



UNIVERSIDAD DE MEDELLIN

FACULTAD DE CIENCIAS BÁSICAS

**Proyecto Final - FisicoQuímica Computacional
Termodinámica de la adsorción de moléculas pequeñas sobre
pentagrafeno**

PRESENTA

Jhon Wilmer Pino Román
1017269052
Computación Científica

PROFESORES

Francisco Nuñez
Julián David Correa
Carlos Andrés Jimenez

Universidad De Medellín

2022-1

Resumen

Este proyecto explora la interacción de compuestos sobre pentagrafeno, está particularmente orientado a materiales que tengan un impacto ambiental, como lo son el caso de monóxido de carbono y el dióxido de carbono, y así mismo el hidrógeno con propósitos energéticos. Tras una caracterización completa del material, empezamos a recrear las simulaciones de interacción y calcular su viabilidad termodinámica. A lo largo del proyecto, no pudimos encontrar interacciones relevantes para los procesos que buscábamos, así que como resultado final, se concluye que en búsqueda de favorecer estas interacciones debe doparse el material y calcular nuevamente en búsqueda de resultados favorables.

Introducción

En este proyecto, nos centraremos en explorar las interacciones termodinámicas de adsorbatos sobre un material emergente y prometedor: el pentagrafeno. Es una variante del grafeno con una estructura de red de pentágonos en lugar de hexágonos. Este material ha ganado considerable atención debido a sus propiedades electrónicas, mecánicas y químicas excepcionales.

La elección de pentagrafeno como objeto de estudio se basa en su estructura y propiedades únicas, así como en su potencial para aplicaciones tecnológicas. Este proyecto busca profundizar nuestra comprensión de las interacciones termodinámicas de adsorbatos sobre pentagrafeno, con el objetivo de descubrir el alcance de sus propiedades y establecer fundamentos sólidos para su aplicación en áreas como la adsorción y la detección de compuestos.

Mencionamos estos dos ámbitos, porque son el tipo de compuestos que analizaremos, si el pentagrafeno es favorable para la disociación de H_2 , tendremos un material importante en la producción de energías limpias. Si su interacción es favorable a CO_2 tendremos un material capaz de atrapar y transformar uno de los principales gases de efecto invernadero. Si es favorable a CO , tendremos un material ideal para ser sensor de este compuesto, el cual es un gas altamente nocivo para la salud.

Esperamos tener resultados favorables que nos permitan orientar nuestro trabajo en búsqueda de conocimiento que sea beneficioso para el desarrollo tecnológico de la humanidad.

Metodología

Antes de comenzar a explorar el material a nivel termodinámico, vamos a realizar una descripción completa sobre las propiedades fisicoquímicas del material, tras haber finalizado esto, empezaremos a experimentar la interacción del sistema con distintas moléculas pequeñas.

Caracterización del Material

En este proyecto, se llevó a cabo una implementación computacional utilizando los paquetes de programación ASE (Atomic Simulation Environment) y GPAW (Projector Augmented Wave) para realizar una caracterización detallada del pentagrafeno. Se utilizaron diversas técnicas de simulación para investigar su estructura de bandas, densidad de estados, espectro de fotoabsorción y modos de vibración (fonones).

Para comenzar, se construyó un modelo del pentagrafeno utilizando la estructura cristalina experimental. Se tuvieron en cuenta los parámetros de red, la geometría y la disposición de los átomos para crear una representación precisa del material en el sistema de simulación.

A continuación, se realizó un estudio de la estructura de bandas del pentagrafeno. Este cálculo se realizó a través de tres métodos: Diferencias finitas, ondas planas y LCAO (combinación lineal de orbitales atómicos). Esto permitió obtener información sobre la distribución de niveles de energía y la naturaleza de los estados electrónicos en el material.

Posteriormente, se determinó la densidad de estados del pentagrafeno. Se calculó la contribución de los diferentes niveles de energía electrónica y se representó gráficamente la densidad de estados en función de la energía. Esto proporcionó información valiosa sobre la disponibilidad de estados electrónicos en el material y su relación con las propiedades electrónicas.

Para estudiar el espectro de fotoabsorción del pentagrafeno, se realizaron cálculos de transiciones electrónicas utilizando métodos de teoría del funcional de la densidad (DFT). Se examinaron las transiciones de electrones entre los niveles de energía permitidos y se calcularon las intensidades y las longitudes de onda asociadas con las transiciones. Esto permitió comprender las propiedades ópticas y de absorción de luz del pentagrafeno.

Por último, se llevó a cabo un análisis de los modos de vibración (fonones) del pentagrafeno. Se calcularon los espectros de fonones, que representan las frecuencias y las amplitudes de las vibraciones atómicas en el material. Esto proporcionó información sobre las propiedades mecánicas y la estabilidad del pentagrafeno.

