

**APLICACIONES DE NANOSTRUCTURAS DE
CARBONO Y GRAFENO EN ARQUITECTURA
SIMULACIÓN DE UN MODELO TEÓRICO**

APLICACIONES DE NANOSTRUCTURAS DE CARBONO Y GRAFENO EN ARQUITECTURA

SIMULACIÓN DE UN MODELO TEÓRICO

diseño de muestras con Rhinoceros, Grasshopper y Ansys Icem

La necesidad del hormigón hoy en día es innegable. A efectos prácticos, no es más que un conjunto de varios componentes. Un conjunto de ingredientes que conforman la receta perfecta de la piedra artificial. Es decir, es una combinación de varias sustancias cuyas propiedades y aplicaciones ya se conocen, por lo tanto, es lógico pensar que, si sus componentes cambiasen, también lo harían sus propiedades. Sería el comienzo de la síntesis de un nuevo material.

¿Y si, mediante la introducción de ciertas sustancias, como microcemento dopado pudiera dotarse al hormigón de mejores propiedades mecánicas?, ¿y si tal cemento fuera capaz de soportar los esfuerzos de tracción con la misma eficacia que soporta las compresiones?, ¿y si, además, pudiera disponer de propiedades eléctricas que permitirán monitorizarlo?

¿Qué sustancias podrían convertir al hormigón en un material inteligente?

Los nanotubos de carbono han demostrado disponer de excelentes propiedades, por ello, su introducción en microcemento podría enriquecer las cualidades de otros materiales, como el hormigón.

VERÓNICA MONTORO SÁNCHEZ

GRADO EN FUNDAMENTOS DE LA
ARQUITECTURA

ETSAVA
En colaboración con **ETSA US**

2020

Tutores:

Luis-Alfonso Basterra Otero en ETSAVA
Víctor Jesús Compán Cardiel en ETSA US

RESUMEN

Mediante el empleo de diferentes softwares, se ha obtenido una serie de modelos tridimensionales. Estos modelos **representan probetas cúbicas de un material teórico**, que puede considerarse microcemento, en el que se habría incorporado un **aditivo a base de nanotubos de carbono**.

Las muestras totales se subdividen en grupos cuyo atributo común es la dimensión del lado del cubo, constando cada conjunto por un total de ocho modelos de iguales dimensiones pero diferente cantidad de nanotubos en su interior. El tamaño de las muestras diseñadas varía entre los 50 y los 500 nanómetros, y las densidades entre el 0,2 % y el 1,5 %, generándose un total de cuarenta muestras.

En primer lugar, se ha modelado la totalidad de las muestras. Se han **diseñado en el espacio tridimensional del programa Rhinoceros** mediante el empleo de su extensión **Grasshopper**, que permite la generación de geometrías complejas a través de herramientas de diseño paramétrico. Gracias a este complemento, el algoritmo obtenido para la generación de muestras de dimensiones y cuantías diferentes, es capaz de ejecutar esta tarea de modo eficiente con resultados óptimos y adaptados a los requerimientos de diseño.

En segundo lugar, las muestras modeladas se han sometido a un **proceso de mallado en ICEM CFD**. Las mallas originadas presentan gran capacidad de adaptación a las diferentes geometrías que componen los modelos, disminuyendo la dimensión de sus elementos conforme se aproximan a las partes que requieren más detalle de cara a una posterior simulación.

En definitiva, este trabajo ha consistido en la elaboración y preparación de las muestras para ser sometidas a una **posterior simulación en Ansys**, que requerirá del mallado de las muestras a simular para permitir su análisis a través del método de los elementos finitos. Además, este programa será el encargado de simular las propiedades de los materiales involucrados en la muestra para el **estudio de unos modelos teóricos** que se representen, de modo creíble, lo que ocurriría en un ensayo experimental real y evalúen la viabilidad e interés de su ejecución.

Using some softwares, a series of three dimensional models has been obtained. These models represent **cubic test pieces** made of microcement, in which a **carbon nanotube-based additive** has been incorporated.

Samples are divided into groups whose common attribute is the dimension of cube's side, each set consisting of a total of eight models with equal dimensions, but with different amounts of nanotubes inside. The size of the designed samples varies between 50 and 500 nanometers, and the densities from 0,2 % to 1,5 %, being generated a total number of forty samples.

Firstly, samples have been modeled. They have been **designed in the three-dimensional space of Rhinoceros, using Grasshopper** as a plug-in tool, which allows the generation of complex geometries through parametric design instruments. Thanks to this supplement, the final algorithm obtained to enable the generation of samples with different dimensions and quantities of CNTs, is capable of executing this task efficiently with optimal results adapted to the design requirements.

In second place, the samples have been **meshed in ICEM CFD**. The originated meshes have the ability to adapt to the different geometries that make up the models, reducing the dimension of the mesh elements as they approach the parts that will require more definition for a subsequent simulation.

In short, this work has consist of the sample's modeling and preparation to be subjected to a **subsequent simulation in Ansys**, which will require a previous meshing of the samples to allow their finite element analysis. In addition, this program will be in charge of **simulating the properties of the materials involved in the sample** in order to represent credibly, what would happen in an experimental test and assess the feasibility and concern of its implementation.

AGRADECIMIENTOS

Después de un casi un año de esfuerzo, aquí está mi Trabajo de Fin de Grado. Se trata de un trabajo de investigación entre la Universidad de Sevilla y la Universidad de Valladolid, consecuencia de un intercambio SICUE en último año de carrera. Agradezco a ambas instituciones la formación completa que he adquirido y a mi tutor en la ETSAVA, Luis Alfonso Basterra Otero, su comprensión y tolerancia con este caso tan particular.

Este trabajo ha sido posible gracias a Víctor Jesús Compán Cardiel, mi tutor en la ETSA US, que me propuso formar parte de su equipo y me acogió incondicionalmente después de haberme conocido como alumna. Gracias a él, estoy formado parte de esta investigación.

Víctor, gracias no sólo por tutorarme y guiarme a lo largo de este proceso, sino por ayudarme y enseñarme tanto siempre desde el optimismo. Este trabajo es también tuyo, más que de nadie. Gracias, además, por ver en mí el potencial que ni si quiera yo sabía que tenía y por demostrar que un profesor puede convertirse en un mentor y un amigo. Espero seguir formando parte de este y otros proyectos juntos. Gracias Víctor, Marcelino y Laura por haber provocado que me interesara por el campo de las estructuras con vuestra magnífica forma de enseñar. Sabed que mi índice particular de mejores profesores (y personas) habéis dejado el listón muy, muy alto.

Agradecer a mi familia que hayan creído constantemente en mí y siempre se hayan interesado por mi trabajo, estando a mi lado cuando los he necesitado, y a mis amigas el apoyo y la confianza absolutos. Gracias a Adriana, Elena y Khouloud. También a mis Marías, Patricia y Laura. Vuestra confianza y apoyo han supuesto una gran ayuda que nunca olvidaré. En especial, agradecer el apoyo constante a Elena Yonte Pindado, la mejor amiga que se puede desear y la todóloga y química más profesional que conozco. Gracias por evitar que escribiera algún disparate molecular o atómico, químicamente absurdo.

Gracias también a Clara, Manolo, Antonio y Juan, los mejores arquitectos sevillanos que han compartido conmigo este par de años en Sevilla. Siento que os haya tocado a vosotros aguantarnos a los nanotubos y a mí. Gracias también a Héctor, Sergio y Elena, que me han acompañado desde el principio hasta el final de esta larga y dura, pero magnífica etapa.

Por último, gracias a Pablo por prestarme su confianza y su ayuda en todo momento, por el apoyo incondicional y por creer en mí más que nadie. También, por tenerme en un pedestal que espero llegar a merecer. Gracias por acompañarme en este camino y en los que vendrán. Este trabajo también es tuyo.

RESUMEN	2
AGRADECIMIENTOS	3
INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS	8
METODOLOGÍA GENERAL	10
CAPITULO 0: ESTADO DEL ARTE	12
NANOMATERIALES DE CARBONO APLICADOS A REFUERZOS DE ESTRUCTURAS	14
REFUERZOS CON FIBRA DE CARBONO	14
REFUERZOS CON NANOTUBOS DE CARBONO	15
APLICACIÓN DIRECTA DE NANOMATERIALES DE CARBONO EN MATERIALES	16
INTRODUCCIÓN DE NANOTUBOS DE CARBONO EN LADRILLO	16
INTRODUCCIÓN DE NANOTUBOS DE CARBONO EN LECHADAS DE CEMENTO	17
INTRODUCCIÓN DE NANOTUBOS DE CARBONO EN MORTEROS Y HORMIGONES	18
INTRODUCCIÓN DE ADITIVOS DE GRAFENO EN HORMIGONES	19
OTRAS APLICACIONES DE NANOMATERIALES	20

CARBONO	24
DESCRIPCIÓN, ESTADO EN LA NATURALEZA Y OBTENCIÓN	24
ÁTOMO DE CARBONO	26
ALÓTROPOS	27
PROPIEDADES	28
LA FIBRA DE CARBONO	30
GRAFENO	33
DESCRIPCIÓN Y ESTRUCTURA MOLECULAR	33
MÉTODOS DE OBTENCIÓN	35
PROPIEDADES	36
ALÓTROPOS DEL GRAFENO	39
FULLERENOS	41
NANOTUBOS DE CARBONO	42
OBTENCIÓN	43
CLASIFICACIÓN	44
DEFINICIÓN GEOMÉTRICA	46
PROPIEDADES	48

DISEÑO Y MODELADO DE MUESTRAS	54
OBJETIVOS	54
METODOLOGÍA	56
DISEÑO DE MODELOS TEÓRICOS	59
MODELADO TRIDIMENSIONAL EN RHINOCEROS	61
MODELO INICIAL: parametrización con Grasshopper	61
MODELO COMPLETO: aplicación de códigos en Python	75
EXPOSICIÓN DE MUESTRAS FINALES	86
CONCLUSIÓN DEL MODELADO	90

MALLADO DE MODELOS TRIDIMENSIONALES	92
INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS	93
PARÁMETROS DE DEFINICIÓN DE LAS MALLAS	94
METODOLOGÍA	95
MALLADO CON ANSYS ICEM CFD	97
COMPARACIÓN DE MODELOS	103
CONCLUSIÓN DEL MALLADO	106
<i>CAPÍTULO III: ANÁLISIS DE RESULTADOS</i>	109
EVALUACIÓN DE MODELOS OBTENIDOS PARA LA SIMULACIÓN	110
VALORACIÓN DE SOFTWARES	114
GRASSHOPPER VS DYNAMO	114
GRASSHOPPER VS HOUDINI	115
ICEM CFD vs SAP 2000	115
RESULTADOS PRELIMINARES DE LA SIMULACIÓN	118
LIMITACIONES ACTUALES DE CÁLCULO: COSTE COMPUTACIONAL	120
<i>CONCLUSIONES GENERALES</i>	124
<i>LÍNEAS FUTURAS DE INVESTIGACIÓN</i>	127

REFERENCIAS	129
BIBLIOGRAFÍA	135
ÍNDICE DE ILUSTRACIONES	138
ÍNDICE DE TABLAS	141
ÍNDICE DE GRÁFICOS	142
ANEXOS	144
ANEXO I: INTRODUCCIÓN A GRASSHOPPER	145
ANEXO II: ALGORITMO CNTSGENERATOR	148
ANEXO III: MODELOS TRIDIMENSIONALES GENERADOS	151
ANEXO IV: ALGORITMO DE MALLADO EN ICEM	165

INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

La época actual se caracteriza por ser un constante proceso de innovación y desarrollo de nuevas tecnologías. Entre todos los campos a los que se extiende este hecho, la investigación sobre **nuevos materiales** y las diferentes posibilidades que éstos ofrecen tiene cada vez más importancia y envergadura.

El ámbito de la edificación no se queda atrás. Existen, en la actualidad, investigaciones teóricas y experimentales sobre cómo aplicar estos nuevos materiales a la construcción y las estructuras que resultan enriquecedoras e innovadoras pudiendo incluso alcanzar su auge en un futuro próximo, no lejano, dada la **rapidez del desarrollo tecnológico contemporáneo**. Sin embargo, no está claro el sistema más adecuado a seguir para conseguir que los nuevos materiales se incorporen de una manera viable y rentable al campo de la edificación.

La fibra de carbono es un claro ejemplo de esta situación. Se conocen sus mejores propiedades en relación con las del acero desde la década de los setenta [43], habiendo estado ya implicado en la construcción de ciertas estructuras bajo ciertas limitaciones relacionadas con su proceso de obtención y fabricación. Otro caso es el del grafeno, material más reciente aún, cuyas aplicaciones actuales se investigan en diversos ámbitos, desde la medicina hasta la tecnología [47].

Los dos materiales citados forman parte de una familia más amplia denominado **nanomateriales del carbono**. Este conjunto está formado por la fibra de carbono, el grafeno, los fullerenos y la fibra de carbono, siendo su composición y orden dimensional los atributos comunes que los enmarcan en el grupo mencionado. Presentan dimensiones de orden nanométrico en, al menos, una de sus direcciones espaciales, cualidad que podría servir para modificar las posibilidades de los materiales desde el nivel molecular, aportándoles mejores propiedades mecánicas a través de la introducción de un aditivo más, como ya exponen numerosas referencias que se citarán a lo largo de este documento.

Sin embargo, en comparación con otros materiales, no muchos estudios han meditado sobre las propiedades de los **compuestos de cemento con nanotubos de carbono**, pues, al tratarse de una mezcla menos homogénea que otras, analizar los resultados resulta de mayor complejidad [9]. Con esto, el presente trabajo da inicio a una investigación mayor que pretende **analizar el comportamiento de materiales dopados con un aditivo basado en nanotubos de carbono**, estableciendo como objetivo servir de continuación a la exploración de las nuevas propiedades que pueden aportar los nanotubos de carbono. Todo ello a través de una simulación de modelos teóricos que aportarán información previa a los posibles ensayos experimentales.

En primer lugar, se pondrá en contexto la **actualidad real de los nanomateriales** y las investigaciones que los conciernen en el campo de la arquitectura y la construcción. Esto servirá para conocer el estado de la cuestión y supondrá unos antecedentes que marcarán ciertas premisas y aspectos a tener en cuenta en este estudio.

En segundo lugar, se proporciona una **perspectiva general de los nanomateriales del carbono** y sus propiedades. Se focaliza, especialmente, en los nanotubos de carbono y las propiedades del grafeno, pues los primeros se pueden considerar, desde un punto de vista geométrico, láminas de grafeno enrolladas respecto a un eje longitudinal.

En síntesis, **el objetivo principal de este trabajo es la elaboración de muestras virtuales que servirán para la ejecución de una simulación de modelos teóricos**, sirviendo ésta, a su vez, como antecedente inmediato a un ensayo experimental real que permita valorar si llevarlo o no a cabo es rentable. En consecuencia, los modelos aquí obtenidos deberán disponer de la **suficiente calidad para aportar unos resultados significativos** y de las condiciones geométricas y formales que **representen de modo creíble a una probeta real**¹. Todo esto, habiéndose obtenido un conocimiento de las propiedades de los nanotubos de carbono y de sus aplicaciones e investigaciones actuales, así como de los nanomateriales similares, que ponen en evidencia el potencial las sustancias de esta familia del carbono. De este modo, se llegará a un conocimiento exhaustivo del estado de la cuestión.

Para dar pie a tal estudio, en este documento se expone el proceso de diseño de las muestras y su tratamiento necesario de cara a la posterior realización de simulaciones. El proceso de diseño de las muestras finales se divide en dos grandes apartados que exponen el **modelado tridimensional** de las muestras, por un lado, y el **posterior mallado** de éstas, por otro. Ambos apartados dispondrán de unos objetivos, metodología y conclusiones propios de cara a obtener resultados meticulosos y concienzudos.

¹ Las probetas deberán representar las muestras con condiciones ideales de dispersión y disposición de los nanotubos, desde la verosimilitud. Es decir, se pretende colocar los nanotubos homogéneamente distribuidos y erguidos, pues se contempla que estas son las condiciones a conseguir en la realidad, en las que se obtendrían las mejores prestaciones.

Con el objetivo de introducir al lector en el estado de la cuestión, se ha elaborado el capítulo 0: estado del arte, que incluye las aplicaciones prácticas más destacadas de los nanomateriales de carbono y las investigaciones teóricas con las que se ha encontrado mayor relación con el presente trabajo. De este modo, se contextualiza el estudio en el campo de la arquitectura y la construcción.

Una vez situado el estado de la cuestión, se han definido los nanomateriales del carbono, sus tipologías y propiedades desde el aspecto más genérico hasta el más detallado de los nanotubos de carbono. Todo ello en el capítulo I: materiales.

Habiendo enmarcado este estudio en su campo de aplicación, se da comienzo al desarrollo del proceso de diseño y modelado de las muestras tridimensionales buscando la forma de **optimizar al máximo el tiempo y los recursos empleados en su generación**. Para ello, se genera un **algoritmo con Rhinoceros y Grasshopper** mediante la aplicación de códigos de **programación en lenguaje Python** que, una vez optimizado, dará paso al tratamiento de las muestras de cara a la posterior simulación de modelos teóricos.

La segunda fase del diseño, consistente en el **mallado de los modelos previamente generados**, se realiza **empleando ICEM CFD** y su ejecución implicará el mayor tiempo de computación de las fases de este estudio como consecuencia de la elevada cantidad de elementos que deberán tratarse simultáneamente por la máquina. Tanto el modelado como el mallado se exponen en el capítulo II: simulación de modelos teóricos.

Grosso modo, la metodología general se ha basado en el **empleo de códigos de programación, puesto que el entorno gráfico de los programas dedicados al diseño no permitía manejar geometrías tridimensionales de gran cuantía y complejidad volumétrica** de manera fluida y rentable². Por ello, este método se ha escogido con el fin de optimizar al máximo los procesos de diseño, mediante herramientas que han posibilitado la **ejecución rápida y a la vez detallada de los modelos**, siendo la eficiencia el requerimiento principal que debía cumplir el método de trabajo.

Para terminar, los modelos resultantes se exponen en el capítulo III: análisis de resultados, que también recoge una comparación de los softwares empleados y expone los inconvenientes que han interferido más notoriamente en el proceso de diseño. Además, se exponen los **resultados preliminares de las simulaciones ya realizadas** por el Dr. Enrique García Macías, profesor ayudante en el Dpto. de Mecánica de Estructuras e Ingeniería Hidráulica, UGR.

² Referido a rentabilidad en periodos de tiempo dedicado. Procesamientos de datos de incluso semanas no permitan una relación equilibrada entre resultado y tiempo y recursos empleados. Una relación, por tanto, poco rentable.

CAPITULO 0: ESTADO DEL ARTE

empleo de nanomateriales de carbono en arquitectura





Los nanomateriales han adquirido un gran protagonismo a lo largo de las últimas décadas [9]. Se trata de sustancias o compuestos cuyo atributo característico es la morfología, estando ésta configurada por una **magnitud de orden nanométrico** en alguna de sus dimensiones espaciales, como así lo indica su denominación.

Los elementos que componen dicho compuesto presentan dimensiones que oscilan entre el orden atómico y el micrométrico, presentando, en el caso concreto del carbono, propiedades útiles como **elevadas resistencias mecánicas**.

La fibra de carbono, como su propio nombre indica, está conformada por un conjunto de filamentos desordenados que se entrecruzan formando un compuesto de gran resistencia y ligereza. El grafeno, por el contrario, es un nanomaterial bidimensional cuya morfología atómica es cristalina y, por tanto, regular, lo que le confiere propiedades excelentes de cierta semejanza con el diamante. Por último, los nanotubos de carbono y los fullerenos presentan propiedades descendientes de las del grafeno como consecuencia de constituir, geoméricamente hablando, cuerpos de revolución de láminas de grafeno: cilindros de grafeno, en el caso de los nanotubos de carbono y esferas de grafeno en el caso de los fullerenos. El conjunto de los materiales anteriores se enmarca dentro de los **nanomateriales de carbono**³.

Su presencia ha adquirido gran notoriedad en la actualidad, ya sea por sus aplicaciones reales o por los diversos ensayos y experimentos en los que toman parte. Interesa, en este estudio, la **aplicación de estos materiales para reforzar estructuras**, en especial de la fibra de carbono [2], y la aplicación directa en otros materiales como un aditivo, en especial de los nanotubos de carbono [9]. Estos últimos presentan gran potencial especialmente como **aditivos a materiales compuestos**, que se conforman mediante la mezcla de un conjunto de elementos, siendo el cemento el ingrediente común en todos ellos y, por tanto, el que podría ser un interesante sujeto experimental sobre el que introducir nanomateriales que lo refuercen.

Mediante el dopaje del cemento, las propiedades de los nanomateriales podrían llegar al mortero de cemento, al hormigón, a las lechadas de cemento e incluso a la construcción con ladrillo. Varios estudios y fuentes que avalan esta teoría se exponen en los siguientes apartados.

³ Nótese que los nanomateriales citados, excepto los fullerenos, sólo enmarcan una de sus dimensiones en el **contexto nanométrico**, superando la escala nano con frecuencia en sus otras dimensiones. Este hecho es suficiente para enmarcarlos en el grupo de los nanomateriales.

Nanomateriales de carbono aplicados a refuerzos de estructuras

En la actualidad, la fibra de carbono es la clara protagonista en cuanto a **refuerzos estructurales** sobre elementos de estructuras ya construidas, aunque cada vez es más frecuente encontrar estudios que proponen encomendar esta tarea a los nanotubos de carbono. Ambos nanomateriales se presentan para esta tarea en forma de delgadas láminas o películas que se adosan a los elementos ya existentes, y cuya ínfima sección en relación a su gran resistencia exhibe sus excelentes propiedades para con las estructuras.

Refuerzos con fibra de carbono

Debido a su ligereza en relación con la gran resistencia a tracción que puede aportar, es apropiado para soportar grandes flexiones en vigas (I.1), soportes o incluso elementos superficiales como muros o forjados.

Mediante la instalación de **finas láminas de fibra de carbono** se consigue un refuerzo que apenas incrementa la sección de la pieza (I.2) y aún menos el peso. Sin embargo, se aprecia una notable **mejoría en cuanto al comportamiento a flexión** del elemento en que se aplique, ejecutándose de manera rápida, con alta durabilidad y mantenimiento nulo.

Este material se ha hecho un hueco en el ámbito de las estructuras, si bien supone limitaciones de tipo económico ya que su producción requiere un período de tiempo elevado, además de maquinaria especializada [43]. A pesar de que **la producción de la fibra de carbono se encuentra limitada** por las características de los hornos actuales, ya que se requiere un proceso que alcance elevadas temperaturas, hay quienes aseguran que representa el futuro de las estructuras (").

Sin embargo, en la actualidad, los plásticos reforzados con fibra de carbono (CFRP) presentan una relación rendimiento/precio notablemente mejor a la de los CNTs⁴ como consecuencia de su alto coste del proceso de producción [53]. Por este motivo, la aplicación real de los nanotubos en las estructuras se ha limitado en los últimos años a la conformación de un relleno secundario para reforzar las fibras de carbono y, así, reducir la cantidad de estas últimas. No obstante, la investigación sobre las propiedades de los CNTs ha avanzado notoriamente en la última década, permitiendo el avance de los procesos de obtención y el incremento de estudios sobre sus aplicaciones, como se expone a continuación.



ilustración 1: unión estructural reforzada con fibra de carbono. Fuente: www.carrillodavila.com (2020-05-21).



ilustración 2: refuerzo de viga estructural con láminas de fibra de carbono. Fuente: www.topconsult.com (2020-05-21).

”

“Otro campo de aplicación de interés creciente son los edificios singulares donde predomina el trazado con curvaturas. Es una cuestión de tiempo que la fibra de carbono se imponga sobre el resto de materiales estructurales debido a la maleabilidad, resistencia y ligereza del material.”

Hacia la fibra de carbono en la construcción
A. Miravete, 26 de junio de 2001

⁴ Al ser la fibra de carbono un material más conocido y estandarizado que los nanotubos de carbono, el coste del primer material es inferior que el del segundo, lo que no significa que la obtención de la fibra de carbono resulte económica hoy en día.

Refuerzos con nanotubos de carbono

Siguiendo el ejemplo de la fibra de carbono, se plantea la fabricación de delgadas **películas de nanotubos de carbono** que sean capaces de reformar elementos estructurales sin apenas incrementar su sección o su peso.

Experimentos realizados sobre una viga reforzada con una lámina de nanotubos [1], incrustada en su sección central (1.3), demuestran un **incremento de la amortiguación** del elemento del 200% y del 30% en cuanto a su rigidez, de modo que la mejoría del elemento no se traduce únicamente en su resistencia flexión.

Este mismo estudio reveló la existencia de una red de nanotubos interconectados como consecuencia de la previa exposición de la mencionada película a altas presiones, lo que supone un medio de disipación de energía que desemboca en los altos niveles de amortiguación, antes mencionados.

Por otro lado, el nanomaterial que se estudia es capaz de **soportar exposiciones a altas temperaturas**, del orden de 600°C, sin que su capacidad resistente se vea afectada de forma significativa [1,29]. Por este motivo, refuerzos fabricados con nanotubos ofrecerían altas prestaciones de fiabilidad y rendimiento a estructuras ya existentes, no sólo atendiendo a su resistencia, sino también a su **durabilidad**.

En la **ilustración 4** se expone la respuesta dinámica⁵ de la viga reforzada con nanotubos de carbono, frente a otra viga que no dispone de ella⁶. Es evidente que la viga reforzada ha experimentado una notable mejoría de la capacidad de amortiguación con respecto al elemento sin película de CNTs.

En cuanto a la **resistencia del material**, varias fuentes aseguran que supera a la máxima de 7 GPa alcanzada por la fibra de carbono, alcanzando valores experimentales de hasta **9.6 GPa** [2,3,8,24] lo que, unido a las propiedades anteriormente descritas, dotaría a las estructuras a reforzar de propiedades difíciles de conseguir a posteriori de su construcción.

En definitiva, aunque en la actualidad la aplicación de nanotubos para refuerzos estructurales no sobrepasa el ámbito teórico, han demostrado ser un excelente candidato para abordar esta tarea. Además, vistos los resultados de la prueba experimental anteriormente citada, parece de tratarse de una buena oportunidad para mejorar la **resistencia ante el sismo** de las estructuras actuales.

⁵ Esta respuesta se ha medido en la **zona empotrada** de una viga en voladizo, de 22.86 mm de longitud.

⁶ El mencionado estudio examina una viga compuesta por rebanadas de diferentes materiales. En este caso, se ha considerado irrelevante tales materiales pues sólo se pretende exponer la diferencia de comportamiento con la película de nanotubos de un material inicial cualquiera con respecto al mismo material más la película. Para evidenciarla, se considera irrelevante el material inicial.

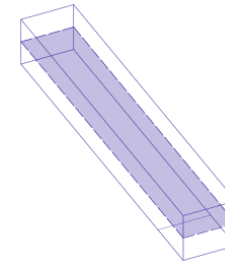


ilustración 3: viga reforzada con lámina central de CNTs.

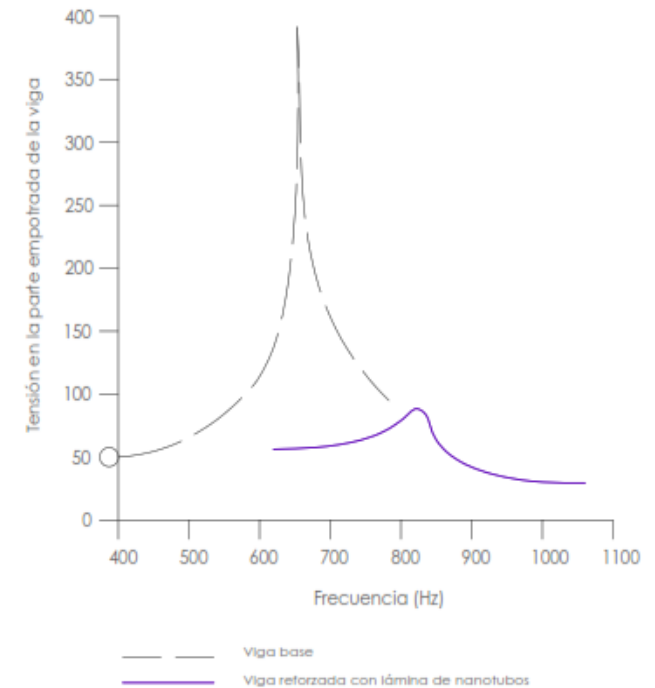


ilustración 4: respuesta dinámica ante un barrido de frecuencia a 50 Vrms [1].

Aplicación directa de nanomateriales de carbono en materiales

Ya se ha visto que los nanomateriales basados en carbono pueden aportar excelentes propiedades por sí solos, estando sus aplicaciones actuales limitadas por el proceso de obtención complejo y de alto coste que dificulta su empleo a gran escala.

No obstante, sus propiedades también pueden aprovecharse mediante la introducción de pequeñas cantidades en otros materiales cuya presencia en el tiempo ha permitido optimizar su fabricación y obtención. Así, es posible tomar conciencia de las prestaciones que pueden aportar los nanomateriales de carbono, estudiando cómo éstos influyen sobre las propiedades de los materiales ya conocidos.

Además de las indudables propiedades mecánicas que se exhiben en el anterior apartado, algunos nanomateriales de carbono presentan interesantes propiedades eléctricas. Tanto es así que, aplicados directamente en materiales compuestos, podrían aportarles **la capacidad de ser monitorizados** para así conocer el estado de salubridad en el interior de las estructuras [41,55,56]. Esta cualidad interesaría especialmente en materiales en base a cementos, que pueden presentar falta de homogeneidad en las diferentes secciones del elemento estructural, permitiendo lo anterior modificar ligeramente sus propiedades en cada sección.

Materiales con estas características son los que se exponen en esta sección: ladrillo, lechadas, mortero, cemento y hormigón.

Introducción de nanotubos de carbono en ladrillo

La técnica de emplear materiales de baja dimensionalidad para crear una pasta resistente con la que construir no es nada nuevo. Desde que el hombre empezó a levantar refugio se emplean materiales que tienen base en la arcilla o el barro, originariamente reforzados con paja como conglomerante.

Existen estudios que demuestran que la introducción de nanotubos de carbono en materiales arcillosos⁷ aporta a estos últimos las sobresalientes propiedades que se vienen indicando [5]. La incorporación de sólo un 1% de compuesto de arcilla con CNT en un material base, supone **incrementos del módulo de elasticidad y la resistencia a tracción** de aproximadamente el 290% y el 150%, respectivamente. En la *ilustración 5* se expone la mejora en cuanto a la relación entre la tensión y la deformación del compuesto reforzado con arcilla y nanotubos de carbono frente al material base, si bien la condición de rotura de la muestra es alcanzada por el material reforzado en una fase previa al material inicial.

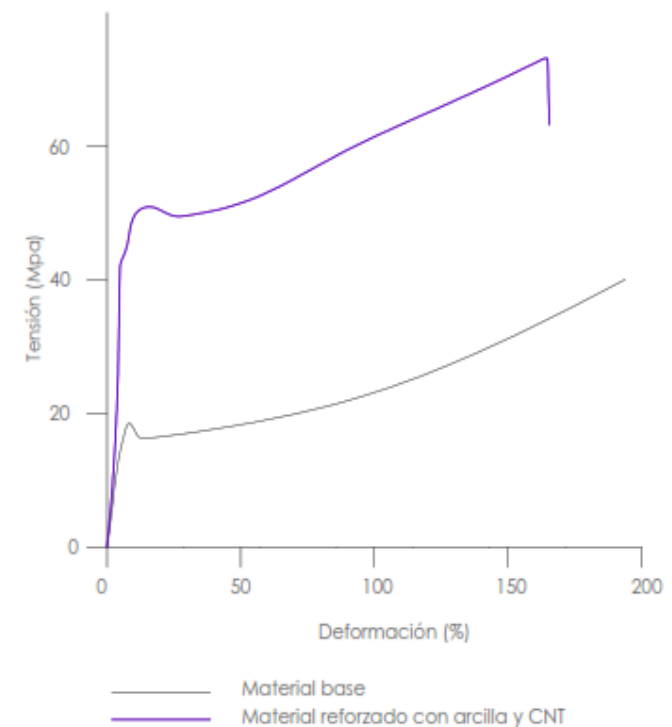


ilustración 5: relación tensión-deformación de ambas muestras [5].

⁷ Los nanotubos tienden a enredarse. En la referencia citada [5], se emplean plaquetas bidimensionales nanométricas de hierro para evitar que esto suceda, por lo que realmente el compuesto está formado por arcilla, nanotubos de carbono y un pequeño porcentaje de hierro.

La adicción de una ínfima cantidad de nanotubos de carbono a una muestra con material arcilloso, se traduce en un **significativo incremento de las propiedades mecánicas del material inicial**, que permiten que éste pueda soportar un nivel de tensión muy superior al previo, aunque necesite **menor cuantía de deformación para alcanzar la rotura**. Es decir, el resultado de esta adicción resulta en un material más resistente y menos flexible [5].

No obstante, la construcción con ladrillo se encuentra fuertemente condicionada por las propiedades que presente el mortero con el que se acopla cada ladrillo. Por tanto, modificar las propiedades de la pasta que se emplee podría traducirse en una mejora del funcionamiento y propiedades del conjunto. Esto se estudia a continuación.

Introducción de nanotubos de carbono en lechadas de cemento

Es habitual el empleo de lechadas de cemento para ocupar huecos entre acero y hormigón en las estructuras postensadas⁸ (1.6). La lechada que se aplique a esta actividad debe cumplir con ciertos estándares de resistencia mecánica y térmica, para lo que sería ideal disponer de la capacidad de monitorizar la lechada aplicada y así evaluar las propiedades del material empleado.

Los nanotubos de carbono son un candidato ideal para esta tarea, pudiendo mejorar la resistencia de la lechada además de convertirla en susceptible de ser monitorizada. La concentración de un **1.0% de nanotubos de carbono**, en relación al total del peso de la lechada de cemento, se considera la solución óptima para evaluar el relleno de la misma lechada [9,10]. Esto se debe a las propiedades térmicas y eléctricas de los nanotubos, que permiten la **detección de huecos e irregularidades en la muestra de lechada** mediante una reducción de la resistencia eléctrica de la muestra conforme a un aumento del porcentaje de nanotubos. Es decir, a más cantidad de nanotubos inmersos en el material, menos resistencia eléctrica y más conductividad y propiedades eléctricas, por tanto.

Estas propiedades, que permiten la **evaluación del material mediante monitorización**, serán un buen aliado para la comprobación de estructuras a posteriori de su ejecución, incluso si el material dopado con nanotubos se encuentra en áreas de difícil acceso. A menudo se emplea lechada para el relleno de grietas y huecos en general, de modo que se consiga mitigar el deterioro estructural. Gracias a pequeñas adiciones de nanotubos de carbono en estas lechadas (hasta 0.12%) se consigue un **aumento de las características mecánicas** en comparación con el mortero simple (+73% de resistencia a flexión y +35% de resistencia a compresión) [11]. Además, la energía de fractura de este compuesto aumenta en un 80%.

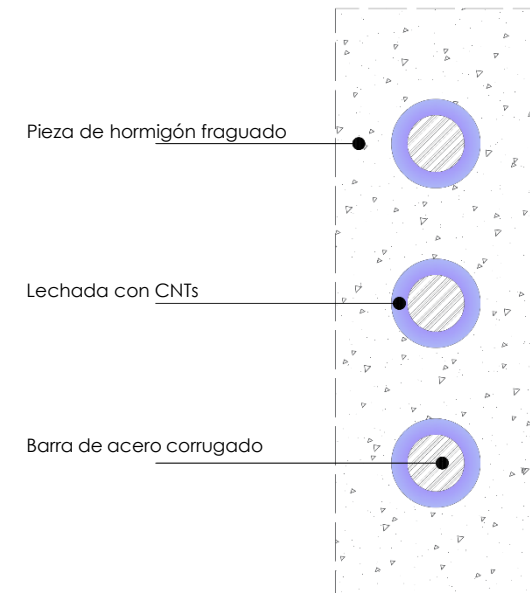


Ilustración 6: aplicación de lechadas dopadas con CNTs en piezas postensadas de hormigón armado.

⁸ Elementos estructurales que se someten a esfuerzos con armaduras activas, en un estadio posterior a su fraguado. Es decir, una vez que el hormigón ya ha adquirido su resistencia característica, se introducen cables de acero por vainas previamente formadas en la pieza.

Introducción de nanotubos de carbono en morteros y hormigones

Las propiedades de los compuestos de cemento se encuentran notoriamente ligadas a las características de este último, puesto que es el elemento aglomerante de la mezcla compuesta. Sin embargo, la construcción de estructuras con ladrillo no se encuentra sólo ligada, sino condicionada por las prestaciones del mortero de cemento que se emplea para unir los bloques cerámicos.

Por un lado, la adición de nanotubos de carbono al mortero de cemento ha demostrado la **mejora de sus propiedades mecánicas** sólo con una cuantía del 0.05% al 0.5%. En concreto, un 0.05% de nanotubos respecto a la muestra de cemento, supone un **aumento del 30% en su resistencia a compresión y un incremento de la resistencia a flexión del 43.38%** [7]. Al mismo tiempo, los CNTs dotan al mortero de capacidad para resistir tracciones, creciente con la cantidad de nanotubos, y amplían el límite elástico del mortero de cemento dopado respecto al mortero simple en un 55% [6].

Por otro lado, además de permitir una sustancial reducción de la porosidad y de la aparición de grietas, varios coeficientes relacionados con la permeabilidad al agua, al gas y la absorción se reducen notablemente, aumentando significativamente la durabilidad del compuesto en cuestión. Además, el compuesto de cemento dopado con CNTs ha demostrado poseer una gran **capacidad piezoeléctrica**⁹ empleable como sensor de tensión en estructuras que contengan cemento [41, 55, 56]. Esta propiedad mejora con el nivel de dopaje de CNTs.

Partiendo de lo anterior, se ha planteado la posibilidad de reforzar el microcemento con el objetivo de mejorar sus propiedades y las de los compuestos de los que forma parte. La adición de los CNTs puede realizarse a través de tres procedimientos: mediante una mezcla con el cemento, disueltos en el agua de la mezcla o directamente, con la adición de polvo de nanotubos de carbono. El procedimiento más empleado a nivel experimental con el hormigón, es la **adición al hormigón de cemento mezclado con CNTs prístinos**¹⁰, aunque pueden presentar dificultad para conseguir una combinación homogénea con el resto de elementos de la mezcla debido a su hidrofobicidad¹¹. Por ello, es frecuente también su adición al hormigón mediante previa disolución en agua con el objetivo de conseguir un óptimo grado de dispersión [13].

⁹ Se define como piezoelectricidad a la capacidad de un material (de estructura atómica cristalina) de generar una diferencia de potencial y, por tanto, una corriente eléctrica, cuando es sometido a una tensión mecánica que lo deforma.

¹⁰ Es decir, nanotubos inalterados y en su forma original tras su obtención.

¹¹ Capacidad de un material de repeler el agua.

En cuanto a las propiedades del hormigón dopado, está demostrado que presenta propiedades superiores con respecto al hormigón convencional. Su **resistencia a flexión se incrementa en un 54.8% [7]** y disminuye, en gran medida, su capacidad de absorción de agua¹², lo que supone la multiplicación de la durabilidad del compuesto. La mejora de cualquiera de las anteriores propiedades se aprecia con más claridad con el aumento del curado del hormigón.

Sin embargo, esta mejoría del hormigón¹³ se encuentra condicionada por una **correcta dispersión de los nanotubos**, habiendo demostrado unas propiedades mejores un compuesto homogeneizado frente a otro con una dispersión de nanotubos más irregular [6]. Además de la homogeneización de la mezcla por solubilización de CNTs, también es habitual el empleo de ultrasonidos [12].

Por otro lado, se ha demostrado que el tratamiento superficial de los nanotubos mejora la unión y adherencia con la matriz contenedora y, del mismo modo, las propiedades del compuesto final [14]. Además, cocer los CNTs elimina impurezas y defectos de las moléculas, puliendo sus propiedades mecánicas [15,16].

Introducción de aditivos de grafeno en hormigones

En 2016, la Universidad Católica San Antonio de Murcia anunciaba la colaboración con la empresa murciana *Graphenano*TM para la ejecución de una serie de **ensayos sobre hormigones** reforzados con grafeno, fabricado por la mencionada entidad [17,18]. En los artículos relacionados con este experimento, se asegura que las muestras dopadas con grafeno presentan un **incremento de la resistencia a tracción del hormigón**, mermando, al mismo tiempo, su capacidad de absorción de agua.

Paralelamente, insisten en la importancia de unas líneas futuras que permitan la sustitución del cemento por otros materiales, debido a la contaminación que su proceso de obtención supone ("). De hecho, la industria del cemento es responsable de entre el 5% y el 8% de las emisiones contaminantes producidas al año y se fabrican unos once mil millones de toneladas métricas anualmente [7].

Después tal ensayo, la empresa lanzó al mercado una línea de aditivos para hormigón con base en grafeno. Otras empresas internacionales también disponen en la actualidad de productos similares, como la empresa australiana *Graphene Industry*TM.

“Nuestro empeño es seguir utilizando el grafeno con mezclas adecuadas para incrementar la resistencia a tracción del hormigón para disminuir el uso de armaduras y controlar el proceso de contaminación de estas.”

Juan Roldán, director de Grado en Arquitectura de la UCAM
 “Graphenano y la UCAM demuestran la eficacia del grafeno aplicado al hormigón”
 Publicado en La Verdad, a 22 de febrero de 2016

¹² Consecuencia de la **condición hidrófuga** de los CNTs, anteriormente mencionada.

¹³ La mejoría de las propiedades del material que se dopa con nanotubos se encuentra condicionada a su **correcta dispersión** no sólo en hormigones, sino en todos los compuestos de cemento por ser heterogéneos por naturaleza. Conque debe asegurarse el mayor nivel de homogeneidad posible.

Otras aplicaciones de nanomateriales

en ámbitos alternativos

Además de las aplicaciones ya vistas, los nanomateriales se destinan a otras tareas en la actualidad, enmarcadas en otros campos, que evidencian su intrínseca versatilidad, conque la investigación de las posibilidades de los nanomateriales del carbono se encuentra en pleno auge. Se presentan, a continuación, algunas de las aplicaciones más novedosas en vigente desarrollo.

El grafeno en el sector energético

El grafeno es un material capaz de transformar la energía solar en energía eléctrica [38], al igual que los paneles fotovoltaicos. Sin embargo, unos paneles fabricados con grafeno (") podrían generar notablemente más electricidad por unidad de tiempo que los actuales¹⁴, desembocando en una relación entre su eficiencia y su coste más equilibrada.

Grafeno como potenciador del blindaje

Siendo especialmente notable entre las propiedades del grafeno su resistencia, no es de extrañar que se plantee la posibilidad de destinarlo a formar parte de carrocerías de diferentes vehículos. El automóvil de la ilustración 7 es un ejemplo de este hecho, si bien la composición de estas piezas incorpora grafeno en muy baja cantidad [39].

Grafeno como aislante térmico

Ciertas fuentes plantean dedicar óxido de grafeno a cumplir la función aislante térmico para reforzar la envolvente de edificios [37]. Un compuesto ya existente es el aerogel de grafeno (1.8), compuesto por óxido de grafeno y nanotubos de carbono, que permitirá disponer de un incremento en la inercia térmica de los edificios sin apenas elevar su peso. Esto es posible gracias a que el óxido de grafeno, lejos de ser conductor térmico y eléctrico, presenta notables propiedades aislantes contrarias a las que caracterizan al grafeno como tal, que destaca, precisamente, por ser el mayor superconductor descubierto hasta la fecha [52]. Esta dualidad exhibe la versatilidad del grafeno y sus derivados.

¹⁴ Esta propiedad del grafeno es consecuencia de la **deslocalización de los electrones** a lo largo de las láminas. Es decir, los enlaces entre los átomos de carbono son tan estables que los electrones adquieren la capacidad para moverse por todo el material libremente, hecho que se ve incrementado en condiciones de calor. Con este crecimiento aumenta la diferencia de potencial en el material, lo que da lugar a corrientes eléctricas.

“Quienes abogan por las energías renovables ven en la aplicación del grafeno a este ámbito una posible salvación para dar por zanjada la eterna discusión sobre la rentabilidad y eficiencia de estos sistemas de producción de energía.”

Grafeno en el sector de las energías renovables: hacia la eficiencia de los dispositivos fotovoltaicos

Martín Martínez, CEO de Graphenano



Ilustración 7: GTA Spano. Primer vehículo en incorporar grafeno. Fuente: www.abc.es (2020-05-02).



Ilustración 8: aerogel de grafeno. Fuente: www.abc.com (2020-05-03).

Fullerenos como inhibidores víricos

Los fullerenos¹⁵ han demostrado su capacidad de **inhibir la replicación del virus Ébola [40]** impidiendo que se reproduzca e infecte células humanas, que generarían diversas infecciones y problemas de salud en el anfitrión. Gracias a la geometría esférica del fullereno que se aprecia en la [ilustración 9](#), éste sería capaz de rodear y envolver a los agentes virales sin ser perjudiciales para el cuerpo, pues están compuestos por carbono que, además de ser un material completamente orgánico, es el mismo del que están compuestas las células.

No sería descabellado pensar que estas moléculas pudieran ser capaces de inhibir la actuación de otros agentes víricos, como el tan actual Covid-19.

Aplicaciones de nanotubos de carbono¹⁶

Al año se generan varios miles de toneladas de **“polvo de nanotubos de carbono” [2]**, lo que evidencia el interés comercial de este producto. Un gran porcentaje se destina a los ensayos y estudios del material como expuestos anteriormente, con el objetivo de descubrir el modo más adecuado de tratarlos y destinarlos a diferentes tareas. Se trata, por tanto, de un estudio en constante desarrollo en la actualidad.

Las aplicaciones actuales de los nanotubos han proporcionado resultados prometedores en varios campos, destinándose gran parte del material producido anualmente a la construcción de cascos de vehículos, fabricación de baterías o confección de artículos deportivos [2], lo que permite que se optimicen progresivamente los métodos de obtención de nanotubos de carbono (1.10) y que éstos alcancen propiedades en creciente mejoría.

Las diferentes aplicaciones de los nanomateriales del carbono se encuentran intrínsecamente relacionadas con sus superlativas propiedades que, a su vez, son fruto de su morfología a nivel molecular, que se expone en el siguiente capítulo.

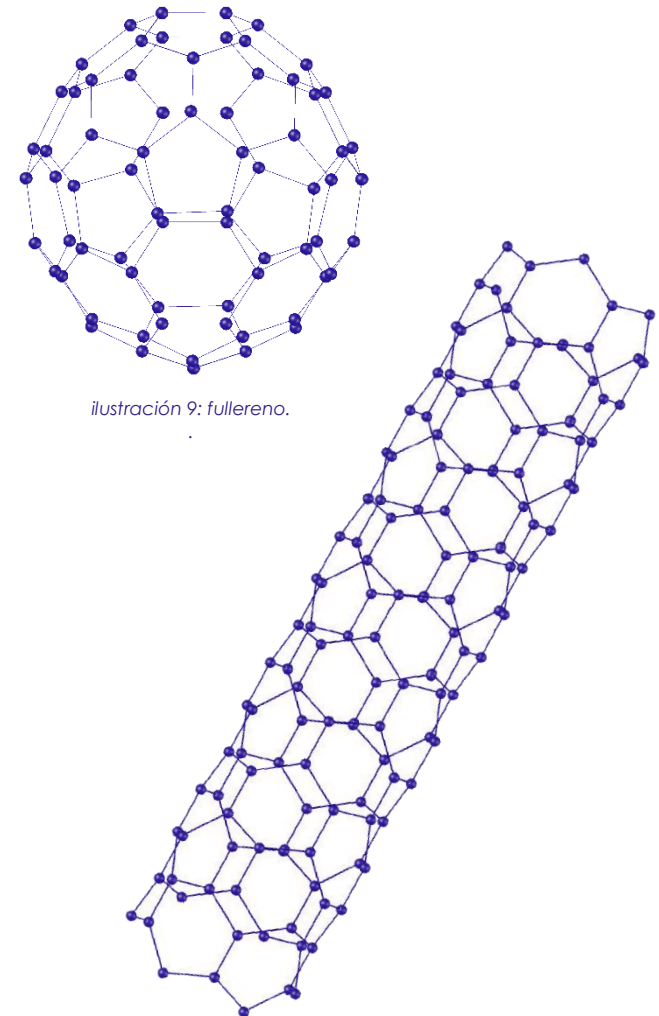


ilustración 9: fullereno.

ilustración 10: nanotubo de carbono.

¹⁵ Nanoestructuras moleculares, derivadas del grafeno, con **geometría esférica**. Podría decirse que se trata de grafeno enrollado. Ver el apartado: “Fullerenos”, en el Capítulo II de este documento.

¹⁶ Al igual que los fullerenos, los nanotubos de carbono se pueden considerar, a nivel geométrico, **láminas de grafeno enrolladas**. La relación entre el grafeno, los fullerenos y los nanotubos se expone a lo largo del Capítulo I y, en concreto, los atributos de los nanotubos de carbono se recogen en el apartado “nanotubos de carbono” del presente documento.

CAPÍTULO I: LOS MATERIALES

nanomateriales en base a alótopos del carbono



Carbono



Ilustración 11: carbón. Fuente: www.mineriaenlinea.com (2020-02-22).

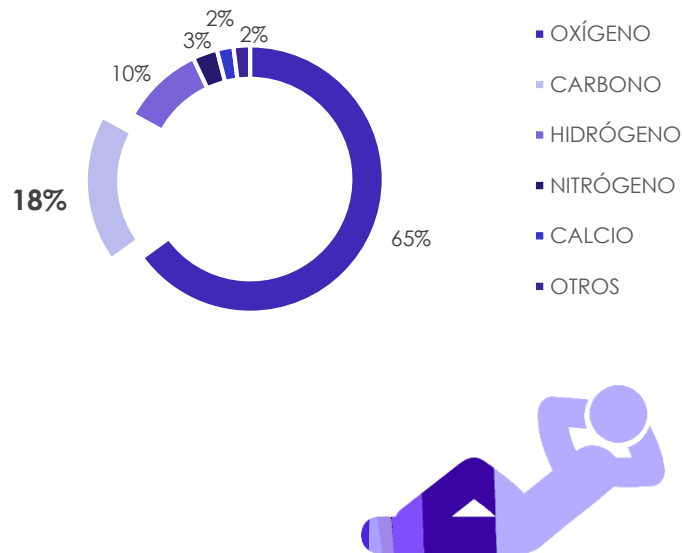


Gráfico 1: composición porcentual de los seres vivos.

Ilustración 12: composición química del ser humano.

El carbono es un elemento químico con gran importancia en la actualidad. En gran medida, esto nace del reciente descubrimiento del grafeno [52], aunque no es el único material novedoso compuesto por carbono, como se ha expuesto anteriormente.

Las diferentes distribuciones atómicas del carbono desembocan en distintos materiales, dotados de diferentes propiedades. Es por ello que los materiales compuestos por este elemento químico están adquiriendo una gran importancia en la actualidad en el grupo de los materiales nanométricos, habiendo formado incluso su propia familia de nanomateriales del carbono, que se viene mencionando.

Descripción, estado en la naturaleza y obtención

Se trata del elemento base de la vida orgánica y el décimo segundo elemento más abundante en el planeta. Por un lado, durante la historia de la humanidad se ha empleado en forma de **carbón**¹⁷ (I.11) como combustible para originar fuego y calor o como medio para cocinar, llegando esta práctica incluso hasta la actualidad. Fue uno de los primeros elementos químicos en ser descubierto por los pueblos egipcio y sumerio en torno al año **3750 a.C.**, ocupando la sexta posición, precedido solamente por los metales más explotados por el hombre: cobre, oro, plomo, plata y hierro, cronológicamente.

Por otro lado, el elemento carbono se encuentra presente en variados ámbitos. Es sabido que los **seres vivos** (I.12) están compuestos por un porcentaje de carbono entre el 18-20% (G.1), acompañado de hidrógeno y oxígeno, composición que más tarde dará lugar a los derivados geológicos de la materia viva pasando a formar compuestos petrolíferos sedimentarios de la misma naturaleza que el carbón, antes mencionado.

También es posible encontrar **carbono en la naturaleza**. Está presente en estado puro¹⁸ en dos formas esenciales que resultan de diferentes organizaciones de los átomos de carbono, generadas bajo distintas condiciones de contorno, siendo consecuencia una de la otra. Estas formas son el diamante y el grafito.

¹⁷ El carbón es una roca de origen sedimentario, compuesta principalmente por carbono y por cantidades variables de otros elementos de la tabla periódica, como nitrógeno, azufre y oxígeno.

¹⁸ Es decir, sin encontrarse combinado con otros elementos de la tabla periódica.



Ilustración 13: grafito. Fuente: www.comofunciona.com (2020-03-16). Ilustración 14: diamante. Fuente: www.universoabierto.org (2020-03-16).

El **diamante** (I.14) se forma en los cráteres de volcanes que una vez estuvieron en erupción. Esto debe a que el carbono necesita temperaturas extremadamente altas para cristalizar y en este lugar se combinan la materia prima y las condiciones ideales para su formación, aunque llegar a obtenerlo para su empleo sea una difícil labor. Sin embargo, el precio al que se pagan sus propiedades, sobre todo estéticas, rentabiliza su obtención. Los yacimientos de mayor importancia de diamante se encuentran repartidos entre Sudáfrica, Canadá y Australia.

El **grafito** (I.13) es el polimorfo del carbono que se encuentra con mayor frecuencia en la naturaleza. Esto es debido a que las condiciones de contorno que requiere incluyen la temperatura ambiente y presión atmosférica terrestres, que permiten que, además de ser la forma del carbono más abundante, también sea la más estable a nivel químico. Se encuentra en yacimientos naturales originados por depósitos de carbono previamente existentes, aunque también se produce de manera artificial para su uso comercial siendo los principales productores de grafito a nivel mundial son China, India y Brasil, en orden de importancia.

También es habitual encontrar carbono participando en varios compuestos. Algunos de ellos, en estado sólido, son el **carbonato de calcio** CaCO_3 (caliza), minerales como el mármol, la caliza o el yeso y, en estado gaseoso, el gas natural o el dióxido de carbono CO_2 , presente en la atmósfera (G.2) con un porcentaje aproximado de 0,033%.

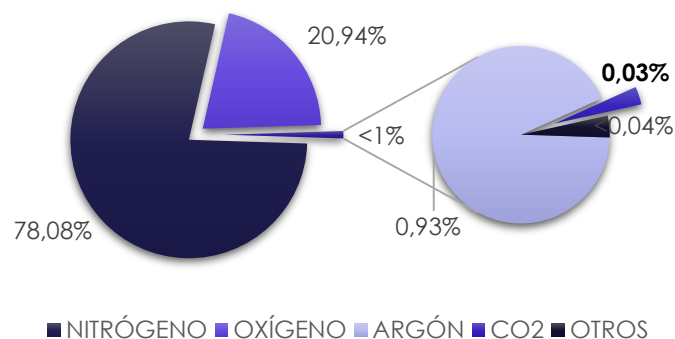


Gráfico 2: elementos químicos en la atmósfera.

Muchos otros elementos de la naturaleza son abundantes y se presentan en muy diferentes formas, sin embargo, el Carbono es diferente a cualquier otro: la **versatilidad del carbono** se evidencia por su capacidad de formar más compuestos químicos que elementos recoge la tabla periódica. En efecto, se estima la existencia de una cuantía mínima de un millón de combinaciones distintas que dan lugar a compuestos diferentes en base a carbono. Por ello, no es de extrañar que exista incluso una rama de la ciencia dedicada en exclusividad al estudio de la formación de compuestos de carbono, la Química Orgánica¹⁹.

Esta versatilidad también se evidencia en la capacidad del carbono de formar compuestos bajo condiciones de contorno completamente dispares, resultantes en polimorfos con propiedades y atributos opuestos. A continuación, se exponen las características del carbono a nivel atómico y molecular, taxativas en cuanto a las propiedades del grafito y el diamante.

¹⁹ Los compuestos orgánicos son aquellos cuya composición molecular incluye átomos de carbono, frecuentemente implicados en la formación de un enlace covalente. También es habitual, en **Química Orgánica**, encontrar enlaces de carbono e hidrógeno. Contrariamente, la **Química Inorgánica** comprende el estudio de los compuestos en los que no intervienen átomos de carbono o hidrógeno. Por tanto, la relevancia del carbono es tal que supone el elemento organizador de la química, dividiéndola en sus dos ramas fundamentales, anteriormente mencionadas.

Átomo de carbono |

TABLA PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS

La imagen muestra la tabla periódica de los elementos con el carbono (C) circulado en azul. El carbono se encuentra en el grupo 14 y el período 2. El número atómico del carbono es 6.

Ilustración 15: situación del carbono en la tabla periódica. Fuente: www.fotosearch.es (2020-02-24).

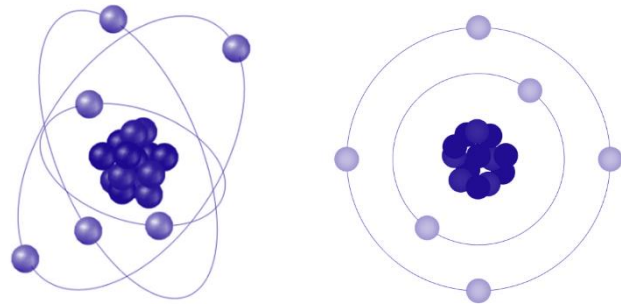


ilustración 16: átomo de carbono 12.

El carbono se encuentra recogido en la tabla periódica (I.15) con **número atómico 6**²⁰, no metal. Existen tres isótopos²¹ del carbono, siendo el más común de ellos el **carbono 12** (¹²C), que representa aproximadamente el 98,9% del carbono que se halla en La Tierra. Su núcleo se compone de seis neutrones y seis protones, completando su estructura interna con seis electrones periféricos divididos en tres orbitales de dos electrones cada uno. La primera capa presenta un orbital, y la segunda, dos.

El carbono 13 (¹³C) presenta 7 neutrones en su núcleo con una cuantía del 1,1% sobre la superficie terrestre y el carbono 14 (¹⁴C) consta de 8 protones en el centro, conservando ambos, como es lógico, el mismo número de protones y electrones que ¹²C.

El carbono 14 se encuentra presente en la atmósfera terrestre dando lugar, mediante la reacción con el oxígeno gaseoso, a moléculas de dióxido de carbono que más tarde consumirán las plantas para la realización de la fotosíntesis. Además, este isótopo tiene la particularidad de tener una vida media de gran duración con respecto a la de otros átomos²², lo cual hace posible su empleo para conocer la antigüedad de cuerpos orgánicos.

El átomo de carbono (I.16) presenta una alta capacidad de concatenación, es decir, es **muy capaz de formar enlaces y cadenas** con otros átomos. Esta propiedad la comparte con los elementos de su mismo grupo en la tabla periódica, aunque ninguno de ellos logra formar enlaces con tanta facilidad como el carbono que es, además, susceptible de enlazarse entre sí en una cantidad y variedad imposibles para cualquier otro elemento de la tabla periódica.

Como molécula, puede formar cadenas organizadas linealmente o en ciclos hexagonales, siendo más estable esta última forma. De la distribución espacial de los átomos dependen las propiedades que adquiere el material, adquiriendo la estructura molecular una importancia imperiosa para este estudio.

²⁰ Es decir, se trata de un átomo compuesto por 6 protones en su núcleo y 6 electrones en órbita alrededor de éste, compensando cargas.

²¹ Diferentes átomos de un mismo elemento, que presentan el mismo número atómico, es decir, mismo número de protones y electrones, pero diferente masa atómica, es decir diferente cuantía de neutrones en el núcleo.

²² El ¹⁴C tiene una vida media de más de 5730 años. La vida media, en el mundo atómico, representa la cantidad de tiempo que transcurre hasta que la cantidad de átomos del elemento que se trata reduce su concentración a la mitad. Es decir, si un cuerpo dispone de 100 átomos de carbono, en un periodo de tiempo de 5730 años esa cantidad se habrá reducido a 50 átomos.

Alótropos del carbono

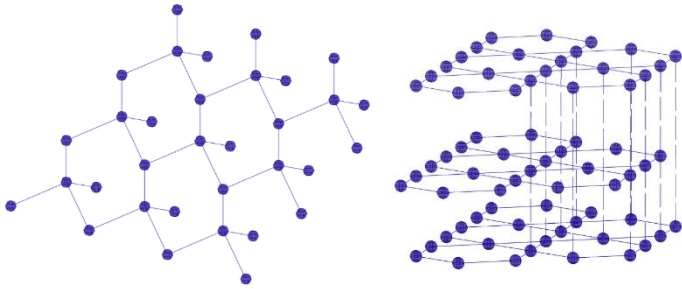


Ilustración 17: alótropos del carbono. A la izquierda, diamante; a la derecha, grafito.

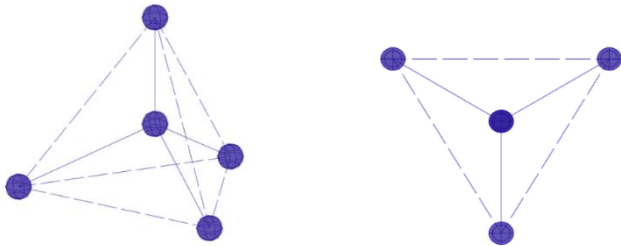


Ilustración 18: molécula de diamante.

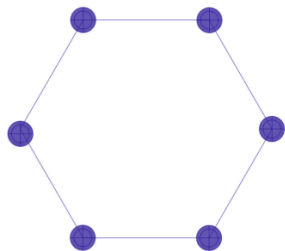


Ilustración 19: molécula de grafito.

El elemento carbono presenta gran **alotropía**²³ que dará lugar a diferentes configuraciones moleculares (I.17). Cada una de ellas se encuentra formada por átomos de la misma tipología que presentan distribuciones espaciales diferentes, conformando los diferentes alótropos del carbono. En este grupo se enmarcan el diamante y el grafito, presentando ambos estructura molecular cristalina²⁴ de diferentes formas. Por otro lado, los fullerenos y los nanotubos de carbono se suelen considerar, a nivel teórico, alótropos del grafeno lo que, a su vez, los convierte en alótropos del carbono, pues éste también está formado por carbonos a nivel molecular.

DIAMANTE

El diamante se encuentra compuesto por átomos unidos en forma de **tetraedro** (I.18), estando cada átomo de carbono unido a otros cuatro mediante enlaces covalentes. Estos tetraedros, juntos, forman una red tridimensional de carbono.

Debido a su rigidez molecular, el diamante es un compuesto difícil de contaminar por impurezas provenientes de átomos distintos al Carbono, como boro o nitrógeno. Este tipo de imperfecciones configuran una apariencia de diamante con un ligero tono azul o amarillo, respectivamente.

GRAFITO

El otro alótropo del carbono es el grafito. Se encuentra compuesto por una serie de capas de estructura regular cristalina formadas por átomos organizadas en **ciclos hexagonales** (I.19) de átomos de carbono, unidos mediante fuertes enlaces covalentes.

Las capas se superponen unas con otras generando una estructura laminar ABAB, unida mediante débiles fuerzas de Van der Waals (fuerza atractiva entre moléculas, diferente al enlace intermolecular), lo que provoca la desintegración del grafito al tacto.

²³ Referido a la capacidad de ciertas sustancias de formar moléculas compuestas por los mismos átomos, pero organizados en torno a una estructura espacial diferente.

²⁴ Una estructura cristalina es una estructura molecular ordenada, que consta de enlaces covalentes entre los átomos que la componen.



Esta notable diferencia entre las organizaciones moleculares del diamante y del grafito da lugar a una serie de **propiedades prácticamente opuestas**. Puede dar la impresión de que el grafito es un material sin propiedades interesantes en cuanto al tema que se trata, sin embargo, la perspectiva cambia una vez conocidas otras sustancias como los fullerenos o el grafeno, intrínsecamente relacionados con respecto a su estructura molecular con el grafito y no con el diamante.

Las moléculas de Carbono comentadas hasta el momento, si bien diferentes, **tienen en común que se encuentran organizadas por un patrón regular**: el diamante por tetraedros y el grafito por capas superpuestas regularmente²⁵ (I.20), lo que evidencia que la organización estructural es la clave de las propiedades de cada alótropo del carbono.

