

Resumen

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 Hexa-perihexabenzocoroneno (HBC, C₄₂H₁₈) puro y dopado con nitrógeno de boro en el anillo central [1]. Las optimizaciones y deformaciones inducidas se obtuvieron con base en la mecánica molecular. Para los sistemas más pequeños se generan cargas dentro del intervalo $8.66 \leq \sigma \leq 20.1$ nN. Para tamaños medianos ésta tendencia oscila dentro del rango $50.5 \leq \sigma \leq 55.68$ nN. Para los sistemas dopados se observa un cambio en los valores de carga. 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.

Introducción

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) [2]. 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 [3].

Metodología

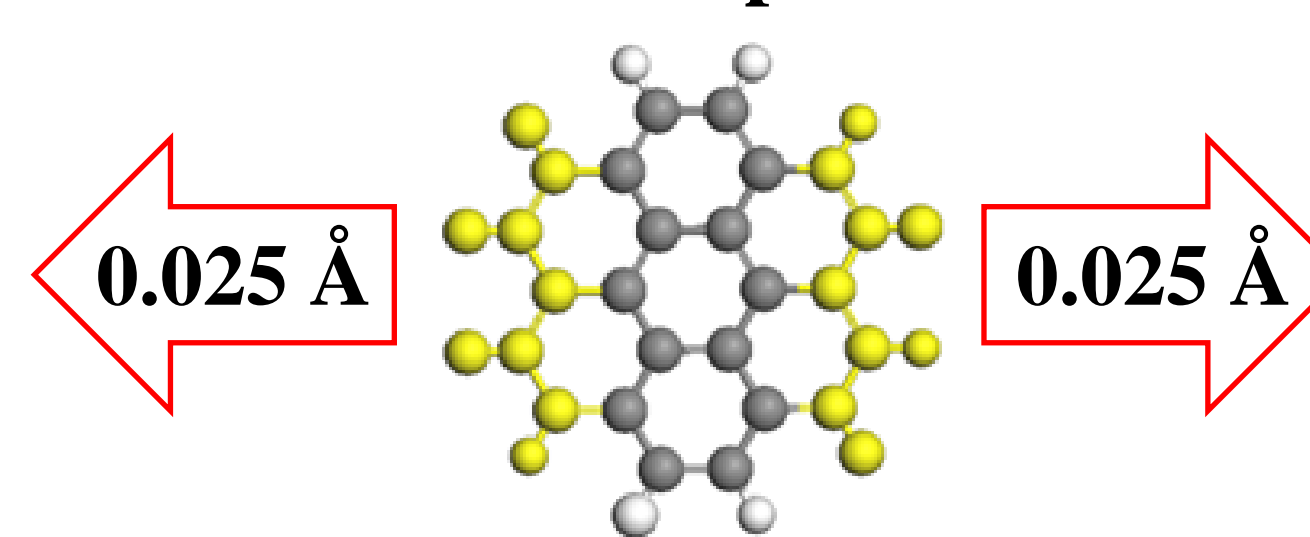
Simulaciones mediante mecánica molecular se llevaron a cabo usando el programa Materials Studio.

Modulo: Forcite Tools **Algoritmo:** Smart **Campos de fuerza:** Universal[4] / Dreiding[5]

• Tolerancia de convergencia:

Calidad = Ultra-fine Energía = 2×10^{-5} Kcal/mol Desplazamiento = 1×10^{-5} Å

Tensión aplicada



Obtención de Carga y Deformación [6]

$$P = \frac{1}{R} \frac{\partial E}{\partial \epsilon}, \quad (1)$$

$$\epsilon = \frac{l - l_0}{l_0}, \quad (2)$$

Donde:

P es la Carga (nN)

R es el radio covalente del C (0.77Å)

E es la energía total (eV)

Donde:

ϵ es la deformación (Å/Å)

l es la longitud final (Å)

l₀ es la longitud inicial (Å)

