

**Szent István Egyetem**

**TÖBBDIMENZIÓS SZÉN NANOCső  
SZERKEZETEK HÚZÁSÁNAK MODELLEZÉSE**

Doktori (Ph.D) értekezés

**Pataki Tamás István**

Gödöllő  
2014

**A doktori iskola**

megnevezése: **Műszaki Tudományi Doktori Iskola**

tudományága: **Agrárműszaki tudomány**

vezetője: **Dr. Farkas István**  
egyetemi tanár, DSc  
Szent István Egyetem,  
Gépészmérnöki Kar  
Gödöllő

**Témavezető:** **Dr. Zsoldos Ibolya**  
egyetemi tanár, DSc  
Széchenyi István Egyetem,  
Műszaki Tudományi Kar  
Anyagtudományi és Technológiai  
Tanszék  
Győr

.....

Az iskolavezető jóváhagyása

.....

A témavezető jóváhagyása

---

## TARTALOM

---

# TARTALOM

JELÖLÉSEK ÉS RÖVIDÍTÉSEK .....	3
1. BEVEZETÉS, CÉLKITŰZÉS .....	5
1.1. A választott témakör jelentősége.....	5
1.2. Feladat meghatározás .....	6
1.3. Célkitűzések .....	6
2. SZAKIRODALMI ÁTTEKINTÉS .....	9
2.1. Szén nanocső elágazások modellezésének előzményei .....	9
2.1.1. Szén nanocsőves szerkezetek .....	9
2.1.2. Szén nanocsővek mechanikai tulajdonságai .....	12
2.1.3. Szén nanocsővek elektromos tulajdonságai .....	15
2.2. Szén nanoszerkezetek mechanikai vizsgálatai .....	20
2.2.1. Szén nanoszerkezetek mechanikai vizsgálatainak előzményei .....	20
2.2.2. Energetikai potenciál függvények .....	22
2.3. Szakirodalom elemzése, kutatási célok megfogalmazása .....	30
3. ANYAG ÉS MÓDSZER.....	33
3.1. Algoritmus szén nanoszerkezetek húzás-szimulációjára.....	33
3.2. Gradiens módszer.....	34
3.3. Az algoritmus .....	37
3.4. Húzás-szimuláció algoritmusának alkalmazhatósága .....	38
3.5. Szén nanocső szerkezetek modellezése .....	43
4. EREDMÉNYEK .....	45
4.1. Szén nanocső elágazás vizsgálatai .....	45
4.2. Szén nanocső elágazások gyenge pontjának módosítása .....	53
4.2.1. Stone-Walles transzformáció.....	54
4.2.2. Atombevétel.....	60
4.2.2. Szerkezetek szakítószilárdsága .....	64
4.3. Szén nanocső szerkezetek rugalmassága.....	66
4.3.1. Karosszék típusú nanocső rugalmassága .....	66
4.3.2. Cikk-cakk típusú nanocső rugalmassága .....	72
4.4. Szén nanocső szerkezet modellezése és vizsgálatai .....	78
4.4.1. Cikk-cakk típusú nanocső hálózat elem.....	78
4.4.2. Cikk-cakk típusú T transzformációval módosított nanocső hálózat elem.....	80
4.4.3. Cikk-cakk típusú atombevétellel módosított nanocső hálózat elem .....	82

---

## TARTALOM

---

4.4.4. Karosszék típusú nanocső hálózat elem .....	85
4.4.5. Szén nanocső hálózat-részlet egyirányú terhelése.....	87
4.4.6. Szén nanocső hálózat-részlet többirányú terhelése .....	90
4.4.7. Szén nanocső hálózat vizsgálata .....	94
4.5. Eredmények összefoglalása.....	98
4.6. Új tudományos eredmények.....	102
5. KÖVETKEZTETÉSEK ÉS JAVASLATOK.....	105
6. ÖSSZEFOGLALÁS.....	107
7. SUMMARY .....	109
8. MELLÉKLETEK.....	111
M1. Irodalomjegyzék.....	112
M2. Témával kapcsolatos publikációk.....	122
KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS.....	124

---

***JELÖLÉSEK ÉS RÖVIDÍTÉSEK***

Å	= Angström ( $10^{-10}$ méter)
AFM	= Atomic Forced Microscop = atomerő mikroszkóp
CNF	= Carbon Nanofiber = nano szénszál
CNT	= Carbon Nanotube = szén nanocső
CVD	= Chemical Vapor Deposition = kémiai gőzbázisú lebotás
DTMM	= Desktop Molecular Modeller = Egyszerű molekula-modellező
GPa	= Giga Pascal ( $10^9$ Pascal)
HRTEM	= High-resolution transmission electron microscop = nagy felbontású transzmissziós elektronmikroszkóp
MPa	= Mega Pascal ( $10^6$ Pascal)
MWNT	= Multi-Walled Nanotube = többfalú nanocső
nm	= nanométer ( $10^{-9}$ méter)
SEM	= Scanning Electric Microscope = Elektromos Pásztázó mikroszkóp
STM	= Scanning Tunneling Microscope = pásztázó alagútmikroszkóp
SWNT	= Single-Walled Nanotube = egyfalú nanocső
TPa	= Tera Pascal ( $10^{12}$ Pascal)
UHMWPE	= Ultra High Molecular Weight Polyetilene = Ultranagy Molekulasúlyú Polietilén



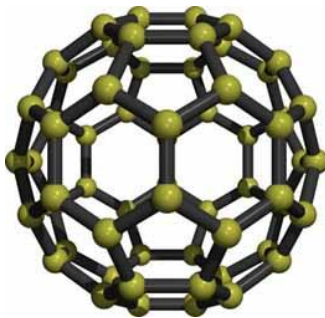
## 1. BEVEZETÉS, CÉLKITŰZÉS

### 1.1. A választott témakör jelentősége

Dolgozatommal egyrészt átfogó képet szeretnék nyújtani a szén nanoszerkezetek tulajdonságairól, alkalmazásairól, másrészt bemutatom tudományos munkásságom eddigi eredményét.

Napjainkban egyre többet hallani a nanotechnológiai forradalomról. Nem is olyan régen a miniatürizálásban a legjobb eredményt még az olyan szilíciumalapú mikrocsipek jelentették, amelyekben a legkisebb elemek az ezredmilliméter tartományába estek. A tudomány fejlődése következtében azonban ma már a milliméter milliomodrészénél is kisebb méretű objektumokat, azaz akár magukat az egyes atomokat is látni lehet, sőt manipulálni tudjuk azokat. Mindez az anyagvizsgálati módszerek, elsősorban az elektronmikroszkópok, illetve a különböző pásztázó tűszondás mikroszkópok (pásztázó alagútmikroszkóp = scanning tunneling microscope = STM; pásztázó atomerő mikroszkóp = atomic force microscope = AFM) hihetetlen fejlődésének köszönhető. A szemünk láttára kibontakozó és a széles területet felölelő nanotechnológiában kulcsfontosságúak a szén nanocsövek. Az egyfalú szén nanocső egy nagyon kis átmérőjű, belül üres egyenes henger, amelynek a „falán” helyezkednek el a szénatomok. Elnevezésük onnan ered, hogy a henger átmérője a nanométeres tartományba esik, vagyis ezek a csövek négy nagyságrenddel vékonyabbak az emberi hajszálnál. Ez azt jelenti, hogy a kerületen, a cső tengelyére merőlegesen körbehaladva legfeljebb néhányszor tíz szénatomot találunk. Ugyanakkor hosszuk tipikusan több tíz- vagy százezerszer nagyobb vastagságuknál.

Szén nanocsöveket először fullerének, azaz a „buckyball” előállításán figyelte meg Iijima, 1991-ben. Ezek azok a molekulák amit a focilabdára hasonlítanak. A gömböt hatvan darab szénatomból álló öt és hatszög gyűrűk alkotják (1. ábra).



1. ábra: Fulleren molekula (Buckyball)

Az ívkiüléses elpárologtatáshoz használt grafitrúd felületén keletkezett kormot vizsgálták elektronmikroszkóppal. A felvételeken koncentrikusan egymásba ágyazott csöveket lehetett látni, amelyek száma esetenként a tízet is meghaladta. Az ilyen többfalú szén nanocsövek külső átmérője 2 és 20 nm közé esik, a szomszédos falak távolsága  $\approx 0,34$  nm, vagyis annyi, amennyi a grafit párhuzamos rétegei közötti van der Waals-távolság. A kutatások a 90-es évek közepén indultak meg, amikor lehetővé vált egyfalú szén nanocsövek előállítása megfelelő katalizátorral adalékolt grafit lézeres elpárologtatásával. A szén nanocsövek előállítása manapság leggyakrabban valamilyen széntartalmú gáz katalitikus elbontásával (chemical vapor deposition = CVD) történik. Ennél az eljárásnál a katalizátorrészesekéknek egy hordozóra való megfelelő ráhelyezésével a létrejövő mintázat akár tervezhető is, például egyenletes sűrűségű „erdő” hozható létre szén nanocsövekből. Előállítottak már centiméteres hosszúságú nanocsövekből álló erdőt is, gyufaskatulya-méretben.

### 1.2. Feladat meghatározás

Dolgozatomban a szén allotrópok egyik speciális módozatával a szén nanocsövekkel foglalkozom. A nanocsöveknek a mechanikai tulajdonságainak vizsgálatát tűztem ki célul. Be szeretném mutatni, hogy miért van a szakirodalomban olyan nagy, több nagyságrendi eltérés a kísérleti úton mért szakítószilárdság és a matematikai módszerekkel számolt értékek között. Rávilágítok arra, hogy ha a nanocsöveket építőelemként használva különböző hálózatokat, szerkezeteket állítunk elő, hogyan vihető át az extra mechanikai tulajdonság a tér minden irányába. Egy új algoritmussal megmutatom, hogy a szerkezetekben hogy lehet megtalálni a gyenge keresztmetszetet. Megmutatom, hogy a gyenge keresztmetszet hogyan változtatható meg oly módon, hogy a szerkezet alapjában véve nem változik, csak a kötések rendeződnek át. Bebizonyítom, hogy a különféle topológiával rendelkező nanocső elágazások más és más mechanikai tulajdonsággal rendelkeznek. Egy adott hálózaton szemléltetem, hogy a tudatosan létrehozott gyenge keresztmetszettel megépített szerkezet hogyan viselkedik húzó igénybevétellel szemben.

### 1.3. Célkitűzések

- Be fogom bizonyítani a kísérletekkel és számolásokkal szemben felállított követelésem helyességét, miszerint a különböző energetikai potenciál függvények használatával létrehozott számítógépes modellek viselkedése a lehető legközelebb áll a valósághoz.
- Egy rendszert fogok felépíteni, illetve kifejleszteni, aminek az alapja egy új számolási módszer. Az ember nem csak teoretikusan látja azt,



amit készít, hanem egy szimulációval le is tudja ellenőrizni a kívánt mechanikai igénybevétellel terhelt modell viselkedését.

- A topológiai elrendeződés és a szilárdság közti összefüggést fogom megállapítani.
- Meg fogom állapítani, hogy az egydimenziós szén nanocsövek extrém mechanikai tulajdonságai mennyire vihetők át különböző csatlakozások segítségével a háromdimenziós tér több irányába.
- Meg fogom határozni, hogy egy nanocső hálózatnak melyek a leggyengébb pontjai, és hogy milyen viselkedése van a hálózatoknak húzó igénybevétellel szemben. A különböző elágazások hogyan határozzák meg a szerkezet mechanikai tulajdonságát, valamint ezt hogy tudom megváltoztatni.



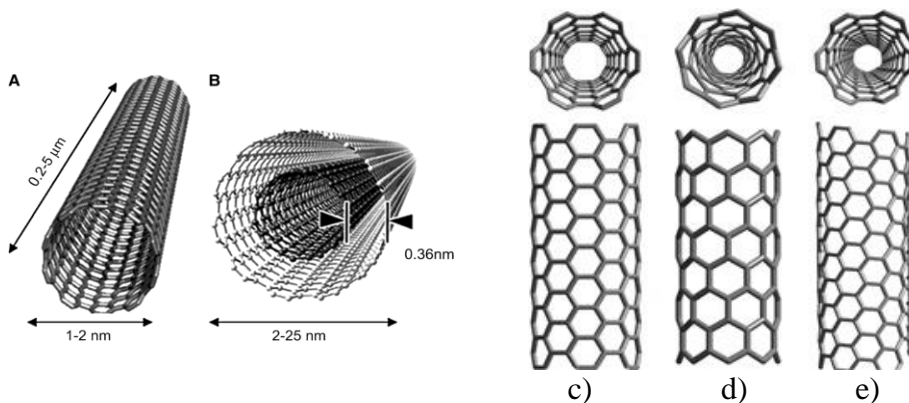
## 2. SZAKIRODALMI ÁTTEKINTÉS

### 2.1. Szén nanocső elágazások modellezésének előzményei

#### 2.1.1. Szén nanocsöves szerkezetek

Az egyenes szén nanocsövek felfedezésük óta (Iijima 1991) a nanoanyagok kutatásának középpontjában állnak, elsősorban kivételes mechanikai (Treacy 1996) és elektromos tulajdonságaik miatt (Saito 1992, Mintmire 1992). Az egyenes szén nanocsöveknek két alapvető csoportja van: egyfalú és többfalú nanocsövek.

Az egyenes, egyfalú szén nanocső – szerkezetét tekintve – egyetlen grafitréteg (grafén) hengerré tekerésével nyert alakzat. A többfalú szén nanocső több, koncentrikusan egymásba helyezett, egyfalú csőből épül fel. Az egyfalú szén nanocsövek a grafitsík feltekerésének orientációjától függően három csoportba sorolhatók: karosszék, cikk-cakk és királis nanocsövek, (2. ábra), (Kürti 2007).



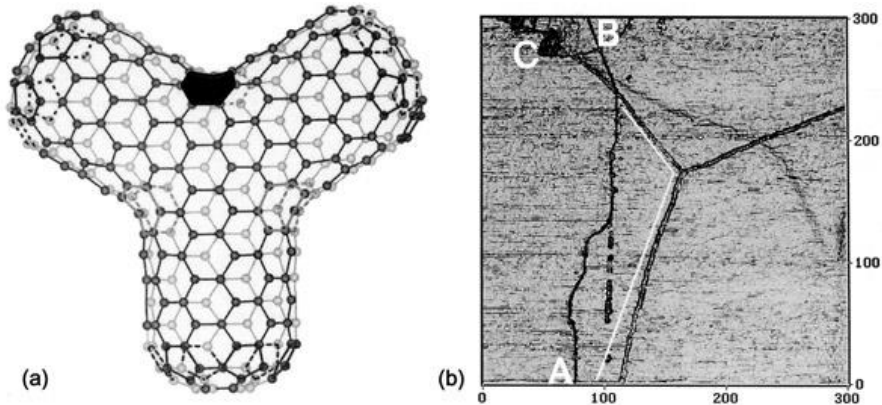
2. ábra.: Nanocsövek szerkezeti modellje: a) egyfalú; b) többfalú;  
Nanocsőfajták: c) karosszék; d) cikk-cakk; e) királis

A szerkezetet a feltekerési vektor segítségével definiálják. Ezeket a vektorokat a grafén hatszögmintázatán lévő egymással  $60^{\circ}$ -os szöget bezáró egységvektorok lineáris kombinációjával lehet értelmezni. Az így kapott irányvektorok a kiralitásvektorok. (Biró 2003).

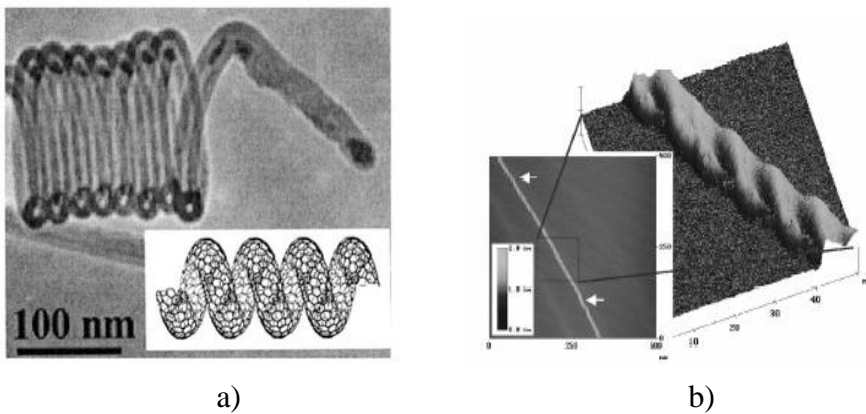
Az egyenes szén nanocsövek felfedezése után nem sokkal megmutatták, hogy ha öt- és hétszögek is bekerülnek a hatszöges szerkezetbe, akkor újabb szén nanostruktúrák is előfordulhatnak, 3-6. ábra. Bizonyított tény, hogy léteznek szén nanocső könyökök (Dunlap 1992) és Y elágazások (Chernozatonskii 1992, Andriotis 2001a), amelyeknek az

előfordulását, különböző szimmetrikus és aszimmetrikus fajtáit kísérleti úton először magyar kutatók igazolták (Biró 2002, Osváth 2002), 3. ábra. Szintén magyar kísérletekkel figyelték meg az egyfalú (Biró 2000a) és a többfalú (Amelinck 1994) nanocső tekerceket és kettős spirálokat (Biró 2000b, Su 2002, Ding 2003), 4. ábra. Találtak továbbá X- és T- elágazásokat (Terrones 2002, Ponomareva 2003, Menon 2003). Modellezéssel mutatták meg a tóruszok (Ihara 1993, 1995) szénatomokból álló szerkezetét, 5.ábra.

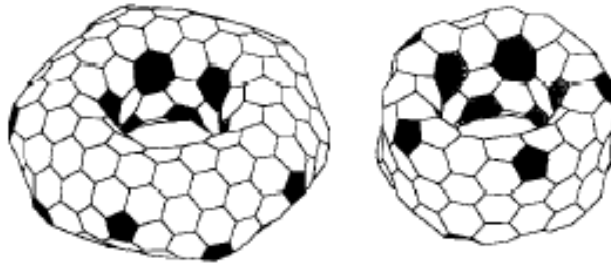
Az egyenes szén nanocsővekhez hasonlóan feltérképezték az öt-, hat- és hétszögekből álló különböző síkbeli poligonmintázatok feltekerési módjait és tulajdonságait is. Az öt-, hat- és hétszögekből álló ún. haeckelite vagy azulenoid egységekből álló csőszervezetek változatos alakzatokat vehetnek fel 6.a. ábra, valamint az Y elágazásokhoz hasonlóan a T elágazások szerkezeti felépítését is bemutatom a 6.b. ábrán (Terrones 2000, László 2001, Biró 2002b, Lambin 2003, László 2004)



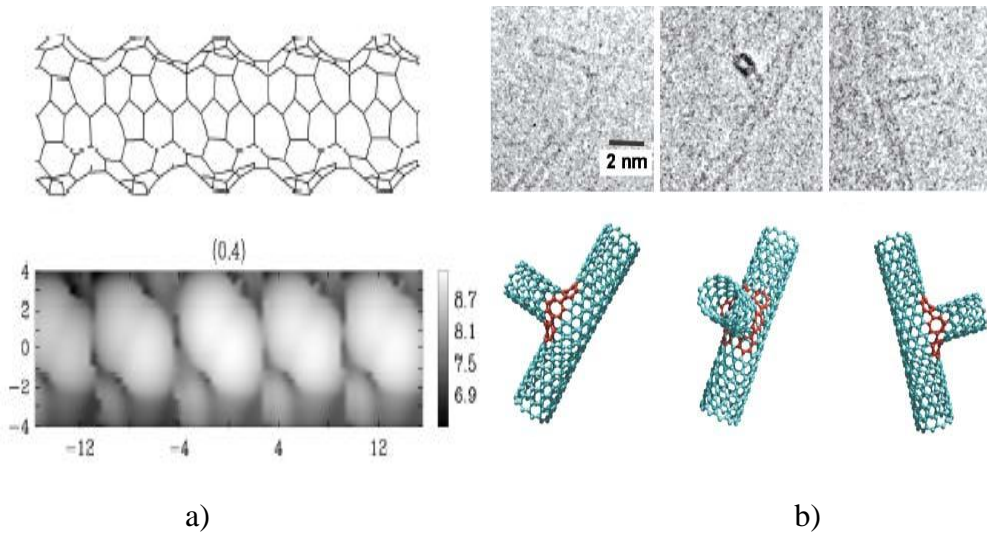
**3. ábra:** a) Y elágazás szerkezeti modellje, az egyik hétszög kiemelve; b) egyfalú Y elágazásról készített alagútmikroszkópos felvétel (Biró, 2002a)



**4. ábra:** a) Többfalú szén nanocső spirál (Biró 2003), b) Szén nanocső "duplaspirál" (Biró 2002b)



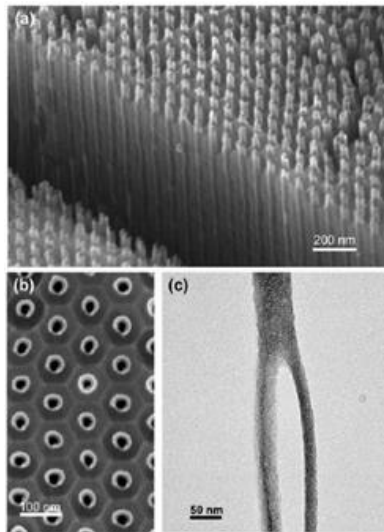
5. ábra: Nanocső tórusz modellek (Ihara 1995)



6. ábra: a) Haeckelite szerkezet modellje és STM képe (Lambin 2003),  
b) T-elágazások HRTEM felvételei és modelljei (Terrones 2002)

A szén nanocsövek előállításánál – elsősorban az érdekes elektromos tulajdonság miatt – az elágazások készítése és vizsgálata az egyik legizgalmasabb feladat. Célzottan nanocső elágazások sokaságának előállítási módjait keresték. Alumínium hordozón CVD eljárással többfalú szén nanocső Y elágazások tömbökbe rendezett sokaságát sikerült előállítani már 1999-ben, 7. ábra (Li 1999). Az elágazások készítésének egy lehetséges módjaként mutatták a szén nanocsövek kémiai reakciókkal történő összekapcsolását. A nanocsövek előállításánál szükségszerű tisztítás során a felnyitott nanocső végeken különböző, oxigéntartalmú funkciós csoportok jönnek létre (Zhang 2000). Ezeknek a funkciós csoportoknak és a nanocső paláston létrehozott funkciós csoportoknak a kémiai reakcióival hoznak létre különböző T, Y, X formájú elágazásokat (Kónya 2007). Az Y elágazások tömeges, olcsó előállítási módszereinek vizsgálata az utóbbi években intenzíven megindult. Y elágazások véletlen rendszerét sikerült növesztetni

aeroszolos technikával, szénrel reagens gázok és hidrogéngáz magas hőmérsékletű közegében, katalizátorprekurzorként fémsókat alkalmazva, víz befecskendezéssel (Heyning 2005). Alumíniumoxid hordozón molibdénrel ötvözött vas nanoszemcséket mint katalizátort alkalmazva CVD eljárással ugyancsak Y elágazásokban gazdag mintát sikerült előállítani (Choi 2005). Y elágazások sokaságát tartalmazó mintát mutattak a plazmával fokozott CVD módszerek eredményei is (AuBuchon 2006). Fa struktúrájú Y elágazások rendszerét nyerték ferrocén és benzéndiklorid keverékének speciális kezeléséből (Yao 2007). Legutóbb a metán katalizátor nélküli, mikrohullámmal kiváltott bomlással szintén Y elágazások sokaságát sikerült kimutatni (Fu 2009).



7. ábra a,b: Alumínium hordozón CVD eljárással növesztett Y elágazások SEM felvételei, c: a tömbből kiemelt Y elágazás TEM felvétele (Li 1999)

### 2.1.2. Szén nanocsövek mechanikai tulajdonságai

Két rendkívüli módon érdekes mechanikai tulajdonságot kell kiemelni az egyenes szén nanocsövek esetében, az extrém magas szilárdságot, amely szokatlanul nagymértékű rugalmassággal párosul.

Az egyenes szén nanocsövek szakítószilárdságát néhányszor 10 és 300GPa közötti értékre becsülik (Treacy 1996, Belytschko 2002, Duan 2007), amelyet nagyságrendileg mérésekkel is sikerült igazolni (Demczyk 2002, Yu 2000a-b). Mivel ennek a tulajdonságnak a tárgyalását a 3. fejezetben külön részletezem, ezért itt csak érintőlegesen említem meg.

Az egyenes szén nanocső másik kiváló mechanikai tulajdonságai a rugalmassági modulus. Mind elméleti úton, mind mérési eredményekből 1-1,2TPa értékre becsülik (Liu 1998, Lorie 1998, Ryoo 2007).

Az eddigi kutatási eredmények azt mutatják, hogy a szén nanocsövek rendkívüli mechanikai tulajdonságaik miatt különleges tulajdonságú kompozitok és újszerű eszközök, pl. szenzorok létrehozását teszik lehetővé (Andó 2006).

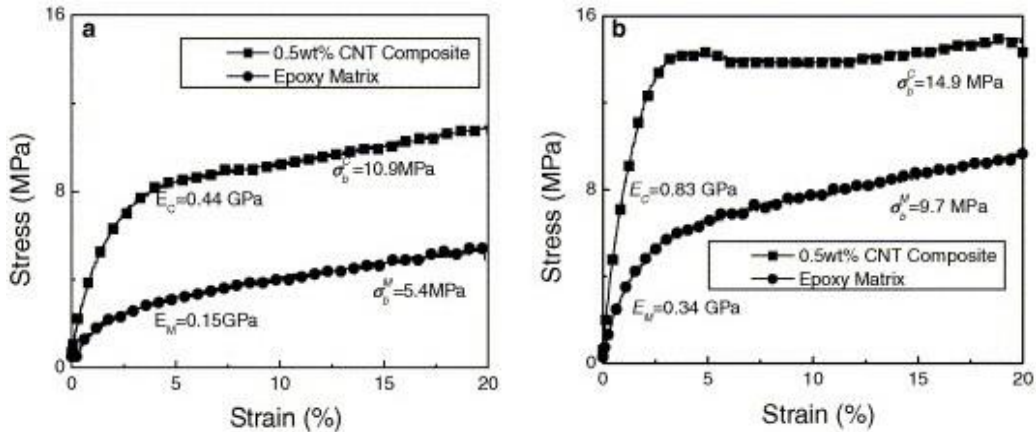
Elsősorban a két említett rendkívüli tulajdonság miatt használják a szén nanocsöveket különböző kompozitok adalékaként (Andó 2008).

A műanyag kompozitokkal kapcsolatos eredményekről hasznos összefoglalás található 2004-ig bezárólag (Andrews 2004), majd egy későbbi munkában is (Andó 2008). Az 1. táblázatból a 2004-ig terjedő időszak eredményeiből röviden összefoglalva azt lehet látni, hogy a műanyag mátrixoknak 1-5%-nyi szén nanocső adalékkal mind a rugalmassági modulusát, mind pedig a szilárdságát jelentősen, 25-200%-kal sikerült megnövelni.

**1. táblázat:** Szén nanocsőekkel adalékolt műanyag kompozitok kísérleteinek eredményei (Andrews 2004)

CNT	Matrix	Conc. (%)	Loading	Modulus	Yield stress	Strength	Toughness	Max. strain
MWNT	None	100	Tensile <sup>a</sup>	910 GPa		150 GPa		
MWNT	None	100	Tensile <sup>b</sup>	270–950 GPa		11–200 GPa		12%
MWNT	PAN	1.8 vol.%	Tensile	+36%	+46%	+31%	+80%	
SWNT	PVA	60 wt.%	Tensile	80 GPa		1.8 GPa	570 J/g	~100%
MWNT	PS	5 wt.%	DMA (25 °C)	+49% (aligned) +10% (random)				
MWNT	PE-B <sup>c</sup>		AFM <sup>c</sup>					
MWNT	UHMWPE	1 wt.%	Tensile	+25%	+48%	+25%	+150%	+60 to +140%
SWNT	PAN	4 wt.%	AFM <sup>d</sup>	~+100%				
CNF	PMMA	5 wt.%	Tensile	+50%		+200% <sup>e</sup>		-37.5%
MWNT	PMEMA	1 wt.%	DMA	+200%				

A 2004 óta eltelt időszakban inkább a hatékonyságon tudtak javítani, amely azt jelenti, hogy egészen kis mennyiségű szén nanocső adalékkal is határozott eredményeket sikerül elérni. Figyelemre méltó összefoglaló munkában fogalmazták meg, hogy az évek elteltével mindig kevesebb szén nanocső adalékkal sikerül ugyanazt a mértékű javulást elérni a műanyag kompozitok szilárdsági tulajdonságaiban (Coleman 2006). A 8. ábrán arra látunk példát, hogy már 0,5 tömegszázalék szén nanocső esetében is kb. kétszeresére javítható az epoxigyanta mátrix szilárdsága (Ci 2006).



8. ábra: Kis mennyiségű szén nanocső adalékkal elért szilárdságjavítás

A szilárdsági és rugalmassági tulajdonságok javítása mellett (esetenként azoknak a rovására) más különleges célokkal kapcsolatosan is sikerült jó eredményeket elérni, pl. a hőtágulási (fröccsöntési technológiáknál a zsugorodási) tulajdonságokban (Chae 2005), elektrokémiai korrózióállósági tulajdonságokban (Zeng 2009).

A műanyag kompozitok elektromos vezetőképessége a szén nanocső adalék arányával erősen változik. A változás jellege olyan, hogy a nanocső arányának egy küszöbértékénél ugrásszerűen megnő a vezetőképesség. Ez a nagyságrend még nem teszi kimondottan elektromos vezetővé a műanyagokat, inkább csak az elektrosztatikus feltöltődési tulajdonságot javítja pozitív irányban. Példaképpen: polisztirol mátrixnak kb. 0,5 súlyszázalék szén nanocső adalék mellett a vezetőképessége ugrásszerűen, legalább 10 nagyságrendet növekszik, mely azzal magyarázható hogy a polimer mátrixban lesz olyan vezető nanocsőszál mely végigfut a műanyagban (Chang 2006).

Magyar kutatók is kiváló eredményeket értek el polimer nanokompozitok kifejlesztésében. Hőre keményedő epoxygyanták szén nanocsővel erősített kompozitjainak és hibrid kompozitjainak a mechanikai és elektromos tulajdonságok szempontjából optimális technológiáit fejlesztették ki a Budapesti Műszaki Egyetem Polimertechnológiai Tanszékén (Romhány 2008, Romhány 2009, Szabó, 2010). Szén nanocsővek ipari mennyiségben történő előállítására fejlesztettek ki új elvi alapokon működő, saját tervezésű reaktort a veszprémi Pannon Egyetemen. Többfalú szén nanocsövet, mint saját terméket alkalmaztak sikeresen polipropilén mátrixú nanokompozitok erősítésére és az elektromos, valamint a hőtechnikai tulajdonságok javítására (Szentés 2010, Szentés 2011, Szentés 2012). Polimer nanokompozitok előállításánál hasonlították össze és



optimalizálták a száraz és a folyadékos keverési technológiákat a szén nanocsöveknek UHMWPE, ultranagy molekulásúlyú polietilén mátrixhoz való adagolásánál, Dogossy 2012, Hargitai 2012).

Nagyon érdekes alkalmazása a szén nanocsöveknek az AFM mikroszkópok tüjeként való felhasználás. Ezt a lehetőséget a szén nanocsövek ideális tulajdonságai tették lehetővé, a kis átmérő, kedvező hossz-átmérő arány, nagy rugalmassági modulus, nagy szilárdság, jól definiált szerkezet, erős kémiai stabilitás. A kísérleteket megelőző kalkulációk (László 1999) után konkrét alkalmazásokkal lehet találkozni (Hafner 2001, Lee 2005, Buchoux 2009).

### *2.1.3. Szén nanocsövek elektromos tulajdonságai*

Az egyik legizgalmasabb feladat a szén nanoszerkezetek elektromos tulajdonságainak a vizsgálata, ugyanis a különböző szerkezetek a legváltozatosabb elektromos viselkedést mutatják. Egyes félvezető eszközök részeként már ma is alkalmaznak szén nanocsöveket, és azt becsülik, hogy a jövőben a nanoelektronika eszközeit a legnagyobb valószínűséggel szén nanostruktúrákkal fogják megvalósítani.

A változatos elektromos viselkedésnek az alapja az, hogy a szén nanocsövek feltekerésének orientációja egyértelműen befolyásolja az egyfalú nanocső elektromos tulajdonságait: minden karosszék konfigurációjú nanocső fém viselkedésű, a cikkcakk nanocsövek közül azonban csak minden harmadik ilyen, a többiek félvezető tulajdonsággal rendelkeznek (Saito 1992). A királis nanocsövek esetén a kiralitás mértéke határozza meg a viselkedést (Xinghui 2004).

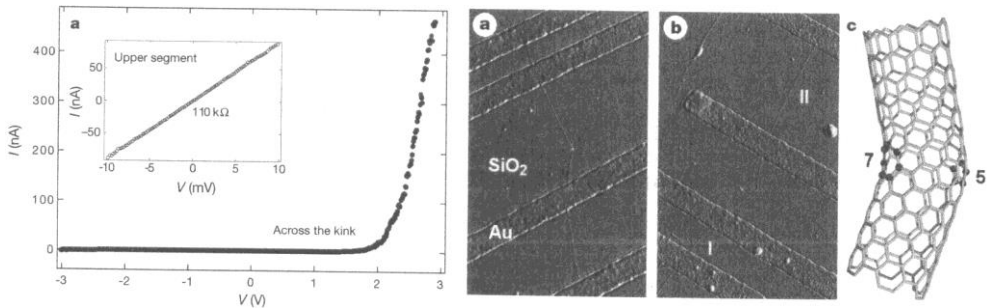
Elektromos viselkedés szempontjából eltérő nanocsövek csatlakozásai között keresik intenzíven a félvezető eszközök új, nanoméretű családjának az alapelemeit.

Viszonylag korán sikerült mérésrel igazolni, hogy adott szén nanocső könyök, amely egy cikkcakk és egy karosszék típusú ágból áll, egyenirányító diaódaként képes viselkedni (Yao 1999), 9. ábra. Az ábrán fent az a. és b. részen a szilíciumdioxid felületen az arany elektródák közé kifeszített nanocső könyök látható, a c. rész a nanocső könyök szerkezeti modelljét, az alsó rész a mért karakterisztikát mutatja.

Szén nanocső Y elágazásokon is egyenirányító jelleget mértek és számoltak az első próbálkozásokkal (Papadopoulos 2000), 10. ábra. A 10. ábra bal oldali részén az arany elektródák közé kifeszített Y elágazás SEM felvétele látható, a jobb oldali rész a mért karakterisztikát mutatja.

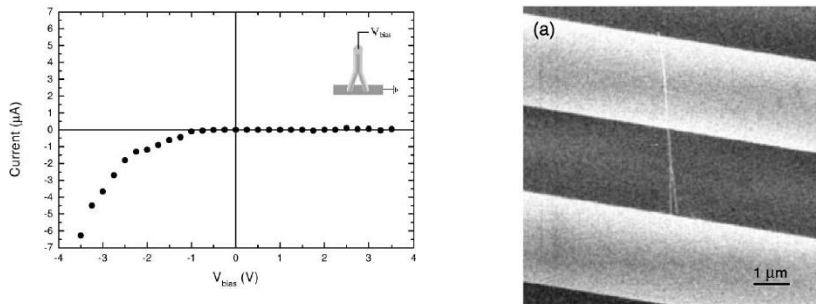
Adott szén nanocső vagy nanocső elágazás áram-feszültség diagramjának elméleti úton történő meghatározására a kvantumfizikai alapokon nyugvó Green-függvényes módszert dolgozták ki. A módszert

először egyenes nanocsöveken mutatták meg (Andriotis 2001b), azután alkalmazták különböző szén nanocső Y elágazásokon.



**9. ábra:** Különböző típusú ágakból álló szén nanocső könyvek esetében diódaszerű viselkedést mértek (Yao 1999)

Az Y elágazások esetében a Green-függvényes módszer eredményeként először – az első kísérletekkel (Papadopoulos 2000) összhangban – azt kapták, hogy a vizsgált Y elágazásoknak is egyenirányító jellegű karakterisztikája van (Andriotis 2001c), 11. ábra.



**10. ábra** Az 5. ábrán látható Y elágazás karakterisztikus diagramjának a mérése (Papadopoulos 2000)

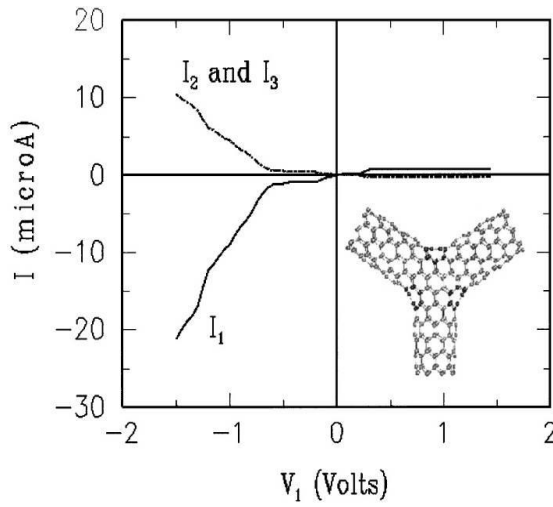
Később hasonló számításokkal megmutatták, hogy léteznek olyan Y elágazások, ahol az áram-feszültség karakterisztika már aszimmetriát mutat (Andriotis 2002, Ponomareva 2003).

Végül mérésekkel is igazolták az Y elágazások esetében az aszimmetrikus áram-feszültség görbét (Bandaru 2005), 12. ábra. Az ábra bal oldalán a mérés felülnézetben, elvi rajzzal látható, ahol az Y elágazás 1, 2, 3 számokkal jelölt ágai arany elektródák közé vannak fektetve. A jobb oldali rész a mért görbét mutatja.

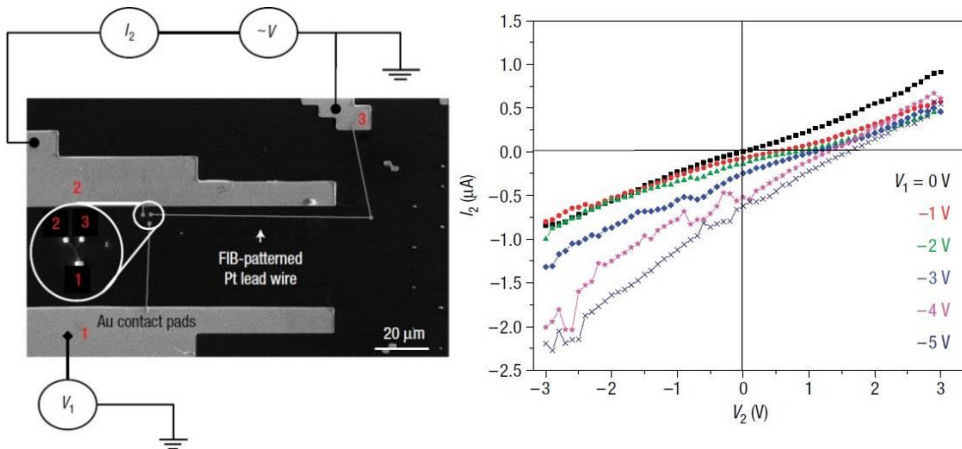
Az aszimmetrikus áram-feszültség karakterisztikák megtalálásával bebizonyosodott, hogy a szén nanocső Y elágazások alkalmasak nemcsak

nanoméretű kapcsolók, hanem nanoméretű logikai áramkörök alapelemeinek a kialakítására is.

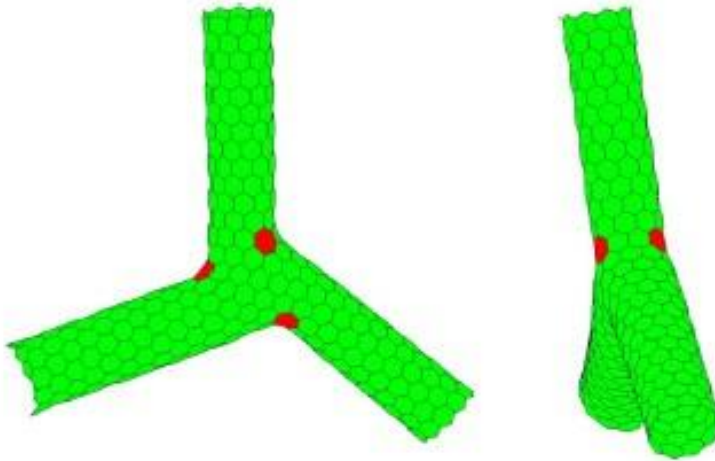
Az eddig ismertett Y elágazások karosszék és cikkcakk típusú nanocsövek csatlakozásaiból álltak. Tetszőleges kiralítású Y elágazás modelljének létrehozásához általános módszert dolgoztak ki (László 2007), 13. ábra, az alakra vonatkozó matematikai analízist alkalmazták a szénatomok Descartes-koordinátáinak a meghatározására (Graovac 2008).