Propiedades del carbono |

Ya se han mencionado sus propiedades más características: versatilidad y alotropía. Por un lado, se exponen las propiedades físicas y químicas genéricas del átomo de carbono en la tabla 1:

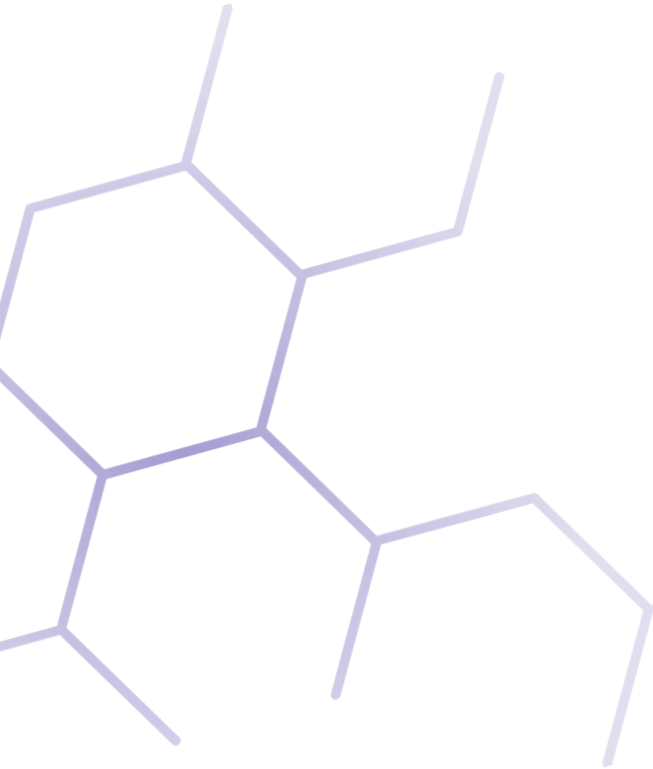
Símbolo químico	C
Número atómico	6
Grupo	14
Periodo	2
Bloque	p
Configuración electrónica	1s ² 2s ² 2p ²
Masa atómica	12,01115
Electrones por capa	2, 4
Estado	Sólido
Electronegatividad	2,55
Punto de sublimación	3951 K

Tabla 1: propiedades del carbono.

Por otro lado, las propiedades que adquiera cada material compuesto de carbono, varían según la estructura molecular. En el caso del diamante, el material resultante de la organización tetraédrica de los carbonos es un **conductor térmico** excelente, de mejores características en este ámbito que el cobre, aunque de precio mucho más elevado. Además, al estar formado por uniones muy rígidas entre átomos, el desplazamiento de electrones por su superficie es prácticamente imposible, lo que lo convierte en **aislante eléctrico**.

Ilustración 20: apreciación de capas de grafito en un lápiz de madera. Fuente: www.carbotecnica.info (2020-03-16).

²⁵ Estas capas se aprecian claramente al observar de cerca un lapicero de palo, como el de la ilustración 20.



El diamante es **material más duro** conocido sobre la tierra²⁶, es decir, no puede ser rayado por ningún otro material que no sea el diamante mismo, sin embargo, ante una caída su tenacidad es sólo buena; es relativamente fácil de romper. No obstante, su fragilidad no es impedimento alguno para aplicar el diamante a la confección de cuchillas de corte o la elaboración de joyas, debido a su atractivo aspecto estético. Además, el diamante no puede ser atacado por los ácidos en general, exceptuando el ácido nítrico (HNO₃) o la sosa (NaOH). Otras propiedades de este alótropo son la transparencia a los rayos X y la fluorescencia.

Contrariamente a las características que presenta el carbono en forma de diamante, el grafito es un **buen conductor eléctrico** en la dirección perpendicular a sus capas, ya que la distancia entre éstas permite que los electrones se muevan con relativa libertad y sean capaces de viajar a través de la superficie del grafito. Además, se trata un material muy blando²⁷ y **deficiente conductor térmico**, al contrario que el diamante.

Por todo ello, se podría afirmar que el diamante y el grafito son materiales totalmente opuestos a pesar de misma composición atómica, como se expone en la [tabla 2](#):

Propiedad	Diamante	Grafito
Lustre	Adamantino	Metálico
Diafanidad	Transparente	Opaco
Fragilidad	Duro	Frágil
Punto de fusión	5000 K	4300 K
Conductividad térmica	900-2300 W/m · K	119-165 W/m · K
Cristalización	Sistema isométrico	Sistema hexagonal

Tabla 2: propiedades del diamante y del grafito.

Esta controversia permite la variación de las propiedades de materiales basados en carbono mediante una modificación de sus estructuras moleculares, pues ahí radica el motivo de sus diferencias. Estas distribuciones no tienen por qué ser siempre cristalinas para lograr unas propiedades superlativas del material resultante, como es el caso de la fibra de carbono.

²⁶ Se trata del material más duro sobre la tierra de presencia natural. El **grafeno presenta una dureza aún superior** a la del diamante, sin embargo, es necesario sintetizarlo ya que no se forma en la naturaleza.

²⁷ Que se raya con facilidad.

La fibra de carbono²⁸

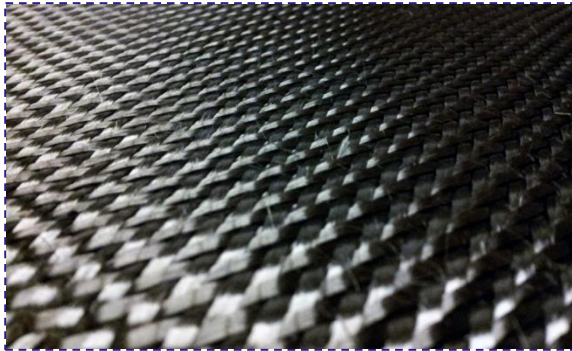


Ilustración 21: apariencia de la fibra de carbono. Fuente: www.carbonsystem.com (2020-03-09).



Ilustración 22: apariencia de la fibra de carbono vista a nivel microscópico. Fuente: www.eldioxxtm.foroactivo.com (2020-03-09).

La fibra de carbono consta de una serie de filamentos entrecruzados de átomos de carbono (1.21). Su estructura molecular, *grosso modo*, es muy similar a la que presenta el grafito, pues presenta serie de capas de carbonos ordenadas siguiendo un patrón hexagonal. Sin embargo, no se trata de una estructura cristalina ya que las mencionadas capas no se ordenan regularmente, todo lo contrario. Cada una de ellas se coloca de manera aleatoria, entrelazándose unas con otras como se aprecia en la *ilustración 22*, para conferir a la fibra de carbono unas propiedades únicas. Algunas de ellas [26,44]:

- ❑ **Alta resistencia mecánica.** Su resistencia a tracción es casi 10 veces superior a la que presenta el acero.
- ❑ Su **módulo de elasticidad** asciende a un valor entre 230 – 390 GPa, notablemente más elevado que el del acero estructural.
- ❑ Es un material **durable** a lo largo del tiempo como consecuencia a la gran vida media del átomo de carbono, es decir, presenta gran resistencia a agentes externos.
- ❑ Capacidad de **aislante térmico** como consecuencia de su baja conductividad térmica.
- ❑ Elevada **resistencia a la corrosión.**
- ❑ Material de **baja densidad** con respecto al acero, es decir, es más ligero que éste.
- ❑ **Elevado coste** de producción en la actualidad.

El procedimiento para obtener fibra de carbono en la actualidad no se encuentra optimizado, suponiendo un **proceso de elevado coste y larga duración**. Esto puede deberse, en parte, a que se trata de un sistema que requiere de la participación de procesos tanto químicos como mecánicos, además de maquinaria de fabricación de grandes prestaciones, como hornos capaces de alcanzar muy elevadas temperaturas [43].

No obstante, y dadas las superlativas propiedades de la fibra de carbono, se trata de un campo en constante investigación y desarrollo que podría llegar a desembocar en un proceso optimizado y estandarizado para elaborar de este material a gran escala.

²⁸ Según las fuentes consultadas, no se conoce oficialmente la identidad del descubridor o inventor de la fibra de Carbono. Habitualmente, se atribuye esta hazaña a **Thomas Alva Edison (1847-1931)** ya que, antes de la elaboración del filamento de su bombilla con Tungsteno, fabricaba filamentos compuestos por algodón o bambú que entrelazaba y que posteriormente sometía a altas temperaturas mediante su introducción en un horno. La similitud está en que los materiales mencionados se componen, en gran parte, por átomos de Carbono.

A pesar de tener en común con el acero su producción por medios artificiales²⁹, muestra unas cualidades muy superiores. A continuación, se incluye una comparación entre los mencionados materiales en la *tabla 3*:

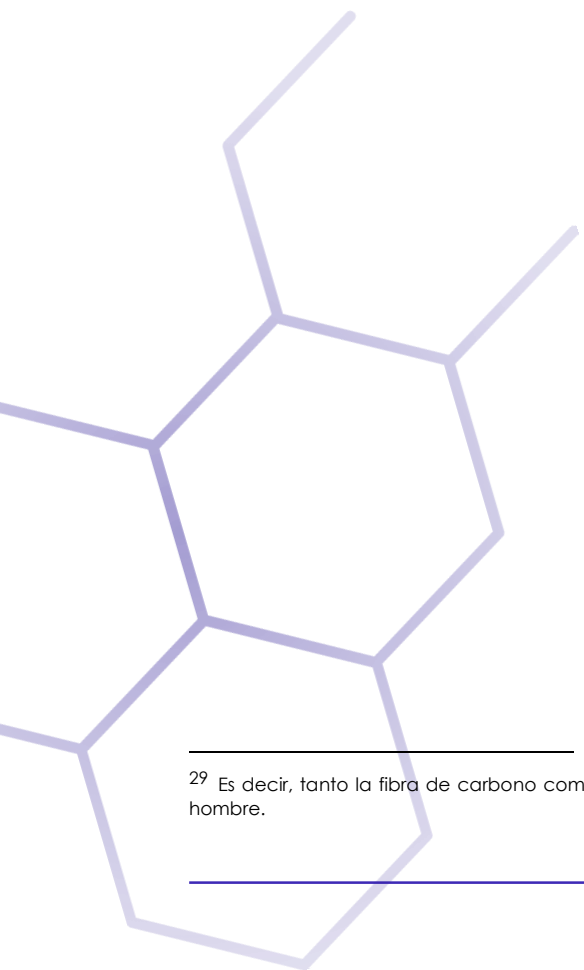
Propiedad	Fibra de carbono	Acero
Resistencia mecánica	35500 kg/cm ²	4200 kg/cm ²
Módulo de elasticidad	230-390 Gpa	210 Gpa
Durabilidad	Muy alta	Alta
Conductividad térmica	Baja	Alta
Densidad	1760 kg/m ³	7850 kg/m ³
Coste	Muy alto	Alto
Conductividad eléctrica	Buena	Buena
Composición	Carbono	Hierro y carbono
Ductilidad	Alta	Alta

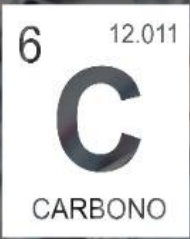
Tabla 3: propiedades fibra de carbono frente a acero [26, 44].

La fibra es carbono, por tanto, podría ser la **heredera de las funciones que hoy desempeña el acero**, dada su notable superioridad en varios ámbitos, siempre y cuando su proceso de fabricación se optimizara y, por tanto, su precio también. Además, el acero se obtiene a través de una aleación de hierro y carbono, principalmente, lo que indica que el carbono ya está presente en las estructuras.

No debe pasarse por alto que **la estructura molecular de la fibra de carbono no es cristalina**, es decir, no sigue un patrón de ordenación regular y, a pesar de ello, presenta las cualidades anteriores. Por tanto, un material molecularmente cristalino, como el grafeno, debería ser capaz de incrementar estas propiedades.

²⁹ Es decir, tanto la fibra de carbono como el acero son materiales resultado de un proceso de elaboración. No se encuentran en la naturaleza, sino que son sometidos a un proceso de fabricación por el hombre.





“Es la membrana más fina posible, pues es carbono de un átomo de grosor, y tiene la apariencia de una tela transparente y flexible, a la par que resistente y conductora de electricidad.”

Elsa Prada, investigadora en el Instituto de Ciencia de Materiales del CSIC de Madrid.

Historia de un descubrimiento, publicado en El País el 6 de agosto de 2020.



Ilustración 23: grafeno, el "material de Dios". Fuente: www.automaticainstrumentacion.com (2020-03-10).

Su descubrimiento es muy reciente [52], datado de 2004 por dos doctores de la Universidad de Mánchester³⁰. Hasta su hallazgo se trataba de un material fantástico, **imposible de sintetizar y únicamente aplicable a modelos teóricos**, sin ninguna validez práctica. Se trataba casi de una quimera ya que había sido estudiado desde el punto de vista matemático durante más de 50 años, partiendo de la premisa de ser un material irrealizable y, en caso de serlo, se preveía la existencia de una lámina tan fina que presentaría cuantiosos defectos o incluso sería inestable a temperatura ambiente³¹. Sus descubridores, por tanto, dieron la vuelta a estas teorías (?).

El grafeno ha sido motivo de una auténtica revolución mediática y científica con motivo de sus numerosas y preciadas propiedades. Aunque ya en la actualidad es un material empleado en algunos ámbitos, la investigación sobre sus posibles aplicaciones sigue vigente y en constante evolución. Estas aplicaciones enmarcan desde el campo de la medicina hasta el de la electrónica, pasando por otros muchos y sumando una elevada cuantía de posibles aplicaciones totalmente alternativas, que han desembocado en que el grafeno haya pasado a denominarse **“el material de Dios” (I.23)** como consecuencia de su versatilidad.

En definitiva, la importancia del grafeno radica en las variadas y superlativas cualidades que presenta a pesar de tratarse de un material de ínfimo grosor, tan delgado que se considera el **único material bidimensional** en la actualidad. Paradójicamente, se trata también del material más resistente descubierto hasta la fecha, más incluso que el acero estructural o la ya mencionada fibra de carbono.

Descripción y estructura molecular

El grafeno fue descubierto y sintetizado por primera vez a partir del grafito. Si éste estaba formado por capas de estructura cristalina superpuestas, el grafeno se podría entender como cada una de esas capas por separado. Se trata, por tanto, de **una lámina monoatómica** de carbonos, unidos mediante fuertes enlaces covalentes en la forma química más estable conocida: el hexágono. Al igual que ocurría con el diamante y el grafito, ésta configuración atómica de los carbonos es la responsable de las propiedades que adquieren el grafeno y sus alótropos.

³⁰ En el año 2004 se hace oficial la existencia del buscado material, premiándose a sus descubridores con el premio **Nobel de Física** en 2010. En el año del descubrimiento, el físico **Andre Geim** en la Universidad de Mánchester, le propuso a su recién llegado estudiante **Konstantin Kostya Novoselov** una nueva línea de investigación en torno al grafito. Tuvo el privilegio de ser testigo el profesor español y experto en grafito, Francisco Paco Guinea, quien pudo observar que los doctores de la Universidad de Mánchester no habían llevado a cabo sólo una proeza experimental, sino un auténtico hito en la Física y la Historia, como explica Elsa Prada en el artículo citado.

³¹ Desde la década de 1930 es conocido el grafeno, considerado demasiado utópico durante más de 70 años hasta su descubrimiento.

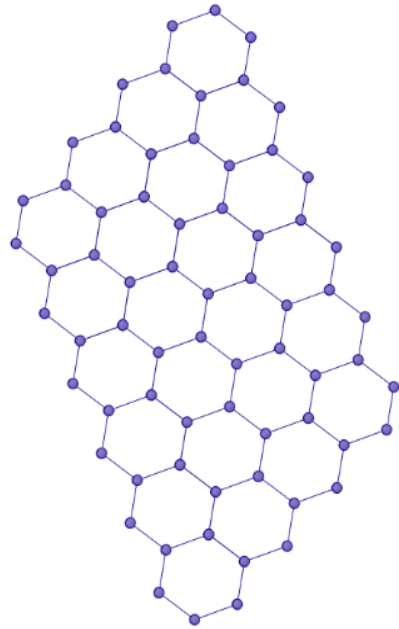


Ilustración 24: estructura molecular del grafeno.

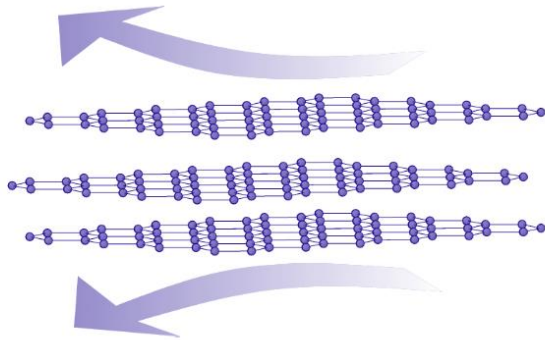


Ilustración 25: la separación teórica de las capas de grafito da lugar a láminas de grafeno.

El grafeno como material, no supone gran novedad en cuanto a su composición molecular, pero sí atendiendo a la ordenación de sus átomos y su estructura (1.24). Se trata del único material en la actualidad capaz de mantenerse en forma estable en un contexto **bidimensional**³², alcanzando espesores máximos de hasta 10 láminas. Según el número de capas por las que esté formado el grafeno, se clasifica como se indica a continuación en la tabla 4:

grafeno monocapa	espesor de 1 capa
grafeno bicapa	espesor de 2 capas
grafeno de pocas capas	espesor de entre 3-4 capas
grafeno multicapa	espesor de entre 5-10 capas

Tabla 4: clasificación de grafenos.

La importancia de conocer la clasificación del grafeno radica en el hecho de que sus propiedades varían en función de su tipología, si bien cualquier grafeno se caracteriza por disponer de un conjunto de propiedades comunes. Presenta dos particularidades fundamentales que lo distinguen de otras sustancias: en primer lugar, supone el primer caso de cristal atómico desarrollado únicamente en dos direcciones del espacio, es decir, **su estructura molecular es, además de bidimensional, cristalina**. Su simple existencia ya supone un recurso para entender la estabilidad de materiales formados por sistemas de baja dimensionalidad, desconocidos hasta la fecha.

La molécula de grafito y grafeno es la misma a nivel individual. Por ello, parámetro definitorio para la identificación de uno u otro material será la cantidad de capas de grafeno superpuestas y el patrón de superposición de las mismas (1.25). Hasta un máximo de diez capas, superpuestas regularmente, se tratará de grafeno, suponiendo un patrón irregular de ordenación y mayor cuantía de capas la existencia de grafito.

Por otro lado, las **características** que suelen diferenciar a un material de otro, como las propiedades eléctricas o mecánicas, son **notoriamente superiores** cuando se trata de grafeno [48,51]. Esto le dota de una versatilidad tal que podría ser susceptible de emplearse en gran variedad de aplicaciones y campos; aplicaciones que vendrán limitadas por el modo de obtención del grafeno que a su vez determinará la definición y calidad de las láminas del material.

³² El espesor de un átomo se traduce, aproximadamente en 0,0000001 ó 0.1×10^{-6} milímetros. De tan delgado espesor que se considera que se desarrolla únicamente en las otras dos dimensiones del espacio y es, por tanto, de naturaleza bidimensional.

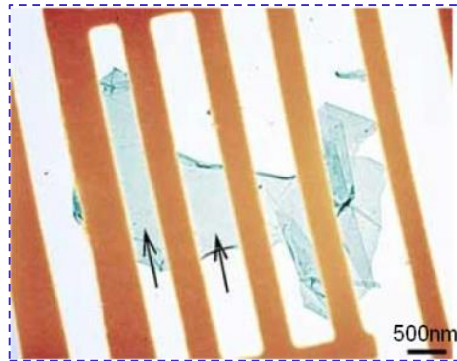


Ilustración 26: partícula de grafeno sobre soporte de hilos de oro. Fuente: [42].

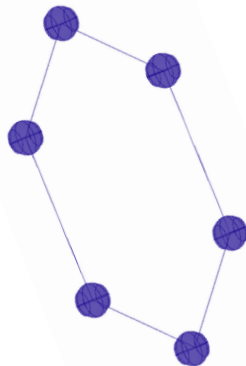


Ilustración 27: molécula de grafeno.

Se va a distinguir entre procesos de obtención enmarcados en dos grandes grupos: procesos físicos y químicos³³ [51].

El **método físico** consiste en la **separación de las capas del grafito** mediante un medio adhesivo que permita retirar una serie de capas del material del que se parte³⁴ (1.26). Este fue el método por el que se obtuvo en primicia el grafeno por Geim y Novoselov en 2004. Como su propio nombre indica, se trata de un proceso que no modifica las características químicas de la molécula y, por ello, la definición y propiedades de la lámina de grafeno resultante quedarán intactas. Se trata de un método sencillo y económico, cuya principal desventaja es su deficiente rendimiento debido a la lentitud del proceso y el escaso material que se obtiene. Por tanto, no se trata de un proceso eficiente o productivo en cuanto a escala industrial. Alternativamente, existen dos **procesos químicos** de naturaleza diferente:

- **Estrategia “top-down”**. Se trata de someter al grafito a un proceso de exfoliación mediante reducción química. Se parte de **un material ya existente**, habitualmente del grafito, y se le da forma a conveniencia empleando una serie de transformaciones químicas [49].
- **Estrategia “bottom-up”**. Consiste en la **creación de la molécula de grafeno desde cero** (1.27), partiendo desde su unidad básica: el átomo de carbono [53]. Existen varios mecanismos englobados en esta estrategia, aunque todos comparten la base común de partir de procesos del carbono: descomposición química en fase de vapor (CVD) o crecimiento epitaxial sobre sustratos metálicos [50] son los más comunes. No obstante, este último es menos eficaz que el método CVD ya que su rendimiento es considerablemente menor.

Estos procesos surgen de la necesidad de encontrar un equilibrio entre economía, calidad y productividad en cuanto a la obtención de grafeno, implicando cada método unos ordenes de magnitud alternativos. Además, cada uno de los procesos expuestos resulta en un **grafeno de calidades y cuantías diferentes** y, por tanto, de distintas propiedades, siendo lo más habitual que un proceso que permita óptimas calidades resulte en escasas cantidades de producto. En el siguiente apartado, se exponen las propiedades del grafeno de mejor calidad obtenido hasta la fecha.

³³ Comprensión de los procesos a través de entrevista a la Doctora Química: Dña. Elena Yonte Pindado.

³⁴ Este procedimiento se denomina: **exfoliación micro mecánica**.

Propiedades del grafeno

Como se indica anteriormente, el grafeno se ha ganado el sobrenombre de “material de Dios” o “material del futuro”. Esto es consecuencia de sus **numerosas y potentes propiedades** que lo sitúan por encima de otros muchos materiales empleados con frecuencia en la actualidad, diferenciándose de ellos por tratarse de un material de composición orgánica. Por tanto, presenta un potencial destacable no sólo por sus cualidades, sino también por la posibilidad **de obtenerlo en grandes cantidades como consecuencia de la abundancia del carbono** en estado natural, si bien una elevada cuantía no permitirá el máximo esplendor de las propiedades que el grafeno puede llegar a adquirir. A continuación, se presentan las variadas propiedades del grafeno:

Propiedades mecánicas(I.28)

- **Dureza.** Es incluso más duro que el diamante, calificado hasta hace poco como el material terrestre más duro.
- **Resistencia.** Supera en unas **100 veces la resistencia mecánica del acero** estructural³⁵ y es capaz de soportar elevados esfuerzos antes de fatigarse [46].
- **Rigidez.** Antes de sufrir deformaciones severas tiene la capacidad de soportar grandes solicitaciones.
- **Elasticidad.** Puede deformarse en grandes porcentajes de modo reversible³⁶ lo que hace posible la existencia de sus alótropos, entendidos como pliegues geométricos de láminas de grafeno.

Propiedades físicas(I.28)

- **Ligereza.** Su peso por unidad de superficie³⁷ es unas 200 veces menos que el del acero estructural.
- **Transparencia.**
- **Impermeabilidad.** Es impermeable a cualquier sustancia líquida o gaseosa excepto al hidrógeno que, por cuestiones químicas, es capaz de atravesar los espacios producidos por los hexágonos de grafeno. No obstante, y por cuestiones de la misma naturaleza, el óxido de grafeno no es impermeable al agua, aunque sí a cualquier otra sustancia [45].

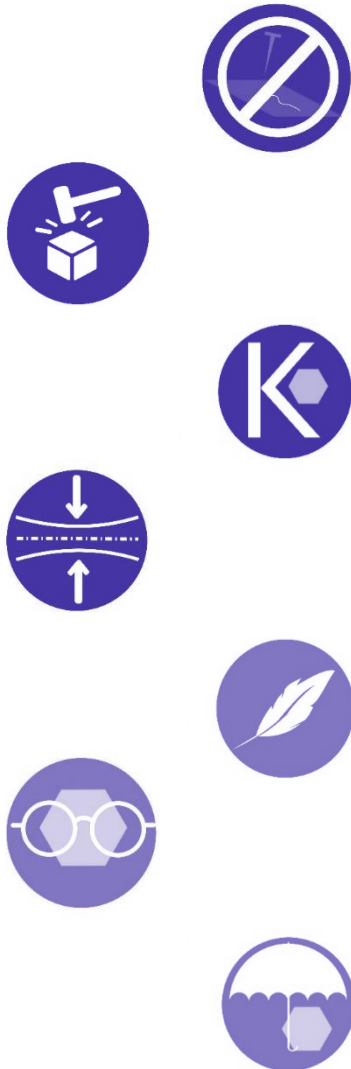


Ilustración 28: propiedades del grafeno. Arriba, propiedades mecánicas; abajo, propiedades físicas.

³⁵ Según ensayos ejecutados por Graphenano sería necesario aplicar una fuerza de unas **4 toneladas** con algún objeto afilado para atravesar una lámina de grafeno.

³⁶ Permite ser estirado en un 10% y doblado en un 20% [45].

³⁷ Peso de **0.77 miligramos** por cada lámina de un metro cuadrado, según Graphenano.



Ilustración 29: propiedades del grafeno. Arriba, propiedades eléctricas y térmicas; abajo, propiedades químicas.

Propiedades eléctricas y térmicas (I.29)

- **Conductor eléctrico.** Como consecuencia de su configuración molecular, los electrones se desplazan por la superficie de grafeno de un modo muy rápido, sin precedentes en otros materiales [48]. Hasta ahora, un material conductor de electricidad, metálico, se calentaba provocando pérdidas eléctricas por *efecto Joule*³⁸. Este calentamiento no se produce sobre una superficie de grafeno, es decir, se trata de un material conductor eléctrico, no metálico. El primero en su especie.
- **Conductor térmico.** El hecho de que no se caliente al conducir electricidad no quiere decir que no sea capaz de conducir calor, pues al final se trata de conducir energía en una u otra forma. Tanto es así, que se trata del mejor conductor térmico que se conoce en la actualidad³⁹ [44,45].
- **Multiplicador de frecuencias.** El grafeno es capaz de generar ondas de mayor frecuencia que las que recibe, demostrando así su potencial para el campo de la electrónica [45,48].

Propiedades químicas (I.29)

- **Material bactericida.** Aunque no permite la reproducción de bacterias u hongos en su superficie, no es dañino para con el ADN humano [45].
- **Biocompatibilidad.** Como consecuencia de tratarse de un material orgánico.

Debido a la condición novedosa del grafeno como material, aún se encuentra en proceso de investigación, pudiendo descubrirse nuevas propiedades. La compañía *Graphenano*, que se viene mencionando, indica algunas de estas novedosas propiedades que cuentan con gran potencial de desarrollo [45]:

- **Nuevas propiedades a partir de la reacción con otras sustancias.** Estudios realizados por Graphenano revelan que el grafeno es capaz de reaccionar con diferentes sustancias, formando compuestos con distintas propiedades según los elementos químicos que participen en dicha reacción. Por tanto, una propiedad de esta naturaleza, dotaría al grafeno de gran versatilidad para fabricar materiales a medida.

³⁸ Efecto ocurrence sobre conductores por los que circula corriente eléctrica, en los que parte de la energía cinética, debida al movimiento de los electrones sobre la superficie del conductor, se **dispersa en forma de calor**.

³⁹ Según varias fuentes, mejor incluso que el cobre.

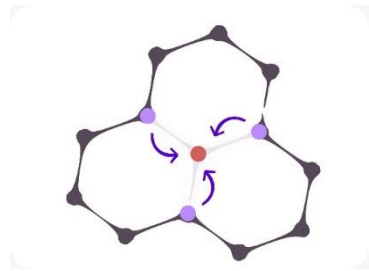


Ilustración 30: autorreparación del grafeno.

- **Autorreparación [45] (I.30).** En caso de que el grafeno perdiera algún átomo de carbono, los átomos cercanos serían capaces de cerrar el hueco creado por su ausencia⁴⁰. Este hecho podría resultar significativo en cuanto a la durabilidad de los materiales en los que fuere aplicado, pudiendo deberse a la facilidad de los electrones de los carbonos de moverse a lo largo de la superficie de grafeno, como consecuencia de su estable configuración hexagonal.

Algunas de las características aquí descritas son aplicables a los distintos alótropos del grafeno y, por tanto, del carbono (I.31). En mayor medida, son conocidas propiedades de los nanotubos de carbono, encontrándose en fase de menor desarrollo la investigación para con los fullerenos esféricos, atendiendo al ámbito de ciencia de los materiales y la construcción. A continuación, se comparan algunas propiedades del grafeno y el acero en la tabla 5:

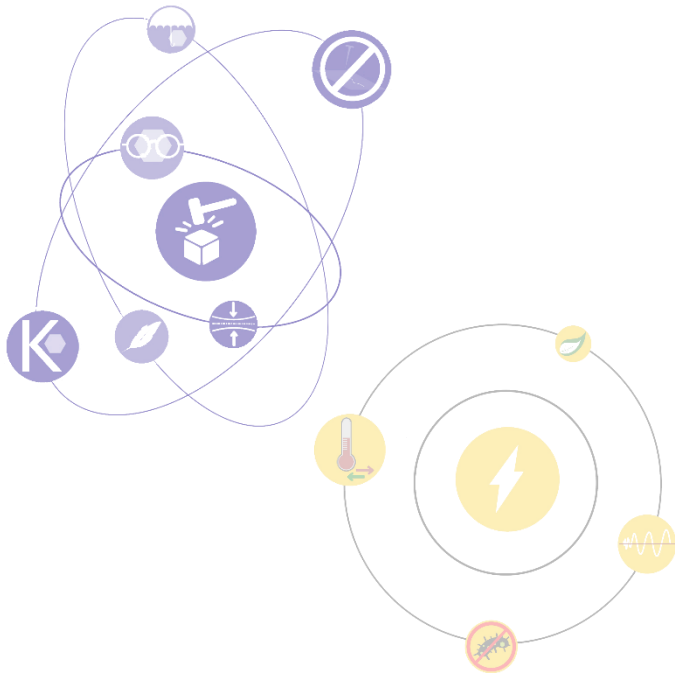


Ilustración 31: propiedades del grafeno, resumen y relevancia.

Propiedad	Grafeno	Acero estructural
Módulo de elasticidad [46]	1000 GPa	210GPa
Durabilidad	Muy alta	Alta
Conductividad térmica [44]	5.000 W/mK	50.2
Densidad [45]	0,77 mg/m ²	7850 kg/m ³
Coste	Alto	Alto
Conductividad eléctrica	Muy buena	Buena
Composición	Carbono	Hierro y carbono
Ductilidad	Muy alta	Alta

Tabla 5: propiedades del grafeno frente al acero estructural.

Es conveniente matizar que los datos numéricos expuestos en esta tabla oscilan entre las diferentes fuentes consultadas, si bien todas ellas coinciden en que las propiedades anteriores del grafeno son sobresalientes, hecho que se evidencia más claramente en comparación con las capacidades ya conocidas del acero.

⁴⁰ Según revelan algunos experimentos realizados por los profesionales de Graphenano, aún en fase de investigación aún primitiva.

Alótropos del grafeno |

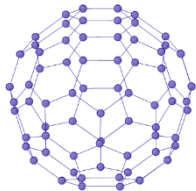
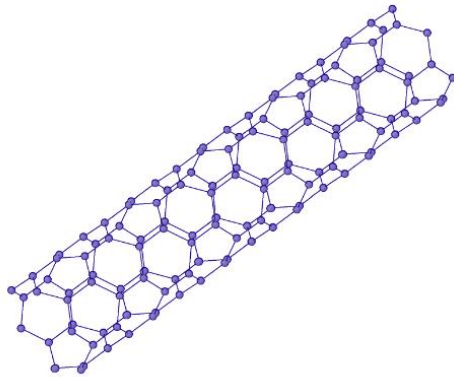
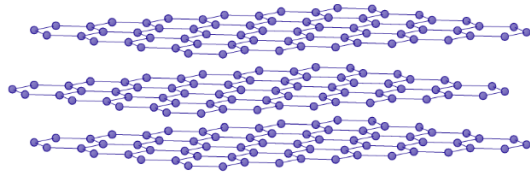


Ilustración 32: alótropos del grafeno. Arriba, grafito; centro, nanotubo, abajo, fullereno.

El grafeno es una de las formas del carbono, pero, a su vez, presenta otros alótropos propios. Es decir, diferentes subtipos de moléculas cuya base morfológica reside en la molécula de grafeno que podrían ser considerados simultáneamente alótropos del grafeno y del carbono desde el punto de vista compositivo. No obstante, ciertas moléculas sólo pueden ser incluidas en el grupo de formas alotrópicas del grafeno si se evalúan desde un punto de vista geométrico. Es el caso de los nanotubos de carbono y los fullerenos (1.32).

Específicamente, un milímetro de **grafito** contiene unos 3 millones de láminas de **grafeno**. Si una de estas láminas se pliega sobre sí misma, alrededor de un eje, se obtendrá un cilindro hueco, cuya pared de revolución constará de moléculas de grafeno organizadas en perfectos ciclos covalentes hexagonales. Se obtendrá, entonces, un **nanotubo de carbono**⁴¹. De igual modo, si se pliega una lámina de grafeno en torno a un punto, el resultado geométrico será una forma esférica compuesta por las mismas moléculas, denominada **fullereno**. En la [tabla 6](#) se recogen las diferentes formas del grafeno (1.33), siendo curioso el hecho de que cada una de ellas puede corresponderse con una tipología dimensional, abarcando desde el ámbito puntual hasta el volumétrico.

Molécula	Grafito	Grafeno	Nanotubo	Fullereno
Dimensión	3D	2D	1D	0D
Geometría	Planos superpuestos	Plana	Cilíndrica	Esférica
Electrónica	Metal	Semi-metal	Semiconductor	Semiconductor

Tabla 6: alótropos del grafeno.

Las propiedades de estos alótropos vendrán determinadas por el método de obtención de los mismos en gran medida, ya que, aun siendo materiales orgánicos formados por carbonos no se encuentran en la naturaleza de modo oriundo, sino que son resultado de un proceso de obtención de carácter artificial, al igual que el grafeno. Tal procedimiento es específico para cada uno de los alótropos, debiendo aclararse que su producción no se realiza sometiendo a una lámina de grafeno a transformaciones geométricas.

⁴¹ Podría entenderse como más apropiada la denominación de **nanotubo de grafeno**, ya que la existencia de éste es indudablemente necesaria para la comprensión morfológica de los nanotubos. No obstante, la nomenclatura de "nanotubo de carbono" no deja de ser correcta ya que el elemento químico que los compone es el mencionado.

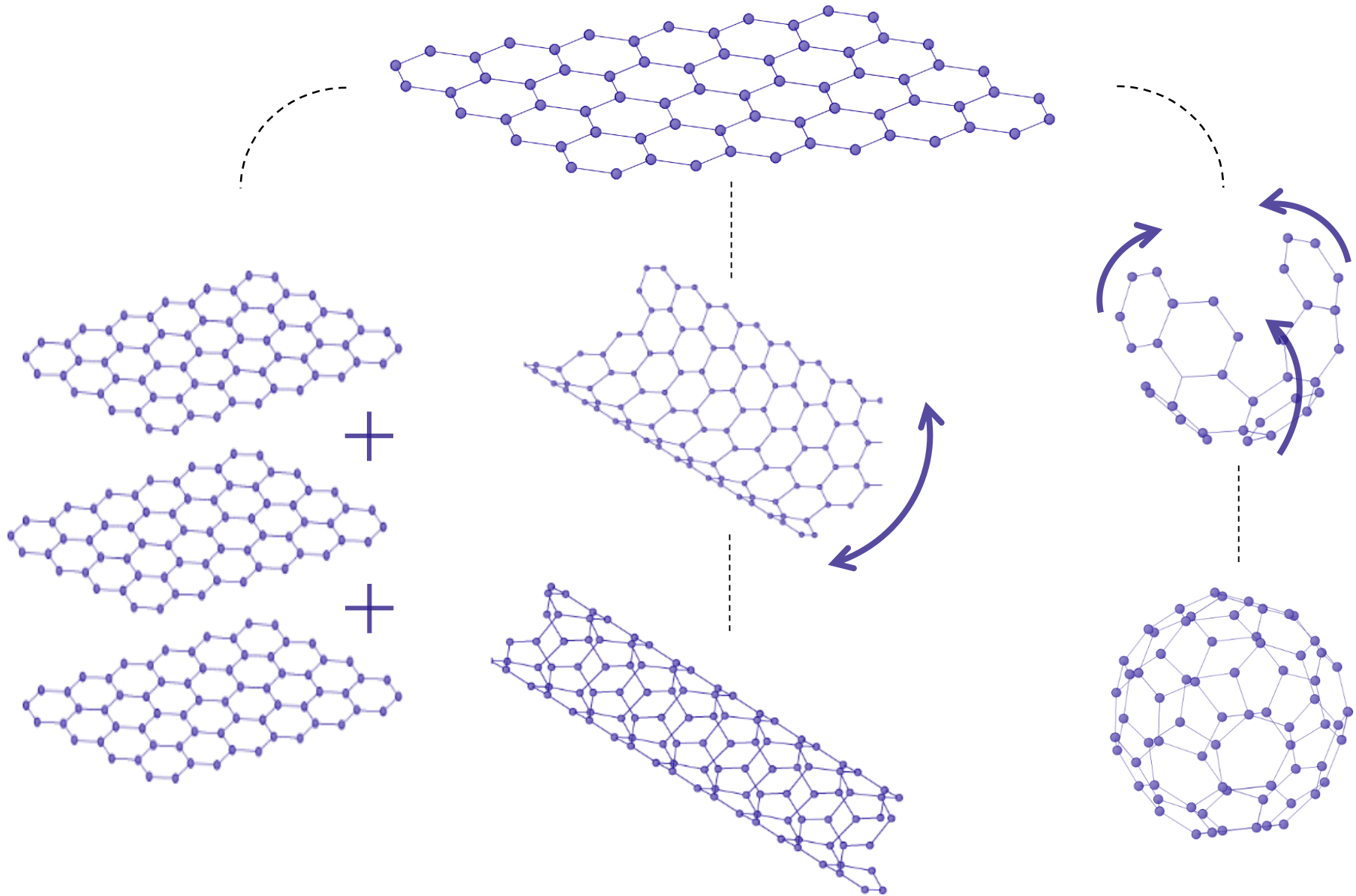


Ilustración 33: generación por transformación geométrica de los alótropos del grafeno.

“La vaporización de grafito proporciona un medio no controlado pero eficiente de producir moléculas de fullereno. [...] Recientemente, este enfoque se ha utilizado para producir cantidades aislables del fullereno C60 a partir de materiales de partida disponibles comercialmente.”

Fullerenes from aromatic precursors by Surface-catalysed cyclodehydrogenation,

Publicado el 14 de agosto de 2008, varios autores.

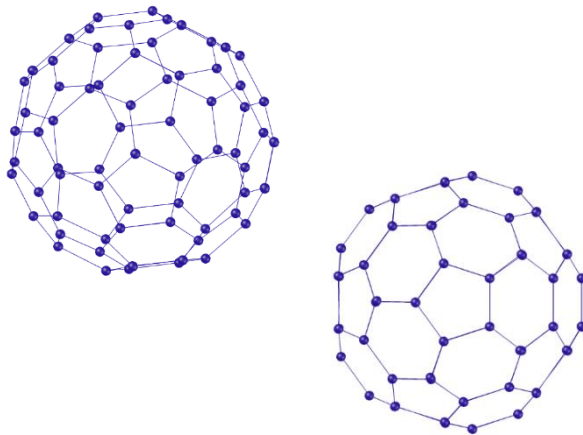


Ilustración 34: fullereno C60.

Hasta 1985 las combinaciones moleculares mencionadas de diamante y grafito eran las únicas conocidas para con el Carbono. De esa fecha data el descubrimiento de la familia de los **fullerenos**, atribuido a Curl, Kroto y Smalley⁴² (et al.) [23] y bautizada con esta nomenclatura como resultado de la similitud formal para con las estructuras geodésicas diseñadas por el conocido visionario del siglo XX, **Richard Buckminster Fuller**⁴³.

Los fullerenos son formas espaciales huecas, compuestas por átomos de carbono organizados en **anillos hexagonales y pentagonales**, cuyo número depende del tamaño del fullereno. Por geometría, el más pequeño posible consta de 12 anillos de caras pentagonales (C20), aumentando su tamaño conforme sea posible añadir caras hexagonales. Así, el primer fullereno descubierto, bautizado como C60, está formado por 20 caras hexagonales además de las 12 con forma de pentágono, configuradas por un total de 60 carbonos. Se trata del fullereno más conocido en la actualidad [23].

Cada arista del fullereno supone un **enlace covalente entre carbonos**, lo que indica su gran estabilidad como molécula. Además, es importante destacar que, para conseguir esta estabilidad, no pueden darse dos pentágonos consecutivos pues su existencia viene dada por la necesidad de cerrar geoméricamente la forma esférica, configurando así una morfología similar a la del clásico balón de fútbol.

La producción de fullerenos⁴⁴ se limitaba a pequeñas cantidades obtenidas mediante procesos químicos y eléctricos en laboratorio hasta la primera década del Siglo XXI, cuando un grupo de investigadores españoles desarrolló un **nuevo proceso de obtención** notoriamente más eficiente [58], con base en la vaporización del grafito [57].

El **fullereno C60** (I.34), además de ser el más conocido, es el que se forma más habitualmente en los procesos de producción. Atendiendo a las propiedades de tal molécula, es conveniente destacar que comparte varias características con el grafeno, como su gran estabilidad molecular o su elevada resistencia mecánica, de hasta 3.000 atmósferas de presión [57].

⁴² La existencia de los fullerenos había sido sugerida por David E.H. Jones, Eiji Osawa y Robert W. Henson, en 1966, 1970 y 1985, respectivamente, sin credibilidad alguna. Finalmente, Curl, Kroto y Smalley consiguen hacerse con la autoría del descubrimiento y posteriormente con el premio Nobel en 1996 [59].

⁴³ **Richard B. Fuller (1895-1983)** fue un reconocido inventor y diseñador del siglo XX. Desarrolló durante su vida una serie de "artefactos" relacionados con diferentes ámbitos de la práctica, como el transporte, la construcción o la energía. Es un personaje muy influyente sobre los conocedores de diferentes ramas del saber. En concreto, en el campo de la Arquitectura es especialmente reconocido y admirado por ser el inventor de la "cúpula geodésica", de múltiples aplicaciones a nivel mundial.

⁴⁴ Aunque la producción de estas moléculas es el modo más frecuente para obtenerlas, diversas fuentes consultadas aseguran que se aparecen en la **naturaleza** como consecuencia de fenómenos relacionados con el fuego o los rayos, en ocasiones muy concretas.

Nanotubos de carbono

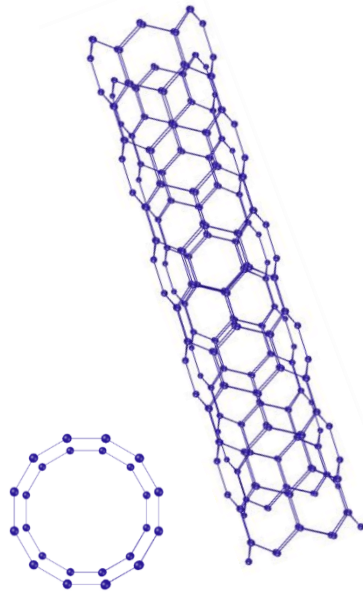


ilustración 35: nanotubo de pared múltiple.

"En realidad, se conocían nanotubos de carbono desde muchos años antes, pero éstos, generados catalíticamente, no despertaron interés debido a que su estructura era muy imperfecta y, por ello, también sus propiedades."

Ángel Herráez. *Las asombrosas estructuras del carbono: fullerenos, grafeno y nanotubos.*

La historia ha puesto en evidencia que es habitual que se produzcan descubrimientos de forma accidental⁴⁵. Ya le sucedió a **Cristóbal Colón (1451-1506)**, que se topó por sorpresa con un nuevo continente cuando había partido en busca de una ruta comercial alternativa hacia las indias, o a **Alexander Fleming (1881-1955)**, que se encontró con una especie de hongo molesto que obstaculizaba un estudio sobre bacterias y que resultó ser el descubrimiento más importante de su carrera: lo que hoy conocemos como penicilina.

La historia del descubrimiento de los nanotubos de carbono siguió este mismo rumbo, aunque **Sumio Iijima**⁴⁶ no partía de un objetivo desviado. En 1991, el científico trataba de obtener fullerenos a través de uno de los procedimientos habituales, arco de descarga eléctrico⁴⁷, cuando advirtió la formación de elementos longitudinales, de hasta 1 milímetro [19]. Estos elementos similares a una aguja de costura resultaron ser los primeros nanotubos obtenidos artificialmente, que más tarde se bautizaron como **nanotubos de pared múltiple** (I.35).

Este tipo de molécula se podría entender, desde el punto de vista geométrico, como el resultado de enrollar sobre sí mismas varias concéntricas capas de grafeno. Los primeros nanotubos de pared múltiple constaban de un máximo de 20 capas de cilindros concéntricos, de entre 3 y 30 nanómetros de diámetro, cerrados en sus extremos mediante medios fullerenos, conocidos como *hemi-fullerenos*.

No fue hasta 1993 cuando se sintetizaron los primeros **nanotubos de pared sencilla**⁴⁸ aunque algunas fuentes aseguran su existencia con anterioridad (?). Esta nueva molécula presentaba grosor monoatómico, el de una lámina de grafeno, y se obtuvo empleando catalizadores de elementos metálicos en el proceso, como cobalto o níquel. Este procedimiento recibe el nombre de deposición química en fase de vapor y se ejecuta a partir de un material base, en este caso, el grafito.

Los dos procedimientos mencionados suponen los de ejercicio más común, dando lugar a cada uno de ellos a un tipo de producto diferente en cuanto al número de paredes de los nanotubos resultantes. En el apartado que sigue, se expone en qué consiste cada uno de ellos.

⁴⁵ Es decir, es habitual que una investigación parta con un objetivo como premisa y que acabe desembocando en cuestiones diferentes a las que se estimaba.

⁴⁶ Sumio Iijima es un físico, catedrático y químico de nacionalidad japonesa, nacido en 1939 y formado en la Universidad de Oxford. Su especialidad es el área de la nanotecnología y materiales avanzados.

⁴⁷ En el apartado "obtención de nanotubos de carbono de este documento, se expone en qué consiste este método.

⁴⁸ Descubrimiento atribuido a Sumio Iijima (et al.).

Obtención de nanotubos de carbono |

Los principales procedimientos para obtener nanotubos de carbono en la actualidad son **estrategias del tipo "bottom-up"**. Es decir, pretenden crear estas nanoestructuras a partir de su elemento más simple: el átomo de carbono.

Algunos de los métodos de obtención de los nanotubos ya se han mencionado con anterioridad. Los más practicados en la actualidad son: método del arco de descarga [33], método de ablación láser [34] y deposición química de vapor (CCVD⁴⁹) [35]. Empleando cualquiera de los procedimientos anteriores, obtendremos **compuestos de carbono a mayores** de los nanotubos como fullerenos, grafito o polvo amorfo de carbono⁵⁰.

Es necesaria una gran cantidad de nanotubos de carbono para su aplicación en otros materiales. El procedimiento que permite la obtención de una mayor cantidad de nanotubos, actualmente es **CCVD**. Este método emplea partículas de un **material metálico que actúa como catalizador** para hacer crecer nanotubos de carbono sobre su superficie. Es habitual encontrar productos que emplean una especie de lechada como catalizador para después inyectarla directamente en materiales [36].

Otro procedimiento de obtención frecuentemente ejercitado en la actualidad es el **método de descarga de arco eléctrico**. Consiste en hacer pasar corriente continua a través de dos electrodos muy puros de grafito, de modo que entre ambos elementos se forma una especie de plasma de átomos de carbono que se traduce en un depósito de nanotubos sobre el cátodo, procedentes de la sublimación desde el ánodo⁵¹. En concreto, si se emplea un 1% del ánodo en el proceso se obtendrán nanotubos de pared simple (1.36) con muy buenas propiedades que alcanzarán una pureza del 90%.

Cada método desembocará en resultados diferentes⁵² en cuanto a la cristalinidad, pureza y número de capas de los CNTs [2]. Por ello, a la hora de poner en práctica su empleo, sería conveniente comprobar las propiedades finales de este nanomaterial. Como consecuencia de los diferentes nanotubos resultantes, se pueden clasificar según su geometría y su número de capas en las tipologías que siguen.

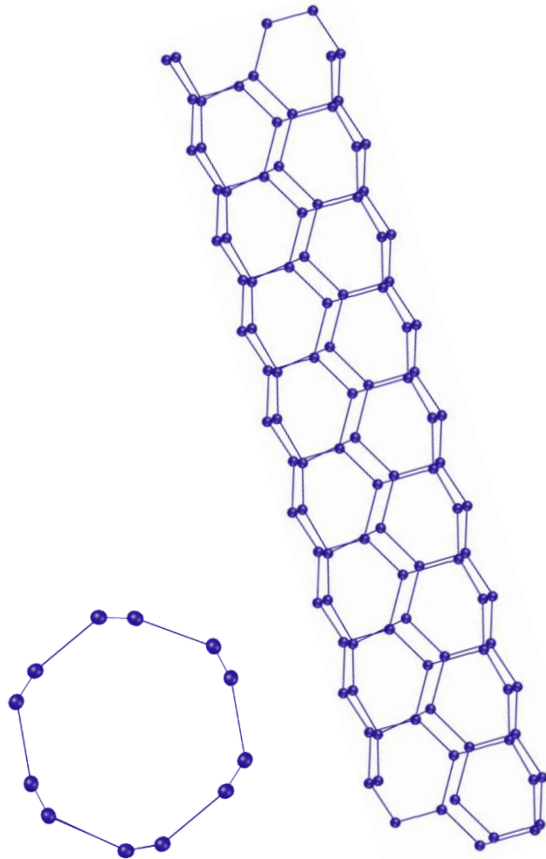


Ilustración 36: nanotubo de pared simple.

⁴⁹ Catalytic Chemical Vapor Deposition.

⁵⁰ La aparición de estos compuestos puede interferir en las propiedades de los nanotubos resultantes.

⁵¹ Ánodo es el electrodo positivo; cátodo el negativo. El cátodo es el elemento del proceso que sufre una reducción, produciendo un **estado de oxidación** en el ánodo, que se incrementa.

⁵² Esto resulta en lotes de CNTs muy diferentes en dependencia del fabricante.

Clasificación

Los nanotubos de carbono, atendiendo al número de capas que presentan, se han clasificado en dos grandes grupos en la [tabla 7](#):

Tipología de nanotubo	Número de paredes	Abreviatura
De pared simple	Una pared	SWNT ⁵³
De pared múltiple	De varias paredes	MWNT

Tabla 7: clasificación de nanotubos según su número de paredes.

Además de esta clasificación, los nanotubos pueden presentar **forma cilíndrica hueca o cerrada** por medios fullerenos, sin que este hecho haga variar significativamente sus propiedades [32]. A mayores, según el patrón de ordenación que muestren los átomos de sus paredes, producto de enrollar la lámina de grafeno de una u otra forma, se clasificarán en una de las siguientes tipologías (1.37):

- **CNT⁵⁴ en sillón**: los hexágonos comparten una de las aristas en dirección perpendicular al eje del nanotubo. Esta configuración supone que se generen ramas más o menos continuas de átomos de carbono a lo largo del nanotubo, convirtiéndolo en un material capaz de conducir electricidad y calor [24].
- **CNT en zig-zag**: como su propio nombre indica, los hexágonos de carbonos se sitúan siguiendo un patrón serpenteante, perpendicularmente al eje de la pieza. Como consecuencia de esta organización, lo que se obtiene es un CNT semiconductor, generalmente.
- **CNT quiral**: el patrón que siguen los hexágonos en este caso, se podría definir como el resultado de partir de cualquiera de los modelos de CNT anteriores sometido a un esfuerzo torsor. De este modo, la forma resultante podrá provocar que esta tipología de nanotubos adquiera unas propiedades eléctricas u otras, dependiendo en cada caso. Esta propiedad conductora de los nanotubos es independiente de si el cilindro se encuentra cerrado en sus extremos o no.

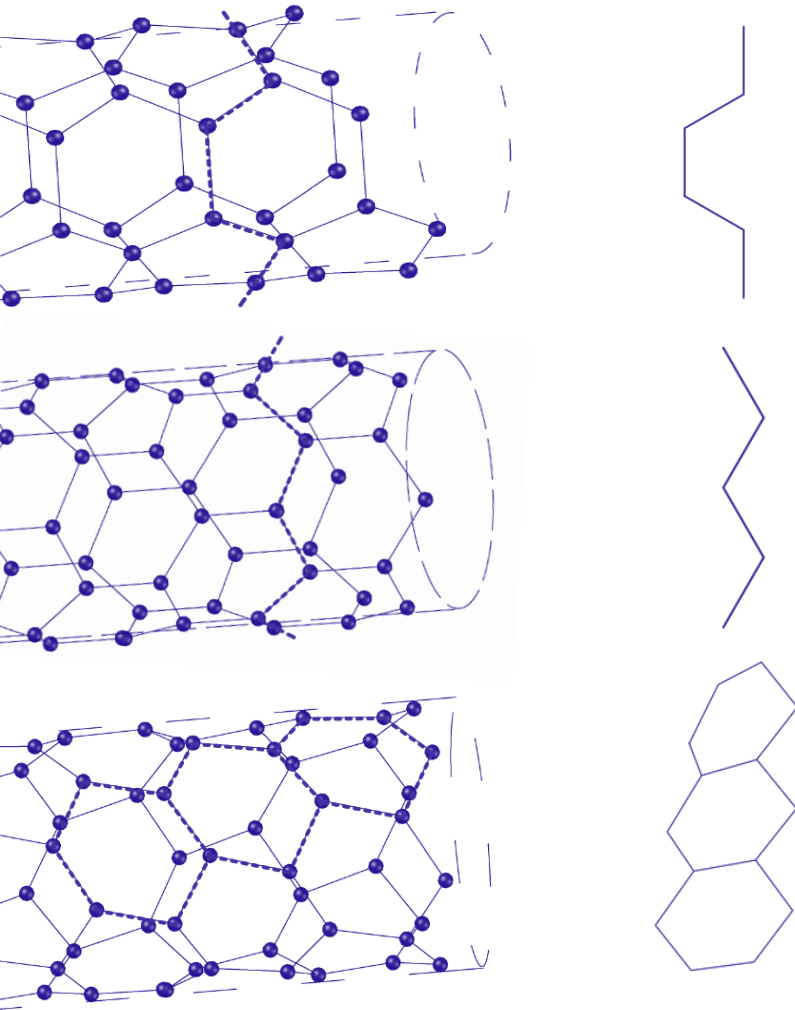


Ilustración 37: tipologías de nanotubos según su geometría. Arriba: nanotubo en sillón; en el centro: nanotubo en zigzag; abajo: nanotubo quiral.

⁵³ En inglés: *Single-walled nanotubes* para los nanotubos de pared simple y *Multi-walled nanotubes* para los de pared múltiple.

⁵⁴ "CNT" hace referencia a la nomenclatura inglesa: Carbon NanoTubes.

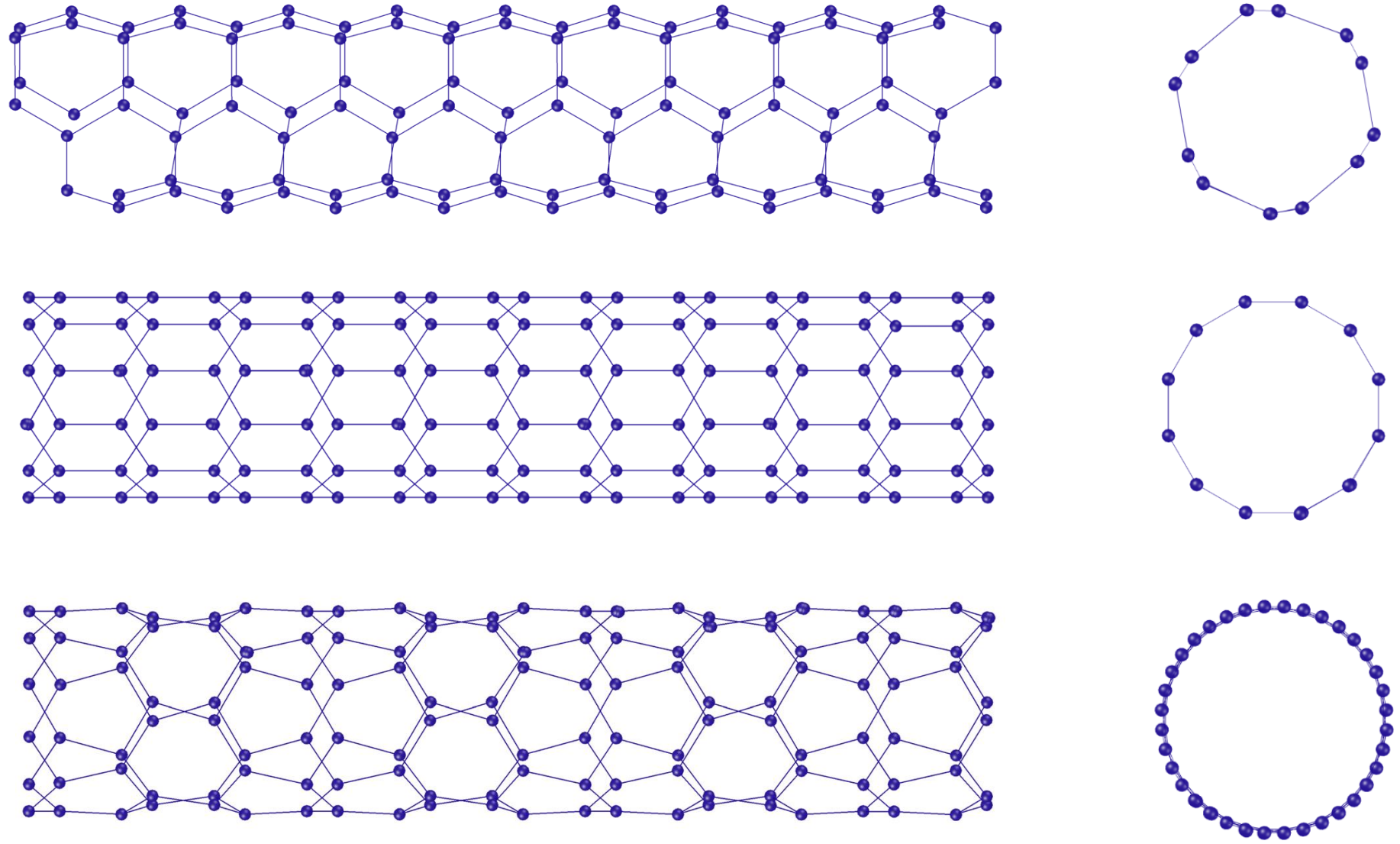


ilustración 38: tipologías de CNTs. Arriba: nanotubo en sillón; en el centro: nanotubo en zigzag; abajo: nanotubo quiral.

Definición geométrica

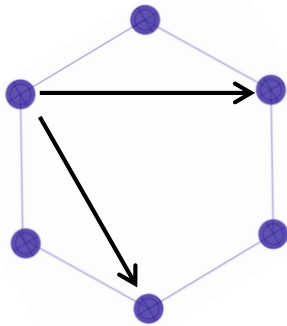


Ilustración 39: sistema de ejes locales para determinación de índices de Hamada.

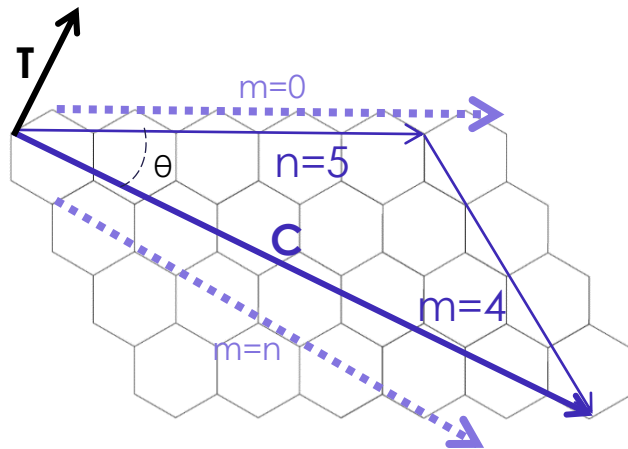


Ilustración 40: parámetros definitorios de la definición geométrica de los CNTs.

Las clases de nanotubos anteriormente expuestas pueden parecer muy diferentes entre ellas. Sin embargo, todas parten de una base común: las entendemos como láminas de grafeno enrolladas sobre sí mismas⁵⁵.

La lámina de grafeno que “se enrolla” parte de un corte en su superficie. Dependiendo de la posición y del ángulo de este corte con respecto a los hexágonos que conforman la lámina, el resultado será una tipología de nanotubo de las anteriores u otra.

El corte en la lámina de grafeno por el que se inicia la revolución del nanotubo, se denomina **vector quiral**. Este parámetro será determinante para conocer la tipología del nanotubo que se trata y vendrá definido por dos índices “n” y “m”, denominados **índices de Hamada** [32]. Sobre la lámina de grafeno generadora del nanotubo, los parámetros anteriores indican el número de hexágonos secantes con el vector quiral, según un sistema de ejes locales como el que se indica en la ilustración 39.

Si el valor del índice “m” es igual a cero, el nanotubo presenta forma en zigzag. Si el valor de los índices “m” y “n” es el mismo, entonces se forma un nanotubo en sillón. Por el contrario, si ninguna de estas condiciones anteriores se cumple, el nanotubo pasa a tener “quiralidad”, es decir, a clasificarse dentro de la tercera tipología de nanotubos expuesta, presentando una **quiralidad (n, m)** siempre y cuando $n > m > 0$ y $0^\circ < \theta < 30^\circ$.⁵⁶ Así, la ilustración 40 describe un nanotubo quiral (5, 4).

El módulo del **vector quiral** (Ch), por tanto, dará lugar al perímetro del nanotubo y el **vector traslación** (T), perpendicular a este último, marcará la dirección del eje longitudinal de la pieza. Partiendo de esta premisa, y tomando un valor fijo de $a=1.42 \text{ \AA}$ ⁵⁷ como longitud del enlace entre carbonos, se puede deducir el radio de cualquier nanotubo de carbono en función de su tipología y sus índices de Hamada⁵⁸, como se expone en la tabla 8.

⁵⁵ Se trata de un mecanismo para comprender la naturaleza de estas moléculas, ya que realmente no se obtienen mediante un operario cuya pericia le permitiere ser capaz de enrollar láminas microscópicas de grafeno.

⁵⁶ El ángulo θ se denomina “helicidad” del nanotubo.

⁵⁷ El parámetro “a” hace referencia a longitud del enlace entre los átomos de carbono (lado del hexágono). Esta longitud fue medida por Wilder (*et al.*) en la década de 1990. Y siendo “Å” la unidad de medida del ángstrom, $1 \text{ \AA} = 0.1 \text{ nm}$.

⁵⁸ La formulación que se expone a continuación tiene fuente en el artículo [32]: “Estructura y síntesis de nanotubos de carbono” por Fernando Alcca Quispe, que se incluye también en la bibliografía de este documento. Se recomienda la lectura, en concreto, del capítulo 3 para un conocimiento más profundo de los parámetros matemáticos que rigen la estructura de los nanotubos de carbono.

