

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA DE MATERIALES



TRABAJO DE FIN DE GRADO

Código de TFG: FM14

Probando la elasticidad de un material 2D

Testing the elasticity of a 2D material

Supervisor: César González Pascual

Omar Bentaleb Ruiz

Grado en Física

Curso académico 2024-2025

Convocatoria ordinaria

Calificación: 9.2

Resumen:

Este trabajo presenta una revisión bibliográfica sobre las propiedades mecánicas y electrónicas de varios materiales bidimensionales (2D), en particular del grafeno y del disulfuro de molibdeno (MoS_2). Se analizan y comparan diferentes enfoques teóricos (Teoría del Funcional de la Densidad: DFT, Dinámica Molecular: DM, *Tight Binding Model*: TBMD) y experimentales (nanoindentación mediante Microscopía de Fuerza Atómica, Espectroscopía Raman, Microscopía Electrónica de Barrido) para evaluar la elasticidad, resistencia y ductilidad de estos materiales bajo distintas deformaciones. Además, se estudian los efectos de la temperatura y la presencia de defectos sobre las propiedades del grafeno. Los resultados con DFT muestran buena concordancia entre teoría y experimento, mientras que la DM tiende a subestimar las propiedades de los materiales estudiados. El grafeno se posiciona como el material estudiado con mejores propiedades mecánicas, alcanzando un Módulo de Young de 1 TPa. También se compara la utilidad de estos materiales en función de sus propiedades mecánicas y electrónicas. Finalmente, se identifican desafíos y se proponen posibles líneas de investigación para otros materiales 2D.

Abstract:

This work presents a bibliographic review of the mechanical and electronic properties of some two-dimensional (2D) materials, specifically graphene and molybdenum disulfide (MoS_2). Various theoretical approaches (Density Functional Theory: DFT, Molecular Dynamics: DM, Tight Binding Model: TBMD) and experimental techniques (nanoindentation using Atomic Force Microscopy, Raman spectroscopy, Scanning Electron Microscopy) are analyzed and compared to assess the elasticity, strength, and ductility of these materials under different types of deformation. Additionally, the effects of temperature and the presence of defects on the properties of graphene are studied. The results with DFT show good agreement between theory and experiment, while DM tends to underestimate the properties of the studied materials. Graphene stands out as the studied material with the best mechanical properties, reaching a Young's modulus of 1 TPa. The usefulness of these materials is also compared based on their mechanical and electronic properties. Finally, key challenges are identified and possible future research directions for others 2D materials are proposed.

Índice

1. Introducción	1
2. Objetivos	2
3. Grafeno	3
3.1. Obtención del grafeno	4
3.2. Deformación experimental del grafeno	4
3.3. Deformación del grafeno sobre sustratos: estudio mediante SEM y Espectroscopía Raman	7
3.4. Deformación teórica del grafeno mediante DFT	8
3.5. Deformación teórica del grafeno mediante DM	10
3.6. Propiedades electrónicas del grafeno	11
3.6.1. Cambios en las propiedades electrónicas del grafeno observados mediante TBMD	11
3.7. Influencia de los defectos y la temperatura en las propiedades del grafeno	12
3.7.1. Influencia de los defectos en el grafeno	12
3.7.2. Influencia de la temperatura en el grafeno	14
4. MoS₂	15
4.1. Propiedades mecánicas del MoS ₂	15
4.2. Efectos de la deformación en las propiedades electrónicas del MoS ₂	16
5. Desafíos futuros	17
6. Conclusiones	18
Referencias	18

1. Introducción

El control de las propiedades de los materiales ha sido esencial a lo largo de la evolución del ser humano. Incluso en la Edad de los Metales, el hombre ya fue cambiando la dureza y las propiedades mecánicas de los materiales para fabricar herramientas que les ayudase en la agricultura o en la caza.

En las últimas décadas, el descubrimiento de nuevos materiales ha impulsado grandes avances en múltiples campos de la ciencia. Concretamente, los materiales bidimensionales (2D) han captado una atención especial debido a sus propiedades únicas. El grafeno [1], el primer material 2D aislado con éxito en 2004, abrió las puertas a un nuevo campo de estudio, pues se demostró que es posible obtener materiales estables de un solo átomo de grosor con propiedades totalmente diferentes a las de los materiales tridimensionales (3D). A raíz de este, se empezaron a estudiar materiales como el disulfuro de molibdeno (MoS₂) [2] o el nitruro de boro (BN) [3].

Estudiar la elasticidad y respuesta mecánica de estos materiales se puede hacer desde el punto de vista teórico; con modelos como la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) [4], el *Tight Binding Model* (TBMD) [5] y Dinámica Molecular (DM) [6]; o desde el punto de vista experimental, mediante la nanoindentación con la punta de un microscopio de fuerza atómica (AFM) [7], con deformación mecánica mediante sustratos elásticos [8] y a través de la actuación electrostática [9]. Adicionalmente, tienen especial relevancia otras técnicas como la Microscopía Electrónica de

Barrido (SEM) [10] o la Espectroscopía Raman [11] y su función en la revelación de propiedades estructurales, mecánicas y electrónicas de los materiales 2D. Es crucial entender los límites de estos materiales para poder emplearlos en diversos campos. Por ejemplo, se le puede *abrir* un *gap* al grafeno mediante deformación mecánica, lo que sería muy útil para emplear dicho material en transistores y dispositivos digitales.

Desde que se consiguió aislar el grafeno, este mostró un gran potencial en aplicaciones como la construcción de aviones, satélites y coches debido a sus interesantes propiedades estructurales. Además, sus propiedades electrónicas podrían revolucionar la optoelectrónica del futuro e incluso brindarnos baterías de móviles que se cargarían en segundos. Por si fuera poco, en 2018, se observó que si colocábamos una capa de grafeno sobre otra rotada ligeramente (aproximadamente 1 grado), el material resultante presentaría estados superconductores, pudiendo conducir la electricidad sin pérdidas a temperaturas muy bajas. Aunque las aplicaciones prácticas en nuestro día a día no se han visto beneficiadas de una manera tan importante como prometía, su versatilidad puso a este material en boca de todos [12].

En la práctica, el grafeno es empleado en productos como raquetas de tenis, cascos de motos, bicicletas, bombillas, zapatillas o cañas de pescar. La dificultad de implementar este material en aplicaciones más revolucionarias viene dada por diversos motivos. Para empezar, las propiedades tan buenas que exhibe el material 2D se da para una única capa de grafeno sin defectos. Al juntar varias de estas capas, nos damos cuenta de que no son perfectas ni están alineadas a la perfección. En el ámbito de la electrónica, el silicio es un semiconductor que impide el paso de la corriente en respuesta a un campo eléctrico (característica esencial que permite codificar la información en ceros y unos). Este es el funcionamiento de los transistores en los que se basan nuestros dispositivos electrónicos. En cambio, los electrones del grafeno siempre conducen la electricidad. No obstante, el problema más grande al que se enfrenta el grafeno es que no resulta fácil producirlo a gran escala (el mejor método es el de la exfoliación mecánica). Existen métodos, como la Deposición Química de Vapor (CVD) [13], en el que el grafeno obtenido es un *mosaico* formado por cristales más pequeños, lo que afecta a sus propiedades. Otro método es la exfoliación química, en la que se obtiene óxido de grafeno, en lugar del deseado grafeno [14].

Cabe resaltar la necesidad de recursos, tanto públicos como privados, para conseguir el desarrollo tecnológico que prometen este tipo de materiales 2D capitaneados por el grafeno. Aún así, en los últimos años, investigadores españoles han desarrollado implantes cerebrales más pequeños y más sensibles con este material, que ya están en ensayo clínico. En algunos móviles también se ha incorporado el grafeno para disipar el calor de los circuitos electrónicos. Adicionalmente, se recubren algunos barcos de pintura con dicho material para reducir la corrosión y la fricción. Muchos vehículos *Ford* tienen una espuma con dicho material para reducir el ruido del motor y protegerlo del calor. A principios del año pasado, se anunció el primer semiconductor funcional hecho de grafeno, que será viable en un futuro no muy lejano. Todo requiere un tiempo y un proceso. A corto plazo, tendemos a sobreestimar la tecnología y, a largo plazo, a subestimarla [15].

2. Objetivos

En esta revisión bibliográfica, se pretende recabar datos experimentales y teóricos sobre distintos materiales 2D sometidos a diferentes deformaciones, de manera que se pueda llegar a un consenso entre los modelos teóricos y los métodos experimentales. Además, también se quieren comparar diferentes materiales para ver cuáles son más útiles para ciertas aplicaciones, según la

flexibilidad de estos y cuánto pueden aguantar antes de la fractura. Para este fin, se tendrán en cuenta distintas variables, como las condiciones de los experimentos, a qué tipo de deformación se somete el material o los distintos modelos teóricos que se emplean.