11. ábra: A modellel mutatott Y elágazás Green-függvényekkel számolt I-U karakterisztikája egyenirányító jelleget mutat (Andriotis 2001c)



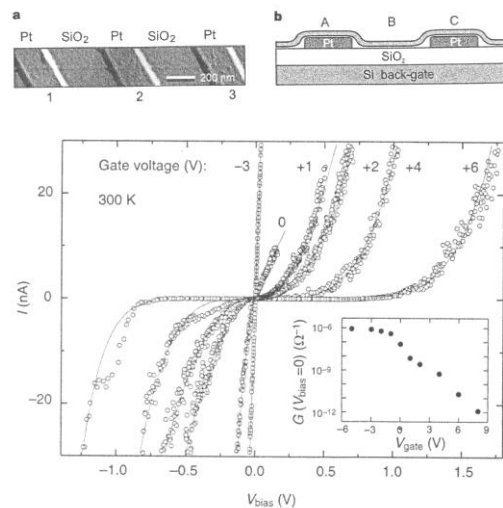
12. ábra: Első alkalommal mérték szimmetrikus I-V karakterisztikát szén nanocső Y elágazáson (Bandaru 2005)



**13. ábra:** (10,0), (10,1) és (10,2) típusú nanocsövekből álló Y elágazás modellje példa a tetszőleges kiralítású elágazások előállítására szolgáló algoritmus alkalmazására (László 2007)

A félvezető technika szempontjából elsősorban a szén nanocső elágazások alkalmazási lehetőségei merültek fel, mint önálló, nanoméretű félvezető elemek lehetséges szerkezetei, ezzel párhuzamosan azonban már régóta lehet találkozni a gyakorlatban olyan félvezető eszközökkel, amelyek részegységként tartalmaznak egyenes nanocsöveket 14. ábra, (Tans 1998). A szén nanocső részegységeket tartalmazó félvezető eszközöknek, és a nanocső elágazásoknak egy értékes ismeretanyagát tartalmazó szakirodalmi összefoglalás Wei cikke (Wei 2008).

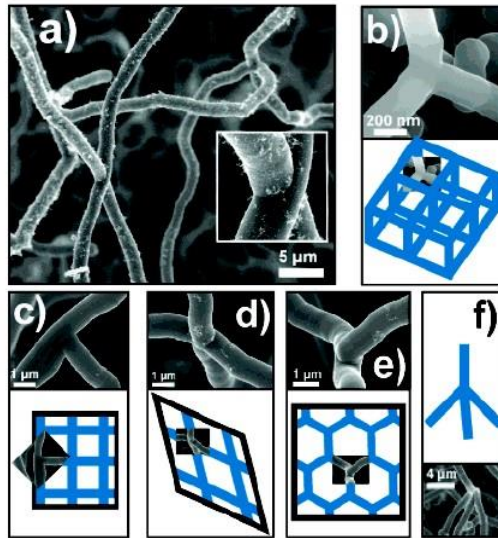
A szén nanocső elágazások irodalmában meg kell még említeni, hogy egyre több esetben találkoznak térbeli és háromnál több nanocsőből álló úgynevezett „multiterminal” elágazásokkal a szén nanocsövek előállítása során. A 15. ábrán a különböző elágazásokról készült SEM felvételek között látunk ilyeneket, pl. az ábra 'a' és az 'f' részén (Romo-Herrera 2007).



**14. ábra:** Transzisztorok részeként már régóta alkalmaznak egyenes szén nanocsöveket (Tans 1998)

Egyre több szerző számol be hasonló kísérleti tapasztalatokról (Ting 2004, Graner 2007, Liu 2007, Devaux 2009).

A háromnál több nanocsőből álló térbeli csatlakozások elektromos viselkedését egyelőre elméleti úton, számításokkal becsülik. A négy nanocsőből álló tetraédres elágazások elektromos viselkedését a sávszerkezet, a DOS (density of state) diagramok számításával mutatták meg (Nakada 2009).



**15. ábra:** Különböző szén nanocső elágazások SEM felvételei között szerepelnek térbeli és háromnál több nanocsőből álló elágazások is (Romo-Herrera 2007)

A szén nanocső elágazások nanoelektronikai alapegységekhez való alkalmazásának legegyszerűbb modelljeit elméleti megfontolások szerint rendszerbe foglalták (Zsoldos 2004, Zsoldos 2005, Zsoldos, 2011). A nanoelektronikában való ipari alkalmazás legnagyobb korlátja jelenleg az, hogy sem az előállításukra, sem a komplikáltabb szerkezetek elkészítésére, de még a válogatásukra sem létezik jelenleg jól vezérelhető, megbízható ipari alkalmazásra használható módszer, technológia.

Nagyobb esélyt jósolnak a kutatók jól működő ipari technológiák megvalósítására a felfedezéséért (Novoselov, 2005) 2010-ben Nóbeldíjjal jutalmazott, egyetlen atomátmérőnyi vastag grafitrétegnek, a grafénnek a nanoelektronikában való alkalmazásaihoz (Nemes-Incze 2008). A grafén esetében szintén igaz az, hogy az elektromos viselkedés függ a kristályorientációtól. A különböző kristályorientációjú nanoszalagok és nanoalakzatok (T-, Y-, Z-elágazások) előállítására könnyebb ipari alkalmazást találni a síkbeli alakzat, a grafén esetén, mint a 3D nanocsővek

esetén. A különböző alakzatoknak a grafénból való kivágására irányulnak a grafén nanolitográfiai kutatások. Jelenleg két módszer párhuzamos fejlődése figyelhető meg. Az egyik módszernél az alagútmikroszkóp tujét használják az alakzatok kivágására (Tapasztó 2008). A másik módszernél mesterségesen létrehozott pontszerű hibák körül a  $\text{SiO}_2$  hordozó oxigénjével kiváltott lassú, kontrollált oxidációt, mint kémiai reakciót használják az alakzatok kialakítására (Nemes-Incze 2010). Az elektromos viselkedés vizsgálata után a különböző grafén nanoalakzatok egységeinek kombinációiból már nanoáramkörök tervezésével is próbálkoznak (Areshkin 2007). A grafénból szabott nanoszalagok és nanoalakzatok esetén is vannak még sajnos korlátok a nanoelektronikai megvalósításokhoz: az alakzatok szabásának pontossága jelenleg 5nm, tehát kb. egy nagyságrend hiányzik ahhoz, hogy atomi pontosságban meg lehessen valósítani az alakzatok atomi pontosságú szabását. Ezen kívül instabilitást okoznak a szalagok és az alakzatok szélén található, szabad vegyértékkel rendelkező szélső atomok.

A grafénból szabott különböző alakzatok és a 3D szén nanoszerkezetek közötti kapcsolat keresése érdekes feladat. Molekuláris dinamikai szimulációkkal sikerült megmutatni, hogy atomi pontossággal, előre definiált módon kiszabott alakzatok önszervező módon, saját maguk képesek adott 3D szerkezetek (fullerének, szén nanocsövek) felépítésére (László 2012a, László 2012b). Ez azt jelenti, hogy az ipari alkalmazás szempontjából reményteljes grafén nanolitográfia alkalmas lehet 3D szén nanoszerkezetek, nanocsövek és nanocső elágazások kontrollált előállítására is. A 3D szerkezetek esetében nem kell számolni instabilitásokkal, amelyek a grafén alakzatok szélein megjelennek. Ez a különbség is indokolja, hogy a grafén létezése és a grafén egyszerűbb megmunkálásának ténye mellett továbbra is célszerű foglalkozni a szén nanocsövek és a nanocső elágazások rendszerével.

## **2.2. Szén nanoszerkezetek mechanikai vizsgálatai**

### *2.2.1. Szén nanoszerkezetek mechanikai vizsgálatainak előzményei*

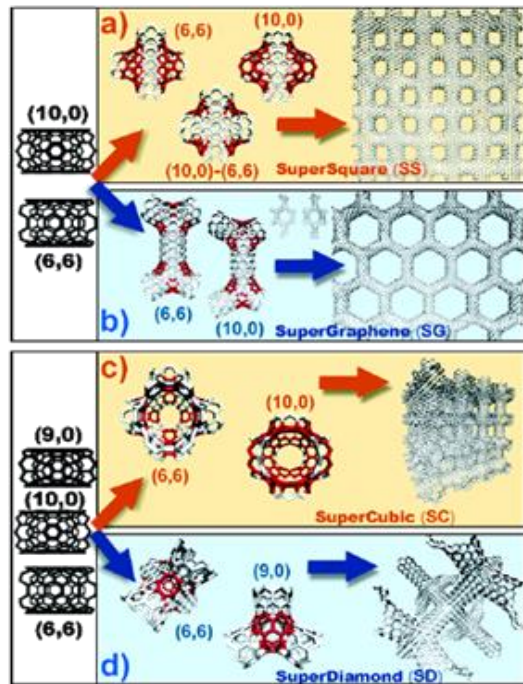
A szilárd testekben előforduló legerősebb kémiai kötés a grafitrétegen belül a szénatomok közötti  $\text{sp}^2$  kémiai kötés (Coulson 1952, Demczyk 2002), ennél fogva a ma ismert legerősebb szilárd anyag a grafén. A grafén szakítószilárdságát elméleti úton már régen meghatározták. A Young-modulusból származtatott módszerrel 0.316TPa értéket találtak (Kelley 1981), a törési munkából kalkulált módszerrel 0.14-0.177TPa értéket becsültek (Polányi 1921, Orowan 1949). Ez az elméleti szilárdság tehát fontos mennyiség, mivel a szilárd testek körében ez a maximálisan elérhető szilárdsági érték.

A grafénből való származtatás (grafén szalag feltekerése) miatt a szén nanocsövek olyan anyagok, amelyeknek a szilárdsága megközelítheti az elméleti maximumot. A szén nanocsövek szakítószilárdságának a közvetlen méréssel történő meghatározását elvégezték többfalú szén nanocsöveken (MWCNT) (Demczyk 2002, Yu 2000a) és egyfalú szén nanocső (SWCNT) kötegeken (Yu 2000b). Két atomerő mikroszkóp tű közé rögzítették a mintákat, amelyek közül az egyik erőmérő szenzorként is szolgált. A húzás folyamatát pásztázó elektronmikroszkóppal rögzítették.

A szén nanocsövek az extra nagy szilárdságukat a grafén szerkezettől öröklik. Ezt a rendkívüli tulajdonságot azonban csak egy irányban, a cső tengelyének irányában mutatják. A nanocső csatlakozások lehetnek azok a nanoszerkezetek, amelyek a rendkívüli szilárdsági tulajdonságot a háromdimenziós tér különböző irányába vezethetik.

Különböző nanocső csatlakozásokból különböző nanocső hálózatok építhetők. A szabályos geometriával leírható hálózatok (16. ábra) alaptípusai közül „szupernégyzetrács”-nak nevezték el az X elágazásokból épített hálózatokat, „szupergrafén” elnevezést kapott az Y elágazásokból álló

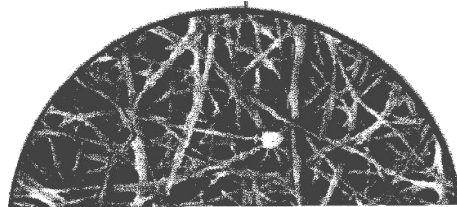
hatszög-mintázatos szerkezet, „szuperkőbös” hálózat alatt a hat egymásra merőleges csőből álló elágazások rendszerét értik, végül a „szupergyémánt” szerkezet a tetraéderes elágazásokból definiált hálózat (Romo-Herrera 2007). Ilyen szabályos hálózatok modelljein végeztek mechanikai számításokat: meghatározták a Young-modulust, különböző deformációs mechanizmusok szimulációját végezték síkbeli hálózatok szerkezetein (Coluci 2007). Nanocsövek fraktál hálózatait definiálták (Coluci 2006). A fraktál szerkezet egy lépésének definícióját úgy értelmezik, hogy a nanocsövek modelljén a szénatomok közötti kötések helyébe új hatszögmintázatos nanocsövet szerkesztenek, és mivel minden atomnak három szomszédja van, ezért az atomok helyén – mint az eredeti hatszögmintázat csomópontjain – Y elágazások lesznek az új struktúrában.



16. ábra: Elméleti nanocsőhálózatok

Sikeres alkalmazásokat jósolnak a szén nanocsövek véletlen hálózatainak (Graner 2007). Ezek a hálózatok nem nanocső elágazások rendszereiből állnak, hanem úgy kell elképzelni őket, mint véletlenszerűen “összegubancolódt” nanocsövek sokaságát (17. ábra). A kedvező tulajdonságok meghatározására koncentrált kísérletezés folyik. Az eddigi eredmények szerint ezek a hálózatok lehetnek a legstabilabb és legerősebb elektromos vezetők, a meghibásodási valószínűség majdnem nulla. Intenzíven dolgoznak új és olcsó előállítási technológia kifejlesztésén.

Néhány kutatóintézetben műanyagba impregnált technológiával már ma is gyártanak ilyen vezető anyagokat.



17. ábra: Véletlen hálózat

### 2.2.2. Energetikai potenciál függvények

Az egyenes szén nanocsövek szakítószilárdságának elméleti úton történő meghatározásához molekuláris mechanikai módszereket használtak. Ezeknek az alapja az, hogy az atomok közötti kötőerőket a kémiai kötések leíró potenciálfüggvények gradienséből lehet számítani. A legtöbb ilyen számításnál az empirikus Brenner-potenciált alkalmazták (Belytschko 2002, Mylvaganam 2004, Duan 2007, Fu 2008, Agrawal 2008). Lehet találkozni olyan számításokkal is, ahol a Brenner-potenciál kifejlesztése előtti formulákat használnak, ilyenek a Tersoff-potenciállal (Jeng 2004, Mylvaganam 2004) és a Morse-potenciállal (Belytschko 2002, Meo 2006, Duan 2007) végzett számítások.

Az első matematikai megközelítés a Lennard-Jones-formula volt az energetikai potenciálfüggvény leírására (Lennard-Jones, 1931). Ezt a potenciálfüggvényt széles körben alkalmazták molekuláris mechanikai és dinamikai számításokban (pl. S.Zhen, 1983).



**Lennard-Jones potenciál:**

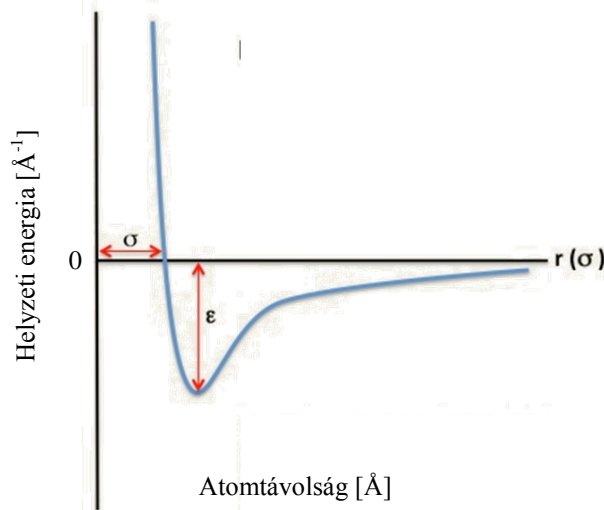
$$V(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] = \varepsilon \left[ \left( \frac{r_m}{r} \right)^{12} - 2 \left( \frac{r_m}{r} \right)^6 \right]$$

Ahol:

$$V(\sigma) = 0$$

$$V(r_m) = -\varepsilon$$

$$r_m = 2^{1/6} \sigma$$

**18. ábra:** Lennard-Jones potenciál

Idekapcsolódnak még Morse (J.Laakkonen, 1985) és Stillinger-Weber kutatópáros (F. H. Stillinger and T. A. Weber, 1985) által felírt potenciál függvények is, amik a már említett Lennard-Jones potenciál függvényen alapszanak.

Történetileg Lennard-Jones (Zhen 1983), Morse (Laakkonen 1985), Tersoff, végül Brenner (Brenner 1990, 2002) írtak fel egyre jobban közelítő matematikai formulákat. Lennardék egyszerű hatványfüggvény alakban adták meg a formulákat. Morse véges hatótávolságot vett figyelembe az atomok között, ezzel rövidítette a számítások futási idejét. Tersoff volt az első, aki figyelembe vette az atomok második koordinációs gömbjét és a kötőszögeket, ezeknek a formuláknak a közelítését Brenner javította tovább.

**Morse potenciál [Morse 1923]:**

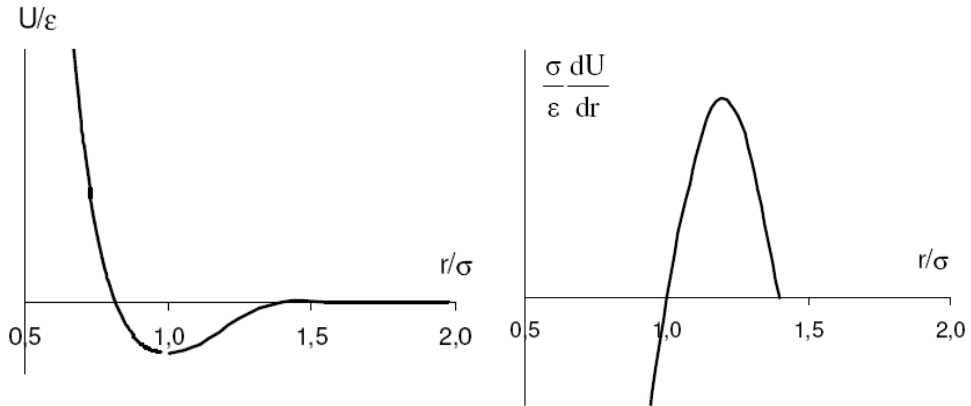
$$V_{(r)} = D_e (1 - e^{-a(r-r_e)})^2$$

ahol:

r: Atomok közötti távolság

$r_e$ : Az a távolság az atomok között, ahol nyugalomban vannak

$D_e, a$ : Anyagállandók



**19. ábra:** Morse potenciál energia függvény és az ebből deriválással adódó erő függvény

**Stillinger-Weber potenciál:**

$$U = \epsilon A \left[ \sum_{\langle ij \rangle} v_{ij}^{(2)}(r_{ij}) + \frac{\lambda}{A} \sum_{\langle ijk \rangle} v_{ijk}^{(3)}(r_{ij}, r_{ik}) \right]$$

Ahol:

$A, \epsilon, \lambda$ : Anyagállandók

$v_{ij}^{(2)}$ : A szomszédos atomok szomszédjainak energiája

$v_{ijk}^{(3)}$ : A másodsomszéd kölcsönhatások

r: Atomok távolsága

A függvény már a második koordinációs gömböt is figyelembe veszi. A szomszédos atomok szomszédjainak a szomszédjainak hatását is összegzi a pontosabb függvénylefutáshoz.

**Tersoff potenciál:**

$$E = \sum_i V_1(r_i) + \sum_{i<j} V_2(r_i, r_j) + \sum_{i<j<k} V_3(r_i, r_j, r_k)$$

Ahol:

- r: Atomok közötti távolság
- V<sub>1</sub>: Két atom közötti energia
- V<sub>2</sub>: A két atom szomszédjainak hatása
- V<sub>3</sub>: Az atomok szomszédjainak szomszédai hatása

A legjobb közelítést Brenner empirikus potenciálfüggvényei adják, amelyeket eredetileg szén és szénhidrogén atomos struktúrákhoz határozott meg, ma ezeket használják leggyakrabban molekuláris mechanikai és molekuláris dinamikai számításokhoz. A formuláknak két generációját adta meg, ezek közül az első generációs formulák használata terjedt el jobban a tudományos alkalmazásokban.

Mint általában az energetikai potenciálfüggvényeknél szokás volt, Brenner is a vonzó (V<sub>A</sub>) és a taszító (V<sub>R</sub>) hatásoknak megfelelő tagok eredőjeként adja meg a potenciálfüggvényt (V<sub>ij</sub>) az i-edik és a j-edik közvetlen szomszéd atompárra:

$$V_{ij}(r_{ij}) = V_R(r_{ij}) - \bar{B}_{ij} V_A(r_{ij}) \quad (2.2.1)$$

ahol r<sub>ij</sub> az i-edik és a j-edik atom közötti távolság. A taszító és a vonzó tagokat a következő kifejezésekkel írja le:

$$V_R = \frac{D_e}{S-1} e^{-\sqrt{2S}\beta(r_{ij}-R)} f_{ij}(r_{ij}) \quad (2.2.2)$$

$$V_A = \frac{D_e S}{S-1} e^{-\sqrt{2/S}\beta(r_{ij}-R)} f_{ij}(r_{ij}) \quad (2.2.3)$$

A vonzó és taszító tagokat leíró (2.2.2) és (2.2.3) formulákban szereplő paraméterek: D<sub>e</sub>, S, β és R anyagra vonatkozó állandók, vagy fizikai állandók.

Az f<sub>ij</sub>(r<sub>ij</sub>) úgynevezett levágó függvénynek az a szerepe, hogy a kölcsönhatásokat egy adott hatósugáron belülről korlátozza:

$$f_{ij}(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} < R_1 \\ \left[ 1 + \cos\left(\frac{r_{ij} - R_1}{R_2 - R_1} \pi\right) \right] / 2, & R_1 \leq r_{ij} \leq R_2 \\ 0, & r_{ij} > R_2 \end{cases} \quad (2.2.4)$$

A levágó hatás  $R_1$  és  $R_2$  atomtávolságok közötti szakaszon érvényesül, a függvény értéke  $R_1$  és  $R_2$  között 1-ről 0-ra csökken, 20/b ábra. Brenner  $R_1=1,7\text{Å}$  értéket javasol a levágó hatás kezdőpontjának, elkerülve ezzel a nyugalmi egyensúlyi helyzet ( $r_{ij} = 1,42\text{Å}$ ) környezetét,  $R_2=2\text{Å}$  értékhez javasolja a levágást.

A (2.2.1) kifejezésben  $B_{ij}$  az a tényező, amelynek segítségével figyelembe vesszük nemcsak az  $i$ -edik és a  $j$ -edik atomokból álló atompárt, hanem ezeknek a közvetlen szomszédjait, valamint a kötősszögeket:

$$B_{ij} = \left[ 1 + \sum_{k(\neq i, j)} G(\theta_{ijk}) f_{ik}(r_{ik}) \right]^{-\delta} \quad (2.2.5)$$

ahol:

- az összegzést az  $i$ -edik és a  $j$ -edik atomok közvetlen szomszédjaira kell elvégezni,
- $\theta_{ijk}$  az  $i$ -edik és  $j$ -edik atomok közötti kötés, valamint az  $i$ -edik és  $k$ -adik atomok közötti kötés szöge,
- A kötősszögek figyelembe vételére a következő összefüggés vonatkozik:

$$G(\theta_{ijk}) = a_0 \left[ 1 + \frac{c_0^2}{d_0^2} - \frac{c_0^2}{d_0^2 + (1 + \cos \theta_{ijk})^2} \right] \quad (2.2.6)$$

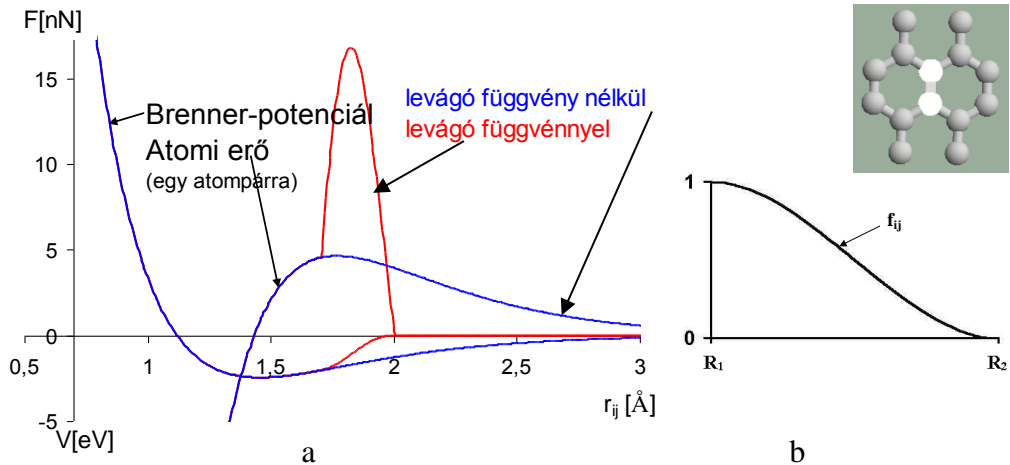
A (2.2.5) és a (2.2.6) összefüggések szintén tartalmazznak állandókat:  $\delta$ ,  $a_0$ ,  $c_0$  és  $d_0$ , amelyeknek megválasztása Brenner táblázataiból lehetséges (Brenner 1990).

Végül, mivel az  $i$ -edik és a  $j$ -edik atomnak a lokális környezete különbözhet, ezek átlagaként kalkulált korrekciós tényezőt javasol Brenner a (2.2.1) formulához:

$$\bar{B}_{ij} = (B_{ij} + B_{ji}) / 2 \quad (2.2.7)$$

Több szerző észrevételezte, hogy a Brenner-formulák levágó függvényének rendkívül erős hatása van az atomi erők számítására:  $r_{ij} = R_1$  atomtávolságnál egy töréspont van a potenciálfüggvényen. A

potenciálfüggvény gradiensén, tehát az atomi erőt meghatározó függvényen  $R_1$  helyen szintén töréspont jelenik meg, amely itt hirtelen meredekség változással is együtt jár, 20/a. ábra.



**20. ábra a:** A levágó függvény hatása a Brenner-potenciálra és annak deriváltjára, az atomi erőt meghatározó függvényre. Mindkét diagram a grafén egy közvetlen szomszédos atompárjára vonatkozik. **b:** A levágó függvény,  $f_{ij}(r_{ij})$  menete  $R_1$  és  $R_2$  között.

A töréspont megjelenése kevesebb gondot okoz a Brenner-potenciál lefutásán, mivel azt leginkább relaxációs számításokra használják, és ilyenkor legtöbb esetben csak az egyensúlyi helyzet közvetlen környezetében kell számolni a függvénnyel. Annál nagyobb problémát jelent azonban a töréspont a vele járó hirtelen meredekség változással együtt a potenciálfüggvény deriváltján, tehát az atomi erő függvényen. Itt ugyanis nem lehet fizikai jelenséggel megmagyarázni a hirtelen meredekség változást, de emellett az atomi erő maximális értékének a többszörösére való növekedését sem. A probléma megkerülésére az alábbi megoldásokkal próbálkoztak:

- Javasolták a levágó függvény kitolását a potenciálfüggvény minimumtól jobbra lévő ágának az inflexiós pontján kívülre (Shenderova 2000), így legalább a maximális erőhöz tartozó atomtávolságnál kisebb megnyúlásoknál nem kell számolni a problémával. Ezt a megoldást kritizálták más szerzők (Belytschko 2002), akik megállapították, hogy a töréspont problémája még 100% nyúlás után is kritikus, ezért inkább elhagyták a levágó függvényt a Brenner-formulákból.
- Vannak, akik a meredekség változást egyszerűen a szakítódigram különböző szakaszaiként értékelték (Mylvaganam 2004), amely természetesen nem helyes, hiszen a töréspontot nem fizikai viselkedés okozza, hanem a levágó függvény alkalmazása. Itt emlitem meg

azokat a további szerzőket is, akik a számítási eredményeket a meredekség változással együtt közltek, de nem tesznek említést annak okáról (Agrawal 2008, Fu 2008), még akkor sem, ha a függvényeken a változásokat megmutatják  $R_1$  értékének módosításával (Agrawal 2008).

- Találkozni lehet olyan számításokkal, ahol a levágó függvényt egyszerűen elhagyták a formulából (Belytschko 2002, Duan 2007).

A 2. táblázatban összegyűjtve mutatom meg a számolási eredményeket különböző szén nanocsövek esetére, ebben a táblázatban összehasonlításképpen mutatom a szakítóvizsgálatok kísérleti eredményeit is.

A szakítószilárdság értékei között meglehetősen nagy a szórás. Előfordulnak több nagyságrendnyi különbségek is a szakítószilárdságokban. A kísérletek esetében a kicsi értékeknek az oka lehet a bizonytalan megfogás, amelyet maguk a szerzők is megemlítenek. Ezen kívül a nanocső kötegek és a többfalú szén nanocsövek esetében is valószínűsíthető, hogy a belső (esetleg rövidebb) szálak vagy belső rétegek könnyebben megcsúsznak egymáson (Yakobson 2000). A számítások esetében a különbségek okai között egy magyarázat lehet a Brenner-potenciál levágó függvényének eltérő módon való kezelése. Másik magyarázatként még az is adódik, hogy esetenként a szerzők másképpen értelmezik magát a szakítószilárdságot, mint fizikai mennyiséget.

Összességében figyelembe véve az atomi erők számításánál található bizonytalanságokat, célszerű volt keresni egy megbízhatóbb számítási módszert, amellyel a felsorolt problémák kiküszöbölhetők. Ezt az általam készített algoritmus a következő fejezetben kerül bemutatásra.

**2. táblázat:** Szén nanocsövek szakítószilárdsága (Zsoldos 2009)

Nanocső szerkezet	Szakítószilárdság $R_m$ (GPa)	Módszer	Szerző
SWCNT kötegek	13-50	kísérlet	Yu 2000b
MWCNT	11-63	kísérlet	Yu 2000a
MWCNT	150	kísérlet	Demczyk 2002
(5,5) nanocső	123	Morse potenciállal	Meo 2006
(9,0) nanocső	94		
(12,12) nanocső	112	Morse-potenciállal	Belytschko 2002
(16,8) nanocső	106	Morse-potenciállal	
(12,4) nanocső	98	Morse-potenciállal	
(20,0) nanocső	93	Morse-potenciállal	
(20,0) nanocső	110	Brenner-potenciállal	
(10,0) nanocső	105,38	Morse-potenciállal	Duan 2007
(10,0) nanocső	99,89	Brenner-potenciállal	
(10,1) nanocső	106,09	Morse-potenciállal	
(10,1) nanocső	100,46	Brenner-potenciállal	
(10,3) nanocső	110,21	Morse-potenciállal	
(10,3) nanocső	102,59	Brenner-potenciállal	
(10,5) nanocső	116,83	Morse-potenciállal	
(10,5) nanocső	104,20	Brenner-potenciállal	
(10,7) nanocső	124,09	Morse-potenciállal	
(10,7) nanocső	104,93	Brenner-potenciállal	
(10,9) nanocső	130,93	Morse-potenciállal	
(10,9) nanocső	105,64	Brenner-potenciállal	
(10,10) nanocső	134,01	Morse-potenciállal	
(10,10) nanocső	111,93	Brenner-potenciállal	
(10,10) nanocső	1357	Brenner-potenciállal	Mylvaganam 2004
(17,0) nanocső	754		
(14,14) nanocső	250*	Brenner-potenciállal	Agrawal 2008
(24,0) nanocső	125*		
(6,6) nanocső	152,3	Tersoff -potenciállal	Jeng 2004
(8,3) nanocső	107,6		
(10,0) nanocső	92,5		
(5,5) nanocső	1700-1800*	Brenner-potenciállal	Fu 2008
(9,0) nanocső	1400*		
(10,10) nanocső	1700-1800*		
(17,0) nanocső	1400*		
(15,15) nanocső	1700-1800*		
(26,0) nanocső	1400*		

\*Az értékeket diagramban adták meg.

Atomi erőknek a Brenner-potenciál segítségével történő számítására módosított, parametrizált függvényrendszert definiáltak (Zsoldos 2009). A módosításnak kettős célja volt: egyrészt az, hogy az atomi erő függvényen a töréspont elkerülésére megoldást adjon, másrészt pedig az, hogy a parametrizálással lehetőség adódjon az atomi erő függvénynek mérési eredményekhez való illesztésére. Az utóbbira azért volt szükség, mert a Brenner-potenciált korábban csak az egyensúlyi helyzet, vagyis a minimumhely környezetében illesztették kísérleti adatokhoz, azonban a terhelt nanoszerkezetek esetében nemcsak az egyensúlyi helyzet környezete fontos, hanem az egyensúlyi helyzettől távolabb eső szakasz is. Ez a kísérleti eredményekhez való illesztés csak nagyságrendileg sikerült. Ugyanis a korábban említett szén nanocsövek szakitóvizsgálatára irányuló kísérletekből (Demczyk 2002, Yu 2000a, Yu 2000b) származó eredményekből jelenleg még nem végezhető el a teljesen pontos illesztés. A vizsgált nanocső szerkezeteket nem ismerték pontosan, ezért az egy kötésre jutó atomi erő csak nagyságrendileg volt meghatározható a mérési adatokból.

### **2.3. Szakirodalom elemzése, kutatási célok megfogalmazása**

A különböző nanoszerkezetek mechanikai vizsgálatainak kísérleti úton való kivitelezése jelenleg nehézkes és rendkívül költséges, teljesen pontos méréseket eddig nem sikerült végezni. Napjainkban folyó kutatásokban kiemelkedően nagy jelentősége van az elméleti úton, modellezéssel és szimulációs eszközökkel végzett mechanikai vizsgálatoknak.

A szén nanoszerkezetek esetében a mechanikai vizsgálatok különösen fontosak, mivel ezekben a szerkezetekben az atomokat összetartó erőket a szilárd testekben előforduló legerősebb kémiai kötések biztosítják, és ennél fogva a szén nanoszerkezetek a legnagyobb szilárdságú anyagok.

A szén nanoszerkezetek elméleti, molekuláris mechanikai vizsgálatainak az alapja az, hogy ismerjük az atomok közötti kötőerőket. Az atomi erőket a kötések potenciálfüggvényének gradienseként lehet meghatározni. Az atomi erők formulákkal való megadása jelenleg csak nagyságrendileg tekinthető pontosnak. A számított és becsült szilárdsági és nyúlási jellemzők is csak nagyságrendileg felelnek meg a valóságnak.

A szén nanoszerkezetek között kiemelt jelentősége van az Y elágazásoknak. Általában elágazásokkal oldható meg, hogy a szén nanocsöveknek a tengely irányban adódó rendkívül nagy szilárdságát elvezessük a tér több irányába is. Az elektromos viselkedés miatt szintén az Y elágazások a legérdekesebbek. Ha létezhet ipari technológia a szén nanoszerkezetek családjára épülő nanoelektronika megvalósítására, akkor



biztos, hogy az alapvető építőelemek egy része az Y elágazások halmazából kerül ki.

A szakirodalomban fellelhető különböző kutatók nagyságrendi eltéréseket kaptak eredményül nanocsövek szakítószilárdságára. Ezeknek az eltéréseknek nagy jelentősége van a későbbi alkalmazások és gyártások során. A számolások oka a Brenner potenciál eltérő használata. Már említettem, hogy a Brenner által alkalmazott levágó függvényt a kutatók más és más szempontok szerint alkalmazták. A cél az volt, hogy az erő függvényen létrejött töréspontot elkerüljék, vagy a függvényen olyan helyre essen, ahol a maximális erő számolásába nem esik bele.

Ebben a munkában szén nanocső Y elágazások mechanikai vizsgálatának molekuláris mechanikai szimulációkkal való megvalósítását tűztem ki célul. Az alábbi feladatokat foglalmaztam meg:

1. saját algoritmust készítek szén nanocső Y elágazások húzás-szimulációjára,
2. az atomi erők eddig felírt formulái csak nagyságrendileg pontosak, ezért először elemezni szándékozom, hogy az ilyen pontossággal végzett számítások, szimulációs eredmények mennyire megbízhatóak, milyen esetekben adhatnak reális eredményeket,
3. futtatásokat végzek húzás-szimulációra különböző Y elágazásokon,
4. analizálom a húzó igénybevételnek kitett Y elágazások viselkedését, vizsgálom a kötések alakulását, a tönkremenetel folyamatát, meghatározom a szerkezetek gyenge pontjait,
5. összefüggést keresek, mennyire határozzák meg a topológiai tulajdonságok a tönkremenetel folyamatát.



### 3. ANYAG ÉS MÓDSZER

#### 3.1. Algoritmus szén nanoszerkezetek húzás-szimulációjára

Szén nanoszerkezetek húzás-szimulációjára molekuláris mechanikai algoritmust készítettem.

A szakirodalomból kiindulva ennek az algoritmusnak is az az alapja, hogy az atomi erőket a kémiai kötéseket leíró potenciálfüggvény gradienseiből számítom. A Brenner-potenciálfüggvényt választottam erre a célra.

Az eredeti Brenner-formulákban az  $f_{ij}(r_{ij})$  függvénynek az volt a szerepe, hogy a kölcsönhatásokat egy adott hatósugáron belülré korlátozza. A módosított formulákban azonban korrekciós függvényként használták az egyenes szén nanocső szakítóvizsgálatok kísérleti eredményeihez való illesztését (Zsoldos 2009). Ezt a korrekciós függvényt használtam fel a saját algoritmusomban is. A korrekciós függvény matematikailag az  $[R_1, R_2]$  szakaszon értelmezett, két különböző intervallumban definiált polinom:

$$f_{ij}(r) = \begin{cases} f_1(r), & R_1 \leq r \leq R_T \\ f_2(r), & R_T < r \leq R_2 \end{cases} \quad (3.1.1.)$$

ahol  $R_T$  az inflexiós pont helye  $R_1$  és  $R_2$  között ( $r=r_{ij}$ ).

A két különböző intervallumban definiált  $f_1(r)$  és  $f_2(r)$  függvény egy negyedfokú és harmadfokú polinom:

$$f_1(r) = a_0 + a_1 r + a_2 r^2 + a_3 r^3 + a_4 r^4 \quad (3.1.2.)$$

$$f_2(r) = b_0 + b_1 r + b_2 r^2 + b_3 r^3 \quad (3.1.3.)$$

A polinomok együtthatóit a Brenner-potenciálhoz való illesztés útján határozták meg:

$$b_3 = \frac{f_T}{2(R_2 - R_T)^3} \quad (3.1.4.)$$

$$a_4 = \frac{3f_T - 3 + 6b_3(R_2 - R_T)^2(R_T - R_1)}{(R_T - R_1)^4} \quad (3.1.5.)$$

$$a_3 = \frac{4a_4[R_T^3 - R_1^3 - 3R_T^2(R_T - R_1)] + 3b_3(R_2 - R_T)^2 + d}{3(R_T - R_1)^2} \quad (3.1.6.)$$

$$b_2 = -3b_3 R_T \quad (3.1.7.)$$

$$a_2 = -3a_3 R_T - 6a_4 R_T^2 \quad (3.1.8.)$$

$$a_1 = d - 2a_2R_1 - 3a_3R_1^2 - 4a_4R_1^3 \quad (3.1.9.)$$

$$b_1 = d - 2b_2R_2 - 3b_3R_2^2 \quad (3.1.10.)$$

$$a_0 = 1 - a_1R_1 - a_2R_1^2 - a_3R_1^3 - a_4R_1^4 \quad (3.1.11.)$$

$$b_0 = -b_1R_2 - b_2R_2^2 - a_3R_2^3 \quad (3.1.12.)$$

$R_T$  tehát az inflexiós pont helye,  $f_T$  pedig a korrekciós függvény értéke az inflexiós pontban. Az  $f_{ij}(r_{ij})$  korrekciós függvényben szereplő  $R_T$  és  $f_T$  változók tehát szabad paraméterek, amelyek bevezetésével eredetileg az volt a cél, hogy mérési eredményekhez lehessen illeszteni az potenciálfüggvény gradiensét, azaz az atomi erő függvényét. A szakirodalom ismertetésénél említett okok miatt azonban ma még az illesztés nem végezhető el nagy pontossággal. A munka első részében azt szándékozom vizsgálni, hogy az illesztés bizonytalanságával mennyire reálisan alkalmazható potenciálfüggvény szén nanoszerkezetek húzás-szimulációjára.

### 3.2. Gradiens módszer

A fenti egyenletrendszer megoldását numerikusan, az ún. gradiens-módszerrel oldottam meg. A következőkben ezt ismertetem röviden.

A Brenner-potenciál (2.2.1) formulájának felhasználásával a rendszer energiája:

$$V = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^3 V_{ij}(r_{ij}) \quad (3.2.1.)$$

ahol

- az „i” index azokat az atomokat jelöli, amelyekre egyensúlyi helyzetet számolok, ezeknek a száma „N”,
- a „j” index az i. atom közvetlen szomszédjait jelöli.

A feladat a „V” függvény minimalizálása. A „V” függvény 3N változós függvény, mivel az i-edik atom  $(x_i, y_i, z_i)$  koordinátákkal rendelkezik.

Legyen  $\underline{X}$  vektor a  $3N$  változóból álló vektor:

$$\underline{X} = \begin{bmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \\ x_2 \\ y_2 \\ z_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ x_N \\ y_N \\ z_N \end{bmatrix} \quad (3.2.2.)$$

Induljunk ki az  $\underline{X}_0$  kezdeti vektorból, amely az atomi koordinátáknak a kezdeti értékeiből áll (egyensúlyi helyzet keresés előtt értékekből).

A „ $V(\underline{X})$ ” függvénynek az  $\underline{X}_0$  pontbeli normális vektora:

$$(\text{grad}V)_{\underline{X}=\underline{X}_0} = \underline{n}(\underline{X}_0) \quad (3.2.3.)$$

A „ $V(\underline{X})$ ” függvény legjobban a

$$-\underline{n}(\underline{X}_0) \quad (3.2.4.)$$

irányban csökken, vagyis az

$$\underline{X}(t) = \underline{X}_0 - t \cdot \underline{n} \cdot (\underline{X}_0) \quad (3.2.5.)$$

egyenlettel megadott egyenes mentén.

