

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ
ΠΟΛΥΤΕΧΝΙΚΗ ΣΧΟΛΗ
ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Εργαστήριο Ρευστομηχανικής & Στροβιλομηχανών

Μεταπτυχιακή Εργασία

Αριθμητική Μελέτη Στατικής Παραμόρφωσης Φυσαλίδας με Ελαστικό Περίβλημα σε
Καθεστώς Μεταβαλλόμενης Εσωτερικής Πίεσης και για Κατανεμημένο Εξωτερικό
Φορτίο

υπό

ΑΛΚΜΗΝΗΣ ΛΥΤΡΑ

Διπλωματούχου Μηχανολόγου Μηχανικού Π.Θ., 2011

Υπεβλήθη για την εκπλήρωση μέρους των
απαιτήσεων για την απόκτηση του
Μεταπτυχιακού Διπλώματος Ειδίκευσης

2013

© 2013 Αλκμήνη Λύτρα

Η έγκριση της μεταπτυχιακής εργασίας από το Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών της Πολυτεχνικής Σχολής του Πανεπιστημίου Θεσσαλίας δεν υποδηλώνει αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα (Ν. 5343/32 αρ. 202 παρ. 2).

Εγκρίθηκε από τα Μέλη της Τριμελούς Εξεταστικής Επιτροπής:

Πρώτος Εξεταστής (Επιβλέπων) Δρ. Νικόλαος Πελεκάσης
Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Δεύτερος Εξεταστής Δρ. Βασίλης Μποντόζογλου
Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Τρίτος Εξεταστής Δρ. Αθανάσιος Παπαθανασίου
Αναπληρωτής Καθηγητής, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών,
Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας

Ευχαριστίες

Με την ολοκλήρωση της μεταπτυχιακής μου εργασίας θα ήθελα να ευχαριστήσω θερμά τον επιβλέποντα Καθηγητή κ. Νίκο Πελεκάση για την ανάθεση του θέματος, την άρτια δομημένη καθοδήγηση στην επιλογή μαθημάτων στο μεταπτυχιακό, τις συμβουλές, τη βοήθεια, αλλά και τον χρόνο που αφιερώνει από την πρώτη στιγμή ώστε να έρθει σε πέρας η παρούσα εργασία.

Ιδιαίτερα ευγνώμων είμαι στα υπόλοιπα μέλη της εξεταστικής επιτροπής της μεταπτυχιακής μου εργασίας Καθηγητές κκ. Βασίλη Μποντόζογλου, Αθανάσιο Παπαθανασίου για την προσεκτική ανάγνωση της εργασίας μου και για τις πολύτιμες υποδείξεις τους, καθώς και όλα όσα μου δίδαξαν στα προπτυχιακά και μεταπτυχιακά μαθήματα. Οφείλω ευχαριστίες στον Καθηγητή κ. Αντώνιο Γιαννακόπουλο για τις πολύτιμες συζητήσεις και υποδείξεις που αφορούν την εργασία.

Ένα μεγάλο ευχαριστώ στα μέλη του εργαστηρίου ρευστομηχανικής κκ Κώστα Τσιγκλιφή, Μαρία Βλαχομήτρου, Κώστα Ευθυμίου και Δημήτρη Δημόπουλο για προηγούμενες και παρούσες εργασίες στο θέμα των φυσαλίδων. Χωρίς τη δικιά τους συμβολή, η παρούσα εργασία δεν θα είχε ολοκληρωθεί. Επιπλέον, θα ήθελα να ευχαριστήσω την κα Στεφανία Σερπετσή για την προηγούμενη δουλειά που είχε κάνει πάνω σε φυσαλίδες, δίνοντας μου μια σημαντική καθοδήγηση στην συγγραφή της παρούσας εργασίας.

Ευχαριστώ πολύ τους Δημήτρη, Θένια και Έφη για την έμπρακτη υποστήριξη και την κατανόηση τους την τελευταία περίοδο.

Ακόμη θα ήθελα να ευχαριστήσω τους συμφοιτητές μου και ιδιαίτερα τις κκ Κορίτσα Λίλα, Παντούσα Δάφνη και Τέστα Δήμητρα για το ομαδικό πνεύμα, την πολύ καλή συνεργασία, αλλά και τις πολύ όμορφες στιγμές.

Πάνω απ' όλα θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένειά μου για την υποστήριξη των επιλογών μου, ακόμα και αυτά τα δύσκολα χρόνια. Χωρίς την δική τους ενθάρρυνση και αγάπη δεν θα είχα καταφέρει να κάνω αυτά τα πρώτα βήματα. Ως ελάχιστη ένδειξη αγάπης και σεβασμού αφιερώνω την μεταπτυχιακή μου εργασία στην οικογένειά μου.

Αλκμήνη Λύτρα

«Αριθμητική Μελέτη Στατικής Παραμόρφωσης Φυσαλίδας με Ελαστικό
Περιβλήμα σε Καθεστώς Μεταβαλλόμενης Εσωτερικής Πίεσης και για
Κατανεμημένο Εξωτερικό Φορτίο»

Αλκμήνη Λύτρα

Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας, Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, 2013

Επιβλέπων Καθηγητής: Δρ Νικόλαος Πελεκάσης, Καθηγητής Υπολογιστικής
Ρευστοδυναμικής

Περίληψη

Στην παρούσα εργασία μελετήθηκε η σημειακή παραμόρφωση φυσαλίδων γεμάτων με αέρα. Η μοντελοποίηση βασίστηκε στην θεωρία των λεπτότοιχων κελυφών, ενώ χρησιμοποιούνται και οι θεωρίες Reissner, Pogorelon, Hertz για την κατανόηση της αλληλεπίδρασης δύναμης-παραμόρφωσης, ενώ λαμβάνεται υπόψη και η συμπιεστότητα του περικλειόμενου αερίου. Οι προσομοιώσεις συγκρίνονται με πειραματικά αποτελέσματα Μικροσκοπίας Ατομικής Δύναμης (Atomic Force Microscopy). Στις φυσαλίδες τύπου με κέλυφος από φωσφολιπίδιο (μαλακό κέλυφος) υπάρχει καλή συμφωνία μεταξύ προσομοιώσεων και πειραμάτων. Στην πρώτη φυσαλίδα με κέλυφος από πολυμερές (σκληρό κέλυφος) προσεγγίζεται ικανοποιητικά η διαθέσιμη από άποψη πειραμάτων γραμμική περιοχή, ενώ στις επόμενες δύο φυσαλίδες τύπου BiSphere προσεγγίζεται μόνο η γραμμική περιοχή.

Επιπλέον στην παρούσα εργασία διεξάγεται παραμετρική μελέτη της επίδρασης των ελαστικών ιδιοτήτων και της γεωμετρίας για φυσαλίδες με κέλυφος από φωσφολιπίδιο (π.χ. BR14) και πολυμερές (π.χ. Bisphere). Αναγνωρίζονται δύο σημαντικές αδιάστατες παράμετροι που χαρακτηρίζουν (α) την σχετική αντίσταση σε εφελκυσμό και κάμψη και (β) την σχετική αντίσταση σε εφελκυσμό και συμπίεση της μικροφυσαλίδας. Η πρώτη καθορίζει την μετάβαση από την γραμμική κατά Reissner στην μη γραμμική κατά Pogorelon περιοχή, ενώ η δεύτερη καθορίζει την μετάβαση στην περιοχή όπου κυριαρχεί η αντίσταση στην συμπίεση της μικροφυσαλίδας και αποκτά καθοριστικό ρόλο για μεγάλες παραμορφώσεις. Συνδυασμένη χρήση των παραπάνω μεταβάσεων στην απόκριση της μικροφυσαλίδας μπορεί να δώσει εκτίμηση του επιφανειακού μέτρου ελαστικότητας και του πάχους του κελύφους/ αντίστασης σε κάμψη.

Για την πλήρη χαρτογράφηση της στατικής απόκρισης της μικροφυσαλίδας, σε σχέση και με τις διαθέσιμες πειραματικές μετρήσεις, θα χρειαστεί να ληφθεί υπόψη η ενέργεια πρόσφυσης μεταξύ της μικροφυσαλίδας και του προβόλου, ιδιαίτερα για πολύ μικρές παραμορφώσεις, καθώς και η ελαστικότητα του προβόλου έτσι ώστε να προβλεφθεί με ακρίβεια η κατανομή του φορτίου στο κέλυφος. Μία πρώτη προσέγγιση που έγινε στην παρούσα εργασία ανέδειξε το ενδεχόμενο πολλαπλότητας λύσεων γεγονός που παρατηρείται και στις διαθέσιμες πειραματικές μετρήσεις.

Περιεχόμενα

1. Εισαγωγή	1
1.1 Κίνητρο και υπόβαθρο	1
1.2 Βιβλιογραφική Ανασκόπηση	2
1.3 Οργάνωση Μεταπτυχιακής Εργασίας.....	8
2. Θεωρητική Ανάλυση	9
2.1 Θεωρία Παραμόρφωσης Μικροφυσαλίδων	9
2.1.1 Σημειακό Φορτίο	10
2.2 Συμπιεστότητα αερίου.....	14
2.3 Επαφή προβόλου AFM και φυσαλίδας.....	15
2.3.1 Κατανεμημένο Φορτίο	15
2.4 Κατάστρωση του προβλήματος	21
2.4.1 Παραδοχές	21
2.4.2 Αδιαστατοποίηση των μεγεθών του προβλήματος	22
2.4.3 Η Lagrangian αναπαράσταση της διεπιφάνειας της φυσαλίδας.....	23
2.4.4 Ισορροπία δυνάμεων στην διεπιφάνεια της φυσαλίδας.	24
2.4.5 Διεπιφανειακές τάσεις και ροπές κάμψης	25
2.4.6 Ορισμός ενέργειας εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης	27
2.4.7 Καταστατικές εξισώσεις για τις ελαστικές τάσεις	29
2.4.8 Καταστατικές εξισώσεις για τις ροπές κάμψης.....	32
3. Αριθμητική Ανάλυση	33
3.1 Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων	33
3.2 Υλοποίηση πεπερασμένων στοιχείων	34
3.3 Συναρτήσεις βάσης	34
3.4 Διάγραμμα ροής κώδικα Fortran.....	36
4. Αποτελέσματα.....	38
4.1 Περίπτωση φυσαλίδας BR14.....	38
4.1.1 Διάγραμμα δύναμης-παραμόρφωσης.....	38
4.1.2 Διάγραμμα ενεργειών-παραμόρφωσης	42
4.1.3 Σχήματα παραμορφωμένων φυσαλίδων	45
4.1.4 Μεταβολή καμπυλότητας παραμορφωμένου σχήματος φυσαλίδας	46
4.2 Περίπτωση φυσαλίδας με κέλυφος από Φωσφολιπίδιο	48
4.2.1 Διάγραμμα δύναμης-παραμόρφωσης.....	48
4.2.2 Διάγραμμα ενεργειών-παραμόρφωσης	51
4.2.3 Σχήματα παραμορφωμένων φυσαλίδων	55
4.2.4 Μεταβολή καμπυλότητας παραμορφωμένου σχήματος φυσαλίδας	56
4.3 Περίπτωση φυσαλίδας BiSphere 1	58
4.3.1 Διάγραμμα δύναμης-παραμόρφωσης.....	58

4.3.2 Διάγραμμα ενεργειών-παραμόρφωσης	62
4.3.3 Σχήματα παραμορφωμένων φυσαλίδων	65
4.3.4 Μεταβολή καμπυλότητας παραμορφωμένου σχήματος φυσαλίδας	67
4.4 Περίπτωση φυσαλίδας BiSphere 2	69
4.5 Κατανεμημένο φορτίο-Πρόβλημα επαφής	74
4.6 Παραμετρική μελέτη της επίδρασης των σταθερών του προβλήματος.	78
4.6.1 Παραμετρική μελέτη της επίδρασης του επιφανειακού μέτρου διαστολής και του μέτρου κάμψης.....	78
4.6.2 Παραμετρική μελέτη της επίδρασης του πάχους και του μέτρου διάτμησης για φυσαλίδες τύπου BiSphere.....	83
5. Συμπεράσματα-Προτάσεις για μελλοντική εργασία	93

ΠΙΝΑΚΑΣ ΣΥΜΒΟΛΩΝ

Ελληνικά σύμβολα:

γ	Πολυτροπικός εκθέτης αερίων	$[-]$
Δ	Μετατόπιση πόλου φυσαλίδας	$[m]$
ε	Αδιάστατη μετατόπιση	$[-]$
θ	Γωνία	$[rad]$
θ_c	Γωνία επαφής	$[rad]$
λ	Παράμετρος Shanahan	$[-]$
ν	Λόγος Poisson	$[-]$
ξ	Τοπική συντεταγμένη	$[-]$
ρ_w	Πυκνότητα νερού	$[kg/m^3]$
ω	Γωνιακή συχνότητα	$[s^{-1}]$
χ	Επιφανειακό μέτρο διαστολής	$[N/m]$

Αγγλικά σύμβολα:

D	Μήκος κάμψης	$[m]$
D	Διάμετρος φυσαλίδας	$[m]$
E	Τρισδιάστατο μέτρο διάτμησης	$[Pa]$
F	Δύναμη	$[N]$
$G_{s,2d}$	Επιφανειακό μέτρο διάτμησης	$[Pa]$
H	Πάχος κελύφους	$[m]$
k_c	Ακαμψία προβόλου AFM	$[N/m]$
k_b	Μέτρο αντίστασης σε κάμψης	$[Nm]$
P_{st}	Στατική Πίεση (Ατμοσφαιρική)	$[Pa]$
P_c	Κρίσιμη τάση λυγισμού	$[Pa]$
r	Αδιάστατη Πολική συντεταγμένη	$[-]$
R_o	Αρχική ακτίνα φυσαλίδας	$[m]$
R	Τελική ακτίνα φυσαλίδας	$[m]$
δR	Μεταβολή ακτίνας φυσαλίδας	$[m]$
s	Αδιάστατο μήκος τόξου	$[-]$
V_o	Αρχικός όγκος φυσαλίδας	$[m^3]$
V	Τελικός όγκος φυσαλίδας	$[m^3]$
ΔV	Μεταβολή όγκου φυσαλίδας	$[m^3]$

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΕΙΚΟΝΩΝ

Εικόνα 1-1 Ερυθρά αιμοσφαίρια σε πείραμα εφελκυσμού, αυξανόμενη δύναμη από αριστερά προς τα δεξιά. Πάνω υγιή αιμοσφαίρια, κάτω αιμοσφαίρια που έχουν προσβληθεί από μαλάρια. Και οι δύο τύποι υφίστανται την ίδια φόρτιση.	2
Εικόνα 1-2 Μπλε γραμμή: Πειραματικές τιμές δύναμης-παραμόρφωσης φυσαλίδας τύπου PAH/PSS, πάχους 25 nm και $R_o=7.9 \mu\text{m}$. Διακεκομμένη γραμμή: Γραμμική πρόβλεψη Reissner για παραμόρφωση μέχρι 50 nm.	3
Εικόνα 1-3 Καμπύλες δύναμης-παραμόρφωσης για τις φυσαλίδες τύπου PLA. Τετράγωνα: $R_o=2 \mu\text{m}$. Κύκλοι: $R_o=5 \mu\text{m}$. Στην προσθήκη: Η δύναμη συναρτήσει της αρχικής ακτίνας για παραμόρφωση 2%.	3
Εικόνα 1-5 Πειραματικά αποτελέσματα δύναμης-παραμόρφωσης (μαύρη γραμμή) πολυμερικής μεμβράνης, $R_o=2.6 \mu\text{m}$ και πάχους 39 nm. Η κόκκινη γραμμή είναι γραμμική προσέγγιση για μικρές παραμορφώσεις.	4
Εικόνα 1-4 Τυπική καμπύλη φόρτισης-αποφόρτισης για την φυσαλίδα τύπου MF, $R_o=2 \mu\text{m}$	4
Εικόνα 1-6 Τυπική καμπύλη δύναμης-παραμόρφωσης, $k_c=0.12 \text{ N/m}$ για δύο φυσαλίδες μεγέθους $d=4.8 \mu\text{m}$ (κόκκινη γραμμή) και $d=2.5 \mu\text{m}$ (μπλε γραμμή).	5
Εικόνα 1-7 Τυπική καμπύλη δύναμης-παραμόρφωσης ($k_c=1.14 \text{ N/m}$), για φυσαλίδες μεγέθους $d=2.6 \mu\text{m}$ (μαύρη γραμμή), $d=3.5 \mu\text{m}$ (κόκκινη γραμμή), $d=4.1 \mu\text{m}$ (μπλε γραμμή).	5
Εικόνα 1-8 Τυπική καμπύλη δύναμης-παραμόρφωσης ($k_c=1.14 \text{ N/m}$), που εμφανίζονται περιοχές αστάθειας, για φυσαλίδες μεγέθους $d=3.2 \mu\text{m}$ (σκούρο κίτρινο γραμμή), $d=3.1 \mu\text{m}$ (μαύρη γραμμή), $d=4.0 \mu\text{m}$ (κόκκινη γραμμή), $d=4.9 \mu\text{m}$ (μπλε γραμμή), $d=5.5 \mu\text{m}$ (πράσινη γραμμή).	5
Εικόνα 1-9 Καμπύλη δύναμης-παραμόρφωσης για διαφορετικές φυσαλίδες Η μπλε καμπύλη (Α) αντιστοιχεί σε φυσαλίδα με διάμετρο $D=2.9 \mu\text{m}$ και $k_c=0.04 \text{ N/m}$. Η πράσινη καμπύλη (Β) αντιστοιχεί σε φυσαλίδα με διάμετρο $D=3.0 \mu\text{m}$ και $k_c=0.026 \text{ N/m}$. Η κόκκινη καμπύλη (C) αντιστοιχεί σε φυσαλίδα με διάμετρο $D=2.1 \mu\text{m}$ και $k_c=0.019 \text{ N/m}$	6
Εικόνα 1-10 Διάγραμμα δύναμης παραμόρφωσης για μπάλες τένις με $h/R=0.167$ (πείραμα) συγκρινόμενα με υπολογισμούς βασισμένους στην θεωρία κελυφών. Το πείραμα πραγματοποιήθηκε με άδειες μπάλες (κύκλοι) και γεμάτες με νερό μπάλες (τετράγωνα).	6

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΣΧΗΜΑΤΩΝ

Σχήμα 1-1 Σχηματική αναπαράσταση AFM.	8
Σχήμα 2-1 Σχηματική αναπαράσταση προβλήματος, αριστερά απαραμόρφωτη φυσαλίδα, δεξιά παραμορφωμένη.	9
Σχήμα 2-2 Σχηματική αναπαράσταση ισορροπίας δυνάμεων.	10
Σχήμα 2-3 Σχηματισμός κρατήρα υπό την επίδραση εξωτερικού σημειακού φορτίου ...	12
Σχήμα 2-4 Σχηματική αναπαράσταση σφαιρικού κελύφους σε επαφή με στερεό επίπεδο σώμα.	15

Σχήμα 2-5 Ανάλυση παραμόρφωσης φουσαλίδας.....	16
Σχήμα 2-6 Επαφή δύο σφαιρικών σωμάτων. Αριστερά απλή επαφή χωρίς παραμόρφωση, δεξιά επιπλέον φόρτιση και παραμόρφωση σε ένα επίπεδο.....	18
Σχήμα 2-7 Σχηματική αναπαράσταση ισορροπίας δυνάμεων στην επιφάνεια της φουσαλίδας.....	20
Σχήμα 2-8 Γεωμετρική αναπαράσταση Lagrangian περιγραφής της φουσαλίδας.....	23
Σχήμα 3-1 Διάγραμμα ροής κώδικα Fortran.....	37

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΠΙΝΑΚΩΝ

Πίνακας 4-1 Δεδομένα εισόδου στο μοντέλο (BR14).....	40
Πίνακας 4-2 Δεδομένα εισόδου στο μοντέλο(Phospholipid).....	49
Πίνακας 4-3 Δεδομένα εισόδου στο μοντέλο (BiSphere).....	59
Πίνακας 4-4 Δεδομένα εισόδου στο μοντέλο (BiSphere).....	60
Πίνακας 4-5 Δεδομένα εισόδου στο μοντέλο(BiSphere -Red Points).....	69
Πίνακας 4-6 Δεδομένα εισόδου στο μοντέλο(BiSphere -Yellow Points).....	69

ΚΑΤΑΛΟΓΟΣ ΔΙΑΓΡΑΜΜΑΤΩΝ

Διάγραμμα 3-1 Γραφική αναπαράσταση συνάρτησης cubic B-Spline.....	35
Διάγραμμα 3-2 Γραφική αναπαράσταση των συναρτήσεων cubic B-Splines στο εσωτερικό στοιχείου.....	36
Διάγραμμα 4-1 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φουσαλίδες (Άξονες με διαστάσεις)-(BR14).....	39
Διάγραμμα 4-2 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φουσαλίδες (Άξονες χωρίς διαστάσεις) -(BR14).....	40
Διάγραμμα 4-3 Μεταβολή του όγκου συναρτήσει της παραμόρφωσης για κενές και γεμάτες φουσαλίδες-(BR14).....	41
Διάγραμμα 4-4 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για γεμάτες φουσαλίδες-(BR14).....	42
Διάγραμμα 4-5 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για άδειες φουσαλίδες-(BR14).....	43
Διάγραμμα 4-6 Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού μεταξύ κενών και γεμάτων φουσαλίδων-(BR14).	44
Διάγραμμα 4-7 Σύγκριση της ενέργειας λόγω κάμψεως μεταξύ κενών και γεμάτων φουσαλίδων-(BR14).	44
Διάγραμμα 4-8 Μεταβολή του σχήματος της φουσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φουσαλίδες-(BR14).	45
Διάγραμμα 4-9 Μεταβολή του σχήματος της φουσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για άδειες φουσαλίδες-(BR14).	45

Διάγραμμα 4-10 Μεταβολή της καμπυλότητας του σχήματος της φυσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φυσαλίδες-(BR14).....	46
Διάγραμμα 4-11 Μεταβολή της καμπυλότητας του σχήματος της φυσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για άδειες φυσαλίδες-(BR14).....	47
Διάγραμμα 4-12 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φυσαλίδες (Άξονες με διαστάσεις)-(Phospholipid).....	48
Διάγραμμα 4-13 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φυσαλίδες (Άξονες χωρίς διαστάσεις) -(Phospholipid).....	49
Διάγραμμα 4-14 Μεταβολή του όγκου συναρτήσει της παραμόρφωσης για κενές και γεμάτες φυσαλίδες-(Phospholipid).....	50
Διάγραμμα 4-15 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για γεμάτες φυσαλίδες-(Phospholipid).....	51
Διάγραμμα 4-16 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για άδειες φυσαλίδες-(Phospholipid).....	52
Διάγραμμα 4-17 Κατανομή της ενέργειας κάμψης και εφελκυσμού συναρτήσει της πολικής γωνίας θ για παραμορφώσεις 5,10,20 και 25% βλ ενότητα 2.4.6.	53
Διάγραμμα 4-18 Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού μεταξύ κενών και γεμάτων φυσαλίδων-(Phospholipid).....	54
Διάγραμμα 4-19 Σύγκριση της ενέργειας λόγω κάμψεως μεταξύ κενών και γεμάτων φυσαλίδων-(Phospholipid).....	54
Διάγραμμα 4-20 Μεταβολή του σχήματος της φυσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φυσαλίδες-(Phospholipid).....	55
Διάγραμμα 4-21 Μεταβολή του σχήματος της φυσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για άδειες φυσαλίδες-(Phospholipid).....	55
Διάγραμμα 4-22 Μεταβολή της καμπυλότητας του σχήματος της φυσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φυσαλίδες-(Phospholipid).....	56
Διάγραμμα 4-23 Μεταβολή της καμπυλότητας του σχήματος της φυσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για άδειες φυσαλίδες-(Phospholipid).....	57
Διάγραμμα 4-24 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φυσαλίδες (Άξονες με διαστάσεις)-(BiSphere).....	58
Διάγραμμα 4-25 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φυσαλίδες (Άξονες χωρίς διαστάσεις) -(BiSphere).....	61
Διάγραμμα 4-26 Μεταβολή του όγκου της φυσαλίδας συναρτήσει της παραμόρφωσης για γεμάτες και άδειες φυσαλίδες-(BiSphere).....	62
Διάγραμμα 4-27 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για γεμάτες φυσαλίδες-(BiSphere Πίνακας 4-2).....	63
Διάγραμμα 4-28 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για άδειες φυσαλίδες-(BiSphere-Πίνακας 4-2).	64

Διάγραμμα 4-29 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για γεμάτες φουσαλίδες-(BiSphere Πίνακας 4-3).....	65
Διάγραμμα 4-30 Μεταβολή του σχήματος της φουσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φουσαλίδες-(BiSphere Πίνακας 4-2).	66
Διάγραμμα 4-31 Μεταβολή του σχήματος της φουσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για άδειες φουσαλίδες-(BiSphere Πίνακας 4-2).	66
Διάγραμμα 4-32 Μεταβολή της καμπυλότητας του σχήματος της φουσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φουσαλίδες -(BiSphere Πίνακας 4-2).....	67
Διάγραμμα 4-33 Μεταβολή της καμπυλότητας του σχήματος της φουσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για άδειες φουσαλίδες -(BiSphere Πίνακας 4-2).....	68
Διάγραμμα 4-34 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φουσαλίδες (Άξονες με διαστάσεις) -(BiSphere $R_0=2 \cdot 10^{-6}$ m).....	70
Διάγραμμα 4-35 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για γεμάτες φουσαλίδες-(BiSphere 2 Πίνακας 4-5).....	71
Διάγραμμα 4-36 Μεταβολή του σχήματος της φουσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φουσαλίδες-(BiSphere 2 Πίνακας 4-5).....	71
Διάγραμμα 4-37 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φουσαλίδες (Άξονες με διαστάσεις) -(BiSphere $R_0=1,6 \cdot 10^{-6}$ m).	72
Διάγραμμα 4-38 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για γεμάτες φουσαλίδες-(BiSphere 2 Πίνακας 4-6).....	73
Διάγραμμα 4-39 Μεταβολή του σχήματος της φουσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φουσαλίδες-(BiSphere 2 Πίνακας 4-6).....	73
Διάγραμμα 4-40 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες φουσαλίδες για σημειακό και κατανεμημένο φορτίο-(BR14).....	74
Διάγραμμα 4-41 Μεταβολή του σχήματος της φουσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου-(BR14).....	75
Διάγραμμα 4-42 Μεταβολή της γωνίας επαφής μεταξύ προβόλου και φουσαλίδας (BR 14).....	75
Διάγραμμα 4-43 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες φουσαλίδες και κατανεμημένο φορτίο-(BiSphere 1).	76
Διάγραμμα 4-44 Μεταβολή της γωνίας επαφής μεταξύ προβόλου και φουσαλίδας (BiSphere 1) για την λύση χωρίς παραμόρφωση.	77
Διάγραμμα 4-45 Μεταβολή της γωνίας επαφής μεταξύ προβόλου και φουσαλίδας (BiSphere 1) για την λύση από Flat σε σημειακό φορτίο.....	77
Διάγραμμα 4-46 Καμπύλες δύναμης παραμόρφωσης για σταθερό τον αδιάστατο αριθμό $N_2=2$ και μεταβαλλόμενο τον αριθμό N_1	80

Διάγραμμα 4-47 Καμπύλες δύναμης παραμόρφωσης για σταθερό τον αδιάστατο αριθμό $N_2=0.2$ και μεταβαλλόμενο τον αριθμό N_1	80
Διάγραμμα 4-48 Καμπύλες δύναμης παραμόρφωσης για σταθερό τον αδιάστατο αριθμό $N_2=0.02$ και μεταβαλλόμενο τον αριθμό N_1	81
Διάγραμμα 4-49 Μεταβολή της καμπύλης δύναμης-παραμόρφωσης για ίδιο μέτρο διάτμησης και μεταβαλλόμενο λόγο ακτίνας-πάχους.....	85
Διάγραμμα 4-50 Μεταβολή της καμπύλης δύναμης-παραμόρφωσης για ίδιο μέτρο διάτμησης και μεταβαλλόμενο λόγο ακτίνας-πάχους.....	86
Διάγραμμα 4-51 Μεταβολή της καμπύλης δύναμης-παραμόρφωσης για ίδιο μέτρο διάτμησης και μεταβαλλόμενο λόγο ακτίνας-πάχους.....	87
Διάγραμμα 4-52 Μεταβολή της καμπύλης δύναμης-παραμόρφωσης για ίδιο μέτρο διάτμησης και μεταβαλλόμενο λόγο ακτίνας-πάχους.....	88
Διάγραμμα 4-53 Μεταβολή της καμπύλης δύναμης-παραμόρφωσης για ίδιο μέτρο διάτμησης και μεταβαλλόμενο λόγο ακτίνας-πάχους.....	88
Διάγραμμα 4-54 Μεταβολή της καμπύλης δύναμης-παραμόρφωσης για ίδιο μέτρο διάτμησης και μεταβαλλόμενο λόγο ακτίνας-πάχους.....	89
Διάγραμμα 4-55 Μεταβολή της εσωτερικής πίεσης συναρτήσει της παραμόρφωσης για σταθερό λόγο στατικής πίεσης-μέτρου διάτμησης και μεταβαλλόμενο το λόγο ακτίνας-πάχους.	90
Διάγραμμα 4-56 Μεταβολή της εσωτερικής πίεσης συναρτήσει της παραμόρφωσης για σταθερό λόγο στατικής πίεσης-μέτρου διάτμησης και μεταβαλλόμενο το λόγο ακτίνας-πάχους.	90

1. Εισαγωγή

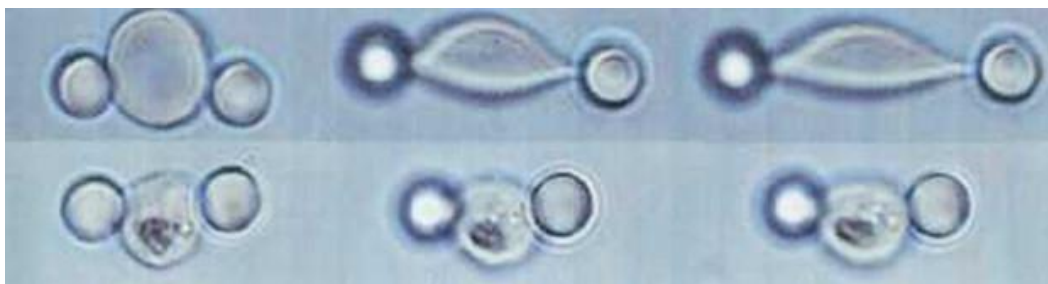
Η προσπάθεια της ανθρώπινης κοινωνίας για βελτίωση των συνθηκών ζωής έχει συνδυαστεί αναπόσπαστα με την πρόοδο της Μηχανικής και της Ιατρικής. Τις τελευταίες δεκαετίες η πρόοδος της τεχνολογίας είναι ραγδαία καθώς εκμεταλλεύεται όλο το θεωρητικό υπόβαθρο προηγούμενων περιόδων και με την βελτίωση των υλικών είμαστε πλέον σε θέση να αντιληφθούμε αυτό που αποκαλούμε σύγχρονο τρόπο ζωής. Οι ιστορίες επιστημονικής φαντασίας θέλουν η θεραπεία μιας μολυσμένης περιοχής να γίνεται χωρίς χειρουργικά εργαλεία, αίμα και πόνο, παρά με το πέρασμα ενός οργάνου πάνω από την πάσχουσα περιοχή. Η σύγχρονη επιστήμη μπορεί να μην το έχει καταφέρει ακόμα, όμως έχει γίνει ιδιαίτερη πρόοδος σε αυτή την κατεύθυνση. Οι μικροφουσαλίδες τύπου contrast agent είναι μια μέθοδος που θα επιτρέπει την ανώδυνη θεραπεία προσφέροντας στοχευμένη απελευθέρωση φαρμάκου χωρίς χειρουργική επέμβαση.

1.1 Κίνητρο και υπόβαθρο

Η μελέτη των μικροφουσαλίδων είναι ένα ιδιαίτερα διεπιστημονικό πεδίο καθώς συγκεντρώνει γνώση από διάφορους τομείς της επιστήμης. Ήδη από τις αρχές του περασμένου αιώνα ξεκίνησαν μελέτες για την δομή των κυττάρων, ανοίγοντας έτσι το δρόμο στη μελέτη των μικροφουσαλίδων. Οι μικροφουσαλίδες έχουν ένα ευρύ πεδίο τεχνολογικών εφαρμογών όπως η ιατρική, η βιομηχανία τροφίμων, τα καλλυντικά, καθώς και η βιομηχανία χαρτιού. Ωστόσο ο πιο δυναμικός κλάδος που εμπλέκονται οι μικροφουσαλίδες είναι η ιατρική και ιδιαίτερα η στοχευμένη διανομή φαρμάκου καθώς και η ιατρική απεικόνιση ζωτικών οργάνων. Στην πρώτη περίπτωση ο βασικός σκοπός των μικροφουσαλίδων είναι να αναγνωρίσουν και να προσκολληθούν σε συγκεκριμένες περιοχές του σώματος που πάσχουν από κάποια ασθένεια και να απελευθερώσουν φάρμακο στην πάσχουσα περιοχή μόνο, την επιθυμητή χρονική στιγμή [1]. Ενώ στην δεύτερη περίπτωση, χρησιμοποιούνται φουσαλίδες που περιέχουν κάποιο αέριο (πχ άζωτο) και σε συνδυασμό με υπερήχους επιτρέπουν την απεικόνιση κάποιου οργάνου. [2].

Ο σχεδιασμός τέτοιων μικροφουσαλίδων απαιτεί την κατανόηση των φυσικών ιδιοτήτων. Πιο συγκεκριμένα ιδιαίτερο ρόλο παίζουν η ικανότητα προσκόλλησης, η διαπερατότητα και οι μηχανικές ιδιότητες. Ο σκοπός της παρούσας εργασίας είναι η μελέτη των μηχανικών ιδιοτήτων των μικροφουσαλίδων και πιο συγκεκριμένα του μέτρου ελαστικότητας (Young's Modulus) και του μέτρου κάμψης (Bending Resistance). Η μελέτη και κατανόηση των μηχανικών ιδιοτήτων είναι προφανώς καθοριστικής σημασίας για τη ρεολογική συμπεριφορά καθώς και την αντοχή τους στο εσωτερικό ενός αγγείου. Ένα παράδειγμα της σημασίας των μηχανικών ιδιοτήτων αποτελούν τα ερυθρά αιμοσφαίρια, όπου τα υγιή έχουν την ικανότητα να παραμορφώνονται έως και 10% της αρχικής τους ακτίνας, χωρίς αστοχία. Ενώ, αιμοσφαίρια που έχουν προσβληθεί από μαλάρια δεν είναι δυνατό να παραμορφωθούν [3], βλ. Εικόνα 1-1. Άλλο παράδειγμα

αποτελεί η μοντελοποίηση κυττάρων που προσβάλλονται από ιούς, εκεί οι μηχανικές ιδιότητες είναι πληροφορία εισόδου της μοντελοποίησης [4].



Εικόνα 1-1 Ερυθρά αιμοσφαίρια σε πείραμα εφελκυσμού, αυξανόμενη δύναμη από αριστερά προς τα δεξιά. Πάνω υγιή αιμοσφαίρια, κάτω αιμοσφαίρια που έχουν προσβληθεί από μαλάρια. Και οι δύο τύποι υφίστανται την ίδια φόρτιση.

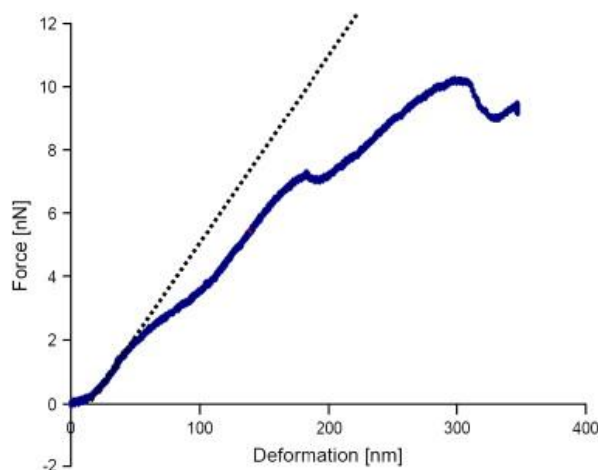
Στην παρούσα εργασία μελετώνται αριθμητικά μικροφουσαλίδες αρχικά πολυμερικού υλικού, παραδείγματος χάρη τύπου biSphere, που γενικά χαρακτηρίζονται ως σκληρές φουσαλίδες και στη συνέχεια φουσαλίδες από λιπίδιο, τύπου BR14 ή φωσφολιπίδια και οι οποίες είναι πιο μαλακές. Επιπλέον η παρούσα εργασία αποτελεί συνέχεια της μεταπτυχιακής εργασίας της Σερπετσή [5], η οποία μελέτησε επίσης αριθμητικά την συμπεριφορά των φουσαλίδων θεωρώντας σημειακό φορτίο και κενές φουσαλίδες. Βασικός σκοπός μας είναι να προσδιορίσουμε πόσο σημαντική είναι η συμπίεστικότητα του αερίου που βρίσκεται στο εσωτερικό της φουσαλίδας καθώς και να μελετήσουμε την σημασία της επαφής μεταξύ προβόλου και φουσαλίδας, θεωρώντας όχι πια σημειακό φορτίο αλλά κατανεμημένο σε μια περιοχή στην επιφάνεια της φουσαλίδας.

1.2 Βιβλιογραφική Ανασκόπηση

Οι τεχνικές που χρησιμοποιούνται σε πειραματικό επίπεδο για τον προσδιορισμό των μηχανικών ιδιοτήτων ποικίλουν με πιο ξεχωριστή την μέθοδο της ατομικής μικροσκοπίας δύναμης (Atomic Force Microscopy).

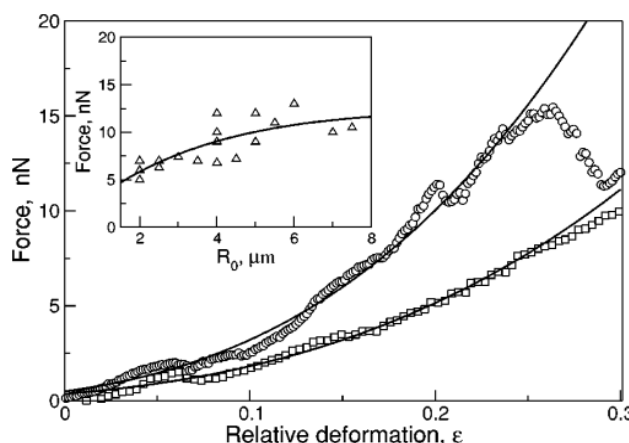
Υπάρχουν αρκετές πειραματικές μελέτες που αφορούν την μηχανική συμπεριφορά των μικροφουσαλίδων και χρησιμοποιούν την διάταξη AFM για τις μετρήσεις τους. Οι Fery και Weinkamer [6] μελετούν τις μηχανικές ιδιότητες πολυστρωματικών μικροφουσαλίδων αποτελούμενες από πολυαλλυλαμίνη και σουλφονικό πολυστυρένιο (PLA) σε νερό, αρχικής ακτίνας 7.9 μm , με σκοπό να προσδιορίσουν το μέτρο ελαστικότητας. Η άκρη του προβόλου είναι σφαιρική και έχει ακτίνα αρκετά μεγαλύτερη από την ακτίνα της φουσαλίδας. Στην εργασία τους μετράνε δύναμη και παραμόρφωση για μια σειρά από φουσαλίδες, βλ. Εικόνα 1-2. Οι μετρήσεις περιορίζονται σε μικρές παραμορφώσεις, ώστε να αποφευχθεί οποιαδήποτε μορφής πλαστικοποίηση, που δεν επιτρέπει την επαναχρησιμοποίηση της φουσαλίδας. Επιπλέον, αποφεύγονται οι μεγάλες παραμορφώσεις διότι η μεταβολή του όγκου θα παίζει σημαντικό ρόλο.

Τελικά, δείχνουν ότι η σχέση δύναμης-παραμόρφωσης είναι αρχικά γραμμική μέχρι 0.63% παραμόρφωση και με περαιτέρω φόρτιση εμφανίζονται αστάθειες. Επιπλέον υπολογίζουν το μέτρο ελαστικότητας να είναι της τάξεως των Mega Pascals.



Εικόνα 1-2 Μπλε γραμμή: Πειραματικές τιμές δύναμης-παραμόρφωσης φυσαλίδας τύπου PAH/PSS, πάχους 25 nm και $R_0=7.9 \mu\text{m}$. Διακεκομμένη γραμμή: Γραμμική πρόβλεψη Reissner για παραμόρφωση μέχρι 50 nm.

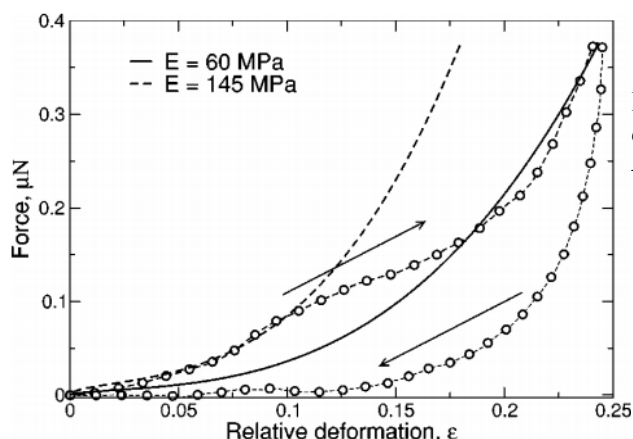
Οι Lulevich et al. [7] μελέτησαν επίσης πειραματικά το μέτρο ελαστικότητας διαφόρων πολυστρωματικών φυσαλίδων. Εξετάζουν δύο τύπους υλικών, το πρώτο είναι πολυαλλυλαμίνη και σουλφονικό πολυστυρενίο (PLA) σε διάλυμα οξέως και το δεύτερο είναι μονοδιασκορπισμένη μελαμίνη φορμαλδεΰδη (MF) επίσης σε διάλυμα οξέως. Οι φυσαλίδες τύπου PLA έχουν αρχική ακτίνα 2-8 μm , ενώ οι τύπου MF έχουν μέση ακτίνα 2 μm . Η άκρη του προβόλου είναι σφαιρική με ακτίνα 20 μm . Βασικός σκοπός της εργασίας τους είναι μέσω των διαγραμμάτων δύναμης-παραμόρφωσης να υπολογίσουν το μέτρο ελαστικότητας και να το σχετίσουν με την γεωμετρία της φυσαλίδας, βλ. Εικόνα 1-3 και Εικόνα 1-4. Στην μοντελοποίηση των πειραματικών μετρήσεων αγνοούν την επίδραση της ενέργειας λόγω κάμψης στην παραμόρφωση του κελύφους της μικροφυσαλίδας. Σαν αποτέλεσμα δεν προβλέπουν γραμμική περιοχή στην καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης.



Εικόνα 1-3 Καμπύλες δύναμης-παραμόρφωσης για τις φυσαλίδες τύπου PLA. Τετράγωνα: $R_0=2 \mu\text{m}$. Κύκλοι: $R_0=5 \mu\text{m}$. Στην προσθήκη: Η δύναμη συναρτήσει της αρχικής ακτίνας για παραμόρφωση 2%.

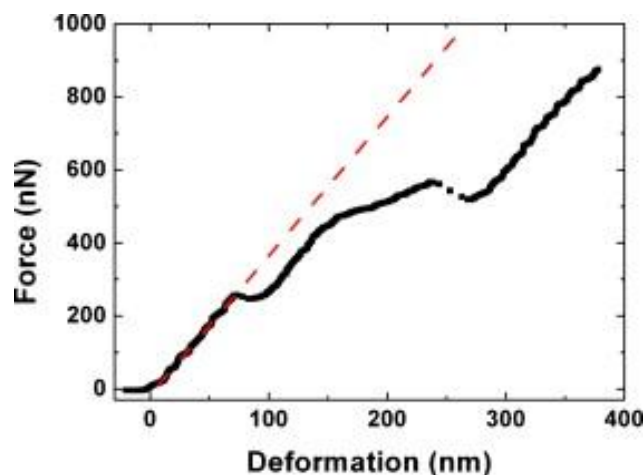
Στα αποτελέσματά τους δείχνουν ότι η σχέση δύναμης-παραμόρφωσης είναι μη γραμμική και για τους δύο τύπους υλικών. Επιπλέον, στις φυσαλίδες τύπου PLA μελετάται η επίδραση της αρχικής ακτίνας της σφαίρας και διαπιστώθηκε πως φυσαλίδες με μεγαλύτερη ακτίνα έχουν μεγαλύτερη ακαμψία. Το ίδιο συμβαίνει και με αύξηση του πάχους του κελύφους της φυσαλίδας. Τέλος, υπολογίζουν το μέτρο ελαστικότητας, το οποίο βρέθηκε να είναι τάξεως 1-100 MPa. Όμως το παραπάνω εύρημα προέκυψε για

τιμές της δύναμης από την περιοχή τιμών όπου κυριαρχούν δυνάμεις πρόσφυσης (adhesion forces) μεταξύ του προβόλου και της μικροφουσαλίδας [8] και συνεπώς δεν αναμένεται να είναι σε ισχύ η θεωρία του Reissner η οποία θεωρεί ότι οι ελαστικές δυνάμεις καθορίζουν την μετατόπιση του κελύφους.



Εικόνα 1-4 Τυπική καμπύλη φόρτισης-αποφόρτισης για την φουσαλίδα τύπου MF, $R_o=2\ \mu\text{m}$.

Μια άλλη πειραματική εργασία που αφορά την μηχανική συμπεριφορά των μικροφουσαλίδων είναι αυτή των Glynos et al. [9]. Στην εργασία μελετώνται φουσαλίδες τύπου biSphere με μέση ακτίνα $2.5\ \mu\text{m}$ και πάχος $37\ \text{nm}$. Η άκρη του προβόλου είναι επίπεδη (tipless). Στην εργασία επιδιώκεται να υπολογιστεί το μέτρο ελαστικότητας από τα διαγράμματα δύναμης-παραμόρφωσης.

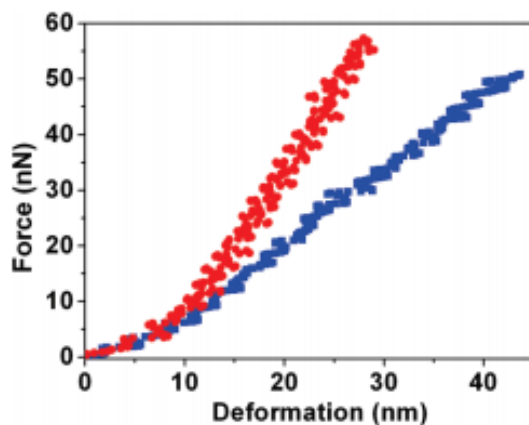


Εικόνα 1-5 Πειραματικά αποτελέσματα δύναμης-παραμόρφωσης (μαύρη γραμμή) πολυμερικής μεμβράνης, $R_o=2.6\ \mu\text{m}$ και πάχους $39\ \text{nm}$. Η κόκκινη γραμμή είναι γραμμική προσέγγιση για μικρές παραμορφώσεις.

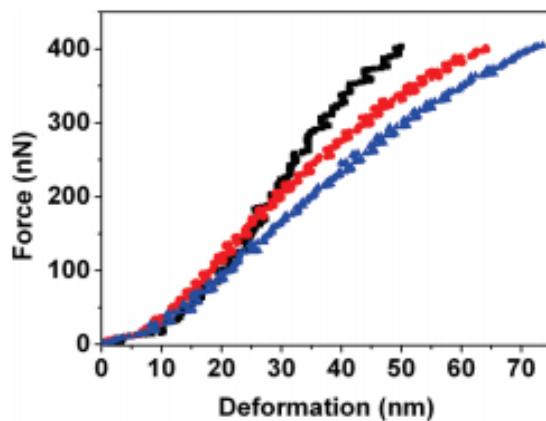
Το διάγραμμα δύναμης-παραμόρφωσης (Εικόνα 1-5) έχει αρχικά γραμμική συμπεριφορά μέχρι 2% παραμόρφωση, ενώ με επιπλέον φόρτιση παρατηρείται αστάθεια και ασυνέχειες. Η αστάθεια που εμφανίζεται σχετίζεται σύμφωνα με τους συγγραφείς με σημαντικές αλλαγές στην γεωμετρία, που περιλαμβάνουν τοπική διόγκωση ή σχηματισμό πτυχώσεων (dimples).

Αναλόγως εργάστηκαν και οι Glynos και Koutsos [10] σε μια αντίστοιχα πειραματική εργασία. Μελετούν φουσαλίδες τύπου biSphere με ακτίνα $2-6\ \mu\text{m}$, που περιέχουν αέριο άζωτο σε ατμοσφαιρική πίεση. Για τις μετρήσεις δύναμης-παραμόρφωσης χρησιμοποιούν ένα AFM του οποίου ο πρόβολος είναι επίπεδος (tipless).

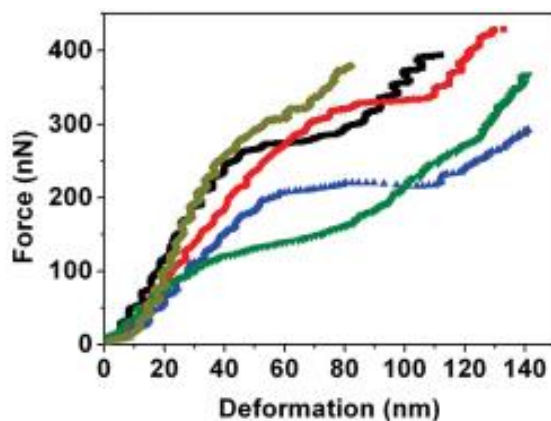
Είναι ιδιαίτερα ενδιαφέρον πως για τα πειράματά τους χρησιμοποιούν ένα πλήθος από προβόλους που χαρακτηρίζονται από διαφορετική ακαμψία. Στην [10] θα παρατηρήσουμε ότι βρέθηκαν διαφορετικές καμπύλες δύναμης-παραμόρφωσης. Ωστόσο, όλες χαρακτηρίζονται από μια αρχικά γραμμική περιοχή Εικόνα 1-6 και Εικόνα 1-7. Με περαιτέρω φόρτιση η συσχέτιση των δύο μεγεθών παύει να είναι γραμμική με ολοένα μειούμενη κλίση. Κατόπιν κάποιας παραμόρφωσης η σχέση γίνεται ξανά γραμμική. Σε αντίθεση με τους Lulevich et al. [7] οι Glynos και Koutsos [10] μέτρησαν μείωση του μέτρου ελαστικότητας με αύξηση της ακτίνας της φυσαλίδας, υποθέτοντας δεδομένη σχέση μεταξύ του πάχους και της ακτίνας του κελύφους. Τέλος παρατηρούν αύξηση του μέτρου ελαστικότητας με μείωση του πάχους. Η τελευταία παρατήρηση δικαιολογείται από τους ίδιους, διότι καθώς μειώνεται το πάχος του κελύφους η μορφολογία της επιφάνειας του γίνεται πιο ευάλωτη στην μοριακή δομή και τον προσανατολισμό των πολυμερικών αλυσίδων.



Εικόνα 1-6 Τυπική καμπύλη δύναμης-παραμόρφωσης, $k_c=0.12 \text{ N/m}$ για δύο φυσαλίδες μεγέθους $d=4.8 \mu\text{m}$ (κόκκινη γραμμή) και $d=2.5 \mu\text{m}$ (μπλε γραμμή).