Resultados

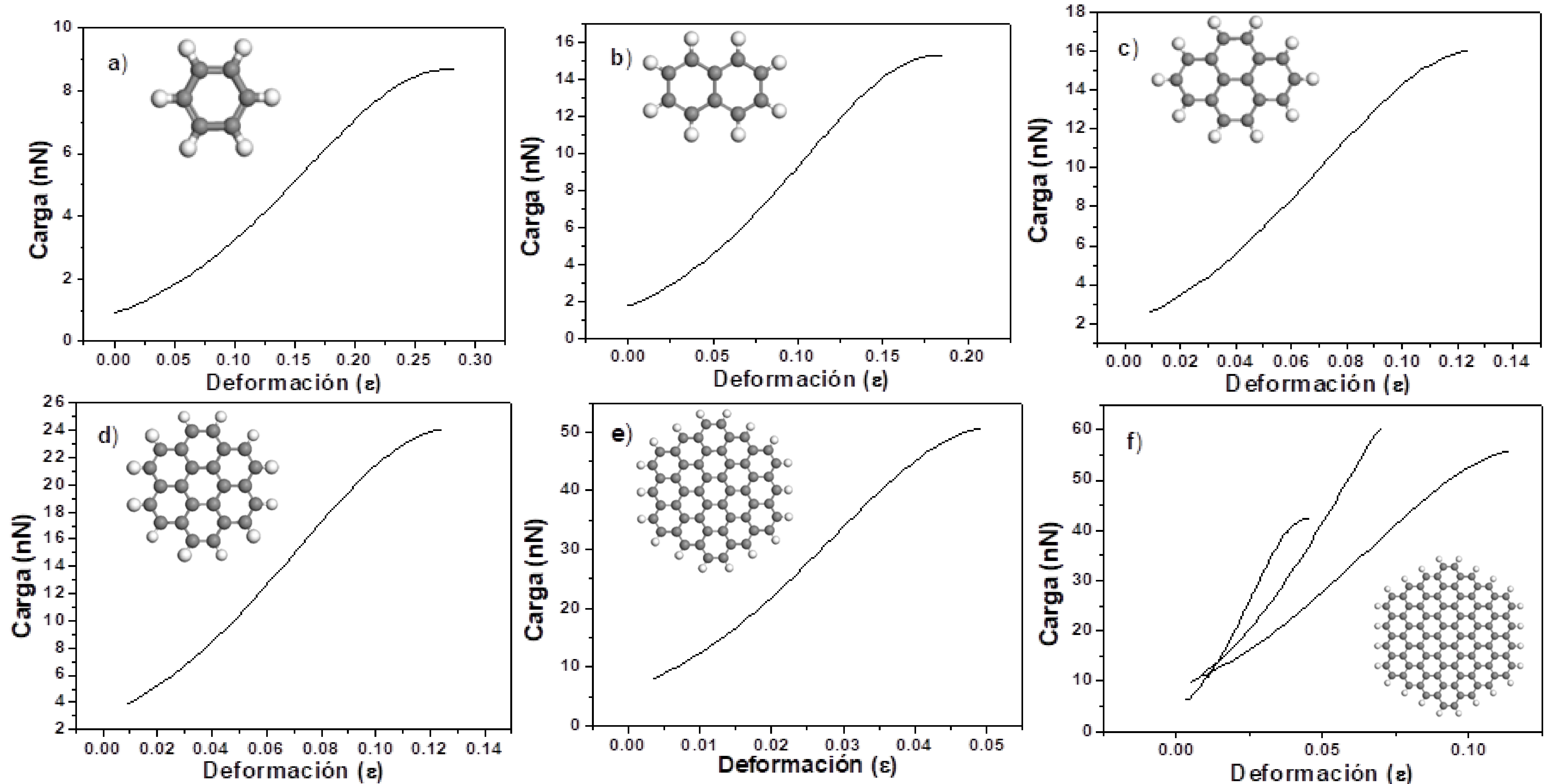


Figura 1. Diagramas carga-deformación de NG (a) Benceno, b) Naftaleno, c) Pireno, d) Coroneno, e) Circuncoroneno, f) Dicircuncoroneno).