A következőkben a

$$V(\underline{X}_0 - t \cdot \underline{n} \cdot (\underline{X}_0)) \quad (3.2.6.)$$

függvény minimumhelyét kell meghatároznom. Minimum csak ott lehet, ahol a

$$\dot{V}(\underline{X}_0 - t \cdot \underline{n} \cdot (\underline{X}_0)) = 0 \quad (3.2.7.)$$

ahol

$$\dot{V} = \frac{dV}{dt} \quad (3.2.8.)$$

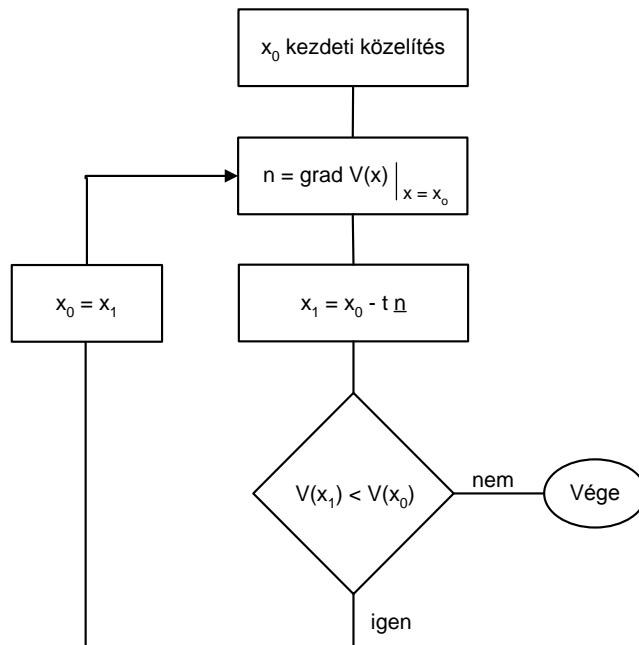
Ha az egyenlet legkisebb pozitív megoldása  $t_0$ , akkor az

$$\underline{X}_1 = \underline{X}_0 - t_0 \cdot \underline{n} \cdot (\underline{X}_0) \quad (3.2.9.)$$

vektor a  $V(X)$  minimumhelyének jobb közelítését adja, mint az  $X_0$ . Hasonló módon meghatároztam  $X_1$ -ből kiindulva  $X_2$ -t és így tovább.

A kapott  $X_0, X_1, X_2, X_3, X_4, X_5, \dots$  vektorsorozat számítását addig folytattam, amíg a  $V(X_1), V(X_2), V(X_3), V(X_4), V(X_5) \dots$  sorozat monoton csökkent.

Az egyenletrendszer megoldásának lépéseit mutatom be az alábbi folyamatábrán:

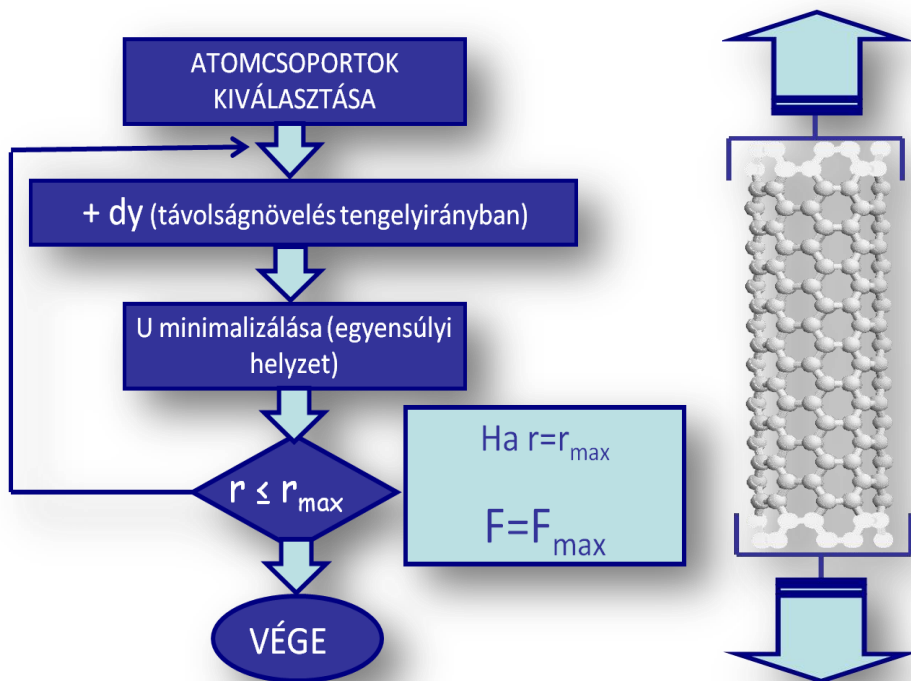


21. ábra: Az egyenletrendszer megoldásának lépései

### 3.3. Az algoritmus

Az algoritmus lépéseit a 22. ábrán szemléltetem:

- Az algoritmus bemenete a vizsgált szén nanoszerkezet modelljéből a szénatomok (x, y, z) koordinátáinak táblázata.
- Az indítás előtt szükség van a szerkezetben a szélső, rögzített helyek definiálására.
- A húzás-szimuláció egy lépése a rögzítések közötti távolság nagyon kis értékkel (ebben a munkában minden futtatásban 0,01Angströmmel) való növelésével kezdődik.
- A megnövelt távolságban lévő rögzített helyek közötti atomok egyensúlyi helyének számítása tartozik még az adott lépéshez. Ez a számítás egy iteráció, amely matematikailag egy többváltozós függvény (a Brenner potenciálfüggvény) minimumának megkeresésére irányul. A minimumkereséshez gradiens módszert alkalmaztam.
- Megfelelő számú lépés során végigkövethető a szerkezet viselkedése a húzás folyamatában. A folyamat szemléltetését a DTMM (Desktop Molecular Modeller) molekuláris modellező rendszer grafikus felületén oldottam meg.

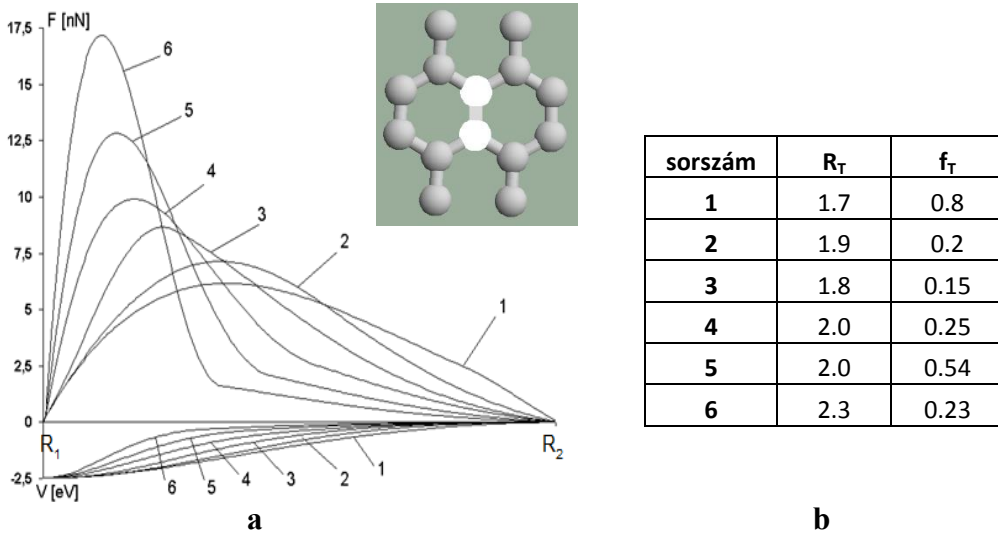


22. ábra: A folyamatábra, melyen a húzás-szimuláció folyamata látható, illetve egy modellen a szemléltetés

### 3.4. Húzás-szimuláció algoritmusának alkalmazhatósága

Ebben a fejezetben azt vizsgáltam meg, hogyan befolyásolja a szén nanoszerkezet viselkedését, ha a potenciálfüggvényt, ezzel együtt az atomi erőgörbe lefutását változtatjuk meg.

Az energetikai potenciálfüggvény és az atomi erőgörbe lefutásának változtatásához hét különböző esetet vizsgáltam. Az első esetben a Brenner-formulából elhagytam az  $f_{ij}(r_{ij})$  függvényt, vagyis azonosan „1” értékűnek értelmeztem. A következő hat esetben az  $f_{ij}(r_{ij})$  korrekciós függvényhez hat különböző  $R_T$ ,  $f_T$  értékpárt választottam, és ezzel hat különböző atomi erőfüggvényt állítottam elő. A 23. ábrán ezt a hat különböző esetet mutatom. A diagramon a vízszintes tengely alatti részen az energetikai potenciálfüggvény lefutását látjuk a hat különböző esetben. A vízszintes tengely feletti részen az atomi erőfüggvény derívtája, azaz az atomi erőfüggvény van feltüntetve a hat különböző esetben. Az energetikai potenciálfüggvényeken a különbségek kisebbek, az atomi erőfüggvényeken azonban drasztikusabb változásokat okoz a korrekciós függvényben a szabad paraméterek variálása. Kérdés tehát: milyen változásokat fog okozni az atomi erő függvény változtatása a szén nanoszerkezetek viselkedésében?



**23. ábra:** a.) Vízszintes tengely alatti részen az energetikai potenciálfüggvény, vízszintes tengely feletti részen az atomi erőfüggvény van feltüntetve, két szomszédos (fehérellel jelölt) atom között kalkulálva. b.) A korrekciós függvény szabad paraméterei.

A fent említett és megmutatott függvényeim láthatóan az egyensúlyi helyzetből indultak. Ez azért van így, mert a szakirodalom is úgy említi ezt a Brenner-potenciálfüggvényt, hogy csak az egyensúlyi helyzetben van több kísérlettel és bizonyítással igazolva, hogy a függvény milyen értéket vesz fel.

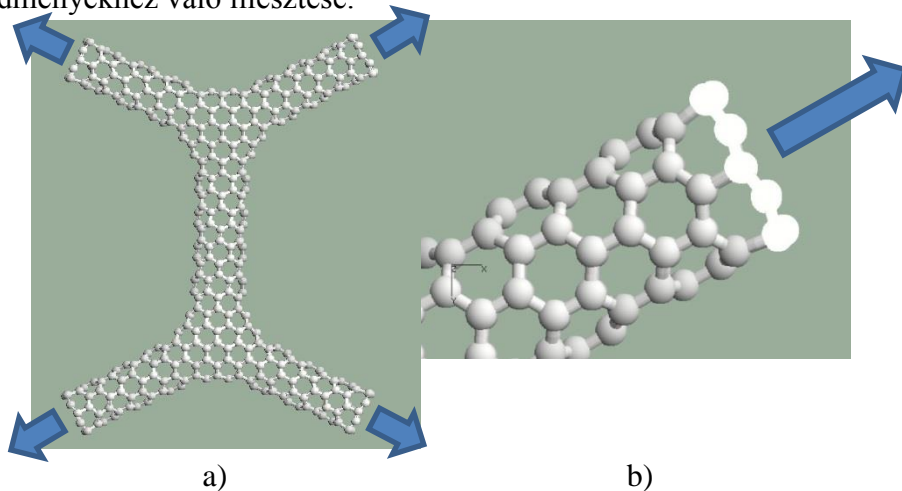


Bár Brenner azt mondta, hogy ezeket a korrekciós függvényeket nem az egyensúlyi helyzetből kell alkalmazni, én bebizonyítom, hogy nem szükséges, hogy ez így legyen. Ahhoz, hogy a függvény lefutást pontosan meghatározzam, ezt a módszert választottam. Így tudom pontosabban a különböző kísérleti eredményekhez illeszteni a függvényt, és ezáltal nem lesz töréspont a diagramomon. Ezzel a módszerrel pontosabban tudom megbecsülni az egész folyamatot, ami lezajlik egy szerkezetben a húzás-szimuláció folyamán.

Hét húzás-szimulációt végeztem el a hét különböző atomi erő függvényt használva az előző fejezetben ismertetett algoritmussal. A húzás-szimulációkat ugyanazon a szerkezeten, a 24.a. ábrán látható két szembefordított Y elágazásból álló szerkezeten végeztem. A szembefordított Y elágazás modelleket cikk-cakk típusú nanocsövekből szerkesztettem, a feltekerési vektor  $(6,0)$ . A szerkezet 580 atomból áll. A húzás-szimulációk során a négy egyenes nanocső ágat a tengelyek irányában, azonos arányban húztam, 24.b. ábra. A futtatásokat a roncsolódás (meghibásodás) megjelenéséig végeztem.

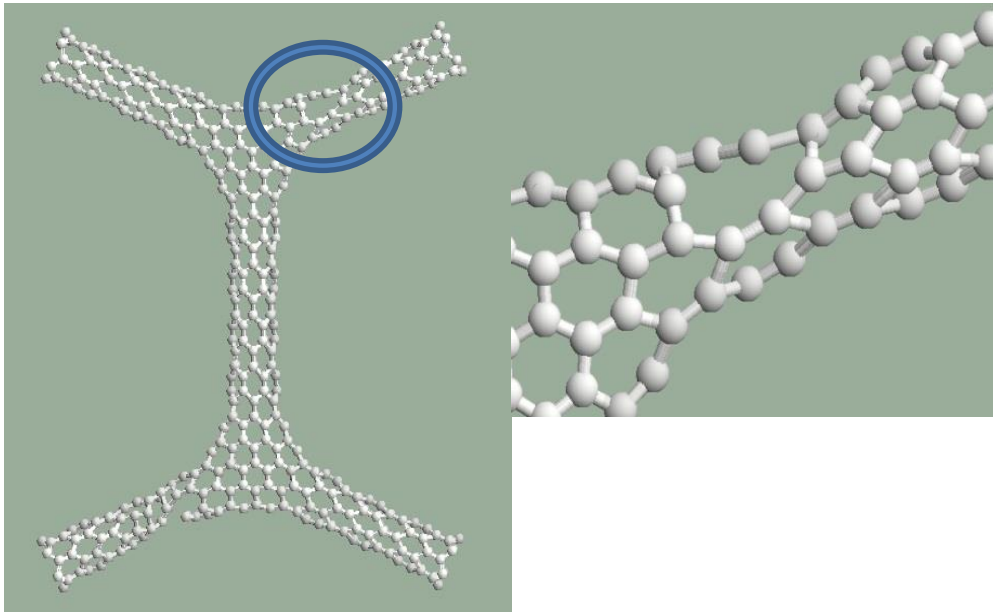
Az első esetben tehát az eredeti Brenner-potenciállal számoltam, ahol a levágó függvény, vagy korrekciós függvény hatását nem vettem figyelembe, azaz az értéke azonosan „1” volt. A húzás-szimulációs folyamat során kerestem azt a helyet, ahol a szerkezet roncsolódott.

Ezek után a korrekciós függvény hatását határoztam meg a szabad paraméterek hat különböző értékpárjának alkalmazásával. Ezzel a szimulációs sorozattal azt akartam vizsgálni, hogy a gyenge pont meghatározáshoz mennyire szükséges az atomi erőfüggvény pontos, kísérleti eredményekhez való illesztése.



24. ábra: a.) kiinduló szerkezet 580 atomból áll b.) A húzás minden ágnál tengelyirányú

A 25. ábrán az eredeti Brenner-potenciállal vizsgált futtatás eredményét mutatom. A futtatást akkor fejeztem be, amikor a szerkezeten megállapítható volt a roncsolódás helye. Ez a pillanat akkor következett be, amikor a megnyúlás mind a négy csőágban 11,26 Å volt. Ez 38%-os megnyúlásnak felel meg. A szerkezet geometriai méreteiből adódóan két szimmetrikusan fellépő roncsolódás látható. Ezek a roncsolódások nem a csomópontokban, hanem az egyenes csőszakaszokon jelentek meg. A nagyított ábrán látható, hogy egyes kötések átszakadtak, néhány kötés pedig átrendeződött.

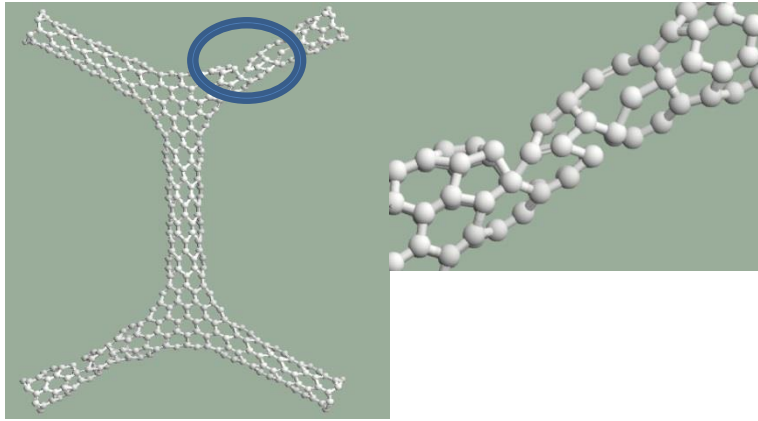


a)

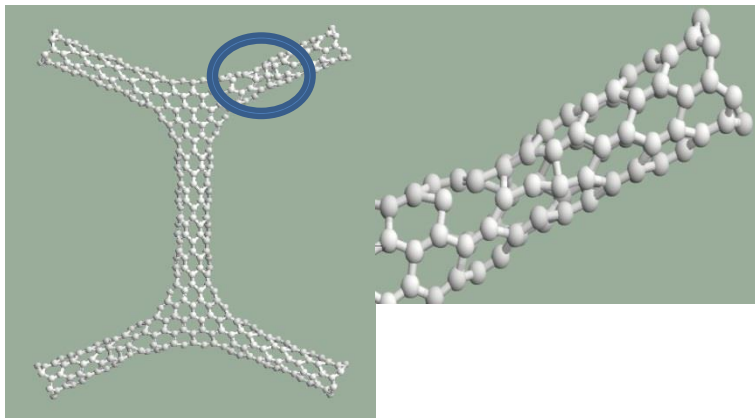
b)

**25. ábra:** a.) Az eredeti Brenner-potenciállal vizsgált és roncsolódott szerkezet b.) A nagyított részleten lehet látni az átszakadt kötések

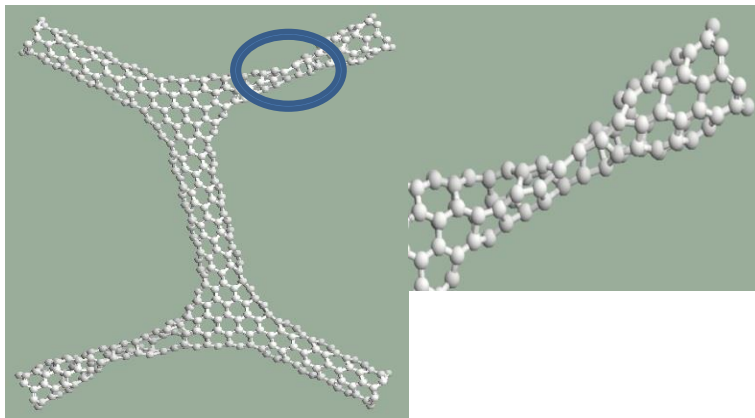
A következőkben a fent említett hat különböző szabad paraméterpár által meghatározott korrekciós függvényt alkalmazó futtatások eredményét mutatom (25.a.-25.f. ábra)



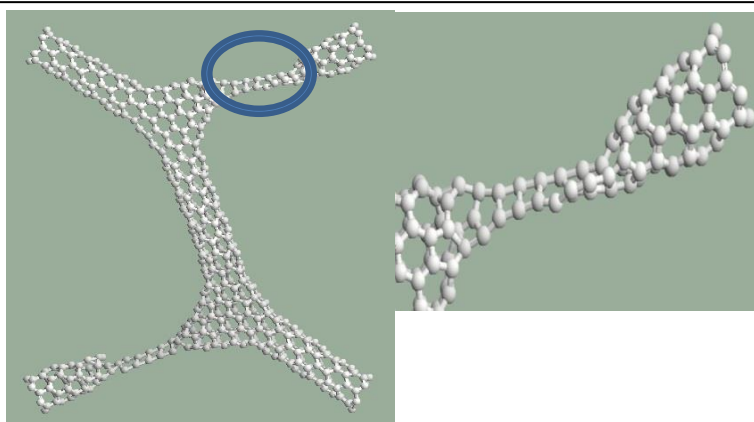
a)



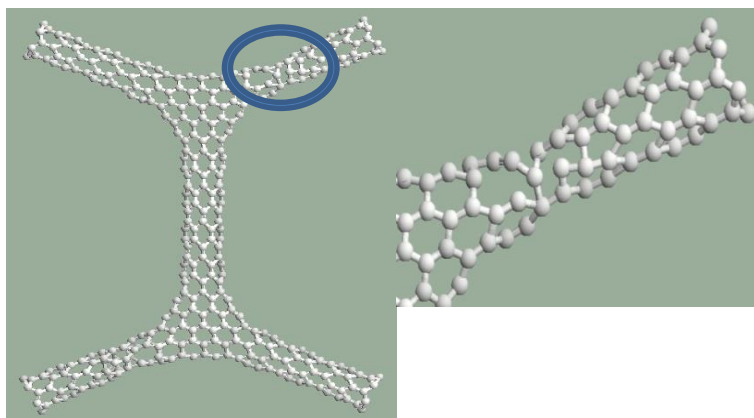
b)



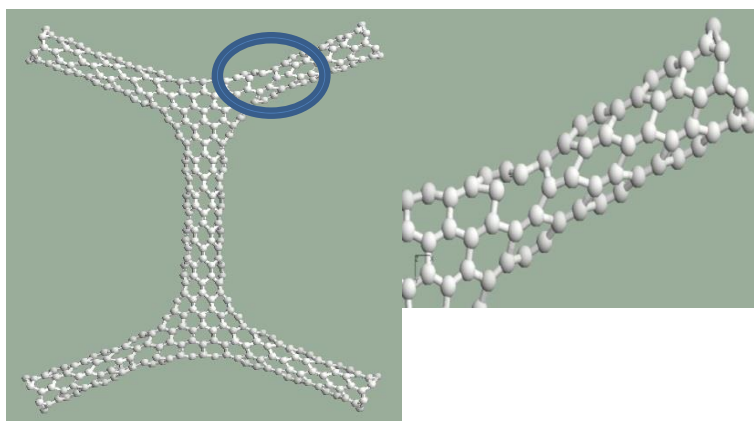
c)



d)



e)



f)

**25.ábra:** a:  $R_T = 1.7$ ,  $f_T = 0.8$ ;  
 b:  $R_T = 1.8$ ,  $f_T = 0.15$ ;  
 c:  $R_T = 1.9$ ,  $f_T = 0.2$ ;  
 d:  $R_T = 2.0$ ,  $f_T = 0.25$ ;  
 e:  $R_T = 2.0$ ,  $f_T = 0.54$ ;  
 f:  $R_T = 2.3$ ,  $f_T = 0.23$ ;

A futtatások eredményeiből megállapítottam, hogy a roncsolódás ugyanazon a szakaszon, sőt ugyanazon a helyen (ugyanazon atomok környezetében) történt. Minden esetben az első futtatás során megállapított szakaszon jött létre a deformáció. Az atomi erőfüggvény lefutása nem módosította a roncsolódás helyét.

Annak ellenére, hogy az potenciálfüggvény gradienseből származtatott atomi erőfüggvény lefutása az egyensúlyi helyzet környezetén kívül még nem pontosan definiált, az atomi erőfüggvény mégis alkalmas adott szén nanoszerkezet húzó igénybevétellel szemben való viselkedésének vizsgálatára, a szerkezet gyenge pontjának megkeresésére, a tönkremenetel folyamatának a vizsgálatára.

### 3.5. Szén nanocső szerkezetek modellezése

Ebben a fejezetben azt mutatom be, hogy a nanocsövekből felépült elágazásoknak számtalan formája létezik. Ezeknek a szerkezeteknek a viselkedése nem csak elektromosan változik, ahogy azt már említettem a 2.1.3. fejezetben, hanem a mechanikai tulajdonságaik is változnak.

A szerkezetek viselkedését a hétszög gyűrűk befolyásolják. A hétszögek elhelyezkedése számos módon történhet. A legfontosabb, hogy minden ághoz két darab ilyen hétszög gyűrű tartozik. Az általam vizsgált Y elágazásokban, mivel három ágból áll egy ilyen elágazás, hat darab hétszög gyűrűnek kell lennie. Ezt a szabályt az Euler-formula mutatja meg (Andriotis A.N. 2002). Dolgozatomban csak az elágazások csomópontjának közvetlen környezetét vizsgáltam, nem vizsgáltam a nanocső modellek végén szereplő „zárósapkákat”, melyekben szerepelnek az Euler-formulában említett ötszög gyűrűk, azaz nyitott végű nanocsövekkel foglalkoztam.

Az Euler-törvény szén nanocső elágazásokra:

$$N_7 + 2N_8 - N_5 = 6(N - 2),$$

ahol:  $-N_7$ ,  $N_8$ ,  $N_5$  a hét-, nyolc-, ötszögek száma,  
 $-N$  az ágak száma.

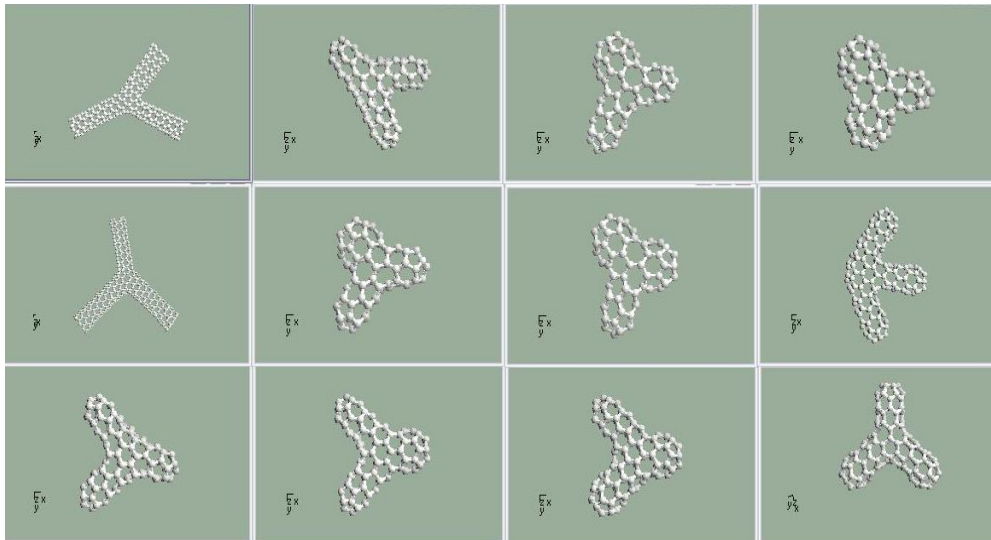
Y elágazásnál háromágú a szerkezet, azaz  $N=3$ .

Mivel nyitott végű nanocsövekről van szó, nincs ötszög, azaz  $N_5=0$ .

A dolgozatban szereplő elágazásokban nincs nyolcszög sem, azaz  $N_8=0$ . Az Euler-egyenlet szerint ekkor

$$N_7 = 6$$

A hétszög gyűrűk elhelyezkedése befolyásolja a tengelyszögeket, amelyeket a csatlakozó ágak között mérhetünk. Dolgozatomban számos elágazást modelleztem meg. Ezeknek felépítését és topológiáját vizsgáltam, melyekből szemléltetek néhány példát a 26. ábrán.



**26. ábra:** Különböző „Y” elágazásokra egy-egy példa

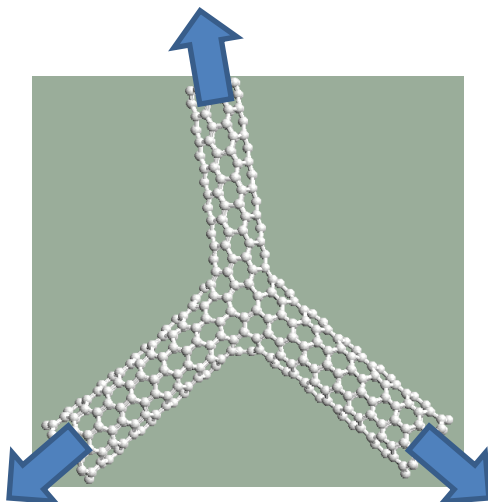
A modelleken jól látható az, hogy mennyi variációja lehet az Y elágazásoknak. A legszembevetőbb észrevétel az, hogy vannak a modellezett szerkezetek között szimmetrikus és aszimmetrikus elágazások. Ezek az elágazások más módon épülnek fel. A szerkezetükben máshol, és máshogy helyezkednek el a hétszög gyűrűk.

Az elágazásokat megvizsgáltam az általam létrehozott algoritmus segítségével, hogy megkeressem az egyes szerkezeteknek a gyenge keresztmetszetét.

## 4. EREDMÉNYEK

### 4.1. Szén nanocső elágazás vizsgálatai

Az első modell (27. ábra), melyet megvizsgáltam, egy nem azonos nanocsövekből álló, elágazás. Ezeket az elágazásokat aszimmetrikus elágazásoknak fogom nevezni. Az aszimmetrikus elágazásoknak a legfőbb jellemzője – ahogy már említettem – hogy nem azonos nanocsövekből állnak. A különbség lehet típusbeli és lehet átmérőbeli is. Az első modell, melyet vizsgáltam, két darab (8,0) kiralitású cikk-cakk típusú nanocsőből és egy darab (4,4) kiralitású karosszék típusú nanocsőből áll.

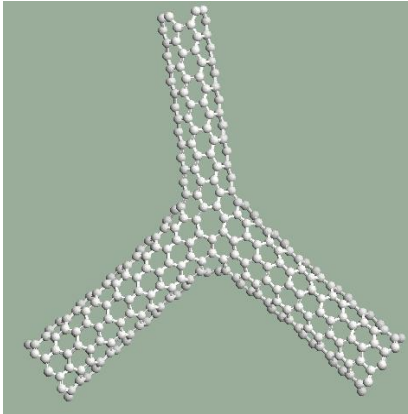


**27. ábra:** Aszimmetrikus elágazás (alsó két ág: 8;0 nanocső, felső ág: 4;4), jelölve a húzási irányokat

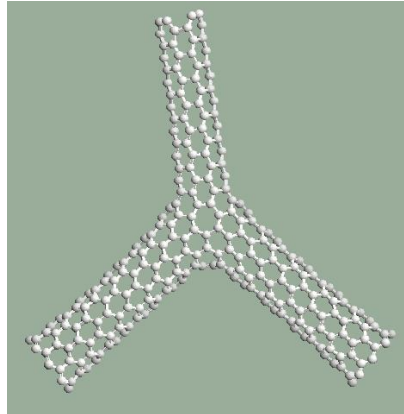
A szerkezet 466 atomból áll, melyek között a kezdeti állapotban a grafénnek megfelelően az atomok közötti távolság  $1,4 \text{ \AA}$ , a kötőszögek az egyenes csőszakaszokon azonosak. Mivel kiralitás szempontjából nem egyezők a nanocsövek, ezért átmérőbeli különbség is van a két típus között. A cikk-cakk típusú nanocső átmérője állandó és  $6,2 \text{ \AA}$ , a karosszék típusúé is homogén és  $5,4 \text{ \AA}$ . Az építőelemnek használt csövek hossza a végponttól – a befogott atomoktól – a csomópont kezdetéig mérve: a cikk-cakk típusúnál  $21,3 \text{ \AA}$ , a karosszék típusúnál  $18,16 \text{ \AA}$ . Az ágak által közrefogott szögek  $113,63^\circ$  az első,  $144,3^\circ$  a második, és  $102,07^\circ$  a harmadik szög.

A húzás-szimuláció során a rögzítés számára kiválasztott atomok az egyenes csövek végein lévő atomok lettek. Ezeknek az atomoknak a közvetítésével tudom a szerkezetet tengely irányban terhelni. Ezen

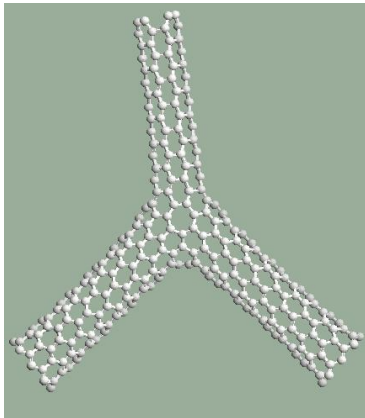
peremfeltételek alapján a szimulációt lefuttattam és az eredményt a 28. ábra csoporton szemléltetem.



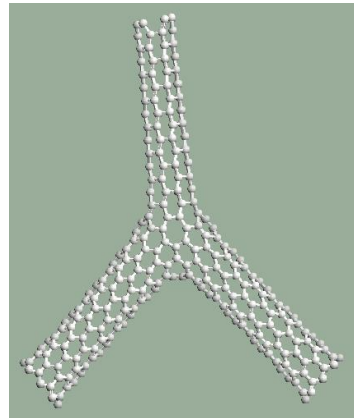
100. lépés (1 Å; megnyúlás: 3,43 %)



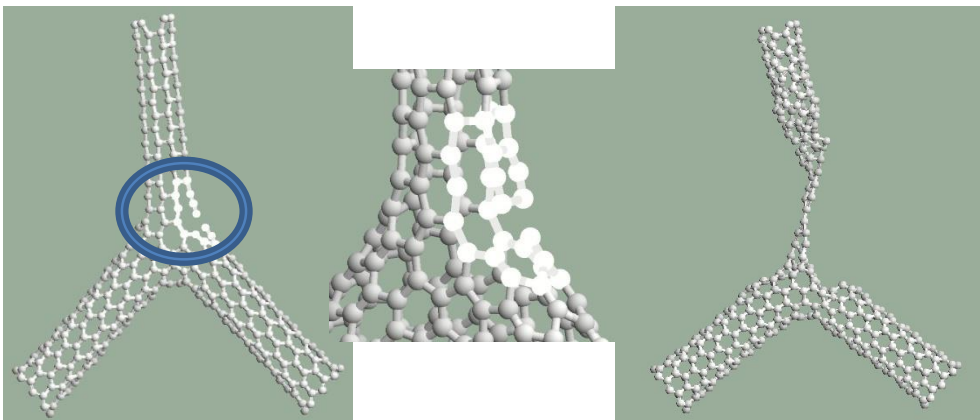
200. lépés (2 Å; megnyúlás: 9,36 %)



300. lépés (3 Å; megnyúlás: 14,7 %)



500. lépés (5 Å; megnyúlás: 27,25 %)



617. lépés szakadás (6,17 Å;  
megnyúlás 28,04 %)

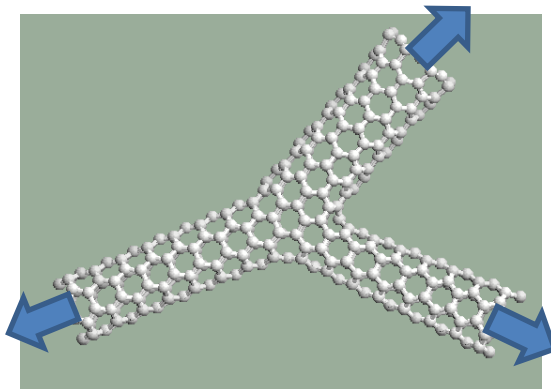
700. lépés (7 Å)

**28. ábra:** A húzás folyamata és az elszakadt szerkezet képe



A szimuláció eredményeképpen elmondhatom, hogy a szerkezet aszimmetrikus mivolta miatt a tengelyirányú terhelések még pluszban deformálták a szerkezetet. Az ábrarozaton nagyon jól látható, hogy nem maradtak meg az ágak közötti szögek és az ágak nyúlása sem volt egységes. A szögek a szakadás pillanatában a következőképpen alakultak:  $129,28^\circ$  (az eredeti  $113,63^\circ$  helyett),  $135,47^\circ$  (az eredeti  $144,3^\circ$  helyett) és  $95,25^\circ$  ( $102,07^\circ$  helyett). Az ágak hossza is a terhelés irányának megfelelően alakult, az eredő erők komponensei az egyik irányba nagyobb terheléshatást hoztak létre, így abban az irányban nagyobb volt a deformáció. A szakadás pillanatában az a két ág, amely a húzás kezdetekor megegyező volt most eltérő. Az ágak hossza a következőképpen alakult:  $22,37 \text{ \AA}$  ( $21,3 \text{ \AA}$  volt),  $22,85 \text{ \AA}$  ( $21,3 \text{ \AA}$  volt) és a karosszék típusú  $20,34 \text{ \AA}$  ( $18,16 \text{ \AA}$  volt).

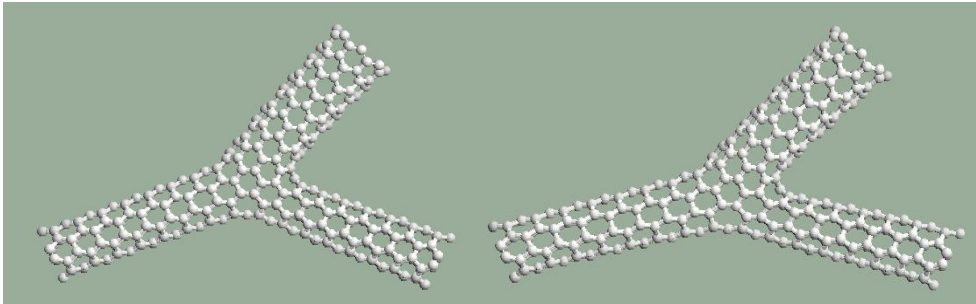
A következő példában szintén aszimmetrikus Y elágazás húzás-szimulációját végeztem. A második szerkezet ugyanazon nanocsövekből épül fel, csak nem két cikk-cakk és egy karosszék típusú, hanem pont fordítva, tehát két karosszék (4;4) és egy cikk-cakk típusú nanocsőből (8;0) (29. ábra).



**29. ábra:** Aszimmetrikus elágazás (alsó két ág: 4;4 nanocső, felső ág: 8;0), jelölve a húzási irányok

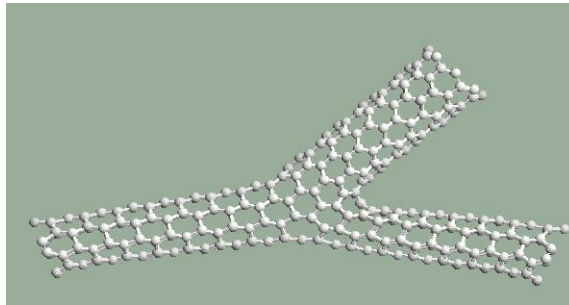
A szerkezet itt kevesebb atomból épül fel, szám szerint 460 db. A csövekről ugyanúgy elmondhatóak a kezdeti paraméterek, miszerint az egyenes ágakban a kötések azonosak, és a kötések hossza szintén  $1,4 \text{ \AA}$ . A cikk-cakk típusú nanocső hossza  $16,43 \text{ \AA}$ , a karosszék típusú nanocsövek hossza pedig  $19,14 \text{ \AA}$ . Eltérés az előző szerkezettől a hétszögek helyzete, és az ebből adódó tengelyszögek közti különbség. Jelen esetben a szögek  $152,57^\circ$ ,  $70,46^\circ$ , és  $136,97^\circ$ . Az előző modell futtatása során a szerkezet aszimmetrikussága miatt a modell a szimuláció végére nem tartotta meg a kezdeti paramétereit és nagyban deformálódott. Ezen a modellen az aszimmetria mértéke nagy. Az ágak kristályorientációja különböző, a hétszöges gyűrűk elhelyezkedése a csomópontban nem szimmetrikus. A

szimuláció végére a szerkezetnek sokkal nagyobb lesz a deformációja. A kezdeti modell és a végeredmény között nagyobb lesz a különbség. A szimulációról készült sorozatfelvételeket a 30. ábrán mutatom be.