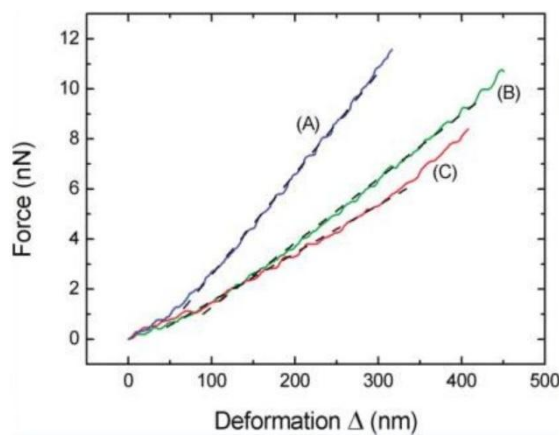


Εικόνα 1-7 Τυπική καμπύλη δύναμης-παραμόρφωσης ($k_c=1.14 \text{ N/m}$), για φυσαλίδες μεγέθους $d=2.6 \mu\text{m}$ (μαύρη γραμμή), $d=3.5 \mu\text{m}$ (κόκκινη γραμμή), $d=4.1 \mu\text{m}$ (μπλε γραμμή).



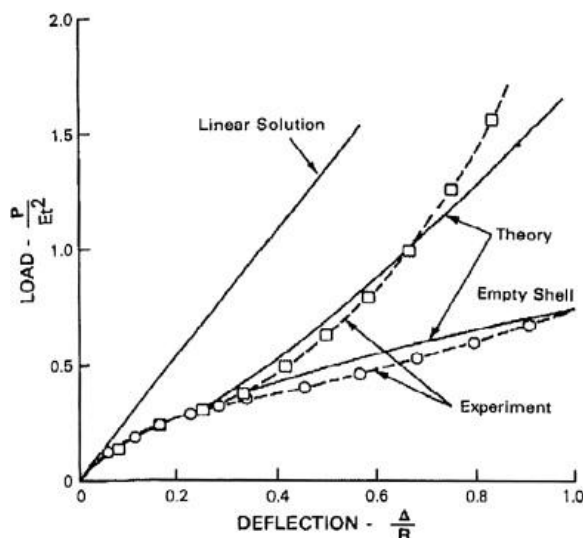
Εικόνα 1-8 Τυπική καμπύλη δύναμης-παραμόρφωσης ($k_c=1.14 \text{ N/m}$), που εμφανίζονται περιοχές αστάθειας, για φυσαλίδες μεγέθους $d=3.2 \mu\text{m}$ (σκούρο κίτρινο γραμμή), $d=3.1 \mu\text{m}$ (μαύρη γραμμή), $d=4.0 \mu\text{m}$ (κόκκινη γραμμή), $d=4.9 \mu\text{m}$ (μπλε γραμμή), $d=5.5 \mu\text{m}$ (πράσινη γραμμή).

Την μηχανική συμπεριφορά φυσαλίδων φωσφολιπιδίου μελέτησαν επίσης πειραματικά οι Santos et al. [11] οι οποίοι χρησιμοποιούν ένα AFM με επίπεδο πρόβολο (tipless). Σκοπός της εργασίας τους είναι να υπολογίσουν το μέτρο ελαστικότητας από τα διαγράμματα δύναμης-παραμόρφωσης. Το μέσο πάχος των φυσαλίδων που χρησιμοποιούν είναι 5 nm και η διάμετρος κυμαίνεται από 2.1-4.2 μm . Οι μετρήσεις τους περιορίζονται σε πολύ μικρές παραμορφώσεις και τα αντίστοιχα διαγράμματα δύναμης-παραμόρφωσης είναι γραμμικά βλ Εικόνα 1-9, ενώ καθώς μεγαλώνει η παραμόρφωση αρχίζει να αναδεικνύεται α μη γραμμικότητα στην καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης. Ενδιαφέρον παρουσιάζει μια αρχική περιοχή μηδενικής κλίσης η οποία σχετίζεται με την προσκόλληση της φυσαλίδας στον πρόβολο και ισοδυναμεί σε κάποια μικρή παραμόρφωση χωρίς την άσκηση εξωτερικής δύναμης [8]. Η περιοχή αυτή αγνοείται στον υπολογισμό του μέτρου ελαστικότητας. Το υπολογισμένο μέτρο ελαστικότητας κυμαίνεται από 300-900 Mpa και τείνει να αυξάνεται για φυσαλίδες με μεγαλύτερη διάμετρο.



Εικόνα 1-9 Καμπύλη δύναμης-παραμόρφωσης για διαφορετικές φυσαλίδες Η μπλε καμπύλη (A) αντιστοιχεί σε φυσαλίδα με διάμετρο $D=2.9 \mu\text{m}$ και $k_c=0.04 \text{ N/m}$. Η πράσινη καμπύλη (B) αντιστοιχεί σε φυσαλίδα με διάμετρο $D=3.0 \mu\text{m}$ και $k_c=0.026 \text{ N/m}$. Η κόκκινη καμπύλη (C) αντιστοιχεί σε φυσαλίδα με διάμετρο $D=2.1 \mu\text{m}$ και $k_c=0.019 \text{ N/m}$.

Τέλος, πειραματικά και αναλυτικά μελετήθηκε η παραμόρφωση γεμάτων με νερό και άδειων σφαιρικών κελυφών (μπάλες τένις) από τον Taber [12]. Στην εργασία του ο Taber υπολογίζει την δύναμη συναρτήσει της παραμόρφωσης και παρατηρεί ταύτιση των τιμών για παραμόρφωση μέχρι 20% μεταξύ γεμάτων και άδειων κελυφών. Αντιθέτως με περαιτέρω παραμόρφωση απαιτείται όλο και μεγαλύτερη δύναμη για την παραμόρφωση των γεμάτων κελυφών. Η παραμόρφωση κυριαρχείται από την κάμψη. Η μετατόπιση του ρευστού παίζει ρόλο σε μεγαλύτερες παραμορφώσεις. Στην Εικόνα 1-10 φαίνεται το διάγραμμα δύναμης παραμόρφωσης στο οποίο συγκρίνεται η αναλυτική λύση με τις πειραματικές μετρήσεις.



Εικόνα 1-10 Διάγραμμα δύναμης παραμόρφωσης για μπάλες τένις με $h/R=0.167$ (πείραμα) συγκρινόμενα με υπολογισμούς βασισμένους στην θεωρία κελυφών. Το πείραμα πραγματοποιήθηκε με άδειες μπάλες (κύκλοι) και γεμάτες με νερό μπάλες (τετράγωνα).

Σε αντίθεση με τον μεγάλο αριθμό πειραματικών εργασιών που περιγράφουν τις μηχανικές ιδιότητες των μικροφυσαλίδων, οι εργασίες που βασίζονται στην μοντελοποίηση και την αριθμητική προσομοίωση είναι ιδιαίτερα περιορισμένες.

Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η εργασία των Knoche και Kierfeld [13], οι οποίοι μελετούν αριθμητικά την συμπεριφορά των μικροφυσαλίδων σε λυγισμό υπό την επίδραση ομοιόμορφα κατανεμημένης πίεσης. Χαρακτηριστικό της εργασίας τους είναι η πλούσια απεικόνιση των παραμορφωμένων φυσαλίδων πάνω σε διαγράμματα διακλάδωσης, με τη βοήθεια των οποίων και κατάλληλο fitting συσχετίζουν την καμπυλότητα με το μέτρο ελαστικότητας.

Σημαντική για την κατανόηση της μηχανικής συμπεριφοράς των φυσαλίδων είναι και η εργασία των Vella et al. [14] που μελετούν αριθμητικά την συμπεριφορά σφαιρικών ελαστικών κελυφών υπό σημειακό φορτίο. Στην εργασία τους [14] μελετάται ο σχηματισμός πτυχώσεων στην αξιμουθιακή διεύθυνση και αφορά κελύφη ακτίνας 1 m.

Τέλος παρατίθεται για λόγους πληρότητας η βασική αρχή λειτουργίας του AFM με το οποίο διεξάγονται τα πειράματα.

Βασική αρχή λειτουργίας AFM

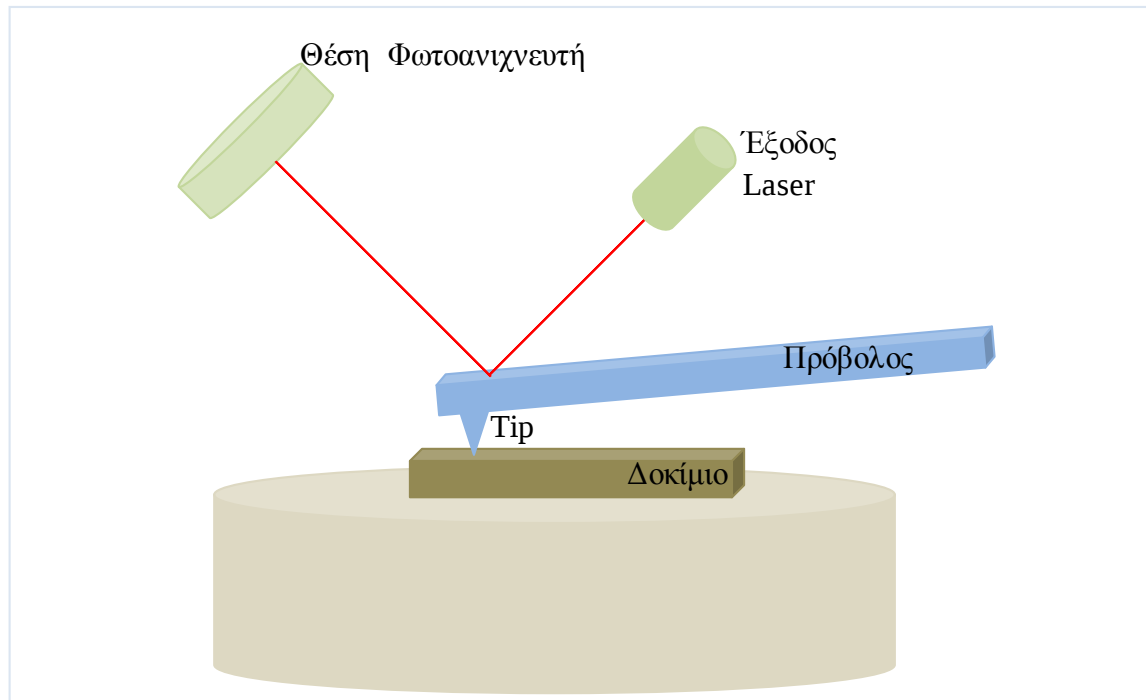
Στις αρχές της δεκαετίας του '80 οι Gerd Binnig και Heinrich Rohrer κατασκεύασαν τον πρόδρομο του AFM το μικροσκόπιο σάρωσης σήραγγας (STM), ανοίγοντας έτσι το δρόμο σε ένα νέο εργαλείο στα χέρια της επιστήμης. Το STM επέτρεπε την απεικόνιση αγωγίων και ημι-αγωγίων υλικών. Λίγο αργότερα το 1988 το πρώτο AFM ήταν πλέον διαθέσιμο. Το AFM ανήκει στην οικογένεια των μικροσκοπίων σάρωσης και έχει την δυνατότητα να αποτυπώνει την δομή επιφανειών καθώς και να μετράει επιφανειακές δυνάμεις σε γεωμετρίες της τάξεως των νανομέτρων. Στις μέρες μας το AFM χρησιμοποιείται ευρέως από επιστήμονες για τον χαρακτηρισμό υλικών, αλλά και δομών σε ατομικό επίπεδο (άτομα-μόρια).

Ένα τυπικό AFM αποτελείται από ένα μικροσκοπικό άκρο (tip) με μέση καμπυλότητα τάξεως 10-50 nm το οποίο είναι προσκολλημένο στο ελατήριο του προβόλου. Ωστόσο υπάρχουν και πρόβολοι που δεν διαθέτουν τέτοιο άκρο (tipless), βλ Σχήμα 1-1.

Η αρχή λειτουργίας του AFM βασίζεται στην κάμψη του ελατηρίου του προβόλου ως εξισορρόπηση των εξωτερικών ασκούμενων δυνάμεων. Στην περίπτωση προσκόλλησης μεταξύ του άκρου και της επιφάνειας αυτές οι δυνάμεις είναι της τάξεως 0.1-1 nN. Για να μετρηθούν τόσο μικρές δυνάμεις δεν απαιτείται μόνο ένα πολύ ευαίσθητο ελατήριο, αλλά και ένας «ευαίσθητος» τρόπος για την ανίχνευση της κάμψης του προβόλου. Για το σκοπό αυτό μια δέσμη laser προσπίπτει στο πίσω μέρος του προβόλου, η οποία ανακλάται και καταγράφεται.

Καθώς αλλάζει η παραμόρφωση του προβόλου αλλάζει και η διεύθυνση της ανακλώμενης ακτίνας. Η αλλαγή αυτή μετατρέπεται σε ηλεκτρικό σήμα και μέσω

ηλεκτρονικού υπολογιστή και κατάλληλου προγράμματος γίνεται απεικόνιση της επιφάνειας ή μετράται η δύναμη [15].



Σχήμα 1-1 Σχηματική αναπαράσταση AFM

1.3 Οργάνωση Μεταπτυχιακής Εργασίας

Το υπόλοιπο της εργασίας χωρίζεται σε τρεις ενότητες που καταλαμβάνουν τα κεφάλαια 2-5. Συγκεκριμένα:

Στο Κεφάλαιο 2 αναπτύσσεται η θεωρία στην οποία βασίζεται η παρούσα εργασία.

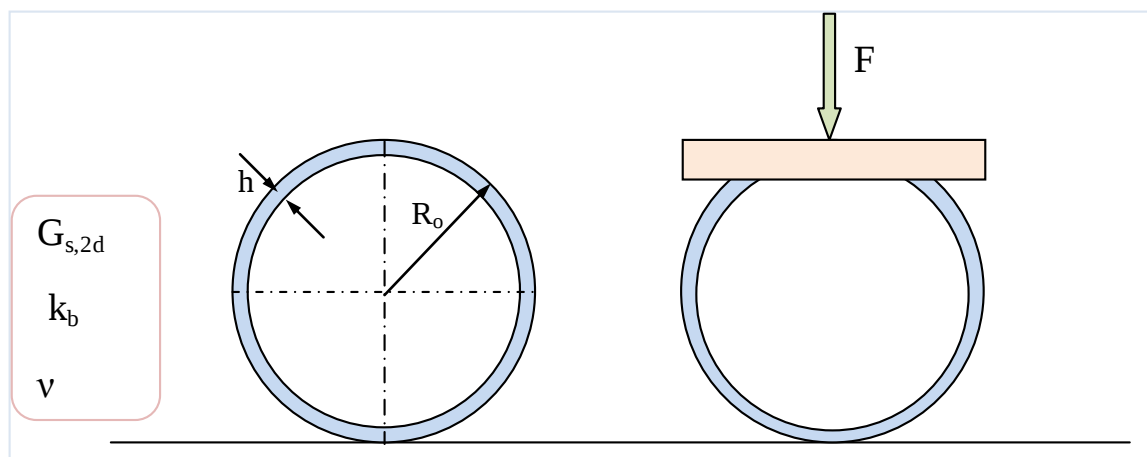
Στο Κεφάλαιο 3 περιγράφεται η αριθμητική ανάλυση του προβλήματος.

Στο Κεφάλαιο 4 και συγκεκριμένα στις ενότητες (4.1-4.4) παρατίθενται τα αποτελέσματα της εργασίας με βάση προσομοιώσεις σε κατάλληλα διαγράμματα και γίνεται σύγκριση με διαθέσιμα πειραματικά αποτελέσματα. Στην ενότητα 4.5 μελετάται το πρόβλημα της επαφής μεταξύ προβόλου και φυσαλίδας. Τέλος στην ενότητα 4.6 τα αποτελέσματα οργανώνονται και παρουσιάζονται με βάση τις κύριες αδιάστατες παραμέτρους του προβλήματος που χαρακτηρίζουν το σχετικό μέγεθος των αντιστάσεων σε εφελκυσμό και κάμψη του κελύφους και σε συμπίεση της μικροφυσαλίδας.

Τα τελικά συμπεράσματα της μεταπτυχιακής εργασίας και κατευθύνσεις για περαιτέρω έρευνα παρουσιάζονται στο Κεφάλαιο 5.

2. Θεωρητική Ανάλυση

Στο κεφάλαιο αυτό περιγράφεται το θεωρητικό υπόβαθρο της εργασίας, το οποίο βασίζεται κατά κύριο λόγο στην θεωρία των κελυφών, αφού μπορούμε να θεωρήσουμε την φυσαλίδα ως συνεχές μέσο και επιπλέον ο λόγος του πάχους προς την ακτίνα είναι αρκετά μικρότερος του 0.1 ($h/R \ll 0.1$). Το πρόβλημα που προσπαθεί να προσεγγίσει η παρούσα εργασία περιγράφεται από το Σχήμα 2-1.



Σχήμα 2-1 Σχηματική αναπαράσταση προβλήματος, αριστερά απαραμόρφωτη φυσαλίδα, δεξιά παραμορφωμένη

2.1 Θεωρία Παραμόρφωσης Μικροφυσαλίδων

Αρχικά έχουμε μια φυσαλίδα με ακτίνα R_0 , η οποία παραμορφώνεται υπό την άσκηση εξωτερικής δύναμης F μέσω του προβόλου του AFM.

Στην παρούσα εργασία για την περιγραφή των γεωμετρικών και ελαστικών παραμέτρων των φυσαλίδων διακρίνουμε δύο περιπτώσεις:

Φυσαλίδες πολυμερικού υλικού (biSphere)	Φυσαλίδες από λιπίδιο (BR14 ή Phospholipid)
<u>Γεωμετρία:</u>	<u>Γεωμετρία:</u>
Αρχική ακτίνα: R_0	Αρχική ακτίνα: R_0
Πάχος κελύφους: h	
<u>Ελαστικές ιδιότητες:</u>	<u>Ελαστικές ιδιότητες:</u>
Μέτρο διάτμησης: G_s	Εκτατική δυσκαμψία: χ
Καμπτική δυσκαμψία: $k_b = k_b(G_s, h/R_0)$	Καμπτική δυσκαμψία: k_b

Η εκτατική δυσκαμψία ορίζεται ως:

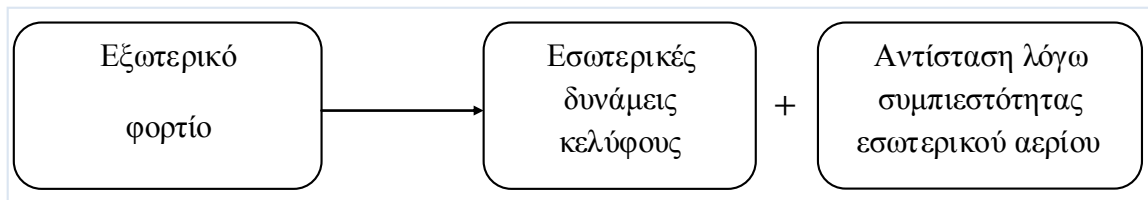
$$\chi = 3G_s h \quad (2-1)$$

Στην περίπτωση της φυσαλίδας τύπου biSphere το μέτρο καμπτικής δυσκαμψίας υπολογίζεται από την θεωρία των κελυφών ως:

$$k_b = \frac{3G_s h^3}{12(1-\nu^2)} \stackrel{3G_s=E}{=} \frac{Eh^3}{12(1-\nu^2)} \quad (2-2)$$

Ενώ στην περίπτωση των λιπιδίων θεωρούμε μια τιμή για το k_b που δεν υπολογίζεται από το πάχος και το μέτρο διάτμησης, αλλά είναι ανεξάρτητη παράμετρος μαζί με την εκτατική δυσκαμψία χ . Ο λόγος που κάνουμε αυτή την διαφοροποίηση έχει να κάνει με την αδυναμία να μετρηθεί το πάχος των φυσαλίδων από λιπίδιο.

Με την άσκηση φορτίου στην επιφάνεια της φυσαλίδας αναπτύσσονται εφελκυστικές και καμπτικές τάσεις ως εξισορρόπηση των εξωτερικών δυνάμεων. Επιπλέον στο εσωτερικό της φυσαλίδας υπάρχει αέριο το οποίο ασκεί κάποια επιπλέον αντίσταση στο ασκούμενο εξωτερικό φορτίο. Στο Σχήμα 2-2 μπορούμε να δούμε μια αναπαράσταση της ισορροπίας των δυνάμεων στην επιφάνεια της φυσαλίδας.



Σχήμα 2-2 Σχηματική αναπαράσταση ισορροπίας δυνάμεων

2.1.1 Σημειακό Φορτίο

Σε αυτή την περίπτωση θεωρούμε πως το συγκεντρωμένο φορτίο (δύναμη) ασκείται σε μια πολύ μικρή περιοχή. Αυτή η θεώρηση αν και δεν φαίνεται ρεαλιστική χρησιμοποιείται ευρέως, εξαιτίας της απλότητας της, σαν υπόθεση για τον προσδιορισμό των ελαστικών σταθερών [6], [9], [10].

Σημειακό φορτίο-μικρές παραμορφώσεις

Ο πόλος της σφαίρας μετατοπίζεται κατά Δ στην περιοχή που ασκείται το φορτίο. Σε αρχικά μικρές τιμές της κανονικοποιημένης μετατόπισης (Δ/R_0) η παραμορφωμένη περιοχή επιμηκώνεται αποκτώντας, περίπου, επίπεδο σχήμα με κυκλική επιφάνεια επαφής με τον πρόβολο, ο οποίος συνήθως έχει αρκετά μεγαλύτερη ακτίνα καμπυλότητας από την μικροφυσαλίδα. Πέραν αυτής της μικρής περιοχής όπου υπάρχουν παραμορφώσεις η μικροφυσαλίδα διατηρεί το σφαιρικό σχήμα της.

Οι εφελκυστικές δυνάμεις που αναπτύσσονται κυριαρχούν σε σχέση με τις καμπτικές. Αυτό φαίνεται πιο ξεκάθαρα όταν η φυσαλίδα παραμορφώνεται ομοιόμορφα κατά Δ . Τότε το μήκος της περιφέρειας της φυσαλίδας αυξάνεται κατά $2\pi\Delta$. Έτσι η σχετική έκταση της φυσαλίδας είναι:

$$\varepsilon = \frac{2\pi\Delta}{2\pi R_o} = \frac{\Delta}{R_o} \quad (2-3)$$

Και κατά συνέπεια ο τανυστής των παραμορφώσεων είναι ανάλογος του Δ . Επιπλέον ο τανυστής των τάσεων θα είναι ανάλογος του $E\Delta/R_o$ και η ενέργεια παραμόρφωσης ανά μονάδα επιφανείας θα είναι:

$$E_s \sim Eh \left(\frac{\Delta}{R_o} \right)^2 \quad (2-4)$$

Παράλληλα, η ενέργεια λόγω κάμψης θα είναι:

$$E_b \sim Eh^3 \left(\frac{\Delta}{a^2} \right)^2 \quad (2-5)$$

όπου a συμβολίζει την ακτίνα του σχεδόν επίπεδου δίσκου με το παραμορφωμένο κέλυφος. Επιπλέον, ο λόγος των δύο ενεργειών είναι:

$$\frac{E_s}{E_b} \sim \left(\frac{a^2}{hR_o} \right)^2 \quad (2-6)$$

Προκειμένου να εξισορροπήσουν οι δύο αυτές συνιστώσες της ελαστικής ενέργειας θα πρέπει $a=(hR_o)^{1/2}$. Τέλος το άθροισμα των δύο ενεργειών, $E_s + E_b \approx Eh^2\Delta^2 / R_o$, σε συνδυασμό με την μηχανική ενέργεια λόγω της εξωτερικής δύναμης, $F\Delta$, ελαχιστοποιείται ως προς την μετατόπιση Δ όταν $F \approx (Eh^2 / R_o)\Delta$ [16]. Ο Reissner [17] διατύπωσε την ίδια σχέση δύναμης παραμόρφωσης για σημειακό (ή συγκεντρωμένο) φορτίο που ασκείται στον πόλο ενός σφαιρικού κελύφους. Η σχέση δίνεται από την εξίσωση (2-7 και ισχύει για μικρές παραμορφώσεις. Επιπλέον αναφέρεται σε μια περιοχή κοντά στον πόλο.

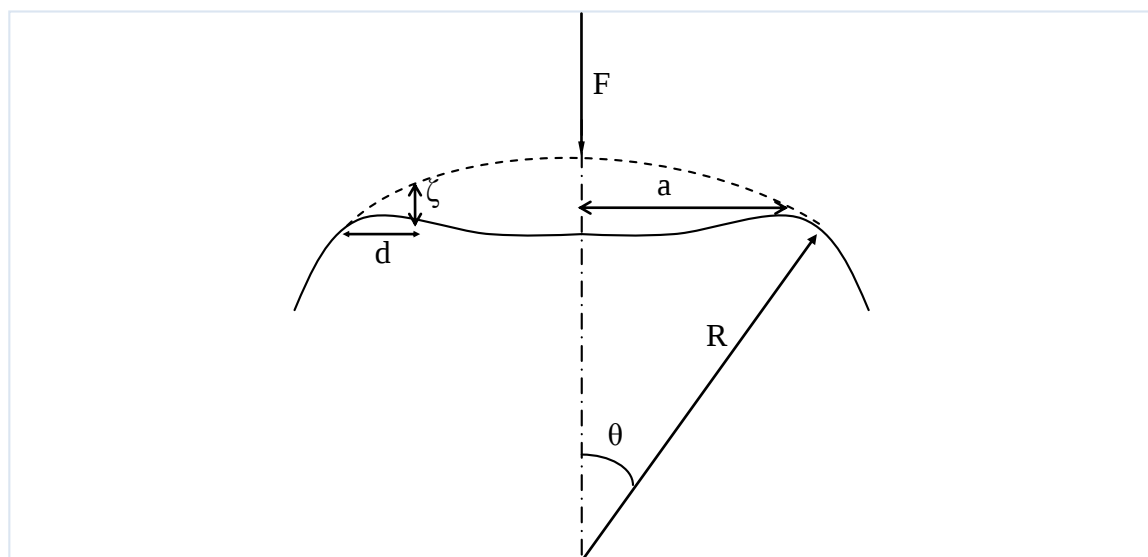
$$F = \frac{4}{\sqrt{3(1-\nu^2)}} \frac{Eh^2}{R_o} \Delta \quad (2-7)$$

Θα παρατηρήσουμε πως η σχέση δύναμης παραμόρφωσης είναι γραμμική, κάτι που όντως παρατηρείται σε μικρές παραμορφώσεις. Η σχέση (2-7 είναι ιδιαίτερα χρήσιμη στην μελέτη των μηχανικών ιδιοτήτων των φυσαλίδων διότι για δεδομένη γεωμετρία (R_o, h) και κλίση στην καμπύλη δύναμης-παραμόρφωσης (F/Δ) είναι δυνατό

να υπολογιστεί το μέτρο ελαστικότητας του κελύφους. Είναι σημαντικό να τονίσουμε πως στην θεωρία των κελυφών μικρές θεωρούνται οι παραμορφώσεις που είναι ανάλογες του πάχους του κελύφους. Η σχέση που προτείνει ο Reissnerδεν μπορεί να εφαρμοστεί σε περιπτώσεις που έχουμε μεγαλύτερες παραμορφώσεις και η σχέση δύναμης παύει να είναι γραμμική. Το αντίστοιχο πρόβλημα μελέτησε ο Pogorelov [18].

Σημειακό φορτίο-μεγαλύτερες παραμορφώσεις

Όσο μεγαλώνει η φόρτιση ανάλογα μεγαλώνει η παραμόρφωση με αποτέλεσμα η περιοχή να παύει να είναι σφαιρική, ενώ ταυτόχρονα έχουμε σχηματισμό «κρατήρα» λόγω κάμψης (Σχήμα 2-3).



Σχήμα 2-3 Σχηματισμός κρατήρα υπό την επίδραση εξωτερικού σημειακού φορτίου

Το μέγεθος του σχηματιζόμενου «κρατήρα» είναι καθοριστικής σημασίας για την ανάλυσή μας καθώς ένας ιδιαίτερα μεγάλος «κρατήρας» μπορεί να οδηγήσει σε απώλεια επαφής μεταξύ φυσαλίδας και προβόλου, για κατανεμημένο εξωτερικό φορτίο. Σε αυτή την περίπτωση η περαιτέρω παραμόρφωση θα είναι αποτέλεσμα επαφής του προβόλου με την φυσαλίδα πάνω σε μια περιοχή με σχήμα δακτυλίου. Αυτό μπορούμε να το αποφύγουμε θεωρώντας ένα «μαλακό» πρόβολο (όχι όμως πιο μαλακό από τη φυσαλίδα) ο οποίος είναι δυνατό να παραμορφώνεται και να ακολουθεί το σχήμα της φυσαλίδας. Περισσότερη ανάλυση σχετικά με την περίπτωση κατανεμημένου φορτίου δίδεται στη ενότητα 2.3.

Κατά την φάση δημιουργίας κρατήρα, λόγω σημειακού φορτίου, η ελαστική ενέργεια λόγω εφελκυσμού και κάμψης συγκεντρώνεται σε μία στενή λωρίδα πάχους δ και ακτίνας a γύρω από τον άξονα συμμετρίας. Το άνοιγμα του κρατήρα είναι γωνίας θ έτσι ώστε $a = R_0 \sin \theta \approx R_0$, ενώ το βάθος του κρατήρα, Δ , δίνεται από την σχέση $\Delta = R_0 (1 - \cos \theta) \approx R_0 \theta^2 = R_0 (a / R_0)^2 = a^2 / R_0$. Η συνολική ενέργεια ανά μονάδα

επιφάνειας, λόγω εφελκυσμού καθορίζεται από την μετατόπιση, Δ , μέσα στην παραπάνω στενή λωρίδα,[16]

$$E_s \sim Eh \left(\frac{\zeta}{R^2} \right)^2 \quad (2-8)$$

ενώ η ενέργεια λόγω κάμψης ανά μονάδα επιφάνειας δίνεται από την σχέση [16]:

$$E_b \sim Eh^3 \left(\frac{\zeta}{d^2} \right)^2 \quad (2-9)$$

Η ποσότητα d εκφράζει το εύρος της καμπτόμενης/εφελκυσμένης περιοχής του κελύφους (Σχήμα 2-3). Η επιφάνεια που υφίσταται τις παραπάνω μεταβολές καθορίζεται από τον κυκλικό δίσκο ακτίνας a και πάχους d . Η μετατόπιση προκύπτει από την γεωμετρία του προβλήματος και πιο συγκεκριμένα από την τοπική καμπύλωση του κελύφους στην περιοχή εύρους d . Το κάθετο διάνυσμα μεταβάλλεται κατά γωνία θ μέσα σε μήκος d και συνεπώς η καμπυλότητα τοπικά είναι $\theta/d \approx \zeta/d^2 \rightarrow \zeta \approx ad/R_0$. Τότε πολλαπλασιάζοντας και τις δύο ενέργειες με το εμβαδό της καμπτόμενης περιοχής ($\sim ad$) παίρνουμε $Eh^3 a^3/R^2 d$ και $Ehd^3 a^3/R^4$ και απαιτώντας οι ενέργειες εφελκυσμού και κάμψης να είναι ίδιας τάξης μεγέθους έχουμε:

$$E_b \approx E_s \Rightarrow \frac{Eh^3 a^3}{R^2 d} \approx \frac{Ehd^3 a^3}{R^4} \Rightarrow$$

$$d \sim \sqrt{hR} \quad (2-10)$$

Με αύξηση της φόρτισης παρατηρούμε πως αντίστοιχα μεγαλώνουν και οι παραμορφώσεις. Η συμπεριφορά σε αυτή την περίπτωση περιγράφεται κατά κύριο λόγο από λυγισμό, δηλαδή έχουμε σχηματισμό «κρατήρα», ο οποίος μεγαλώνει με αύξηση της φόρτισης. Επιπλέον η κάμψη αρχίζει να γίνεται σημαντική σε σχέση με τον εφελκυσμό. Ο Rogorelon [18] υποθέτοντας ότι η ενέργεια παραμόρφωσης είναι συγκεντρωμένη στην περιοχή του κρατήρα και αντικαθιστώντας την τελευταία σχέση στον ορισμό της συνολικής ελαστικής ενέργειας κατέληξε στην σχέση

$$E_b + E_s \approx Ea^3 h^{5/2} / R_0^{5/2} \approx Eh^{5/2} \Delta^{3/2} / R_0 \quad (2-11)$$

Ελαχιστοποιώντας την συνολική ενέργεια, λαμβάνοντας υπόψη και την μηχανική ενέργεια $F\Delta$ λόγω και της εξωτερικής δύναμης, παίρνουμε για την παραμόρφωση υπό σημειακό φορτίο.

$$F \approx \sqrt{\frac{E^2 h^5}{R_0^2}} \sqrt{\Delta} \quad (2-12)$$

Μια σημαντική διαφοροποίηση από την ανάλυση του Reissner είναι ότι πια η σχέση δύναμης-παραμορφωσης παύει να είναι γραμμική, αλλά η δύναμη πλέον

εξαρτάται από την τετραγωνική ρίζα της παραμόρφωσης. Η αλλαγή αυτή παρατηρείται σε αρκετές πειραματικές εργασίες [6], [9], [10], αλλά και στην παρούσα. Ο συνδυασμός των (2-7 και (2-12) μας επιτρέπει να υπολογίσουμε πέρα από το μέτρο ελαστικότητας E , και το μέτρο κάμψης k_b , βλ. Κεφάλαιο 4.

2.2 Συμπιεστότητα αερίου

Μια σημαντική βελτίωση της μοντελοποίησης της μηχανικής συμπεριφοράς των φυσαλίδων είναι να θεωρήσουμε ότι οι φυσαλίδες δεν είναι άδειες, αλλά περιέχουν κάποιο ιδανικό αέριο. Συνήθως συναντάμε άζωτο στο εσωτερικό των φυσαλίδων, το οποίο σε πίεση μίας ατμόσφαιρας και θερμοκρασία δωματίου ($\sim 25^\circ\text{C}$) μπορεί να θεωρηθεί ως ιδανικό αέριο.

Σε αυτή την περίπτωση η μαθηματική περιγραφή της μεταβολής της πίεσης στο εσωτερικό της φυσαλίδας μετά την άσκηση του εξωτερικού φορτίου F γίνεται από την έκφραση:

$$PV^\gamma = \text{σταθερό}$$

Πιο συγκεκριμένα έχουμε:

$$P_{\text{int},o} V_o^\gamma = P_{\text{int}} V \Rightarrow P_{\text{int}} = P_{\text{int},o} \left(\frac{V_o}{V} \right)^\gamma \quad (2-13)$$

Όπου για ισοθερμοκρασιακή μεταβολή $\gamma=1$. Η ενέργεια λόγω συμπίεσης του εσωτερικού αερίου είναι:

$$E_c = -P_{st} V_i \ln V \Big|_{V_i}^{V_f} + P_{st} (V_f - V_i) \quad (2-14)$$

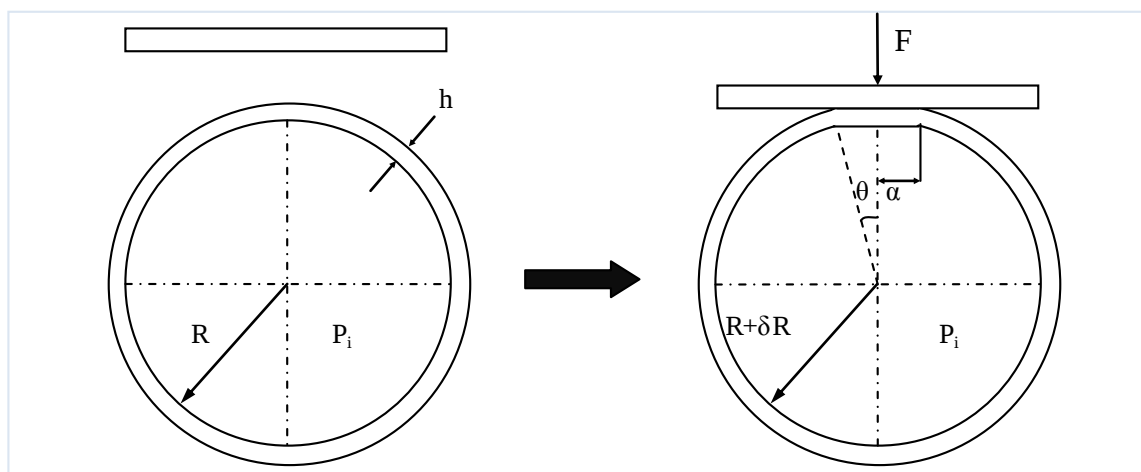
και επαυξάνει την συνολική δυσκαμψία της μικροφυσαλίδας.

Ο Shanahan [19] μελετάει την επαφή ενός στερεού επίπεδου σώματος με σφαιρικό κέλυφος γεμάτο με κάποιο ιδανικό αέριο. Αγνοώντας τάσεις λόγω κάμψης, αλλά θεωρώντας μόνο τάσεις εφελκυστικές και εφαρμόζοντας ισορροπία μακριά από την παραμορφωμένη περιοχή υπολογίζει την μεταβολή της ακτίνας της σφαίρας.

$$\delta R \approx \frac{3R_o^2 P_i (1-\nu) \theta^4}{16 [2Eh + 3R_o P_i (1-\nu)]} \equiv \lambda R_o \theta^4 \quad (2-15)$$

Όπου το λ είναι μια σταθερά που εξαρτάται από τις ελαστικές ιδιότητες και την γεωμετρία, καθώς και την πίεση του αερίου στο εσωτερικό του κελύφους. Η παράμετρος λ εκφράζει το λόγο της αντίστασης του αερίου και προς την αντίσταση που αναπτύσσει

το κέλυφος λόγω του πάχους που διαθέτει και του μέτρου ελαστικότητας. Είναι, εν ολίγοις, ο λόγος της δύναμης λόγω συμπίεστος προς της ελαστικές δυνάμεις.



Σχήμα 2-4 Σχηματική αναπαράσταση σφαιρικού κελύφους σε επαφή με στερεό επίπεδο σώμα.

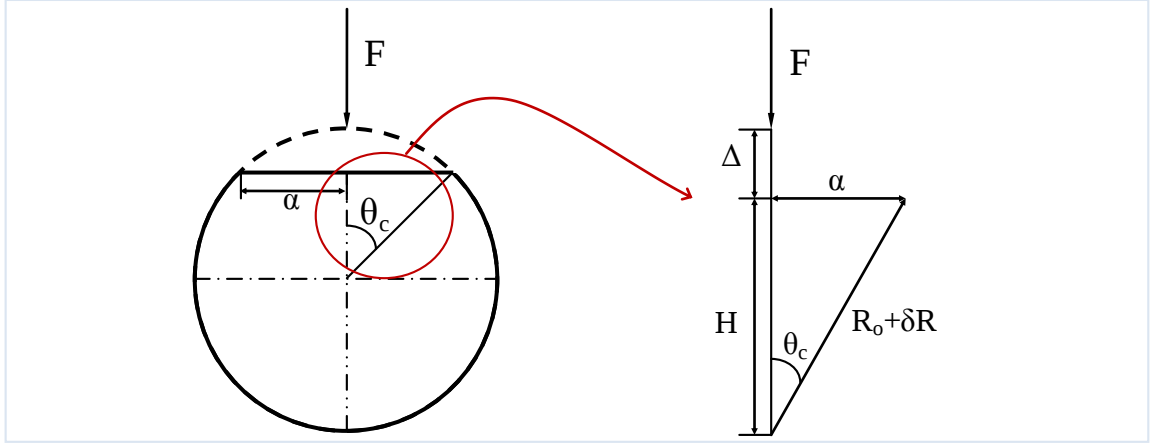
2.3 Επαφή προβόλου AFM και φυσαλίδας

Ένα από τα ζητήματα που απασχολούν την παρούσα εργασία είναι η επαφή μεταξύ του προβόλου του AFM και της επιφάνειας της φυσαλίδας. Όταν ο πρόβολος πιέζει την φυσαλίδα υπάρχει μια περιοχή επαφής των δύο σωμάτων, η οποία για μικρές παραμορφώσεις δεν είναι σημαντική. Σημαντικό ρόλο στην μορφή αυτής της περιοχής παίζει και η άκρη του προβόλου. Όταν πρόκειται για επίπεδο πρόβολο (tipless) η περιοχή επαφής είναι σημαντική εξαρχής. Ανάλογη υπόθεση μπορεί να διατυπωθεί για την περίπτωση προβόλου πεπερασμένης ακτίνας καμπυλότητας πλην όμως αρκετά μεγαλύτερης από αυτήν της μικροφυσαλίδας. Στην προσπάθεια να μοντελοποιήσουμε την περιοχή επαφής εισάγουμε μοντέλα από την βιβλιογραφία. Πιο συγκεκριμένα μελετώνται τα μοντέλα του Reissner και Pogorelov για σημειακό φορτίο και το μοντέλο Hertz για να μελετηθεί η επαφή μεταξύ των δύο σωμάτων.

2.3.1 Κατανομημένο Φορτίο

Κατά την μέτρηση δύναμης και παραμόρφωσης με AFM χρησιμοποιείται πρόβολος ο οποίος στην άκρη του είτε έχει κάποια πεπερασμένη καμπυλότητα είτε είναι επίπεδος. Και στις δύο περιπτώσεις η περιοχή που έρχονται σε επαφή ο πρόβολος και η φυσαλίδα έχει ορισμένο μήκος και η άσκηση του φορτίου δεν είναι πια σημειακή. Σε αυτό το κομμάτι της εργασίας θα προσπαθήσουμε να συσχετίσουμε το μήκος της παραμορφωμένης περιοχής α με την ασκούμενη δύναμη F .

Με τη βοήθεια του Σχήμα 2-5 έχουμε:



Σχήμα 2-5 Ανάλυση παραμόρφωσης φουσαλίδας

Η μετατόπιση Δ του πόλου στην περιοχή που εφαρμόζεται η δύναμη είναι:

$$\Delta = R_0 - H = R_0 - R \cos \theta_c = R_0 - (R_0 + \delta R) \cos \theta_c \Rightarrow$$

$$\Delta = R_0 (1 - \cos \theta_c) - \delta R \cos \theta_c \quad (2-16)$$

Αναπτύσσοντας το $\cos \theta$ σε σειρά Taylor παίρνουμε:

$$\cos \theta_c = \cos 0^\circ - \frac{\sin 0^\circ}{1!} + \frac{\cos 0^\circ}{2!} (\theta_c - 0^\circ)^2 + O(\theta_c^4) = 1 - \frac{\theta_c^2}{2} + O(\theta_c^4) \quad (2-17)$$

Θεωρώντας μικρές παραμορφώσεις μπορούμε να αγνοήσουμε όρους μεγαλύτερης τάξης. Έτσι αντικαθιστώντας την (2-17) στην (2-16) έχουμε:

$$\Delta = R_0 \frac{\theta_c^2}{2} - \delta R \left(1 - \frac{\theta_c^2}{2} \right) \quad (2-18)$$

Η μεταβολή της ακτίνας δR μπορεί να υπολογίζεται από την εξίσωση (2-15)

Έτσι έχουμε:

$$\Delta = R_0 \frac{\theta_c^2}{2} - \lambda R_0 O(\theta_c^4) \quad (2-19)$$

Υπολογίζουμε την παράμετρο λ για την φουσαλίδα τύπου BR14:

$$\lambda = \frac{1}{16 \left[\frac{2Eh}{3R_0 P_{st} (1-\nu)} + 1 \right]} = \frac{1}{16 \left[\frac{2 \cdot 15 \cdot 10^4 \cdot 6 \cdot 10^{-7}}{3 \cdot 2.6 \cdot 10^{-6} \cdot 1.01 \cdot 10^5 (1-0.5)} + 1 \right]} = 4.2 \cdot 10^{-2} \quad (2-20)$$

Ομοίως για την φουσαλίδα τύπου biSphere:

$$\lambda = \frac{1}{16 \left[\frac{2Eh}{3R_o P_{st} (1-\nu)} + 1 \right]} = \frac{1}{16 \left[\frac{2 \cdot 2.9 \cdot 10^9 \cdot 39 \cdot 10^{-9}}{3 \cdot 2.6 \cdot 10^{-6} \cdot 1.01 \cdot 10^5 (1-0.5)} + 1 \right]} = 1 \cdot 10^{-4} \quad (2-21)$$

Παρατηρούμε δηλαδή ότι η παράμετρος λ είναι ένας μικρός αριθμός και επιπλέον πολλαπλασιάζει ένα όρο που είναι τέταρτης τάξης, άρα μπορούμε να τον αγνοήσουμε.

$$\Delta = R_o \frac{\theta_c^2}{2} \quad (2-22)$$

Από όπου τελικά μπορούμε να εκτιμήσουμε ότι για μικρές παραμορφώσεις:

$$\theta_c = \left(2 \frac{\Delta}{R_o} \right)^{0.5} \quad (2-23)$$

Ο υπολογισμός της γωνίας θ_c επιτρέπει και τον υπολογισμό του τόξου a . Με τη βοήθεια της γεωμετρίας της παραμορφωμένης κατάστασης έχουμε:

$$a = (R_o + \delta R) \sin \theta_c \cong R_o \sin \theta_c \stackrel{\text{Ανάπτυγμα Taylor}}{=} R_o \left(\sin 0^\circ + \frac{\cos 0^\circ}{1!} (\theta_c - 0) + O(\theta_c^2) \right) \Rightarrow$$

$$a = R_o \theta_c \quad (2-24)$$

Επίσης, ο Landau στην εργασία του [16] για την παραμόρφωση σφαιρικών κελυφών δίνει την σχέση δύναμης-παραμόρφωσης ως εξής:

$$\frac{\Delta}{R_o} \sim \frac{F}{Eh^2} \quad (2-25)$$

Οπότε συνδυάζοντας τις εξισώσεις (2-23, (2-24 και (2-25 έχουμε:

$$\frac{a}{R_o} = \theta_c = \left(2 \frac{F}{Eh^2} \right)^{0.5} \quad (2-26)$$

Επιπλέον από τον ορισμό του επιφανειακού μέτρου διαστολής έχουμε :

$$x = Eh = 3G_s h \quad (2-27)$$

και

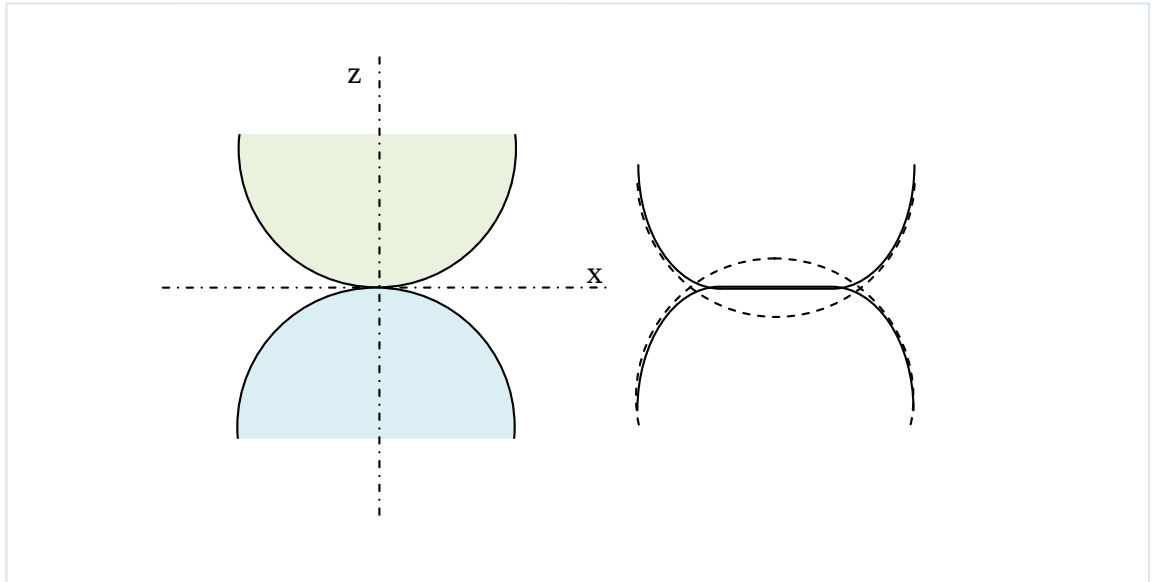
$$k_b = \frac{3G_s h^3}{12(1-\nu^2)} \stackrel{(2-22)}{=} \frac{x h^2}{12(1-\nu^2)} \Rightarrow$$

$$h^2 = \frac{12k_b(1-\nu^2)}{x} \quad (2-28)$$

Οπότε αντικαθιστώντας τις (2-27 και (2-28 στην (2-26 έχουμε:

$$\begin{aligned} \theta_c &= \left(2 \frac{F}{E h^2} \right)^{0.5} = \left(\frac{2F}{\frac{x}{h} h^2} \right)^{0.5} = \left(\frac{2F}{x h} \right)^{0.5} = \left(\frac{2F}{x \left(\frac{12k_b(1-\nu^2)}{x} \right)^{0.5}} \right)^{0.5} = \left(\frac{2F}{\left(\frac{12x^2 k_b(1-\nu^2)}{x} \right)^{0.5}} \right)^{0.5} \Rightarrow \\ \theta_c &= \left(\frac{2F}{(12x k_b(1-\nu^2))^{0.5}} \right)^{0.5} \end{aligned} \quad (2-29)$$

Το βασικό συμπέρασμα από την παραπάνω ανάλυση και ιδιαίτερα από την εξίσωση (2-29 είναι πως ασκώντας μία δύναμη F στην φυσαλίδα θα έχουμε ένα μήκος a ή μια γωνία θ_c τα οποία εξαρτώνται από την τετραγωνική ρίζα της ασκούμενης



Σχήμα 2-6 Επαφή δύο σφαιρικών σωμάτων. Αριστερά απλή επαφή χωρίς παραμόρφωση, δεξιά επιπλέον φόρτιση και παραμόρφωση σε ένα επίπεδο.

δύναμης.

Συνεπώς ένας επί πλέον τρόπος εκτίμησης των παραμέτρων του κελύφους θα μπορούσε να είναι μέσω της παραπάνω σχέσης που δίνει την έκταση της παραμόρφωσης του κελύφους αναλόγως της δύναμης.

