

## Estudio de propiedades mecánicas en nanotubos de carbono mediante FEA

LOZANO-LUNA, Alfonso\*†, RAZÓN-GONZÁLEZ, Juan Pablo y TAPIA-TINOCO, Guillermo

*Instituto Tecnológico Superior de Irapuato. Carretera Irapuato - Silao Km. 12.5, C.P. 36821 Irapuato, Gto*

Recibido 2 Marzo, 2017; Aceptado 04 Junio, 2017

### Resumen

Se desarrolla una metodología para la simulación y el diseño de nanoestructuras de carbono conocidas como nanotubos de pared simple (SWCNT), en sus tres configuraciones: butaca, zig-zag y chiral (Anexo 1). Se establece una equivalencia entre mecánica molecular y estructural para establecer los parámetros de los elementos viga (Beams) que se usaron en un programa de FEA (Finite Element Analisis) para modelación y simulación de los nanotubos. Estos sistemas se someten a cargas de tensión, torsión y flexión para su estudio. Se analiza el módulo de elasticidad y rigidez, calculando valores de alrededor de 320 GPa y 107 GPa, respectivamente. Los análisis realizados muestran que existe una dependencia entre los módulos de elasticidad y rigidez, así como la rigidez a tensión, flexión y torsión con el diámetro del nanotubo, siendo la configuración zigzag la que mostró el comportamiento más regular.

**Nanotubo de carbono, análisis de elemento finito, propiedades mecánicas, dinámica molecular, Beams**

### Abstract

A methodology to simulate and design carbon nanostructures is developed for simple wall nanotubes in its three configurations known as: chiral, armchair and zig-zag (see Annexed 1). An equivalence between molecular mechanic and structural mechanic is established in order to find the parameters of the beam, that was used with FEA (Finite Element Analisis) program to modeling and simulate nanotubes. These systems are analyzed under tension, torsion and flexion loads. The elasticity and shear modules were computed and the values found are about 320 and 107 GPa, respectively. The analyses show that exist a dependency between elasticity and shear modules, as well as tension, bending and torsion stiffness and the nanotube diameter, zigzag configuration being the one that shows more regular behavior.

**Carbon nanotube, finite element analysis, mechanical properties, molecular dynamic, Beams**

**Citación:** LOZANO-LUNA, Alfonso, RAZÓN-GONZÁLEZ, Juan Pablo y TAPIA-TINOCO, Guillermo. Estudio de propiedades mecánicas en nanotubos de carbono mediante FEA. Revista de Simulación y Laboratorio 2017, 4-11: 13-21.

\*Correspondencia al Autor (Correo Electrónico: [alozano@itesi.edu.mx](mailto:alozano@itesi.edu.mx))

†Investigador contribuyendo como primer autor

## Introducción

Desde su descubrimiento por Lijima en 1991 [A1] los nanotubos de carbono son un material con grandes perspectivas para usarse como una fase de refuerzo en los materiales compuestos principalmente donde la matriz es un polímero. Dos de las principales cuestiones a responder serían: la efectividad en la transferencia de carga en la interface de los nanotubos y la matriz polimérica y la dependencia de las propiedades de los nanotubos con su estructura (geometría y defectos estructurales). Actualmente se han realizado análisis experimentales pero no son muy factibles por las dimensiones nanométricas, por lo que se opta por el análisis teórico en este caso simulación con un paquete de elemento finito (ANSYS).

Para nuestro análisis se estable una semejanza entre mecánica molecular y mecánica estructural, para simular los enlaces covalentes carbono-carbono con elementos viga en nuestro modelo para elemento finito. Posteriormente se realiza la simulación en ANSYS obteniéndose resultados que nos muestran la dependencia de las propiedades de los nanotubos con sus geometrías.

## Estado del arte

Algunas investigaciones presentan resultados del uso de nanotubos de carbono como material de refuerzo en materiales compuestos. Liu and Chen [A3] analizaron materiales compuestos usando un (RVE) elemento de volumen representativo basado en mecánica continua y el método de elementos finitos (MEF). Los resultados que obtuvieron fueron que con la adición de una fracción volumétrica de 2% y 5% de nanotubos de carbono en la matriz del material compuesto, la rigidez del compuesto puede incrementarse hasta 0.7 y 9.7 veces para el caso de fibras cortas y largas de nanotubos, respectivamente.

