

# 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	1
2. Complejo simplicial del grafeno	3
3. Deducción de la expresión general de las matrices de constantes de fuerza	6
4. Interacciones contempladas en el modelo descrito por Aizawa et al.	8
5. Deducción de las constantes de fuerza	11
6. Resultados	12
7. Conclusiones y trabajo futuro	14
8. Agradecimientos	14
9. Referencias	15
Anexo: Cálculos con Mathematica 6.0	17

## 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:

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

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

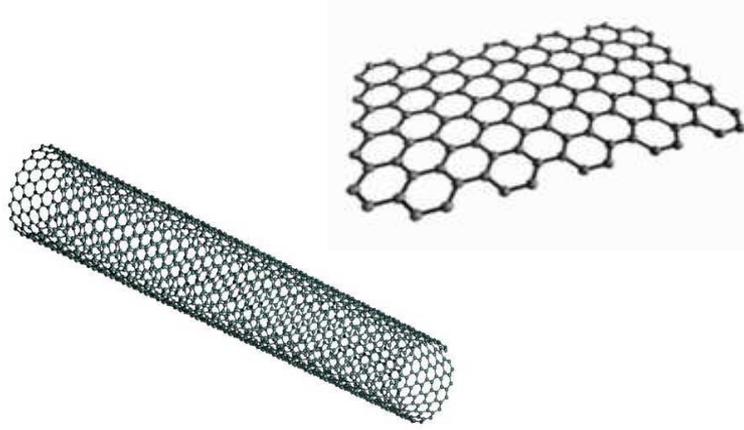


Figura 1: A la izquierda, estructura de nanotubo de carbono. A la derecha, lámina de grafeno.

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.