

## **PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE NANOGRAFENOS DE BORDE ZIG-ZAG INTERACCIONANDO CON AGREGADOS FERROMAGNÉTICOS**

Este trabajo se encuadra en el campo de la investigación sobre las propiedades electrónicas del grafeno, concretamente en la caracterización de la variación de sus propiedades al añadirle átomos de metales de transición mediante simulación computacional. En este caso se ha estudiado la colocación de uno, dos y cuatro átomos de cobalto sobre grafeno. La estructura de grafeno empleada es una lámina hexagonal de tres átomos de carbono en cada borde, pasivada con átomos de hidrógeno (hexagonal nano-graphene *HNG*). Los bordes de la lámina son de tipo zig-zag.

Se hacen cálculos de optimización de geometría, en los que se varían las coordenadas de los átomos en busca de un mínimo en la energía. Para llevar a cabo el cálculo de la estructura electrónica se resuelven las ecuaciones de Kohn-Sham de la teoría del funcional de la densidad (DFT), mediante el uso del programa Amsterdam Density Functional (ADF). Se emplean la aproximación de la densidad local (LDA) y la aproximación de gradiente generalizado (GGA). Para la energía de intercambio y correlación se usan las expresiones PW92 y revPBE. En el cálculo se emplean todos los electrones, y se usa la aproximación de “core” congelado.

Se ha encontrado que la posición de mínima energía para el átomo de cobalto consiste en situarlo sobre el centro de un hexágono de átomos de carbono, lo que es coherente con la información encontrada en trabajos previos. Si se compara con otros estudios sobre la colocación de metales de transición sobre grafeno, en concreto en los que se estudia el hierro, se observa que los átomos de cobalto están más fuertemente adsorbidos por los átomos de carbono.

Se ha analizado la densidad electrónica de los sistemas resultantes de combinar *HNG* con los agregados de átomos de cobalto, y se ha obtenido que el sistema *HNG* pasa de tener el mismo gap alfa y beta a tener un gap alfa considerablemente mayor que el gap beta, lo que podría ser interesante de cara a aplicaciones en la espintrónica, donde se trabaja con corrientes de espín. El origen de esta propiedad son los átomos de cobalto, que como sistema libre presentan un gap alfa mayor que el gap beta. Al analizar los orbitales frontera de los sistemas combinados, se ha encontrado que el orbital ocupado más alto en todos los casos está localizado sobre los átomos de cobalto. Para los orbitales vacantes, el orbital de menor energía entre el alfa y el beta, también se encuentra localizado sobre los átomos de cobalto.

Por otro parte, también se han analizado las propiedades magnéticas. El sistema *HNG* ha resultado ser diamagnético, con un espín total nulo. Los sistemas de cobalto libres presentan un acoplamiento ferromagnético. Al combinar el sistema *HNG* con agregados de átomos de cobalto se obtienen una reducción de espín, y por tanto del momento magnético de los átomos de cobalto. En el caso de *HNG + Co<sub>2</sub>* se encuentra un acoplamiento antiferromagnético entre los dos átomos de cobalto.

Por último, se ha estudiado la transferencia de carga mediante los análisis de población de Mulliken, Hirshfeld y de Voronoi. Inicialmente tanto el sistema *HNG* como los átomos de cobalto eran neutros, sin embargo al combinarlos dejan de serlo. En un caso (*HNG + Co<sub>2</sub>*) los átomos de cobalto adquieren carga negativa, mientras que en los otros dos casos quedan cargados positivamente.