


# Simulación de propiedades mecánicas de un síntesis de nanotubos de carbono de pared simple (SWNT) mediante dinámica molecular

Investigación de la quiralidad, resistencia a la tensión (EA), rigidez de flexión (EI) y resistencia a la torsión (EJ)

Carlos R. Primo S. 

Universidad Mayor de San Marcos, Facultad de Ciencias Físicas, Lima, Perú

**Resumen:** Texto do resumo. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Duis ut elementum libero, tincidunt pellentesque quam. Cras id vulputate diam. Curabitur metus lorem, feugiat vel ipsum vulputate, mattis mollis lacus. Duis lectus velit, dignissim et neque ac, venenatis mattis quam. Duis commodo vestibulum sapien at volutpat. Phasellus pretium ipsum magna, porta mollis metus venenatis eu. Vestibulum ante ipsum primis in faucibus orci luctus et ultrices posuere cubilia curae; Nulla facilisis arcu nibh, viverra blandit tellus feugiat a. Proin porttitor ex vel dolor vestibulum varius ut ut ante.

**Palabras clave:** palavras;chave;português

**Abstract:** *Abstract text. Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Pellentesque pellentesque lacinia erat, vitae lacinia nulla tincidunt ac. Suspendisse nibh libero, aliquam eget bibendum a, pulvinar eget urna. Nulla ac nunc augue. Donec vehicula dictum sapien eget gravida. Suspendisse lobortis nulla libero, eu dapibus tellus facilisis id. Donec pretium nunc varius finibus consequat. Integer viverra nibh eget nunc dapibus maximus. Mauris egetas neque vitae nulla condimentum, at euismod purus hendrerit. Curabitur dignissim arcu sem, at imperdiet urna iaculis vel. Cras rhoncus nunc quis neque volutpat, in pretium turpis convallis. Aliquam at varius dolor. Aenean a lobortis sem. Phasellus eget porttitor risus.*

**Keywords:** key;words;english

## 1. Introducción

Breve texto de desucbrimeiento e imporatacia (Text of Ijima, Indis, and URSS) [3] [4]  
Porque se emplea dinamica molecular en este trabajo [6], [7] Detalles en incovenientes [5] Aplicaciones mecanicas particulares [1], [2]

## 2. Modelo mecanico de simulacion

Descripcion de la notacion  $(n,m)$  para la cracterizacion del nanotubo de carbono [1]  
grafica 1  
El vector de quiralidad que caracteriza un nanotubo de cabono (CNT) se expresa mediante la notación  $(n, m)$  donde  $n$  y  $m$  representan números enteros escalares de los vectores  $a_1$  y  $a_2$  respectivamente (ver figura 1)

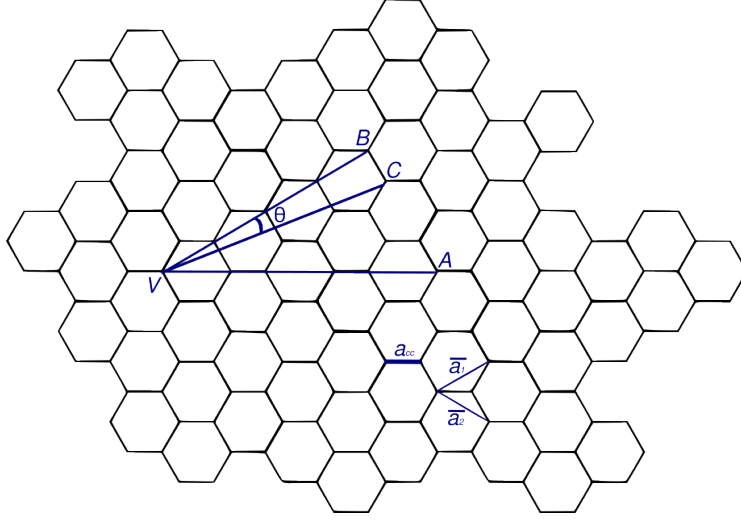


Figura 1: Caption

$$\vec{C}_v = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2 = (n, m), \text{ tal que } |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = \sqrt{3}a_{cc} \quad (1)$$

