Propiedades electrónicas y de transporte en materiales

Dr. Gerardo Jorge Vázquez Fonseca
IFUNAM

Resumen

Se investiga nanoestructuras en sistemas compuestos de grafeno los cuales son de mucho interés en diferentes áreas de la ciencia y la ingeniería. Los sistemas estudiados se orientan hacia el modelado de dispositivos nano electrónicos. Así se estudia la posibilidad de obtener superconductores a base de grafeno o nitruro de boro dopados con metales de transición. Se estudia, a partir de primeros principios, las geometrías de pequeños cúmulos de bismuto-cobre, también sus propiedades electrónicas incluyendo la energía de ionización, afinidad electrónica, reactividad y aromaticidad. Por otro lado en el área de cristales líquidos colestéricos, se ha propone un modelo para estudiar la radiación de Cherenkov con posibles aplicaciones para detectar radiaciones tenues.

Avances

Se llevó a cabo investigación en el área de nanopartículas, grafeno y sus propiedades ópticas, dieléctricas y superconductoras. Se usó la Teoría de Funcional de la Densidad, apoyados en el código llamado Quantum Espresso (QE) y se obtuvieron resultados que predicen la superconductividad de los materiales estudiados. Exploramos la posibilidad de inducir la superconductividad en una hoja de grafeno al contaminarla con una capa de átomos de titanio. Definiendo la cobertura M como la razón de número de átomos de titanio ente número de hexágonos de grafeno por celda, tomamos los casos de M=1 y 1/3, correspondientes a C_2Ti y C_6Ti. Estos resultados han sido presentados tanto en congresos nacionales como internacionales. También se explore la posibilidad de inducir superconductividad en una hoja de Nitruro de Boro contaminando esta con Niobio. Se están dirigiendo dos tesis de licenciatura, una de ellas es la continuación de un servicio social que se dirigió el año pasado (Ángel Dámaso López). En un trabajo de tesis se han estudiado cúmulos de silenitas (BXO, X=Si, Ge, Ti), como posibles materiales fotorrefractivos al colocarlos sobre grafeno. Esta tesis lleva un avance de un 40%. Se ha empezado la dirección de una tesis donde ya se han calculado como se forman modos superficiales (tanto para el caso cuántico, electromagnético y acústico) en heteroestructuras con diferentes composiciones. También se empezó una colaboración interdiciplinaria en relación con cristales líquidos. Los resultados fueron presentados el artículo “Transition radiation in cholesteric liquid crystal”. Se tiene en preparación los artículos “Cherenkov radiation in a Kroning Penny medium induced by charged particles”, “Superconducting transition temperature of a graphene layer with a high niobium coverage (C2Nb)” y “Theoretical study of neutral bismuth-copper clusters: magic numbers and electronic structure and vibrational modes”.

Cálculos realizados

Para el cálculo de la superconductividad en los sistemas de grafeno o Nitruro de Boro contaminados con metales de transición, primero se llevó a cabo la optimización de las estructuras con el programa de relajamiento de QE, luego se realizó un cálculo autoconsistente (con el programa scf-fit) con una red densa de puntos k de la red recíproca que daría datos para un cálculo subsecuente de la interacción electrón-fonón, el siguiente paso del cálculo fue llevar a cabo un cálculo autoconsistente (con el programa scf) con una red de puntos k menos densa para la obtención de fonones. Se graficaron los resultados para comparar con resultados experimentales. Se emplearon una serie de programas (elph, q2r, matdyn) para obtener los datos necesarios para correr

un último programa que nos dio la temperatura de transición superconductora en el modelo de Allen-Dynes. Todos estos cálculos se repitieron para diferentes pseudopotenciales, tanto en la aproximación LDA como en la GGA.
También se variaron otros parámetros para checar la precisión de los resultados.
Para los cálculos de cúmulos se hicieron cálculos con el programa Gaussion 09 en una computadora pequeña y luego se llevaron a Miztli, para corroborar los resultados obtenidos con empleando ahora el código QE.
En el caso de la radiación de electrones en cristales colestéricos, primero se consideró una partícula cargada viajando con velocidad constante en un cristal líquido colestérico en una dirección arbitraria. Se hicieron cálculos de la polarización inducida dentro del colestérico debida al campo generado por la carga en movimiento. Luego se propuso una expresión para los dipolos inducidos en términos de la susceptibilidad. Se escribieron las correspondientes ecuaciones de Maxwell que se resolvieron iterativamente asumiendo valores pequeños de la birrefringencia colestérica. Lo anterior nos permitió obtener las contribuciones dominantes del campo de radiación. Repetimos los cálculos variando los parámetros siguientes: ángulo de incidencia, frecuencia y velocidad de la partícula.

Software Utilizado
Quantum Espresso

Recursos Utilizados
500,000

Colaboradores
Adrian Reyes Cervantes, IFUNAM
Luis Fernando Magaña Solís, IFUNAM
Eduardo Rangel Cortes, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo
Ángel Dámaso López, estudiante UNAM
José Luis Campos Arcaraz, estudiante UNAM

Artículos
Transition radiation in cholesteric liquid crystal. Liquid Crystal impreso ON LINE

Cherenkov radiation in a Kroning Penny medium induced by charged particles, en preparación.

Superconducting transition temperature of a graphene layer with a high niobium coverage (C2Nb), en preparación.

Theoretical study of neutral bismuth-copper clusters: magic numbers and electronic structure and vibrational modes, en preparación.

Congresos:

LIX Congreso Nacional de Investigación en Física.
G. J. Vázquez y L. F. Magaña Solís.
"Acerca de la superconductividad de grafeno con una cobertura grande de átomos de titanio"
León, Guanajuato, del 3 al 7 de octubre de 2016.

Sesión simultánea
March Meeting 2016
L.F. Magaña and G.J. Vázquez
" Superconducting transition temperature of a boron nitride layer with a high niobium coverage "
Baltimore, Maryland., USA, 14 al 18 de marzo, 2016.

International Materials Research Congress XXV
Vázquez G. J. y Magaña L.F.
"Superconducting transition temperature of a graphene layer with a high niobium coverage (C2Nb) "
Cancún, Quintana Roo, agosto 14-19 de 2016.