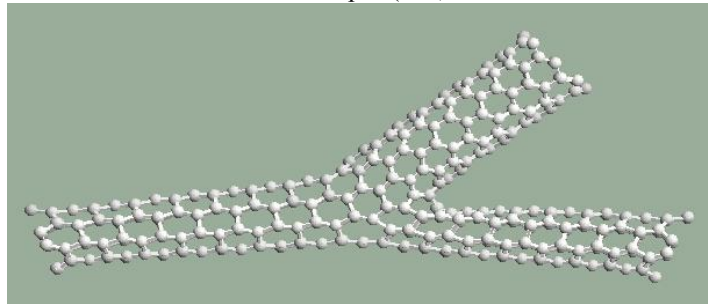


100. lépés (1 Å)

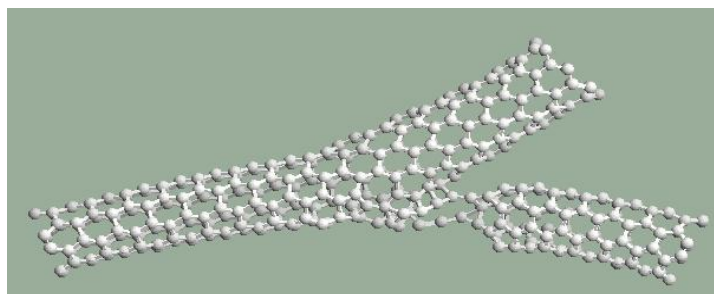
300. lépés (3 Å)



500. lépés (5 Å)



Szakadás előtti pillanat 675. lépés (6,75 Å)

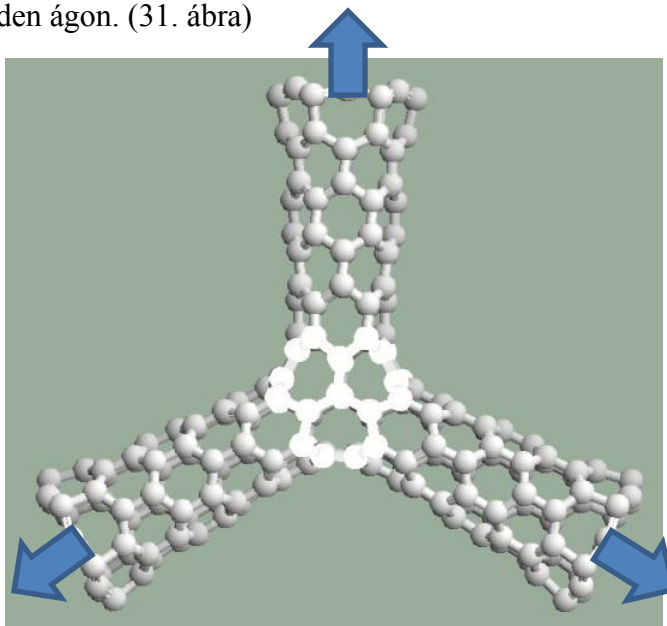


Szakadás utáni pillanat 676. lépés (6,76 Å)

**30. ábra:** Pillanatfelvételek a húzás-szimulációból

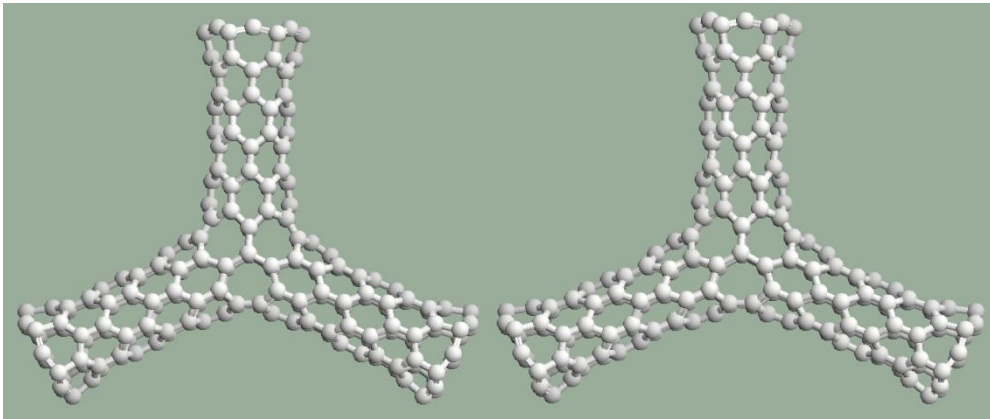
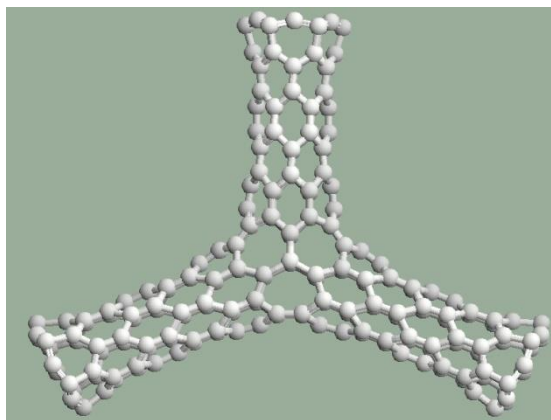
Ezen képsorozaton még szembetűnőbb az aszimmetria miatti deformáció a húzás során. Ebben az esetben az ágak deformációja még inkább torzítja a modellt, mivel a kezdeti szerkezeten a cikk-cakk típusú nanocső és a hozzá közelebb eső karosszék típusú nanocső által közrezárt szög már hegyesszög. A vízszintes erőkomponensek ebben az esetben dominálnak és a modellen a húzó terhelés a horizontális tengellyel párhuzamosan erőteljesebben érvényesül. A végeredményként kapott szerkezetem paraméterei a következők: az cikk-cakk típusú ág hossza 17,36 Å (16,43 Å volt), az egyik karosszék típusú alsó ág hossza 24,66 Å (19,14 Å volt) és a harmadik ág hossza – mely ugyanolyan hosszú volt, mint a másik ugyanolyan típusú ág – 23,49 Å (19,14 Å volt). A torzulás legjobban a szögek változásából látszik: 152,43° (152,57° volt), 40,7° (70,46° volt) és végül 166,58° (136,97° volt).

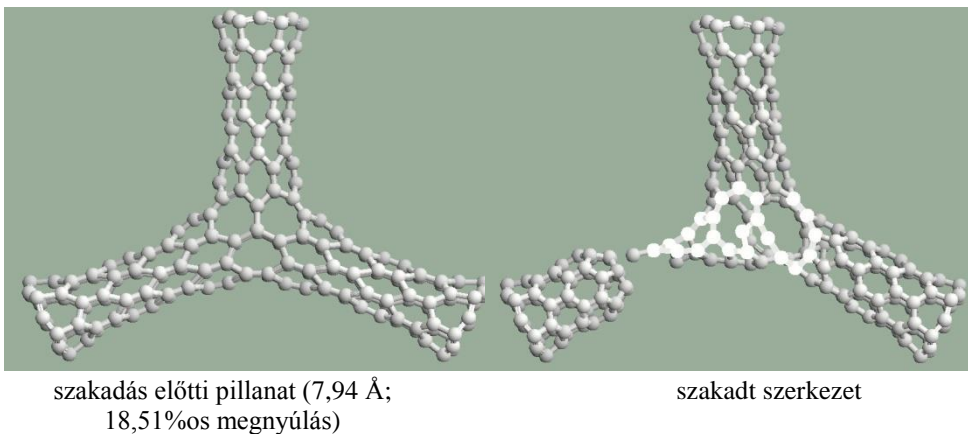
A harmadik modellt, melyet vizsgáltam, egy szimmetrikus szerkezet modelltje. Összehasonlítás végett analizáltam ezt a modellt, hogy megvizsgáljam a hétszög gyűrűk elhelyezkedésének hatását. Az eddigi modellekről, melyekről ebben a fejezetben beszéltem, elmondható, hogy a szerkezetükben elhelyezkedő hétszög gyűrűk nem szimmetrikusan helyezkedtek el. A következő modellben ezek a gyűrűk topológiailag azonosak minden ágon. (31. ábra)



**31. ábra:** A legkarcsúbb szimmetrikus Y elágazás (6;0) nanocsövekből, a húzás irányok jelölésével

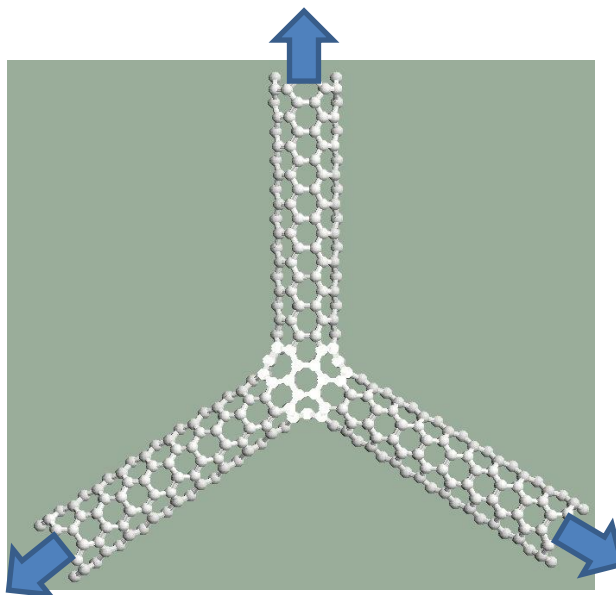
Ez a modell 218 darab szén atomból áll, melyek között itt is természetesen alaphelyzetben a kötések  $118,37^\circ$ -sak és a hosszuk  $1,4 \text{ \AA}$ . A modellezésnél használt nanocsövek cikk-cakk típusúak, a kiralitás-vektoruk (6,0). Az ágak hossza a befogástól a csomópont kezdetéig  $24,7 \text{ \AA}$ . Az ágak  $120^\circ$ -os szöget zárnak be. Erről a szerkezetről elmondható az ágak és a hétszögek elhelyezkedése miatt, hogy szimmetrikus. A lefuttatott szimuláció a 32. ábracsoporton látható. Az ábrákon lehet látni, hogy a nanocsövek átmérője elkezd csökkenni, a csomópontban a kötések meghosszabbodnak. A befogásnál az átmérő nem tud változni, nem tud a szerkezettel együtt relaxálódni, ezért a szimuláció végén a gyenge keresztmetszet a befogás mellett alakul ki.

200. lépés ( $2 \text{ \AA}$ ; 8%-os megnyúlás)400.lépés ( $4 \text{ \AA}$ ; 14%-os megnyúlás)600. lépés ( $5 \text{ \AA}$ ; 18%-os megnyúlás)



**32. ábra:** A szimmetrikus szerkezet húzásának folyamata

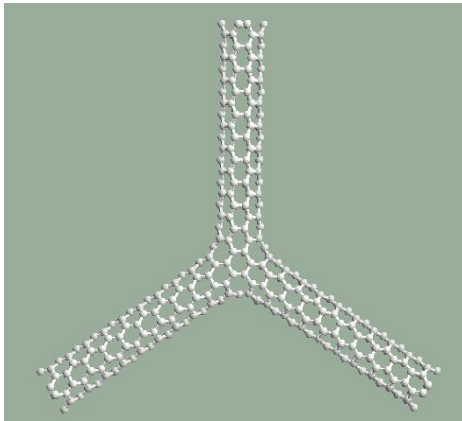
A következőkben ismét szimmetrikus Y elágazást vizsgáltam, ahol az ágak ellentétes kiralitásúak, mint az előző példában: karosszék típusú nanocsövek. A modellezett szerkezet a 33. ábrán látható.



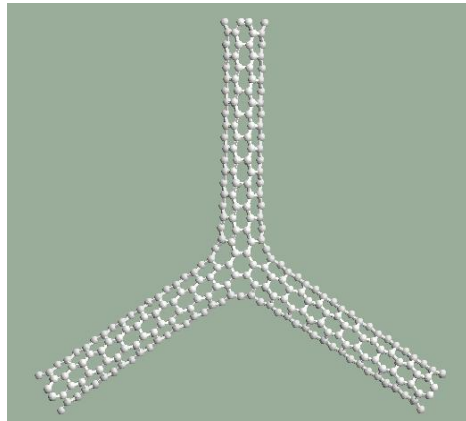
**33. ábra:** Karosszék típusú nanocsövből képzett Y elágazás

A szerkezeten látható, hogy a hétszög gyűrűk itt is a csomópontban helyezkednek el. Ebben az esetben (6,6) kiralitású nanocsöveket használtam a szerkezet kialakításához. Ez a modell is a karosszék típusú nanocsövből felépíthető legkarcsúbb csomópont. A szerkezetben az atomok közötti kötések szintén 1,4 Å és 118,37°-os szöget zárnak be. Mindegyik ága 24,08 Å

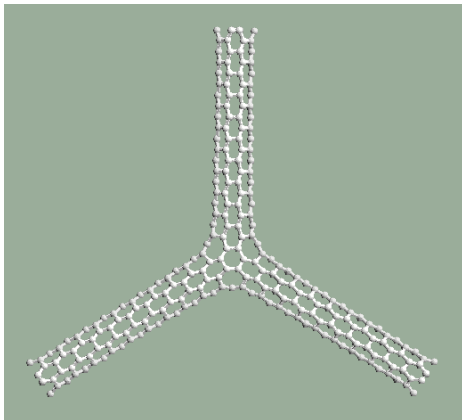
hosszú és  $120^\circ$ -os szöget zárnak be. A szimuláció során figyeltem a megnyúlást és a deformációt. A gyenge keresztmetszet a hétszög gyűrűk környezetében várható. A szimulációs folyamatot a 34. ábrán szemléltetem.



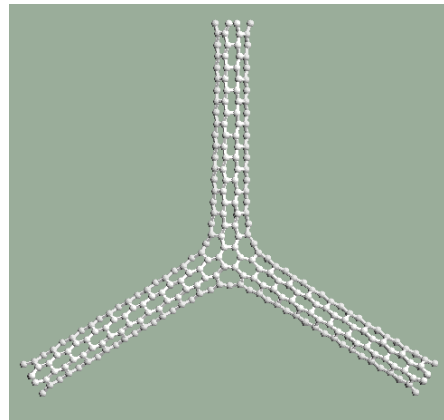
200. lépés(2 Å; megnyúlás 8 %)



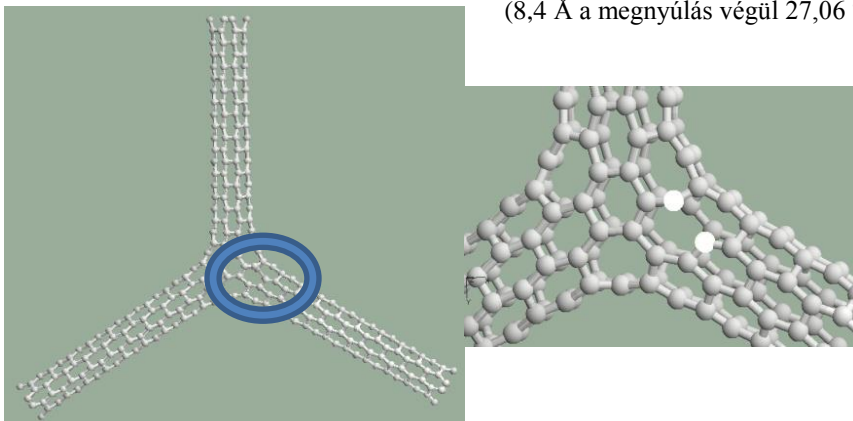
400. lépés (4 Å; megnyúlás 14,46 %)



600. lépés (6 Å; megnyúlás 20,14 %)



840. lépés; szakadás előtti pillanat (8,4 Å a megnyúlás végül 27,06 %)



841. lépés; szakadás előtti pillanat (8,41 Å a megnyúlás végül 27,08 %)

**34. ábra:** A karosszék típusú nanocsőből álló Y elágazás húzás-szimulációja

Miután az előzőekben említett szimulációkat befejeztem megállapítottam, hogy mechanikai igénybevétellel szembeni viselkedés szempontjából az Y elágazásokat két fő csoportba sorolható. Az egyik az aszimmetrikus csoport, melyek nem azonos nanocsövekből épülnek fel. Ezeknél a nanocső elágazásoknál a szerkezetben fellépő belső feszültségek, melyek a csőágak végén lévő atomcsoportok mozgatása révén jön létre, a csőágak nem azonos mértékben veszik fel. Az ágak elhelyezkedési szöge nagyban befolyásolja az adott ág terhelését. A szerkezet topológiája befolyásolja, hogy melyik ágon következik be a roncsolódás. A másik nagy csoport a szimmetrikus Y elágazások csoportja, melyeknél azonos a nanocsöveknek a fajtája, átmérője és hossza, melyekből felépülnek. Ennél a csoportnál a tengely irányú terhelés hatására az elágazás ágai azonos módon és ütemben deformálódnak mind a cikk-cakk típusú, mind a karosszék típusú nanocsövek esetén.

A másik észrevétel, amit megállapíthattam, hogy az aszimmetrikus elágazásoknál teherviselés szempontjából, meg tudom mondani, hogy melyik a gyengébb nanocső. Vizsgálataim során az aszimmetrikus szén nanocső elágazásokat két típusú nanocsőből építettem meg. Az egyik volt a karosszék típusú (az én példamban (8;8) kiralitású nanocső), a másik a cikk-cakk típusú (jelen esetben (8;0) kiralitású nanocső). Mind a két példában a szerkezetem nem a csomópontban roncsolódott, hanem valamelyik nanocső szakaszon. Ez a nanocső típusát tekintve mindig a karosszék típusú nanocső volt. Ezen eredmények következtében a szén nano szerkezetekben a cikk-cakk típusú nanocső nagyobb deformációra képes roncsolódás előtt, mint a karosszék típusú.

Négyféle Y elágazást vizsgáltam. A négy szerkezet közül három esetében (aszimmetrikus elágazások és a karosszék típusú szimmetrikus elágazás) a tönkremenetel helye a csomópont közelében, valamelyik csőszakaszon, a hétszöges gyűrűk mellett adódott. A cikkcakk típusú szimmetrikus Y elágazás esetében a tönkremenetel helye a befogás mellett, az egyenes csőszakaszon adódott.

#### **4.2. Szén nanocső elágazások gyenge pontjának módosítása**

Az előzőekben vizsgált nanocső szerkezetek analizálása során azt a megállapítást tettem, hogy a legtöbb esetben szerkezetek csomópontja mellett van a modellem gyenge keresztmetszete. Ezeket a gyenge szerkezeteket a hétszög gyűrűk határozzák meg. Minden esetben a hétszög gyűrűk mellett következett be a roncsolódás.

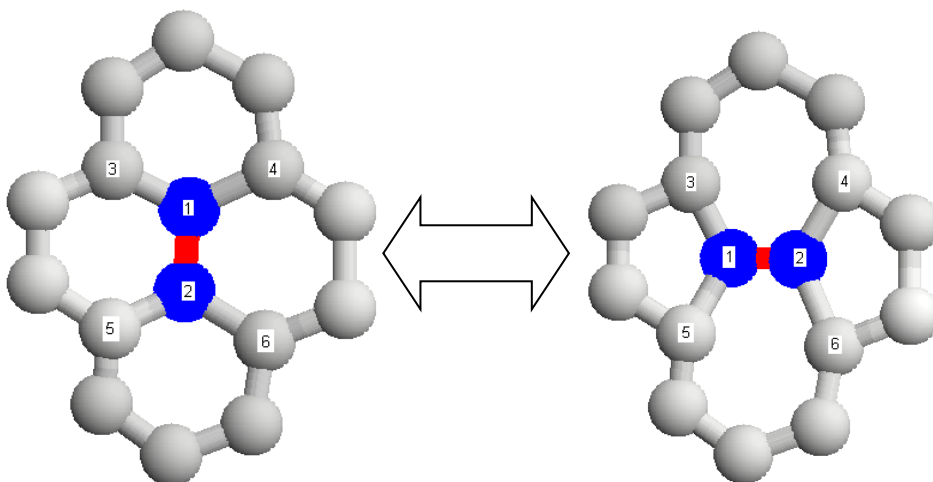
A következőkben bemutatok két olyan lehetőséget, melyekkel ezek a hétszög gyűrűk „elmozgathatók” az eredeti helyükről. Azt valószínűsítem, hogy ezáltal a gyenge keresztmetszet megváltozik. Ezeket a módszereket a



szimmetrikus nanocső elágazásokon mutatom be, mivel ezeknél a szerkezeteknél a célom a csomópont megerősítése.

#### 4.2.1. Stone-Walles transzformáció

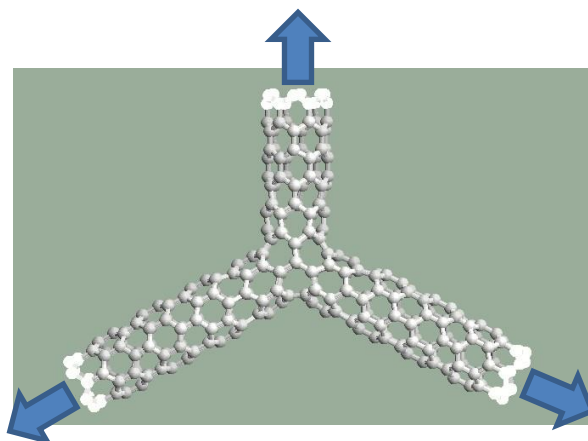
Az első módszer egy szerkezeti átalakítás, mellyel a modell csomópontját beavatkozás történik. Ez az apró beavatkozás egy kémiai kötésnek az átbillentése, az ún. Stone-Walles transzformációmelyet a 35. ábán szemléltetem (Stone 1986).



35. ábra: Stone-Walles transzformáció

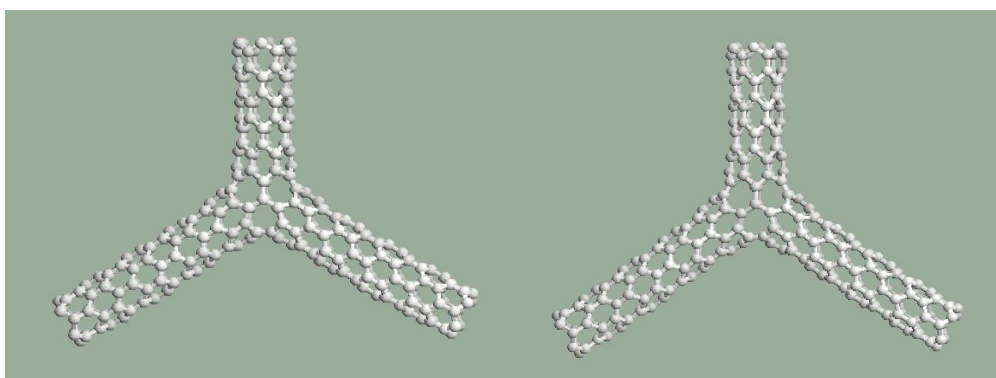
A transzformáció lényege, hogy felbontok egyes kötések és ezek helyett újakat hozok létre. Azzal, hogy új kötések hozok létre, más szén gyűrűk jönnek létre. A kezdeti 4 darab 6-szög gyűrűből a Stone-Walles transzformáció segítségével létrejön két 5-szög gyűrű, és két darab hétszög gyűrű. Ez a módszer természetesen visszafelé is működik. Ezen módszer segítségével, ha egy olyan szerkezetet veszek alapul, melyben található hétszög gyűrű, akkor Stone-Walles transzformációkkal, azaz kötés átbillentésekkel ezt a hétszög gyűrűt mozgatni tudom a felületen vagy hálózaton. Természetesen nem csak egy hétszög gyűrűt lehet így mozgatni, hanem többet is. A kiválasztott modellem egy szimmetrikus Y elágazás. A szerkezet 290 atomból áll. A szénatomok közti kötés itt is, mint eddig 1,4 Å és a kötésszögek 118,37°-ak. Az nanocső szakaszok hossza két ágon ugyanolyan hosszúak, 18,62 Å. A harmadik ág 12,46 Å. Az ágak által közrezárt szögek mindenhol 120°-ak. A kezdeti szerkezet felépítését a 36. ábrán szemléltetem.





**36. ábra:** Az alap Y elágazás, itt is a kiválasztott atomok a nanocső szakaszok végén helyezkednek el, és ezeket mozgatom tengely irányba (jelölve)

A szerkezetemen, a szimuláció során a szögek változását és az egyes ágak deformációját ellenőrzöm. A húzás-szimuláció során három atomcsoportot választok ki jelen esetben, ahhoz hogy a húzást végrehajtsam. Az előzőekben bemutatott modellt változtattam, hogy a későbbiekben egy hálózat építőelemeként tudjam felhasználni. Ezért a szimulációt újra lefuttatom, és természetesen ugyanazt az eredményt várom, mint ahogy az előzőekben bemutatam. A szimuláció folyamata a 37-es ábrán látható.



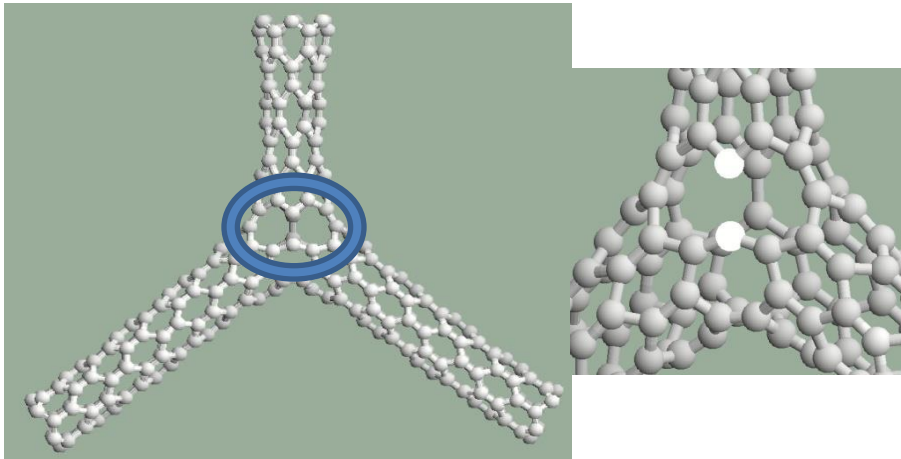
200. lépés (2 Å; megnyúlás 9,05 %)

400. lépés (4 Å; megnyúlás 11,65 %)



600. lépés (6 Å; megnyúlás 15,61 %)

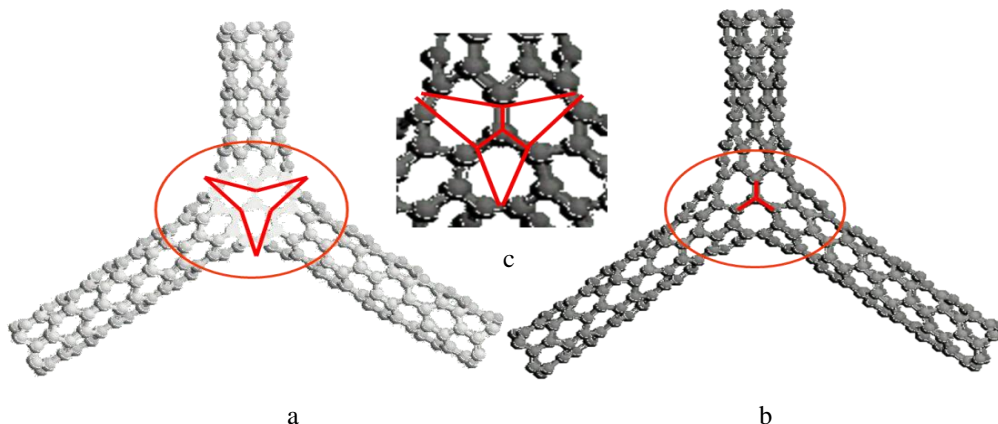
774. lépés (7,74 Å; szakadás előtti pillanat)  
(megnyúlás 16,69 %)



775. lépés (7,75 Å; szakadás utáni pillanat; megnyúlás 16,71 %)

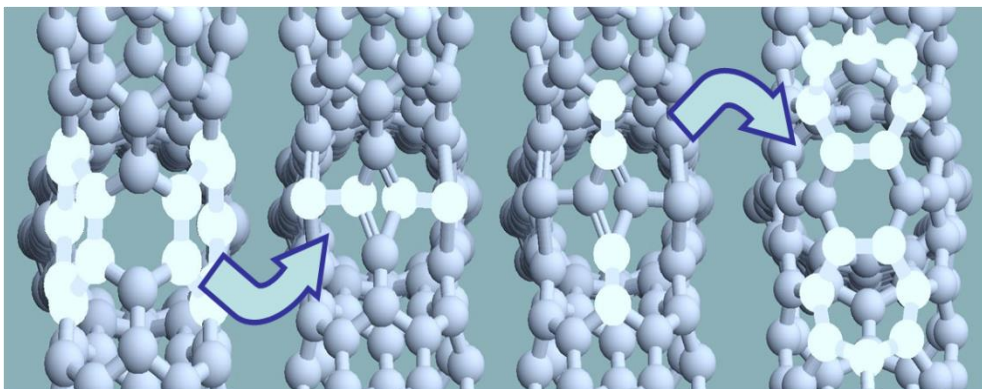
**37. ábra:** Az alap Y elágazás húzás-szimulációjának folyamata

Miután ezt a szimulációt elvégeztem, ugyanazokat az eredményeket kaptam, mint a 3.3. fejezetben bemutatott szimuláció során, amit a szimmetria vizsgálat során készítettem. Az eredményemet a 38. ábrán foglaltam össze. Az ábrán látható hogy a hétszög gyűrűk elhelyezkedése, mely arra a keresztmetszetre utal, ahol a kritikus kötэшossz leghamarabb fog kialakulni (1,7 Å).



**38. ábra a:** az előre várt gyenge keresztmetszet; **b:** szimuláció után a gyenge keresztmetszet; **c:** az előre várt és a szimuláció után kapott eredmények egybeesnek

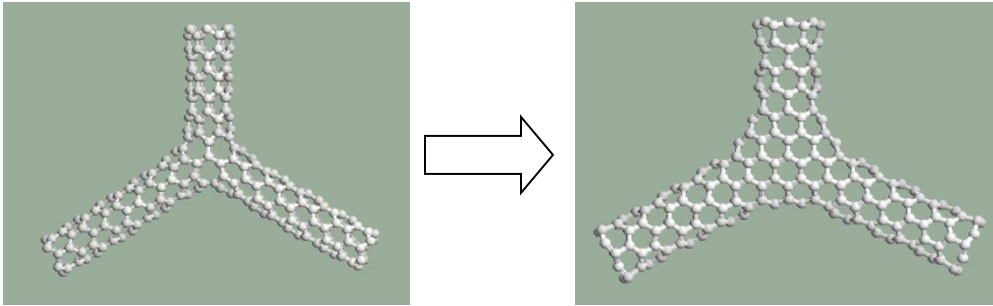
Ezt a modellt fogom a topológiai transzformáció segítségével szerkezetileg átalakítani. A csomópontban elhelyezkedő hétszög gyűrűket a csomópont határára az ágak csatlakozási pontjához fogom „mozgatni”. Ezt a folyamatot a 39. ábrán szemléltetem.



**39. ábra:** A csomópontban elhelyezkedő hétszög gyűrűk átmozgatása a szárakra

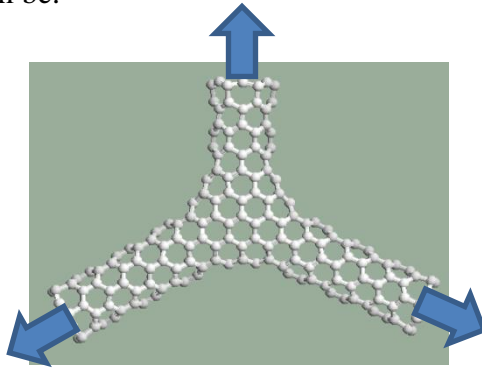
A folyamatábra első részén látható kijelölve, hogy melyek azok a hétszög gyűrűk, melyeket el kell távolítanom a csomópontból. A második ábrarészleten két kötés átbillentés látható. Az első képen látható függőleges kötésből vízszintes kötést hoztam létre. Majd másik két kötést választottam ki, hogy a szerkezet csak annyit változzon, hogy a hétszög gyűrűk máshol legyenek. A harmadik képrészleten látható az a két kötés, amelyeket szintén függőleges állapotból át billentek vízszintes állapotba. A végeredmény a negyedik képrészleten látható, miszerint a hétszög gyűrűket  $90^\circ$ -kal

elforgattam és az elágazás csomópontjának határára mozgattam. A transzformáció előtti és utáni modellt a 40. ábrán mutatom be.

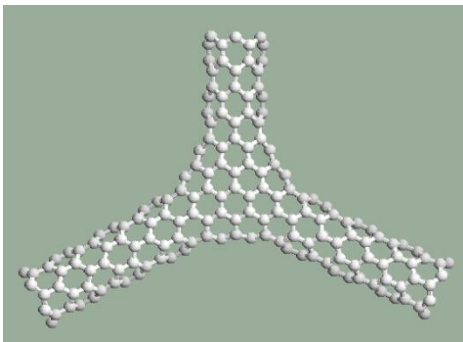


**40. ábra:** Az eredeti és a transzformált modell

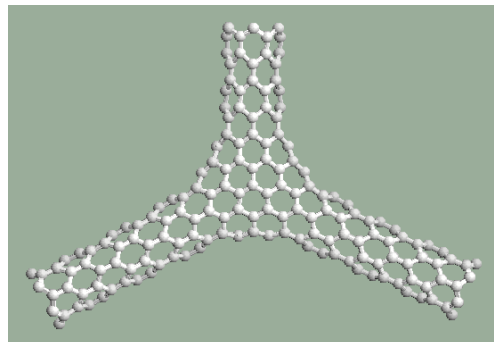
Miután elvégeztem ezeket a transzformációkat, a modellem csomópontját több kötés alkotja, mely kötések erősítik magát a szerkezetet. A módosított szerkezetű modellem húzás-szimulációjának folyamatát a 41. ábra csoporton mutatom be.



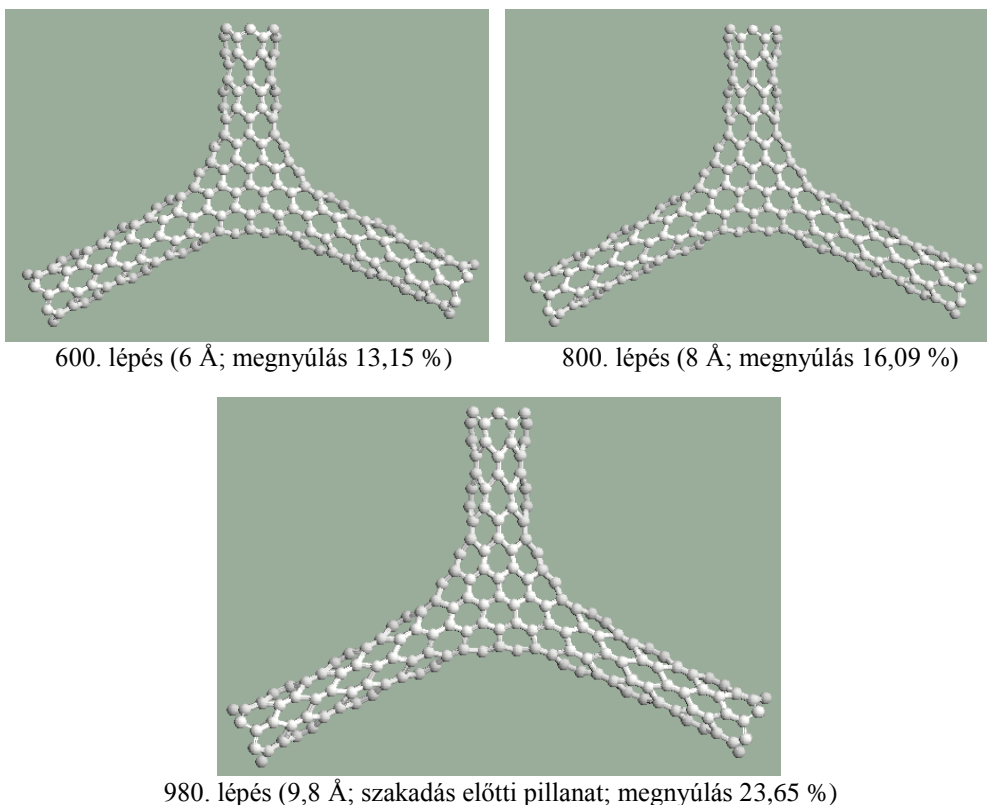
Terhelési irányok ebben az esetben is tengelyirányúak



200. lépés (2 Å; megnyúlás 5,66 %)



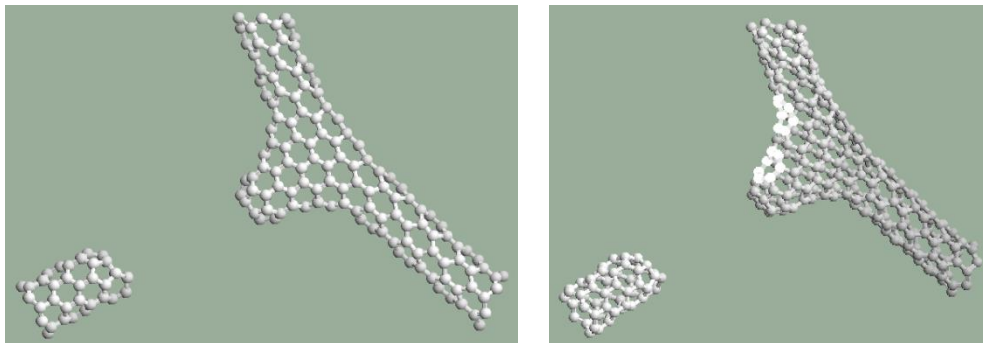
400. lépés (4 Å; megnyúlás 9,66 %)



**41. ábra** A transzformált elágazás húzás-szimulációja

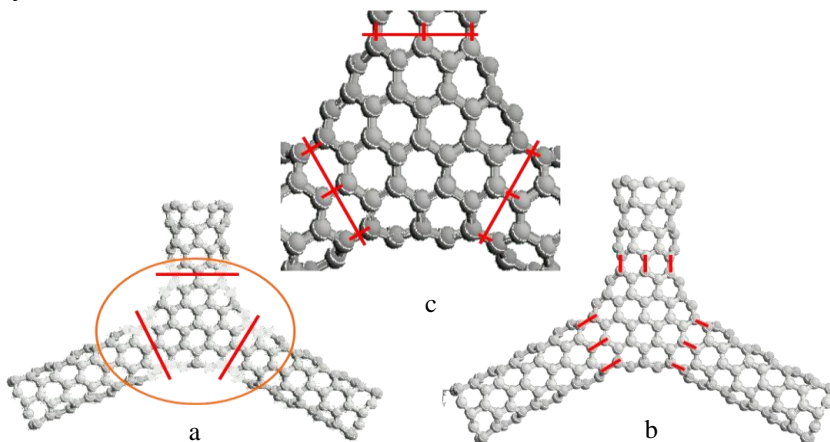
A szimuláció első szakaszáról elmondhatom, hogy a szerkezet arányosan deformálódott. Az ágak arányosan nyúltak meg, a kötések egyenletesen hosszabbodtak. A szerkezet megnyúlásából, illetve a lépések számából – ami a szerkezetre ható erővel arányos – látható hogy, az alapmodell mind megnyúlásban, mind teherbírásban elmarad a transzformált szerkezettől.

A 42. ábrán bemutatom a húzás-szimuláció végét, itt a nanocső szerkezetet roncsolódásig terheltem. Jól látható, hogy a csomópontból eltolt hétszög gyűrűk mellett keletkezett a gyenge keresztmetszet.



**42. ábra** Elszakadt szerkezet; és a megjelölt hétszög gyűrűk

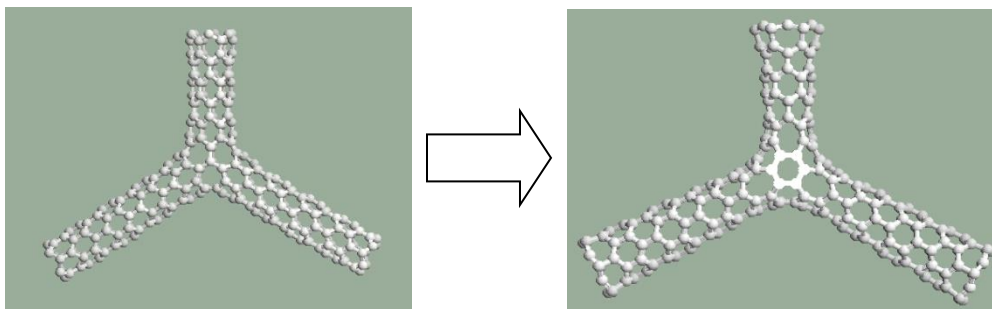
A következő ábra (43. ábra) mutatja be, hogy a hétszög gyűrűk a csomópontból elkerültek az ágak végeihez, vagyis a csomópont határára. Piros színnel jelöltem a húzás-szimuláció előtt feltételezett gyenge keresztmetszetet, majd a kapott eredményt, végül összevettem a gyenge pont helyét.



