

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, Νανοϋλικών, Νανοδιεργασιών και Νανοτεχνολογίας, Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ, Αθήνα, Ελλάδα

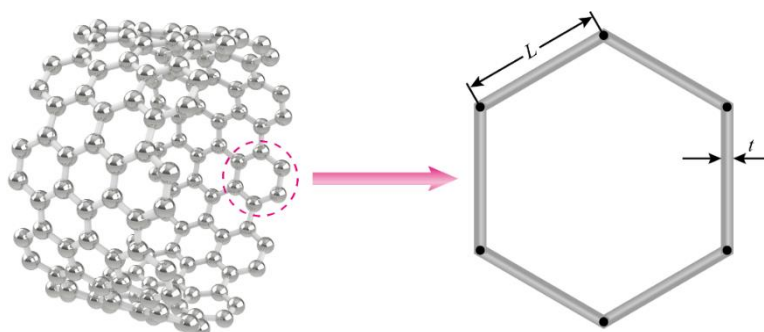
(*charitidis@chemeng.ntua.gr)

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων έχει βρεί εφαρμογή στη μοντελοποίηση νανοσωλήνων άνθρακα με στόχο την εκτίμηση, εκτός των άλλων, και των μηχανικών τους ιδιοτήτων. Στόχος της παρούσας εργασίας είναι να καταδείξει ότι τόσο ο τύπος των πεπερασμένων στοιχείων που χρησιμοποιείται για την μοντελοποίηση, όσο και το μήκος του μοντελοποιούμενου νανοσωλήνα, μπορεί να έχει σημαντική επίδραση στο εκτιμώμενο μέτρο ελαστικότητας Young.

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Αρκετές διαφορετικές πειραματικές και υπολογιστικές μέθοδοι έχουν κατά καιρούς χρησιμοποιηθεί για την εκτίμηση των μηχανικών, θερμικών, ηλεκτρικών και οπτικών ιδιοτήτων των νανοσωλήνων άνθρακα^[1]. Σε ό,τι αφορά τις υπολογιστικές μεθόδους, αυτές μπορούν γενικά να ταξινομηθούν σε τρεις κατηγορίες: α) μεθόδους μοριακής δυναμικής, β) μεθόδους συνεχούς μηχανικής και γ) μεθόδους πεπερασμένων στοιχείων.



Σχήμα 1. Μοντελοποίηση ενός νανοσωλήνα άνθρακα ως χωροδικτύωμα δοκών.

Οι Li και Chou^[3] χρησιμοποίησαν μεθόδους δομικής μηχανικής και μοντελοποίησαν τη παραμόρφωση νανοσωλήνων άνθρακα θεωρώντας τους ως χωρικά δικτυώματα όπου η αλληλεπίδραση μεταξύ των κοντινότερων γειτονικών ατόμων C–C μοντελοποιείται ως μια δοκός, ενώ τα άτομα άνθρακα θεωρούνται ως σύνδεσμοι μεταξύ των δοκών (Σχήμα 1). Σύμφωνα με την εργασία τους, η μηχανική συμπεριφορά της δοκού περιγράφεται πλήρως από το μέτρο ελαστικότητας Young E , από το εμβαδό διατομής της A , το μήκος της L , τη ροπή αδρανείας της I (με την παραδοχή ότι $I_x = I_y \equiv I$) και το μέτρο διάτμησης G . Από την άλλη μεριά, σε μικροσκοπικό επίπεδο, η ενέργεια ενός δεσμού C–C χαρακτηρίζεται πλήρως από τις τιμές τριών παραμέτρων, της σταθεράς έκτασης του δεσμού (bond stretching constant) k_r , της σταθεράς κάμψης γωνίας του δεσμού (bond angle bending constant) k_θ και της σταθεράς αντίστασης περιστροφής (torsional resistance constant) k_τ . Η σύνδεση μεταξύ των ανωτέρω παραμέτρων επιτυγχάνεται με την εξίσωση αντίστοιχων μορφών ενέργειας μεταξύ της μικροκλίμακας και της μακροκλίμακας, η οποία τελικά οδηγεί στις εξής εξισώσεις^[3]:

$$\frac{EA}{L} = k_r \quad \frac{EI}{L} = k_\theta \quad \frac{GJ}{L} = k_\tau \quad (1)$$

