REPORTE

Nombre del responsable: Dra. María Guadalupe Moreno Armenta
Adscripción: Centro de Nanociencias y Nanotecnologia
Lugar: Ensenada, B.C.

1. Titulo

Crecimiento de sistemas de C en la superficie 0001 de GaN, con aplicación en nanotecnología

2. Resumen

El grafeno dadas sus excepcionales propiedades ha abierto un sinfín de posibilidades para la investigación científica y tecnológica como lo demuestran las mas de 3500 publicaciones que se han hecho a la fecha. Por otro lado el GaN que es un semiconductor de suma importancia para múltiples dispositivos entre los cuales están emisores en el azul y el ultravioleta cercano, dispositivos electrónicos de alta potencia y diodos láser. Su alta conductividad térmica lo hace buen candidato para nuevas aplicaciones que deben funcionar en alta temperatura. Este proyecto une estos dos materiales tan prometedores.

En base a los estudios ya existentes de grafeno y de GaN así como de nuestra propia experiencia con GaN haremos el estudio de cálculos computacionales para depositar C sobre superficies de GaN con diferentes reconstrucciones superficiales para demostrar que es posible obtener el crecimiento de capas de grafeno homogéneas y estables, libres de los dominios policristalinos que caracterizan los crecimientos experimentales. Calcularemos La energía de equilibrio, modulo de volumen, estructura de bandas, densidades de estados, sitios de absorción mas probables, energías de enlace, barreras de difusión para determinar la configuración mas estable para una o dos capas de grafeno. Esperamos profundizar en el conocimiento de los mecanismos que gobiernan la interacción entre la superficie de GaN y grafeno para poder mejorar la obtención de grafeno de forma aplicable tecnológicamente.

3. Breve descripción de avances:

El objetivo general de este proyecto es el estudio usando DFT de la adsorción, incorporación y difusión de átomos de C en volumen y sobre la superficie (0001)GaN en puntos de alta simetría y a lo largo de caminos sobre la superficie que los unen; así mismo, el estudio de la estabilidad y propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de carbono/grafeno/digrafeno sobre (0001)GaN en diferentes reconstrucciones.

Del objetivo general planteado se ha logrado estudiar la adsorción y difusión de átomos de carbono sobre el volumen y la superficie (0001) GaN, los resultados se encuentran publicados en: Journal of Physics: Conference Series **687** (2016) 012048, "Theoretical investigation of GaN carbon doped"

Los resultados del estudio de la capa de bigrafeno en la superficie (0001)GaN y sus imagenes STM, esto ha sido presentado en los congresos internacionales: 10th Congress on Electronic Structure:Principles and Applications, Fall MRS-2016,

4. Cálculos realizados.

Se determinó el volumen de equilibrio, y por consiguiente los parámetros de red cristalina para los cuales se obtiene la energía mínima en la ecuación de estado de estado de Murnaghan a partir del ajuste de la energía como función del volumen de la celda unitaria, en el GaN dopado con átomos de C, mediante la sustitución de C por N o por Ga en las concentraciones 25%, 50% y 75%.
Se calcularon, las energías de enlace y las barreras de energía para la difusión lateral de los átomos adsorbidos de C sobre la superficie (0001)GaN en la geometría hexagonal 2×2. Asi como la energía de difusión hacia el volumen mediante la penetración del átomo de C dentro de la supercelda de GaN.
S determinó la configuración más estable de una monocapa completa de grafeno sobre la superficie de GaN(0001), mediante el movimiento o rotación de toda la monocapa sobre caminos de alta simetría de la superficie de GaN (0001).
Se realizaron cálculos de la energía del sistema bicapa de grafeno/ GaN(0001) optimizando los parámetros de la estructura para encontrar su forma más estable.
Se calcularon estructura de bandas, densidad de estados e imágenes STM de los sistemas estudiados. Análisis de las propiedades electrónicas y magnéticas a partir de los cálculos obtenidos.

5. Software utilizado.
Quantum Espresso

6. Recursos utilizados.

CUENTA TITULAR:MARIA GUADALUPE MORENO ARMENTA
NÚMERO DE CUENTAS ADICIONALES: 3
FECHA DE APROBACIÓN: 03-2016
RECURSOS APROBADOS: 500000
RECURSOS CONSUMIDOS: 689112.25
SALDO: -189112.25

7. Lista de colaboradores.

Dr. Jairo Arbey Rodriguez Martinez
Dr. Rafael Gonzalez Hernandez
Fabian Herrera Rodriguez

8. Lista de artículos publicados.

1. M J Espitia Rico, M G Moreno Armenta, J A Rodríguez, and N Takeuchi, “Theoretical investigation of GaN carbon doped”, Journal of Physics: Conference Series 687 (2016) 012048

2. J Otalora-Acevedo, J A Rodríguez Martínez, G Moreno-Armenta, E Vera and N Takeuchi Tan, "The most stable mono-layers of (111)-Pt (fcc) on Graphene: A first-principles GGA study", Journal of Physics: Conference Series 743 (2016) 012006.

3. G P Abdel Rahim, J A Rodríguez M, and M G Moreno-Armenta, "First principles study of structural, electronic and magnetic properties of magnesium", Journal of Physics: Conference Series 687 (2016) 012043.

4. Gladys Patricia Abdel Rahim, Jairo Arbey Rodriguez, and M. Guadalupe Moreno-Armenta, "First Principles Study of the Structural, Electronic, and Magnetic Properties of ZrC", Solid State Phenomena Vol. 257, pp 211-215 (2016)

9. Lista de alumnos graduados de doctorado

1. Miguel J. Espitia Rico,
"Adsorción, crecimiento e incorporación de átomos de carbono: un estudio basado en DFT"
2. Patricia Abdel Rahim Garzon,
"Propiedades físicas de la adsorción de Bisobre la superficie (001)-MgO mediante DFT"

10. Lista de congresos nacionales e internacionales y participantes.

Internacionales:

1. M. Moreno-Armenta, J. Rodriguez Martinez, 10th Congress on Electronic Structure:Principles and Applications. Junio 28 a julio 1 2016, Castellón de la Plana, España

2. M. Moreno-Armenta, J. Rodriguez Martinez, Fall MRS-2016, Boston MA, USA

Nacionales:

1. José Otálora Acevedo, Jairo Arbey Rodríguez, Guadalupe Moreno-Armenta, Enrique Vera, and Noboru Takeuchi Tan, "Magnetic and electronic properties by means of first-principles calculations of new materials based on absorption of V, Co and Ni on graphene" , Workshop on Processing Physic-Chemistry Advanced 2nd WPPCA, 4-6 abril 2016, Bucaramanga, Santander, Colombia.

2. J F Murillo, C Ortega López, J A Rodríguez Martínez, M G Moreno-Armenta and Takeuchi Tan, "Adsorption and lateral diffusion of C atoms on wurtzite (0001)-AlN surface", Workshop on Processing Physic-Chemistry Advanced 2nd WPPCA, 4-6 abril 2016, Bucaramanga, Santander, Colombia.