

Propiedades electrónicas y de transporte de anillo de átomos de carbono

Carlos Rojas^{1*}, Pedro Orellana^{1†}, Alejandra León², Leonor Chico³, Mónica Pacheco¹

¹Departamento de Física, Universidad Técnica Federico Santa María, Casilla 110, Valparaíso.

²Instituto de Ciencias Básicas, Universidad Diego Portales, Avda. Ejército 441, Santiago.

³GISC, Departamento de Física de Materiales, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid.

*carlos.rojasle@usm.cl, †pedro.orellana@usm.cl

Introducción

Recientemente se han sintetizado anillos unidimensionales de átomos de carbono [1], lo que complementa las estructuras en base a carbón como el grafito, nanotubos de carbono, grafeno, fullerenos, etc. Una propiedad importante de estos anillos es su estructura geométrica, estudios [2,3,4,5] muestran que las configuraciones más estables son la poliínica con enlaces alternados simples y triples, y la cumulénica con enlaces dobles consecutivos. Motivados y motivadas por estos artículos, en este trabajo estudiamos el espectro de transmisión de un anillo de átomos de carbono en sus dos posibles configuraciones acoplado a contactos a través de un Hamiltoniano en la aproximación de enlace fuerte. Para resolver el problema usamos técnicas de funciones de Green y complementos con cálculos DFT (Figura 1). Nuestros resultados muestran que el espectro de transmisión presenta una serie de resonancias y antirresonancias, que dependen del tamaño y la configuración de los anillos. Por ejemplo para la configuración cumulénica, si el número total de átomos en el anillo es múltiplo de cuatro, la transmisión del sistema presenta una antirresonancia en la energía de Fermi. Por otra parte para la configuración poliínica, se abre una brecha de energía entorno al centro de la banda. Para ambos casos el estudio de la conductancia muestra además la estructura de niveles de energía del anillo.

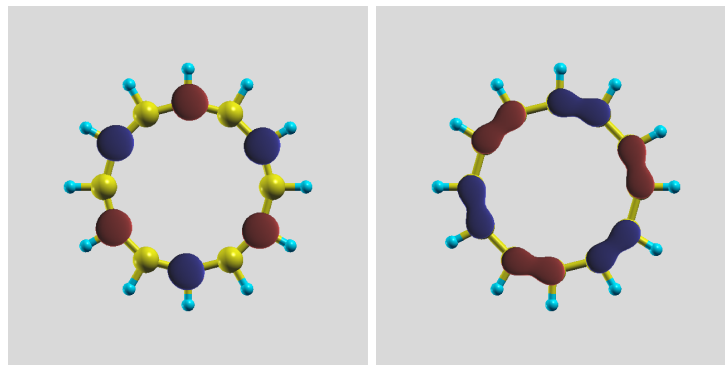


Figura 1: Orbitales moleculares del estado HOMO de un anillo con $M = 12$ sitios en la configuración cumulénica (panel izquierdo) y poliínica (panel derecho). Los colores representan el signo de la autofunción.

Agradecimientos: A mis tutores y colaboradores de este trabajo Pedro Orellana, Leonor Chico, Monica Pacheco y Alejandra León. A ANID por su ayuda financiera a través de la beca Doctorado Nacional, como también a la UTFSM por el financiamiento otorgado gracias a su programa de becas de postgrado.

Referencias

- [1] Kaiser, K., Scriven, L.M., Schulz, F., Gawel, P., Gross, L., & Anderson, II. L. (2019). *Science*, 365(6459), 1299-1301
- [2] Parasuk, V., Almlof, J., & Feyereisen, M. W. (1991). *Journal of the American Chemical Society*, 113(3), 1049-1050.
- [3] Neiss, C., Trushin, E., & Görling, A. (2014). *ChemPhysChem*, 15(12), 2497-2502.
- [4] Torelli, T., & Mitas, L. (2000). *Physical review letters*, 85(8), 1702.
- [5] Arulmozhiraja, S., & Ohno, T. (2008). *The Journal of chemical physics*, 128(11), 114301.