

Resum

Des de el seu descobriment en 1991, els nanotubs de Carbó han despertat un gran interès per banda de la comunitat científica e investigadora arreu el món. Això es debut en gran mesura a les excepcionals propietats mecàniques, tèrmiques y elèctriques que presenten. Les seues extraordinàries característiques els confereixen prometedores aplicacions al camp de la biomecànica, la indústria aeronàutica y la enginyeria. En qualsevol cas, la utilització extensiva d'aquestos nous materials en un futur pròxim passa necessàriament per la millora dels actuals processos de fabricació, fins l'obtenció de nanotubs d'una forma econòmicament rentable.

Una part important de la investigació relacionada amb estes singulars moléculas ha sigut destinada a la predicció de la seua resposta tenso-deformacional davant d'accions o estímuls externs. En alguns casos, els models existents han sigut aplicats al comportament resistent dels nanotubs, mentres que en altres es defineixen nous models amb característiques pròpies. Com a punt mitjà entre els costosos models de dinàmica molecular i els models clàssics derivats de la mecànica del continu, apareixen els models de mecànica estructural molecular (entre ells, el *stick-spiral*), que permeten descriure l'estructura atòmica del nanotub a un cost computacional raonable.

Aquesta tesi doctoral té per objecte la formulació general del model *stick-spiral* i la seua aplicació als nanotubs de Carbó monocapa. S'ha explorat l'esmentada formulació i els seus resultats tant al marc del l'anàlisi geomètricament lineal com al no lineal, además de contrastar les possibles diferències en la resposta estructural dels nanotubs debut a la consideració de dos potencials interatòmics (AMBER i Morse).

En la primera part del treball s'ha estudiat la indeterminació estàtica i cinemàtica del model mitjançant una adaptació de la descomposició en valors singulars de Pellegrino y Calladine per a estructures articulades, amb l'objectiu de trobar l'existència de solucions estàticament admissibles. Aquest estudi permet establir les equacions cinemàtiques i estàtiques de cada element constituent del model al camp de la linealitat, així com plantejar les característiques del muntatge de les matrius cinemàtiques i de equilibri dins del model estructural complet. Aquest primer anàlisi ha posat de relleu la verificació de la relació de contragradiència per al nostre model, i permet establir la determinació cinemàtica del sistema en funció de les condicions de contron existents, així com l'elevada indeterminació estàtica interna que assegura l'existència de solucions donada una configuració de les càrregues externes.

En una segona etapa s'adreça l'anàlisi geomètricament lineal del model mitjançant una formulació en rigidesa completament general e independent de la situació de càrrega per mitjà de l'aplicació sistemàtica de l'ecuació de treballs virtuals als elements estructurals, així com al sistema complet. Es proporcionen expressions tancades per a les matrius de rigidesa de cada element i es demostra la verificació del muntatge booleà al model. Adicionalment, es presta especial atenció a la curvatura inicial del nanotub, incloent un sistema d'esforços inicials (preenergía o pretensat) que tendeix a estabilitzar la secció transversal i acurtar el nanotub. Com a paràmetres de comparació, s'estimen les característiques mecàniques del nanotub com a conjunt davall dels esquemes de càrrega habituals en peçes allargades (tracció, compressió, flexió i torsió), lo qual ha permés validar la formulació comparant resultats amb altres autros, com ara Natsuki i Endo; tot plegat considerant dos potencials

interatòmics diferents, per a trobar l'influència de la no linealitat mecànica en la resposta final. No obstant això, es critica la validesa de les esmentades característiques mecàniques debut a la seua dependència de certs paràmetres geomètrics com ara el gruix de paret equivalent, de determinació controvertida. Adicionalment, es descriuen els avantatges del model de la tèsi en front de la dubtosa aplicabilitat dels models continus clàssics i respecte als computacionalment costosos mètodes de dinàmica molecular.

Més endavant, es du a terme l'anàlisi del comportament de nanotubs davant la inestabilitat des d'un punt de vista geomètricament no lineal. El desenrollament d'expressions simbòliques per a la matriu de rigidesa tangent i la demostració del muntatge booleà al cas no lineal posen de relleu la potència de la formulació en l'obtenció de deformacions crítiques amb un esforç computacional raonable. Des del punt de vista numèric, s'han implementat algoritms incrementals-iteratius per a cada potencial interatòmic considerat, de forma que permeteren verificar que la no linealitat geomètrica es desenvolupa prèviament a la constitutiva, d'acord amb Falvo et al. e Iijima et al. Com resultats es proporcionen les trajectòries d'equilibri no lineals, les deformacions crítiques davall els esquemes de càrrega habituals en peçes allargades i les geometries deformades a la fi del procés de càrrega.

Finalment, s'estudia l'adequació de la geometria inicial a la proporcionada pel mapeu conforme sobre una superfície cilíndrica ideal. En concret, es va determinar el diàmetre inicial del cilindre mitjançant la minimització de l'energia total del sistema per a les tres quiralitats, suposats nuls els allargaments d'enllaç respecte a la longitud de referència sobre la lámina de grafit. Els diàmetres i esforços obtinguts es varen contrastar amb els resultats de l'anàlisi lineal per al model de la tèsi, trobant una íntima coincidència entre els valors d'eixidada de tots dos procediments. La consideració d'esta nova geometria inicial representa una via alternativa en la introducció de la curvatura del nanotub al seu comportament mecànic.