

ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΙΔΙΟΤΗΤΩΝ ΝΑΝΟΣΩΛΗΝΩΝ ΑΝΘΡΑΚΑ ΜΕ ΤΗΝ ΜΕΘΟΔΟ ΤΩΝ ΠΕΠΕΡΑΣΜΕΝΩΝ ΣΤΟΙΧΕΙΩΝ: ΚΡΙΤΙΚΗ ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

Γ. Ψυχογιός¹, Χ. Θεοδωρίδης¹, Δ. Δραγατογιάννης¹, Κ. Χαριτίδης^{1,*}

¹Εργαστήριο Προηγμένων και Συνθέτων Υλικών, Νανούλικών/Νανοδιεργασιών και Νανοτεχνολογίας, Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ, Αθήνα, Ελλάδα

(*charitidis@chemeng.ntua.gr)

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η ανακάλυψη των νανοσωλήνων άνθρακα (CNTs) το 1991 από τον Iijima^[1] ακολουθήθηκε από έντονο ερευνητικό ενδιαφέρον σχετικά με τη δυνατότητα χρήσης τους σε πολλές τεχνολογικές εφαρμογές λόγω των αξιοσημείωτων μηχανικών, θερμικών και ηλεκτρικών ιδιοτήτων τους.

Οι μηχανικές ιδιότητες των CNTs μπορούν να μελετηθούν με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων όπου ουσιαστικά η δομή του νανοσωλήνα αντιμετωπίζεται ως ένα χωροδικτύωμα^[2]. Σε αυτή την προσέγγιση οι δεσμοί άνθρακα-άνθρακα αντικαθίστανται από δοκούς τα γεωμετρικά και μηχανικά χαρακτηριστικά των οποίων είναι τέτοια ώστε να ανακτούν την ενέργεια των ομοιοπολικών δεσμών.

Παρότι η ανωτέρω προσέγγιση έχει παρουσιασθεί σε αρκετές ερευνητικές εργασίες^[2, 3, 4] εμφανίζονται σημαντικές διαφορές στα αποτελέσματα, χωρίς να έχουν εξηγηθεί οι λόγοι που τις δημιουργούν. Περαιτέρω, τεχνικές λεπτομέρειες σχετικά με τον τύπο των πεπερασμένων στοιχείων που χρησιμοποιούνται για τη σύνθεση του χωροδικτύωματος συχνά δεν παρουσιάζονται με λεπτομέρεια.

Στην παρούσα εργασία επιδιώκεται μια κριτική αξιολόγηση της ανωτέρω μεθόδου. Για το λόγο αυτό χρησιμοποιήθηκαν δύο διαφορετικά εμπορικά λογισμικά για την προσομοίωση του προβλήματος (Abaqus, ANSYS mechanical). Βρέθηκε ότι τα αποτελέσματα της προσομοίωσης μπορεί να επηρεασθούν σημαντικά από το στοιχείο που χρησιμοποιείται για την αναπαράσταση των δοκών. Η διαπίστωση αυτή μπορεί να εξηγήσει τις διαφορές που εμφανίζονται στη βιβλιογραφία σχετικά με το μέτρο ελαστικότητας (Young's modulus) των νανοσωλήνων. Επιπλέον, το μέτρο ελαστικότητας διαφόρων νανοσωλήνων που μελετήθηκαν βρέθηκε σε καλύτερη συμφωνία με αντίστοιχους θεωρητικούς υπολογισμούς^[5] σε σύγκριση με προηγούμενες προσομοιώσεις που έχουν παρουσιασθεί στη βιβλιογραφία^[2, 3, 4, 6].

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] Iijima S., Nature, (1991) 354:56–58
- [2] K. I. Tserpes, P. Papanikos, Composites: Part B, (2005) 36:468–477
- [3] C.W. Fan, Y.Y. Liu, Chyanbin Hwu, Appl. Phys. A, (2009) 95:819–831
- [4] Michele Meo, Marco Rossi, Composites Science and Technology, (2006) 66:1597–1605
- [5] Toshiaki Natsuki, Kriengkamol Tantrakarn, Morinobu Endo, Carbon (2004) 42:39–45
- [6] D. Soulioti, D.A. Dragatogiannis, C.A. Charitidis, 10th Panhellenic Conference of Chemical Engineering, (2015)