Ο Hertz [16] μελέτησε την επαφή δύο συμπαγών σφαιρών έχοντας αρχικά σημειακή επαφή και στη συνέχεια καθώς η μία ασκεί δύναμη στην άλλη παραμορφώνονται σε ένα επίπεδο. Η δύναμη στην επιφάνεια επαφής απέδειξε ότι δεν είναι σταθερή αλλά έχει μια κατανομή με μέγιστο στο αρχικό σημείο επαφής. Στο Σχήμα 2-6 φαίνεται το πρόβλημα που μοντελοποίησε ο Hertz. Στο σημείο αυτό είναι σημαντικό να αναφέρουμε πως το τόξο επαφής a των δύο σωμάτων είναι ανάλογο με την κυβική ρίζα της συνολικής δύναμης.

$$a \sim F^{1/3} \quad (2-30)$$

Αυτό γενικά είναι σε αντίθεση με την ανάλυση που γίνεται στην παρούσα εργασία, (σχέση (2-29), ωστόσο η διαφοροποίηση δικαιολογείται καθώς ο Hertz μελετάει στερεά σώματα σε επαφή, ενώ εδώ μελετάται κέλυφος σε επαφή με στερεό σώμα

Η κατανομή δύναμης δίνεται από τον ίδιο [16] ως:

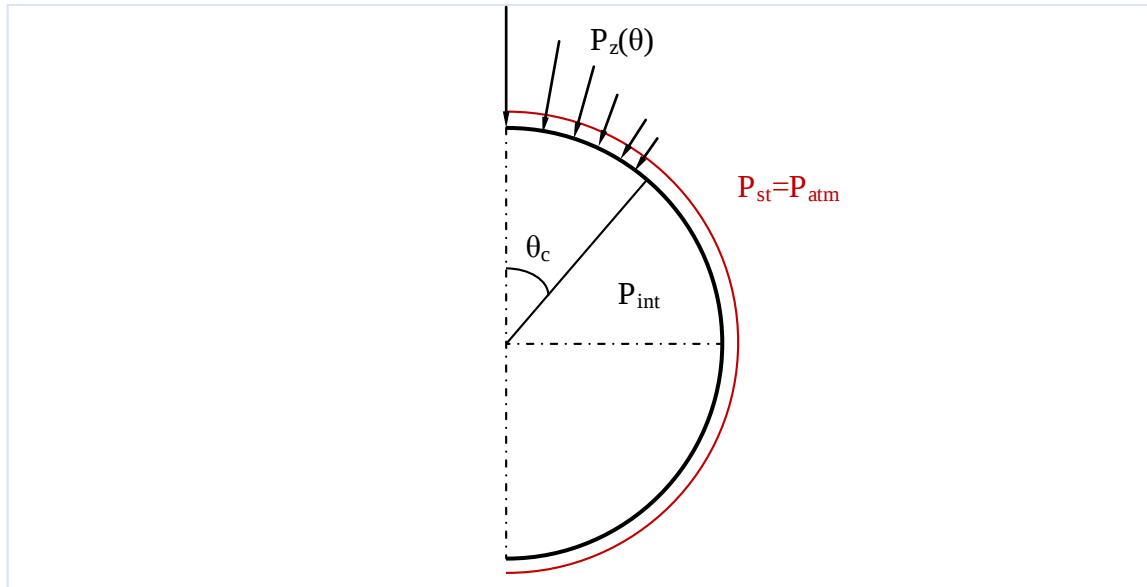
$$P_z(x, y) = \frac{3F}{2\pi a^2} \left(1 - \frac{x^2 + y^2}{a^2} \right)^{0.5} \quad (2-31)$$

Την σχέση (2-31) είναι δυνατό να την αδιαστατοποιήσουμε, θεωρώντας ότι επιλύουμε στο επίπεδο xz ($y=0$)

$$\begin{aligned} P_z(x) &= \frac{3F}{2\pi a^2} \left(1 - \frac{x^2}{a^2} \right)^{0.5} = \frac{3F}{2\pi a^2} \left(1 - \frac{\left(\frac{x}{R_o} \right)^2}{\left(\frac{a}{R_o} \right)^2} \right)^{0.5} = \frac{3F}{2\pi a^2} \left(1 - \frac{R^2 \sin^2 \theta}{\sin^2 \theta_c} \right)^{0.5} \cong \\ &= \frac{3F}{2\pi \left(\frac{a}{R_o} \right)^2 R_o^2} \left(1 - \frac{R^2 \sin^2 \theta}{\sin^2 \theta_c} \right)^{0.5} \Rightarrow \frac{P_z(\theta)}{P_{st}} = \frac{3}{2\pi \sin^2 \theta_c} \frac{F}{P_{st} R_o^2} \left(1 - \frac{R^2 \sin^2 \theta}{\sin^2 \theta_c} \right)^{0.5} \Rightarrow \\ &\frac{P_z(\theta)}{P_{st}} = \frac{3F^*}{2\pi \sin^2 \theta_c} \left(1 - \frac{R^2 \sin^2 \theta}{\sin^2 \theta_c} \right)^{0.5} \end{aligned} \quad (2-32)$$

Η παραπάνω σχέση μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως εκτίμηση της κατανομής του εξωτερικού φορτίου στο κέλυφος, σαν συνάρτηση της αδιάστατης εξωτερικά επιβαλλόμενης δύναμης, με παράμετρο την έκταση της παραμόρφωσης θ_c πέραν της οποίας το κέλυφος παραμένει στο αρχικό σφαιρικό του σχήμα. Σε μία πλήρη μοντελοποίηση της συζευγμένης παραμόρφωσης του κελύφους και του προβόλου η παραπάνω σχέση θα αποτελέσει μέρος της επίλυσης. Στην παρούσα εργασία αποτελεί μία πρώτη προσπάθεια έκφρασης της κατανομής του εξωτερικού φορτίου που υφίσταται η μικροφυσαλίδα από τον πρόβολο.

Συνοψίζοντας, το πρόβλημα που μοντελοποιείται στην παρούσα εργασία περιγράφεται σχηματικά από το Σχήμα 2-7. Στην επιφάνεια της φυσαλίδας ασκείται η εξωτερική ατμοσφαιρική πίεση και η υπερπίεση λόγω του αερίου στο εσωτερικό της φυσαλίδας. Επιπλέον ασκείται λόγω επαφής κατανεμημένο φορτίο με παραβολικό προφίλ.



Σχήμα 2-7 Σχηματική αναπαράσταση ισορροπίας δυνάμεων στην επιφάνεια της φυσαλίδας

Για την περιγραφή της επαφής δύο σωμάτων υπάρχουν και άλλα μοντέλα πέρα από το μοντέλο Hertz, όπως το JKR [8] ή το DMT [20]. Σε αυτά τα μοντέλα λαμβάνεται υπόψη και η προσκόλληση των δύο επιφανειών. Στην παρούσα εργασία αγνοούμε την προσκόλληση ως φαινόμενο που αποκτά σημασία στην μελέτη των μηχανικών ιδιοτήτων του κελύφους για πολύ μικρές δυνάμεις, της τάξης των nN. Οι δυνάμεις αυτές εξηγούν την αρχική μη γραμμική σχέση δύναμης παραμόρφωσης που παρατηρείται σε κάποια πειράματα ([10], [11]) και για πολύ μικρές δυνάμεις.

2.4 Κατάστρωση του προβλήματος

2.4.1 Παραδοχές

Για την επίλυση του προβλήματος ισορροπίας δυνάμεων στην διεπιφάνεια της φυσαλίδας αρχικά κάνουμε ορισμένες παραδοχές που επιτρέπουν μια πιο απλοποιημένη λύση.

- Θεωρούνται μικρές παραμορφώσεις.

Η θεώρηση των μικρών παραμορφώσεων είναι ρεαλιστική διότι και οι πειραματικές μετρήσεις γίνονται σε μικρές τιμές. Επιπλέον αποφεύγεται ο σχηματισμός «κρατήρα».

- Καταστατικός νόμος HOOK.

Υποθέτουμε ότι το υλικό συμπεριφέρεται ως τέλεια ελαστικό, δηλαδή η σχέση δύναμης παραμόρφωσης είναι γραμμική.

- Δεν λαμβάνεται υπόψη η ανισοτροπία του υλικού.

Τα υλικά που σχηματίζουν τις φυσαλίδες είναι συνήθως κάποιο πολυμερές ή κάποιο λιπίδιο. Στην κλίμακα που μελετάμε οι πολυμερικές αλυσίδες των φυσαλίδων biSphere ή οι υδρόφοβη ουρά του φωσφολιπιδίου έχουν συγκεκριμένες διευθύνσεις η οποίες εισάγουν συγκεκριμένες διευθύνσεις, που κάνουν το υλικό ανισότροπο. Σε αυτή την εργασία λαμβάνεται υπόψη η ανισοτροπία μεταξύ της τάσης σε εφελκυσμό και της κάμψης και θεωρούμε την αντίσταση σε λυγισμό ανεξάρτητη παράμετρο, κυρίως για φωσφολιπίδια [21].

- Θεωρούμε ισοθερμοκρασιακή μεταβολή.

Κατά την άσκηση του εξωτερικού φορτίου έχουμε μεταβολή του όγκου και της πίεσης στο εσωτερικό της φυσαλίδας. Οι μεταβολές αυτές θεωρούμε ότι δεν συνοδεύονται από μεταβολές της θερμοκρασίας.

- Θεωρείται πως δεν υπάρχουν μεταβολές του σχήματος στην αζιμούθια διεύθυνση.

Η παραδοχή αυτή είναι ρεαλιστική καθώς θεωρούμε μικρές παραμορφώσεις. Η λύση που παίρνουμε είναι ανεξάρτητη της μεσημβρινής γραμμής που επιλέγουμε να λύσουμε. Σε μεγαλύτερες παραμορφώσεις (>25%) αποδεικνύεται και πειραματικά [14] ότι έχουμε σχηματισμό πτυχώσεων περιφερειακά. Έτσι, η επίλυση γίνεται κατά μήκος μια μεσημβρινής γραμμής.

- Τέλος θεωρούμε ότι η φυσαλίδα δεν έχει προένταση, ως εκ τούτου η ακτίνα της δεν μεταβάλλεται πριν από την φόρτιση, δηλαδή έχει ακτίνα R_0 .

2.4.2 Αδιαστατοποίηση των μεγεθών του προβλήματος

Για τον καλύτερο χειρισμό των εξισώσεων αλλά και τον σωστό προγραμματισμό τους χρησιμοποιούμε τις παρακάτω αδιάστατες παραμέτρους του προβλήματος [22]:

αδιάστατη εξωτερική ασκούμενη πίεση (συνήθως ατμοσφαιρική):

$$\tilde{P}_{St} = \frac{P_{St} R_o}{\chi} \quad (2-33)$$

αδιάστατη εξωτερικά ασκούμενη δύναμη:

$$\tilde{F} = \frac{F}{\chi R_o} = \frac{F}{P_{St} R_o^2} \frac{P_{St} R_o^2}{\chi R_o} = F^* \tilde{P} \quad (2-34)$$

και το αδιάστατο μέτρο κάμψης:

$$\tilde{k}_b = \frac{k_b}{\chi R_o^2} \quad (2-35)$$

Προκειμένου να εκτιμηθούν καλύτερα οι ελαστικές παράμετροι του προβλήματος τα αποτελέσματα δύναμης παραμόρφωσης θα παρουσιαστούν μέσω της F^*

Η αδιάστατη εσωτερική πίεση:

$$\tilde{P}_{int} = \frac{R_o P_{int}}{\chi} \quad (2-36)$$

το αδιάστατο φορτίο λυγισμού (προκύπτει για ομοιόμορφη κατανομή εξωτερικού φορτίου σε όλη την έκταση του κελύφους):

$$\tilde{P}_c = \frac{R_o P_c}{\chi} \quad (2-37)$$

η αδιάστατη μετατόπιση:

$$\varepsilon = \frac{\Delta}{R_o} \quad (2-38)$$

καθώς και η γωνιακή έκταση της παραμόρφωσης

$$\theta_c \quad (2-39)$$

αποτελούν σημαντικές παραμέτρους που προκύπτουν από την αριθμητική επίλυση του μοντέλου.

2.4.3 Η Lagrangian αναπαράσταση της διεπιφάνειας της φυσαλίδας

Για την περιγραφή των μεταβολών του σχήματος της φυσαλίδας χρησιμοποιείται Lagrangian προσέγγιση. Το ξ είναι μια τοπική συντεταγμένη και σχετίζεται με το μήκος τόξου, s :

$$\frac{\partial s}{\partial \xi} = \sqrt{r_\xi^2 + r^2 \theta_\xi^2}, \quad 0 \leq \xi \leq 1 \quad (2-40)$$

Όπου ο δείκτης ξ δηλώνει μερική παραγωγή.

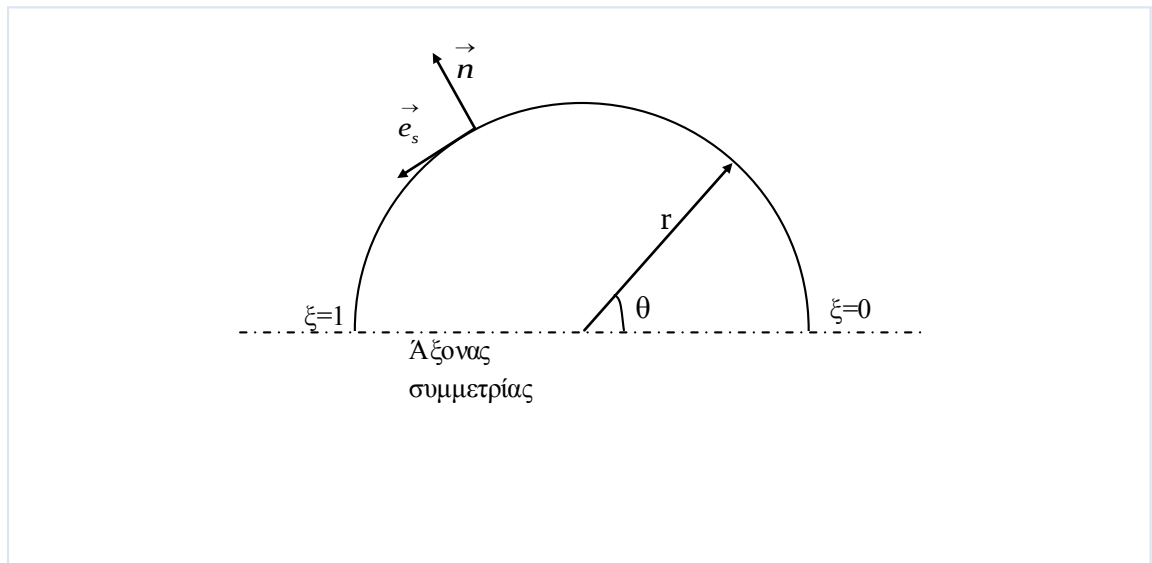
Επίσης τα μοναδιαία διανύσματα την επιφάνεια της φυσαλίδας είναι:

Το κάθετο διάνυσμα:

$$\vec{n} = \frac{r\theta_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + r^2 \theta_\xi^2}} \vec{e}_r - \frac{r_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + r^2 \theta_\xi^2}} \vec{e}_\theta \quad (2-41)$$

Και το εφαπτομενικό διάνυσμα:

$$\vec{e}_s = \frac{r_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + r^2 \theta_\xi^2}} \vec{e}_r + \frac{r\theta_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + r^2 \theta_\xi^2}} \vec{e}_\theta \quad (2-42)$$



Σχήμα 2-8 Γεωμετρική αναπαράσταση Lagrangian περιγραφής της φυσαλίδας

2.4.4 Ισορροπία δυνάμεων στην διεπιφάνεια της φυσαλίδας.

Η συνισταμένη των ελαστικών δυνάμεων που αναπτύσσονται στην διεπιφάνεια της φυσαλίδας δίδεται από τη σχέση (2-43).

$$\vec{\Delta F} = \Delta F_n \vec{n} + \Delta F_t \vec{s} = -\vec{\nabla}_s \cdot \underline{\underline{T}} \quad (2-43)$$

όπου $\vec{\nabla}_s = \sum_{i=1}^2 \vec{a}^i \frac{\partial}{\partial u_i}$ $i=1,2$ είναι ο επιφανειακός τελεστής κλίσης με $\vec{a}_i = \frac{\partial \vec{r}_s}{\partial u_i}, i=1,2$

και $\vec{a}^i = \frac{(-1)^j \left(\vec{a}_j \times \vec{n} \right)}{\left| \vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \times \vec{n} \right|}, i, j=1,2, i \neq j$ είναι τα συναλλοίωτα και ανταλλοίωτα

διανύσματα βάσης, αντίστοιχα. Ενώ ο όρος $\underline{\underline{T}}$ εκφράζει το τανυστή των τάσεων και είναι:

$$\underline{\underline{T}} = \underline{\underline{\tau}} + q \vec{e}_s \vec{e}_s \quad (2-44)$$

όπου $\underline{\underline{\tau}}$ συμβολίζει τον ιξωδο-ελαστικό τανυστή τάσης στο επίπεδο και $q \vec{e}_s \vec{e}_s$ τον εγκάρσιο τανυστή διάτμησης που δίνει τις διατμητικές τάσεις που οφείλονται στις αναπτυσσόμενες ροπές κάμψης. Το διάνυσμα διατμητικής τάσης $\vec{q}$ συσχετίζεται με τον τανυστή των ροπών κάμψης $\underline{\underline{m}}$ και είναι:

$$\vec{q} = \vec{\nabla}_s \cdot \underline{\underline{m}} \cdot \left(\underline{\underline{I}} - \vec{n} \vec{n} \right) \quad (2-45)$$

όπου $\underline{\underline{I}}$ είναι ο μοναδιαίος τανυστής τάσης .

Οι εξισώσεις (2-45 και (2-45) αναπαριστούν το ισοζύγιο ροπής σε ένα διαφορικό στοιχείο της μεμβράνης. Λόγω της συμμετρίας ως προς τον άξονα, οι παράγωγοι ως προς ξ θα πρέπει να ικανοποιούν τις ακόλουθες συνθήκες:

$$\frac{\partial r}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 \theta}{\partial \xi^2} = 0 \text{ για } \xi = 0,1 \quad (2-46)$$

που αντιστοιχούν στους δύο πόλους του συστήματος συντεταγμένων.

2.4.5 Διεπιφανειακές τάσεις και ροπές κάμψης

Ο καρτεσιανός τανυστής καμπυλότητας ορίζεται ως $\underline{\underline{B}} \equiv \nabla_s^{\rightarrow} \vec{n}$. Οι συνιστώσες του είναι:

$$b_{ij} = \vec{a}_i \cdot \underline{\underline{B}} \cdot \vec{a}_j, i, j = 1, 2 \quad (2-47)$$

και αναπαρίστανται από τη βάση $\left[\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{n} \right]$. Ο τανυστής $\underline{\underline{B}}$ είναι 2×2 συμμετρικός πίνακας. Για τη διαγωνιοποίηση και την εύρεση των κύριων καμπυλοτήτων πρέπει να λυθεί το ακόλουθο πρόβλημα ιδιοτιμών,

$$\underline{\underline{B}} \cdot \vec{t}_i = k_i \cdot \vec{t}_i, i = 1, 2 \quad (2-48)$$

όπου k_i είναι οι κύριες καμπυλότητες και $\vec{t}_i$ τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα που παριστάνονται από το σύστημα $\vec{a}_i$. Στην περίπτωση που το σχήμα της διεπιφάνειας, οι ελαστικές τάσεις και οι ροπές κάμψης είναι αξονοσυμμετρικές, αυτό οδηγεί σε $\vec{t}_1 = \vec{e}_s, \vec{t}_2 = \vec{e}_\phi$ όπου

$$k_1 = k_s = \frac{r_\xi^2 \theta_\xi}{\left((r\theta_\xi)^2 + r_\xi^2 \right)^{3/2}} + \frac{rr_\xi \theta_{\xi\xi}}{\left((r\theta_\xi)^2 + r_\xi^2 \right)^{3/2}} + \frac{\theta_\xi}{\left((r\theta_\xi)^2 + r_\xi^2 \right)^{1/2}} \quad (2-49)$$

$$k_2 = k_\phi = \frac{\theta_\xi}{\left((r\theta_\xi)^2 + r_\xi^2 \right)^{1/2}} - \frac{r_\xi \cot \theta}{r \left((r\theta_\xi)^2 + r_\xi^2 \right)^{1/2}} \quad (2-50)$$

ενώ η μέση καμπυλότητα δίνεται από τη σχέση

$$k_m = \frac{k_1 + k_2}{2} \quad (2-51)$$

Επομένως, οι κύριες διευθύνσεις του $\underline{\underline{\tau}}$ και του $\underline{\underline{m}}$ συμπίπτουν με τα αξονοσυμμετρικά μοναδιαία διανύσματα

$$\underline{\underline{\tau}} = \tau_{ss} \vec{e}_s \vec{e}_s + \tau_{\phi\phi} \vec{e}_\phi \vec{e}_\phi, \underline{\underline{m}} = m_s \vec{e}_s \vec{e}_s + m_\phi \vec{e}_\phi \vec{e}_\phi \quad (2-52)$$

ενώ η διανυσματική, εγκάρσια διατμητική τάση βρίσκεται στο μεσημβρινό επίπεδο και δίνεται από τη σχέση (2-53

$$\vec{q} = q \vec{e}_s \quad (2-53)$$

Με αντικατάσταση των εκφράσεων (2-44, (2-52, (2-53 στις (2-43 και (2-45 προκύπτει:

$$\vec{\Delta F} = \Delta F_N \vec{n} + \Delta F_t \vec{e}_s = \left[k_s \tau_{ss} + k_\phi \tau_{\phi\phi} - \frac{1}{6} \frac{\partial}{\partial s} (\sigma q) \right] \vec{n} - \left[\frac{\partial \tau_{ss}}{\partial s} + \frac{1}{6} \frac{\partial \sigma}{\partial s} (\tau_{ss} - \tau_{\phi\phi}) + k_s q \right] \vec{e}_s \quad (2-54)$$

$$q = \frac{1}{6} \frac{\partial \sigma}{\partial s} \left[\frac{\partial}{\partial s} (\sigma m_s - m_\phi) \right] \quad (2-55)$$

με $\sigma = r \sin \theta$. Οι εξισώσεις (2-54 και (2-55 είναι σε συμφωνία με τις κλασικές εξισώσεις θεωρίας μεμβρανών που προέρχονται από τις καμπυλόγραμμες συντεταγμένες της επιφάνειας. Από την εξίσωση (2-54 μπορεί να εξαχθεί ότι

$$\Delta F_N = k_s \tau_{ss} + k_\phi \tau_{\phi\phi} - \frac{1}{6} \frac{\partial}{\partial s} (\sigma q) \quad (2-56)$$

$$\Delta F_t = -\frac{\partial \tau_{ss}}{\partial s} - \frac{1}{6} \frac{\partial \sigma}{\partial s} (\tau_{ss} - \tau_{\phi\phi}) - k_{sq} \quad (2-57)$$

Για την συμπλήρωση του μοντέλου και τον υπολογισμό της εσωτερικής πίεσης και της γωνιακής έκτασης της παραμόρφωσης χρησιμοποιούμε ως επί πλέον σχέσεις την καταστατική σχέση τελείων αερίων, εξίσωση (2-13, και το ολοκλήρωμα του εξωτερικά επιβαλλόμενου φορτίου πάνω στην επιφάνεια της μικροφυσαλίδας, ώστε να ανακτηθεί το μέγεθος της εξωτερικής δύναμης F όπως αυτή εκφράζεται μέσω της κατανομής της (2-32.

Η δύναμη F τελικά υπολογίζεται ως το ολοκλήρωμα της διαφοράς πίεσης πάνω στην επιφάνεια της σφαίρας, δηλαδή:

$$\vec{F} = \iint_A \Delta P \vec{n} dA \quad (2-58)$$

Το ολοκλήρωμα της σχέσης (2-58 υπολογίζεται ως εξής:

$$\begin{aligned} \vec{F} &= \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \Delta P \vec{n} \left(\sqrt{r^2 + r_\theta^2} d\theta \right) (r \sin \theta d\varphi) \Rightarrow \\ \vec{F} &= \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} \Delta P \left(\frac{r \theta_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + r^2 \theta_\xi^2}} \vec{e}_r - \frac{r_\xi}{\sqrt{r_\xi^2 + r^2 \theta_\xi^2}} \vec{e}_\theta \right) r \sin \theta \sqrt{r^2 + r_\theta^2} d\theta d\varphi \end{aligned} \quad (2-59)$$

Τα μοναδιαία διανύσματα $\vec{e}_r$ και $\vec{e}_\theta$ των σφαιρικών συντεταγμένων δεν είναι ανεξάρτητα των φ, θ για αυτό το λόγο θα τα εκφράσουμε με τη βοήθεια των μοναδιαίων διανυσμάτων των καρτεσιανών συντεταγμένων.

$$\begin{aligned} \vec{e}_r &= \sin \theta \cos \varphi \vec{e}_x + \sin \theta \sin \varphi \vec{e}_y + \cos \theta \vec{e}_z \\ \vec{e}_\theta &= \cos \theta \cos \varphi \vec{e}_x + \cos \theta \sin \varphi \vec{e}_y - \sin \theta \vec{e}_z \end{aligned}$$

Η ολοκλήρωση ως προς φ αφορά μόνο τα μοναδιαία διανύσματα, διότι είναι οι μοναδικοί όροι που εξαρτώνται από την γωνία φ :

$$\begin{aligned}\int_0^{2\pi} \vec{e}_r d\varphi &= \int_0^{2\pi} (\sin\theta \cos\varphi \vec{e}_x + \sin\theta \sin\varphi \vec{e}_y + \cos\theta \vec{e}_z) d\varphi = 2\pi \cos\theta \vec{e}_z \\ \int_0^{2\pi} \vec{e}_\theta d\varphi &= \int_0^{2\pi} (\cos\theta \cos\varphi \vec{e}_x + \cos\theta \sin\varphi \vec{e}_y - \sin\theta \vec{e}_z) d\varphi = -2\pi \sin\theta \vec{e}_z\end{aligned}\quad (2-60)$$

Εισάγοντας την (2-60) στην (2-59) έχουμε:

$$\begin{aligned}\vec{F} &= 2\pi \int_{\xi=0}^1 \Delta P (r\theta_\xi \cos\theta + r_\xi \sin\theta) \frac{r \sin\theta}{\sqrt{r_\xi^2 + r^2 \theta_\xi^2}} \sqrt{r^2 + \left(\frac{dr}{d\theta}\right)^2} \frac{d\theta}{d\xi} d\xi \vec{e}_z \Rightarrow \\ \vec{F} &= 2\pi \int_{\xi=0}^1 \Delta P (r\theta_\xi \cos\theta + r_\xi \sin\theta) \frac{r \sin\theta}{\sqrt{r_\xi^2 + r^2 \theta_\xi^2}} \sqrt{r^2 \left(\frac{d\theta}{d\xi}\right)^2 + \left(\frac{dr}{d\theta} \frac{d\theta}{d\xi}\right)^2} d\xi \vec{e}_z \Rightarrow \\ \vec{F} &= 2\pi \int_{\xi=0}^1 \Delta P (r\theta_\xi \cos\theta + r_\xi \sin\theta) \frac{r \sin\theta}{\sqrt{r_\xi^2 + r^2 \theta_\xi^2}} \sqrt{r^2 \theta_\xi^2 + r_\xi^2} d\xi \vec{e}_z \Rightarrow \\ \vec{F} &= 2\pi \int_{\xi=0}^1 \Delta P (r\theta_\xi \cos\theta + r_\xi \sin\theta) \frac{r \sin\theta}{\sqrt{r_\xi^2 + r^2 \theta_\xi^2}} \sqrt{r_\xi^2 + r^2 \theta_\xi^2} d\xi \vec{e}_z \Rightarrow \\ \vec{F} &= 2\pi \int_{\xi=0}^1 \Delta P (r\theta_\xi \cos\theta + r_\xi \sin\theta) r \sin\theta d\xi \vec{e}_z \Rightarrow \\ \vec{F} &= 2\pi \int_{\xi=0}^1 \Delta P (r^2 \theta_\xi \cos\theta \sin\theta + r r_\xi \sin^2\theta) d\xi \vec{e}_z\end{aligned}\quad (2-61)$$

Η σχέση (2-61) εισάγεται στον κώδικα και υπολογίζει την δύναμη με αριθμητική ολοκλήρωση κατά Gauss με 4 σημεία ολοκλήρωσης.

2.4.6 Ορισμός ενέργειας εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης

Το κέλυφος της φουσαλίδας αποτελείται από ελαστικό υλικό και αυτό το καθιστά ικανό να αποθηκεύσει ενέργεια εξαιτίας των έργων που παράγουν εφελκυστικές και οι καμπτικές τάσεις.

Η ενέργεια λόγω εφελκυσμού ανά μονάδα αρχικής επιφάνειας για ένα υλικό που ακολουθεί το νόμο του Hook είναι [23]:

$$\begin{aligned}
E_s &= \frac{Eh}{2(1-\nu^2)} \int (e_s^2 + 2\nu e_s e_\varphi + e_\varphi^2) dA_o \Rightarrow \\
E_s &= \frac{Eh}{2(1-\nu^2)} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} (e_s^2 + 2\nu e_s e_\varphi + e_\varphi^2) \sqrt{r_o^2 + r_{o,\theta}^2} (r_o \sin \theta_o) d\theta_o d\varphi \Rightarrow \\
E_s &= \frac{2\pi Eh}{2(1-\nu^2)} \int_{\theta=0}^{\pi} (e_s^2 + 2\nu e_s e_\varphi + e_\varphi^2) \sqrt{r_o^2 + r_{o,\theta}^2} (r_o \sin \theta_o) d\theta_o \Rightarrow \\
E_s &= \frac{2\pi Eh}{2(1-\nu^2)} \int_0^1 (e_s^2 + 2\nu e_s e_\varphi + e_\varphi^2) (r_o \sin \theta_o) \sqrt{r_o^2 + r_{o,\theta}^2} \frac{d\theta_o}{d\xi} d\xi \Rightarrow \\
E_s &= \frac{2\pi Eh}{2(1-\nu^2)} \int_0^1 (e_s^2 + 2\nu e_s e_\varphi + e_\varphi^2) (r_o \sin \theta_o) \sqrt{r_o^2 \left(\frac{d\theta_o}{d\xi} \right)^2 + \left(\frac{dr}{d\theta} \frac{d\theta_o}{d\xi} \right)^2} d\xi \Rightarrow \\
E_s &= \frac{2\pi Eh}{2(1-\nu^2)} \int_0^1 (e_s^2 + 2\nu e_s e_\varphi + e_\varphi^2) (r_o \sin \theta_o) \sqrt{r_\xi^2 + r_o^2 \theta_\xi^2} d\xi \quad (2-62)
\end{aligned}$$

Με παρόμοιο τρόπο υπολογίζεται η ενέργεια κάμψης ανά μονάδα αρχικής επιφάνειας:

$$\begin{aligned}
E_b &= \frac{k_b}{2} \int (K_s^2 + 2\nu K_s K_\varphi + K_\varphi^2) dA_o \Rightarrow \dots \dots \dots \text{όπως} \quad \text{στην} \quad E_s \dots \dots \dots \\
E_b &= \frac{2\pi k_b}{2} \int_0^1 (K_s^2 + 2\nu K_s K_\varphi + K_\varphi^2) (r_o \sin \theta_o) \sqrt{r_\xi^2 + r_o^2 \theta_\xi^2} d\xi \quad (2-63)
\end{aligned}$$

Τέλος η ενέργεια λόγω συμπίεσης του αερίου είναι:

$$\begin{aligned}
E_c &= - \int_{V_i}^{V_f} \Delta P dV = - \int_{V_i}^{V_f} (P - P_i) dV = - \int_{V_i}^{V_f} \left(\frac{P_{st} V_i}{V} - P_{st} \right) dV \Rightarrow \\
E_c &= -P_{st} V_i \ln V \Big|_{V_i}^{V_f} + P_{st} (V_f - V_i) \quad (2-64)
\end{aligned}$$

Όπου V_i και V_f είναι ο αρχικός και τελικός όγκος, αντίστοιχα.

Ο αρχικός όγκος υπολογίζεται στην απαραμόρφωτη κατάσταση και δίνεται από τη γνωστή σχέση της γεωμετρίας:

$$V_i = \frac{4}{3} \pi R_o^3 \quad (2-65)$$

Ενώ ο τελικός αναφέρεται στον όγκο της παραμορφωμένης φουσαλίδας και υπολογίζεται ως εξής:

$$V_f = \int_V dV = \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{r=0}^{r_f} \int_{\theta=0}^{\pi} r^2 \sin \theta d\theta \Rightarrow$$

$$V_f = \int_0^1 \frac{2\pi}{3} r_f^3 \sin \theta \frac{d\theta}{d\xi} d\xi$$

2.4.7 Καταστατικές εξισώσεις για τις ελαστικές τάσεις

Ο νόμος του Hooke για την ελαστικότητα αποτελεί μία προσέγγιση που δηλώνει ότι η έκταση ενός ελατηρίου είναι ευθέως ανάλογη προς το φορτίο το οποίο εφαρμόζεται. Πολλά υλικά υπακούουν σε αυτόν το νόμο με την προϋπόθεση ότι το φορτίο δεν υπερβαίνει το όριο ελαστικότητας του υλικού. Τα συγκεκριμένα υλικά είναι γνωστά ως γραμμικό-ελαστικά ή Hookean υλικά. Με μαθηματικούς όρους ο νόμος του Hooke γράφεται

$$F = -k\Delta \quad (2-66)$$

Ωστόσο, υπάρχουν υλικά που παρουσιάζουν σκλήρυνση λόγω παραμόρφωσης των οποίων η σχέση τάσης-παραμόρφωσης παρουσιάζει μεγαλύτερη κλίση καθώς αυξάνονται οι παραμορφώσεις που αντιστοιχεί σε αυξημένο φαινομενικό μέτρο ελαστικότητας. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα αυτού του τύπου υλικού αποτελούν οι λιπιδικές διπλοστιβάδες που σχηματίζουν οι μεμβράνες των ερυθρών αιμοσφαιρίων, καθώς και ορισμένα πολυμερή που χρησιμοποιούνται στην κατασκευή των μικροφυσαλίδων (contrast agents). Αντίθετα, εάν η κλίση τάσης-παραμόρφωσης μειώνεται καθώς οι παραμορφώσεις αυξάνονται το υλικό παρουσιάζει χαλάρωση λόγω παραμόρφωσης. Ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα υλικού που εμφανίζει την παραπάνω συμπεριφορά είναι το καουτσούκ. Η συγκεκριμένη συμπεριφορά εξηγείται από τον καταστατικό νόμο που περιγράφει το υλικό της μεμβράνης.

Ο νόμος Skalak [21] ανήκει στην κατηγορία των καταστατικών νόμων που περιγράφουν υλικά που παρουσιάζουν σκλήρυνση λόγω παραμόρφωσης εκ φύσεως και χρησιμοποιείται ευρέως για την περιγραφή της μηχανικής συμπεριφοράς της μεμβράνης των ερυθρών αιμοσφαιρίων, ενώ ο νόμος Mooney-Rivlin [24] χρησιμοποιείται συχνά για τον χαρακτηρισμό υλικών που παρουσιάζουν χαλάρωση λόγω παραμόρφωσης. Η σημασία των παραπάνω υλικών ιδιοτήτων έχει ήδη αναγνωριστεί στη μοντελοποίηση μικροφυσαλίδων για χρήση σε εφαρμογές της βιοϊατρικής με υπερήχους, ερυθρών αιμοσφαιρίων ή καψουλών γενικά, όπου με τον όρο κάψουλα εννοείται μία σταγόνα που περιβάλλεται από μία ελαστική μεμβράνη [25], [26]. Σωματίδια αυτού του είδους παράγονται συνήθως στη φαρμακευτική βιομηχανία ή στη βιομηχανία καλλυντικών.

Τα περισσότερα υλικά δεν αποκρίνονται στις εξωτερικές δυνάμεις με γραμμικό τρόπο. Συνήθως εμφανίζουν μία μη γραμμική σχέση διατμητικής τάσης σε μεγάλες παραμορφώσεις. Δύο πολύ κοινές οικογένειες υλικών που χαρακτηρίζονται από μη γραμμική απόκριση είναι τα υλικά που παρουσιάζουν χαλάρωση λόγω παραμόρφωσης και εκείνα που παρουσιάζουν σκλήρυνση λόγω παραμόρφωσης. Στην πρώτη περίπτωση το υλικό της μεμβράνης είναι τέτοιο ώστε το ενεργό μέτρο ελαστικότητας μειώνεται

καθώς η παραμόρφωση αυξάνει, ενώ το αντίθετο ισχύει για τον δεύτερο τύπο υλικού μεμβράνης [22], [25].

Ακολουθώς παρουσιάζονται οι εξισώσεις που διέπουν τη μηχανική συμπεριφορά μίας ιξωδοελαστικής μεμβράνης στην ισορροπία η οποία θεωρείται ότι είναι απειροστά λεπτή σε σύγκριση με την ακτίνα όπως συμβαίνει στην περίπτωση των μικροφουσαλίδων (contrast agents) που χρησιμοποιούνται στη διαγνωστική απεικόνιση με υπερήχους για διαφορετικούς τύπους μη γραμμικής απόκρισης. Χρησιμοποιείται γενικό σύστημα καρτεσιανών συντεταγμένων για την αναπαράσταση της κλίσης μετατόπισης της επιφάνειας, $\underline{\underline{A}}$

$$\underline{\underline{A}} = \left(\underline{\underline{I}} - \vec{n} \vec{n} \right) \cdot \frac{\partial \vec{x}}{\partial \vec{X}} \cdot \left(\underline{\underline{I}} - \vec{N} \vec{N} \right) \quad (2-67)$$

όπου $\vec{x}, \vec{X}$ συμβολίζουν το διάνυσμα θέσης ενός σημείου της μεμβράνης στην παραμορφωμένη και στην κατάσταση αναφοράς όπου δεν έχει επιβληθεί τάση και παρόμοια για τα κάθετα διανύσματα $\vec{n}, \vec{N}$. Ο τανυστής $\underline{\underline{A}}^T \cdot \underline{\underline{A}}$ έχει δύο μη μηδενικές ιδιοτιμές λ_1^2, λ_2^2 που αντιστοιχούν στους τοπικούς κύριους άξονες παραμόρφωσης στο εφαπτόμενο στη μεμβράνη επίπεδο και παριστάνουν τους κύριους λόγους επέκτασης κατά μήκος των ίδιων αξόνων, $\lambda_i = \frac{ds_i}{dS_i}$, οι δείκτες δεν αθροίζονται, όπου ds_i και dS_i

υποδηλώνουν μήκη γραμμικών στοιχείων σε κάθε μία από τις κύριες διευθύνσεις στην παραμορφωμένη και στην κατάσταση αναφοράς. Στην περίπτωση συμμετρίας ως προς τον άξονα

$$\lambda_1 = \lambda_2 = \frac{S_\xi(t)}{S_\xi(t=0)}, \lambda_2 = \lambda_\phi = \frac{\sigma(t)}{\sigma(t=0)} \quad (2-68)$$

Κατά την εισαγωγή του τανυστή παραμόρφωσης επιφάνειας Green-Lagrange $\underline{\underline{e}}$ που ορίζεται ως

$$\underline{\underline{e}} = \frac{1}{2} \left[\underline{\underline{A}}^T \cdot \underline{\underline{A}} - \left(\underline{\underline{I}} - \vec{N} \vec{N} \right) \right] \quad (2-69)$$

Ο λόγος J_s μεταξύ της παραμορφωμένης και της μη παραμορφωμένης τοπικής επιφάνειας και οι αδιάστατες σταθερές τάσης μπορούν επίσης να οριστούν ως

$$J_s = \lambda_1 \lambda_2 = \sqrt{\det \left(\underline{\underline{A}}^T \cdot \underline{\underline{A}} + \vec{N} \vec{N} \right)} \quad (2-70)$$

Όπου οι I_1 και I_2 ορίζονται ως:

$$I_1 = 2tr(\underline{\underline{e}}) = \lambda_1^2 + \lambda_2^2 - 2 \quad (2-71)$$

$$I_2 = J_s^2 - 1 = \lambda_1^2 \lambda_2^2 - 1 \quad (2-72)$$

Οι σταθερές I_1, I_2 συμβολίζουν την επιμήκυνση ενός τοπικού γραμμικού στοιχείου και την τοπική επιφανειακή διαστολή αντίστοιχα. Εάν οι παραπάνω ποσότητες είναι γνωστές, οι κύριες συνιστώσες του τανυστή ελαστικής τάσης σε μία παραμορφωμένη διδιάστατη μεμβράνη μπορεί να συσχετιστεί με τον τανυστή παραμόρφωσης μέσω της συνάρτησης ενέργειας παραμόρφωσης $w(I_1, I_2)$.

$$\underline{\tau} = \frac{2}{J_s} \left[\frac{\partial w}{\partial I_1} \underline{A} \cdot \underline{A}^T + \frac{\partial w}{\partial I_2} J_s^2 (\underline{I} - \overline{N} \overline{N}) \right] \quad (2-73)$$

Η ενέργεια παραμόρφωσης $w(I_1, I_2)$ εξαρτάται από τη φύση του υλικού της μεμβράνης και λαμβάνει διάφορες μορφές καθώς αλλάζει η μηχανική συμπεριφορά της μεμβράνης. Μία τυπική ενέργεια παραμόρφωσης που περιγράφει ένα πολύ λεπτό φύλλο ενός ισοτροπικού όγκου ασυμπίεστου υλικού που μοιάζει με λάστιχο που παρουσιάζει χαλάρωση λόγω παραμόρφωσης είναι αυτή που παρέχεται από τον διδιάστατο νόμο Mooney-Rivlin (MR):

$$w^{MR} = \frac{E}{6} \left[(1-b) \left(I_2 + 2 + \frac{1}{I_2 + 1} \right) + b \left(\frac{I_1 + 2}{I_2 + 1} + I_2 + 1 \right) \right] \quad (2-74)$$

$$\tau_{ss}^{MR} = \frac{E}{3\lambda_s \lambda_\phi} \left(\lambda_s^2 - \frac{1}{(\lambda_s \lambda_\phi)^2} \right) [1 + b(\lambda_\phi^2 - 1)] \quad (2-75)$$

$$\tau_{\phi\phi}^{MR} = \frac{E}{3\lambda_s \lambda_\phi} \left(\lambda_\phi^2 - \frac{1}{(\lambda_s \lambda_\phi)^2} \right) [1 + b(\lambda_s^2 - 1)] \quad (2-76)$$

Όπου το E εκφράζει το αδιάστατο μέτρο επιφανειακής διαστολής. Η περίπτωση με $b=0$ αντιστοιχεί σε μία νέο-Hookean μεμβράνη, ενώ καθώς το b το οποίο κυμαίνεται μεταξύ 0 και 1 τείνει στο 0 η μεμβράνη γίνεται πιο μαλακή. Θα πρέπει επίσης να σημειωθεί ότι ο καταστατικός νόμος Mooney-Rivlin επιτρέπει την απεριόριστη επιφανειακή διαστολή που αντισταθμίζεται από την προοδευτική λέπτυνση της μεμβράνης. Ένας από τους πιο ευρέως χρησιμοποιούμενους καταστατικούς νόμους που αφορούν στις μεμβράνες που παρουσιάζουν σκλήρυνση λόγω παραμόρφωσης είναι αυτός που αναπτύχθηκε από τους Skalak et al. προκειμένου να μοντελοποιηθεί η λιπιδική δομή διπλοστιβάδας που περιβάλλει τα ερυθρά αιμοσφαίρια,

$$w^{SK} = \frac{E}{6} (I_1^2 + 2I_1 - 2I_2 + CI_2^3) \quad (2-77)$$

$$\tau_{ss}^{SK} = \frac{E}{3\lambda_s \lambda_\phi} \left\{ \lambda_s^2 (\lambda_s^2 - 1) + C (\lambda_s \lambda_\phi)^2 \left[(\lambda_s \lambda_\phi)^2 - 1 \right] \right\} \quad (2-78)$$

$$\tau_{\phi\phi}^{SK} = \frac{E}{3\lambda_s \lambda_\phi} \left\{ \lambda_\phi^2 (\lambda_\phi^2 - 1) + C (\lambda_s \lambda_\phi)^2 \left[(\lambda_s \lambda_\phi)^2 - 1 \right] \right\} \quad (2-79)$$

Η παράμετρος C στις παραπάνω εξισώσεις είναι πάντοτε θετική και ελέγχει την έκταση της επιφάνειας ασυμπίεστότητας της μεμβράνης. Στην περίπτωση των ερυθρών αιμοσφαιρίων $C \sim 1$ προκειμένου να ληφθεί υπόψη η σχεδόν ασυμπίεστη φύση της επιφάνειας της μεμβράνης. Ωστόσο, αυτός είναι ένας σχετικά γενικός νόμος που χρησιμοποιείται για μεμβράνες που εμφανίζουν σκλήρυνση λόγω παραμόρφωσης είτε στην περίπτωση που έχουν ασυμπίεστη επιφάνεια είτε στην περίπτωση που δεν έχουν.

2.4.8 Καταστατικές εξισώσεις για τις ροπές κάμψης

Στην παρούσα μελέτη γίνεται η υπόθεση ότι οι ροπές κάμψης έχουν αμελητέα επίδραση στο συμμετρικό κομμάτι των ελαστικών τάσεων που δίνεται στην εξίσωση . Αυτό ισχύει για ισοτροπικές διεπιφάνειες και μικρές παραμορφώσεις κάμψης (μικρές μεταβολές του καρτεσιανού τανυστή καμπυλότητας $\underline{\underline{B}}$) διότι σε αυτήν την περίπτωση ο τανυστής ροπής κάμψης $\underline{\underline{m}}$ είναι συμμετρικός και από την εξίσωση (2-45

προκύπτει ότι το μη-συμμετρικό κομμάτι του $\underline{\underline{\tau}}$ εκλείπει. Στην περίπτωση της αξονικής συμμετρίας έχουμε [24] τα καμπτικά μέτρα παραμόρφωσης:

$$\tau_{\phi\phi}^{MR} = \frac{E}{3\lambda_s\lambda_\phi} \left(\lambda_\phi^2 - \frac{1}{(\lambda_s\lambda_\phi)^2} \right) \left[1 + b(\lambda_s^2 - 1) \right] + \frac{2}{\text{Re}_s} \frac{1}{\lambda_\phi} \frac{\partial \lambda_\phi}{\partial t} \quad (2-80)$$

$$K_s \equiv \lambda_s k_s - k_s^R, K_\phi \equiv \lambda_\phi k_\phi - k_\phi^R \quad (2-81)$$

και επικαλέσθηκαν αναλογία με τη γραμμική θεωρία κάμψης λεπτών πλακών για να εξάγουν την ακόλουθη έκφραση για τις ροπές κάμψης η οποία σε αδιάστατη μορφή γράφεται

$$m_s = \frac{k_B}{\lambda_\phi} (K_s + \nu K_\phi), m_\phi = \frac{k_B}{\lambda_s} (K_\phi + \nu K_s) \quad (2-82)$$

όπου k_s^R, k_ϕ^R είναι οι αδιάστατες καμπυλότητες αναφοράς στις κύριες διευθύνσεις όπου η μεμβράνη είναι ελεύθερη από ροπές κάμψης, και k_B είναι το αδιάστατο μέτρο κάμψης και ν ο λόγος του Poisson. Για μία σφαίρα $k_s^R = k_\phi^R = 1$ και για ασυμπίεστο υλικό $\nu=0,5$. Εάν η μεμβράνη αποτελείται από ένα λεπτό στρώμα ενός τρισδιάστατου ελαστικού στερεού πάχους h , τότε η σταθερά ακαμψίας k_{Bdim} δίνεται από την σχέση . Για μεμβράνες που αποτελούνται από εγγενώς διδιάστατα δίκτυα πολυμερών, το k_{Bdim} μπορεί να αντιμετωπιστεί ως ανεξάρτητη φυσική σταθερά.

3. Αριθμητική Ανάλυση

Η επίλυση των ανωτέρω εξισώσεων υλοποιείται με την μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων σε συνδυασμό με Fortran. Σε αυτό το κεφάλαιο επιχειρείται να δοθεί μία σύντομη περιγραφή της μεθόδου, των συναρτήσεων βάσης που χρησιμοποιούνται καθώς και μια σύντομη περιγραφή του κώδικα που υλοποιεί τελικά την επίλυση.

3.1 Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων

Η μέθοδος των πεπερασμένων στοιχείων χρησιμοποιείται ευρύτατα για την αριθμητική επίλυση διαφορικών εξισώσεων. Στη συγκεκριμένη μέθοδο χρησιμοποιούνται απλά σχήματα, τα στοιχεία, ο συνδυασμός των οποίων επιτρέπει την προσέγγιση πολύπλοκων γεωμετριών. Ιδιαίτερο πλεονέκτημα της μεθόδου αποτελεί το γεγονός ότι μπορεί να χρησιμοποιηθεί σε περιπτώσεις όπου το πεδίο προσομοίωσης είναι αρκετά πολύπλοκο ή μεταβλητό, καθώς και για προσομοιώσεις όπου δεν απαιτείται η ίδια τάξη ακρίβειας σε όλο το πεδίο επίλυσης. Με τα επιλεγμένα στοιχεία γίνεται διακριτοποίηση του χωρίου και στη συνέχεια για το καθένα από αυτά κατασκευάζεται μία εξίσωση που διακριτοποιεί τη μερική διαφορική εξίσωση που περιγράφει το φυσικό πρόβλημα. Για κάθε στοιχείο (element) γράφονται εξισώσεις της μορφής:

$$\left[K^{(e)} \right] \{ u^{(e)} \} = \{ F^{(e)} \} \quad (3-1)$$

Όπου το μητρώο K συμβολίζει το μητρώο ακαμψίας, το οποίο είναι συμμετρικό και θετικά ορισμένο. Το διάνυσμα u περιέχει τις άγνωστες μετατοπίσεις και το διάνυσμα F περιέχει τις εξωτερικά ασκούμενες δυνάμεις.

Στη συνέχεια οι εξισώσεις κάθε στοιχείου συνδυάζονται μεταξύ τους μέσω του πίνακα συνεκτικότητας ώστε να προκύψει ένα τελικό σύστημα εξισώσεων το οποίο περιγράφει το συνολικό πρόβλημα. Στο σύστημα εξισώσεων επιβάλλονται οι συνοριακές συνθήκες και ακολουθεί επίλυση. Από τη λύση μπορεί να ακολουθήσει και περαιτέρω επεξεργασία για τον υπολογισμό μεταβλητών που σχετίζονται με τα αποτελέσματα. Τα βήματα που απαιτούνται για την εφαρμογή της μεθόδου είναι τα παρακάτω:

- Επιλογή κατάλληλων στοιχείων και συναρτήσεων βάσης N_i
- Διακριτοποίηση του χωρίου επίλυσης

- Κατασκευή του πίνακα συνεκτικότητας ο οποίος προσδιορίζει για κάθε στοιχείο τους κόμβους του πλέγματος που συνεισφέρουν στην επίλυση στο συγκεκριμένο στοιχείο.
- Υπολογισμός των γεωμετρικών χαρακτηριστικών των κόμβων (π.χ. συντεταγμένες)
- Κατασκευή των διακριτοποιημένων διαφορικών εξισώσεων σε κάθε στοιχείο του πεδίου, προσεγγίζοντας την άγνωστη μεταβλητή u με μία σχέση της μορφής $u = \sum_{i=1}^n u_i \psi_i$. Τελικά προκύπτει για κάθε στοιχείο e ένα σύστημα
$$\left[K^{(e)} \right] \{ u^{(e)} \} = \{ F^{(e)} \}$$
- Σύνδεση των τοπικών διακριτοποιημένων εξισώσεων για τον ορισμό του συνολικού προβλήματος
- Επιβολή των οριακών συνθηκών του προβλήματος
- Επίλυση του συνολικού συστήματος εξισώσεων [27]

3.2 Υλοποίηση πεπερασμένων στοιχείων

Οι αντίστοιχες άγνωστες μεταβλητές εκφράζονται ως ένα πεπερασμένο άθροισμα άγνωστων συντελεστών πολλαπλασιασμένων επί ένα σύνολο προκαθορισμένων συναρτήσεων βάσης οι οποίες είναι μη μηδενικές μόνο σε ελάχιστα στοιχεία του χωρίου μέσω της μεθόδου Galerkin. Η διατύπωση της ασθενούς μορφής προκύπτει με πολλαπλασιασμό των εξισώσεων που περιγράφουν το πρόβλημα με κάθε συνάρτηση βάσης και ολοκλήρωση επί του χωρίου.

