

Resumen Trabajo Fin de Carrera:

Interacción de agregados de cromo con nanografenos triangulares

Ángela Calleja Rebanal

El objetivo de este trabajo es estudiar la interacción de compuestos de cromo con estructuras de grafeno (capa de átomos de carbono de un átomo de espesor dispuestos en una retícula de tipo hexagonal) triangular con bordes de tipo zig-zag, prestando especial atención a las propiedades magnéticas de estos sistemas. También se realizará una comparación con la lámina y el agregado libres, estudiando como varían sus propiedades. Para ello, se tomarán dos estructuras triangulares de grafeno, una centrada en un hexágono ($C_{33}H_{15}$) y la otra centrada en un átomo ($C_{46}H_{18}$); y tres estructuras de cromo: átomo (Cr), dímero (Cr_2) y tetrámero (Cr_4).

Para resolver este problema, es decir, determinar la estructura electrónica de estos sistemas, se utiliza la teoría del funcional de la densidad (DFT), que consiste en resolver las ecuaciones de Kohn-Sham, mediante el programa *ADF*. El funcional de la energía de intercambio y correlación utilizado será el revisado de Perdew, Burke y Ernzerhof (revPBE) con la aproximación de gradiente generalizado de la densidad (GGA). Además, se usarán bases formadas por orbitales tipo Slater (STO) localizados en los átomos, teniendo en cuenta que parte de los electrones formarán el core (estarán congelados) y el resto serán los de valencia, que formarán los enlaces.

De los cálculos realizados, se ha obtenido que estas estructuras compuestas (nanografeno + cromo) son muy estables, más cuanto menor sea el tamaño de la lámina y mayor sea la estructura de cromo, por lo que tenderán a enlazarse. Estos enlaces se hacen mediante orbitales p_z de los átomos de carbono y los d , y en menor medida los s , de los átomos de cromo. Los orbitales p_x , p_y y s de los carbonos son los que le dan estabilidad a la estructura hexagonal de la lámina (hibridación sp^2). Estos carbonos se enlaza mediante enlaces σ .

Otro resultado importante es el de la hemi-metalicidad de los sistemas compuestos, es decir, podrían filtrar la corriente eléctrica a un solo canal del espín. Esta conclusión se obtiene del gap de estos sistemas. En el caso de los sistemas libres, el gap, tanto alfa ($\uparrow$) como beta ($\downarrow$), es alto, lo que indican que son semiconductores. En cambio, cuando se tiene en cuenta la interacción del nanografeno con el Cr, se obtiene un gap muy diferente en función del espín. Es decir, para uno de los espines, este gap será alto, aunque siempre menor que cuando los sistemas están libres, conservando su carácter semiconductor. Sin embargo, para el otro espín, este gap será muy pequeño ($E_g < 0,2eV$), adquiriendo un carácter metálico.

Por último, se trata la magnetización de estos sistemas. En los bordes zig-zag de las láminas de grafeno ($C_{33}H_{15}$ y $C_{46}H_{18}$) se presenta un orden ferromagnético (FM), salvo en los vértices de estas estructuras, que presentan ordenamiento antiferromagnético (AFM). Estos átomos serán los que contribuyan principalmente al momento neto de la lámina, aunque también lo harán el resto de capas, que presentan un acoplamiento antiferromagnético entre átomos de carbono vecinos. Por su parte, el átomo de cromo presenta un momento magnético muy alto. Sin embargo, el momento del dímero y del tetrámero de cromo es nulo. Esto será el total, porque los átomos presentan momentos magnéticos atómicos altos pero ordenados de forma antiferromagnética. Al interaccionar estos sistemas, el momento magnético disminuye respecto a la de los sistemas libres, salvo el sistema $Cr_4C_{46}H_{18}$, que se mantiene invariante. La principal contribución al momento dependerá del sistema tomado, siendo en unos casos del cromo (Cr) y en otros de la lámina (Cr_2 y Cr_4), acoplándose los momentos parciales de los sistemas, tanto ferromagnéticamente (Cr_4) como antiferromagnéticamente (Cr y Cr_2). Las propiedades magnéticas de las láminas varían al interaccionar con el cromo, disminuyendo su momento magnético respecto del de la lámina libre, especialmente en el caso del átomo de Cr, en el que llega a cambiar de signo.