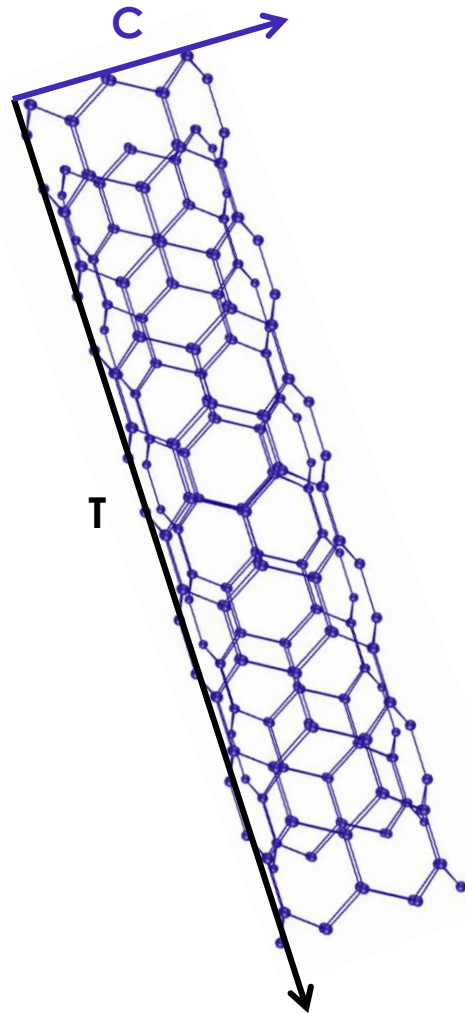


ilustración 41: relación de los vectores quiral y traslación con el nanotubo.

Tipo de nanotubo	Quiral	Sillón	ZigZag
Radio	$\frac{a}{2\pi} \sqrt{nm + n^2 + m^2}$	$\frac{a}{2\pi} n\sqrt{3}$	$\frac{a}{2\pi} n$

Tabla 8: radio de CNTs en función de sus índices de Hamada [32].

La **longitud total** que adquiere el nanotubo, en cualquiera de los casos anteriores, suele ser **del orden de 10.000 veces su radio**. Es decir, aunque el diámetro del CNT se enmarca en orden nanométrico, su longitud se sitúa en un contexto micrométrico. Además, si el nanotubo presenta varias capas concéntricas, la separación entre estas rondará los 0.34 nm [24].

A continuación, se expone el **proceso geométrico de conformación** de cada tipología de nanotubos de carbono (tabla 9). Este desarrollo se realiza a partir del vector quiral y el vector de traslación (I.41).

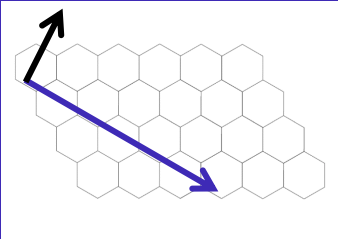
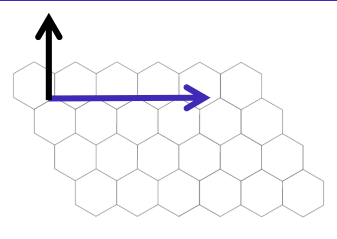
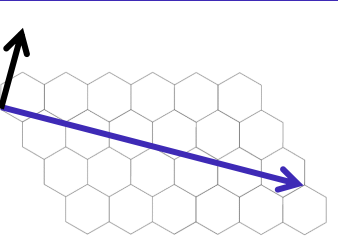
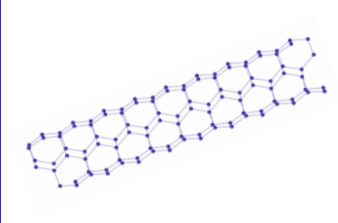
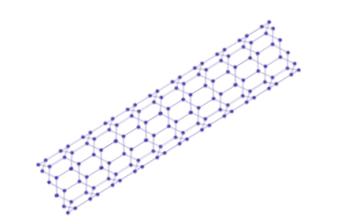
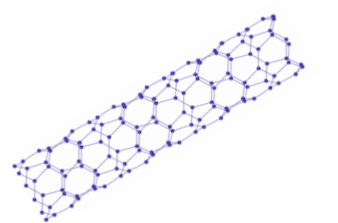
CNT en sillón	CNT en zigzag	CNT quiral
		
		

Tabla 9: formación geométrica de nanotubos a partir del vector quiral y el vector traslación.

Estas tipologías de nanotubos tienen especial **relevancia pues las propiedades del material resultante** variarán simultáneamente a su geometría, aunque siempre mantiene determinadas cualidades comunes.

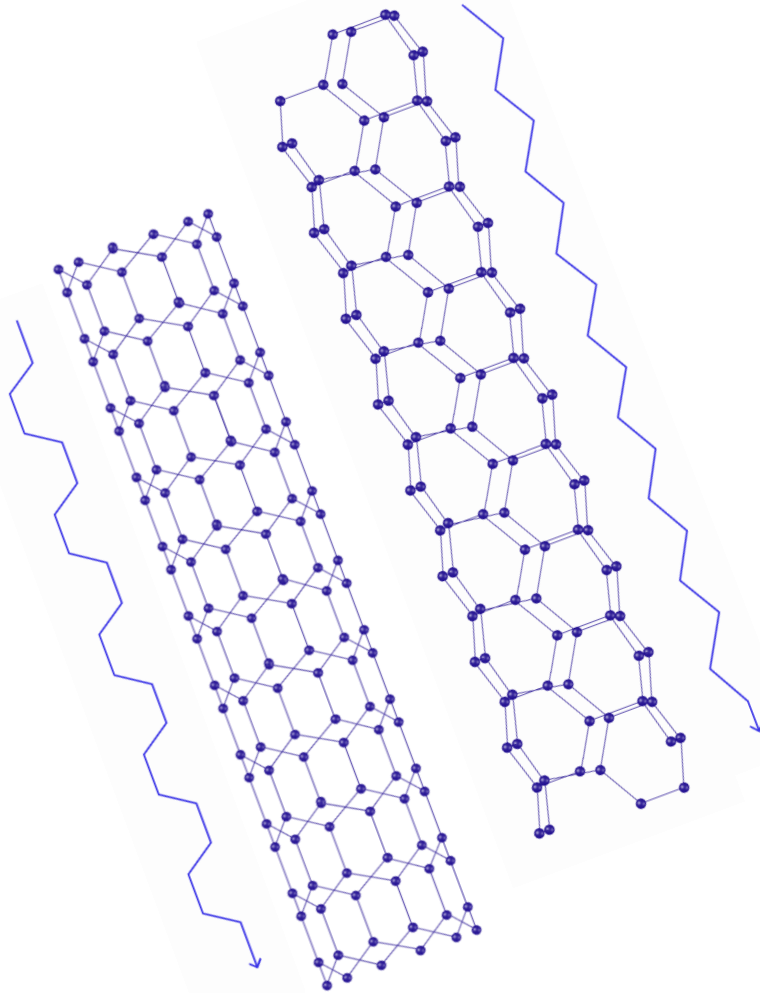


Ilustración 42: conductividad eléctrica de los nanotubos en carbono en función de su morfología atómica.

Las propiedades de los nanotubos se asemejan en gran medida a las ya descritas del grafeno, aunque pueden variar vagamente ya que la condición formal lo hace. A mayores, la tipología, dimensiones y capas del CNT también influirán en sus cualidades finales, que se condensan a continuación.

Propiedades mecánicas

En este ámbito, las propiedades tienen grandes puntos en común con las del grafeno. Esto quiere decir que se trata de un material con **cualidades superlativas** en lo que se refiere a respuesta mecánica, estudiada por Yu et al. [28] desde el año 2000. Del mismo modo, se trata de un material sobresaliente en cuanto a dureza, rigidez y elasticidad [25]. Por ello, la aplicación de CNTs como refuerzos mecánicos para compuestos es muy esperada, en dependencia de dos problemas que vienen surgiendo: alcanzar una dispersión homogénea de los nanotubos en la totalidad de la matriz del material al mismo tiempo que se logre una adherencia entre los tubos y el material contenedor [6].

Propiedades eléctricas y térmicas

Los CNT podrán actuar como **conductores eléctricos o semiconductores** dependiendo de sus características estructurales [24], en función de la siguiente igualdad: si $n-m = 3i$ ⁵⁹, el nanotubo actuará como conductor metálico⁶⁰ y se comportará como semiconductor en caso contrario [32]. Alternativamente, los nanotubos en sillón serán conductores y los nanotubos en zigzag semiconductores, como regla general (1.42). La conductividad eléctrica media de los nanotubos ronda los 6000 S/cm⁶¹ [9].

Por otro lado, los nanotubos han demostrado superar el valor de 1 K en su calor específico lineal [29-31] y presentar valores de más de 3000 W/mK en cuanto a su conductividad térmica [24].

⁵⁹ Es decir, la diferencia de $n-m$ debe ser **múltiplo de 3**. Esta regla es aplicable a los nanotubos quirales en exclusividad.

⁶⁰ Es decir, actuará con las propiedades eléctricas por las que se caracterizan los materiales formados por elementos químicos metales. Sin embargo, es importante insistir en que el carbono no está clasificado entre los metales en la tabla periódica.

⁶¹ Siemens por centímetro.



A continuación, se presenta la [tabla 10](#) con un resumen de las propiedades de los nanotubos de carbono que se han considerado de mayor relevancia con respecto al presente estudio. Los valores que se exponen, fruto del estudio experimental de los tubos, ya presentan **importantes incrementos con respecto a la fibra de carbono** incluso habiendo considerado márgenes de error. Por ejemplo, atendiendo al módulo de Young⁶², las fibras de carbono presentan valores que rondan los 680 GPa [\[26\]](#) y el acero alcanza los 200 GPa.

Diámetro medio MWCNT [9]	9,5	nm
Longitud media [9]	1.5	µm
Densidad [32]	Desde 1.33 hasta 1.40	g/cm ³
Módulo de Young [24]	1.8	TPa
Resistencia a compresión [6]	110	GPa
Resistencia a tracción⁶³ [8]	63	GPa
Resistencia a flexión [26]	14.2 +- 8	GPa
Resistencia media a la rotura [26]	30	GPa
Deformación de rotura [26]	5,2 %	

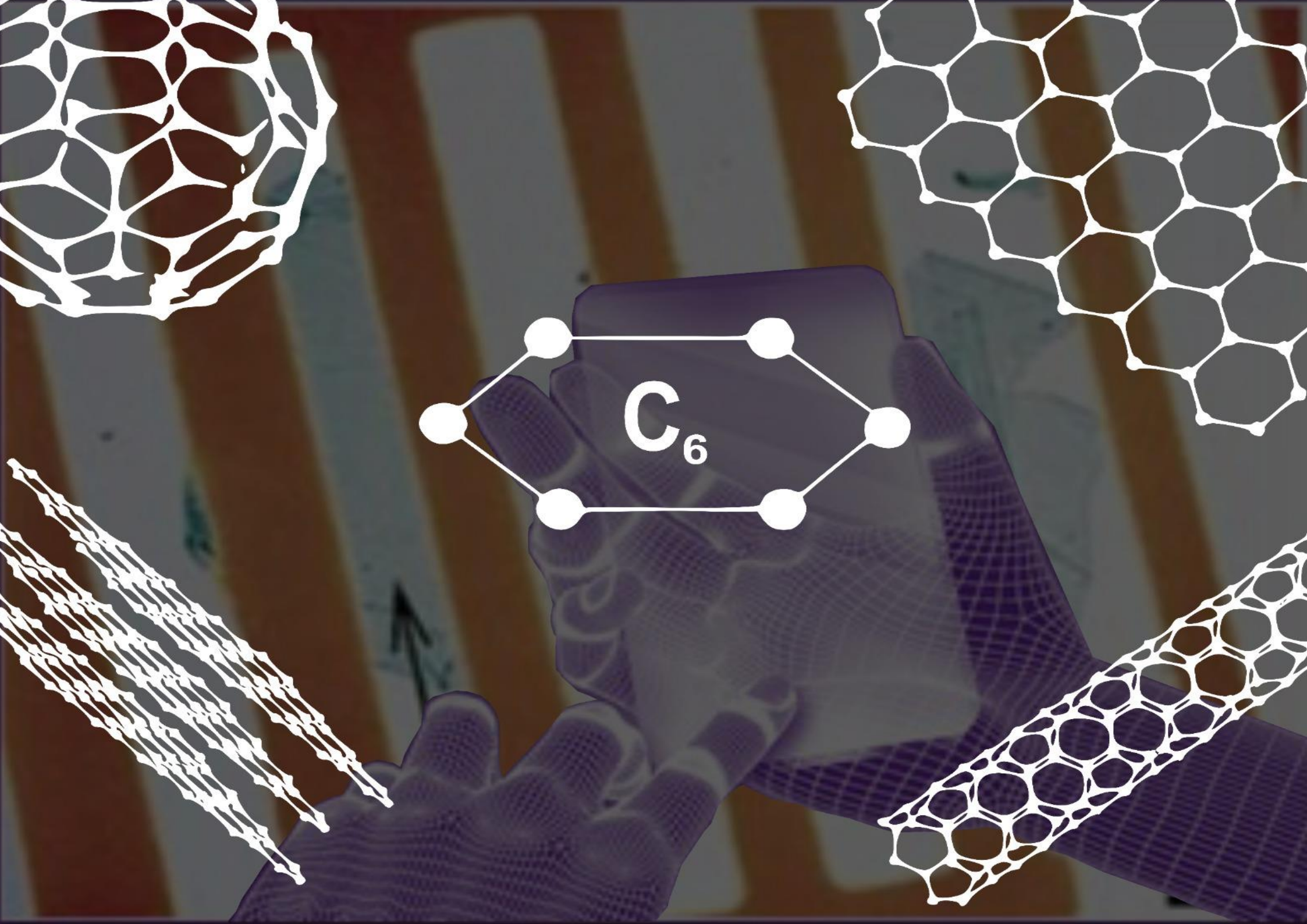
Tabla 10: propiedades de los CNTs.

Al suponer los nanotubos de carbono un material relativamente nuevo en el campo de la construcción, los primeros ensayos y estudios en los que se ve implicado datan de poco antes de la última década, pudiendo asimilar que no exista aún consenso sobre los valores numéricos que adjudicarle, con que se toman como valores medios para estudios experimentales.

No obstante, las fuentes consultadas coinciden en que **los nanotubos quirales presentan mejores atributos que el resto de tipologías**, seguidos de los nanotubos configurados en zigzag y dejando a los nanotubos en sillón en último lugar [\[32\]](#). Esta diferencia es más notable entre los nanotubos quirales y los no quirales (zigzag y sillón), siendo de poca relevancia la diferencia entre los nanotubos no quirales.

⁶² Este valor se establece como el valor promedio, existiendo un rango de valores como consecuencia a la incertidumbre experimental de varios estudios, como la estimación del valor de las longitudes, diferente en cada caso de estudio [\[24\]](#). No obstante, existen experimentos en los que el valor del módulo de elasticidad de los nanotubos ha alcanzado valores de hasta 5,5 TPa [\[27\]](#).

⁶³ La resistencia a tracción del acero estructural es de 2 GPa.



C_6



CAPÍTULO II: SIMULACIÓN GEOMÉTRICA DE MODELOS TEÓRICOS

con Rhinoceros, Grasshopper, Python e ICEM



Antes de elaborar cualquier ensayo experimental, se considera necesaria la elaboración de **un modelo teórico** previo al físico, ya que los recursos informáticos de la actualidad lo permiten. Así, mediante la realización de un modelo virtual a priori, se podrán extraer una serie de resultados y conclusiones para compararse con futuras pruebas experimentales que se lleven a cabo. Además, el diseño y modelado virtual de las muestras permitirá un conocimiento exhaustivo de las mismas. Como bien expone Juan José Sáenz (2), la simulación teórica puede considerarse el fundamento de la Nanociencia y la Nanotecnología, ya que la comprensión de los sucesos que ocurren a tan pequeña escala solo puede ser posible gracias a estos medios actuales [60].

En este capítulo se lleva a cabo el **diseño y mallado de muestras tridimensionales**. Las muestras constarán de un material teórico⁶⁴, que configurará la matriz principal en la que se encontrarán inmersos los nanotubos de carbono para estudiar la interacción entre ambos elementos. El objetivo de esta simulación será evaluar si los atributos de los nanotubos podrían ser decisivos para mejorar las propiedades del microcemento y materiales asociados como los conocemos hoy en día o, incluso, para sintetizar un nuevo material. Para ello, será necesario realizar varias muestras de diferentes tamaños y con diferentes densidades de nanotubos de carbono, por lo que se debe disponer de un **algoritmo optimizado** que permita un modelado tridimensional rápido y eficiente.

Para la elaboración del modelo se escoge el software **Rhinoceros**. El motivo de esta elección radica en las posibilidades que el programa de diseño pone a disposición del usuario gracias a extensiones como **Grasshopper**⁶⁵, que permite la elaboración de modelos virtuales desde la parametrización. Otra gran ventaja es la posibilidad de modelar directamente con códigos en **Python** u otro lenguaje, si bien es necesario disponer de conocimientos básicos de programación para su empleo. De este modo, el programa es capaz de modelar en 3D a partir de unas pocas líneas de texto escritas por el usuario, lo que ahorra tiempo de diseño y de cálculo computacional, además de simplificar el proceso de diseño reduciendo las operaciones necesarias exponencialmente. Una vez se dispone del algoritmo de diseño, se procede al mallado de los modelos virtuales con **ICEM** para la ejecución de una simulación a través del **análisis de elementos finitos en Ansys**.



“En los últimos 20 años, las técnicas fundamentales de teoría, modelado y simulación han sufrido una revolución comparable a la de los avances tecnológicos y experimentales que han dado lugar al desarrollo de la Nanociencia.”

*Juan José Sáenz, licenciado y doctor en Ciencias Físicas por la UAM.
“Teoría, modelado y simulación en nanociencia”.*

⁶⁴ El material teórico del estudio se considera microcemento.

⁶⁵ En el **Anexo I** de este documento, se adjunta una breve introducción a Grasshopper.

Diseño y modelado de muestras

En este apartado se recoge el proceso completo de diseño de las muestras tridimensionales. Para ello, como se viene comentando, ha sido necesario el empleo de varias herramientas que no se suponían necesarias a priori de este estudio.

Los objetivos requerían de la elaboración de un **número considerable de modelos**, con dimensiones y relaciones de nanotubos con respecto a la muestra diferentes en cada caso. Desde modelos con un CNT hasta muestras con miles de ellos que resultaban en una complicación computacional, tanto para el programa como para las características electrónicas del ordenador.

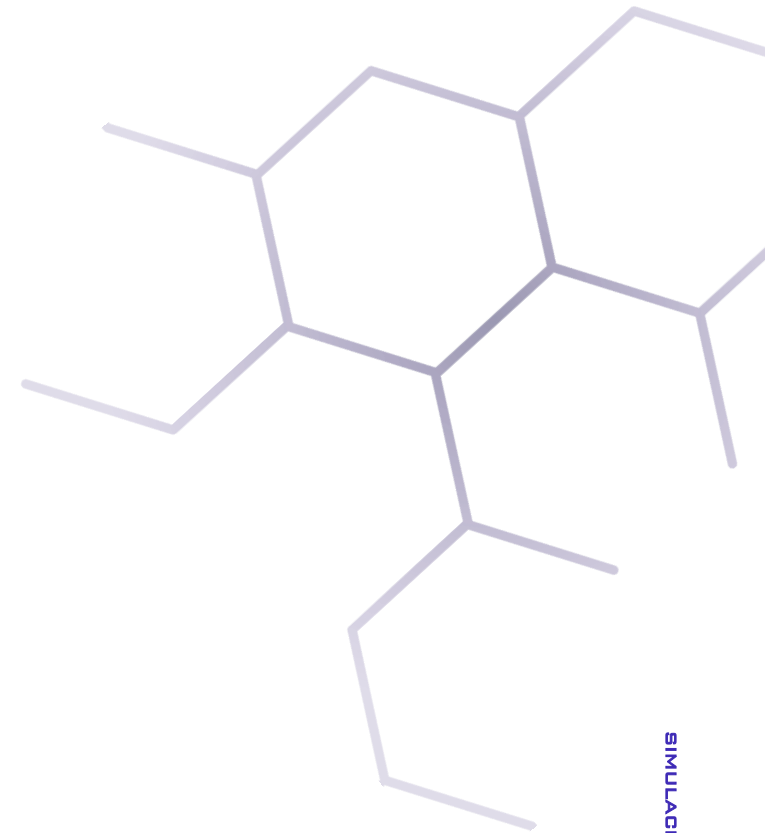
La falta de prestaciones de los softwares que se emplearon al inicio de la simulación, o la inadecuación de estas al caso de estudio en concreto, llevaron al empleo de mecanismos más potentes que simplificaron, en gran medida, la rápida generación de modelos diferentes. Esta simplificación se hizo evidente, sobre todo, en la reducción del tiempo que han necesitado el software y la máquina para lograr crear modelos de gran densidad de datos, si bien la **complejidad del algoritmo generador** se incrementó en gran medida y también su elaboración.

La dificultad no disminuyó una vez se llegó al momento de mallar los modelos tridimensionales previamente diseñados, pues debieron adquirirse, de nuevo, unas competencias de las que no se disponía al inicio de la investigación. Identificado el mejor modo de mallado, y, optimizado este, se introducen las muestras a estudiar en el programa para ser tratadas y poder introducirlas en el software de simulación mecánica para analizar los resultados obtenidos.

Objetivos

Los modelos tridimensionales deben cumplir una serie de requerimientos muy concretos. Estas restricciones servirán para alcanzar unas **condiciones geométricas de las muestras** que supongan una aproximación a la realidad, de cara a la ejecución de la simulación en un estadio posterior a este trabajo.

En primer lugar, los nanotubos incluidos en las muestras deberán presentar unas **dimensiones muy concretas e invariables** independientemente del cilindro que se trate. Además, no podrán colisionar entre ellos pues esto no representaría la naturaleza independiente de los nanotubos de carbono.



En segundo lugar, **su distribución en el interior de la muestra deberá ser aleatoria a la vez que homogénea** y la orientación de los cilindros no podrá presentar direcciones similares que tiendan al paralelismo.

En tercer lugar, **los cilindros no podrán atravesar las paredes de la muestra** cúbica, muriendo en el choque con ésta al tiempo que crean intersecciones diferentes y complejas debido a las direcciones aleatorias y dispares que presentarán.

Teniendo en cuenta las condiciones anteriores, se pretende diseñar un **algoritmo personalizado** para generar modelos con características variables de modo rápido y eficiente, pues se debe disponer de una **gran cuantía de muestras** que permitan varias simulaciones con parámetros variables y **posibiliten una síntesis entre los resultados** de todas ellas, a razón de obtener unas conclusiones precisas y significativas.

Por otro lado, debido a que se pretende abordar el estudio desde un punto de vista anisótropo, siguiendo con los objetivos principales de este estudio, se deberá dotar a cada uno de los cilindros comprendidos en las muestras de unos atributos direccionales, es decir, **cada nanotubo de carbono deberá estar asociado a un vector director cuya dirección coincidirá con la del eje longitudinal del cilindro** en cuestión.

Resumiendo lo planteado, se pretende diseñar un **algoritmo que sea capaz de generar una gran cuantía de muestras en tiempos de computación asumibles** para la investigación, al mismo tiempo que les confiere la calidad necesaria de cara a su posterior simulación. Esto se hará a través de la implantación de una serie de condiciones de condiciones, que las geometrías inmersas en la matriz deberán cumplir, y ciertos requerimientos sin cuyo cumplimiento no podrán formar parte de la probeta virtual.

Así, los objetivos del modelado se establecen en que **las muestras obtenidas representen fielmente los atributos de unas probetas reales**⁶⁶ y que su generación suponga un proceso asumible en cuanto al tiempo y los recursos empleados diseñándose un algoritmo personalizado y eficiente. Sin él, el proceso de desarrollo de prueba y error podría volverse largo y complejo, pues no permitiría la constante modelación de muestras hasta alcanzarse la calidad deseada. Es por ello que la obtención de un algoritmo ágil y definido se alza como el objetivo principal de este apartado.

⁶⁶ Los modelos deberán representar fielmente las propiedades de los materiales de los que estaría compuesta. Sin embargo, las condiciones geométricas que se exigen están relacionadas con la probeta ideal a obtener, suponiendo que los problemas de enrollamiento y dispersión de los nanotubos se hubieran solucionado.

Metodología

Las muestras a diseñar deberán contar con un número variable de nanotubos para cada caso, cuya característica común e ineludible será conseguir que éstos se coloquen homogéneamente distribuidos en la matriz contenedora, sin cortarse en ningún caso y en posiciones tridimensionales aleatorias en las tres direcciones del espacio.

Para conseguirlo, se toma como método el siguiente: se parte de una serie de **puntos de coordenadas tridimensionales aleatorias** que estarán contenidos en la matriz, representando cada punto a un nanotubo, de forma primitiva. Los nanotubos se simplifican para dar lugar a formas cilíndricas huecas (1.43) a las que se añadirán tapas en ambos extremos⁶⁷. Posteriormente, con el objetivo de conseguir **generar un nanotubo a partir de este punto P**, será confeccionado un vector director para cada uno de ellos, con coordenadas espaciales también aleatorias.

En este marco de arbitrariedad, siempre desde el interior de la matriz, los puntos desde sus coordenadas, **se proyectan en las caras de la muestra cúbica con la dirección dada por los vectores directores V y -V** generados y sentidos fruto de este vector en positivo y su contrario⁶⁸. Así, la dirección del vector no varía, pero sí su sentido, de modo que el punto espacial contenido en la matriz, se proyectará por dos lados en dependencia de la dirección aleatoria, previamente generada. Una vez obtenidos ambos puntos proyectados, mediante su unión se origina una recta para cada punto y vector, que representará el eje de cada uno de los nanotubos.

Tomando esta línea E como referencia, se formarán cilindros CNT de base y longitud correspondientes a la longitud de la recta hallada y radio $r=1.187 \text{ nm}$ ⁶⁹. Por tanto, la longitud de cada nanotubo generado no superará, en ningún caso, las dimensiones de la muestra, presentando un lado de $500 \mu\text{m}$ el prototipo de mayor dimensión. Puesto que la longitud de los nanotubos supera esta dimensión, se parte de la premisa de que todos los nanotubos presentes en la matriz la atravesarán de lado a lado, es decir, ninguno de los extremos de los CNTs se encontrará inmerso en las muestras que aquí se diseñan, suponiéndolos fuera de la matriz contenedora.

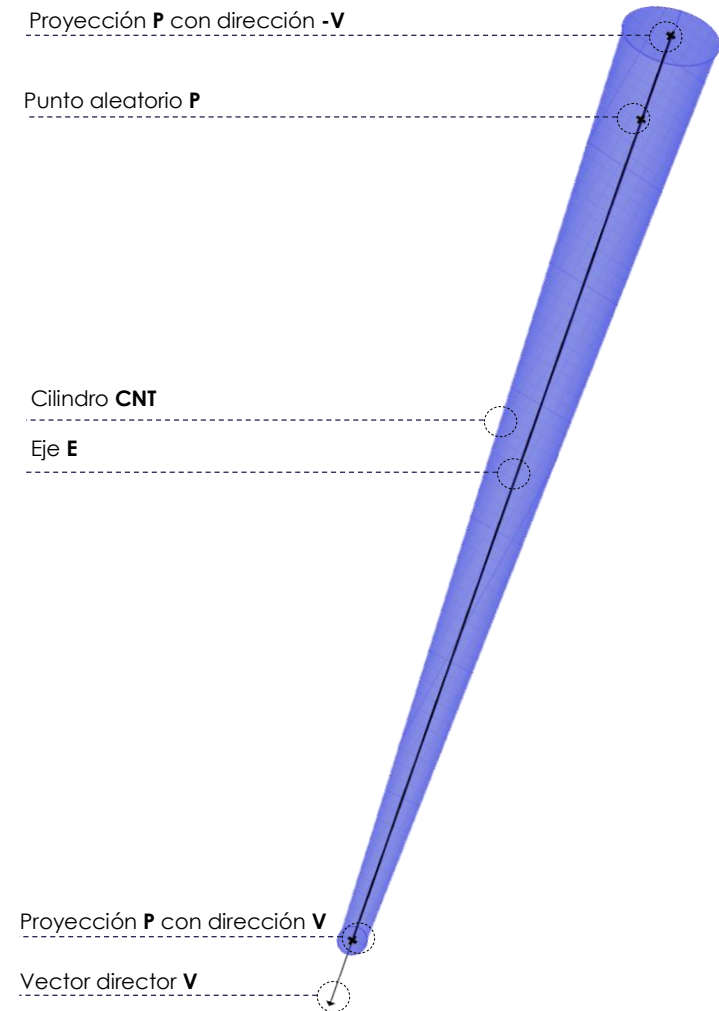


Ilustración 43: atributos de los cilindros diseñados.

⁶⁷ Esto se hará con el fin de hacer posible el **cálculo del volumen de la masa de nanotubos**, para lo que el programa exige, lógicamente, disponer de volúmenes cerrados.

⁶⁸ Es decir, este mismo vector multiplicado por el **factor: -1**.

⁶⁹ En la actualidad, los fabricantes de "aditivos" de nanotubos de carbono suelen elaborarlos mediante solubilización en agua para su mejor dispersión. Precisamente **se emplean nanotubos de 2.374 nm de diámetro y longitudes de orden micrométrico**. Por ello, a la hora de realizar un ensayo físico, lo más habitual sería que se incorporasen a la mezcla de este modo, conque se ha considerado ventajoso tener en cuenta este hecho desde la fase primitiva del estudio que en este documento se realiza.

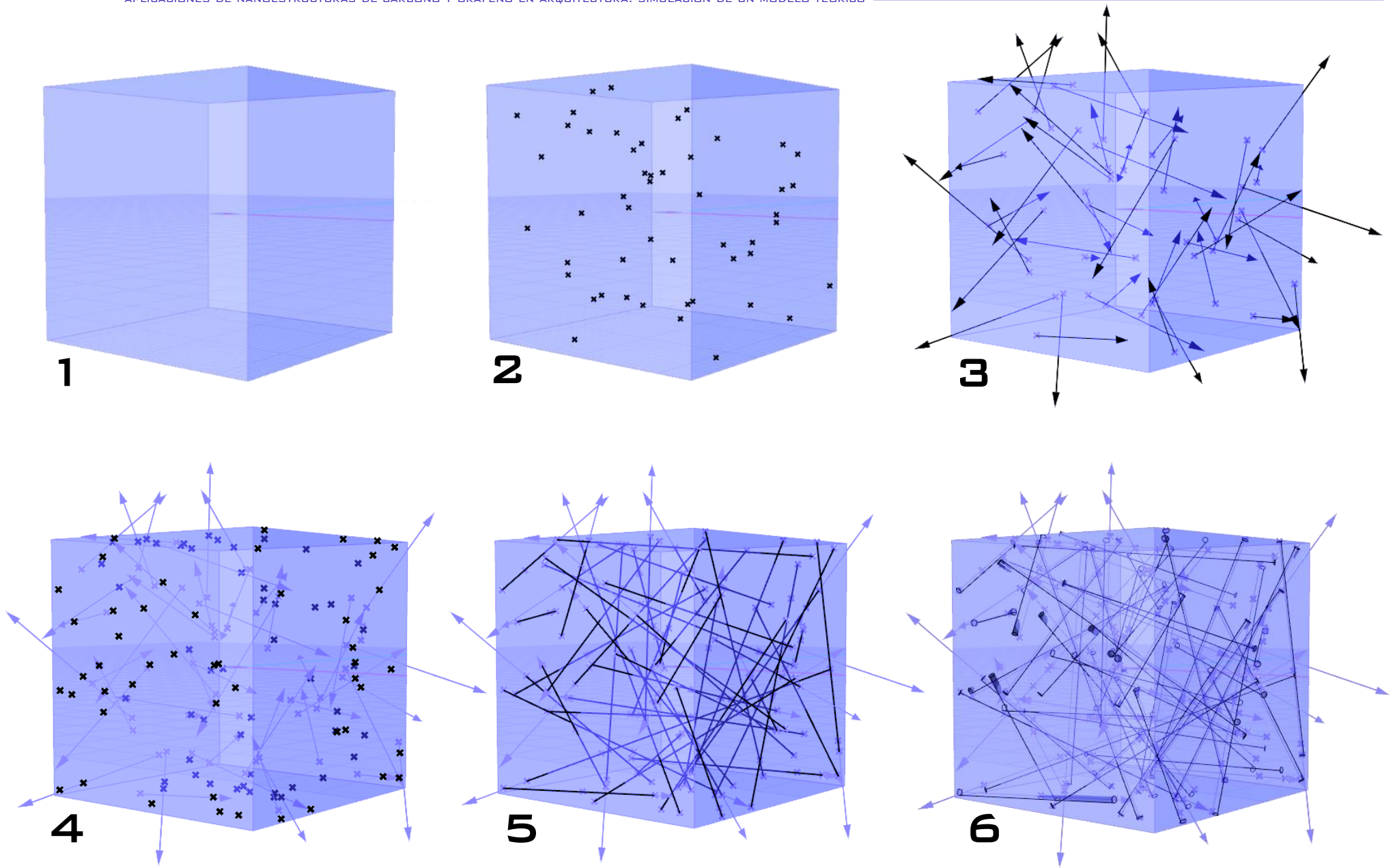


Ilustración 44: resumen gráfico del proceso de modelación de las muestras.

El proceso de creación de nanotubos se verá condicionado por la exigencia de que **ninguno de los nanotubos sea secante con otro**, en cada modelo. Además, la cantidad de estos en cada muestra se calculará teniendo en cuenta el porcentaje buscado de nanotubos para con el volumen de la muestra. Para la obtención de esta relación, **se evaluará el volumen de la muestra cúbica y el volumen del sumatorio de todos los nanotubos existentes**⁷⁰. Es importante destacar que, para poder ejecutar el cálculo de volumen de los tubos, ha sido necesario incorporarles una tapa en sus extremos en algún momento del proceso de elaboración.

Para el todo el proceso se emplean mecanismos de diseño y parametrización tridimensionales, como se ha comentado con anterioridad. En un primer momento, se trató de obtener los modelos mediante el empleo exclusivo de Grasshopper. Más adelante, se descubre que esta herramienta requiere **demasiado esfuerzo y tiempo computacionales** para modelar una cantidad moderada⁷¹ de nanotubos, por lo que no permitía la creación de un algoritmo optimizado para el diseño rápido y eficiente de numerosas muestras. Por este motivo, debió emplearse una función de Grasshopper que permite la generación de diseños virtuales mediante el empleo de ventanas de programación, con lenguajes como Python.

Las mismas circunstancias se dieron en la segunda parte de este estudio, encargada de mallar las muestras ya diseñadas para hacer posible proceder a su simulación y estudio, debiéndose optimizar las características de los softwares de mallado empleados, mediante **ajustes con códigos de programación** en diferentes lenguajes informáticos. Todo este proceso se explica con detalle en los apartados que siguen.

La metodología de este estudio se ha visto, por tanto, fuertemente condicionada por la falta de competencias, que han debido irse adquiriendo progresivamente con el avance de la investigación, y **la necesidad de la optimización de los algoritmos de diseño**, para poder ajustarlo a las características de los ordenadores disponibles⁷² (I.45).

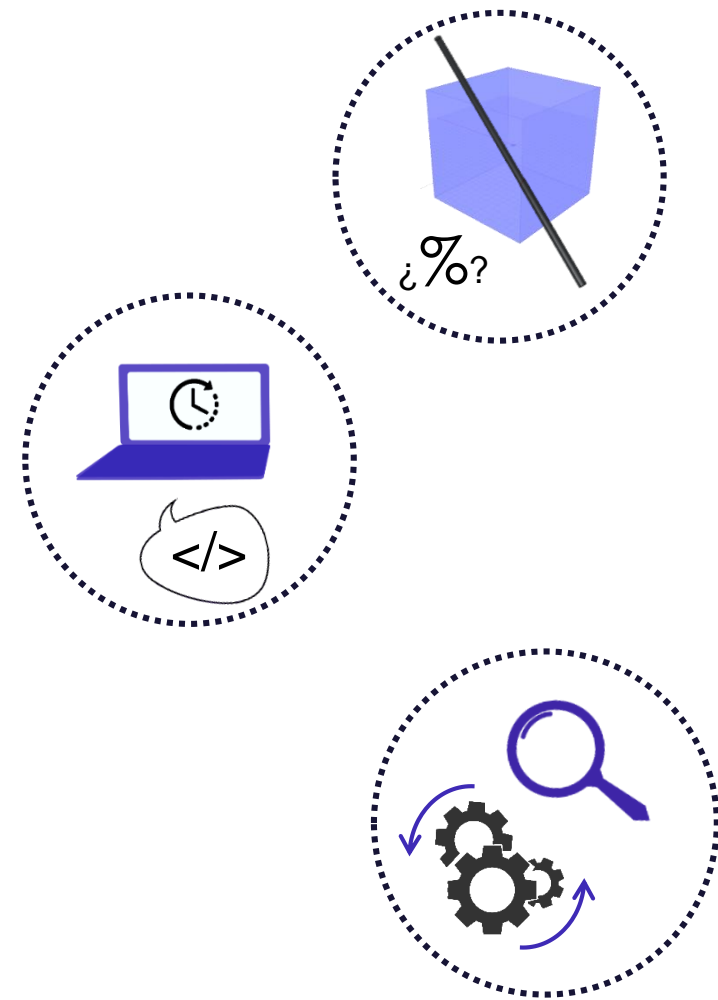


Ilustración 45: requerimientos básicos e inconvenientes en el modelado.

⁷⁰ El cálculo de este volumen presentará complejidad debido a su irregular corte con las paredes de la muestra, consecuencia de la aleatoriedad de su dirección.

⁷¹ Cantidad moderada en relación con el total necesarios. Es decir, la máquina y el programa presentaban **dificultad para generar unos cientos de tubos** cuando se estimaban necesarios miles de ellos en las muestras de mayor envergadura de cálculo.

⁷² En diseño tridimensional, la **memoria RAM** de un ordenador es la encargada de realizar los cálculos matemáticos y paramétricos de los procesos de diseño, mientras que la **tarjeta gráfica** es la responsable de la visualización de las operaciones previamente realizadas por la RAM. Una memoria RAM de baja capacidad supone un aumento exponencial del tiempo computacional necesario para la realización de las operaciones, mientras que una gráfica de calidad deficiente supondrá una visualización de modelos tridimensionales complejos poco fluida. Por ello, ha sido necesaria la modificación de los ordenadores a disposición de la usuaria.

Diseño de modelos teóricos

En este apartado se expone con detalle el proceso total de desarrollo, que tiene comienzo en unos modelos de compleja, larga y engorrosa realización⁷³ que evolucionan progresivamente hasta convertirse en unos diseños optimizados y eficientes. Los modelos finales resultan sencillos de realizar, permitiendo la creación de muestras virtuales casi instantáneamente, como resultado de un proceso de diseño y optimización del algoritmo de diseño que los modela.

Antes de exponerse esta evolución se exponen las diferentes muestras que se han diseñado una vez el algoritmo lo ha permitido.

Comprensión de muestras

Se pretende estudiar desde la interacción entre ambos materiales protagonistas, a pequeña escala, hasta la repercusión de la inclusión de nanotubos en una muestra grande en relación a su diámetro, a mayor escala.

Para evaluar los efectos de **interacción de los propios nanotubos de carbono con el material de la matriz** contenedora, se escoge realizar muestras de baja dimensionalidad en las que se aprecie con claridad la presencia de los nanotubos. Tomando la muestra que refleje lo anterior como inicio, se va **aumentando progresivamente el tamaño de la probeta**. Esto permite un **análisis global desde lo más detallado hasta lo más general**, que llega en la muestra más grande⁷⁴ para presentar la modificación en las propiedades del propio material contenedor.

Estos modelos tendrán una apariencia como la de la figura (1.46). El material base, en este caso el microcemento, formará una matriz contenedora de cilindros⁷⁵ dispuestos aleatoria y homogéneamente, suponiendo una óptima dispersión de los CNTs que deberá darse también en un ensayo físico.

Las dimensiones de las probetas se han seleccionado atendiendo a las propiedades geométricas y dimensionales de los nanotubos, de orden nanométrico en dos de sus dimensiones, el diámetro, pero micrométrico en la tercera, su longitud⁷⁶.

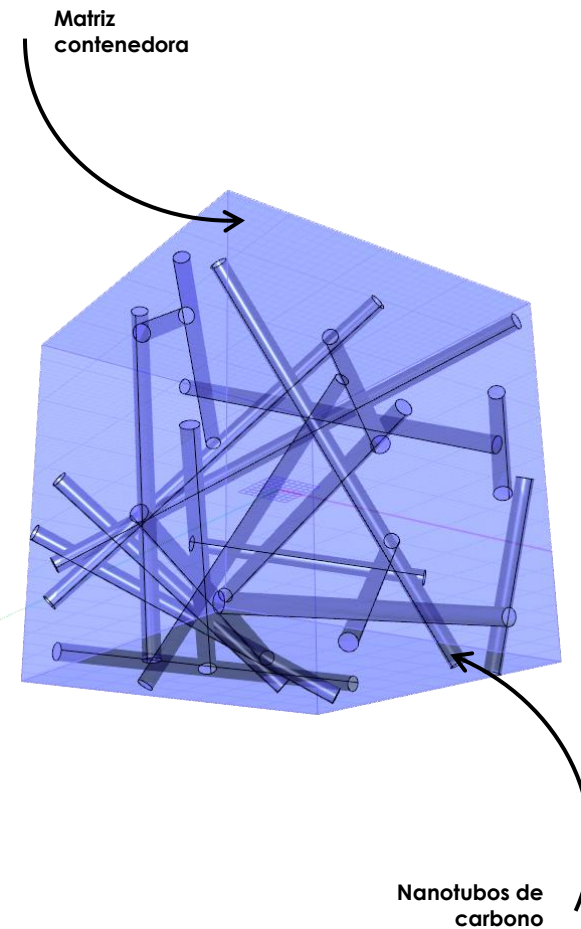


ilustración 46: material contenedor y contenido en los modelos.

⁷³ Esto es resultado del empleo de Grasshopper en exclusividad, sin asistencia de elementos de programación con Python.

⁷⁴ Nótese que la muestra "más grande" será de 500 nm (0,5 μm), que no es una dimensión grande.

⁷⁵ Desde el año 2000 hasta la actualidad, Hsueh et al. [20-22] demostraron la eficacia de los estudios realizados con el concepto simplificado de los CNTs, es decir, considerándolos cilindros de geometrías primitivas.

⁷⁶ Pueden alcanzar longitudes milimétricas [24] aunque lo habitual es que ronden una dimensión de 1,5 μm.

En relación a lo que antecede, el lado de las muestras tomará valores desde los 50 nm, en concordancia con la dimensión del diámetro del CNT, hasta los 500 nm, para no exceder la longitud de los tubos y poder suponerlos enteros en el interior de la muestra⁷⁷.

Además de variarse el tamaño de la probeta, se diseñarán modelos con **diferentes densidades de nanotubos** respecto al total de la matriz, para cada uno de los tamaños. Así, las muestras a diseñar quedan reflejadas en la **tabla 11**:

Lado de la probeta	Porcentaje de CNTs							
	0,2 %	0,3%	0,4%	0,6%	0,8%	1,0%	1,2%	1,5%
50 nm								
100 nm								
200 nm								
300 nm								
500 nm								

Tabla 11: dimensiones y porcentajes de CNTs de las probetas virtuales

Como puede apreciarse, se realiza un total de **40 muestras diferentes**. Con esta cantidad se pretende disponer de suficiente información para obtener unas conclusiones útiles de cara a la futura realización de ensayos experimentales, fruto de un proceso de síntesis y comparación entre todas las simulaciones ejecutadas (I.47).

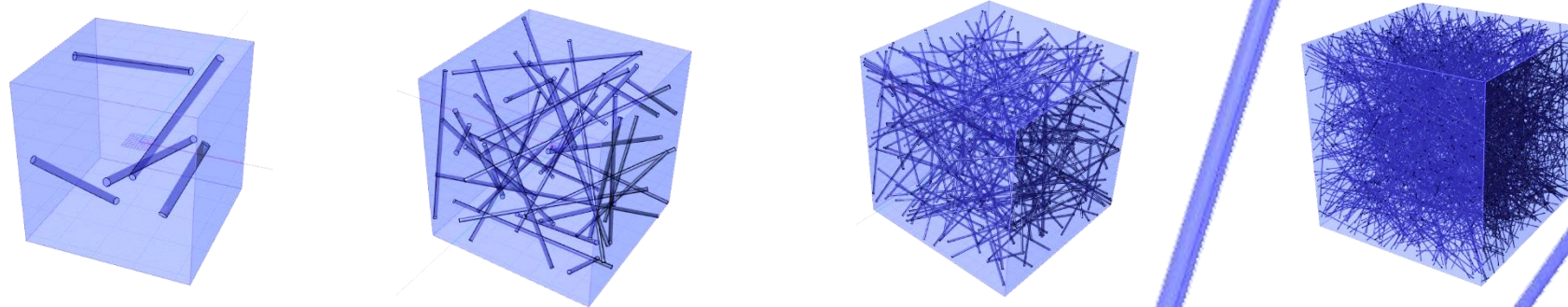


ilustración 47: evolución de tamaño y densidad de las muestras.

⁷⁷ La longitud de los nanotubos de carbono alcanza el orden micrométrico, luego medirán como mínimo 1 μm que es el doble de la dimensión del lado del modelo más grande que va a realizarse.

Modelado tridimensional en Rhinoceros

A continuación, se expone el proceso de desarrollo de los dos modelos tridimensionales protagonistas de este estudio: el modelo inicial, realizado en exclusividad con Grasshopper y el modelo final, y completo, ejecutado mediante la combinación de las herramientas de Grasshopper y las ordenes programadas con Python.

MODELO INICIAL: parametrización con Grasshopper

Siguiendo la metodología anteriormente expuesta, era necesaria la obtención de coordenadas aleatorias para la creación de puntos espaciales dentro de la muestra contenedora. El diseño de ésta con Grasshopper es sencillo, como se ha expuesto en la introducción anterior al software. Sin embargo, la necesaria condición de aleatoriedad de los puntos iniciales, así como la exigencia de que los nanotubos no se corten entre ellos, supusieron complicaciones en cuanto el diseño en las diferentes propuestas.

PROPUESTA 1ª: generación de coordenadas aleatorias en Grasshopper.

Mediante el componente "Random" (I.48) se generaron valores numéricos aleatorios, siempre contenidos en el dominio de valores de la muestra⁷⁸. Este componente pide un rango numérico "R" en que estarán contenidos los valores aleatorios, el número de valores deseados "N" y una semilla "S" con respecto a la cuál hablar esa serie de valores. Este parámetro tiene como función servir a las operaciones de cálculo interno del programa para la **obtención de aleatorios diferentes**⁷⁹.

Como resultado, GH nos muestra una **serie de valores contenidos en el dominio de nuestra muestra**. Esta operación sirve para hallar los valores de la coordenada "X" de nuestros puntos aleatorios, como nos pide el componente "ConstructPoint" (I.48), por lo que deberemos repetir la operación de aleatorios 3 veces para conseguir el trío de coordenadas espaciales que son necesarias.

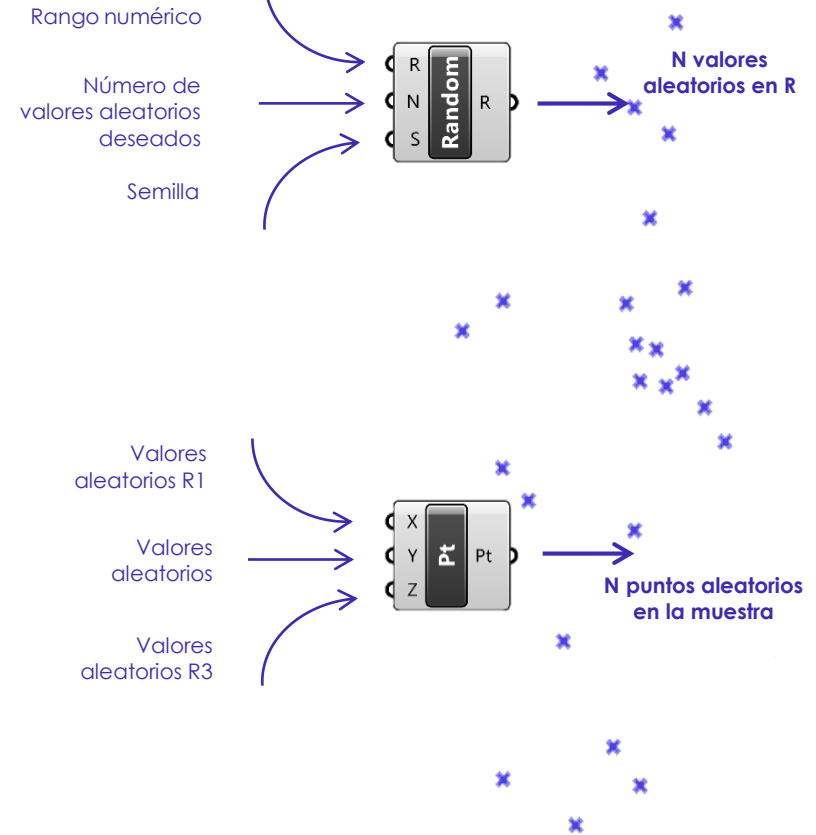


Ilustración 48: empleo de los componentes "Random" y "ConstructPoint" en Grasshopper.

⁷⁸ En este caso, será de -150 a 150 como consecuencia del diseño de la muestra con "Center Box" y un lado buscado de 300 nm.

⁷⁹ La función de aleatorios será siempre la misma en un rango. Con la semilla se consigue que estos valores varíen, pues en lo que respecta al programa, los valores de "R" y "N" serán los mismos para nuestras tres coordenadas, como tampoco varía la función "Random" que viene programada. Por ello, con "S", disponemos de un parámetro de la función que varía a gusto, aleatoriamente.

En este modelo se han creado **cinco puntos espaciales**. Como puede apreciarse en la *ilustración 49*, el valor de la semilla ha debido variarse para hallar las tres coordenadas necesarias.

Los puntos resultantes parecen estar bien distribuidos en la muestra. Esto es resultado de los valores tan dispares que se han adoptado para las semillas.

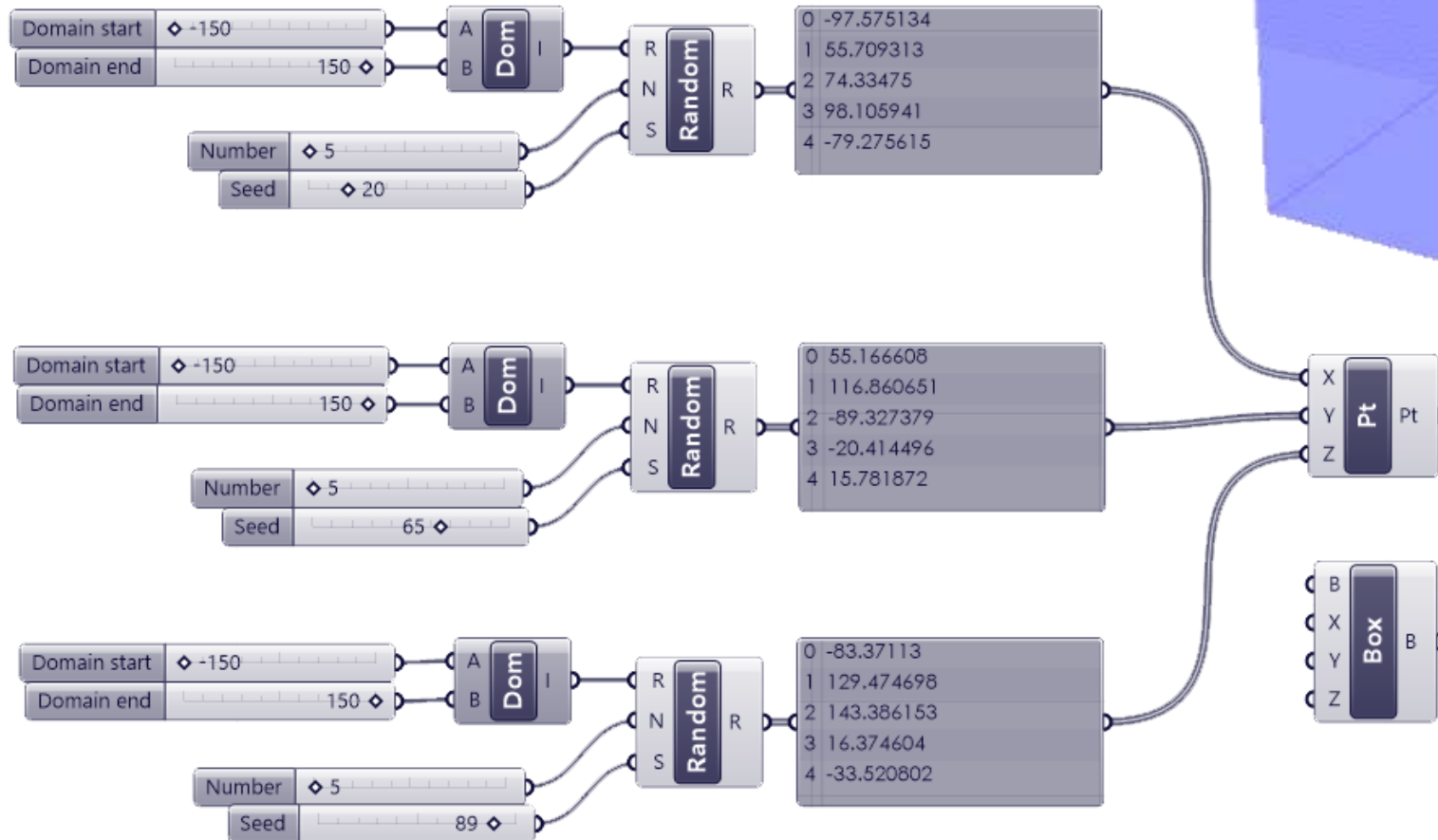
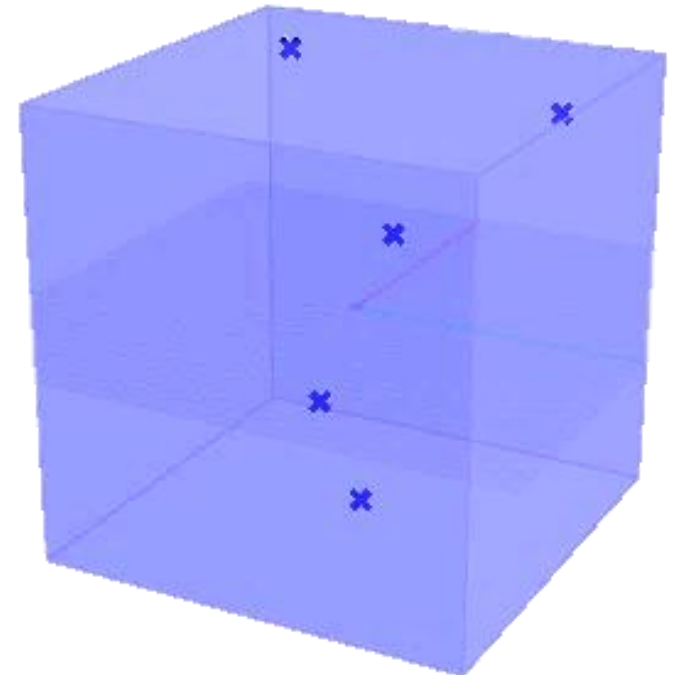


ilustración 49: generación de puntos espaciales con "Random", directamente en Grasshopper.

Si los valores de la semilla no varían con la coordenada, se obtendrán **tres listas con los mismos números** en cada una. Esto demuestra que el componente "Random" no es tan aleatorio como cabría pensar (I.50).

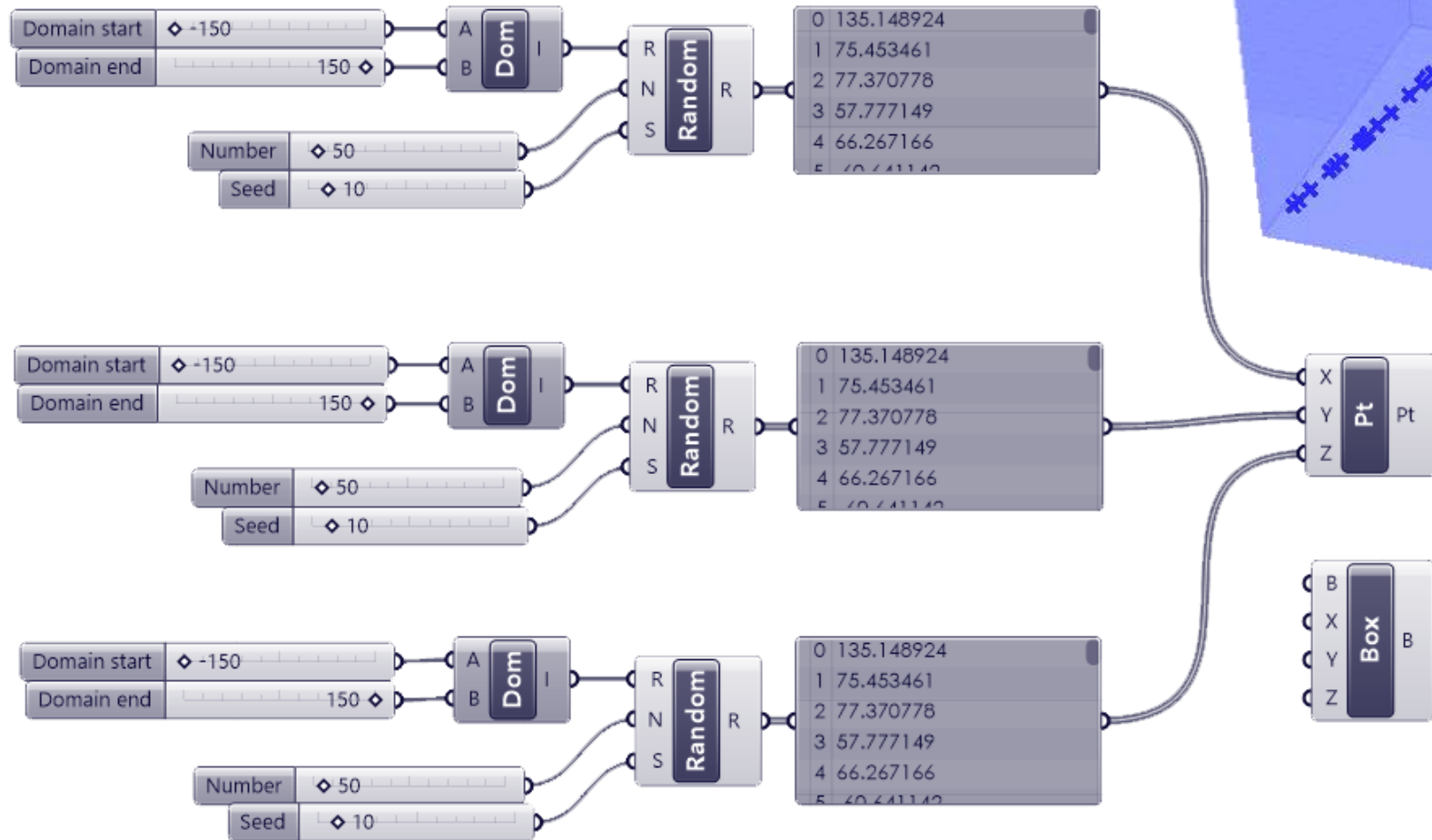
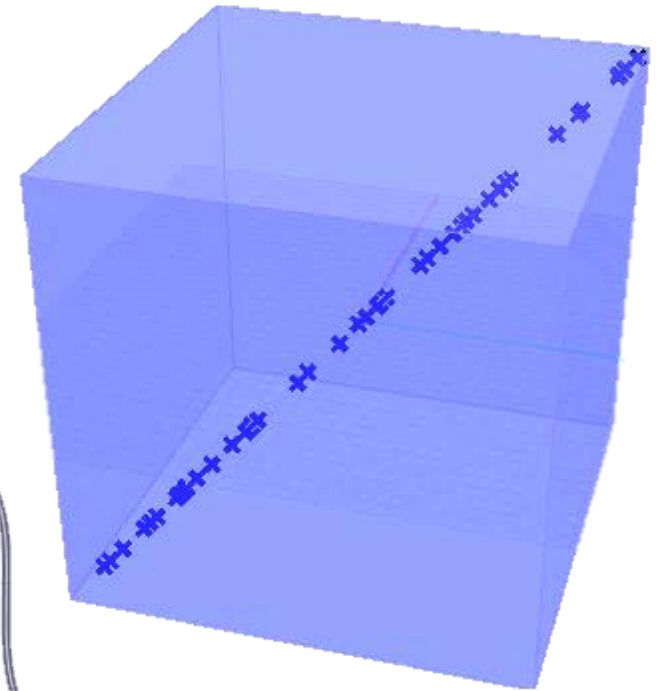


ilustración 50: agrupación de puntos espaciales como consecuencia del empleo de la misma semilla en sus tres coordenadas en "Random", Grasshopper.

Sin embargo, aunque los valores de la semilla cambien, si lo hacen siguiendo algún patrón, **los puntos quedarán agrupados** espacialmente (1.51).

En este caso, se han tomado múltiplos de diez para los tres valores de la semilla. Se exploran a continuación, otros métodos de generación de coordenadas aleatorias.

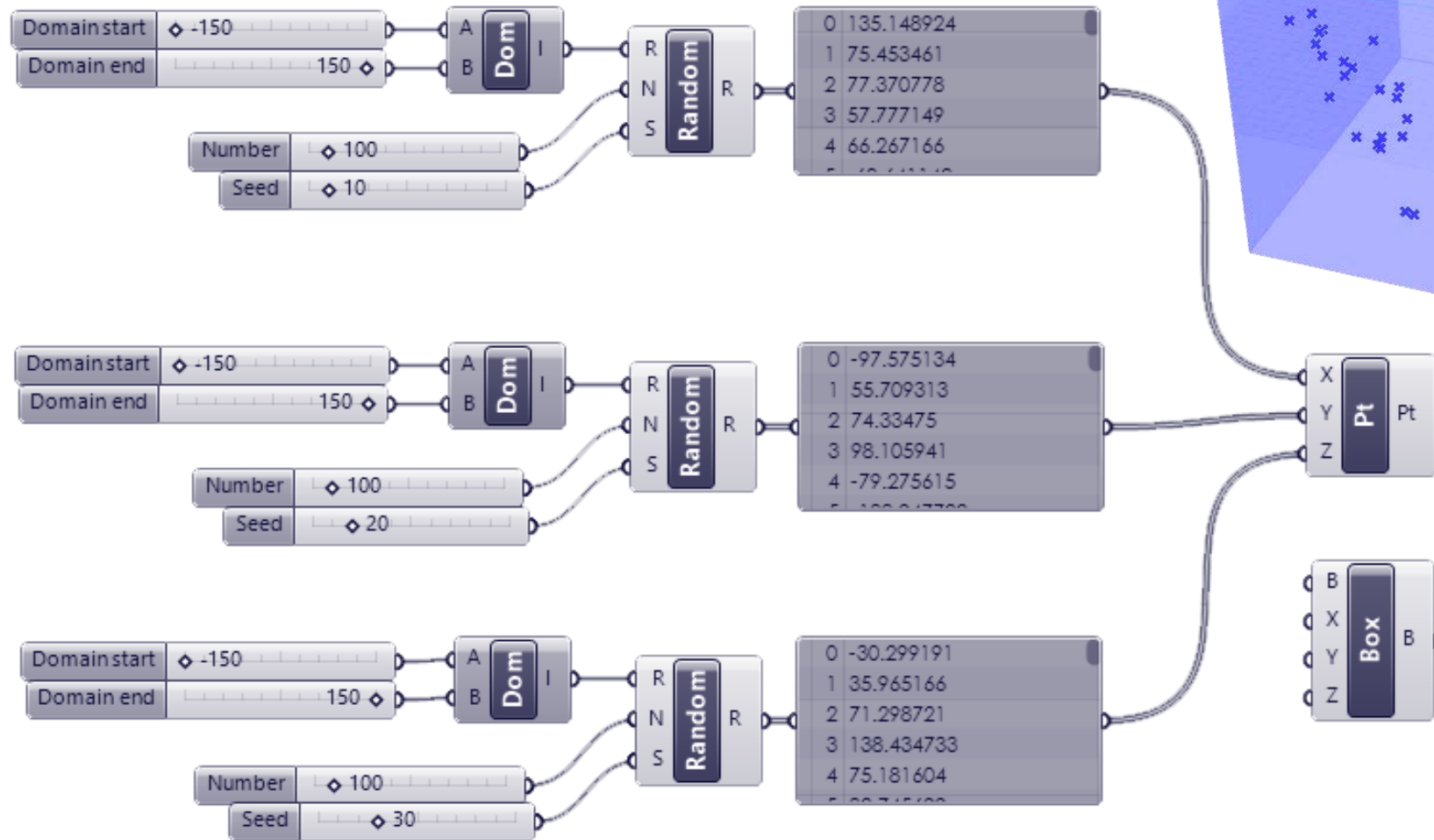


ilustración 51: agrupaciones de puntos espaciales generados como consecuencia de semillas enmarcadas en una sucesión numérica común con "Random", Grasshopper.

