

Informe de trabajo proyecto en la supercomputadora Miztli 2016

1. Título

Estudio de primeros principios de la modificación de superficies semiconductoras y nanoestructuras.

Responsable: Dr. Noboru Takeuchi, Centro de Nanociencias y Nanotecnología

2. Resumen

El entendimiento de las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de las superficies es una parte esencial en la búsqueda de materiales con propiedades a la medida. Un primer paso necesario es conocer la estructura atómica de las superficies (su reconstrucción), debido a que sus otras propiedades, como las electrónicas y magnéticas, dependen directamente de dicha estructura. Al adsorber átomos y moléculas, las propiedades del material suelen cambiar y dependiendo de la clase y cantidad de átomos que se depositan, podemos diseñar las propiedades del nuevo sistema que deseamos crear. Por ejemplo, si depositamos átomos metálicos en un semiconductor, dependiendo de la cantidad del material que se deposita, el sistema puede continuar siendo semiconductor o puede volverse metálico o hasta magnético. En este proyecto, se está estudiando la modificación de superficies semiconductoras y nanoestructuras, por medio del depósito de átomos y moléculas. Se estudia también el crecimiento de cristales, la formación de nanoestructuras en estos sistemas y la formación de heteroestructuras. En todos los casos se calculan las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas.

3. Breve descripción de avances

Usando cálculos de primeros principios estudiamos superficies de algunos nitruros, como el nitruro de galio y el nitruro de manganeso y como se modificaban sus superficies con el depósito de átomos. Particularmente estudiamos como la superficie de nitruro de galio se podía modificar con la adsorción de Y formando una interface de nitruro de galio con nitruro de itrio.

Usando los mismos métodos se estudió la formación de nanoalambres de dimensión atómica que se forman en la superficie de In/Si(111)-(4×1). Se estudió la formación de alambres de InN cuando se adsorbe nitrógeno y la de AsN cuando se adsorbe arsénico.

También se estudió la formación de una capa antiferromagnética de MnN sobre la superficie de MnGa(001), su estabilidad y sus propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas.

Se estudió la formación de fosforeno sobre la superficie (111) de fosfuro de boro inducida por la adsorción de nitrógeno.

Por otro lado, también estudiamos la funcionalización de sistemas bidimensionales como el grafeno, siliceno y germaneno hidrogenado con moléculas orgánicas de los grupos alquenos, alquinos y aldehídos. La introducción de la química orgánica en los semiconductores, puede traer nuevas aplicaciones. La habilidad de las moléculas orgánicas para adsorber y emitir luz a ciertas frecuencias, de detectar moléculas, o de reconocer muestras biológicas son ejemplos de algunas aplicaciones que se podrían extender a la tecnología del silicio.

4. Cálculos realizados

Se realizaron cálculos de la adsorción de manganeso sobre la superficie GaAs(111)-(2×2)B. Se calcularon varias configuraciones con diferentes terminaciones para ver la estabilidad de esta superficie en función del potencial químico del boro.

Se realizaron cálculos de la adsorción de Y sobre la superficie de GaN(000 $\bar{1}$). Se estudió sus posibles caminos de difusión y su estabilidad. También se estudió las condiciones bajo las cuales se formaba el nitruro de itrio.

Se realizaron cálculos para el estudio de la formación de nanoalambres de dimensión atómica que se forman en la superficie de In/Si(111)-(4×1). Se estudió la formación de alambres de InN cuando se adsorbe nitrógeno y la de AsN cuando se adsorbe arsénico.

Se realizaron cálculos sobre la funcionalización orgánica de la superficie de Ge[111] hidrogenada por medio de una reacción iniciada por un radical. Las moléculas que se consideraron fueron acetileno, etileno y estireno.

Se realizaron cálculos para conocer el efecto de las interacciones de Van der Waals en la reactividad de grafeno, siliceno y germaneno hidrogenado con moléculas de alquenos y alquinos para su funcionalización orgánica. Se usaron funcionales DFT-D2.

Se realizaron cálculos para estudiar la funcionalización de estructuras bidimensionales de nitruro de boro hidrogenada con la adsorción de moléculas de acetileno.

Se realizaron cálculos sobre la funcionalización orgánica del siliceno hidrogenado con aldehídos.

Se realizaron cálculos para estudiar la formación de una capa antiferromagnética de MnN sobre la superficie de MnGa(001).

Se realizaron cálculos para estudiar la formación de fosforeno sobre la superficie (111) de fosfuro de boro inducida por la adsorción de nitrógeno.

5. Software utilizado

Se utilizó el paquete Quantum Espresso que contiene varios programas. Específicamente, se utilizó el programa PWSCF, en el que la función de onda se expande en ondas planas. Usa pseudopotenciales que conservan la norma, o pseudopotenciales ultrasuaves.

6. Recursos Utilizados

682024.72

7. Colaboradores

- i. Dr. Gregorio Hernandez Coccoletzi, Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.
- ii. Dr. Arthur Smith, Departamento de Física y Astronomía, Ohio University.
- iii. Dr. Jonathan Guerreros Sanchez, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM
- iv. Dra. Pamela Rubio Pereda, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM
- v. M.C. Diego Morachis Galindo, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM
- vi. M.C. Rodrigo Ponce, Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.

