


# PARÁMETROS DE REACTIVIDAD DEL GRAFENO NEGRO VS. GRAFENO BLANCO DE DIMENSIONES DE 1,0 NM<sup>2</sup>: ESTUDIO QUÍMICO CUÁNTICO COMPUTACIONAL

 VIANEIS DE JESÚS ARAUJO CONTRERAS<sup>1</sup>  
OLGA LUCÍA CASTELLANO<sup>2</sup>  
SAMUEL ELIGIO SAMBRANO ROJAS<sup>3</sup>  
RAMÓN DE JESÚS BERTEL PALENCIA<sup>4</sup>

## RESUMEN

Se investigaron los parámetros de reactividad del grafeno extendido (grafeno negro con simetría  $D_{2h}$ ) y el nitruro de boro (h-BN) (grafeno blanco con simetría  $C_{2v}$ ), ambos con dimensiones de 1.0 nm<sup>2</sup>, usando la teoría del funcional de la densidad (DFT) combinada con la metodología HCTH/GGA/DNP. Para la estabilidad estructural se consideró el criterio de obtención de autovalores positivos de la matriz hessiana. Para obtener los parámetros de reactividad (potencial químico, dureza química, *gap* e índice electrofílico) se consideraron los orbitales moleculares HOMO y LUMO; además, se reportan la densidad de estados molecular (DOS) y las propiedades eléctricas y electrónicas. Los resultados indican que el grafeno blanco es mucho más estable, pero más reactivo que el grafeno negro, debido a los valores obtenidos para la dureza química (1,157 eV y 0,329 eV, respectivamente), el potencial químico (2,39 eV y 3,85 eV, respectivamente) y el *gap* (2,313 eV y 0,657 eV respectivamente). Los valores del índice electrofílico indican que el grafeno negro podría adsorber sobre su superficie alguna molécula prefiriendo el proceso de fisorción ( $\epsilon=0,0$  eV), mientras que al grafeno blanco podría tener preferencia por la quimisorción dado que se observan valores diferentes de cero ( $\epsilon=0,28$  eV).

**PALABRAS CLAVE:** grafeno, nitruro de boro, teoría del funcional de la densidad, orbitales moleculares y parámetros de reactividad.

## REACTIVITY PARAMETERS VS. BLACK GRAPHITE WHITE GRAPHENE DIMENSIONS OF 1.0 NM<sup>2</sup>: COMPUTATIONAL QUANTUM CHEMICAL STUDY

## ABSTRACT


Reactivity parameters of an extended graphene (black grapheme, symmetry  $D_{2h}$ ) and boron nitride (h-BN) (white grapheme, symmetry  $C_{2v}$ ), with dimensions of 1.0 nm<sup>2</sup>, were calculated using the Density Functional Theory (DFT)

<sup>1</sup> Lic. En química y biología, Doctora en química. Docente tiempo completo Universidad de la Guajira. Miembro del Grupo de Investigación GIFES

<sup>2</sup> Lic. En química. Doctora en química y física, Investigadora en PDVSA-Intevep. El Tambor, Los Teques, Venezuela

<sup>3</sup> Lic. En física y matemáticas, Magister en ciencias físicas y aplicadas. Docente tiempo completo Universidad de La Guajira. Miembro del grupo de Investigación GIFES

<sup>3</sup> Lic. En matemáticas, Magister en ciencias físicas y aplicadas. Docente tiempo completo Universidad de La Guajira. Miembro del grupo de Investigación GIFES

 Autor de correspondencia: Araujo Contreras, V.d.J. (Vianeis De Jesús): Universidad de la Guajira, Km 5 vía a Maicao. Tel.: (57) 3017359901 / Correo electrónico: varaujo@uniguajira.edu.co,

Historia del artículo:

Artículo recibido: 15-XI-2015 / Aprobado: 09-III-2016

Disponible online: mayo 30 de 2016

Discusión abierta hasta mayo de 2017

combined with HCTH/GGA/DNP methodology. For structural stability criterion obtain positive vibration frequencies continues. For reactivity parameters: chemical potential, chemical hardness, and electrophilic gap index, molecular orbitals (HOMO and LUMO) were considered. Furthermore, the molecular density of states (DOS) and the electrical and electronic properties are reported. The results for the chemical hardness (1.157 eV and 0.329 eV, respectively), the chemical potential (2.39 eV and 3.85 eV, respectively) and the gap (2.313 eV and 0.657 eV, respectively) indicate that the white graphene is more stable and more reactive than black graphene. Electrophilic index values indicate that the black graphene preferably adsorbs molecule on its surface by physisorption ( $\epsilon = 0.0$  eV), while the white graphene is more suitable for chemisorption as consequence of the observed nonzero values ( $\epsilon = 0.28$  eV).

**KEYWORDS:** Graphene, boron nitride, Density functional theory, molecular orbitals and reactivity parameters.

## PARÂMETROS DE REATIVIDADE DO GRAFENO PRETO VS. GRAFENO BLANCO DE DIMENSÕES DE 1,0 NM<sup>2</sup>: ESTUDO QUÍMICO QUÁNTICO COMPUTACIONAL.

