

Películas ultradelgadas polares de carburo de silicio (SiC): Estudio teórico y computacional de la estabilidad y propiedades electrónicas

Ignacio Gallardo^{1*}, Francisco Calderón^{1†}, Sergio Conejeros^{2**}

¹Departamento de Física, Universidad Católica del Norte, Avda. Angamos 0610, Antofagasta.

²Departamento de Química, Universidad Católica del Norte, Avda. Angamos 0610, Antofagasta.

*ignacio.gallardo@alumnos.ucn.cl, †fcalderon@ucn.cl, **sconejeros@ucn.cl

Resumen

La estabilidad termodinámica y propiedades electrónicas, en función del número de capas, de películas ultradelgadas (nanofilms) polares y no polares de carburo de silicio (SiC) fueron analizadas a través de cálculos periódicos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). Este trabajo se centra en el estudio de la estabilidad de nanofilms SiC polares, ya que este tipo de estructuras presentan una alta inestabilidad según el modelo de Tasker [1], debido a la presencia de un momento dipolar diferente de cero que se repite en cada unidad en dirección perpendicular a la superficie. Como resultado, la energía electrostática diverge cuando el número de capas $N \rightarrow \infty$ [2]. Diferentes mecanismos se han propuesto para estabilizar los nanofilms polares y eliminar o reducir el momento dipolar, tales como: transiciones de fase, reconstrucción de la superficie y transferencia de carga. De particular interés son aquellos mecanismos de transición de fase que se observan en películas ultradelgadas polares WZ(0001)/(000-1) de AlN, BeO, GaN, SiC y ZnS [3] que originan una estructura tipo grafito o grafeno. Un mecanismo similar se observa en películas ultradelgadas polares ZB(111) de ZnO y ZnS [4]. Nuestros resultados predicen la existencia de nanofilms SiC con estructura grafeno y grafito. Es de especial interés la fase escalonada tipo grafito con apilamiento ABC, ya que presenta un band gap directo que decrece linealmente en función del número de capas. Asimismo, los nanofilms polares grafiticos escalonados de apilamiento ABC y ZB(111) presentan un régimen de polaridad no compensada de acuerdo a Noguera y Goniakowski [5].

Agradecimientos: Agradecemos el apoyo financiero del proyecto de investigación FONDECYT/ANID 1221697, y también al “Núcleo de Investigación No.7 UCN-VRIDT 076/2020, Núcleo de modelación y simulación científica (NMSC)” por el apoyo científico.

Referencias

- [1] P. W. Tasker, *J. Phys. C: Solid State Phys*, vol. 12, 1979.
- [2] C. Noguera, *Journal of Physics Condensed Matter*, vol. 12, nº 31, 2000.
- [3] C. L. Freeman, F. Claeysens, N. L. Allan y J. H. Harding, *Physical Review Letters*, vol. 96, nº 6, pp. 1-4, 2006.
- [4] S. Conejeros, N. L. Allan, F. Claeysens y J. N. Hart, *Nanoscale Advances*, vol. 1, nº 5, pp. 1924-1935, 2019.
- [5] J. Goniakowski, C. Noguera y L. Giordano, *Physical Review Letters*, vol. 98, nº 20, pp. 1-4, 2007.