

Índice general

Agradecimientos

Resumen

Resum

Abstract

1. Introducción	1
1.1. nanotubos de carbono: una presentación general	1
1.1.1. Descripción geométrica	1
1.1.2. Relación de los CNTs con otros materiales del carbono	4
1.1.3. Fabricación de nanotubos de carbono	6
1.1.4. Desarrollo mediante CVD de nanotubos orientados	9
1.1.5. Aplicaciones de los Nanotubos de carbono	10
1.2. Motivación	15
1.3. Objetivos de la tesis	16
1.4. Contenido	17
2. Estado del Arte	19
2.1. Clasificación esquemática de los métodos de análisis para CNTs.	19
2.2. Modelos de mecánica cuántica (QM)	21
2.2.1. Método tight binding (TB)	21
2.2.2. Métodos ab initio	22
2.3. Modelos de dinámica molecular (MD)	23
2.4. Modelos de mecánica estructural molecular (MSM)	25
2.4.1. Potenciales interatómicos	26
2.5. Métodos de simulación multiescala (MS)	29
2.5.1. Métodos MS jerárquicos	29
2.5.2. Métodos MS simultáneos	30
2.5.3. Condiciones de contorno multiescala	31
2.6. Modelos híbridos atómico-continuos (HAC)	31
2.7. Modelos continuos	32
2.7.1. El modelo viga de Navier	32
2.7.2. El modelo pieza flexible 1D	35
2.7.3. El modelo lámina	35
2.7.4. Método de los elementos finitos (MEF)	36
3. Caracterización estática y cinemática del modelo MSM	39
3.1. Descripción conceptual del modelo MSM <i>stick-spiral</i>	39
3.2. Revisión abreviada de la formulación SVD	40
3.2.1. Ecuaciones cinemáticas	40
3.2.2. Ecuaciones de equilibrio	41
3.2.3. Relación de contragradencia	42
3.2.4. Descomposición en valores singulares (SVD) de la matriz de equilibrio.	42
3.3. Aplicación de la descomposición en valores singulares al modelo MSM	43
3.3.1. Ecuaciones cinemáticas incluyendo distorsiones angulares	43
3.3.2. Ecuaciones de equilibrio incluyendo resortes angulares.	47
3.3.3. Aplicación de las condiciones de contorno	48
3.4. Resultados y discusión	49
4. Formulación general del modelo y su aplicación a nanotubos monocapa	53
4.1. Desarrollo energético de la formulación en rigidez	53
4.1.1. Ecuaciones cinemáticas	53

4.1.2. Ecuaciones de equilibrio	54
4.1.3. Ecuaciones constitutivas	54
4.1.4. Formulación matricial en rigidez	57
4.1.5. El problema de la predeformación de SWNTs	60
4.2. Implementación numérica	62
4.2.1. Potencial AMBER	62
4.2.2. Potencial Morse	63
4.3. Resultados y discusión	65
4.3.1. Comportamiento a tracción	65
4.3.2. Comportamiento a compresión	73
4.3.3. Comportamiento a flexión	78
4.3.4. Comportamiento a torsión	84
4.3.5. Deducción del coeficiente de Poisson	88
4.4. Sumario del análisis lineal	90
5. Extensión de la formulación a la no linealidad geométrica	93
5.1. Ecuaciones de campo de la formulación no lineal	94
5.1.1. Ecuaciones cinemáticas	94
5.1.2. Ecuaciones de equilibrio	97
5.2. Ecuaciones constitutivas	99
5.2.1. Matriz de rigidez tangente	100
5.3. Implementación numérica	103
5.3.1. Planteamiento del problema numérico	104
5.3.2. Descripción del proceso incremental-iterativo	106
5.4. Resultados numéricos y discusión	108
5.4.1. Comportamiento a compresión	108
5.4.2. Comportamiento a flexión	113
5.4.3. Comportamiento a torsión	120
5.5. Sumario del análisis geoméricamente no lineal	125
6. Aproximación energética a la geometría inicial del nanotubo	127
6.1. Hipótesis iniciales y potenciales simplificados	127
6.2. Determinación del diámetro inicial para SWNTs ZigZag	128
6.2.1. Desarrollo con potencial AMBER	130
6.2.2. Desarrollo con potencial Morse	132
6.3. Determinación del diámetro inicial para SWNTs Armchair.	133
6.3.1. Desarrollo con potencial AMBER	136
6.3.2. Desarrollo con potencial Morse	137
6.4. Determinación del diámetro inicial para SWNTs Chiral	139
6.4.1. Desarrollo con potencial AMBER	143
6.4.2. Desarrollo con potencial Morse	146
6.5. Consideraciones sobre la coherencia de la formulación	147
6.5.1. Comprobación Chiral-ZigZag	147
6.5.2. Comprobación Chiral-Armchair	148
7. Conclusiones y líneas de investigación propuestas	151
7.1. Resumen del trabajo realizado	151
7.2. Conclusiones	152
7.2.1. En relación con la formulación del modelo	152
7.2.2. En relación con los parámetros mecánicos equivalentes	153
7.2.3. En relación con la obtención de deformaciones críticas	154
7.3. Aportaciones originales	155
7.4. Líneas de investigación propuestas	156
7.4.1. Introducción del pretensado en el análisis geoméricamente no lineal	156
7.4.2. Deducción del mapeo generador de la geometría inicial	158
7.4.3. Extensión de la formulación a la dinámica	158
7.4.4. Análisis estructural de MWNTs y nanosistemas	159
7.4.5. Introducción de la interacción con fluidos y otros entornos	160

A. Notación y Acrónimos	161
A.1. Notación	161
A.2. Índice de acrónimos	167
Bibliografía	176