En cada una de estas etapas de caracterización, se utilizaron los paquetes de programación ASE y GPAW para realizar los cálculos y análisis computacionales. Estos paquetes proporcionaron herramientas y algoritmos adecuados para llevar a cabo las simulaciones requeridas y obtener resultados precisos y confiables.

Identificación de Sitios de Interacción

Al ubicar adsorbatos sobre la superficie de pentagrafeno, es crucial tener en cuenta la interacción electrónica entre el adsorbato y el material anfitrión. Esta interacción depende en gran medida de la geometría de la estructura y las simetrías del adsorbato. La geometría de la estructura del pentagrafeno presenta sitios de adsorción preferenciales donde los átomos del adsorbato pueden interactuar de manera efectiva con los átomos de carbono del pentagrafeno. Estos sitios de interacción pueden estar determinados por la presencia de defectos en la superficie, como sitios de borde o grupos funcionales. Además, las simetrías del adsorbato deben ser consideradas para asegurar una orientación óptima y una interacción favorable con el pentagrafeno. La identificación y selección adecuada de estos sitios de interacción electrónica basados en la geometría de la estructura y las simetrías del adsorbato son fundamentales para comprender y controlar las propiedades termodinámicas y las interacciones de adsorción en el sistema pentagrafeno-adsorbato. Para facilitar la identificación de estos sitios, se realizó un diagrama y un barrido de los sitios identificados para la celda unitaria y para una celda 2x2.

Cálculos Termodinámicos

La termodinámica de adsorción ha sido objeto de estudio durante décadas debido a su relevancia en diversos campos científicos y tecnológicos. En particular, las interacciones termodinámicas de adsorbatos sobre materiales de carbono nanoestructurados han captado la atención de investigadores debido a sus propiedades únicas y potenciales aplicaciones en diversas áreas. En este caso estamos evaluando la viabilidad de las interacciones entre pentagrafeno y tres adsorbatos: H_2 , CO_2 y CO . Una vez ubicados nuestro adsorbato sobre cada sitio, procedemos a guardar el archivo para realizar la optimización del sitio. Se procedió a realizar la relajación de cada sitio dibujado y se rankeó por su mejor energía de reacción ΔE . Donde la energía de reacción está dada por:

$$\Delta E = E_{\text{producto}} - E_{\text{slab}} - E_{\text{adsorbato}}$$

De igual manera, para comprobar que nuestras reacciones sean o no viables termodinámicamente, calcularemos la energía libre de Gibbs de la reacción.

$$G = U - TS + PV$$

En un sistema a temperatura constante y volumen constante, la energía de Helmholtz (A) se define como:

$$A = U - TS$$

donde U es la energía interna del sistema, T es la temperatura y S es la entropía.

En un sistema a temperatura constante y presión constante, la energía libre de Gibbs (G) se define como:

$$G = H - TS$$

donde H es la entalpía del sistema, T es la temperatura y S es la entropía.

La relación entre A y G está dada por la siguiente ecuación:

$$G = F + PV$$

donde P es la presión y V es el volumen del sistema.

En casos donde la presión y el volumen del sistema se mantienen constantes, es decir, cuando no hay trabajo de expansión o compresión, la ecuación se reduce a:

$$G = F$$

Por lo tanto, en condiciones de presión y volumen constantes, la energía de Helmholtz (F) y la energía libre de Gibbs (G) serán iguales.

Por último calcularemos el ΔG de adsorción, teniendo en cuenta la Zero-Point energy y viendo cuando contribuye esta porcentualmente. ΔG de adsorción está dado por:

$$\Delta G_{diss} = G_{prod} - G_{reac}$$

$$\Delta G_{diss} = E_{diss} - K_B T \{ [\ln(q_{vib}^{nH-})] - [\ln(q_{vib}^{nH-2})] - Q_{gas} \}$$

Donde

$$E_{diss} = \sum_{i=1}^{nm} \frac{1}{2} h v_i$$

$$Q_{gas} = \ln \left(\left(\frac{2\pi m_{H_2} K_B T}{h^2} \right)^{3/2} \frac{K_B T}{p_{H_2}} \right) + \ln \left(\frac{1}{\sigma_r} \left(\frac{T}{h^2 / 8\pi^2 I K_B} \right) \right) + \sum_{i=1}^{nm} \ln \left(\frac{1}{1 - \exp(-h v_i / K_B T)} \right)$$

Las relajaciones del sistema se realizaron usando el método de ondas planas (PW) implementado en el paquete GPAW usando los argumentos determinados en las pruebas que realizamos sobre la estructura de la celda unitaria inicial.