### RESUMO

Se pesquisaram parâmetros de reatividade do grafeno estendido (grafeno preto com simetria D<sub>2h</sub>) e nitreto de boro (h-BN) (grafeno branco com simetria C<sub>2v</sub>), ambos com dimensões de 1,0 nm<sup>2</sup>, usando a teoria do funcional da densidade (DFT) combinada com a metodologia HCTH/GGA/DNP. Para a estabilidade estrutural se considerou o critério de obtenção de autovalores positivos da matriz Hessiana. Para obter os parâmetros de reatividade (potencial químico, dureza química, gap e índice electrofilico) se consideraram os orbitais moleculares HOMO e LUMO; Além disso, se reporta a densidade de estados moleculares (DOS) e as propriedades eléctricas e electrónicas. Os resultados indicam que o grafeno branco é muito mais estável, mas mais reativo do que o grafeno preto, isto devido aos valores obtidos para a dureza química (1,157 eV e 0,329 eV, respectivamente), o potencial químico (2,39 eV e 3,85 eV, respectivamente) e o gap (2,313 eV e 0,657 eV, respectivamente). Os valores do índice electrofilicos indicam que o grafeno preto pode adsorver sobre sua superfície alguma molécula preferindo o processo fisiossorção ( $\epsilon = 0,0$  eV), enquanto o grafeno branco poderia ter preferência por a quimissorção por que se observa valores diferentes de zero ( $\epsilon = 0,28$  eV).

**PALAVRA-CHAVE:** Grafeno, nitreto de boro, a teoria do funcional da densidade, orbitais moleculares e parâmetros de reatividade.

---

### 1. INTRODUCCIÓN

Para comprender el potencial de la nanotecnología es importante saber que las propiedades físicas y químicas de la materia cambian a escala nanométrica, debido al predominio de los efectos cuánticos. La conductividad eléctrica, el calor, la resistencia, la elasticidad, la reactividad y otras propiedades de un material se comportan de una manera diferente a diferentes escalas; Boddien y Junge (2011). La nanotecnología ha tenido un gran impacto en el campo de la química, siendo un tópico de actual interés el estudio de nanoclusters de átomos; Jacobser (2009), Maubert, *et al.* (2008), Whitesides (2005), los cuales poseen importancia tanto en catálisis como en el desarrollo de nuevos materiales de

varias aplicaciones. Dentro de la escala nanométrica, los materiales como el grafeno y el nitruro de boro han sido estudiados de forma teórica usando modelos moleculares, los cuales permiten caracterizar estos materiales y así poder determinar sus potenciales aplicaciones como, por ejemplo, la capacidad para adsorber moléculas. La estructura hexagonal del grafito en dos dimensiones llamada grafeno fue aislada por el grupo de Novoselov *et al.* (2004), dando origen a una variedad de materiales con la misma estructura hexagonal como el nitruro de boro; Novoselov, *et al.* (2005), grafano; Sofo, Chaudhari y Barber (2007), Elias *et al.* (2009). Recientemente, empleando las técnicas de exfoliación y deposición química de vapor fue posible aislar mono-

capas de grafito con espesores variables, conduciendo a un nuevo tipo de material tridimensional conocido como grafito; Dresselhaus (2010), Nagashima, *et al* (1993). Estas estructuras han sido confirmadas por diferentes técnicas experimentales, como son la microscopía óptica y de fuerza atómica, entre otras.

Desde que fue aislado el grafito se le han encontrado importantes propiedades y aplicaciones, como su dureza, flexibilidad, óptica y capacidad para absorber moléculas gaseosas; Schedin *et al.* (2007), Lee *et al.* (2008), Nair *et al.* (2008). Debido a que fue el primer tipo de material completamente bidimensional a nivel molecular, el grafito es considerado modelo estructural para estudios de simulación computacional relacionados con grafito, fullerenos y nanotubos de carbono. El nitruro de boro por sus propiedades físicas, químicas y mecánicas, como la dureza, alto punto de fusión, baja constante dieléctrica, gran brecha de energía (6,0 eV), es uno de los compuestos más interesantes formados por átomos de los grupos II y IV de la tabla periódica (Arya y D'Amico, 2002). El nitruro de boro forma diferentes fases que son análogas al carbono, la fase hexagonal del nitruro de boro (h-BN) se asemeja al grafito y la fase cubica del nitruro de boro (c-BN) al diamante (Teghil, Marotta, y Di Palma, 1998), dependiendo de la fase se puede encontrar diferentes propiedades como es la del nitruro de boro en la fase hexagonal que forma hibridaciones  $sp^2$  siendo un material que es muy útil para lubricantes, en comparación con el grafito (Xiaopeng y Meiyang, 2002), el h-BN es eléctricamente aislante debido a la falta de deslocalización de los enlaces  $\pi$  (Reisse y Weissmantel, 1999), este material presenta una dureza de aproximadamente de 15 GPa y también es muy utilizado para dispositivos de emisión de campo, dispositivos optoelectrónicos y semiconductores de alta potencia (Miyake y Wang, 2005). Mientras que el nitruro de boro cubico (c-BN) presenta hibridación  $sp^3$  que le permite poseer diversas propiedades como es alta resistencia al desgaste, resistencia a la oxidación, bajo coeficiente de fricción y es considerado el segundo material más duro después del diamante con una dureza de 70GPa (Deng y Chen, 2006), siendo este material un buen candidato para el recubrimiento de herramientas que han sido expuestas a ambientes de alto grado de desgaste como son las herramientas de

corte, este recubrimiento duro es muy dependiente del espesor de la película. (He y Li, 2005).

