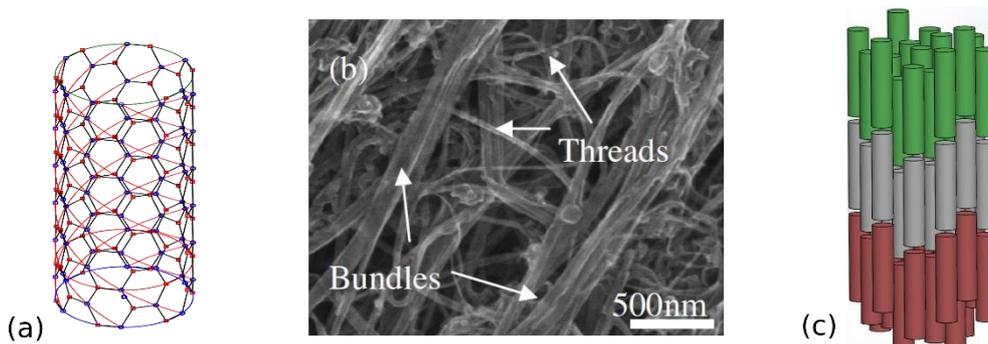


## Aufgabenstellung für einen großen Beleg / Studienarbeit / Diplomarbeit

### Modellierung von CNT-Bündeln mittels der Molekülmechanik

Kohlenstoffnanoröhren (Carbon Nanotubes, CNT) weisen als Mitglieder der Fulleren-Familie außerordentliche mechanische Eigenschaften auf, wie beispielsweise einen hohen E-Modul und eine ausgezeichnete Zugfestigkeit. Diese Eigenschaften möchte man sich für neuartige Fasern zunutze machen um die Eigenschaften heutiger kommerziell verfügbarer Kohlenstofffasern zu übertreffen. Experimentelle Untersuchungen (Abb. (b)) haben gezeigt, dass die Festigkeit der gesamten Faser maßgeblich von den mechanischen Eigenschaften der Bündel beeinflusst wird [Yang 2015]. In Vorarbeiten an der Professur wurde auf Basis des Strukturmodells einer CNT (Abb. (a)) ein vereinfachtes Modell eines Bündels (Abb.(c)) erstellt und dessen mechanische Eigenschaften in verschiedenen Konfigurationen numerisch simuliert. Auf der Basis dieses Modelles soll untersucht werden, wie die mechanischen Eigenschaften des Bündels verbessert werden können und wie das Bündelmodell, in Anlehnung an eine reale CNT Faser, weiter detailliert werden kann. Des Weiteren soll die Möglichkeit untersucht werden, dass bestehende Bündelmodell um die Verwendung des molekularen strukturmechanischen Ansatzes zur Modellierung einzelner Nanoröhren zu erweitern [Eberhardt 2019].


**Literatur:**

Yang, Zhong-Jun, et al. "Detailed investigation on elastoplastic deformation and failure of carbon nanotube fibers by monotonic and cyclic tensile experiments." *Carbon* 94 (2015): 73-78.

O. Eberhardt and T. Wallmersperger, "Advanced molecular structural mechanics model for carbon nanotubes incorporating the 2nd generation rebo potential", *International Journal of Engineering Science*, vol. 144, p. 103-137, 2019

**Voraussetzungen:**

Hoher Selbstantrieb und die Bereitschaft sich in ein neues, interdisziplinäres Fachgebiet einzuarbeiten. Kenntnisse im Umgang mit MATLAB wünschenswert. Grundkenntnisse in numerischer Mathematik (auch nichtlinear) sind hilfreich.

**Kontakt:**

Dipl.-Ing. Daniel Mählich, [daniel.maehlich@tu-dresden.de](mailto:daniel.maehlich@tu-dresden.de), 0351/46339401

*Postadresse (Briefe)*

Technische Universität Dresden  
Institut für Festkörpermechanik  
01062 Dresden

*Postadresse (Pakete u.ä.)*

Technische Universität Dresden  
Institut für Festkörpermechanik  
Helmholtzstraße 10  
01069 Dresden

*Besucheradresse*

Sekretariat:  
George - Bähr- Str. 3c  
Zeuner - Bau 211

*Internet*

<http://www.tu-dresden.de>



**DRESDEN  
concept**  
Exzellenz aus  
Wissenschaft  
und Kultur