Para terminar, aunque no hay artículos científicos con resultados para todos los materiales 2D que conocemos (MoSe₂, borofeno, siliceno, germaneno, fosforeno...), se hablará de los más conocidos (grafeno, BN y MoS₂) y se llevará a cabo un apartado de *desafíos futuros*, en el que se propondrá deformar algunos materiales bajo ciertas condiciones. Es muy importante, si queremos que la ciencia avance, recalcar los fallos de los experimentos y sus causas.

3. Grafeno

Estemos haciendo lo que estemos haciendo, no hay nada que el carbono no esté influyendo, gobernando o facilitando. El carbono es el cuarto elemento más abundante del universo observable y forma el 18% de nuestro cuerpo. Además de formar parte de nuestro ADN y encontrarse en los combustibles fósiles, se usa en la fabricación de materiales avanzados como el grafeno. Tiene una capacidad única para formar enlaces covalentes fuertes consigo mismo y con otros elementos. Esta propiedad le permite existir en varias formas alotrópicas, además de ser la base de las moléculas orgánicas que dan lugar a la vida y de otras inorgánicas muy importantes como el CO₂.

El grafeno [1], el miembro más reciente de los alótropos de carbono y el material bidimensional más delgado conocido, es en realidad el bloque básico de construcción de otros alótropos de carbono importantes, incluidos el grafito (3D) [16], los CNTs (1D) [17] y el fullereno C60 (0D) [18] (Figura 1).

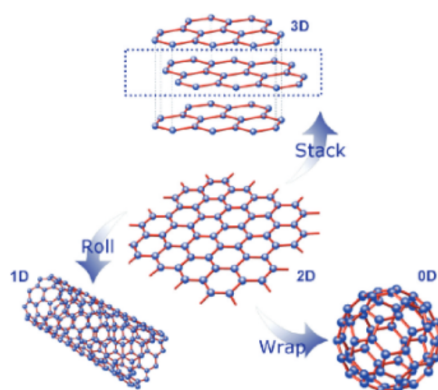


Figura 1: El grafeno es el bloque básico de construcción de otros alótropos de carbono. Cuando se envuelve (*wrap*) obtenemos fullerenos, cuando se enrolla (*roll*) obtenemos CNTs y cuando se apila (*stack*) obtenemos grafito [19].

En 2004 se consigue aislar y caracterizar el grafeno gracias a los científicos Andre Geim y Konstantin Novoselov. Para ello, tomaron un trozo de grafito y usaron cinta adhesiva para despegar capas delgadas de este hasta que obtuvieron una única capa de átomos de carbono dispuestos en un patrón hexagonal (exfoliación mecánica). Esto generó un gran interés, debido a que era la primera vez que se obtenía un material 2D, abriéndose un nuevo campo científico. También sorprendieron sus características y propiedades. Es mucho más resistente que el acero, más flexible que la fibra de carbono, más duro que el diamante, mejor conductor de la electricidad y el calor que el cobre, casi totalmente transparente e impermeable a cualquier gas, biocompatible y 100.000 veces más ligero

que el papel.

Enfocando la atención en sus propiedades mecánicas, existen tres tipos de deformación aplicables al grafeno: deformación en la dirección *armchair*, deformación en la dirección *zigzag* y deformación por cizalla (*shear strain*). La Figura 2 muestra una representación gráfica de estas tres deformaciones. Cualquier forma de deformación bidimensional concebible es una combinación de estas deformaciones, con la excepción de la deformación torsional.

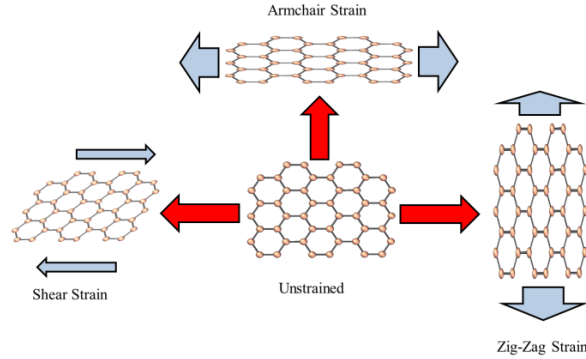


Figura 2: Tipos de deformaciones aplicables al grafeno. *Unstrained* es el grafeno sin deformar, mostrando su red hexagonal [20].

3.1. Obtención del grafeno

Existen diversos métodos de obtención del grafeno, entre los que podemos distinguir dos aproximaciones: *bottom up* (producir grafeno a partir de un gas que contiene C) y *top down* (usar grafito como fuente y aplicar técnicas de exfoliación mecánica para separar las láminas de C). La Deposición Química de Vapor (CVD) es una técnica *bottom up* utilizada para depositar películas delgadas sobre sustratos sólidos. El proceso consiste en introducir gases en una cámara de reacción donde, en contacto con superficies calientes, se producen reacciones químicas que generan un material sólido que se adhiere al sustrato, mientras que los subproductos volátiles son evacuados [13]. Adicionalmente, otra manera de obtener grafeno proviene de la reducción química del óxido de grafeno (GO) con plasma de hidrógeno [21]. El GO se obtiene mediante oxidación química del grafito y es más barato y fácil de producir que el grafeno puro, aunque tiene propiedades diferentes. En adición, el GO reducido (rGO) es GO en el que el contenido de oxígeno se ha reducido térmicamente o químicamente para aumentar su conductividad y mejorar sus propiedades.

El grafeno utilizado en un experimento, llevado a cabo por Anderson Smith [20], se obtiene *cultivándolo* sobre cobre mediante CVD. Luego, el cobre se elimina mediante grabado químico (se sumerge la lámina en una solución que disuelve el cobre), dejando solo una monocapa de grafeno, la cual se transfiere a un sustrato de silicio (Si) con una capa de SiO_2 , formando una membrana suspendida con aire atrapado debajo. Esta configuración evita el contacto directo con el sustrato, eliminando efectos de dispersión y contaminación. Luego, se colocan contactos en el dispositivo y se le somete a vacío. Al hacer esto, la presión del aire debajo del grafeno empujará contra él, provocando que la capa de grafeno se deforme.

3.2. Deformación experimental del grafeno

Para aplicar la deformación, de manera experimental, se pueden recurrir a varios métodos. Uno de ellos es la nanoindentación, en la que se utiliza la punta afilada (generalmente, de diamante) de

un microscopio de fuerza atómica (AFM) para presionar y deformar el grafeno de manera controlada (ver Figura 3). Otras maneras pueden ser aplicando voltajes para generar fuerzas electrostáticas que deformen el grafeno (actuación electrostática) o depositándolo sobre un sustrato flexible que puede estirarse o comprimirse.

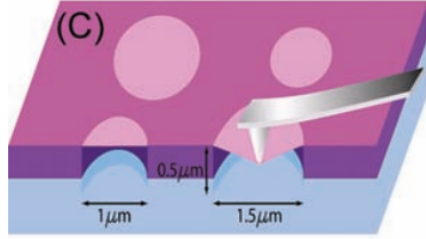


Figura 3: Esquema de nanoindentación en una membrana de grafeno suspendido (cavidades circulares) [22].

La Microscopía de Fuerza Atómica (AFM) es una técnica utilizada para estudiar las propiedades estructurales y mecánicas de diferentes muestras con resolución nanométrica. Utiliza una punta afilada montada sobre un *cantilever* flexible que interactúa con la superficie de la muestra. Las fuerzas de adhesión entre la punta y la muestra provocan deflexiones del *cantilever*, que son detectadas mediante un haz láser reflejado hacia un fotodetector. A partir de estas deflexiones, se genera una imagen topográfica o se miden fuerzas a nivel atómico. Tiene distintos modos de operación: modo contacto (punta en contacto constante con la muestra, cuya fuerza se mide a través de la deflexión del cantilever), modo intermitente (la punta vibra y toca la muestra intermitentemente, manteniendo constante la amplitud de oscilación) y modo no contacto (la punta no toca directamente la muestra, sino que oscila a una pequeña distancia de la superficie, detectando fuerzas de van der Waals) [7].

