



INTERACCIÓN DE ÁTOMOS CON SUPERFICIES BIDIOMENSIONALES

Chiarvetti, Julieta

Facultad de Ingeniería Química

Director: Romero, Marcelo Ariel

Área: Ciencias Exactas

Palabras claves: Superficies Bidimensionales, Python, Grafeno

INTRODUCCIÓN

El grafeno ha sido extensamente estudiado tanto computacionalmente como experimentalmente, debido a su amplio rango de aplicaciones en microelectrónica, almacenamiento de hidrógeno y sensores químicos.

La adsorción de átomos en superficies ha mostrado una sustancial actividad en reacciones de catálisis. La mayoría de los átomos alcalinos pueden intercalarse entre capas de grafeno, lo cual tiene gran aplicación tecnológica, por ejemplo, los compuestos de litio intercalados en grafito han sido recientemente introducidos como baterías de estado sólido recargables.

En este trabajo estudiamos la adsorción de átomos en grafeno utilizando el modelo de Anderson.

OBJETIVOS

- Reproducir algunos de los modelos matemáticos que interpretan y describen los fenómenos presentes en la interacción de átomos con superficies bidimensionales
- Analizar los datos obtenidos a partir de los códigos desarrollados

Título del Proyecto: Materiales bidimensionales: intercambio electrónico en colisiones con iones de baja energía.

Instrumento: CAID

Año convocatoria: 2020

Organismo financiador: UNL

Director: Dr. Fernando José Bonetto



METODOLOGÍA

En este trabajo estudiamos la adsorción de átomos en grafeno utilizando el modelo de Anderson. Lo describimos mediante el modelo Tight-binding a primeros vecinos y considerando solo la banda π . Esta aproximación está justificada siempre y cuando la energía de las especies adsorbidas (relativas al nivel de Fermi del grafeno) se encuentren en el rango de dicha banda. Con esta consideración podemos obtener de forma exacta los autovalores y autofunciones del grafeno, a partir de los cuales calculamos su matriz densidad completa. Las cantidades físicas de interés, como ser, la función de hibridación, la densidad de estados local y parcial del adsorbato, y la transferencia de carga son calculadas por medio de las funciones de Green, las cuales se obtienen por medio del método de ecuaciones de movimiento.

Con el objetivo de llevar a cabo los cálculos se desarrolló un código en el lenguaje de programación Python. La red de grafeno estudiada está formada por 19 átomos de carbono (ver Fig. 1).

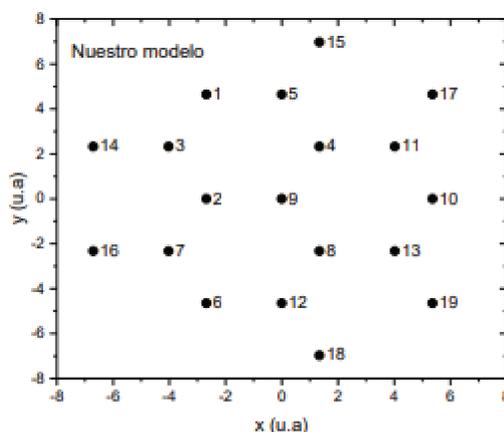


Fig. 1: Posiciones (etiquetadas a la derecha de cada átomo) de los 19 átomos considerados para el cálculo de la matriz densidad del grafeno.

Los cálculos se realizaron con una discretización en energía de 0,0001 u.a. y una discretización de la zona de Brillouin de 0,001 u.a.

RESULTADOS

En la Fig. 2 puede observarse los elementos de la matriz densidad calculados. El cálculo se realizó para los 19 átomos considerados. Los elementos diagonales corresponden a la densidad de los estados local en el carbono (solo banda π), por lo que todos los elementos diagonales son iguales. Los elementos no diagonales, los cuales corresponden al producto de coeficientes en distintos átomos, también serán iguales siempre y cuando la distancia entre los átomos sea la misma. Por esta razón, en la Fig. 2 solo se muestran los más representativos.

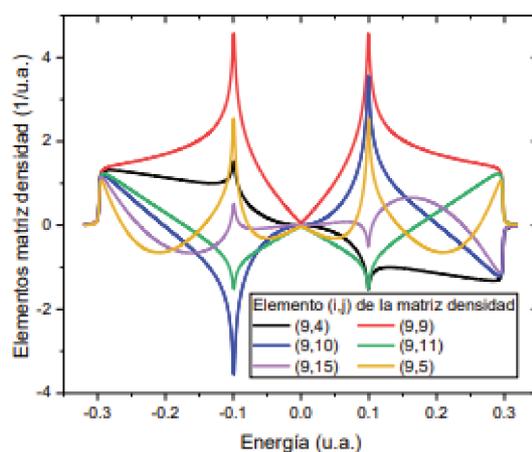


Fig. 2: Elementos de la matriz densidad del grafeno.

Los elementos de la matriz densidad calculados se compararon con otros cálculos más sofisticados. En las Figs. 3 y 4 se puede observar la comparación entre nuestros cálculos y los obtenidos por medio del código Fireball. Este código está basado en la teoría de la funcional de densidad (DFT) con una aproximación de densidad local que emplea un conjunto base de orbitales localizados.

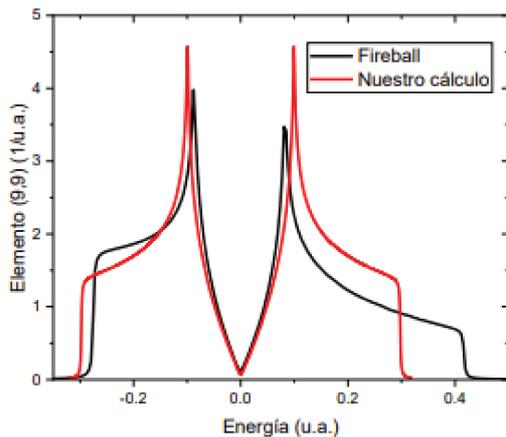


Fig. 3: Elemento (9,9) de la matriz densidad calculada por nuestro código vs el calculado por el código Fireball.

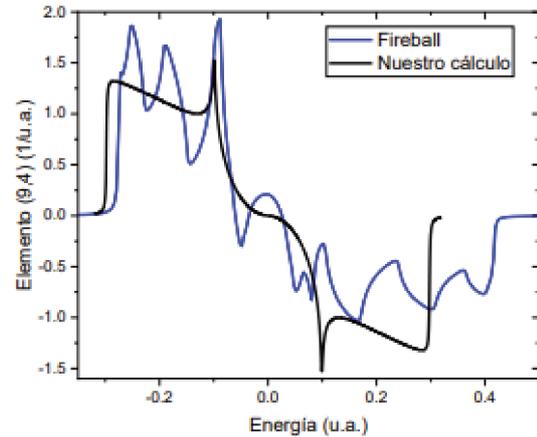


Fig. 4: Elemento (9,4) de la matriz densidad calculada por nuestro código vs el calculado por el código Fireball.

CONCLUSIONES

Comparando nuestros cálculos con los del código Fireball observamos principalmente la ruptura de la simetría (ver Fig. 3) en este último. Esto es debido, principalmente, a que el Fireball tiene en cuenta la interacción con todos los vecinos que es capaz de ver cada átomo de carbono. A grandes rasgos podemos decir que nuestro cálculo captura las características esenciales de los elementos de la matriz densidad cuando se considera solamente la banda π .

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Castro Neto, A.H; Guinea, F; Peres, N.M.R; Novoselov, K.S; y Geim, A.K. 2009. The electronic properties of Graphene. Reviews of modern physics, volumen 81, 109-162.