**43. ábra a:** Az elmozgatott hétszög gyűrűk és a feltételezett gyenge keresztmetszet; **b:** az eredmény, mely megmutatja a kritikus kötéseket; **c:** a feltételezés és az eredmény együtt

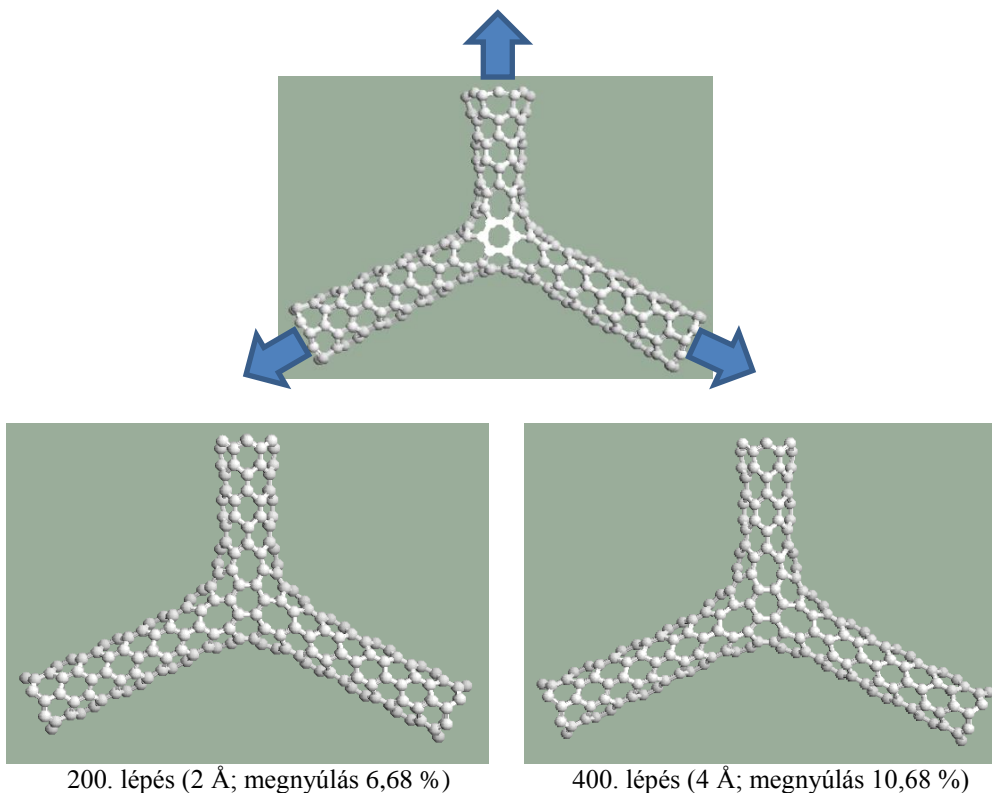
#### 4.2.2. Atombevétel

A másik módszer, amivel a csomópontokban lévő kötések számát növeltem - ezáltal a teherviselő képességét javítottam – az atombevétel. Egyszerűen a szerkezet csomópontjába beilleszték négy atomot, amik kötések alkotnak a már ott lévő atomokkal. Ennek a módszernek a segítségével is a hétszög gyűrűk helyzetét megváltoztatom. az átalakított modell és az átalakítás helye a 44. ábrán látható.

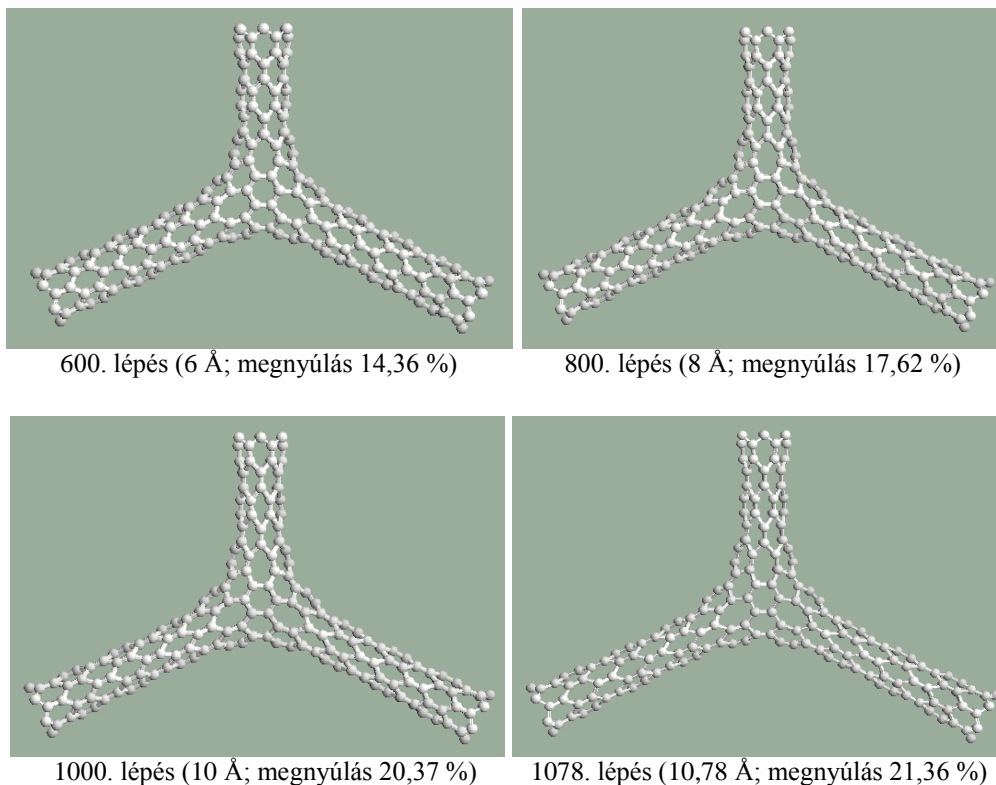


**44. ábra** Az atombevitellel módosított elágazás

A szerkezetben az atomok szintén a graféntól örökölt pozícióban vannak,  $1,4 \text{ \AA}$ -re és  $118,37^\circ$ -os kötésszögben. Jelen esetben az ágak hossza két esetben egyenlő (alsó két ág),  $17,75 \text{ \AA}$ . A harmadik ág, most függőlegesen helyezkedik el,  $11,44 \text{ \AA}$ . Az ágak  $120^\circ$ -os szöget zárnak be egymással. A húzás folyamatát a 45. ábracsoporton mutatom. A beillesztett atomok segítségével a hétszög gyűrűket elmozgattam a csomópontból. Az előző futtatásokból arra a következtetésre várok, hogy a gyenge keresztmetszet ebben az esetben is a hétszög gyűrűk környezetében lesz.

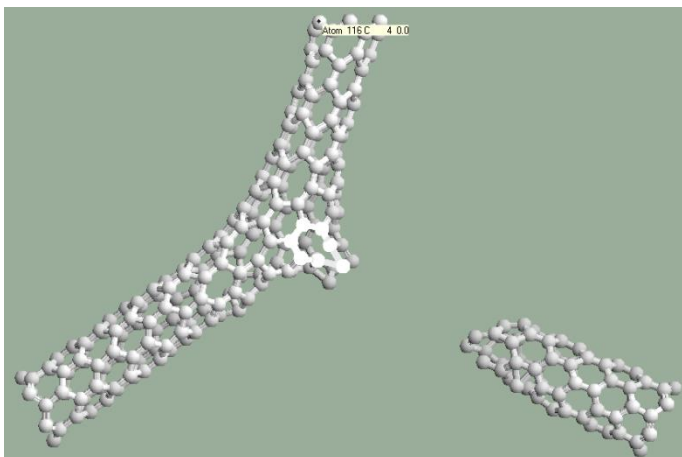






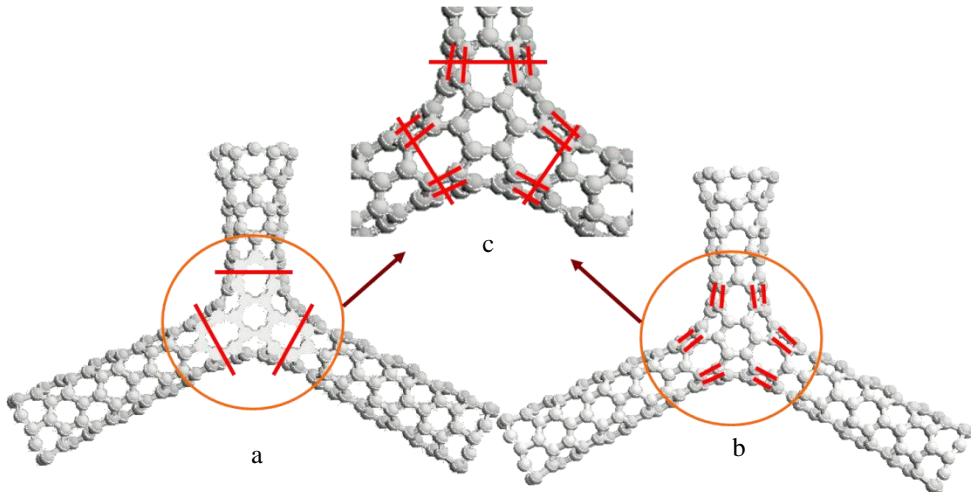
**45. ábra** Atombevitellel módosított Y elágazás húzás-szimulációja

A futtatásom első szakasza során a szerkezet arányosan változott. A szerkezet megnyúlásából megállapítottam, hogy ezzel a módszerrel is erősíteni tudtam a csomóponton. Az elszakadt szerkezetet a 46. ábrán mutatom be. Az ábrán fehérrel jelöltem a szerkezetben lévő hétszög gyűrűt.



**46. ábra** Az elszakadt modell és a jelölt hétszög gyűrű





**47. ábra a:** Az elmozgatott hétszög gyűrűk és a feltételezett gyenge keresztmetszet; **b:** az eredmény, mely megmutatja a kritikus kötéseket; **c:** a várható és az eredményül kapott keresztmetszetek együtt

A futtatási eredményemet ebben az esetben is egy összefoglaló ábrán mutatom be (47. ábra). Az ábrán az előre megbecsült gyenge keresztmetszetek és a szimuláció után a tényleges roncsolódási pontok találhatóak kiemelve. Ez a hely ebben az esetben is egybeesik, azaz a várható helyen történt a roncsolódás.

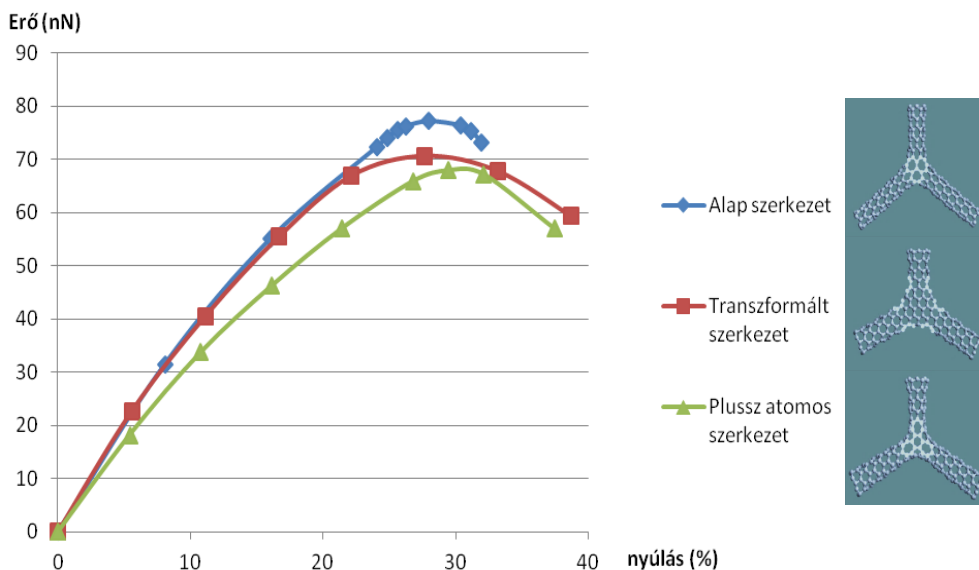
#### 4.2.2. Szerkezetek szakítószilárdsága

Ahhoz hogy a szerkezetek szakítószilárdságát meg tudjam határozni és össze tudjam vetni a szakirodalomban található eredményekkel, tisztáznom kell azokat a paramétereket melyek segítségével a számolásaimat pontosan el tudom végezni.

Az eddigi vizsgálataim során az, hogy milyen paraméterű polinomokkal helyettesíttem a Brenner formulában a levágó függvényeket, az általam bemutatott ellenőrzések alapján elmondható, hogy nem befolyásolta a gyenge pont keresésére alkalmazott algoritmusomat. A szakító szilárdsági számításoknál viszont a potenciál függvény lefutása nem mindegy, sőt az ebből kapott erő függvények lefutása még jobban szembetűnő.

Hogy a számításaimnak pontosságát ellenőrizzem a szakirodalomban található kísérleti eredményekhez nagyságrendileg ugyanolyan értékeket kell kapnom. Ezt a legpontosabban az  $R_t=1,9$   $f_t=0,2$  paraméter párral létrehozott levágó függvénnyel értem el, melyet a 3.2. fejezetben már bemutatattam.

Miután a vizsgálat alapjául szolgáló szerkezeteket analizáltam és a kapott eredményeket kiértékeltem, megrajoltam a szakítódigramját mindhárom szerkezetnek (48. ábra).



48. ábra: A három szakítódigram

A kapott eredményeken kívül mind a három szerkezetnek kiszámoltam a szakító szilárdságát (Belytschko, 2002).

$$\sigma_{\max} = \frac{F_{\max}}{\pi Dt} \cdot 4$$

ahol:  $F_{\max}$  a maximális erő, melyet a diagramból is le lehet olvasni.  
 $D$  a nanocső átmérője  
 $t$  grafén síkok közötti távolság

Mind a három esetben a nanocső ugyanolyan típusú volt. Ez azt jelenti, hogy a nanocső átmérője ugyanakkora 4,701 Å. Mivel mind a három esetben az egyenes nanocső szakaszon történt a roncsolódás ezért mind a három szakítószilárdságnál ezzel az értékkel kell számolni.  $t$  a grafétsíkok közötti távolság, ezzel egy csőkeresztmetszetet számolunk,  $t=3,4$  Å (Angström) =  $3,4 \times 10^{-10}$  m :

Az **alap esetben** a nanocső szerkezet szakítószilárdsága:

$$\sigma_{\max} = \frac{F_{\max}}{\pi Dt} \cdot 4 = \frac{77,1939 \cdot 10^{-9} \cdot 4}{\pi \cdot 4,701 \cdot 10^{-10} \cdot 3,4 \cdot 10^{-10}} = 153,73 \text{ GPa}$$

A **transzformált esetben** a szerkezet szakítószilárdsága:

$$\sigma_{\max} = \frac{F_{\max}}{\pi Dt} \cdot 4 = \frac{70,7001 \cdot 10^{-9} \cdot 4}{\pi \cdot 4,701 \cdot 10^{-10} \cdot 3,4 \cdot 10^{-10}} = 140,80 \text{ GPa}$$

A **plussz atommal módosított esetben** a szerkezet szakítószilárdsága:

$$\sigma_{\max} = \frac{F_{\max}}{\pi Dt} \cdot 4 = \frac{68,0040 \cdot 10^{-9} \cdot 4}{\pi \cdot 4,701 \cdot 10^{-10} \cdot 3,4 \cdot 10^{-10}} = 135,43 \text{ GPa}$$

A kapott eredményeket összevetve a szakirodalomban összegyűjtött eredményekkel, megállapíthatom, hogy ezek az eredmények egy nagyságrendbe esnek a kísérleti tapasztalatokkal és a legpontosabb számításokkal kapott végeredményekkel, melyek az általam ismertett 2. táblázatban megtalálhatóak (2.2.2. fejezet). A kísérleti eredményből kapott szakítószilárdság 150 GPa (Demczyk 2002).

### 4.3. Szén nanocső szerkezetek rugalmassága

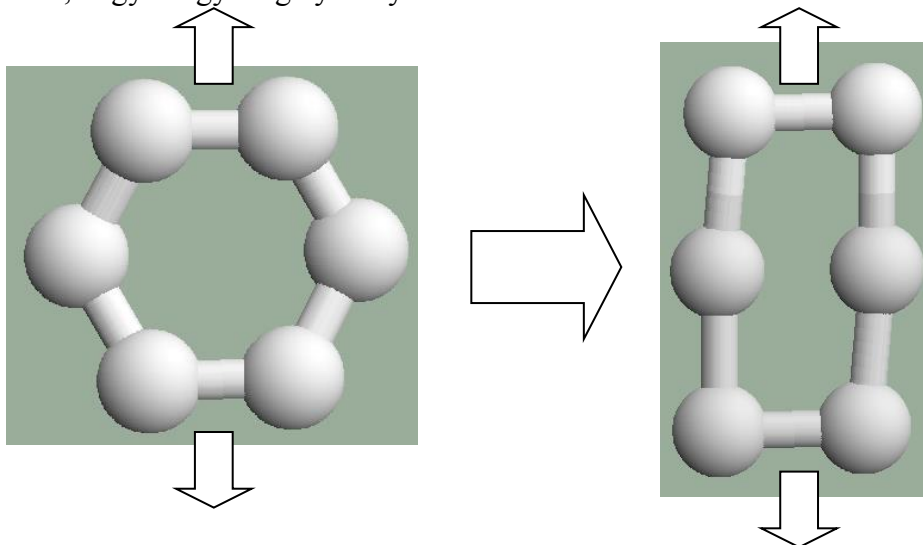
Szakirodalmi kutatásaim során találkoztam sok kutató által említett nanocsővek rugalmasságával. Ebben a fejezetben bemutatom, hogy ez a rugalmasság hogyan épül fel és milyen szerkezeti változások mennek végbe a különböző nanocsővekből felépült szerkezetekben, ha terhelem és utána a terhelést megszüntetem, és a szerkezet visszanyeri eredeti állapotát.

A rugalmasság a nanocső szerkezeteknél megfigyeléseim szerint két részből tevődik össze. Az egyik a kötési szögek deformációja. Ez azt jelenti, hogy az eredeti kötések  $118,37^\circ$ -os szögben helyezkednek el. Tengely irányú terhelés hatására ezek a szögek megváltoznak és az erőhatás irányába próbálnak befordulni. Ez alatt a szerkezet torzul, oly mértékben hogy a kezdeti átmérő lecsökken, és természetesen a szerkezet hossza növekedik.

A másik rugalmassági összetevő a kötések hosszváltozása. Az potenciál függvény lefutásából látjuk, hogy a kötéshosszak változása nem lineárisan követi az erő hatását. És az is megállapítható hogy a kezdeti állapotban – nyugalmi helyzetben – lévő atompárok törekednek ezen állapot fenntartására. Ebben az állapotban  $1,4 \text{ \AA}$  a kötéshossz. Dolgozatomban kéttípusú nanocső szakasz rugalmasságát vizsgáltam. Az egyik cikkcakk a másik karosszék felépítésű nanocső.

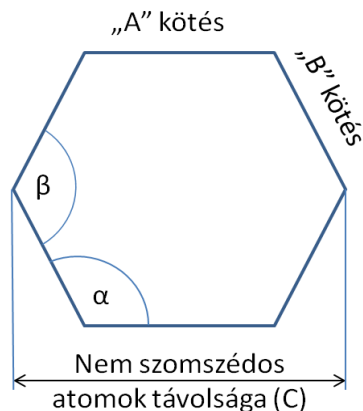
#### 4.3.1. Karosszék típusú nanocső rugalmassága

A karosszék típusnál a hatszög gyűrű deformációja látható a 49. ábrán, hogyha egy tengely irányú erővel terhelem a nanocsövet.



49. ábra A karosszék típusú nanocsőnél a hatszög deformációja erőhatásra

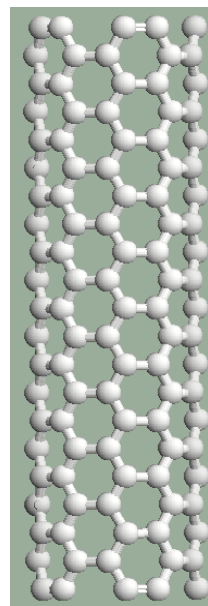
Az ábrán jó látható hogy a kötésszögek mekkorát változtak. Négy kötés csaknem teljesen befordult a terhelés irányába, a másik két kötést - mivel merőleges a terhelés irányára – nem érte olyan nagymértékű deformáció. Ezen a két kötésen is vannak változások, de azok csak a kötéshosszak növekedésében látszanak. Ezek az átmérő csökkenése miatt változnak. Az átmérő csökkenésekor az atomok szintén elkezdnek egymáshoz közeledni. Ebben az esetben a kötésekkel össze nem kapcsolódott atomok is hatással vannak egymásra és ezek a párok is az energiaminimumra törekedve taszító tatást gyakorolnak egymásra.



50. ábra: A vizsgált paraméterek a hatszögön

Megvizsgáltam egy karosszék típusú nanocső deformációjának lefutását. A 6-szög gyűrűk alakváltozását a következő ábrán rögzített paraméterekkel írtam le (50. ábra).

A 6-szög gyűrűkön két jellegzetes szöget vizsgáltam („ $\alpha$ ” és „ $\beta$ ” típusú szögek), a többi szög e két szög valamelyikéhez hasonló. A „ $\beta$ ” típusú szög növekedni fog, ugyanúgy, mint a vele szemközti szög. A többi csökkenni fog úgy, mint az „ $\alpha$ ” típusú szög. Megfigyeltem a kötések hosszváltozását is. Két elhelyezkedésükben eltérő jellegzetes kötés van a szerkezetben a jelöltek szerint, amiknek a változását vizsgáltam. A jelölt kötések közül az egyiknek a deformációja kisebb lesz, a fent említettek miatt. A másik kötésnek jóval nagyobb mértékben kell változnia, mivel a terhelés irányával ugyanakkora szöget zárnak be, tehát a terhelés irányára eső erővetület a két kötésnél egyenlő. És végül a nem szomszédos atomok közti távolságot is rögzítettem. Ez azért fontos, mert a legjobban ezzel a paraméterrel tudom meghatározni a gyűrű deformációját. Ezen paraméter változása a legnagyobb. A futtatási eredményeimet a 3. táblázatba foglaltam, mely tartalmazza még az egész szerkezet hosszváltozását valamint az nanocső átmérőjét két irányból mérve, és a lépések számát, melyek megfelelnek 0,01 Å-nek. Végül ábrázolom a kapott eredményeket diagramokon is. (52-56. ábra).

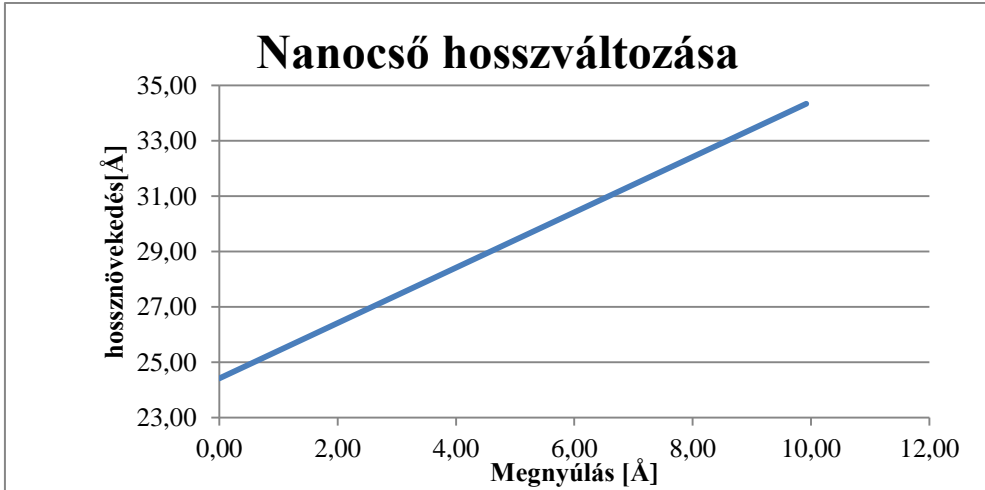


51. ábra  
Karosszék típusú nanocső a vizsgálatához

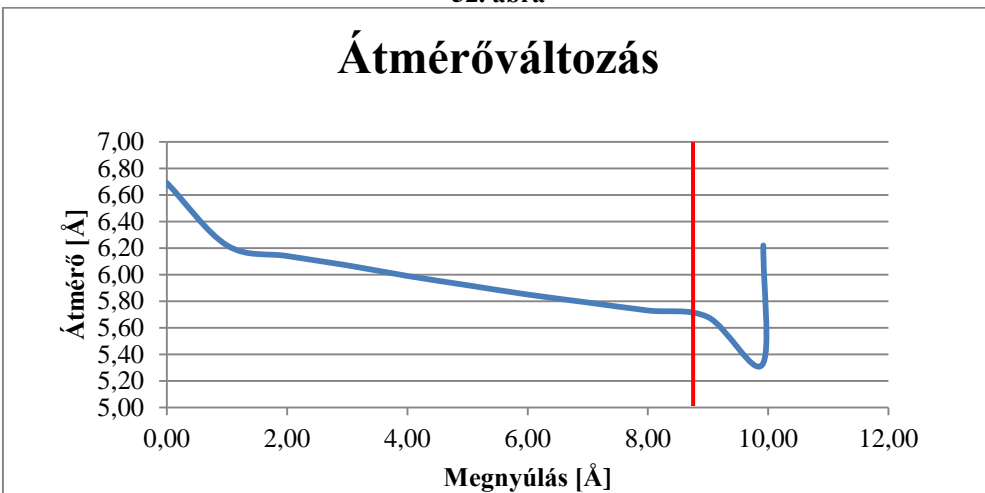
A vizsgált szerkezetem az 51. ábrán látható, mely egy karosszék típusú (5;5) nanocső, és a hossza 24,42 Å.

3. táblázat A karosszék típusú nanocső húzása során bekövetkező deformáció változások

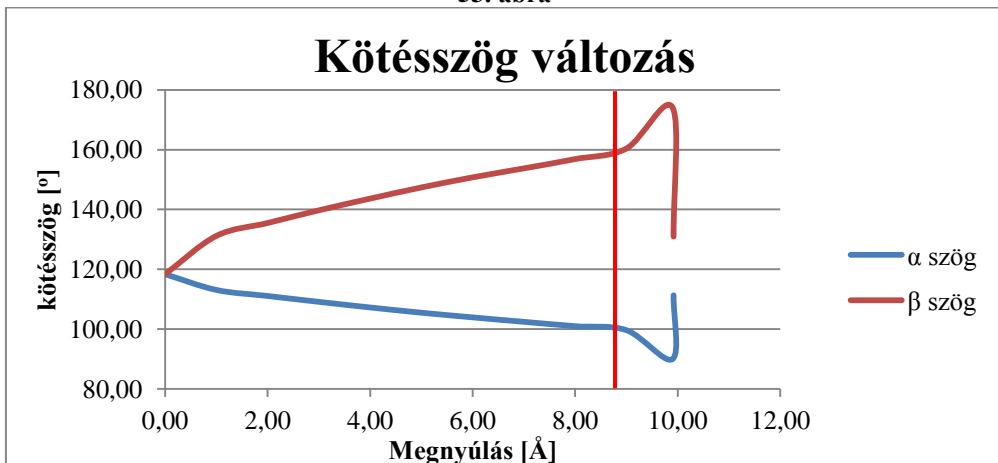
Megnyúlás (Angström)	Nanocső teljes hossz	Nanocső átmérő	"A" kötés	"B" kötés	$\alpha$ szög	$\beta$ szög	Nem szomszédos atomok távolsága (C)
<b>0,00</b>	24,42	6,69	1,40	1,40	118,37	118,37	2,74
<b>1,00</b>	25,42	6,22	1,40	1,40	113,11	131,17	2,47
<b>2,00</b>	26,42	6,14	1,40	1,43	111,09	135,49	2,41
<b>3,00</b>	27,42	6,07	1,40	1,47	109,13	139,73	2,35
<b>4,00</b>	28,42	5,99	1,41	1,50	107,25	143,65	2,30
<b>5,00</b>	29,42	5,92	1,43	1,54	105,50	147,38	2,24
<b>6,00</b>	30,42	5,85	1,44	1,59	103,94	150,75	2,19
<b>7,00</b>	31,42	5,79	1,45	1,63	102,45	153,76	2,14
<b>8,00</b>	32,42	5,73	1,46	1,67	100,99	156,86	2,09
<b>9,00</b>	33,42	5,68	1,52	1,70	99,66	160,39	2,03
<b>9,90</b>	34,32	5,32	1,60	1,73	90,00	174,12	1,74
<b>9,92</b>	34,34	6,22	1,43	1,44	111,32	130,95	2,53



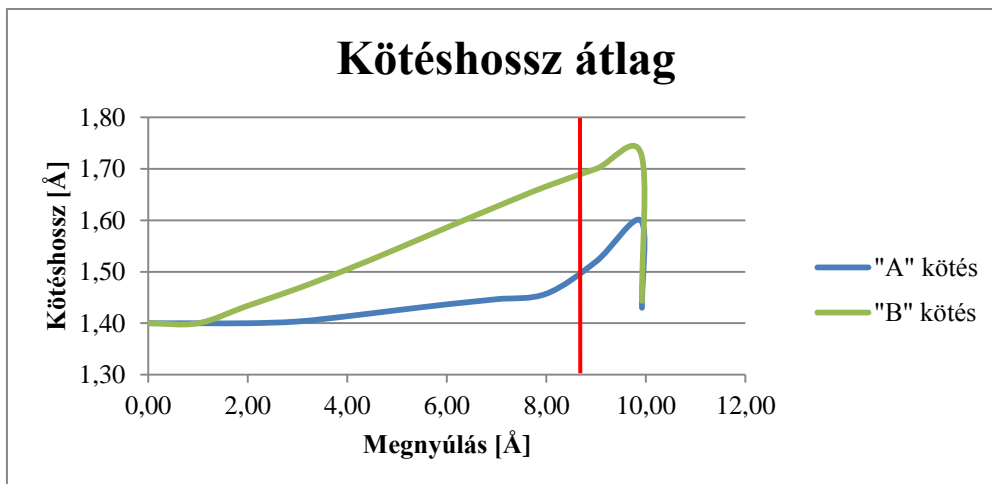
52. ábra



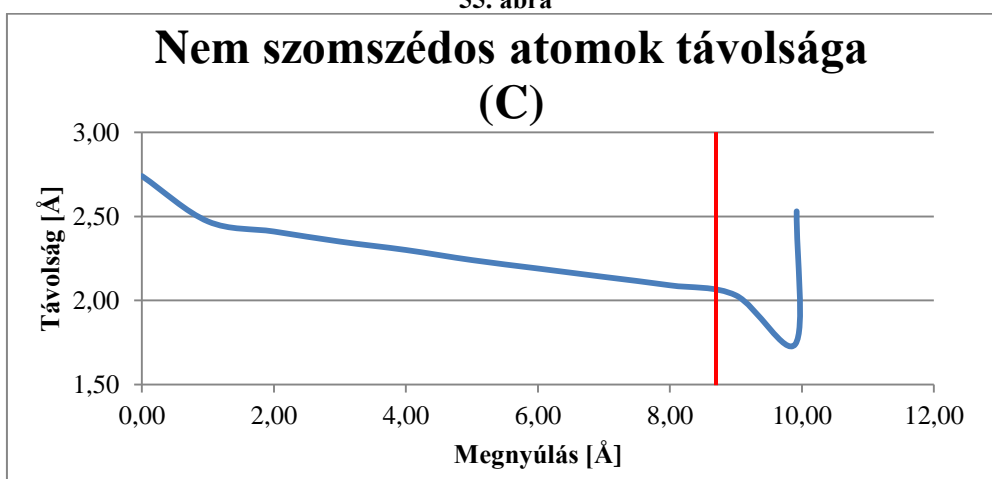
53. ábra



54. ábra



55. ábra



56. ábra

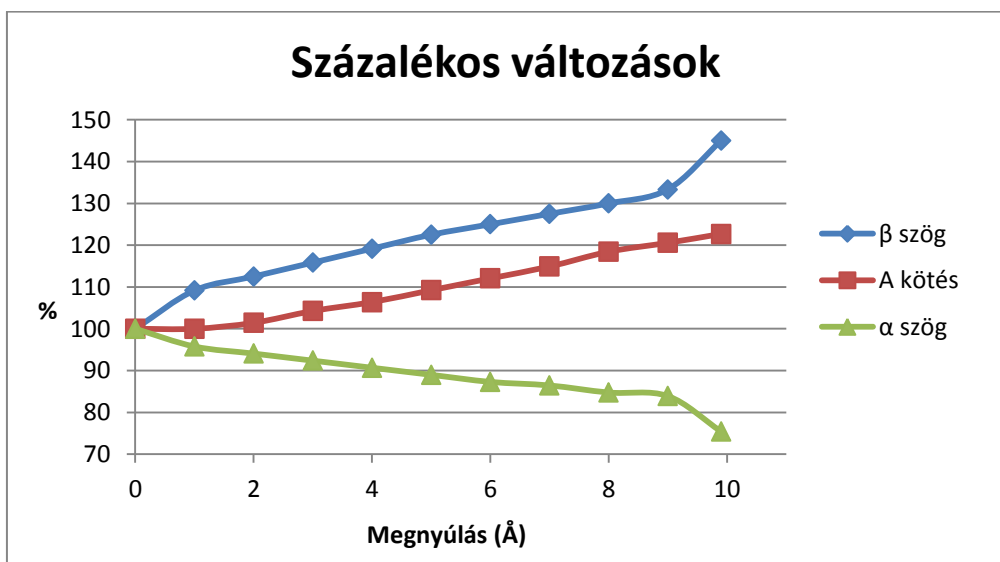
A futtatások után, az eredmények kiértékelésekor két dolgot állapítottam meg. Az egyik, hogy a tönkremenetel előtt a diagramok lefutásában van egy hirtelen törés, mely pont a szerkezet tönkremenetelét jelzi. Ezt a pontot jelöltem a diagramokon (8,68 Å-nál). Ha ezt a pontot a szerkezet terhelése meghaladja, a rugalmasság nem veszik el, tehát ha elveszem a terhelést, akkor a modell egy relaxáció után visszaáll az eredeti állapotba, 24,43 Å.

A másik észrevételt a kötéshosszok változásánál és a kötésszögek változásánál tettem. A kötésszögek korábban deformálódnak, mint ahogyan a kötések elkezdnek változni. Ez a tendencia az alábbi, százalékos eltéréseket mutató diagramon világosan látszik. A szögek változásait mutató kék és zöld görbéken a növekedés („ $\alpha$ ” típusú szögeknél a csökkenés) azonnal,



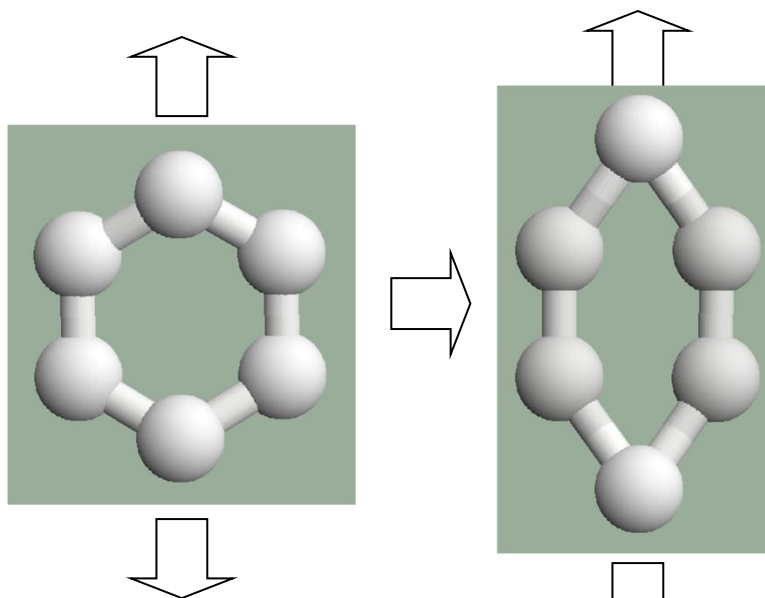
határozottan megkezdődik, amíg a kötэшosszak változása csak később, kb. 1 Å nyúlásnál indul meg.

A szögek és kötэшosszak analizésénél fontos tényező továbbá, hogy a rugalmas alakváltozás az 52-56. ábrákon mutatott piros színű függőleges vonalig, 8,68 Å nyúlásig volt megfigyelhető. Ez azt jelenti, hogy a piros vonalig terjedő nyúlási szakaszban a terhelés megszüntetése után a magára hagyott szerkezet visszanyeri eredeti alakját. Ez 18,3% rugalmas nyúlást jelent. A szimuláció valóban igazolja a sok szerző által említett extrém rugalmasságot. Az extrém rugalmasság oka a kötэшosszak változásai mellett a kötэшögek nagymértékű deformációjával is magyarázható. A százalékos változásokat egy összesített diagramon mutatom be az 57. ábrán.



57. ábra: A karosszék típusú nanocső alakváltozásának százalékos értékelése

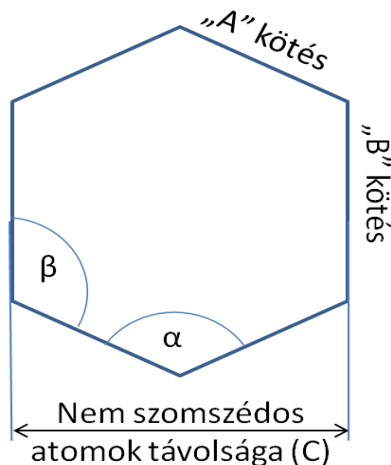
## 4.3.2. Cikk-cakk típusú nanocső rugalmassága



58. ábra: A cikk-cakk típusú nanocsőnél a hatszög deformációja erőhatásra

A másik típusú nanocső, melyet rugalmasság szempontjából vizsgáltam, a cikk-cakk típusú nanocső, illetve az őt felépítő 6-szög gyűrű (58. ábra). Ebben az esetben a gyűrű orientációja más, mint az előbb taglalt nanocsőnél. Jelen vizsgálatban a gyűrűnek van két olyan kötése, mely teljes mértékben a tengely irányú erőnek a hatását felveszi. Illetve van négy olyan kötés, mely szintén szöget zár be a tengellyel, mint a karosszék típusnál. Egy kiragadott gyűrűn szemléltetem a következőkben vizsgált paramétereket (59. ábra).

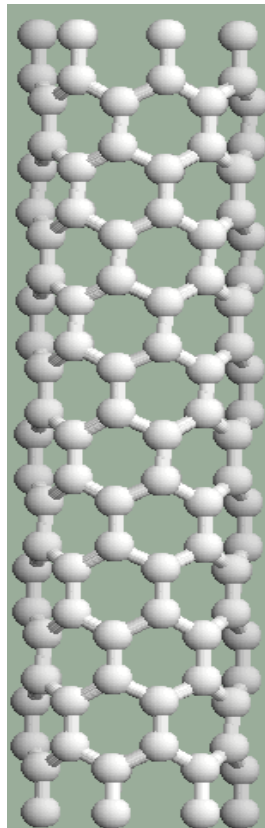
Ebben az esetben is ugyanazokat a paramétereket vizsgáltam, mint a karosszék típusúnál. Két szöget, melyből az  $\alpha$  szög és a vele szemközti megegyezik. A  $\beta$  szög viselkedés szempontjából és szög állás szempontjából megegyezik a többi három kimaradt szöggel. Azt várom, hogy az  $\alpha$  szögnek az értéke csökken a  $\beta$  szög értéke pedig nő. Vizsgáltam ennél a szerkezetnél is két kötést, mivel a többi kötés megegyezik e kötések valamelyikével. Azt várom, hogy az A kötés kisebb, míg a B kötés nagyobb



59. ábra: Cikk-cakk típusú nanocsövet felépítő hatszög gyűrű

léptékben és jobban fog változni terhelés hatására. Ennél a típusnál is vizsgáltam a nem szomszédos atomok távolságát, melyet az ábrán látható módon vettem fel. Vizsgáltam még a szerkezetem átmérőjét, melyet két irányból egymásra merőlegesen mértem. Az eredményeket táblázatba foglalva (4. táblázat), és diagramokon is ábrázoltam (61.-65. ábra).

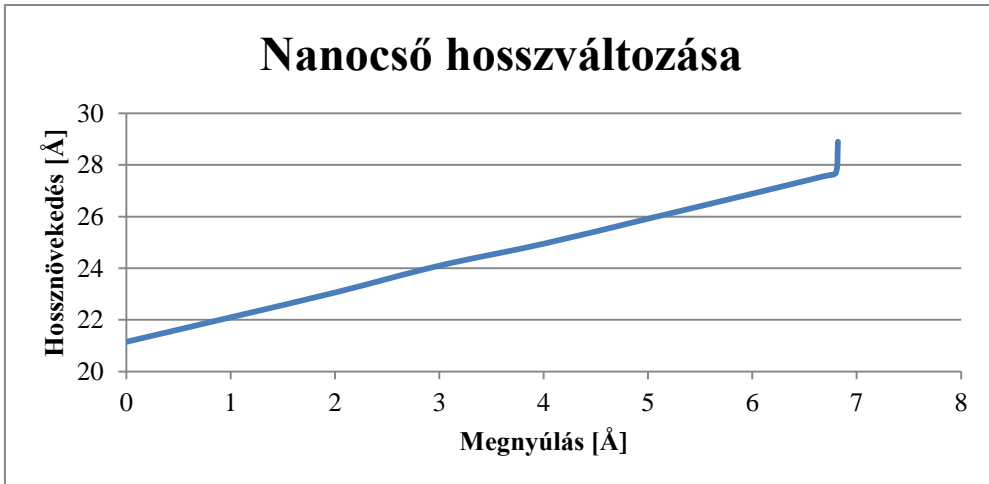
Az analizált szerkezetem az 60. ábrán látható, melynek tulajdonságai: cikk-cakk típusú (7,0) kiralitású, és 21,15 Å hosszú.



