

# Un modelo de constantes de fuerza para el grafeno

Trabajo de Fin de Máster

Rafael Serrano Bello

Tutora: Pilar Ariza Moreno

Máster en Diseño Avanzado en Ingeniería Mecánica, 2007-2008

*Escuela Superior de Ingenieros, Universidad de Sevilla*

# Índice

## 1. Introducción

Los nanotubos de carbono, estructuras tubulares de átomos de carbono enlazados formando dichos átomos celdas hexagonales, son hoy en día una de las disposiciones de la materia más estudiadas en el campo de la nanotecnología (Kostoff, 2006). Desde que Iijima sintetizara y caracterizara su estructura (Iijima, 1991) no han cesado de aparecer nuevas propiedades mecánicas, ópticas, eléctricas, o magnéticas (Saito, 1998), que las convierten en estructuras extremadamente interesantes. Si bien se conocía su existencia desde hace unas décadas (Oberlin, 1976), no ha sido hasta el redescubrimiento de Iijima que se han comenzado a explorar masivamente sus muchas posibilidades.

Una de las maneras de afrontar su estudio es el de comprender que un nanotubo puede ser modelado como una lámina de grafeno enrollada hasta formar un tubo. El grafeno es una lámina monoatómica de átomos de carbono, enlazados en forma de panel de abeja. El ángulo con el que se enrolla la lámina tiene importantes consecuencias. Así, por ejemplo, desde el punto de vista magnético, tres maneras distintas de enrollar la lámina darían lugar a tres variedades de nanotubos de carbono: metálicos, cuasimetálicos y semiconductores.

Es, desde muchos puntos de vista, interesante el atacar el estudio de nanotubos desarrollando primero un modelo de la estructura del grafeno. Se puede optar para ello por acudir a una función potencial (Brenner,1990; Finnis y Sinclair, 1984), linealizándola convenientemente para así obtener una expresión manejable de la energía (Ramasubramaniam, Ariza y Ortiz,2007) o bien desarrollar un modelo constantes de fuerza (Born, Huang, 1954; Sengupta, 1988; Falkovsky,2007; Kundu,2007;Nicholson y Bacon;1977).

Habitualmente, al hablar de constantes de fuerza se sobreentiende que nos referimos a fuerzas entre átomos de la red cristalina. Es posible, sin embargo, y muy útil desde el punto de vista del estudio de mecánica de dislocaciones el papel que juega la aparición de defectos en la red (Bulatov y Cai, 2006; Liu, Karpov y Park,2006), construir un modelo de constantes de fuerza entre aristas. Según (Ariza y Ortiz, 2005), podemos escribir la expresión de la energía en una red armónica cristalina en función de los desplazamientos de sus átomos utilizando unas u otras constantes como sigue:

$$E(u) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{[-\pi,\pi]} \frac{1}{2} \langle \hat{\Phi}(\theta)\hat{u}(\theta), \hat{u}^*(\theta) \rangle d\theta \quad (1)$$

$$E(u) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{[-\pi,\pi]} \frac{1}{2} \langle \hat{\Psi}(\theta)P^*(\theta)\hat{u}(\theta), P(\theta)\hat{u}^*(\theta) \rangle d\theta \quad (2)$$

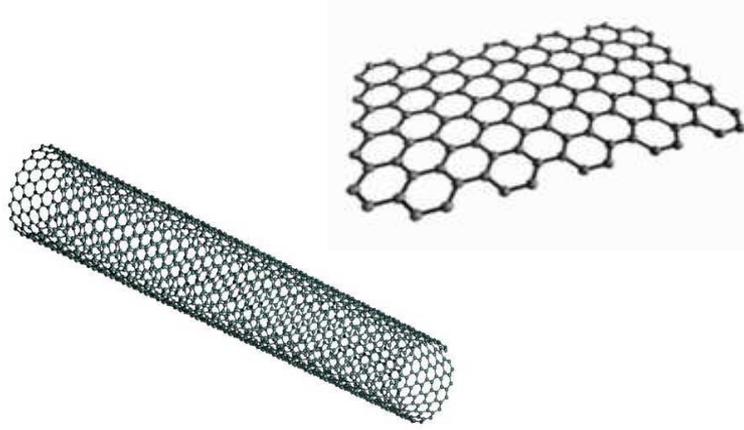


Figura 1: A la izquierda, estructura de nanotubo de carbono. A la derecha, lámina de grafeno.

siendo  $\hat{\Phi}(\theta)$  y  $\hat{\Psi}(\theta)$  las matrices que recogen las respectivas transformadas de Fourier de las matrices de constantes de fuerza  $\Psi \begin{pmatrix} l \\ \alpha\beta \end{pmatrix}$  (constante de fuerza que liga  $u(0,\alpha)$  con  $u(1,\beta)$ ) y  $\Phi(l)$  (constante de fuerza que liga  $u(0)$  y  $u(1)$ ).

