

# Resumen

Desde su descubrimiento en 1991, los nanotubos de carbono han despertado un gran interés por parte de la comunidad científica e investigadora en todo el mundo. Esto es debido en gran medida a las excepcionales propiedades mecánicas, térmicas y eléctricas que presentan. Sus extraordinarias características les confieren prometedoras aplicaciones en el campo de la biomecánica, la industria aeronáutica y la ingeniería. En cualquier caso, la utilización extensiva de estos nuevos materiales en un futuro próximo pasa necesariamente por la mejora de los actuales procesos de fabricación, hasta la obtención de nanotubos de una forma económicamente rentable.

Una parte importante de la investigación relacionada con estas singulares moléculas se ha destinado a la predicción de su respuesta tenso-deformacional frente a acciones o estímulos externos. En algunos casos se han aplicado modelos ya existentes al comportamiento resistente de los nanotubos, mientras que en otros se han definido nuevos modelos con características propias. Como punto medio entre los costosos modelos de dinámica molecular y los modelos clásicos derivados de la mecánica del continuo, aparecen los modelos de mecánica estructural molecular (entre ellos, el *stick-spiral*), que permiten describir la estructura atómica del nanotubo a un coste computacional razonable.

Esta tesis doctoral tiene por objeto la formulación general del modelo *stick-spiral* y su aplicación a los nanotubos de carbono monocapa. Se ha explorado dicha formulación y sus resultados tanto en el marco del análisis geoméricamente lineal como en el no lineal, además de contrastar las posibles diferencias en la respuesta estructural de los nanotubos debido a la consideración de dos potenciales interatómicos (AMBER y Morse).

En la primera parte del trabajo se ha estudiado la indeterminación estática y cinemática del modelo mediante una adaptación de la descomposición en valores singulares de Pellegrino y Calladine para estructuras articuladas, con el objetivo de averiguar la existencia de soluciones estáticamente admisibles. Este estudio permite establecer las ecuaciones cinemáticas y estáticas de cada elemento constituyente del modelo en el rango de la linealidad, así como plantear las características del ensamblaje de las matrices cinemáticas y de equilibrio en el modelo estructural completo. Este primer análisis ha puesto de manifiesto la verificación de la relación de contragradencia para nuestro modelo y permite establecer la determinación cinemática del sistema en función de las condiciones de contorno presentes, así como la alta indeterminación estática interna que asegura la existencia de soluciones dada una determinada configuración de las cargas externas.

En una segunda etapa se aborda el análisis geoméricamente lineal del modelo mediante una formulación en rigidez completamente general e independiente de la situación de carga mediante la aplicación sistemática de la ecuación de trabajos virtuales a los elementos estructurales, así como al sistema completo. Se proporcionan expresiones cerradas para las matrices de rigidez de cada elemento y se demuestra la verificación del ensamblaje booleano en el modelo. Adicionalmente, se presta especial atención a la curvatura inicial del nanotubo, incluyendo un sistema de esfuerzos iniciales (preenergía o pretensado) que tiende a estabilizar la sección transversal y acortar el nanotubo. Como parámetros de contraste, se estiman las características mecánicas del nanotubo como conjunto bajo los esquemas de carga habituales en piezas alargadas (tracción, compresión, flexión y torsión), lo cual ha permitido validar la formulación comparando resultados con otros autores, como Natsuki y

Endo; todo ello considerando dos potenciales interatómicos distintos, para averiguar la influencia de la no linealidad mecánica en la respuesta final. No obstante, se critica la validez de tales características mecánicas debido a su dependencia de ciertos parámetros geométricos como el espesor de pared equivalente, de determinación controvertida. Adicionalmente, se describen las ventajas del modelo de la tesis en relación a la dudosa aplicabilidad de los modelos continuos clásicos y respecto a los computacionalmente costosos métodos de dinámica molecular.

Posteriormente, se lleva a cabo el análisis del comportamiento de nanotubos frente a la inestabilidad desde un punto de vista geoméricamente no lineal. El desarrollo de expresiones simbólicas para la matriz de rigidez tangente y la demostración del ensamblaje booleano en el caso no lineal ponen de manifiesto la potencia de la formulación en la obtención de deformaciones críticas con un esfuerzo computacional razonable. Desde el punto de vista numérico, se han implementado algoritmos incrementales-iterativos para cada uno de los potenciales interatómicos considerados, de forma que permitieron verificar que la no linealidad geométrica se desencadena previamente a la constitutiva, de acuerdo con Falvo et al. e Iijima et al. Como resultados se proporcionan las trayectorias de equilibrio no lineales, las deformaciones críticas bajo los esquemas de carga habituales en piezas alargadas y las geometrías deformadas al final del proceso de carga.

Finalmente, se estudia la adecuación de la geometría inicial a la proporcionada por el mapeo conforme sobre una superficie cilíndrica ideal. En concreto, se determinó el diámetro inicial del cilindro mediante la minimización de la energía total del sistema para las tres quiralidades, supuestos nulos los alargamientos de enlace respecto a la longitud de referencia sobre la lámina plana de grafeno. Los diámetros y esfuerzos obtenidos se contrastaron con los resultados del análisis lineal para el modelo de la tesis, hallando una íntima coincidencia entre los valores de salida de ambos procedimientos. La consideración de esta nueva geometría inicial representa una vía alternativa en la introducción de la curvatura del nanotubo en su comportamiento mecánico.