$$|\vec{C}_v| = a_{cc}\sqrt{n^2 + m^2 + mn} \quad (2)$$

en coordenadas cartesianas

$$\vec{C}_v = \frac{a_{cc}\sqrt{3}}{2}(\sqrt{3}\hat{i} + \hat{j}) \quad (3)$$

El diámetro del nanotubo seria  $d = |\vec{C}_v|/\pi$ , ademas se deduce de las graficas y ecuaciones

$$\cos \theta = \frac{2n + m}{2\sqrt{n^2 + m^2 + mn}} \quad (4)$$

- Explicación detallada de los métodos de simulación por dinámica molecular empleados en el estudio.
- Descripción del potencial empírico utilizado y su validación mediante comparación con valores experimentales.
- Consideraciones adicionales en los cálculos de energía y estructura de moléculas de hidrocarburos y superficies de diamante.

### 3. Resultados y discusión

- Presentación y análisis de los resultados obtenidos a partir de la simulación por dinámica molecular.
- Discusión de las energías de adsorción de moléculas en superficies de diamante y su relevancia para el crecimiento de SWNT.
- Análisis de las propiedades de energía y estructura de los SWNT simulados, comparándolos con los valores experimentales cuando estén disponibles.
- Interpretación de los resultados y su relación con los mecanismos de crecimiento y síntesis de SWNT.

## 4. Conclusiones

- Resumen de los hallazgos más relevantes del estudio.
- Reflexión sobre la contribución del enfoque de simulación por dinámica molecular en el entendimiento del crecimiento y síntesis de SWNT.
- Posibles direcciones futuras de investigación y mejoras en los métodos de simulación.

## Referencias

- [1] Antonio Ferreira Ávila y Guilherme Silveira Rachid Lacerda. “Molecular mechanics applied to single-walled carbon nanotubes”. En: *Mat. Res.* 11.3 (2008). Selected articles from IV Congresso Brasileiro de Carbono (VI Brazilian Congress of Carbon), November 18-22, 2007, Gramado - RS. DOI: [10.1590/S1516-14392008000300016](https://doi.org/10.1590/S1516-14392008000300016).
- [2] Jie Chen, Gang Zhang y Baowen Li. “Molecular Dynamics Simulations of Heat Conduction in Nanostructures: Effect of Heat Bath”. En: *J. Phys. Soc. Jpn.* 79 (2010). Submitted on 25 May 2010. This manuscript is accepted for publication in JPSJ, pág. 074604. DOI: [10.1143/JPSJ.79.074604](https://doi.org/10.1143/JPSJ.79.074604).
- [3] Sumio Iijima. “Helical microtubules of graphitic carbon”. En: *Nature* 354 (1991), págs. 56-58. DOI: [10.1038/354056a0](https://doi.org/10.1038/354056a0). URL: <https://www.nature.com/articles/354056a0#citeas>.
- [4] Marc Monthieux y Vladimir L. Kuznetsov. “Guest Editorial: Who should be given the credit for the discovery of carbon nanotubes?” En: *Carbon* 44 (2006). This article has appeared in CARBON 44 (2006) 1621, pág. 1621. DOI: [10.1016/j.carbon.2006.03.019](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2006.03.019).
- [5] K. Mylvaganam y L.C. Zhang. “Important issues in a molecular dynamics simulation for characterising the mechanical properties of carbon nanotubes”. En: *Carbon* 42.10 (2004), págs. 2025-2032. DOI: [10.1016/j.carbon.2004.04.004](https://doi.org/10.1016/j.carbon.2004.04.004).
- [6] Lida Najmi y Zhong Hu. “Review on Molecular Dynamics Simulations of Effects of Carbon Nanotubes (CNTs) on Electrical and Thermal Conductivities of CNT-Modified Polymeric Composites”. En: *Journal Name* Volume Number.Issue Number (2023), Page Range. DOI: [10.3390/jcs7040165](https://doi.org/10.3390/jcs7040165).
- [7] Yasushi Shibuta y Shigeo Maruyama. “Molecular dynamics simulation of formation process of single-walled carbon nanotubes by CCVD method”. En: *Chemical Physics Letters* 382.3-4 (2003), págs. 381-386. DOI: [10.1016/j.cplett.2003.10.080](https://doi.org/10.1016/j.cplett.2003.10.080).