Οι ανωτέρω εξισώσεις αποτελούν τη βάση εφαρμογής της μεθόδου των πινάκων ακαμψίας (stiffness matrix method) των Li και Chou μιας και δοθέντων των k_r , k_θ και k_τ μπορούν να υπολογισθούν οι παράμετροι ακαμψίας της δοκού EA , EI και GJ , αντίστοιχα.

Οι Tserpes και Paraniokos^[6] τροποποίησαν την παραπάνω μέθοδο ώστε να είναι εφαρμόσιμη στο πλαίσιο της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων. Για το σκοπό αυτό θεώρησαν ότι η δοκός που αναπαριστά ένα δεσμό C–C είναι κυκλικής διατομής με διάμετρο d , οπότε η επιφάνεια διατομής, η ροπή αδρανείας και η πολική ροπή αδρανείας της δίνονται από τις εξισώσεις $A = \pi d^2/4$, $I = \pi d^4/64$ και $J = \pi d^4/32$, αντίστοιχα. Αντικαθιστώντας στις εξισώσεις (1), προκύπτουν οι γεωμετρικές και μηχανικές ιδιότητες της δοκού συναρτήσει των k_r , k_θ και k_τ , ως εξής^[6]:

$$d = 4 \sqrt{\frac{k_\theta}{k_r}} \quad E = \frac{k_r^2 L}{4\pi k_\theta} \quad G = \frac{k_r^2 k_\tau L}{8\pi k_\theta^2} \quad (2)$$

Οι τιμές των σταθερών k_r , k_θ και k_τ , συνήθως λαμβάνονται ως^[3, 6]: $k_r = 6.52 \times 10^{-7} \text{ N} \cdot \text{nm}^{-1}$, $k_\theta = 8.76 \times 10^{-10} \text{ N} \cdot \text{nm} \cdot \text{rad}^{-2}$, $k_\tau = 2.78 \times 10^{-10} \text{ N} \cdot \text{nm} \cdot \text{rad}^{-2}$, ενώ το L αντιστοιχεί στο μήκος του ομοιοπολικού δεσμού C–C (Σχήμα 1), το οποίο είναι ίσο με 0.1421 nm. Με αντικατάσταση αυτών των τιμών στις εξισώσεις (2), προκύπτει ότι^[6]: $d = 0.147 \text{ nm}$, $E = 5.49 \text{ TPa}$ και $G = 0.871 \text{ TPa}$. Όπως είναι γνωστό, για ένα ομογενές ιστροπικό υλικό, ισχύει ότι $\nu = E/2G - 1$, οπότε με αντικατάσταση των ανωτέρω τιμών προκύπτει ότι $\nu = 2.15$, το οποίο είναι αφύσικο δεδομένου ότι για ελαστικά ιστροπικά υλικά $-1 \leq \nu \leq 0.5$. Αξίζει να σημειωθεί ότι αυτή η αδυναμία δεν εμφανίζεται στο μοντέλο των Li και Chou, μιας και δεν απαιτείται η γνώση των E , G και d αυτών καθ' αυτών, αλλά μόνο των γινομένων EA , EI και GJ , αντίστοιχα. Με σκοπό να ξεπεραστεί αυτή η αδυναμία του μοντέλου, σε όλες τις περιπτώσεις που παρουσιάζονται έχει θεωρηθεί $\nu = 0.3$, δεδομένου ότι υπάρχουν σαφείς ενδείξεις ότι η τιμή του λόγου Poisson δεν επηρεάζει σημαντικά το μέτρο ελαστικότητας Young του νανοσωλήνα^[7].

