

268 Distribuciones estacionarias de carga y de corriente en Nanoconos de Carbono bajo perturbaciones eléctricas y magnéticas.

P. Ulloa¹, A. Latgé², M. Pacheco¹

¹Departamento de Física, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso-Chile

²Instituto de Física, Universidad Federal Fluminense, Niteroi- Brasil

email address corresponding author: monica.pacheco@usm.cl

Los nanoconos de carbono (NC) son estructuras basadas en grafeno, los cuales se pueden obtener como producto de procesos industriales, y con una abertura angular correspondiente a 5 posibles disclinaciones de 60 grados en grafeno [1]. Un nanocono sin disclinación equivale a un disco de grafeno y un nanocono con una disclinación de 360 grados equivale a un nanotubo abierto por un extremo.

Debido a su extensión fuera del plano los nanoconos poseen interesantes propiedades físicas las que incluyen dependencia del espectro de absorción con respecto a la polarización de la radiación incidente. En presencia de campos eléctrico y magnético ocurren cambios considerables en el espectro energético, lo que implica una distribución de estados y de corrientes de probabilidad no homogénea, donde el ápice y el borde del cono juegan un papel relevante [2].

El diámetro de los sistemas considerados es de varios nanómetros, correspondiendo a conos con unos pocos miles de átomos (hasta 5000). En tales condiciones es conveniente trabajar dentro del formalismo de enlace fuerte, el cual requiere un esfuerzo computacional moderado para describir al sistema. El efecto de un campo eléctrico es modelado por medio de un potencial en cada sitio, el efecto de un campo magnético es modelado a través de la sustitución de Peierls y el espectro de absorción es obtenido dentro de la aproximación dipolar.

En presencia de campo eléctrico axial, se establece un gradiente de carga a lo largo de la estructura, alcanzando sus valores extremos en el ápice y en la base. En presencia de campo magnético axial, se aprecian resonancias en el espectro de energías que indican niveles de Landau en el caso que la longitud magnética sea menor que el radio de la base del cono. Las corrientes estacionarias, forman patrones

circulares y de vórtices según la energía del estado considerado. Aquellos lugares del cono en que la densidad local de estados (LDOS) alcanza un mínimo corresponden a los lugares en que la corriente alcanza valores altos, mientras en aquellos donde la LDOS es máxima, ocurren los cambios de sentido de las corrientes.

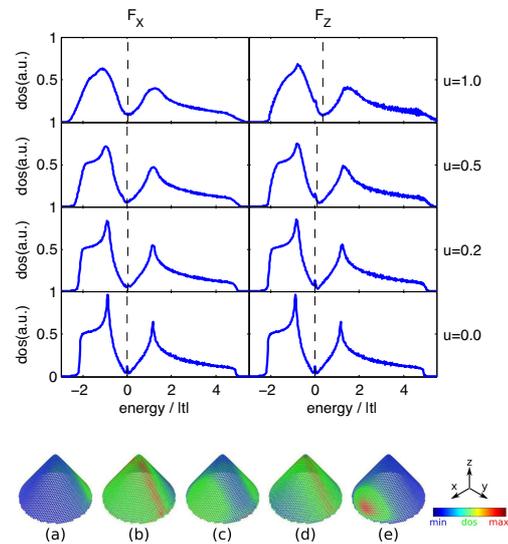


Fig. 1 El panel superior muestra la DOS de un NC con 5011 átomos para diferentes intensidades de un campo eléctrico, axial (derecha) y transversal (izquierda). u es la energía potencial eléctrica en unidades de la integral de transferencia. El panel inferior muestra la LDOS para un NC con 5011 átomos en un campo eléctrico en dirección x . (a) y (e) Energías mínima y máxima, (b) y (d) Energías de las resonancias tipo Van-Hove y (c) Energía de Fermi.

Referencias

- [1] A. Krishnan, E. Dujardin, M. M. J. Treacy, J. Hugdahl, S. Lynum and T. W. Ebbesen, Nature, 388, 451-454 (1997).
- [2] P. Ulloa, A. Latgé, L. E. Oliveira and M. Pacheco, Nanoscale Res. Lett., 8(1), 384 (2013).