Επίσης διεξάγεται ολοκλήρωση κατά μέρη όποτε αυτό είναι δυνατό προκειμένου να εξαλειφθεί η τέταρτη παράγωγος που εμφανίζεται στον όρο καμπτικής τάσης. Χρησιμοποιούνται τέσσερα σημεία ολοκλήρωσης Gauss για τον υπολογισμό των ολοκληρωμάτων σε κάθε στοιχείο. Αυτό εξασφαλίζει ότι οποιοδήποτε αριθμητικό σφάλμα ελέγχεται από την παρεμβολή άγνωστων συναρτήσεων και όχι από την αριθμητική ολοκλήρωση [22].

3.3 Συναρτήσεις βάσης

Για την επίλυση προβλημάτων με τη μέθοδο των πεπερασμένων στοιχείων καθοριστικό ρόλο στην ακρίβεια των αποτελεσμάτων παίζει η επιλογή των κατάλληλων

συναρτήσεων βάσης. Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιήθηκαν οι συναρτήσεις βάσης cubic B-splines [28].

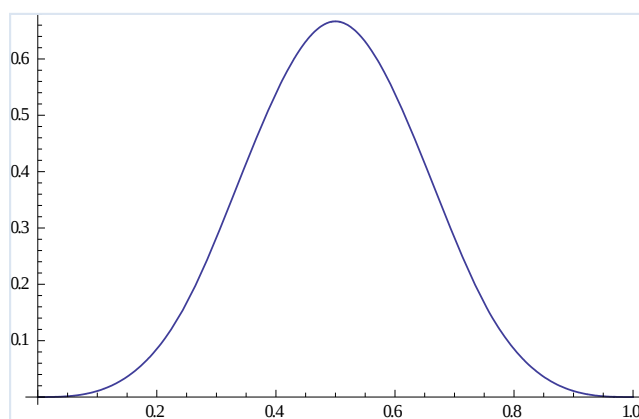
Οι συναρτήσεις βάσης cubic B-splines μίας διάστασης είναι πολυώνυμα τρίτου βαθμού που χρησιμοποιούνται σε κάθε υποδιάστημα διαμερισμού του διαστήματος παρεμβολής. Η συνάρτηση spline επιλέγεται με τέτοιο τρόπο, ώστε να είναι συνεχής και δύο φορές παραγωγίσιμη στο διάστημα παρεμβολής. Για την παρεμβολή μίας συνάρτησης η οποία είναι γνωστή σε $N+1$ σημεία απαιτείται η εισαγωγή δύο βοηθητικών σημείων οπότε αν χρησιμοποιούνται N στοιχεία, θα υπάρχουν συνολικά $N+3$ άγνωστοι συντελεστές, $u_{c,j}$, όσοι και οι κόμβοι του πλέγματος. Όλοι οι υπολογισμοί βασίζονται σε συντελεστές της μεταβλητής που αντιστοιχούν στους κόμβους του πλέγματος. Η τιμή μίας μεταβλητής στη θέση $t \in [t_i, t_{i+1}]$ θα δίνεται από τη σχέση:

$$u(t) = \sum_{j=1}^{N+3} u_{c,j} B_j(t) \quad (3-2)$$

όπου B_j οι συναρτήσεις βάσης cubic splines και u_c οι συντελεστές splines της μεταβλητής. Η ακριβής μορφή των cubic B-splines είναι:

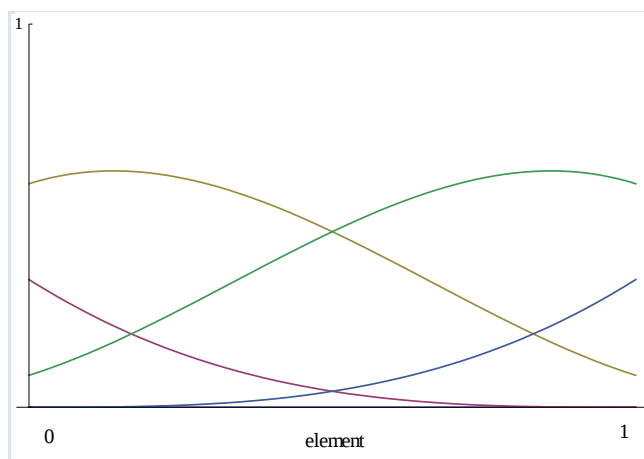
$$B_i(t_j) = \frac{1}{h^3} \left\{ \begin{array}{l} (t - t_{i-2})^3, t \in [t_{i-2}, t_{i-1}] \\ h^3 + 3h^2(t - t_{i-1}) + 3h(t - t_{i-1})^2 - 3(t - t_{i-1})^3, t \in [t_{i-1}, t_i] \\ h^3 + 3h^2(t_{i+1} - t) + 3h(t_{i+1} - t)^2 - 3(t_{i+1} - t)^3, t \in [t_i, t_{i+1}] \\ (t_{i+2} - t)^3, t \in [t_{i+1}, t_{i+2}] \\ 0, t \notin [t_{i-2}, t_{i+2}] \end{array} \right\} \quad (3-3)$$

Οι συναρτήσεις βάσης cubic splines απεικονίζονται στο Διάγραμμα 3-1.



Διάγραμμα 3-1 Γραφική αναπαράσταση συνάρτησης cubic B-Spline

Από το Διάγραμμα 3-2 είναι φανερό ότι κάθε μία από τις τέσσερις συναρτήσεις είναι δύο φορές συνεχώς παραγωγίσιμη. Επιπλέον, σε κάθε στοιχείο υπάρχουν τέσσερις μη μηδενικές συναρτήσεις βάσης, ενώ σε κάθε κόμβο τρεις.

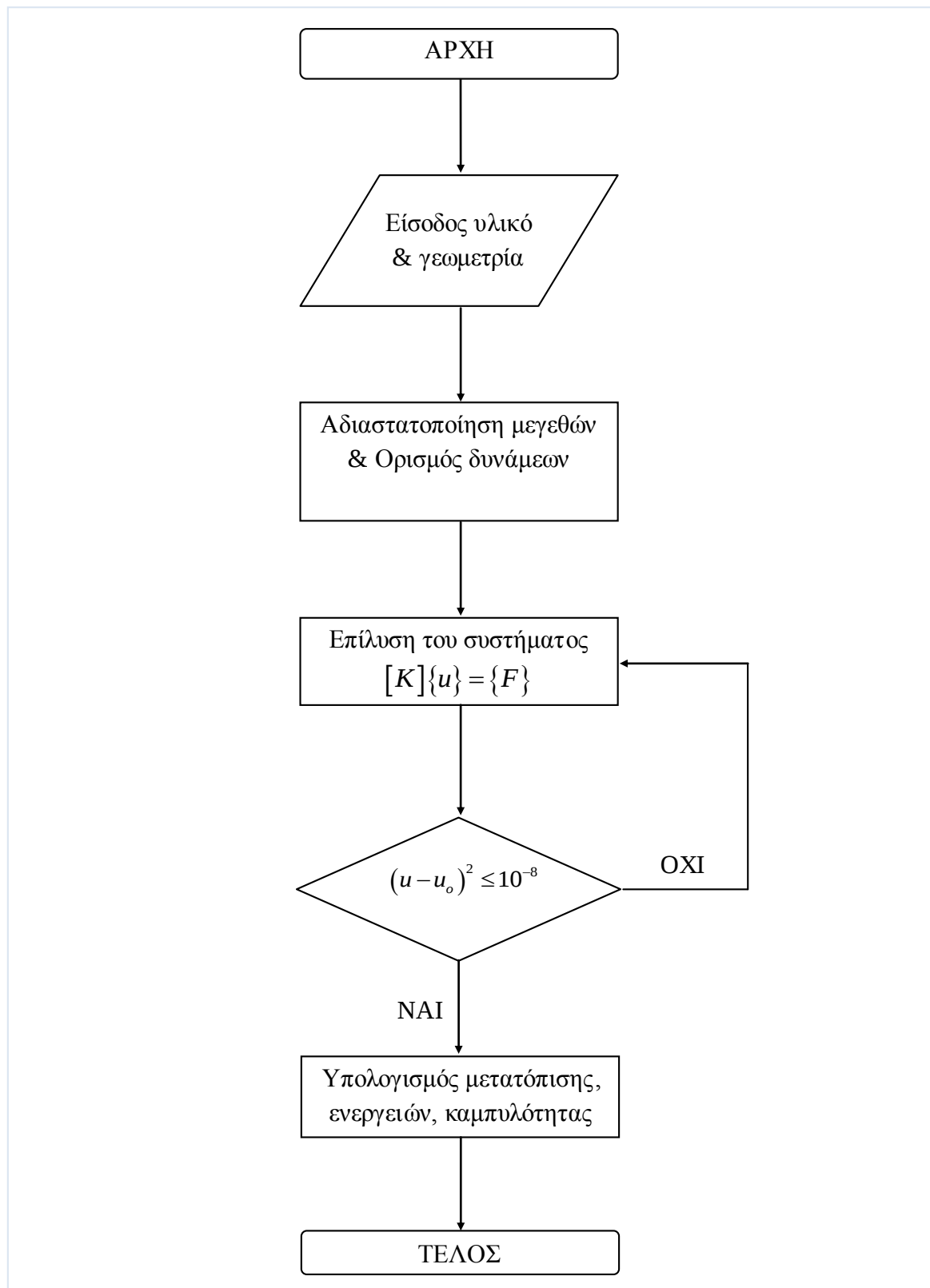


Διάγραμμα 3-2 Γραφική αναπαράσταση των συναρτήσεων cubic B-Splines στο εσωτερικό στοιχείου και ισχύει:

$$B_i(t_j) = \begin{cases} 4, & j=1 \\ 1, & j=i \pm 1 \\ 0, & j=i \pm 2 \end{cases} \quad (3-4)$$

3.4 Διάγραμμα ροής κώδικα Fortran

Σε αυτή την ενότητα παρουσιάζεται συνοπτικά ο κώδικας που υλοποιεί την επίλυση του προβλήματος. Πιο συγκεκριμένα και από το Σχήμα 3-1 στον κώδικα εισάγουμε μέσω αρχείου τις ελαστικές σταθερές του υλικού (μέτρο διάτμησης, μέτρο κάμψης και λόγο Poisson), όπως επίσης και την γεωμετρία του υλικού (ακτίνα και πάχος). Επιπλέον εισάγουμε την ασκούμενη φόρτιση. Ο κώδικας αρχικά αδιαστατοποιεί τις ελαστικές σταθερές και την φόρτιση, όπως περιγράφηκε στην ενότητα 2.4.2, ώστε να είναι πιο εύκολη η επίλυση του προβλήματος. Παράλληλα χρησιμοποιείται η καταστατική σχέση τελείων αερίων, υποθέτοντας ισοθερμοκρασιακή διεργασία, για τον υπολογισμό μεταβολών της εσωτερικής πίεσης καθώς και το ολοκλήρωμα του εξωτερικού φορτίου για τον υπολογισμό της γωνιακής έκτασης της παραμόρφωσης. Στη συνέχεια ορίζονται οι πίνακες που περιέχουν τους συντελεστές των συναρτήσεων βάσης με σκοπό την επίλυση συστήματος γραμμικών εξισώσεων. Η επίλυση γίνεται επαναληπτικά μέσω επαναλήψεων Newton, με αριθμητικό υπολογισμό του Ιακωβιανού πίνακα, μέχρι να επιτευχθεί η επιθυμητή ακρίβεια. Μετά τον υπολογισμό της μετατόπισης στην περιοχή της φόρτισης υπολογίζεται η μετατόπιση στον πόλο, και με αριθμητική ολοκλήρωση υπολογίζονται οι ενέργειες εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης.



Σχήμα 3-1 Διάγραμμα ροής κώδικα Fortran

4. Αποτελέσματα

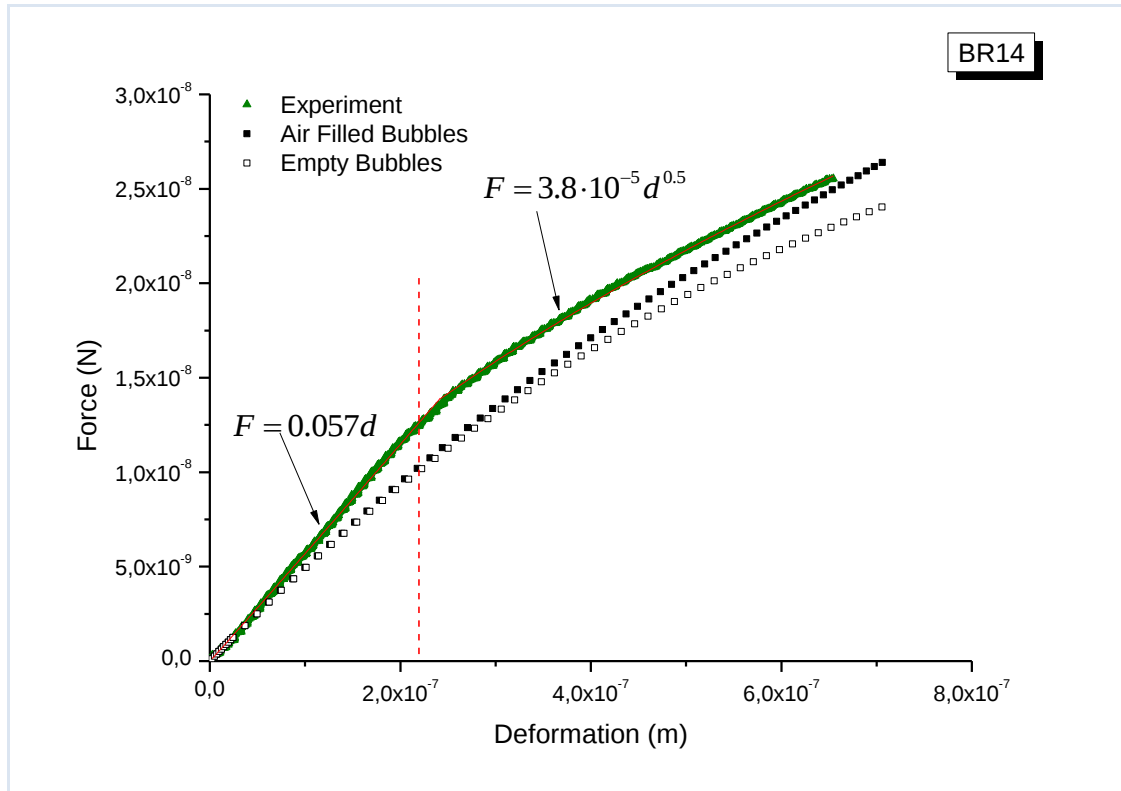
Από τις προσομοιώσεις που διεξήχθησαν υπολογίζονται και χαράσσονται τα αντίστοιχα διαγράμματα που αφορούν την δύναμη και την ενέργεια συναρτήσει της μετατόπισης του πόλου στον οποίο εφαρμόζεται η σημειακή δύναμη. Αρχικά στις ενότητες 4.1-4.4 μελετώνται τέσσερις περιπτώσεις φυσαλίδων υπό την επίδραση σημειακού φορτίου. Επιπλέον τα αποτελέσματα που αφορούν την δύναμη συγκρίνονται με διαθέσιμα πειραματικά αποτελέσματα. Στην ενότητα 4.5 μελετάται το ζήτημα της επαφής μεταξύ της φυσαλίδας και του προβόλου που ασκεί την δύναμη σε μια περιοχή της φυσαλίδας. Τέλος στην ενότητα 4.6 γίνεται παραμετρική μελέτη με βάση τις αδιάστατες παραμέτρους του προβλήματος για φυσαλίδες τύπου BR14 και BiSphere

4.1 Περίπτωση φυσαλίδας BR14

Σε αυτή την παράγραφο της εργασίας μελετώνται φυσαλίδες τύπου BR14, οι οποίες αποτελούνται από λιπίδια και γενικά χαρακτηρίζονται ως φυσαλίδες μαλακού κελύφους. Αρχικά δίδονται τα διαγράμματα που αφορούν την δύναμη και στη συνέχεια την ενέργεια, το σχήμα καθώς και την καμπυλότητα του κελύφους στην παραμορφωμένη κατάσταση. Οι πειραματικές τιμές που αφορούν την δύναμη προέρχονται από πειραματικές μετρήσεις της ερευνητικής ομάδας του Πανεπιστημίου του Εδιμβούργου [9, 10]

4.1.1 Διάγραμμα δύναμης-παραμόρφωσης

Βασικός στόχος της εργασίας είναι η χάραξη των διαγραμμάτων δύναμης-παραμόρφωσης ώστε να συγκριθούν τα αριθμητικά αποτελέσματα με πειραματικές μετρήσεις. Στο Διάγραμμα 4-1 δίδεται με διαστάσεις η απαιτούμενη δύναμη για να επιτευχθεί ορισμένη παραμόρφωση στον πόλο της φυσαλίδας. Με πράσινα τρίγωνα σημειώνονται οι πειραματικές τιμές, ενώ με μαύρα τετράγωνα και λευκά τετράγωνα αναπαριστώνται προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες φυσαλίδες και άδειες φυσαλίδες, αντίστοιχα.



Διάγραμμα 4-1 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φουσίδες (Αξονες με διαστάσεις)-(BR14)

¹Παρεμβάλλοντας πολυωνυμικές καμπύλες στα πειραματικά αποτελέσματα διαπιστώνουμε ότι υπάρχει μια αρχικά γραμμική περιοχή, η οποία ακολουθείται από μία μη-γραμμική περιοχή. Είναι δυνατό, δηλαδή να γραφεί μια σχέση για την περιγραφή της εξάρτησης της δύναμης από την παραμόρφωση:

$$F = \begin{cases} 0.057d & , & 0 \leq d \leq 2.4 \cdot 10^{-7} \text{ m} \\ 3.8 \cdot 10^{-5} d^{0.5} & , & 2.4 \cdot 10^{-7} \leq d \leq 6.5 \cdot 10^{-7} \text{ m} \end{cases} \quad (4-1)$$

Οι τιμές που αφορούν την προσομοίωση έχουν ως παραμέτρους εισόδου στο μοντέλο το μέτρο επιφανειακής διαστολής (χ) και το μέτρο αντίστασης σε κάμψη (k_b) όπως αυτά πρόέκυψαν επιλύοντας τις σχέσεις (2-7 και (2-12 ως προς το μέτρο διάτμησης (G_s) και το πάχος (h), και αφού εισήχθησαν η αρχική ακτίνα, ο λόγος Poisson και οι κλίσεις της γραμμικής και μη γραμμικής περιοχής όπως αυτές πρόέκυψαν από την παρεμβολή στα πειραματικά αποτελέσματα². Στον Πίνακα 4-1 δίδονται οι παράμετροι εισόδου στο μοντέλο.

¹ Τα διαγράμματα και η παρεμβολή γίνονται με το πρόγραμμα Origin 8.5

² Η επίλυση του συστήματος γίνεται με το πρόγραμμα Mathematica 8.0

Πίνακας 4-1 Δεδομένα εισόδου στο μοντέλο (BR14)

Αρχική Ακτίνα	Λόγος Poisson	Επιφανειακό μέτρο διαστολής	Μέτρο κάμψης
$2.6 \cdot 10^{-9} \text{ m}$	0.5	0.1 N/m	$0.36 \cdot 10^{-14} \text{ N} \cdot \text{m}$

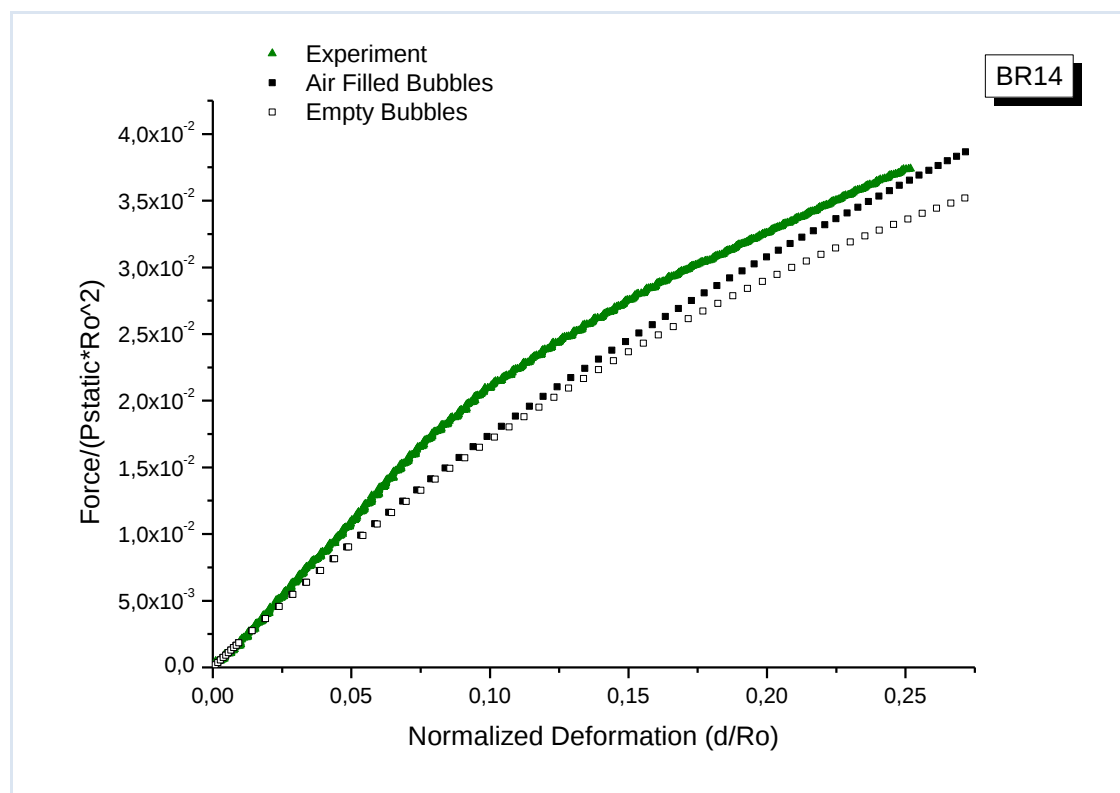
Τα οποία υπολογίζονται ως εξής:

$$\chi = 3G_s h = 3 \cdot 5 \cdot 10^4 \cdot 6 \cdot 10^{-7} = 0.09 \approx 0.1 \text{ N/m} \quad (4-2)$$

$$k_b = \frac{3G_s h^3}{12(1-\nu^2)} = \frac{3 \cdot 5 \cdot 10^4 \cdot (6 \cdot 10^{-7})^3}{12(1-0.5^2)} = 0.36 \cdot 10^{-14} \text{ N} \cdot \text{m} \quad (4-3)$$

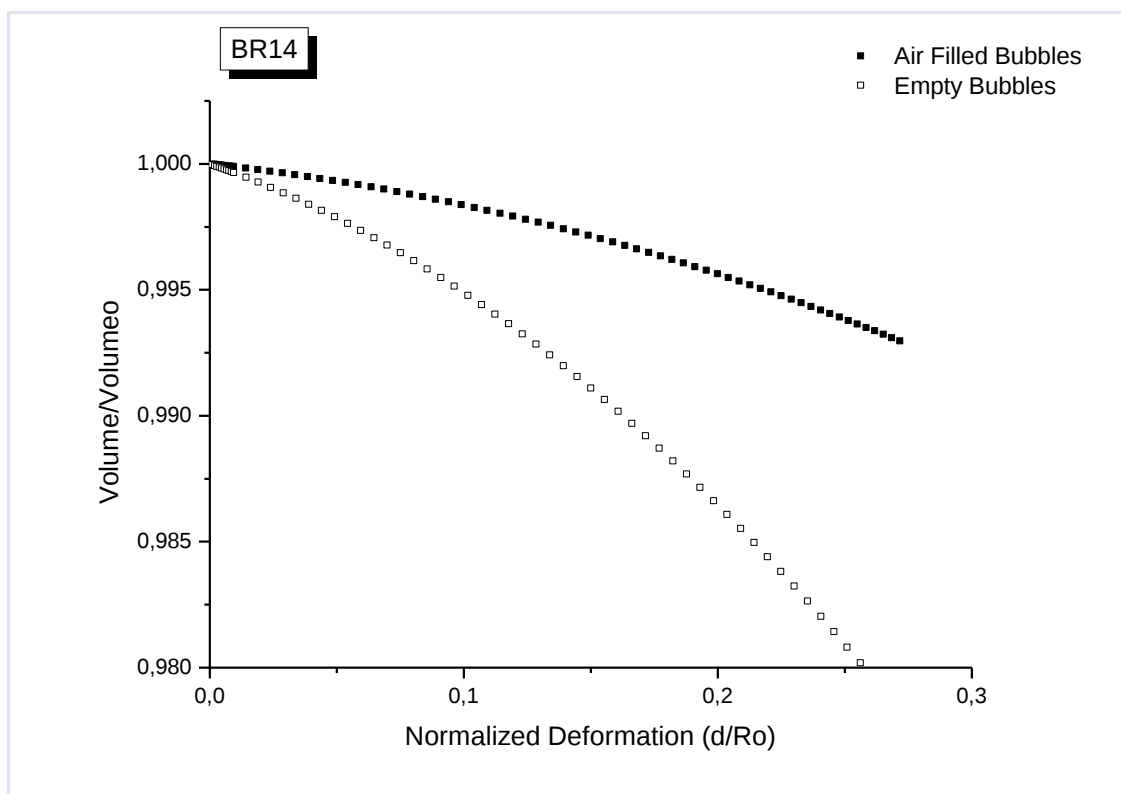
Η τιμή που προέκυψε για την εκτίμηση του πάχους είναι μη ρεαλιστική ($h/R_0 = 0.23 \gg 0.01$) σε αντίθεση με το μέτρο επιφανειακή διαστολής και το μέτρο κάμψης. Το πάχος στην περίπτωση των λιπιδίων δεν είναι σαφώς καθορισμένο και εύκολα μετρήσιμο. Και ως εκ τούτου δεν μπορεί να επιλεγεί ως ανεξάρτητη παράμετρος.

Επιπλέον δίδεται διάγραμμα δύναμης-παραμόρφωσης με αδιάστατες τιμές για την σύγκριση των μεγεθών με χαρακτηριστικές τιμές της γεωμετρίας και του περιβάλλοντος της φυσαλίδας. (Διάγραμμα 4-2)



Διάγραμμα 4-2 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φυσαλίδες (Αξονες χωρίς διαστάσεις) - (BR14)

Οι προσομοιώσεις περιγράφουν πολύ καλά την γραμμική περιοχή, ενώ όσο ξεκινάει η μη γραμμική περιοχή υπάρχει κάποια απόκλιση από τα πειραματικά αποτελέσματα. Επίσης παρατηρείται ταύτιση των προσομοιώσεων για τις γεμάτες και τις άδειες φυσαλίδες στις μικρές παραμορφώσεις. Ωστόσο όταν η παραμόρφωση μεγαλώνει η συμπίεστικότητα του αερίου που εσωκλείεται γίνεται σημαντική ως μια επιπλέον δύναμη αντίστασης στην παραμόρφωση. Η τελευταία παρατήρηση δικαιολογεί την αύξηση της απαιτούμενης δύναμης για να επιτευχθεί μια ορισμένη παραμόρφωση στις φυσαλίδες με αέρα. Στο Διάγραμμα 4-3 δίδεται η μεταβολή του όγκου συναρτήσει της παραμόρφωσης του πόλου της φυσαλίδας. Παρατηρείται συνολικά μια μικρή μεταβολή του όγκου η οποία είναι πιο σημαντική για τις άδειες φυσαλίδες σε σύγκριση με τις γεμάτες. Αυτό είναι αναμενόμενο, διότι ο αέρας προβάλλει αντίσταση στην αλλαγή του όγκου.

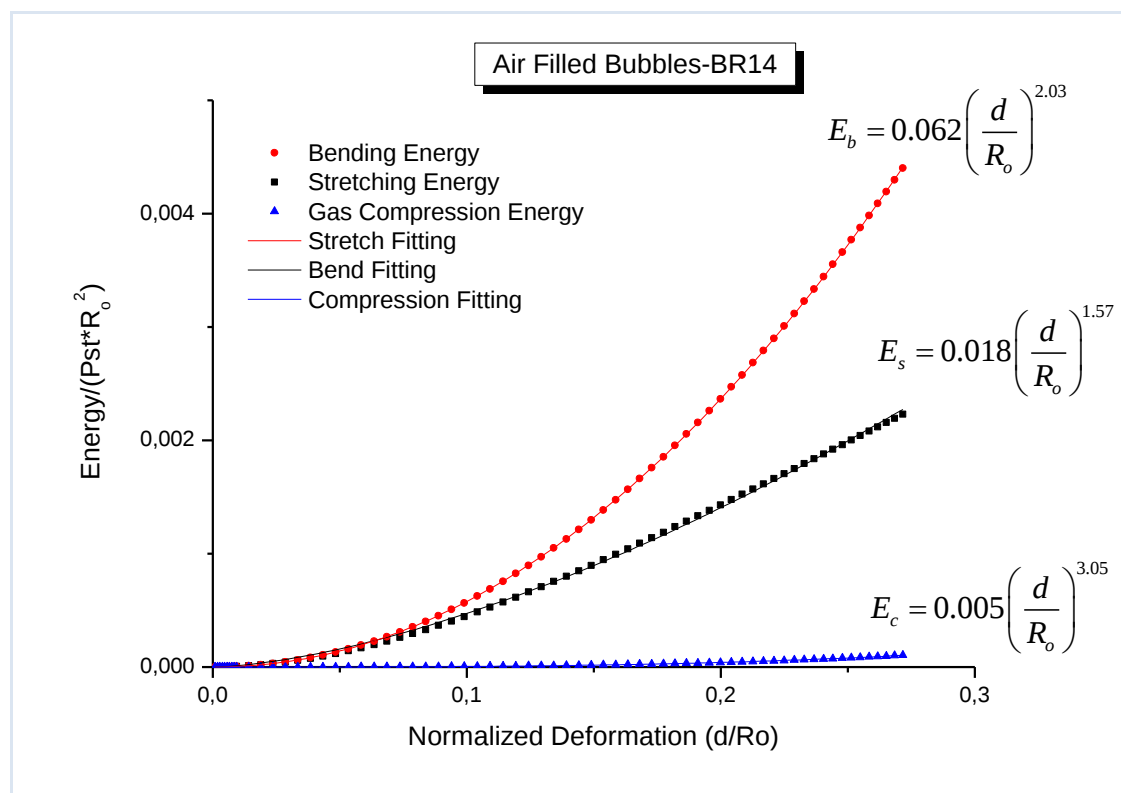


Διάγραμμα 4-3 Μεταβολή του όγκου συναρτήσει της παραμόρφωσης για κενές και γεμάτες φυσαλίδες- (BR14).

4.1.2 Διάγραμμα ενεργειών-παραμόρφωσης

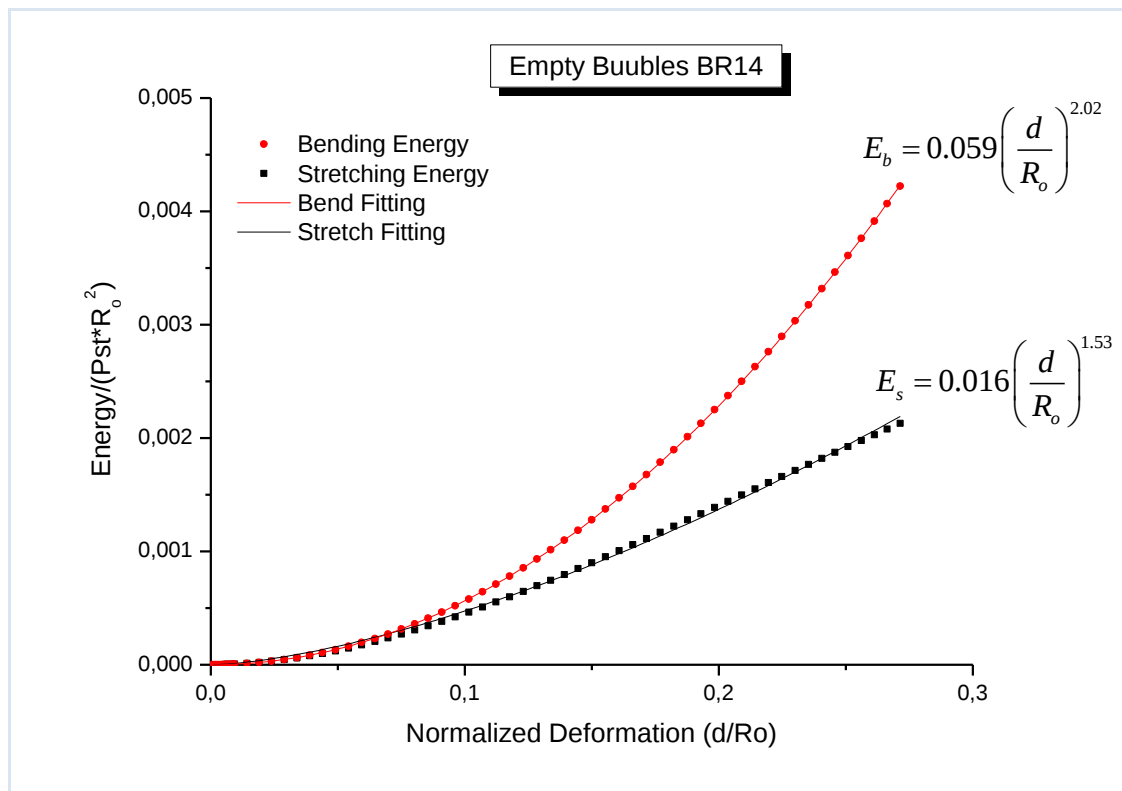
Η μοντελοποίηση που έγινε μπορεί να υπολογίσει πέρα από μεγέθη που είναι άμεσα συγκρινόμενα με πειράματα και μεγέθη όπως είναι η ενέργειες λόγω εφελκυσμού και κάμψης του κελύφους, καθώς και την ενέργεια λόγω συμπίεσης του αέρα στο εσωτερικό της φυσαλίδας. Σκοπός αυτής της ενότητας είναι η κατανόηση της κυρίαρχης δύναμης στην παραμόρφωση της φυσαλίδας.

Στο Διάγραμμα 4-4 αναπαριστώνται οι ανωτέρω ενέργειες συναρτήσει της παραμόρφωσης για γεμάτες με αέρα φυσαλίδες. Επιπλέον, γίνεται παρεμβολή πολυωνυμικών συναρτήσεων ώστε να προσδιοριστεί η εξάρτηση των ενεργειών από το την αδιάστατη παραμόρφωση. Το Διάγραμμα 4-4 δείχνει ότι η παραμόρφωση του κελύφους κυριαρχείται από δυνάμεις κάμψεως και εφελκυσμού, ενώ η συμπίεση του αερίου είναι αμελητέα. Επιπλέον, οι ενέργειες λόγω κάμψης και εφελκυσμού εξαρτώνται από το τετράγωνο της παραμόρφωσης, όπως θα αναμέναμε, διότι θεωρήθηκε γραμμικά ελαστικό υλικό. Η ενέργεια συμπίεσης του αερίου είναι ανάλογη του κύβου της παραμόρφωσης, το οποίο επίσης είναι αναμενόμενο, διότι η ενέργεια λόγω συμπίεσης είναι ανάλογη του όγκου.



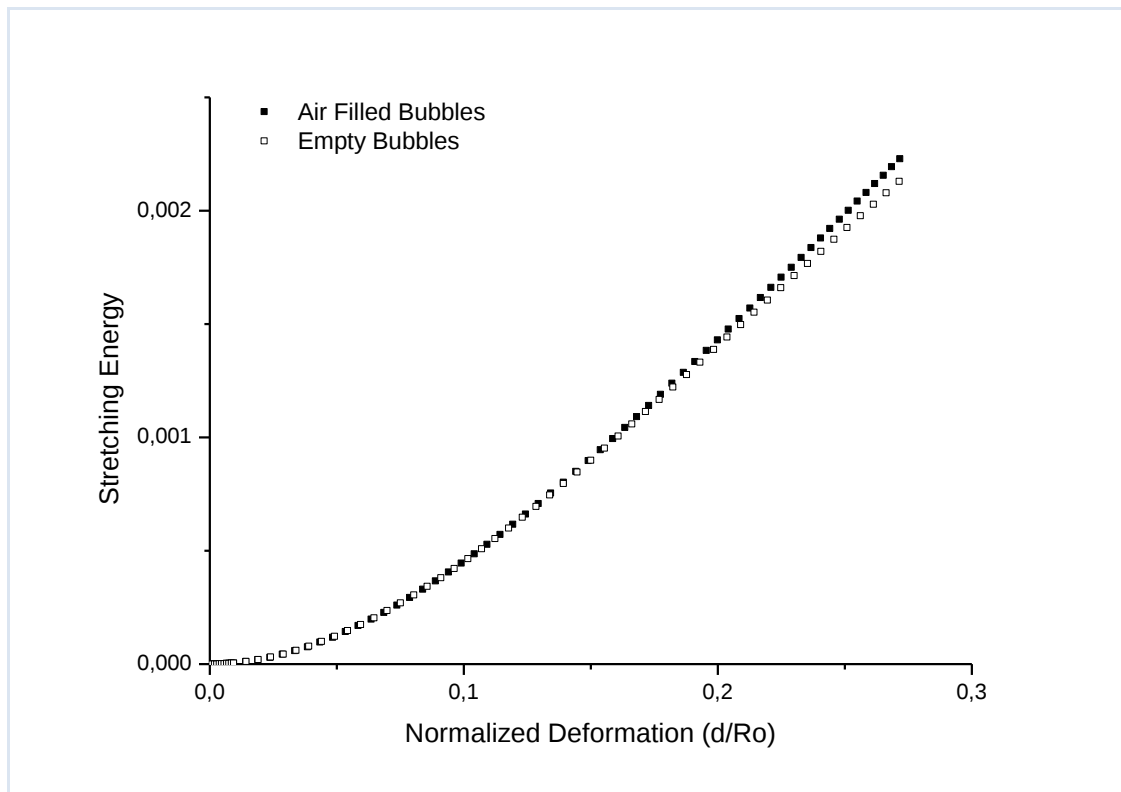
Διάγραμμα 4-4 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για γεμάτες φυσαλίδες-(BR14).

Ομοίως χαράσσεται το διάγραμμα ενέργειας-παραμόρφωσης για άδειες φυσαλίδες (Διάγραμμα 4-5). Τα αποτελέσματα είναι ανάλογα ως προς την κυριαρχία των δυνάμεων και την εξάρτηση των ενεργειών από την παραμόρφωση.

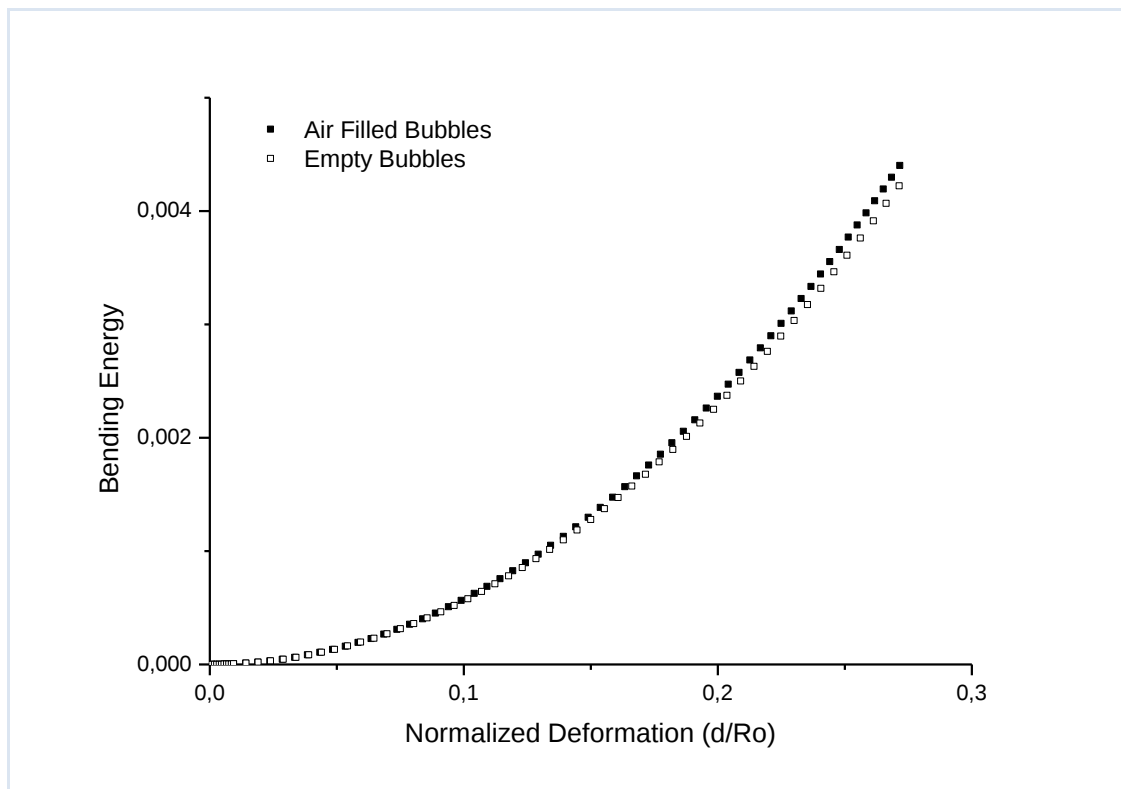


Διάγραμμα 4-5 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για άδειες φυσαλίδες-(BR14).

Στη συνέχεια συγκρίνεται η ενέργεια λόγω εφελκυσμού και κάμψης μεταξύ άδειων και γεμάτων φυσαλίδων (Διάγραμμα 4-6 & Διάγραμμα 4-7). Όπως προκύπτει και από την παρεμβολή που διεξήχθη οι ενέργειες ταυτίζονται για τις δύο περιπτώσεις φυσαλίδων. Παρατηρείται μόνο μια μικρή απόκλιση σε μεγαλύτερες παραμορφώσεις που πιθανά να συνδέεται με τη μεταβολή του όγκου.



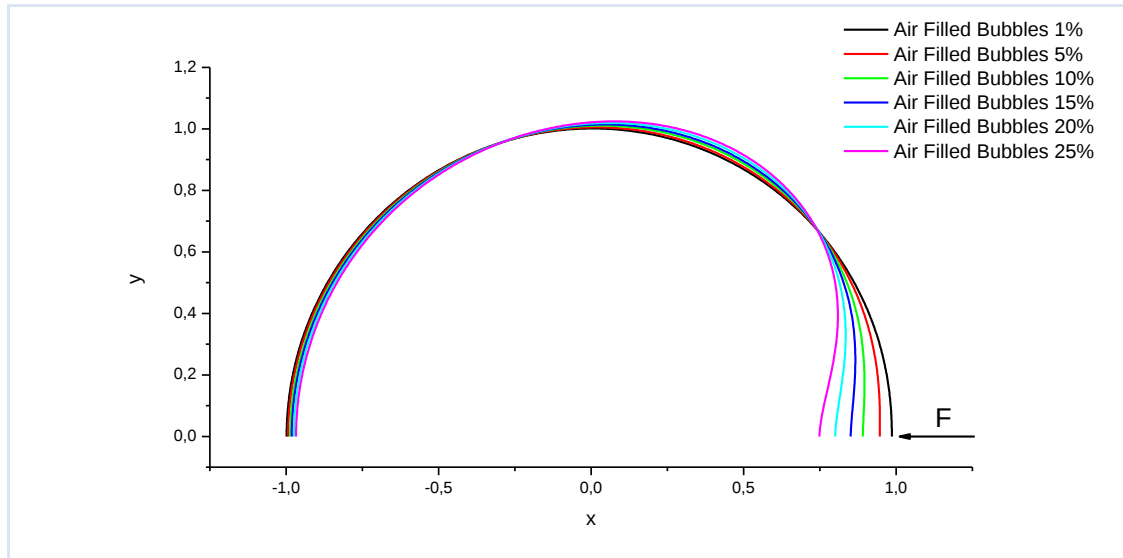
Διάγραμμα 4-6 Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού μεταξύ κενών και γεμάτων φουσαλίδων-(BR14).



Διάγραμμα 4-7 Σύγκριση της ενέργειας λόγω κάμψεως μεταξύ κενών και γεμάτων φουσαλίδων-(BR14).

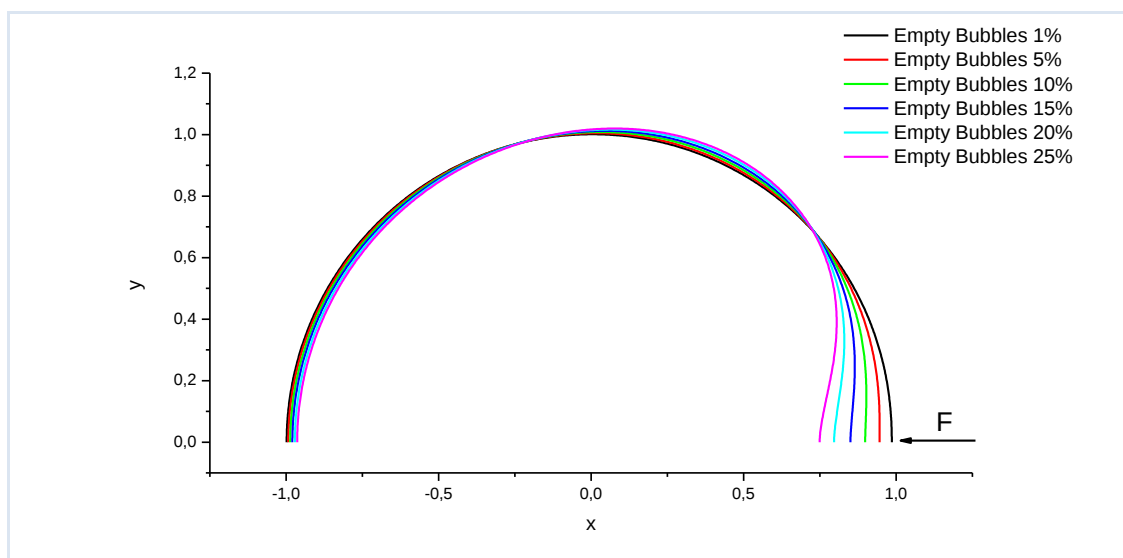
4.1.3 Σχήματα παραμορφωμένων φυσαλίδων

Σε αυτή την ενότητα παρουσιάζεται η μεταβολή του παραμορφωμένου σχήματος της φυσαλίδας για επιλεγμένες τιμές της παραμόρφωσης. Το Διάγραμμα 4-8 αφορά φυσαλίδες γεμάτες με αέρα και αναπαριστώνται στην παραμορφωμένη κατάσταση. Οι τιμές που επιλέγηκαν να παρουσιαστούν είναι για παραμόρφωση 1%, 5%, 10%, 15%, 20% και 25%. Το σχήμα της φυσαλίδας παραμένει σχεδόν σφαιρικό μέχρι και 15% ενώ με περαιτέρω παραμόρφωση παρατηρείται ο σχηματισμός κρατήρα.



Διάγραμμα 4-8 Μεταβολή του σχήματος της φυσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φυσαλίδες-(BR14).

Ανάλογα αποτελέσματα παρατηρούνται από το Διάγραμμα 4-9 για φυσαλίδες που δεν περιέχουν αέρα.

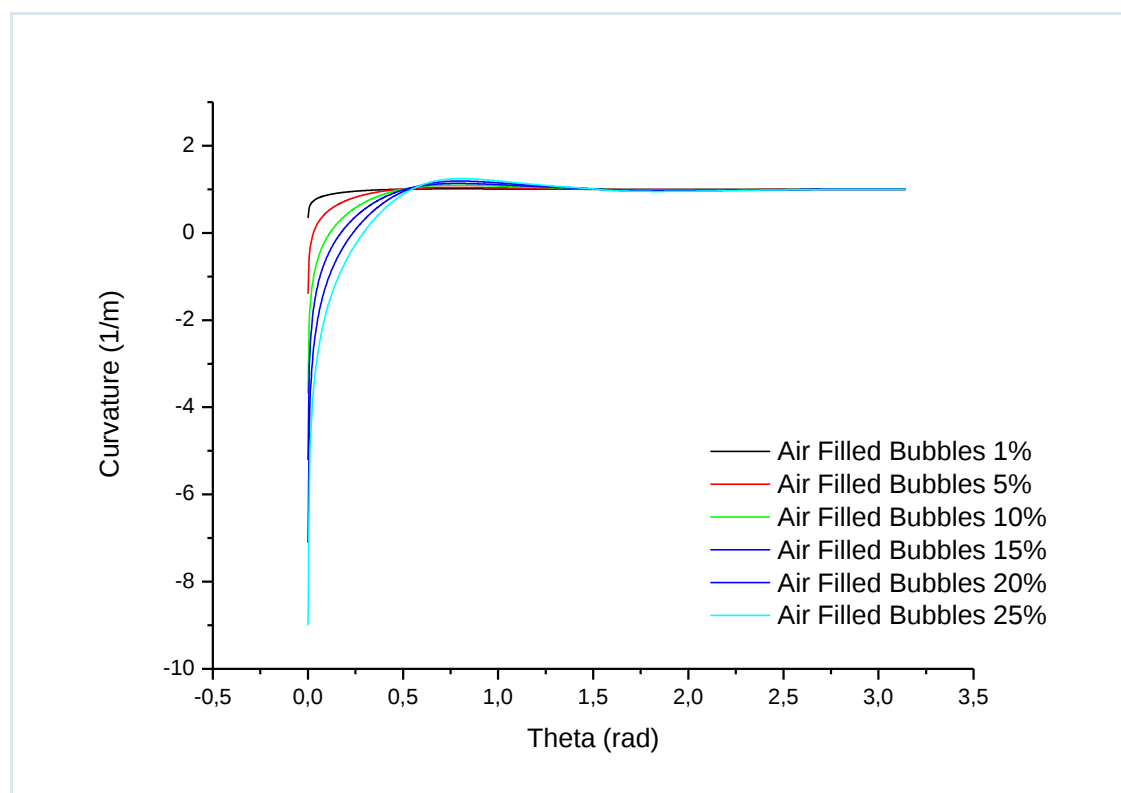


Διάγραμμα 4-9 Μεταβολή του σχήματος της φυσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για άδειες φυσαλίδες-(BR14).