Por su parte Lau, Chipara, Ling y Hui [A4] analizan las nanoestructuras de carbono para conocer el módulo de elasticidad a tensión, usando un microscopio de fuerza atómica (AFM), valores desde 270 hasta 950 GPa fueron medidos para nanotubos de pared múltiple (MWCNTs). Además X. Sun y W. Shao [A5] calcularon en base a mecánica molecular basada en aproximación de elemento finito, la rigidez a tensión y la resistencia a la tensión de nanotubos de carbono de pared simple.

La rigidez a la tensión está alrededor de 0.4 TPa, y la resistencia a la tensión está entre 77 y 101 GPa. Además la rigidez a tensión es independiente del diámetro del tubo y de la helicidad. El módulo de Poisson está entre 0.31 y 0.35, y disminuye con el aumento en el diámetro del tubo. La resistencia a la tensión es independiente del diámetro del tubo, pero ligeramente dependiente de la helicidad del tubo.

Los trabajos antes mencionados se realizaron para conocer el comportamiento de los nanotubos como refuerzo para los materiales compuestos. También existen trabajos como el de Tserpes y Papanikos [A6] que hicieron un modelo de elementos finitos para las configuraciones de SWCNTs como son butaca, zigzag y chiral. El modelo se basa en que los nanotubos cuando son sometidos a carga se comportan como una estructura en tres dimensiones.

El modelo se uso para investigar los efectos del espesor de pared, el diámetro y el ángulo de helicidad en el módulo de elasticidad de SWCNTs. Los valores del módulo de elasticidad fueron parecidos a los ya encontrados en literatura. Los resultados sugieren que el módulo de Young es inversamente proporcional al espesor de pared del tubo.

Se encontró además la dependencia del módulo de elasticidad con el diámetro y el ángulo de helicidad de los nanotubos; incrementando el diámetro del tubo aumenta el valor del módulo de elasticidad. Por su parte A. L. Kalamkarov [A7] estudió el comportamiento de los nanotubos de carbono mediante el método analítico y el método de elementos finitos. Logrando valores para el módulo de elasticidad y rigidez, además de estudiar la dependencia de las propiedades con el diámetro del tubo.

Los resultados obtenidos fueron los siguientes: mediante el método analítico se encontró que el módulo de elasticidad de un nanotubo de pared simple (SWCNT) fue 1.71 TPa y el de rigidez 0.32 TPa. En el análisis numérico por elementos finitos los enlaces covalentes fueron modelados mediante elementos viga, y para nanotubos de pared múltiple las fuerzas de Van der Waals entre tubos externos e internos se modelaron con elementos resorte no lineales, los módulos de elasticidad variaron entre 0.97 TPa a 1.05 TPa para SWCNTs, el de corte vario desde 0.14 a .47 TPa, además éste último resultado más dependiente al diámetro del tubo que el de tensión. Para nanotubos de doble pared el módulo de Young varió desde 1.32 a 1.39 TPa, mientras que el de corte varió de 0.37 a 0.62 TPa. Con respecto a nanotubos de pared múltiple (MWCNT) el módulo de elasticidad tomó valores desde 1.39 a 1.58 TPa y el de rigidez desde 0.44 a 0.47 TPa (esto para tubos de tres y cuatro paredes), siendo éste último más dependiente al diámetro del tubo que el módulo de Young.

### Generación de un modelo matemático

Para su estudio numérico los nanotubos de carbono son representados en un modelo estructural en tres dimensiones (como se menciona en el planteamiento del problema).

Como los átomos de carbono en ambos tanto en las hojas de grafito como en los nanotubos de carbono se mantienen unidos por los enlaces covalentes de una longitud de enlace característica, los átomos de carbono pueden ser vistos como puntos materiales que están conectados por elementos viga. (Li y Chou 2003) [A8]. Una correlación entre mecánica molecular y mecánica estructural se usa para establecer una equivalencia entre ambos modelos. El modelo estructural lo analizamos usando elemento finito y la respuesta elástica del modelo estructural se usa para calcular las propiedades del nanotubo de carbono.

### Correlación entre mecánica molecular y estructural

A un nivel molecular la interacción entre átomos individuales de carbono puede ser descrita usando campos de fuerzas las correspondientes interacciones núcleo-núcleo y electrón-núcleo (Machida, 1999). Si las interacciones electroestáticas son despreciadas, la energía potencial total puede ser obtenida como la suma de energías debida a la interacción de valencia (o enlace) y no enlace, esto es:

$$U_{\text{TOTAL}} = \sum U_r + \sum U_\theta + \sum U_\phi + \sum U_{\text{vdw}} \quad (1)$$

Donde:

$U_r$ =acortamiento (estiramiento) de enlace.

