structural όπου στη συνέχεια θα εμφανιστεί το Structural Supports παράθυρο διαλόγου στο οποίο θα προβούμε στις εξής ενέργειες

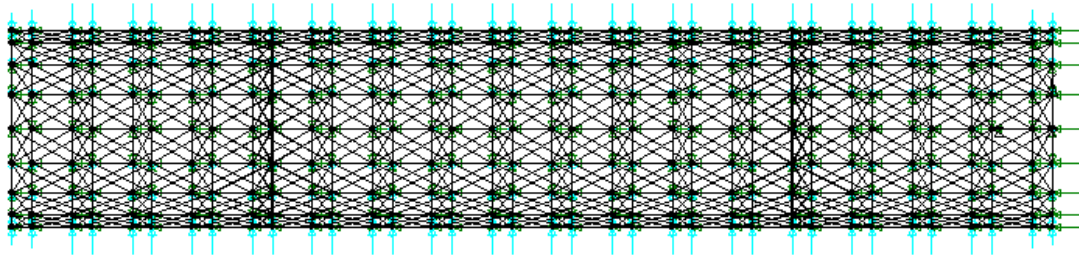


Κατόπιν πατάμε Apply και Close.

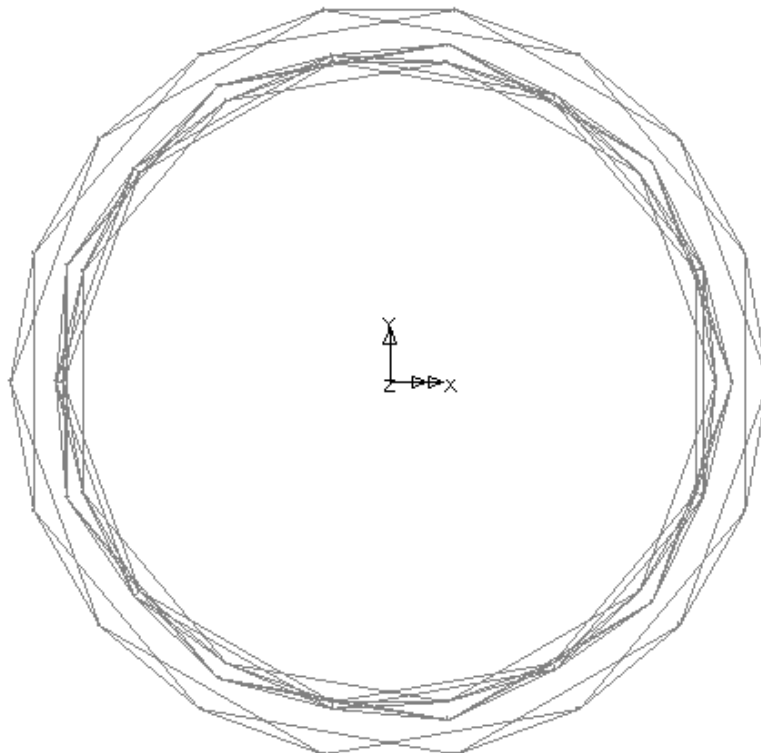
Επιλέγουμε και πάλι ολόκληρο το νανοσωλήνα όπως δείξαμε πριν.

Στη συνέχεια περνάμε τα στοιχεία “ Concentrated Load” και “Sthriksi ” στο νανοσωλήνα με drag and drop.

Θα έχουμε το εξής:



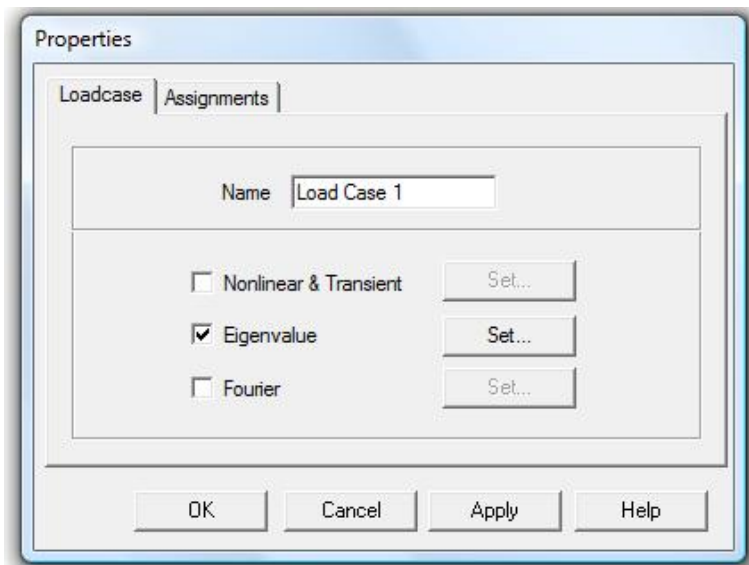
Κάνουμε αποθήκευση του αρχείου και στη συνέχεια πάμε File- Lusas Datafile και πατώντας Αποθήκευση το πρόγραμμα λύνει τα δεδομένα με το εξής αποτέλεσμα:



ΕΥΣΤΑΘΕΙΑ

Για τον ανάλυση ευστάθειας εκτελούμε τα εξής:

Πατάμε Loadcase - Properties- Eigenvalue



Έπειτα Set-Buckling load

