

Modelowanie własności mechanicznych nanorurek węglowych oraz nanokompozytów umocnionych nanorurkami węglowymi / Małgorzata Chwał. – Kraków, 2015

Spis treści

I. WSTĘP	7
I.1. Przedmowa	7
I.2. Materiały kompozytowe	8
I.3. Przegląd literatury	10
I.3.1. Nanorurki węglowe	11
I.3.2. Nanokompozyty umocnione nanorurkami węglowymi	14
Literatura	16
II. NANORURKI WĘGLOWE	21
II.1. Wprowadzenie	21
II.2. Odmiany alotropowe węgla	21
II.3. Geometria nanorurek węglowych	23
II.4. Metody wytwarzania nanorurek węglowych	26
II.5. Własności nanorurek węglowych	28
II.6. Zastosowania nanorurek węglowych	32
Literatura	37
III. ODDZIAŁYWANIA MIĘDZYATOMOWE	41
III.1. Wprowadzenie	41
III.2. Podstawy opisu oddziaływań międzyatomowych	42
III.3. Wybrane potencjały oddziaływań międzyatomowych	44
III.3.1. Potencjał Morse'a	45
III.3.2. Potencjał Tersoffa-Brennera	46
III.3.3. Potencjał Lennarda-Jonesa	48
III.3.4. Potencjał AIREBO	49
III.3.5. Potencjał Keatinga	51
III.4. Zastosowanie potencjałów w opisie własności nanorurek węglowych	51
Literatura	55
IV. PROBLEMATYKA MODELOWANIA WŁASNOŚCI NANORUREK WĘGLOWYCH I NANOKOMPOZYTÓW	57
IV.1. Wprowadzenie	57
IV.2. Modelowanie nanorurek węglowych	59
IV.2.1. Model efektywnego przekroju poprzecznego	59
IV.2.2. Modele belkowe	61
IV.2.3. Modele powłokowe	63
IV.2.4. Model mechaniki strukturalnej	65

IV.3. Modelowanie nanokompozytów	66
IV.3.1. Model Coxa	66
IV.3.2. Model teorii sprężystości	67
IV.3.3. Model zastępczego continuum	67
IV.4. Modelowanie fazy pośredniej	68
IV.5. Modelowanie w ujęciu mechaniki statystycznej	69
IV.6. Modelowanie wieloskalowe	70
IV.6.1. Wprowadzenie	70
IV.6.2. Efekt skali i sformułowanie wieloskalowe	71
IV.6.3. Metoda MAAD	73
IV.6.4. Uproszczona dynamika molekularna	74
IV.6.5. Metoda quasi-continuum	74
IV.6.6. Metoda CADD	74
IV.6.7. Metoda obszaru pośredniego	75
IV.6.8. Metoda skali pośredniej	75
IV.6.9. Metoda wirtualnych klastrów atomowych	77
Literatura	78
V. PRZYKŁADY MODELOWANIA CONTINUUM	83
V.1. Homogenizacja numeryczna	83
V.2. Modelowanie poprzecznie izotropowych własności nanokompozytów	84
V.2.1. Wprowadzenie	84
V.2.2. Opis teoretyczny	85
V.2.3. Model numeryczny	90
V.2.4. Wyniki numeryczne	92
V.3. Modelowanie strukturalne	95
V.3.1. Wprowadzenie	95
V.3.2. Modele 2W nanokompozytów	96
V.3.3. Modele 3W nanorurek węglowych	99
V.3.3.1. Model geometryczny	99
V.3.3.2. Numeryczny model strukturalny	102
V.3.3.3. Model liniowy	103
V.3.3.4. Model nieliniowy	106
V.3.4. Modele 3W nanokompozytów	107
V.4. Modelowanie defektów	111
V.4.1. Wprowadzenie	111
V.4.2. Model nanorurki węglowej z defektami	112
V.4.3. Model nanokompozytu z defektami	115
Literatura	118
VI. ZAGADNIENIA WŁASNE	123
VI.1. Wprowadzenie	123
VI.2. Identyfikacja defektów w nanorurkach węglowych i nanokompozytach	126
VI.3. Drgania nanorurek bez defektów	130

VI.4. Rekonstrukcja wakancji	132
VI.5. Krzywe naprężenie-odkształcenie	133
Literatura	135
VII. OPIS NIELOKALNY	141
VII.1. Wprowadzenie	141
VII.2. Lokalna i nielokalna teoria belek - związki podstawowe	143
VII.3. Wpływ parametru nielokalnego na częstotliwości własne	146
VII.4. Weryfikacja numeryczna	148
VII.5. Dopasowanie parametru nielokalnego	151
Literatura	152
UWAGI KOŃCOWE	157
STRESZCZENIE	161
ABSTRACT	162
ZUSAMMENFASSUNG	163
SKOROWIDZ RZECZOWY	167

oprac. BPK