ΣΤΟΧΟΙ ΚΑΙ ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ

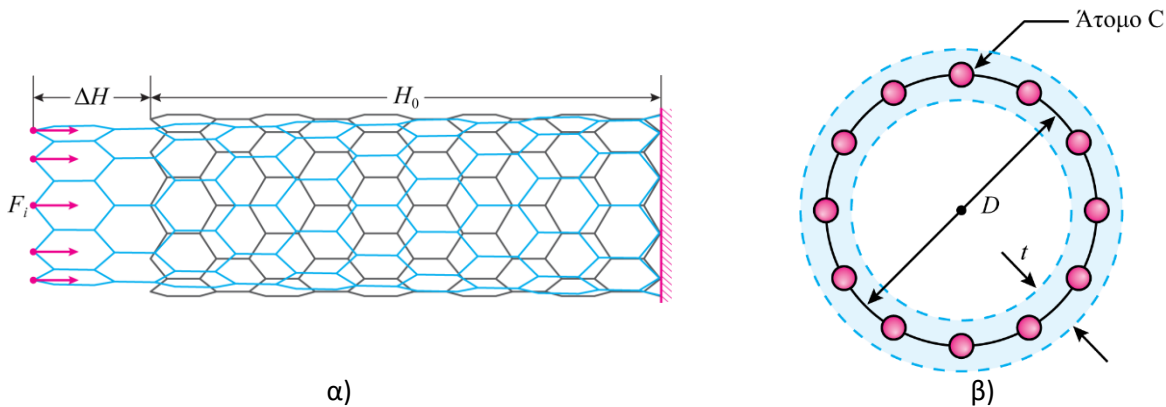
Το ανωτέρω μοντέλο είναι σχετικά εύκολο να υλοποιηθεί χρησιμοποιώντας κάποιο εμπορικό λογισμικό πεπερασμένων στοιχείων, όπως για παράδειγμα το Abaqus ή το ANSYS Mechanical APDL. Για την κατασκευή της γεωμετρίας των νανοσωλήνων χρησιμοποιήθηκε η ακόλουθη πορεία: αρχικά κατασκευάστηκε ο προς μελέτη νανοσωλήνας στο λογισμικό VMD^[8]. Εν συνεχεία οι συντεταγμένες των κέντρων των ατόμων C εξήχθησαν σε αρχείο μορφοποίησης XYZ. Μέσω κατάλληλου script που δημιουργήθηκε στη γλώσσα προγραμματισμού VB Script, το ανωτέρω αρχείο εισήχθη στο λογισμικό Rhinoceros 3D για την κατασκευή της γεωμετρίας του νανοσωλήνα (Σχήμα 2.α). Τέλος, η γεωμετρία εξήχθη σε αρχείο μορφοποίησης IGES το οποίο χρησιμοποιήθηκε για την κατασκευή της γεωμετρίας του χωροδικτυώματος στον Abaqus (Σχήμα 2.β).



Σχήμα 2. α) Γεωμετρία του νανοσωλήνων άνθρακα (5,5), β) Πλέγμα πεπερασμένων στοιχείων. Τα τετράγωνα αναπαριστούν τους κόμβους του πλέγματος και οι γραμμές τις δοκούς.

Για τον υπολογισμό του μέτρου ελαστικότητας Young ενός νανοσωλήνα, γίνεται προσομοίωση εφελκυσμού του. Αυτό επιτυγχάνεται με πάκτωση όλων των κόμβων του ενός άκρου του ενώ σε

όλους τους κόμβους του άλλου του άκρου επιβάλλεται κοινή μετατόπιση κατά την διεύθυνση του άξονά του (Σχήμα 3.α).