El grupo de investigación que desarrolló este trabajo ha estado interesado en el estudio de materiales a nivel nanométrico, con posibles aplicaciones en diferentes campos, por lo que el presente trabajo pretende, mediante los métodos de la química computacional, estudiar los parámetros de reactividad del grafito extendido y del nitruro de boro hexagonal con dimensiones de  $1,0 \text{ nm}^2$ .

## 2. MATERIALES Y MÉTODOS (DETALLES COMPUTACIONALES)

En el presente estudio se usó la teoría del funcional de la densidad (DFT) (Kohn, Becke y Parr, 1996; Jones y Gunnarsson, 1989; y Kohn, 1999), desarrollada por Walter Kohn en la década de los años 60 y usando el código DMOL-3 (versión 4.3) disponible de Accelrys Inc. (Delley, 1990). El método fue combinado con la funcional HCTH a nivel LDA desarrollada por Hamprecht *et al.* (1998), el cual incluye corrección para el gradiente de correlación y la base atómica polarizada (incluye un orbital  $p$  para el hidrogeno y  $d$  para el carbono, nitrógeno y boro) a nivel *all-electron* para el tratamiento del core (DNP) (Delley, 1990 y 2000). La Multiplicidad=1 (singlete) y carga=0 (neutra) fue utilizada para todas las estructuras. Fueron considerados los orbitales HOMO (orbital molecular más alto ocupado) y LUMO (orbital molecular más bajo desocupado) para obtener los parámetros de reactividad; representando la dureza química como:  $n = (\text{LUMO}-\text{HOMO})/2$  (Becke, 1993), para el potencial químico se tiene  $\mu = (\text{LUMO}+\text{HOMO})/2$  (Perdew, Burke y Wang, 1992), para el índice electrofilico  $\epsilon = n^2/2u$  (considerado como parámetro de transferencia electrónica) (Hehre, Dichfied y Pople, 1972) y la diferencia de energía entre el HOMO y LUMO es la energía de la banda prohibida o *gap* (Fujita *et al.* 1996). Los umbrales de convergencia utilizados con DFT/GGA/HCTH para la variación de la energía, la fuerza máxima y el máximo desplazamiento atómico entre los ciclos de optimización fueron:  $1 \times 10^{-5}$  Hartree, 0,002 Hartree/Å y 0,005 Å, respectivamente. El cambio máximo permitido de cualquier coordenada cartesiana fue de 0,3 Å. Para encontrar la estabilidad de la estructura mínima

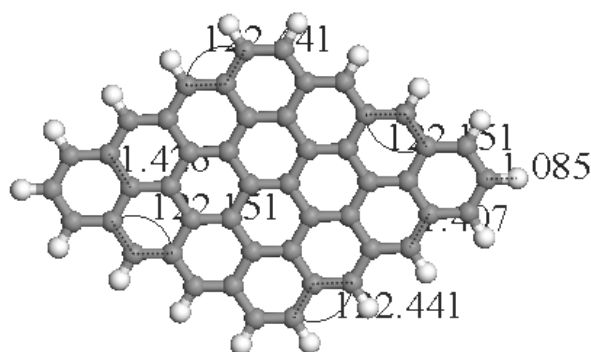
se siguió el criterio de tener frecuencias de vibración positivas (Foresman y Frisch, 1996).

### 3. RESULTADOS

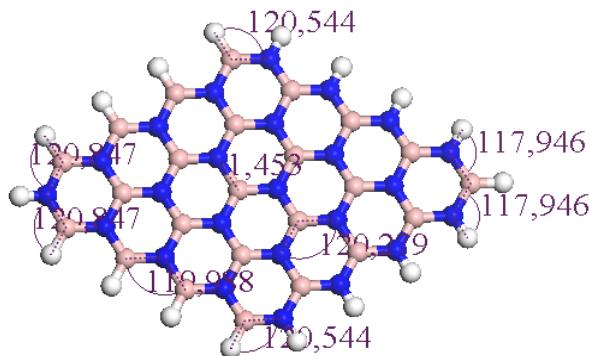
Como un paso preliminar al estudio de las aplicaciones potenciales del grafeno y el h-BN, se ha logrado describir de forma teórica utilizando cálculos DFT las propiedades estructurales, de reactividad; mediante descriptores químicos y vibracionales de estos materiales. De acuerdo a los resultados estructurales obtenidos se puede observar que tanto los enlaces B-N, C-C y C-H como los ángulos B-N-B y C-C-C se encuentran en el rango de los valores típicos para estos átomos (Ver **Tabla 1**). Además, a través del análisis de la matriz Hessiana de la geometría optimizada se muestra que la estructura representa un mínimo global en la superficie de energía potencial (frecuencias vibracionales reales) debido a la ausencia de autovalores negativos en la matriz Hessiana, presentando 198 modos de vibración para los dos materiales. En las **Figuras 2a** y **2b** de los orbitales moleculares HOMO se observa contribuciones únicamente del 2py del carbono para el grafeno 1,0 nm<sup>2</sup> y 2pz de los nitrógenos en el h-BN 1,0 nm<sup>2</sup> (**Tabla 2**).