Resultados

Como primer paso, conozcamos la celda unitaria de nuestro material:

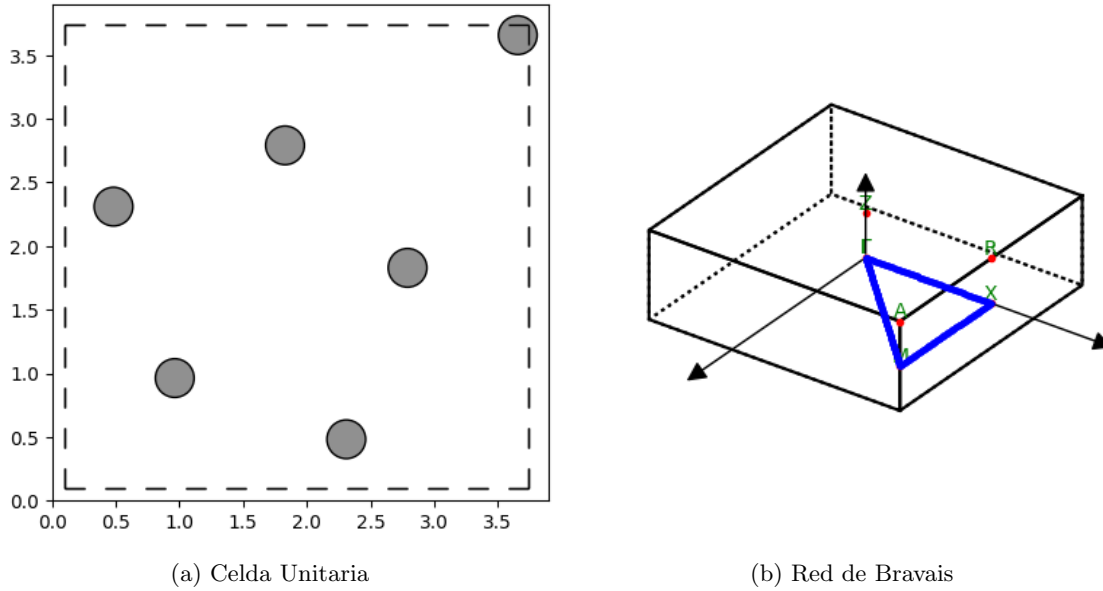


Figura 1: Celda unitaria de Pentagrafeno y su red de Bravais

Para la implementación del método de ondas planas, realizamos una rutina iterativa que nos permita saber cuanta energía de corte para los planos de onda y cuantos puntos-k son suficientes para que nuestros cálculos converjan. De este modo sabremos que estamos obteniendo unos resultados acordes a la realidad y regularemos el costo computacional al no escoger más de lo necesario.

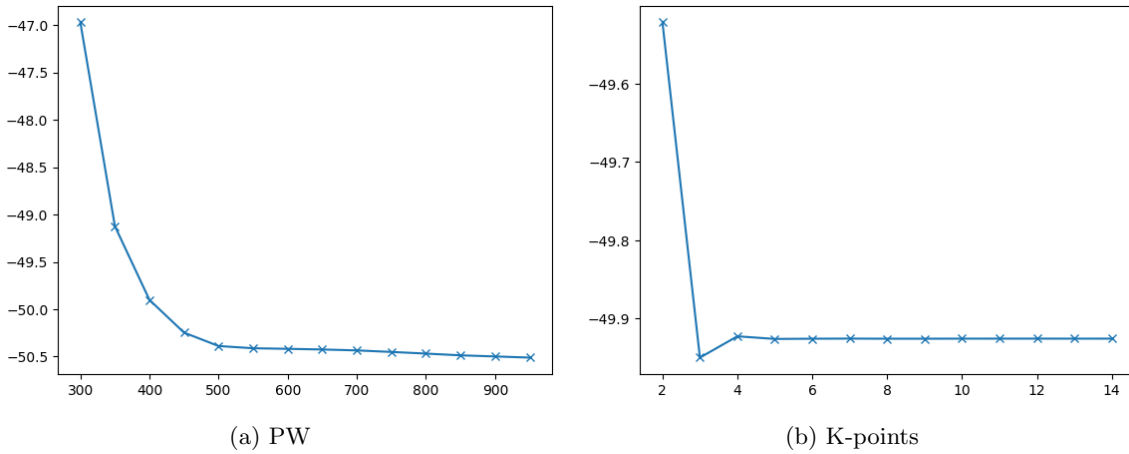


Figura 2: Convergencia energética

Dado esto, vemos que los cálculos convergen en un tamaño de base muy grande, en este caso la convergencia se presenta apartir de un tamaño de base de alrededor de 700 a 800. Dado esto, escogeremos un tamaño de 750 como base para los cálculos realizados. Adicionalmente observamos que la convergencia de la energía no requiere demasiados k-points, en este caso, utilizaremos un total de 8. Para el resto del proyecto, todos los cálculos que se realizen, utilizaran estos mismos parámetros.

