

«Μελέτη μηχανικής συμπεριφοράς νανοσωλήνων άνθρακα με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων»

Δ.Ε. Σουλιώτη, Δ.Α. Δραγατογιάννης, Κ.Α. Χαριτίδης*
Σχολή Χημικών Μηχανικών, Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
*charitidis@chemeng.ntua.gr

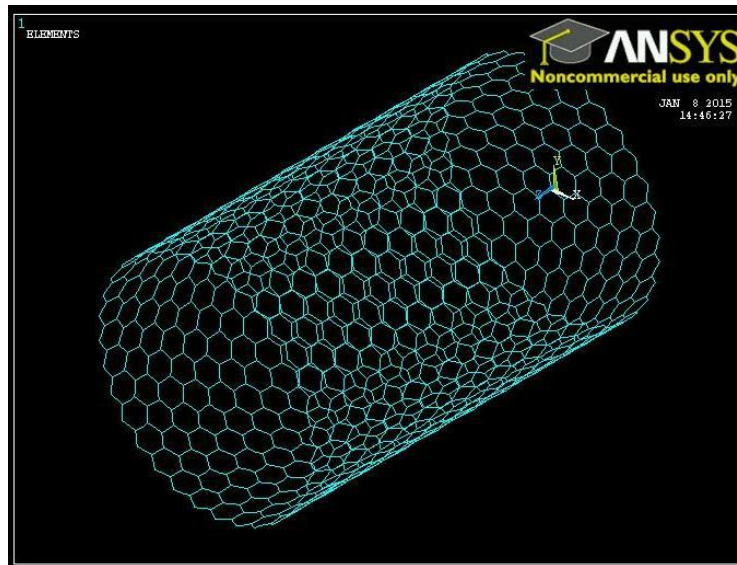
Περίληψη

Προτείνεται ένα τρισδιάστατο μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων (Finite Element Model), armchair και zigzag μονοτοιχωματικών νανοσωλήνων άνθρακα (SWCNTs). Η εξαγωγή του μοντέλου βασίζεται στην υπόθεση ότι οι νανοσωλήνες άνθρακα όταν υπόκεινται σε μηχανική φόρτιση, συμπεριφέρονται ως χωροδικτύωματα. Για την κατασκευή και επίλυση του μοντέλου χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα προσομοίωσης ANSYS 13.0 και η σχεδίαση των νανοσωλήνων έγινε χρησιμοποιώντας τις αντίστοιχες εντολές κώδικα του προγράμματος.

Στο παρόν μοντέλο, οι δεσμοί μεταξύ των ατόμων άνθρακα, μοντελοποιούνται ως ελαστικοί δοκοί (στοιχεία – elements) οι οποίες και υπόκεινται σε φόρτιση, ενώ τα άτομα άνθρακα ως κόμβοι (nodes) μεταξύ των δεσμών - δοκών. Η μετατόπιση των ατόμων άνθρακα περιορίζεται από τους δεσμούς και συνεπώς η τελική παραμόρφωση του νανοσωλήνα προκύπτει ως αποτέλεσμα της αλληλεπίδρασης των δεσμών. Για να κατασκευάσουμε το μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων, και να επιτύχουμε την προσομοίωσή του με ένα χωροδικτύωμα, στη θέση των ατόμων άνθρακα τοποθετήθηκαν σημεία – κόμβοι και οι ενώσεις μεταξύ τους μοντελοποιούνται χρησιμοποιώντας στοιχεία ελαστικών δοκών τριών διαστάσεων.

Ο παραπάνω σχεδιασμός πραγματοποιείται σε έξι διαφορετικές περιπτώσεις: για τα δύο είδη νανοσωλήνων μονού τοιχώματος, armchair και zigzag, για τρεις διαφορετικές διαμέτρους – άρα και κατανομές ατόμων - για το κάθε είδος. Οι τρεις διαφορετικές κατασκευές για τη διαφοροποίηση της διαμέτρου των νανοσωλήνων που εξετάστηκαν είναι οι (4,4), (8,8) και (16,16) για τους μεν armchair νανοσωλήνες και οι (4,0), (8,0) και (16,0) για τους zigzag. Ενδεικτικά, ο (16,16) νανοσωλήνας αποτελείται από 1120 κόμβους, ο (16,0) από 1280 κόμβους και ο μικρότερος νανοσωλήνας (4,0) περιλαμβάνει 160 κόμβους. Σε κάθε περίπτωση, armchair ή zigzag μορφής, οι διαφορετικοί νανοσωλήνες είναι ισομήκεις για καλύτερη συγκρισιμότητα των αποτελεσμάτων, και το μήκος τους είναι αρκετά μεγάλο ώστε να εξαλειφθούν φαινόμενα μεγέθους.