Por otro lado, para el orbital LUMO (**Figuras 3a** y **3b**) se observa la contribución de los orbitales atómicos 2pz de los boros en el h-BN 1,0 nm<sup>2</sup> y 2py del carbono para el grafeno 1,0 nm<sup>2</sup>. En las **Figuras 2a** y **3a** se puede observar que el grafeno cuando pasa del HOMO al LUMO presenta un cambio de fase en la función de onda, lo que se puede notar en el cambio de color en la parte derecha de la **Figura 3a** con respecto a la **Figura 2a**. Mientras que en el h-BN ocurre un desplazamiento de cargas, pues la distribución de carga cambia desde los átomos de nitrógeno (HOMO) a los de Boro (LUMO), desaparece densidad de carga en el centro y aumenta en los bordes sobre los boros, es decir una polarización en la superficie. Como se dijo en la sección de metodología, estos orbitales fueron utilizados para conocer la reactividad química de los sistemas y de acuerdo con los resultados de los parámetros de reactividad (**Tabla 4**) estos nos indican que el grafeno presenta menor grado de reactividad que h-BN (según el potencial químico), resultado que no se encuentra en concordancia con los reportados por Chigo y Juárez, (2008). De igual manera, el grafeno presenta menor resistencia a la redistribución electrónica (según la dureza química) que la del h-BN, además el comportamiento del grafeno es de semiconductor (**Figura 1a**. DOS para el grafeno) y el h-BN de aislante (**Figura 1b**. DOS para el h-BN).

**Tabla 1.** Estructuras optimizadas con la metodología DFT/GGA/HCTH/DNP del grafeno y el nitruro de boro hexagonal (h-BN).



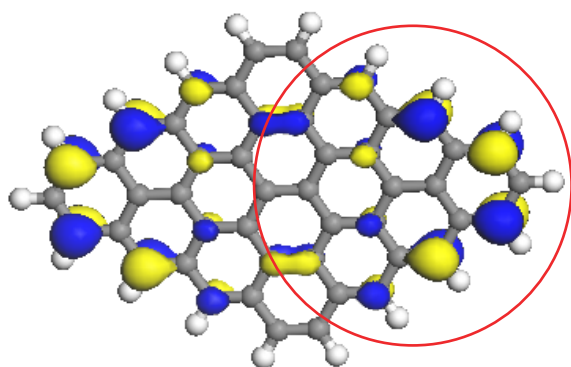
**Figura 1a.** Grafeno negro: enlaces C-C y C-H, ángulos C-C-C.



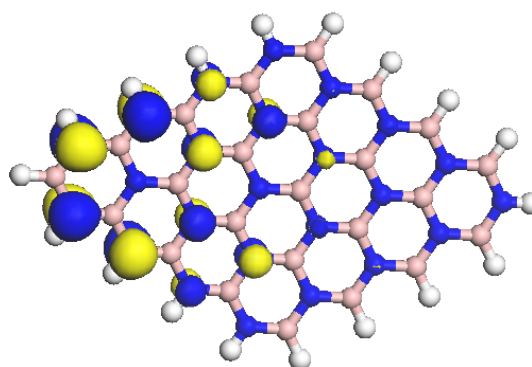
**Figura 1b.** h-BN: Enlaces B-N y ángulos N-B-N, H-N-B y H-B-N.

Benceno C-C: 1,4 Å (Pauling,1996); grafito N-B: 1,421 Å (Pauling, 1996); Ferroceno / Fullerenos C-C: 1,4 /1,46 Å (Seibold y Sutton,1965); Nanotubo-NB N-B: 1,45 Å (Rubio, Corkill & Cohen, 1994).