Σχήμα 3. α) Ανάπτυξη κομβικών αντιδράσεων, F_i , κατά τον εφεκλισμό νανοσωλήνα μέσω μετατόπισης του αριστερού και πάκτωσης του δεξιού του άκρου, β) Ορισμός του πάχους τοιχώματος νανοσωλήνα, t .

Με την προϋπόθεση ότι βρισκόμαστε στη γραμμική ελαστική περιοχή παραμορφώσεων, το μέτρο ελαστικότητας Young του νανοσωλήνα, E_{CNT} , μπορεί να εκτιμηθεί από το νόμο του Hooke:

$$E_{CNT} = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{F_t/A_0}{\Delta H/H_0} \quad (1)$$

όπου $F_t = \sum_i F_i$ η συνολική δύναμη αντίδρασης στο άκρο που υφίσταται μετατόπιση η οποία λαμβάνεται με άθροιση όλων των αντιδράσεων που αναπτύσσονται στον κάθε κόμβο (Σχήμα 3.α), A_0 η αρχική (πριν την παραμόρφωση) επιφάνεια διατομής του νανοσωλήνα, ΔH η επιβαλλόμενη μετατόπιση και H_0 το αρχικό (πριν την παραμόρφωση) μήκος του νανοσωλήνα. Ο υπολογισμός της επιφάνειας διατομής A_0 γίνεται από την εξίσωση:

$$A_0 = \pi D t \quad (2)$$

όπου D είναι η διάμετρος του νανοσωλήνα και t το πάχος τοιχώματος του αντίστοιχα, όπως φαίνονται στο Σχήμα 3.β. Στη βιβλιογραφία δεν υπάρχει πλήρης συμφωνία στην επιλογή της τιμής του t . Για παράδειγμα, οι Τσερπές και Παπανίκος^[6] έχουν χρησιμοποιήσει την τιμή $t = 0.147$ nm, ενώ οι Li και Chou^[3] την τιμή $t = 0.34$ nm, η οποία αντιστοιχεί στο πάχος του φύλλου γραφενίου. Η τελευταία αυτή τιμή έχει χρησιμοποιηθεί και στην παρούσα εργασία. Η επιλογή της τιμής αυτής της παραμέτρου είναι γνωστό^[6] ότι επηρεάζει σημαντικά την υπολογιζόμενη τιμή του E_{CNT} και μπορεί, ως ένα βαθμό, να εξηγήσει τις διαφορές που εμφανίζονται στη βιβλιογραφία οι οποίες μπορεί να κυμαίνονται μεταξύ του 1– 5 TPa^[7].

ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ ΚΑΙ ΣΥΖΗΤΗΣΗ

Επιλογή πεπερασμένου στοιχείου

Όπως θα δείξουμε πιο κάτω, η επιλογή του τύπου του πεπερασμένου στοιχείου που θα χρησιμοποιηθεί για την προσομοίωση μπορεί να επιφέρει σοβαρή διαφοροποίηση στα λαμβανόμενα αποτελέσματα. Το λογισμικό Abaqus Standard διαθέτει τρεις τύπους πεπερασμένων στοιχείων για την μοντελοποίηση δοκών, τους B31, B32 και B33. Και τα τρία αυτά πεπερασμένα στοιχεία διαθέτουν δύο κόμβους, αλλά το B31 χρησιμοποιεί γραμμικές συναρτήσεις μορφής (shape functions), το B32 τετραγωνικές ενώ το B33 κυβικές. Στον Πίνακα 1 δίνονται τα αποτελέσματα για το μέτρο ελαστικότητας Young των νανοσωλήνων (8,0) και (8,8) όπως υπολογίζεται από εφαρμογή των τριών ανωτέρω πεπερασμένων στοιχείων, αντίστοιχα. Σε όλες τις περιπτώσεις που παρουσιάζονται το μήκος των νανοσωλήνων έχει επιλεγεί ίσο με 10 nm, ώστε

οι εκτιμήσεις του μέτρου ελαστικότητας να είναι απαλλαγμένες από πιθανή επίδραση αυτής της παραμέτρου (αναλυτική συζήτηση επ' αυτού γίνεται παρακάτω).

