



**Obtención de diagramas carga-deformación de estructuras tipo nanografenos:
Un estudio mediante mecánica molecular.**

Heber Hernández Flores¹, Martin Salazar Villanueva², José Humberto Camacho García¹

¹BUAP, Facultad de Ingeniería Química, Apdo. Postal J-48, Puebla, Pue. 72570; México;

²BUAP, Facultad de Ingeniería, Apdo. Postal J-39, C.P. 72570 Puebla, México

hb_hernandez@hotmail.com

Tabla de Contenido

1	Resumen	3
1.1	Palabras Clave.....	3
2	Abstract.....	4
2.1	Keywords:	4
3	Referencias.....	4

1 Resumen

Con el motivo de generar aplicaciones del grafeno en áreas como la electrónica donde muchas veces encuentra límites debido a la ausencia de band gap, se han estudiado varios enfoques que generan esta propiedad, incluidos el dopaje por impurezas de átomos, funcionalización química, creación de defectos y la segmentación de un grafeno a tamaños más pequeños denominados nanografenos (NG) o PAHs (Polycyclic aromatic hydrocarbons) [1]. Los NG tienen band gap finita, una alta estabilidad química y térmica, alta movilidad del portador de carga y buenas propiedades de formación de película que los hacen adecuados para la electrónica orgánica, transistores de diodos emisores de luz orgánica de efecto de campo orgánico y fotovoltaica orgánica [2]. Uno de estos sistemas que más ha llamado a atención debido a sus condiciones favorables de síntesis es el Hexa-perihexabenzocoroneno (HBC, $C_{42}H_{18}$), estudios computacionales presentados por E.Vessally y colaboradores [3] analizan propiedades electrónicas, ópticas y estructurales del HBC comparando estructuras puras y dopadas con nitruro de boro, obteniendo resultados importantes.

Con la intención del estudio de propiedades mecánicas en este trabajo se presentan resultados parciales para la obtención del diagrama carga-deformación de algunas estructuras de NG, con el caso de interés en el HBC puro y dopado con nitruro de boro en el anillo central. Las optimizaciones y deformaciones inducidas se obtuvieron con base en la mecánica molecular. Para los sistemas más pequeños se generan cargas dentro del intervalo $8.66 \leq s \leq 20.1$ nN. Para tamaños medianos ésta tendencia oscila dentro del rango $50.5 \leq s \leq 55.68$ nN. Para los sistemas dopados se observan valores comparables y similares. En estos últimos se observa una oscilación par impar en el valor de la carga máxima tolerada. Los cambios inducidos por tensión serán discutidos por medio de longitudes de enlace y la energía total de cada sistema.

1.1 Palabras Clave.

Nanografenos, propiedades mecánicas, mecánica molecular

2 Abstract

In order to generate applications of graphene in areas such as electronics where it often finds limits due to the absence of band gap, several approaches have been studied to generate this property, including doping impurity atoms, chemical functionalization, creating defect and the segmentation of a graphene to smaller sizes which are called nanographene (NG) or PAHs (Polycyclic aromatic hydrocarbons) [1]. The NG have a finite band gap, high chemical and thermal stability, high charge carrier mobility and good film-forming properties which make them suitable for organic electronics, organic field effect organic light emitting diode transistors, and organic photovoltaics [2]. One of these systems that has attracted the most attention due to its favorable synthesis conditions is Hexa-perihexabenzocoroneno (HBC, C₄₂H₁₈), computational studies presented by E.Vessally et al. [3], analyze electronic, optical and structural properties of HBC comparing pure structures and doped with boron nitride, obtaining important results.

With the intention of the study of mechanical properties in this work partial results are presented to obtain the load-deformation diagram of some structures type NG, with the case of interest in the pure HBC and doped with boron nitride in the central ring. The optimizations and induced deformations were obtained based on molecular mechanics. For smaller systems, charges are generated within the range $8.66 \leq s \leq 20.1$ nN. For medium sizes this trend oscillates within the range $50.5 \leq s \leq 55.68$ nN. Comparable and similar values are observed for doped systems. In the latter, an odd pair oscillation is observed in the value of the maximum tolerated load. The strain induced changes will be discussed by means of bond lengths and the total energy of each system.

2.1 Keywords:

Nanographenes, mechanical properties, molecular mechanics

3 Referencias

- [1] Memarian, F., Fereidoon, A. and Darvish Ganji, M. (2015). Graphene Young's modulus: Molecular mechanics and DFT treatments. *Superlattices and Microstructures*, 85, pp.348-356.
- [2] Vessally, E., Soleimani-Amiri, S., Hosseinian, A., Edjlali, L. and Bekhradnia, A. (2017). A comparative computational study on the BN ring doped nanographenes. *Applied Surface Science*, 396, pp.740-745.
- [3] Hosseinian, A., Bekhradnia, A., Vessally, E., Edjlali, L. and Esrafil, M. (2017). A DFT study on the central-ring doped HBC nanographenes. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 73, pp.101-107.