En un experimento, llevado a cabo por James Hone de la Universidad de Columbia [22], se empleó la nanoindentación con AFM para medir propiedades mecánicas en grafeno suspendido. Los resultados fueron los siguientes:

- **Módulo de Young:** $E = (1,0 \pm 0,1)$ TPa. Este valor indica cuánta fuerza se necesita para estirar el material en su régimen elástico (lineal), dándonos a entender que el grafeno es muy rígido.
- **Resistencia a la fractura:** $\sigma = (130 \pm 10)$ GPa. Indica la fuerza máxima por unidad de longitud que soporta el material antes de romperse.
- **Deformación en el punto de ruptura:** $\epsilon = 25\%$. Dice cuánto puede estirarse el grafeno, como porcentaje de su longitud original, antes de la fractura.

En el Cuadro 1 podemos observar que el grafeno es 5 veces más rígido que el acero. También es mucho más flexible, resistente y dúctil que este, como habíamos introducido. También se muestran las propiedades del nitruro de boro hexagonal (h-BN) [3], obtenidas mediante nanoindentación. Este es un aislante eléctrico (tiene un *gap* muy grande) y tiene una alta conductividad térmica, además de una gran resistencia mecánica. Su estructura hexagonal es similar a la del grafeno, pero en lugar de tener solo átomos de carbono, alterna átomos de boro (B) y nitrógeno (N) en la red (ver Figura 4). Observamos que el h-BN es mucho más rígido, soporta más esfuerzo antes de la fractura y es más dúctil que el acero, aunque no tanto como el grafeno.

Propiedad	Grafeno	Acero	h-BN
E	(1,0 ± 0,1) TPa	200 GPa	(865 ± 73) GPa
σ	(130 ± 10) GPa	(400–2500) MPa	(70,5 ± 5,5) GPa
ϵ	25 %	(10–15) %	(12,5 ± 3,0) %

Cuadro 1: Comparación de propiedades mecánicas del grafeno [22] y del h-BN monocapa [23], obtenidas experimentalmente mediante nanoindentación, frente a las del acero obtenidas mediante ensayos de tracción con probetas metálicas [24].

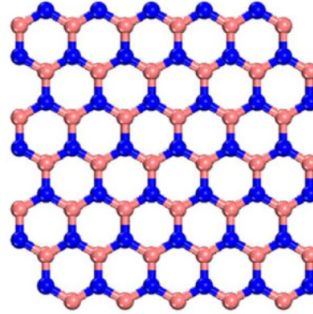


Figura 4: Estructura de una monocapa hexagonal con dos posiciones: (a) naranja y (b) azul. En el grafeno ambos átomos son C, mientras que en el BN, uno es N y el otro es B [25].

La Figura 5 muestra la relación entre la carga aplicada y la profundidad de indentación en el experimento llevado a cabo para obtener las propiedades mecánicas del grafeno [22]. Se usaron puntas de indentación con radios de 16.5 nm y 27.5 nm y películas de 1.5 μm y 1.0 μm de diámetro. Los puntos “×” marcan el punto de fractura de la membrana de grafeno, el cual depende del radio de la punta y del diámetro de la muestra. En adición, las puntas eran de diamante para que estas no se dañaran antes de que el grafeno alcanzara su punto de ruptura, como ocurría con las de silicio. Podemos observar que a mayor diámetro de la película, la carga necesaria para una misma profundidad de indentación es menor, debido a que una membrana más grande puede deformarse más fácilmente, actuando como una superficie más flexible. También observamos que las puntas de menor radio hacen que la ruptura ocurra antes, puesto que generan más concentración de esfuerzo.

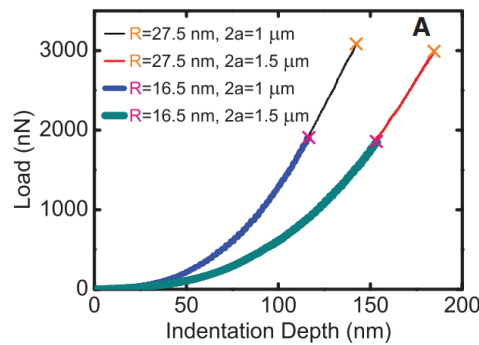


Figura 5: Relación entre la carga aplicada (*Load*) y la profundidad de indentación (*Indentation Depth*), en el grafeno, para diferentes condiciones [22].

3.3. Deformación del grafeno sobre sustratos: estudio mediante SEM y Espectroscopía Raman

En el experimento de Anderson Smith [20], se utiliza la Microscopía Electrónica de Barrido (SEM) para ver imágenes de las membranas de grafeno suspendidas y confirmar que el grafeno se deforma al entrar en las cavidades, como se observa en la Figura 6. El SEM es una técnica empleada para caracterizar materiales, que proporciona imágenes de alta resolución de la superficie de una muestra, revelando información morfológica, topográfica, estructural y composicional. Emplea un haz de electrones de alta energía que interactúa con los átomos de la muestra, generando señales electrónicas que son detectadas y convertidas en imágenes digitales. Los principales tipos de señales detectadas son los electrones secundarios (nos proporcionan información sobre la topografía) y los electrones retrodispersados (nos dan información sobre la estructura atómica), las cuales permiten estudiar la porosidad, el tamaño de grano, la forma de las partículas y la estructura cristalina de una muestra. Además, alcanza resoluciones del orden de los nanómetros y ofrece aumentos de hasta 500.000 veces, lo cual lo convierte en una buena herramienta para el análisis de nanoestructuras [10].

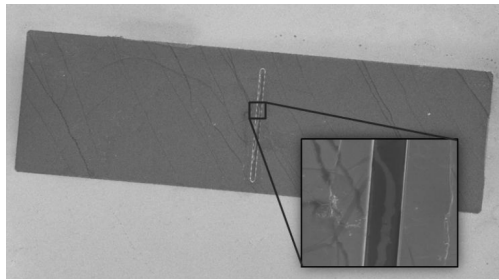


Figura 6: Imagen SEM del grafeno grabado sobre una cavidad [20].

En la Figura 6 aparece el grafeno muy oscuro en comparación con el resto del chip. Como en un dispositivo SEM, los electrones retrodispersados o secundarios son los responsables de la imagen, es posible que los electrones sean absorbidos y conducidos a lo largo del material en lugar de provocar eventos de dispersión que sean detectados por el SEM. Esto podría ocurrir debido a la alta conducción del grafeno. Asimismo, se observa un brillo en el borde de la cavidad, indicando que ahí la tensión está haciendo que el grafeno sea menos conductor.

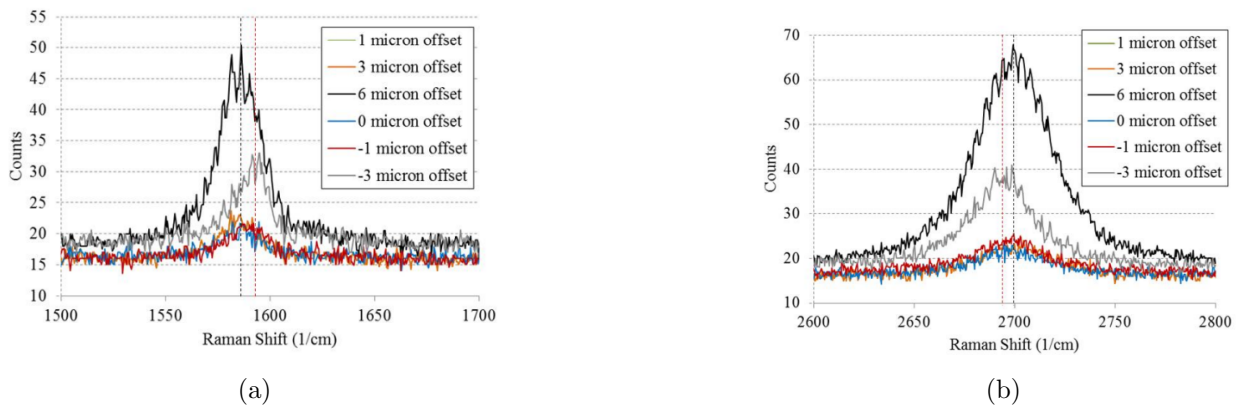


Figura 7: Análisis Raman del grafeno grabado [20]: (a) Pico G de la muestra de grafeno; (b) Pico 2D de la muestra de grafeno.

Por otro lado, se realizaron mediciones de Espectroscopía Raman en varios puntos de las cavidades para evaluar cambios en los picos G y 2D debido a la tensión. Esta técnica es fundamental para la caracterización del grafeno, debido a su capacidad para proporcionar información estructural y electrónica de forma rápida, no destructiva y con alta resolución espacial. En el espectro Raman del grafeno destacan dos bandas principales, cuyo análisis conjunto permite determinar cambios en la estructura electrónica del grafeno, mediante desplazamientos en las posiciones de los picos [11]:

- Pico G (1580 cm^{-1}): su posición y forma pueden verse afectadas por el dopado, la tensión mecánica o la temperatura del material.
- Pico 2D (2700 cm^{-1}): es muy sensible al número de capas de grafeno. Para una lámina, aparece como una banda única y simétrica. Para más láminas, se desdobra y se vuelve más ancha y asimétrica.