En lo que sigue se hallarán las matrices de constante de fuerza entre átomos del grafeno aplicando las simetrías que posee como red cristalina, y se utilizará un modelo de interacciones entre átomos propuesto por Aizawa para calcular numéricamente dichas constantes, previo cálculo de las constantes de fuerza entre aristas.

## 2. Complejo simplicial del grafeno

La red hexagonal queda definida por sus vectores básicos  $\vec{a}_1$  y  $\vec{a}_2$  (véase figura 2). Haciendo uso del esquema del complejo simplicial, en el que se especifica la convención de orientaciones entre las dos 0-celdas, las tres 1-celdas y la única 2-celda (véase (Ariza y Ortiz, 2005) para una más extensa introducción a la interpretación de estos esquemas, o bien (Munkres, 1984)) las escribimos las reglas que determinan los operadores de contorno y co-contorno.

We also can align several equations:

$$\partial e_1(l, 1) = e_0(l, 1) - e_0(l + \varepsilon_2, 2) \quad (3a)$$

$$\partial e_1(l, 2) = e_0(l, 1) - e_0(l, 2) \quad (3b)$$

$$\partial e_1(l, 3) = e_0(l, 1) - e_0(l + \varepsilon_3, 2) \quad (3c)$$

$$\begin{aligned} \partial e_2(l) = & -e_1(l, 1) - e_1(l + \varepsilon_1, 3) + e_1(l + \varepsilon_1, 2) \\ & + e_1(l - \varepsilon_3, 1) - e_1(l - \varepsilon_3, 3) + e_1(l, 2) \end{aligned} \quad (3d)$$

$$\partial e_1(l, 1) = e_0(l, 1) - e_0(l + \varepsilon_2, 2) \quad (4a)$$

$$\partial e_1(l, 2) = e_0(l, 1) - e_0(l, 2) \quad (4b)$$

$$\partial e_1(l, 3) = e_0(l, 1) - e_0(l + \varepsilon_3, 2) \quad (4c)$$

$$\begin{aligned} \partial e_2(l) = & -e_1(l, 1) - e_1(l + \varepsilon_1, 3) + e_1(l + \varepsilon_1, 2) \\ & + e_1(l - \varepsilon_3, 1) - e_1(l - \varepsilon_3, 3) + e_1(l, 2) \end{aligned} \quad (4d)$$

$$\delta e^0(l, 1) = e^1(l, 1) + e^1(l, 2) + e^1(l, 3) \quad (5a)$$

$$\delta e^0(l, 2) = -e^1(l, 2) - e^1(l - \varepsilon_3, 2) - e^1(l - \varepsilon_2, 3) \quad (5b)$$

$$\delta e^1(l, 1) = -e^2(l) + e^2(l + \varepsilon_3) \quad (6a)$$

$$\delta e^1(l, 2) = e^2(l) - e^2(l - \varepsilon_1) \quad (6b)$$

$$\delta e^1(l, 3) = e^2(l - \varepsilon_1) - e^2(l + \varepsilon_3) \quad (6c)$$

Donde se ha tenido en cuenta que  $\varepsilon_1 = (1, 0)$ ,  $\varepsilon_2 = (0, 1)$  y  $\varepsilon_3 = (-1, 1)$ . De las anteriores reglas se sigue la representación del complejo simplicial mediante sus transformadas de Fourier discretas, a saber:

$$Q_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ -e^{-i\theta_2} & -1 & -e^{i(\theta_1 - \theta_2)} \end{pmatrix} \quad (7)$$