$U_\theta$ =ángulo de flexión de enlace

$U_\phi$ =torsión

$U_{\text{vdw}}$ =fuerzas de Vander Waals

Asumiendo que la interacción covalente entre átomos de carbono puede ser representada usando funciones armónicas simples, las energías potenciales vibracionales debidas a la interacción entre átomos de carbono covalentemente unidos puede ser representada por:

$$U_r = \frac{1}{2} K_r (r - r_0)^2 = \frac{1}{2} K_r (\Delta r)^2 \quad (2)$$

$$U_\theta = \frac{1}{2} K_\theta (\theta - \theta_0)^2 = \frac{1}{2} K_\theta (\Delta \theta)^2 \quad (3)$$

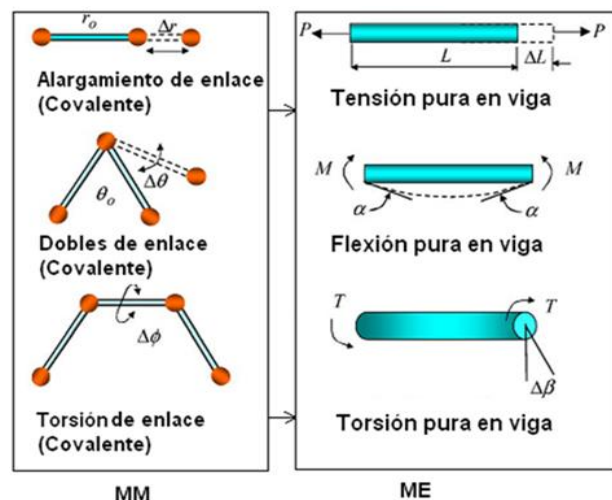
$$U_{\phi} = \frac{1}{2} K_{\phi} (\Delta\phi)^2 \quad (4)$$

Donde:

$r_0, \theta_0$  = distancia interatómica y ángulo de enlace sin deformación

$r, \theta$  = después de deformación

$K_r, K_{\theta}, K_{\phi}$  = constantes de fuerza asociadas a estrechamiento, flexión y torsión del enlace químico.



**Figura 1** Correlación entre mecánica molecular (MM) y estructural (ME) [A8]

Debido a la naturaleza del campo de fuerzas molecular entre dos átomos, estos pueden ser tratados como fuerzas actuando entre dos uniones que son separadas por vigas estructurales o elementos resorte. Para determinar las constantes de fuerza pertenecientes a la interacción covalente podemos igualar las energías potenciales de los enlaces individuales con sus equivalentes en el modelo con elementos viga.

Los elementos viga son considerados isotrópicos, con longitud  $L$ , área de sección transversal  $A$  y momento de inercia  $I$ . La energía de deformación bajo carga axial pura  $P$  sería:

$$U_p = \int_0^L \frac{P^2}{2EA} dL = \frac{EA}{2L} (\Delta L)^2 \quad (5)$$

La energía de deformación bajo momento flexionante  $M$  sería:

$$U_M = \int_0^L \frac{M^2}{2EI} dL = \frac{EI}{2L} (\Delta\alpha)^2 \quad (6)$$

La energía de deformación debida a un par torsor  $T$  es:

$$U_T = \int_0^L \frac{T^2}{2GJ} dL = \frac{GJ}{2L} (\Delta\beta)^2 \quad (7)$$

Ahora si igualamos:

$$\Delta L = \Delta r \quad \text{de ecuación (2) y (5)}$$

$$\Delta\theta = \Delta\alpha \quad \text{de ecuación (3) y (6)}$$

$$\Delta\phi = \Delta\beta \quad \text{de ecuación (4) y (7)}$$

Se puede obtener los módulos de rigidez al igualar las ecuaciones de mecánica molecular con estructural. Módulo de rigidez a tensión, flexión y torsión respectivamente:

$$\frac{EA}{L} = K_r, \quad \frac{EI}{L} = K_{\theta}, \quad \frac{GJ}{L} = K_{\phi}$$

Con los módulos de rigidez podemos obtener nuestros parámetros geométricos y propiedades del material como sigue:

Diámetro del elemento viga:

$$d_d = 4 \sqrt{\frac{K_{\theta}}{K_r}} \quad (8)$$

Módulo de elasticidad:

$$E = \frac{K_r^2 L}{4\pi K_{\theta}} \quad (9)$$

Módulo de rigidez al corte

$$G = \frac{K_r^2 L K_{\phi}}{8\pi K_{\theta}^2} \quad (10)$$

Considerando las constantes de fuerza de trabajos anteriores como el de Allinger 1989 [A9], Cornell 1995 [A10] y Jorgensen and Severance 1990 [A11], tenemos:

LOZANO-LUNA, Alfonso, RAZÓN-GONZÁLEZ, Juan Pablo y TAPIA-TINOCO, Guillermo. Estudio de propiedades mecánicas en nanotubos de carbono mediante FEA. Revista de Simulación y Laboratorio 2017.

$$K_r = 6.52 \times 10^{-7} \text{ N/nm}$$

$$K_\theta = 8.76 \times 10^{-10} \text{ N nm/rad}^2$$

$$K_\phi = 2.78 \times 10^{-10} \text{ N nm/rad}^2$$

Sustituyendo valores encontramos que los parámetros para los elementos viga serían:

$$E = 5.488 \times 10^{-8} \text{ N/Å}^2$$

$$G = 8.701 \times 10^{-9} \text{ N/Å}^2$$

$$d_b = 1.466 \text{ Å}$$

Para el cálculo del módulo de elasticidad del nanotubo usaremos la siguiente relación proveniente de la ley de Hook:

$$E_{NT} = \frac{\sigma}{\varepsilon} = \frac{P/A_0}{\Delta L/L_0} \quad (11)$$

Donde:

P= carga total aplicada

A<sub>0</sub> = área transversal de un tubo equivalente continuo

ΔL=deformación axial calculada de FE (elemento finito)

L<sub>0</sub>= longitud del tubo

$$A_0 = \pi \left[ \left( R_{NT} + \frac{t}{2} \right)^2 - \left( R_{NT} - \frac{t}{2} \right)^2 \right] \quad (12)$$

Donde t es un valor de espesor de pared del tubo establecido en muchos artículos como t=0.68nm [A7]. Para el módulo de rigidez G tenemos:

$$G_{NT} = \frac{TL_0}{\theta J_0} \quad (13)$$

Donde:

T = torque aplicado

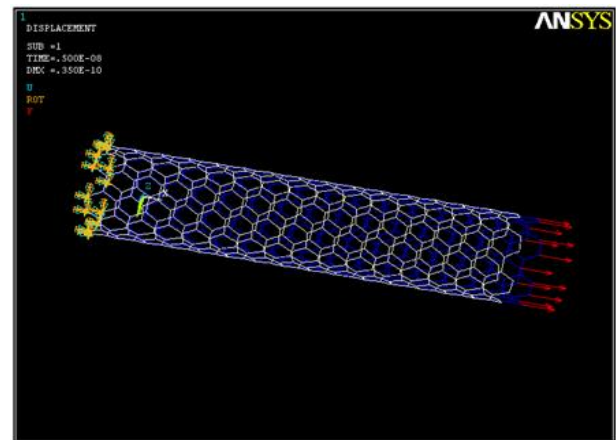
θ = ángulo de torsión sacado de FE

J<sub>0</sub> = momento polar de inercia de tubo equivalente continuo

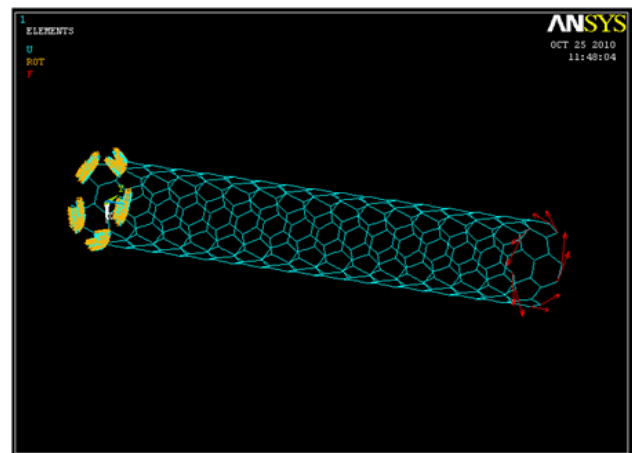
$$J_0 = \frac{\pi}{2} \left[ \left( R_{NT} + \frac{t}{2} \right)^4 - \left( R_{NT} - \frac{t}{2} \right)^4 \right] \quad (14)$$