4.1.4 Μεταβολή καμπυλότητας παραμορφωμένου σχήματος φυσαλίδας

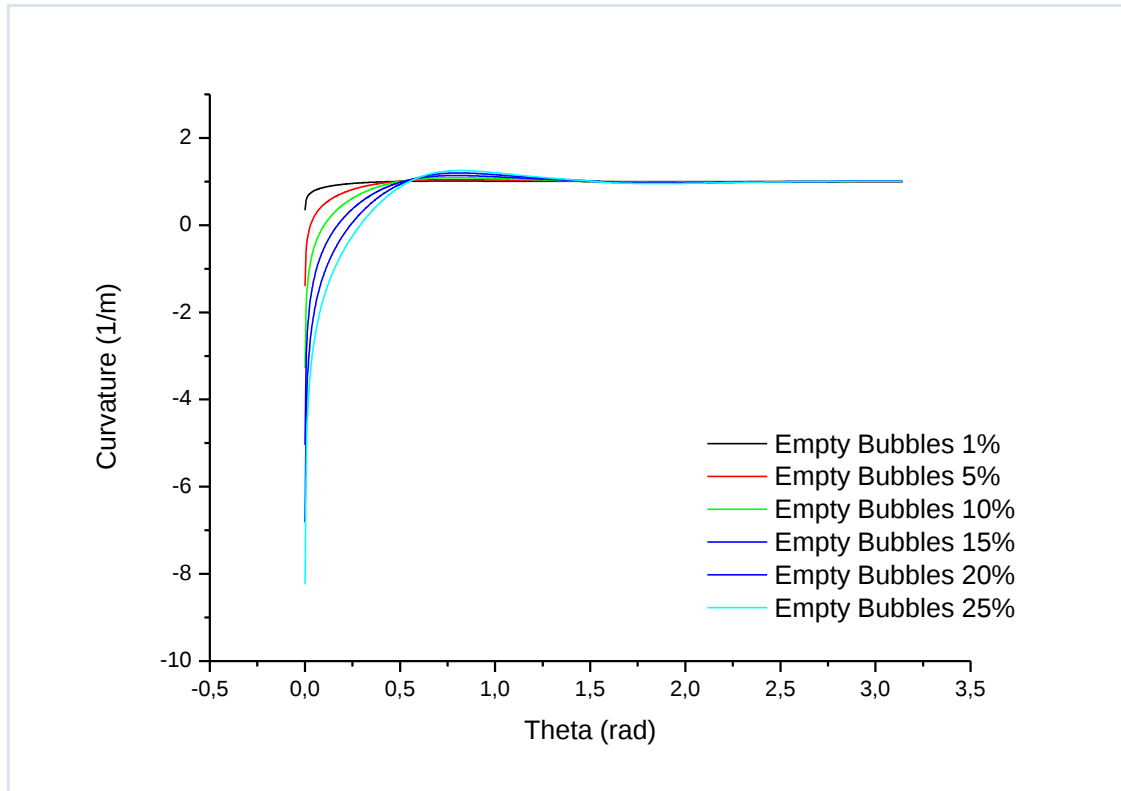
Στην προσπάθεια κατανόησης της μηχανικής συμπεριφοράς των φυσαλίδων καταγράφεται και η καμπυλότητα. Πιο συγκεκριμένα υπολογίζεται η μέση καμπυλότητα με τη βοήθεια της σχέσης (2-51) για κάθε σημείο της φυσαλίδας στην παραμορφωμένη κατάσταση.

Στο Διάγραμμα 4-10 αναπαριστάται η μεταβολή της καμπυλότητας για γεμάτες φυσαλίδες συναρτήσει της πολικής γωνίας θ . Στο $\theta=0$ rad έχουμε εφαρμογή της σημειακής δύναμης F . Οι καμπύλες αναφέρονται σε παραμόρφωση 1%, 5%, 10%, 15%, 20% και 25%. Στο σημείο εφαρμογής της δύναμης η καμπυλότητα έχει αρνητική τιμή, η οποία γίνεται ολοένα και πιο αρνητική με αύξηση της παραμόρφωσης. Στη συνέχεια η καμπυλότητα αυξάνεται μονοτονικά αποκτώντας μια μέγιστη τιμή, η οποία εμφανίζεται όλο και μεγαλύτερη γωνία. Τέλος, όλες οι καμπύλες σταθεροποιούνται στην μονάδα (τέλεια σφαίρα) σε γωνία $\theta=1.4$ rad.



Διάγραμμα 4-10 Μεταβολή της καμπυλότητας του σχήματος της φυσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φυσαλίδες (BR14).

Παρόμοια αποτελέσματα για την μεταβολή της καμπυλότητας παρατηρούνται και για τις άδειες φυσαλίδες (Διάγραμμα 4-11).



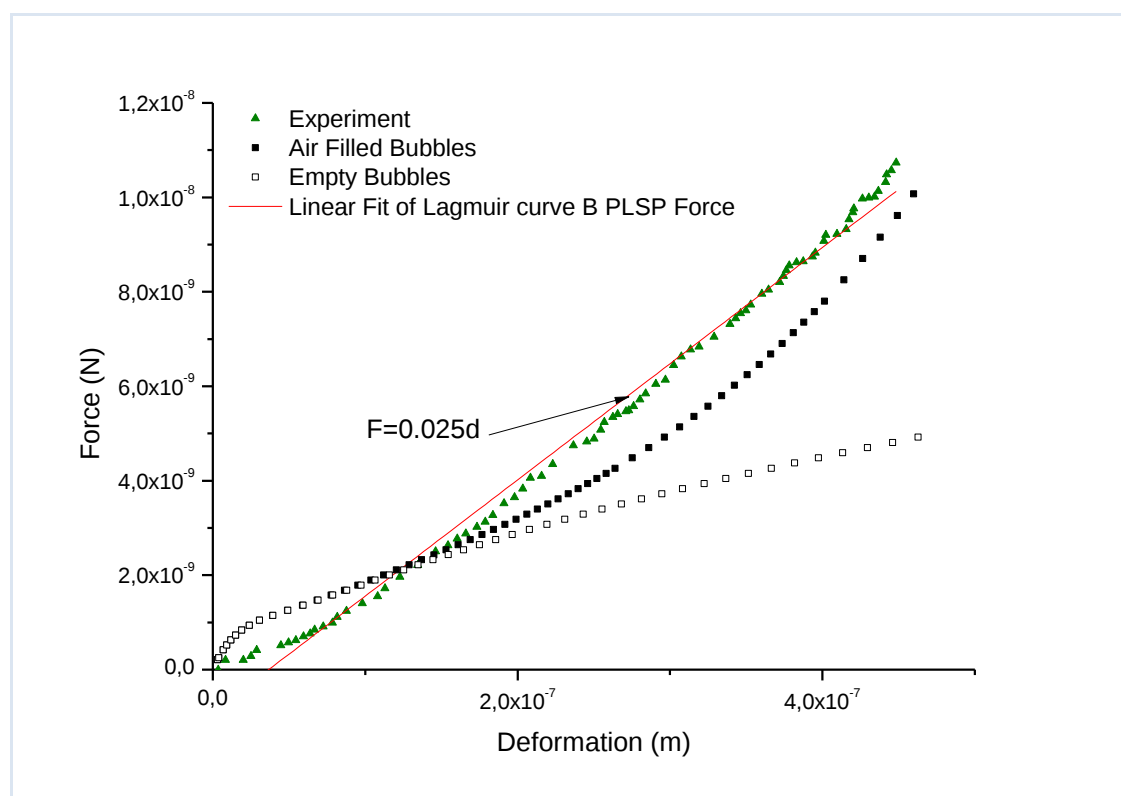
Διάγραμμα 4-11 Μεταβολή της καμπυλότητας του σχήματος της φουσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για άδειες φουσαλίδες-(BR14).

4.2 Περίπτωση φυσαλίδας με κέλυφος από Φωσφολιπίδιο

Σε αυτή την παράγραφο της εργασίας μελετώνται φυσαλίδες από φωσφολιπίδιο και χαρακτηρίζονται ως φυσαλίδες μαλακού κελύφους. Οι πειραματικές τιμές που αφορούν την δύναμη προέρχονται από την πειραματική εργασία των Glynos et al. [10].

4.2.1 Διάγραμμα δύναμης-παραμόρφωσης

Στο Διάγραμμα 4-12 δίδεται με διαστάσεις η απαιτούμενη δύναμη για να επιτευχθεί ορισμένη παραμόρφωση στον πόλο της φυσαλίδας. Με πράσινα τρίγωνα σημειώνονται οι πειραματικές τιμές, ενώ με μαύρα τετράγωνα και λευκά τετράγωνα αναπαριστώνται προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες φυσαλίδες και άδειες φυσαλίδες, αντίστοιχα.



Διάγραμμα 4-12 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φυσαλίδες (Άξονες με διαστάσεις) (Phospholipid).

Από την παρεμβολή στις πειραματικές τιμές προκύπτει μια γραμμική εξάρτηση της δύναμης από την παραμόρφωση:

$$F = 0.025d \quad , \quad 0 \leq d \leq 5 \cdot 10^{-7} \text{ m} \quad (4-4)$$

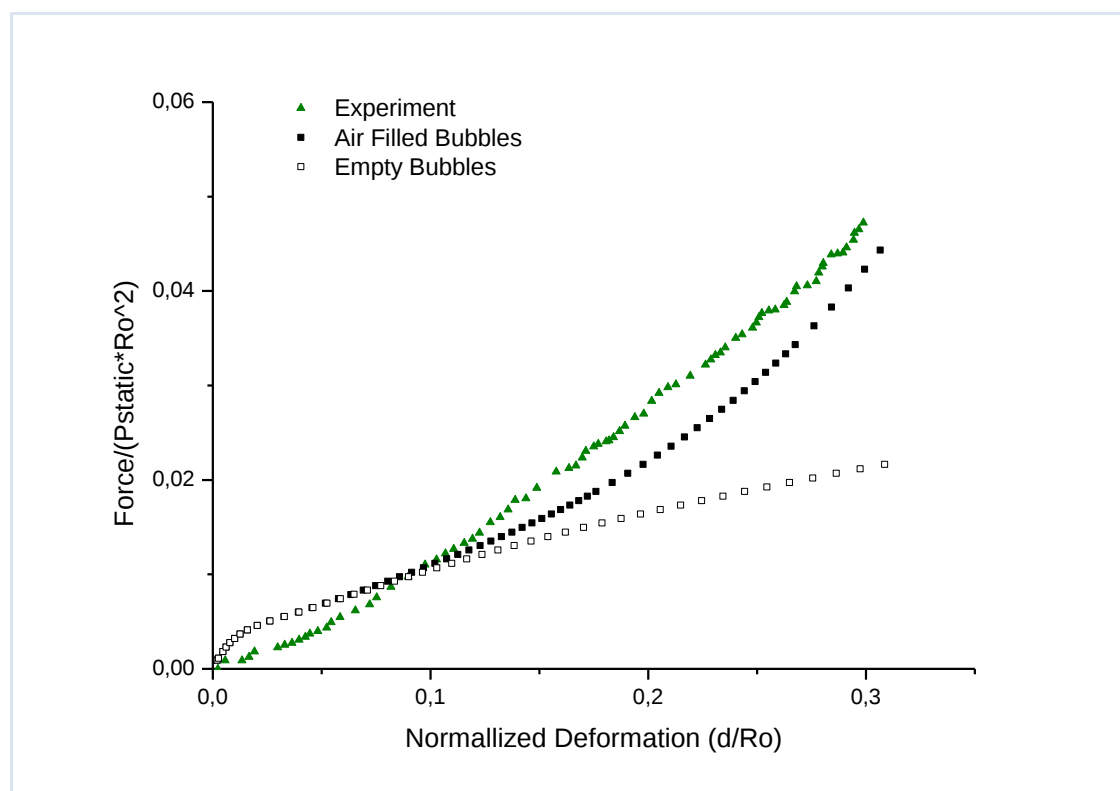
Οι τιμές που αφορούν την προσομοίωση έχουν ως παραμέτρους εισόδου στο μοντέλο το επιφανειακό μέτρο διαστολής, το μέτρο κάμψης, την αρχική ακτίνα R_0 , και τον λόγο Poisson (ν). Στον Πίνακα 4-2 δίδονται οι παράμετροι εισόδου στο μοντέλο. Το

μέτρο κάμψης δεν προκύπτει με χρήση των νόμων Reissner και Pogorelov αλλά με χρήση του νόμου Reissner και επιλογή του μέτρου κάμψης ώστε να υπάρξει κατά το δυνατό προσέγγιση μεταξύ των πειραματικών αποτελεσμάτων και των προσομοιώσεων.

Πίνακας 4-2 Δεδομένα εισόδου στο μοντέλο (Phospholipid)

Αρχική Ακτίνα	Λόγος Poisson	Επιφανειακό μέτρο διαστολής	Μέτρο κάμψης
$1.5 \cdot 10^{-6}$ m	0.5	2.43 N/m	$8 \cdot 10^{-17}$ N·m

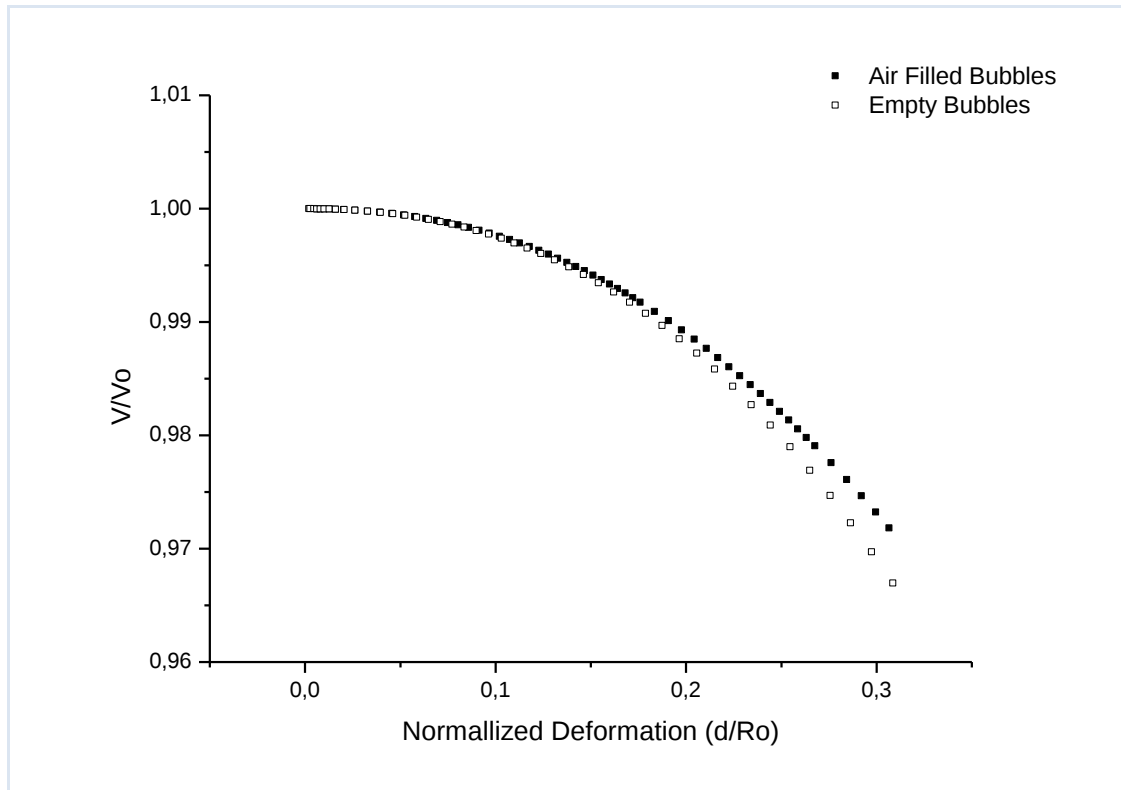
Επιπλέον δίδεται διάγραμμα δύναμης-παραμόρφωσης με αδιάστατες τιμές για την σύγκριση των μεγεθών με χαρακτηριστικές τιμές της γεωμετρίας και του περιβάλλοντος της φυσαλίδας. (Διάγραμμα 4-13)



Διάγραμμα 4-13 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φυσαλίδες (Άξονες χωρίς διαστάσεις) (Phospholipid).

Οι προσομοιώσεις περιγράφουν την τάση των πειραματικών αποτελεσμάτων, δεν παρατηρείται ωστόσο ταύτιση σε κάποια περιοχή. Όσον αφορά τις προσομοιώσεις ενδιαφέρον παρουσιάζει το γεγονός ταύτισης των αποτελεσμάτων στις μικρές παραμορφώσεις, ενώ για μεγαλύτερες υπάρχει έντονη απόκλιση των δύο φυσαλίδων. Στο

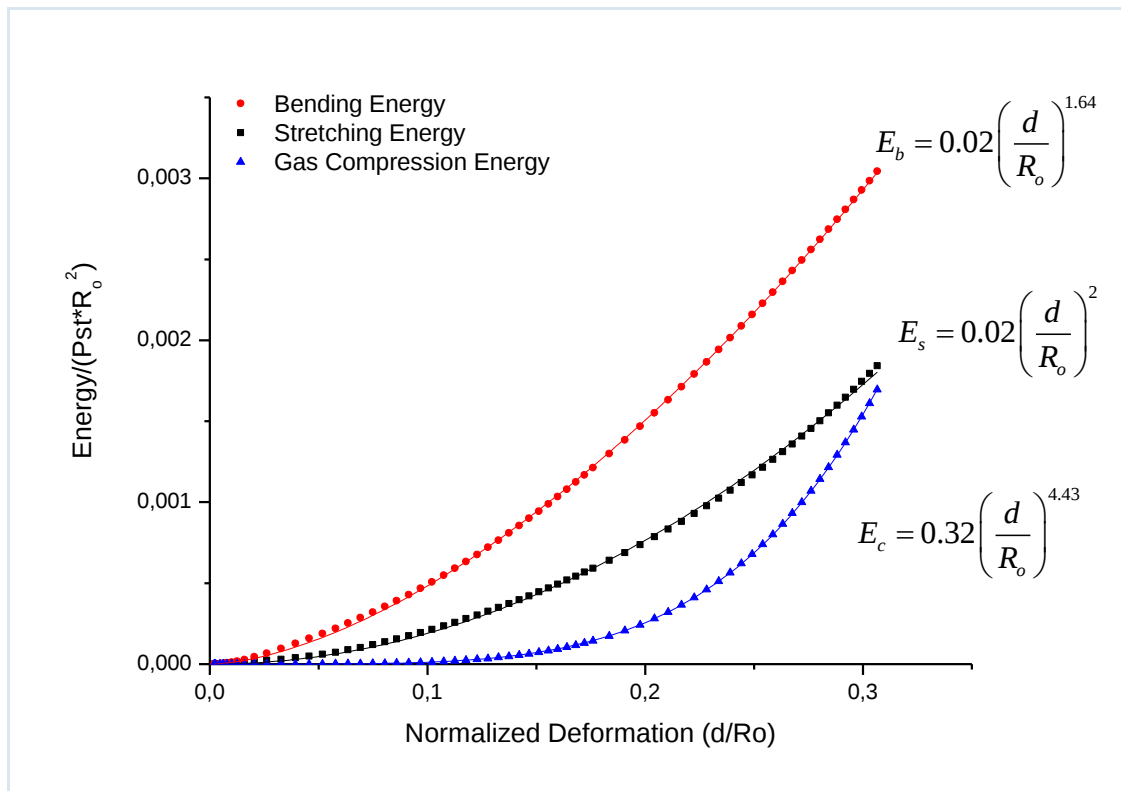
Διάγραμμα 4-14 δίδεται η μεταβολή του όγκου συναρτήσει της παραμόρφωσης του πόλου της φυσαλίδας. Παρατηρείται συνολικά μια μικρή μεταβολή του όγκου η οποία είναι πιο σημαντική για τις άδειες φυσαλίδες σε σύγκριση με τις γεμάτες.



Διάγραμμα 4-14 Μεταβολή του όγκου συναρτήσει της παραμόρφωσης για κενές και γεμάτες φυσαλίδες-*(Phospholipid)*.

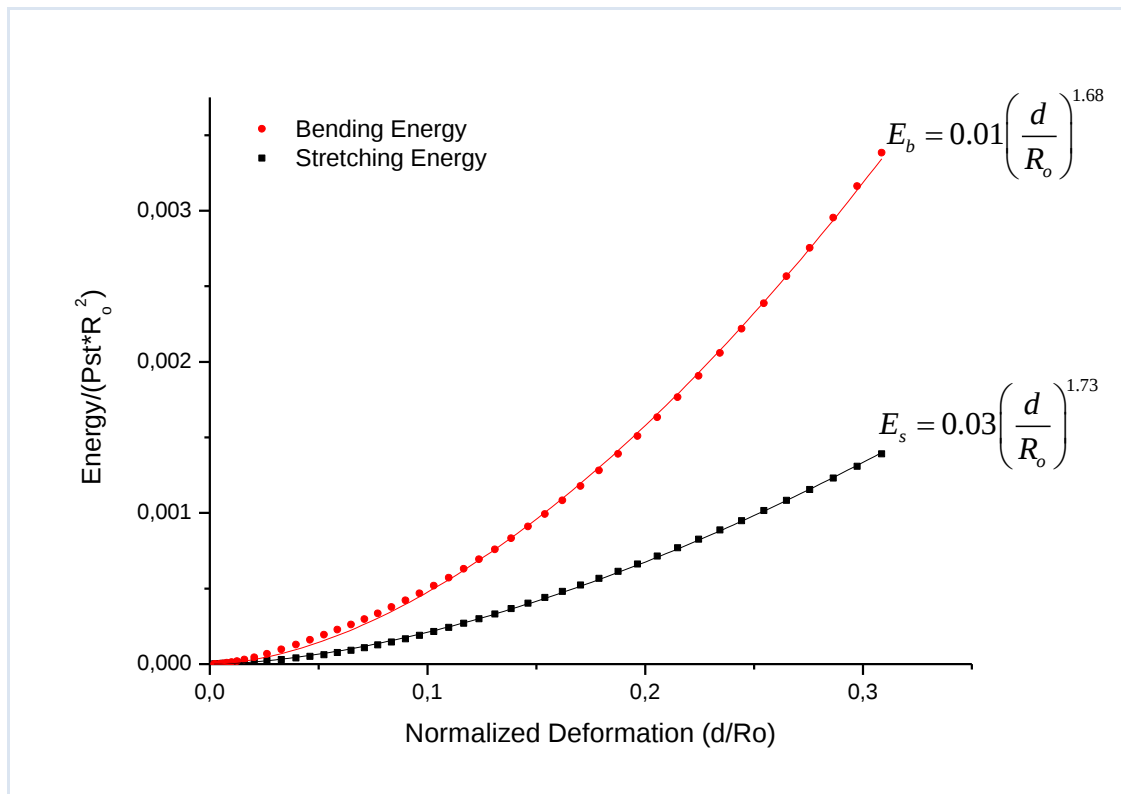
4.2.2 Διάγραμμα ενεργειών-παραμόρφωσης

Στο Διάγραμμα 4-15 αναπαριστώνται οι ενέργειες λόγω κάμψης και εφελκυσμού συναρτήσει της παραμόρφωσης για γεμάτες με αέρα φυσαλίδες. Το Διάγραμμα 4-15 δείχνει ότι η παραμόρφωση του κελύφους κυριαρχείται από δυνάμεις κάμψεως, ενώ η συμπίεση του αερίου είναι αρχικά αμελητέα, ενώ στις μεγάλες παραμορφώσεις γίνεται συγκρίσιμη με το ενέργεια λόγω εφελκυσμού. Επιπλέον, οι ενέργειες λόγω κάμψης και εφελκυσμού εξαρτώνται από το τετράγωνο της παραμόρφωσης. Η ενέργεια συμπίεσης του αερίου είναι ανάλογη της τέταρτης δύναμης της παραμόρφωσης.



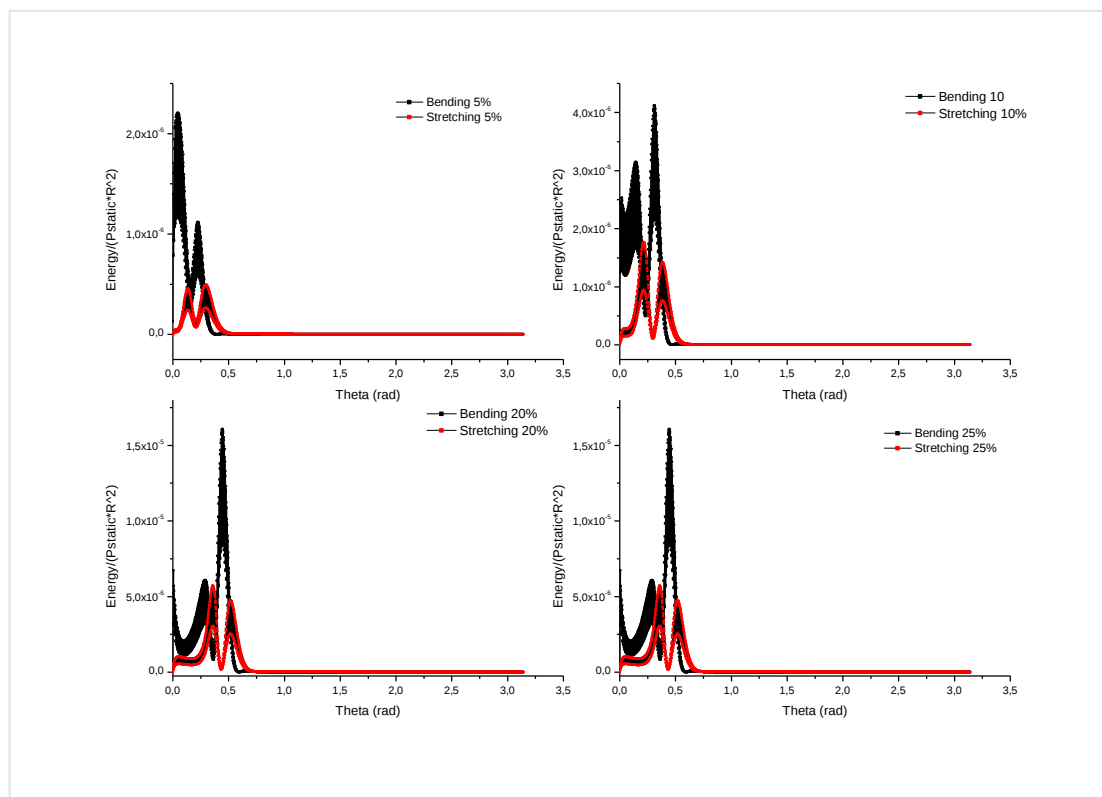
Διάγραμμα 4-15 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για γεμάτες φυσαλίδες (Phospholipid).

Ομοίως χαράσσεται το διάγραμμα ενέργειας-παραμόρφωσης για άδειες φυσαλίδες (Διάγραμμα 4-16). Τα αποτελέσματα είναι ανάλογα ως προς την κυριαρχία των δυνάμεων και την εξάρτηση των ενεργειών από την παραμόρφωση.



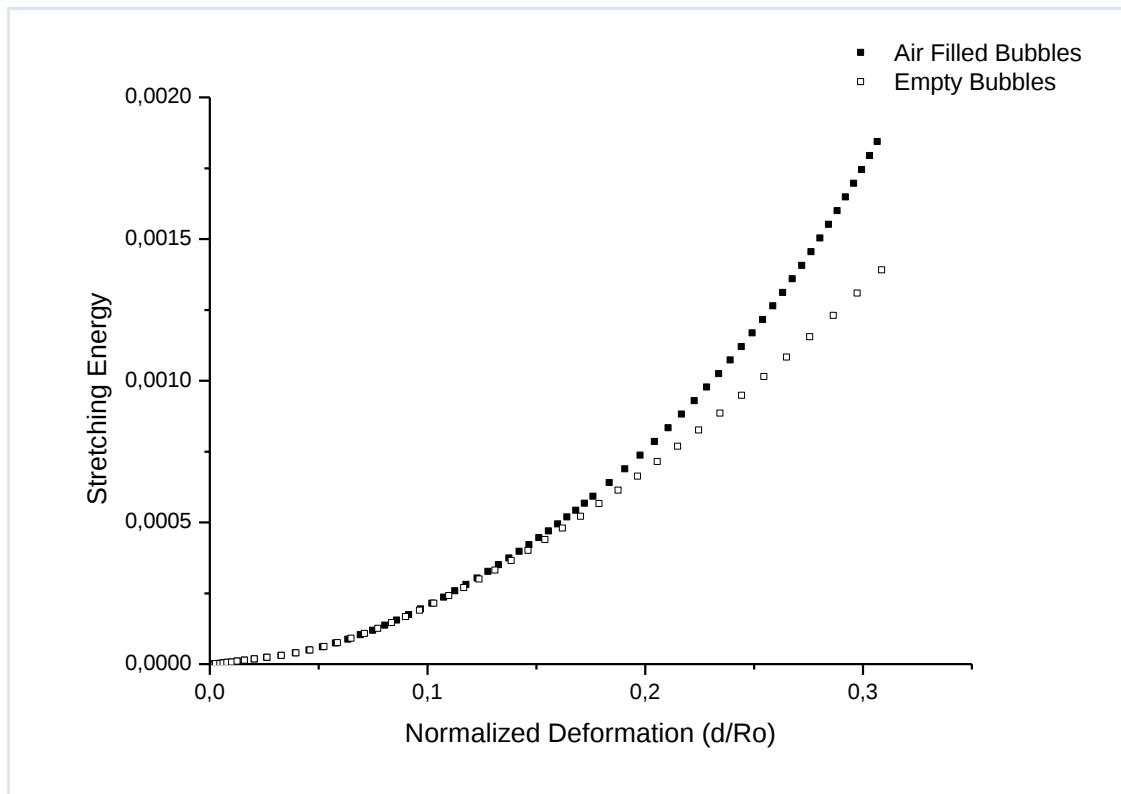
Διάγραμμα 4-16 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για άδειες φουσλίδες (Phospholipid).

Στο Διάγραμμα 4-17 δίδεται η κατανομή της ενέργειας λόγω κάμψης και εφελκυσμού για επιλεγμένες παραμορφώσεις.

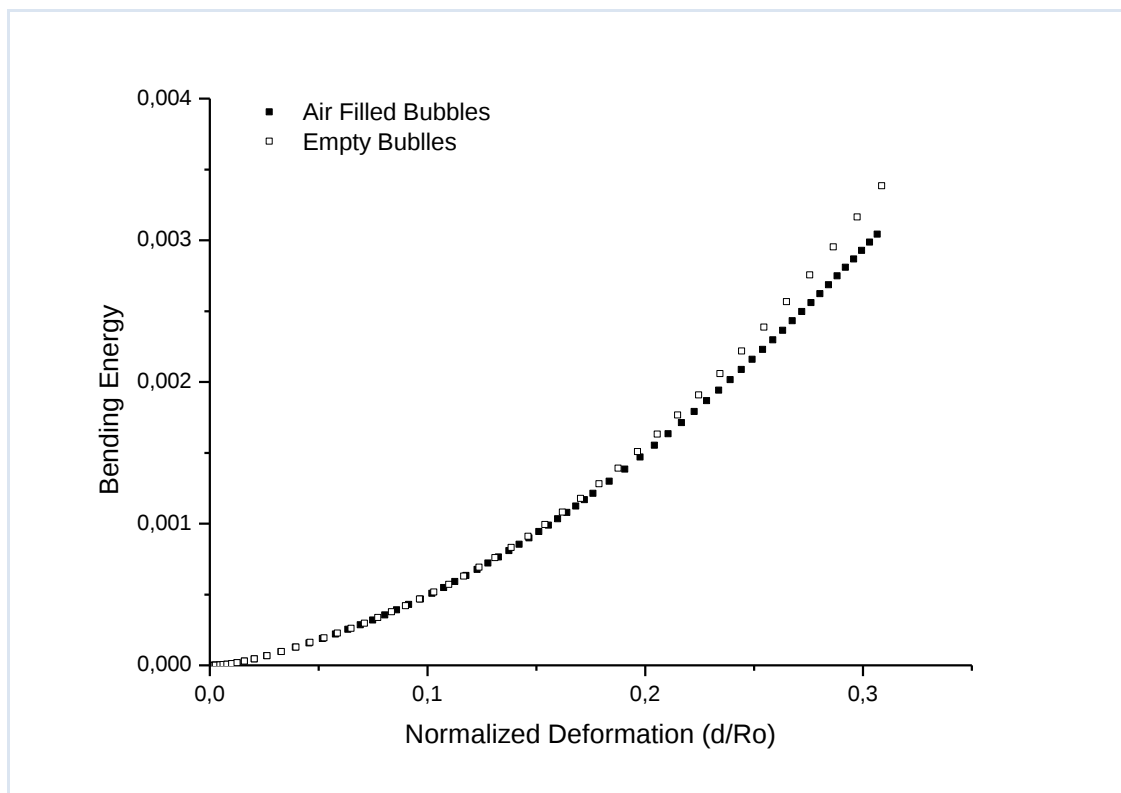


Διάγραμμα 4-17 Κατανομή της ενέργειας κάμψης και εφελκυσμού συναρτήσει της πολικής γωνίας θ για παραμορφώσεις 5,10,20 και 25% βλ ενότητα 2.4.6.

Στη συνέχεια συγκρίνεται η ενέργεια λόγω εφελκυσμού και κάμψης μεταξύ άδειων και γεμάτων φυσαλίδων (Διάγραμμα 4-18 & Διάγραμμα 4-19). Όπως προκύπτει και από την παρεμβολή που διεξήχθη οι ενέργειες είναι σχεδόν ίδιες, αλλά σε μεγάλες παραμορφώσεις παρατηρείται σημαντική απόκλιση.



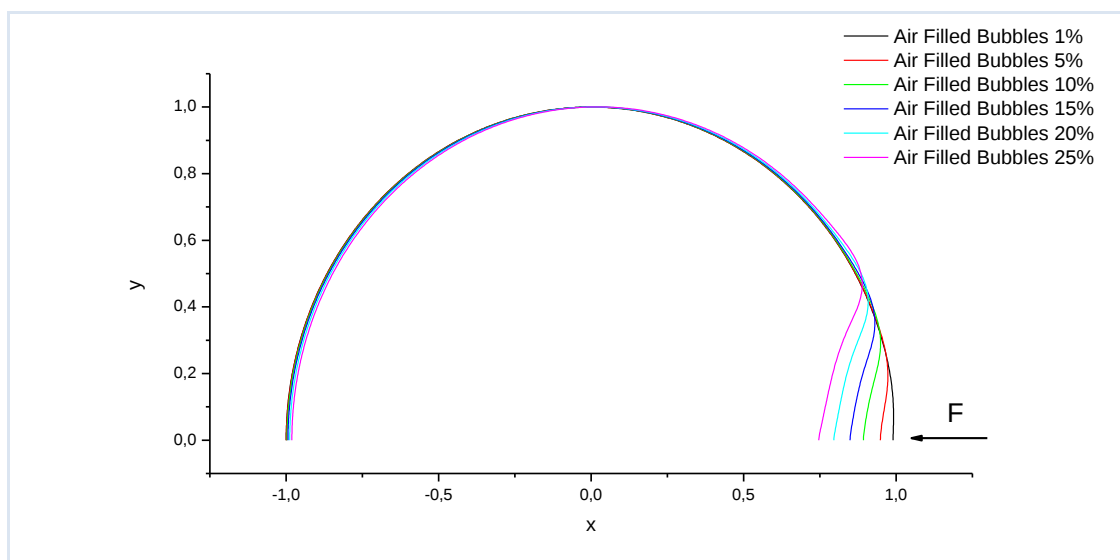
Διάγραμμα 4-18 Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού μεταξύ κενών και γεμάτων φυσαλίδων- (Phospholipid).



Διάγραμμα 4-19 Σύγκριση της ενέργειας λόγω κάμψεως μεταξύ κενών και γεμάτων φυσαλίδων- (Phospholipid).

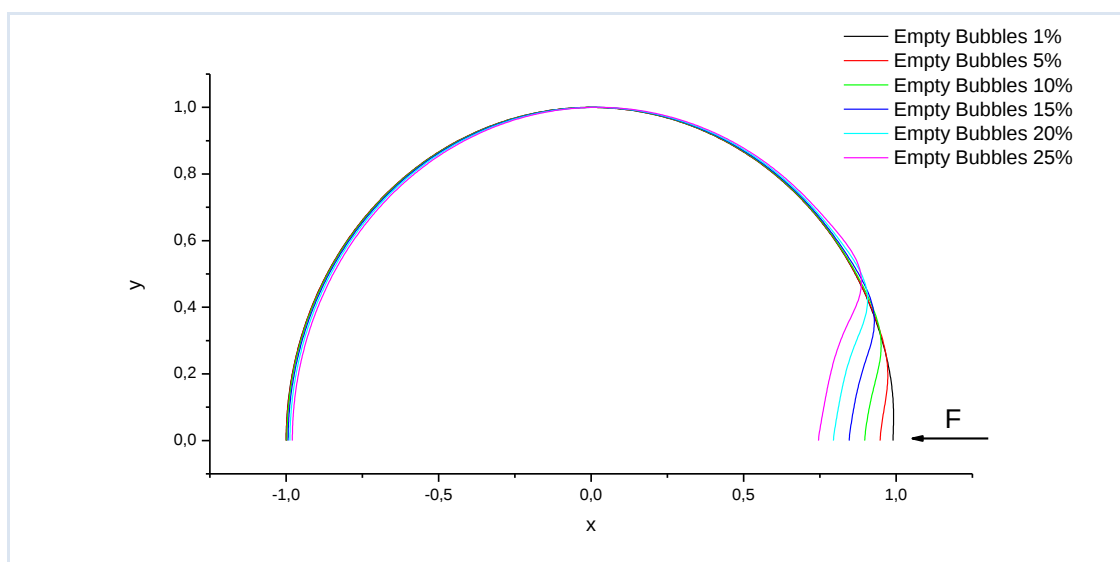
4.2.3 Σχήματα παραμορφωμένων φυσαλίδων

Το **Διάγραμμα 4-20** αφορά φυσαλίδες γεμάτες με αέρα και αναπαριστώνται στην παραμορφωμένη κατάσταση. Οι τιμές που επιλέγησαν να παρουσιαστούν είναι για παραμόρφωση 1%, 5%, 10%, 15%, 20% και 25%. Το σχήμα της φυσαλίδας παραμένει σχεδόν σφαιρικό μέχρι και 10% ενώ με περαιτέρω παραμόρφωση παρατηρείται ο σχηματισμός κρατήρα.



Διάγραμμα 4-20 Μεταβολή του σχήματος της φυσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φυσαλίδες-(Phospholipid).

Ανάλογα αποτελέσματα παρατηρούνται από το **Διάγραμμα 4-21** για φυσαλίδες που δεν περιέχουν αέρα.

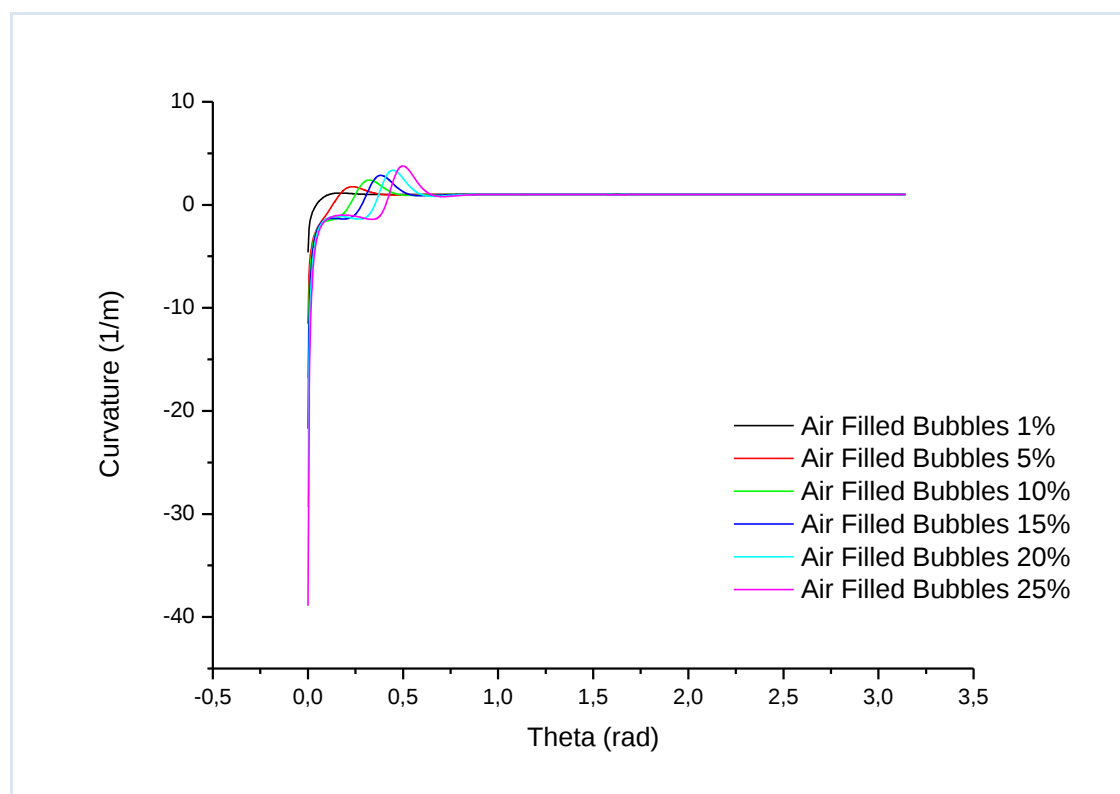


Διάγραμμα 4-21 Μεταβολή του σχήματος της φυσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για άδειες φυσαλίδες-(Phospholipid).

Παρατηρείται ταύτιση του σχήματος για ίδια παραμόρφωση, η οποία όμως προκύπτει για διαφορετικές δυνάμεις για γεμάτες και άδειες φυσαλίδες.

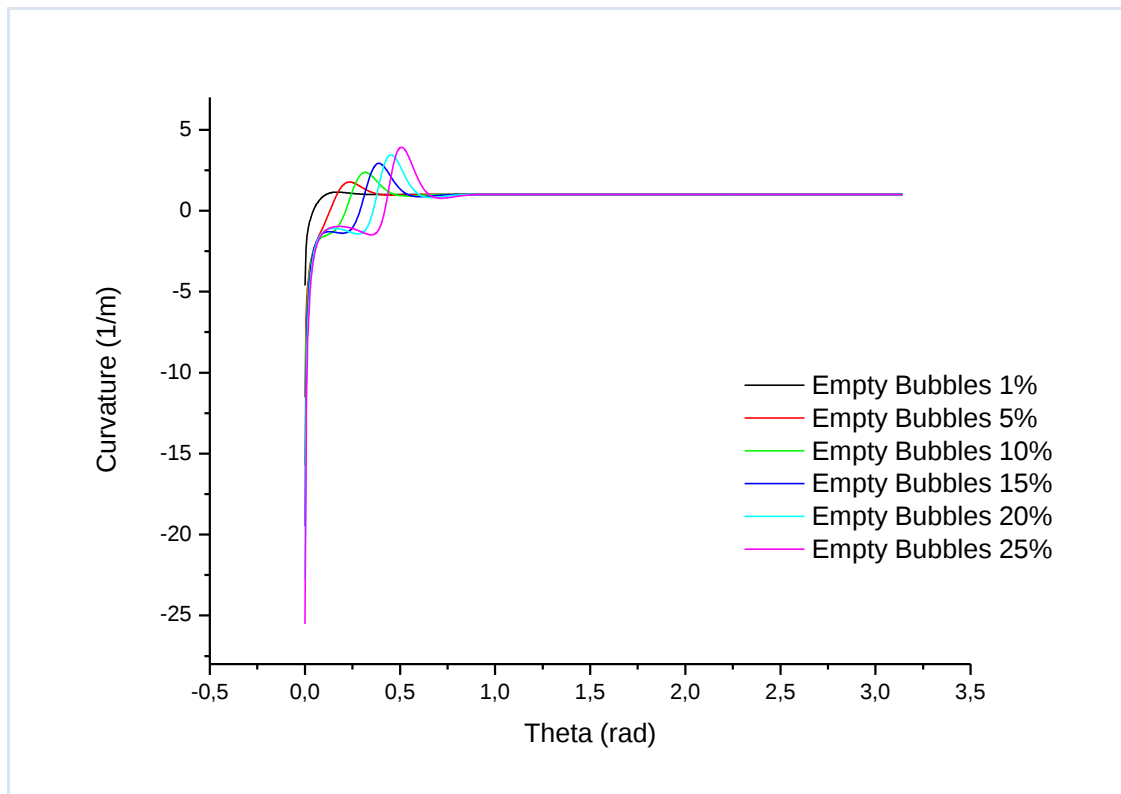
4.2.4 Μεταβολή καμπυλότητας παραμορφωμένου σχήματος φυσαλίδας

Στο Διάγραμμα 4-22 αναπαριστάται η μεταβολή της καμπυλότητας για γεμάτες φυσαλίδες συναρτήσει της πολικής γωνίας θ . Οι καμπύλες αναφέρονται σε παραμόρφωση 1%, 5%, 10%, 15%, 20% και 25%. Στο σημείο εφαρμογής της δύναμης η καμπυλότητα έχει αρνητική τιμή, η οποία γίνεται ολοένα και πιο αρνητική με αύξηση της παραμόρφωσης. Στη συνέχεια η καμπυλότητα αυξάνεται μονοτονικά αποκτώντας μια μέγιστη τιμή, η οποία εμφανίζεται όλο και μεγαλύτερη γωνία. Τέλος, όλες οι καμπύλες σταθεροποιούνται στην μονάδα (τέλεια σφαίρα) σε γωνία $\theta=0.7$ rad.



Διάγραμμα 4-22 Μεταβολή της καμπυλότητας του σχήματος της φυσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φυσαλίδες (Phospholipid).

Παρόμοια αποτελέσματα για την μεταβολή της καμπυλότητας παρατηρούνται και για τις άδειες φυσαλίδες (Διάγραμμα 4-23). Η καμπυλότητα για ίδια παραμόρφωση μεταξύ άδειων και γεμάτων φυσαλίδων είναι η ίδια στις καμπύλες που έχουν την ίδια παραμόρφωση, αλλά αυτό επιτυγχάνεται με διαφορετική τιμή της δύναμης.

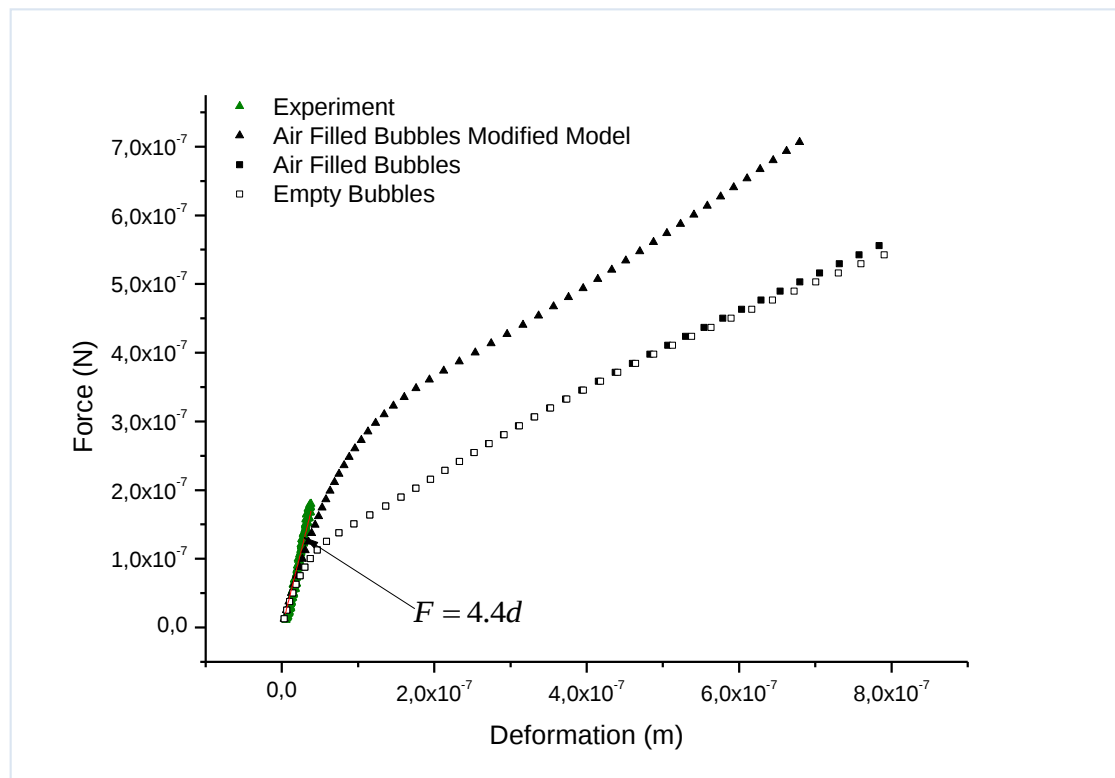


Διάγραμμα 4-23 Μεταβολή της καμπυλότητας του σχήματος της φουσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για άδειες φουσαλίδες-(Phospholipid).

4.3 Περίπτωση φυσαλίδας BiSphere 1

Σε αυτή την παράγραφο της εργασίας μελετώνται φυσαλίδες τύπου BiSphere, οι οποίες αποτελούνται από πολυμερές και γενικά χαρακτηρίζονται ως φυσαλίδες σκληρού κελύφους. Η δομή των διαγραμμάτων είναι η ίδια με αυτή της ενότητας 4.1. Οι πειραματικές τιμές που αφορούν την δύναμη προέρχονται από την πειραματική εργασία των Glynos & Koutsos [9].

4.3.1 Διάγραμμα δύναμης-παραμόρφωσης



Διάγραμμα 4-24 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φυσαλίδες (Άξονες με διαστάσεις) (BiSphere)

Στο Διάγραμμα 4-24 αναπαριστώνται πειραματικά αποτελέσματα για φυσαλίδες τύπου BiSphere ($\blacktriangle$) σε διάγραμμα δύναμης συναρτήσεως της τοπικής παραμόρφωσης του πόλου της φυσαλίδας. Επιπλέον, αναπαριστώνται αποτελέσματα που αφορούν προσομοιώσεις που προσπαθούν να ερμηνεύσουν την συμπεριφορά αυτών των φυσαλίδων. Με μαύρα τετράγωνα ($\blacksquare$) και τρίγωνα ($\blacktriangle$) αναπαριστώνται προσομοιώσεις για γεμάτες φυσαλίδες. Ενώ με λευκά τετράγωνα αναπαριστώνται κενές φυσαλίδες ($\square$).

Με πολυωνυμική παρεμβολή στα διαθέσιμα πειραματικά αποτελέσματα παρατηρείται πως εμφανίζουν μόνο γραμμική περιοχή. Η σχέση δηλαδή δύναμης-μετατόπισης μπορεί να περιγραφεί από μια σχέση της μορφής:

$$F = \begin{cases} 4.4d & 0 \leq d \leq 4 \cdot 10^{-8} m \\ ? & d > 4 \cdot 10^{-8} m \end{cases} \quad (4-5)$$

Στην σχέση (4-5 έχει σημειωθεί το ερωτηματικό με σκοπό να τονιστεί ότι δεν ήταν διαθέσιμα πειραματικά αποτελέσματα για $d > 4 \cdot 10^{-8} m$ και δεν μπορεί να γίνει σύγκριση με τις προσομοιώσεις.

Επιπλέον, από την σχέση (4-5 έχουμε την κλίση της συνάρτησης της δύναμης σε σχέση με την παραμόρφωση και σε συνδυασμό με την σχέση (2-7 του Reissner είναι δυνατό να υπολογίσουμε το μέτρο διάτμησης G_s για πάχος $h = 39 \cdot 10^{-9} m$ και ακτίνα $R_o = 2.6 \cdot 10^{-6} m$, όπως αυτά δίνονται από τους Glynos & Koutsos [9].

$$F = \frac{4}{\sqrt{3(1-\nu^2)}} \frac{Eh^2}{R_o} \Delta \Rightarrow E = \frac{\sqrt{3(1-\nu^2)}}{4} \frac{R_o}{h^2} \frac{F}{\Delta} \Rightarrow E = \frac{\sqrt{3(1-\nu^2)}}{4} \frac{R_o}{h^2} (slope) \Rightarrow$$

$$E = \frac{\sqrt{3(1-0.42^2)}}{4} \frac{2.6 \cdot 10^{-6}}{(39 \cdot 10^{-9})^2} 4.4 \Rightarrow E = 2.9 \cdot 10^9 Pa \Rightarrow G_s = 0.98 \cdot 10^9 Pa$$

Η παραπάνω τιμή του μέτρου διάτμησης δίνει τα αποτελέσματα που έχουν σημειωθεί με μαύρα γεμάτα και άδεια τετράγωνα (■, □). Συγκεντρωτικά τα στοιχεία εισόδου στην μοντελοποίηση φαίνονται στον Πίνακα 4-3.