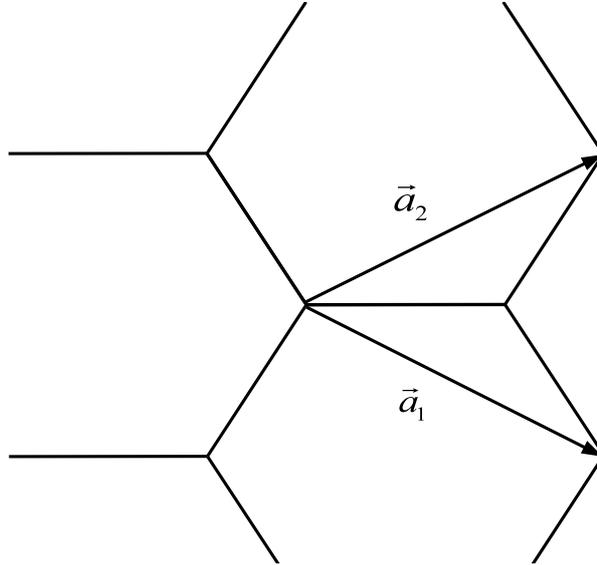


Figura 2: Vectores básicos de la red hexagonal.

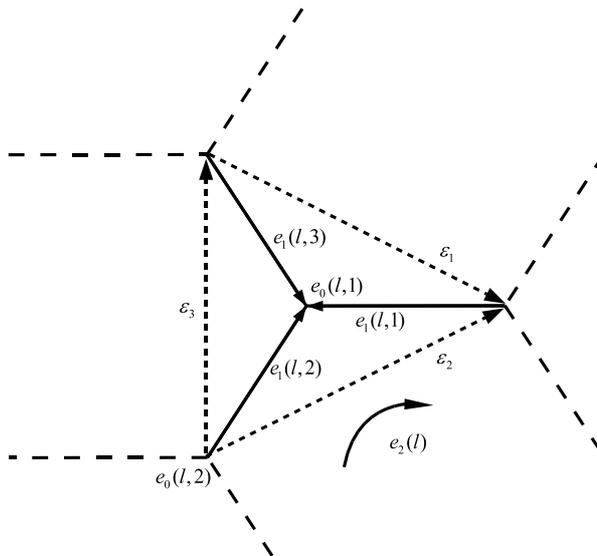


Figura 3: Esquema del complejo simplicial del grafeno.

$$Q_2 = \begin{pmatrix} -1 + e^{i(\theta_2 - \theta_1)} \\ 1 - e^{-i\theta_1} \\ e^{-i\theta_1} - e^{i(\theta_2 - \theta_1)} \end{pmatrix} \quad (8)$$

$$P_1 = \begin{pmatrix} 1 & -e^{-i\theta_2} \\ 1 & -1 \\ 1 & -e^{i(\theta_1 - \theta_2)} \end{pmatrix} \quad (9)$$

$$P_2 = \begin{pmatrix} -1 + e^{i(\theta_1 - \theta_2)} & 1 - e^{i\theta_1} & e^{i\theta_1} - e^{i(\theta_1 - \theta_2)} \end{pmatrix} \quad (10)$$

En cuya obtención se ha tenido en cuenta que  $\theta_3 = \theta_2 - \theta_1$ .

### 3. Deducción de la expresión general de las matrices de constantes de fuerza

El grafeno pertenece al grupo de simetría  $D_{6h}$ , que es generado por  $\{C_3, \sigma_v, \sigma_z\}$ , siendo  $C_3$  las rotaciones de  $120^\circ$  alrededor del eje  $z$ ,  $\sigma_z$  la reflexión en el plano  $xy$ , y  $\sigma_v$  la reflexión en el plano  $xz$  (Falkovsky,2007; Kundu,2007; Nicholson y Bacon; 1971).

Así, se puede deducir las siguientes relaciones entre las matrices de constantes de fuerza  $B_{1,2,3}, A_{4,\dots,9}$  debidas a  $C_3$ :

$$\Phi^{A0B2} = Q_{-120} \Phi^{A0B1} Q_{-120}^T \quad (11a)$$

$$\Phi^{A0B3} = Q_{120} \Phi^{A0B1} Q_{120}^T \quad (11b)$$

$$\Phi^{A0A6} = Q_{-120} \Phi^{A0A4} Q_{-120}^T \quad (11c)$$

$$\Phi^{A0A8} = Q_{120} \Phi^{A0A4} Q_{120}^T \quad (11d)$$

$$\Phi^{A0A7} = Q_{-120} \Phi^{A0A5} Q_{-120}^T \quad (11e)$$

$$\Phi^{A0A9} = Q_{120} \Phi^{A0A5} Q_{120}^T \quad (11f)$$

siendo  $Q_i$  las consabidas matrices de giro de  $i$  grados. Debidas a  $\sigma_z$  tendríamos 9 relaciones:

$$\Phi^{A0M} = Q_{z \rightarrow -z} \Phi^{A0M} Q_{z \rightarrow -z}^T \quad (12)$$

siendo  $M = B0, B1, B2, A4, \dots, A9$ , y debidas a  $\sigma_v$  tendríamos 5 relaciones:

$$\Phi^{A0B1} = Q_{y \rightarrow -y} \Phi^{A0B1} Q_{y \rightarrow -y}^T \quad (13a)$$

$$\Phi^{A0A8} = Q_{y \rightarrow -y} \Phi^{A0A9} Q_{y \rightarrow -y}^T \quad (13b)$$

$$\Phi^{A0B3} = Q_{y \rightarrow -y} \Phi^{A0B2} Q_{y \rightarrow -y}^T \quad (13c)$$

$$\Phi^{A0A7} = Q_{y \rightarrow -y} \Phi^{A0A4} Q_{y \rightarrow -y}^T \quad (13d)$$

$$\Phi^{A0A6} = Q_{y \rightarrow -y} \Phi^{A0A5} Q_{y \rightarrow -y}^T \quad (13e)$$

con las matrices de reflexión:

$$Q_{y \rightarrow -y} = I - 2nn^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - 2 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (14a)$$

$$Q_{z \rightarrow -z} = I - 2nn^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - 2 \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (14b)$$

La expresión de las matrices de constantes de fuerza, una vez resueltas las ecuaciones,

queda como sigue. Para los primeros vecinos,

$$\Phi^{A0B1} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \quad (15a)$$

$$\Phi^{A0B2} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(a+3b) & \frac{1}{4}(\sqrt{3}a - \sqrt{3}b) & 0 \\ \frac{1}{4}(\sqrt{3}a - \sqrt{3}b) & \frac{1}{4}(3a+b) & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \quad (15b)$$

$$\Phi^{A0B3} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(a+3b) & \frac{1}{4}(-\sqrt{3}a + \sqrt{3}b) & 0 \\ \frac{1}{4}(-\sqrt{3}a + \sqrt{3}b) & \frac{1}{4}(3a+b) & 0 \\ 0 & 0 & c \end{pmatrix} \quad (15c)$$

y para los segundos vecinos:

$$\Phi^{A0A4} = \begin{pmatrix} d & e & 0 \\ -e & f & 0 \\ 0 & 0 & g \end{pmatrix} \quad (16a)$$

$$\Phi^{A0A5} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(d+3f) & \frac{1}{4}(\sqrt{3}d - 4e - \sqrt{3}f) & 0 \\ \frac{1}{4}(\sqrt{3}d + 4e - \sqrt{3}f) & \frac{1}{4}(3d+f) & 0 \\ 0 & 0 & g \end{pmatrix} \quad (16b)$$

$$\Phi^{A0A6} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(d+3f) & \frac{1}{4}(-\sqrt{3}d + 4e + \sqrt{3}f) & 0 \\ \frac{1}{4}(-\sqrt{3}d - 4e + \sqrt{3}f) & \frac{1}{4}(3d+f) & 0 \\ 0 & 0 & g \end{pmatrix} \quad (16c)$$

$$\Phi^{A0A7} = \begin{pmatrix} d & -e & 0 \\ e & f & 0 \\ 0 & 0 & g \end{pmatrix} \quad (16d)$$

$$\Phi^{A0A8} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(d+3f) & \frac{1}{4}(\sqrt{3}d + 4e - \sqrt{3}f) & 0 \\ \frac{1}{4}(\sqrt{3}d - 4e - \sqrt{3}f) & \frac{1}{4}(3d+f) & 0 \\ 0 & 0 & g \end{pmatrix} \quad (16e)$$

$$\Phi^{A0A9} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4}(d+3f) & \frac{1}{4}(-\sqrt{3}d - 4e + \sqrt{3}f) & 0 \\ \frac{1}{4}(-\sqrt{3}d + 4e + \sqrt{3}f) & \frac{1}{4}(3d+f) & 0 \\ 0 & 0 & g \end{pmatrix} \quad (16f)$$