PROPUESTA 2º: introducción de coordenadas de fuente externa a GH

Para la obtención de números aleatorios se emplea un **generador externo y se almacenan los valores en archivos de texto independientes** para cada coordenada. Grasshopper permite conectar archivos externos al programa, como una lista de valores igual que las que se exponen en el apartado anterior.

Se genera, entonces, un fichero de texto con números aleatorios para cada coordenada de cada vector y de cada punto. Una vez definidos el nombre del archivo de texto a conectar y el directorio donde se encuentra, el componente "Concatenate" nos permite **introducir esos datos en las funciones de GH (I.47)**. Para que el programa pueda ahora interpretar estos datos, se emplea "ReadFile" para poder indicar a Grasshopper que el archivo que hemos conectado debe leerse por cada línea, es decir, que es una lista de valores.

Una vez se encuentran los datos en el programa, sus valores numéricos ya pueden emplearse para crear tanto **puntos de coordenadas espaciales aleatorias como puntos para definir las direcciones de los vectores**. Es importante destacar que el módulo de estos vectores en Grasshopper, por defecto, valdrá la unidad ya que sólo implica un parámetro direccional. Por ello, el componente "VectorXYZ" no permite su visualización en el espacio por lo que se deberá hacer uso de la función "VectorDisplay" para obtener una imagen de estos vectores (I.52). Este componente permite visualizarlos sobre puntos espaciales a seleccionar a través del input "P" puesto que, al ser vectores, se encontrarán flotando en el espacio virtual a no ser que se fije su inicio.

Al haberse generado 6 listas diferentes por nanotubo (3 listas para las tres coordenadas espaciales del punto, y otras 3 listas para las coordenadas del vector), la dirección y el punto iniciales con los que partirá el nanotubo se consideran "más aleatorios" que los obtenidos en la propuesta 1ª. Además, se ha **reducido el número de operaciones paramétricas a realizar por GH**, habiendo realizado la generación de aleatorios en una fuente externa al software. Por este motivo, el programa realizará menor esfuerzo computacional que empleando su propio "Random", aspecto que no es decisivo para la generación de una cuantía pequeña o moderada de CNTs pero que supondrá una gran limitación a la hora de modelar varios miles de ellos⁸⁰.

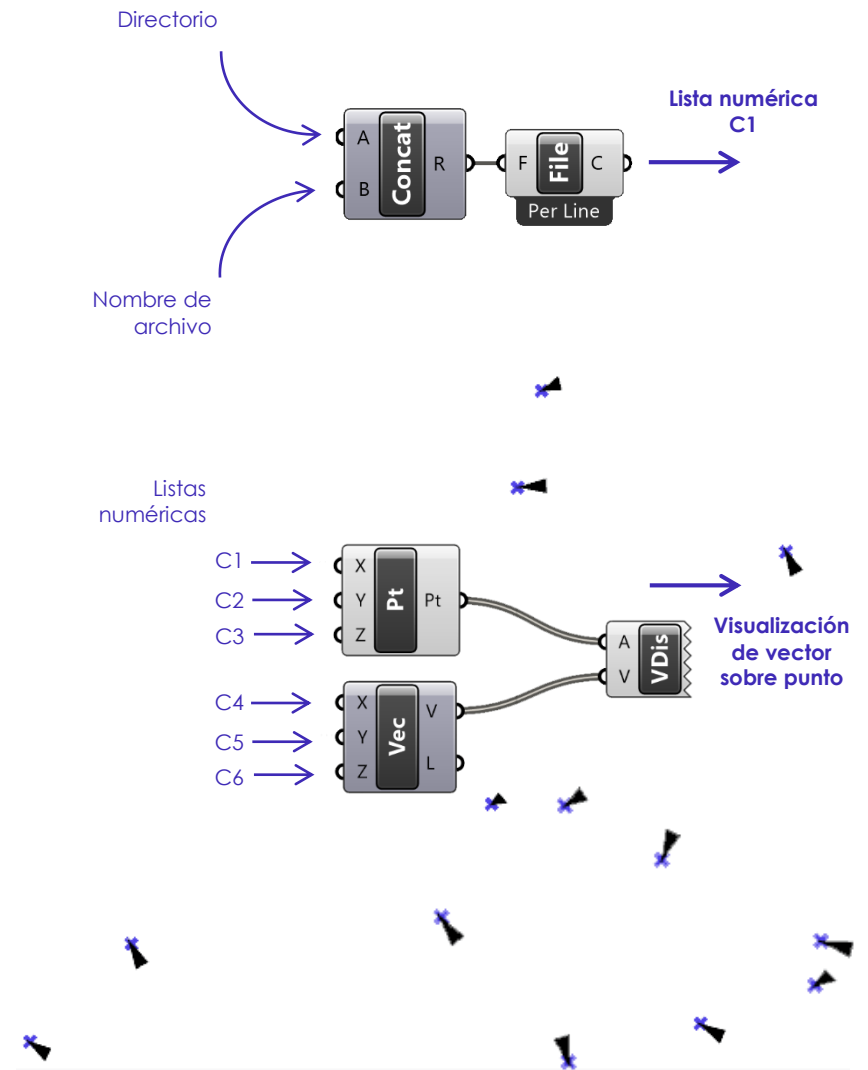


ilustración 52: arriba, importación de ficheros de texto como datos numéricos a Grasshopper; abajo, visualización de los vectores con base en un punto previamente generado.

⁸⁰ El Software tardaría en procesar la información largos tiempos de procesamiento, por tanto, no sería un algoritmo eficiente para elaborar nada menos que 40 muestras diferentes.

Este modelo presenta una cuantía de 100 puntos, con 100 vectores directores asociados (1.53). Nótese que cada vector indica la **dirección que tomarán los nanotubos al conformarse**, en el paso posterior.

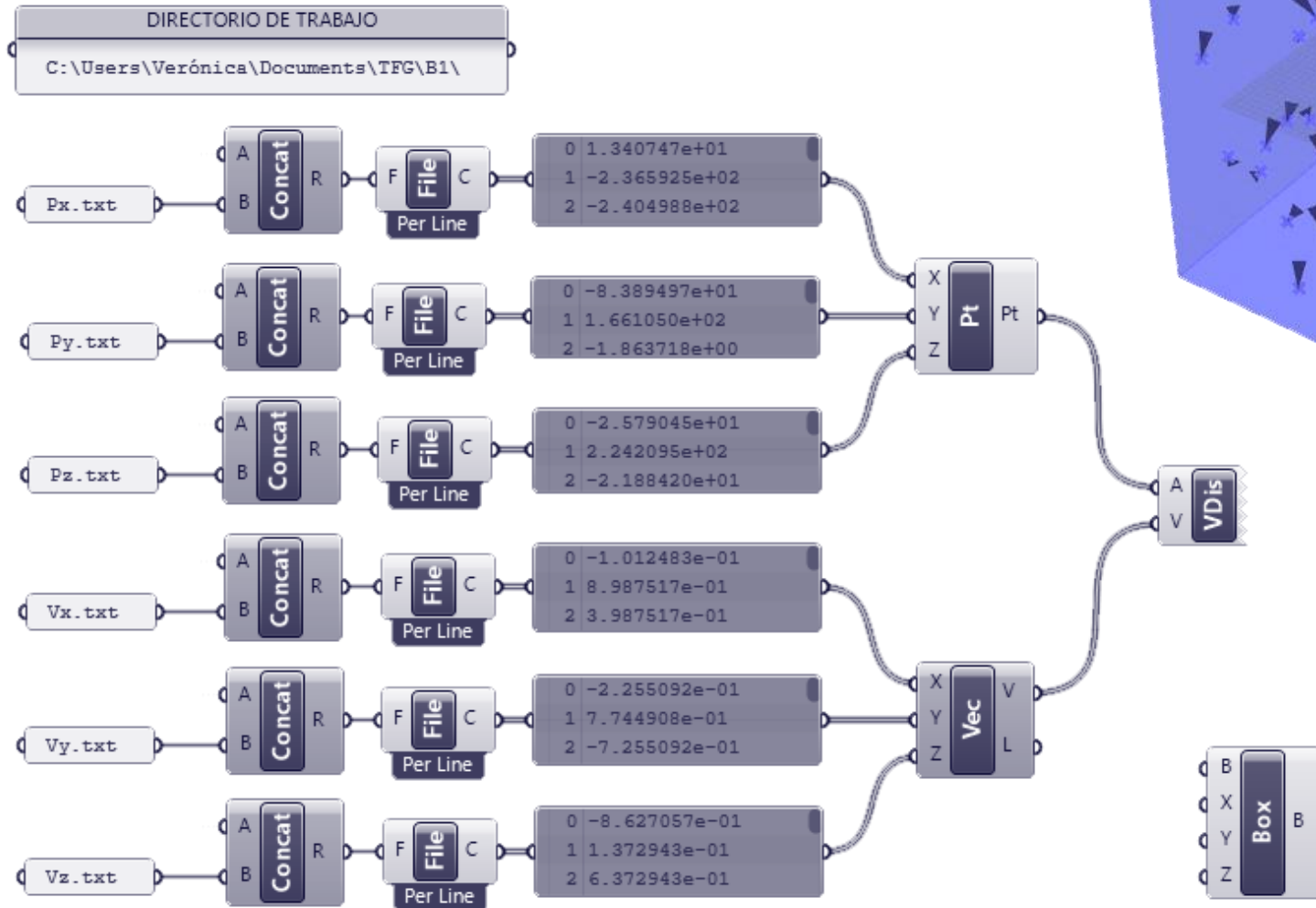


Ilustración 53: generación de puntos y vectores de coordenadas aleatorias importadas desde un generador externo a Grasshopper.

Una vez obtenidos los valores aleatorios para puntos base y vectores directores, empleando cualquiera de las dos propuestas anteriores, debe hallarse **la recta base para la conformación de cada nanotubo**. Esta línea será el resultado de la unión de la proyección del punto base en las caras exteriores de la muestra, con dirección el vector director y su negativo, que se halla multiplicando a los vectores originales por "-1" (1.55). Los valores numéricos se conservan, cambiando únicamente el signo de cada coordenada y, por tanto, su sentido.

Para encontrar ambas proyecciones se emplea "ProjectPoint" en dos ocasiones, con cada par de vectores anteriormente encontrados. Este componente pide "P", el punto que será proyectado, una dirección "D", representada por el vector director⁸¹ y "G", referente a la geometría o volumen en el que se pretende enmarcar el punto base.

Obtenidos ambos puntos, **el eje longitudinal de cada nanotubo** se configura mediante el componente "Line" (1.55), que se encarga de la creación de esta recta mediante la simple unión de los puntos proyectados (1.54).

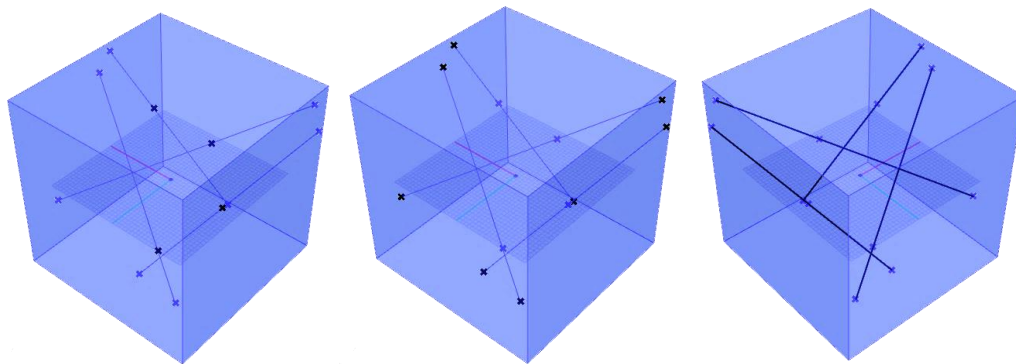


ilustración 54: generación de puntos base, puntos proyectados y rectas eje de los cilindros.

⁸¹ La proyección tiene inicio en el punto base y fin en la cara de la geometría que se especifica. Por ello, si se ejecuta el componente "ProjectPoint" una única vez, daría lugar a una recta desde el punto y no atravesaría la muestra cúbica de lado a lado, como se pretende.

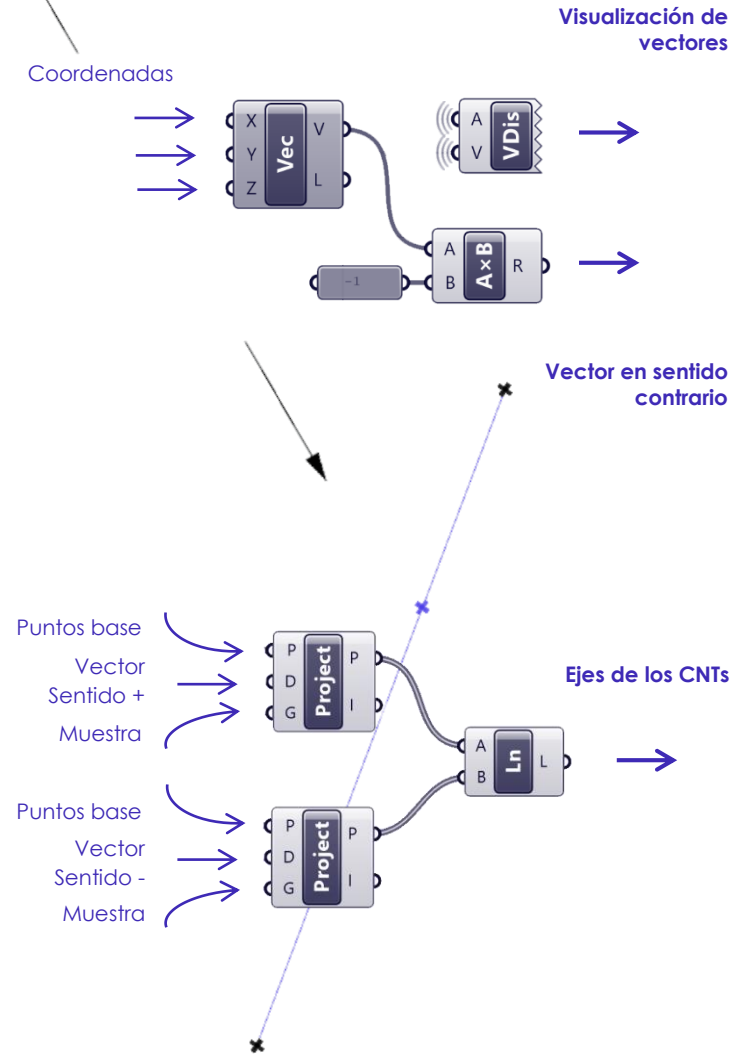


ilustración 55: obtención de unVector y generación del eje del cilindro con "Line", en Grasshopper.

Este modelo contiene 50 rectas halladas mediante el proceso anteriormente expuesto, que servirán de base a 50 cilindros. Es importante destacar que, como se pretendía, **las rectas atraviesan la muestra de lado a lado**, sin traspasar las paredes del cubo (I.56).

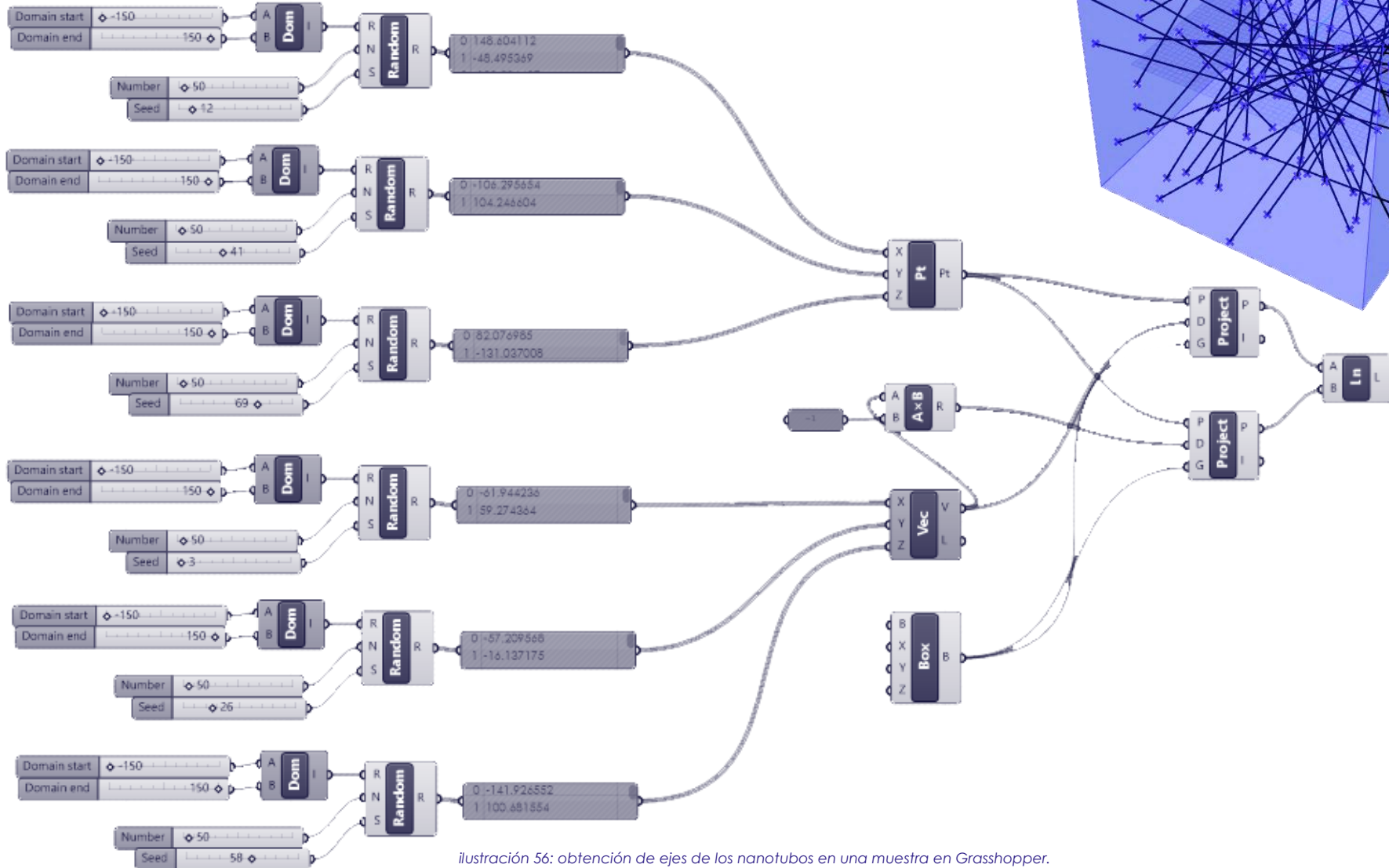


ilustración 56: obtención de ejes de los nanotubos en una muestra en Grasshopper.

Llegados a este punto, empleando el componente "Cylinder" se modelan los tubos con "B" y "L", base y longitud, en la línea o eje previamente hallada (I.57). El radio de estos tubos será de "R" = 1.187 nm.

Este proceso de modelado, **no asegura que los cilindros creados no se corten** entre ellos en el interior de la muestra, condición que no debe darse si se pretende que los modelos dispongan de un mínimo de verosimilitud. Para comprobar que no se cortan se emplea "CollisionManyToMany", componente que indicará si los cilindros se cortan y cuáles lo hacen a tendiendo a su número de índice⁸² (I.58). Será difícil identificarlos de modo visual puesto que no se conoce qué cilindro tiene asignado cada índice a priori. Sin embargo, si se conoce que, si se indica que el cilindro de índice "2" colisiona con el de índice "5", entonces se mostrará igualmente que el i5 colisiona con el i2. Por tanto, sólo deben contabilizarse las colisiones que no repitan índices de objetos. Para ello, mediante "Dispatch", "ItemIndex" y "LargerThan" aislamos los valores de la lista de colisiones que sean mayores que el índice que los acompaña. De este modo, si se nos muestra que el cilindro 2 colisiona con el 41, y el 41 con el 2, el programa sólo contabilizará la primera colisión puesto que $i2 < 41$ pero $i41 > 2$.

Para acondicionar estos cilindros no válidos y habiendo obtenido una lista de cuáles son en concreto, se estudia el **desfase de su recta directora** sobre uno de los planos del espacio a un diámetro, que es la distancia mínima imprescindible para que la intersección advertida deje de existir.

Los ejes de los cilindros afectados por las colisiones, ordenados como se expone anteriormente, se añadirán a una nueva lista junto con el resto de ejes de cilindros que no presentaban colisión para **generar nuevos cilindros** a partir de sus rectas y se analizan de nuevo las colisiones. Si siguen existiendo, se vuelve a realizar el mismo procedimiento, ejecutando el **desfase sobre otro de los planos espaciales**. Este procedimiento se realizará hasta en 3 ocasiones, respecto a cada uno de los planos espaciales⁸³, volviendo a analizar después del desplazamiento si existen colisiones. Aunque ya no se dé la colisión con el cilindro respecto al que se mueve, **no significa que no pueda colisionar con otro** u otros diferentes.

A continuación se expone el algoritmo final que supuso la conclusión del modelo inicial (I.59).

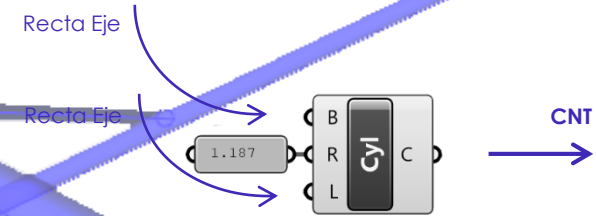


ilustración 57: empleo del componente "Cylinder" en Grasshopper.

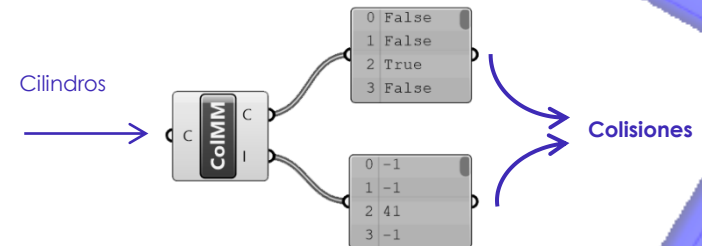


ilustración 58: empleo del componente "CollisionManyToMany" en Grasshopper.

⁸² Este número es asignado automáticamente por el software a cada volumen en el momento de su creación virtual.

⁸³ Es decir, se desplaza la proyección de los ejes en los planos XY, XZ y ZY.

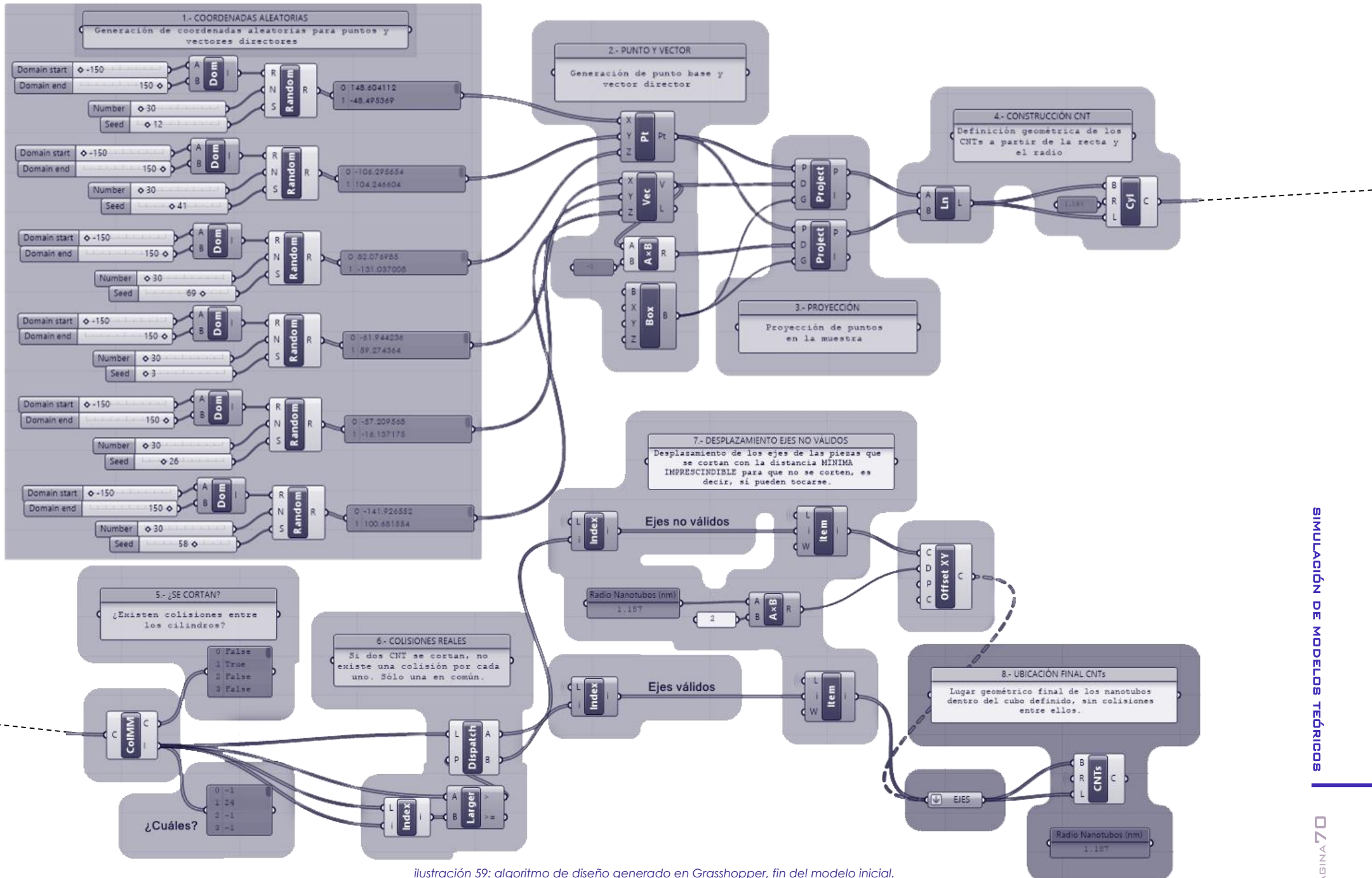


ilustración 59: algoritmo de diseño generado en Grasshopper, fin del modelo inicial.

Para simplificar la morfología, se crea un **grupo con el proceso de identificación de los cilindros secantes y la corrección aplicando los desfases**. Cada grupo de operaciones se denomina "Cluster", con que se emplea un cluster atendiendo al desplazamiento en cada plano espacial (1.60).

Para finalizar cada cluster, se coloca un **contador que indica el número de colisiones reales** que quedan después de cada operación. Es importante destacar que el número de colisiones no tiene por qué disminuir después de cada operación, aunque puede emplearse cada cluster tantas veces como se desee.

Sin embargo, esto no se llega a realizar puesto que este modelo inicial finaliza en este punto. Esto es debido a que **requiere un esfuerzo computacional excesivo** que requiere de grandes tiempos de operación para modelos moderados, no dando oportunidad a ejecutar modelos densos. Además, presenta una serie de inconvenientes de difícil solución que se exponen más adelante y que no aparecerán en el modelo completo.

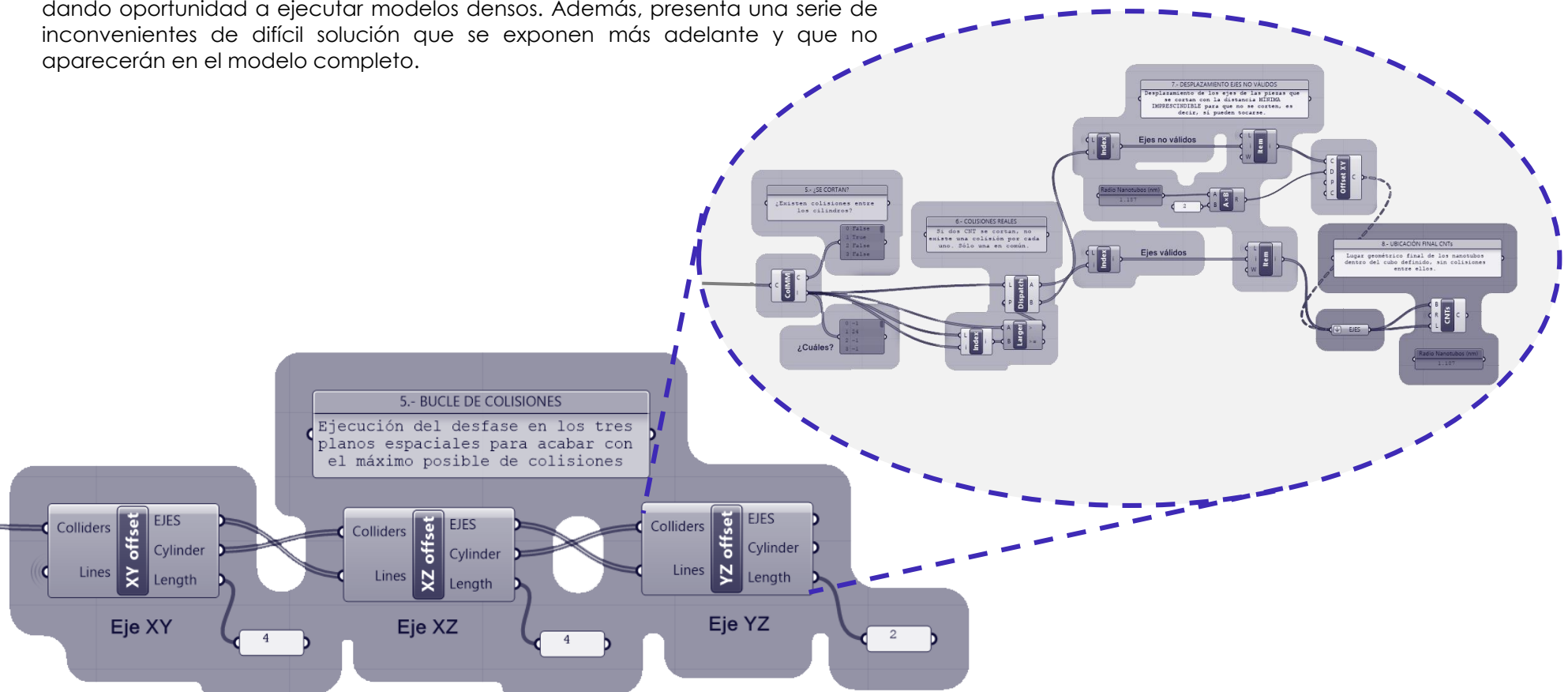


Ilustración 60: generación de clusters en Grasshopper para simplificar el proceso de diseño.

Para obtener el porcentaje de nanotubos que se ha creado respecto a la muestra que se considera, se procede a **tapar los externos de los cilindros** finales con “CapHoles” (I.62). A continuación, mediante “Volume⁸⁴” y “MassAddition” se calcula el volumen del sumatorio de todos los tubos generados⁸⁵ que se compara con el de la probeta mediante una relación de porcentajes (I.62).

En este caso, la ejecución de tres bucles de desfase, uno respecto a cada plano espacial, fueron suficientes para eliminar todas las colisiones entre cilindros. Se obtuvo un porcentaje de entorno al 0,04% de densidad de nanotubos en la muestra de 300 nm de lado (I.61).

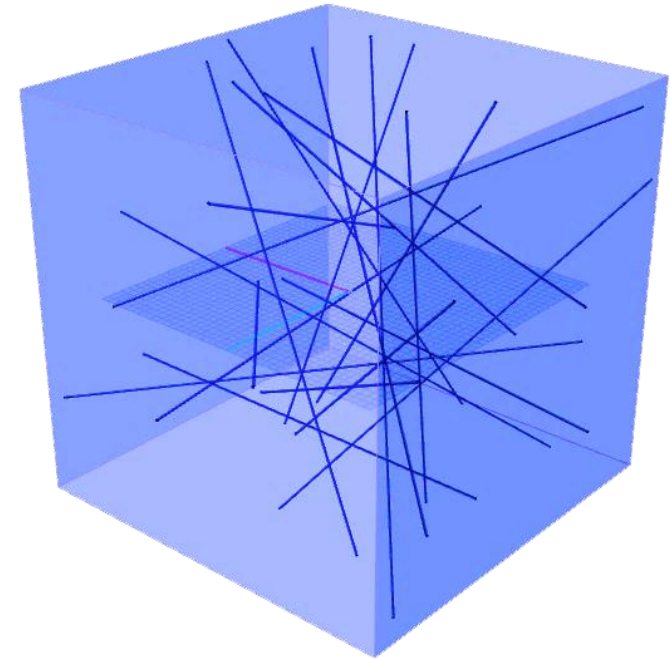


ilustración 61: visualización de una muestra de 300 nm y 0,4 % de nanotubos en Rhino, diseñada en Grasshopper.

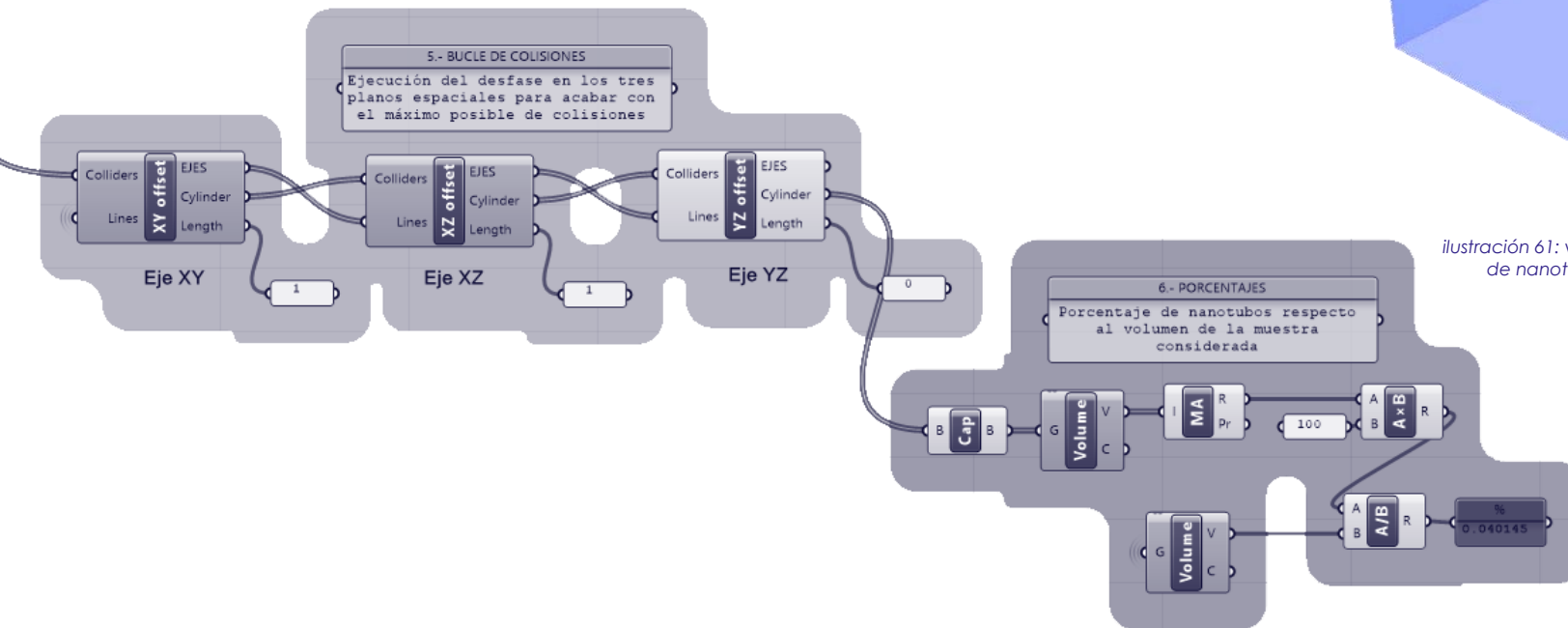


ilustración 62: generador de bucles de desfase y proceso de cálculo del porcentaje de nanotubos en Grasshopper.

⁸⁴ Este componente también permite conocer el centro de gravedad “C” de la geometría con la que opera, hecho que será de utilidad para la elaboración del modelo completo, puesto que es un dato necesario para el posterior mallado de las muestras.

⁸⁵ Los tubos de bucles anteriores que presentaban colisión, no están incluidos en esta totalidad. Aunque en el programa se sigan visualizando, no se contabilizan a la hora del cálculo de volúmenes. Simplemente, se ignora su presencia en este modelo.

Inconvenientes del modelo inicial

Este modelo se desarrolló hasta que **se advirtió la aparición de las siguientes deficiencias de diseño (I.63)**, consideradas mejorables a través de otros recursos que se presentarán en el modelo completo. Se trata de trabas con difícil solución mediante el empleo único de las herramientas ya presentadas:

- **Duplicados de los tubos secantes.** Los tubos desplazados mediante el desfase respecto a los planos espaciales, **realmente no se han movido, sino que el software los ha copiado**, desfasados respecto a los tubos iniciales que se cortaban. Por tanto, sería necesario eliminar los tubos en los que se advirtiera la colisión, antes de desfasarlos con el objetivo de que el software trabaje con el mínimo imprescindible de datos.
- **Imposibilidad de supresión de tubos conflictivos.** Los cilindros en los que se advierta una colisión **no pueden ser eliminados una vez se han generado**. Por ello, el modo de generar tubos no secantes debería ser añadiéndolos al espacio virtual sólo si se conoce a priori que no van a colisionar con un ya existente, es decir, condicionar su adición al espacio modelo en función de exigencias definidas por el usuario.
- **Persistencia de colisiones.** Aunque se ejecuten los clústeres de desfases repetidamente, **es habitual que sigan existiendo colisiones entre los tubos**, sobre todo cuando se debe aumentar la cuantía de ellos por muestra ya que, aunque se aleje al cilindro de una colisión, es posible que al desplazarlo se corte con varios más⁸⁶.
- **Exceso de tiempo computacional.** Al emplearse una gran cantidad de componentes, el programa necesita de **grandes tiempos de procesamiento de datos** incluso para el modelado de muestras moderadas. Por tanto, no será viable emplear este algoritmo para muestras en las que se estima que deba haber miles de cilindros. El gráfico que se adjunta expone los tiempos computacionales necesitados por este algoritmo para cada muestra.

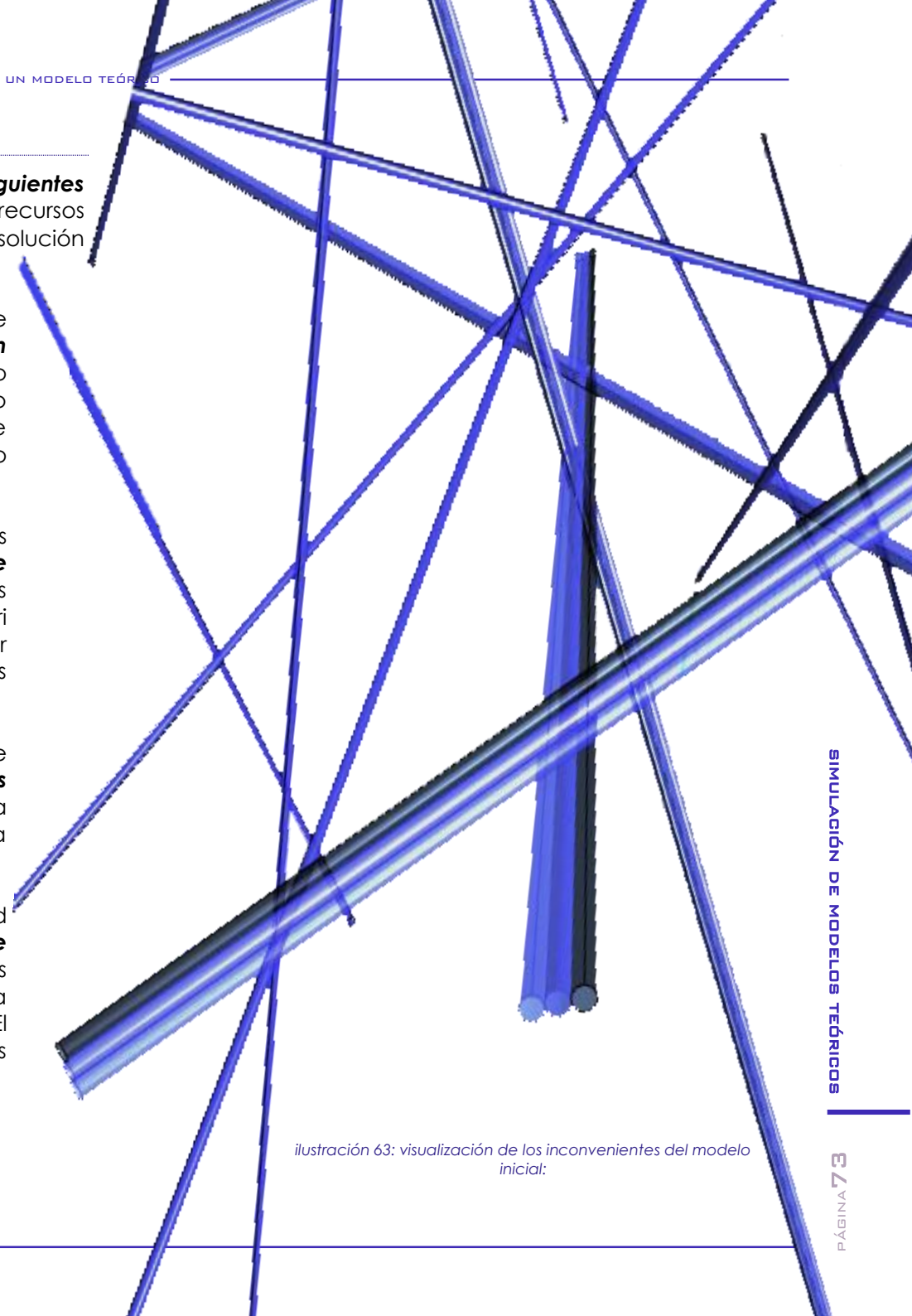


Ilustración 63: visualización de los inconvenientes del modelo inicial:

⁸⁶ Este hecho será más notable cuando se deba disponer de un número muy elevado de tubos.

Los resultados de los tiempos computacionales que aquí se exponen, fueron realizados con un total de **seis bucles de desfases para eliminar colisiones**. Sin embargo, aun presentando estos tiempos, los clústeres **no fueron capaces de eliminar la totalidad de ellas** llegando a dejar unos 60 cilindros secantes por cada 2000, aproximadamente.

Lo anterior, unido a la imposibilidad de desechar los nanotubos que presentaron colisión antes del proceso⁸⁷ y los altos tiempos computacionales recogidos en la [tabla 12](#), que conllevó el modelado de las muestras de mayor envergadura (G.3), resultaron en un **segundo modelo**, optimizado mediante las capacidades de la programación con Python, dentro de Grasshopper.

Tiempo computacional (seg)

	0,2	0,3	0,4	0,6	0,8	1	1,2	1,5
50	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1	<1
100	<1	<1	<1	<1	1,61	2,56	2,87	3,08
200	1,5	2,59	4,11	6,44	8,34	15,8	26,86	39,42
300	3,9	4,28	10,6	15,8	31,2	45,5	50,7	103,5
500	28	49,9	78,4	105	234	932	2443	5934

Tabla 12: tiempo computacional requerido por el modelo inicial.

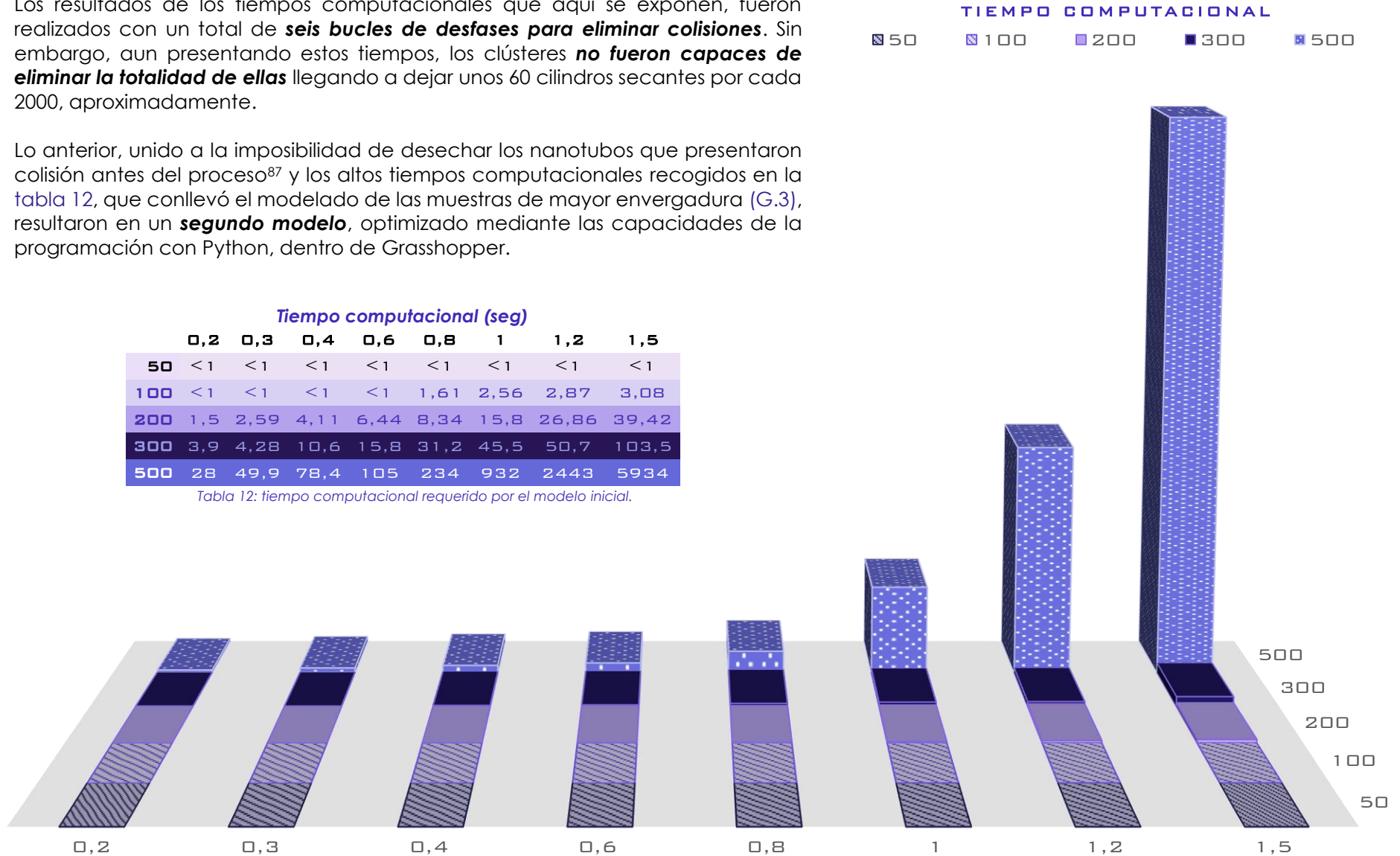


Gráfico 3: tiempos de generación de muestras mediante el empleo del modelo inicial.

⁸⁷ Aunque los cilindros chocantes no se tengan en cuenta a la hora del cálculo de volúmenes, la realidad es que siguen existiendo e interfieren en el proceso de modelado en lo que al software se refiere. Son un obstáculo para la obtención de un algoritmo eficiente y optimizado.

MODELO COMPLETO: aplicación de códigos en Python

Este segundo modelo vendrá dado por un **algoritmo perfeccionado y optimizado**, cuyo proceso de desarrollo se expone a continuación.



Se trata de la elaboración de un proceso que permitirá **contar sólo con nanotubos no secantes como condición**, sin necesidad de cuerpos residuales que interfieran en el proceso computacional de la máquina. De este modo, las colisiones que siempre existían mediante la generación de modelos con el algoritmo anterior, y que imposibilitaban su empleo para este estudio, no sólo no aparecerán, sino que supondrán un impedimento para la existencia de cada nanotubo. Así, **la adición de cada cilindro se hace uno a uno**, sujeto a las condiciones prescritas por el usuario para asegurar la independencia de cada nanotubo.

Para poder alcanzar el máximo nivel de rendimiento, se diseña un componente en Grasshopper, **específico para la realización de estos modelos**. Este componente será único, definidos sus input y output directamente por el usuario mediante su programación en lenguaje Python⁸⁸.

Ya es claro que se pretende dar solución a los problemas de colisión, interferencia⁸⁹ y computación anteriormente expuestos, aunque aún no se ha asistido a un requisito importante del modelado. El método descrito, parte de puntos que pretenden ser aleatorios, es decir, que no tengan coordenadas explícitamente definidas por el usuario. Esta condición se buscaba con la intención de repartir los nanotubos a lo largo del volumen de la muestra, sin embargo, **esta aleatoriedad no asegura una homogénea distribución de los puntos en la matriz** y, por tanto, tampoco de los cilindros a partir de ellos conformados, existiendo así la posibilidad de concentraciones de cilindros o que otras áreas permanezcan vacías. Por ello, mediante el empleo de este método tal y como se ha venido exponiendo, no puede asegurarse la homogeneidad de la composición de la muestra, que es un requerimiento necesario.

Una muestra con distribución heterogénea de nanotubos (I.64) valdría para entender la interacción entre la matriz y el nanotubo en singular, no para comprender la mejora de las propiedades del material contenedor o para la síntesis de un nuevo material.

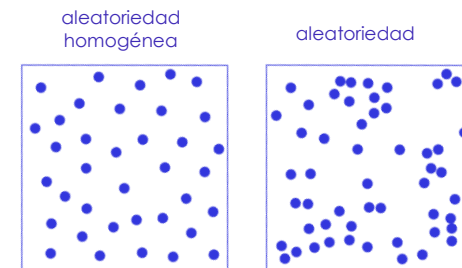


ilustración 64: aleatoriedad homogénea.

⁸⁸ Se intuye, por tanto, que para la elaboración de este algoritmo de diseño personalizado ha sido necesaria la **adquisición de numerosas competencias** en cuanto a lo que a programación informática se refiere.

⁸⁹ Persistencia de cilindros inservibles en la muestra.

Con el objetivo de **cumplir con la condición de homogeneidad**, se elaboraron dos propuestas atendiendo a la aleatoriedad de las coordenadas iniciales mediante el empleo de módulos de Python⁹⁰.

PROPUESTA 1ª: empleo del módulo SOBOL

Sobol ofrece una **serie de funciones que permiten la generación de puntos espaciales**, enmarcados en un dominio dado, **distribuidos homogéneamente en todo el rango numérico**. Se trata de un módulo bastante eficiente cuyas funciones se encuentran definidas en lenguaje *Python*. Sin embargo, a pesar de emplearse este lenguaje para realizar el diseño de módulos en *Grasshopper*, se encuentra asociado a un servidor alternativo con el que no comparte la totalidad de los módulos, cuyo conjunto se denomina *IronPython (1.65)*. En concreto, IP no incorpora el módulo *sobol*, por lo que fue necesario realizar una **conexión con las librerías originales de Python** para poder importar las funciones de aleatoriedad homogénea de las que esta librería dispone, imposibles de reproducir por la longitud y dificultad de los códigos⁹¹.

Mediante el empleo de *GHPythonRemote*⁹² se logró establecer un **canal de comunicación entre Grasshopper y las funciones de Python nativo**. Este componente no es diferente al que se pretende diseñar para disponer de un algoritmo generador de muestras, pues también se trata de un módulo programado con lenguaje *Python* para cumplir su función específica: conectar *Grasshopper* con *Python*.

Sin embargo, aunque se obtuvo un resultado exitoso en la conexión con *Python*, como se ilustra en la página siguiente, se presentaron **varios inconvenientes en cuanto al empleo de las funciones de sobol en Grasshopper**. Se detectó que el módulo importado funcionaba correctamente para la realización de operaciones sencillas sin relación de datos con las funciones de *Grasshopper*, presentando múltiples trabas en la realización de estas.

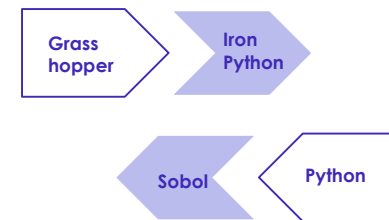


Ilustración 65: : grasshopper se encuentra conectado a Iron Python; sobol a Python.

⁹⁰ En programación, se entiende como módulo un **conjunto de operaciones ya diseñadas**, ejecutables por el usuario mediante su importación al código que se diseña. El usuario llama al fichero (lo importa) que contiene la función a emplear mediante el comando "import" (o similares) y el módulo que es llamado devuelve al usuario la información ya procesada, sin necesidad de incluir las líneas definitorias de las funciones en el propio código. Esto se realiza con el objetivo de no generar códigos excesivamente largos, pudiendo sustituir un gran número de líneas por una sola, que realiza la misma función.

⁹¹ Del mismo modo que el usuario llama a un módulo para importar funciones, estas funciones buscadas llaman a varios módulos más, lo que supone una reacción en cadena y dificulta la reproducción de las funciones.

⁹² Se trata de un componente especial que debería permitir al usuario de *Grasshopper* acceder a las librerías de *Python*. Es de dominio público y puede encontrarse en páginas oficiales de apoyo al software *Rhino* y *Grasshopper*.

Al ejecutar el algoritmo (I.66), que necesariamente debía combinar funciones de *sobol* con otras de *Grasshopper*, el software avisaba de errores que cambiaban constantemente su tipología sin haberse modificado en absoluto el texto del algoritmo⁹³, incluso durante la realización de una cuantía menor de la decena de cilindros. Como consecuencia de este hecho, pudo advertirse la **inestabilidad de la combinación de *sobol* y *gh* en este caso en concreto**, después de meses de pruebas.

Una de las pruebas realizadas para comprobar el correcto funcionamiento de generación de números aleatorios de *sobol*, se presenta en el código a la derecha. La función "i4_uniform", importada de *sobol* mediante *GhPythonRemote* (I.67), genera el número de la parte inferior de la viñeta sin mayor inconveniente, contenido en un rango dado y en función de una semilla cualquiera. Tras varias pruebas similares, se detectó la interferencia con las funciones de *gh* a gran escala⁹⁴, **imposibilitando el empleo de este módulo** para la ejecución del caso de estudio.

```

... import ghpythonremote
... import scriptcontext
... sb = scripcontext.sticky['sobol']
... HalfSide = 250
... seed = 63259
... X = sb.i4_uniform(-HalfSide,HalfSide,seed)
... print (X)

```

1,50246

Ilustración 67: importación de la librería de *sobol* al componente personalizado en *Grasshopper*.

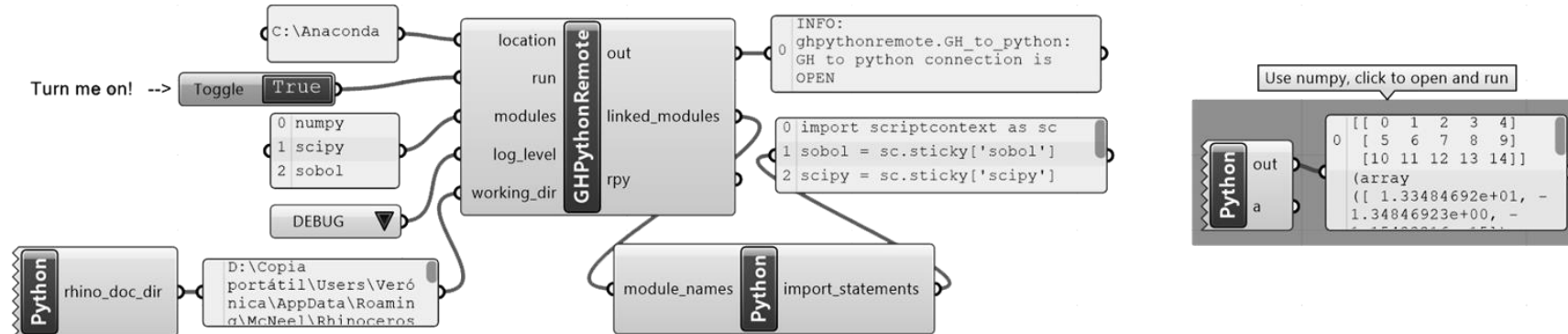


Ilustración 66: algoritmo de conexión con Python nativo en *Grasshopper*; *GhPythonRemote*.

⁹³ En ocasiones, el error del que avisaba el software estaba relacionado con el tiempo de computación mientras que en otros casos indicaba que el error tenía fuente en la imposibilidad de encontrar ciertas librerías o parámetros definidos en el código, que, de hecho, sí se encontraban definidos. Algunos de estos códigos de error: "Runtime error", "KeyNotFoundException", "KeyError".

⁹⁴ Los motivos causantes de esta incompatibilidad podrían radicar en la antigüedad del nacimiento de la librería de *sobol*, que data de 1976, con respecto a la condición novedosa de *Grasshopper*. Además, en los requerimientos para la instalación de *ghpythonremote*, se indica explícitamente la necesidad de disponer de una versión reciente de Python, lo que respalda esta teoría.

De hecho, una evidencia de que **la conexión con sobol no funciona adecuadamente**⁹⁵ en este caso, se advierte en los resultados de modelos generados durante las pruebas.

En primer lugar, para generar modelos sencillos, el algoritmo necesitaba de **elevados tiempos de procesamiento de datos**, incluso mayores que los que necesitaba el modelo inicial. Este hecho, ya dejaba intuir que algo no estaba funcionando como debería.

En segundo lugar, en los modelos resultantes de las pruebas se observan **concentraciones de nanotubos en áreas de las muestras** mientras otras partes quedan prácticamente exentas⁹⁶. Por si fuera poco, las orientaciones de los nanotubos generados aparentan ser bastante similares, prácticamente paralelas, demostrando ser un proceso contraproducente.

En la **ilustración 68** puede observarse el cambio de color, de verde a rojo, del modelo generado por el programa, lo que advertía de **errores en el proceso de diseño con sobol**. Estos errores, como se comentaba con anterioridad, están relacionados con el "enganche artificial" entre *sobol* y *Grasshopper*, que hace que este módulo pierda eficacia y eficiencia. La realización de varias pruebas más, aclaró que este proceso no era el más adecuado para el diseño de los modelos que se pretenden.

La muestra de color blanco se realizó con la propuesta 2ª, que se presenta en el siguiente apartado. En comparación con el resto de los modelos que se exponen en esta página, puede apreciarse una clara mejoría en cuanto a concentración y orientación de los nanotubos.

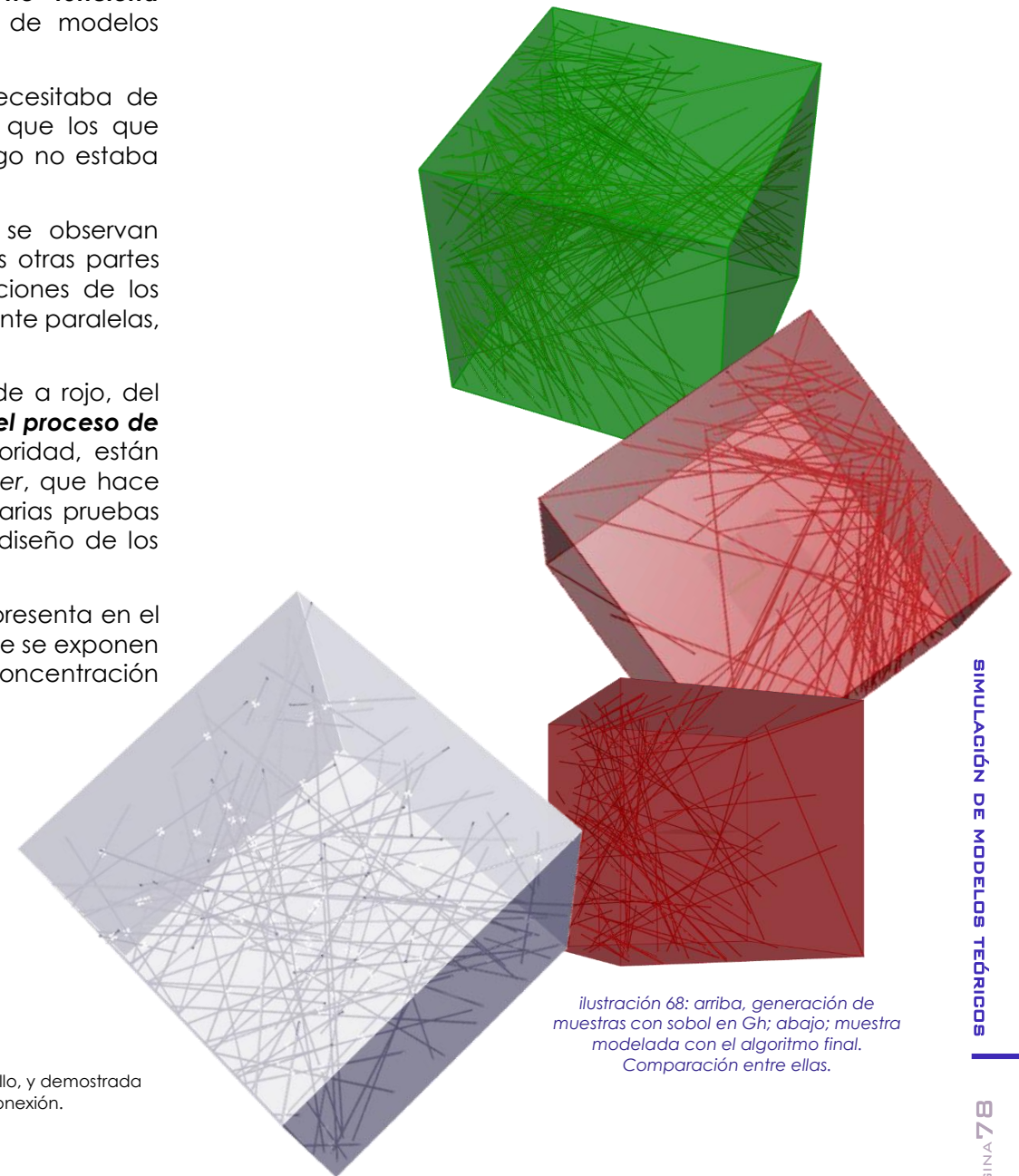


ilustración 68: arriba, generación de muestras con *sobol* en *Gh*; abajo; muestra modelada con el algoritmo final. Comparación entre ellas.

⁹⁵ *Sobol* se diseñó para **distribuir homogéneamente** valores aleatorios en un dominio dado. Por ello, y demostrada su eficacia desde hace más de cuatro décadas, es obvio que el problema se encuentra en la conexión.

⁹⁶ Esta distribución es, precisamente, la que se ha estado tratando de evitar.

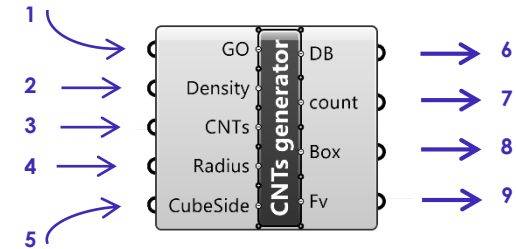
PROPUESTA 2ª: empleo del módulo RANDOM

Una vez advertidos los inconvenientes de emplear las funciones de *sobol*, se decide realizar un análisis de las funciones de **generación de aleatorios de Python**. En concreto, se encuentra la función “uniform” en la librería Random. Esta función permite la generación de valores aleatorios enmarcados en un dominio numérico, con ubicaciones uniformes, como su propio nombre indica, si bien **su aleatoriedad no se encuentra dirigida por un valor aleatorio de semilla**. No obstante, tras la realización de varias pruebas **se comprueba la eficacia y eficiencia⁹⁷ de la función**, suponiendo, sobre todo la segunda, un gran potencial para ser empleada en este estudio.