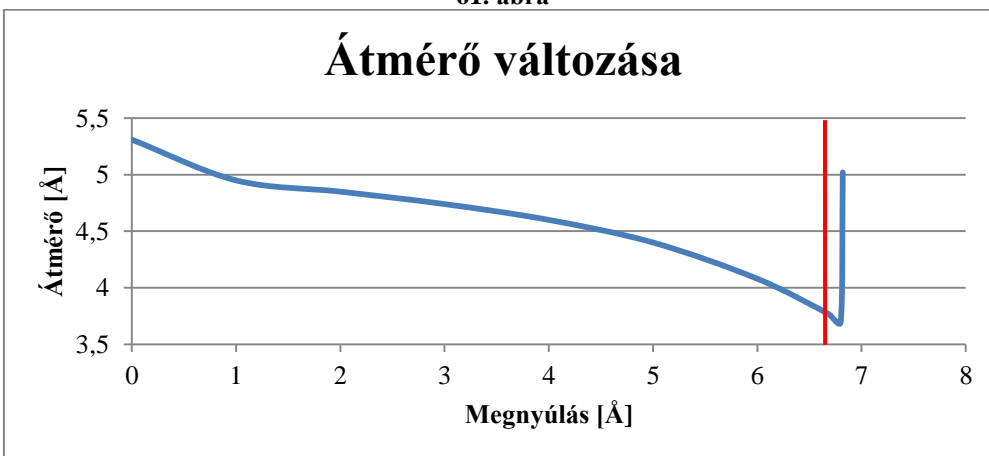
**60. ábra:** Cikk-cakk típusú nanocső a vizsgálatához

4. táblázat A cikk-cakk típusú nanocső húzása során bekövetkező deformáció változások

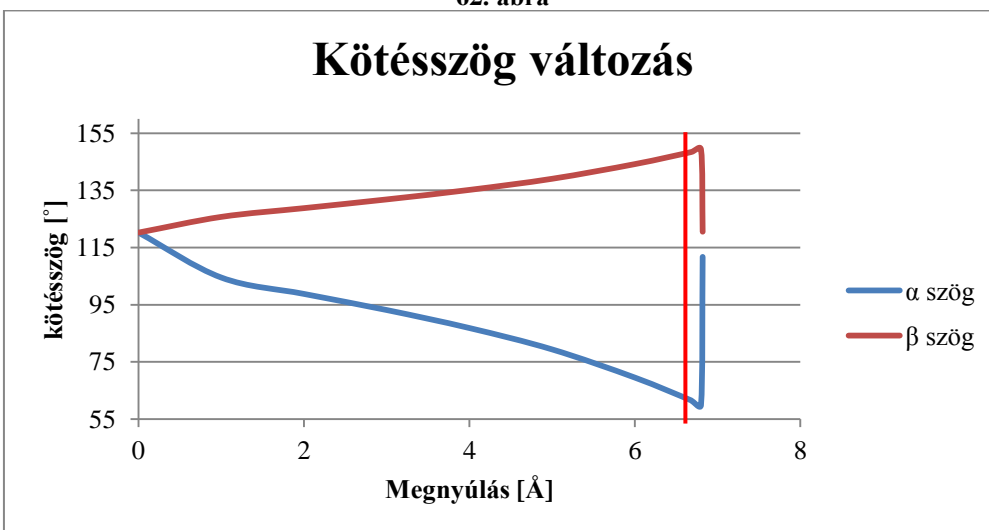
Megnyúlás (Angström)	Nanocső teljes hossz	Nanocső átmérő	"A" kötés	"B" kötés	$\alpha$ szög	$\beta$ szög	Nem szomszédos atomok távolsága (C)
<b>0</b>	21,15	5,31	1,4	1,4	118,37	118,37	2,36
<b>1</b>	22,15	4,95	1,4	1,4	104,53	125,74	2,2
<b>2</b>	23,15	4,85	1,42	1,42	98,79	128,8	2,16
<b>3</b>	24,15	4,74	1,45	1,44	93,16	131,85	2,11
<b>4</b>	25,15	4,6	1,49	1,46	86,86	135,18	2,05
<b>5</b>	26,15	4,4	1,53	1,47	79,38	139,07	1,96
<b>6</b>	27,15	4,08	1,59	1,48	69,52	144,2	1,82
<b>6,68</b>	27,83	3,77	1,64	1,48	61,55	148,41	1,69
<b>6,8</b>	27,95	3,7	1,65	1,48	59,89	149,3	1,64
<b>6,82</b>	27,97	5,02	1,37	1,35	111,74	120,55	2,3



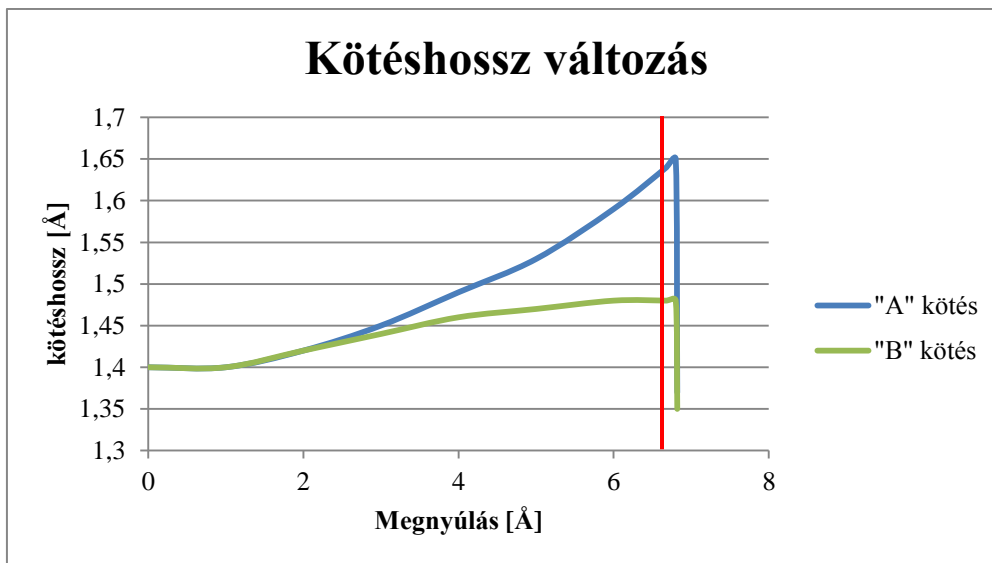
61. ábra



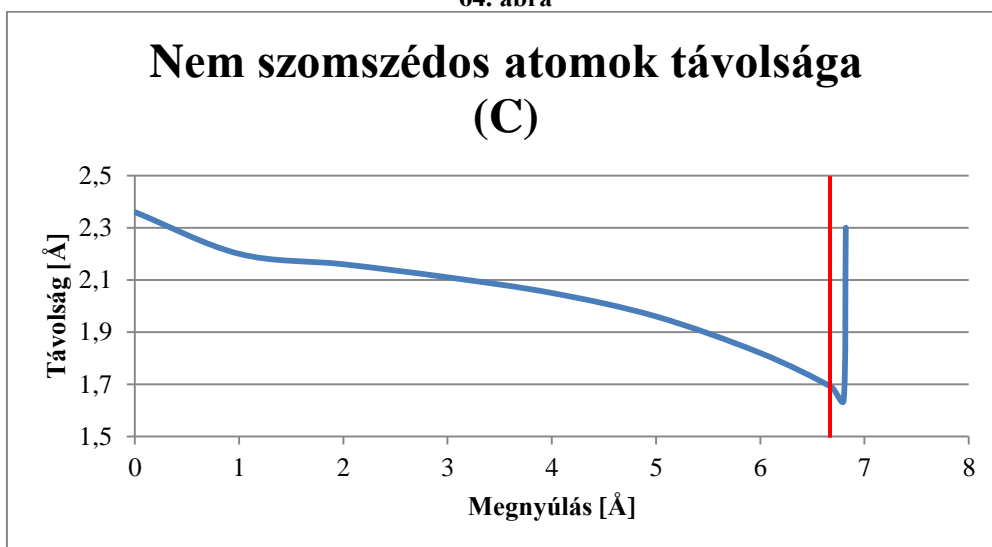
62. ábra



63. ábra



64. ábra



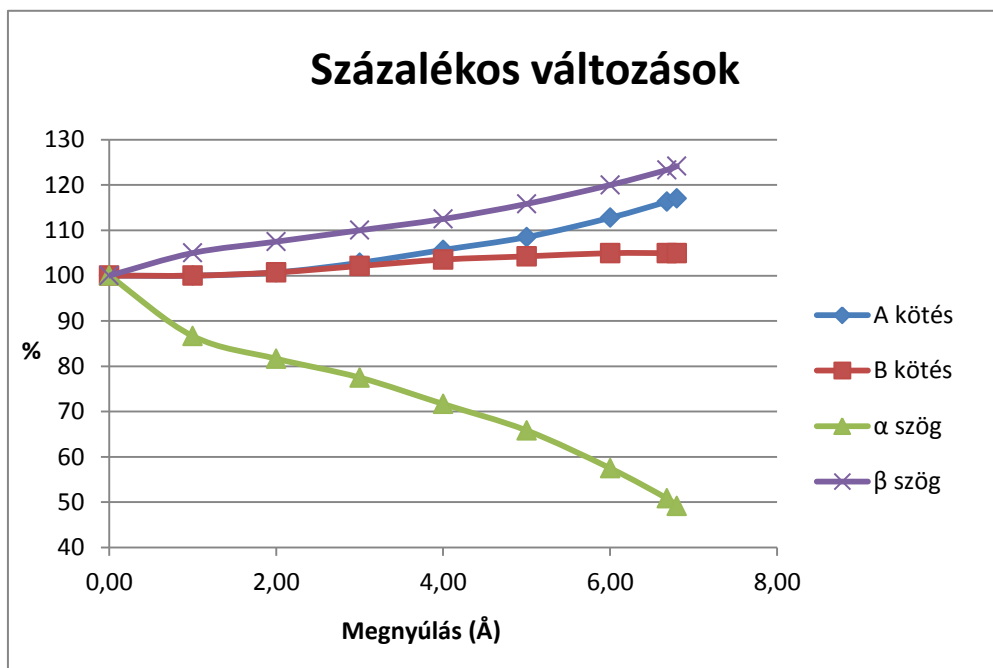
65. ábra

Ebben az esetben is megtalálható az a két határpont, amelyek a karosszék típusú nanocső húzás-szimulációjánál is. Ugyanúgy a szerkezet deformációja két részből áll. 0,5 Å-nél van az első törés, ameddig a kötéshosszok nem változnak, és a kötésszögek, illetve a szerkezet átmérője drasztikusan változik. utána kezdenek a kötésszögek hosszabbodni és a szerkezet deformációja lelassul.

A másik egy határpont a szerkezet tönkremenetele előtt, mely előre jelezheti a roncsolódást (6,74 Å).

A tendenciák az alábbi, százalékos változásokat összehasonlító diagramon jól megfigyelhetők. A kötéshosszak esetében most is lassabban indul a változás, csak kb. 1 Å nyúlás után, a szögek esetében azonban már ezen a kezdeti szakaszon is nagymértékű változások tapasztalhatók.

A rugalmas alakváltozás az 59-62. ábrákon mutatott piros színű függőleges vonalig, 6,74 Å nyúlásig volt megfigyelhető. (Tehát a piros vonalig terjedő nyúlási szakaszban a terhelés megszüntetése után a magára hagyott szerkezet visszanyeri eredeti alakját.) Ez most 15,9% rugalmas nyúlást jelent. A szimuláció most is igazolja a sok szerző által említett extrém rugalmasságot, amely a karosszék típusú nanocsöveknél valamelyest nagyobb volt (18,3%). Az extrém rugalmasság oka a kötéshosszak változásai mellett a kötőszögek nagymértékű deformációjával is magyarázható a karosszék és a cikk-cakk típusú nanocsövek esetében is. Ebben az esetben is a százalékos változásokat egy diagramba foglaltam, amit a 66. ábrán szemléltetek.



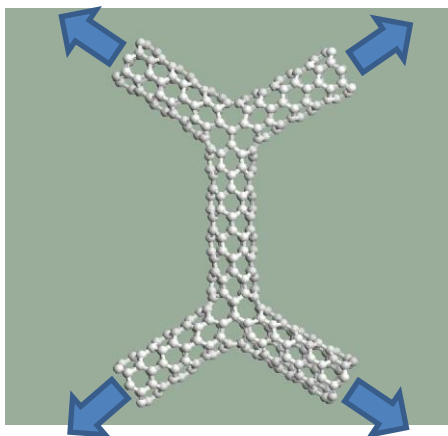
**66. ábra:** A cikk-cakk típusú nanocső alakváltozásának százalékos értékelése

#### 4.4. Szén nanocső szerkezet modellezése és vizsgálatai

Dolgozatom egyik témája a többdimenziós nanocső szerkezetek modellezése. Ebben a fejezetben bemutatok több olyan modellt, melyet a továbbiakban vizsgálni fogok. A modellek egy hálózatnak a részei lehetnek. Amennyiben ezeket a nanocső elágazásokat periodikusan egymás mellé helyezzük, akkor egy nanocső hálózatot kapunk eredményül. Az egységnyi elemet tesztelem, és mechanikai igénybevétellel terhelem, majd nézem a szerkezetem gyenge pontját. Miután meghatároztam a kritikus keresztmetszetet, a fent említett 3.4.1-es és 3.4.2-es fejezetben leírtak alapján módosítom a szerkezetet. A vizsgálni kívánt hálózatokat mindig csak Y elágazásokból építem fel. Ezeket az Y elágazásokat dolgozatomban a 3.4-es fejezetben már vizsgáltam. Ugyanazokat a szerkezeteket használom fel. A hálózat építőelemei minden esetben két Y elágazásból állnak. Az elágazások egymással szembe vannak fordítva és a szerkezet végén található atomok kötéseket létesítenek.

##### 4.4.1. Cikk-cakk típusú nanocső hálózat elem

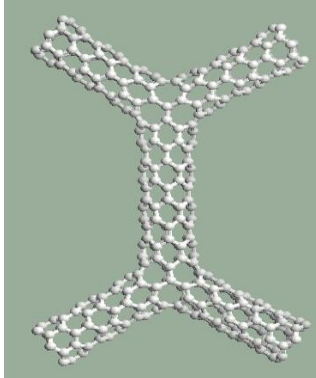
Először a cikk-cakk típusú nanocsőből készült hálózatelemet mutatom be. A szerkezet minden szakasza azonos kiralitású nanocsőből épül fel. Jelen esetben is egy (6,0) kiralitású nanocsőből. A tesztelt modellt a 67. ábrán mutatom be. Ebben az esetben is a szerkezetre tengely irányú terheléseket tettem, melyet az ábrán jelöltem is. A terhelést szintén a nanocső végeken elhelyezkedő atomcsoportok mozgásával értem el.



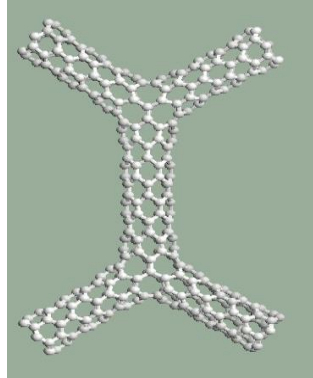
**67. ábra:** cikk-cakk típusú hálózat elem, a terhelési irányokat is jelöltem az ábrán



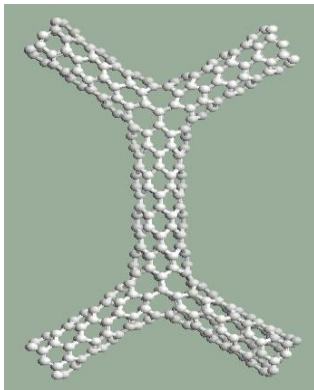
A következő képcsoporton (68. ábra) bemutatom a szimuláció folyamatát. Megmutatom, hogy egy bizonyos lépéshez mekkora megnyúlás tartozik. Mekkora a szerkezet megnyúlása százalékban (középső függőleges nanocső szakasz irányában)



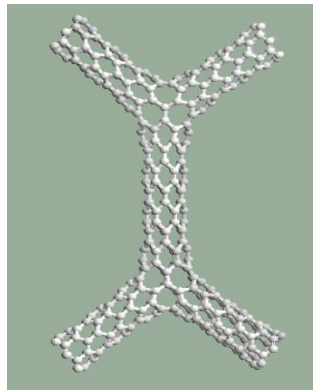
200. lépés (2Å; 4,76% megnyúlás)



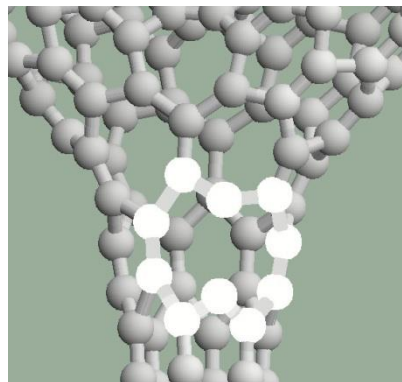
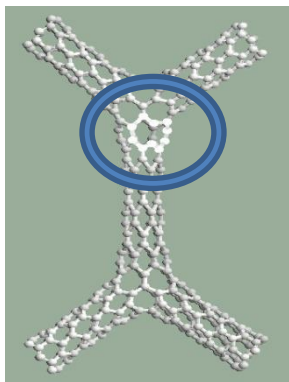
400. lépés (4Å; 10,48% megnyúlás)



600. lépés (6Å; 15,53% megnyúlás)



800. lépés (8 Å; 20,01% megnyúlás)

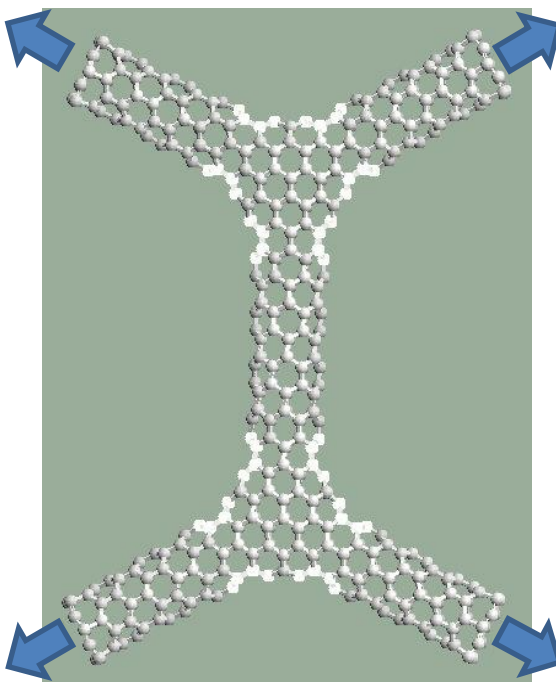


1038. lépés (10,38Å; 24,59% megnyúlás), és a tönkremenetel (Az első kötés most is a hétszög gyűrűk mellett szakad át.)

**68. ábra:** Cikk-cakk típusú hálózatelem húzás-szimulációja

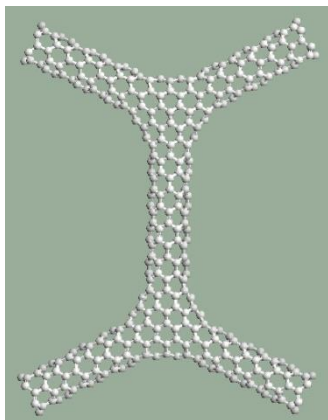
#### 4.4.2. Cikk-cakk típusú $T$ transzformációval módosított nanocső hálózat elem

A 3.4.1. fejezetben már bemutatott modellt fogom felhasználni az előzőekben bemutatott hálózat elem építéséhez. Az említett fejezetben épített modellel ugyanannyi atom építi fel, ebből következően megegyezik a szerkezetben lévő kötésszám. A különbség a két csomópontban van. A transzformált modell csomópontjában több a kötés, és a kritikusnak minősített hétszög gyűrűk a csomópont szélére kerültek. Ebben az esetben is természetesen a terhelések tengelyirányúak. A módosított hálózatelemet a 69. ábrán mutatom be. Cikk-cakk típusú (6,0) nanocsövekből áll, a szerkezetben 580 atom található. A csövek  $120^\circ$ -ban helyezkednek el.

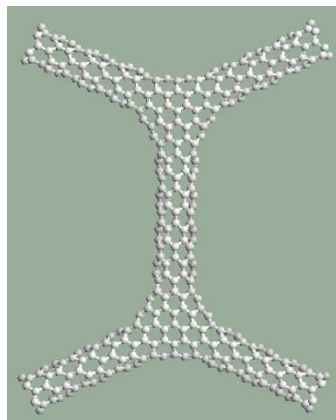


**69. ábra:** Transzformált hálózatelem, jelölve a hétszög gyűrűk és a terhelések

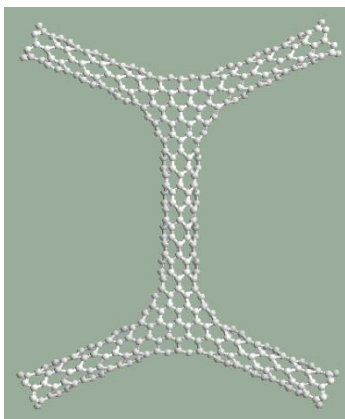
A következőkben bemutatom a fent említett és meghatározott hálózatelem húzás-szimulációját. A várható eredmény – mint, ahogy a 3.4.1. fejezetben tapasztalt szimuláció után –, hogy a modellem a csomópontok szélén elhelyezkedő hétszög gyűrűknél fog roncsolódni. A szimuláció folyamatát a 70. ábrasorozaton szemléltetem. Az egyes ábrák alatt olvasható a szimuláció lépésszáma, mely számszerűen megegyezik az elmozdulással angstromban, és a szerkezet százalékos megnyúlása (középső függőleges nanocső szakasz irányában).



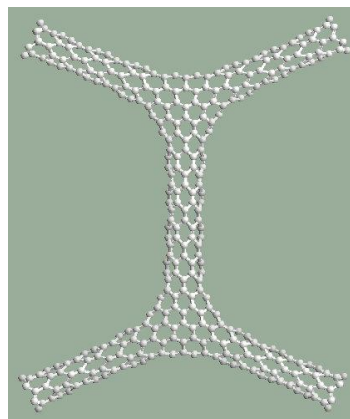
200. lépés (2 Å; 6,13%-os megnyúlás)



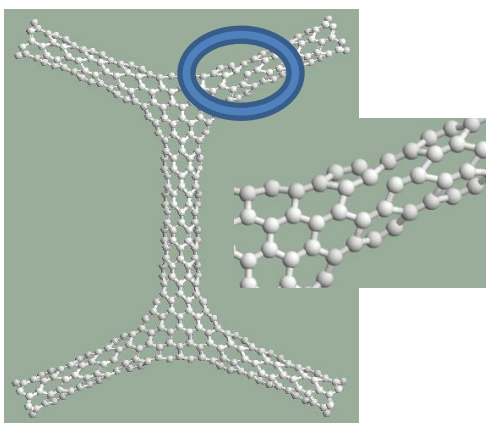
600. lépés (6 Å; 15,36 %-os megnyúlás)



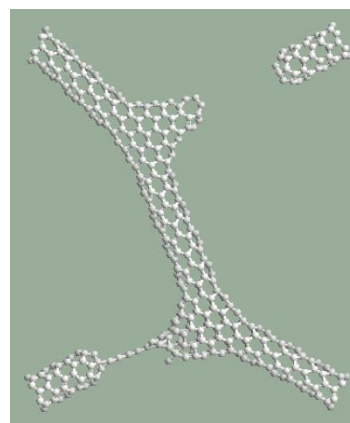
1000. lépés (10 Å;  
22,92%-os megnyúlás)



1114. lépés (11,14 Å;  
24,84 %-os megnyúlás)



Roncsolódás pillanata  
(24,89%-os megnyúlás)

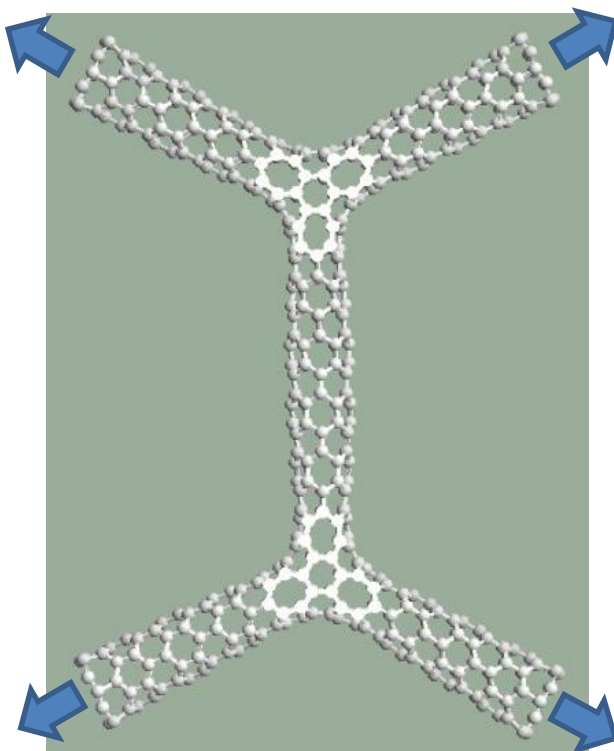


Roncsolódott és  
relaxálódott modell

**70. ábra:** T transzformációval módosított hálózat elem húzás-szimulációja

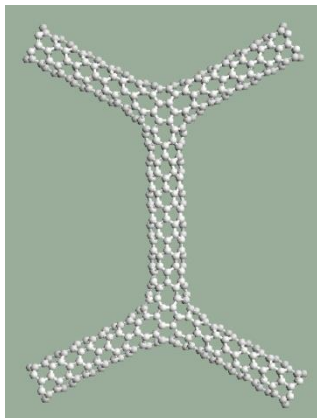
#### 4.4.3. Cikk-cakk típusú atombevitellel módosított nanocső hálózat elem

A 3.4.2. fejezetben már bemutatott modellt fogom felhasználni az előzőekben bemutatott hálózat elem építéséhez. A két modell közötti különbség, ahogy a módosítás neve is utal rá, több atomból áll. A különbség a két csomópontban van. A több atomból álló modell csomópontjában több a kötés. A kritikuskak minősített hétszög gyűrűk szintén a csomópont szélére lettek eltolva. Természetesen ebben az esetben is a terhelések tengelyirányúak. A módosított hálózatelemet a 71. ábrán mutatom be.

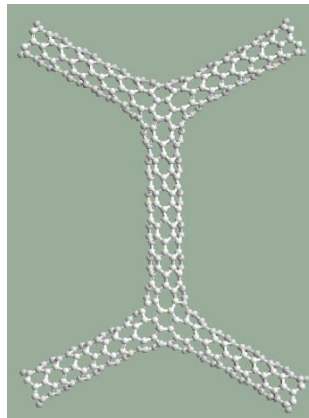


**71. ábra:** A módosított hálózatelem, jelölve a hétszög gyűrűk, és a terhelések

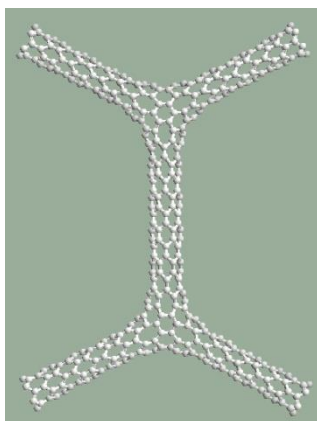
A következőkben bemutatom az atombevitellel módosított hálózatelem húzás-szimulációját (72. ábra). Azt az eredményt várom a 3.4.2 fejezetben leírtak alapján, hogy ez a szerkezetem is a hétszög gyűrűknél fog ronccsolódni. Ez a szerkezet is kétszer annyi atomból áll (588 db), mint a 3.4.2 fejezetben említett. Ugyanúgy cikk-cakk típusú (6,0) nanocsövekből áll, és a csövek által közbezárt szög  $120^\circ$ . A szimuláció folyamatát a 68. ábrasorozaton szemléltetem. Az ábra alatt látható a szerkezet százalékos megnyúlása (középső függőleges nanocső szakasz irányában)



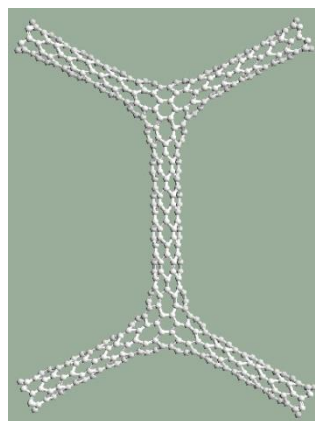
200. lépés (2 Å; 5,38%-os megnyúlás)



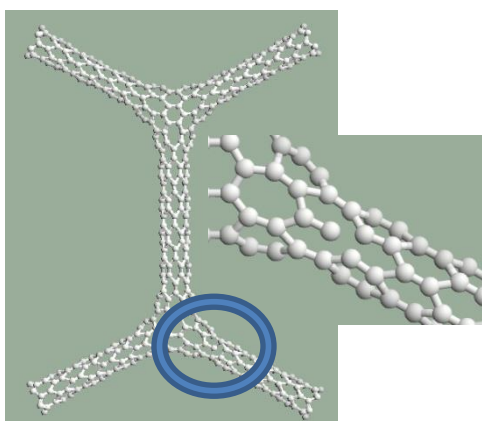
600. lépés (6 Å; 9,71 %-os megnyúlás)



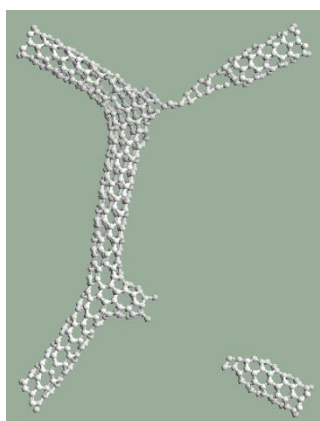
1000. lépés (10 Å;  
17,29%-os megnyúlás)



1284. lépés (12,84 Å;  
21,94%-os megnyúlás)



Roncsolódás pillanata  
(22,07%-os megnyúlás)



Roncsolódott és  
relaxálódott modell

**72. ábra:** Atombevittelével módosított hálózatelem húzás-szimulációja

A cikk-cakk típusú hálózatelemek vizsgálata során számos megállapítást tettem. Az alapmodellem a legkarcsúbb elágazás, melyet létre lehet hozni (6,0) kiralitású nanocsövekből. A szerkezet teherbírása, amit ha lefordítunk az általam vizsgált paraméterekre, egy részt 1038. lépés, ami ugye azt jelenti, hogy a szerkezet két végén rögzített atomcsoportok között a távolság 10,38 angströmmel növekedett.

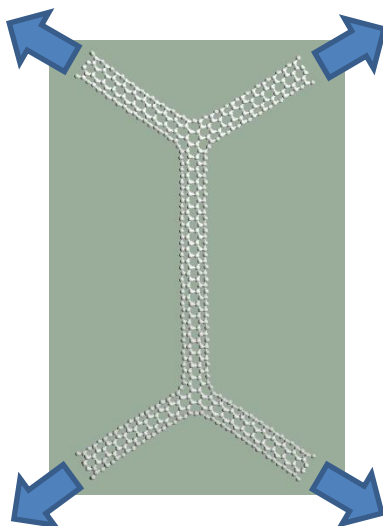
A Stone-Walles transzformáció segítségével a módosított modellem ugyanezekre a paraméterekre lefordítva kismértékben eltérő nyúlást mutatott. Ebben az esetben a szerkezetem két végén kiválasztott atomcsoportok között, melyek a befogást szimbolizálják, a távolság 11,14 angström. Ez az eredeti távolságnövekedésnek a 7,8 %-a.

Az atombevittellel módosított hálózatelem is jobb nyúlási tulajdonságokkal rendelkezik. A kiválasztott atomcsoportok között a távolságnövekedés 12,84 angström. Ez 19,2 %-os változás.

Az eredmények ismeretében tehát elmondhatom, hogy a hétszög gyűrűk elmozdításával egy más szerkezetű hálózat elemet hoztam létre. Ezek a hálózat elemek nyúlási tulajdonságaikat tekintve kismértékben eltérőek.

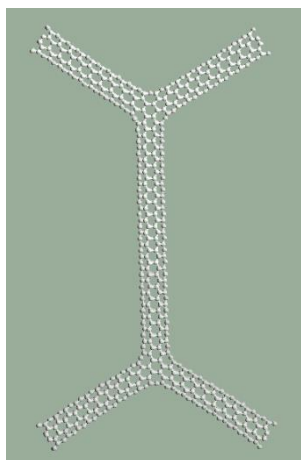
#### 4.4.4. Karosszék típusú nanocső hálózat elem

A következő modellt karosszék típusú nanocsővekből készítettem el. A terhelést ebben az esetben is tengelyirányban helyezem el a szerkezeten és az elágazások végén lévő atomcsoportok mozgásával hozom létre. A következőkben vizsgált szerkezetet a 73. ábrán mutatom be. A szerkezet (4,4) kiralitású nanocsővekből építettem.

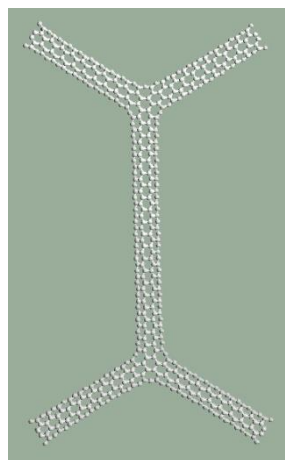


**73. ábra:** Karosszék típusú hálózat elem, terhelési irányokkal

A következőkben megmutatom a szimuláció folyamatát (74. ábra). Ismertetem a szerkezet módosulását különböző fázisokban. Az ábrák alatt a szerkezet megnyúlását is le lehet olvasni, valamint a szerkezet egészére vonatkozó nyúlást angstromben.

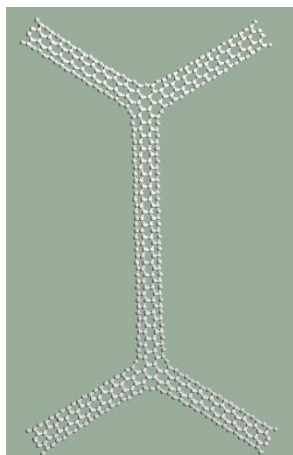


200. lépés (2 Å; megnyúlás 7,47%)

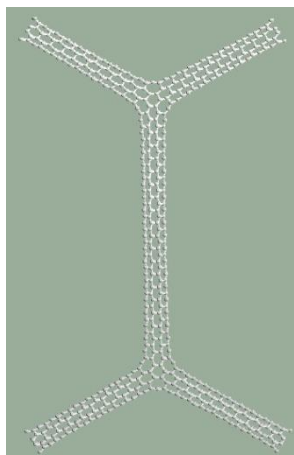


400.lépés (4 Å; megnyúlás 13,89%)

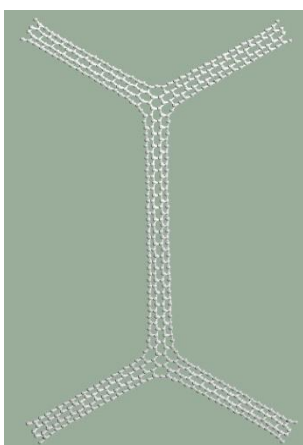




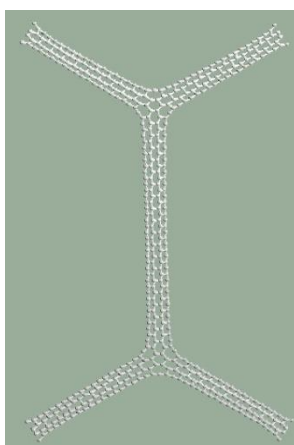
600. lépés (6 Å; megnyúlás 16,82%)



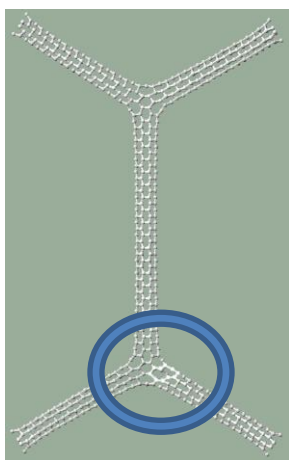
800.lépés (8 Å; megnyúlás 19,5%)



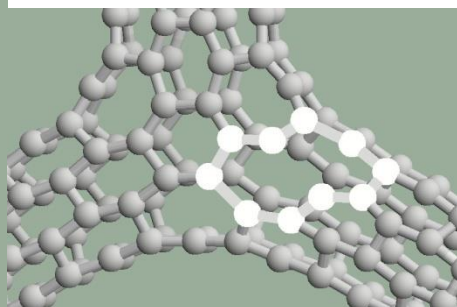
1000. lépés (10 Å; megnyúlás 21,21%)



1061. lépés (megnyúlás 22,22% szakadás előtti pillanat)



roncsolódás utáni állapot



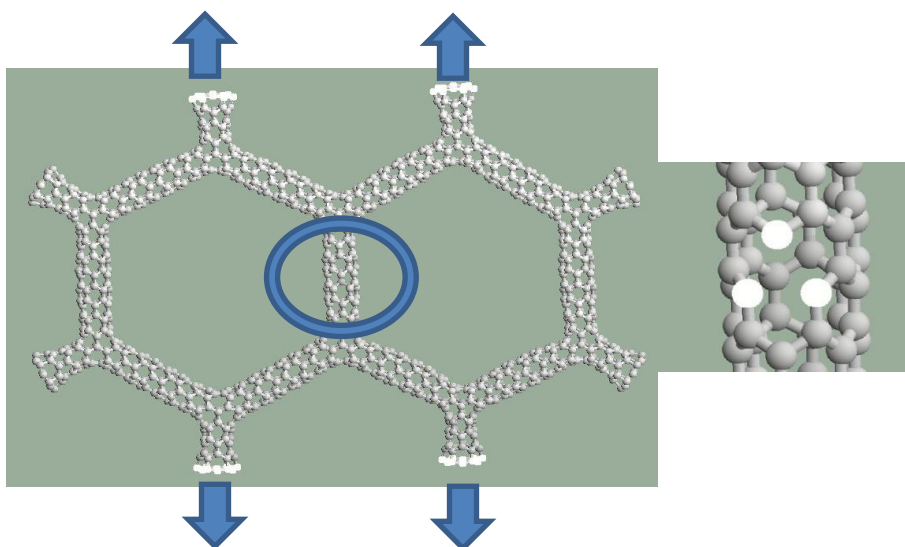
**74. ábra:** Karosszék típusú hálózati elem húzás-szimulációja



A karosszék típusú nanocső hálózat elem szimulációja során is megállapítottam, hogy a szerkezet roncsolódása szintén, mint az eddigi szerkezetek vizsgálata során, a hétszög gyűrűk közvetlen környezetében roncsolódott. A szimuláció során azt is megfigyeltem, hogy a kötésszögek szembetűnőbben megváltoztak, mint a cikk-cakk típusú nanocsőből készült szerkezetek során. A szerkezet 22,22 %-os megnyúlást követően roncsolódott. Ebben az esetben a terheléssel párhuzamos kötés nem volt a szerkezetben. Az egyenletes nyúlás során viszont megállapítottam, hogy a terhelések hatására a szerkezetben a kötések, melyek valamilyen szöget bezártak a tengellyel, befordultak a terhelések irányába. Ez a jelenség előbb bekövetkezett, minthogy a kötések hossza elkezdett volna nőni.

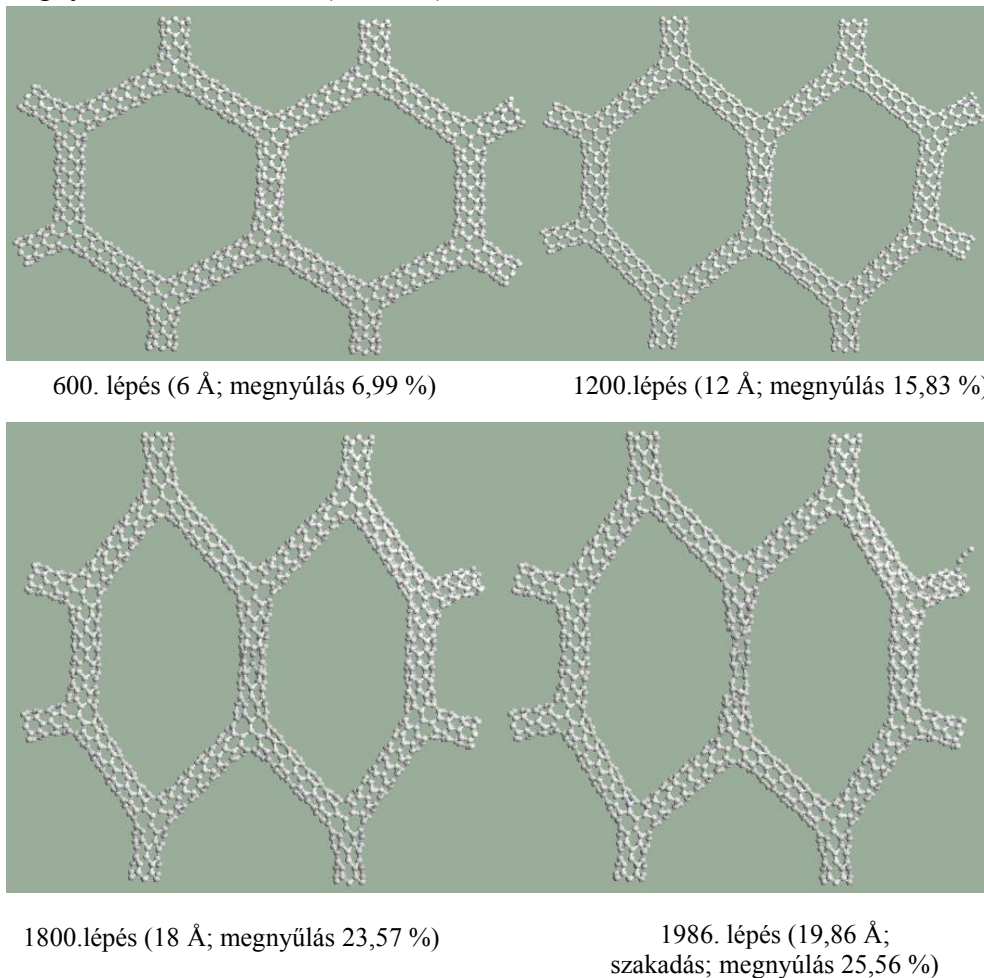
#### 4.4.5. Szén nanocső hálózat-részlet egyirányú terhelése

A korábbi esetekben a szerkezeteket minden ágon tengely irányban terheltem. Ebben a fejezetben azt vizsgálom, hogy a hálózat elem hogyan viselkedik, ha nem minden ág van egyformán terhelve. A következő, 75. ábrán mutatott szerkezetet 1459 atom alkotja, melyek cikk-cakk típusú nanocsöveket alkotnak. A csövek hosszúsága minden esetben egyforma. Ebben az esetben egy hibát vittem a szerkezetbe, melyet a szakirodalom vakanciának hív. A középső ágon az egyik atomot töröltem, így három kötés megszűnt. Az ábrán (75. ábra) jelöltem a rögzített atomokat, illetve azt a három atomot melyek közül kivettem azt az atomot mellyel kötést létesítettek (vakancia).