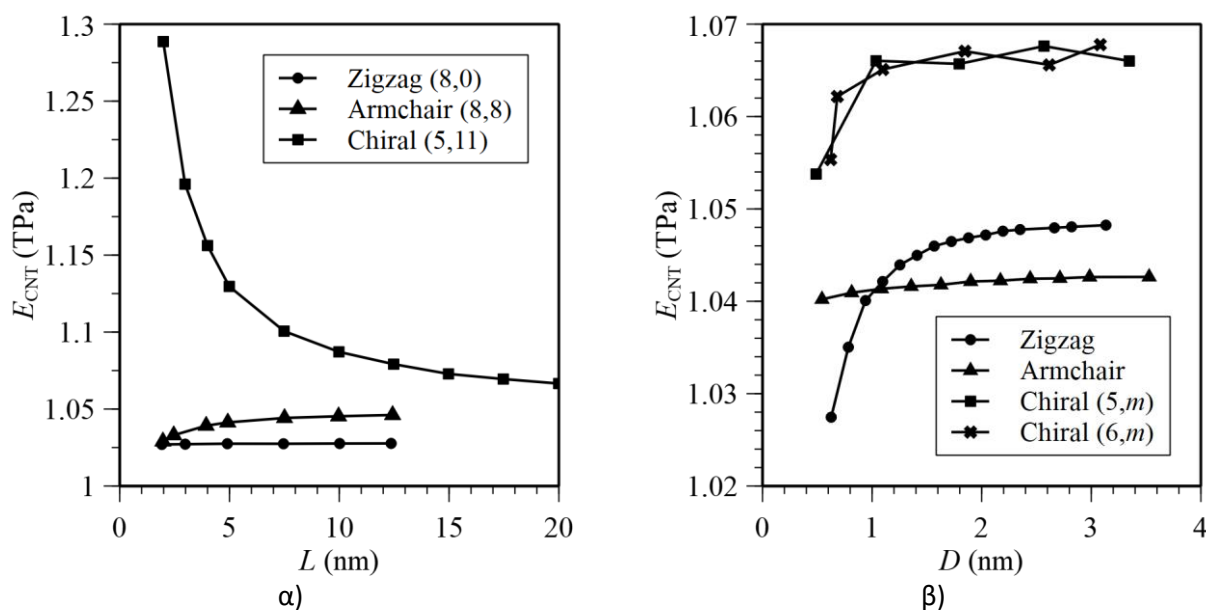
Πίνακας 1. Εκτιμώμενο μέτρο ελαστικότητας Young για δύο νανοσωλήνες με χρήση διαφορετικού τύπου πεπερασμένων στοιχείων τύπου δοκού στο λογισμικό Abaqus Standard.

Πεπερασμένο στοιχείο	Μέτρο ελαστικότητας (TPa)	
	(8,0)	(8,8)
B31	0.65	0.65
B32	0.62	0.62
B33	1.03	1.05

Όπως είναι ξεκάθαρο, η επιλογή του τύπου του πεπερασμένου στοιχείου επιφέρει σημαντική διαφοροποίηση στο εκτιμώμενο μέτρο ελαστικότητας του νανοσωλήνα. Πιο συγκεκριμένα, τα πεπερασμένα στοιχεία B31 και B32 φαίνεται να υποεκτιμούν την τιμή του μέτρου ελαστικότητας, δεδομένου ότι $E_{CNT} \approx 1$ TPa είναι η πιο συχνά συναντώμενη τιμή στη βιβλιογραφία^[2, 3, 4, 5]. Σε όλα τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται από το σημείο αυτό και κάτω, η μοντελοποίηση έχει γίνει χρησιμοποιώντας το πεπερασμένο στοιχείο B33. Αξίζει να σημειωθεί ότι από μια προκαταρκτική μας μελέτη, παρόμοια συμπεράσματα προκύπτουν και για την συμπεριφορά των πεπερασμένων στοιχείων BEAM188 και BEAM189 που διαθέτει το λογισμικό ANSYS Mechanical APDL για την μοντελοποίηση δοκών. Η κατάλληλη επιλογή των παραμέτρων αυτών των πεπερασμένων στοιχείων, στο πλαίσιο της μοντελοποίησης νανοσωλήνων άνθρακα με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων, θα αποτελέσει αντικείμενο μελλοντικής εργασίας.