En la Figura 7, los desplazamientos de micras se refieren a los movimientos del punto de medición del láser Raman con respecto al centro de la cavidad, el cual corresponde al punto $0\text{ }\mu\text{m}$ (donde se alinea el láser Raman). Solo el punto a $-3\text{ }\mu\text{m}$ muestra un corrimiento al rojo en el pico G y al azul en el pico 2D, indicando tensión en esa posición específica. Los otros puntos no muestran cambios significativos, lo que confirma que la tensión está localizada cerca del borde de la cavidad, coincidiendo con lo observado en la Figura 6 y en la Figura 8.

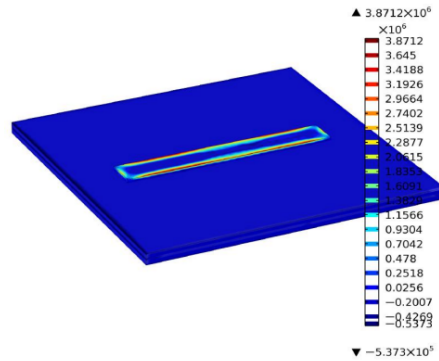


Figura 8: Perfil de deformación en una membrana rectangular [20].

En la Figura 8, la estructura rectangular representa una cavidad grabada en el sustrato sobre la cual se deposita el grafeno, mientras que los colores indican la magnitud de la deformación. Los colores amarillo y rojo muestran zonas con alta deformación (podrían indicar la apertura de un *gap*). La deformación es máxima en los bordes largos de la cavidad rectangular, confirmando que la geometría de la cavidad controla la dirección de la tensión. En este experimento, esta tensión localizada en los bordes se debe a una deformación inducida naturalmente por la forma en que se fabrica y se suspende el grafeno, como se menciona en el inicio de este apartado.

3.4. Deformación teórica del grafeno mediante DFT

La Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) es un método computacional ampliamente utilizado en física del estado sólido para estudiar las propiedades electrónicas de átomos, moléculas y materiales a $T = 0\text{K}$. Es ideal para estudiar sistemas nanoscópicos porque su alto costo computacional dificulta aplicarla a escalas macroscópicas o dinámicas. Su principal ventaja radica en que permite reducir el problema cuántico de N electrones interactuantes a un problema efectivo más

sencillo, basado únicamente en la **densidad electrónica** $\rho(\mathbf{r})$, en lugar de en la función de onda compleja $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ [4]. Para ello, tiene en cuenta distintas aproximaciones [26]:

- **Aproximación de Born-Oppenheimer:** Dado que los electrones tienen una masa mucho menor que los núcleos atómicos, se asume que los núcleos permanecen prácticamente fijos mientras los electrones se ajustan instantáneamente a sus posiciones. Esta aproximación permite separar el problema cuántico total en una parte electrónica y otra nuclear.
- **Teoremas de Hohenberg-Kohn (1964):** El primer teorema dice que la densidad electrónica $\rho(\mathbf{r})$ determina de forma única el potencial externo $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$, y por tanto, todas las propiedades del sistema. El segundo teorema dice que existe un funcional de energía $E[\rho]$ tal que su mínimo corresponde a la densidad electrónica del estado fundamental. Este funcional satisface un principio variacional:

$$E[\rho] \geq E[\rho_{\text{fund}}]$$

- **Ecuaciones de Kohn-Sham:** Permiten reducir el problema a la resolución de N ecuaciones de Schrödinger para las funciones de onda monoeléctricas, lo que se conoce como aproximación *one electron*, en la que el electrón percibe un potencial promedio producido por el resto de electrones e iones. Funciona bien en sistemas en los que la correlación entre electrones es poco importante. En sistemas altamente correlacionados, como sistemas magnéticos, la DFT requiere de mejoras en el término de canje y correlación.
- **Aproximación del término de intercambio y correlación:** El funcional exacto de intercambio y correlación $E_{\text{XC}}[\rho]$ no se conoce. Kohn y Sham (1965) propusieron la **Aproximación de la Densidad Local (LDA)**, en la que se considera un sistema ficticio de electrones no interactuantes que tienen la misma densidad que el sistema real. En nuestro caso, los resultados obtenidos con DFT se llevan a cabo usando el código *ABINIT*, el cual emplea otra aproximación que resuelve algunos problemas del LDA. Se trata de la **Aproximación de Gradiente Generalizado (GGA)**, la cual no solo incluye la densidad electrónica, sino también su gradiente (cómo varía en el espacio). Esto permite representar de manera más realista cómo cambia la energía de intercambio y correlación en regiones donde la densidad cambia rápidamente. Hay muchas formas de funcionales dentro de la GGA, como el PBE, PW91 o BLYP.
- **Aproximación de pseudopotenciales:** Para reducir el coste computacional, se emplean pseudopotenciales, que sustituyen el efecto de los electrones internos (no participativos) por un potencial efectivo, permitiendo centrarse solo en los electrones de valencia. Esto es especialmente útil en materiales con elementos pesados.
- **Teorema de Bloch:** Bajo la actuación de un potencial periódico, este teorema garantiza que, para un electrón con función de onda

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

donde \mathbf{k} es el vector de onda del electrón (puntos de la red recíproca) y $u_{\mathbf{k}}$ es una función con la misma periodicidad de la red directa; podemos reformular las ecuaciones de Kohn-Sham para pasar de tener un número infinito de átomos y de celdas de la red directa a infinitos puntos \mathbf{k} de la red recíproca. Este infinito número de puntos \mathbf{k} puede reducirse a un cálculo de un número finito de puntos \mathbf{k} especiales que caracterizan la primera zona de Brillouin. De esta manera, pasamos de un problema de infinitos átomos a un número finito de problemas de los átomos en la celda unidad.

Los resultados experimentales obtenidos, para el grafeno, en el apartado anterior pueden ser comparados con otros obtenidos mediante DFT usando el código *ABINIT* [27], como se muestra en el Cuadro 2. El procedimiento a seguir para la obtención de estos resultados se basa en aplicar deformaciones a una lámina de grafeno simulada computacionalmente, relajando la estructura en cada paso para obtener la configuración de mínima energía sin tensiones internas. Después, se aplica una deformación incremental en la celda hasta la ruptura. Se mantienen fijos los bordes y se relajan solo las posiciones atómicas internas. Para cada paso, se obtiene la energía total, el tensor de esfuerzos y la geometría relajada. Al terminar, se lleva a cabo una gráfica de la tensión frente a la deformación. En la región elástica, se ajusta una recta cuya pendiente es el Módulo de Young (E). El máximo de la curva corresponde a la resistencia a la fractura (σ) y la deformación correspondiente es la deformación en el punto de ruptura (ϵ).

Propiedad	Armchair	Zigzag
E (GPa)	1050	1050
σ (GPa)	110	121
ϵ	0.19	0.26

Cuadro 2: Propiedades mecánicas del grafeno calculadas en las direcciones *armchair* y *zigzag* mediante DFT.

El Módulo de Young (igual para ambas direcciones) coincide muy bien con el obtenido experimentalmente, mientras que la resistencia a la fractura teórica es ligeramente inferior a la experimental. La que más se acerca es la obtenida para la dirección *zigzag*. Por último, la DFT subestima la deformación en el punto de ruptura para la dirección *armchair*, mientras que es prácticamente igual para la dirección *zigzag*. Por lo tanto, el grafeno muestra mayor ductilidad en la dirección *zigzag*, resaltando la importancia de la orientación cristalográfica en las propiedades mecánicas de los materiales.

3.5. Deformación teórica del grafeno mediante DM

La Dinámica Molecular (DM) es otra técnica computacional que simula el movimiento de átomos y moléculas bajo las leyes de la física clásica a una temperatura finita. Se basa en integrar numéricamente las ecuaciones de movimiento de Newton, utilizando campos de fuerza para describir interacciones atómicas [6]. Tiene un coste computacional más bajo que la DFT, pero es menos preciso. La DM se suele aplicar a escalas microscópicas y captura fenómenos colectivos y dependientes del tiempo. El procedimiento para la obtención de los resultados computacionales, en este caso, es similar al mencionado para la DFT.

A continuación, se procederá a comparar las propiedades mecánicas del grafeno obtenidas anteriormente con las que se obtienen mediante DM [28], las cuales se muestran en el Cuadro 3.