**Tabla 2.** Orbitales moleculares HOMO para el grafeno 1,0 nm<sup>2</sup> y h-BN 1,0 nm<sup>2</sup> obtenidos con la metodología DFT/GGA/HCTH/DN

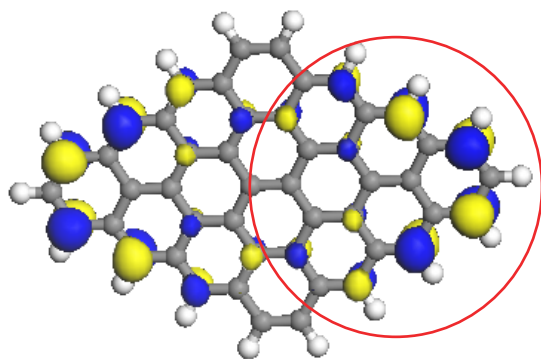


**Figura 2a.** Orbital molecular HOMO del grafeno 1,0 nm<sup>2</sup>, de contribución atómica por parte de orbitales atómicos 2py del carbono.

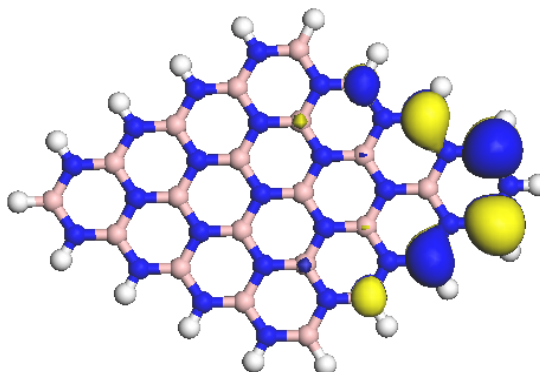


**Figura 2b.** Orbital molecular HOMO del h-BN 1,0 nm<sup>2</sup>, cuya contribución atómica se tiene por parte de los orbitales 2pz del nitrógeno.

**Tabla 3.** Orbitales moleculares LUMO para el grafeno 1,0 nm<sup>2</sup> y h-BN 1,0 nm<sup>2</sup> obtenidos con la metodología DFT/GGA/HCTH/DNP.



**Figura 3a.** Orbital molecular LUMO del grafeno 1,0 nm<sup>2</sup>, de contribución atómica por parte de orbitales atómicos 2py del carbono.



**Figura 3b.** Orbital molecular LUMO del h-BN 1,0 nm<sup>2</sup>, de contribución atómica por parte de orbitales atómicos 2pz del boro.

**Tabla 4.** Parámetros de reactividad química calculados utilizando los valores del HOMO y LUMO y el momento dipolar para el grafeno 1,0 nm<sup>2</sup> y h-BN 1,0 nm<sup>2</sup> obtenidos con la metodología DFT/GGA/HCTH/DNP.

| MATERIAL  | Momento dipolar en (Debyes). | Potencial químico ( $\mu$ ) (eV) | Dureza química (n) (eV) | Índice electrofílico ( $\epsilon$ ) (eV) | gap (eV) |
|---|------------------------------|----------------------------------|-------------------------|--|----------|
| Grafeno 1,0 nm <sup>2</sup> (Simetría D <sub>6h</sub> ) | 0,0                          | -3.85                            | 0.329                   | -0.01                                    | -0.657   |
| h-BN 1,0 nm <sup>2</sup> (Simetría C <sub>2v</sub> )    | 0,22                         | -2.39                            | 1.157                   | -0.28                                    | -2.313   |

Figura 1a. Gráfica de la DOS (Electrones/ Ha Vs. Energía en Ha) del grafeno 1,0 nm<sup>2</sup> con gap = -0.657 eV  $\approx$  -0,024 Ha.