## Simulación numérica

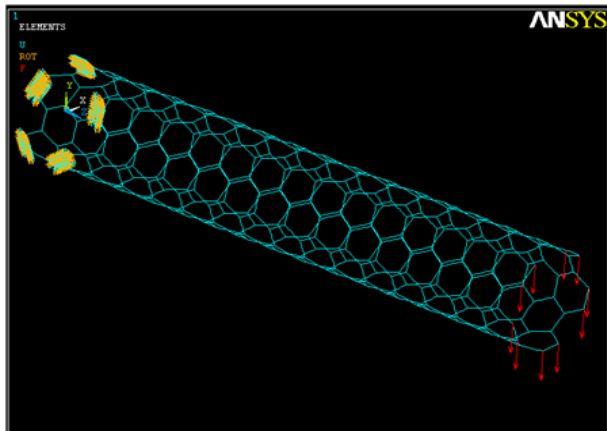
Una vez que se obtuvieron los parámetros que se usarían en los elementos viga para los enlaces carbono-carbono, se hizo la simulación en el paquete de elemento finito, estableciéndose las condiciones de frontera como se muestra en la figura 3, 4 y 5. La figura 6 muestra los elementos viga mallados.



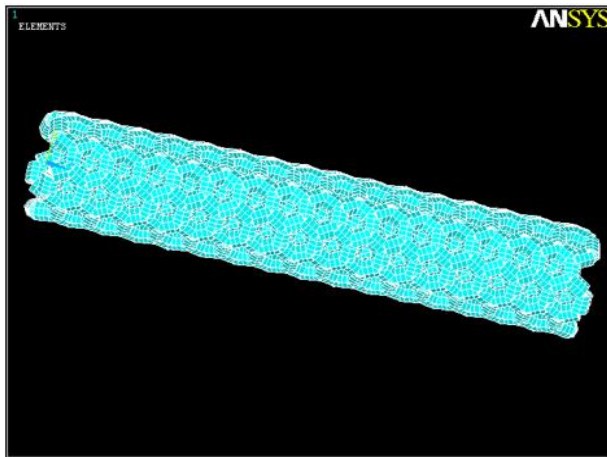
**Figura 3** Condiciones de frontera para el análisis del nanotubo de carbono a tensión



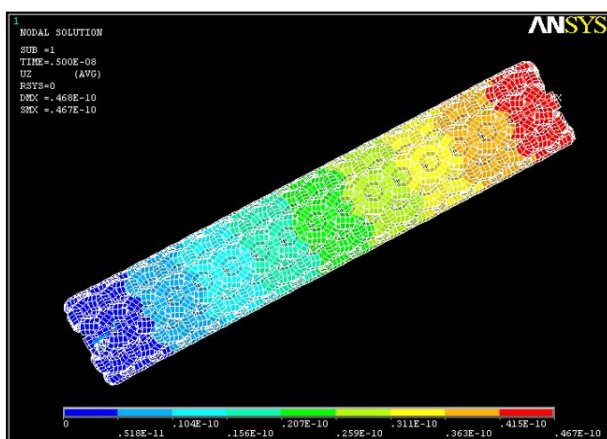
**Figura 4** Condiciones de frontera para el análisis del nanotubo de carbono a torsión



**Figura 5** Condiciones de frontera para el análisis del nanotubo de carbono a tensión



**Figura 6** Nanotubo de carbono mallado



**Figura 7** Análisis en el paquete de elemento finito se muestran los desplazamientos

## Resultados y discusión

En las gráficas 1 y 2 se muestra el comportamiento de los módulos de elasticidad y rigidez de los nanotubos en sus tres configuraciones: zig-zag, butaca y chiral contra el diámetro de los mismos. Las gráficas 3, 4 y 5 muestran el comportamiento rigidez a tensión, flexión y torsión contra el diámetro de los nanotubos de las tres configuraciones de nanotubos.