Propiedad	Armchair	Zigzag
E (GPa)	961	911
σ (GPa)	93	106
ϵ	0.14	0.20

Cuadro 3: Propiedades mecánicas del grafeno calculadas en las direcciones *armchair* y *zigzag* mediante DM.

En este caso, podemos observar que la DM subestima todas las propiedades mecánicas obtenidas con anterioridad, tanto los valores experimentales como los obtenidos con DFT. Quizás sea por falta de defectos en el modelo o límites en la escala de tiempo. La deformación en el punto de ruptura para la dirección *zigzag* en MD se acerca más a los datos experimentales que para la *armchair*, pero ambas subestiman la ductilidad real.

3.6. Propiedades electrónicas del grafeno

A continuación, queremos ver qué ocurre cuando deformamos una capa de grafeno suspendida y cómo varían sus propiedades electrónicas. El experimento citado anteriormente, llevado a cabo por Anderson Smith [20], propone que la deformación mecánica podría inducirle a este semiconductor un *gap* de energía, del cual carece. Esto lo haría muy útil para ser empleado en transistores convencionales, entre otras aplicaciones. En la Figura 9, observamos que la banda de valencia (BV) y la de conducción (BC) se cruzan exactamente en un punto (punto de Dirac: K y K'), que se encuentra exactamente en el nivel de Fermi. Esta anulación de la densidad de estados en dicho nivel tiene como consecuencia una relación de dispersión lineal a bajas energías, determinando una región conocida como los conos de Dirac. Aquí, los electrones en la BC y los huecos en la BV se comportan como fermiones relativistas sin masa (fermiones de Dirac).

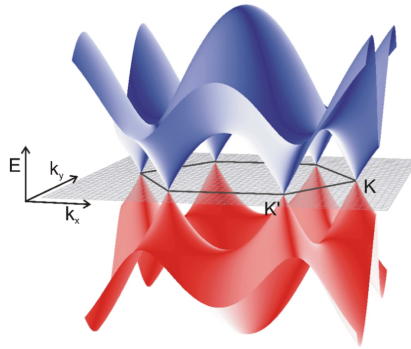


Figura 9: Vista esquemática de la estructura de bandas del grafeno con los conos de Dirac en las proximidades de los puntos K y K'. La superficie azul es la banda de conducción, la roja es la banda de valencia y el plano gris representa el nivel de energía de Fermi [29].

3.6.1. Cambios en las propiedades electrónicas del grafeno observados mediante TBMD

El *Tight Binding Model* (TBMD) es un método empleado para analizar diferentes propiedades de los materiales, pero con menor costo computacional y precisión que la DFT. No obstante, es capaz de capturar más fenómenos que la DM porque tiene en cuenta mejor los efectos cuánticos a través de los parámetros de la simulación. Es una aproximación cuántica que parte de la idea de que los enlaces entre átomos son covalentes (fuertes). Permite calcular las bandas de energía electrónica de un material, a través de la creación del hamiltoniano mediante los parámetros de los estados electrónicos y los parámetros de *hopping* (estos últimos permiten parametrizar la estructura de un material para distancias mayores) [5]. En el experimento de Anderson [20], se emplea para predecir cómo la deformación afecta a la estructura de bandas del grafeno.

Este modelo predice que la deformación uniaxial en la dirección *armchair* y la deformación combinada, ya sea *armchair* o *zigzag*, con cizalladura (*shear strain*) pueden inducir un *gap* de energía en el grafeno (ver Figura 10). Por ejemplo, **una deformación del 0.17% en la dirección *armchair* podría generar un *gap* de 0.95 eV**. Por otro lado, la tensión en la dirección *zigzag* sola,

así como el estiramiento biaxial (en ambas direcciones), no generan una apertura del *gap* [20].

Para terminar; otro estudio realizado con TBMD por Giulio Cocco, Emiliano Cadelano y Luciano Colombo [30]; demuestra que la **deformación uniaxial combinada con cizalladura** permite abrir un ***gap*** energético en el grafeno (hasta **0.9 eV**) con **deformaciones moderadas (12–17 %)**, evitando superar el límite de ruptura del material (25 %).

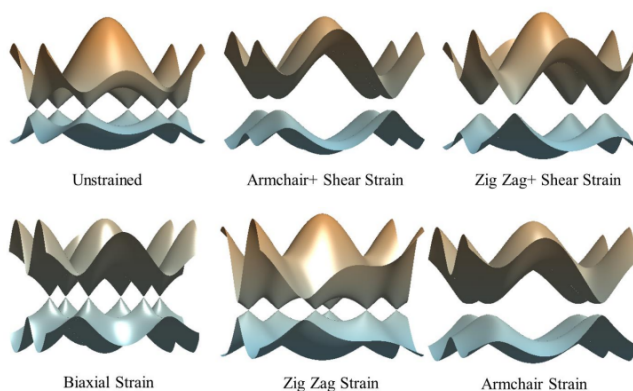


Figura 10: Cambio de la estructura de bandas según el tipo de deformación aplicada al grafeno. Las deformaciones que consiguen *abrir* un *gap* en el grafeno son en las que se observa una separación energética entre la banda de conducción y la de valencia [20].

3.7. Influencia de los defectos y la temperatura en las propiedades del grafeno

A continuación, se pretende analizar los efectos de la temperatura y los defectos en las propiedades mecánicas del grafeno.

3.7.1. Influencia de los defectos en el grafeno

Primero, se va a investigar el efecto de los siguientes tipos de defectos en el grafeno: vacantes simples (SV), vacantes dobles (DV) y defectos Stone-Wales (SW), como se muestra en la Figura 11. En este caso, en el SV eliminamos un átomo de carbono de la estructura prístina de grafeno, en el DV eliminamos dos átomos de carbono adyacentes y en el SW rotamos un enlace C-C en 90° .

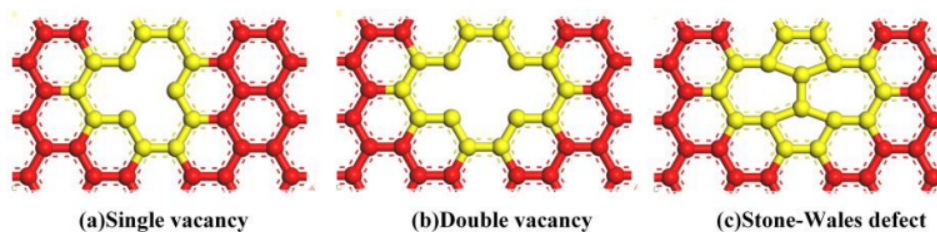


Figura 11: Tipos de defectos estudiados: (a) Vacante simple (SV); (b) Vacante doble (DV); y (c) Defecto de Stone–Wales (SW) [28].

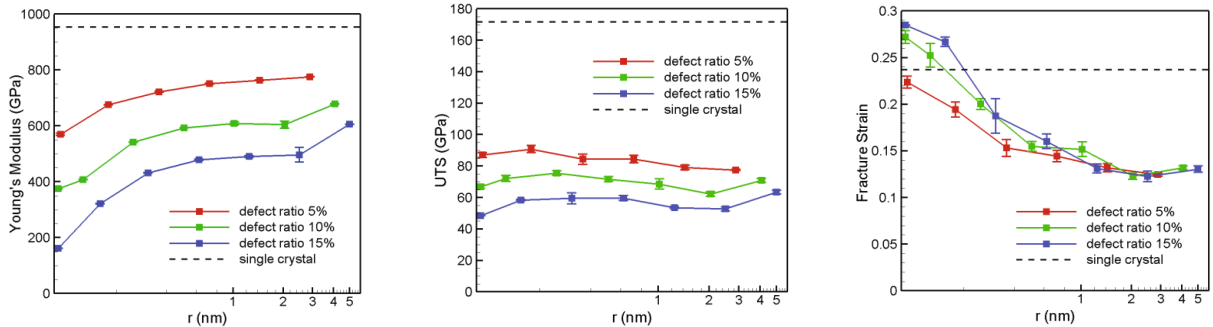
Los resultados de un estudio, llevado a cabo por Maoyuan Li con DM [28], se muestran en el Cuadro 4.