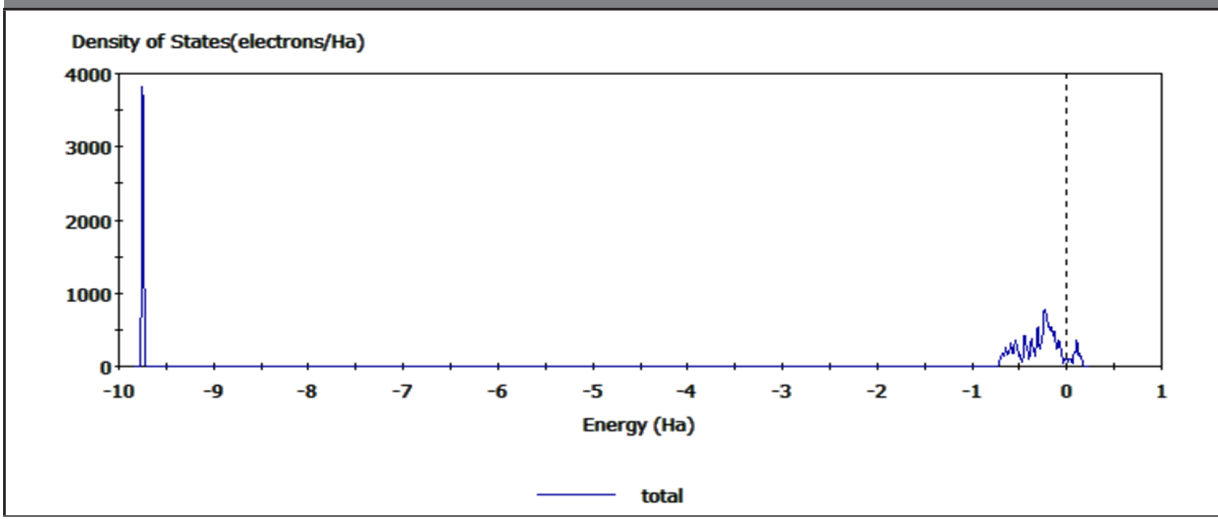
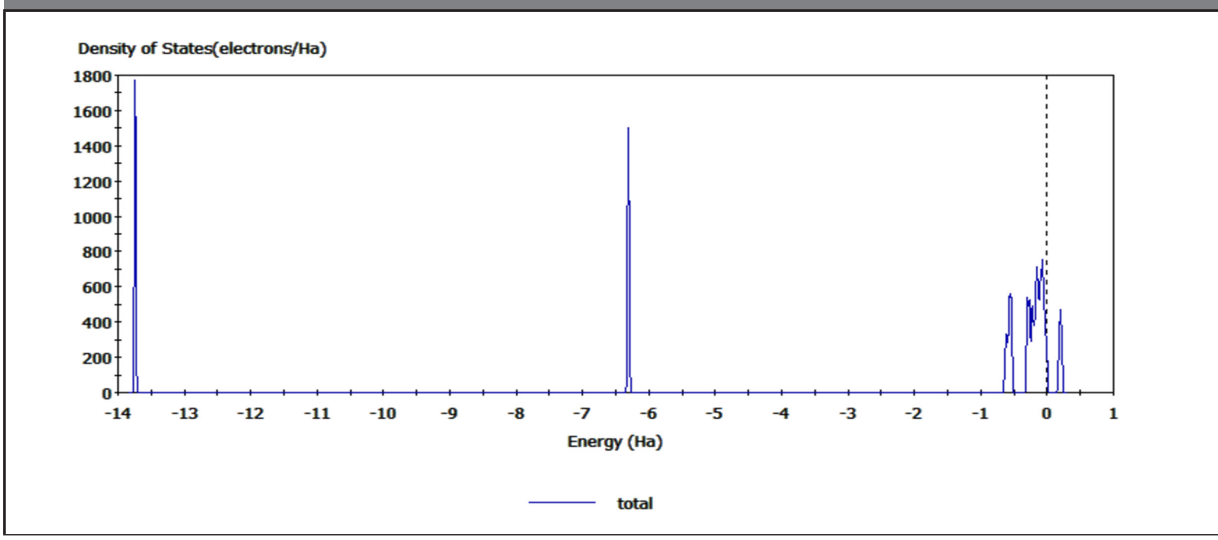


Figura 1b. Gráfica de la DOS (electrones/ Ha Vs. Energía en Ha) del h-BN 1,0 nm<sup>2</sup> con gap = -2.313 eV  $\approx$  -0,084 Ha.



Por su parte, el índice electrofílico ( $\epsilon$ ) por su valor numérico bajo nos indica que el grafeno podría ser más estable cuando acepte una carga electrónica adicional, prefiriendo el proceso de fisisorción ( $\epsilon=0,0$  eV), mientras que el h-BN podría tener preferencia por la quimisorción dado que se observan valores diferentes de cero ( $\epsilon=0,28$  eV). Finalmente, presenta un mayor grado de covalencia el grafeno que el nitruro de boro según nos indica el valor del momento dipolar.

#### 4. CONCLUSIONES

En este trabajo mediante el uso de la simulación computacional molecular se logró concordar con lo reportado en la literatura (Novoselov *et al.*, 2004; y Schedin *et al.* 2007) sobre la existencia de grafenos extendidos y nitruro de boro en condiciones normales de temperatura y presión.

Dichos sistemas presentan el comportamiento electrónico de semiconductor para el grafeno negro y para el nitruro de boro (grafeno blanco) un comporta-

miento electrónico de aislante, pero con mayor reactividad química, además de menor covalencia que el grafeno negro (indicado por el momento dipolar).

Finalmente, se concluye que el grafeno negro presenta mayor dificultad a que se pueda presentar el proceso de quimisorción que en el h-NB, según nos indican los valores numéricos de los parámetros de reactividad química. Estos estudios nos servirán para entender mejor el proceso de adsorción de átomos y moléculas sobre la superficie de estos materiales, así como la predicción de nuevas estructuras.