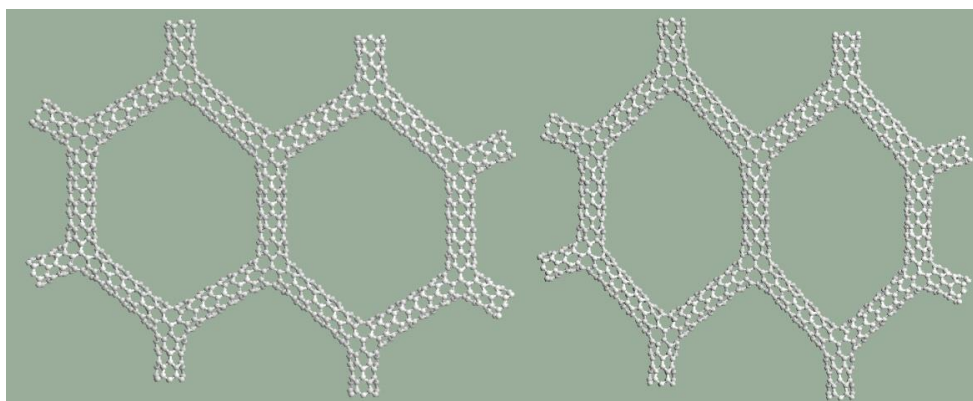
**75. ábra:** A szimulációhoz használt szerkezet és kiemelve a törölt atom helye (vakancia), valamint a terhelések

A következőkben bemutatom a szimulációt, melyen látható az egyenletes nyúlás szakasza. Az egyes ábrák alatt látható a lépésszám, ami ebben az esetben is a nanométer század része, valamint a szerkezet megnyúlása százalékban (76. ábra)



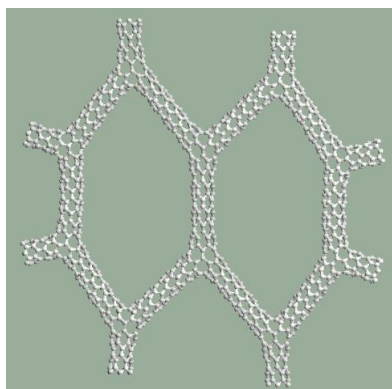
**76. ábra:** A hibás hálózatrészlet húzás-szimulációja

Miután a szerkezet húzása során a várható helyen (hibás keresztmetszetben) történt a szakadás, a következő futtatást végeztem egy olyan szerkezeten végeztem, ahol nincsen hiba. Az előzőekben alkalmazott szerkezetet javítottam ki és futtattam le a szimulációt ismét. Ugyanazokkal a paraméterekkel rendelkezik természetesen, azaz az atomszám és a szerkezet felépítése egyforma az előző modellel. A terhelés itt is a kiválasztott atomok párhuzamos mozgatásával értem el. A 77. ábrán bemutatom ennek a szimulációnak a lépéseit.

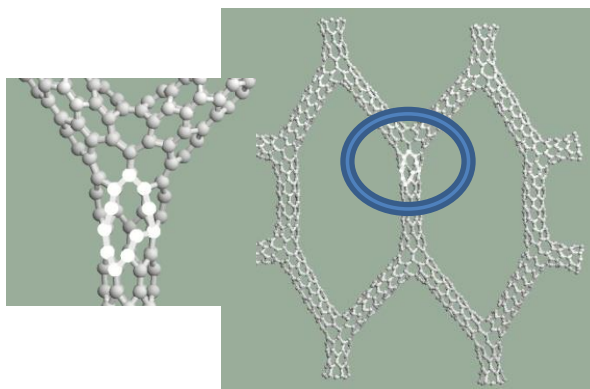


600. lépés (6 Å;  
megnyúlás 10,13 %)

1200. lépés (12 Å;  
megnyúlás 18,39 %)



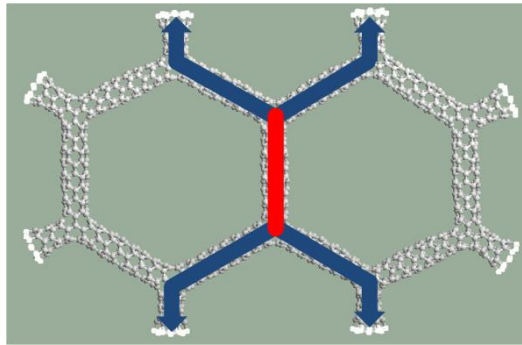
1800. lépés (18 Å;  
megnyúlás 25,56 %)



2184. lépés (21,84 Å;  
megnyúlás 29,14 %)

**77. ábra:** Az ép hálózatrészlet húzás-szimulációja

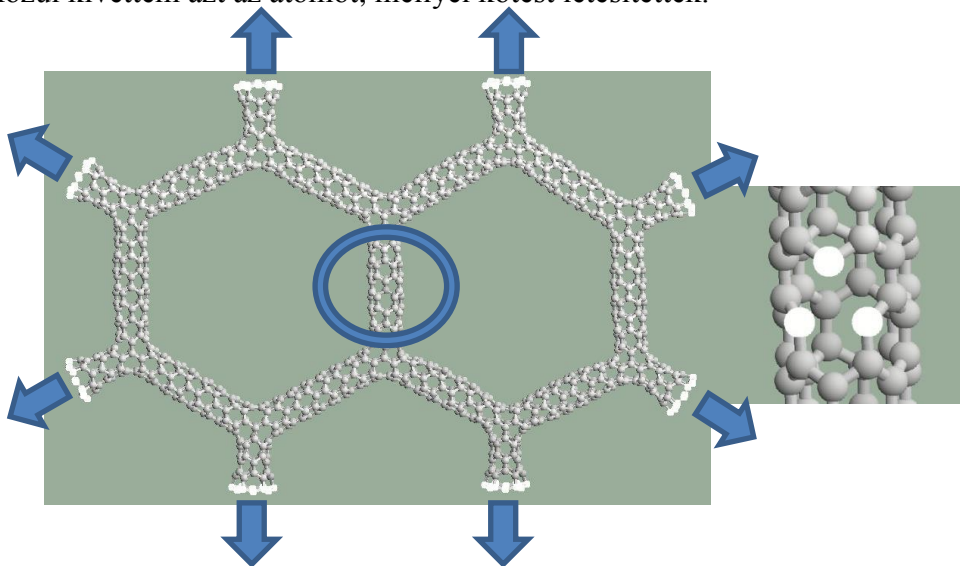
A két szimuláció futtatása és értékelése után megállapítom, hogy a hibás és ép szerkezet ugyanazon a szakaszon roncsolódott. A hibás szerkezet a gyengített keresztmetszetben, az ép pedig a hétszög gyűrűknél roncsolódott. A két futtatás között csak annyi a különbség, hogy az ép hálózat körülbelül 10%-kal erősebb. Az atomcsoportok mozgatásával olyan belső feszültség keletkezik a szerkezetben, melynek a hatásvonalai egy nanocső szakaszban koncentráltabbak. Ezen a nanocső szakaszon történt mind a két esetben a roncsolódás. Ezt az összegzett megállapítást mutatom be a 78. ábrán.



**78. ábra:** A szerkezetben ébredő erők hatásvonalai és a roncsolódott szakasz fedik egymást

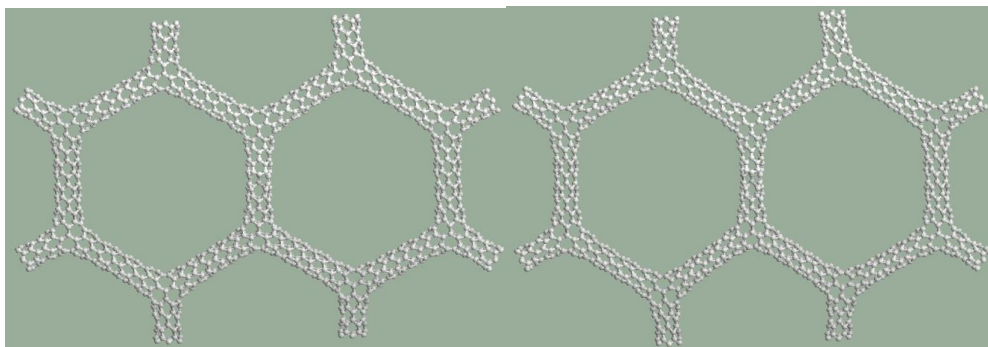
#### 4.4.6. Szén nanocső hálózat-részlet többirányú terhelése

A második esetben a szerkezetet több irányból terheltem. Ebben az esetben is az előzőekben bemutatott szerkezetet teszteltem. A 79. ábra bal oldalán részén fehér színnel kiemelt csővégeket húztam tengelyirányban. A középső ágon az egyik atomot töröltem, így három kötés megszűnt. Az ábrán (79. ábra) jelöltem a rögzített atomokat, illetve azt a három atomot melyek közül kivettem azt az atomot, mellyel kötést létesítettek.



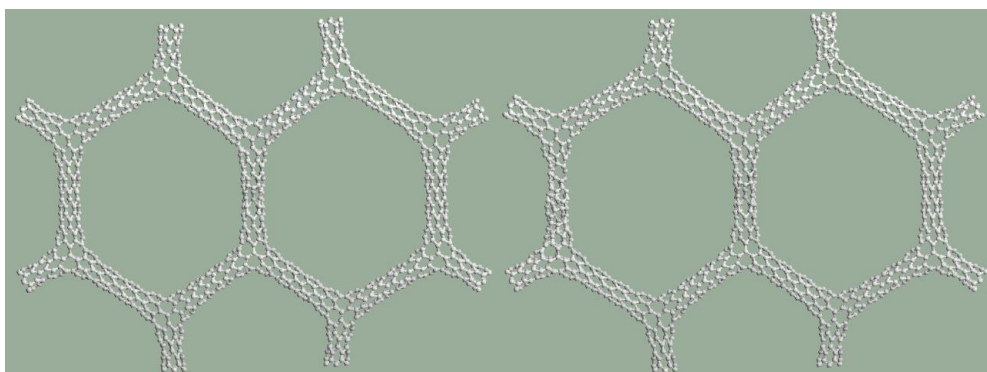
**79. ábra:** A szimulációhoz használt szerkezet és kiemelve a törölt atom helye

Bemutatom a szimuláció lépéseit az egyenletes nyúlás szakaszában, valamint a roncsolódás helyét, ami ebben az esetben is a hétszög gyűrűk mellett van. (80. ábra)



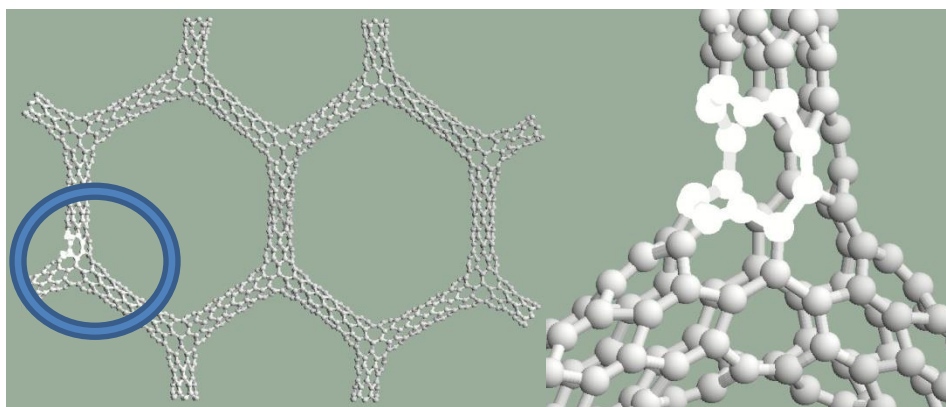
600. lépés (6 Å;  
megnyúlás 10,33 %)

1200. lépés (12 Å;  
megnyúlás 18,68 %)



1600. lépés (16 Å;  
megnyúlás 23,09 %)

1668. lépés (16,68 Å;  
megnyúlás 23,92 %)



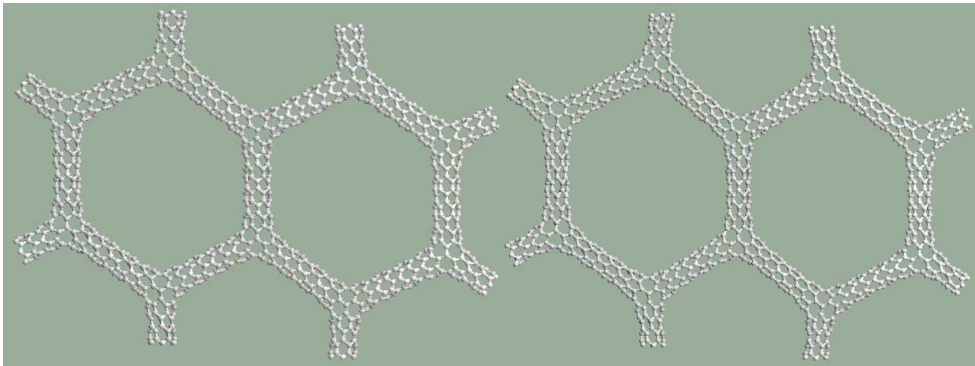
Elsődleges roncsolódási pont (16,5 Å; megnyúlás 23,76 %)

**80. ábra:** A hibás hálózatrészlet többtengelyű húzás-szimulációja



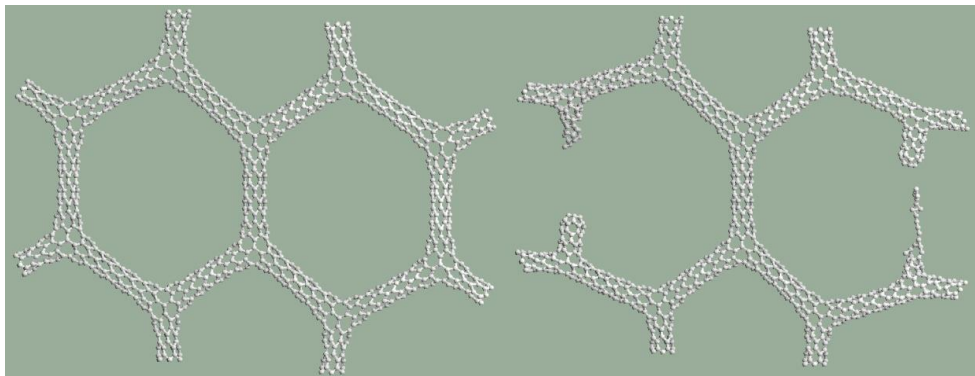
A futtatás után megállapítottam, hogy ha többirányú terhelés miatt a szerkezetem kisebb alakváltozást mutatott, mielőtt roncsolódott volna. Ez a jelenség a makro világban is észlelhető. Ez a tulajdonsága a molekuláris szerkezeteknek hasonlít a „kézzel fogható” anyagok tulajdonságaira.

Miután a szerkezet húzása során nem a várható helyen (hibás keresztmetszetben) történt a szakadás egy ellenőrző futtatást végeztem az ép szerkezeten. Az előzőekben már alkalmazott szerkezeten futtattam le a szimulációt ismét. A terhelés itt is többirányú. A 81. ábrán bemutatom ennek a szimulációnak a lépéseit.



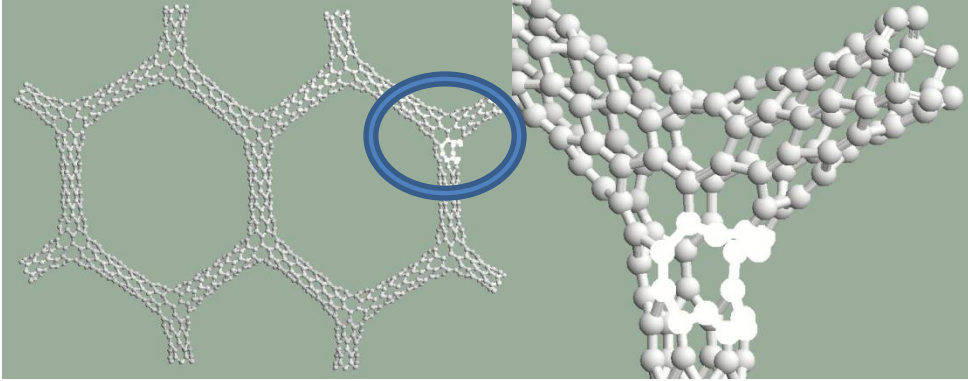
600. lépés (6 Å;  
megnyúlás 10,15 %)

1200. lépés (12 Å;  
megnyúlás 18,57 %)



1600. lépés (16 Å;  
megnyúlás 23,34 %)

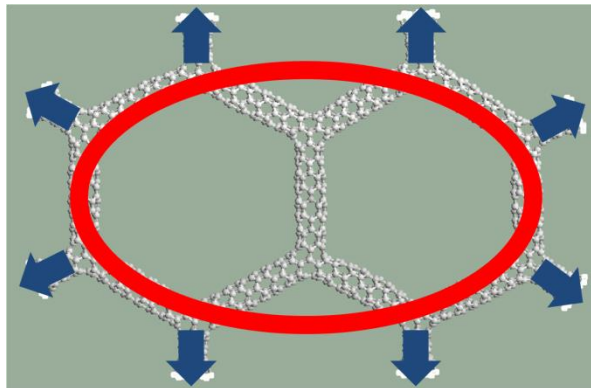
1650. lépés (16,5 Å;  
megnyúlás 23,84 %)



Elsődleges roncsolódási pont (16,38 Å; megnyúlás 23,76 %)

**81. ábra:** Az ép hálózatrészlet húzás-szimulációja

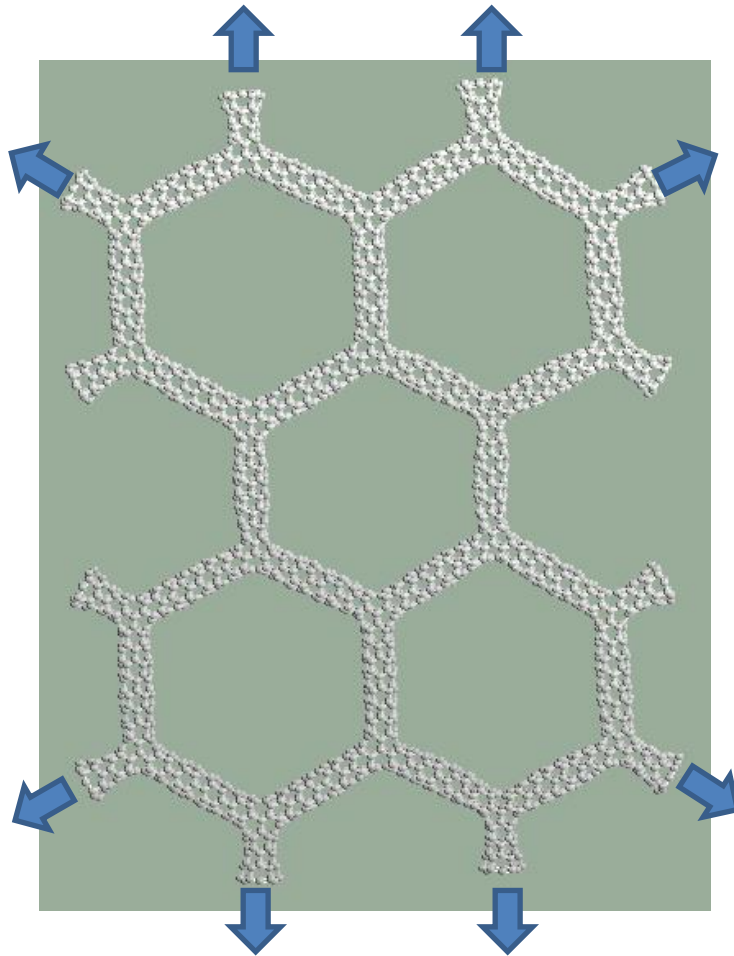
A két szimuláció futtatása és értékelése után megállapítottam, hogy a hibás és ép szerkezet ugyanabban a keresztmetszetben roncsolódott először, a hétszög gyűrűk mellett. A két futtatás között számottevő különbség nincs. Azt is megállapítottam, hogy az erőhatások következtében a szerkezeten kialakul egy olyan gyűrű körbe a szerkezet szélén, ahol a legnagyobb erőhatás éri a hálózatelemet. Ezen a gyűrűn alakul ki a gyenge keresztmetszet végül, az elgyengített keresztmetszet nem befolyásolta a roncsolódás helyét. (82. ábra)



**82. ábra:** Gyenge keresztmetszetekből álló határréteg

#### 4.4.7. Szén nanocső hálózat vizsgálata

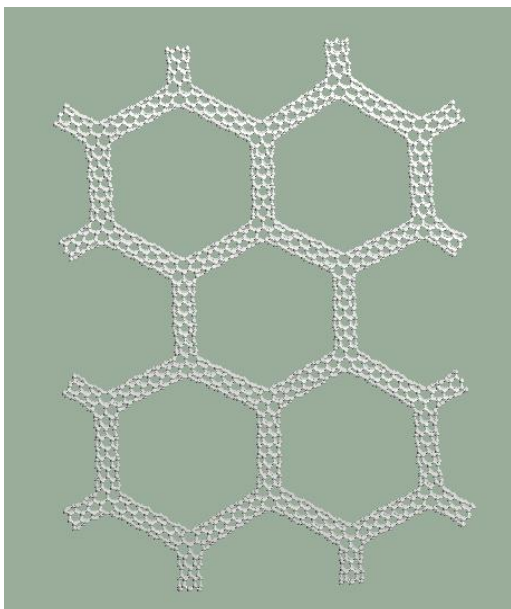
Az előzőekben bemutatott szimuláció során egyes terhelések alatt hogyan viselkednek a hálózatrészletek. A következő szerkezet egy teljes hálózat lesz, melynek szintén a gyenge pontját keresem. A 83. ábrán bemutatom a vizsgált modellt és a terhelési irányokat, amik ebben az esetben is tengely irányúak. A szerkezetben minden nanocső szakasz egyforma hosszú, kiralityást tekintve is megegyeznek (6,0) cikk-cakk típusúak.



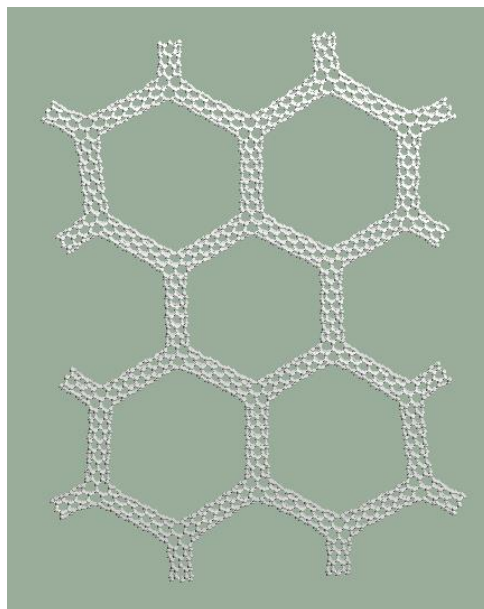
**83. ábra:** Nanocső hálózat és a terhelési irányok

A következőkben bemutatom, hogyan változott a szerkezetem a többirányú terhelés hatására. A 84. ábracsoporton a szimuláció lépéseit lehet látni. Minden kép alatt a szerkezetre vonatkozó adatok láthatók.

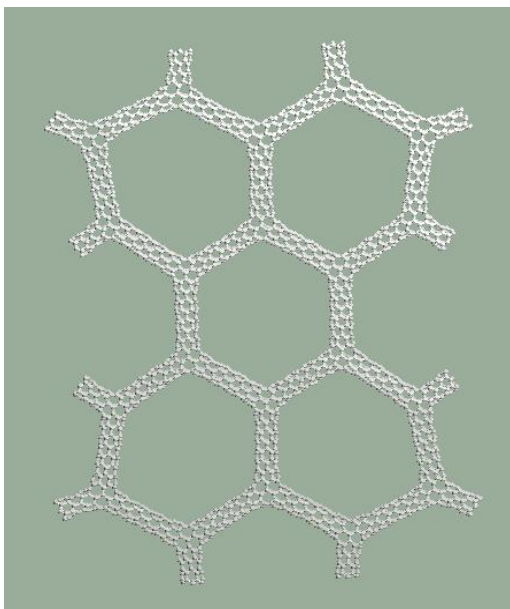




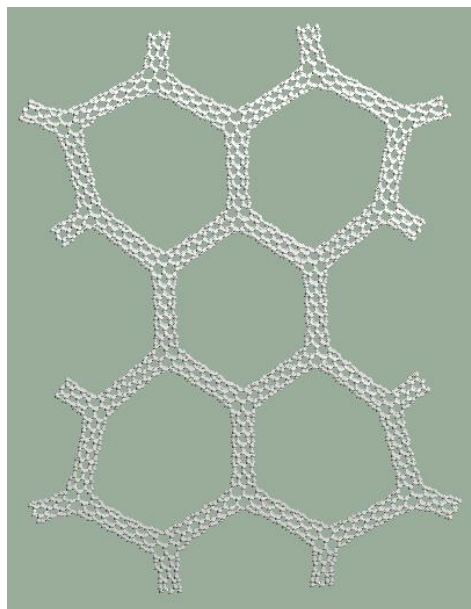
200. lépés (2 Å;  
megnyúlás 1,38 %)



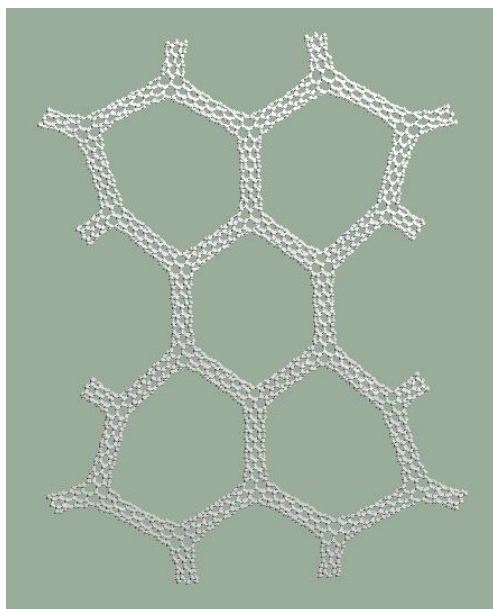
600. lépés (6 Å;  
megnyúlás 4,2 %)



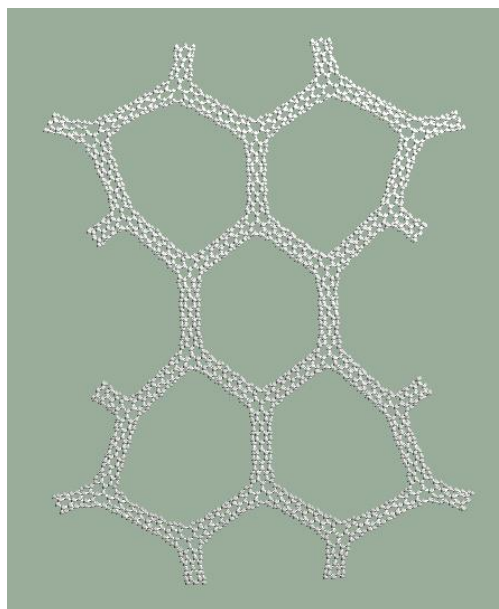
1000. lépés (10 Å;  
megnyúlás 7,98 %)



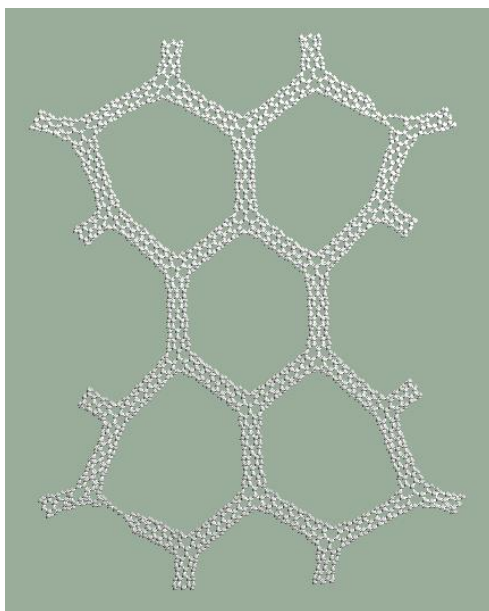
1400. lépés (14 Å;  
megnyúlás 11,63 %)



1800. lépés (18 Å;  
megnyúlás 14,45 %)

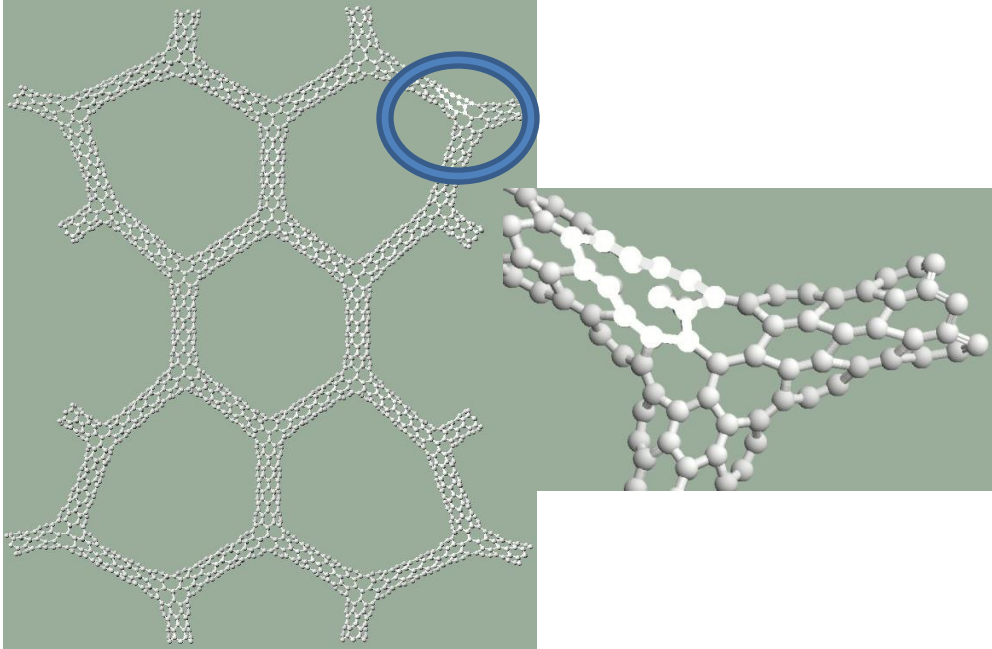


2000. lépés (20 Å;  
megnyúlás 15,8 %)



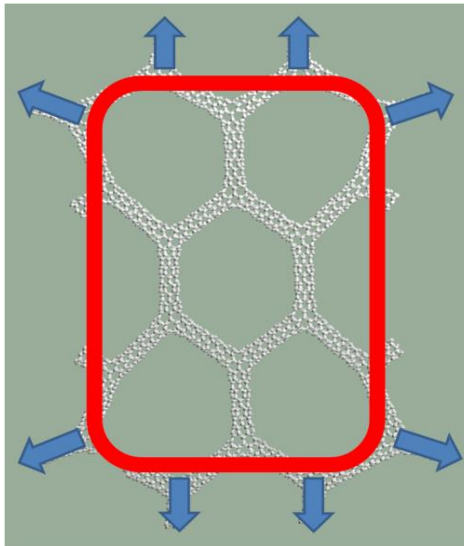
2147. lépés, roncsolódott szerkezet (21,47 Å; megnyúlás 16,92 %)

**84. ábra:** Nanocső hálózat többtengelyű húzás-szimulációja



**85. ábra:** A hálózat elsődleges roncsolódási pontja, kiemelve a hiba helyét

A hálózat futtatása során megállapítottam, hogy a szerkezet itt is a hétszög gyűrűk közvetlen környezetében roncsolódik. (85. ábra). A további futtatás során azt is megállapítottam, hogy ezen a szerkezeten is megtalálható az előző fejezetben tárgyalt gyűrű a szerkezet külső részén. Ezen a gyűrűn alakult ki az elsődleges roncsolódási pont is, és a további szakadások is. Ezt a gyűrűt mutatja a 86. ábra.



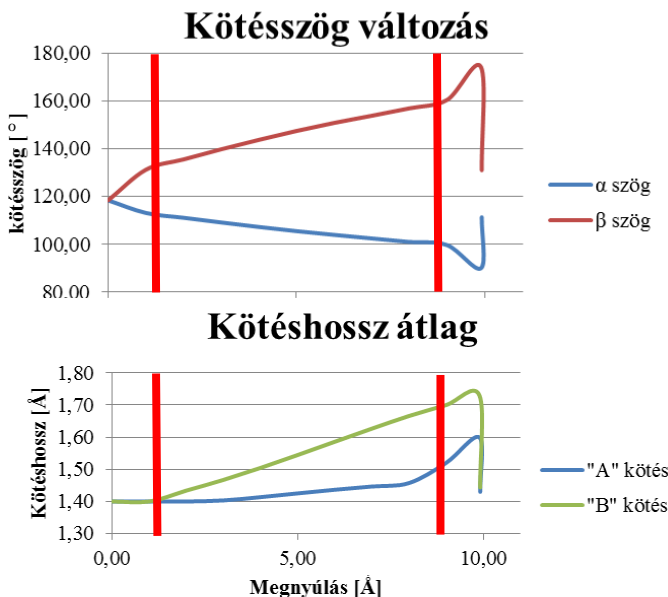
**86. ábra:** A hálózat határrétege, ahol a roncsolódások bekövetkeznek

#### 4.5. Eredmények összefoglalása

Dolgozatom eredményeit összefoglalva mutatom be ebben a fejezetben.

Az általam készített algoritmus ellentmond a Brenner – potenciálfüggvény követelményeinek azzal, hogy a korrekciós függvény az egyensúlyi helyzetből kiindulva módosítja az energetikai potenciálfüggvényt. Csak ezzel a megoldással lehet a szakirodalomban is taglalt problémákat kiküszöbölni. Ezzel a módszerrel, illetve módosítással az erőfüggvényen a korrekciós függvény miatt keletkezett töréspontot sikerült eltüntetni, így a függvény lefutása folytonos lett. Így a számolásokat könnyítettem meg. A további szimulációkból kiderül, hogy az így módosított függvénnyel a szerkezetek mechanikai terheléssel szembeni viselkedése megbecsülhető, oly módon, hogy hol lesz a szerkezetem gyenge pontja. (4.6. fejezet 1. tézis)

A nanocsövek extrém rugalmassága közismert, de a nanocsövek húzása során a szerkezeti deformációk alakulása új megállapítás. Szimulációk során megállapítottam, hogy a nanocsövekben a szerkezeti átalakulás három fázison megy keresztül (példa erre a karosszék típusú nanocső diagramja, mely a 4.3.1. fejezetből már ismert 87. ábra).

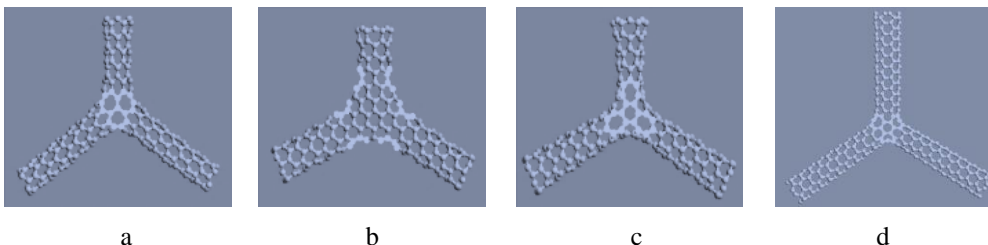


87. ábra: A húzási folyamat három szakasza

Az első szakaszban a 0-1 Å-ig a szerkezet a terhelést úgy veszi fel, hogy a kötéshosszok nem változnak, de a kötés szöget egy hirtelen intenzív változásba kezdenek. A második szakaszban, mely nem olyan meredek, mint az első szakaszban a függvény, de folyamatos változás megy végbe a

szerkezeten, egészen a következő hirtelen változásig. A harmadik szakaszra az mondható el, hogy a nanocsövek a rugalmasságukat ettől a ponttól kezdve veszítik el. Ami azt jelenti, hogy ha a nanocső terhelését e pont előtt megszüntetjük, akkor a szerkezet visszanyeri eredeti állapotát, ha e pont után szüntettem meg akkor maradó alakváltozást szenved. (4.6. fejezet 2. tétel)

A szimmetrikus és aszimmetrikus elágazások mechanikai teherbírások szempontjából két fő csoportra oszthatók. Az aszimmetrikus Y elágazások esetén a felépítő nanocsövek más és más mértékű mechanikai terhelésnek vannak kitéve szerkezetükből adódóan. A 88. ábrán bemutatott elágazások szimulációja során kapott eredményekből létrehoztam az 5. táblázatot.



**88. ábra:** A megfigyelt szerkezetek; **a)** Cikk-cakk nanocsőből készült alapszerkezet; **b)** cikk-cakk transzformált szerkezet; **c)** cikk-cakk plusz atommal erősített szerkezet; **d)** Karosszék nanocsőből készült Y elágazás

A táblázat kitöltéséhez egy erő faktort vezetek be, mellyel a szerkezetekben jelenlévő nanocső típusoknak adok egy jelölést, amivel a terhelhetőségüket határozom meg. Ezzel a számmal rangsort lehet állítani a különböző nanocső típusok között. Ez a faktor a  $\psi$  melyet a következő módon határoztam meg:

$$\Psi = \frac{F_{sz}}{F_{kk}}$$

ahol:

- F<sub>sz</sub>:** A szerkezetre ható maximális erő a roncsolódás pillanatában, mely a nanocső tengelyével párhuzamos
- F<sub>kk</sub>:** A kritikus (roncsolódott) kötésben létrejövő erő a szerkezetre ható maximális erő hatására, természetesen ez minden esetben ugyan annyi, mivel két szénatom közötti kötés megszüntetésére mindig ugyanakkora erő kell (13,453 nN).

A számításoknál a szerkezetet terhelő maximális erőnek mindig a felépítő nanocső tengelyével kell párhuzamosnak lenni, a szerkezetet mindig tengely irányú erők terhelik. A kritikus kötésben ébredő erőnek ugyanakkor semmilyen vetületét nem kell számolni, mivel a két atom közötti erő maximuma a gömbfelület minden irányában értelmezett.