El módulo de elasticidad para los SWCNTs varió desde 0.3009 TPa hasta 0.3261 TPa para valores de diámetro de 4.69 Å hasta 32.55 Å. Encontrándose que el módulo para el mismo diámetro es mayor en la configuración chiral y es menor en la configuración zigzag. Estos resultados muestran valores menores a los reportados en la mayoría de los trabajos realizados en el tema que reportan valores mayores para el módulo de elasticidad; Tserpes y Papanikos [A6] obtuvieron valores del módulo de elasticidad desde 0.952 TPa hasta 1.066 TPa para un diámetro entre 3.91 Å y 27.14 c, Kalamkarov [A7] obtuvo valores desde 0.96 TPa hasta 1.04 TPa para diámetros desde 4 Å hasta 35 Å, finalmente Li y Chou [A8] encontraron valores para el módulo entre 0.88 TPa y 1.03 TPa.

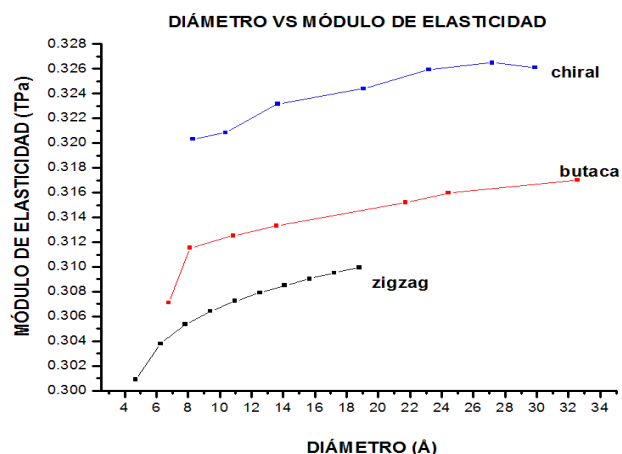
El módulo de rigidez varió desde 0.045 TPa hasta 0.107 TPa para diámetros de 4.69 Å hasta 32.55 Å. Encontrándose que el módulo de rigidez es mayor en la configuración zigzag y es menor en la configuración butaca. Estos resultados al igual que para el módulo de elasticidad son valores menores a los reportados en la mayoría de los trabajos realizados en el tema; Tserpes y Papanikos [A6] obtuvieron valores del módulo de rigidez desde 0,242 TPa hasta 0.504 TPa, Kalamkarov [A7] obtuvo valores de 0.14-0.47 TPa y finalmente Li y Chou [A8] encontraron valores entre 0.225 TPa y 0.475 TPa.

El comportamiento lineal que presento la rigidez a la tensión muestra que las tres configuraciones de nanotubos de carbono se comportan de forma estable ante cargas axiales. El valor de la rigidez se incrementó alrededor de 3 veces para las tres configuraciones, esto para diámetros desde 6.26 Å hasta 19.05 Å.

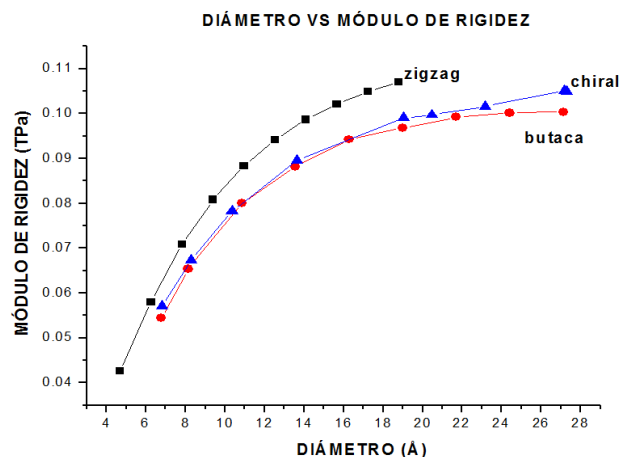
La rigidez a la flexión fue mayor para la configuración chiral, en cuanto al comportamiento: el valor de la rigidez para esta configuración aumentó alrededor de 18 veces para una variación en el diámetro desde 6.8 Å hasta 19.05Å, se incrementó 32 veces aproximadamente para la configuración zigzag y 12 veces para la butaca.

En la rigidez a torsión el comportamiento diámetro-rigidez fue regular para las tres configuraciones, mostrándose un incremento mayor en la rigidez para la configuración zigzag de aproximadamente 26 veces su valor contra 22 veces de las configuraciones butaca y chiral, esto para la misma variación del diámetro.