Tabla 1. Valores de máxima carga y deformación asociada obtenidos para NG.

Modelo	Unidades de Benceno	Máxima carga (nN)	Deformación(ε) (Å/Å)
Benceno	1	8.6685	0.27
Naftaleno	2	15.2518	0.185
Pireno	4	15.9953	0.124
Coroneno	7	24.0688	0.124
Circuncoroneno	19	50.5064	0.049
Dicircuncoroneno 1	37	42.1893	0.045
Dicircuncoroneno 2	37	60.4642	0.070
Dicircuncoroneno 3	37	55.6838	0.114

Tabla 2. Valores obtenidos para HBC puro y dopado con BN.

Modelo	Máxima carga (nN)	Deformación(ε) (Å/Å)
HBC(n=13)	31.8291	0.100
HBC BN	28.5341	0.098
HBC BN2	45.6974	0.131

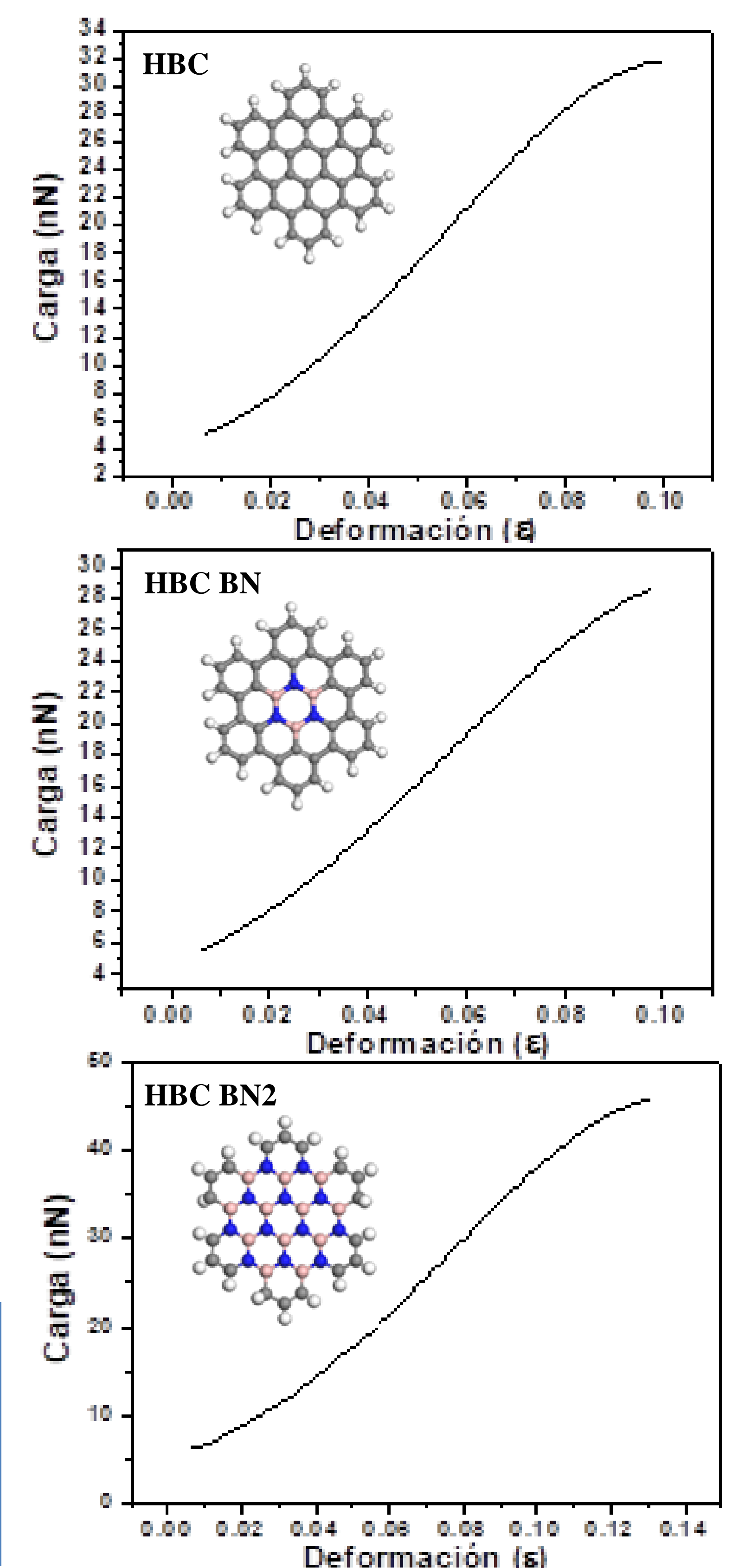


Figura 2. Diagramas carga-deformación de HBC puro y dopado con BN.

Tabla 3. Análisis mediante QM (GGA/PBE)

Análisis cuántico	Densidad de deformación		Orbitales	
	Estructura Optimizada	Estructura previa a ruptura de enlace	Estructura optimizada	Estructura previa a ruptura de enlace
Benceno (vista superior)	 Isosuperficie= 0.093027 e/Å ³	 Isosuperficie= 0.093027 e/Å ³	 HOMO= -6.18645 eV LUMO= -0.99980 eV Gap= 5.18665 eV	 HOMO= -5.17710 eV LUMO= -2.27049 eV Gap= 2.90661 eV
Naftaleno (vista superior)	 Isosuperficie= 0.090941 e/Å ³	 Isosuperficie= 0.090941 e/Å ³	 HOMO= -5.3781 eV LUMO= -1.9215 eV Gap= 3.4566 eV	 HOMO= -4.9386 eV LUMO= -3.0420 eV Gap= 1.8965 eV

Conclusiones Parciales

- La máxima carga tolerada se presenta en el sistema con 37 unidades de benceno.