## REFERENCIAS

- Arya, S.P.S., D'Amico, A. (29 de febrero de 1988). Preparation, properties and applications of boron nitride thin films. En *Thin Solid Film*, vol. 157, p. 267-282. Recuperado de [http://dx.doi.org/10.1016/0040-6090\(88\)90008-9](http://dx.doi.org/10.1016/0040-6090(88)90008-9)
- Becke, A. (1993). Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange. En *The Journal of Chemical Physics*, vol. 98, pp. 5648. Recuperado de <http://dx.doi.org/10.1063/1.464913>
- Boddien A. & Junge H. (2011). Catalysis: Acidic ideas for hydrogen storage. En *Nature Nanotechnology*, 6: pp. 265-266. DOI: 10.1038/nnano.2011.70.
- Chigo, E. y Juárez, A. (2008). Propiedades electrónicas de la hoja de grafeno vs. hoja de nitruro de boro: una investigación por simulación. En *Rev. Cub. Fis.*, vol. 25 (2B), pp. 106-110. ISSN: 0253-9268. Original paper. Online: [http://www.researchgate.net/publication/266317914\\_Propiedades\\_electrnicas\\_de\\_la\\_hoja\\_de\\_grafeno\\_Vs\\_hoja\\_de\\_Nitruro\\_de\\_Boro\\_Una\\_investigacin\\_por\\_simulacin](http://www.researchgate.net/publication/266317914_Propiedades_electrnicas_de_la_hoja_de_grafeno_Vs_hoja_de_Nitruro_de_Boro_Una_investigacin_por_simulacin).
- Delley, B., (2000). From molecules to solids with the DMol3 approach. En *The Journal of Chemical Physics*, vol. 113(18), pp. 7756-7764, DOI: 10.1063/1.1316015.
- \_\_\_\_\_. (1990). An all-electron numerical method for solving the local density functional for polyatomic molecules. En *The Journal of Chemical Physics*, vol. 92, pp. 508. <http://dx.doi.org/10.1063/1.458452>.
- Deng, J. y Chen, G. (15 de septiembre de 2006). Surface properties of cubic boron nitride thin films. En *Applied Surface Science*, vol. 252, Issue 22. p. 7766-7770. Recuperado de <http://dx.doi.org/10.1016/j.apusc.2005.09.066>.
- Dresselhaus, M. S. y Dresselhaus, G. (2010). Intercalation compounds of graphite. En *Advances in Physics*. Vol. 51, pp. 1-186. Recuperado el 20 de febrero de 2015 en DOI:10.1080/00018730110113644.
- Elias D. C., Nair R. R., Mohiuddin T. M., Morozov S. V., Blake P., Halsall M. P., Ferrari A. C., Boukhvalov D. W., Katsnelson M. I., Geim A. K. y Novoselov K. S. (30 de enero de 2009). Control of graphene's properties by reversible hydrogenation: evidence for graphane. En *Science*, vol. 323 N° 5914 pp. 610-613. DOI: 10.1126/science.1167130.
- Foresman, J.B. y Frisch, A.E. (1996). *Exploring chemistry with electronic structure methods*. Ed. Gaussian Inc., 2ª ed., Pittsburgh, PA, EUA.
- Fujita M., Wakabayashi K., Nakada K. & Kusakabe K. (1996). Peculiar localized state at zigzag graphite edge. En *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 65, pp. 1920-1923. <http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.65.1920>.
- Hamprecht F. A., Cohen A. J., Tozer D. J. y Handy N. C. (1998). Development and assessment of new exchange-correlation functional. En *The Journal of Chemical Physics*, vol. 109, pp. 6264. Recuperado de <http://dx.doi.org/10.1063/1.477267>.
- He Q., Li C., Frankel C., Pilione L., Drawl B., Lu F. y Messier R. (2005). Deposition of cBN on silicon substrates coated with diamond thin films. En *Thin Solid Films*, vol. 474, N° 1, pp. 96-102. Recuperado de <http://dx.doi.org/10.1016%2fj.tsf.2004.08.018>.
- Hehre W. J., Dichfied R. and Pople, J. A. (1972). Self-consistent molecular orbital methods. 12. Further extensions of Gaussian-type basis sets for use in molecular-orbital studies of organic-molecules, En *The Journal of Chemical Physics*, vol. 56, pp. 2257.
- Jacobson, N. (2009). Nanotechnology. En *Chemistry Central Journal*, 12: p. 245 - 248.
- Jones R.O. y Gunnarsson O. (1o. de julio de 1989). The density functional formalism, its applications and prospects. En *Modern Phys*, vol. 61, p. 689. Recuperado de <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.61.689>.
- Kohn W. (1o. de octubre de 1999). Nobel Lecture: Electronic structure of matter-wave functions and density functional. En *Mod. Phys*, vol. 71, p.1253. Recuperado de <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.71.1253>.
- Kohn W., Becke A.D. y Parr R. G. (1996). Density Functional Theory of Electronic Structure. En *Phys. Chem*, vol. 100 (31), pp. 12974-12980. Recuperado de DOI: 10.1021/jp960669l.
- Lee C., Wei X., Kysar J. W. and Hone J. (2008). Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene. En *Science*, vol. 321, pp. 385-388. Recuperado de DOI: 10.1126/science.1157996.
- Maubert M., Soto L., León A. y Flores J. (2008). Nanotubos de Carbono - La era de la nanotecnología. En *Área*