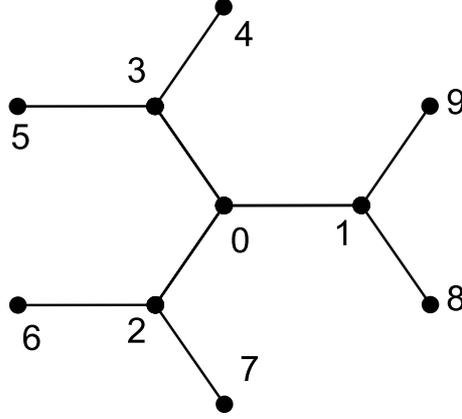


Figura 4: Numeración de átomos que se sigue en los cálculos.

#### 4. Interacciones contempladas en el modelo descrito por Aizawa et al.

El modelo de Aizawa (Aizawa et al.,1990) contempla seis interacciones entre átomos debidas a sus respectivos desplazamientos. Hemos hecho uso de cinco de ellas -la sexta hace referencia a la influencia del sustrato, que no aplicamos en nuestro caso al tratarse de una lámina de grafito aislada. Describimos a continuación las interacciones, reordenándolas de manera que nos sea fácil identificar posteriormente, en el apartado 5, términos con las ecuaciones de la integral de la energía de presentada en la Introducción:

*Energía debida a movimientos relativos entre primeros vecinos:*

Por ejemplo entre los átomos 0 y 1:

$$E_{01} = \frac{\alpha_1}{2} \left( \frac{(u_1 - u_0) \cdot r_{01}}{|r_{01}|} \right)^2 = \frac{\alpha_1}{2d^2} du_{01} \cdot r_{01} \otimes r_{01} \cdot du_{01} \quad (17)$$

siendo  $d$  la distancia entre átomos en el grafito,  $1,42 \text{ \AA}$

Análogamente se tienen las aportaciones  $E_{02}$  y  $E_{03}$ .

*Energía debida a movimientos relativos entre segundos vecinos:*

$$\begin{aligned}
E_{12} &= \frac{\alpha_2}{2} \left( \frac{(u_2 - u_1) r_{12}}{|r_{12}|} \right)^2 = \frac{\alpha_2}{2} \left( \frac{((u_2 - u_0) - (u_1 - u_0)) r_{12}}{|r_{12}|} \right)^2 \quad (18) \\
&= \frac{\alpha_2}{6d^2} du_{01} r_{12} \otimes r_{12} du_{01} + \frac{\alpha_2}{6d^2} du_{02} r_{12} \otimes r_{12} du_{02} \\
&\quad - \frac{\alpha_2}{6d^2} du_{01} r_{12} \otimes r_{12} du_{02} - \frac{\alpha_2}{6d^2} du_{02} (r_{12} \otimes r_{12})^T du_{01}
\end{aligned}$$

donde se ha tenido en cuenta que  $|r_{12}| = d\sqrt{3}$ . Análogamente se tienen las aportaciones  $E_{23}, E_{31}, E_{89}, E_{67}, E_{45}$ .

*Energía debida a cambio de ángulo en el plano xy:*

Por ejemplo, para el ángulo que forman la aristas 01 y 02:

$$\begin{aligned}
E_{102} &= \frac{\gamma_1}{2} \left( \left( \frac{(u_1 - u_0) \times r_{01}}{|r_{01}|^2} \right)_z - \left( \frac{(u_2 - u_0) \times r_{02}}{|r_{02}|^2} \right)_z \right)^2 \quad (19) \\
&= \frac{\gamma_1}{2d^4} du_{01} Q_{90} r_{01} \otimes r_{01} du_{01} Q_{90}^T + \frac{\gamma_1}{2d^4} du_{02} Q_{90} r_{02} \otimes r_{02} du_{02} Q_{90}^T \\
&\quad - \frac{\gamma_1}{2d^4} du_{01} Q_{90} r_{01} \otimes r_{02} du_{02} Q_{90}^T - \frac{\gamma_1}{2d^4} du_{02} (Q_{90} r_{02} \otimes r_{01} Q_{90}^T)^T du_{01}
\end{aligned}$$

Análogamente se tienen las aportaciones de  $E_{203}, E_{301}, E_{918}, E_{726}, E_{534}$ , donde  $E_{102}$  es la energía del cambio del ángulo con vértice en el átomo 0 y extremos 1 y 2, y donde se ha tenido en cuenta que  $|r_{01}| = |r_{02}| = d$ .