Energía del Sistema

Para hallar la energía del sistema, vamos a implementar y comparar los resultados obtenidos con los tres modos de cálculo que nos ofrece GPAW, estos son diferencias finitas (FD), ondas planas (PW) y combinación lineal de orbitales atómicos (LCAO), lo haremos tomando en cuenta el valor de energía obtenido y el costo computacional. Con el método de mejor energía, construiremos los calculadores para el resto de caracterizaciones

Método	Energía Obtenida (eV)	Iteraciones
PW	-49.948100	18
FD	-49.551922	20
LCAO	-40.699106	3

El mejor resultado tal y como lo vemos, lo obtenemos al utilizar el método de ondas planas, este no solo arroja la menor energía de los tres, si no que ademas lo hace a un costo computacional razonable.

Estructura de Bandas

Para empezar con la caracterización del material, primero obtengamos la estructura de bandas de la estructura periódica. Nuevamente, lo haremos a través de los tres métodos de cálculo.

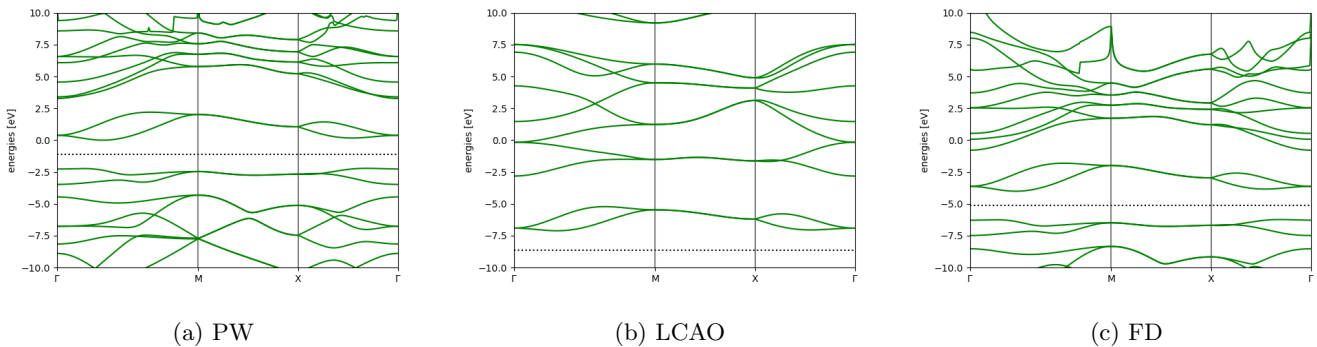


Figura 3: Estructura de Bandas de Pentagrafeno

Por el gap que se da en la estructura de bandas, y que se da con los tres métodos de cálculo, el cual podemos observar que es de entre 4 y 4.5 eV aproximadamente, nos indica entonces que el pentagrafeno es un material semiconductor.

Densidad de Estados

La densidad de estados se define como la cantidad de estados por unidad de volumen de espacio de momentos. En otras palabras, la densidad de estados es una medida de la cantidad de estados cuánticos disponibles para un sistema en función de su energía.

La densidad de estados es importante porque está relacionada con muchas propiedades macroscópicas de los materiales, como su capacidad térmica, conductividad eléctrica y magnética, y su espectro de absorción de luz. Además, la densidad de estados puede usarse para calcular la probabilidad de que un electrón o un fotón tenga una energía particular en un material, lo que es útil en la investigación de materiales para aplicaciones electrónicas, ópticas y energéticas.

En particular, se espera que el pentagrafeno tenga una banda de energía electrónica completamente llena y una banda vacía parcialmente llena, lo que indica que tiene propiedades semiconductoras.

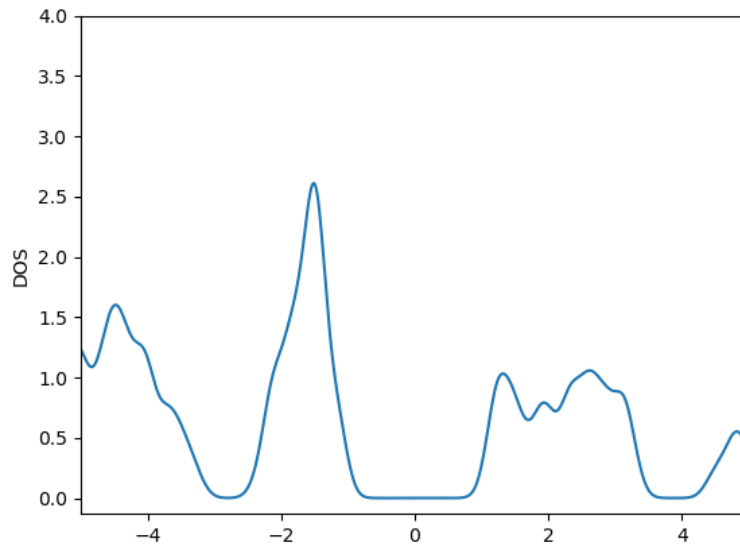


Figura 4: Densidad de Estados del Pentagrafeno

A partir de la descripción que nos proporciona el diagrama de densidad de estados, se pueden hacer las siguientes interpretaciones:

1. Densidades cero alrededor de -3 eV: No hay estados electrónicos disponibles en la energía de -3 eV. Esto podría indicar una brecha de energía prohibida en el material en ese rango de energía. Es posible que los electrones no puedan ocupar estados electrónicos en esa región específica.
2. Aproximadamente 2.5 densidades entre -2 eV y -1 eV: Hay una densidad moderada de estados electrónicos en el rango de energía. Esto podría indicar la presencia de niveles de energía o bandas electrónicas en esa región, donde los electrones tienen una probabilidad razonable de ocupar esos estados.
3. Densidades cero entre -1 eV y 1 eV: No hay estados electrónicos disponibles en el rango de energía entre -1 eV y 1 eV. Esto sugiere una brecha prohibida en ese rango de energía, donde los electrones no tienen niveles de energía permitidos para ocupar.
4. Aproximadamente 1 densidad entre 1 eV y 3 eV: Existe una densidad de estados electrónicos moderada en el rango de energía entre 1 eV y 3 eV. Esto indica la presencia de niveles de energía o bandas electrónicas donde los electrones pueden ocupar esos estados con cierta probabilidad.
5. Densidades cero alrededor de 4 eV: No hay estados electrónicos disponibles en la energía alrededor de 4 eV. Esto podría indicar una brecha de energía prohibida o una falta de niveles de energía permitidos en esa región específica.

En resumen, según la descripción de densidad de estados que obtuvimos, se puede inferir que el material puede tener propiedades ópticas que incluyen una baja absorción en las brechas prohibidas alrededor de -3 eV y alrededor de 4 eV, una mayor absorción en la región de energía alrededor de -2 eV y una absorción moderada en el rango de energía entre 1 eV y 3 eV.

Espectro de FotoAbsorción

Ahora continuamos con el espectro de foto absorción electrónica del sistema, tras realizar los cálculos, obtuvimos el siguiente resultado.

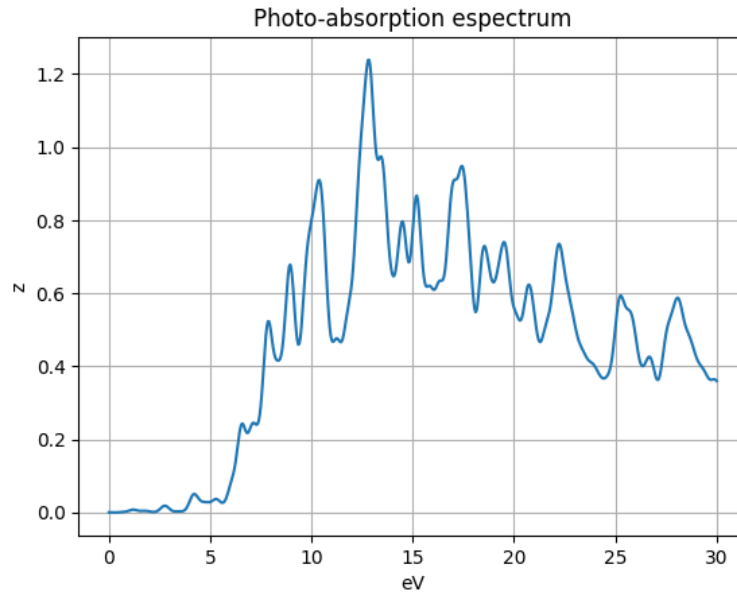


Figura 5: Espectro de Foto-absorción del Pentagrafeno

A partir de esto, podemos exponer lo siguiente:

- Ausencia de absorción entre 0 y 5 eV: La falta de absorción en este rango de energía sugiere que el material tiene una brecha de energía significativa o una región de energía donde las transiciones electrónicas no están permitidas. Esto implica que el material es transparente o tiene una interacción mínima con la luz en este rango de energía.
- Absorción con un promedio de aproximadamente 0.5 entre 5 y 10 eV: Una absorción promedio de 0.5 indica que el material interactúa moderadamente con la luz en este rango de energía. Sugiere que existen algunas transiciones electrónicas o niveles de energía disponibles, lo que lleva a una absorción parcial de fotones dentro de este rango. El material absorbe aproximadamente el 50 % de la luz incidente en energías entre 5 y 10 eV.
- Pico de absorción de 1.2 entre 10 y 15 eV: El pico de absorción de 1.2 indica una fuerte interacción entre el material y la luz en este rango de energía. Sugiere la presencia de niveles de energía o transiciones electrónicas que coinciden con la energía de los fotones en este rango. El material absorbe de manera eficiente los fotones con energías entre 10 y 15 eV, con una intensidad de absorción de 1.2, lo que indica un mayor nivel de transferencia de energía de los fotones al material.
- Absorción promedio de 1 por encima de 15 eV: Una absorción promedio de 0.6 indica que el material absorbe de manera moderada la luz por encima de 15 eV. Sugiere que existen algunas transiciones electrónicas o niveles de energía disponibles, lo que lleva a una absorción parcial de fotones dentro de este rango. El material absorbe aproximadamente el 50 % de la luz incidente en energías por encima de 15 eV, con una intensidad de absorción de 0.6, lo que indica una transferencia media de energía de los fotones al material.

