



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 $E_{03,5421}$.