*Energía debida a desplazamientos verticales de los tres primeros vecinos del átomo 0:*

$$\begin{aligned}
E_{0123} &= \frac{\gamma_2}{2} \left( \frac{u_{1z} + u_{2z} + u_{3z} - 3u_{0z}}{|r|} \right)^2 \quad (20) \\
&= \frac{\gamma_2}{2d^2} \left( (u_1 - u_0)_z^2 + (u_2 - u_0)_z^2 + (u_3 - u_0)_z^2 \right. \\
&\quad + (u_1 - u_0)_z (u_2 - u_0)_z + (u_2 - u_0)_z (u_1 - u_0)_z \\
&\quad + (u_1 - u_0)_z (u_3 - u_0)_z + (u_3 - u_0)_z (u_1 - u_0)_z \\
&\quad \left. + (u_2 - u_0)_z (u_3 - u_0)_z + (u_3 - u_0)_z (u_2 - u_0)_z \right)
\end{aligned}$$

*Energía debida a torsión en una arista, provocada por desplazamientos verticales:*

Por ejemplo, en la arista con los átomos 0 y 1 como extremos, por la torsión provocada por tener desplazamientos verticales los átomos 2,3,8 y 9:

$$E_{01,2389} = \frac{\delta}{2} \left( \frac{(u_{9z} - u_{8z}) - (u_{3z} - u_{2z})}{|r|} \right)^2 \quad (21)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\delta}{2} \left( \frac{(u_{9z} - u_{1z}) - (u_{8z} - u_{1z}) - (u_{3z} - u_{0z}) + (u_{2z} - u_{0z})}{|r|} \right)^2 \\
&= \frac{\delta}{6d^2} \left( (u_9 - u_1)_z^2 + (u_8 - u_1)_z^2 + (u_3 - u_0)_z^2 + (u_2 - u_0)_z^2 \right. \\
&\quad - (u_9 - u_1)_z(u_8 - u_1)_z - (u_9 - u_1)_z(u_3 - u_0)_z + (u_9 - u_1)_z(u_2 - u_0)_z \\
&\quad - (u_8 - u_1)_z(u_9 - u_1)_z + (u_8 - u_1)_z(u_3 - u_0)_z - (u_8 - u_1)_z(u_2 - u_0)_z \\
&\quad - (u_3 - u_0)_z(u_9 - u_1)_z - (u_3 - u_0)_z(u_2 - u_0)_z + (u_3 - u_0)_z(u_8 - u_1)_z \\
&\quad \left. + (u_2 - u_0)_z(u_9 - u_1)_z - (u_2 - u_0)_z(u_3 - u_0)_z - (u_2 - u_0)_z(u_8 - u_1)_z \right)
\end{aligned}$$

Análogamente, se tendrán los términos  $E_{02,7613}$  y  $E_{03,5421}$ .

## 5. Deducción de las constantes de fuerza

Identificando términos con los términos de la energía del apartado de Introducción deducimos las matrices de constantes de fuerza entre aristas, sumando las contribuciones de todas las aristas. Para hallar las constantes de fuerza entre átomos, hemos utilizado la secuencia:

$$\hat{\Psi} \begin{pmatrix} \theta \\ \alpha & \beta \end{pmatrix} = \sum_l \Psi \begin{pmatrix} l \\ \alpha & \beta \end{pmatrix} e^{-i\theta l} \quad (22)$$

$$Q_1 \hat{\Psi} Q_1^{T*} \rightarrow \begin{pmatrix} \hat{\Phi}_{AA} & \hat{\Phi}_{AB} \\ \hat{\Phi}_{BA} & \hat{\Phi}_{BB} \end{pmatrix} \quad (23)$$

$$\Phi(l) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{[-\pi, \pi]} \hat{\Phi}_{AA} e^{i\theta l} d\theta \quad (24)$$

si el átomo en la posición (1) es del mismo tipo que el  $e_0(l, 1)$ ;

$$\Phi(l) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{[-\pi, \pi]} \hat{\Phi}_{AB} e^{i\theta l} d\theta \quad (25)$$

si el átomo en la posición (1) es del mismo tipo que el  $e_0(l, 2)$  (BA si queremos hallar la fuerza vista desde el segundo átomo);

$$\Phi(l) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{[-\pi, \pi]} \hat{\Phi}_{BB} e^{i\theta l} d\theta \quad (26)$$

si queremos hallar la relación entre átomos del tipo  $e_0(l, 2)$ ;