Modos de Vibración (Fonones)

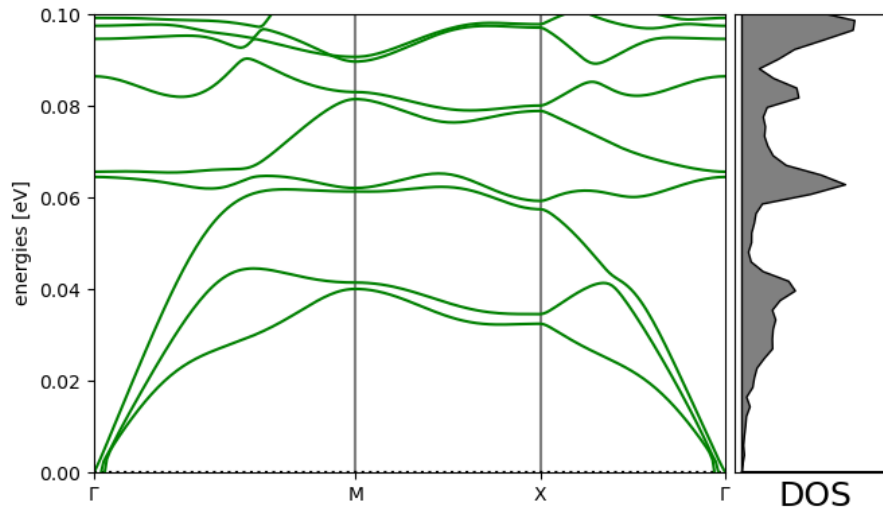


Figura 6: Modos de vibración del Pentagrafeno

Diagrama de Sitios de Interacción

Para entender mejor la estructura y presentar resultados más acordes con la realidad, realizaremos distintos barridos, tanto en la celda unitaria, como en una super celda 2x2, para corroborar los resultados que tengamos con una y otra. Primero visualizemos la estructura 2x2

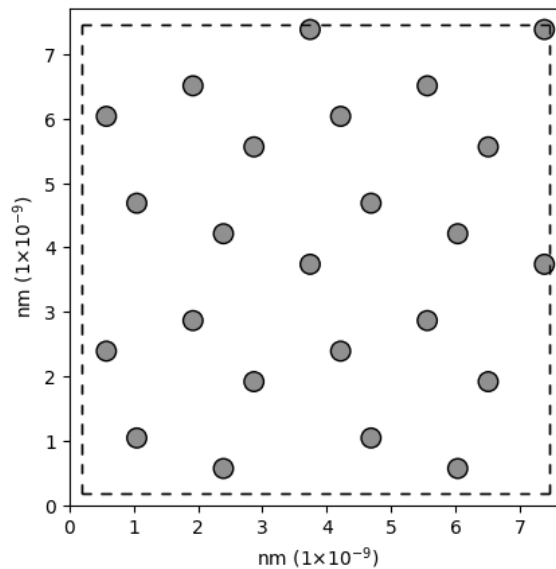


Figura 7: Celda de Pentagrafeno 2x2

Ahora presentamos los resultados del barrido de sitios para la celda unitaria de pentagrafeno

Modo	E_{prod} (eV)	E_{slab} (eV)	E_{H_2} (eV)	ΔE (eV)
10	-58,47956	-49,95092	-6,75051	-1,77813
2	-58,47903	-49,95092	-6,75051	-1,77760
8	-57,32982	-49,95092	-6,75051	-0,62839
4	-57,32868	-49,95092	-6,75051	-0,62725
9	-57,32770	-49,95092	-6,75051	-0,62627
3	-57,32748	-49,95092	-6,75051	-0,62605
6	-57,32677	-49,95092	-6,75051	-0,62534
5	-57,32636	-49,95092	-6,75051	-0,62493
7	-57,32380	-49,95092	-6,75051	-0,62237
1	-57,32217	-49,95092	-6,75051	-0,62074

Estos resultados son sin duda áltamente favorables, pero antes de cualquier conclusión apresurada, debemos evaluar su veracidad, esto lo haremos comparando con la supercelda 2x2 y evaluando la energía de deformación del sistema, lo cual haremos por medio de esta fórmula:

$$E_D = |E_P - E_{pMod}| \quad (1)$$

E_D será la energía de deormación calculada, E_{pMod} , será la energía de la superficie de pentagrafeno que interactuo con los hidrógenos y cuya estructura se ha modificado debido a esta interacción.