- de Química de Materiales, Universidad Autónoma Metropolitana. Recuperado el 15 de agosto de 2015 de <http://www.razonypalabra.org.mx/N/n68/mauert.pdf>.
- Miyake S., Wang M., Saitoh T. y Watanabe S. (31 de mayo de 2005). Microtribological properties of B-C-N extremely thin protective films deposited on plasma pretreated magnetic layers. En *Surface & Coatings Technology*, vol. 195, p. 214–226. Recuperado de <http://dx.doi.org/10.1016/j.surfcoat.2004.05.037>.
- Nagashima A., Nuka K., Itoh H., Ichinokawa T., Oshima C. & Otani, S. (1993). Electronic states of monolayer graphite formed on TiC(111) surface. En *Surface Science*, 291(1-2), 93-98. DOI: 10.1016/0039-6028(93)91480-D.
- Nair R.R., Blake P. A., Grigorenko N., Novoselov K. S., Booth T. J., Stauber T., Peres N. M. R. y Geim A. K. (2008). Fine Structure Constant Defines Visual Transparency of Graphene. En *Science*, vol. 320, p. 1308. DOI: 10.1126/science.1156965.
- Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S. V., Grigorieva I. V. y Firsov A. A. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. En *Science*, vol. 306 N°. 5696 pp. 666-669. Recuperado en enero de 2011 de DOI: 10.1126/science.1102896.
- Novoselov K. S., Jiang D., Schedin F., Booth T. J., Khotkevich V. V., Morozov S. V. y Geim A. K. (2005). Two-dimensional atomic crystals. En *National Academy of Sciences of USA*, vol. 102 N°. 30 p.10451–10453. Recuperado en enero de 2001 de DOI: 10.1073/pnas.0502848102.
- Pauling L. (1966). The structure and properties of graphite and boron nitride. En *Natl. Acad. Sci.*, vol. 56, pp. 1646-1652 Recuperado de <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC220148/>.
- Perdew J., Burke K. y Wang Y. (15 de diciembre de 1996). Generalized gradient approximation for the exchange-correlation hole of a many-electron system. En *Phys. Rev. B*, vol. 54, pp. 16533. Recuperado de <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.54.16533>.
- Reisse G. y Weissmantel S. (1o. de noviembre de 1999). Characterization of pulsed laser deposited h-BN films and h-BN/c-BN layer systems. En *Thin Solid Films*, vol. 355-356, pp. 105-111. Recuperado de [http://dx.doi.org/10.1016/S0040-6090\(99\)00498-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0040-6090(99)00498-8).
- Rubio J. L., Corkill, M. L. y Cohen M. L. (1994). Theory of graphitic boron nitride nanotubos. En *Phy. Rev. B*. Vol. 49, pp.508. Recuperado de <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.49.5081>.
- Schedin F., Geim A. K., Morozov S. V., Hill E. W., Blake P., Katsnelson M. I. y Novoselov K. S. (2007). Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene. En *Nature Materials*, vol. 6, pp. 652-655. Recuperado de DOI:10.1038/nmat1967.
- Seibold, E. A., Sutton, L. E., (1955). Structure of Ferrocene. En *J. Chem. Phys.* Vol. 23, pp.1967. Recuperado de <http://dx.doi.org/10.1063/1.1740629>.
- Sofo J. O., Chaudhari A. S. y Barber G. D. (10 de abril de 2007). Graphane: a two-dimensional hydrocarbon. En *Phys. Rev.* Vol. 75. Recuperado de DOI: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.75.153401>.
- Teghil R., Marotta V. y Di Palma T.M. (1998). Laser ablation and deposition of boron nitride in a vacuum and in the presence of N<sub>2</sub> and NH<sub>3</sub>. En *Surface and Coatings Technology*, vol. 100-101, marzo de 1998, p. 433-436. Recuperado de [http://dx.doi.org/10.1016/S0257-8972\(97\)00665-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0257-8972(97)00665-8).
- Whitesides G., (2005). *Nanoscience, Nanotechnology, and Chemistry*. Nanoscience and chemistry, vol. 1(2): pp. 172-179. [Online]. Recuperado el 23 de julio de 2015 en <https://gmwgroup.harvard.edu/pubs/pdf/924.pdf>. DOI: 10.1002/sml.200400130.
- Xiaopeng H., Meiyang Y., Deliang C., Xiangang X., Qilong W y Minhua J. (2002). The effect of temperature on the synthesis of BN nanocrystals. En *Journal of Crystal Growth*, vol. 241, p. 124–128. Recuperado de [http://dx.doi.org/10.1016/S0022-0248\(02\)01291-5](http://dx.doi.org/10.1016/S0022-0248(02)01291-5).

PARA CITAR ESTE ARTÍCULO /  
TO REFERENCE THIS ARTICLE /  
PARA CITAR ESTE ARTIGO /

Araújo Contreras, V.d.J.; Castellano, O.L.; Sambrano Rojas, S.E.; Bertel Palencia R.d.J.(2016). Parámetros de reactividad del grafeno negro vs. grafeno blanco de dimensiones de 1,0 nm<sup>2</sup>: estudio químico cuántico computacional. *Revista EIA*, 12 (E3), mayo, pp. 45-52. [Online]. Available on: <http://dx.doi.org/10.14508/reia.2016.12.e3.45-52>