Propiedad	Dirección	Valor intrínseco	Tipo de defecto	Concentración de defectos (%)	Reducción (%)	Valor final aprox.
E (GPa)	Zigzag	911	SV	1,67	↓ 47.6	477
			DV		↓ 39.1	555
			SW		↓ 15-20	730-775
	Armchair	961	SV		↓ 45-50	480-530
			DV		↓ 35-40	580-625
			SW		↓ 15-20	770-820
σ (GPa)	Zigzag	106	SV, DV, SW	1,67	↓ 30-40	65-75
	Armchair	93	SV, DV, SW		↓ 30-40	55-65
ϵ	Zigzag	0,2	SV, DV, SW	1,67	↓ 40-50	0.10-0.12
	Armchair	0,14	SV, DV, SW		↓ 35-45	0.08-0.09
Conductividad térmica (W/mK)		182	SV	0,24	↓ 57.6	77.2
			DV		↓ 43.4	103
			SW		↓ 31.9	124

Cuadro 4: Comparación de propiedades mecánicas y térmicas del grafeno, con distintos tipos de defectos y orientaciones, obtenidas mediante DM.

Debido a los diferentes tamaños de los modelos, la concentración de defectos (densidad numérica de átomos removidos respecto al grafeno perfecto) varió. Observamos que las propiedades del grafeno, tanto las mecánicas como las térmicas, disminuyen ante la presencia de los tres tipos de defectos estudiados.

Cuando más disminuye el Módulo de Young, reduciéndose a la mitad de su valor intrínseco, es para la dirección *zigzag* con SV. Disminuye menos para la dirección *armchair* con defectos SW. La resistencia a la fractura no cambia apenas según el tipo de defecto y se reduce la misma cantidad para ambas direcciones. La deformación en el punto de ruptura disminuye más para la dirección *zigzag* y lo hace de la misma manera para los tres tipos de defectos. Por último, la conductividad térmica se ve más afectada para defectos SV. Concluimos en que las vacantes simples (SV) son las más críticas para degradar propiedades y que la dirección *zigzag* es más sensible a defectos que la *armchair*. También se observa que cuando la concentración de defectos es mayor al 7%, el comportamiento del grafeno cambia de frágil (no se deforma mucho antes de quebrarse) a dúctil (es capaz de deformarse plásticamente antes de romperse) [28].



(a) Módulo de Young según el radio de los defectos. (b) Resistencia a la fractura según el radio de los defectos. (c) Deformación máxima según el radio de los defectos.

Figura 12: Variación de las propiedades mecánicas del grafeno según el radio de los defectos [31].

Por otro lado, otro estudio, llevado a cabo por Youngho Park [31] mediante DM, reveló que el Módulo de Young aumenta con el radio de los defectos (referido al tamaño de los vacíos generados por defectos de tipo vacante, donde se han eliminado átomos de carbono), pero disminuye con el porcentaje de defectos. Mientras tanto, la deformación en el punto de ruptura disminuye con el aumento del radio de estos. Además, tiende a saturarse a valores similares cuando el radio de los defectos supera los 1.5 nm. Por último, la resistencia a la fractura se mantiene relativamente

constante en general, salvo en presencia de defectos muy pequeños, para los que presenta un ligero aumento. En cambio, con defectos muy grandes, también puede aumentar levemente como resultado de una rigidez localizada más alta. Estos resultados se muestran en la Figura 12.

3.7.2. Influencia de la temperatura en el grafeno

A continuación, queremos ver cómo varían las propiedades del grafeno para diferentes temperaturas mediante DM (ver Figura 13). Para ello, recurrimos al estudio de Maoyuan Li [28] mencionado anteriormente.

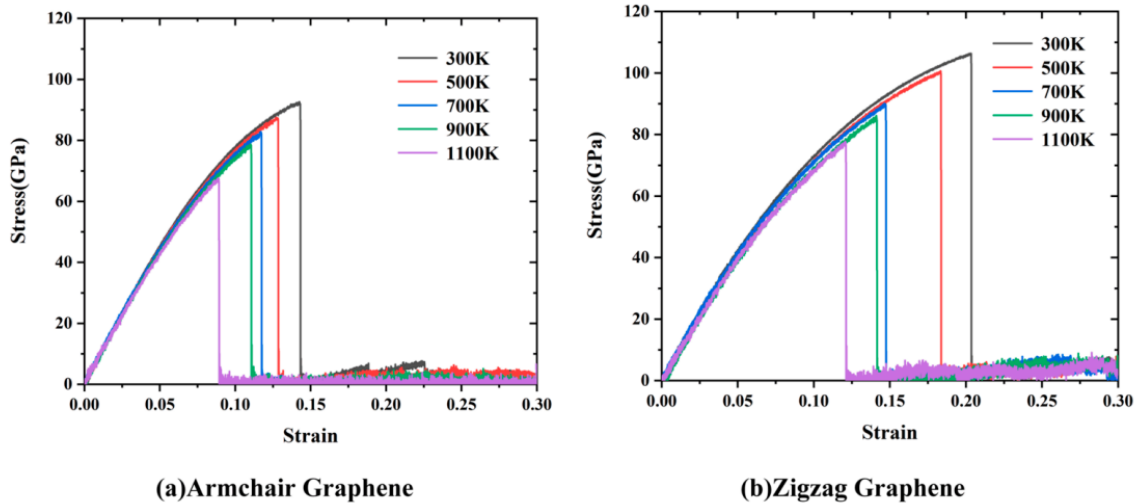


Figura 13: Curvas esfuerzo-deformación del grafeno a diferentes temperaturas a lo largo de las direcciones: (a) *armchair*; y (b) *zigzag* [28].

En la Figura 14 y en el Cuadro 5 podemos observar los resultados obtenidos. Muestran una leve disminución en la rigidez del grafeno con el aumento de temperatura, además de una pérdida considerable de resistencia mecánica y de ductilidad. La deformación en el punto de ruptura se reduce prácticamente a la mitad cuando pasamos de 300 K a 1100 K. Estos cambios son un poco más pronunciados para la dirección *zigzag*.

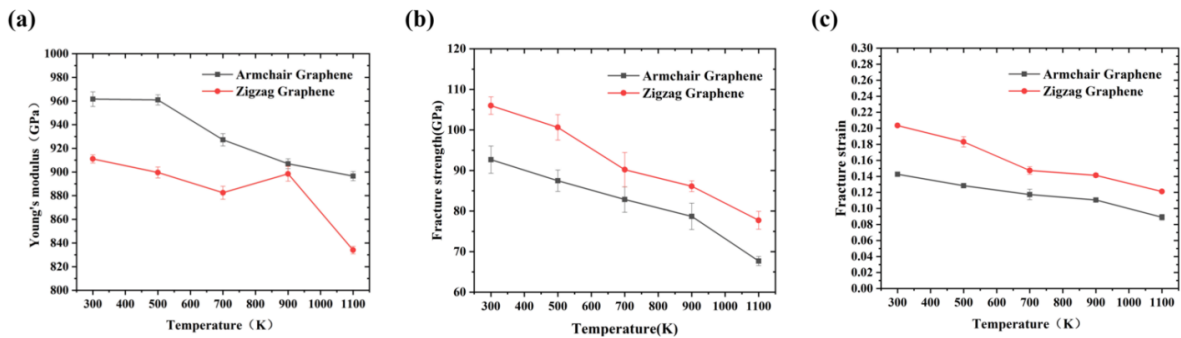


Figura 14: (a) Módulo de Young; (b) Resistencia a la fractura; y (c) Deformación en el punto de ruptura del grafeno a lo largo de las direcciones *armchair* y *zigzag* a diferentes temperaturas [28].

Dirección	Propiedad	300 K	1100 K	Cambio
Armchair	E (GPa)	961.61	896.56	-6.8 %
	σ (GPa)	92.67	67.68	-27 %
	ϵ	0.14	0.089	-37.6 %
Zigzag	E (GPa)	911.08	834	-8.5 %
	σ (GPa)	106	77.73	-26.7 %
	ϵ	0.204	0.121	-40.49 %

Cuadro 5: Propiedades mecánicas del grafeno en las direcciones *armchair* y *zigzag* a 300K y 1100K.

4. MoS₂

Un material con propiedades estructurales similares al grafeno y al BN es el MoS₂. Sus átomos forman una red hexagonal, pero en este caso los S quedan en planos diferentes al del Mo (en la posición S hay 2 átomos simétricamente colocados por encima y por debajo del Mo), como se muestra en la Figura 15. Las capas están unidas por fuerzas de Van der Waals, mientras que los enlaces Mo-S dentro de la misma capa son covalentes.