Primero observemos una comparativa visual entre ambas superficies

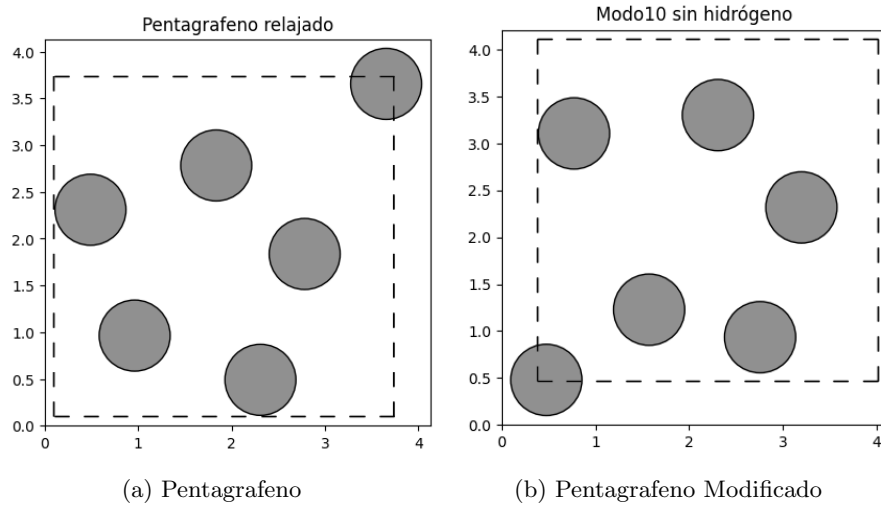


Figura 8: Comparativa entre el pentagrafeno limpio y posterior a la interacción con H_2

Visualmente podemos ver una enorme deformación en la estructura de anillos de pentagrafeno. Ahora veamos los resultados del cálculo de energía de deformación.

$$E_P = -55.209270330506435eV$$

$$E_{pMod} = -52.33178349506612eV$$

$$E_D = |-55.209270330506435 - (-52.33178349506612)|eV$$

$$E_D = 2.8774868354403154$$

Dado el alto valor que obtenemos de energía de deformación, superior a 2 eV, no podemos considerar estos cálculos como adecuados, por ende vamos a proceder a realizar el barrido en 2x2 y de ahí decidiremos si descartar estos resultados o no.

Ahora, con las herramientas de visualización de ase gui, detectamos los siguientes sitios en donde ubicar nuestros adsorbatos sobre la supercelda 2x2, esto lo podemos hacer de manera unificada, ya que nuestros adsorbatos de estudio, son todas moléculas lineales.