Εξάρτηση μέτρου ελαστικότητας από το μήκος του νανοσωλήνα

Φυσικά το μέτρο ελαστικότητας Young οποιουδήποτε υλικού είναι ανεξάρτητο από το μήκος του δείγματος στο οποίο πραγματοποιείται η μέτρηση. Ωστόσο, επειδή εδώ χρησιμοποιούμε μια αριθμητική μέθοδο για την εκτίμηση του μέτρου ελαστικότητας θα πρέπει να βεβαιώσουμε ότι πράγματι δεν υφίσταται τέτοια εξάρτηση.



Σχήμα 4. α) Μέτρο ελαστικότητας Young νανοσωλήνων άνθρακα συναρτήσει του μήκους τους, β) Μέτρο ελαστικότητας Young νανοσωλήνων άνθρακα συναρτήσει της διαμέτρου τους.

Στο Σχήμα 4.α φαίνεται το μέτρο ελαστικότητας τριών διαφορετικών νανοσωλήνων συναρτήσει του μήκους τους. Όπως παρατηρούμε το μέτρο ελαστικότητας συγκλίνει προς μια σταθερή τιμή

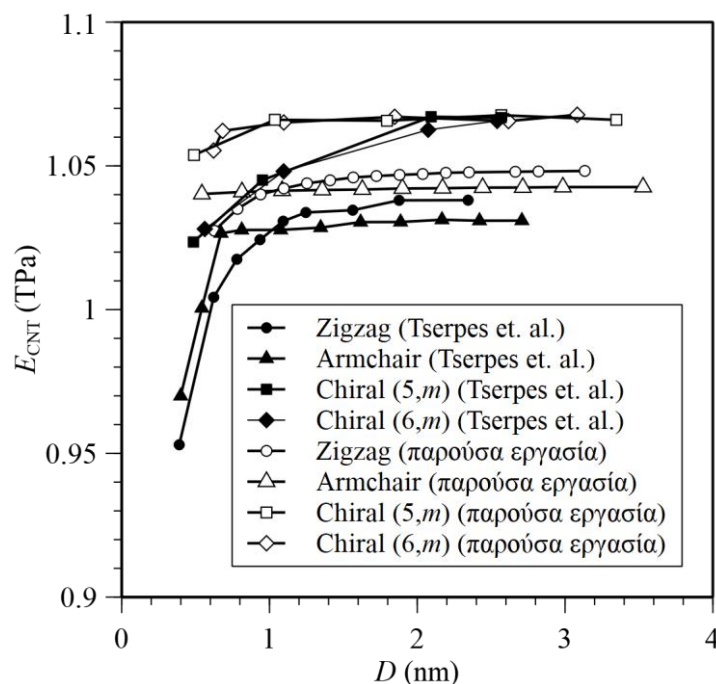
μόνο όταν το μήκος του νανοσωλήνα ξεπεράσει κάποια οριακή τιμή, η οποία για νανοσωλήνες τύπου zigzag είναι της τάξης των 5 nm, ενώ για του τύπου armchair της τάξης των 10 nm. Οι νανοσωλήνες τύπου chiral απαιτούν ακόμα μεγαλύτερο μήκος ώστε να εξασφαλιστεί η ανεξαρτησία του υπολογιζόμενου μέτρου ελαστικότητας από το L . Συγκεκριμένα, το υπολογιζόμενο μέτρο ελαστικότητας συγκλίνει ικανοποιητικά για μήκη της τάξης των 20 nm και άνω. Πιθανολογούμε ότι η συμπεριφορά αυτή αντανακλά την επίδραση που έχει η γεωμετρία των συνόρων επάνω στα οποία εφαρμόζονται οι κομβικές συνοριακές συνθήκες. Πιο συγκεκριμένα, τα σύνορα των νανοσωλήνων τύπου armchair και zigzag είναι σαφώς πιο ομαλά από αυτά του τύπου chiral. Αποτέλεσμα αυτού είναι ότι η επίδραση του συνόρου αποσβένει γρήγορα για τους νανοσωλήνες armchair και zigzag ενώ απαιτεί μεγαλύτερο μήκος για να αποσβέσει στους νανοσωλήνες τύπου chiral. Σε κάθε περίπτωση, η υπόθεσή μας αυτή χρήζει περαιτέρω διερεύνησης. Για να αποκλείσουμε οποιαδήποτε εξάρτηση των αποτελεσμάτων από το μήκος των νανοσωλήνων όλα τα αποτελέσματα που παρουσιάζονται κατόπιν του σημείου αυτού έχουν ληφθεί σε νανοσωλήνες το μήκος των οποίων είναι τουλάχιστον 10 nm.