Το μέτρο ελαστικότητας των δοκών – δεσμών προσδιορίζεται, χρησιμοποιώντας μια σύνδεση μεταξύ της μοριακής δυναμικής (*molecular dynamics*) και της προσέγγισης συνεχούς ανάλυσης (*continuum analysis*). Οι δεσμοί μοντελοποιήθηκαν μέσω ελαστικών τρισδιάστατων δοκών κυκλικής, συμπαγούς διατομής και συγκεκριμένης ακτίνας, μέσω της οποίας καθορίζεται και το τελικό πάχος τοιχώματος του νανοσωλήνα. Οι εκάστοτε ενεργειακές σταθερές και το μήκος του δεσμού μεταξύ ανθράκων βρέθηκαν στη βιβλιογραφία και αποτέλεσαν το μέσο σύνδεσης των δομικών μηχανικών χαρακτηριστικών των νανοσωλήνων με παραμέτρους μοριακής μηχανικής, απαραίτητο για την εξαγωγή των τελικών αποτελεσμάτων για τα μέτρα διάτμησης και ελαστικότητας των νανοσωλήνων.



*Εικόνα 1: Νανοσωλήνας Ανθρακα
μορφής Armchair (16,16) όπως φαίνεται
στο περιβάλλον ANSYS*

Επιπλέον, στο συγκεκριμένο μοντέλο, διερευνάται η επίδραση του πλευρικού πάχους των σωλήνων (wall thickness), της διαμέτρου και της χειρομορφίας στο μέτρο ελαστικότητας κατά Young και στο μέτρο διάτμησης των δύο ειδών SWCNTs. Αποφαινεται ότι η επιλογή του πάχους επηρεάζει σημαντικά την μέτρηση του μέτρου ελαστικότητας, διαφορετικά όμως για κάθε είδος νανοσωλήνα. Αποδεικνύεται, ακόμα, η εξάρτηση του μέτρου ελαστικότητας τόσο από τη διάμετρο όσο και από τη χειρομορφία των νανοσωλήνων. Γενικά, με την αύξηση της διαμέτρου του σωλήνα, φαίνεται να αυξάνεται επίσης και το μέτρο ελαστικότητάς του.

Το προτεινόμενο μοντέλο πεπερασμένων στοιχείων αποτελεί ένα αξιόλογο εργαλείο μελέτης της μηχανικής συμπεριφοράς των νανοσωλήνων άνθρακα ακόμα και την ενσωμάτωσή τους στην κατασκευή και μελέτη σύνθετων νανοϋλικών (nanocomposites). Εφόσον το μοντέλο περιέχει σχετικά μικρό αριθμό στοιχείων, εκτελείται σε μικρό υπολογιστικό χρόνο και απαιτεί ελάχιστη υπολογιστική ισχύ. Αυτό το πλεονέκτημα, σε συνδυασμό με τις δυνατότητες μοντελοποίησης της μεθόδου πεπερασμένων στοιχείων, επεκτείνει το πεδίο εφαρμογής του μοντέλου σε νανοσωλήνες μονού τοιχώματος με μεγάλο αριθμό ατόμων, καθώς και σε νανοσωλήνες πολλαπλών τοιχωμάτων, σε άλλες νανοδομές σχετιζόμενες με άνθρακα και τελικά σε νανοςύνθετα υλικά που περιέχουν νανοσωλήνες.

Βιβλιογραφία

1. K.I Tserpes, P. Papanikos, Finite element modeling of single-walled carbon nanotubes, Composites B 2005;36;468-477
2. Minh-Quy Le, Young's modulus prediction of hexagonal nanosheets and nanotubes based on dimensional analysis and atomistic simulations, Meccanica 2014;49;1709-1719
3. S. Prabhu1, Shubrajit Bhaumik, B.K. Vinayagam, Finite element modeling and analysis of zigzag and armchair type single wall carbon nanotube, Journal of Mechanical Engineering Research 2012;4(8);260-266