- Para pequeños sistemas, en específico el coroneno es tres veces mayor en carga máxima que el benceno. Sin embargo, para los sistemas de mayor tamaño, el dicircuncoroneno 3 es apenas 16% mayor en carga máxima tolerada que el circuncoroneno.
- Por lo tanto, se espera que para mayores tamaños este valor nominal no cambie según los cálculos obtenidos en el presente trabajo.
- El sistema HBC BN2 muestra gran influencia del dopaje en la máxima carga tolerada al incrementar un 43.5% con respecto al HBC puro, sin embargo en menor cantidad el sistema BN incluso disminuye un 10.3%.

Referencias

- [1] Vessally, E., Soleimani-Amiri, S., Hosseini, A., Edjlali, L. and Bekhradnia, A. (2017). A comparative computational study on the BN ring doped nanographenes. Applied Surface Science, 396, pp.740-745.
- [2] 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.
- [3] Hosseini, A., Bekhradnia, A., Vessally, E., Edjlali, L. and Esrafilii, M. (2017). A DFT study on the central-ring doped HBC nanographenes. Journal of Molecular Graphics and Modelling, 73, pp.101-107.
- [4] S.L. Mayo, B.D. Olafson, W.A. Goddard, J. Phys. Chem. 94 (1990) 8897-8909.
- [5] A.K. Rappé, C.J. Casewit, K.S. Colwell, W.A. Goddard III, W.M. Skiff, J. Am. Chem. Soc. 114 (1992) 10024-10035.
- [6] Salazar Villanueva, M., Romero, A. and Bautista Hernández, A. (2009). Ideal strength on clusters from first principles: the Ti13case. Nanotechnology, 20(46), p.465709.