8. Artículos publicados

- i. Mn Adsorption on the GaAs(111)-(2×2)B Surface: First Principles Studies, Jonathan Guerrero-Sanchez, J. Castro-Medina, J. F. Rivas-Silva, Noboru Takeuchi, L. Morales de la Garza, J. Varalda, D. H. Mosca, and Gregorio H. Coccoletzi, Zeitschrift für Physikalische Chemie 230, 943 (2016).
- ii. Surface reactivity of Ge[111] for organic functionalization by means of a radical-initiated reaction: a DFT study, Pamela Rubio Pereda and Noboru Takeuchi, Applied Surface Science 379, 14 (2016).
- iii. Ab-initio study of the Y adsorption and YN formation on the GaN(000 $\bar{1}$): Diffusion pathways and stability, J. Guerrero-Sánchez, Gregorio H. Coccoletzi, J.F. Rivas-Silva and Noboru Takeuchi, Superlattices and Microstructures, 96, 67 (2016).
- iv. Formation of InN atomic-size wires by simple N adsorption on the In/Si(111)-(4×1) surface, J. Guerrero-Sánchez and Noboru Takeuchi, Applied Surface Science 385, 318 (2016).
- v. Van der Waals molecular interactions in the reactivity of graphane, silicane and germanane towards organic functionalization with alkene and alkyne molecules: a DFT-D2 revisited study, Pamela Rubio-Pereda, and Noboru Takeuchi, Journal of Molecular Modelling 22, art. 175 (2016).

- vi. Two-dimensional boron nitride structures functionalization: First principles studies, Rodrigo Ponce Perez, Gregorio Hernandez Cocoltzi, and Noboru Takeuchi, J. Molecular Modelling 22, art. 226 (2016).
- vii. Antiferromagnetic MnN layer on the MnGa(001) surface, J. Guerrero-Sánchez and Noboru Takeuchi. Applied Surface Science 390, 328–332 (2016).
- viii. Nitrogen induced phosphorene formation on the boron phosphide (111) surface: a density functional theory study, J. Guerrero-Sánchez, M. Lopez-Fuentes, F. Sánchez-Ochoa, Noboru Takeuchi, and Gregorio H. Cocoltzi. RCS Advances 6, 108621 (2016)
- ix. Organic functionalization of hydrogenated silicene with aldehydes, Diego Morachis Galindo, Pamela Rubio-Pereda, and Noboru Takeuchi, Applied Surface Science. 392, 841 (2017)
- x. Formation of indium arsenide atomic wires on the In/Si(111)-4×1 surface, J. Guerrero-Sánchez, Superlattices and Microstructures, In press <http://dx.doi.org/10.1016/j.spmi.2017.01.016>

9. Estudiantes graduados:

- i. Pamela Rubio Pereda, Doctorado en física de Materiales, CICESE-CNyN, 28 de junio 2016. Simulaciones por computadora de la adsorción de moléculas orgánicas y biológicas sobre superficies. 28 de junio 2016.
- ii. Diego Morachis Galindo, Maestría en física de Materiales, CICESE-CNyN Simulación de la adsorción de aldehídos sobre siliceno hidrogenado. Fecha de examen: 23 de agosto 2016

10. Congresos internacionales:

- i. Organic functionalization of two dimensional systems, Nanotech 2016, Puerto Vallarta, Jalisco, 14 de noviembre 2016.
- ii. Formation of InN atomic-size wires by simple N adsorption on the In/Si(111)–(4×1) surface. J. Guerrero-Sanchez and Noboru Takeuchi, The Eighth International Conference on Low Dimensional Structures and Devices, Mayan Riviera – Mexico, August 28 – September 02, 2016
- iii. Propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de los compuestos M_nxN_y y sus superficies, Noboru Takeuchi and Jonathan Guerrero, II Simposio Peruano en Nanociencia y Nanotecnología, 4 de Agosto 2016.

- iv. Manganese nitride magnetic nanopillars: ab initio calculations, Noboru Takeuchi and J. Guerrero Sanchez, Plenary Lecture, IX International Conferences on Surfaces, Materials and Vacuum, Mazatlan, 27 de Octubre 2016.
- v. Organic functionalization of hydrogenated silicene with aldehydes, Diego Morachis Galindo and Noboru Takeuchi, IX International Conferences on Surfaces, Materials and Vacuum, Mazatlan, 27 de Octubre 2016.
- vi. Surface reactivity of Ge[111] for organic functionalization by means of a radical-initiated reaction: A DFT study, Pamela Rubio-Pereda, and Noboru Takeuchi, IX International Conferences on Surfaces, Materials and Vacuum, Mazatlan, 27 de Octubre 2016.
- vii. Two-dimensional boron nitride structures functionalization: First principles studies, Rodrigo Ponce Pérez, Gregorio H. Coccoletzi and Noboru Takeuchi, IX International Conferences on Surfaces, Materials and Vacuum, Mazatlan, 27 de Octubre 2016.