

T713: Modelamiento y simulación de materiales, estructuras y dispositivos nanométricos

Nicolás Plaza
*Universidad de Santiago
y CEDENNA*

Javier Rojas
*Universidad de Santiago
y CEDENNA*

Samuel Baltazar
*Universidad de Santiago
y CEDENNA*

Eduardo Bringa
*Universidad de Mendoza
y CONICET*

Comportamiento mecánico de una lámina de óxido de grafeno bajo estrés: un estudio de los grados de oxidación y segregación

El grafeno es uno de los materiales más estudiados de la actualidad, debido a sus propiedades mecánicas, eléctricas, entre otras. Este consiste en una capa monoatómica de una red hexagonal de carbono. Podemos cambiar sus propiedades si oxidamos estas láminas de grafeno, así obtenemos un material conocido como óxido de grafeno (GO). Esta oxidación puede presentarse de distintas formas, los grupos funcionales que se forman en la estructura pueden ser de tipo epóxido e hidroxilo (y grupos carbonilos en los bordes de la lámina). A su vez, estos grupos pueden presentarse en distintas razones, dependiendo del método de síntesis con que se prepara el GO. Otra manera en que se presenta la oxidación es la agregación. Esto significa que usualmente los grupos funcionales se encuentran muy cercanos entre sí, dejando zonas de grafeno prístino en la lámina de GO. Estas “islas” de óxido pueden tener distintos tamaños, por lo que resulta interesante estudiar las propiedades de la lámina en función del grado de segregación: mientras más segregadas se encuentren las islas, más homogénea será la distribución. En este trabajo estudiamos el comportamiento de distintas láminas de GO bajo un estiramiento constante en función de su grado de oxidación y su grado de segregación.

Para llevar esto a cabo utilizamos el software de dinámica molecular LAMMPS [1]. Las simulaciones se realizaron con un potencial REAXFF [2]. Se generaron láminas de 20x20 nm con distintos grados de oxidación y con dos tipos de segregación: homogéneas y segregadas [3]. La proporción entre grupos epóxidos e hidroxilos se mantuvo fijo en 2:1 respectivamente. Antes de comenzar la deformación las láminas fueron relajadas a 300 K.

A continuación se sometieron las láminas a una deformación uniaxial en la dirección zig-zag con una razón de estiramiento constante. Pudimos observar que las láminas homogéneas resisten mucho más estrés que sus contrapartes segregadas, lo cual se debe a la falta de puntos débiles ubicados en la interfase de GO/grafeno. Observamos también que las zonas donde la fractura es más probable son aquellas donde la cantidad de GO perpendicular al eje de deformación es mayor. Para esto probamos deformando láminas con islas de óxido rectangulares de distintas longitudes, y encontramos una proporcionalidad entre la cantidad de GO transversal y el mayor estrés soportado por la lámina. Finalmente estudiamos la relación entre la resistencia de la lámina y la razón entre los grupos epóxidos e hidroxilos, encontrando que los primeros son más propensos a generar puntos de nucleación y por lo tanto disminuyendo la resistencia del GO frente al estiramiento.

Agradecimientos

Agradecemos el financiamiento de proyecto DICYT 042331BR_Postdoc VRIDEI y de Fondo basal para centros científicos y tecnológicos proyecto AFB220001 y Facultad de Ciencia, USACH.

Referencias

- [1] Plimpton S. (1995), doi.org/10.1006/jcph.1995.1039
- [2] Chenoweth K. et al. (2008), doi.org/10.1021/jp709896w
- [3] Sinclair R. et al. (2019), doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00114