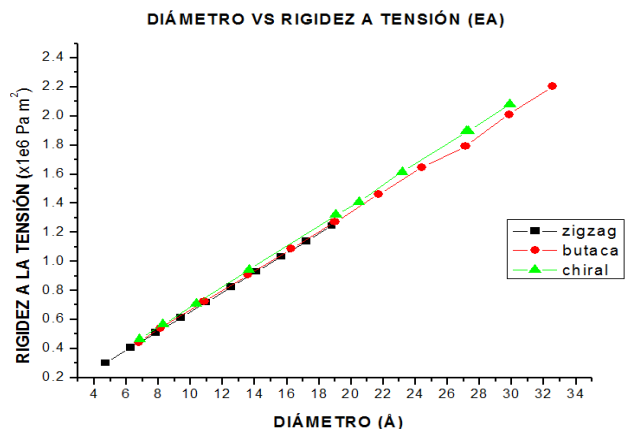
Finalmente, las propiedades de los nanotubos de carbono como: el módulo de elasticidad, el módulo de rigidez y la rigidez a tensión, flexión y torsión muestran sensibilidad ante el aumento del diámetro del nanotubo, mostrando diferentes comportamientos ante los modos de carga: tensión, flexión y torsión, siendo la configuración zigzag la que muestra un comportamiento más regular.



**Grafica 1** Módulo de elasticidad (E) contra diámetro de nanotubo en las tres configuraciones

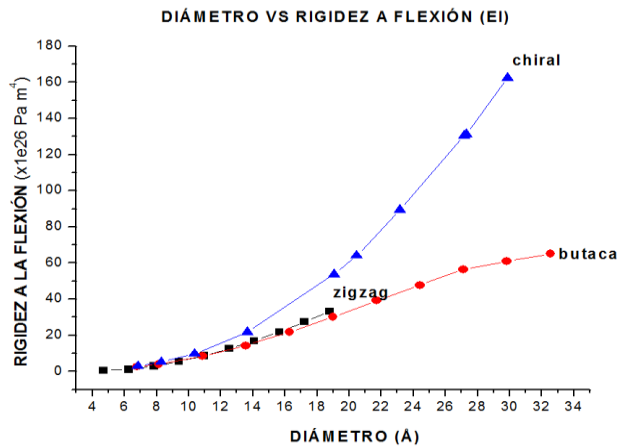


**Grafica 2** Módulo de rigidez (G) contra diámetro de nanotubo en las tres configuraciones

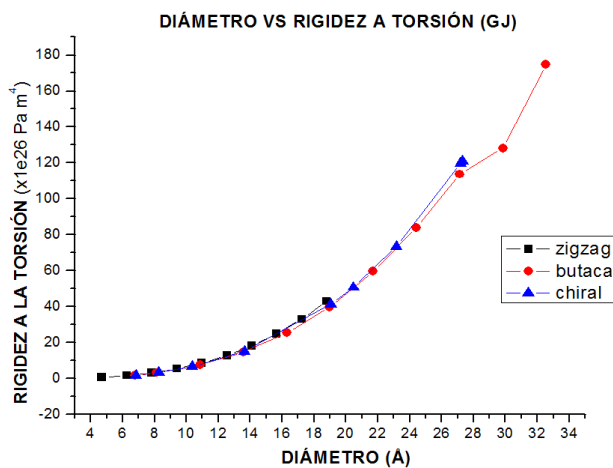


**Grafica 3** Rigidez a la tensión contra diámetro de nanotubo en las tres configuraciones





Gráfica 4 Rigidez a flexión contra diámetro



Gráfica 5 Rigidez a torsión contra diámetro

## Conclusiones

Se logró modelar un sistema de enlaces de carbono que simula la estructura cristalina de las diferentes configuraciones de los nanotubos de carbono. Además, se simuló mediante un paquete de elemento finito los nanotubos de carbono sometidos a distintos modos de carga, obteniendo su comportamiento ante dichas condiciones.

Se modelaron 31 nanotubos de carbono en total para las tres configuraciones: butaca, zigzag y chiral. Obteniendo las gráficas del comportamiento diámetro-propiedad de los nanotubos mencionados.

El modelado de nanotubos de carbono mediante un paquete de elementos finitos usando el método establecido en el presente trabajo es muy sencillo y presenta muchas ventajas en comparación con métodos de análisis químico computarizado que requiere una mayor infraestructura y tiempo.

En el presente trabajo se utilizó una relación simple entre la mecánica molecular y mecánica estructural que ayudó a realizar un análisis rápido y sencillo del comportamiento de este tipo de nanoestructura de carbono.