Las **distribuciones de puntos aleatorios y la orientación de los cilindros** aportadas por *uniform* **resultó ser variada y homogénea** en las pruebas a las que se sometió a la función, lo que la convirtió en la herramienta base para la elaboración del algoritmo final que se presenta.

El componente generador de CNTs (1.69) queda configurado como se indica en la figura de la derecha, disponiéndose un interruptor para permitir la desactivación temporal del algoritmo mientras se editan los valores de la muestra a diseñar. De este modo, **se evita trabajo innecesario a la máquina** durante la edición de los valores numéricos de la muestra, que se clasifican en:

- **Parámetros informativos:** Density, DB, Count y Fv. Informan de las **características de la muestra resultante**, sin interferir en las operaciones que se realizan en el interior del componente.
- **Parámetros definitorios:** CNTs, Radius y CubeSide. Aportan las **variables necesarias para que el modelo tridimensional se ejecute**.
- **Otros parámetros:** GO, cuya utilidad ya mencionada radica en la **activación del algoritmo**, DB y Box, que permiten la **visualización de los nanotubos y la muestra** cúbica, respectivamente.



Interruptor de activación del algoritmo	.1
Densidad de nanotubos buscada	.2
Cantidad de nanotubos a generar	.3
Radio de los CNTs	.4
Lado de la muestra cúbica	.5
Base de datos de CNTs válidos	.6
Contador de CNTs después del proceso	.7
Muestra cúbica	.8
Factor de volumen de CNTs respecto a la muestra	.9

Ilustración 69: componente personalizado diseñado en Grasshopper: CNTsGenerator.

⁹⁷ La librería o módulo *Random* se encuentra entre las disponibles en *IronPython*, por lo que su empleo no supone mayor problema para un algoritmo diseñado en *Grasshopper*, al contrario de lo ocurrido para con el empleo de *sobol*. *Uniform* aporta resultados óptimos de distribuciones numéricas en tiempos asumibles.

El componente diseñado funciona de la siguiente manera: a partir de una muestra cúbica de dimensiones conocidas, establece un dominio numérico y espacial en el que enmarcará los valores generados mediante el empleo de la función *uniform*, que se viene mencionando.

Estos valores, siguiendo la metodología ya expuesta, supondrán **coordenadas aleatorias tanto para puntos base como para vectores directores** de generación de cilindros. Se diseñarán tantos puntos y vectores como CNTs se haya especificado en el input del componente siendo el algoritmo **capaz de detectar qué cilindros serán válidos** y cuáles colisionan y, por tanto, no. Esta clasificación la realiza mediante el empleo de "CollisionOneToMany", de modo que sólo añadirá a la base de datos final de cilindros aquellos que salgan impunes de esta condición. Es decir, no se crea un número concreto de nanotubos y más tarde se comprueba si colisionan, sino que se va creando uno a uno, **sometiendo cada nuevo cilindro a una serie de pruebas que deberán pasar de modo exitoso, para ser añadidos a la base de datos**. La adición de un contador en el output provocará que **el algoritmo siga funcionando hasta que la cuantía en "Count" coincida con la pedida en CNTs**, es decir hasta que se alcance el valor de CNTs buscados, válidos.

De este modo, **DB sólo contendrá cuerpos cilíndricos que hayan cumplido las condiciones impuestas**, conque no será posible que colisionen y se encuentren en la base de datos⁹⁸. No obstante, y para aportar mayor certeza de la eficacia del algoritmo, se añade una comprobación final fuera del componente programado, mediante las funciones de *Grasshopper* ya conocidas.

Para finalizar el proceso de modelado, el algoritmo calcula el **porcentaje de nanotubos generados respecto al total de la muestra**, que indica con "Fv". El objetivo es que el valor buscado en "Density" y el obtenido después del proceso en "Fv", sean lo más cercanos posible.

La adición del parámetro "Density" no tiene mero carácter informativo, pues servirá para llevar a cabo el último paso de la generación de muestras: creación de **ficheros de texto que organizan las coordenadas de los vectores** de cada cilindro válido. La nomenclatura de este fichero vendrá asociada al valor de "Density" y "CubeSide".

⁹⁸ De hecho, si un cilindro en proceso de generación no cumple las condiciones, se omite su modelado, por lo que no llega a existir y no provocará interferencias computacionales.

Aquí se expone el **algoritmo final** que se ha empleado para el diseño de las muestras. A continuación, se adjunta el **componente de comprobación** ejecutable a posteriori del proceso de creación de la base de datos DB si fuera necesario (1.70).

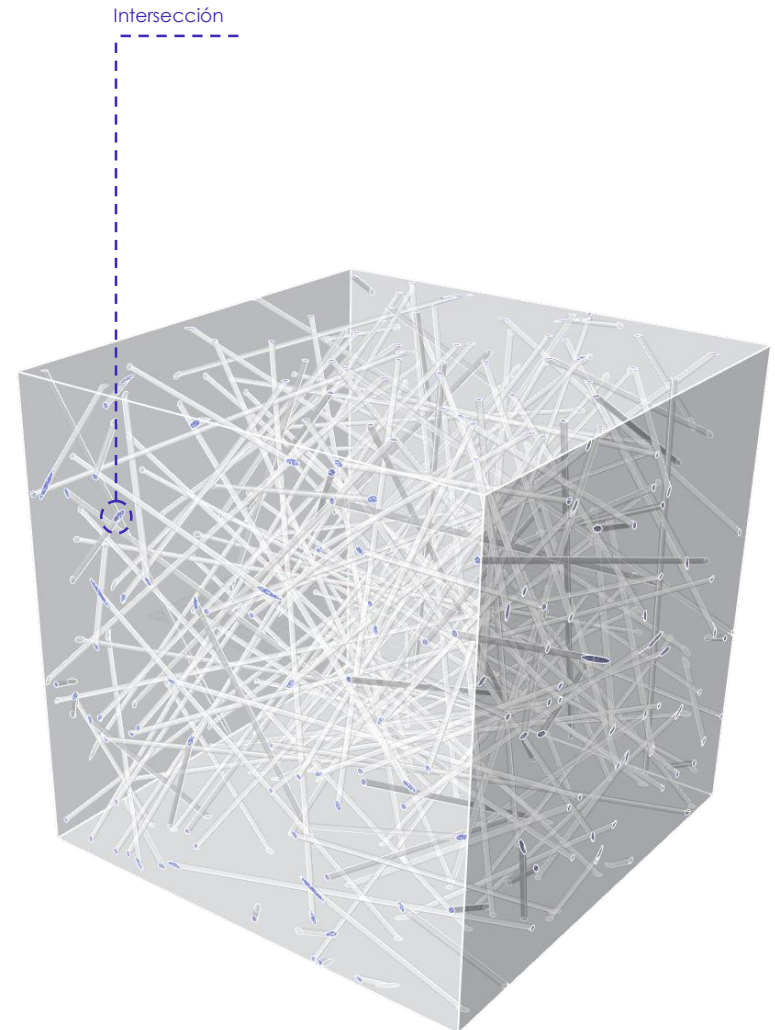
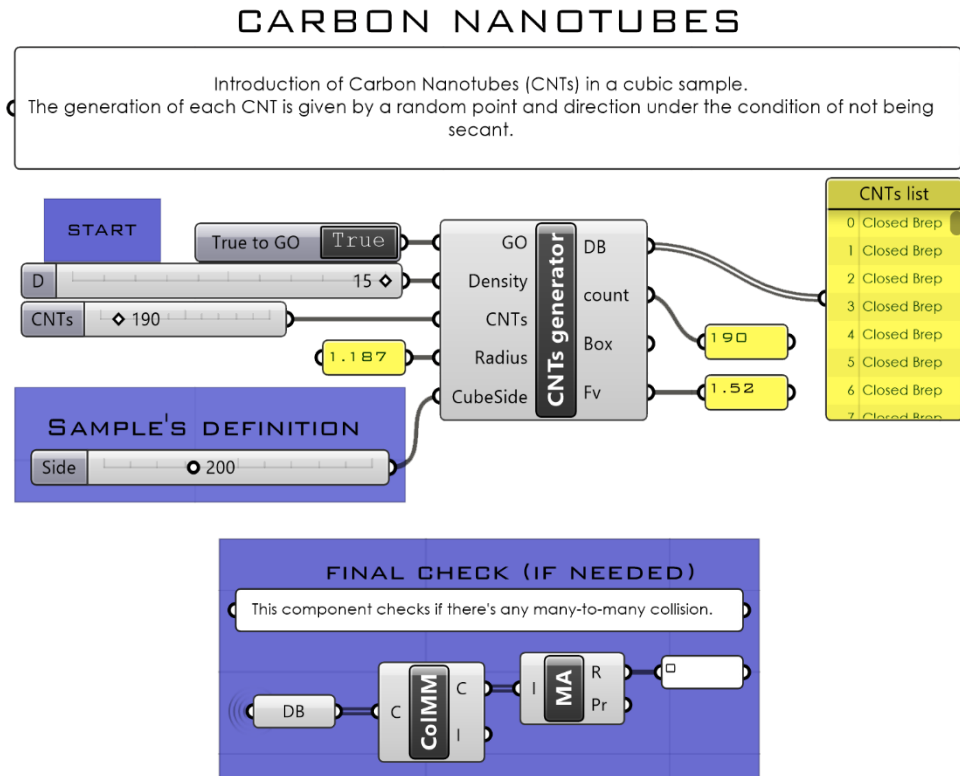


Ilustración 71: muestra generada con el algoritmo final. Identificación de intersecciones entre cilindros y cubo contenedor.

ilustración 70: algoritmo de diseño CNTsGenerator y comprobación final de colisiones, ejecutable si es necesario.

Puede apreciarse en la [ilustración 71](#), la **intersección de cada cilindro con la muestra cúbica**. Esta operación de intersecciones no llegó a realizarse en el modelo inicial⁹⁹, pero resulta esencial para posibilitar el mallado de las muestras.

⁹⁹ Los diversos problemas que condujeron a desechar el primero modelo, se identificaron antes de alcanzar este punto de definición de las muestras. Por ello, no se alcanzó el cálculo de intersecciones.

DISEÑO DE ALGORITMO

La totalidad del componente "CNTsGenerator" **se programó en lenguaje Python** siguiendo un proceso de prueba error para llegar a la solución más eficiente y optimizada en relación al resultado y al tiempo computacional.

En primer lugar, **se importaron las funciones** indicadas en la figura que permiten la programación de componentes en *Rhinoceros* (rhinoscriptsyntax) y la ejecución de los componentes nativos de *Grasshopper* a partir de su nombre (ghpythonlib.components). Una vez ya se dispone de estas funciones básicas, se importa la función *uniform* de la librería *Random* de *Python* nativo, esencial para la generación de los modelos virtuales. Todo este proceso se expone en la [ilustración 72](#).

El empleo de los componentes de *Grasshopper* sigue el mismo procedimiento que se ha visto, cambiando únicamente la interfaz de cara al usuario. Debe ejecutarse la operación mediante el activador, en este caso "ghcomp", seguido del nombre del componente que se requiere. A continuación, se especifican los inputs entre paréntesis, siguiendo un orden de arriba abajo.

El componente reconoce los valores que se establecen en las conexiones externas, de modo que "CubeSide" adoptará el valor que se indique en cada caso. Es decir, **aunque el valor del lado de la muestra deba variar atendiendo a cuál se esté generando, el algoritmo no lo hará**, pues se ejecuta en función a "CubeSide" y éste adoptará un valor de 50, 100, 200, 300 ó 500 nm, dependiendo del modelo.

Como ya sucedía en el modelo inicial, para crear un hexaedro empleando los componentes de *Grasshopper*, debemos disponer de un plano base sobre el que asentarlo, que a su vez necesitará un punto de origen para establecerse. Se generan, entonces, los parámetros previos: "Origin", "Plane" y "Halfside" que representarán el punto de base para el plano, el plano de soporte para el cubo y el semilado del cubo¹⁰⁰, que se origina a continuación.

Una vez generado el cubo, mediante el comando "print" indicamos al programa que debe permitir la visualización de lo que se especifique entre paréntesis. **Su respuesta la produce en el cuadro de diálogo de la parte inferior** mostrando, en este caso, que se ha creado una geometría (Rhino.Geometry.Box).

```

... import rhinoscriptsyntax as rs

... import ghythonlib.components as ghcomp

... from random import uniform

... # setting some values
... Origin = ghcomp.ConstructPoint(0,0,0)
... Plane = ghcomp.XYPlane(Origin)
... HalfSide = CubeSide/2

... # sample's geometry
... Box = ghcomp.CenterBox(Plane,HalfSide,
    HalfSide,HalfSide)
... VolBox = ghcomp.Volume(Box)[0]

... print (Box)
    
```




ilustración 72: código de programación del primer cilindro en la muestra, lenguaje Python en Grasshopper.

¹⁰⁰ No debe olvidarse que la generación de un prisma mediante "CenterBox" **parte del centro geométrico del volumen**. Por tanto, el dato que requiere es la mitad del lado del cuerpo a generar (CubeSide).

Disponiendo ya del cubo contenedor, **se introduce el primer cilindro**, como se expone en la **ilustración 73**, que no estará sujeto a cumplir condiciones de colisión pues, al ser el primero en generarse, no hay posibilidad de que colisione con ningún otro.

En primer lugar, **se generan los valores aleatorios** que se asignará a las coordenadas espaciales del punto base (X,Y,Z) y del vector director (V,U,W) enmarcados en un dominio numérico de la misma dimensión que el lado de la muestra que se está modelando (-HalfSide,HalfSide)¹⁰¹.

Ya obtenidas las **coordenadas aleatorias y homogéneas gracias a la ejecución de Uniform**, se generan el punto (Point), el vector (Vector) y su contrario (unVector) mediante las operaciones de Grasshopper que se definen en la viñeta. El componente "VectorXYZ", en concreto, dispone de dos output¹⁰², conque se indica que se requiere el primero de ellos ([0])¹⁰³.

El siguiente paso es la **proyección del punto base, con direcciones Vector y unVector en las caras de Box** para unirlos seguidamente mediante el componente "Line" y crear una línea que será el **eje geométrico del nanotubo**. A partir del eje, se ejecuta el componente "Cylinder" que genera el primer nanotubo y se añaden tapas a sus dos extremos mediante el empleo del componente "CapHoles".

A continuación, se crean las **listas que almacenarán los vectores directores** ([Vector]), los cuerpos cilíndricos válidos ([CNT]) y sus respectivos centros de gravedad ([gc]). Además, se introduce un **contador que indicará el número de cilindros existentes al final de cada proceso de generación** para permitir comprobar que la cantidad de CNTs demandada desde el input del **CNTsGenerator** y los reales generados, coincide.

Este primer cilindro servirá de base para la ejecución del resto, que **se irán añadiendo progresivamente a DB si cumplen los requerimientos** que se indica a continuación.

```

... # starting point
... X = uniform(-HalfSide,HalfSide)
... Y = uniform(-HalfSide,HalfSide)
... Z = uniform(-HalfSide,HalfSide)

... # starting vector
... V = uniform(-HalfSide,HalfSide)
... U = uniform(-HalfSide,HalfSide)
... W = uniform(-HalfSide,HalfSide)

... # other parameters
... Point = ghcomp.ConstructPoint(X,Y,Z)
... Vector = ghcomp.VectorXYZ(V,U,W)[0]
... unVector = ghcomp.VectorXYZ(-V,-U,-W)[0]

... point1 = comp.ProjectPoint(Point,Vector,Box)[0]
... point2 = comp.ProjectPoint(Point,unVector,
Box)[0]

... AXE = ghcomp.Line(point1,point2)

... CNT1 = ghcomp.Cylinder(AXE,Radius,Axe)
... CNT = ghcomp.CapHoles(CNT1)

... # definition of DataBase that will store valid CNTs
... DB = [CNT]
... count = 1
... Vec = [Vector]
... GC = [gc]
    
```

ilustración 73: programación de condiciones de inclusión de CNTs generados a la base de datos final.

¹⁰¹ El origen de coordenadas supondrá siempre el **inicio de toda parametrización** en GrassHopper. Por ello, si se pretende diseñar una muestra de 50 nm de lado, por ejemplo, el dominio numérico correspondiente abarcará los valores comprendidos entre -25 y 25 nm.

¹⁰² Este componente aporta como resultado el propio vector y su longitud.

¹⁰³ Los input y output están asociados a un **número de índice en función de su orden**, de arriba abajo. Por ello, si se busca obtener el primer output, será el correspondiente al primer índice, el 0. En caso de requerirse el segundo output, se deberá indicar el segundo índice, en este caso, el 1.

Se comienza a introducir cilindros siguiendo el modus operandi que se viene describiendo en el presente capítulo, como se expone en la *ilustración 74*. El programa deberá realizar las mismas operaciones de ejecución anteriormente expuestas y las siguientes de **comprobación sobre cada uno de los cilindros** que vayan a añadirse a la base de datos.

Se genera cada nuevo nanotubo mediante el mismo procedimiento que el CNT inicial, que no se expone de nuevo en la viñeta, enmarcando la **creación de estos nuevos cilindros dentro de un bucle** “while”¹⁰⁴. Así, las operaciones del bucle se ejecutarán una y otra vez, de modo ininterrumpido, hasta que el contador alcance el valor de CNTs que se requiere, especificado en el exterior del componente.

Previa adición de los CNTs que se irán generando en el bucle a la base de datos, deberán **superar la prueba de la colisión**, ejecutada mediante “CollisionOneXMany”. Si no colisionan con los tubos ya incluidos en la base de datos (if R is False), se añadirá a DB¹⁰⁵ y **se calculará su volumen y su centro de gravedad**, repitiéndose esta operación hasta que la base de datos contenga CNTs cilindros válidos, no secantes.

Una vez superado el bucle *while*, cuando el contador alcance el valor requerido, se calcula la **intersección entre los cilindros y la muestra contenedora**, pues aquéllos no pueden sobresalir de ésta.

El siguiente paso consiste en **calcular el porcentaje de nanotubos respecto al total** de la muestra¹⁰⁶, para lo que se realiza una serie de relaciones de volúmenes, como se indica en la viñeta. Una vez obtenido el valor, se redondea el porcentaje mediante “round” para que se expongan solamente dos cifras de dicho número, pues no son necesarias más.

Tras este proceso, el cuadro de diálogo indicará la existencia de numerosas geometrías (Breps) en el modelo, lo que indicará que las operaciones han resultado exitosas.

```

... # CNTs loop generator following
... if GO:

... while(count < CNTs):
...   # Point
...   # Vector
...   # unVector
...   # point1
...   # point2
...   # AXE
...   # CNT1
...   # CNT

...   # Generated CNTs are just added if doesn't
...   collide
...   R = ghcomp.CollisionOneXMany(CNT,DB)[0]

...   if R == False:
...     DB.append(CNT)
...     count = count + 1
...     Vec.append(Vector)

...     # CNT Centroid
...     gc = ghcomp.Volume(CNT)[1]
...     GC.append(gc)

... # Intersection between Box and CNTs
... DB = ghcomp.SolidIntersection(DB,Box)

... # Volumes relation
... Vol = ghcomp.Volume(DB)[0]
... Vol1 = ghcomp.MassAddition(Vol)[0]
... Vol2 = Vol1 * 100
... Den = Vol2 / VolBox

... Fv = round(Den,2)
    
```

Ilustración 74: programación de condiciones de inclusión de CNTs generados a la base de datos final.

¹⁰⁴ El bucle while permite que, las operaciones en él contenidas, **se ejecuten continuamente** y sin pausa mientras no se cumple la condición que lo acompaña entre paréntesis.

¹⁰⁵ Si se añade un cilindro a DB, **al mismo tiempo se añadirá su vector director** asociado a Vec. Esta adición se realiza mediante el comando “append”.

¹⁰⁶ Que se denominará Factor de volumen, **Fv**.

Una vez concluida la programación del **CNTsGenerator**, se realizó una serie de operaciones para conseguir la **generación automática de archivos de texto** de coordenadas de puntos, vectores y centros de gravedad. Además, el algoritmo final se programó atendiendo a que los nombres de estos ficheros estuvieran acordes al lado de la muestra y su densidad de nanotubos. Estas líneas de programación, así como el algoritmo al completo se adjuntan en el **Anexo II** de este documento.

Además, se advirtió que las intersecciones de los cilindros con la muestra generaban formas muy complejas de interpretar¹⁰⁷ por el programa de mallado, similares a las que se exponen en la **ilustración 75**. Para solventarlo, se programó la modelación de un segundo hexaedro¹⁰⁸, de mayor tamaño que el de la muestra, hasta el que llegaran los cuerpos cilíndricos, para producir **intersecciones más regulares con el cubo contenedor**. La muestra blanca representa un modelo correcto, frente al resto de imágenes en esta página, que presentan intersecciones irregulares en exceso o incompletas.

Resueltos los últimos detalles, se modelaron las muestras que se exponen a continuación. Para su nomenclatura se disponen dos **índices: "Mx" y "By", que indicarán la dimensión del lado de la muestra y el porcentaje de nanotubos** de carbono, respectivamente, mediante el valor numérico que los acompañe.

Estas mismas nomenclaturas deberán ser interpretadas por el programa de mallado. Por ello, con el objetivo de no introducir caracteres de texto que interfieran con el software, el valor de la densidad se multiplicará por diez. Así, al referirse a M100-B08, se tratará de una muestra de 100 nm de lado y 0,8 % de nanotubos respecto al volumen total de la muestra.

Por otro lado, debido a que la generación de muestras se realiza **estimando el número de CNTs** que podría suponer la densidad buscada, se hará referencia a los términos densidad buscada y densidad real, pues esta última será el resultado de las operaciones del algoritmo. Valor que no coincidirá exactamente con el porcentaje demandado, en todos los casos. No obstante, mediante la ejecución continuada del generador, en algún momento se obtiene la densidad buscada exacta en muestras que tardan segundos en generarse, procedimiento no válido para muestras de mayor envergadura.

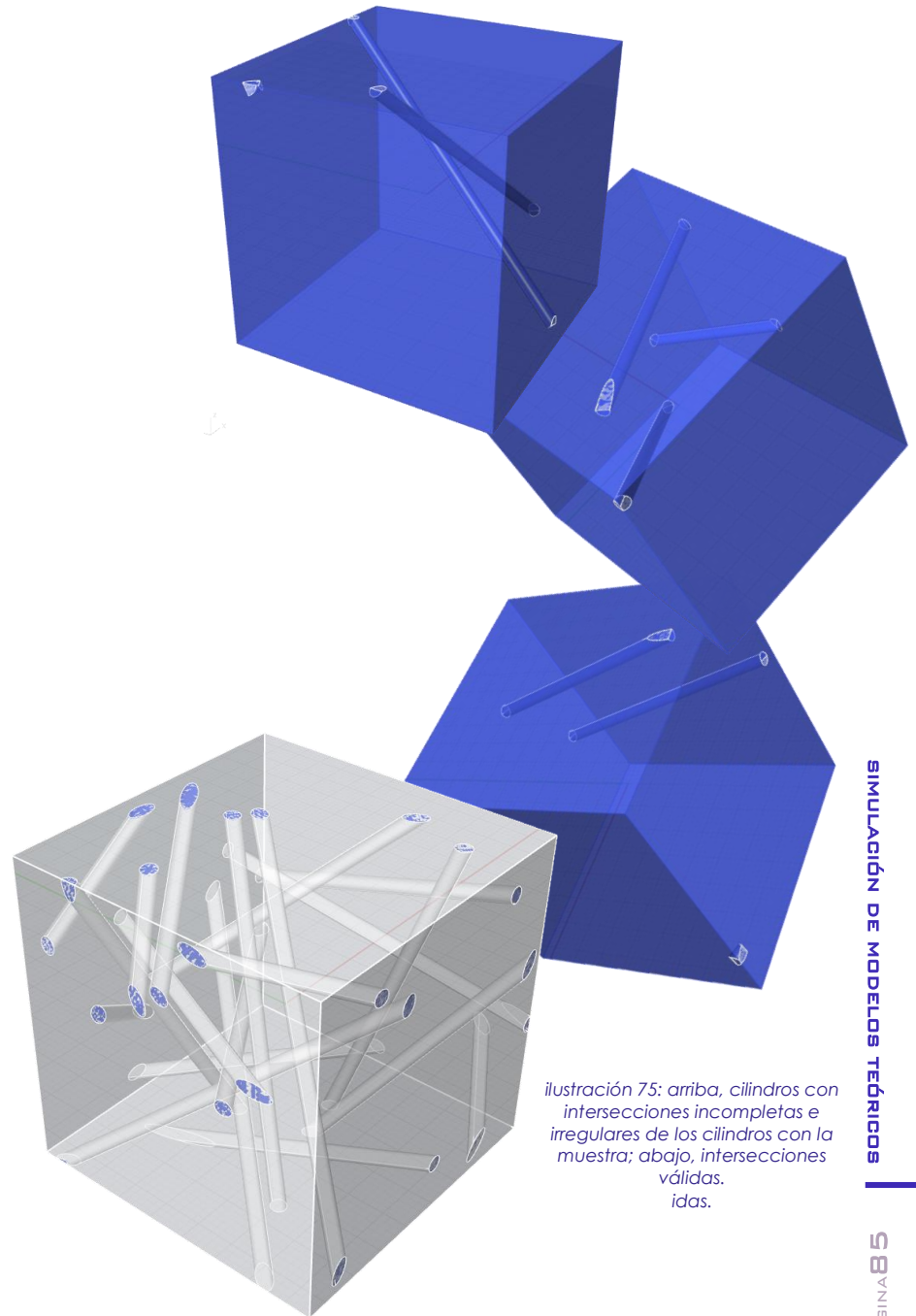
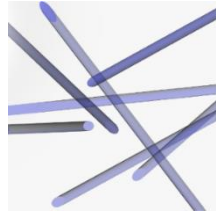
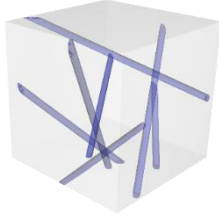
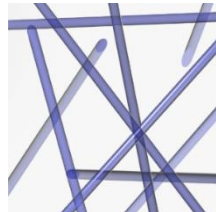
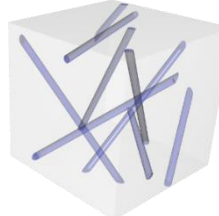
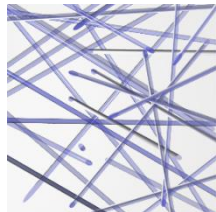
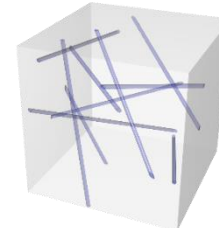

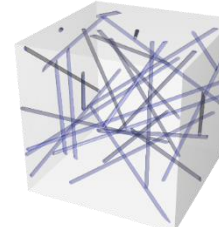


ilustración 75: arriba, cilindros con intersecciones incompletas e irregulares de los cilindros con la muestra; abajo, intersecciones válidas.

¹⁰⁷ O los tubos no se seccionaban completamente en su dirección transversal, hecho que no permitiría suponer **que el nanotubo atraviesa la muestra**.

¹⁰⁸ En concreto, de 20 nm más que cada muestra.

Exposición de muestras finales

<i>LADO DEL CUBO</i>	<i>CUANTÍA DE CNTs</i>	<i>DENSIDAD DE CNTs</i>	<i>APARIENCIA</i>	
M50 - B02	1	0,2 %		
M50 - B15	9	1,5 %		
M100 - B04	10	0,4 %		
M100 - B12	30	1,2 %		

Exposición de muestras finales

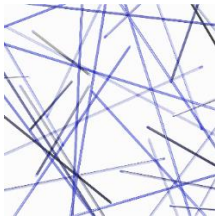
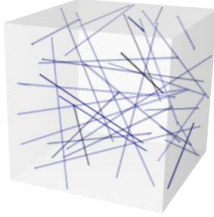
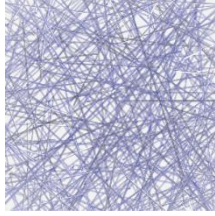
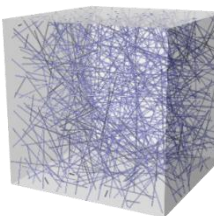
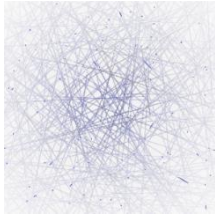
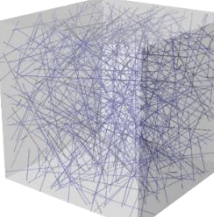
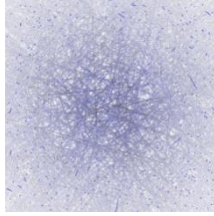
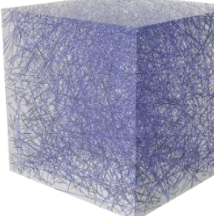
LADO DEL CUBO	CUANTÍA DE CNTs	DENSIDAD DE CNTs	APARIENCIA	
M200 - B03	30	0,3 %		
M300 - B12	350	1,2 %		
M500 - B04	300	0,4 %		
M500 - B15	1870	1,5 %		

Tabla 13: exposición resumen de muestras finales.

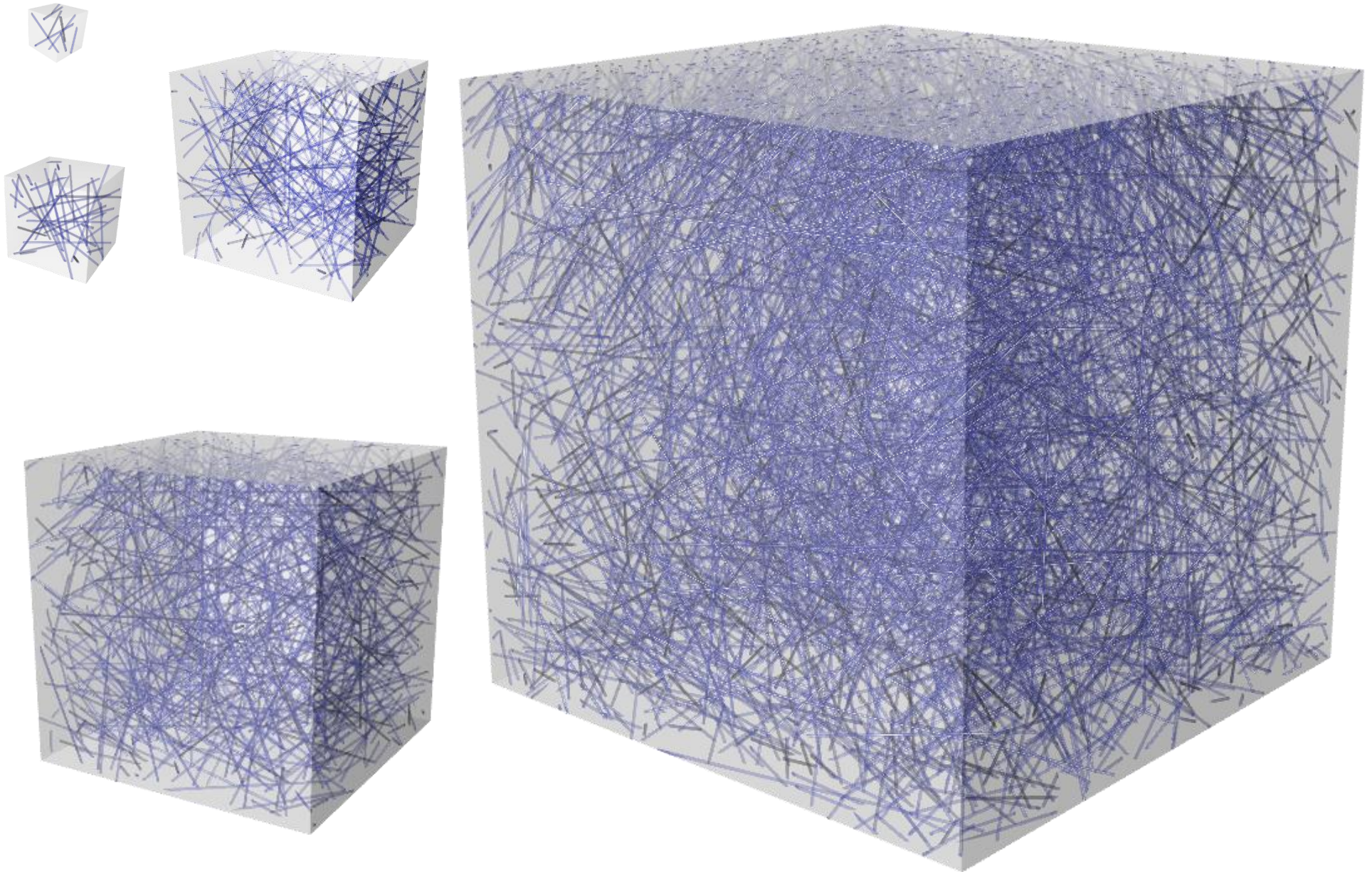


ilustración 76: relación de tamaños de las muestras de 1,5% de densidad.

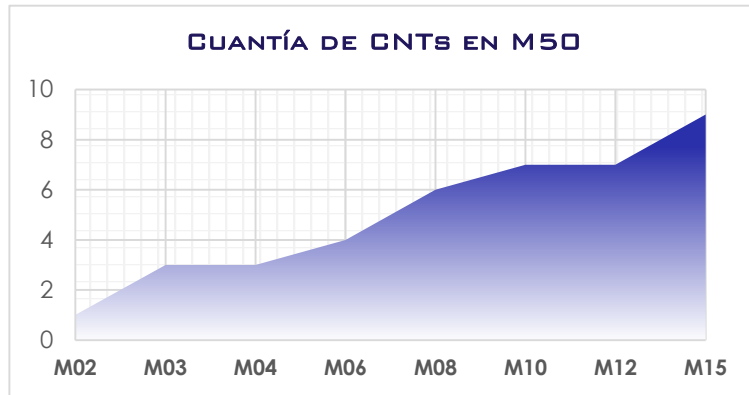


Gráfico 4: cuantía de CNTs en muestras de 50 nm.

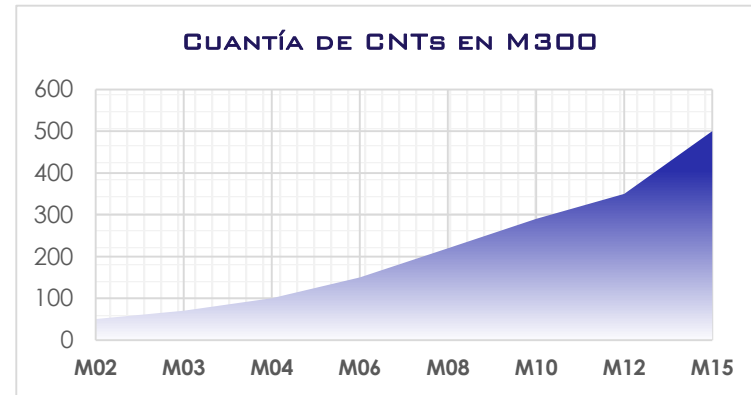


Gráfico 5: cuantía de CNTs en muestras de 300 nm.

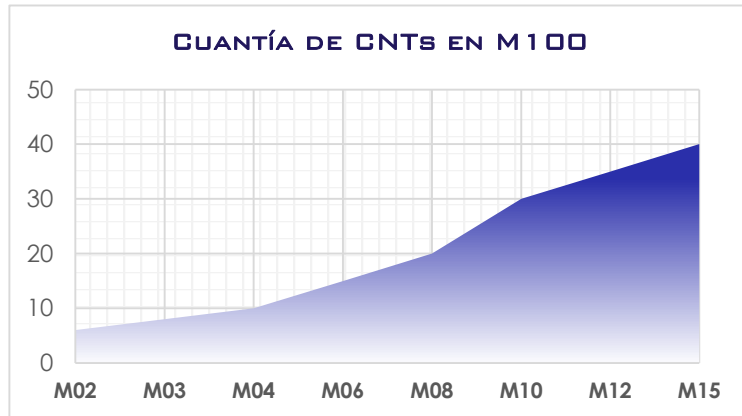


Gráfico 6: cuantía de CNTs en muestras de 100 nm.

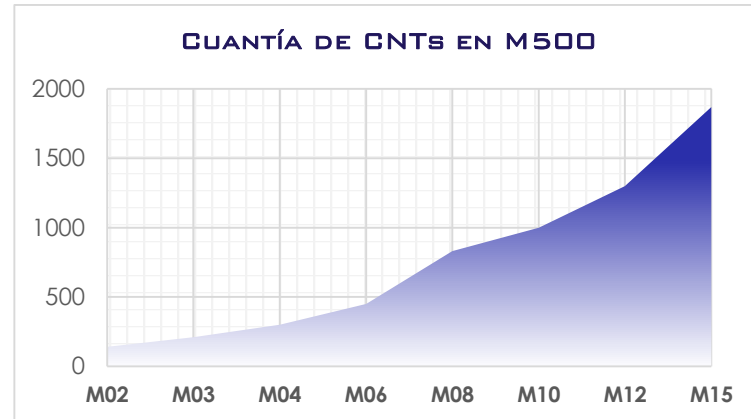


Gráfico 7: cuantía de CNTs en muestras de 500 nm.

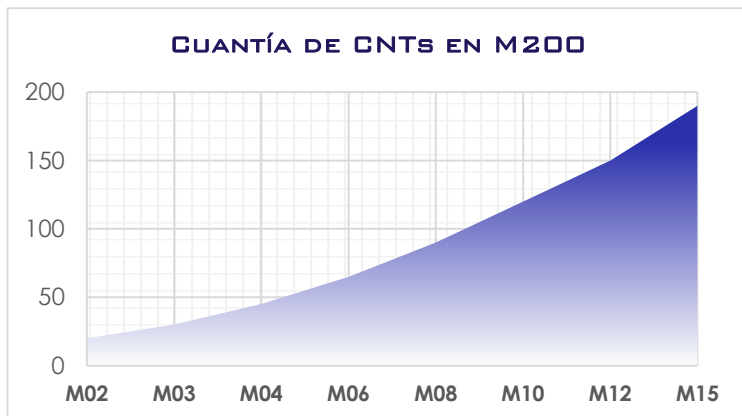


Gráfico 9: cuantía de CNTs en muestras de 200 nm.

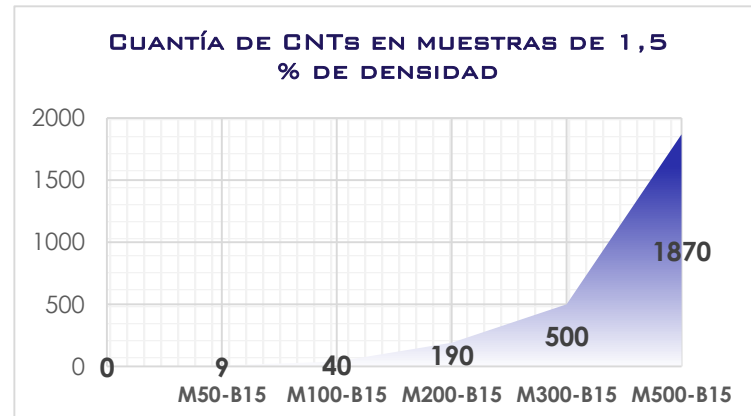


Gráfico 8: cuantía de CNTs en muestras de 1,5 % de densidad.

Conclusión del modelado

Los modelos finales han cumplido con las expectativas iniciales. Ha sido posible la generación de todas las muestras que se había previsto, alcanzando un total de **cuarenta modelos de óptimas cualidades**.

El algoritmo generador de las muestras debía aportar resultados sin colisiones entre cilindros, pudiendo generar una **elevada cuantía de éstos en tiempos viables** para la realización frecuente de muestras que permitiera su evaluación y así identificar sus atributos, debilidades y aspectos mejorables.

Para disponer de un control total sobre el diseño, se decidió emplear **herramientas de parametrización** que permitieran la construcción de objetos a partir de datos numéricos y no exclusivamente mediante operaciones de modelado tridimensional, pues se conocía la necesidad de manejar grandes cantidades de datos y cuerpos geométricos a priori de su realización.

El proceso de modelado se vio fuertemente condicionado por las capacidades de las herramientas empleadas, debiendo estudiarse los diferentes procedimientos y mecanismos para hacer posible tal diseño eficiente y adecuado para la simulación. La **falta de capacidad de los algoritmos propuestos en el modelo inicial** se evidenció por sus carencias en cuanto a resultado y procesamiento de datos, generando muestras que en todo caso presentaban colisiones y empleando, para la obtención de estos deficientes modelos, tiempos de computación excesivos.

Una vez descartada la validez de los primeros algoritmos construidos mediante funciones nativas del software escogido, se optó por diseñar un componente capaz de ejecutar funciones propias, diseñadas en exclusividad para el objetivo que acontecía, con el objetivo de **mejorar el rendimiento de la generación** de muestras.

El modelo completo debía cumplir más exigencias que el inicial, por lo que se experimentó con varios **mecanismos de generación numérica** mediante procesos de prueba y error hasta dar con la solución más apropiada para el diseño de las muestras virtuales. La realización del modelo completo fue posible gracias a las herramientas del software, que permitía al usuario el diseño del componente mencionado mediante **códigos de programación**.

Sin embargo, aunque el algoritmo final es capaz de generar modelos óptimos en tiempos viables para este estudio, **no permite establecer la densidad buscada como parámetro inicial** de diseño. Habiéndose empleado un largo período para la elaboración del algoritmo final, suponía una inversión extra de tiempo establecer la densidad como condición para el proceso sabiendo que esto **no supondría una mejoría en el tiempo computacional**. De hecho, lo incrementaba debido a las numerosas operaciones necesarias para calcular la densidad de la muestra, que deberían realizarse una y otra vez durante el proceso de computación.

Mediante el procedimiento que se expone, el contador sólo debe llegar a una cantidad preestablecida de cilindros, calculándose a partir de ella la densidad en una única ocasión, a posteriori. Tras un balance de las posibilidades, se decide **tantear la densidad respecto a un número estimado de nanotubos** de cara a conseguir la mejor relación entre calidad de la muestra y tiempo de procesamiento.

En conclusión, se ha alcanzado un **resultado óptimo de los modelos** a pesar de los diferentes factores que han interferido en el diseño. En primer lugar, la falta de competencias personales para con los softwares a emplear produjo una demora para con el inicio de la modelación. La capacidad de entender y manejar el programa de diseño tridimensional no fue suficiente, debiendo adquirirse constantemente durante el desarrollo de este estudio, una serie de conocimientos, al principios básicos y más tarde avanzados, sobre programación mediante códigos informáticos.

La relación entre la calidad de las muestras resultantes y el tiempo de procesamiento de datos que requiere el algoritmo para su modelado, resulta no sólo viable, sino **práctica y eficiente**, permitiendo la generación de todas las muestras expuestas en tiempos asumibles.

Mallado de modelos tridimensionales

En este capítulo se expone el mallado de los modelos. Tal proceso se realiza con el software *ICEM CFD*, que permite la generación de mallas espaciales formadas por elementos tridimensionales, aportando una definición detallada de las muestras a nivel diferencial.

Las listas de los centros de gravedad de las geometrías exportadas de los modelos tendrán especial relevancia en el proceso de mallado, pues desempeñarán un papel importante para con la ordenación de los elementos de la malla. Sin embargo, las listas de vectores adquirirán mayor relevancia en la posterior simulación realizada a partir de las muestras modeladas y malladas.

Introducción y objetivos

El mallado de las muestras consiste en la **división de los elementos complejos** que las componen en subelementos más sencillos. Esta fragmentación se realiza con el objetivo de preparar los modelos para someterlos a simulaciones mecánicas en softwares que emplean el **método de los elementos finitos** para su análisis. El procedimiento consiste en **convertir un problema complejo en un sumatorio de problemas simples de resolver**¹⁰⁹ y sustituir un número infinito de parámetros desconocidos por una cuantía limitada de variables bien definidas. En este caso, el método de los elementos finitos supondrá la división de una geometría compleja en una serie de elementos muy sencillos que no representan mayor problema de comprensión, en lo que a cualidades geométricas y comportamiento se refiere. El conjunto de estos elementos simples conforma una malla.

Deberá disponerse de un **mallado lo bastante detallado** en cada muestra, bien definido y con elementos suficientes para obtener resultados relevantes en la posterior simulación, teniendo en cuenta que la malla deberá ser capaz de **representar con precisión la intersección de los cilindros y el cubo** para permitir estudiar la interacción entre ellos en la simulación.

Por otro lado, se pretende **aportar una dirección a los nanotubos para abordar la simulación desde un punto de vista anisótropo**¹¹⁰, ya que las propiedades de los nanotubos de carbono variarán en dependencia de la dirección debido a su **notable diferencia en cuanto a la dimensión de su longitud y su diámetro**. Por ello, no sería lógico considerar, por ejemplo, que la resistencia a tracción del nanotubo es la misma transversal y longitudinalmente, pues las condiciones de forma e inercia del cuerpo varían notablemente respecto a una u otra dirección de aplicación de la fuerza.

En definitiva, el propósito de este proceso es la generación de mallas adaptadas a cada modelo (I.77), que permitan un nivel de detalle suficiente en **coherencia con cada muestra** y las cuestiones que se quieren estudiar. Además, la malla deberá ser lo bastante eficaz para representar con precisión la relación entre el material contenedor y el contenido, y permitir un análisis exhaustivo de elementos finitos con Ansys.

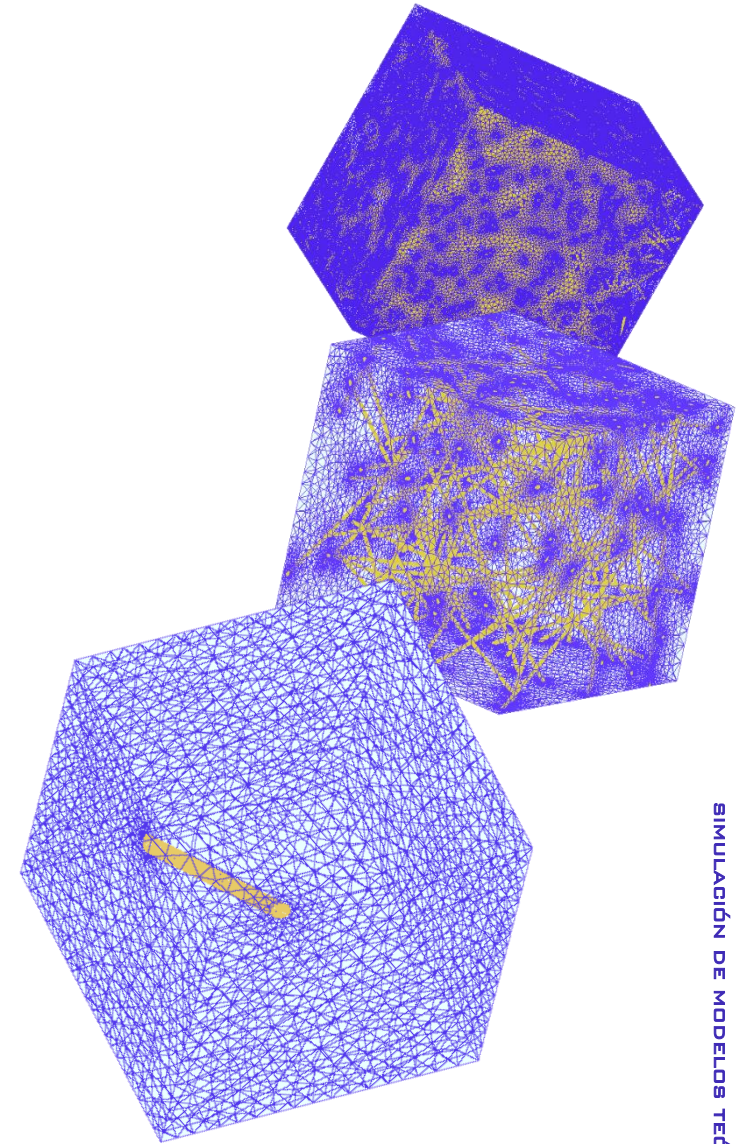


ilustración 77: evolución del mallado de las muestras conforme a la variación de la dimensión y la cuantía de CNTs.

¹⁰⁹ La cuantía de operaciones a realizar se incrementa exponencialmente, por lo que no se trata de un método viable de modo manual. Sin embargo, la realización de elevados números de operación tan sencillas es realizadas en milésimas de segundo por un ordenador.

¹¹⁰ Lo más habitual es enfocar el análisis desde la condición isótropa, según se aprecia en los experimentos y simulaciones referenciados en este documento.

Parámetros de definición de las mallas

El mallado de cada modelo constará de los siguientes elementos (I.78), cuya cuantía y tamaño deberá adaptarse a las condiciones dimensionales y geométricas de cada muestra:

- **Nodos:** puntos del modelo que aportan la información de la **coordenada espacial** de los elementos finitos. Cada elemento está conformado por cuatro nodos que representan los vértices de un tetraedro, perteneciendo a varios simultáneamente. La nomenclatura de los tetraedros de la malla se realiza en función de los nodos por los que estén formados.
- **Elementos finitos:** las partes en las que se fragmenta el modelo que se somete al mallado (I.79). Al realizarse una operación de división, la cuantía de elementos que conforman dicha malla será finita. Se forman mediante la unión de nodos adoptando la geometría de **tetraedros irregulares**, cuya dimensión será variable y se verá limitada por la semilla.
- **Semilla:** referido a la **dimensión máxima** que podrá adoptar un elemento finito, es decir, el tetraedro más grande que se podrá generar al originarse la malla. La relevancia de la semilla radica en la siguiente cuestión: a mayor tamaño de los tetraedros, menor número de ellos podrá contener la muestra y a menor cuantía de tetraedros, menor definición en el posterior análisis. Por ello, la semilla debe adoptar una dimensión lo suficientemente pequeña para promover un análisis detallado, pero lo bastante grande¹¹¹ para aportar información relevante, siempre en coherencia con el tamaño del cuerpo que se malla.
- **Sistema de ejes locales:** conjunto de vectores espaciales que cada tetraedro lleva asociado, cuya utilidad radica en **determinar la posición del elemento** respecto a la geometría global. El orden en que el programa recoge las coordenadas (nodos) del tetraedro, marca la dirección y el sentido de los ejes locales, adoptando un sistema de ejes diferente el elemento 4-3-2-1 que el 1-2-3-4 y dándoles nomenclatura en función a tal disposición.

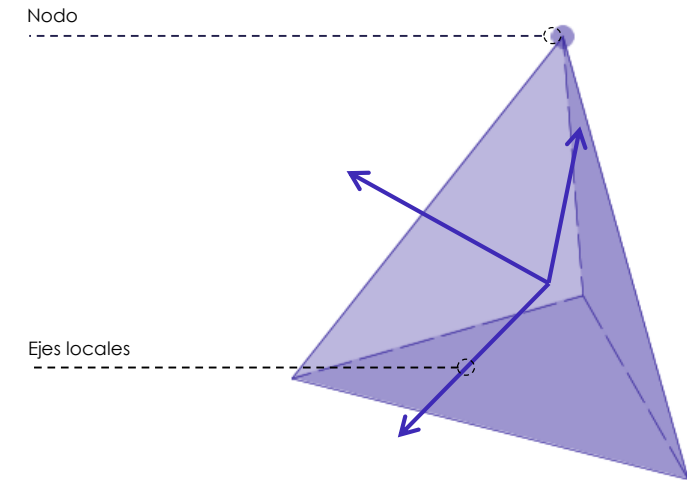


Ilustración 78: parámetros de definición de los elementos.

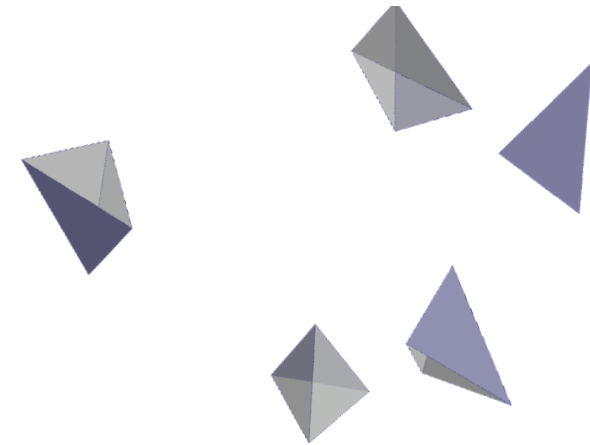


Ilustración 79: elementos que conforman la malla, tetraedros para ejecución de análisis por el método de los elementos finitos.

¹¹¹ Los atributos de grande y pequeño se entienden aquí en relación a la dimensión de la muestra.

Metodología

Las semillas son las protagonistas del método de diseño de las mallas. La **limitación dimensional de los elementos de la malla** deberá establecerse con anterioridad a la generación de la misma, disponiéndose, en este caso, dos semillas por muestra: una de ellas, supondrá el tamaño máximo del elemento de malla de los nanotubos, que se ajusta para disponer de entre cuatro y seis elementos¹¹² en el interior del cilindro; la otra semilla limitará el tamaño máximo de los tetraedros que formarán la malla del cubo.

A la hora de definir la semilla de los nanotubos se tendrán en cuenta dos aspectos, principalmente: en primer lugar, se deberá **conservar la geometría cilíndrica** de los mismos después del mallado (1.80), para lo que la semilla debe ser lo bastante pequeña. Por otra parte, se simplifica el proceso **considerando cilindros macizos** ya que la escala del material es mucho mayor que la de los tubos, impidiendo la introducción de material de la matriz en su interior¹¹³. Además, si se considerasen huecos, la semilla asociada a los nanotubos debería ser mucho más pequeña para caber en su interior, provocando esto un aumento exponencial del número de elementos. Tal aproximación a la realidad no es posible con los medios informáticos de la actualidad, por lo que es necesario recurrir a dicha técnica de simplificación para poder estudiar este caso.

Dado que el tamaño del nanotubo no variará en ninguno de los modelos, se establecerá la dimensión máxima de sus elementos de la malla en una única ocasión, siendo **la semilla de los cilindros el único parámetro invariable del proceso de mallado**. Sin embargo, **el tamaño de la muestra sí varía por lo que su semilla deberá cambiar conforme lo hagan sus dimensiones** para ser topológicamente compatible con cada modelo. Es importante tener en cuenta que, a mayor cuantía de elementos en la malla, mayor nivel de precisión adquirirán los resultados interesando que la semilla del nanotubo presente baja dimensionalidad, mientras que no es necesario ni significativo que los elementos del cubo sean muy pequeños.

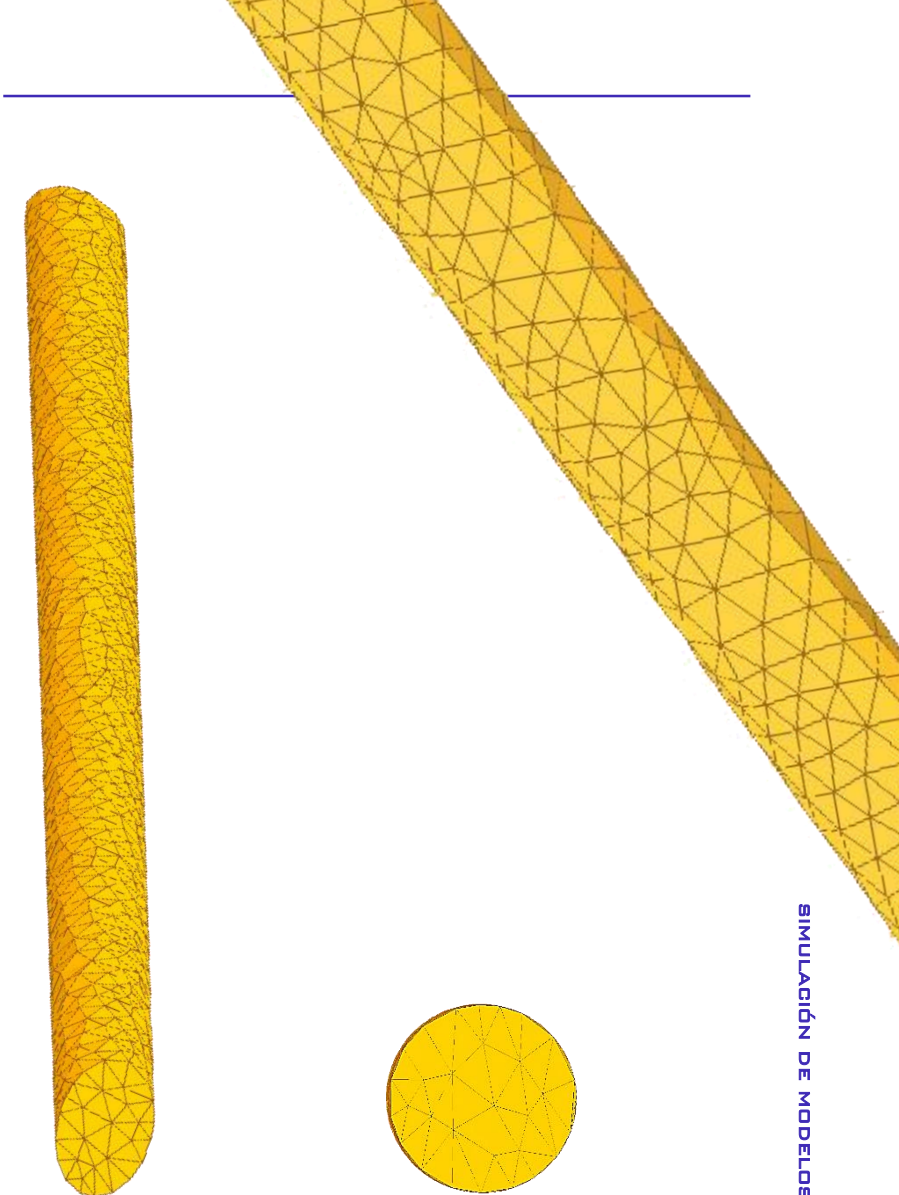


ilustración 80: cilindros mallados en ICEM CFD.

¹¹² Considerando que elementos más grandes en el cilindro, y, por tanto, menos cantidad, no aportarían suficiente definición.

¹¹³ Se ha considerado que los cilindros en las muestras diseñadas las atraviesan de lado a lado, pues la más grande aún mide menos que la longitud de los nanotubos. Por ello, se ha supuesto que los extremos de los nanotubos se encontrarán en las muestras de al lado de la que se analiza. Aunque en la muestra se encontraran los extremos de los nanotubos, la escala del hormigón sería demasiado grande como para introducirse en el interior de los cilindros más que un poco de agua de la mezcla, por ello se considera correcto suponer que los cilindros son macizos.

Sabiendo que el programa es capaz de detectar espacios cerrados, se asociarán los elementos de la malla que se encuentren en el interior del mismo volumen creando **agrupaciones de elementos** para así dotar de diferentes propiedades a cada grupo según formen parte de un nanotubo o del material contenedor. Esta clasificación se realiza **atendiendo al centro de gravedad de cada volumen**, importados todos ellos de Rhinoceros en forma de listado.

Agrupados los tetraedros que pertenecen a cada nanotubo, a través de su sistema de ejes locales, **se asociarán en la simulación al vector director** de cada cilindro (I.81) para aportar una dirección a las muestras. Esto se realizará reorientando uno de los vectores locales de cada tetraedro hacia la dirección del cilindro en que se encuentra.

La generación de la malla en *ICEM CFD* podrá realizarse en el entorno gráfico del software o mediante programación en código *Tcl*¹¹⁴, permitiéndose ambas vías de diseño al igual que sucedía en el proceso de modelado con *Grasshopper* y *Python*. Se prestará especial atención a la **simplificación tanto del proceso de mallado como de la exportación de los datos de las mallas** obtenidas a Ansys.

Obtenidas las mallas y reorientados sus elementos, se exporta de *ICEM* el modelo tridimensional mallado y las listas de nodos y elementos de la malla, estando definido qué nodos pertenecen a cada elemento. Esto último completa los parámetros necesarios a incrustar en Ansys para ejecutar la simulación de cada modelo:

- Modelo tridimensional mallado.
- Listado de vectores directores de los nanotubos¹¹⁵.
- Listado de nodos y elementos finitos asociados a cada volumen espacial.

La generación de la malla no es un paso del proceso que pueda eludirse, pues prácticamente la totalidad de los softwares de simulación informática emplean el método de análisis por elementos finitos, conque cualquier modelo virtual debe encontrarse fragmentado. Además, **la calidad y adaptación de los elementos de la malla a la geometría tendrán relevancia total con respecto a los resultados** que se obtengan en la posterior simulación, por lo que el mallado no es sólo inevitable, sino determinante y taxativo.

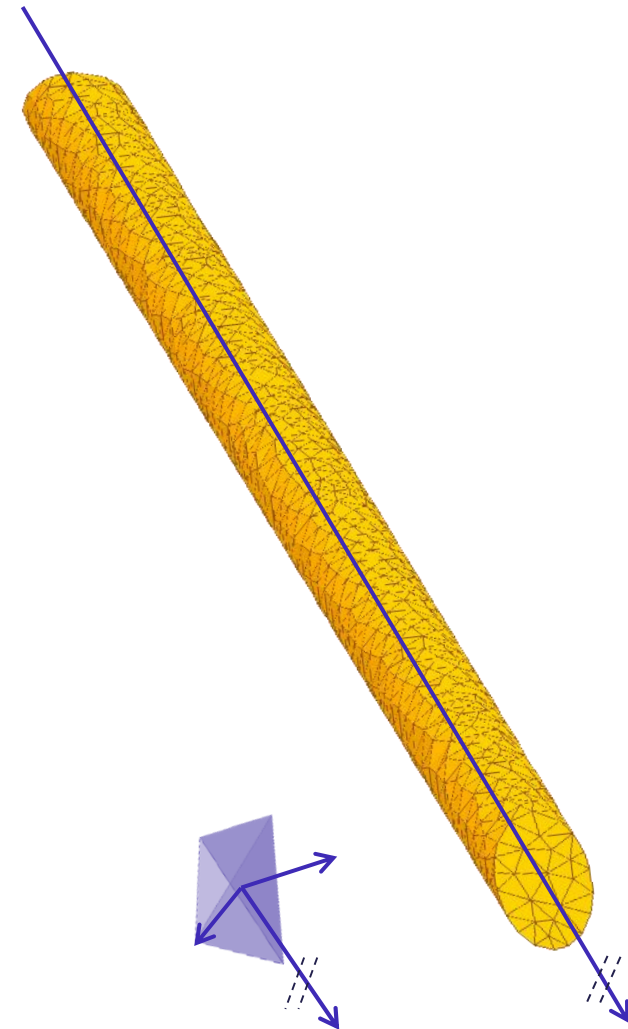


ilustración 81: orientación del sistema de ejes locales de los elementos de la malla para con el vector director de su respectivo cilindro.

¹¹⁴ *Tcl* es un lenguaje de programación que presenta una sintaxis extremadamente sencilla de cara al usuario, aparecido en los años 80. Prácticamente la totalidad de los softwares que emplean el método de los elementos finitos para realizar análisis mecánicos utilizan este lenguaje.

¹¹⁵ Exportado del modelo tridimensional de *Rhino*.

Mallado con Ansys ICEM CFD

Como se ha mencionado anteriormente, *ICEM* permite la **intervención en el software por medio de su entorno gráfico o a través de códigos** en lenguaje de programación *Tcl*. Aunque la interfaz del programa no resulta muy atractiva, es de gran ayuda para comprender las operaciones que se están realizando y visualizar las mallas generadas, sin embargo, es más eficiente trabajar en el programa empleando los códigos.

Por otro lado, resulta de gran complejidad entender los procesos que se realizan en el software por medio de la programación sin una herramienta que permita su visualización y edición desde la imagen. Es por ello que en este estudio se emplean ambos mecanismos, considerándose medios necesarios para la obtención de un resultado óptimo, si bien se pretende **automatizar al máximo el proceso de mallado**, de cara a trabajar lo menos posible en el programa.