Εξάρτηση μέτρου ελαστικότητας από τη διάμετρο του νανοσωλήνα

Σε αντίθεση με το μήκος, η διάμετρος ενός νανοσωλήνα αναμένεται να έχει επίδραση στο μέτρο ελαστικότητάς του νανοσωλήνα, όπως άλλωστε έχει παρατηρηθεί και σε άλλες εργασίες^[3, 6, 9]. Στο Σχήμα 4.β βλέπουμε ότι η τάση είναι το μέτρο ελαστικότητας να αυξάνει συναρτήσει της διαμέτρου του νανοσωλήνα, D , έως μια κρίσιμη διάμετρο άνω της οποίας παραμένει πρακτικά ανεξάρτητο της. Η κρίσιμη αυτή τιμή φαίνεται να εξαρτάται από τον τύπο του νανοσωλήνα. Έτσι, για νανοσωλήνες τύπου zigzag η κρίσιμη τιμή της διαμέτρου είναι της τάξης των 3 nm, για νανοσωλήνες τύπου armchair και chiral είναι φανερά χαμηλότερη και είναι της τάξης του 1 nm.

Σύγκριση του παρόντος μοντέλου με τη βιβλιογραφία

Στο Σχήμα 5 φαίνεται η σύγκριση των αποτελεσμάτων μας για το μέτρο ελαστικότητας Young διαφόρων νανοσωλήνων άνθρακα με αυτά των Τσερπέ και Παπανίκου^[6]. Παρότι, όπως παραπάνω σημειώθηκε, οι τελευταίοι χρησιμοποιούν αφύσικη τιμή του λόγου Poisson τα αποτελέσματά τους συγκλίνουν ικανοποιητικά με αυτά της παρούσας εργασίας, ιδιαίτερα στην περιοχή με $D > 1$ nm.



Σχήμα 5. Σύγκριση αποτελεσμάτων της παρούσας εργασίας με αυτά της εργασίας των Τσερπέ και Παπανίκου^[6].

Πίνακας 2. Σύγκριση του μέτρου ελαστικότητας Young για νανοσωλήνες zigzag και armchair μεταξύ των Fan et. al.^[7] και της παρούσας εργασίας.