Πίνακας 4-3 Δεδομένα εισόδου στο μοντέλο (BiSphere)

Αρχική Ακτίνα	Λόγος Poisson	Μέτρο διάτμησης	Πάχος	Μέτρο κάμψης
$2.6 \cdot 10^{-6} m$	0.42	$0.97 \cdot 10^9 Pa$	$39 \cdot 10^{-9} m$	Θεωρία

Οι συγκεκριμένες προσομοιώσεις μπορούν και περιγράφουν ικανοποιητικά την ένα μέρος της γραμμικής περιοχής, ωστόσο το μοντέλο που έχει θεωρηθεί γρήγορα μεταβαίνει στην μη γραμμική περιοχή. Αν και δεν είναι διαθέσιμα τα πειραματικά αποτελέσματα σε μεγαλύτερες παραμορφώσεις γίνεται αισθητό από την τάση της καμπύλης ότι όποια πιθανή μετάβαση σε μη γραμμική εξάρτηση θα είναι πιο αργή σε σχέση με το μοντέλο. Όπως παρατηρήθηκε και στο λιπίδιο τύπου BR14 διακρίνεται διαφορά στις τιμές για γεμάτες και άδειες φυσαλίδες ειδικά στην περιοχή των μικρών παραμορφώσεων. Κάποια απόκλιση παρατηρείται σε μεγαλύτερες τιμές.

Στη συνέχεια διατηρώντας ως δεδομένο την κλίση των πειραματικών αποτελεσμάτων και την αρχική ακτίνα, γίνεται αλλαγή στο πάχος και θεωρείται $h = 100 \cdot 10^{-9} m$, έτσι υπολογίζεται ξανά από την σχέση του Reissner (2-7 το μέτρο διάτμησης.

$$E = \frac{\sqrt{3(1-\nu^2)}}{4} \frac{R_o}{h^2} (slope) \Rightarrow$$

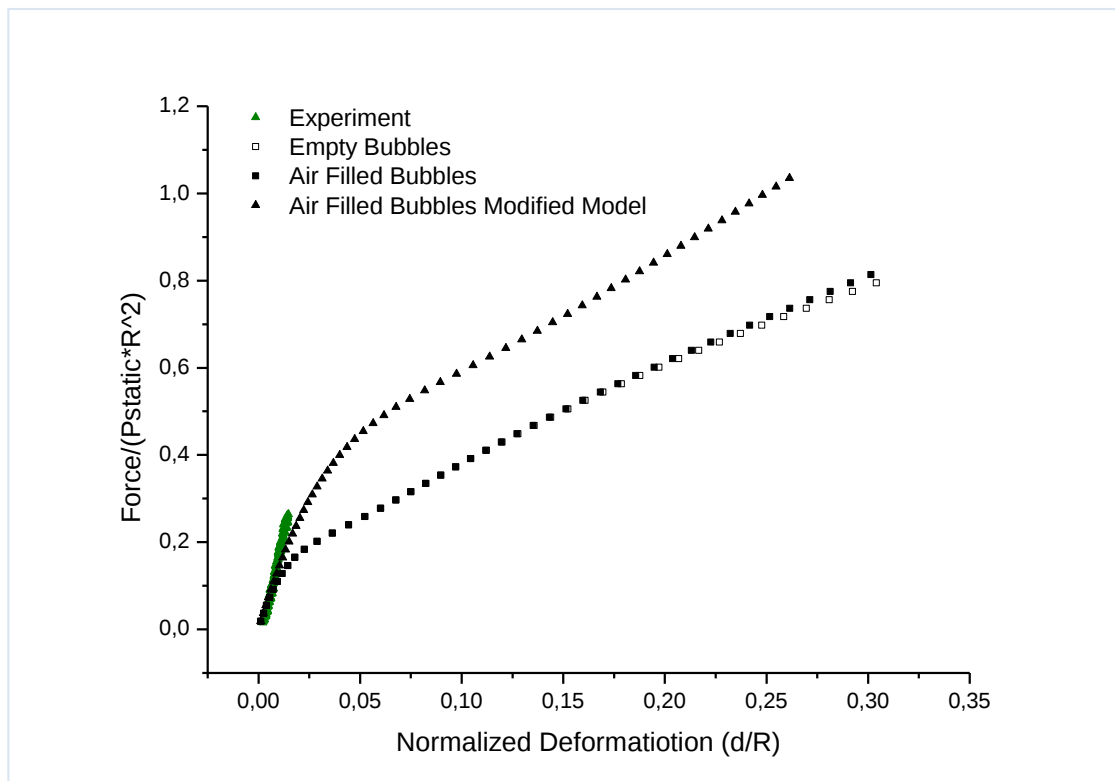
$$E = \frac{\sqrt{3(1-0.42^2)}}{4} \frac{2.6 \cdot 10^{-6}}{(100 \cdot 10^{-9})^2} 4.4 \Rightarrow E = 0.45 \cdot 10^9 Pa \Rightarrow G_s = 0.15 \cdot 10^9 Pa$$

Και με βάση το τελευταίο αποτέλεσμα για το μέτρο διάτμησης διεξάγονται ξανά προσομοιώσεις με δεδομένα εισόδου στο μοντέλο που φαίνονται στον Πίνακα 4-4. Οι συγκεκριμένες προσομοιώσεις αναπαριστώνται με μαύρα τρίγωνα (▲) στο Διάγραμμα 4-24. Παρατηρείται πιο καλή πρόβλεψη της γραμμικής περιοχής με τα νέο πάχος. Συνεπώς η εκτίμηση του πάχους του κελύφους είναι καθοριστικής σημασίας για την σωστή εκτίμηση των ελαστικών παραμέτρων. Ακόμη, για αυτή την περίπτωση δεν διεξήχθησαν προσομοιώσεις για άδειες φυσαλίδες, διότι αναμένεται ταύτιση των αποτελεσμάτων, γεγονός που επαληθεύεται και από την παραμετρική μελέτη, βλ ενότητα 4.6

Πίνακας 4-4 Δεδομένα εισόδου στο μοντέλο (BiSphere)

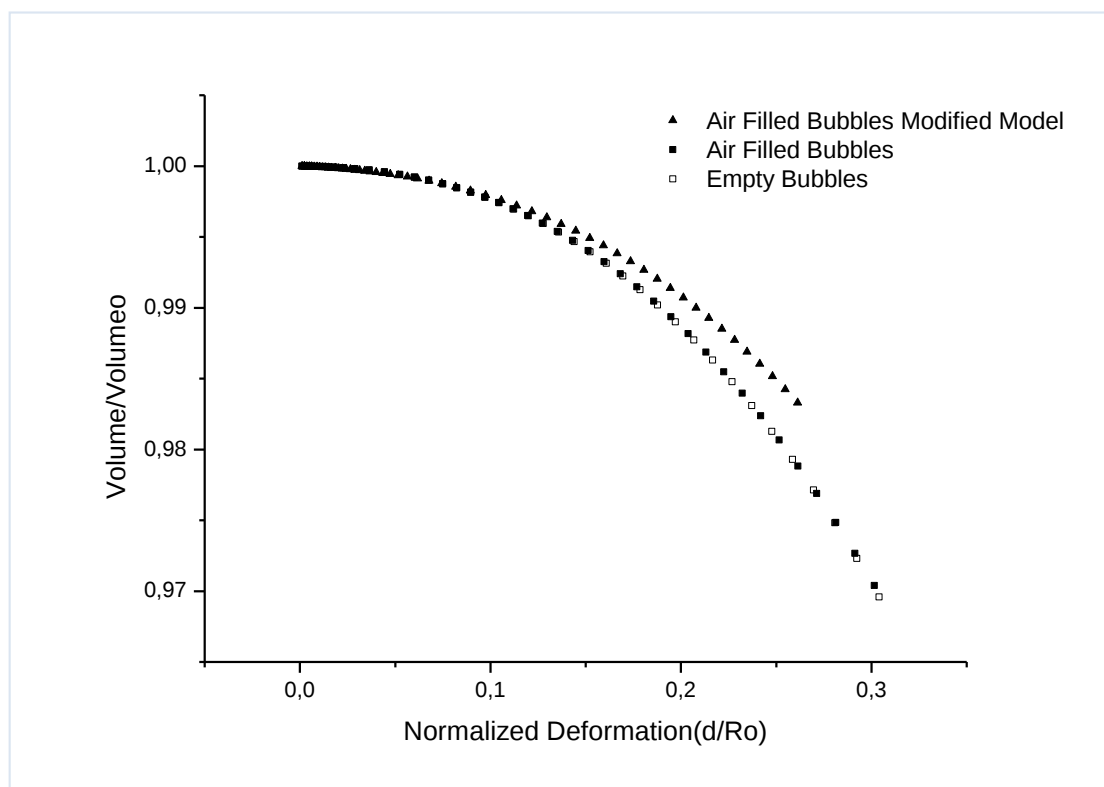
Αρχική Ακτίνα	Λόγος Poisson	Μέτρο διάτμησης	Πάχος	Μέτρο κάμψης
$2.6 \cdot 10^{-6}$ m	0.42	$0.15 \cdot 10^9$ Pa	$100 \cdot 10^{-9}$ m	Θεωρία

Επιπλέον δίδεται διάγραμμα δύναμης-παραμόρφωσης με αδιάστατες τιμές για την σύγκριση των μεγεθών με χαρακτηριστικές τιμές της γεωμετρίας και του περιβάλλοντος της φυσαλίδας. (Διάγραμμα 4-25)



Διάγραμμα 4-25 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φυσαλίδες (Άξονες χωρίς διαστάσεις) -(BiSphere)

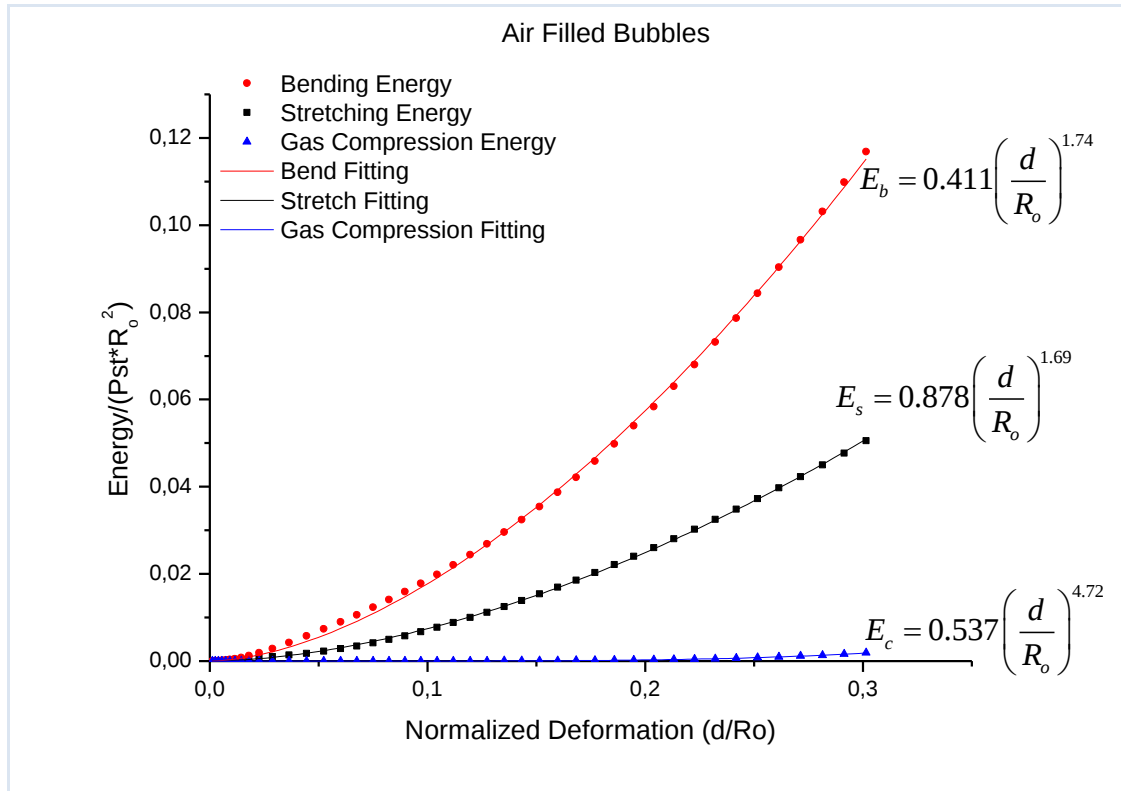
Επιπλέον, στο Διάγραμμα 4-26 δίδεται η μεταβολή του όγκου για άδειες και γεμάτες φυσαλίδες, όπου η μεταβολή δεν είναι σημαντική και δεν υπάρχει διαφορά μεταξύ γεμάτων και κενών φυσαλίδων. Επιπλέον, η μεταβολή του όγκου της φυσαλίδας είναι πιο αμελητέα για τις φυσαλίδες με μεγαλύτερο πάχος κελύφους.



Διάγραμμα 4-26 Μεταβολή του όγκου της φυσαλίδας συναρτήσει της παραμόρφωσης για γεμάτες και άδειες φυσαλίδες-(BiSphere).

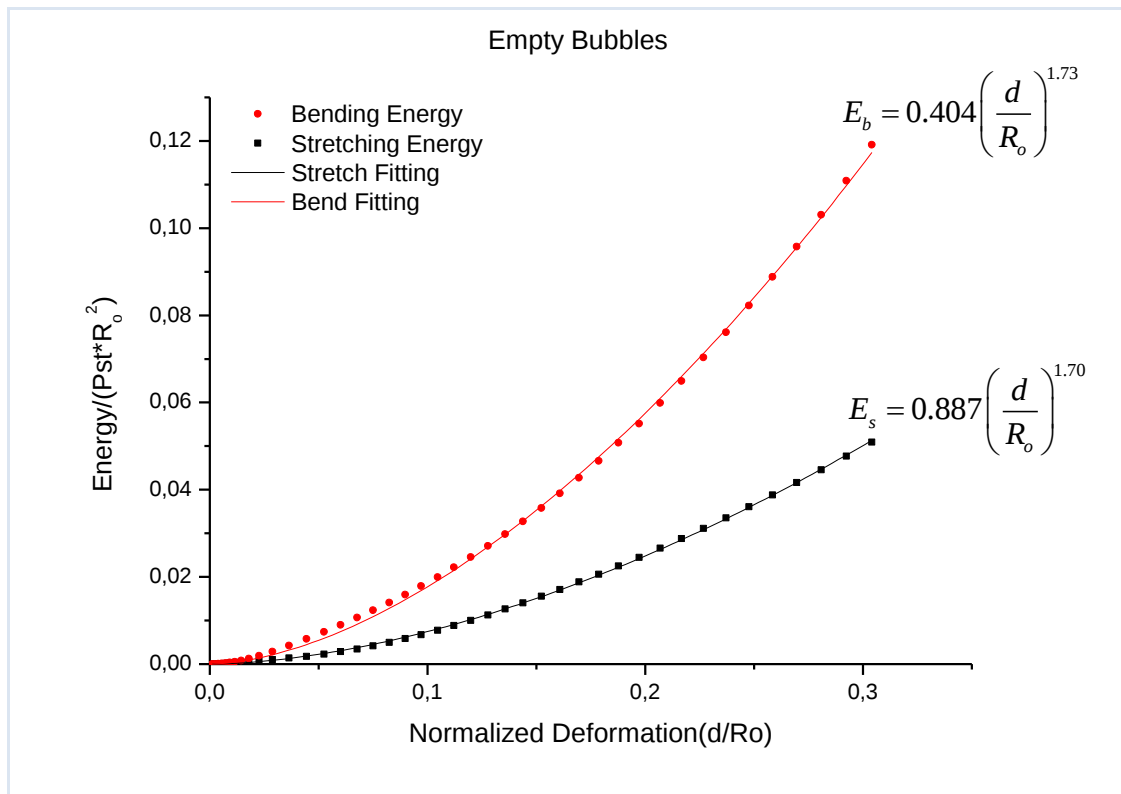
4.3.2 Διάγραμμα ενεργειών-παραμόρφωσης

Στο Διάγραμμα 4-27 αναπαριστώνται οι ενέργειες λόγω κάμψης, εφελκυσμού και συμπίεσης του αερίου συναρτήσει της παραμόρφωσης για γεμάτες με αέρα φυσαλίδες. Επιπλέον, γίνεται παρεμβολή πολυωνυμικών συναρτήσεων ώστε να προσδιοριστεί η εξάρτηση των ενεργειών από το την αδιάστατη παραμόρφωση. Το Διάγραμμα 4-27 δείχνει ότι η παραμόρφωση του κελύφους κυριαρχείται από δυνάμεις κάμψεως και εφελκυσμού, ενώ η συμπίεση του αερίου είναι αμελητέα. Επιπλέον, οι ενέργειες λόγω κάμψης και εφελκυσμού εξαρτώνται ξανά από το τετράγωνο της παραμόρφωσης. Η ενέργεια συμπίεσης του αερίου είναι ανάλογη με την πέμπτη δύναμη της παραμόρφωσης. Τα αποτελέσματα αφορούν τις φυσαλίδες με στοιχεία εισόδου του Πίνακας 4-3



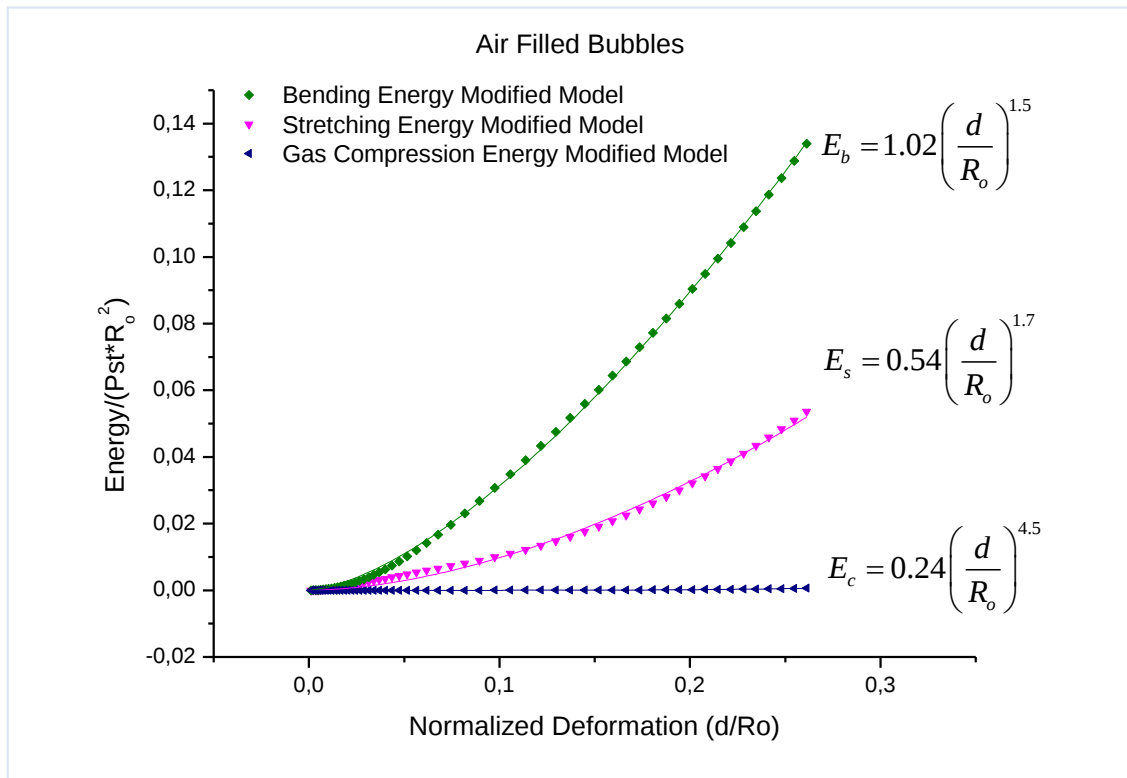
Διάγραμμα 4-27 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για γεμάτες φυσαλίδες-(BiSphere Πίνακας 4-2).

Ομοίως χαράσσεται το διάγραμμα ενέργειας-παραμόρφωσης για άδειες φυσαλίδες (Διάγραμμα 4-28). Τα αποτελέσματα είναι ανάλογα ως προς την κυριαρχία των δυνάμεων και την εξάρτηση των ενεργειών από την παραμόρφωση.



Διάγραμμα 4-28 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για άδειες φυσαλίδες-(BiSphere-Πίνακας 4-2).

Επιπλέον, χαράσσονται τα αντίστοιχα διαγράμματα ενεργειών για φυσαλίδες που έχουν ως δεδομένα τον Πίνακας 4-4.

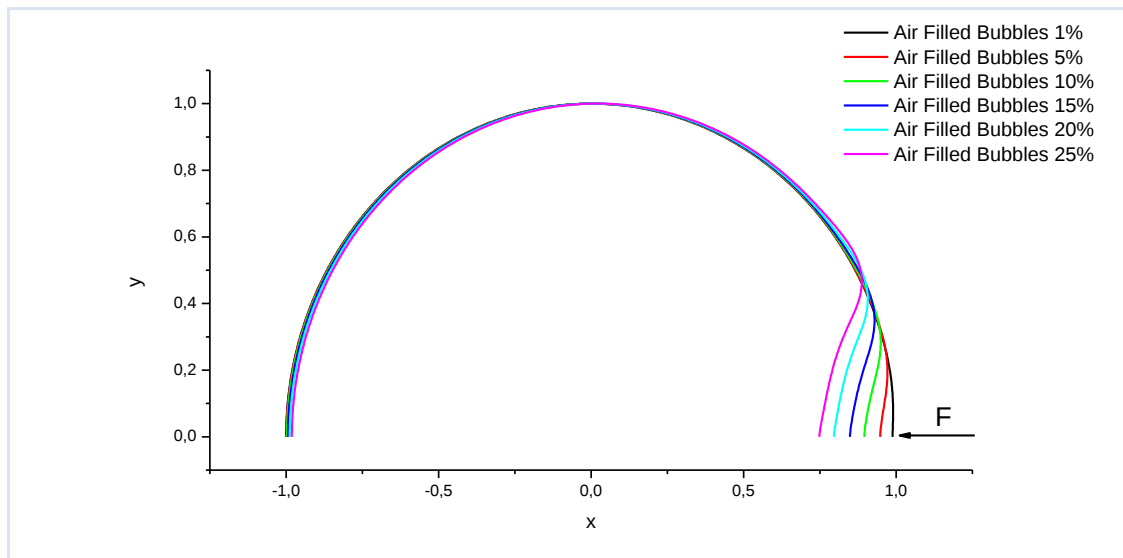


Διάγραμμα 4-29 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για γεμάτες φουσαλίδες-(BiSphere Πίνακας 4-3).

Στο Διάγραμμα 4-29 αναπαριστώνται οι ενέργειες λόγω κάμψης, εφελκυσμού του κελύφους και συμπίεσης του αερίου της φουσαλίδας. Το σχετικό μέγεθος των ενεργειών καθώς και η εξάρτηση από την παραμόρφωση είναι ανάλογη με το Διάγραμμα 4-27.

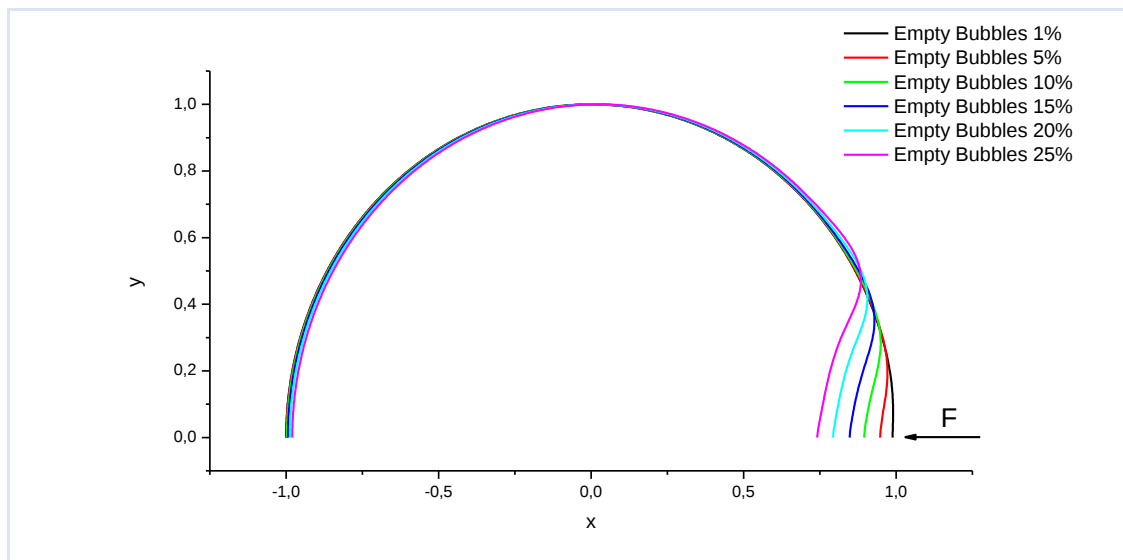
4.3.3 Σχήματα παραμορφωμένων φουσαλίδων

Το Διάγραμμα 4-30 αφορά φουσαλίδες γεμάτες με αέρα και αναπαριστώνται στην παραμορφωμένη κατάσταση. Οι τιμές που επιλέγηκαν να παρουσιαστούν είναι για παραμόρφωση 1%, 5%, 10%, 15%, 20% και 25%. Το σχήμα της φουσαλίδας παραμένει σχεδόν σφαιρικό μέχρι και 5% ενώ με περαιτέρω παραμόρφωση παρατηρείται ο σχηματισμός κρατήρα.



Διάγραμμα 4-30 Μεταβολή του σχήματος της φυσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φυσαλίδες-(BiSphere Πίνακας 4-2).

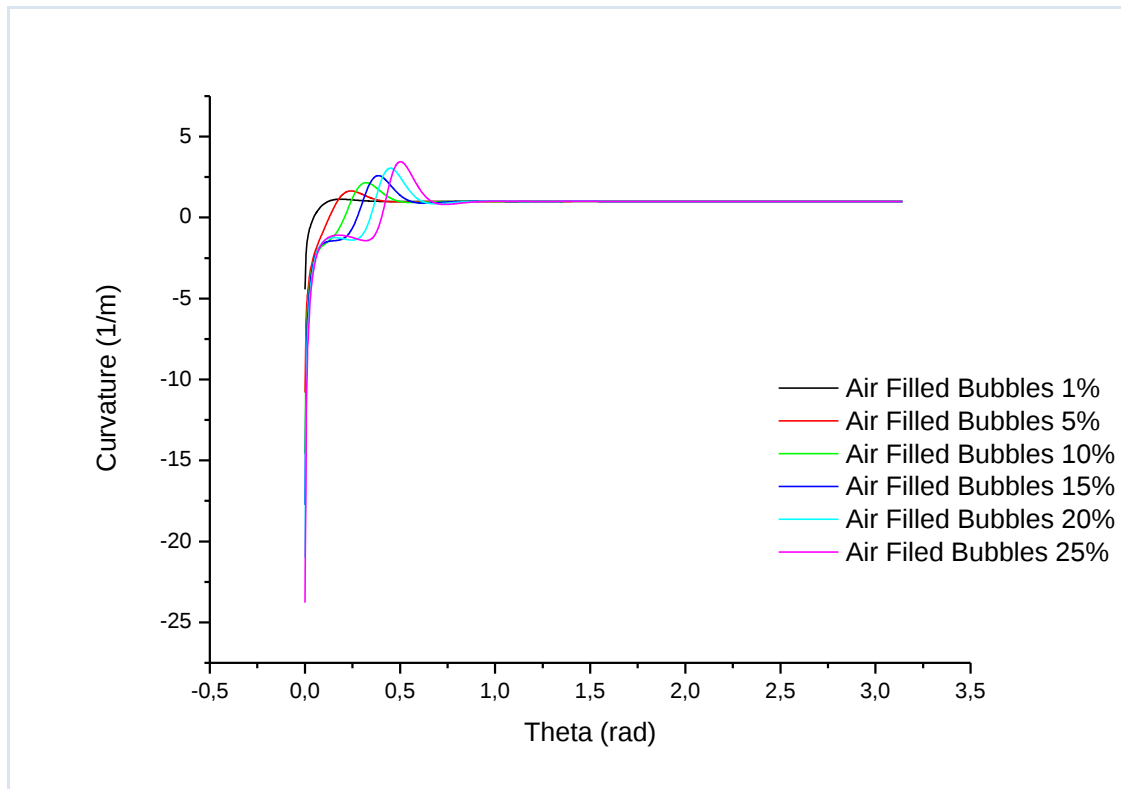
Ανάλογα αποτελέσματα παρατηρούνται από το Διάγραμμα 4-31 για φυσαλίδες που δεν περιέχουν αέρα.



Διάγραμμα 4-31 Μεταβολή του σχήματος της φυσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για άδειες φυσαλίδες-(BiSphere Πίνακας 4-2).

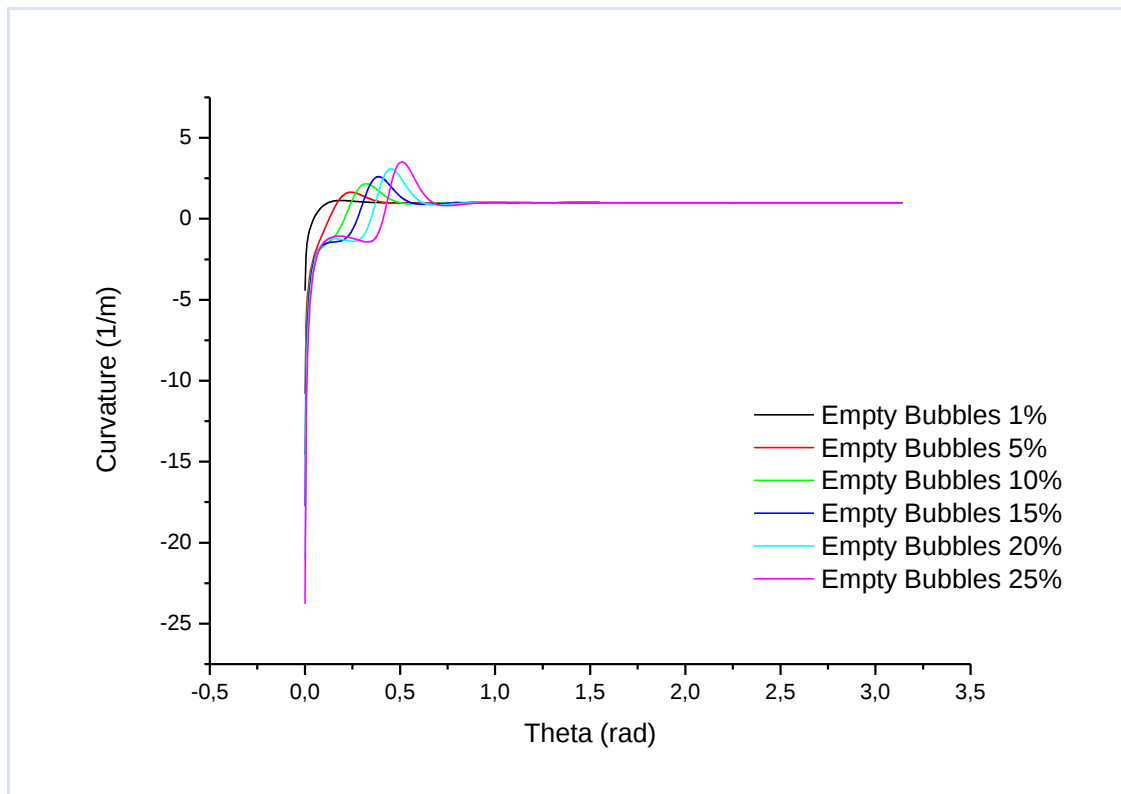
4.3.4 Μεταβολή καμπυλότητας παραμορφωμένου σχήματος φυσαλίδας

Στο Διάγραμμα 4-32 αναπαριστάται η μεταβολή της καμπυλότητας για γεμάτες φυσαλίδες συναρτήσει της πολικής γωνίας θ . Οι καμπύλες αναφέρονται σε παραμόρφωση 1%, 5%, 10%, 15%, 20% και 25%. Στο σημείο εφαρμογής της δύναμης η καμπυλότητα έχει αρνητική τιμή, η οποία γίνεται ολοένα και πιο αρνητική με αύξηση της παραμόρφωσης. Στη συνέχεια η καμπυλότητα αυξάνεται μονοτονικά αποκτώντας μια μέγιστη τιμή, η οποία εμφανίζεται όλο και μεγαλύτερη γωνία. Τέλος, όλες οι καμπύλες σταθεροποιούνται στην μονάδα (τέλεια σφαίρα) σε γωνία $\theta=0.8$ rad.



Διάγραμμα 4-32 Μεταβολή της καμπυλότητας του σχήματος της φυσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φυσαλίδες (BiSphere Πίνακας 4-2).

Παρόμοια αποτελέσματα για την μεταβολή της καμπυλότητας παρατηρούνται και για τις άδειες φυσαλίδες (Διάγραμμα 4-33).



Διάγραμμα 4-33 Μεταβολή της καμπυλότητας του σχήματος της φουσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για άδειες φουσαλίδες -(BiSphere Πίνακας 4-2).

4.4 Περίπτωση φυσαλίδας BiSphere 2

Τέλος προσομοιώσεις διεξάγονται για φυσαλίδες τύπου BiSphere και συγκρίνονται με τα πειραματικά αποτελέσματα των Glynos et al. [10]. Από την εργασία τους υπολογίζεται η κλίση της γραμμικής και μη γραμμικής περιοχής και σε συνδυασμό με τις εξισώσεις των Reissner & Pösgorelov (σχέσεις (2-7 & (2-12) υπολογίζεται το πάχος και το μέτρο διάτμησης.

Πιο συγκεκριμένα υπολογίζονται οι ανωτέρω παράμετροι για δύο φυσαλίδες με αρχική ακτίνα $R_0=2\cdot 10^{-6}$ m και $R_0=1.6\cdot 10^{-6}$ m . Συγκεντρωτικά φαίνονται στους Πίνακες 4-5 & Πίνακας 4-6.

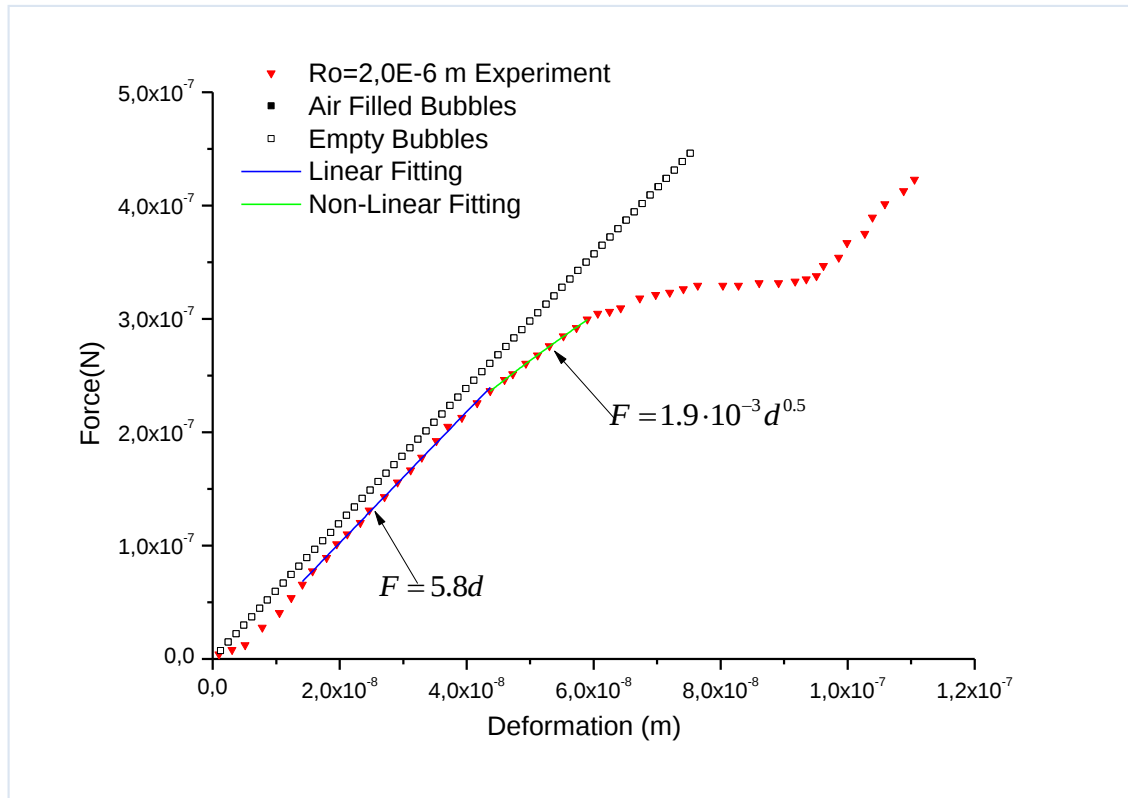
Πίνακας 4-5 Δεδομένα εισόδου στο μοντέλο(BiSphere -Red Points)

Αρχική Ακτίνα	Λόγος Poisson	Μέτρο διάτμησης	Πάχος	Μέτρο κάμψης
$2\cdot 10^{-6}$ m	0.5	$1.8\cdot 10^9$ Pa	$920\cdot 10^{-9}$ m	$4.2\cdot 10^{-15}$ N·m

Πίνακας 4-6 Δεδομένα εισόδου στο μοντέλο(BiSphere -Yellow Points)

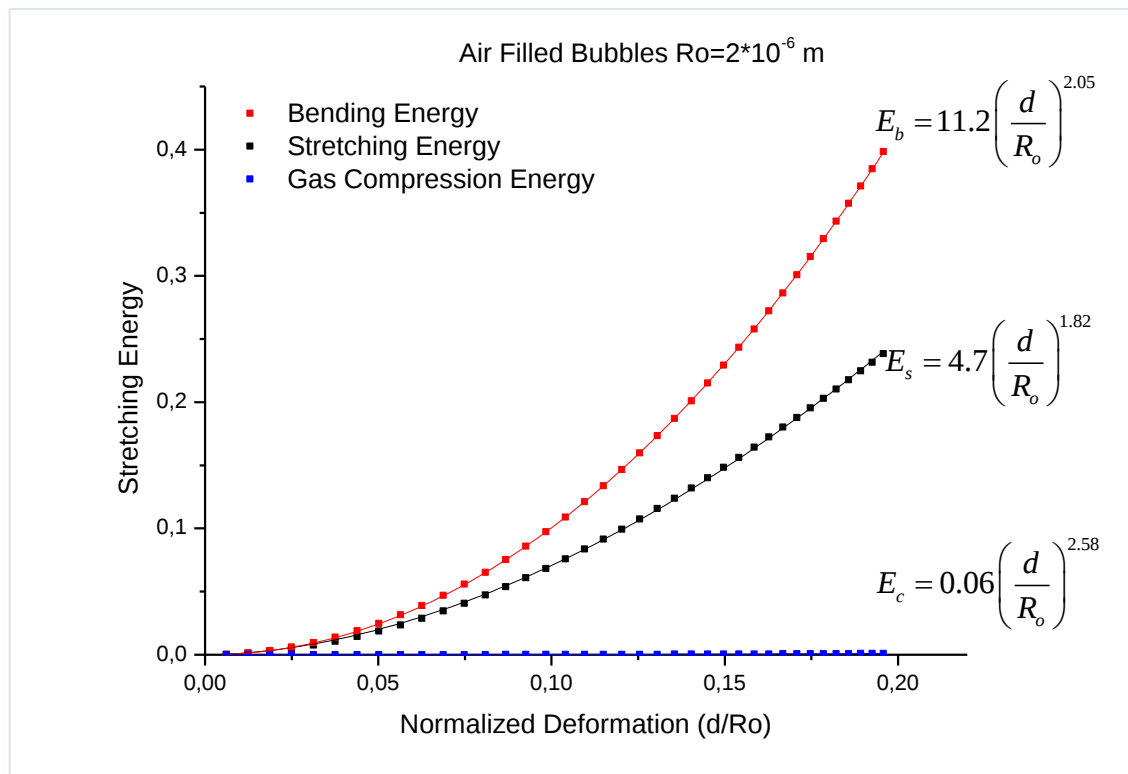
Αρχική Ακτίνα	Λόγος Poisson	Μέτρο διάτμησης	Πάχος	Μέτρο κάμψης
$1.6\cdot 10^{-6}$ m	0.5	$8.1\cdot 10^8$ Pa	$51\cdot 10^{-9}$ m	$2.6\cdot 10^{-14}$ N·m

Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης για την φυσαλίδα με αρχική ακτίνα $R_0=2\cdot 10^{-6}$ m αναπαριστώνται στο Διάγραμμα 4-34.

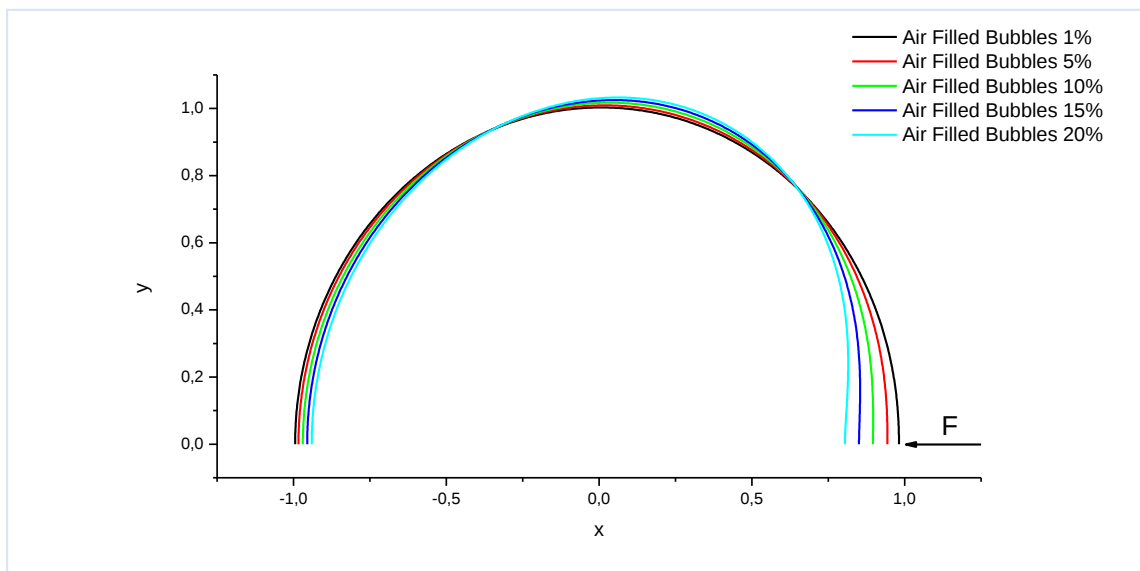


Διάγραμμα 4-34 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φουσαλίδες (Άξονες με διαστάσεις) -(BiSphere $R_o=2 \cdot 10^6$ m).

Το μοντέλο που προτείνεται δίνει μια έντονα γραμμική περιοχή και δεν προβλέπει μη γραμμική συμπεριφορά, όπως συμβαίνει στα πειραματικά αποτελέσματα. Επιπλέον οι προσομοιώσεις μεταξύ γεμάτων και άδειων φουσαλίδων δεν έδωσε διαφορετικά αποτελέσματα.

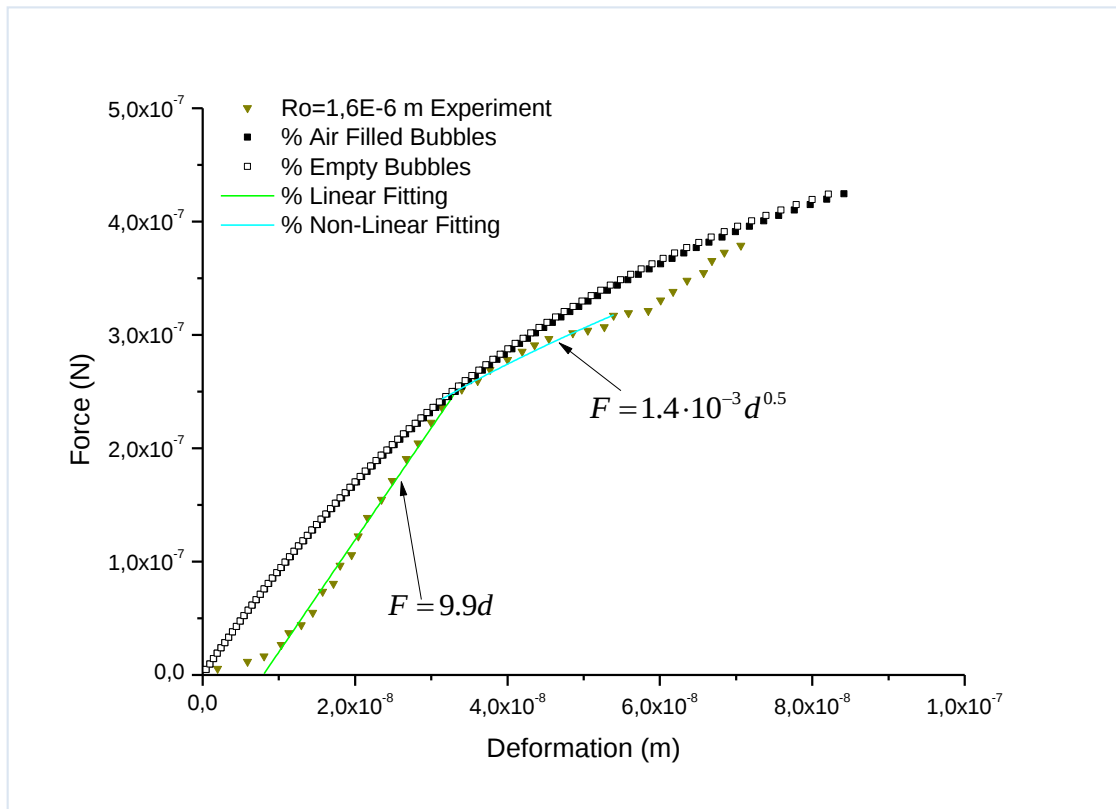


Διάγραμμα 4-35 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για γεμάτες φουσαλίδες-(BiSphere 2 Πίνακας 4-5).



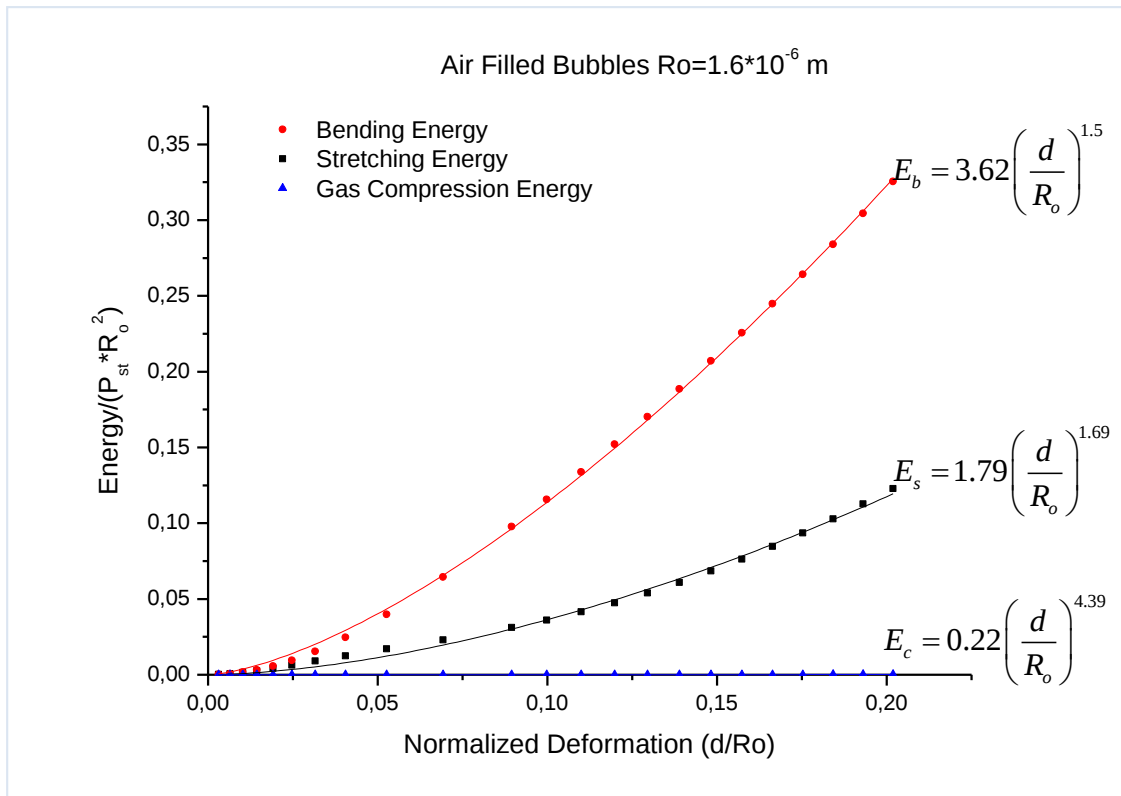
Διάγραμμα 4-36 Μεταβολή του σχήματος της φουσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φουσαλίδες-(BiSphere 2 Πίνακας 4-5).

Αντίστοιχα αποτελέσματα προέκυψαν και για την φουσαλίδα με αρχική ακτίνα $R_o=1.6 \cdot 10^{-6}$ m και αναπαριστώνται στο Διάγραμμα 4-37.

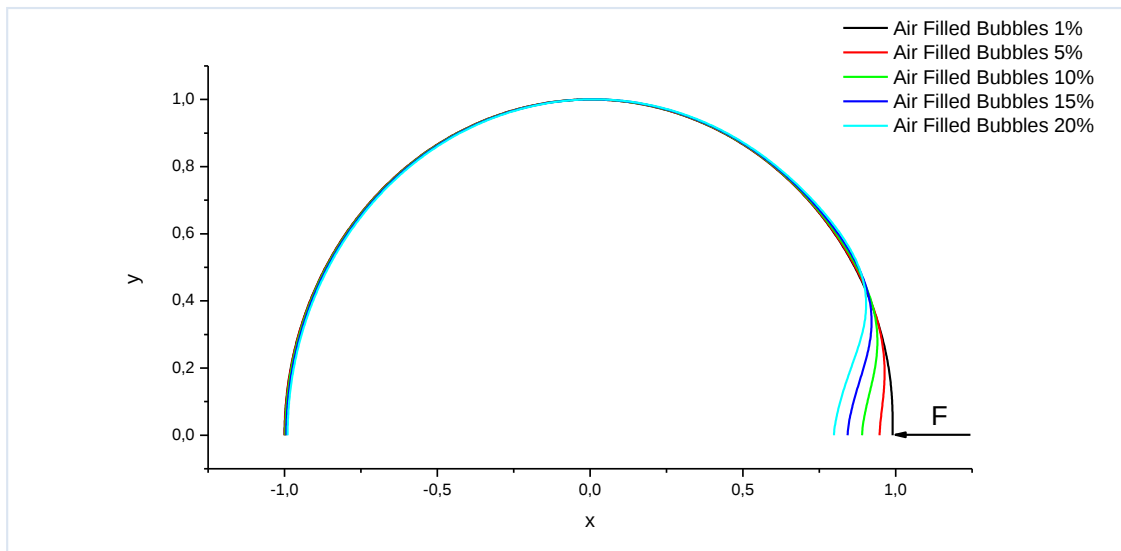


Διάγραμμα 4-37 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες και άδειες φουσαλίδες (Αξονες με διαστάσεις) -(BiSphere Ro=1,6·10⁻⁶ m).

Οι προσομοιώσεις αν και έδωσαν και μη γραμμική περιοχή δεν περιγράφουν έστω και με ποιοτικό τρόπο την μεταβολή της δύναμης.