## 6. Resultados

Siguiendo los pasos anteriormente mencionados (véanse para más detalle los cálculos con Mathematica recogidos en el anexo) se obtienen las siguientes matrices de constantes de fuerza:

$$\Phi^{01} = \begin{pmatrix} -\alpha 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{6\gamma 1}{d^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{3\gamma 2}{d^2} \end{pmatrix} \quad (27a)$$

$$\Phi^{02} = \begin{pmatrix} -\frac{\alpha 1}{4} - \frac{9\gamma 1}{2d^2} & \frac{\sqrt{3}(d^2\alpha 1 - 6\gamma 1)}{4d^2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}(d^2\alpha 1 - 6\gamma 1)}{4d^2} & \frac{3}{4} \left(-\alpha 1 - \frac{2\gamma 1}{d^2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{3\gamma 2}{d^2} \end{pmatrix} \quad (27b)$$

$$\Phi^{03} = \begin{pmatrix} -\frac{\alpha 1}{4} - \frac{9\gamma 1}{2d^2} & -\frac{\sqrt{3}(d^2\alpha 1 - 6\gamma 1)}{4d^2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}(d^2\alpha 1 - 6\gamma 1)}{4d^2} & -\frac{3\alpha 1}{4} - \frac{3\gamma 1}{2d^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{3\gamma 2}{d^2} \end{pmatrix} \quad (27c)$$

$$\Phi^{04} = \begin{pmatrix} \frac{3\gamma 1}{4d^2} & -\frac{\sqrt{3}\gamma 1}{4d^2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}\gamma 1}{4d^2} & -\frac{4d^2\alpha 2 + \gamma 1}{4d^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\delta}{3d^2} \end{pmatrix} \quad (27d)$$

$$\Phi^{05} = \begin{pmatrix} -\frac{3\alpha 2}{4} & \frac{\sqrt{3}(d^2\alpha 2 + 2\gamma 1)}{4d^2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}\alpha 2}{4} & \frac{1}{4} \left(-\alpha 2 + \frac{2\gamma 1}{d^2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\delta}{3d^2} \end{pmatrix} \quad (27e)$$

$$\Phi^{06} = \begin{pmatrix} -\frac{3\alpha 2}{4} & -\frac{\sqrt{3}(d^2\alpha 2 + 2\gamma 1)}{4d^2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}\alpha 2}{4} & \frac{1}{4} \left(-\alpha 2 + \frac{2\gamma 1}{d^2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\delta}{3d^2} \end{pmatrix} \quad (27f)$$

$$\Phi^{07} = \begin{pmatrix} \frac{3\gamma 1}{4d^2} & \frac{\sqrt{3}\gamma 1}{4d^2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}\gamma 1}{4d^2} & -\frac{4d^2\alpha 2 + \gamma 1}{4d^2} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\delta}{3d^2} \end{pmatrix} \quad (27g)$$

$$\Phi^{08} = \begin{pmatrix} -\frac{3\alpha 2}{4} & \frac{\sqrt{3}\alpha 2}{4} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}(d^2\alpha 2 + 2\gamma 1)}{4d^2} & \frac{1}{4} \left(-\alpha 2 + \frac{2\gamma 1}{d^2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\delta}{3d^2} \end{pmatrix} \quad (27h)$$

$$\Phi^{09} = \begin{pmatrix} -\frac{3\alpha 2}{4} & -\frac{\sqrt{3}\alpha 2}{4} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}(d^2\alpha 2 + 2\gamma 1)}{4d^2} & \frac{1}{4} \left(-\alpha 2 + \frac{2\gamma 1}{d^2}\right) & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\delta}{3d^2} \end{pmatrix} \quad (27i)$$

Y dado que en el átomo 0 se tiene que cumplir el equilibrio,

$$\Phi^{00} = - \sum_{i=1}^{i=9} \Phi^{0i} = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} \left( \alpha_1 + 2\alpha_2 + \frac{5\gamma_1}{d^2} \right) & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2} \left( \alpha_1 + 2\alpha_2 + \frac{5\gamma_1}{d^2} \right) & 0 \\ 0 & 0 & \frac{9\gamma_2 + 2\delta}{d^2} \end{pmatrix} \quad (28)$$

Los valores numéricos de las matrices, sustituidos los valores de las constantes proporcionados por los experimentos de Aizawa para el grafeno, pueden consultarse en el anexo.