En definitiva, la combinación de las dos propuestas que se presentan a continuación ha sido necesaria a lo largo del desarrollo del mallado: la primera, como asistencia visual y la segunda, estableciendo los requerimientos de las mallas a generar (I.82).

PROPUESTA 1º: mallado en entorno gráfico

Este método consiste en **importar la geometría de Rhino directamente en ICEM**¹¹⁶. Colocado el modelo, puede actuarse sobre éste con total libertad y definirse un tipo de semilla para cada volumen, pues el programa es capaz de detectar espacios cerrados en la muestra.

A pesar de esta habilidad del programa, si se genera la malla en el entorno gráfico del software, se advierte cómo se crea una interminable **lista de elementos finitos imposibles de identificar** ni de relacionar con la geometría que los contiene, bautizados con **nombres genéricos totalmente aleatorios**. Por este motivo, no es posible reconocer en la lista los elementos del modelo que pertenecen a los diferentes volúmenes y, aunque fuera posible, identificar varios millones de elementos conllevaría un tiempo demasiado excesivo, desembocando en un proceso nada eficiente y muy engorroso.

Con el objetivo de optimizar y simplificar el proceso de mallado al máximo nivel de cara al usuario y al tiempo total de desarrollo, nace la siguiente propuesta.

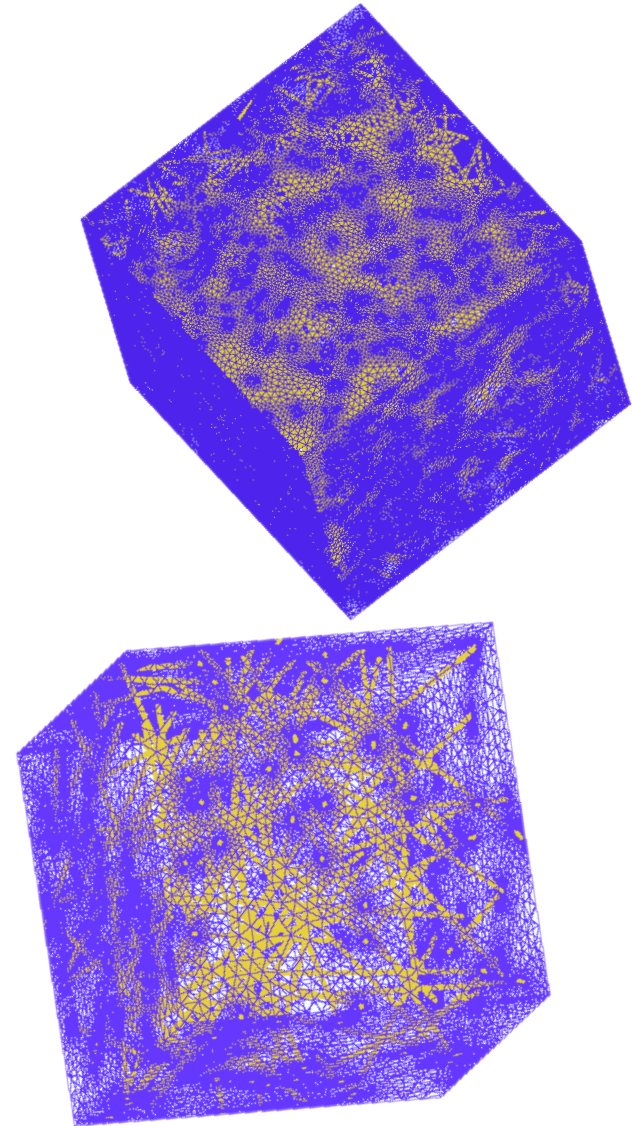


ilustración 82: mallas generadas en ICEM CFD.

¹¹⁶ El software permite la importación directamente en formato .3dm.

PROPUESTA 2ª: mallado con códigos programados

El conjunto de códigos de *ICEM* permite ejecutar las mismas operaciones que el entorno gráfico, si bien debe disponerse de capacidad de comprender y diseñar en lenguaje *Tcl*, e incluso ejecutar acciones más complejas sobre el modelo importado y su malla.

Este método permite **automatizar al máximo el proceso de mallado** mediante la definición de los parámetros necesarios de cara a una menor presencia del usuario en el proceso de mallado. De este modo, se reduce también la probabilidad de generarse problemas por error humano, siendo posible **resolver las carencias del mallado en entorno gráfico del software**.

Agrupación de elementos finitos

Con el fin de dar solución al problema de identificación de los elementos del mallado, se generan unos **puntos de control asociados a cada espacio cerrado**, que el programa es capaz de detectar. Estos puntos se harán coincidir los centros de gravedad¹¹⁷ de cada volumen para disponer de unas coordenadas definidas y fáciles de identificar, cuya información se importa previamente desde el modelo de *Rhino*.

Conocido cada volumen y su respectivo centro de gravedad, se indica al programa que debe **agrupar todos los elementos que detecte en el interior de cada espacio en torno a la coordenada de su centro definido (I.83)**, posterior denominación del conjunto con una sola nomenclatura. Así, el conjunto de elementos contenidos en el nanotubo 1 formará "CNT1". Esta agrupación será especialmente necesaria en muestras con elevadas cuantías de cilindros, pues a más cantidad de éstos, más elementos contendrá la malla como consecuencia de la constante adaptación de la semilla de la muestra a la de los cilindros.

Una vez determinado qué elementos de la malla pertenecen a qué cilindro, será posible reorientar los ejes locales de estos elementos con respecto al vector director de los nanotubos, previa identificación del vector a reorientar. Este aspecto representa la dificultad del mallado con *ICEM* y, al mismo tiempo, su potencia pudiendo dotarse a los modelos de la direccionalidad necesaria para posibilitar la posterior ejecución de una simulación de carácter anisótropo.

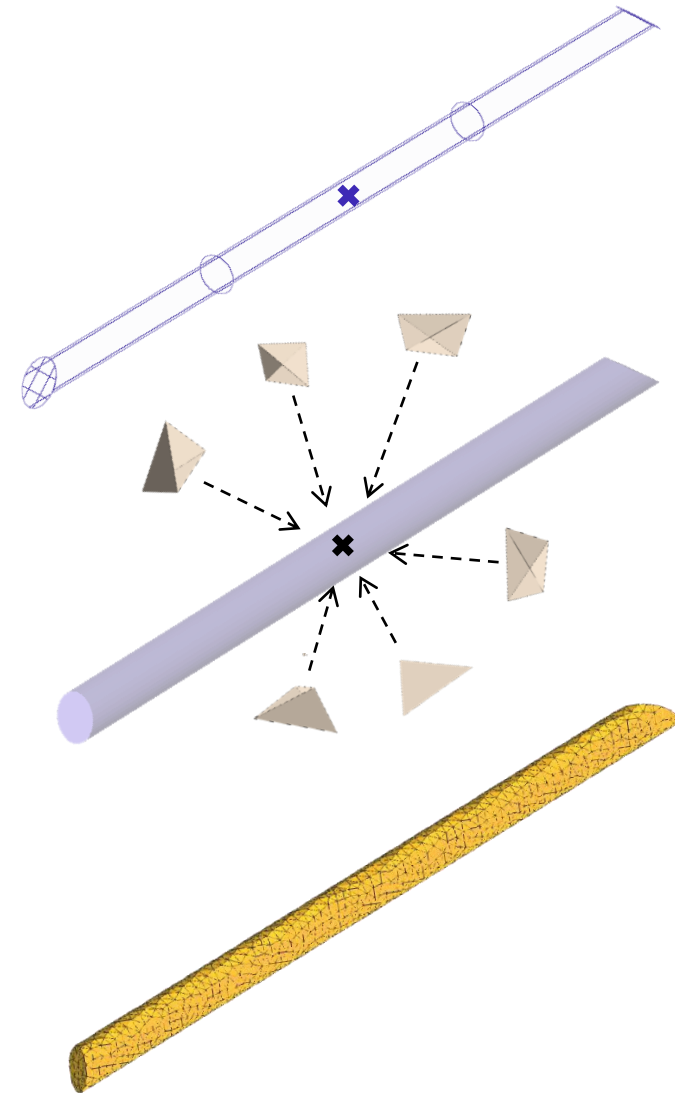


Ilustración 83: agrupación de elementos de la malla de un cilindro respecto a su centro de gravedad, tomando éste como punto de control asociativo.

¹¹⁷ Se importa la lista de centros de gravedad que expulsa previamente el algoritmo de *Rhino*, coincidiendo el orden de generación de cada CNT con la escritura de su respectivo centro de gravedad en la lista. Como este orden no se altera, la importación de los datos a *ICEM* es inmediata y las de los vectores a *Ansys* lo será también.

Desarrollo del proceso de mallado

El primer paso del proceso radica en establecer la semilla para generar la malla, considerando las dos geometrías diferenciadas que se encuentran en el modelo: los nanotubos y el cubo que los contiene. La diferencia de tamaño entre ambos elementos es clara, siendo **conveniente establecer varios tipos de semilla (1.84) en coherencia con las condiciones dimensionales de los volúmenes.**

La **tabla 12** recoge los tamaños de las semillas decretadas para mallar cada cuerpo espacial, siendo estos los cinco cubos de geometría idéntica, pero tamaño variable y el nanotubo de carbono, de constantes siempre fijas:

SEMILLAS DE LAS MALLAS					
CNT	M50	M100	M200	M300	M500
0,75	4,0	8,0	16,0	24,0	32,0
NM					

Tabla 14: semillas del proceso de mallado.

A pesar de la clara diferencia entre las dimensiones de las semillas del cubo y la muestra, ambos elementos formarán parte del mismo todo de la malla, conque deberá realizarse una **transferencia dimensional entre ambos elementos.** A través de un algoritmo de crecimiento de mallado, la transmisión de tamaños en la malla se realiza de forma suavizada en lo que respecta a variación dimensional, adaptándose las capacidades de crecimiento de la malla a la muestra mediante una acomodación gradual de las magnitudes (1.85). Es decir, los tetraedros de mayor dimensión del cubo van reduciendo su tamaño paulatinamente según se acerquen al nanotubo. Esta **homogeneización de la semilla del cubo a la del cilindro** no se realiza mediante cambios bruscos de tamaño en los tetraedros, si no que la adaptación es progresiva.

Cabe destacar que, **a mayor densidad de nanotubos en el cubo, mayor capacidad de adaptación de la malla será precisa,** generándose un mayor número de elementos ya que la malla no dispone de espacio para crecer por la aproximación inmediata de otro cilindro, al que también deberá adaptarse. Esto se traduce en un incremento de la complejidad y los elementos de la malla conforme aumenta la densidad de nanotubos en el modelo¹¹⁸.

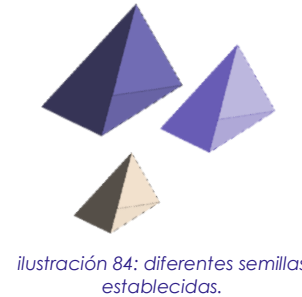


ilustración 84: diferentes semillas establecidas.

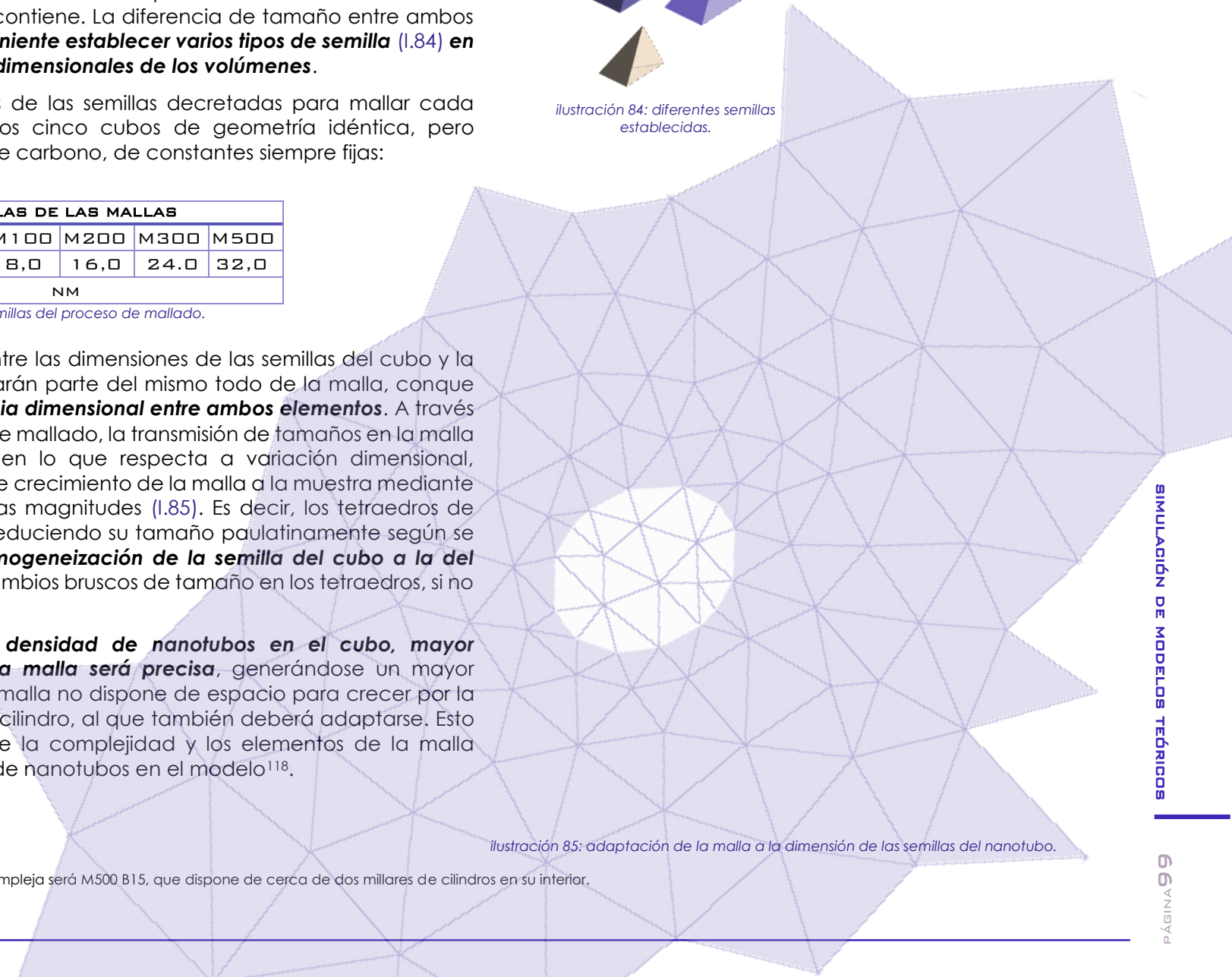


ilustración 85: adaptación de la malla a la dimensión de las semillas del nanotubo.

¹¹⁸ La muestra que presentará la malla más compleja será M500 B15, que dispone de cerca de dos millares de cilindros en su interior.

Las mallas generadas por *ICEM* gozan de una capacidad de adaptación muy eficiente a la hora de realizar transferencias de tamaños enmarcados en geometrías complejas. **La homogeneización de ambos elementos es crucial para entender la interacción entre los nanotubos de carbono y la matriz de microcemento** que los contiene.

Obtenida una malla coherente con las condiciones formales de cada modelo (1.86), se exportan de *ICEM* los resultados que comprenden, por un lado, el modelo tridimensional mallado que se introducirá en *Ansys* para ejecutar la simulación y, por otro lado, una serie de complementos ligados al modelo virtual, en forma de archivos de texto que definen diferentes atributos que, unidos al fichero que recoge los vectores directores, sumarán los parámetros necesarios para efectuar la simulación:

- Listado de nodos.
- Listado de elementos.
- Relación de nodos y elementos.
- Parámetros definitorios de las mallas: cuantías y semillas.

A continuación, se expone el algoritmo diseñado para el mallado de las muestras, programado en lenguaje *Tcl* y complementado por la visualización de las mallas en el entorno gráfico de *ICEM*.

DISEÑO DE ALGORITMO

En primer lugar, se establece un directorio de trabajo para el mallado con *ICEM* y se definen los parámetros de entrada que se importarán ligados al modelo tridimensional de *Rhino* (1.87). A continuación, se especifica el nombre de los ficheros de *Rhino* a importar en *ICEM* y la ruta donde se encuentran, y se importa la lista de los centros de gravedad.

Una vez importados el modelo y los datos de los centros de gravedad para posibilitar la agrupación de elementos en torno a ellos, se transforma el modelo de *Rhino* de formato ".3dm"¹¹⁹ a ".tin" y se le asocia una ruta en el espacio de trabajo.

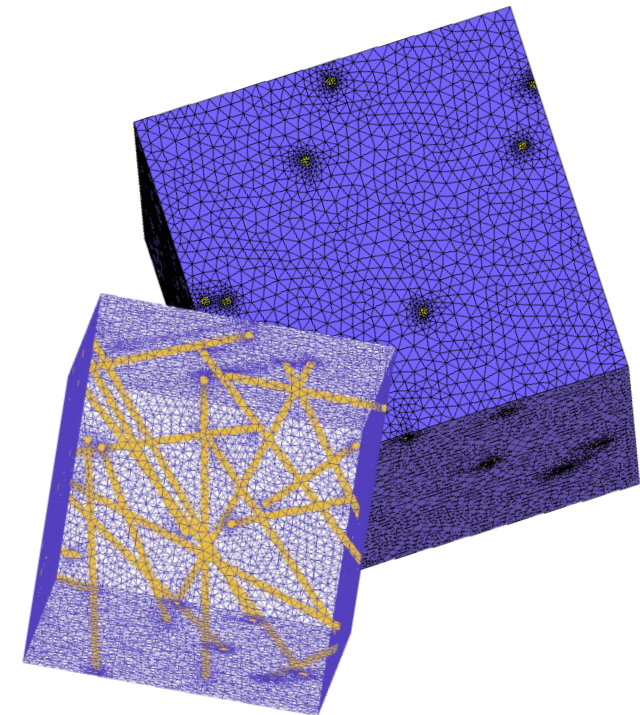


Ilustración 86: ejemplos de mallas generadas, adaptables a cada geometría.

```

... #Define WorkSpace
... set workSpace "C:\DirectorioTrabajo"
... file mkdir $workSpace

... # File's name and route
... set output "$Muestra-$Fv"
... set pxyzDir "C:\DirectorioTrabajo"

... # Name of Gravity Center's file
... set pxyzFile "$Muestra-$Fv-GC.txt"

... # File import and new route
... set r3dm "$output.3dm"
... set ruta3dm "C:\DirectorioTrabajo"
... set rutaTin $workSpace/$output.tin
    
```

¹¹⁹ *ICEM* no permite la importación de modelos tridimensionales en formatos de versiones posteriores a *Rhino3*.

Para dar inicio al proceso de mallado se establecen los parámetros de medida de las mallas para cada muestra: **MA (x, y, z)**.

- MA: nomenclatura de la muestra que se va a mallar.
- x: escala de la unidad de medida con respecto a modelo. Siempre tomará **valor la unidad** pues las unidades especificadas en Rhino se mantienen.
- y: tamaño de la semilla del cubo en nanómetros. Su valor **variará con respecto a cada muestra** tomando los valores definidos en la **tabla X**.
- z: tamaño de la semilla de los nanotubos. Supone una dimensión invariable independientemente del tamaño del cubo, tomando un **valor constante de 0.75 nm**.

Definidos los parámetros anteriores, se especifica el factor de escala global para toda la geometría del modelo (ic_geo_scale) y se exponen los valores definitorios de las características de la malla (ic_set_meshing_params).

A continuación, se crean dos listados (l. 88): el primero, de diferentes espaciales que presenta la geometría previamente al mallado, detectadas por el software y el segundo, de espacios referentes a CNTs.

Para relacionar los elementos del segundo listado con los centros de gravedad y obtener los elementos de la malla ordenados por nanotubo, se crea una tercera lista dentro del programa que contendrá **tantos centroides como cilindros detecte el programa** y se unen las variables de la segunda y la tercera lista, es decir, se le asigna un punto de control a cada volumen de la muestra¹²⁰ perteneciente a un CNTs.

Para **afiliar cada cilindro con su punto de control y asociar a éste las coordenadas de los centros de gravedad** exportados de *Rhino*, cada uno en su respectivo orden, se genera un total de tres bucles que ejecutan esta tarea de forma automática (l.82). Además, se especifica que cada uno de los nanotubos recibirá el nombre de CNTx, representando la x el número de índice con que se recoge el cilindro en las listas exportadas de *Rhino*.

```

... # Global parameters definition
... # M50 (1.0, 4.0, 0.75)
... set meshScale 1 0
...
ilustración 87: variables iniciales del código Tcl en ICEM CFD.
... set meshSeedCnts 0.75 ;

... # Setting some values
... ic_geo_sacle_meshing_params all $meshScale
... ic_set_meshing_params global 0 gref $meshScale
Gmax $meshSeed gfast 0 ggedged 0.2 gnat 0
gcgap 1 gnatref 10

... # List generation
... set listFamilyParts [ic_geo_non_empt_families]
... set cntFamilyParts [lsearch -regexp -all
$listFamilyParts CNT]
... ic_geo_delete_unattached $listFamilyParts 0 1
... ic_build_topo 0.04 -angle 30 -filter_poins -filter_curves
-no_concat $listFamilyParts

... # Joining elements with gravity centers
... set file [open $pxyzDir/$pxyzFile { RONLY } ]
... while { [gets $file linea] >= 0 } {
... .. set linea [join $linea ]
... .. lappend pxyz $linea
... }
... close $file
... set cnt "CNT"
... for {set i 0} {$i < [llength $pxyz]} {incr i 1} {
... .. set j [ expr $i+1]
... .. set j $cnt$j
... .. lappend centroidNumber $j
... }
... for {set i 0} {$i < [llength $pxyz]} {incr i 1} {
... .. set j [ lindex $pxyz $i ]
... .. set j [ split $j , ]
... .. lappend coord [ lindex $j 0 ]
... .. lappend coord [ lindex $j 1 ]
... .. lappend coord [ lindex $j 2 ]
... .. ic_geo_new_family [ lindex $centroidNumber $i ]
... .. ic_boco_set_part_color [ lindex
$centroidNumber $i ]
... .. ic_geo_create_volume $coord {} [ lindex
$centroidNumber $i]
... .. unset coord
... }

```

ilustración 88: agrupación de elementos de un mismo conjunto con respecto a su respectivo centro de gravedad en código Tcl.

¹²⁰ Este punto de control se ubicará en la misma posición que los centros de gravedad respectivos, cuyas coordenadas son conocidas.

Ya disponiendo de la lista donde se almacenarán los datos de los elementos de los cilindros, se genera una lista más que contendrá los **elementos de la malla pertenecientes al grupo del cubo**, asociados a su correspondiente semilla. A estos elementos, al igual que a los de los CNTS se les asigna un color determinado para favorecer la identificación de los elementos diferentes una vez realizado el mallado. El código de colores adquiere especial relevancia en modelos con gran densidad de nanotubos, facilitando la visualización y perspectiva de la malla.

Para asociar los elementos no contenidos en los cilindros a otro punto de control, se genera un **Hardpoint muy próximo al centro de gravedad del cubo**, concretamente en las coordenadas (0, 0, 0).

Una vez asociados todos los espacios a un punto de control **se relaciona cada volumen de la muestra con su respectiva semilla**, definida al inicio del código, para dar paso a la generación automática de la malla (I.89). Los comandos empleados para ejecutar esta función se incluyen en el **Anexo IV**, donde se expone el algoritmo de mallado completo en Tcl.

Mediante el empleo de este código, **las mallas se generan organizadas** como se viene exponiendo, incluyéndose en una base de datos que será posteriormente exportada (Database) en formato “.uns”.

Este modelo se importará a Ansys para ejecutar la simulación al mismo tiempo que las listas donde se especifica el número de nodos y elementos y la relación entre ellos.

Se prepara, además, una **salida ordenada de resultados** escritos en un archivo de texto que incluirá los datos básicos referentes a cada malla en relación a los elementos y las semillas (I.89). Este archivo se genera para adjuntar un resumen a cada modelo mallado pues se genera un total de cuarenta muestras.

A continuación, se exponen algunos ejemplos de los modelos mallados obtenidos mediante el anterior procedimiento. Además, el **Anexo IV** de este documento recoge una recopilación de los cuarenta modelos realizados y una tabla resumen con las características de todos ellos.

```

... # Shape the mesh
... set box BOX
... ic_geo_new_family box
... ic_boco_set_part_color box
... ic_geo_create_volume {1 1 1} {} box
... ic_point {} GEOM pnt.01 0, 0, 0

... # Assign parts to box
... lappend namePartsTetra $box
... lappend namePartsTetra $centroidNumber
... set namePartsTetra [join $namePartsTetra]

... #Setting mesh according to seed
... ic_geo_set_family_params G_CNTS no_crv_inf prism 0
... Emac $meshSeedCnts ehgt 0.0 hrat 0 nlay 0 \
... ... erat 0 ewid 0 emin 0.0 edev 0.0 split_wall 0
... internal_wall 0

... # Meshing
... ic_run_tetra $rutaTin \
... ... C:\DirectorioTrabajo \ run_cutter 1 delete_auto 1
... run_smoother 0
... Fix_holes 1 n_processors 6 in_process 1 \ log
[... ]

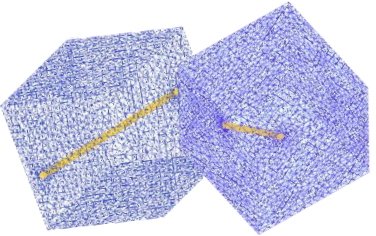
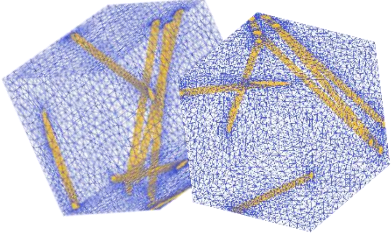
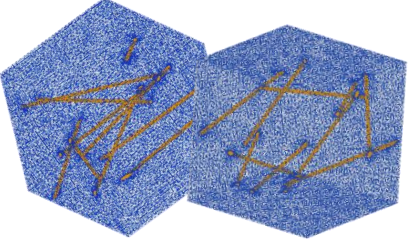
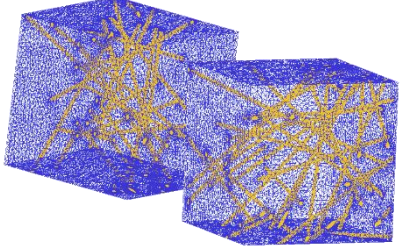
... # Mesh parts list and Database
... set listFamilyMesh [ ic_uns_non_empty_families]
... set listFamilyMat [ ic_uns_list_material_numbers]
... ic_save_unstruct $output.uns 1 {} {} {}

... # Results
... set nodeNumber [ ic_count_nodes ]
... set elementsNumber [ ic_count_elements TETRA_4]
... set filename "Mesh_side.txt"
... fileld [ open $pxyzDir/$output/$filename [CREAT
TRUNC WRONLY] ]

... ... puts $fileld "Número de nodos: $nodeNumber"
... ... puts $fileld "Numero de elementos:
$elementsNumber"
... ... puts $fileld "Semilla BOX: $meshSeed"
... ... puts $fileld "Semilla CNTS: $meshSeedCnts"
... close $fileld
    
```

Ilustración 89: generación de las mallas y programación de resultados de salida de ICEM CFD mediante códigos en lenguaje Tcl.

Comparación de modelos

<i>MODELO</i>	<i>SEMILLA DEL CUBO</i>	<i>ELEMENTOS DE LA MALLA</i>	<i>APARIENCIA</i>
M50 - B02	4,0 NM	99.525	
M50 - B10	4,0 NM	273.534	
M100 - B04	8,0 NM	1.040.987	
M100 - B12	8,0 NM	2.334.983	

Comparación de modelos

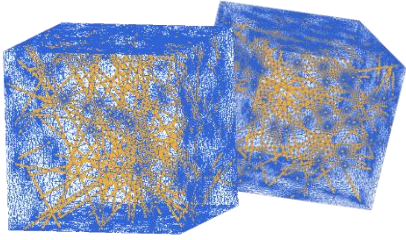
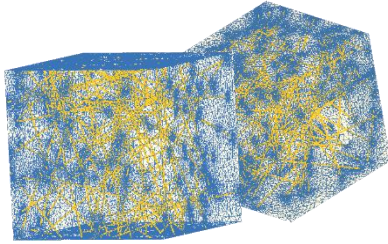
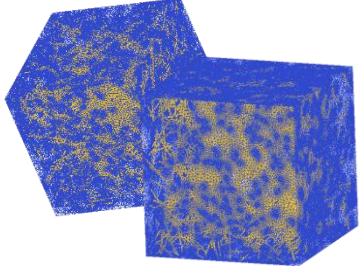
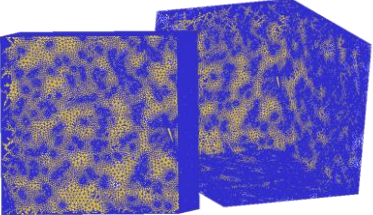
<i>MODELO</i>	<i>SEMILLA DEL CUBO</i>	<i>ELEMENTOS DE LA MALLA</i>	<i>APARIENCIA</i>
M200 - B08	16,0 NM	10.965.806	
M300 - B06	24,0 NM	11.547.079	
M300 - B12	24,0 NM	54.603.447	
M500 - B15	32,0 NM	170.552.197	

Tabla 15: exposición resumen de modelos mallados en ICEM CFD.

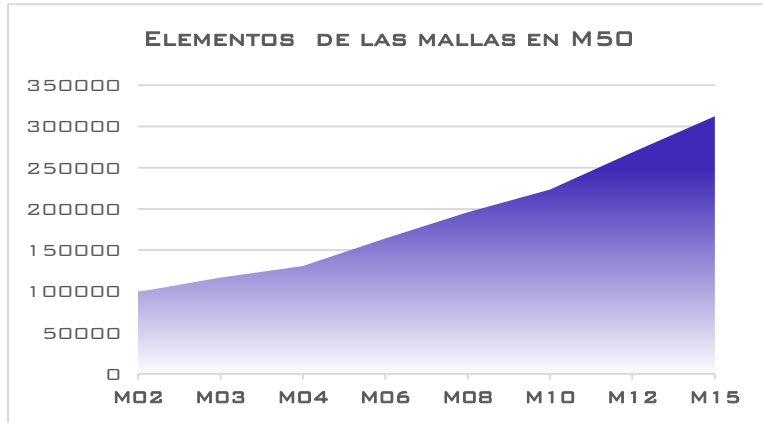


Gráfico 13: cuantía de elementos del mallado en muestras de 50 nm de lado.

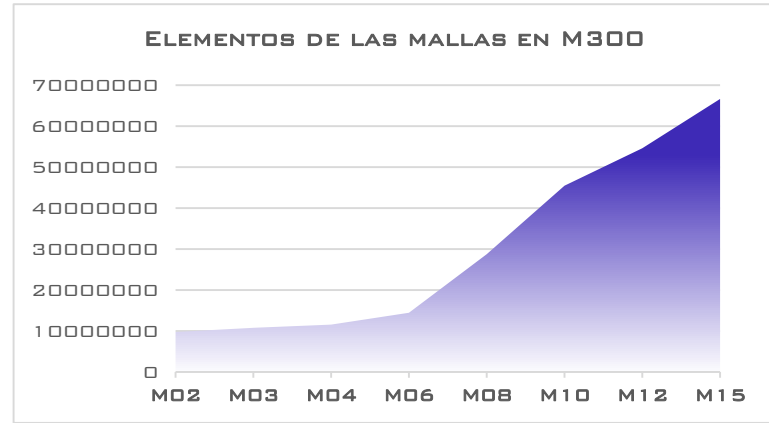


Gráfico 12: cuantía de elementos del mallado en muestras de 300 nm de lado.

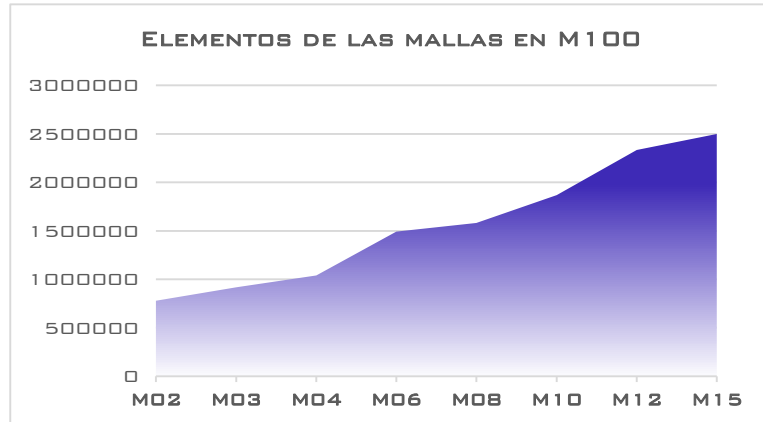


Gráfico 15: cuantía de elementos del mallado en muestras de 100 nm de lado.

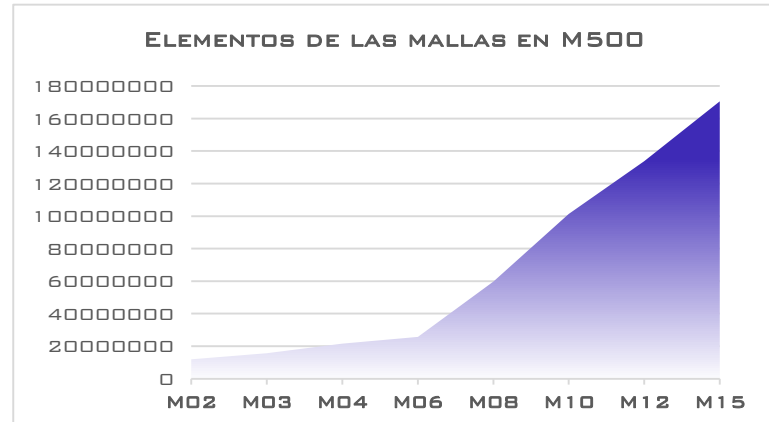


Gráfico 14: cuantía de elementos del mallado en muestras de 500 nm de lado.

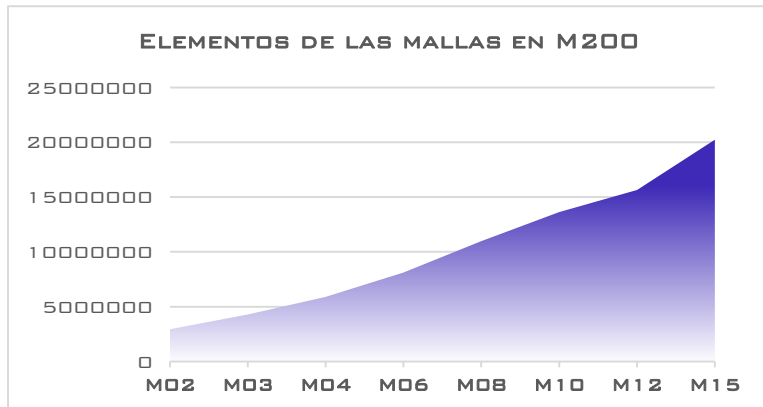


Gráfico 10: cuantía de elementos del mallado en muestras de 200 nm de lado.

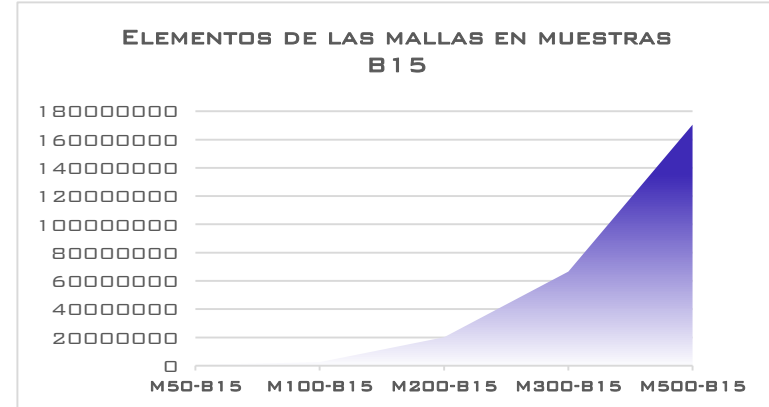


Gráfico 11: variación de cuantías de elementos en muestras de 1,5% de densidad.

Conclusión del mallado

Los modelos mallados obtenidos cumplen con los objetivos establecidos. Las mallas se adaptan a la geometría base importada de Rhinoceros con bastante precisión.

En un primer momento, **la actuación desde el entorno gráfico de ICEM complicó el proceso de mallado** debido a la nomenclatura aleatoria que se adjudicaba a cada uno de los elementos generados, dificultando su identificación y la intervención sobre ellos. Este hecho no proporcionaba unos mallados válidos, pues era necesario realizar una serie de operaciones sobre los elementos de la malla para aportar a la muestra final un carácter anisótropo de cara a la simulación en Ansys.

Más adelante, ante la dificultad de mallar modelos de geometría tan compleja y densa en el entorno gráfico, se optó por **operar en el programa empleando códigos de programación en lenguaje Tcl** que permitieron diseñar un proceso de mallado adaptado a las exigencias que se requerían. De este modo, se confeccionó un algoritmo que permitió la generación de elementos de la malla directamente asociados con las geometrías cilíndricas que los contenían, proporcionando un control total sobre los elementos de la muestra y sus propiedades respecto al mallado.

Este algoritmo se caracteriza por sus **resultados ordenados y eficiencia**, que permiten la generación de mallas bien estructuradas y con propiedades óptimas en tiempos razonables. Además, su **capacidad de adaptación a las dimensiones establecidas para las semillas** permitirá un estudio concienzudo de la interacción entre el material contenedor y el contenido, demostrando así su potencial.

Por otro lado, la alta calidad y definición de las mallas desemboca en unos **modelos fragmentados demasiado pesados**, cuya interpretación se encontrará condicionada a las características computacionales de los softwares y hardwares que los estudien. La exportación de los resultados también se ha encontrado condicionada por **diversos factores que han dificultado la salida de datos** incluso más que el propio proceso de mallado. Estos datos deben introducirse en Ansys escritos en cierto lenguaje de programación que ha resultado ser el que suponía mayores problemas de exportación, sobre todo en cuanto al tiempo empleado. Para solucionar este inconveniente, los resultados se exportan en formato Abaqus que aparenta ser el más eficiente en ICEM, transformándose posteriormente al lenguaje deseado para ser introducidos en Ansys.

La naturaleza dividida y agrupada de las mallas supondrá una ventaja de cara a la simulación, pues en Ansys se dotará al cubo de microcemento y los nanotubos de carbono de propiedades diferentes, de acuerdo con el material que representan. Estas agrupaciones fueron posibles gracias a la introducción de los centros de gravedad de los diferentes cilindros, que suponen un punto sólido de asociación entre los elementos de la malla y el volumen que los contiene. Estas agrupaciones también facilitarán la **ligadura en Ansys de los cilindros y los elementos que los componen a sus vectores directores**, siendo esto determinante para otorgar propiedades mecánicas anisótropas a los nanotubos, es decir, los elementos tridimensionales asociados a este vector se dotarán de una serie de propiedades que no compartirán con otros elementos cuyo sistema de ejes locales difiera de la naturaleza de éste.

En conclusión, el desarrollo del mallado se ha visto condicionado por las características del software, cuyas propiedades han debido adaptarse a las necesidades propias para obtener **mallas ajustadas a los requerimientos buscados** desde el inicio del proceso. Esta personalización de las operaciones del programa ha sido posible, desembocando en un algoritmo de diseño que proporciona resultados y tiempos de cálculo no sólo asumibles, sino complacientes. Por consiguiente, los modelos mallados obtenidos han cumplido con los requerimientos impuestos y las expectativas esperadas.



CAPÍTULO III: ANÁLISIS DE RESULTADOS

de modelos generados para la simulación en Ansys

Evaluación de modelos obtenidos para la simulación

Se ha diseñado un total de cuarenta muestras diferentes en *Grasshopper* y posteriormente se han sometido al mallado en *ICEM*. La totalidad de las muestras **cumple con los estándares de calidad y requerimientos establecidos** a priori de este estudio, pues representan de manera admisible la introducción de nanotubos de carbono en microcemento¹²¹ aunque de modo simplificado.

Por un lado, al ser el grupo más grande de muestras generadas de dimensiones inferiores a la micra, se ha considerado que **los nanotubos atraviesan todos los modelos de lado a lado**, no encontrándose ningún extremo de nanotubo inmerso en el cubo de la muestra, pues se considera que se encuentra en el siguiente.

En segundo lugar, se ha escogido un material de nanotubos en concreto, formado por moléculas que presentan un radio de 1.187 nm y una longitud del orden de mil veces su diámetro. Esta elección se ha realizado habiendo tenido en cuenta los **proveedores actuales de nanotubos de carbono**, aunque no se considera que la variación de la dimensión de los nanotubos sea especialmente significativa para este estudio siempre y cuando las dimensiones del material empleado se encuentren enmarcadas en los mismos ordenes de magnitud.

Además, se ha considerado que **los cilindros de las muestras son macizos** de cara a simplificar el proceso de mallado. Esta simplificación no se califica como relevante, pues de haberse modelado cilindros huecos no se estima que pudieran rellenarse con el material que los rodea ya que presenta una escala mucho mayor éste que aquéllos, pudiendo introducirse, como mucho, algo de agua en su interior. Este hecho tampoco variaría las propiedades de los tubos o de la muestra debido a su condición hidrófoba.

Otro hecho importante a destacar, es la consideración de los nanotubos de carbono como **cilindros completamente regulares**. En numerosas referencias tomadas para este trabajo se expone que uno de los problemas de trabajar con los nanotubos es la tendencia que presentan a enredarse. Este hecho no se ha contemplado de cara al modelado de las probetas virtuales, pues lo complicaría exponencialmente y no está claro que interese estudiar un material con un aditivo que presente tales condiciones formales. Por ello, se han simplificado los cilindros de cara a estudiar el material ideal que se querría obtener, con los nanotubos de carbono dispuestos del modo óptimo para aportar diferentes propiedades al compuesto en que se introducen. De este modo, si vieras simulaciones sobre materiales dopados con nanotubos de carbono estirados obtuvieran resultados prometedores, podría dar cabida a estudiar el procedimiento óptimo de tratar los nanotubos para evitar que se enreden, de igual modo que se estudia en la actualidad el mejor mecanismo para homogeneizar su distribución.

¹²¹ Se ha contemplado el empleo de un hormigón formado por áridos de limos, de tamaño inferior a 0.08 mm para componer la matriz contenedora.

Las simplificaciones anteriores no han supuesto una interferencia con los objetivos, pues se pretendía obtener modelos que contuvieran **nanotubos de carbono en las condiciones ideales para la aportación óptima**. Es decir, se ha pretendido la síntesis del material utópico, dopado con nanotubos de carbono en las mejores condiciones de geometría y disposición y siempre enmarcadas en una situación de coherencia con la naturaleza del nanomaterial. Esto se hace a fin de exponer la potencialidad de las propiedades de los nanotubos de carbono si se tratan y disponen adecuadamente.

En cualquier caso, la actuación de los vectores directores en el modelado y en la posterior simulación supondrá una aportación novedosa al cálculo, pues **contempla un comportamiento transversalmente anisótropo** de las muestras¹²² mientras que lo más habitual en otras investigaciones es abordar la simulación desde un punto de vista isótropo. En este estudio, se considera fundamental el hecho de conferirle una dirección a los nanotubos, pues se valora que la potencialidad de los nanotubos de carbono se encuentra ligada a su notable variación dimensional. No se sopesa, por tanto, estimar que las propiedades mecánicas o eléctricas de estas moléculas no varíen con la dirección, pues según ésta, la dimensión varía copiosamente.

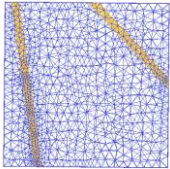
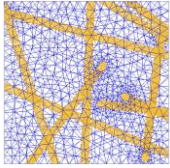
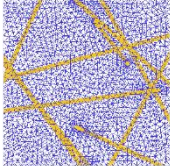
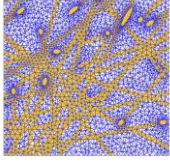
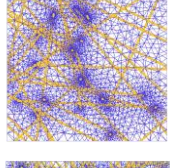
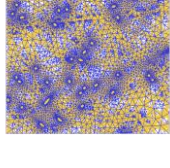
En definitiva, se considera que las muestras modeladas y malladas cumplen con las expectativas establecidas en torno a la geometría, distribución, cuantías y especificaciones:

- La **distribución de los cilindros** presenta una imagen aparentemente homogénea, sin concentraciones de nanotubos en áreas y la existencia de otras vacías.
- La **intersección de los tubos con las paredes** de la muestra se forma de manera bastante regular, facilitando asumir que el cilindro continúa en la muestra de al lado.
- La **orientación de los vectores** de los cilindros presenta variedad, sin apreciarse ninguna tendencia al paralelismo de las direcciones.
- Se ha verificado la **ausencia de colisiones** entre los cilindros de los modelos.
- Las **mallas generadas se adaptan** perfectamente a las condiciones geométricas de las muestras.
- La **cuantía de elementos de la malla** en los cilindros es suficiente de cara al estudio de la aportación de los nanotubos.

Las cualidades anteriores de los modelos permitirán la obtención de **resultados coherentes en la simulación**, que se espera sean relevantes para este campo de investigación pues la variedad y diferencia entre los modelos permitirá el estudio de la muestra como nuevo material y de la interacción específica entre ambos materiales protagonistas: contenedor y contenido.

¹²² Esto supone la mayor aportación a este campo de estudio, tanto en modelado como en simulación.

RESUMEN DE MODELOS OBTENIDOS PARA LA SIMULACIÓN

DENOMINACIÓN	LADO DE LA MUESTRA		DENSIDAD DE CNTs	CANTIDAD DE CNTs	CANTIDAD DE ELEMENTOS EN LA MALLA	APARIENCIA
M50 B03	50	NM	0,3 %	2	116.736	
M50 B15	50	NM	1,5 %	9	312.440	
M100 B04	100	NM	0,4 %	10	1.040.987	
M100 B12	100	NM	1,2 %	30	2.334.983	
M200 B03	200	NM	0,3 %	30	4.284.622	
M200 B10	200	NM	1,0 %	120	13.638.737	

RESUMEN DE MODELOS OBTENIDOS PARA LA SIMULACIÓN

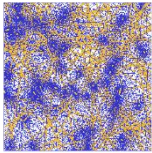
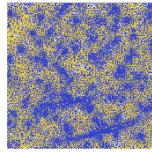
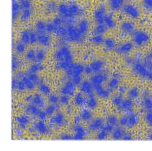
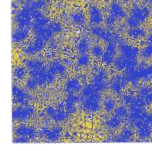
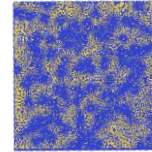
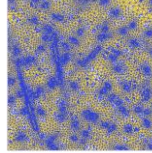
DENOMINACIÓN	LADO DE LA MUESTRA		DENSIDAD DE CNTs	CUANTÍA DE CNTs	CUANTÍA DE ELEMENTOS EN LA MALLA	APARIENCIA
M300 B04	300	NM	0,4%	100	10.727.144	
M300 B10	300	NM	1,0 %	290	45.482.209	
M300 B15	300	NM	1,5 %	500	66.607.824	
M500 B06	500	NM	0,6 %	450	89.687.325	
M500 B12	500	NM	1,2 %	1300	123.698.754	
M500 B15	500	NM	1,5%	1870	170.552.197	

Tabla 16: resumen de modelos obtenidos para la simulación.

Valoración de softwares

Los softwares escogidos se han adecuados a los objetivos de diseño de este proyecto. *Grasshopper* e *ICEM CFD* fueron escogidos como herramientas de elaboración deliberadamente, siendo conocidas sus grandes capacidades tanto de diseño como de adaptación. No obstante, se ha estudiado las posibilidades de otros programas.

Grasshopper vs Dynamo

Era clara la necesidad de un programa que permitiera el **modelado tridimensional mediante herramientas de parametrización**, dadas las complejas características geométricas de las muestras a modelar, por lo que *Grasshopper* y *Dynamo* fueron los candidatos principales a ser empleados para el proceso de modelado.

Ambos softwares presentan las posibilidades de diseño similares, aunque *Grasshopper* pone a disposición del usuario **una interfaz más amable y dinámica** quedando en *Dynamo* un entorno más serio y técnico en comparación, lo que no tiene por qué ser un inconveniente.

Por un lado, la elección de *Grasshopper* se vio marcada por su empleo del **motor de geometría de Rhino**, que es específico para el modelado tridimensional y más ligero que la librería asociada a *Dynamo*, el *ASM*¹²³. Esta biblioteca masiva no se encuentra especializada en el diseño en 3D, pues debe dar servicio a un mínimo de diez programas de *Autodesk* y, por tanto, facilitar la transmisión de datos mediante parámetros estándar que sean compatibles con todos ellos, ya que no disponen de bases de datos individuales y adaptadas. En consecuencia, *Rhino* se alza como un programa **más rápido y eficiente** por disponer de una biblioteca específica y totalmente personalizada, pues no existen más programas a los que deba dar servicio.

Por otro lado, *Revit* como herramienta de visualización de *Dynamo* no se adecua a las exigencias de este proyecto, aunque se trate de un software diseñado específicamente para la arquitectura. En este caso, lo que se demandaba es una herramienta que permitiera la **elaboración rápida y eficiente de modelos tridimensionales complejos**, sin obtener resultados demasiado pesados para trabajar con ellos. En este aspecto, el motor de visualización de *Rhinoceros* no tiene rival, sobre todo, atendiendo a que la velocidad siempre supuso un factor importante en el proceso de diseño de este trabajo.

Es conveniente destacar que la conexión del *ASM* con *Dynamo* podría generar también **problemas de incompatibilidad** con el programa de mallado posterior, debido a empleo generalizado de la misma biblioteca con toda la familia de productos de *Autodesk*.

¹²³ Autodesk Shape Manager.

Grasshopper vs Houdini |

Houdini es un novedoso software que parece ser bastante prometedor. Sin embargo, al ser un programa de reciente aparición, es posible encontrar ciertos **problemas de compatibilidad con otros softwares**, sin exponer la **dificultad de su interfaz**. Ésta resulta bastante confusa para sus usuarios, pues deben adquirirse numerosas competencias en el programa que no resultan intuitivas en absoluto.

Aun resultando tan complejo de manejar, **no se facilita una versión de prueba** para promover que el usuario se familiarice con la interfaz y las funciones del programa, como sí permite *Grasshopper*. Por ello, *Houdini* genera una **curva de aprendizaje excesivamente pronunciada** con respecto a *Grasshopper*, igual de extrema que su precio.

ICEM CFD vs SAP 2000 |

El objeto de estudio demandaba un programa de mallado capaz de **representar las condiciones volumétricas de los modelos**. Softwares como *SAP 2000* trabajan con mallas superficiales denominados “*SHELLS*” mientras que otros como *Cype* o *Robot* realizan su análisis a través de elementos lineales o “*BEAMS*”¹²⁴, enmarcados siempre en un contexto bidimensional. El programa empleado es capaz de realizar mallas sólidas como consecuencia de haberse diseñado de cara al análisis de la dinámica de fluidos, por lo que es radicalmente opuesto a cualquier otro software de cálculo o simulación estructural.

A consecuencia de lo anterior, se escoge *ICEM CFD*, ya que permite generar **mallas de elementos tridimensionales** que otorgarán las características volumétricas requeridas a las muestras mediante un algoritmo de mallado muy potente, capaz de adaptarse al crecimiento y decrecimiento de los diferentes elementos. La potencia de *ICEM* radica en la posibilidad de decidir si ciertos puntos o líneas de la geometría que se importa formarán parte de la malla final, conque el usuario tiene la capacidad de forzar a la malla a pasar por donde más convenga.

Por otro lado, aunque la interfaz del programa resulta poco atractiva y las **capacidades de su entrono gráfico son limitadas de cara a la intervención de modelos muy pesados**, existe la posibilidad de manejar el software a través de códigos de programación y así, adquirir la eficiencia máxima en el proceso de generación de las mallas.

Por último, cabe destacar que la elección tanto de *Grasshopper* como de *ICEM* se ha visto marcada por la búsqueda de eficiencia, proporcionada por la **óptima compatibilidad entre ambos programas** que hace posible importar los modelos directamente en formato *Rhino*, mientras que no se conocen extensiones inmediatamente compatibles con *ICEM* de *Dynamo* o *Houdini*.

¹²⁴ Celdas y barras.

VALORACIÓN DE SOFTWARES: MODELADO

GRASSHOPPER	DYNAMO	HOUDINI	
Agradable, intuitiva	Seria, técnica	Complejo, confuso	Interfaz
Agradable, práctico.	Asumible, mejorable, básico	Muy atractivo, óptima representación	Entorno gráfico
Específica y adaptable.	Genérica para varios softwares, estandarizada.	Común para varios softwares, pero específica para diseño tridimensional.	Bibliotecas
Modelado, renderizado, animación.	Modelado, renderizado, animación	Modelado, renderizado, animación.	Posibilidades
Óptima con formatos propios.	Deficiente, sin formatos propios.	Desconocida.	Compatibilidad
Potencia muy alta, ligero.	Pesado, demasiado denso para elementos complejos.	Desconocido, aunque la calidad gráfica es de muy alto nivel.	Motor de visualización
Asumible.	Asumible.	Desconocido.	Tiempo de computación
Total, a cada caso.	Admisible.	Desconocida.	Adaptación

Tabla 17: comparación de softwares de modelado tridimensional parametrizado: Grasshopper, Dynamo y Houdini.

VALORACIÓN DE SOFTWARES: MALLADO

ICEM CFD	SAP 2000	CATIA V5	
Muy básica, muy intuitiva.	Avanzada, no muy intuitiva.	Avanzada, compleja y técnica.	Interfaz
Deficiente y limitado, poco atractivo.	Atractivo, agradable.	Técnico, con calidad.	Entorno gráfico
De sólidos tridimensionales.	Lineales o superficiales.	Superficiales y sólidas.	Mallas
Tetraedros.	Beam y Shell.	Triángulos y tetraedros.	Elementos de mallas
Práctica, con variedad de formatos.	Muy versátil, amplia variedad de formatos.	Admisible, variedad de formatos.	Compatibilidad
Muy concretas, específicamente mallado tridimensional enfocado a dinámica de fluidos.	Enfocado al cálculo estructural.	Amplio abanico, enfocado al análisis mecánico.	Posibilidades
Asumible.	Óptimo.	Aceptable.	Tiempo de computación

Tabla 18: comparación de softwares de mallado de modelos: ICEM CFD, SAP 2000 y Catia V5.

Resultados preliminares de la simulación

En este momento de la investigación se ha llegado a realizar el análisis de dieciséis de las muestras modeladas: los grupos de modelos de 50 y 100 nm de lado del cubo. La simulación consiste en **someter a las muestras a un ensayo de compresión simple¹²⁵ para estudiar la variación del módulo de deformación homogeneizado¹²⁶** del compuesto formado por microcemento y nanotubos de carbono.

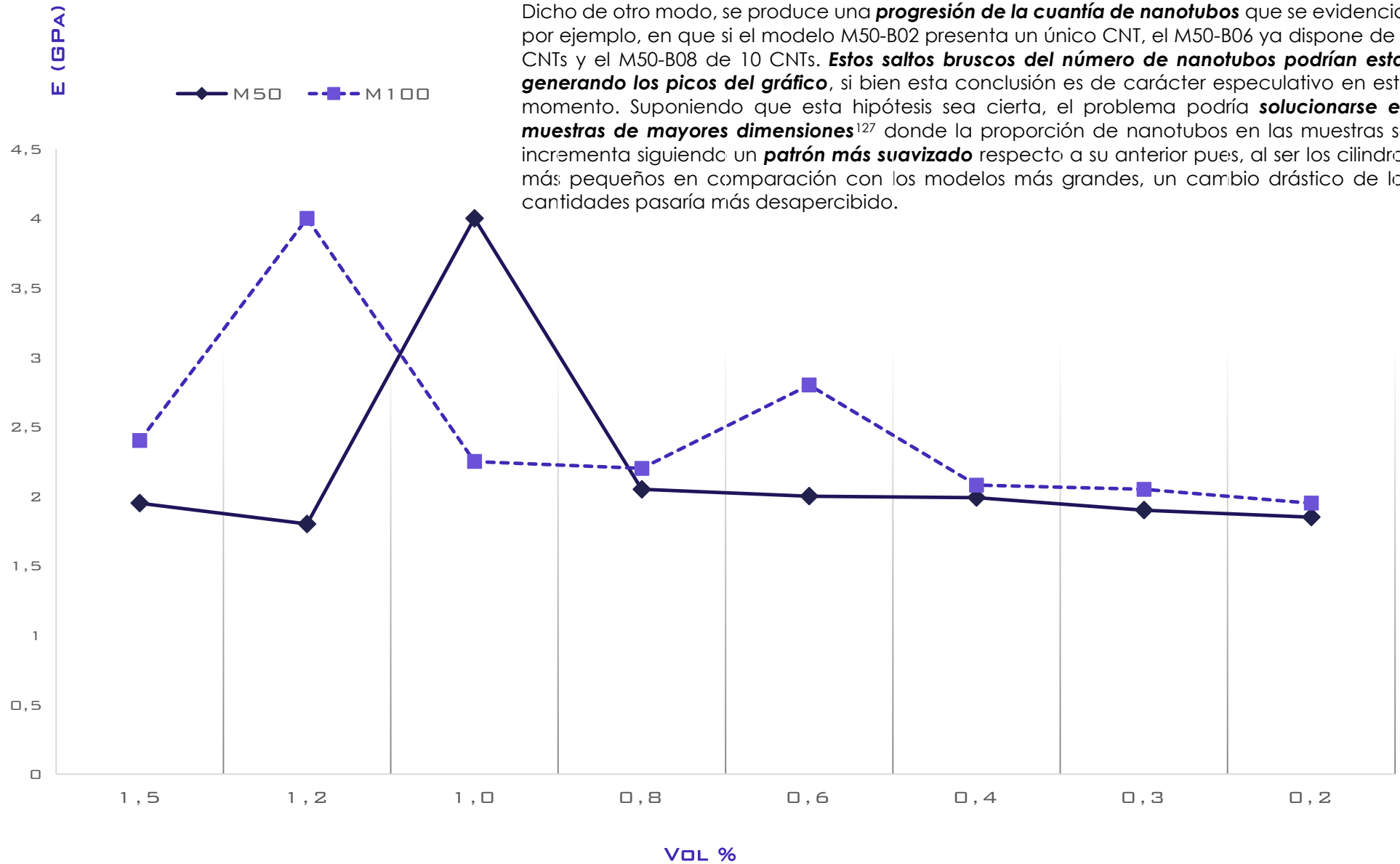
El ensayo virtual sigue el siguiente procedimiento: el modelo tridimensional, ya mallado, se somete a un proceso de **réplica con condiciones senoidales** con respecto a las caras del cubo, para así obtener objetos de mayores dimensiones que permitan una simulación verosímil. Se aplica este patrón de reproducción senoidal a fin de evitar que se produzcan simetrías que restarían aleatoriedad a la distribución de nanotubos en la muestra, pues esto reduciría la calidad de la simulación y la fiabilidad de sus resultados.

A continuación, **se redireccionan los vectores de la malla de los nanotubos, con dirección paralela a la de sus respectivos vectores directores**, y se reproducen estos parámetros de contorno en todas sus réplicas. Así, se pretende representar la **condición anisótropa de la muestra** especificando unas propiedades diferentes a los elementos de las mallas, según se encuentren orientados en una dirección u otra. Establecidos estos parámetros, **se calcula la deformación del sistema en relación a su densidad de volumen**, exponiéndose la relación entre el módulo de deformación y el aumento de nanotubos en el modelo.

En conclusión, habiéndose especificado las propiedades mecánicas de la matriz, por un lado, y de los nanotubos por otro, se calculan las **características del sistema global homogeneizado**, como se indica en el [gráfico 16](#). Dicha imagen expone los resultados preliminares de las simulaciones obtenidos hasta este momento, donde puede apreciarse una serie de **picos del valor del módulo de deformación**. A priori, esta anomalía en los valores se achaca al aumento exponencial de la cuantía de nanotubos en las muestras. Cada una presenta un incremento significativo de la cantidad de nanotubos con respecto a la anterior, lo que podría desembocar en estos resultados que generan picos de valores como consecuencia de la **entrada de nanotubos en las muestras de modo regresivo y no homogéneo**.

¹²⁵ El ensayo a compresión simple consiste en aplicar una **pareja de fuerzas iguales**, pero de sentido contrario, sobre las caras opuestas del material que se analiza. Cuando el material se deforma, se establece el valor de la fuerza interviniente en relación con la deformación del material, obteniéndose lo que se denomina **módulo de deformación del material**.

¹²⁶ Atendiendo al concepto que se emplea para definir la deformación de materiales compuestos, como el hormigón armado.



Dicho de otro modo, se produce una **progresión de la cuantía de nanotubos** que se evidencia, por ejemplo, en que si el modelo M50-B02 presenta un único CNT, el M50-B06 ya dispone de 4 CNTs y el M50-B08 de 10 CNTs. **Estos saltos bruscos del número de nanotubos podrían estar generando los picos del gráfico**, si bien esta conclusión es de carácter especulativo en este momento. Suponiendo que esta hipótesis sea cierta, el problema podría **solucionarse en muestras de mayores dimensiones**¹²⁷ donde la proporción de nanotubos en las muestras se incrementa siguiendo un **patrón más suavizado** respecto a su anterior pues, al ser los cilindros más pequeños en comparación con los modelos más grandes, un cambio drástico de las cantidades pasaría más desapercibido.

Gráfico 16: resultados preliminares de la simulación realizada por Enrique García Macías. Relación entre módulo de deformación homogeneizado de las muestras y su porcentaje de nanotubos de carbono.

¹²⁷ Se estima que la simulación del modelo más pesado, M500-B15, tenga una duración aproximada de 8 horas en Ansys.

Limitaciones actuales de cálculo: coste computacional

El proceso de diseño de las muestras que se presentan en este estudio se ha visto altamente condicionado por las **limitaciones actuales de las máquinas con respecto a la ejecución de ciertos cálculos**. No es posible alcanzar cierto nivel de detalle en los modelos, sobre todo en lo que respecta al mallado, debiendo recurrirse a **simplificaciones geométricas y de cálculo**, como suponer que los cilindros son macizos.

Por un lado, las muestras resultantes de los procesos de modelado y cálculo resultan muy **pesados y densos para su manejo**, como se expone en la [tabla 19](#), debido a la cantidad de elementos de sus mallas ([G.17](#)), lo que ha obligado al usuario a intervenir en el modelo mediante el empleo de la programación. En otras palabras, **los medios informáticos actuales no posibilitan una actuación viable y eficiente mediante el entorno gráfico** del software debido a la gran cantidad de elementos que contienen, con lo que se recurre a la programación.

Estos códigos permiten una **reducción exponencial del tiempo de procesamiento de datos** si se usan adecuadamente. En este caso, la exportación de los ficheros de texto¹²⁸ ([G.18](#)), con los datos desde ICEM en formato Abaqus, redujo el tiempo de salida de los modelos moderados de cuatro semanas¹²⁹ a un máximo de una hora, permitiendo exportar unos ciento cincuenta millones de elementos en un tiempo aproximado de veinte minutos. Los ficheros de texto en Abaqus se convierten más tarde al formato Ansys para la simulación mediante el empleo de un arreglo en lenguaje Python. Esta diversidad de herramientas necesarias para el presente estudio evidencia la importancia de disponer de cierto nivel de competencias informáticas.

Por otro lado, el **nivel de definición de los modelos también se encuentra limitado por las características de las máquinas**, que requieren de 1GB de memoria RAM¹³⁰ por cada millón de grados de libertad de los elementos finitos de las mallas. Esto es debido a que toda la matriz debe ser calculada al mismo tiempo, no pudiendo fragmentarse el cálculo en diferentes turnos. En concreto, para el procesamiento de las muestras de mayor envergadura, se necesita de unos 384 GB de memoria RAM, que han debido adquirirse para posibilitar los resultados.

En definitiva, los problemas que presenta el cálculo de modelos de geometría tan compleja y pesada no radican únicamente en los tiempos de procesamiento de datos que necesitan las máquinas, sino que **los recursos informáticos de la actualidad se quedan cortos**¹³¹ ante un cálculo de 170 millones de elementos finitos de forma simultánea, pues no pueden estudiarse los elementos de la matriz de otro modo.

