

267 Fisisorción de Fullerenos en Grafeno y Nanocintas de Carbono: Una aproximación teórica

J. D. Correa¹, M. Pacheco², P. Orellana²

¹Departamento de Ciencias Básicas, Universidad de Medellín, Medellín- Colombia

²Departamento de Física, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso-Chile

email address corresponding author: pedro.orellana@usm.cl

El estudio de las nanoestructuras basadas en las formas alotrópicas del carbono ha despertado el interés de la comunidad científica en las dos últimas décadas gracias a su gran versatilidad. En este tipo de estructuras un simple cambio de la geometría trae consigo grandes cambios en las propiedades físico-químicas de la nanoestructura.

Para el desarrollo de aplicaciones en muchos casos se requiere la combinación de dos o más estructuras que permitan obtener el comportamiento deseado. En este contexto la combinación diferentes formas alotrópicas del carbono ha sido estudiada para el desarrollo de sistemas fotovoltaicos. Algunos estudios teóricos han mostrado que el grafeno con un fullereno fisisorbido[1] es estable y puede favorecer la transferencia de carga entre los componentes del complejo, que es una condición necesaria para garantizar la generación de fotocorriente en un sistema fotovoltaico.

En este trabajo se muestra un estudio de las propiedades opto-electrónicas de fullerenos fisisorbidos en grafeno y nanocintas. Nuestros cálculos se desarrollan en el marco de la teoría del funcional densidad (DFT), usando el paquete SIESTA[2]. Debido a la naturaleza de los enlaces involucrados empleamos el funcional de intercambio y correlación de Dion et. al. [3], considerando las interacciones tipo van der Waals.

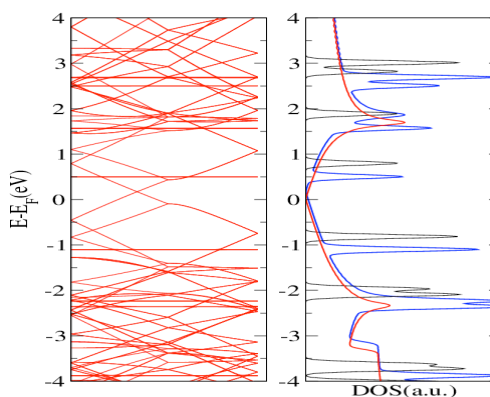


Fig. 1 Estructura de bandas y densidad total de estados (DOS) para un fullereno fisisorbido en una capa de grafeno. En la DOS, la línea roja es la correspondiente al grafeno, la línea negra al fullereno y la línea azul representa la DOS del complejo.

Nuestros resultados muestran que efectivamente los fullerenos se ligan al grafeno y a las nanocintas con energías de ligazón de alrededor de 0.5eV. Mostramos que al formarse el complejo, las propiedades físicas del fullereno, del grafeno y de las nanocintas se conservan. Adicionalmente encontramos que al funcionalizar el grafeno con varios fullerenos, se generan bandas que incrementan el espectro de absorción óptica del complejo.

Referencias

- [1] A. K. Manna and S. K. Pati, Phys. Chem., **14**, 1844 (2013)
- [2] J. M. Soler, et al, J. Phys. Condens. Matter. **14** 2745 (2002)
- [3] M. Dion, et al, Phys Rev Lett **92** 246401 (2004).