



PROPIEDADES DE AZUFRE ADSORBIDO EN GRAFENO

Juan Arellano¹

¹Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco,
Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, C.P. 02200,
Delegación Azcapotzalco, Ciudad de México, México.
Área de Física Atómica Molecular Aplicada
Departamento de Ciencias Básicas

e-mail: jsap@correo.azc.uam.mx

Se discuten resultados para la adsorción de algunas de las formas alotrópicas del azufre sobre hojas de grafeno pristino y con una o dos vacancias de carbono. Los cálculos se realizaron con el código de cómputo Quantum espresso. Se usaron pseudopotenciales que usan la aproximación LDA para la contribución de intercambio y correlación, c.fhi.UPF, para el carbono y un pseudopotencial ultrasuave con funcional del tipo Perdew-Zunger, como el S.pz-van_ak.UPF, para el azufre en la obtención de los resultados. Un solo átomo de azufre es adsorbido en el mismo plano del grafeno ante la presencia de una divacancia de carbono en la hoja de grafeno. Se estudia el efecto en la adsorción en función de la distancia entre el par de vacancias. Se analiza la densidad de estados electrónicos para algunos de los sistemas estudiados y se discuten las modificaciones en las propiedades electrónicas de los sistemas. Una conclusión es que sistemas en base a grafeno y con defectos, como las vacancias puedan ser usados para aplicaciones diversas como la electrónica, medio ambiente y energía.