¹²⁸ Se generan archivos que llegan a ocupar más de 1 GB estando compuestos sólo por líneas de texto, como se aprecia en la [tabla 20](#).

¹²⁹ Tiempo de procesamiento necesario para la exportación en formato Ansys, vital para la simulación.

¹³⁰ A nivel teórico y estimativo. En la práctica, acaban requiriéndose aún más.

¹³¹ Incluso empleándose códigos de programación ([T.19](#)), pues hacen los procesos más eficientes pero los recursos informáticos siguen siendo limitados ante cálculos de esta envergadura ([G.17](#)).

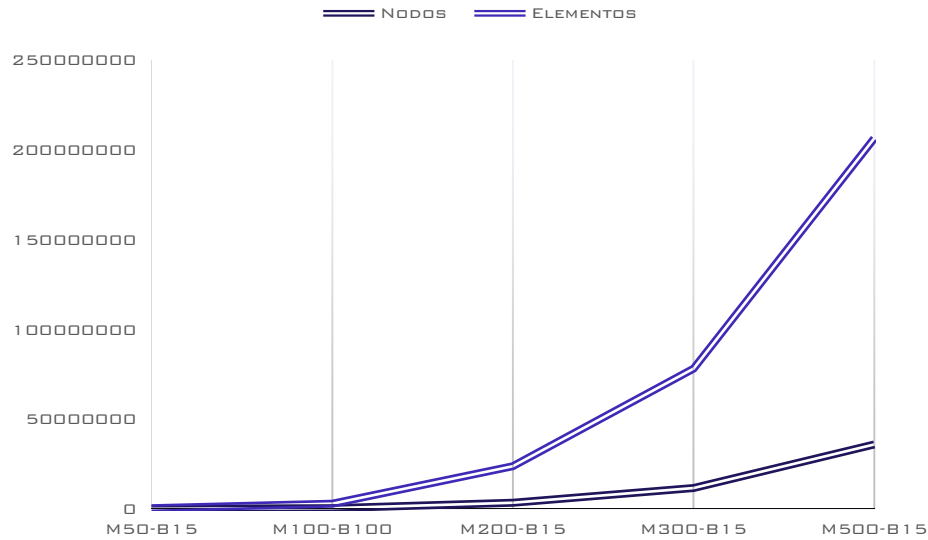


Gráfico 17: variación del número de nodos y elementos de las mallas en la progresión de los diferentes modelos.

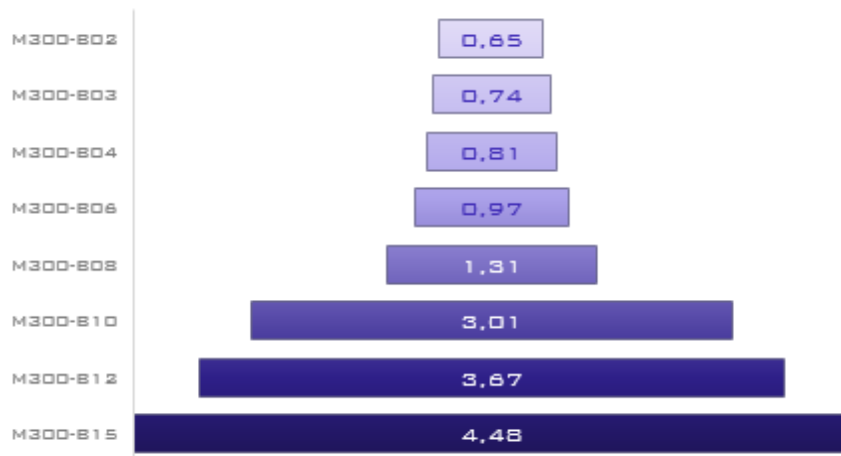


Gráfico 18: tamaño de los archivos que contienen los datos del mallado.

Muestra	Nodos	Elementos
M50-B15	56.077	312.440
M100-B15	440.047	2.498.411
M200-B15	3.529.426	20.229.676
M300-B15	11.598.204	66.607.824
M500-B15	35.895.741	170.552.197

Tabla 19: cuantía de nodos y elementos de las mallas en muestras de 1,5% de densidad de nanotubos.

Modelo	Peso de su archivo de nodos y elementos
M300-B02	0.65 GB
M300-B03	0.74 GB
M300-B04	0.81 GB
M300-B06	0.97 GB
M300-B08	1.31 GB
M300-B10	3,01 GB
M300-B12	3,67 GB
M300-B15	4,48 GB

Tabla 20: tamaños de archivos de nodos y elementos de las muestras M300.

■ M50-B15 ■ M100-B15 ■ M200-B15 ■ M300-B15 ■ M500-B15

MUESTRA	TIEMPO COMPUTACIONAL		
	MODELADO	MALLADO	TOTAL
M50-B15	< 1 MIN	11 MIN	12 MIN
M100-B15	< 1 MIN	32 MIN	33 MIN
M200-B15	4 MIN	1 H 2 MIN	1 H 6 MIN
M300-B15	14 MIN	1 H 49 MIN	2 H 3 MIN
M500-B15	32 MIN	3 H 23 MIN	3 HORAS 55 MIN

Tabla 21: tiempo computacional empleado para la generación de las muestras finales de 1,5 % de densidad.

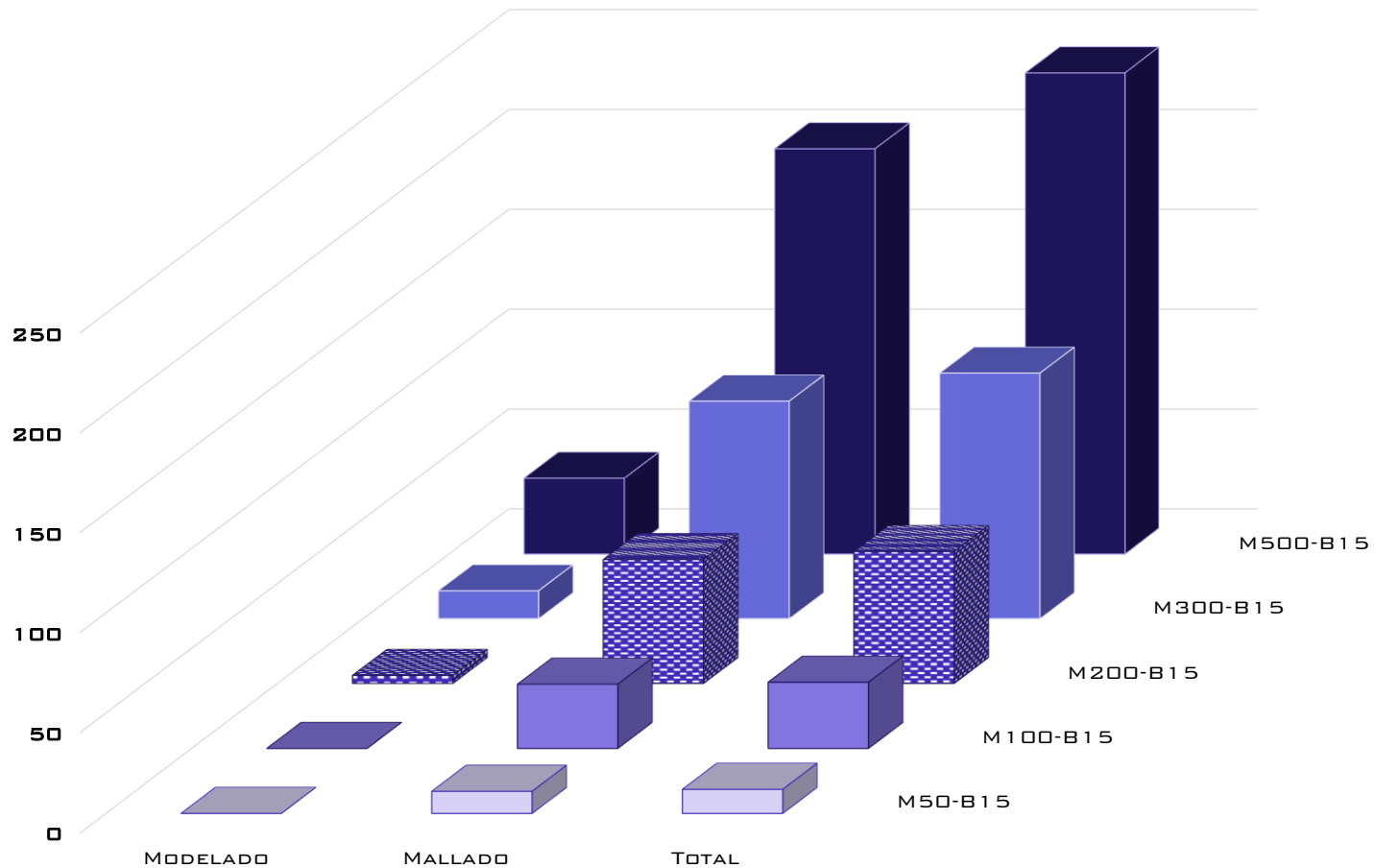


Gráfico 19: tiempos computacionales de generación de muestras finales de 1,5 % de densidad de nanotubos de carbono.

CONCLUSIONES GENERALES

El presente trabajo se planteaba como objetivo realizar una aportación a la investigación sobre **nuevos materiales y materiales inteligentes**. Ha supuesto el paso **previo a una simulación de modelos teóricos**, que ha consistido en el diseño, modelado y mallado tridimensional de una serie de muestras que suman un total de cuarenta. Las conclusiones de tal labor son las siguientes:

Primera. Las aplicaciones de los **nanomateriales del carbono han adquirido gran importancia en la actualidad en el contexto arquitectónico**, desarrollándose propuestas que involucran a la fibra de carbono, los nanotubos y el grafeno, principalmente, en refuerzos estructurales y como aditivos a otros materiales que se conforman mediante un compuesto de elementos. Las teorías, estudios y experimentos relacionados con las **posibilidades de estos materiales inteligentes** presentan un constante incremento.

Segunda. Los nanomateriales del carbono conforman una **familia de materiales con propiedades sin precedentes en diferentes aspectos**, lo que los convierte en un grupo de gran versatilidad. De entre ellos, los nanotubos de carbono disponen de la mejor relación en cuanto a propiedades mecánicas y eléctricas, que sólo comparte con el grafeno, aunque presentan una geometría más estable y rígida que éste.

Tercera. Los **algoritmos diseñados** para el mallado y modelado de muestras se caracterizan por su **eficacia y eficiencia** y permiten la obtención de modelos que alcanzan y sobrepasan los requerimientos iniciales de morfología y tiempo de procesamiento de datos.

Cuarta. El desarrollo de muestras teóricas ha resultado en **modelos de óptimas cualidades** en cuanto a geometría, cantidad, calidad y compatibilidad y su posterior mallado dispone de amplias capacidades de adaptación a las dimensiones de los diferentes elementos del modelo.

Quinta. **Las muestras diseñadas**, se prevé, **serán capaces de aportar conclusiones significativas**, en cuanto a las propiedades resistentes y eléctricas de los nanotubos de carbono, al ser sometidas a una simulación mecánica virtual.

Sexta. **Los picos anómalos** que se aprecian en los resultados preliminares **podrían encontrar solución al analizarse las muestras más grandes**, del mismo modo que las gráficas de los modelos se suavizan cuando la dimensión y cuantía de nanotubos en ellos se incrementa.

Todo el desarrollo del trabajo se ha visto condicionado por la necesaria **adquisición de nuevas competencias** conforme avanzaba el proceso de diseño. En un primer momento, se planteó realizar el modelado de las muestras mediante el empleo único de *Grasshopper*, que resultó ser limitado de cara a los requerimientos geométricos establecidos, provocando la necesidad de confeccionar un componente en el programa, adaptado exclusivamente al diseño de esta tipología de modelos, mediante su diseño con programación en lenguaje *Python*.

Se obtuvo así, un **algoritmo generador totalmente personalizado** que permitió la obtención de **elevadas cuantías de modelos diferentes con la calidad requerida**, en **tiempos computacionales asumibles** para la máquina y la investigación. Esto ha sido posible gracias al empleo de considerables tiempos de trabajo con respecto a la programación del componente y el aprendizaje de las habilidades que lo permitieron.

Las mismas circunstancias se dieron en el proceso de mallado. Al haberse obtenido modelos demasiado complejos y pesados como para mallarse desde el entorno gráfico del software, debió diseñarse un **algoritmo que permitiera un mallado rápido y eficaz** estableciendo los parámetros necesarios directamente en el código, con el objetivo de evitar al máximo la intervención del usuario en el programa.

Alternativamente, la elección de los softwares implicados en el proceso de diseño de las muestras, estuvo condicionada por los **requerimientos de adaptabilidad, eficacia y eficiencia** de los resultados, que los programas seleccionados cumplieran sobradamente debido a la óptima compatibilidad entre ellos que permitió un cómodo desplazamiento de los modelos entre los softwares sin mayor problema.

El desarrollo del trabajo ha desembocado en **modelos de condiciones geométricas óptimas** que cumplen con los objetivos establecidos de homogeneidad y orientación. Este hecho se evidencia más en los modelos que presentan mayor cuantía de cilindros. Del mismo modo, los elementos **de las mallas obtenidas presentan excelente capacidad de adaptación** al crecimiento de las volúmetrías de los modelos, generando unas mallas muy detalladas.

Así, la dispersión de los cilindros en los modelos permitirá el estudio de las **propiedades del microcemento dopado a nivel micrométrico** y, al mismo tiempo, la homogeneización progresiva de las semillas de las mallas permitirá un **estudio exhaustivo de la interacción entre ambos materiales** que componen la muestra, para así estudiar las condiciones de adherencia a nivel nanométrico.

Como se ha expuesto anteriormente, los resultados preliminares de las simulaciones ya indican la **aparición de picos anómalos en la gráfica que relaciona el módulo de deformación y el porcentaje de nanotubos** de las muestras, pudiendo deberse esto al incremento exponencial de la cuantía de nanotubos en una muestra con respecto al anterior. Este hecho cobraría más importancia en muestras pequeñas, cuya diferencia dimensional se distingue menos del tamaño de los nanotubos que la de los modelos más grandes. Por este motivo, es posible que estas anomalías queden resueltas una vez se realice la simulación de los modelos más grandes.

Además, dado que este trabajo forma parte de una investigación en constante desarrollo, se plantea **contemplar la cantidad de nanotubos en las muestras no a través de su cuantía, sino obteniendo la longitud total** que suman todos ellos. Esto se contempla con el objetivo de **aportar una perspectiva adaptada** a lo que está pasando dentro de las muestras, pues un nanotubo de pequeña longitud, que atraviesa por una esquina el modelo, obtiene la misma importancia que un nanotubo más largo, que atraviesa la muestra desde un vértice a su opuesto. Hablar de una cuantía determinada de nanotubos en estos modelos, por tanto, no representa fielmente las condiciones geométricas de la muestra. Este hecho se evidencia de forma clara en los gráficos que recogen la cuantía de CNTs por modelo, pues deberían crecer de forma más suavizada conforme más cantidad de tubos participen de la muestra y, sin embargo, presentan numerosos picos.

En definitiva, se ha cumplido el objetivo principal de este trabajo. Se han generado modelos virtuales de calidades óptimas para permitir la realización de una simulación de modelos teóricos en tiempos asumibles y se han planteado constantemente mecanismos para representar mejor los atributos de los modelos obtenidos, con el fin de facilitar su empleo y comprensión. Estas muestras presentan **excelentes cualidades geométricas producto de los procesos de mallado y modelado** que, se prevé, aportarán resultados significativos en la simulación que permitirán llegar a conclusiones sobre posibles ensayos experimentales reales, la confección de un nuevo tipo de cemento más resistente o incluso la posibilidad de introducir aditivos de nanotubos de carbono al hormigón para conferirle propiedades de las que aún no dispone.

LÍNEAS FUTURAS DE INVESTIGACIÓN

Como objetivos a largo plazo, se pretende **evaluar el comportamiento de compuestos de cemento** una vez se le ha introducido nanotubos de carbono. Para ello se ha diseñado en este trabajo una serie de modelos de probetas de un material base genérico que servirá de contenedor de los nanotubos.

El modelo teórico será capaz de **simular las condiciones de contorno**, propiedades de los materiales e interacción entre ellos y aportar unas conclusiones cercanas a las resultantes de un ensayo experimental real, es decir, con la mayor verosimilitud posible. Así, podrá **evaluarse la viabilidad de la ejecución de un ensayo físico**, a priori de su ejecución.

Los resultados obtenidos de la simulación, expondrán **cómo se comportaría el microcemento dopado con nanotubos de carbono**, qué propiedades adquiere o pierde éste y si es posible o no considerarlo un nuevo material por una gran diferencia de sus propiedades con respecto a las que presenta el cemento convencional¹³².

Obtenidos los resultados de la simulación, deberán estudiarse las siguientes **propiedades de la muestra** con deteniéndose, intrínsecamente relacionadas con los atributos de los nanotubos de carbono y con el grafeno:

- Resistencia** mecánica a compresión, tracción y flexión del material resultante.
- Propiedades elásticas; módulo de **elasticidad**.
- Tendencia de **absorción** de agua.
- Conducción **piezoeléctrica** de la matriz [41]: capacidad de monitorizar de la estructura (SHM¹³³).
- Durabilidad** y respuesta ante agentes atmosféricos.

Los aspectos anteriores se analizarán enmarcados en el contexto de las propiedades del hormigón y compuestos de cemento convencionales. De este modo, podrá realizarse una **comparación entre las características del material inicial y el final** y un balance de la rentabilidad del empleo de nanotubos de carbono en este ámbito.

¹³² Si pudiera sintetizarse un nuevo cemento que **soportara tracciones con la misma eficacia que compresiones**, quizá podrían extenderse tales cualidades a un hormigón compuesto por este nuevo cemento. En cuyo caso, podría tratarse de un nuevo material pues el concepto del hormigón no casa con la resistencia de tracciones.

¹³³ Structural Health Monitoring.

De obtenerse resultados prometedores, se plantea la posibilidad de **introducir nanotubos de carbono al hormigón** con el objetivo de dotarlo de cualidades mecánicas y piezoeléctricas de las que no dispone en la actualidad. Es probable que, en la práctica, los nanotubos se introduzcan mediante solubilización en el agua de adición al compuesto, por ser uno de los métodos de introducción que resulta en una dispersión más homogénea en la matriz contenedora [24]. Esta distribución regular se ha reflejado en la muestra virtual, al igual que unas dimensiones estándar de los CNTs.

Si los resultados de las simulaciones fueran prometedores, el objetivo a largo plazo será la **transferencia del nuevo material del mundo teórico al real**, con propiedades mecánicas mejoradas y nuevas propiedades piezoeléctricas, pudiendo estudiarse, incluso, la posibilidad de llegar a sustituir al acero estructural de empleo contemporáneo.

REFERENCIAS

- [1] Nikhil A. Koratkar, Bingqing Wei, Pulickel M. Ajayan (2003). **Multifunctional structural reinforcement featuring carbon nanotube films** (review). *Composites Science and Technology*, 63(11), 1525-1531. Recuperado de: www.sciencedirect.com
DOI:10.1016/S0266-3538(03)00065-4
- [2] T. Hayashi, M. Endo (2011). **Carbon nanotubes as structural material and their application in composites**. *Composites Part B: Engineering*, 42 (8), 2151-2157. Recuperado de www.sciencedirect.com
DOI: 10.1016/j.compositesb.2011.05.011
- [3] Sang-Ha Hwang, Young-Bin Park, Kwan Han Yoon, Dae Suk Bang (2011). **Smart Materials and Structures Based on Carbon Nanotube Composites**. Recuperado de: www.intechopen.com
DOI: 10.5772/17374
- [4] P.Shahmohamadi, F. Soflaee (septiembre de 2007). **The combination of clay and nanotube carbon as an innovative and sustainable material**. 2nd PALENC Conference and 28th AIVC Conference on Building Low Energy Cooling and Advanced Ventilation Technologies in the 21st Century, 959-963. Isla de Creta, Grecia. Recuperado de: www.researchgate.net
- [5] W.-D. Zhang, I.Y. Phang, T.X. Liu (2005). **Growth of Carbon Nanotubes on Clay: Unique Nanostructured Filler for High-Performance Polymer Nanocomposites**. *Advanced Materials*, 18(1). Recuperado de: <https://onlinelibrary.wiley.com>
DOI: 10.1002/adma.200501217
- [6] Xiaofeng Chen, Jingmei Tao, Jianhong Yi, Yichun Liu, Rui Bao, Caiju Li, Songlin Tan, Xin You (2018). **Enhancing the strength of carbon nanotubes reinforced copper matrix composites by optimizing the interface structure and dispersión uniformity**. *Diamond & Related Materials*, 88, 74-84. Recuperado de: www.sciencedirect.com
DOI: 10.1016/j.diamond.2018.06.026
- [7] Oxana V. Kharissova, Leticia M. Torres Martínez, Boris. I. Kharisov (2016). **Recent Trends of Reinforcement of Cement with Carbon Nanotubes and Fibers**. *Advances in Carbon Nanostructures*, 7, 137-159. Recuperado de: www.intechopen.com
DOI: 10.5772/64307
- [8] Sadegh Imani Yengejeh, Seyedeh Alieh Kazemi, Andreas Öchsner (2017). **Carbon nanotubes as reinforcement in composites: A review of the analytical, numerical and experimental approaches**. *Computational Materials Science*, 136, 85-101. Recuperado de: www.sciencedirect.com
DOI: 10.1016/j.commatsci.2017.04.023
- [9] Heeyoung Lee, Seonghoon Park, Sanggyu Park, Wonseok Chung (2019). **Enhanced Detection Systems of Filling Rates Using Carbon Nanotube Cement Grout**. *Nanomaterials*, 10(1). Recuperado de: www.mdpi.com
DOI:10.3390/nano10010010

[10] Lee, H; Kang, D; Kim, J; Choi, K; Chung,W (2019). **Void detection of cementitious grout composite using single-walled and multi-walled carbon nanotubes**. *Cement & Concrete Composites*, 95. 237-246. Recuperado de: www.sciencedirect.com

DOI: 10.1016/j.cemconcomp.2018.10.003

[11] Restuccia, L; Lopez, A; Ferro, GA; Liberatore, D; Tulliani, JM (2018). **An investigation of the beneficial effects of adding carbon nanotubes to standard injection grout**. *Fatigue & Fracture Of Engineering Materials & Structures*, 41 (1). 119-128. Recuperado de: <https://onlinelibrary.wiley.com>

DOI: 10.1111/ffe.12663

[12] Kharisov, B.I.; Kharissova, O.V.; Leija Gitierrez, H.; Ortiz Méndez, U (2009). **Recent advances on the soluble carbon nanotubes**. *Industrial & Engineering Chemistry Research*,48(2), 572–590. Recuperado de: <https://pubs.acs.org>

DOI: 10.1021/ie800694f

[13] Kharissova, O.V.; Oliva González, C.M.; Kharisov, B.i. (2018). **Solubilization and Dispersion of Carbon Allotropes in Water and Non-aqueous Solvents**. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 57(38). 12624-12645. Recuperado de: www.scopus.com

DOI: 10.1021/acs.iecr.8b02593

[14] Chan, L.Y.; Andrawes, B (2010). **Finite element analysis of carbon nanotube/cement composite with degraded bond strength**. *Computational Materials Science*, 47, 994–1004. Recuperado de: www.researchgate.com

DOI: 10.1016/j.commatsci.2009.11.035

[15] Ray, S.C.; Pao, C.-W.; Tsai, H.-M.; Chen, H.-C.; Chen, Y.-S.; Wu, S.-L.; Ling, D.-C.; Lin, I.-N.; Pong, W.-F.; Gupta, S.; Giorcelli, M.; Bianco, S.; Musso, S.; Tagliaferro, A (2009). **High-temperature annealing effects on multiwalled carbon nanotubes: electronic structure, field emission and magnetic behaviors**. *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*,9, 1–7. Recuperado de: www.researchgate.com

DOI: 10.1166/jnn.2009.1581

[16] Kim, Y.A.; Hayashi, T.; Endo, M.; Kaburagi, Y.; Tsukada, T.; Shan, J., et al. (2005). **Synthesis and structural characterization of thin multi-walled carbon nanotubes with a partial-ly faceted cross section by a floating reactant method**. *Carbon*, 43, 2243–2250. Recuperado de: www.researchgate.com

DOI: 10.1016/j.carbon.2005.03.039

[17] **El grafeno mejora la solidez del hormigón** (2016). *NovaCiencia*.

<https://novaciencia.es/el-grafeno-mejora-la-solidez-del-hormigon/> (recuperado 2020-04-16)

[18] **Graphenano y la UCAM demuestran la eficacia del grafeno aplicado al hormigón** (2016). *La verdad*.

<https://www.laverdad.es/murcia/201602/22/graphenano-ucam-demuestran-eficacia-20160222155755.html> (recuperado 2020-04-16)

[19] S. Iijima (1991). **Helical microtubules of graphitic carbon**. *Nature* 354, 56–58. Recuperado de: www.scopus.com

DOI: 10.1038/354056a0

[20] C.H. Hsueh (2000). **Young's modulus of unidirectional discontinuous-fibre composites.** *Compos. Sci. Technol.* 60, 2671–2680. Recuperado de: www.sciencedirect.com

DOI: 10.1016/S0266-3538(00)00128-7

[21] M. Cho, S. Yang, S. Chang, S. Yu (2011). **A study on the prediction of the mechanical properties of nanoparticulate composites using the homogenization method with the effective interface concept.** *Int. J. Numer. Meth. Eng.* 85, 1564–1583. Recuperado de: www.researchgate.com

DOI: 10.1002/nme.3039

[22] A.L. Kalamkarov (2013). **Asymptotic Homogenization Method and Micromechanical Models for Composite Materials and Thin-Walled Composite Structures, Asympt.** *Mathematical Methods and Models in Composites*, 1–60. Recuperado de: www.worldscientific.com

DOI: 10.1142/9781848167858_0001

[23] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley. (1985). **C60: buckminsterfullerene,** *Nature* 318, 162-163. Recuperado de: www.nature.com

DOI: 10.1038/318162a0

[24] Valentin N. Popov (2004). **Carbon Nanotubes: properties and application.** *Materials Science and Engineering. R: Reports*, 43 (3), 61-102. Recuperado de: www.sciencedirect.com

DOI: 10.1016/j.mser.2003.10.001

[25] G. Overney, W. Zhong, D. Tománek (1993). **Structural rigidity and low frequency vibrational modes of long carbon tubules.** *Zeitschrift für Physik D* 27(1), 93–96. Recuperado de: www.researchgate.com

DOI: 10.1007/BF01436769

[26] R.L. Jacobsen, T.M. Tritt, J.R. Guth, A.C. Ehrlich, D.J. Gillespie (1995). **Mechanical properties of vapor-grown carbon fiber.** *Carbon*, 33(9), 1217-1221. Recuperado de: www.sciencedirect.com

DOI: 10.1016/0008-6223(95)00057-K

[27] B.I. Yakobson, C.J. Brabec, J. Bernholc (1996). **Nanomechanics of carbon tubes: instabilities beyond linear response.** *Physical Review Letters*, 76(14), 2511-2514. Recuperado de: www.semanticscholar.org

DOI: 10.1103/PhysRevLett.76.2511

[28] M.F. Yu, B.F. Files, S. Arepalli, R.S. Ruoff (2000). **Tensile loading of ropes of single wall carbon nanotubes and their mechanical properties.** *Physical Review Letters*, 84(24), 5552-5555. Recuperado de: www.researchgate.com

DOI: 10.1103/PhysRevLett.84.5552

[29] A. Mizel, L.X. Benedict, M.L. Cohen, S.G. Louie, A. Zettl, N.K. Budraa, W.P. Beyermann (1999). **Analysis of the low-temperature specific heat of multi-walled carbon nanotubes and carbon nanotube ropes.** *Physical Review B. Condensed matter* 60(5), 3264-3270. Recuperado de: www.researchgate.com

DOI: 10.1103/PhysRevB.60.3264

[30] J.C. Lasjaunias, K. Biljakoviæ, Z. Benes, J.E. Fischer, P. Monceau (2002). **Low-temperature specific heat of single-wall carbon nanotubes.** *Physical Review B* 65, 113409. 1-4. Recuperado de: www.researchgate.com

DOI: 10.1103/PhysRevB.65.113409

[31] J. Hone, B. Batlogg, Z. Benes, A.T. Johnson, J.E. Fischer (2000). **Quantized Phonon Spectrum of Single-Wall Carbon Nanotubes.** *Science* 289(5485), 1730-1733. Recuperado de: www.researchgate.com

DOI: 10.1126/science.289.5485.1730

[32] Alcca Quispe, Fernando (2005). **Estructura y síntesis de nanotubos de carbono.** Recuperado de: https://sisbib.unmsm.edu.pe/bibvirtual/monografias/Basic/alcca_af/contenido.htm (2020-04-19)

[33] Ebbesen TW, Ajayan PM (1992). **Large-scale synthesis of carbon nanotubes.** *Nature* 358, 220–222. Recuperado de: www.nature.com

DOI: 10.1038/358220a0

[34] Thess A, Lee R, Nikolaev P, Dai HJ, Petit P, Robert J, et al. (1996). **Crystalline ropes of metallic carbon nanotubes.** *Science* 273, 483–487. Recuperado de: www.researchgate.com

DOI: 10.1126/science.273.5274.483

[35] Oberlin A, Endo M, Koyama S (1976). **Filamentous growth of carbon through benzenedecomposition.** *J Cryst Growth* 32, 335–49. Recuperado de: www.sciencedirect.com

DOI: 10.1016/0022-0248(76)90115-9

[36] Li Y-L, Kinloch IA, Schaffer MSP, Geng J, Johnson B, Windle AH (2004). **Synthesis of single-walled carbon nanotubes by a fluidized-bed method.** *Chem Phys Lett* 384, 98–102. Recuperado de: www.sciencedirect.com

DOI: 10.1016/j.cplett.2003.11.070

[37] **Aerogel de grafeno: El material más liviano jamás logrado** (2013). *ABC Ciencia*.

<https://www.abc.es/ciencia/20130325/abci-aerogel-grafeno-material-liviano-201303251055.html> (2020-05-21).

[38] Martín Martínez (2017). **Grafeno en el sector de las energías renovables: hacia la eficiencia de los dispositivos fotovoltaicos.** *Energética 21*.

Recuperado de: www.energética21.com (2020-05-21).

[39] **Así es el primer coche fabricado con grafeno.** *ABC motor*.

<https://www.abc.es/motor-novedades/20150218/abci-coche-grafeno-201502181930.html> (2020-05-21)

- [40] Nazario Martín et al. (2016). **Synthesis of giant globular multivalent glycofullerenes as potent inhibitors in a model of Ebola virus infection.** *Nature Chemistry* 8, 50-57. Recuperado de: www.natura.com
DOI: 10.1038/nchem.2387
- [41] José Luis Gómez Roda (2017). **Caracterización y fabricación de sensores de cemento con nanotubos de carbono (CNTs).** *EPS Universidad de Málaga.*
- [42] Rafael Serrano Bello. **Modelo del comportamiento mecánico del grafeno y sus defectos.** Universidad de Sevilla, 2011.
- [43] Crivelli-Visconti, I., Cooper, G. (1969). **Mechanical properties of a New Carbon Fibre Material.** *Nature* 221, 754-755. Recuperado de: www.nature.com
DOI: 10.1038/221754a0
- [44] Alexander A. Balandin (2011). **Thermal properties of Graphene and nanostructured carbon materials.** *Nature Materials* 10, 569-581. Recuperado de: www.nature.com
DOI: 10.1038/nmat3064
- [45] Graphenano Nanotechnologies (2017). **El grafeno: propiedades y aplicaciones.** Recuperado de: www.graphenano.com
- [46] Cui, T., Mukherjee, S., Sudeep, P.M. et al. (2019). **Fatigue of Graphene.** *Nature Materials* 19, 405-411. Recuperado de: www.nature.com
DOI: 10.1038/s41563-019-0586-y
- [47] (2019). **Graphene macrostructures and the environment.** *Nature Nanotech* 14, 99. Recuperado de: www.nature.com
DOI: 10.1038/s41565-019-0385-2
- [48] Fabio Pulizzi, Olga Bubnova, Silvia Milana, David Schilter, David Abergel and Alberto Moscatelli (2019). **Graphene in the making.** *Nature Nanotechnology* 14, 914-918. Recuperado de: www.nature.com
DOI: 10.1038/s41565-019-0552-5
- [49] Keith R. Paton, Eswaraiah Varla, Jonathan N. Coleman (2014). **Scalable production of large quantities of defect-free few-layer Graphene by shear exfoliation in liquids.** *Nature Materials* 13, 624-630. Recuperado de: www.nature.com
DOI: 10.1038/nmat3944
- [50] Vlassioug, I.V., Stehle, Y., Pudasaini, P.R. et al. (2018). **Evolutionary selection growth of two-dimensional material on polycrystalline substrates.** *Nature Mater* 17, 318-322. Recuperado de: www.nature.com
DOI: 10.1038/s41563-018-0019-3
- [51] Phaedon Avouris, Christos Dimitrakopoulos (2012). **Graphene: Synthesis and applications.** *Materials Today* 15(3), 86-97. Recuperado de: www.sciencedirect.com
DOI: 10.1016/S1369-7021(12)70044-5

[52] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov (2004). **Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films**. *Science* 306(5695), 666-669. Recuperado de: <https://science.sciencemag.org>

DOI: 10.1126/science.1102896

[53] Luong, D.X., Bets, K.V., Algozeeb, W.A. et al. (2020). **Gram-scale bottom-up flash graphene synthesis**. *Nature* 577, 647-651.

Recuperado de: www.nature.com

DOI: 10.1038/s41586-020-1938-0

[54] Pozegic, T., Anguita, J., Hamerton, I. et al. (2016). **Multi-Functional Carbon Fibre Composites using Carbon Nanotubes as an Alternative to Polymer Sizing**. *Scientific Reports* 6, 37334. Recuperado de: www.nature.com

DOI: 10.1038/srep37334

[55] Ajay Raghavan, Seth S. Kessler, Christopher T. Dunn, Derreck Barber, Sunny Wicks and Brian L. Wardle (2009). **Structural Health Monitoring using Carbon Nanotube (CNT) Enhanced Composites**. Recuperado de: www.metisdesign.com

[56] Jandro L. Abot (2017). **Structural Health Monitoring Using Carbon Nanotube Yarns: Sensing Concept and Applications in Composites**. *Proceedings* 1, 852. Recuperado de: www.researchgate.com

DOI: 10.3390/proceedings1080852

[57] Taylor, R., Walton, D. (1993). **The chemistry of fullerenes**. *Nature* 363, 685-693. Recuperado de: www.nature.com

DOI: 10.1038/363685a0

[58] Otero, G., Biddau, G., Sánchez-Sánchez, C. et al (2008). **Fullerenes from aromatic precursors by Surface-catalysed cyclodehydrogenation**. *Nature* 454, 865-868. Recuperado de: www.nature.com

DOI: 10.1038/nature07193

[59] Ángel Herráez (2011). **Las asombrosas estructuras del carbono: fullerenos, grafenos y nanotubos**. *Universidad de Alcalá*. Recuperado de: <https://docplayer.es>

[60] Juan José Sáenz (2004). **Teoría, modelado y simulación en Nanociencia**. *Report from the National Science Foundation workshop*. Recuperado de: www.phantomsnet.net

BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía general

- Borrell Tomás, María Amparo, and María Dolores Salvador Moya. **Materiales de carbono: del grafito al grafeno**. Barcelona: Reverté. Print, 2015.
- Pérez Herrero, Miguel Angel. **Simulación de la interacción de fullerenos con grafito y nanotubos de carbono**. s.l: [s.n.]. Print, 2001.
- Ángel Herráez, profesor titular de la *Universidad de Alcalá*. **Las asombrosas estructuras del carbono: fullerenos, grafenos y nanotubos**, 2011.
- Aldo J. G. Zarbin, Universidade Federal do Paraná y Marcela M. Oliveira. **Nanoestructuras de carbono (nanotubos, grafeno): quo vadis?**. *Universidad tecnológica Federal do Paraná*. Publicado el 2013-10-24.
- Elsa Prada. **Historia de un descubrimiento**. Publicado en *El País* el 6 agosto 2010.
https://elpais.com/diario/2010/08/06/sociedad/1281045602_850215.html
- Vicente López Fernández (2009). **Nanomateriales basados en el carbono**. *Universidad Autónoma de Madrid, Facultad de Ciencias, Departamento de Química Inorgánica*.

Webs consultadas:

- <https://www.carbotecnia.info/el-fascinante-atomo-de-carbono/> (Última conexión 2020-02-03)
- <https://elementos.org.es/carbono> (Última conexión 2020-02-03)
- <https://sites.google.com/site/elcarbonoysuspropiedades/> (Última conexión 2020-02-03)
- <https://abcmodular.com/tecnologia/fibra-de-carbono-construccion-modular> (Última conexión 2020-02-05)
- <https://www.kitfibradecarbono.com/historia/> (Última conexión 2020-02-06)
- <https://www.autodesk.com/redshift/es/construccion-fibra-carbono/> (Última conexión 2020-02-09)
- <https://carbosystem.com/fibra-de-carbono-2/> (Última conexión 2020-03-12)
- <https://eldioxxtm.foroactivo.com/t387-que-importancia-tiene-en-el-auto-de-esta-epoca-la-fc> (Última conexión 2020-03-15)
- <https://cienciaonthecrest.com/2016/01/18/metodos-de-sintesis-de-nanotubos-de-carbono/> (Última conexión 2020-03-19)
- http://sisbib.unmsm.edu.pe/bibvirtual/monografias/Basic/alcca_af/contenido.htm (Última conexión 2020-03-20)
- http://www.phantomsnet.net/Resources/files/Teoria_alta.pdf (Última conexión 2020-03-20)
- <https://abcmodular.com/tecnologia/fibra-de-carbono-construccion-modular> (Última conexión 2020-03-20)
- <https://www.laverdad.es/murcia/201602/22/graphenano-ucam-demuestran-eficacia-20160222155755.html> (Última conexión 2020-04-15)

- https://maison-plus.es/grafeno-construccion/#Aplicaciones_del_grafeno_en_la_construccion (Última conexión 2020-04-20)
- <https://www.abc.es/motor-novedades/20150218/abci-coche-grafeno-201502181930.html> (Última conexión 2020-04-22)
- <https://www.dciencia.es/los-elementos-en-los-humanos-o-c-h-n-ca-p/> (Última conexión 2020-02-21)
- <https://dialnet.unirioja.es/servlet/tesis?codigo=102184> (Última conexión 2020-02-27)

Bibliografía específica: carbono

- Catherine E. Housecroft, Alan G. Sharpe. **Química inorgánica**. Pearson Education, 2ª edición, 2003. ISBN: 978-84-205-4847-0
- L.G. Wade. Jr. **Química orgánica**, 1. Pearson. 7ª edición, 2012. ISBN: 978-607-32-0790-4
- A. Miravete (2001) . **Hacia la fibra de carbono en la construcción**. *Materiales de construcción 51*, 263-264. Consejo Superior de investigaciones Científicas. Recuperado de: <https://materconstruct.revistas.csic.es>

Webs consultadas:

- <https://www.muyinteresante.es/ciencia/articulo/el-carbono-la-base-de-la-vida-581463573586> (Última conexión 2020-02-18)
- <https://www.ecured.cu/Carbono> (Última conexión 2020-02-18)
- <https://www.agenciasinc.es/Noticias/Nuevos-materiales-basados-en-nanoparticulas-de-carbono> (Última conexión 2020-02-17)
- https://es.wikipedia.org/wiki/Descubrimiento_de_los_elementos_qu%C3%ADmicos (Última conexión 2020-02-19)
- <https://es.wikipedia.org/wiki/Carbono> (Última conexión 2020-02-17)
- <https://www.carbotecnia.info/el-fascinante-atomo-de-carbono/> (Última conexión 2020-02-17)
- <https://www.lenntech.es/periodica/elementos/c.htm> (Última conexión 2020-02-17)
- http://www.educaplus.org/climatic/01_atm_compo.html (Última conexión 2020-02-18)
- <https://applynano.com/metodos-de-obtencion-del-grafeno/> (Última conexión 2020-02-20)

Bibliografía específica: grafeno

- Rosa Menéndez, Clara Blanco. **El Grafeno**. Consejo Superior de Investigaciones Científicas; Los Libros de la Catarata, 2014. ISBN: 978-84-00-09886-5
- Rafael Serrano Bello. **Modelo del comportamiento mecánico del grafeno y sus defectos**. Universidad de Sevilla, 2011.

Webs consultadas:

- <https://www.graphenano.com/que-es-el-grafeno/> (Última conexión 2020-04-20)
- <https://www.nature.com/articles/nature07193> (Última conexión 2020-04-22)
- <https://nanova.org/fullereno/> (Última conexión 2020-04-21)

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

ilustración 1: unión estructural reforzada con fibra de carbono. Fuente: www.carrillodavila.com (2020-05-21).	14
ilustración 2: refuerzo de viga estructural con láminas de fibra de carbono. Fuente: www.topconsult.com (2020-05-21).	14
ilustración 3: viga reforzada con lámina central de CNTs.	15
ilustración 4: respuesta dinámica ante un barrido de frecuencia a 50 Vrms [1] .	15
ilustración 5: relación tensión-deformación de ambas muestras [5] .	16
Ilustración 6: aplicación de lechadas dopadas con CNTs en piezas postensadas de hormigón armado.	17
Ilustración 7: GTA Spano. Primer vehículo en incorporar grafeno. Fuente: www.abc.es (2020-05-02).	20
Ilustración 8: aerogel de grafeno. Fuente: www.abc.com (2020-05-03).	20
ilustración 9: fullereno.	21
ilustración 10: nanotubo de carbono.	21
Ilustración 11: carbón. Fuente: www.mineriaenlinea.com (2020-02-22).	24
Ilustración 12: composición química del ser humano.	24
Ilustración 13: diamante. Fuente: www.universoabierto.org (2020-03-16).	25
Ilustración 14: grafito. Fuente: www.como-funciona.com (2020-03-16).	25
Ilustración 15: situación del carbono en la tabla periódica. Fuente: www.fotosearch.es (2020-02-24).	26
ilustración 16: átomo de carbono ¹² .	26
ilustración 17: alótropos del carbono. A la izquierda, diamante; a la derecha, grafito.	27
Ilustración 18: molécula de diamante.	27
Ilustración 19: molécula de grafito.	27
Ilustración 20: apreciación de capas de grafito en un lápiz de madera. Fuente: www.carbotecnica.info (2020-03-16).	28
Ilustración 21: apariencia de la fibra de carbono. Fuente: www.carbonsystem.com (2020-03-09).	30
Ilustración 22: apariencia de la fibra de carbono vista a nivel microscópico. Fuente: www.eldioxxtm.foroactivo.com (2020-03-09).	30
Ilustración 23: grafeno, el "material de Dios". Fuente: www.automaticainstrumentacion.com (2020-03-10).	33
Ilustración 24: estructura molecular del grafeno.	34
Ilustración 25: la separación teórica de las capas de grafito da lugar a láminas de grafeno.	34
Ilustración 26: partícula de grafeno sobre soporte de hilos de oro. Fuente: [42] .	35
Ilustración 27: molécula de grafeno.	35
Ilustración 28: propiedades del grafeno. Arriba, propiedades mecánicas; abajo, propiedades físicas.	36
Ilustración 29: propiedades del grafeno. Arriba, propiedades eléctricas y térmicas; abajo, propiedades químicas.	37
Ilustración 30: autorreparación del grafeno.	38
Ilustración 31: propiedades del grafeno, resumen y relevancia.	38
Ilustración 32: alótropos del grafeno. Arriba, grafito; centro, nanotubo, abajo, fullereno.	39
Ilustración 33: generación por transformación geométrica de los alótropos del grafeno.	40
Ilustración 34: fullereno C ₆₀ .	41
ilustración 35: nanotubo de pared múltiple.	42
Ilustración 36: nanotubo de pared simple.	43
ilustración 37: tipologías de nanotubos según su geometría. Arriba: nanotubo en sillón; en el centro: nanotubo en zigzag; abajo: nanotubo quiral.	44

ilustración 38: tipologías de CNTs. Arriba: nanotubo en sillón; en el centro: nanotubo en zigzag; abajo: nanotubo quiral.	45
Ilustración 39: : sistema de ejes locales para determinación de índices de Hamada.	46
Ilustración 40: parámetros definitorios de la definición geométrica de los CNTs.	46
ilustración 41: relación de los vectores quiral y traslación con el nanotubo.	47
Ilustración 42: conductividad eléctrica de los nanotubos en carbono en función de s_y y morfología atómica.	48
ilustración 43: atributos de los cilindros diseñados.	56
Ilustración 44: resumen gráfico del proceso de modelación de las muestras.	57
Ilustración 45: requerimientos básicos e inconvenientes en el modelado.	58
ilustración 46: material contenedor y contenido en los modelos.	59
ilustración 47: evolución de tamaño y densidad de las muestras.	60
Ilustración 48: empleo de los componentes "Random" y "ConstructPoint" en Grasshopper.	61
ilustración 49: generación de puntos espaciales con "Random", directamente en Grasshopper.	62
ilustración 50: agrupación de puntos espaciales como consecuencia del empleo de la misma semilla en sus tres coordenadas en "Random", Grasshopper.	63
ilustración 51: agrupaciones de puntos espaciales generados como consecuencia de semillas enmarcadas en una sucesión numérica común con "Random", Grasshopper.	64
ilustración 52: arriba, importación de ficheros de texto como datos numéricos a Grasshopper; abajo, visualización de los vectores con base en un punto previamente generado.	65
Ilustración 53: generación de puntos y vectores de coordenadas aleatorias importadas desde un generador externo a Grasshopper.	66
ilustración 54: generación de puntos base, puntos proyectados y rectas eje de los cilindros.	67
ilustración 55: obtención de unVector y generación del eje del cilindro con "Line", en Grasshopper.	67
ilustración 56: obtención de ejes de los nanotubos en una muestra en Grasshopper.	68
ilustración 57: empleo del componente "Cylinder" en Grasshopper.	69
ilustración 58: empleo del componente "CollisionManyToMany" en Grasshopper.	69
ilustración 59: algoritmo de diseño generado en Grasshopper, fin del modelo inicial.	70
ilustración 60: generación de clusters en Grasshopper para simplificar el proceso de diseño.	71
ilustración 61: visualización de una muestra de 300 nm y 0,4 % de nanotubos en Rhino, diseñada en Grasshopper.	72
ilustración 62: generador de bucles de desfase y proceso de cálculo del porcentaje de nanotubos en Grasshopper.	72
ilustración 63: visualización de los inconvenientes del modelo inicial:	73
ilustración 64: aleatoriedad homogénea.	75
Ilustración 65: : grasshopper se encuentra conectado a Iron Python; sobol a Python.	76
Ilustración 66: algoritmo de conexión con Python nativo en Grasshopper; GhPythonRemote.	77
ilustración 67: importación de la librería de sobol al componente personalizado en Grasshopper.	77
ilustración 68: arriba, generación de muestras con sobol en Gh; abajo; muestra modelada con el algoritmo final. Comparación entre ellas.	78
ilustración 69: componente personalizado diseñado en Grasshopper: CNTsGenerator.	79
ilustración 70: algoritmo de diseño CNTsGenerator y comprobación final de colisiones, ejecutable si es necesario.	81
Ilustración 71: muestra generada con el algoritmo final. Identificación de intersecciones entre cilindros y cubo contenedor.	81
ilustración 72: código de programación del primer cilindro en la muestra, lenguaje Python en Grasshopper.	82
ilustración 73: programación de condiciones de inclusión de CNTs generados a la base de datos final.	83

Ilustración 74: programación de condiciones de inclusión de CNTs generados a la base de datos final.	84
ilustración 75: arriba, cilindros con intersecciones incompletas e irregulares de los cilindros con la muestra; abajo, intersecciones válidas.	85
ilustración 76: relación de tamaños de las muestras de 1,5 de densidad.	88
ilustración 77: evolución del mallado de las muestras conforme a la variación de la dimensión y la cuantía de CNTs.	93
ilustración 78: parámetros de definición de los elementos.	94
Ilustración 79: elementos que conforman la malla, tetraedros para ejecución de análisis por el método de los elementos finitos.	94
ilustración 80: cilindros mallados en ICEN CFD.	95
ilustración 81: orientación del sistema de ejes locales de los elementos de la malla para con el vector director de su respectivo cilindro.	96
ilustración 82: mallas generadas en ICEM CFD.	97
ilustración 83: agrupación de elementos de la malla de un cilindro respecto a su centro de gravedad, tomando éste como punto de control asociativo.	98
ilustración 84: diferentes semillas establecidas.	99
ilustración 85: adaptación de la malla a la dimensión de las semillas del nanotubo.	99
Ilustración 86: ejemplos de mallas generadas, adaptables a cada geometría.	100
ilustración 87: variables iniciales del código Tcl en ICEM CFD.	101
ilustración 88: agrupación de elementos de un mismo conjunto con respecto a su respectivo centro de gravedad en código Tcl.	101
ilustración 89: generación de las mallas y programación de resultados de salida de ICEM CFD mediante códigos en lenguaje Tcl.	102
ilustración 90: componente de Grasshopper "Center Box".	145
Ilustración 91: datos de los parámetros del componente.	145
Ilustración 92: hexaedro creado a través del componente "Center Box" en Grasshopper.	145
Ilustración 93: creación de superficie compleja mediante Rhino y Grasshopper.	146
ilustración 94: diferentes conexiones de datos en Grasshopper.	146

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: propiedades del carbono.	28
Tabla 2: propiedades del diamante y del grafito.	29
Tabla 3: propiedades fibra de carbono frente a acero [26, 44].	31
Tabla 4: clasificación de grafenos	34
Tabla 5: propiedades del grafeno frente al acero estructural	38
Tabla 6: alótropos del grafeno.	39
Tabla 7: clasificación de nanotubos según su número de paredes.	44
Tabla 8: radio de CNTs en función de sus índices de Hamada [32].	47
Tabla 9: formación geométrica de nanotubos a partir del vector quiral y el vector traslación.	47
Tabla 10: propiedades de los CNTs	49
Tabla 11: dimensiones y porcentajes de CNTs de las probetas virtuales	60
Tabla 12: tiempo computacional requerido por el modelo inicial.	74
Tabla 13: exposición resumen de muestras finales.	87
Tabla 14: semillas del proceso de mallado.	99
Tabla 15: exposición resumen de modelos mallados en ICEM CFD.	104
Tabla 16: resumen de modelos obtenidos para la simulación.	113
Tabla 17: comparación de softwares de modelado tridimensional parametrizado: Grasshopper, Dynamo y Houdini.	116
Tabla 18: comparación de softwares de mallado de modelos: ICEM CFD, SAP 2000 y Catia V5.	117
Tabla 19: cuantía de nodos y elementos de las mallas en muestras de 1,5% de densidad de nanotubos.	121
Tabla 20: tamaños de archivos de nodos y elementos de las muestras M300.	121
Tabla 21: tiempo computacional empleado para la generación de las muestras finales de 1,5 % de densidad.	122
Tabla 22: resumen de modelos generados y sus características.	153

ÍNDICE DE GRÁFICOS

Gráfico 1: composición porcentual de los seres vivos. _____	24
Gráfico 2: elementos químicos en la atmósfera. _____	25
Gráfico 3: tiempos de generación de muestras mediante el empleo del modelo inicial. _____	74
Gráfico 4: cuantía de CNTs en muestras de 50 nm. _____	89
Gráfico 5: cuantía de CNTs en muestras de 300 nm. _____	89
Gráfico 6: cuantía de CNTs en muestras de 100 nm. _____	89
Gráfico 7: cuantía de CNTs en muestras de 200 nm. _____	89
Gráfico 8: cuantía de CNTs en muestras de 500 nm. _____	89
Gráfico 9: cuantía de CNTs en muestras de 1,5 % de densidad. _____	89
Gráfico 10: cuantía de elementos del mallado en muestras de 300 nm de lado. _____	105
Gráfico 11: cuantía de elementos del mallado en muestras de 50 nm de lado. _____	105
Gráfico 12: variación de cuantías de elementos en muestras de 1,5 % de densidad. _____	105
Gráfico 13: cuantía de elementos del mallado en muestras de 200 nm de lado. _____	105
Gráfico 14: cuantía de elementos del mallado en muestras de 500 nm de lado. _____	105
Gráfico 15: cuantía de elementos del mallado en muestras de 100 nm de lado. _____	105
Gráfico 16: resultados preliminares de la simulación realizada por Enrique García Macías. Relación entre módulo de deformación homogeneizado de las muestras y su porcentaje de nanotubos de carbono. _____	119
Gráfico 17: variación del número de nodos y elementos de las mallas en la progresión de los diferentes modelos. _____	121
Gráfico 18: tamaño de los archivos que contienen los datos del mallado. _____	121
Gráfico 19: tiempos computacionales de generación de muestras finales de 1,5 % de densidad de nanotubos de carbono. _____	122

ANEXOS



Anexo I: introducción a Grasshopper

La elaboración del modelo virtual ha requerido la adquisición de ciertas competencias en lo que a diseño tridimensional se refiere. Es por ello que se incluye esta introducción, de cara a facilitar la comprensión del lector.

Rhinoceros es un software de renombre entre los usuarios que participan del diseño en 3D, sin embargo, su herramienta de **diseño parametrizado**¹³⁴, **Grasshopper**, no goza de la misma fama ni de tan amplia comunidad, si bien ésta se encuentra en constante crecimiento. Esto se debe a las infinitas posibilidades que el complemento ofrece, permitiendo construir modelos de muy compleja geometría a través de operaciones matemáticas sencillas¹³⁵.

Las funciones de *Grasshopper* se organizan mediante lo que se denomina "**componentes**". Cada uno de los componentes presenta una cuantía diferente de "enganches" para indicar parámetros previos y posteriores al diseño. Según su momento de intervención, previa o posteriormente a la operación que realice cada componente, estos enganches serán "**input**" o "**output**".

La [ilustración 90](#) presenta el componente "Center Box". Como su propio nombre indica, permite la creación, a partir de su centro geométrico, de un hexaedro de atributos: "Base", "X", "Y" y "Z", que serán los inputs, siendo el output el propio cubo que hemos solicitado.

Los inputs, en este caso, son las propiedades del cubo que buscamos diseñar. "Base" será el plano base sobre el que se asentará el cubo, y "X", "Y" y "Z" serán las dimensiones del semilado del cubo, ya que con este componente la caja se construye desde su centro.

El output contiene el resultado de la operación que se realice. En este caso, conservando los valores de los inputs que cada componente contiene por defecto¹³⁶ (I.91), el resultado será el cubo que se muestra en la [ilustración 92](#).

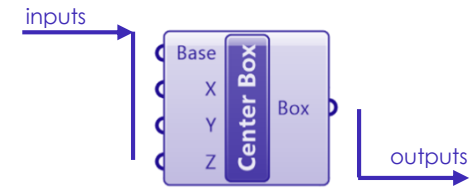


ilustración 90: componente de Grasshopper "Center Box".

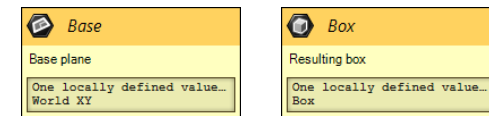


Ilustración 91: datos de los parámetros del componente.

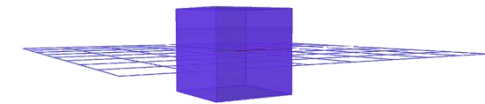


Ilustración 92: hexaedro creado a través del componente "Center Box" en Grasshopper.

¹³⁴ Por diseño parametrizado se entiende aquel procedimiento de construcción virtual de un objeto, cuyos atributos vienen dados por una serie de valores o parámetros, en este caso, numéricos.

¹³⁵ La relación entre *Rhinoceros* y *Grasshopper* es la siguiente: si el usuario trabaja empleando las herramientas de la extensión (GH) no puede visualizar la traducción de estas operaciones a la espacialidad a menos que lo observe desde *Rhinoceros*. Grosso modo, *Rhinoceros* es el medio a través del cual *Grasshopper* muestra al usuario, de modo tridimensional, lo que está diseñando mediante operaciones paramétricas y numéricas. Para traducir estos diseños modelados en *Grasshopper* a la "materialidad" virtual, debe hacerse uso de la función "Bake" (homenear). Así, el usuario pasará de un modelo tridimensional que solo puede visualizar a otro que podrá modificar al gusto.

¹³⁶ En este caso, siguiendo los valores por defecto del programa, el hexaedro se construirá sobre el plano XY, con valor la unidad para sus coordenadas espaciales: se obtendrá un cubo asentado en el plano XY por su centro, con un lado de valor 2.

Al igual que *Grasshopper* dispone de componentes capaces de crear **sólidos primitivos** como el de la imagen, también presenta otros con los que realizar varios tipos de operaciones complejas, por ejemplo, **adición, sustracción o diferencia de sólidos**, o multiplicación rápida de objetos.

También es posible **asignar geometría previamente diseñada con Rhino** a componentes de *Grasshopper*. Las líneas curvas de la **ilustración 93** se han dibujado en *Rhino*, con las herramientas de modelado 3D básicas. La curva que aparece en color verde ha sido asignada al componente de *GH* que se muestra del mismo color y la otra curva quedará recogida en el componente restante "curve", que aún se encuentra vacío y, por ello, se visualiza de color naranja¹³⁷.

Una vez ambas curvas han sido asignadas a los componentes de *Grasshopper* ya forman parte del entorno parametrizado de esta herramienta y pueden ser transformadas y empleadas por la misma.

Mediante el componente "Loft" de *Grasshopper*, basta con unir los componentes que ya contienen a las curvas para obtener esta superficie de muy peculiar geometría, más engorrosa de obtener con *Rhinoceros*.

Es posible conocer la naturaleza de los datos transportados entre los componentes atendiendo al **tipo de línea que Gh asigna a cada cable**. Si este se representa en el entorno gráfico del programa como una línea continua sencilla, esta conexión transporta un único dato mientras que una línea doble informa de que el cable envía una lista de datos (I.94).

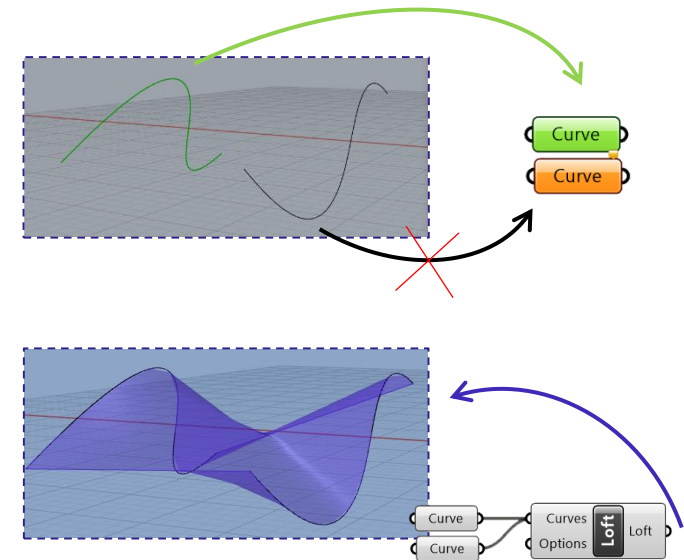


Ilustración 93: creación de superficie compleja mediante Rhino y *Grasshopper*.

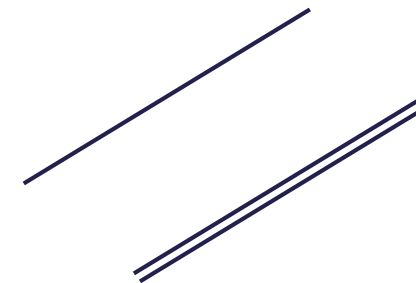


ilustración 94: diferentes conexiones de datos en *Grasshopper*.

¹³⁷ *Grasshopper* presenta un código de colores para facilitar su empleo: gris, indica que el componente no se está ejecutando; verde, informa que el funciona correctamente; naranja, avisa de que falta algún dato necesario para su funcionamiento; rojo, advierte de que el componente no está funcionando. Esto generalmente se deberá a una incorrecta introducción de los inputs.