Νανοσωλήνας	Μέτρο ελαστικότητας (TPa)	
	Fan et. al. ^[7]	Παρούσα εργασία
(8,0)	1.0230	1.0274
(16,0)	1.0394	1.0439
(24,0)	1.0421	1.0469
(6,6)	1.0346	1.0409
(12,12)	1.0365	1.0418
(18,18)	1.0379	1.0424

Στον Πίνακα 2 παρουσιάζεται η σύγκριση των αποτελεσμάτων μας με αυτά των Fan et. al.^[7]. Είναι εμφανές ότι τα αποτελέσματα πρακτικά ταυτίζονται. Κατά την άποψή μας αυτό οφείλεται στο ότι τόσο στη παρούσα εργασία, όσο και σε αυτή των Fan et. al.^[7], χρησιμοποιείται $\nu = 0.3$ για τη δοκό.

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Στο πλαίσιο της παρούσας εργασίας αποπειράθηκε να εξεταστούν κάποια σημεία της εφαρμογής της μεθόδου των πεπερασμένων στοιχείων για την προσομοίωση των μηχανικών ιδιοτήτων νανοσωλήνων άνθρακα, στα οποία δεν έχει υπάρξει η απαραίτητη διερεύνηση από τη σχετική οικεία βιβλιογραφία. Όπως δείξαμε παραπάνω, το μήκος του προς μοντελοποίηση νανοσωλήνα άνθρακα μπορεί να επηρεάσει τα αποτελέσματα, όταν δεν υπερβαίνει κάποια κρίσιμη τιμή, η οποία εκτιμήθηκε ότι είναι της τάξης των 5–10 nm για νανοσωλήνες τύπου zigzag και armchair, ενώ είναι της τάξης των 20 nm για νανοσωλήνες τύπου chiral.

Από τα τρία διαφορετικά πεπερασμένα στοιχεία που χρησιμοποιήθηκαν στο λογισμικό Abaqus, μόνο το στοιχείο B33, το οποίο χρησιμοποιεί κυβικές συναρτήσεις μορφής, έδωσε ικανοποιητικά αποτελέσματα στην εκτίμηση του μέτρου ελαστικότητας Young νανοσωλήνων άνθρακα. Χρησιμοποιώντας αυτό το πεπερασμένο στοιχείο εκτελέσαμε μια σειρά προσομοιώσεων, τα αποτελέσματα των οποίων βρέθηκαν σε καλή συμφωνία με αντίστοιχα αποτελέσματα της οικείας βιβλιογραφίας.

Από την παρούσα εργασία είναι φανερό ότι το μέτρο ελαστικότητας Young είναι πρακτικά ανεξάρτητο από τον τύπο του νανοσωλήνα άνθρακα, μιας και οι διαφορές που βρέθηκαν δεν ξεπερνούν το 5%. Λαμβάνοντας ως πάχος τοιχώματος την τιμή $t = 0.34$ nm, διαπιστώσαμε ότι όλοι οι νανοσωλήνες άνθρακα που εξετάστηκαν στην παρούσα εργασία βρέθηκε να έχουν μέτρο ελαστικότητας Young περίπου 1 TPa.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] A.L. Kalamkarov, A.V. Georgiades, S.K. Rokkam, V.P. Veedu, M.N. Ghasemi-Nejhad, Int. J. Solids Struct. 43 (2006) 6832–6854.
- [2] J. P. Lu, Phys. Rev. Lett. 79 (1997) 1297.
- [3] Chunyu Li, Tsu-Wei Chou, Int. J. Solids Struct. 40 (2003) 2487–2499.
- [4] T. Chang and H. Gao, J. Mech. Phys. Solids 51 (2003) 1059.
- [5] C. W. S. To, Finite Elem. Anal. Des. 42 (2006) 404.
- [6] K.I. Tserpes, P. Papanikos, Composites: Part B 36 (2005) 468–477.
- [7] C.W. Fan, Y.Y. Liu, Chyanbin Hwu, Appl. Phys. A 95 (2009) 819–831.
- [8] W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten, J. Mol. Graph. 14(1) (1996) 33–38.