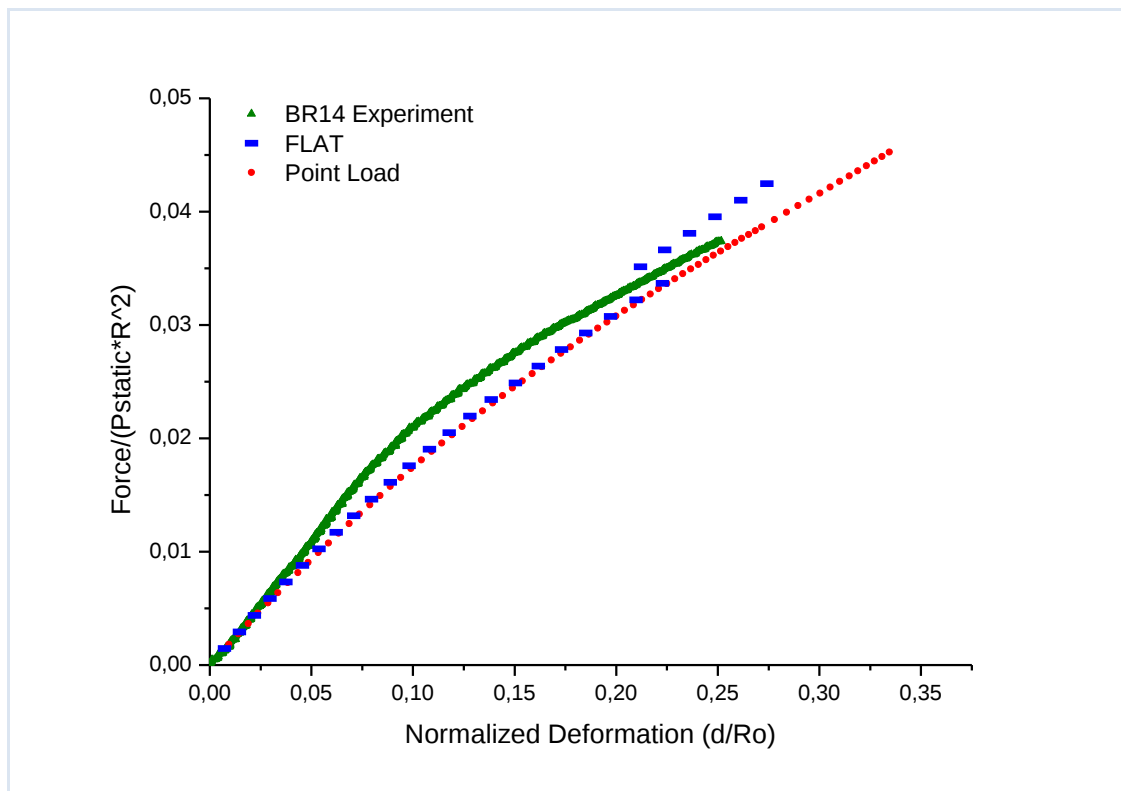
Διάγραμμα 4-38 Καμπύλη ενέργειας-παραμόρφωσης: Σύγκριση της ενέργειας λόγω εφελκυσμού, κάμψης και συμπίεσης του αερίου για γεμάτες φουσαλίδες-(BiSphere 2 Πίνακας 4-6).



Διάγραμμα 4-39 Μεταβολή του σχήματος της φουσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου για γεμάτες φουσαλίδες-(BiSphere 2 Πίνακας 4-6).

4.5 Κατανεμημένο φορτίο-Πρόβλημα επαφής

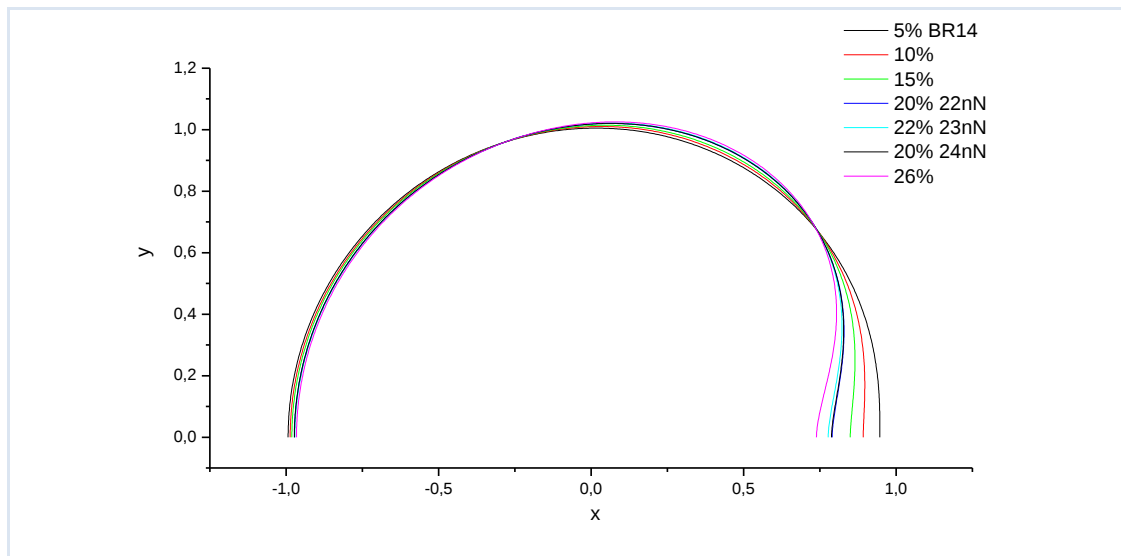
Η επιλογή του σημειακού φορτίου για την περιγραφή της φόρτισης κατά την επαφή του προβόλου και της φουσαλίδας είναι μια απλοποιημένη έκφραση του πραγματικού προβλήματος, ωστόσο με την δέουσα προσοχή για το εύρος των παραμορφώσεων δίνει πολύ καλά αποτελέσματα για την πρόβλεψη της μηχανικής συμπεριφοράς των φουσαλίδων. Στην προσπάθεια βελτίωσης της μοντελοποίησης του προβλήματος επαφής θεωρείται πλέον μια κατανομή δύναμης σε μια περιοχή στον πόλο της φουσαλίδας. Με την γωνία επαφής να είναι μέρος της λύσης και όχι προκαθορισμένη. Το μοντέλο -αν και επιδέχεται βελτίωσης- δίνει κάποια αποτελέσματα για την περίπτωση της φουσαλίδας τύπου BR 14. Στο Διάγραμμα 4-40 αναπαριστώνται αποτελέσματα προσομοιώσεων που αφορούν γεμάτες φουσαλίδες για σημειακό και κατανεμημένο φορτίο.



Διάγραμμα 4-40 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες φουσαλίδες για σημειακό και κατανεμημένο φορτίο-(BR14).

Το κατανεμημένο φορτίο δίνει σχεδόν ίδια αποτελέσματα με το σημειακό, ωστόσο εμφανίζει μια αστάθεια σε παραμόρφωση περίπου 24% η οποία πιθανά να σχετίζεται με πολλαπλότητα λύσεων.

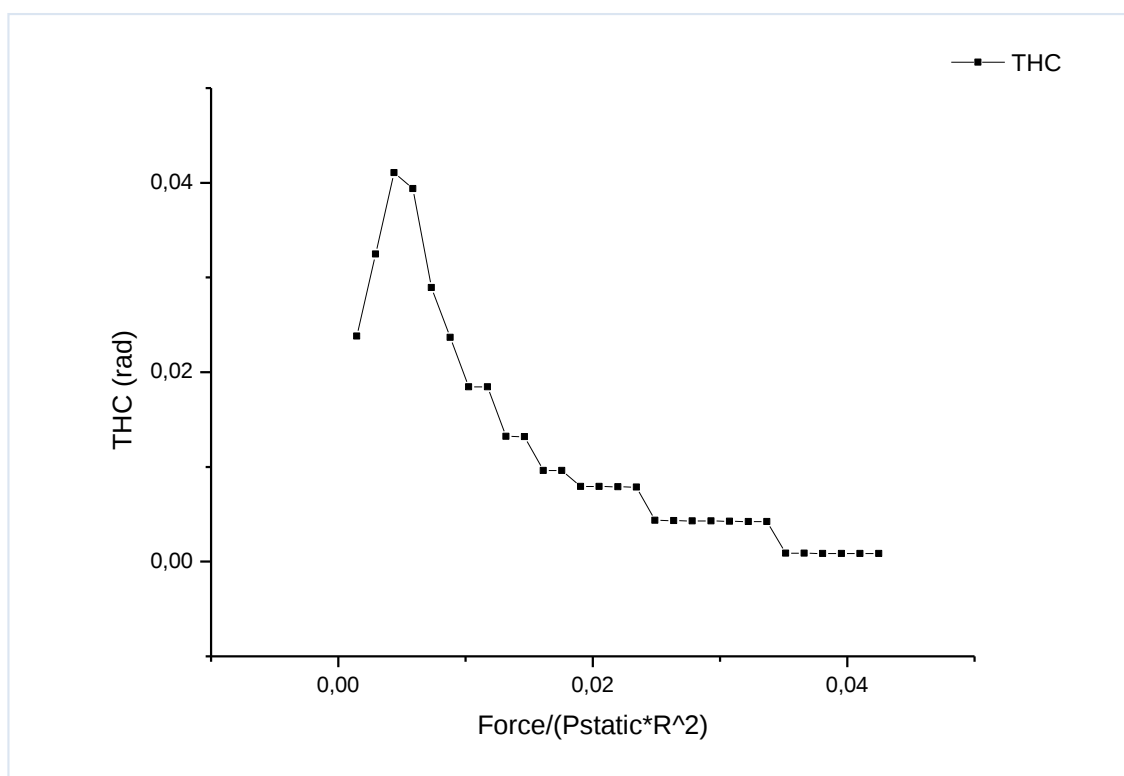
Τα σχήματα που χαρακτηρίζουν την παραμορφωμένη φουσαλίδα υπό την επίδραση του κατανεμημένου φορτίου φαίνονται στο Διάγραμμα 4-41.



Διάγραμμα 4-41 Μεταβολή του σχήματος της φουσαλίδας με αύξηση του εξωτερικού φορτίου-(BR14).

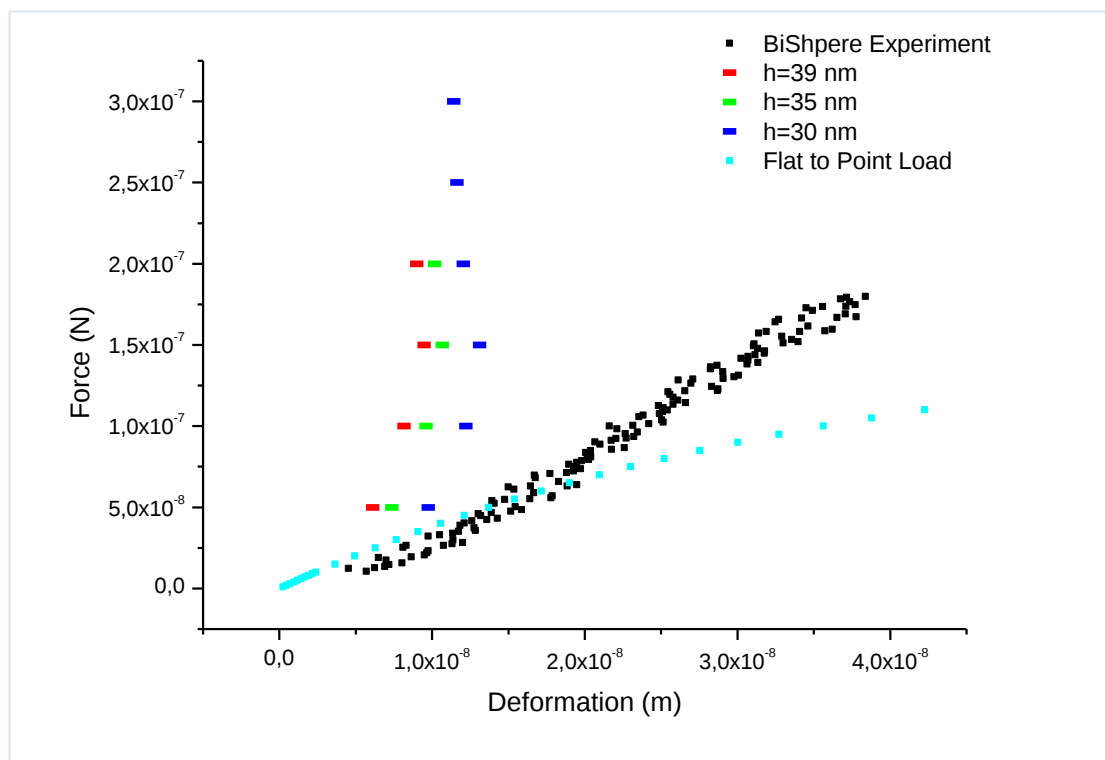
Η μεταβολή του σχήματος είναι παρόμοια με αυτή του σημειακού φορτίου. Ωστόσο χαρακτηριστικό στη συγκεκριμένη μοντελοποίηση είναι ότι η εμφάνιση της αστάθειας στο διάγραμμα δύναμης-παραμόρφωσης μεταφέρθηκε και στο σχήμα όπου το σχήμα με παραμόρφωση 20% συναντάται για δύο διαφορετικές τιμές της εξωτερικά ασκούμενης δύναμης (22 και 24 nN).

Επιπλέον, στο δίδεται η μεταβολή της γωνίας επαφής μεταξύ προβόλου και φουσαλίδας συναρτήσεις της εξωτερικής δύναμης



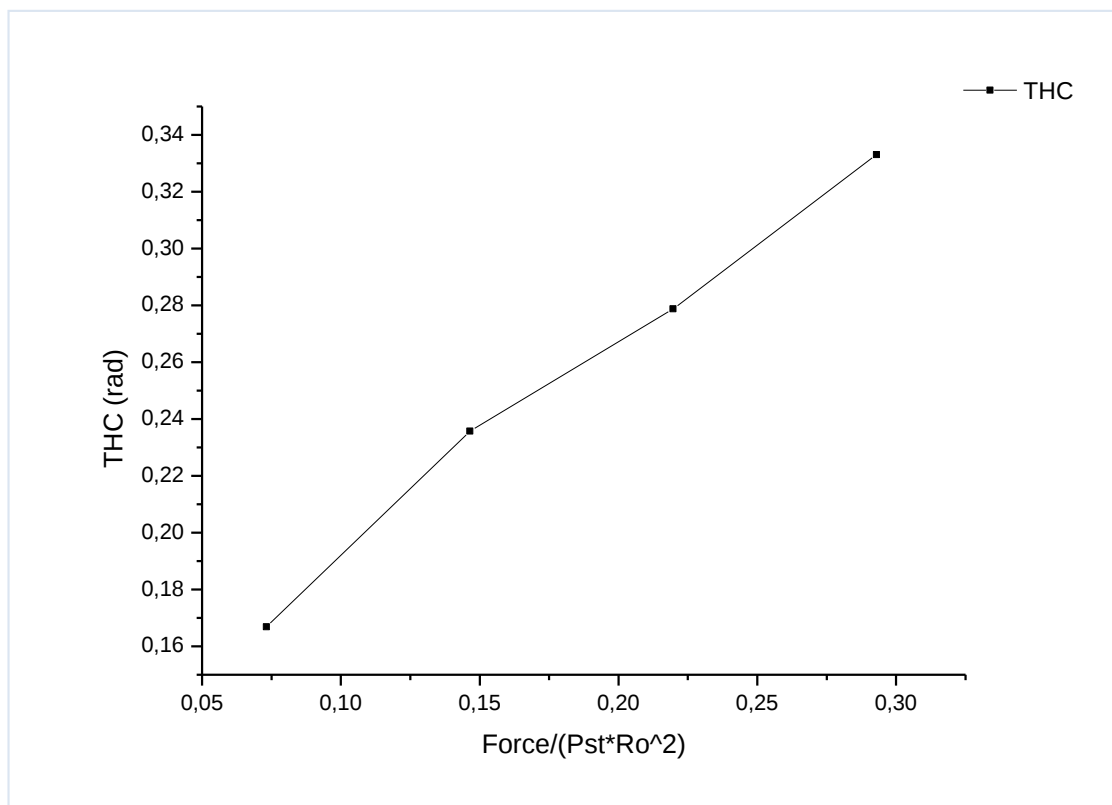
Διάγραμμα 4-42 Μεταβολή της γωνίας επαφής μεταξύ προβόλου και φουσαλίδας (BR 14)

Προσομοιώσεις με κατανεμημένο φορτίο στην περιοχή της επαφής προβόλου-φυσαλίδας διεξήχθησαν και για φυσαλίδες τύπου BiSphere, συγκεκριμένα η περίπτωση BiSphere 1 της ενότητας 4.3. Στο Διάγραμμα 4-43 αποτυπώνονται οι προσομοιώσεις και συγκρίνονται με τις διαθέσιμες πειραματικές μετρήσεις από τους Glynos & Koutsos [9].

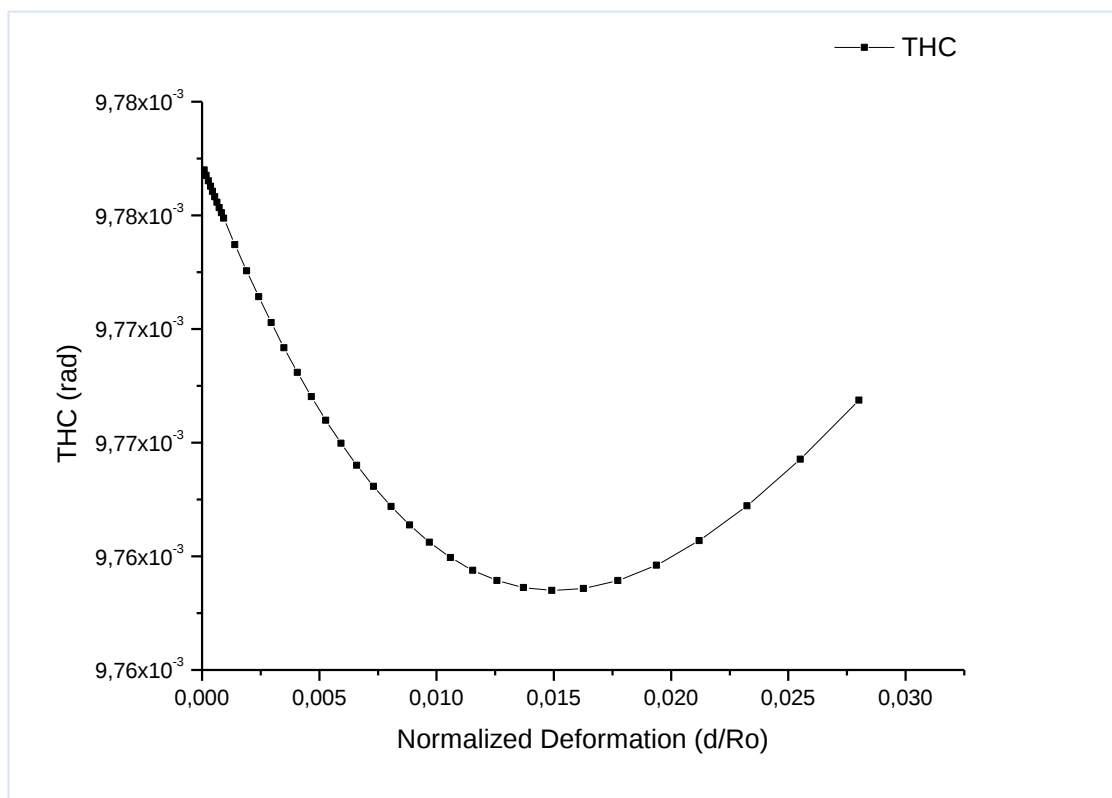


Διάγραμμα 4-43 Καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης: Σύγκριση πειραματικών μετρήσεων με προσομοιώσεις που αφορούν γεμάτες φυσαλίδες και κατανεμημένο φορτίο (BiSphere 1).

Με κόκκινα σύμβολα αποτυπώνονται φυσαλίδες με πάχος 39 nm (όσο προτείνεται και από τους Glynos & Koutsos [9]), με πράσινα και μπλε σύμβολα περιγράφονται προσομοιώσεις με αλλαγή στην τιμή του πάχους. Στις προσομοιώσεις δεν παρατηρείται αύξηση της παραμόρφωσης με επιβολή μεγαλύτερου φορτίου. Η γωνία θεστην οποία γίνεται η επαφή των δύο σωμάτων αυξάνει με την επιβαλλόμενη δύναμη και αυτός έχει ως αποτέλεσμα να μην παραμορφώνεται η φυσαλίδα τοπικά. Στο Διάγραμμα 4-44 δίδεται ένα ενδεικτικό διάγραμμα της μεταβολής της γωνίας συναρτήσεων της αδιάστατης δύναμης για τις περιπτώσεις που έχουμε σχεδόν μηδενική παραμόρφωση με αύξηση της φόρτισης (■, ■, ■). Τέλος, στο Διάγραμμα 4-43 δίδεται μία λύση στην οποία θεωρείται μια πολύ μικρή γωνία ($\sim 10^{-3}$ rad) ως αρχική εκτίμηση της γωνίας επαφής. Συνεχίζοντας τις προσομοιώσεις διαπιστώνεται ότι παίρνουμε την λύση για σημειακό φορτίο. Η γωνία επαφής συναρτήσεως της παραμόρφωσης φαίνεται στο Διάγραμμα 4-45, χαρακτηριστικό είναι πως η γωνία επαφής είναι πολύ μικρή και άρα η φόρτιση σημειακή.



Διάγραμμα 4-44 Μεταβολή της γωνίας επαφής μεταξύ προβόλου και φουσαλίδας (BiSphere 1) για την λύση χωρίς παραμόρφωση.



Διάγραμμα 4-45 Μεταβολή της γωνίας επαφής μεταξύ προβόλου και φουσαλίδας (BiSphere 1) για την λύση από Flat σε σημειακό φορτίο.

4.6 Παραμετρική μελέτη της επίδρασης των σταθερών του προβλήματος.

Στη παρούσα ενότητα γίνεται μια προσπάθεια κατανόησης της επίδρασης των γεωμετρικών παραμέτρων, αλλά και των ελαστικών σταθερών στην μορφή της καμπύλης δύναμης-παραμόρφωσης. Το πρόβλημα που εξετάζεται στην εργασία μπορεί να χαρακτηριστεί ως πολύ-παραμετρικό ως προς το πλήθος των σταθερών που το περιγράφουν. Από τις παραπάνω προσομοιώσεις γίνεται κατανοητό ότι η συμπεριφορά της καμπύλης δύναμης-παραμόρφωσης δεν εξαρτάται μονοσήμαντα από κάποια παράμετρο, αλλά ρόλο παίζει ο συνδυασμός τους.

4.6.1 Παραμετρική μελέτη της επίδρασης του επιφανειακού μέτρου διαστολής και του μέτρου κάμψης

Στις φυσαλίδες τύπου BR14 η μέτρηση και ορισμός του πάχους του κελύφους της φυσαλίδας δεν είναι σαφείς διαδικασίες όπως θα ήταν στην περίπτωση του πάχους ενός κελύφους σε συμβατική μηχανολογική εφαρμογή. Ως εκ τούτου δεν μπορεί να θεωρηθεί ως ανεξάρτητη παράμετρος, αλλά θεωρούνται το μέτρο κάμψης (k_b) και το μέτρο επιφανειακής διαστολής (χ).

Έτσι, στην κατεύθυνση ομαδοποίησης των παραμέτρων, ορίζονται οι εξής αδιάστατοι αριθμοί:

$$N_1 = \frac{\chi R_o^2}{k_b} \quad (4-6)$$

$$N_2 = \frac{P_{st} R_o}{\chi} \quad (4-7)$$

Στις προσομοιώσεις που διεξάγονται διατηρείται σταθερό το μέτρο επιφανειακής διαστολής και μεταβάλλεται το μέτρο κάμψης. Πιο αναλυτικά οι συνδυασμοί των παραμέτρων που επιλέγηκαν είναι:

Περίπτωση Α ($N_2=2$) $\chi=0.1$ N/m

1	$k_b=3.7 \cdot 10^{-14}$ N·m	($N_1=10$)
2	$k_b=1.2 \cdot 10^{-14}$ N·m	($N_1=32$)
3	$k_b=7.4 \cdot 10^{-15}$ N·m	($N_1=54$)
4	$k_b=3.7 \cdot 10^{-15}$ N·m	($N_1=100$)

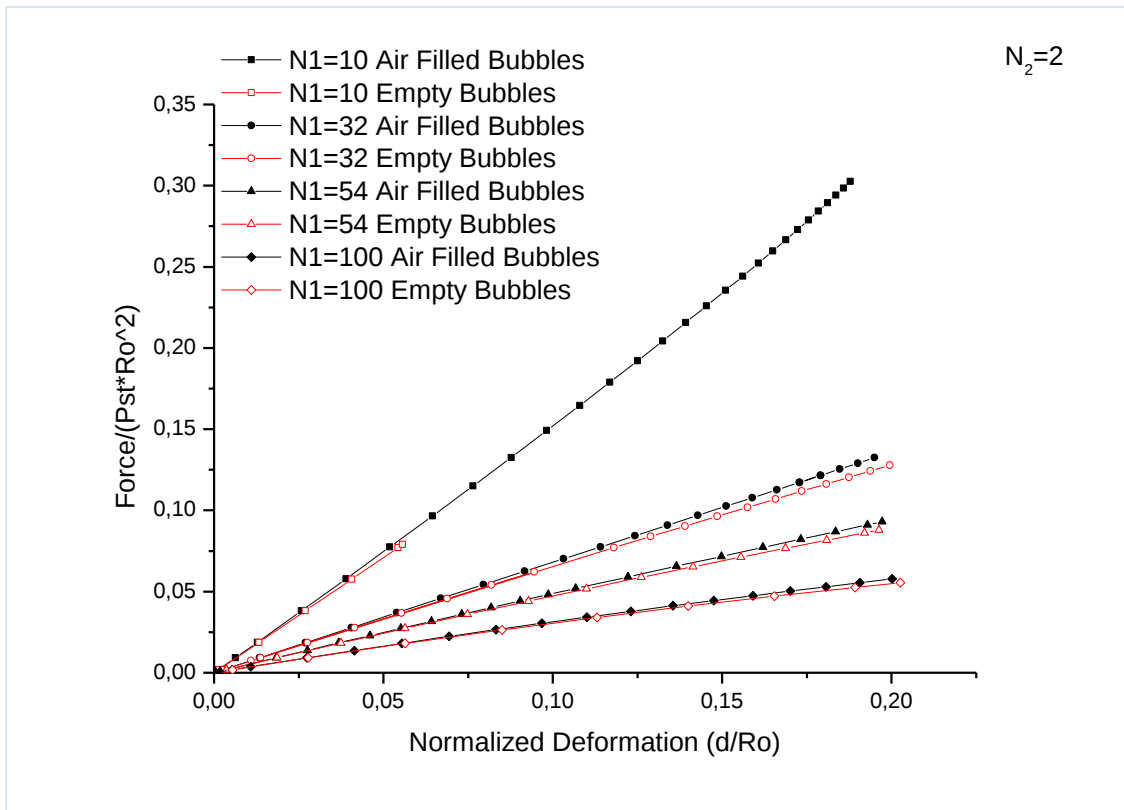
Περίπτωση Β ($N_2=0.2$) $\chi=1$ N/m

1	$k_b=3.9 \cdot 10^{-13}$ N·m	($N_1=10$)
2	$k_b=1.1 \cdot 10^{-13}$ N·m	($N_1=32$)
3	$k_b=1.48 \cdot 10^{-13}$ N·m	($N_1=54$)
4	$k_b=3.7 \cdot 10^{-14}$ N·m	($N_1=100$)

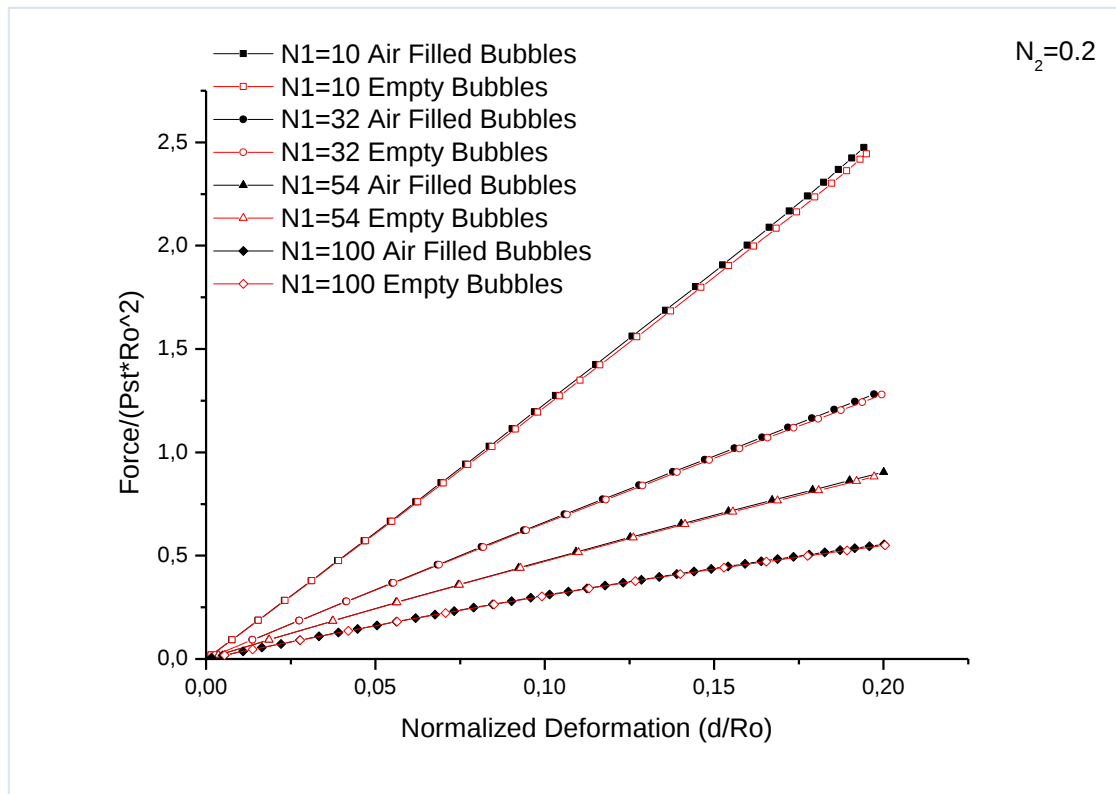
Περίπτωση C ($N_2=0.02$) $\chi=10$ N/m

1	$k_b=2.9 \cdot 10^{-12}$ N·m	($N_1=10$)
2	$k_b=1.1 \cdot 10^{-12}$ N·m	($N_1=32$)
3	$k_b=7.4 \cdot 10^{-13}$ N·m	($N_1=54$)
4	$k_b=3.7 \cdot 10^{-13}$ N·m	($N_1=100$)

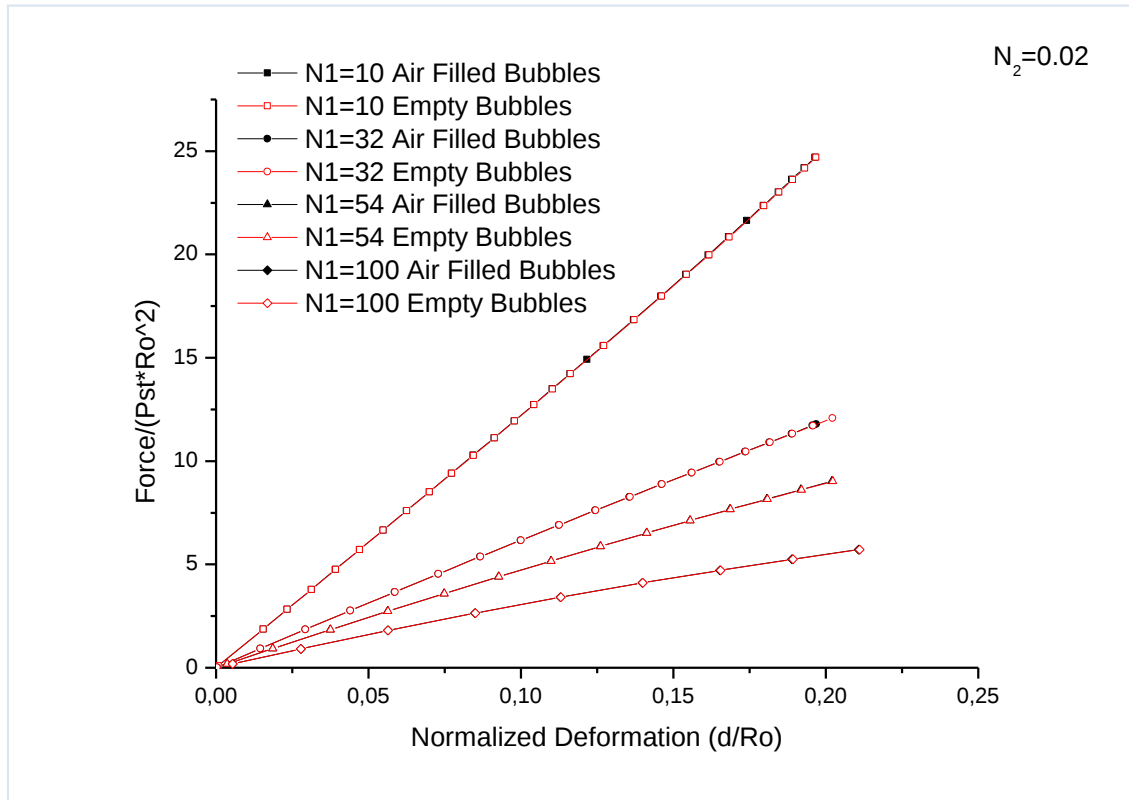
Στη συνέχεια αναπαριστώνται οι καμπύλες δύναμης-παραμόρφωσης για τους ανωτέρω συνδυασμούς παραμέτρων. Στα παρακάτω διαγράμματα αποτυπώνονται διαφορετικές φυσαλίδες ως προς τις ελαστικές σταθερές. Τα μαύρα και τα κόκκινα σύμβολα αναφέρονται σε γεμάτες και άδειες φυσαλίδες, αντίστοιχα. Σε κάθε διάγραμμα αποτυπώνεται οι ανωτέρω περιπτώσεις (Α,Β και C) για σταθερό δηλαδή τον αριθμό N_2 και μεταβάλλοντας τον N_1 . Με βάση και τις πειραματικές τιμές ο αδιάστατος αριθμός N_2 μεταβάλλεται από 2 μέχρι 0.02. Οι καμπύλες συνολικά εμφανίζουν έντονη γραμμικότητα, ενώ μη γραμμική περιοχή τύπου Pogorelon τείνει να εμφανιστεί καθώς ο αριθμός N_1 αυξάνεται. Στο Διάγραμμα 4-46 ο λόγος αντίστασης του αερίου με την αντίσταση σε λυγισμό είναι 2 ($N_2=2$) και παρατηρείται διαφοροποίηση μεταξύ άδειων και γεμάτων φυσαλίδων. Με μείωση του αδιάστατου αριθμού N_2 , δηλαδή καθώς οι ελαστικές δυνάμεις αυξάνονται, δεν παρατηρείται διαφοροποίηση των καμπυλών άδειων και γεμάτων φυσαλίδων.



Διάγραμμα 4-46 Καμπύλες δύναμης παραμόρφωσης για σταθερό τον αδιάστατο αριθμό $N_2=2$ και μεταβαλλόμενο τον αριθμό N_1 .



Διάγραμμα 4-47 Καμπύλες δύναμης παραμόρφωσης για σταθερό τον αδιάστατο αριθμό $N_2=0.2$ και μεταβαλλόμενο τον αριθμό N_1 .



Διάγραμμα 4-48 Καμπύλες δύναμης παραμόρφωσης για σταθερό τον αδιάστατο αριθμό $N_2=0.02$ και μεταβαλλόμενο τον αριθμό N_1 .

Τέλος, η μελέτη των φυσαλίδων τύπου BR14 ολοκληρώνεται με ένταξη των αποτελεσμάτων προσομοίωσης (ενότητες 4.1 και 4.2) στην παραμετρική μελέτη.

Φυσαλίδες τύπου BR14

Οι φυσαλίδες τύπου BR14 έχουν επιφανειακό μέτρο διαστολής:

$$\chi = 0.1 \quad \text{N / m} \quad (4-8)$$

ενώ, μέτρο κάμψης:

$$k_b = 3.7 \cdot 10^{-15} \quad \text{N} \cdot \text{m} \quad (4-9)$$

Επιπλέον, οι αδιάστατοι αριθμοί είναι:

$$N_1 = \frac{\chi R_o^2}{k_b} = \frac{0.1 \cdot (2.6 \cdot 10^{-6})^2}{3.7 \cdot 10^{-15}} = 182.7 \quad (4-10)$$

$$N_2 = \frac{P_{st} R_o}{\chi} = \frac{1.01 \cdot 10^5 \cdot 2.6 \cdot 10^{-6}}{0.1} = 2.6 \quad (4-11)$$

Ως εκ τούτου, είναι δυνατό να ενταχθεί στην περίπτωση Α-4. Πράγματι, το εύρος των δυνάμεων για παραμορφώσεις μέχρι 25% είναι όμοιο.

Φυσαλίδες με κέλυφος από Φωσφολιπίδιο

Το επιφανειακό μέτρο διαστολής είναι:

$$\chi = 2.43 \quad N / m \quad (4-12)$$

ενώ, το μέτρο κάμψης:

$$k_b = 8 \cdot 10^{-17} \quad N \cdot m \quad (4-13)$$

Τέλος, οι αδιάστατοι αριθμοί:

$$N_1 = \frac{\chi R_o^2}{k_b} = \frac{2.43 \cdot (1.5 \cdot 10^{-6})^2}{8 \cdot 10^{-17}} = 68343.8 \quad (4-14)$$

$$N_2 = \frac{P_{st} R_o}{\chi} = \frac{1.01 \cdot 10^5 \cdot 1.5 \cdot 10^{-6}}{2.43} = 6.2 \cdot 10^{-2} \quad (4-15)$$

Κατά συνέπεια είναι δυνατό να ενταχθεί ανάμεσα στις ομάδες αποτελεσμάτων B και C . Όμως, λόγω της πολύ μικρής αντίστασης σε λυγισμό η παράμετρος N_2 είναι αρκετά μεγάλη με αποτέλεσμα να μην είναι εποπτικά χρήσιμο να ενταχθεί στα Διάγραμμα 4-47 ή Διάγραμμα 4-48. Όπως φαίνεται και από το Διάγραμμα 4-13 στην ανάλυση αποτελεσμάτων των σχετικών προσομοιώσεων η καμπύλη απόκρισης αποτελεί συνέχεια αυτών που εμφανίζονται στα γραφήματα 4.47 και 4.48, υπό την έννοια ότι παρουσιάζει μετάβαση στην περιοχή Pogorelon για αρκετά μικρές παραμορφώσεις ενώ εμφανίζει και την απότομη αύξηση της απαιτούμενης δύναμης λόγω αντίστασης στην συμπίεση για μεγάλες παραμορφώσεις, κάτι που δεν παρουσιάζουν οι καμπύλες απόκρισης στα γραφήματα 4.47 και 4.48. Συνεπώς, στο πλαίσιο της άσκησης σημειακού φορτίου, προκειμένου η αντίσταση στην συμπίεση να παίζει σημαντικό ρόλο χρειάζεται να έχει προηγηθεί ο σχηματισμός κρατήρα με τις ανάλογες παραμορφώσεις και μείωση όγκου. Αναφορικά δε με την συγκεκριμένη μικροφυσαλίδα θα πρέπει να εξετασθεί το ενδεχόμενο οι δυνάμεις επιφανειακής πρόσφυσης να αναβάλουν την εμφάνιση κρατήρα με αποτέλεσμα να υπάρχει απ' ευθείας μετάβαση στην μη γραμμική περιοχή που ελέγχεται από την αντίσταση στην συμπίεση. Παράλληλα η μη γραμμικότητα του καταστατικού νόμου του κελύφους, πιο συγκεκριμένα συμπεριφορά strain softening, αναμένεται να επιτρέψει την προσέγγιση μεταξύ των πειραματικών μετρήσεων και των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης. .

4.6.2 Παραμετρική μελέτη της επίδρασης του πάχους και του μέτρου διάτμησης για φουσαλίδες τύπου BiSphere.

Στην περίπτωση των φουσαλίδων τύπου BiSphere έχει νόημα να χρησιμοποιείται το πάχος ως ανεξάρτητη παράμετρος, διότι πρακτικά μπορεί να μετρηθεί. Θεωρώντας το πάχος ανεξάρτητη παράμετρο, η άλλη ανεξάρτητη παράμετρο είναι το μέτρο διάτμησης (ή το μέτρο ελαστικότητας).

Όπου για την περίπτωση φουσαλίδων τύπου BiSphere, δηλαδή φουσαλίδων που έχει νόημα το πάχος h , μπορούμε να γράψουμε:

$$N_1 = \frac{\chi R_o^2}{k_b} = \frac{EhR_o^2}{Eh^3} = 12(1-\nu^2) \frac{R_o^2}{h^2} \stackrel{\nu=0.5}{=} 9 \left(\frac{R_o}{h} \right)^2 = \left(\frac{3R_o}{h} \right)^2$$

$$N_2 = \frac{P_{st} R_o}{\chi} = \frac{P_{st} R_o}{3G_s h} = \frac{P_{st}}{3G_s} \frac{R_o}{h}$$

Ο αδιάστατος αριθμός N_1 περιγράφει τον λόγο εφελκυσμού και κάμψης, ενώ ο N_2 περιγράφει τον λόγο της στατικής πίεσης και αντίστασης λόγω εφελκυσμού. Έτσι διεξάγονται προσομοιώσεις για σταθερό λόγο $\frac{P_{st}}{G_s}$ και μεταβάλλοντας το λόγο $\frac{R_o}{h}$. Οι συνδυασμοί των παραμέτρων είναι η ακόλουθοι:

Περίπτωση Α:

$$\frac{P_{st}}{G_s} = \frac{1}{10^0},$$

$$\frac{R_o}{h} = 100, 90, 80, 70, 60, 50$$

Περίπτωση Β:

$$\frac{P_{st}}{G_s} = \frac{1}{10^1},$$

$$\frac{R_o}{h} = 100, 90, 80, 70, 60, 50$$

Περίπτωση C:

$$\frac{P_{st}}{G_s} = \frac{1}{10^2},$$

$$\frac{R_o}{h} = 100, 90, 80, 70, 60, 50$$

Περίπτωση D:

$$\frac{P_{st}}{G_s} = \frac{1}{10^3},$$

$$\frac{R_o}{h} = 100, \quad 90, \quad 80, \quad 70, \quad 60, \quad 50$$

Περίπτωση E:

$$\frac{P_{st}}{G_s} = \frac{1}{10^4},$$

$$\frac{R_o}{h} = 100, \quad 90, \quad 80, \quad 70, \quad 60, \quad 50$$

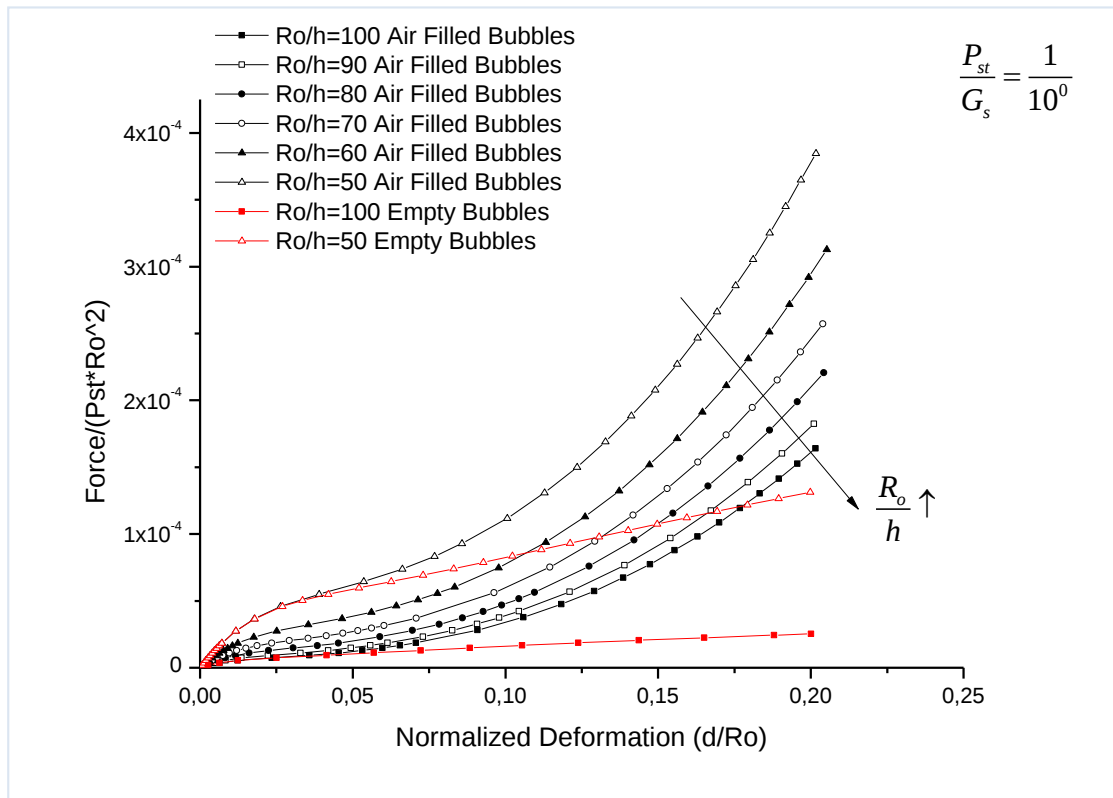
Περίπτωση F:

$$\frac{P_{st}}{G_s} = \frac{1}{10^5},$$

$$\frac{R_o}{h} = 100, \quad 90, \quad 80, \quad 70, \quad 60, \quad 50$$

Οι αναλυτικές τιμές των ελαστικών σταθερών και των αδιάστατων αριθμών βρίσκονται στο Παράρτημα.

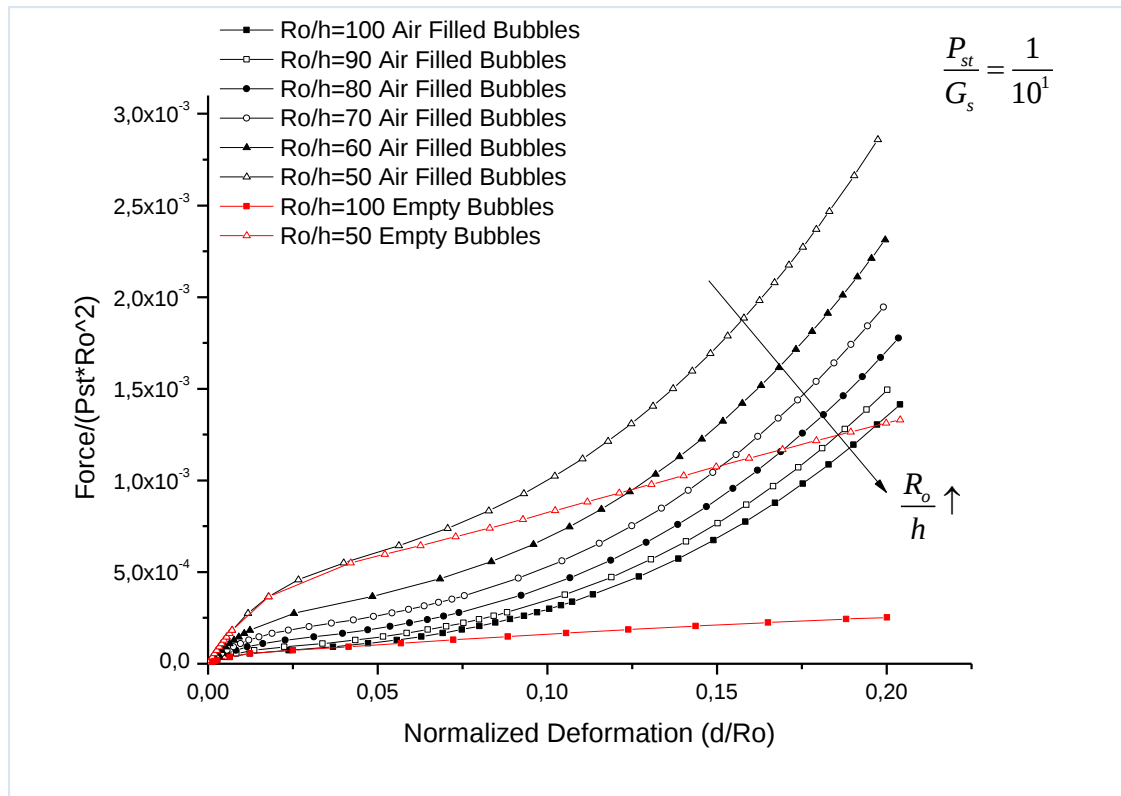
Τα αποτελέσματα των ανωτέρω συνδυασμών παραμέτρων αποτυπώνονται στα επόμενα διαγράμματα και συγκρίνεται η επίδραση της συμπιεστότητας καθώς και του πάχους.



Διάγραμμα 4-49 Μεταβολή της καμπύλης δύναμης-παραμόρφωσης για ίδιο μέτρο διάτμησης και μεταβαλλόμενο λόγο ακτίνας-πάχους.

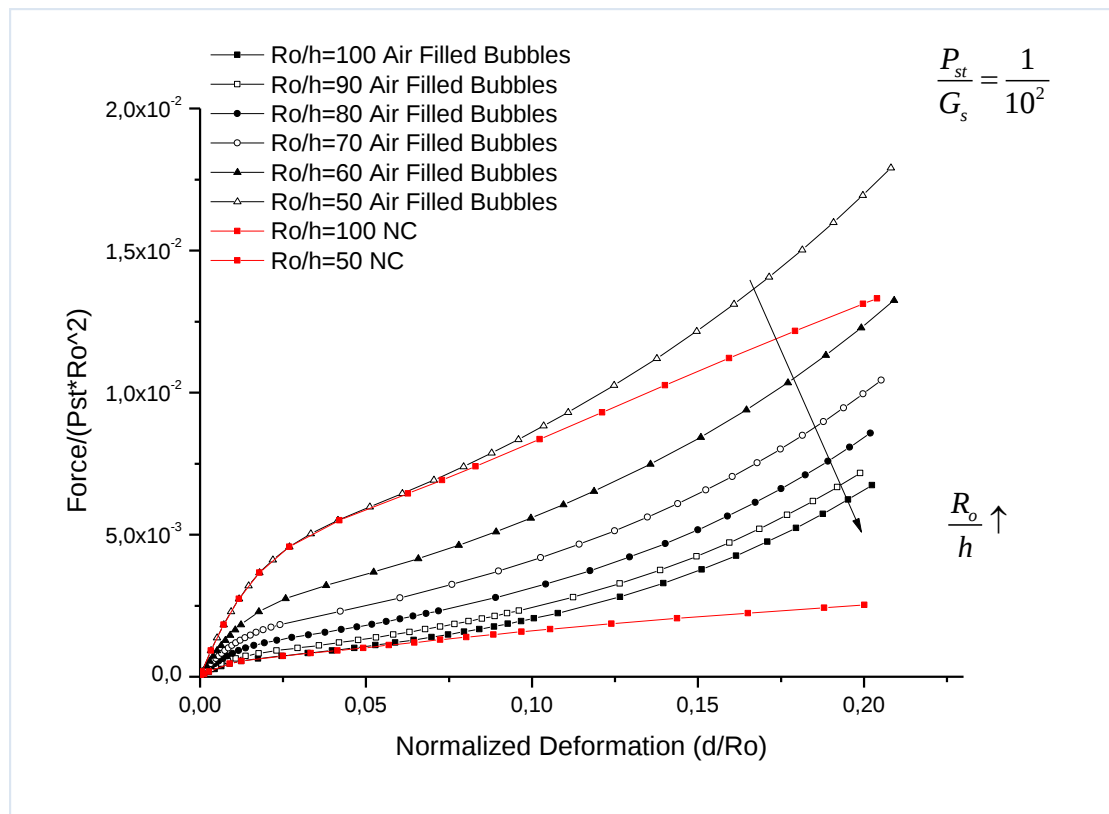
Σε καθένα από τα διαγράμματα αυτής της ενότητας μελετάται η επίδραση του λόγου της αρχικής ακτίνας με το πάχος για σταθερό κάθε φορά μέτρο διάτμησης. Σε κάθε διάγραμμα με μαύρα και κόκκινα σύμβολα απεικονίζονται γεμάτες και άδειες φυσαλίδες, αντίστοιχα. Το βέλος σε κάθε διάγραμμα δηλώνει μείωση του λόγου ακτίνας-πάχους και άρα η φυσαλίδα είναι πιο στιβαρή. Για λόγους καλύτερης απεικόνισης επιλέγηκαν σε κάθε διάγραμμα να αναπαρασταθούν άδειες φυσαλίδες στις ακραίες περιπτώσεις. Η A-1 (■) με λόγο ακτίνας-πάχους 100 και η A-6 (▲) με λόγο 50. Η επιλογή έγινε θεωρώντας ότι σε ενδιάμεσες τιμές του λόγου ακτίνας-πάχους η συμπεριφορά θα είναι ανάλογη.