Anexo II: algoritmo CNTsGenerator

en lenguaje Python

```

"""Provides a scripting component.
Inputs:
    GO!: Empezar a generar CNTs
    Domain: dominio de valores numéricos en R3
Output:
    BD: Base de Datos de CNTs"""

__author__ = "Verónica Montoro"
__version__ = "2020.01.20"

import rhinoscriptsyntax as rs
import ghpythonlib.components as ghcomp
from random import uniform
#
# Setting some values
Origin = ghcomp.ConstructPoint(0,0,0)
Plane = ghcomp.XYPlane(Origin)
HalfSide = CubeSide/2
#
# Sample's geometry
Box = ghcomp.CenterBox(Plane,HalfSide,HalfSide,HalfSide)
Box2 = ghcomp.CenterBox(Plane,HalfSide+10,HalfSide+10,HalfSide+10)
VolBox = ghcomp.Volume(Box)[0]
print(Box)
#
# Starting point
X = uniform(-HalfSide,HalfSide)
Y = uniform(-HalfSide,HalfSide)
Z = uniform(-HalfSide,HalfSide)
#
# Starting vector
V = uniform(-HalfSide,HalfSide)
U = uniform(-HalfSide,HalfSide)
W = uniform(-HalfSide,HalfSide)
#
#
#
#

```

```

# Other parameters
Point = ghcomp.ConstructPoint(X,Y,Z)
Vector = ghcomp.VectorXYZ(V,U,W)[0]
unVector = ghcomp.VectorXYZ(-V,-U,-W)[0]
Vec = [Vector]
#
point1 = ghcomp.ProjectPoint(Point,Vector,Box2)[0]
point2 = ghcomp.ProjectPoint(Point,unVector,Box2)[0]
#
AXE = ghcomp.Line(point1,point2)
#
CNT1 = ghcomp.Cylinder(AXE,Radius,AXE)
CNT = ghcomp.CapHoles(CNT1)
gc = ghcomp.Volume(CNT)[1]
#
# Definition of DataBase that will store valid CNTs
DB = [CNT]
count = 1
Vec = [Vector]
GC = [gc]
#
# CNTs loop generator following
if GO:
#
while(count < CNTs):
# Point
X = uniform(-HalfSide,HalfSide)
Y = uniform(-HalfSide,HalfSide)
Z = uniform(-HalfSide,HalfSide)
#
# Vector
V = uniform(-HalfSide,HalfSide)
U = uniform(-HalfSide,HalfSide)
W = uniform(-HalfSide,HalfSide)
#
# Other parameters
Point = ghcomp.ConstructPoint(X,Y,Z)
Vector = ghcomp.VectorXYZ(V,U,W)[0]
unVector = ghcomp.VectorXYZ(-V,-U,-W)[0]
#
point1 = ghcomp.ProjectPoint(Point,Vector,Box2)[0]
point2 = ghcomp.ProjectPoint(Point,unVector,Box2)[0]
#

```

```

AXE = ghcomp.Line(point1,point2)
#
CNT1 = ghcomp.Cylinder(AXE,Radius,AXE)
CNT = ghcomp.CapHoles(CNT1)
#
#
# Generated CNTs are just added if doesn't collide
R = ghcomp.CollisionOneXMany(CNT,DB)[0]
if R == False:
#
DB.append(CNT)
count = count + 1
Vec.append(Vector)
#
# CNT centroid
gc = ghcomp.Volume(CNT)[1]
GC.append(gc)
#
#
# Solid intersection between box and CNTs
DB = ghcomp.SolidIntersection(DB,Box)
#
# Volumes relation
Vol = ghcomp.Volume(DB)[0]
Vol1 = ghcomp.MassAddition(Vol)[0]
Vol2 = Vol1*100
Den = Vol2/VolBox
#
Fv = round(Den,2)
#
# When Density is reached
print("it's done!")
print(DB)
print(Vec)
print(Box)
print(GC)
print(Fv)
#
#
#
#
#

```

```

# Vec and GC to a text file
F = open("M{:.0f}-B{:.2f}-VEC.txt".format(CubeSide,Density),'w')
for line in Vec:
    F.write(str(line))
    F.write("\n")
F.close()
#
f = open("M{:.0f}-B{:.2f}-GC.txt".format(CubeSide,Density),'w')
for line in GC:
    f.write(str(line))
    f.write("\n")
f.close()

```


Anexo III: modelos tridimensionales generados

preparados para la simulación en Ansys

MODELO	LADO (NM)	DENSIDAD DE CNTs	CUANTÍA CNTs	SEMILLA DEL CUBO (NM)	ELEMENTOS DE LA MALLA
M50-B02	50	0,2 %	1	4,0	99.525
M50-B03		0,3 %	3		116.736
M50-B04		0,4 %	3		130..595
M50-B06		0,6 %	4		164265
M50-B08		0,8 %	6		195.808
M50-B10		1,0 %	7		223.534
M50-B12		1,2 %	7		268.363
M50-B15		1,5 %	9		312.440
M100-B02	100	0,2 %	6	8,0	779.024
M100-B03		0,3 %	8		915.805
M100-B04		0,4 %	10		1..040.987
M100-B06		0,6 %	15		1492.423
M100-B08		0,8 %	20		1.581.024
M100-B10		1,0 %	25		1.868.936
M100-B12		1,2 %	30		2.334.983
M100-B15		1,5 %	40		2.498.411

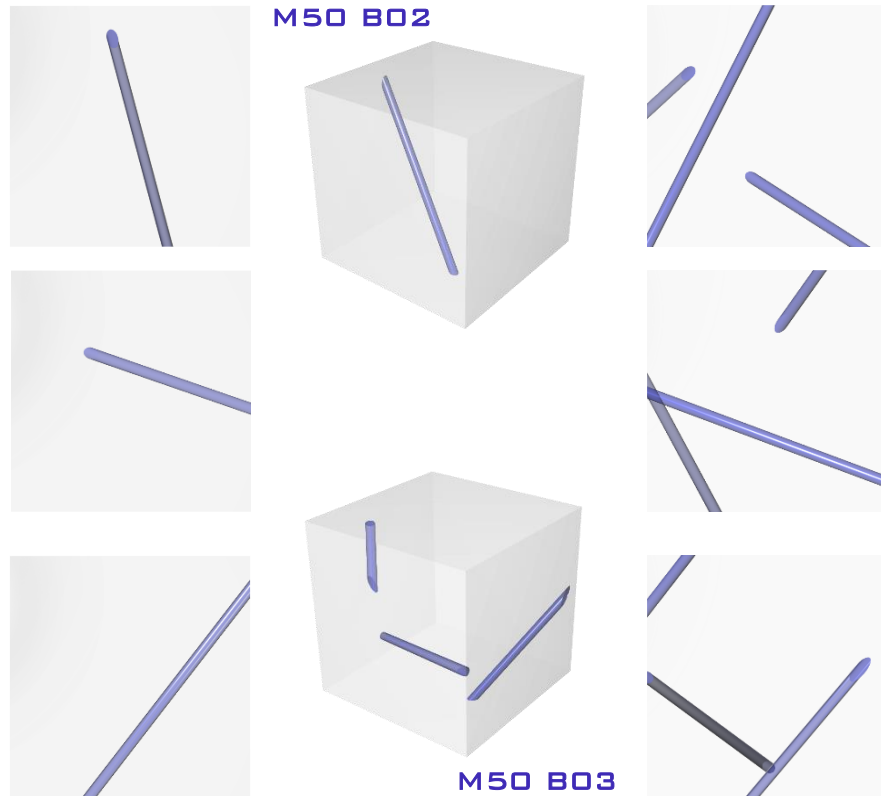
<i>MODELO</i>	LADO (NM)	DENSIDAD DE CNTs	CUANTÍA CNTs	SEMILLA DEL CUBO (NM)	ELEMENTOS DE LA MALLA
M200-B02	200	0,2 %	20	16,0	2.929.442
M200-B03		0,3 %	30		4.284.622
M200-B04		0,4 %	45		5.889.593
M200-B06		0,6 %	65		8.126.771
M200-B08		0,8 %	90		10.965.806
M200-B10		1,0 %	120		13.638.737
M200-B12		1,2 %	150		15.639.367
M200-B15		1,5 %	190		20.229.676
M300-B02		300	0,2 %		50
M300-B03	0,3 %		70	10.727.144	
M300-B04	0,4 %		100	11.547.079	
M300-B06	0,6 %		150	14.447.489	
M300-B08	0,8 %		220	28.722.182	
M300-B10	1,0 %		290	45.482.209	
M300-B12	1,2 %		350	54.603.447	
M300-B15	1,5 %		500	66.607.824	

MODELO	LADO (NM)	DENSIDAD DE CNTs	CUANTÍA CNTs	SEMILLA DEL CUBO (NM)	ELEMENTOS DE LA MALLA
M500-B02	500	0,2 %	140	32,0	11.980.806
M500-B03		0,3 %	210		15.693.287
M500-B04		0,4 %	300		21.589.658
M500-B06		0,6 %	450		49.687.325
M500-B08		0,8 %	830		85.836.871
M500-B10		1,0 %	1000		101.356.871
M500-B12		1,2 %	1300		133.698.754
M500-B15		1,5 %	1870		170.552.197

Tabla 22: resumen de modelos generados y sus características.

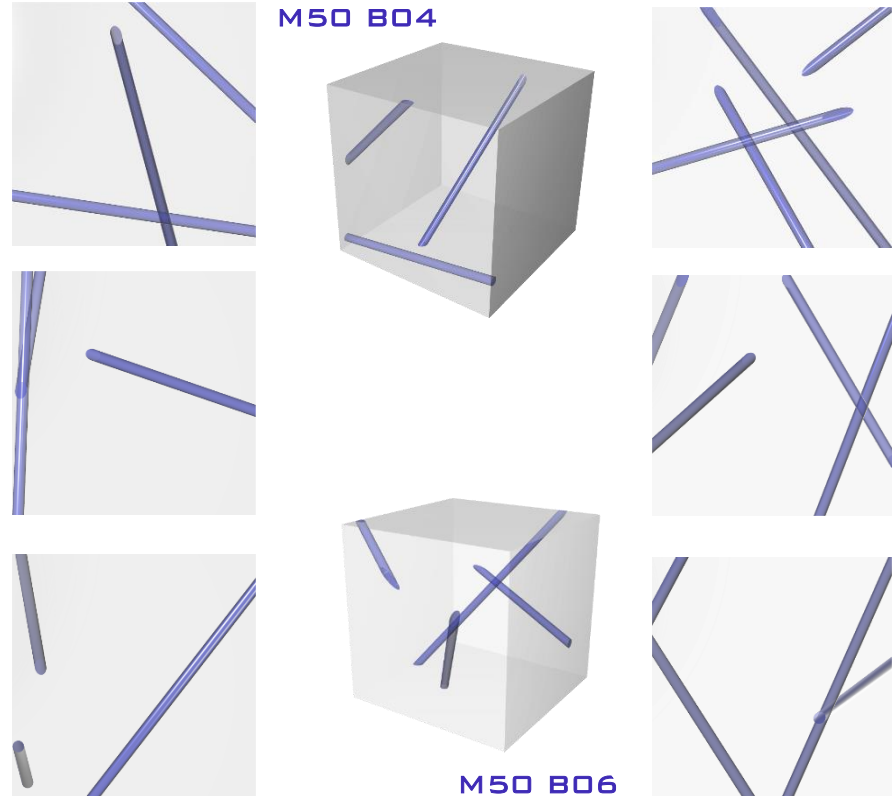
Exposición de modelos

M50 B02	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	50	nm
Densidad buscada	0,2 %	
Densidad real	0,2%	
Cuanfía de nanotubos de carbono	1	



M50 B03	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	50	nm
Densidad buscada	0,3 %	
Densidad real	0,3 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	3	

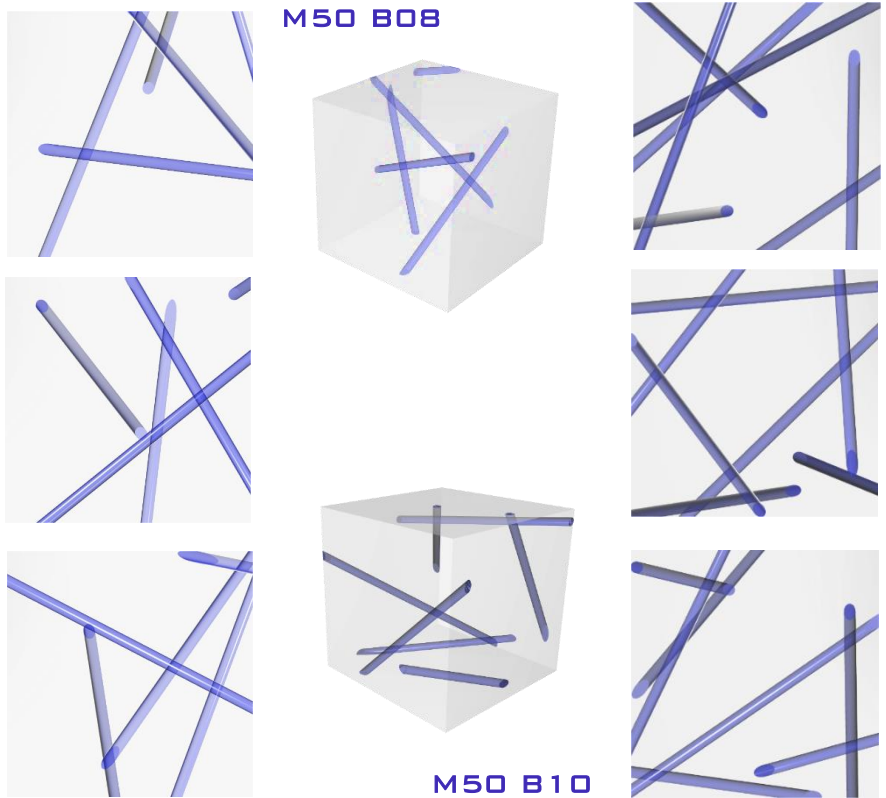
M50 B04	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	50	nm
Densidad buscada	0,4 %	
Densidad real	0,4 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	3	



M50 B06	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	50	nm
Densidad buscada	0,6 %	
Densidad real	0,6 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	4	

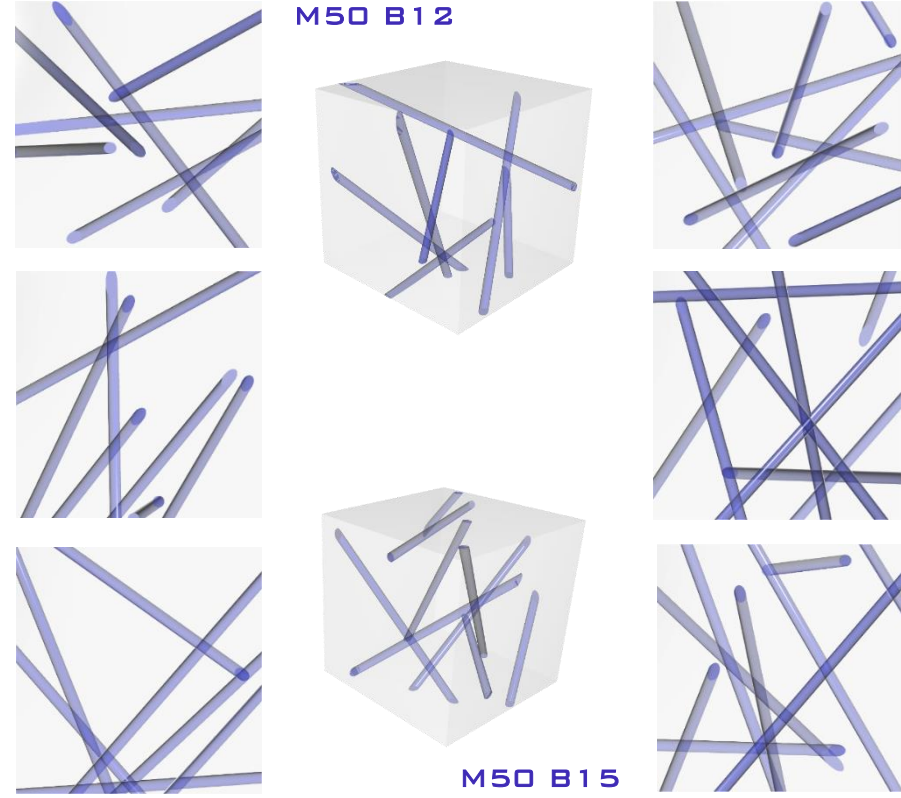
Exposición de modelos

M50 B08	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	50	nm
Densidad buscada	0,8 %	
Densidad real	0,8 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	6	



M50 B10	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	50	nm
Densidad buscada	1,0 %	
Densidad real	1,0 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	7	

M50 B12	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	50	nm
Densidad buscada	1,2 %	
Densidad real	1,2 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	7	

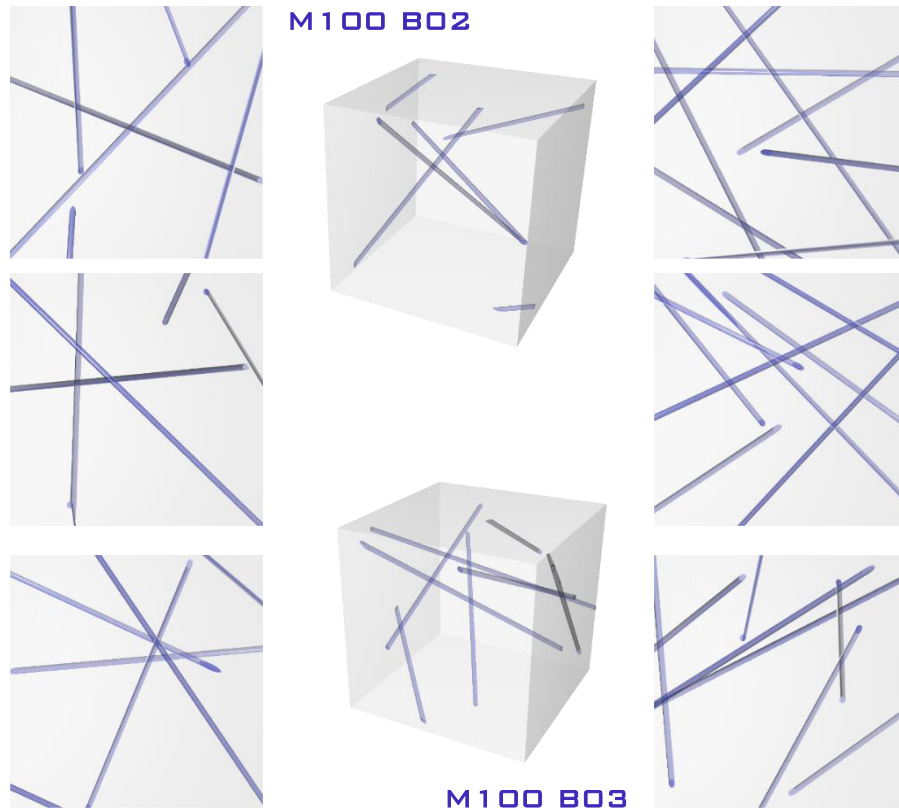


M50 B15	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	50	nm
Densidad buscada	1,5 %	
Densidad real	1,5 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	9	

Exposición de modelos

M100 B02	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	100	nm
Densidad buscada	0,2 %	
Densidad real	0,2 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	6	

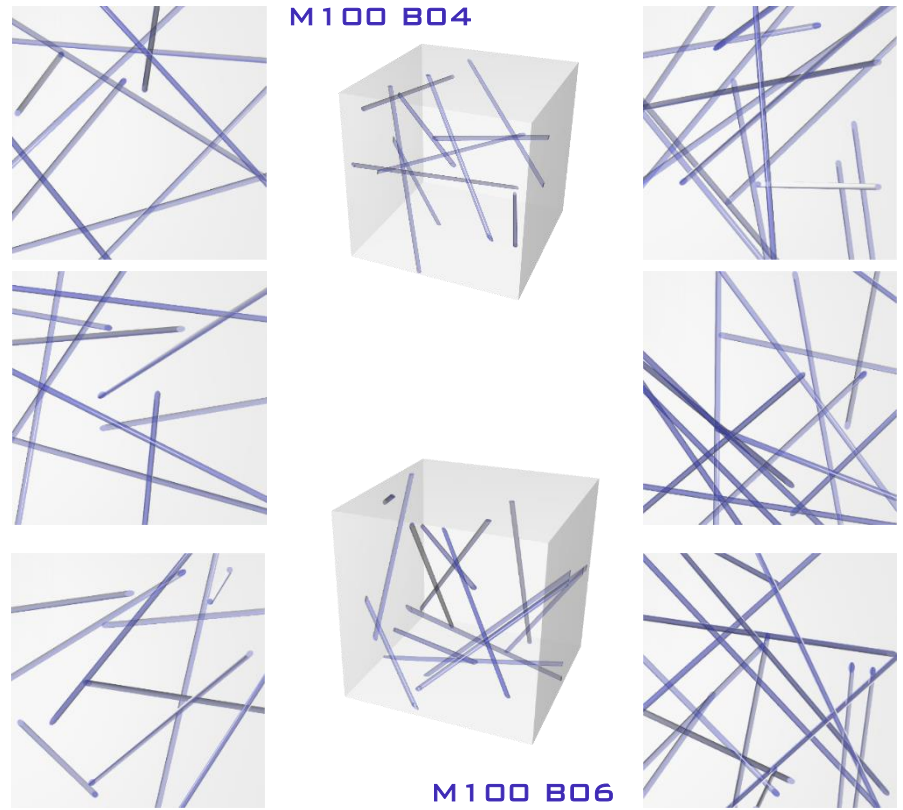
M100 B04	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	100	nm
Densidad buscada	0,4 %	
Densidad real	0,4 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	10	



M100 B02

M100 B03

M100 B03	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	100	nm
Densidad buscada	0,3 %	
Densidad real	0,3 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	8	



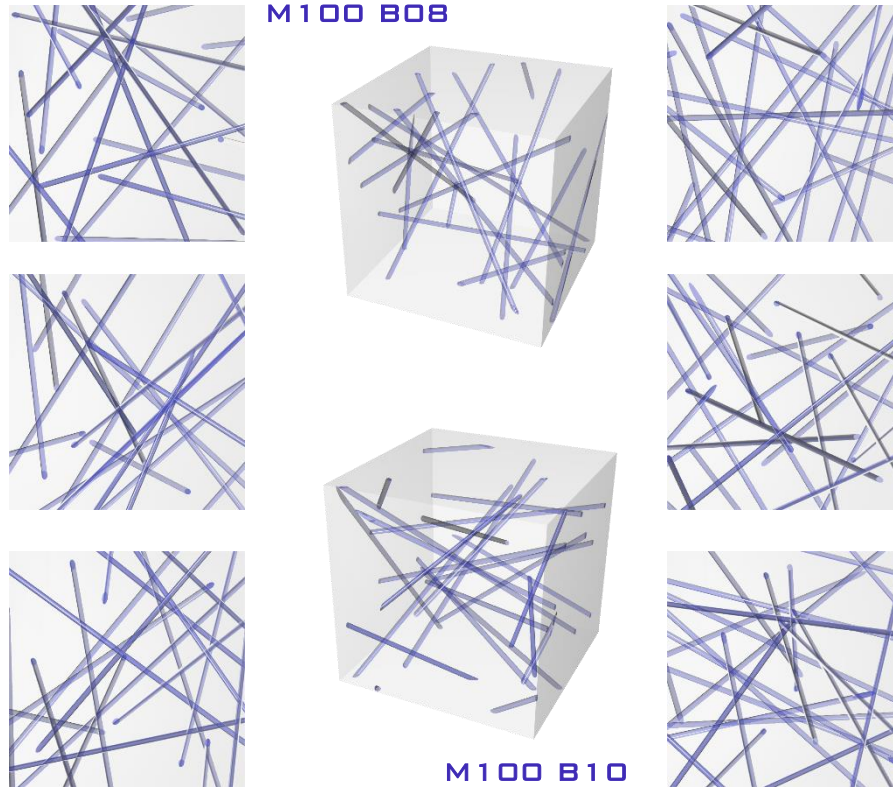
M100 B04

M100 B06

M100 B06	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	100	nm
Densidad buscada	0,6 %	
Densidad real	0,6 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	15	

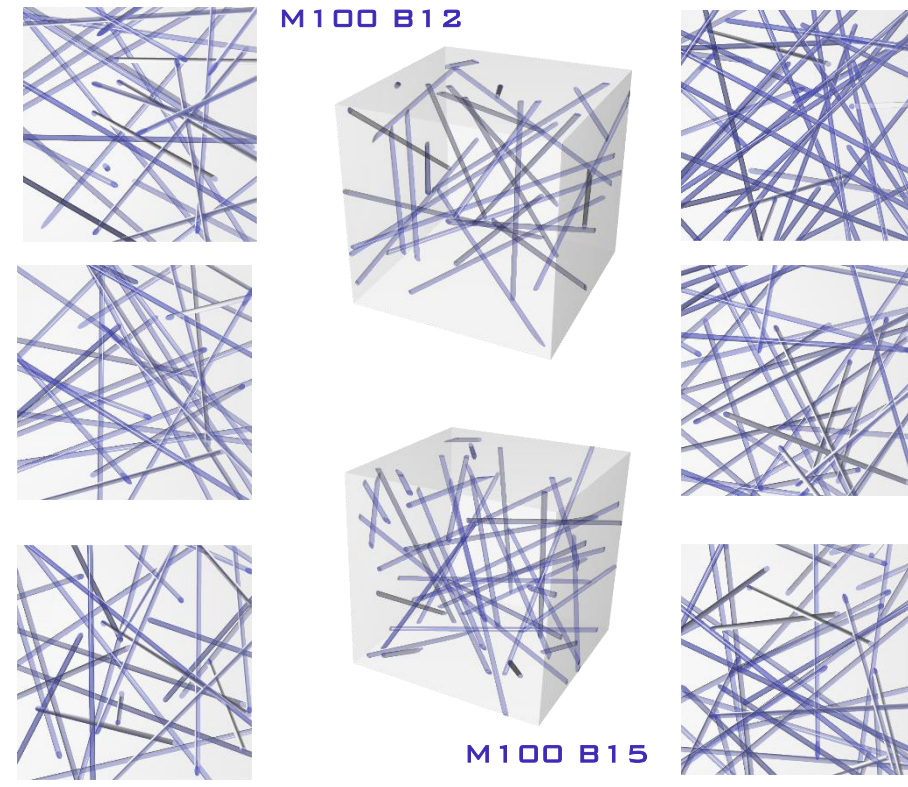
Exposición de modelos

M100 B08	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	100	nm
Densidad buscada	0,8 %	
Densidad real	0,8%	
Cuanfía de nanotubos de carbono	20	



M100 B10	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	100	nm
Densidad buscada	1,0 %	
Densidad real	1,0 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	25	

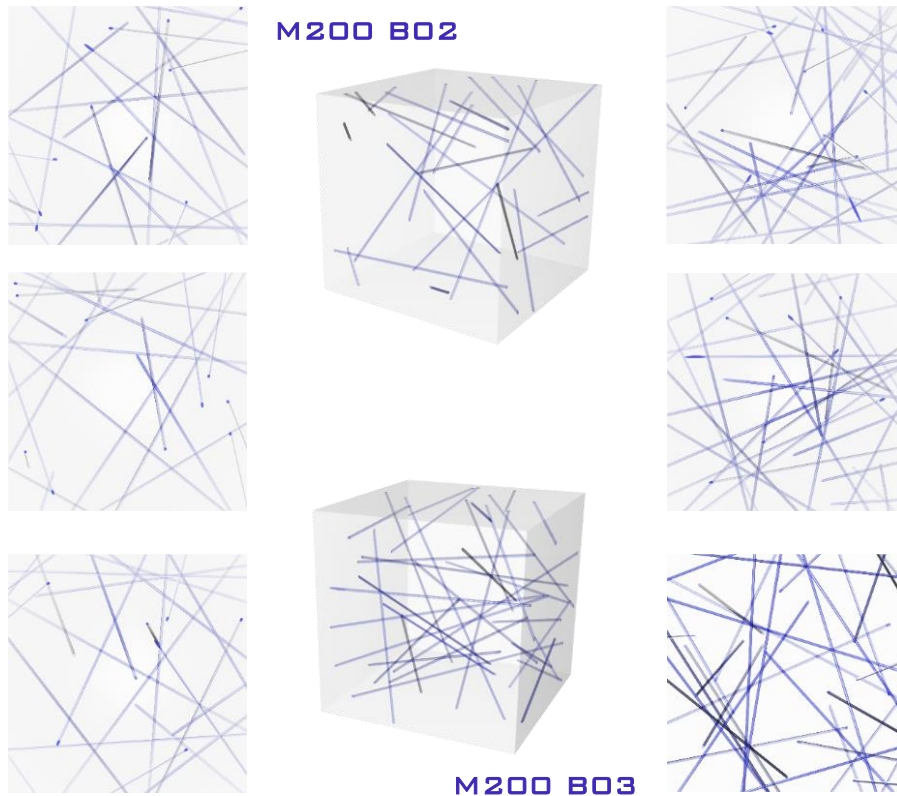
M100 B12	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	100	nm
Densidad buscada	1,2 %	
Densidad real	1,2 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	30	



M100 B15	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	100	nm
Densidad buscada	1,5 %	
Densidad real	1,5 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	40	

Exposición de modelos

M200 B02	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	200	nm
Densidad buscada	0,2 %	
Densidad real	0,2 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	20	

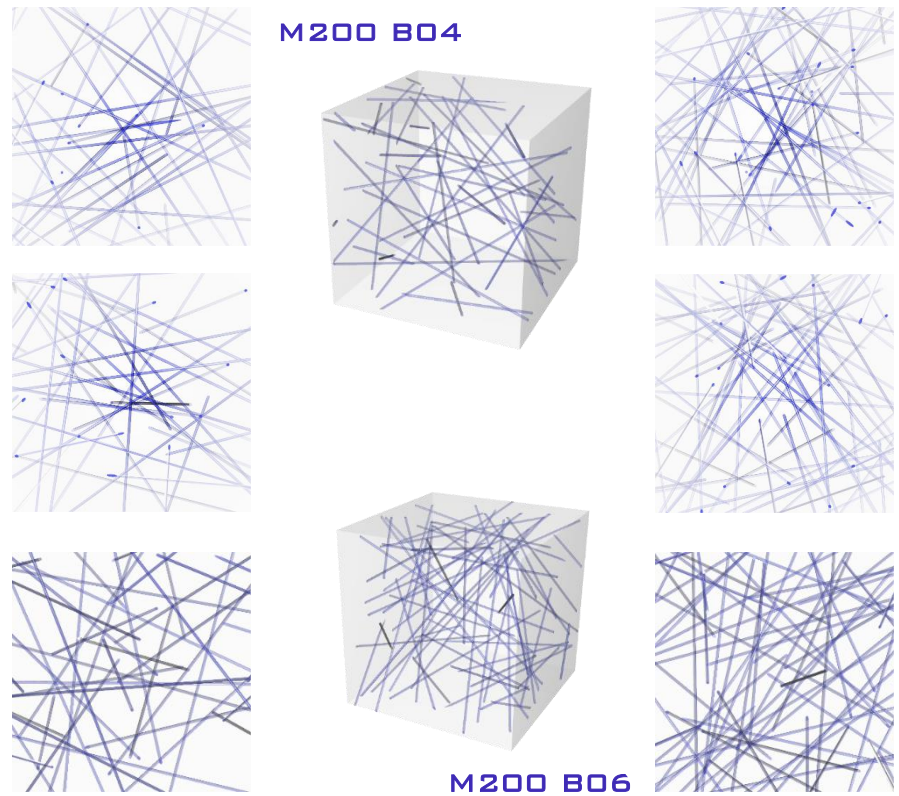


M200 B02

M200 B03

M200 B03	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	200	nm
Densidad buscada	0,3 %	
Densidad real	0,3 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	30	

M200 B04	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	200	nm
Densidad buscada	0,4 %	
Densidad real	0,4 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	45	



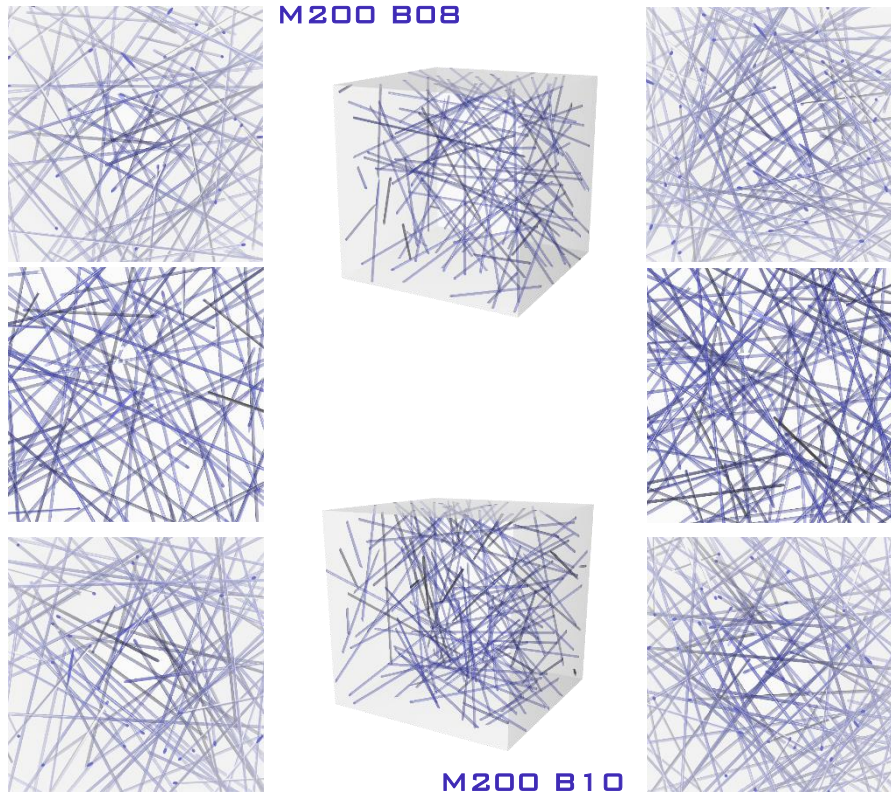
M200 B04

M200 B06

M200 B06	La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros	
Lado del hexaedro	200	nm
Densidad buscada	0,6 %	
Densidad real	0,6 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	65	

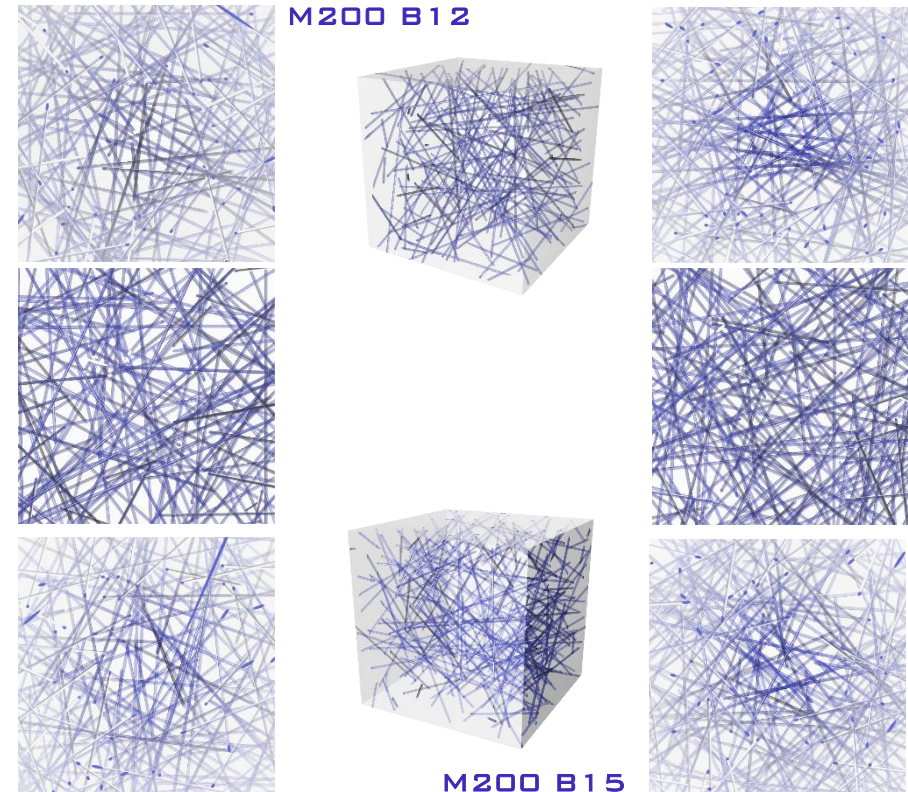
Exposición de modelos

M200 B08 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	200	nm
Densidad buscada	0,8 %	
Densidad real	0,8 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	90	



M200 B10 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	200	nm
Densidad buscada	1,0 %	
Densidad real	1,0 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	120	

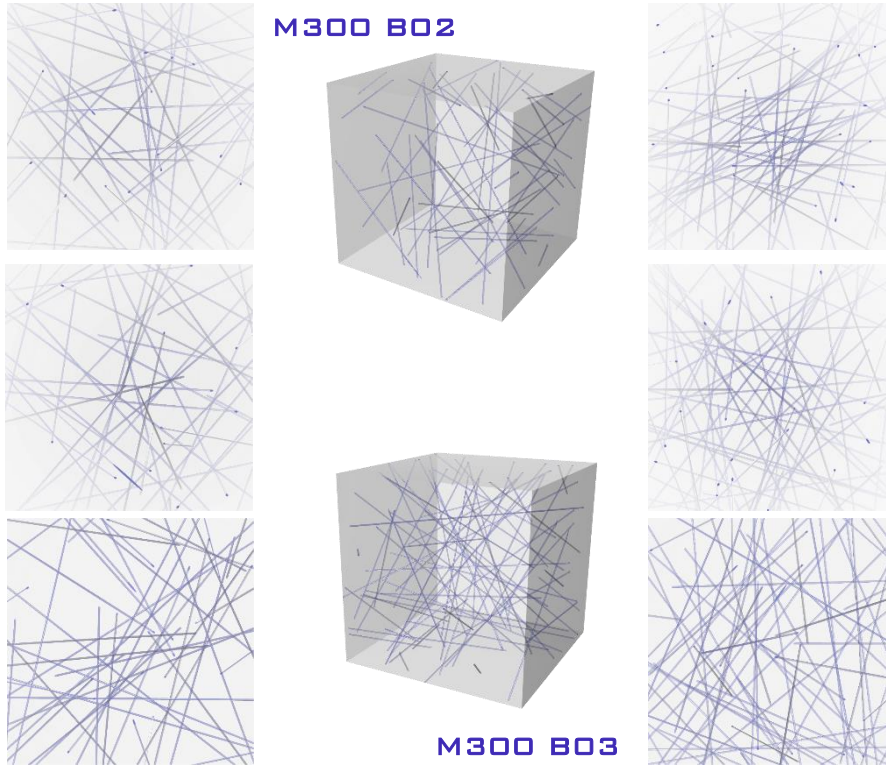
M200 B12 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	200	nm
Densidad buscada	1,2 %	
Densidad real	1,26 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	150	



M200 B15 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	200	nm
Densidad buscada	1,5 %	
Densidad real	1,52 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	190	

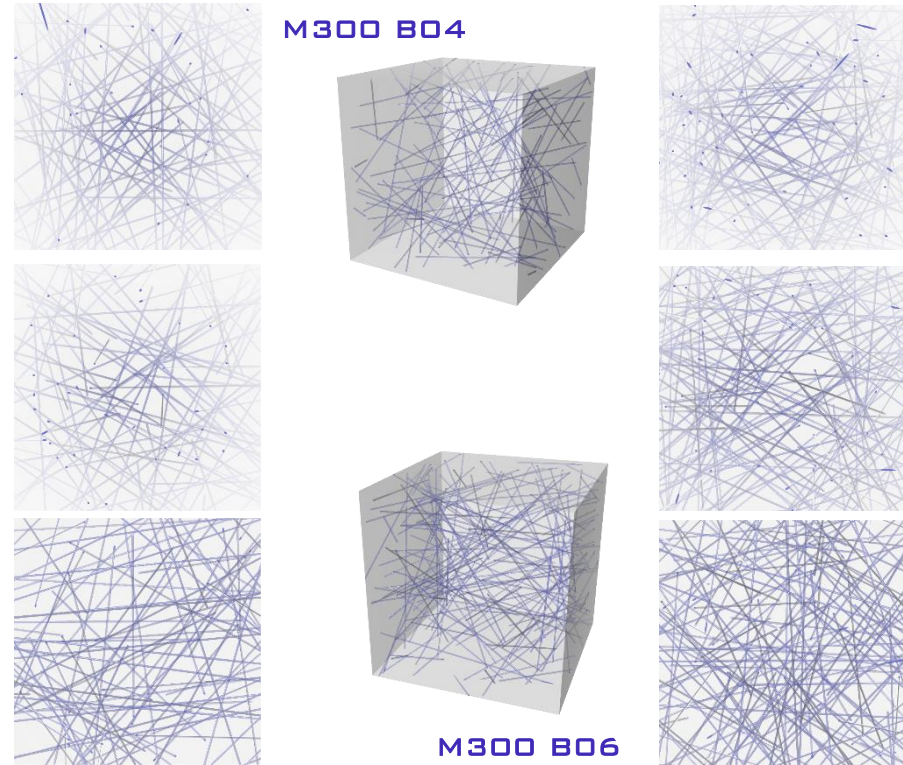
Exposición de modelos

M300 B02 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	300	nm
Densidad buscada	0,2 %	
Densidad real	0,2 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	50	



M300 B03 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	300	nm
Densidad buscada	0,3 %	
Densidad real	0,3 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	70	

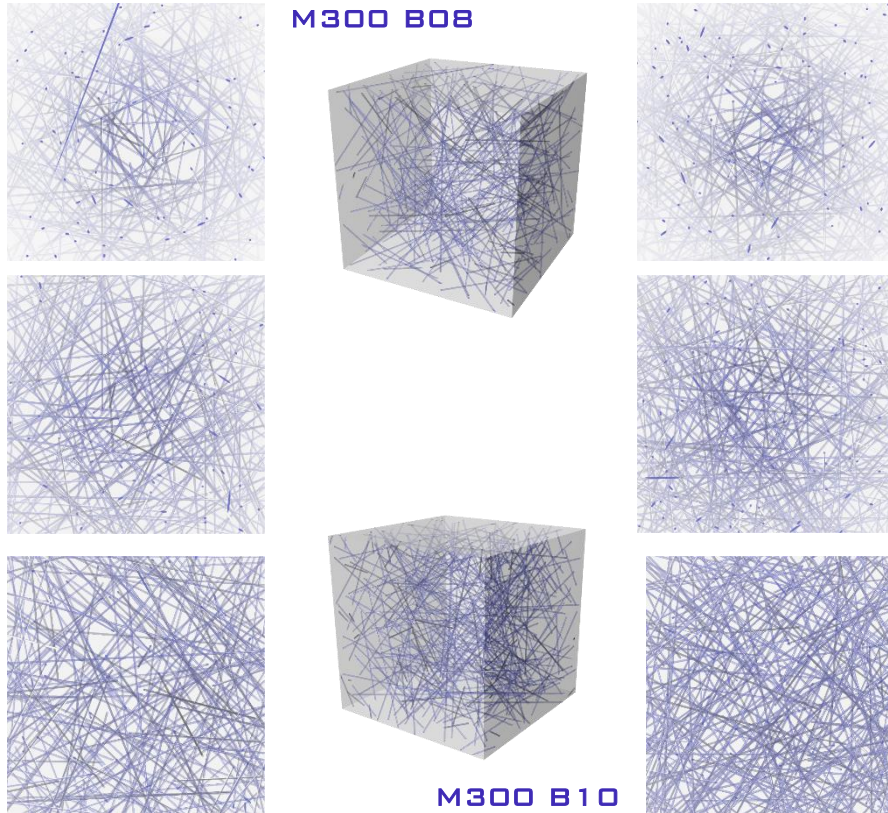
M300 B04 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	300	nm
Densidad buscada	0,4 %	
Densidad real	0,4 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	100	



M300 B06 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	300	nm
Densidad buscada	0,6 %	
Densidad real	0,6 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	150	

Exposición de modelos

M300 B08 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	300	nm
Densidad buscada	0,8 %	
Densidad real	0,82 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	220	

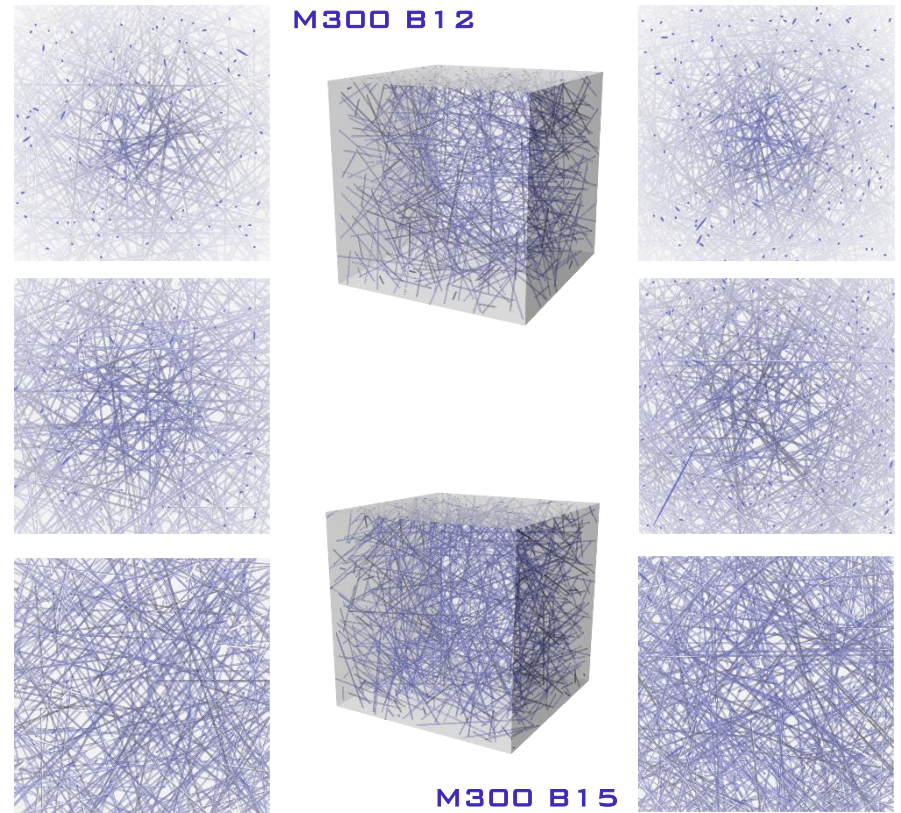


M300 B08

M300 B10

M300 B10 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	300	nm
Densidad buscada	1,0 %	
Densidad real	1,01 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	290	

M300 B12 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	300	nm
Densidad buscada	1,2 %	
Densidad real	1,19 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	350	



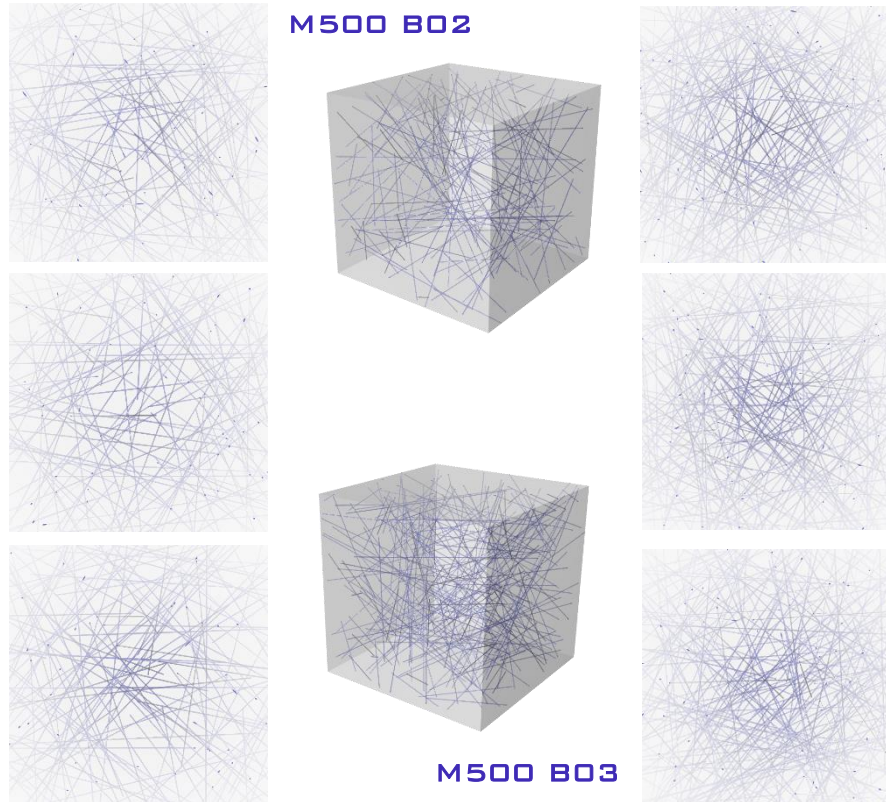
M300 B12

M300 B15

M300 B15 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	300	nm
Densidad buscada	1,5 %	
Densidad real	1,52 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	500	

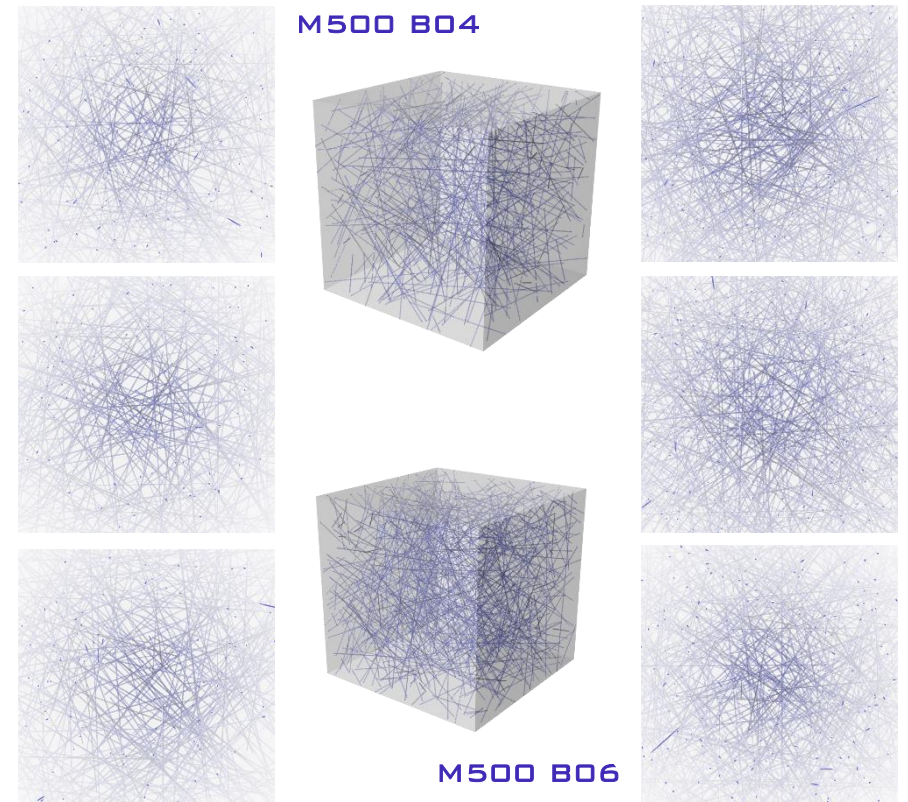
Exposición de modelos

M500 B02 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	500	nm
Densidad buscada	0,2 %	
Densidad real	0,2 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	140	



M500 B03 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	500	nm
Densidad buscada	0,3 %	
Densidad real	0,31 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	210	

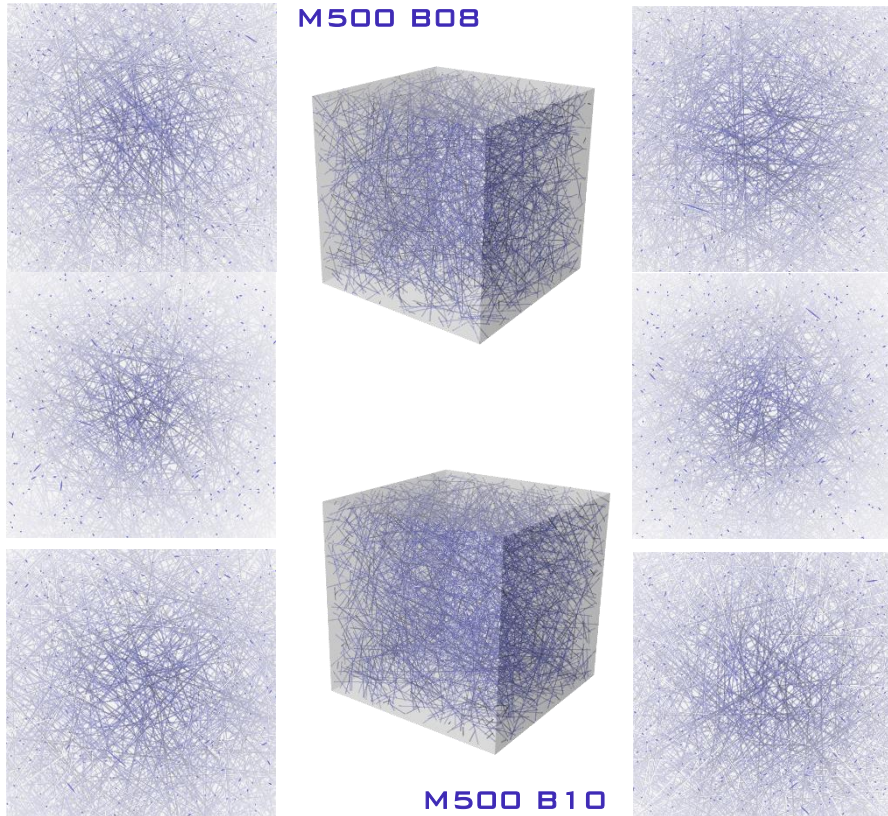
M500 B04 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	500	nm
Densidad buscada	0,4 %	
Densidad real	0,4 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	300	



M500 B06 La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	500	nm
Densidad buscada	0,6 %	
Densidad real	0,61 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	450	

Exposición de modelos

M500 B08		
La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	500	nm
Densidad buscada	0,8 %	
Densidad real	0,82 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	830	

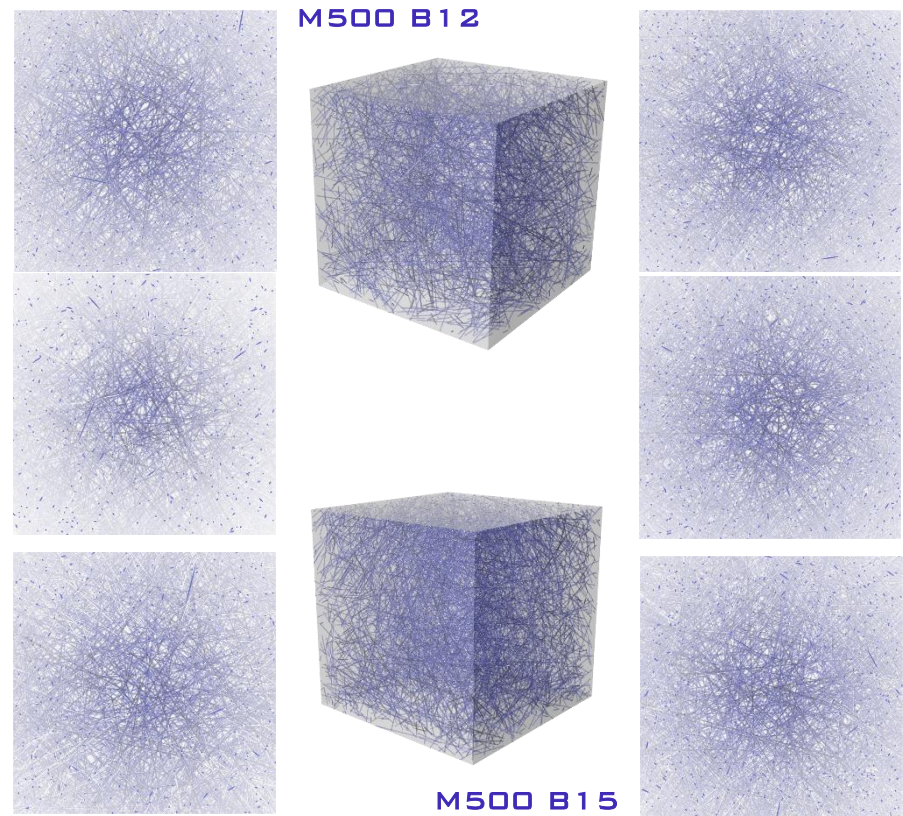


M500 B08

M500 B10

M500 B10		
La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	500	nm
Densidad buscada	1,0 %	
Densidad real	1,03 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	1000	

M500 B12		
La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	500	nm
Densidad buscada	1,2 %	
Densidad real	1,21 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	1300	



M500 B12

M500 B15

M500 B15		
La muestra se generó respecto a los siguientes parámetros		
Lado del hexaedro	500	nm
Densidad buscada	1,5 %	
Densidad real	1,52 %	
Cuanfía de nanotubos de carbono	1870	

Anexo IV: algoritmo de mallado en ICEM

lenguaje Tcl

```
# Getting the installation path
global env
set icemenv $env(ICEM_ACN)
#####
# set tcl_precision 14
#### PARAMETROS DE ENTRADA. FICHEROS ####
## Muestras B50 B100 B200 B300 B500 ##
set Muestra M500
## Densidad de Volumen Fv B02 B03 B04 B06 B08 B10 B12 B15
set Fv B10
#####
# Ruta del directorio de trabajo para ICEM
set workspace "C:\DirectorioTrabajo"
file mkdir $workspace
# Nombre del fichero de RHINO
set output "$Muestra-$Fv"
# Ruta donde se encuentran los ficheros con las coordenadas de los
Centros de Gravedad
set pxyzDir "C:\DirectorioTrabajo"
# Nombre del fichero de coordenadas de los Centros de Gravedad
set pxyzFile "$Muestra-$Fv-GC.txt"
# Cambiar el directorio de trabajo
ic_chdir $workspace
```

```
# Importar el fichero de Rhino a .tin
# Definir las variables de rutas
set r3dm "$output.3dm"
set ruta3dm "C:\DirectorioTrabajo"
set rutaTin $workspace/$output.tin
#
#
ic_exec "$icemenv/bin/3dm2tin" -a $ruta3dm/$r3dm $rutaTin
# Cargar el fichero .tin
#
ic_load_tetin $rutaTin
#
# Cambiar de unidades si es necesario
ic_geo_set_units nm
#
#####
# Definir de los parametros de mallado globales
# M50 (1.0, 4.0, 0.75)
# M100 (1.0, 8.0, 0.75)
# M200 (1.0, 16.0, 0.75)
# M300 (1.0, 24.0, 0.75)
# M500 (1.0, 32.0, 0.75)
#####
#
#
#
```

```

#
# UNIDADES DE MEDIDA. nanometros
set meshScale 1.0 ; # ES LA MISMA UNIDAD QUE EN RHINO
set meshSeed 32.0 ; # SEMILLA GLOBAL (nanometros)
set meshSeedCnts 0.75; # SEMILLA DE LOS CNTs (nanometros)
#
#####
#
# Factor de escala global
ic_geo_scale_meshing_params all $meshScale
# Parametros globales de la semilla
ic_set_meshing_params global 0 gref $meshScale gmax $meshSeed
gfast 0 gedgrec 0.2 gnat 0 gcgcap 1 gnatref 10

# Listado de partes (geometria) previo a mallar
set listFamilyParts [ic_geo_non_empty_families]
# Lista con los indices de parts que contienen CNTs
set cntFamilyParts [lsearch -regexp -all $listFamilyParts CNT]

# Crear de lineas y puntos
ic_geo_delete_unattached $listFamilyParts 0 1
ic_build_topo 0.04 -angle 30 -filter_points -filter_curves -no_concat
$listFamilyParts
ic_geo_delete_unattached $listFamilyParts
#
#####
#

```

```

#
# Crear una lista con el numero de centroides
set file [open $pxyzDir/$pxyzFile { RONLY } ]
while { [gets $file linea ] >= 0 } {
    # Se procesa la variable "linea"
    set linea [join $linea]
    lappend pxyz $linea
}
close $file
#
set cnt "CNT"
for {set i 0} {$i < [llength $pxyz]} {incr i 1} {
    set j [expr $i+1]
    set j $cnt$j
    lappend centroidNumber $j
}
#
for {set i 0} {$i < [llength $pxyz]} {incr i 1} {
    set j [lindex $pxyz $i]
    set j [split $j ,]
    lappend coord [lindex $j 0]
    lappend coord [lindex $j 1]
    lappend coord [lindex $j 2]
    ic_geo_new_family [lindex $centroidNumber $i]
    ic_boco_set_part_color [lindex $centroidNumber $i]
    ic_geo_create_volume $coord {} [lindex $centroidNumber $i]
}

```

```

unset coord
}
set box BOX
ic_geo_new_family box
ic_boco_set_part_color box
# HARDPOINT para BOX, muy cerca del CDG
ic_geo_create_volume {1 1 1} {} box
ic_point {} GEOM pnt.01 0,0,0
#
lappend namePartsTetra $box
lappend namePartsTetra $centroidNumber
set namePartsTetra [join $namePartsTetra]
#####
#
# Asignar de semilla a cada PART
ic_geo_set_family_params G_CNTS no_crv_inf prism 0 emax
$meshSeedCnts ehgt 0.0 hrat 0 nlay 0 \
          erat 0 ewid 0 emin 0.0 edev 0.0 split_wall 0 internal_wall
0
#
# GENERAR MALLADO DE TETRAEDROS
ic_run_tetra $rutaTin \
    C:\DirectorioTrabajo\
    run_cutter 1 delete_auto 1 run_smoother 0 fix_holes 1
n_processors 6 in_process 1 \
    log ./tetra_cmd.log
ic_smooth_elements map all upto 0.4 iterations 5 fix_families {}
n_processors 6 \

```

```

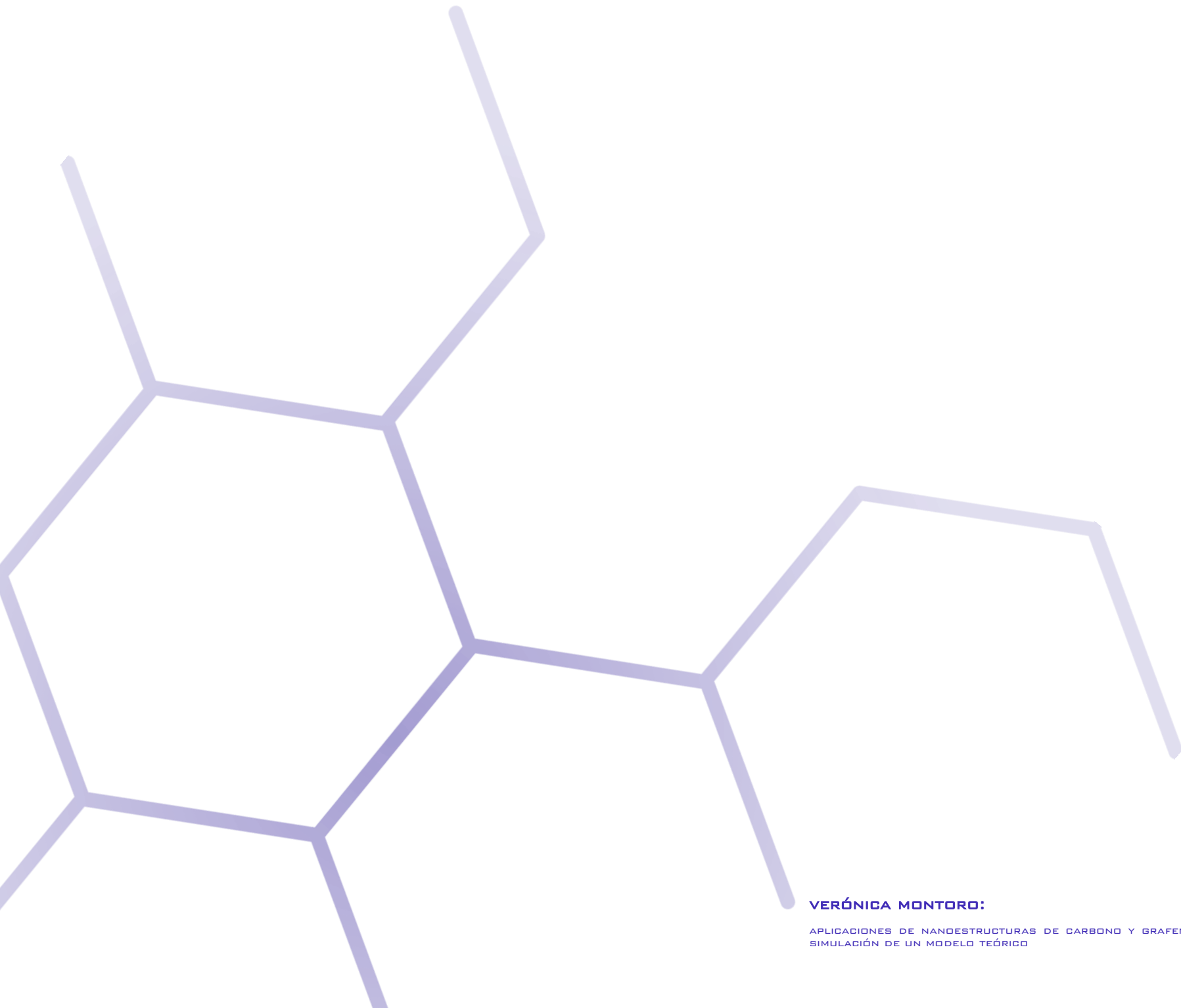
smooth TRI_3 float TETRA_4 laplace 1
ic_smooth_elements map all upto 0.4 iterations 5 prism_warp_weight
0.5 fix_families {} n_processors 6 \
    smooth TETRA_4 float PENTA_6 freeze TRI_3
ic_smooth_elements map all upto 0.4 iterations 5 prism_warp_weight
0.5 fix_families {} \
    metric Quality n_processors 6 smooth TETRA_4 smooth TRI_3 float
PENTA_6
#
# Listado de partes malladas. Tanto superficies como volúmenes
set listFamilyMesh [ic_uns_non_empty_families]
set listFamilyMat [ic_uns_list_material_numbers]
#
# GRABAR LA BASE DE DATOS DEL MALLADO
ic_save_unstruct $output.uns 1 {} {} {}
#
# VERIFICAR QUE EL MALLADO ESTA CARGADO
ic_uns_is_loaded
#
# Preparar la estructura de directorios para exportar la salida de los
resultados
if {[file exists $pxyzDir/$output] == 1} {
    file delete -force $pxyzDir/$output
    file mkdir $pxyzDir/$output
} else {
    file mkdir $pxyzDir/$output
}
#

```



```

#
# Determinacion de numero de nodos y elementos
set nodeNumber [ic_count_nodes]
set elementsNumber [ic_count_elements TETRA_4]
set filename "Mesh_side.txt"
set fileld [open $pxyzDir/$output/$filename {CREAT TRUNC WRONLY}]
#
    puts $fileld "Numero de nodos: $nodeNumber"
    puts $fileld "Numero de elementos: $elementsNumber"
    puts $fileld "Semilla BOX (nm): $meshSeed"
    puts $fileld "Semilla CNTs (nm): $meshSeedCnts"
#
close $fileld
#
#####
#
ic_uns_renumber_nodes all 1 1 {0 0 0}
ic_uns_renumber_elements all 1 1 {0 0 0}
#
#####
#
ic_save_tetin $output.tin 0 0 {} {} 0 0 1
ic_uns_check_duplicate_numbers
ic_save_unstruct $output.uns 1 {} {} {}
ic_unload_mesh 0
ic_unload_tetin 0
    
```

VERÓNICA MONTORO:

APLICACIONES DE NANOSTRUCTURAS DE CARBONO Y GRAFENO EN ARQUITECTURA
SIMULACIÓN DE UN MODELO TEÓRICO