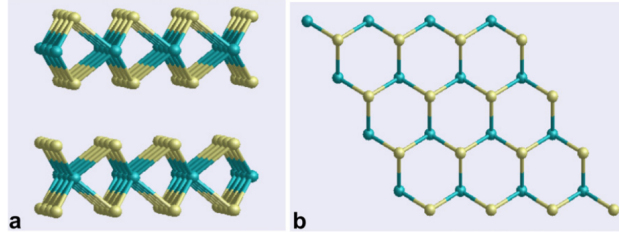


Figura 15: Estructura hexagonal del MoS₂: (a) Vista lateral del MoS₂; (b) Vista superior del MoS₂

4.1. Propiedades mecánicas del MoS₂

Queremos estudiar cómo varían las propiedades mecánicas del MoS₂ suspendido, obtenido mediante exfoliación, al ser deformado experimentalmente mediante nanoindentación con un AFM. Los resultados, obtenidos por Simone Bertolazzi, Jacopo Brivio y Andras Kis, para una monocapa y para una bicapa [32], se muestran en el Cuadro 6.

Propiedad	Monocapa MoS ₂	Bicapa MoS ₂
Módulo de Young (E)	(270 ± 100) GPa	(200 ± 60) GPa
Resistencia a la fractura (σ)	(22 ± 4) GPa	(21 ± 6) GPa
Deformación en el punto de ruptura (ϵ)	6–11 %	–

Cuadro 6: Propiedades mecánicas de MoS₂ en monocapa y bicapa obtenidas experimentalmente.

La monocapa tiene un módulo de Young y una resistencia a la fractura más alta, lo que sugiere que las interacciones intercapas en la bicapa reducen su rigidez. Por lo tanto, la monocapa de MoS₂ es mejor para aplicaciones que demandan mayor resistencia y flexibilidad .

Estos resultados experimentales pueden compararse con otros, obtenidos por Qing Peng y Suvrnu De, que emplean metodología DFT [33]. Se muestran los resultados para tres direcciones distintas en el Cuadro 7.

Propiedad	Armchair	Zigzag	Biaxial
E (GPa)	191	188	184
σ (GPa)	18	19	23
ϵ (%)	24	37	26

Cuadro 7: Simulaciones DFT de las propiedades mecánicas de una monocapa de MoS_2 [33].

Observamos que los valores obtenidos mediante DFT difieren bastante de los experimentales. El Módulo de Young, en este caso, es mucho más pequeño. No obstante, la incertidumbre del E hallado experimentalmente es muy grande (100 GPa), dándonos a entender que el experimento no era muy preciso. De cualquier modo, los valores de E teóricos se encuentran dentro del margen de error experimental. Asimismo, la resistencia a la fractura hallada en la dirección biaxial es la que más se acerca a la experimental. Para terminar, los datos teóricos sobreestiman la deformación en el punto de ruptura, dando valores más altos que los obtenidos mediante nanoindentación. Esto puede haber ocurrido debido a que el sistema teórico no incluye defectos y se hacen los cálculos a 0 K.

Por último, considerando el mismo espesor del MoS_2 monocapa, podemos ver qué valores se obtienen mediante DM [34]. Los resultados se recogen en el Cuadro 8.

Propiedad	Resultados
E	187.4 GPa
σ	17.7–22.3 GPa
ϵ	12–16 %

Cuadro 8: Propiedades mecánicas del MoS_2 monocapa obtenidas mediante DM.

Los resultados obtenidos mediante DM subestiman la deformación a la fractura comparado con los obtenidos mediante DFT. Sin embargo, los valores de E y σ sí que son bastante parecidos, aunque difieren de los valores experimentales.

4.2. Efectos de la deformación en las propiedades electrónicas del MoS_2

El MoS_2 posee un *gap* amplio, el cual es directo (aproximadamente 1.8 eV) para una monocapa e indirecto para multicapas (aproximadamente 1.2 eV). En la Figura 16 podemos observar esta diferencia, a través de la flecha que va desde el máximo de la banda de valencia hasta el mínimo de la banda de conducción.

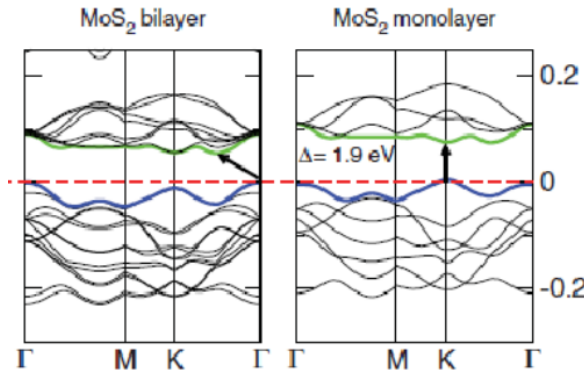


Figura 16: Estructura de bandas para el MoS_2 bicapa (*bilayer*) y monocapa (*monolayer*).

En un estudio, llevado a cabo por Andrés Castellanos Gómez y Rafael Roldán [35], se inducen deformaciones locales arrugando láminas de dicho material sobre un sustrato elástico pre-estirado. Al liberar la tensión del sustrato, se generan arrugas (ver Figura 17) alineadas con deformaciones uniaxiales de hasta 2.5%. Es en las crestas de estas arrugas donde se concentra la deformación uniaxial máxima.

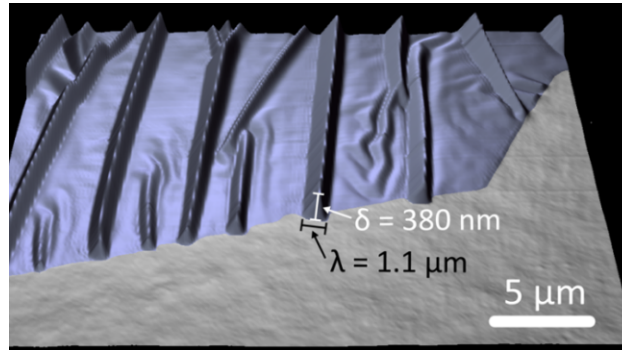


Figura 17: Imagen de topografía de AFM de las arrugas generadas en el MoS₂ (δ y λ representan la altura y el ancho de la arruga, respectivamente.) [35]

La energía de transición del *gap* disminuye al aumentar los valores de deformación uniaxial. Para una deformación del 2.5%, el cambio es de aproximadamente -90 meV, lo que corresponde a una reducción del 5% en la energía de transición de la banda prohibida directa. Este resultado puede observarse en la Figura 18.

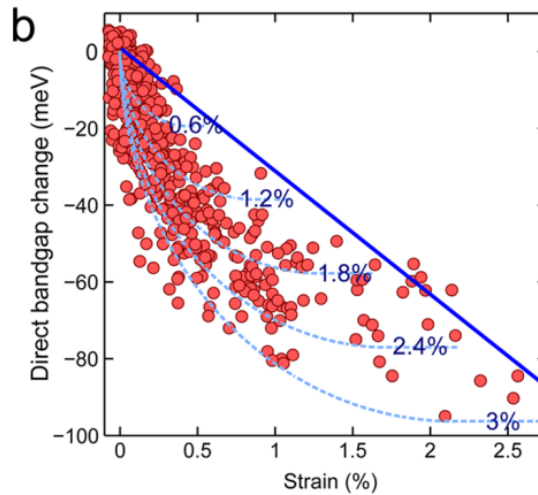


Figura 18: Cambio en el *gap* directo (en meV) del MoS₂ con la deformación uniaxial aplicada [35].

5. Desafíos futuros

Inicialmente, este trabajo pretendía incluir simulaciones computacionales con *Fireball* para deformar el BN. Este código implementa DFT con la aproximación LDA, pseudopotenciales y base de orbitales atómicos localizados. Asimismo, permite modelar sistemas grandes con menor costo computacional. Sin embargo, debido a problemas con las bases de los orbitales atómicos del BN

(no daban bien una estructura atómica ni electrónica del BN), no fue posible completar estas simulaciones. Como alternativa, se optó por basar el análisis en datos publicados de DFT, DM y datos experimentales sobre materiales más estudiados.

Por otro lado, este trabajo ha recopilado y analizado datos sobre materiales 2D como el grafeno, el MoS₂ y el BN. Sin embargo, el campo de los materiales bidimensionales es vasto y aún quedan muchas preguntas por responder, especialmente en materiales menos estudiados como el borofeno, siliceno, germaneno o fosforeno. Se propone, para futuros trabajos, estudiar estos materiales mediante DFT (código *Fireball*), de modo que se puedan comparar con los más estudiados y ver si ofrecen alguna ventaja respecto a estos.

6. Conclusiones

Este Trabajo de Fin de Grado ha explorado las propiedades mecánicas y electrónicas de materiales 2D, centrándose en el grafeno y el MoS₂, con el objetivo de responder a las cuestiones planteadas en la introducción. Hemos podido observar cómo afecta la deformación a las propiedades de estos materiales, además de las discrepancias que existen entre los modelos teóricos (DFT, DM y TBMD) y los resultados experimentales (AFM) a la hora de caracterizar estos materiales.