## **7. Conclusiones y trabajo futuro**

Las constantes de fuerza entre átomos finalmente halladas responden al aspecto general deducido para ellas en el apartado 3 gracias a las relaciones de simetría impuestas.

Se ha obtenido por tanto un modelo de constantes de fuerzas entre átomos y entre aristas para el grafeno. En particular, el modelo para aristas permitirá un más fácil estudio próximamente de las propiedades mecánicas y dislocaciones en nanotubos de carbono.

Más a corto plazo, se pretende aplicar este modelo para la obtención de las constantes elásticas del grafeno, así como la caracterización de la dispersión de fonones en él, para poder contrastarlo con experimentos de otros autores.

## **8. Agradecimientos**

Este trabajo ha sido posible gracias al consejo y la paciencia de la tutora del mismo, Pilar Ariza.

También agradezco a mi familia y amigos el ánimo infundido a lo largo del desarrollo del Máster que concluye con la presentación de este trabajo.

## 9. Referencias

1. Aizawa, T., et al. 1990. Bond softening in monolayer graphite formed on transition-metal carbide surfaces. *Physical Review B* 42, no. 18:11469.
2. Born, M., Huang, K. 1954. *Dynamical theory of crystal lattices*. Oxford University Press.
3. Ariza, M. P., y Ortiz, M. 2005. Discrete Crystal Elasticity and Discrete Dislocations in Crystals. *Archive for Rational Mechanics and Analysis* 178, no. 2:149-226.
4. Brenner, D. W. 1990. Empirical potential for hydrocarbons for use in simulating the chemical vapor deposition of diamond films. *Physical Review B* 42, no. 15:9458.
5. Bulatov, V. y Cai, W. 2006. *Computer simulations of dislocations*. Oxford Series on Materials Modelling, No. 3.
6. Falkovsky, L. 2007. Phonon dispersion in graphene. *Journal of Experimental and Theoretical Physics* 105, no. 2:397-403.
7. Finnis, M.W., Sinclair, J.E. 1984. A simple empirical n-body potential for transition-metals. *Philosophical Magazine A-Physics of Condensed Matter Structure Defects and Mechanical Properties* 50, 45-55.
8. Iijima, S. 1991. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature* 354, no. 6348:56-58.
9. Kostoff, R., et al. 2006. The structure and infrastructure of the global nanotechnology literature. *Journal of Nanoparticle Research* 8, no. 3:301-321.
10. Kundu, R. Towards Phonon Spectrum of Graphene. arXiv:0710.2077. 2007.
11. Liu W. K., Karpov E.G. y Park H.S. 2006. *Nano Mechanics and Materials: Theory, Multiscale Methods and Applications*. Wiley.
12. Monthieux, M., y Kuznetsov, V. L.. 2006. Who should be given the credit for the discovery of carbon nanotubes? *Carbon* 44, no. 9:1621-1623. 13. Munkres, J.R.. 1984. *Elements of Algebraic Topology*. Perseus Publishing.

14. Nicholson, A.P.P. y Bacon, D.J.. 1977. A new force-constant model for graphite. *Journal of Physics C: Solid State Physics* 10, no. 13:2295.
15. Oberlin, A., Endo, M. y Koyama,T. 1976. Filamentous growth of carbon through benzene decomposition. *Journal of Crystal Growth*, 32, no. 3:335-349.
16. Oberlin, A., Endo, M. y Koyama,T. 1976. High resolution electron microscope observations of graphitized carbon fibers. *Carbon*,14, no. 2:133-135.
17. Ramasubramaniam, A., Ariza, M. P., y Ortiz, M. . 2007. A discrete mechanics approach to dislocation dynamics in BCC crystals. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids* 55, no. 3:615-647.
18. Saito, R., Dresselhaus, G. y Dresselhaus, M. S.1998. *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. Imperial College Press.
19. Sengupta, S. 1988. *Lattice Theory of Elastic Constants*. Trans Tech Publications.

## **Anexo: Cálculos con Mathematica 6.0**