Las gráficas diámetro-propiedad que se obtuvieron nos permiten conocer como se ven afectadas las propiedades de los nanotubos con la variación del diámetro, además que nos marcan la pauta del comportamiento de este tipo de nanoestructuras ante distintos modos de carga, dato que resulta importante para el análisis de materiales compuestos, donde los nanotubos de carbono funcionan como refuerzo.

Finalmente, se logró el modelado y la simulación de los nanotubos de carbono, obteniendo sus propiedades mecánicas y el comportamiento de la rigidez ante los modos de carga: tensión, torsión y flexión

## Trabajos futuros

En el presente trabajo se estableció el marco de referencia para el análisis de las propiedades de los nanotubos de carbono, así como su comportamiento ante distintos modos de carga, los tipos de análisis que se pueden realizar a los nanotubos de carbono son muchos, a continuación se mencionará algunos de ellos:

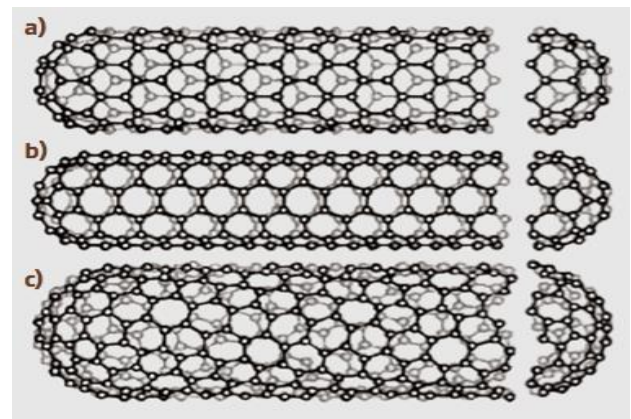


- Analizar el comportamiento de los nanotubos de carbono al introducir defectos en su estructura, se puede obtener una gráfica que muestre cómo se comporta el módulo de elasticidad con el aumento de defectos estructurales, esto para las tres configuraciones de nanotubos.
- Se puede analizar un nanotubo de carbono variando su longitud, se puede obtener la relación que tienen sus propiedades en relación con su longitud.
- Se puede hacer un análisis para la configuración chiral y obtener la relación que pueda existir entre el ángulo chiral respecto sus propiedades.

### Referencias

- [A1] Iijima, S. (1991). "Helical microtubules of graphitic carbon," *Nature*, v. 354, pp. 56.
- [A2] Collins, P. G. and P. Avouris (2000). "Nanotubes for electronics", *Scientific American*, v. December.
- [A3] Y.J. Liu, X.L. Chen, (2003) Evaluation of the effective material properties of carbon nanotube<sup>7</sup>-based composites using a nanoscale representative volume element. *Elsevier. Mechanics of Materials*. 25 69-81.
- [A4] Kin-Tak Lau, Mircea Chipara, Hang-Yin Ling, David Hui. (2004) On the effective elastic moduli of carbon nanotubos for nanocomposite structure. *Elsevier Composites: Part B* 35 95-101.
- [A5] Xuekun Sun, Wenming Zhao, (2005) Prediction of stiffness and strength of single-walled carbon nanotubos by molecular-mechanics based finite element approach. *Elsevier, Materials science and engineering*, A390 366-371.
- [A6] K.I. Tserpes, P. Papanikos, (2005) Finite element modeling of single walled carbon nanotubos, *Elsevier, Composites: Part B* 36 468-477.
- [A7] A. L. Kalamkarov, A. V. Georgiades, S. K. Rokkam, V. P. Veedu, M.N. Ghasemi-Nejhad, (2006) Analytical and numerical techniques to predict carbon nanotubos properties, *Elsevier, International Journal of Solids and structures*, 43 6832-6854.
- [A8] Li, C., Chou, T.W., 2003. A structural mechanics approach for the analysis of carbón nanotubes. *International Journal of Solids and Structures* 40, 2487-2499.
- [A9] Allinger, N.L., Yuh, Y.H., Lii, J.H., 1989. Molecular mechanics: the MM3 force field for hydrocarbons. *Journal of the American Chemical Society* 111, 8551-8556.
- [A10] W. Cornell, P. Cieplak, C. Bayly, et al., (1995) *Journal of American Chemical Society* 117 5179.
- [A11] W. Jorgensen, D. Severance, (1990) *Journal of American Chemical Society* 112 4768.

### Anexo 1



**Figura 1** Nanoestructuras de carbono. a) Zig-zag, b) Butaca, c) Chiral