Para el grafeno, la DFT predice valores similares a los experimentales, mientras que la DM subestima las propiedades mecánicas de este por las aproximaciones que emplea este método. Además, técnicas como el SEM y la Espectroscopía Raman permiten caracterizar materiales 2D y comprobar el lugar en el que se localiza la tensión aplicada. También se comprueba que las propiedades de este material se ven afectadas por la presencia de defectos y el aumento de temperatura, reduciéndose sus propiedades mecánicas y térmicas. Para el MoS₂ la DFT y el experimento también concuerda (dentro de los márgenes de errores experimentales), pero la DM subestima la deformación a la fractura en este caso (requiere potenciales más refinados). Es importante resaltar que, en estos materiales, la dirección en la que se aplica la deformación es muy importante, puesto que las propiedades de estos pueden variar bastante según la dirección elegida.

Los métodos teóricos, como el TBMD, permiten explorar propiedades a nivel atómico, como la apertura de un *gap* en el grafeno bajo deformación o la reducción del *gap* del MoS₂. No obstante, requieren aproximaciones que pueden afectar a la precisión y no siempre capturan efectos macroscópicos, como los defectos. Por otro lado, los métodos experimentales proporcionan datos reales bajo condiciones controladas y permiten validar predicciones teóricas, aunque presentan dificultades a la hora de aislar muestras perfectas.

El grafeno destaca por su altísima resistencia y flexibilidad (seguido del BN), pero su rendimiento se degrada significativamente con defectos y el aumento de la temperatura. El MoS₂ tiene menor rigidez que el grafeno, pero su *gap* intrínseco lo hace más versátil para aplicaciones electrónicas. Sin embargo, su resistencia disminuye en bicapas. La combinación de estos materiales en heteroestructuras podría aprovechar sus ventajas individuales, superando limitaciones.

En definitiva, la sinergia entre teoría y experimentación sigue siendo la clave para desbloquear el potencial de estos materiales. Este trabajo subraya que no existe un material 2D perfecto, pero su selección inteligente y combinación abren puertas a tecnologías revolucionarias.

Referencias

- [1] Andre Konstantin Geim. Graphene: status and prospects. *science*, 324(5934):1530–1534, 2009.
- [2] Zhiming M Wang, C Ren, H Tian, J Yu, and M Sun. Mos2. *PTCDA Hybrid Hetero; Springer: Cham, Switzerland*, 2013.
- [3] Jens Eichler and Christoph Lesniak. Boron nitride (bn) and bn composites for high-temperature applications. *Journal of the European Ceramic Society*, 28(5):1105–1109, 2008.
- [4] Diola Bagayoko. Understanding density functional theory (dft) and completing it in practice. *AIP Advances*, 4(12), 2014.
- [5] W Matthew C Foulkes and Roger Haydock. Tight-binding models and density-functional theory. *Physical review B*, 39(17):12520, 1989.
- [6] Tomas Hansson, Chris Oostenbrink, and WilfredF van Gunsteren. Molecular dynamics simulations. *Current opinion in structural biology*, 12(2):190–196, 2002.
- [7] Andreea Trache and Gerald A Meininger. Atomic force microscopy (afm). *Current protocols in microbiology*, 8(1):2C–2, 2008.
- [8] Junli Du, Huihui Yu, Baishan Liu, Mengyu Hong, Qingliang Liao, Zheng Zhang, and Yue Zhang. Strain engineering in 2d material-based flexible optoelectronics. *Small Methods*, 5(1):2000919, 2021.
- [9] Richter Zengerle, A Richter, and H Sandmaier. A micro membrane pump with electrostatic actuation. In *[1992] Proceedings IEEE Micro Electro Mechanical Systems*, pages 19–24. IEEE, 1992.
- [10] Josué Clavijo et al. Caracterización de materiales a través de medidas de microscopía electrónica de barrido (sem). *Elementos*, 3(3), 2013.
- [11] L Andrew Lyon, Christine D Keating, Audrey P Fox, Bonnie E Baker, Lin He, Sheila R Nicewarner, Shawn P Mulvaney, and Michael J Natan. Raman spectroscopy. *Analytical Chemistry*, 70(12):341–362, 1998.
- [12] Andre K Geim and Konstantin S Novoselov. The rise of graphene. *Nature materials*, 6(3):183–191, 2007.
- [13] JR Creighton and P Ho. Introduction to chemical vapor deposition (cvd). *ASM international*, 407, 2001.
- [14] Terrance Barkan. Graphene: the hype versus commercial reality. *Nature nanotechnology*, 14(10):904–906, 2019.
- [15] Pablo Jarillo-Herrero. The discovery that stuck—20 years of graphene, 2024.
- [16] DDL Chung. Review graphite. *Journal of materials science*, 37:1475–1489, 2002.
- [17] Valentin N Popov. Carbon nanotubes: properties and application. *Materials Science and Engineering: R: Reports*, 43(3):61–102, 2004.
- [18] Harold W Kroto, James R Heath, Sean C O’Brien, Robert F Curl, and Richard E Smalley. C60: Buckminsterfullerene. *nature*, 318(6042):162–163, 1985.

- [19] Xiangjian Wan, Yi Huang, and Yongsheng Chen. Focusing on energy and optoelectronic applications: a journey for graphene and graphene oxide at large scale. *Accounts of chemical research*, 45(4):598–607, 2012.
- [20] Anderson David Smith. Strain effects on electrical properties of suspended graphene, 2011.
- [21] Cristina Gómez-Navarro, Marko Burghard, and Klaus Kern. Elastic properties of chemically derived single graphene sheets. *Nano letters*, 8(7):2045–2049, 2008.
- [22] Changgu Lee, Xiaoding Wei, Jeffrey W Kysar, and James Hone. Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. *science*, 321(5887):385–388, 2008.
- [23] Aleksey Falin, Qiran Cai, Elton JG Santos, Declan Scullion, Dong Qian, Rui Zhang, Zhi Yang, Shaoming Huang, Kenji Watanabe, Takashi Taniguchi, et al. Mechanical properties of atomically thin boron nitride and the role of interlayer interactions. *Nature communications*, 8(1):15815, 2017.
- [24] William D Callister Jr. Materials science and engineering: An introduction, hoboken, 2002.
- [25] Kun Ba, Wei Jiang, Jingxin Cheng, Jingxian Bao, Ningning Xuan, Yangye Sun, Bing Liu, Aozhen Xie, Shiwei Wu, and Zhengzong Sun. Chemical and bandgap engineering in monolayer hexagonal boron nitride. *Scientific reports*, 7(1):45584, 2017.
- [26] Manuel Lozano Bermúdez. Estirando el grafeno, 2024. Supervisado por César González Pascual.
- [27] Fang Liu, Pingbing Ming, and Ju Li. Ab initio calculation of ideal strength and phonon instability of graphene under tension. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 76(6):064120, 2007.
- [28] Maoyuan Li, Tianzhengxiong Deng, Bing Zheng, Yun Zhang, Yonggui Liao, and Huamin Zhou. Effect of defects on the mechanical and thermal properties of graphene. *Nanomaterials*, 9(3):347, 2019.
- [29] Milan Orlita and M. Potemski. Dirac electronic states in graphene systems: Optical spectroscopy studies. *Semicond Sci Technol*, 25, 04 2010.
- [30] Giulio Cocco, Emiliano Cadelano, and Luciano Colombo. Gap opening in graphene by shear strain. *Physical Review B—Condensed Matter and Materials Physics*, 81(24):241412, 2010.
- [31] Youngho Park and Sangil Hyun. Size effect of defects on the mechanical properties of graphene. *Journal of the Korean Physical Society*, 72:681–686, 2018.
- [32] Simone Bertolazzi, Jacopo Brivio, and Andras Kis. Stretching and breaking of ultrathin mos2. *ACS nano*, 5(12):9703–9709, 2011.
- [33] Qing Peng and Suvranu De. Outstanding mechanical properties of monolayer mos 2 and its application in elastic energy storage. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 15(44):19427–19437, 2013.
- [34] Si Xiong and Guoxin Cao. Molecular dynamics simulations of mechanical properties of monolayer mos2. *Nanotechnology*, 26(18):185705, 2015.
- [35] Andres Castellanos-Gomez, Rafael Roldán, Emmanuele Cappelluti, Michele Buscema, Francisco Guinea, Herre SJ Van Der Zant, and Gary A Steele. Local strain engineering in atomically thin mos2. *Nano letters*, 13(11):5361–5366, 2013.