Στα τρεις πρώτες περιπτώσεις (Διάγραμμα 4-49-Διάγραμμα 4-50) ο λόγος της στατικής πίεσης με το μέτρο διάτμησης είναι μεγάλος και κατά συνέπεια η απαιτούμενη δύναμη για δεδομένη παραμόρφωση είναι σχετικά μικρή. Οι καμπύλες εμφανίζουν τρεις βασικές διαφορετικές περιοχές. Μία αρχικά γραμμική, μία ενδιάμεση μη γραμμική με τα κοίλα προς τα κάτω και μία τρίτη ξανά μη γραμμική, αλλά με τα κοίλα στραμμένα προς τα πάνω. Για δεδομένο το λόγο στατικής πίεσης-μέτρου διάτμησης, η μείωση του λόγου ακτίνας-πάχους οδηγεί σε αύξηση της κλίσης της γραμμικής περιοχής και αύξηση της απαιτούμενης δύναμης για δεδομένη παραμόρφωση.



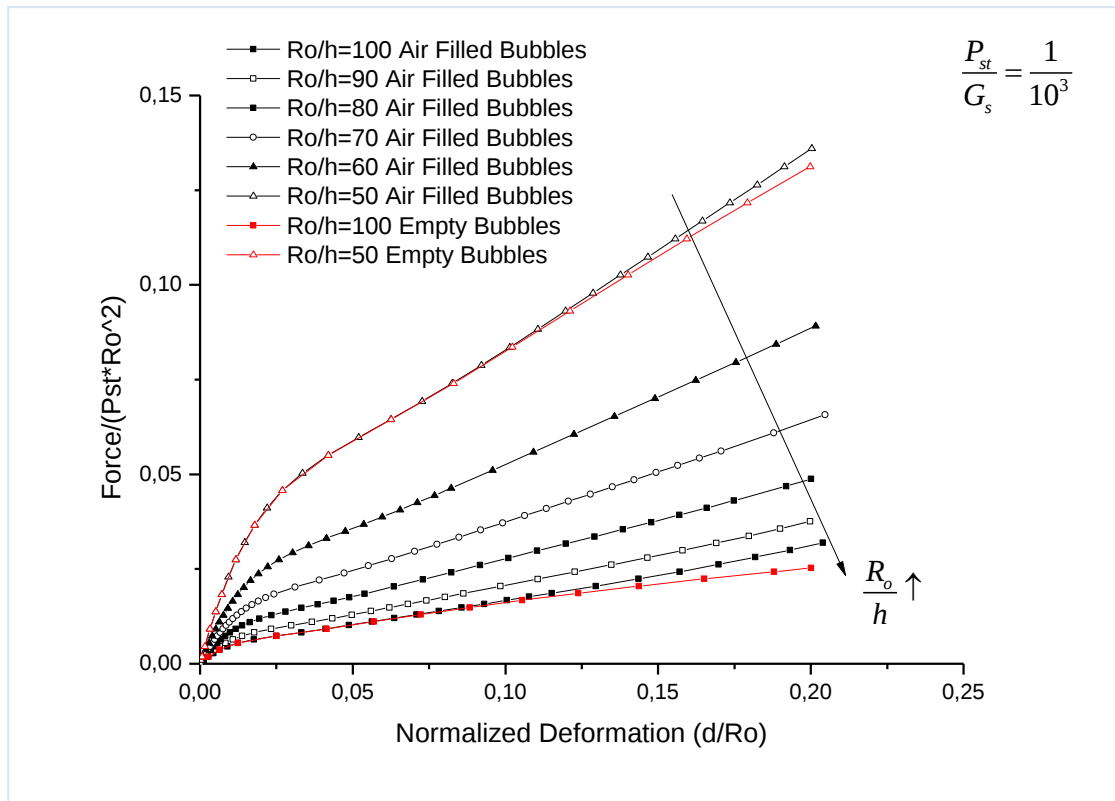
Διάγραμμα 4-50 Μεταβολή της καμπύλης δύναμης-παραμόρφωσης για ίδιο μέτρο διάτμησης και μεταβαλλόμενο λόγο ακτίνας-πάχους.

Τα αποτελέσματα για άδειες και κενές φυσαλίδες είναι ίδια στις μικρές παραμορφώσεις, οπότε οι αντίστοιχες καμπύλες αρχικά ταυτίζονται, ακόμα και στο πρώτο μη γραμμικό κομμάτι. Παρατηρείται όμως αποκόλληση των δύο καμπυλών από μια παραμόρφωση και μετά. Το σημείο αποκόλλησης είναι πρακτικά το ίδιο για φυσαλίδες με το ίδιο μέτρο διάτμησης και διαφορετικό λόγο ακτίνας-πάχους. Αυτό που γίνεται κατανοητό είναι πως με μείωση του λόγου στατικής πίεσης-μέτρου διάτμησης, η αποκόλληση μεταφέρεται σε όλο και μεγαλύτερες παραμορφώσεις.

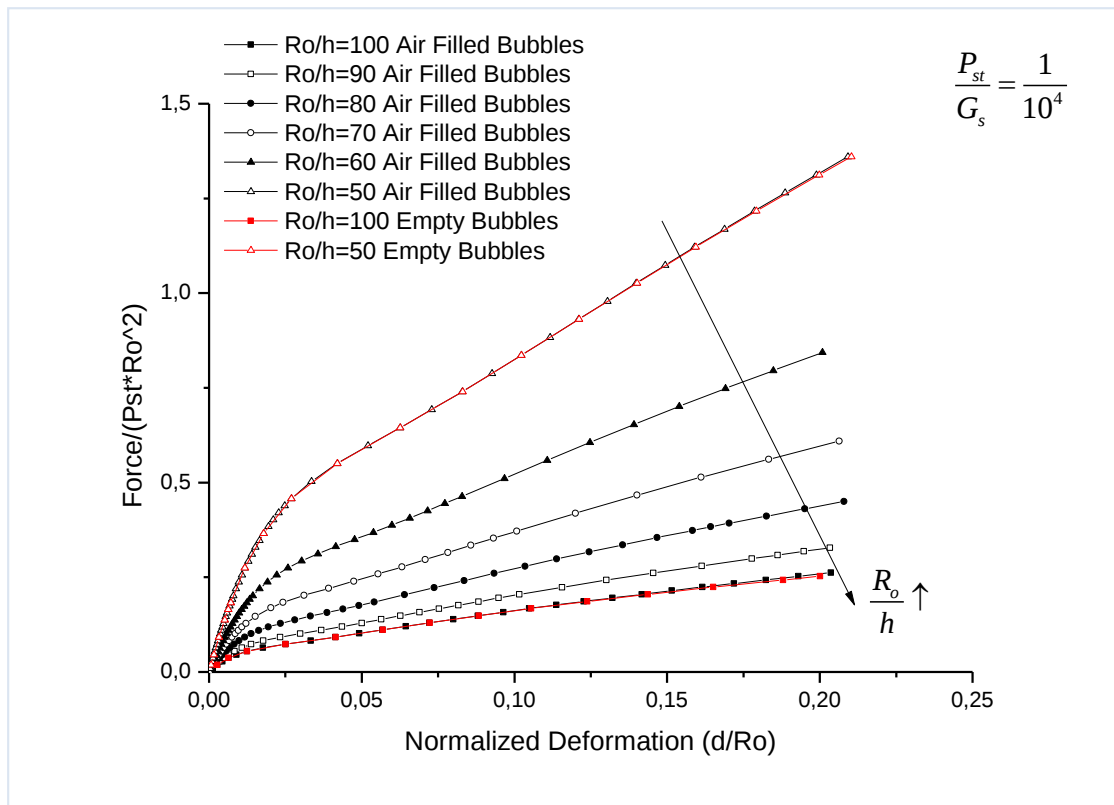


Διάγραμμα 4-51 Μεταβολή της καμπύλης δύναμης-παραμόρφωσης για ίδιο μέτρο διάτμησης και μεταβαλλόμενο λόγο ακτίνας-πάχους.

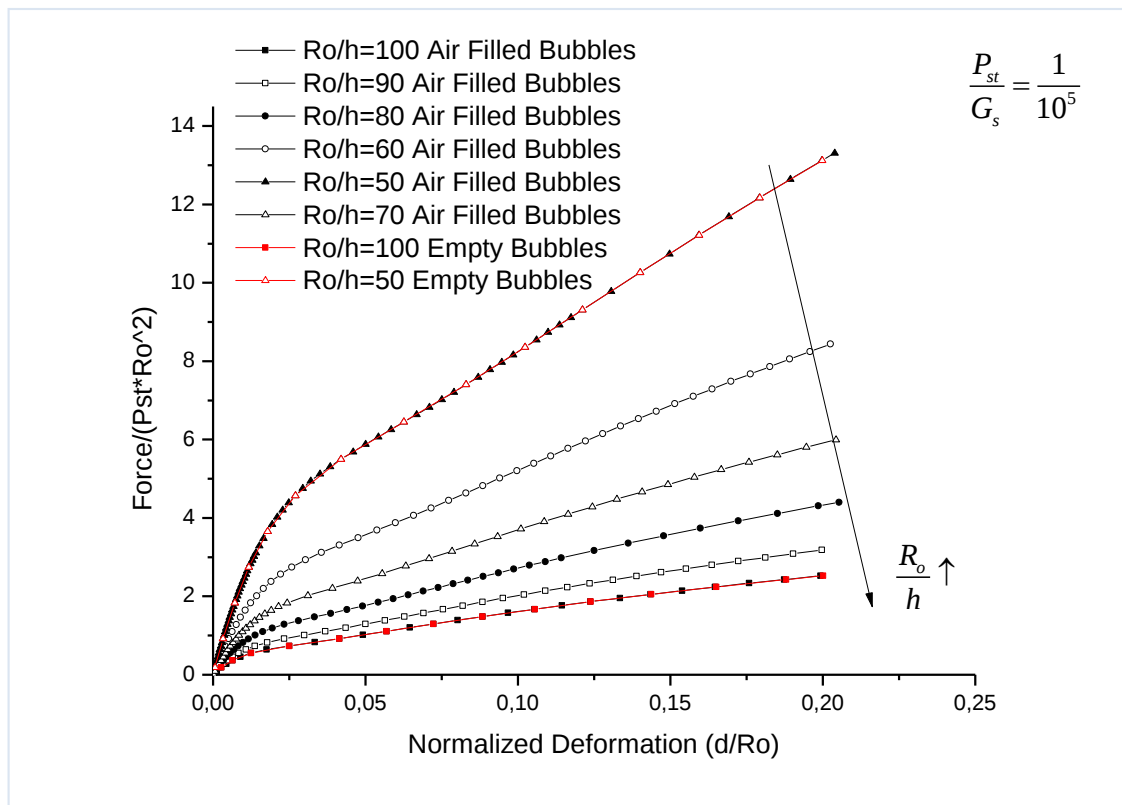
Στις επόμενες περιπτώσεις ο λόγος στατικής πίεσης-μέτρου διάτμησης γίνεται αρκετά μικρός, εν ολίγοις οι ελαστικές παράμετροι κυριαρχούν της αντιστάσεως του αέρα, και η απαιτούμενη δύναμη γίνεται ολοένα και μεγαλύτερη. Οι περιοχές που διακρίνονται είναι ξανά τρεις, αλλά με τη διαφορά ότι η τρίτη περιοχή δεν είναι πια μη γραμμική. Το σημείο αποκόλλησης δεν αλλάζει πρακτικά με μείωση του λόγου ακτίνας-πάχους, και μεταφέρεται σε όλο και μεγαλύτερες παραμορφώσεις καθώς αυξάνεται το μέτρο διάτμησης. Τελικά, οι δύο καμπύλες ταυτίζονται χωρίς να συμβαίνει αποκόλληση στις πολύ μικρές τιμές του λόγου στατικής πίεσης-μέτρου διάτμησης.



Διάγραμμα 4-52 Μεταβολή της καμπύλης δύναμης-παραμόρφωσης για ίδιο μέτρο διάτμησης και μεταβαλλόμενο λόγο ακτίνας-πάχους.



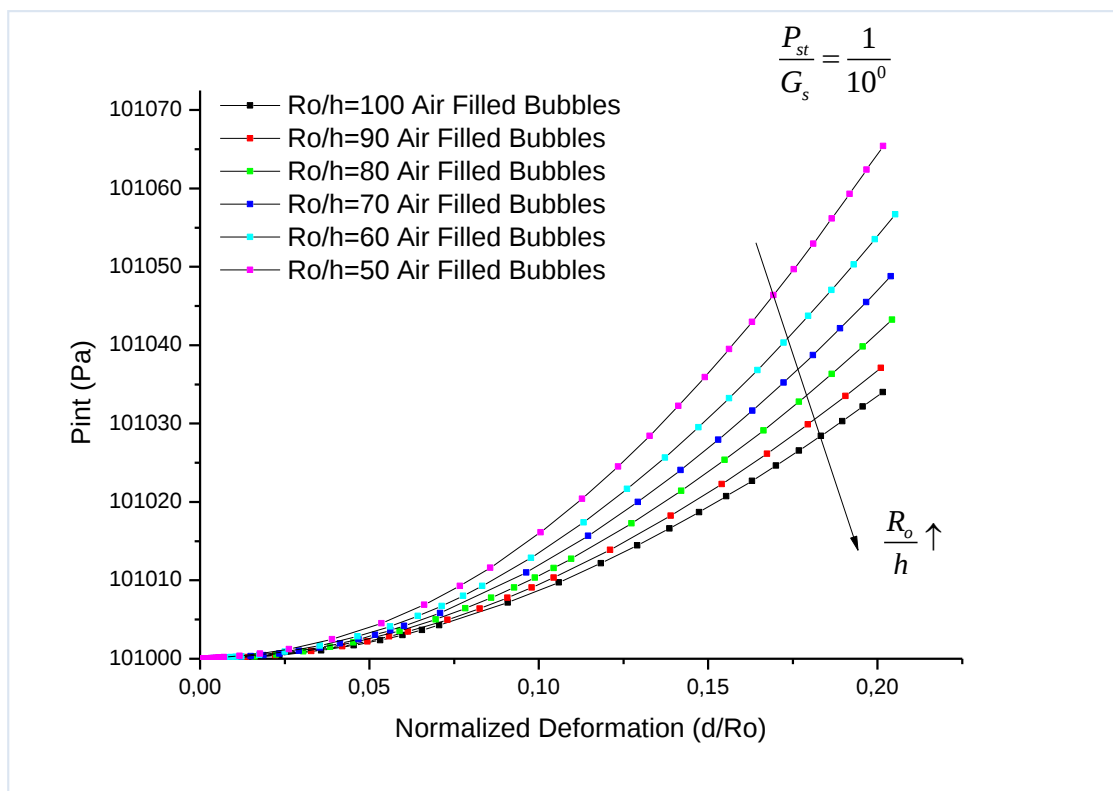
Διάγραμμα 4-53 Μεταβολή της καμπύλης δύναμης-παραμόρφωσης για ίδιο μέτρο διάτμησης και μεταβαλλόμενο λόγο ακτίνας-πάχους.



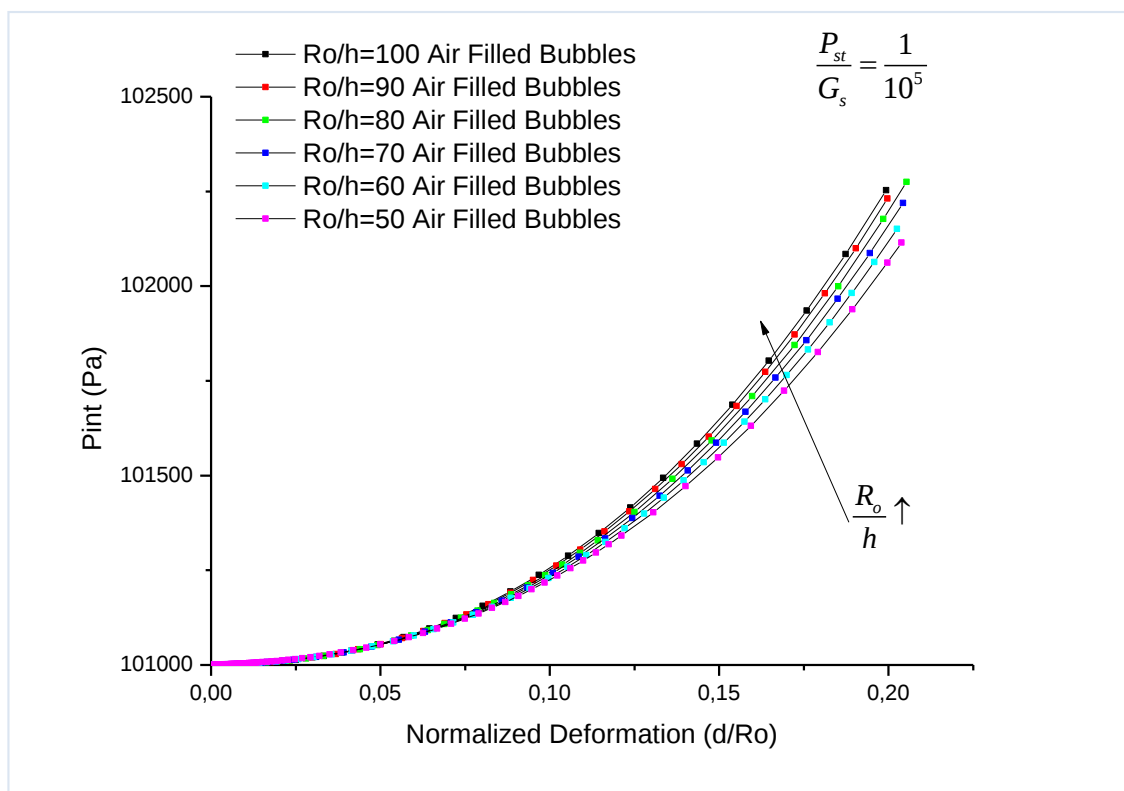
Διάγραμμα 4-54 Μεταβολή της καμπύλης δύναμης-παραμόρφωσης για ίδιο μέτρο διάτμησης και μεταβαλλόμενο λόγο ακτίνας-πάχους.

Επιπλέον, αναπαριστάται η μεταβολή της εσωτερικής συναρτήσεως της παραμόρφωσης, για την κατανόηση της αντίστασης του αέρα ως μια ακόμη δύναμη στην ισορροπία.

Στο Διάγραμμα 4-55 αποτυπώνεται η μεταβολή της εσωτερικής πίεσης για λόγο στατικής πίεσης-μέτρο διάτμησης ίσο με 1 και μεταβολή του λόγου ακτίνας-πάχους. Η μεταβολή της εσωτερικής πίεσης δεν είναι σημαντική σε σχέση με την αρχική ($=1.01 \cdot 10^5$ Pa) και είναι πιο έντονη για φυσαλίδες με πιο χοντρό κέλυφος. Αντίθετα, όταν ο λόγος στατικής πίεσης-μέτρου διάτμησης είναι αρκετά μικρότερος της μονάδας, η μεταβολή της εσωτερικής πίεσης είναι πιο σημαντική και δεν αλλάζει έντονα με αλλαγή του λόγου ακτίνας-πάχους (Διάγραμμα 4-56)



Διάγραμμα 4-55 Μεταβολή της εσωτερικής πίεσης συναρτήσει της παραμόρφωσης για σταθερό λόγο στατικής πίεσης-μέτρου διάτμησης και μεταβαλλόμενο το λόγο ακτίνας-πάχους.



Διάγραμμα 4-56 Μεταβολή της εσωτερικής πίεσης συναρτήσει της παραμόρφωσης για σταθερό λόγο στατικής πίεσης-μέτρου διάτμησης και μεταβαλλόμενο το λόγο ακτίνας-πάχους.

Στις ενότητες 4.3 και 4.4 μελετήθηκαν δύο περιπτώσεις φουσαλίδων τύπου BiSphere. Στο παρόν κομμάτι της εργασίας θα γίνει προσπάθεια ένταξης των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης στην παραμετρική μελέτη.

Περίπτωση BiSphere 1

$$N_1 = \frac{\chi R_o^2}{k_b} = \frac{3G_s h R_o^2}{3G_s h^3} \Rightarrow$$

$$N_1 = 12(1-\nu^2) \left(\frac{R_o}{h} \right)^2 = 12(1-0.5^2) \left(\frac{2.6 \cdot 10^{-6}}{39 \cdot 10^{-9}} \right)^2 = 4 \cdot 10^4 \quad (4-16)$$

$$N_2 = \frac{P_{st} R_o}{\chi} = \frac{P_{st} R_o}{3G_s h} \Rightarrow$$

$$N_2 = \frac{1.01 \cdot 10^5 \cdot 2.6 \cdot 10^{-6}}{3 \cdot 0.97 \cdot 10^9 \cdot 39 \cdot 10^{-9}} = 2.3 \cdot 10^{-3} \quad (4-17)$$

Η εν λόγω μικροφουσαλίδα θα μπορούσε να περιγραφεί από την περίπτωση E-4 (βλ και Παράρτημα). Συγκρίνοντας την παραμετρική μελέτη της E-4 με την φουσαλίδα τύπου BiSphere 1 παρατηρούνται δύο περιοχές, η γραμμική και η μη γραμμική. Παράλληλα, η λύση γεμάτων και άδειων φουσαλίδων είναι η ίδια. Τέλος, το εύρος των δυνάμεων για παραμόρφωση μέχρι 25% είναι παρόμοιο. Θα πρέπει να σημειωθεί ότι θεωρώντας μεγαλύτερο πάχος κελύφους και λίγο μικρότερο μέτρο ελαστικότητας το εύρος της γραμμικής περιοχής πριν την μετάβαση στην περιοχή Rogorelon επεκτείνεται, βλέπε και Διάγραμμα 4-25, ανάλογα με την τάση που αποτυπώνεται στα γραφήματα 4.49-4.54.

Περίπτωση BiSphere 2

Κόκκινα σημεία

$$N_1 = 12(1-\nu^2) \left(\frac{R_o}{h} \right)^2 = 12(1-0.5^2) \left(\frac{2 \cdot 10^{-6}}{920 \cdot 10^{-9}} \right)^2 = 42 \quad (4-18)$$

$$N_2 = \frac{1.01 \cdot 10^5 \cdot 2 \cdot 10^{-6}}{3 \cdot 1.8 \cdot 10^6 \cdot 920 \cdot 10^{-9}} = 0.04 \quad (4-19)$$

Κίτρινα σημεία

$$N_1 = 12(1 - \nu^2) \left(\frac{R_o}{h} \right)^2 = 12(1 - 0.5^2) \left(\frac{1.6 \cdot 10^{-6}}{51 \cdot 10^{-9}} \right)^2 = 8858 \quad (4-20)$$

$$N_2 = \frac{1.01 \cdot 10^5 \cdot 1.6 \cdot 10^{-6}}{3 \cdot 8.1 \cdot 10^8 \cdot 51 \cdot 10^{-9}} = 0.04 \quad (4-21)$$

Αυτές οι περιπτώσεις δεν είναι δυνατό να ενταχθούν στην παρούσα παραμετρική μελέτη. Στην περίπτωση αυτή σημαντικό ρόλο αναμένεται να παίζει η ελαστική συμπεριφορά του προβόλου, όπως αναφέρεται και στις σχετικές πειραματικές εργασίες.

5. Συμπεράσματα-Προτάσεις για μελλοντική εργασία

Στην παρούσα μεταπτυχιακή εργασία μελετήθηκε η μηχανική συμπεριφορά μικροφουσαλίδων όταν φορτίζονται υπό σημειακό φορτίο στον ένα πόλο του κελύφους, με απώτερο στόχο την προσομοίωση πειραμάτων φόρτισης φουσαλίδων γεμάτων με αέρα με χρήση AFM (βλ. ενότητα 1.2).

Αρχικά έγινε βιβλιογραφική ανασκόπηση που αναλύει κατά κύριο λόγο εργασίες που περιγράφουν πειραματική μελέτη των φουσαλίδων (βλ ενότητα 1.2). Στη συνέχεια και με σκοπό την μοντελοποίηση του προβλήματος παρουσιάστηκε το θεωρητικό υπόβαθρο που μπορεί να περιγράψει την μηχανική συμπεριφορά φουσαλίδων, η οποία βασίζεται κατά κύριο λόγο στην θεωρία λεπτότοιχων κελυφών (βλ. ενότητα 2).

Η μοντελοποίηση βασίστηκε σε ισοζύγια δυνάμεων και ροπών στην επιφάνεια της φουσαλίδας και χρησιμοποιώντας μοντέλα από την βιβλιογραφία όπως η θεωρία Reissner [17], Pogorelov [18] καθώς και Hertz [19]. Οι δύο πρώτες θεωρίες περιγράφουν την σχέση δύναμης και παραμόρφωσης, ενώ η θεωρία Hertz περιγράφει την αλληλεπίδραση δύο σωμάτων κατά την επαφή τους. Τέλος ελήφθη υπόψη η συμπίεστικότητα του περικλειόμενου αερίου ως πρόσθετη συνιστώσα τακαμψίας της μικροφουσαλίδας.

Στις διαθέσιμες πειραματικές μετρήσεις ([9], [10], [11]), έγινε παρεμβολή πολυωνυμικών συναρτήσεων με σκοπό να υπολογιστούν το επιφανειακό μέτρο διαστολής και το μέτρο κάμψης για φουσαλίδες τύπου BR14 ή το μέτρο διάτμησης και το πάχος για φουσαλίδες τύπου BiSphere, με συνδυασμένη χρήση των μοντέλων Reissner και Pogorelov. Οι υπολογισμένες σταθερές εισάγονται στο μοντέλο και με τη χρήση πεπερασμένων στοιχείων (βλ. ενότητα 3) υπολογίζονται οι μετατοπίσεις, το σχήμα της παραμορφωμένης φουσαλίδας, η απαιτούμενη δύναμη, οι ελαστικές ενέργειες και η ενέργεια συμπίεσης του αέρα που βρίσκεται στο εσωτερικό της φουσαλίδας.

Σε κάθε περίπτωση διαθέσιμου πειράματος, ακολουθήθηκε η διαδικασία που περιγράφηκε στην προηγούμενη παράγραφο και φτιάχνονται διαγράμματα δύναμης συναρτήσει της παραμόρφωσης. Σκοπός αυτών των διαγραμμάτων ήταν να συγκριθούν οι αριθμητικές τιμές για άδειες και γεμάτες φουσαλίδες με τις πειραματικές. Όσον αφορά την περίπτωση της φουσαλίδας τύπου BR14 (βλ ενότητα 4.1) παρατηρήθηκε πολύ καλή συμφωνία μεταξύ των πειραματικών τιμών και των αριθμητικών. Επιπλέον δεν παρατηρήθηκε διαφορά στις προσομοιώσεις μεταξύ άδειων και γεμάτων φουσαλίδων για μικρές παραμορφώσεις, παρά μόνο μια μικρή απόκλιση όταν η παραμόρφωση γίνεται μεγαλύτερη από 20%. Για δεύτερη σειρά πειραματικών δεδομένων με φουσαλίδες των οποίων το προστατευτικό κέλυφος είναι επίσης από φωσφολιπίδιο, (βλ ενότητα 4.2) παρατηρήθηκε καλή συμφωνία μεταξύ πειραματικών και αριθμητικών τιμών. Στην περίπτωση αυτή οι καμπύλες προσομοίωσης των άδειων και γεμάτων φουσαλίδων έχουν έντονη απόκλιση για παραμόρφωση μεγαλύτερη του 10%, με τις τελευταίες να προσεγγίζουν καλύτερα τις πειραματικές τιμές. Εδώ πρέπει να τονισθεί ότι η εκτίμηση

των παραμέτρων του κελύφους, χ και k_b , έγινε λαμβάνοντας υπόψη το μοντέλο Reissner καθώς και την επίδραση της συμπιεστότητας του περικλειόμενου αερίου. Αυτό αποτελεί ισχυρή ένδειξη της επίδρασης της συμπιεστότητας στην ακαμψία και, κατ' επέκταση, στην μηχανική συμπεριφορά των μικροφουσαλίδων για μεγάλες παραμορφώσεις. Στη συνέχεια εξετάστηκαν δύο περιπτώσεις φουσαλίδων τύπου BiSphere, οι οποίες αποκαλούνται BiSphere 1 και BiSphere 2. Στην πρώτη περίπτωση (βλ ενότητα 4.3) εισάγοντας το μέτρο κάμψης όπως προκύπτει από την θεωρία Reissner και το πάχος του κελύφους όπως δίδεται από την ομάδα που έκανε το πείραμα [9] παρατηρείται ικανοποιητική προσέγγιση της διαθέσιμης μόνο γραμμικής περιοχής. Ωστόσο, αλλάζοντας αυτή την τιμή του πάχους και θεωρώντας μια τιμή 2.5 φορές μεγαλύτερη η προσέγγιση είναι ακόμα καλύτερη, και κατά συνέπεια μικρότερη τιμή της ελαστικής σταθεράς του κελύφους, αναδεικνύοντας έτσι την βαρύνουσα σημασία της ακριβούς εκτίμησης του πάχους στην ανάκτηση των μηχανικών παραμέτρων του κελύφους. Επιπλέον για τον εν λόγω τύπο φουσαλίδας BiSphere, οι προσομοιώσεις μεταξύ άδειων και γεμάτων φουσαλίδων δεν έδειξαν ουσιαστική διαφορά. Όσον αφορά την περίπτωση της φουσαλίδας BiSphere 2 (βλ ενότητα 4.4), μελετήθηκαν δύο διαφορετικές σειρές πειραματικών δεδομένων ακολουθώντας ανάλογη διαδικασία. Η προσομοίωση κατάφερε να περιγράψει σε κάποιο βαθμό την γραμμική περιοχή των καμπυλών δύναμης-παραμόρφωσης και όχι περαιτέρω. Εδώ θα πρέπει να τονισθεί ότι στην τελευταία περίπτωση οι πειραματικές μετρήσεις έδειξαν την επίδραση της ελαστικότητας του προβόλου του μετρητικού οργάνου στην απόκριση της μικροφουσαλίδας. Συνεπώς η σημειακή κατανομή του φορτίου πάνω στο κέλυφος ενδεχομένως αποτελεί παράγοντα λάθους στις εν λόγω προσομοιώσεις, και θα πρέπει να διερευνηθεί η δυνατότητα καλύτερης πρόβλεψής της συνεκτιμώντας την επίδραση της ελαστικότητας του προβόλου.

Συνοψίζοντας, το διαθέσιμο μοντέλο για σημειακό φορτίο περιγράφει καλύτερα την συμπεριφορά των πιο μαλακών κελυφών από φωσφολιπίδια (BR14 και φωσφολιπίο), ενώ στην περίπτωση των πιο σκληρών, τύπου BiSphere, χρειάζεται επανεξέταση. Επιπλέον, η καμπύλη δύναμης παραμόρφωσης έχει συνήθως τρεις περιοχές. Συνοπτικά, πρόκειται για μια αρχικά γραμμική περιοχή, η οποία ακολουθείται από μια μη γραμμική με τα κοίλα προς τα κάτω και τέλος μια μη γραμμική αλλά με τα κοίλα προς τα πάνω. Η ανάπτυξη αυτών των περιοχών εξαρτάται από τις ελαστικές σταθερές και την γεωμετρία (βλ και παρακάτω παραμετρική μελέτη). Συγκρίνοντας αποτελέσματα μεταξύ άδειων και γεμάτων φουσαλίδων συμπεραίνουμε ότι οι δύο πρώτες περιοχές καθορίζονται από τις ελαστικές δυνάμεις, ενώ η τρίτη ελέγχεται από την εσωτερική πίεση του αερίου. Σε κάθε περίπτωση οι ελαστικές ενέργειες κυριαρχούν της ενέργειας λόγω συμπίεσης του αερίου. Στην περίπτωση του φωσφολιπιδίου, όταν οι δύο καμπύλες των άδειων και γεμάτων φουσαλίδων αρχίζουν να διαφοροποιούνται παρατηρείται σημαντική αύξηση της ενέργειας συμπίεσης του αερίου.

Τα πειραματικά αποτελέσματα εμφανίζουν μια αρχικά γραμμική περιοχή, που μπορεί να περιγραφεί από τη θεωρία Reissner, η δεύτερη περιοχή είναι μη γραμμική, αλλά δεν υπακούει υποχρεωτικά στην θεωρία Pogorelov. Οι δύο αυτές περιοχές ελέγχονται από τις ελαστικές δυνάμεις. Ωστόσο, σε αρκετές περιπτώσεις όπως του φωσφολιπιδίου και του BiSphere 2, εμφανίζεται πριν την γραμμική περιοχή μια επιπλέον

μη γραμμική περιοχή η οποία σχετίζεται με δυνάμεις πρόσφυσης μεταξύ της μικροφυσαλίδας και του προβόλου [8] οι οποίες δεν λαμβάνονται υπόψη στην παρούσα μοντελοποίηση.

Όσον αφορά την μοντελοποίηση της ελαστικής επαφής μεταξύ φυσαλίδας και προβόλου χρησιμοποιήθηκε η κατανομή που προβλέπει η θεωρία Hertz για της περιγραφή της φόρτισης στην περιοχή επαφής, με μέγιστο στον πόλο του κελύφους. Δεν λαμβάνεται υπόψη η πρόβλεψη κατά Hertz της καμπύλης δύναμης παραμόρφωσης διότι η τελευταία δεν αφορά κέλυφος αλλά αμιγώς ελαστική σφαίρα. Οι προσομοιώσεις έδειξαν ότι αυτού του είδους η μοντελοποίηση επιτρέπει την πολλαπλότητα λύσεων η μία εκ των οποίων ανακτά την λύση για σημειακό φορτίο. Η δεύτερη επιτρέπει την επέκταση της παραμόρφωσης πέραν της περιοχής γύρω από τον πόλο, η οποία όμως παραμένει πολύ μικρή ενώ το σχήμα του κελύφους διατηρείται σφαιρικό. Οι πειραματικές μετρήσεις με μικροφυσαλίδες τύπου Bisphere καταγράφουν την ύπαρξη πολλαπλότητας λύσεων στις καμπύλες απόκρισης, όμως καλύτερη πρόβλεψη του εν λόγω φαινομένου απαιτεί κατάλληλη μοντελοποίηση της συμπεριφοράς του προβόλου.

Η θεωρία του Shanahan [19] για σημειακή παραμόρφωση σφαιρικού κελύφους προβλέπει την μεταβολή της ακτίνας της με βάση γεωμετρικά επιχειρήματα, ωστόσο αγνοεί τις τάσεις που αναπτύσσονται λόγω κάμψης, ενώ το ισοζύγιο ελαστικών δυνάμεων γίνεται σε μια περιοχή μακριά από την περιοχή γύρω από τους πόλους όπου παρατηρείται η κυρίως παραμόρφωση.

Τέλος από την παραμετρική μελέτη για φυσαλίδες τύπου BiSphere παρατηρείται ότι για τιμές του λόγου P_{st}/G_s από $1-10^{-3}$ διακρίνονται τρεις περιοχές όμοιες με αυτές που περιγράφηκαν παραπάνω. Η λύση μεταξύ άδειων και γεμάτων φυσαλίδων είναι ίδια για μικρές παραμορφώσεις, ενώ παρατηρείται διαφοροποίηση από μια παραμόρφωση και μετά. Για σταθερό λόγο P_{st}/G_s το σημείο διαφοροποίησης των δύο καμπυλών δεν αλλάζει με αλλαγή του λόγου R_0/h . Καθώς ο λόγος P_{st}/G_s μειώνεται, ή αλλιώς η σχετική ακαμψία λόγω συμπιεστότητας του αερίου μειώνεται, η διαφοροποίηση συμβαίνει σε όλο και μεγαλύτερη παραμόρφωση. Η διαφοροποίηση αυτή συμβαίνει για αρκετά μεγάλες παραμορφώσεις, και κατά συνέπεια μεγάλη μείωση του όγκου της μικροφυσαλίδας και αύξηση της εσωτερικής της πίεσης έτσι ώστε η ακαμψία λόγω συμπιεστότητας καθορίζει την απόκριση της μικροφυσαλίδας.

Τέλος από την παραμετρική μελέτη για φυσαλίδες τύπου BiSphere παρατηρείται ότι για τιμές του λόγου P_{st}/G_s από $1-10^{-3}$ διακρίνονται τρεις περιοχές, όμοιες με αυτές που περιγράφηκαν παραπάνω. Η λύση μεταξύ άδειων και γεμάτων φυσαλίδων είναι για μικρές παραμορφώσεις, ενώ παρατηρείται διαφοροποίηση από μια παραμόρφωση και μετά. Για σταθερό λόγο P_{st}/G_s το σημείο αποκόλλησης των δύο καμπυλών δεν αλλάζει με αλλαγή του λόγου R_0/h . Καθώς ο λόγος P_{st}/G_s μειώνεται η αποκόλληση συμβαίνει σε όλο και μεγαλύτερη παραμόρφωση.

Ο λόγος R_0/h καθορίζει την κλίση της αρχικής γραμμικής περιοχής καθώς και το σημείο μετάβασης στην μη γραμμική συμπεριφορά τύπου Pogorelov (για σημειακό φορτίο). Καθώς το R_0/h μειώνεται, ή αλλιώς η αντίσταση σε λυγισμό μεγαλώνει, αντίστοιχα μεγαλώνει η κλίση ενώ καθυστερεί η μετάβαση στην μη γραμμική περιοχή.

Για τιμές του λόγου P_{st}/G_s από 10^{-4} - 10^{-5} δεν παρατηρείται η τρίτη μη γραμμική περιοχή, ενώ δεν παρατηρείται διαφοροποίηση στην λύση που προκύπτει θεωρώντας μικροφυσαλίδες άδειες και γεμάτες με αέριο.

Προτάσεις για μελλοντική έρευνα

- Μελέτη της επίδρασης της μη γραμμικότητας του καταστατικού νόμου στην σχέση δύναμης παραμόρφωσης. π.χ. μελέτη των μη γραμμικών νόμων Mooney Rivlin και Skalak. Στις μικρές παραμορφώσεις δεν αναμένεται διαφοροποίηση, αλλά στις πιο μεγάλες η απόκλιση των καταστατικών νόμων είναι σημαντική [29].
- Μελέτη της επίδρασης της παραμορφωσιμότητας του προβόλου και επίλυση του προβλήματος ως συνδυασμός δύο προβλημάτων παραμόρφωσης.
- Μελέτη της επίδρασης της ενέργειας λόγω πρόσφυσης της μικροφυσαλίδας στον πρόβολο και πρόβλεψη της αρχικής μη γραμμικής περιοχής της απόκρισης.

Βιβλιογραφία

1. Ferrara, K., R. Pollard, and M. Borden, *Ultrasound Microbubble Contrast Agents: Fundamentals and Application to Gene and Drug Delivery*. Annual Review of Biomedical Engineering, 2007. **9**(1): p. 415-447.
2. Kaufmann, B.A., K. Wei, and J.R. Lindner, *Contrast Echocardiography*. Current Problems in Cardiology, 2007. **32**(2): p. 51-96.
3. Suresh, S., *Mechanical response of human red blood cells in health and disease: Some structure-property-function relationships*. Journal of Materials Research, 2006. **21**(08): p. 1871-1877.
4. Deserno, M. and W. Gelbar, M., *Adhesion and Wrapping in Colloid–Vesicle Complexes*. The Journal of Physical Chemistry, 2002. **106**(21): p. 5543-5552.
5. Σερπετσή, *Παραμόρφωση μικροφουσαλίδων με εφαρμογή σημειακής δύναμης στον ένα πόλο*, in *Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών*. 2011, Πανεπιστήμιο Θεσσαλίας: Βόλος.
6. Fery, A. and R. Weinkamer, *Mechanical properties of micro- and nanocapsules: Single-capsule measurements*. Polymer, 2007. **48**(25): p. 7221-7235.
7. Lulevich, V.V., D. Andrienko, and O.I. Vinogradova, *Elasticity of polyelectrolyte multilayer microcapsules*. The Journal of Chemical Physics, 2004. **120**(8): p. 3822-3826.
8. Johnson, K.L., K. Kendall, and A.D. Roberts, *Surface Energy and the Contact of Elastic Solids*. Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences, 1971. **324**(1558): p. 301-313.
9. Glynos, E., V. Sboros, and V. Koutsos, *Polymeric thin shells: Measurement of elastic properties at the nanometer scale using atomic force microscopy*. Materials Science and Engineering: B, 2009. **165**(3): p. 231-234.
10. Glynos, E., et al., *Nanomechanics of Biocompatible Hollow Thin-Shell Polymer Microspheres*. Langmuir, 2009. **25**(13): p. 7514-7522.
11. Buchner Santos, E., et al., *Nanomechanical Properties of Phospholipid Microbubbles*. Langmuir, 2012. **28**(13): p. 5753-5760.
12. Taber, L.A., *Large deflection of a fluid-filled spherical shell under a point load*. TRANS. ASME J. APPL. MECH., 1982. **49**(1, Mar. 1982): p. 121-128.
13. Knoche, S. and J. Kierfeld, *Buckling of spherical capsules*. Physical Review E, 2011. **84**(4): p. 046608.
14. Vella, D., et al., *Wrinkling of Pressurized Elastic Shells*. Physical Review Letters, 2011. **107**(17): p. 174301.
15. Butt, H.-J., B. Cappella, and M. Kappl, *Force measurements with the atomic force microscope: Technique, interpretation and applications*. Surface Science Reports, 2005. **59**(1–6): p. 1-152.
16. Landau, L.D., et al., *Theory of Elasticity*. 1986: Butterworth-Heinemann.
17. Reissner, E., *Stresses and small displacements of Shallow Spherical Shells I and II*. Journal of Mathematics and Physics, 1946. **25**: p. 279-300.
18. Pogorelov, A.V., *Bendings of Surfaces and Stability of Shells*. 1988: American Mathematical Society.
19. Shanahan, M.E.R., *A Novel Test for the Appraisal of Solid/Solid Interfacial Interactions*. The Journal of Adhesion, 1997. **63**(1-3): p. 15-29.
20. Derjaguin, B.V., V.M. Muller, and Y.P. Toporov, *Effect of contact deformations on the adhesion of particles*. Journal of Colloid And Interface Science, 1975. **53**(2): p. 314-326.

21. Skalak, R., et al., *Strain Energy Function of Red Blood Cell Membranes*. Biophysical Journal, 1973. **13**(3): p. 245-264.
22. Tsiglifis, K., *Numerical simulation of bubble dynamics in response to acoustic disturbances*, in *Department of Mechanical Engineering*. 2007, University of Thessaly: Volos.
23. Libai, A. and J.G. Simmonds, *The Nonlinear Theory of Elastic Shells*. 2005: Cambridge University Press.
24. Rivlin, R.S., *Large Elastic Deformations of Isotropic Materials. IV. Further Developments of the General Theory*. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences, 1948. **241**(835): p. 379-397.
25. Tsiglifis, K. and N.A. Pelekasis, *Nonlinear radial oscillations of encapsulated microbubbles subject to ultrasound: The effect of membrane constitutive law*. The Journal of the Acoustical Society of America, 2008. **123**(6): p. 4059-4070.
26. LAC, E., et al., *Spherical capsules in three-dimensional unbounded Stokes flows: effect of the membrane constitutive law and onset of buckling*. Journal of Fluid Mechanics, 2004. **516**: p. 303-334.
27. Reddy, J., *An Introduction to the Finite Element Method*. 2005: McGraw-Hill Education.
28. Boor, C.d., *A Practical Guide to Splines*. 2001: Springer.
29. BARTHÈS-BIESEL, D., A. DIAZ, and E. DHENIN, *Effect of constitutive laws for two-dimensional membranes on flow-induced capsule deformation*. Journal of Fluid Mechanics, 2002. **460**: p. 211-222.

Παράρτημα

Πίνακας Ελαστικών σταθερών και αδιάστατων αριθμών παραμετρικής μελέτης φυσαλίδας τύπου BiSphere.

A-1 $N_1=90000$, $N_2=33.7$ $\chi=0.006$ N/m $k_b=2.7 \cdot 10^{-19}$ N·m	A-2 $N_1=74380$, $N_2=31$ $\chi=0.066$ N/m $k_b=3.5 \cdot 10^{-19}$ N·m
A-3 $N_1=57600$, $N_2=26.9$ $\chi=0.0075$ N/m $k_b=5.2 \cdot 10^{-19}$ N·m	A-4 $N_1=44321$, $N_2=23.6$ $\chi=0.0086$ N/m $k_b=7.8 \cdot 10^{-19}$ N·m
A-5 $N_1=33057$, $N_2=20.4$ $\chi=0.0099$ N/m $k_b=1.2 \cdot 10^{-18}$ N·m	A-6 $N_1=22500$, $N_2=16.8$ $\chi=0.012$ N/m $k_b=2.1 \cdot 10^{-18}$ N·m

B-1 $N_1=90000$, $N_2=3.37$ $\chi=0.06$ N/m $k_b=2.7 \cdot 10^{-18}$ N·m	B-2 $N_1=74380$, $N_2=3.1$ $\chi=0.066$ N/m $k_b=3.5 \cdot 10^{-18}$ N·m
B-3 $N_1=57600$, $N_2=2.69$ $\chi=0.075$ N/m $k_b=5.2 \cdot 10^{-18}$ N·m	B-4 $N_1=44321$, $N_2=2.36$ $\chi=0.086$ N/m $k_b=7.8 \cdot 10^{-18}$ N·m
B-5 $N_1=33057$, $N_2=2.04$ $\chi=0.099$ N/m $k_b=1.2 \cdot 10^{-17}$ N·m	B-6 $N_1=22500$, $N_2=1.68$ $\chi=0.12$ N/m $k_b=2.1 \cdot 10^{-17}$ N·m

C-1 $N_1=90000$, $N_2=3.37 \cdot 10^{-1}$ $\chi=0.6$ N/m $k_b=2.7 \cdot 10^{-17}$ N·m	C-2 $N_1=74380$, $N_2=3.1 \cdot 10^{-1}$ $\chi=0.66$ N/m $k_b=3.5 \cdot 10^{-17}$ N·m
C-3 $N_1=57600$, $N_2=2.69 \cdot 10^{-1}$ $\chi=0.75$ N/m $k_b=5.2 \cdot 10^{-17}$ N·m	C-4 $N_1=44321$, $N_2=2.36 \cdot 10^{-1}$ $\chi=0.86$ N/m $k_b=7.8 \cdot 10^{-17}$ N·m
C-5 $N_1=33057$, $N_2=2.04 \cdot 10^{-1}$ $\chi=0.99$ N/m $k_b=1.2 \cdot 10^{-16}$ N·m	C-6 $N_1=22500$, $N_2=1.68 \cdot 10^{-1}$ $\chi=1.2$ N/m $k_b=2.1 \cdot 10^{-16}$ N·m

D-1 $N_1=90000$, $N_2=3.37 \cdot 10^{-2}$ $\chi=6$ N/m $k_b=2.7 \cdot 10^{-16}$ N·m	D-2 $N_1=74380$, $N_2=3.1 \cdot 10^{-2}$ $\chi=6.6$ N/m $k_b=3.5 \cdot 10^{-16}$ N·m
D-3 $N_1=57600$, $N_2=2.69 \cdot 10^{-2}$ $\chi=7.5$ N/m $k_b=5.2 \cdot 10^{-16}$ N·m	D-4 $N_1=44321$, $N_2=2.36 \cdot 10^{-2}$ $\chi=8.6$ N/m $k_b=7.8 \cdot 10^{-16}$ N·m
D-5 $N_1=33057$, $N_2=2.04 \cdot 10^{-2}$ $\chi=9.9$ N/m $k_b=1.2 \cdot 10^{-16}$ N·m	D-6 $N_1=22500$, $N_2=1.68 \cdot 10^{-2}$ $\chi=12$ N/m $k_b=2.1 \cdot 10^{-15}$ N·m

E-1 $N_1=90000$, $N_2=3.37 \cdot 10^{-3}$ $\chi=60$ N/m $k_b=2.7 \cdot 10^{-15}$ N·m	E-2 $N_1=74380$, $N_2=3.1 \cdot 10^{-3}$ $\chi=66$ N/m $k_b=3.5 \cdot 10^{-15}$ N·m
E-3 $N_1=57600$, $N_2=2.69 \cdot 10^{-3}$ $\chi=75$ N/m $k_b=5.2 \cdot 10^{-15}$ N·m	E-4 $N_1=44321$, $N_2=2.36 \cdot 10^{-3}$ $\chi=86$ N/m $k_b=7.8 \cdot 10^{-15}$ N·m
E-5 $N_1=33057$, $N_2=2.04 \cdot 10^{-3}$ $\chi=99$ N/m $k_b=1.2 \cdot 10^{-14}$ N·m	E-6 $N_1=22500$, $N_2=1.68 \cdot 10^{-3}$ $\chi=120$ N/m $k_b=2.1 \cdot 10^{-14}$ N·m

F-1 $N_1=90000$, $N_2=3.37 \cdot 10^{-4}$ $\chi=600$ N/m $k_b=2.7 \cdot 10^{-14}$ N·m	F-2 $N_1=74380$, $N_2=3.1 \cdot 10^{-4}$ $\chi=660$ N/m $k_b=3.5 \cdot 10^{-14}$ N·m
F-3 $N_1=57600$, $N_2=2.69 \cdot 10^{-4}$ $\chi=750$ N/m $k_b=5.2 \cdot 10^{-14}$ N·m	F-4 $N_1=44321$, $N_2=2.36 \cdot 10^{-4}$ $\chi=860$ N/m $k_b=7.8 \cdot 10^{-14}$ N·m
F-5 $N_1=33057$, $N_2=2.04 \cdot 10^{-4}$ $\chi=990$ N/m $k_b=1.2 \cdot 10^{-13}$ N·m	F-6 $N_1=22500$, $N_2=1.68 \cdot 10^{-4}$ $\chi=1200$ N/m $k_b=2.1 \cdot 10^{-13}$ N·m