



Contribution ID : 90

Type : Short communications

Propiedades electrónicas y magnéticas de canales de grafeno grabados en fluorografeno: Transición controlable de semiconductor a metal.

Tuesday, 16 December 2025 16:30 (30)

Investigamos las propiedades electrónicas y magnéticas de canales de grafeno (de 2 a 4 nm de ancho) en fluorografeno, centrándonos en dos interfaces distintas: la interfaz totalmente fluorada α y la interfaz semifluorada β . Los cálculos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) revelan que los canales $\alpha\alpha$ presentan un comportamiento semiconductor con ordenamiento antiferromagnético, asemejándose estrechamente a las nanocintas de grafeno zigzag prístinas. En contraste, los canales $\alpha\beta$ muestran ferromagnetismo y una transición de semiconductor a metal dependiente del ancho. Buscando el estudio de sistemas más grandes, desarrollamos modelos efectivos de Hubbard para canales $\alpha\alpha$ y $\alpha\beta$. Basados en resultados DFT y en análisis de funciones de Wannier, dichos modelos reproducen la estructura electrónica y el orden magnético observados en los cálculos DFT. De forma crucial, nuestro modelo $\alpha\beta$ capta exitosamente la transición de semiconductor a metal. La aplicación de este modelo a sistemas más grandes revela la persistencia de un estado ferromagnético con polarización de espín localizada en el borde α . Nuestros resultados demuestran el potencial de la fluoración para la ingeniería dirigida de propiedades y proporcionan una base para explorar sistemas grafeno-fluorografeno en aplicaciones de dispositivos que van desde la microelectrónica hasta la espintrónica.

Primary author(s) : Dr GUZMÁN ARELLANO, Robert Mikhail (Universidad Nacional Mayor de San Marcos)

Co-author(s) : Dr HERNADEZ NIEVES, Alexander David (Centro Atomico Bariloche - Instituto Balseiro - CONICET); Dr PEETERS, Francois (Nanjing University of Information Science and Technology, - University of Antwerp); Dr USAJ, Gonzalo (Cemtrp Atomico Bariloche - Instituto Balseiro - CONICET)

Presenter(s) : Dr GUZMÁN ARELLANO, Robert Mikhail (Universidad Nacional Mayor de San Marcos)

Session Classification : FISICA DEL ESTADO SOLIDO