



Contribution ID : 129

Type : Poster

## Estudio de la influencia de estados superficiales para la adsorción de moléculas sobre superficies bidimensionales 2D-InAs-n capas mediante cálculo de primeros principios.

Los materiales bidimensionales son sistemas de alta superficialidad que pueden ser diseñados a partir de semiconductores III-V. En particular, el InAs exhibe alta movilidad electrónica y bandgap estrecho (0.36 eV), propiedades que son aprovechadas por la industria tecnológica. Estudios anteriores resaltan el interés de conocer las propiedades de adsorción del InAs, debido a la sensibilidad que tienen los estados de superficie frente a adsorbatos superficiales. Conservar o sintonizar estas propiedades en su derivado bidimensional resulta importante para sus futuras aplicaciones como sensor de especies químicas o biológicas. En este estudio, investigamos la influencia de los estados de superficie en la estructura electrónica del 2D-InAs-n capas y analizamos los fenómenos de adsorción de este sistema con moléculas de H<sub>2</sub>O y CO mediante cálculos de primeros principios bajo el formalismo de la DFT. Para analizar el fenómeno de adsorción se usó la corrección de Grimme-D3, para considerar las interacciones Van der Waals presentes en este tipo de moléculas. Los resultados exhiben la presencia de sitios de adsorción preferentes sobre la cara de átomos de Indio (In) respecto a los de Arsénico (As). Estos primeros avances ayudan a perfilar este sistema como futuro sensor de alta sensibilidad de moléculas de gas.

**Primary author(s) :** Mr ZAPATA R., B. Edward (Universidad Nacional Mayor de San Marcos)

**Co-author(s) :** GUZMAN ARELLANO, ROBERT MIKHAIL (Universidad Nacional Mayor de San Marcos)

**Presenter(s) :** Mr ZAPATA R., B. Edward (Universidad Nacional Mayor de San Marcos)

**Session Classification :** Poster Fisica del Estado Solido