5. táblázat: nanocsövek teherbírásának összehasonlítása

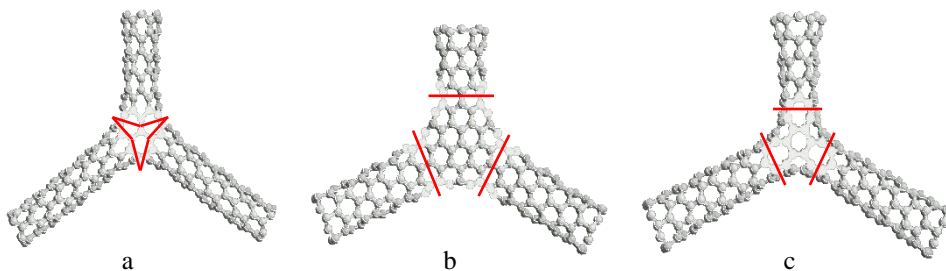
	$\Psi_{\text{alap}}$	$\Psi_{\text{transzformált}}$	$\Psi_{\text{plusz}}$
Y Cikk-cakk	5,73	5,25	5,05
Y Karosszék	4,21	-	-

$\Psi_{\text{alap}}$  Alapszerkezetre vonatkozó érték  
 $\Psi_{\text{transzformált}}$  Transzformált szerkezetre vonatkozó érték  
 $\Psi_{\text{plusz}}$  Plusz atomos szerkezetre vonatkozó érték

A táblázat adataiból megállapítottam, hogy a szerkezeteket felépítő nanocsövek eltérő mechanikai terhelhetőséggel rendelkeznek. Ezáltal az aszimmetrikus Y elágazásoknál a karosszék típusú nanocsövek lesznek mindig a gyengébbek. Ez abból is adódik, hogy a cikk-cakk típusú nanocsövek topológiai módosításai is erősebbek, mint a karosszék típusú nanocsövekből épített elágazás. (4.6. fejezet 3. tézis)

Megállapítottam a táblázatból azt is, hogy az azonos átmérőjű, de különböző felépítésű, más-más topológiával rendelkező nanocső elágazások mechanikai tulajdonsága (szakító szilárdsága) között számottevő eltérés nincsen. (4.6. fejezet 5. tézis)

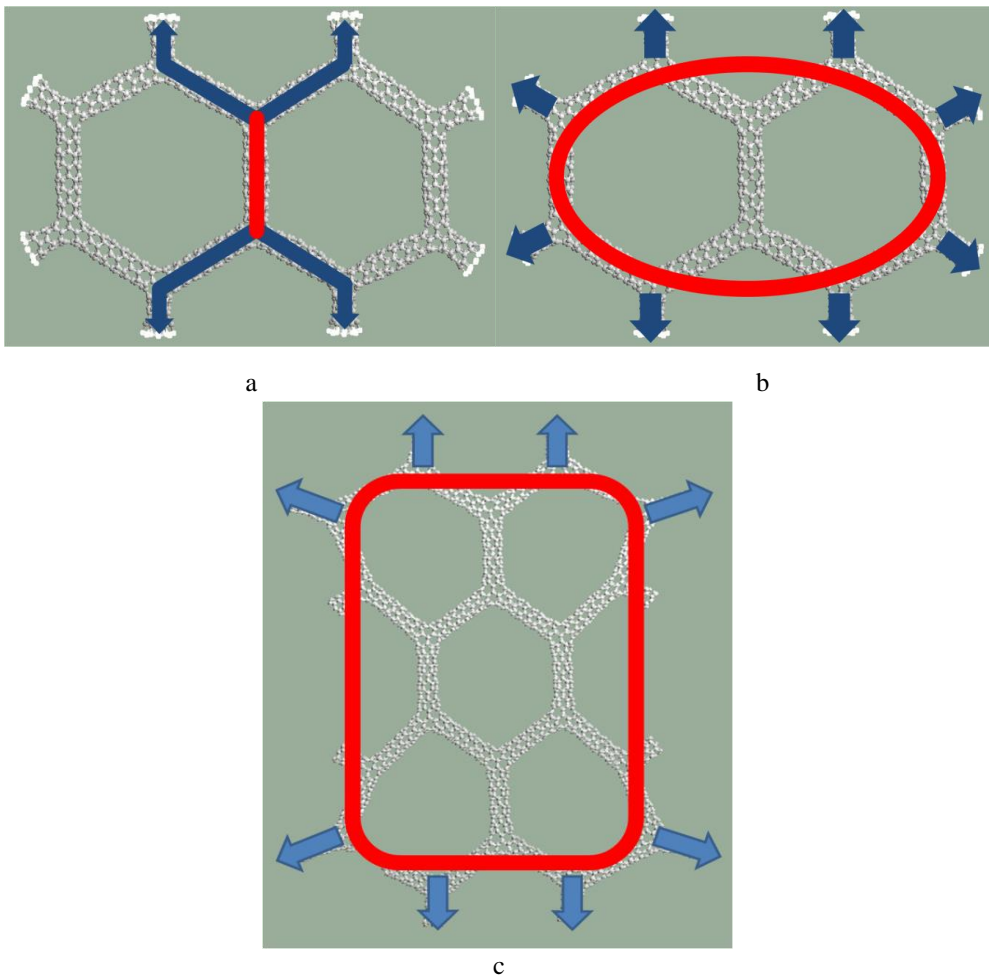
A topológiai módosításokat, amiket elvégeztem, olyan céllal hajtottam végre hogy a szerkezetek gyenge pontja ne a csomópont belsejében, hanem a csomópont határára kerüljenek. Ezek a gyenge pontok ezekben a szerkezetekben, vagy hálózatokban mindig a hétszög gyűrűk közvetlen környezetében található. A hétszög gyűrűk mozgásával tudom a gyenge keresztmetszetet eltolni. Erre a mozgásra mutattam be két példát, melyekkel igazoltam is a célokat, miszerint elmozgattam a gyenge keresztmetszetet. Ezekkel az eljárásokkal a szerkezetekben a roncsolódás helyét mozgattam. Ez a módosítás nagyobb szerkezeteknél is elvégezhető, ezáltal a szerkezet célzottan erősíthető, illetve a kritikus keresztmetszetek a szerkezetek olyan helyére mozgathatók ahol kisebb terhelést kell kibírniuk, ezáltal nő a mechanikai tulajdonság. Bemutatom a módosítások eredményét a 89. ábrán. (4.6. fejezet 4-6. tézis)



89. ábra: A gyenge keresztmetszet áthelyezése



Nagyobb hálózatok vizsgálatánál eltérő terhelő erők hatására a szerkezetekben ébredő feszültségek más és más módon roncsolják a szerkezeteket. Az eredmények összegzése során, melyet a 90. ábrán mutatok be, megállapítottam, hogy a hálózatokra ható tengelyirányú erők attól függően, hogy mely nanocső szakaszok lesznek terhelve ketté is oszthatják a hálózatunkat. Ezeket a megállapításokat is több szimuláció eredményéből következtettem. Megállapítottam, hogyha párhuzamosan terhelem a szerkezetet, akkor a szerkezetben egy nanocsőre koncentrálódik az erőhatás, ezáltal azon lesz a roncsolódott keresztmetszet, természetesen a hétszög gyűrűk közvetlen környezetében. Ha több irányból terhelem a szerkezeteket akkor egy gyűrű jön létre a szerkezetek határán és a roncsolódások ezen a rétegen jönnek létre. (4.6. fejezet 7. tézis)



**90. ábra:** Különböző nanocső szerkezetek és hálózatok különböző terhelésekkel, kiemelve a kritikus keresztmetszeteket pirossal

## 4.6. Új tudományos eredmények

### 1. tézis:

Szén nano szerkezetek molekuláris dinamikai szimulációival megmutattam, hogy a Brenner-potenciálfüggvénynek korrekciós függvénnyel való módosítása során a szerkezet gyenge keresztmetszetének meghatározása pontos marad. Ez a megállapítás azért fontos, mert a kémiai kötések energetikai potenciál függvényei ma még csak az egyensúlyi hely környezetében definiáltak pontosan.

### 2. tézis:

Egyenes szén nanocsövek terhelésvizsgálatainak szimulációival megmutattam, hogy a nagy rugalmasság a kötэшosszak megváltozása mellett a kötэшögeknek a jellemző változásaival, a kötések terhelés irányába való befordulásával is magyarázható. A húzás-szimulációk azt mutatják, hogy a kötések befordulása hamarabb kezdődik meg, amíg a kötэшosszak változása csak később alakul ki.

### 3. tézis:

Molekuláris mechanikai szimuláció alkalmazásával megállapítottam, hogy a legkisebb átmérőkülönbséggel megválasztott cikkcakk és karosszék típusú nanocsövekből álló aszimmetrikus Y elágazásoknál mindig a karosszék típusú nanocsöveknél következett be a roncsolódás.

### 4. tézis:

A molekuláris mechanikai húzás-szimulációk futtatásainak sorozatával megmutattam, hogy a szén nanocső Y elágazások szerkezetében megtalálható hétszög gyűrűk a gyenge keresztmetszetet pontosan meghatározzák. Egy szén nano szerkezetben a leggyengébb hely, azaz elsődleges roncsolódások, a hétszög gyűrűk közvetlen környezetben vannak.

### 5. tézis:

Azonos szén nanocsövekből álló Y elágazásoknak szerkezeti módosításai (hétszögggyűrűk áthelyezései) és molekuláris mechanikai vizsgálatai után megállapítottam, hogy az eltérő csomóponti szerkezettel, de azonos átmérőjű csövekből álló elágazások között mechanikai tulajdonságban számottevő különbség nincsen.

**6. tézis:** Megmutattam, hogy az Y elágazás csomópontjában a topológiai szerkezet megváltoztatásával, azaz a hétszög gyűrűk elmozgatásával a szerkezet gyenge pontja is eltolódik.



**7. tézis:** Nagyobb hálózatok molekuláris dinamikai vizsgálatai során megállapítottam, hogy a húzó-igénybevétel hatására a szerkezetek kétféle képen viselkednek. A párhuzamos terhelés következtében a szerkezetben ébredő feszültségek a szerkezetet azon a nanocső szakaszon roncsolják a hétszög gyűrűk környezetében, ahol az erők koncentrálnak. A több irányból terhelődő szerkezet kettétagolódik. Egy belső részre melyben a feszültségek kisebbek, és egy külső gyűrűre, mely a terhelések nagy részét felveszi, ezáltal a roncsolódási pontok ebben a részben lesznek.



## **5. KÖVETKEZTETÉSEK ÉS JAVASLATOK**

Az általam kidolgozott algoritmus egy kísérleti alapokra helyezett számítási módszer alapján becsüli meg a szerkezetek mechanikai igénybevétellel szembeni tulajdonságát. Az eddigi laboratóriumban végzett kísérleteknek a próbatestét nem tudták meghatározni. Úgy lehet következtetni a nanocső tulajdonságaira, hogy az átmérőből számolható illetve vehető ki a típus. Ebből következően az algoritmus használata előre meghatározott típusú nanocsövekből épült szerkezetek tulajdonságának becslésére használható.

A nanocső szerkezetek vizsgálata során egyértelműen beigazolódtott, hogy a karosszék típusú nanocsövek topológiai felépítéséből következően (vannak olyan kötések a szerkezetben, melyek tengelyirányúak) ez a típus a leggyengébb. A szerkezetek mechanikai tulajdonságát vizsgálva arra a következtetésre jutottam, hogy a szerkezetben szükségszerűen fellelhető hétszög gyűrűk helyzete a szerkezet egészére vonatkozóan nem befolyásolja a mechanikai teherbírást. Viszont igen is befolyásolja a szerkezet gyenge pontját, oly módon hogy a hétszög gyűrűk közvetlen környezetében történt az elsődleges szakadás.

Nanocsövek rugalmasság megállapítottam, hogy miből tevődik össze egy nanocső nyúlása. Két fő részből áll a deformáció. Első részben a nanocsőben található atomi kötések a terhelés irányába fordulnak be, mindaddig, amíg az egymáshoz közeledő atomok el nem érik azt a helyet a szerkezetben, ahol az egymásra ható vonzó és taszító hatások még kiegyenlítik egymást. A második részben következik be az atomok egymástól való távolodása, azaz kezdenek el nőni a kötéshosszak.

A makro anyagokhoz nem hasonlítható a szén nanoszerkezet mechanikai igénybevétellel szembeni viselkedése. A hálózatok felépítése két részre osztható. Minden esetben van egy belső, testrész, és van egy, ezt a testet körülvevő héjszerkezet, mely a terhelés nagyobb részét veszi fel. Ezen a körbevevő héjszerkezeten alakulnak ki a roncsolódási pontok.

A tudomány fejlődése lehetővé fogja tenni, hogy a szén nanocsövekből kifejezetten a kitűzött célokhoz készítsenek megfelelő szerkezetet. Ebben az esetben ezek a szerkezetek oly módon lesznek megtervezhetőek, mint egy ma használatos bármilyen szerszám vagy készülék. Algoritmusom számolási módszere alapul szolgálhat majd egy később kifejlesztésre kerülő 3D-s tervező szoftvernek. Ezzel a szoftverrel a szén nanocsövekből felépülő szerkezeteket lehet majd megmodellezni, illetve különböző mechanikai igénybevétellel terhelni. Meg lehet becsülni majd a szerkezet teherbíró képességét és a cél érdekében lehet módosítani a szerkezet felépítését.



## 6. ÖSSZEFOGLALÁS

### TÖBBDIMENZIÓS NANOCSŐ SZERKEZET HÚZÁSÁNAK MODELLEZÉSE

Szén nanocső Y elágazások jelentősége két nagyon fontos tulajdonság miatt kiemelkedő:

- Mivel a szén nanocső Y elágazások 3 csatlakozó csőágból állnak, ezért alkalmas ipari technológia megtalálása után a molekuláris félvezető technika alapvető elemei lehetnek. A szakirodalom szerint már bizonyított, hogy szén nanoszerkezetek esetében a molekuláris méretű tranzisztorok Y elágazásokról készülhetnek.
- A szén nanocsövek az extrém magas szilárdságukat a nagyon erős kovalens kötésekkel rendelkező graféntól öröklik. Az extrém magas szilárdság azonban csak tengelyirányban adódik. A szén nanocső elágazások lehetnek azok a szerkezetek, amelyekből felépülő hálózatokban az extrém magas szilárdság a tér több irányában is adódik.

Ebben a munkában az utóbbi probléma, a szén nanocső Y elágazások és a belőlük felépülő hálózatok mechanikai tulajdonságainak vizsgálatát tűztem ki célul. Molekuláris mechanikai algoritmus segítségével húzás-szimulációkat végeztem először szén nanocső Y elágazásokon, azután Y elágazásokról álló kisebb-nagyobb hálózat szerkezeteken. Az algoritmus alapja az volt, hogy az atomi erő a kémiai kötések leíró energetikai potenciálfüggvény gradienseként határozható meg. A Brenner-potenciált választottam a számításokhoz. A Brenner-potenciál empirikus formula, de a kísérletekhez való illesztés csak az egyensúlyi környezet közvetlen környezetében bizonyított. A húzás-szimulációk során, terhelt szerkezeteknél azonban az atomi erő függvénynek az egyensúlyi helyzettől távolabbi szakaszaira is szükség van. Itt azonban a kísérleti adatokhoz való illesztés ma még csak nagyságrendileg megoldható. A munka első részében tehát meg kellett vizsgálnom, milyen feladatokra alkalmazható ilyen pontosság mellett reálisan a molekuláris mechanikai algoritmus. Azt találtam, hogy reálisan vizsgálható adott szén nanoszerkezet tönkremenetelének folyamata, a gyenge helyek meghatározása, valamint különböző szerkezetek tönkremenetelének összehasonlítása.

Különböző szerkezetű Y elágazások húzás-szimulációit végeztem el. Azt találtam, hogy a szerkezet topológiája meghatározza a tönkremenetelt, a gyenge helyek a hétszög gyűrűk közvetlen környezetében adódnak.

A húzás-szimulációk során megfigyeltem a kötések hosszának és a kötőszögeknek az alakulását. Azt találtam, hogy a folyamat első szakaszában a kötések befordulnak a terhelés irányába, a kötéshosszak növekedése csak később megy végbe, összességében a két jelenséggel együttesen magyarázható a szén nanoszerkezetek extrém rugalmassága.

Végül Y elágazásokról szerkesztett hálózatok kisebb-nagyobb részleteit vizsgáltam. A húzás-szimulációk eredményeiből megállapítást tettem arra, hogy különböző terhelési esetekben hol kezdődik meg a tönkremenetel.



## 7. SUMMARY

### LOADING SIMULATION OF MULTI-DIMENSIONED NANOTUBE STRUCTURE

Y branching in carbon nanotubes is of paramount importance because of at least two features:

- As Y branches contain 3 joint tube elements, they may become the basic units of molecular electronics provided that a proper industrial production technology is found. It has been proved in the literature that in the case of carbon nanostructures molecular size transistors may consist of Y branches.
- The extremely high strength of carbon nanotubes is due to the very strong covalent bonds of graphene. They exhibit this extremely high strength only in the axial direction. Carbon nanotube branching can be a structural unit which, organized into a network might allow the extension of extreme strength into various spatial directions.

This work aims at the investigation of the latter problem, the mechanical properties of carbon nanotube Y branches and of networks consisting of them. Tensile simulations were performed by molecular mechanical algorithm first on carbon nanotube Y branches then on smaller or larger network structures consisting of Y branches. The basis of the algorithm was that the atomic force can be determined as the gradient of an energetic potential function describing the chemical bonds. The Brenner potential was chosen for the calculations. The Brenner potential is an empirical equation, but the fitting to the experimental data is proven only in the immediate neighborhood of the equilibrium structure. In the tensile simulations, however, parts of the potential function farther from the equilibrium position are also needed. In such cases however, only an order of magnitude agreement with the experimental data can be achieved nowadays. In the first part of my work therefore I had to investigate what kind of problems can be solved realistically with the presently available precision of the molecular mechanical algorithm. I found that it is possible to study realistically the failure process of the given carbon nanostructure, it is possible to identify the weak sites and it is possible to compare the failure of various structures.

Tensile simulations of Y branches of various structures have been performed. It was found that the failure is determined by the topology of the structures, weak spots occurred in the immediate neighborhood of 7-membered rings.

During the tensile simulations the changes in bond length and bond angle values were monitored. It was found that in the first stage of the process the bonds turn towards the load direction, bonds become elongated only later, these two phenomena together explain the extreme elasticity of carbon nanostructures.

Finally smaller or larger portions of networks consisting of Y branches were investigated. From the results of the tensile simulation it was concluded where is the failure process initiated under various loading conditions.

## SUMMARY

---



**8. MELLÉKLETEK**

1. számú melléklet: IRODALOMJEGYZÉK
2. számú melléklet: TÉMÁVAL KAPCSOLATOS PUBLIKÁCIÓK

**M1. Irodalomjegyzék**

- Agrawal PM, Sudalayandi BS, Raff LM, Komanduri R. Molecular dynamic (MD) simulations of the dependence of C-C bond lengths and bond angles on the tensile strain in single-wall carbon nanotubes (SWCNT). *Comput. Mater. Sci* 2008;41:450-456.
- Andrews R., Weisenberger M.C., *Current Opinion in Solid State and Materials, Science* 8(1):31-37, 2004.
- Amelinck S., Zhang X.B., Bernaerts D., Zhang X.F., Ivanov V., Nagy J.B., A Formation Mechanism for Catalytically Grown Helix Shaped Graphite Nanotubes, *Science* 265:635, 1994.
- Areshkin D. A., White C.T.: Building blocks for integrated graphene circuits, *Nanoletters*, Vol. 7, No. 11, 3253-3259, 2007.
- AuBuchon JF, Chen LH, Daraio C, Jin SH. Multibranching carbon nanotubes via self-seeded catalysts. *Nanoletters* 2006; 6: 324-328.
- Bandaru PR, Daraio C, Jin S, Rao AM. Novel electrical switching behaviour and logic in carbon nanotube Y junctions. *Nature Materials* 4:663-666, 2005
- Belytschko T, Xiao SP, Schatz GC, Ruoff R. Atomistic simulations of nanotube fracture. *Phys. Rev. B* 2002;65:235430-1-8.
- Biró L.P., Lazarescu S.D., Thiry P.A., Fonseca A., Nagy J.B., Lucas A.A., Lambin Ph., Scanning Tunneling Microscopy Observation of Tightly Wound, Single-Wall Coiled Carbon Nanotubes, *Europhysics Letters*. 50:494-500, 2000.
- Biro L P, Ehlich R, Osvath Z, Koos A A, Horvath Z E, Gyulai J, et. al. From straight carbon nanotubes to Y-branched and coiled carbon nanotubes. *Diamond Relat. Mater.* 11:1081–5, 2002
- Biró L.P., Márk G.I., Koós A.A., Nagy J.B., Lambin Ph., Coiled Carbon Nanotube Structures with Supraunitary Nonhexagonal to Hexagonal Ring Ratio, *Physical Review B*. 66:165405-1 - 165405-6, 2002b.
- Biró L.P., ÚJSZERŰ SZÉN NANOCső ARCHITEKTÚRÁK, *Magyar Tudomány* 9:1122, 2003.

- Brenner DW, Shenderova OA, Harrison JA, Stuart SJ, Ni B, Sinnott SB. A second- generation reactive empirical bond order (REBO) potential energy expression for hydrocarbons. *J.of Phys.* 2002;14:783-802.
- Brenner DW. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films. *Phys. Rev. B* 1990;42:9458-9471,.
- Buchoux J., Aime, J.P., Boisgard R., Nguyen C.V., Buchaillet L., Marsaudon S., Investigation of the carbon nanotube AFM tip contacts: free sliding versus pinned contact, *Nanotechnology*, 20(47):475701, 2009.
- Chae H.G., Sreekumar T.V., Uchida T., Kumar S., Morphology and Modulus of nanotubes in polyacrylonitrile fiber, *Polymer* 46(24):10925-10935, 2005.
- Chang T.E., Kisliuk A., Rhodes S.M., Brittain W.J., Sokolov A.P., Conductivity and mechanical properties of well-dispersed single-wall carbon nanotube/polystyrene composite, *Polymer* 47(22):7740-7746, 2006.
- Chernozatonskii L A. Carbon nanotube elbow connections and tori. *Phys. Rev. Letters A* 170:34-40, 1992
- Choi WB, Kim DH, Choi YC, Huang J. Y-junction single-wall carbon nanotube electronics *JOM* 2007;59:44-49.
- Choi YC, Choi WB. Synthesis of Y-junction single-wall carbon nanotubes. *Carbon* 2005;43:2737-2741
- Coluci VR, Galvao DS, Jorio A. Geometric and electronic structure of carbon nanotube networks: 'super'-carbon nanotubes. *Nanotechnology* 17:617–621, 2006
- Coluci VR, Galvao DS, Jorio A. Geometric and electronic structure of carbon nanotube networks: 'super'-carbon nanotubes
- Coulson C.A. Valence, Early Ideas in the History of Quantum Chemistry, Oxford University Press 1952.

- Demczyk BG, Wang YM, Cumings J, Hetman M, Han W, Zettl A, Ritchie RO. Direct mechanical measurement of the tensile strength and elastic modulus of multiwalled carbon nanotubes. *Mater. Sci. and Eng. A* 2002;334:173-178.
- Devaux X, Yu S, Tsareva AN, Zharikov EV, McRae E. Formation mechanism and morphologie of large branched carbon nano-structures. *Carbon* 47:1244-1250, 2009
- Ding D.Y., Wang J.N., Cao Z.L., Dai J.H., Yu F., Ni-Ni3P alloy catalyst for carbon nanostructures, *Chemical Physics Letters* 371:333-336, 2003.
- Dogossy G., Sági E., Ronkay F.: Investigation of mixing processes of polymer composites, *Materials Science Forum*, 729, 332-337, 2012.
- Duan WH, Wang Q, Liew KM, He XQ. Molecular mechanics modelling of carbon nanotube fracture. *Carbon* 2007;45:1769-1776.
- Dunlap B I. Connecting Carbon tubules. *Phys. Rev. B* 46:1933–6, 1992
- Fu CX, Chen YF, Jiao JW. Molecular dynamics simulation of the test of single-walled carbon nanotubes under tensile loading. *Sci. in China E* 2008;50:7-17.
- Fu D, Zeng X, Zou J, Quian H, Li X, Xiong X. Direct synthesis of Y-junction carbon nanotubes by microwave-assisted pyrolysis of methane. *Materials Chemistry and Physics* 2009;118:501-505.
- Graner G. Carbon nanonets spark new electronics, *Scientific American* 5:58-65, 2007.
- Graovac A., Laszlo I., Pisanski T., *Match-Communications in Mathematical and in Computer Chemistry* 60:917-926, 2008.
- Hafner J.H., Cheung C.L., Woolley A.T., Lieber C.M., Structural and functional imaging with carbon nanotube AFM probes, *Progress Biophys. Molec. Biol.* 77(1):73-110, 2001.
- Hargitai H., Dogossy G., Sagi E., Ibriksz T., Stifter J: *Műanyag nanokompozitok előállítása és vizsgálata, Magyar Tudomány, Július* (2012) 4-14.

- Heyning O.T., Bernier P., Glerup M., A low cost method for the direct synthesis of highly Y-branched nanotubes, *Chemical Physics Letters* 409:43-47, 2005.
- Hilhorst H.J., Planar Voronoi cells: the violation of Aboav's law explained, *Journal of Physics A Math. and General* 39 (23):7227-7243, 2006.
- H.W. Lee, Kim S.H., Kwak Y.K., Lee E.S., Han C.S., The effect of the shape of a tip's apex on the fabrication of an AFM tip with an attached single carbon nanotube, *Sensors and Actuators A: Phys.* 125(1):41-49, 2005.
- Ihara S., Itoh S., Kitakami J., Toroidal forms of graphitic carbon, *Physical Review B.* 47:12908-12911, 1993.
- Ihara S., Itoh S., Helically coiled and toroidal cage forms of graphitic carbon, *Carbon* 33:931, 1995.
- Iijima S., Helical micro-tubules of graphitic carbon, *Nature*: 345:56-58, 1991.
- Jeng Y.R., Tsai P.C., Fang T.H., Effects of temperature and vacancy defects on tensile deformation of single-walled carbon nanotubes, *J. of Phys. and Chemistry of Solids* 65:1849-1856, 2004.
- Kelley B.T. *Physics of Graphite.* Applied Science, London, 1981.
- Kónya Z., Vesselényi I., Niesz K., Kukovecz A., Demortier A., Fonseca A., Delhalle J., Mekhalif Z., Nagy J.B., Koós A.A., Osváth Z., Kocsonya A., Biró L.P., Kiricsi I., Large scale production of short functionalized carbon nanotubes, *Chemical Physics Letters* 360(5-6):429-435, 2002.
- Kürti J., Szén nanocsövek, *Fizikai Szemle* 3:106, 2007.
- Laakkonen J., Nieminen R.M., Molecular dynamics studies of quenching, *J.of Non-Cryst.Solids* 75:237,1985.
- Lambin Ph., Márk G.I., Biró L.P., Structural and electronic properties of coiled and curled a large number of pentagon–heptagon pairs *Phys.Rev.B* 67: 205413, 2003
- László I., CP486, *Electronic Properties of Novel Materials*, Ed. by H. Kuzmany et. al., (The Amer. Inst. of Phys. Melville, New York p. 355, 1999.

- László I., Rassat A., *International Journal of Quantum Chemistry* 84:136-139, 2001.
- László I., in: Buzaneva E., Scharf F. (eds.) *NATO Science Series II. Mathematics and Chemistry*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston, London, 152:11-18, 2004.
- László I., Construction of atomic arrangement for carbon nanotube junctions, *Phys. Stat. Sol. B* 244(11):4265–4268, 2007.
- László I., Zsoldos I.: Graphene-based molecular dynamics nanolithography of fullerenes, nanotubes and other carbon structures, *Europhysics Letters*, 99:(63001), 1-5., 2012a.
- László I., Zsoldos I.: Molecular dynamics simulation of carbon nanostructures: The C60 buckminsterfullerene, *Physica Status Solidi B-Basic Solid State Physics* 249: 2616-2619., 2012.
- Li J., Papadopoulos C., Xu J.M., Growing Y-junction carbon nanotubes, *Nature* 402:253, 1999.
- Liu J., Rinzler A.G., Dai H., Hafner J.H., Bradley R.K., Boul P.J., Lu A., Iverson T., Shemilov K., Huffman C.B., Rodriguez-Macias F., Shon Y.S., Lee T.R., Colbert D.T., Smalley R.E., Fullerene pipes, *Science* 280:1253, 1998.
- Liu Q., Liu W., Cui Z.M., Song W.G., Wan L.J., Synthesis and characterization of 3D double branched K junction carbon nanotubes and nanorods, *Carbon* 45:268-273, 2007.
- Lorie O., Wagner H.D. *Micro and Nano Mechanical Testing of Materials and Devices*, *Appl.Phys.Lett* 73:3527, 1998.
- Menon M., Andriotis A.N., Srivastava D., Carbon nanotube "T junctions": Nanoscale metal-semiconductor-metal contact devices, *Physical Review Letters* 91(14): 145501-1, 2003.
- Meo M., Rossi M., Tensile failure prediction of single wall carbon nanotube, *Engineering Fracture Mechanics* 73:2589-2599, 2006.
- Mintmire J.W., Dunlap B.I., White C.T., Are fullerenes tubules metallic?, *Physical Review Letters* 68:631-634. 1992.

- Morse P.M. Dinamical molekular according to the wave mechanics II. Vibration levels. *Physical Review* 1929 pp. 57-64
- Mylvaganam K., Zhang L.C., Important issues in a molecular dynamics simulation for characterising the mechanical properties of carbon nanotubes, *Carbon* 42:2025-2032, 2004.
- Nakada K., Maeda K., Daigoku K., J, Topology and electronic structure of nanotube junctions of tetrapod shape, *Math Chem* 45:460–470, 2009.
- Nemes Incze,P.;Osváth,Z.;Kamarás,K.;Biró,L.,P.: Anomalies in thickness measurements of graphene and few layer graphite crystals by tapping mode atomic force microscopy, *Carbon* **46**, 1435, 2008.
- Nemes-Incze P., Magda G., Kamarás K., Biró L.P.: Crystallographically selective nanopatterning of graphene on SiO<sub>2</sub>; *Nano Research* 3, 110, 2010.
- Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Katsnelson M.I., Grigorieva I.V., Dubonos S.V., Firsov A.A.: Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene, *Nature*, 438, 197-200, 2005.
- Orowan E. Fracture and strength of solids. *Rep. Prog. Phys.* 12:185-232, 1949.
- Osváth Z., Koós A.A., Horváth Z.E., Gyulai J., Benito A.M., Martínez M.T., Maser W.K., Biró L.P., Arc-Grown Y-Branched Carbon Nanotubes Observed by Scanning Tunneling Microscopy (STM), *Chemical Physics Letters*. 365, 338-342, 2002.
- Papadopoulos C., Rakitin A., Li J., Vedeneev A.S., Xu J.M., Electronic transport in Y-junction carbon nanotubes, *Phys. Rev. Lett.* 85(16):3476, 2000.
- Polanyi M., Über die Natur des Zerreibsvorganges. *Z. Phys.* 7:323-327, 1921.
- Ponomareva I., Chernozatonskii L.A., Andriotis A.N., Menon M., Formation pathways for single-wall carbon nanotube multiterminal junctions *New Journal of Physics* 5:119.1–119.12, 2003.

- Réti T., Zsoldos I., A possible extension of the Aboav. Weaire law, *Mater. Sci. Forum* 473-474:389-398, 2005.
- Romhány G., Szabéni G.: Preparation of MWCNT reinforced epoxy nanocomposite and examination of its mechanical properties, *Plastics, Rubber and Composites*, 37. 214-218, 2008.
- Romhány G., Szabéni G.: Interlaminar crack propagation in MWCNT/fiber reinforced hybrid composites, *Express Polymer Letters*, 3. 145-151, 2009.
- Romo-Herrera J.M., Terrones M., Terrones H., Dag S., Meunier V., Covalent 2D and 3D networks from 1D nanostructures: Designing new materials, *Nanoletters* 7:570-576, 2007.
- Ryoo J., Hajela P., Suhr J., Koratkar N., Estimation of Young's modulus of single-walled carbon nanotube using cellular automata, *Advances in Engineering Software*, 38(8-9):531-537, 2007.
- Saito R., Fujita M., Dresselhaus G., Dresselhaus M.S., Electronic structure of chiral graphene tubules, *Applied Physics Letters* 60:2204-2206, 1992.
- Shenderova O.A., Brenner D.W., Omeltchenko A., Su X., Yang L.H., Atomistic modeling of the polycrystalline diamond, *Phys. Rev. B* 61:3877-3888, 2000.
- Su C.J., Hwang D.W., Lin S.H., Jin B.Y., Hwang L.P., "Self-Organization of Triple-Stranded Carbon Nanoropes, *Phys.Chem.Comm.* 5:34-36, 2002.
- Stone, A. J.; Wales, D. J. Theoretical studies of icosahedral C<sub>60</sub> and some related structures. *Chemical Physics Letters* 128 (5-6): (1986) 501–503
- Szabéni G., Romhány G.: The effect of electron irradiation on the mechanical properties of MWCNT/carbon fiber reinforced hybrid nanocomposites, *Materials Science Forum*, 659, 91-95, 2010.
- Szentes A., Horváth G.: Mechanical properties of polypropylene/multi walled carbon nanotube composites, *Hungarian Journal of Industrial Chemistry*, 38(1), 67-70, 2010.
- Szentes A., Horváth G., Varga Cs., Harrach G.: Effect of multi-walled carbon nanotube content on dynamic mechanical properties and crystallinity of



polypropylene composites, Hungarian Journal of Industrial Chemistry ,  
Veszprém, vol. 39(1), 113-116, 2011.

Szentes A., Varga Cs., Horváth G., Bartha L., Kónya Z., Haspel H., Dzél J.,  
Kukovecz Á.: Electrical resistivity and thermal properties of  
compatibilized multi-walled carbon nanotube/polypropylene composites,  
Express Polymer Letters, 6, 494-502, 2012.

Tans S.J., Verschueren A.R.M., Dekker C., Room-temperature transistor  
based on a single carbon nanotube Nature, 393: 49, 1998.

Tapasztó L., Dobrik G., Lambin P., Biró, L.P.: Tailoring the atomic structure  
of graphene nanoribbons by scanning tunnelling microscope lithography,  
Nature Nanotechnology 3, 397, 2008.

Tasci E., Erkoç S., J. An algorithm for constructing various kinds of  
nanojunctions using zig-zag and armchair nanotubes, Nanosci. Nanotech.  
7 (4-5): 1653-1661, 2007a.

Tasci E., Ph.D. Thesis, The Graduate School of Natural and Applied Sciences  
of Middle East Technical University, Ankara, 2007b.

Terrones H., Terrones M., Hernandez E., Grobert N., Charlier J.C., Ajayan  
P.M., New metallic allotropes of planar and tubular carbon, Physical  
Review Letters 84:1716-1719, 2000.

Terrones M., Banhart F., Grobert N., Charlier J.C., Terrones H., Ajayan  
P.M., Molecular junctions by joining single-walled carbon nanotubes,  
Phys. Rev. Lett. 89(7): 075505-1, 2002.

Ting J.M., Li T.P., Chang C.C., Carbon nanotubes with 2D and 3D multiple  
junctions, Carbon 42:2997-3002, 2004.

Treacy M.M.J., Ebbesen T.W., Gibson J.M., Exceptionally high Young's  
modulus observed for individual carbon nanotubes, Nature: 381:678-680,  
1996.

Weaire D., Rivier N., Soap, Cells and Statistics - Random Patterns in Two  
Dimensions, Contemp Phys. 25,1: 55-99, 1984.

Xinghui L., Changchun Z., Yukui L., Energy band structure effect of  
individual carbon nanotubes on field emission, Physica B 344:243. 2004.

- Yakobson B.I., Samsonidze G., Samsonidze G.G., Atomistic theory of mechanical relaxation in fullerene nanotubes, *Carbon* 38:1675-1680, 2000.
- Yao Z., Postma H.W.Ch., Balents L., Dekker C., Carbon nanotube intramolecular junctions, *Nature* 402:273, 1999.
- Yao Z.Y., Zhu X., Li X.X., Xie Y., Synthesis of novel Y-junction hollow carbon nanotrees, *Carbon* 45:1566-1570, 2007.
- Yu M.F., Lourie O., Dyer M.J., Moloni K., Kelly T.E., Ruoff R.S. Strength and breaking mechanism of multiwalled carbon nanotubes under tensile load, *Science*, 287:637-640, 2000a.
- Yu M.F., Files B.S., Arepalli S., Ruoff R., Tensile loading of ropes of single nanotubes and their mechanical properties, *Phys. Rev. Lett.*, 84:5552-5555., 2000b.
- Wei D., Liu Y. The Intramolecular Junctions of Carbon Nanotubes, *Advanced Materials* 20:2815–2841, 2008.
- Zeng Z.X., Yu Y.L., Zhang J.Y., J. Electrochemical Corrosion Behavior of Carbon Nanotube-Doped Hard Chromium Coatings Electrodeposited from Cr(III) Baths, *Electrochem. Soc.*, 156(4):C123-C126, 2009.
- Zhang Y., Shi Z., Gu Z., Iijima S., Structure modification of single-wall carbon nanotubes, *Carbon* 38(15):2055-2059, 2000.
- Zhen Shu, Davies G.H., *Phys. Stab. Sol. (a)* 78:595,1983.
- Zsoldos I., Kakuk Gy., Réti T., Szász A.: Geometric construction of carbon nanotube junctions, *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 12:1-16, 2004.
- Zsoldos I., Kakuk Gy., Janik J., Pék L.: Set of carbon nanotube junctions *Diamond Rel. Mater.*, 14(3-7):763-765, 2005.
- Zsoldos I., László I.: Computation of the loading diagram and the tensile strength of carbon nanotube networks *Carbon* 4(7):1327–1334, 2009.
- Zsoldos I.: Planar trivalent polygonal networks constructed by carbon nanotube Y-junctions, *JOURNAL OF GEOMETRY AND PHYSICS* 61, 37-45, 2011.



## M2. Témával kapcsolatos publikációk

### Lektorált cikk világnyelven

**Pataki, T.**, Zsoldos, I., Molecular mechanics simulations on carbon nanotube Y-junctions, Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, 2014 (under review) (IF.: 0.76\*)

**Pataki, T.**, Kári-Horváth, A. , Szakál, Z. , Drawing process of carbon nanotube "Y" junctions, Mechanical engineering letters: R&D :10, 2013 pp. 140-144.

**Pataki, T.**, Kári-Horváth A., Carbon nanostructures behaviour on the strength of different atomic force function, Mechanical engineering letters: R&D 9, 2013 pp. 112-117.

**Pataki, T.**, Zsoldos, I., Loading simulations of carbon nanotube junctions; Material science forum 729: 2012 pp. 162-168.

**Pataki, T.**, Szakál, Z., The symmetrical behaviour of carbon nanotubes junctions, Sustainable construction & design 2, 2011 pp. 128-133.

Zsoldos, I., Kakuk, Gy., **Pataki, T.**, Theoretical Models for Some Possible Elements of Carbon Nanotubes Networks; Mechanical engineering letters: R&D 3, 2009 pp. 120-132.

**Pataki, T.**, Kakuk, Gy., Zsoldos I., Dynamical Behaviour of Carbon Nanotube, Diamond and related materials 15, 2006 pp. 288-291., (IF.:1,935)

### Lektorált cikk magyar nyelven

**Pataki T.**, Nanoszerkezetek Szakítóvizsgálatának Szimulációja; GÉP 2011/1-2, 2011, 64-66 o.

**Pataki T.**, Szakál Z., Polimerek erősítésére alkalmas szén nanoszerkezetek mechanikai teherbírásának vizsgálata, Műanyag és Gumi 2014/3, 2014, 112-114 o.

**Pataki T.**, Molekuláris szimulációk szén nanoszerkezeteken, *Anyagok világa* 2014/3-4, 2014 8 o. (megjelenés alatt)

**Pataki T.**, Kári-Horváth A., Műanyag alkatrészek erősítésének módszerei szén nanoszerkezetekkel, *GÉP* 2014/3, 2014, 38-41 o.

### **Nemzetközi konferencia kiadvány**

**Pataki, T.**, Keresztes, R., The topological change of carbon nanotube structures under loading tensile, Debrecen, 2013. 5 p. (ISBN:978-963-473-623-3)

**Pataki, T.**, Zsoldos, I., Can the topology of the carbon nanotube junction determine the mechanical behaviour? Miskolc; Lillafüred: 2012. 1 p. (ISBN:978-963-08-4874-9)

**Pataki, T.**, Zsoldos I., Carbon nanotube networks and their fields os application, International Conference of Multidisciplinary Engineering. Nagybánya, Románia, 2009, pp. 89-95.

### **Nemzetközi konferencia abstract**

**Pataki, T.**, Kakuk, Gy., Zsoldos, I., Dynamical Behaviour of Carbon Nanotubes; Prague, Euromat 2005, 2005 p. 142

**Pataki, T.**, Kakuk, Gy., Zsoldos, I., Change of form of carbon nanotubes induced by stone-wales, Synergy 2009, Gödöllő, 2009. p. 136. (ISBN:978-963-269-111-4)

### **Egyéb**

**Pataki T.**, Nanoszerkezetek Szakítóvizsgálatának Szimulációja, Magyar Karbantartási Konferencia, előadás 2010.

## ***KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS***

Köszönetet mondok Dr. Zsoldos Ibolyának témavezetőmnek, hogy lehetőséget biztosított munkám sikeres elvégzéséhez és dolgozatom megírásához. Köszönöm segítőkész támogatását és dolgozatom alapos és kritikus átnézését.

Hálás vagyok a Gépipari Technológiai Intézet minden dolgozójának, akik nélkülözhetetlen szakmai tanácsaikkal, önzetlen támogatásukkal alapvetően hozzájárultak szakmai fejlődésemhez és sikeres munkámhoz.

Kiemelten kell köszönetet mondanom Dr. Kalácska Gábornak hasznos szakmai tanácsaiért és segítőkészségéért.

Kollégáim közül ki kell, hogy emeljek három kollégát, Dr. Kakuk Gyulát, Dr. Lefánti Rajmundot és Dr. Kári-Horváth Attilát, akik szakmai tapasztalatukkal és ösztönző hozzáállásukkal segítették munkámat.

Köszönetet mondok a Szent István Egyetem Doktori Tanács Titkárságának, hogy mindig a segítségemre voltak.

A kutatás a "Járműipari anyagfejlesztések" című TÁMOP-4.2.2.A-11/1/KONV-2012-0029 azonosító számú projekt támogatásával valósult meg.

Valamint köszönetet mondok annak a három embernek, akik a legtöbbet jelentik az én Életemben. Rájuk támaszkodva, illetve bennük bízva jutottam el idáig, hogy elkészíthettem dolgozatom. Ők nem mások, mint párom, Kamenszki Anita; nagybátyám Tóth József, és a legfontosabb az Édesanyám, Tóth Lídia.