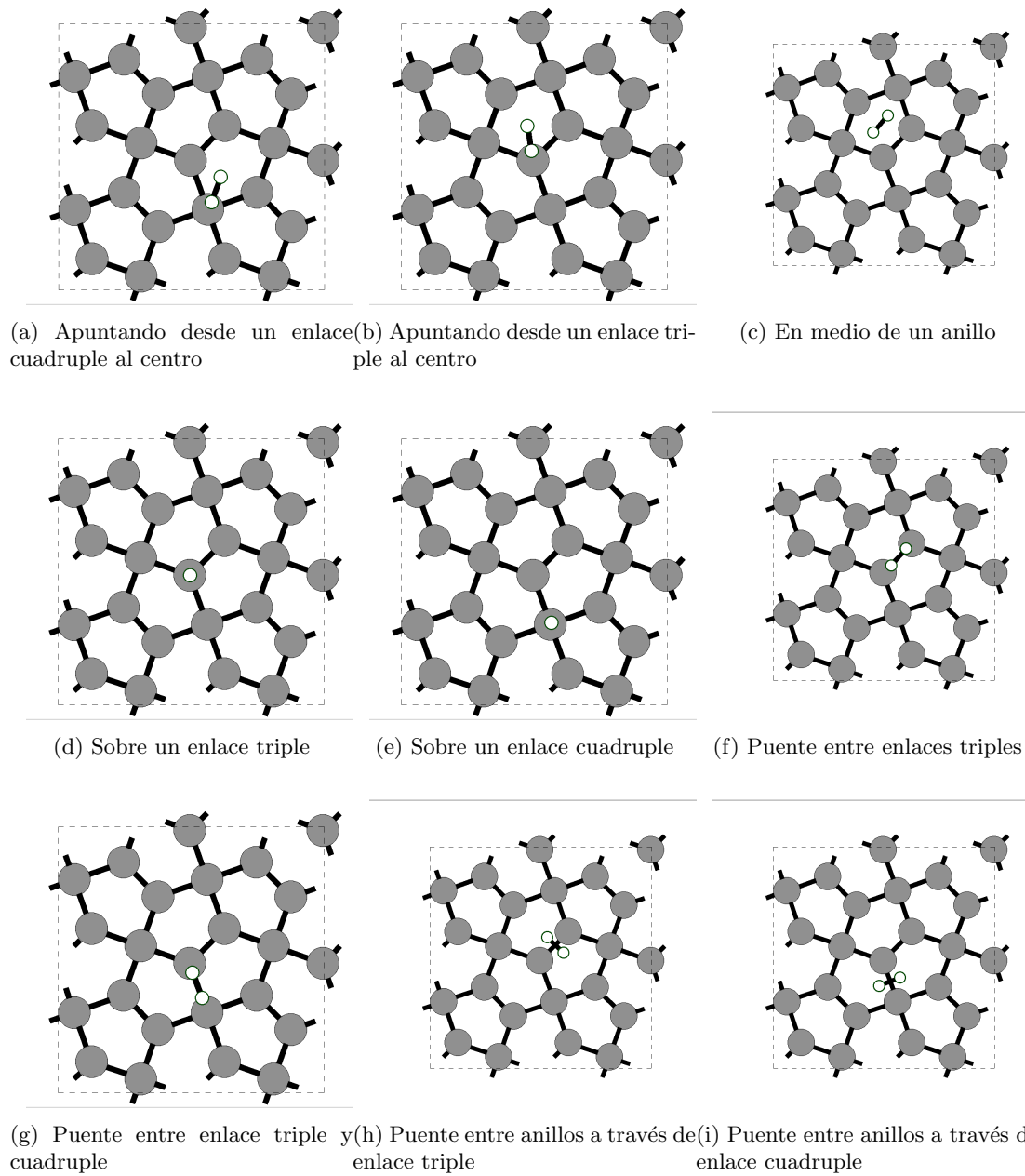


Figura 9: sitios identificados

Con este esquema que recoge la mayoría de simetrías del sistema periódico, realizaremos el barrido de sitios y procederemos a verificar la existencia de posibles interacciones con cada uno de nuestros adsorbatos. A parte de estos nueve sitios, dada la geometría del adsorbato o por un interés particular, podrán resultar modos adicionales de exploración, dichos modos se adjuntarán en los anexos del proyecto para conocimiento del lector.

Termodinámica de Interacción - H_2

Ahora, exponemos los resultados del cálculo de interacción para los modos señalados

Modo	E_{prod} (eV)	E_{slab} (eV)	E_{H_2} (eV)	ΔE (eV)
1	-206,570688	-199.79233	-6.75051	-0,02786
2	-206,56226	-199.79233	-6.75051	-0,01943
3	-206,57113	-199.79233	-6.75051	-0,02829
4	-206,57251	-199.79233	-6.75051	-0,02968
5	-206,57123	-199.79233	-6.75051	-0,02840
6	-206,56937	-199.79233	-6.75051	-0,02654
7	-206,56866	-199.79233	-6.75051	-0,02583
8	-206,57216	-199.79233	-6.75051	-0,02933
9	-206,56191	-199.79233	-6.75051	-0,01908
10	-206,570131	-199.79233	-6.75051	-0,02730

Como observamos, los resultados de energía de interacción son muy bajos, por lo que no serían relevantes para la disociación del hidrógeno.

Termodinámica de Interacción - CO_2

Modo	E_{prod} (eV)	E_{slab} (eV)	E_{CO_2} (eV)	ΔE (eV)
1	-223,400533	-199.79233	-23,578754	-0,029452
2	-223,396054	-199.79233	-23,578754	-0,024973
3	-223,39487	-199.79233	-23,578754	-0,023789
4	-223,39937	-199.79233	-23,578754	-0,028289
5	-223,390452	-199.79233	-23,578754	-0,019371
6	-223,389994	-199.79233	-23,578754	-0,018913
7	-223,400174	-199.79233	-23,578754	-0,029093
8	-223,399096	-199.79233	-23,578754	-0,028015
9	-223,397301	-199.79233	-23,578754	-0,026220
10	-223,388847	-199.79233	-23,578754	-0,017766
11	-223,392496	-199.79233	-23,578754	-0,021415
12	-223,400776	-199.79233	-23,578754	-0,029695
13	-223,394462	-199.79233	-23,578754	-0,023381
14	-223,396404	-199.79233	-23,578754	-0,025323
15	-223,390762	-199.79233	-23,578754	-0,019681

En este caso, nuevamente tenemos interacciones muy bajas, por este resultado podemos decir que el pentagrafeno por sí solo, no logra la captura de moléculas de CO_2

Termodinámica de Interacción - CO

Para el caso de CO intentamos forzar una interacción entre el pentagrafeno, para visualizar si este podría ser utilizado a futuro en la detección de este compuesto tóxico para la salud.

Modo	E_{prod} (eV)	E_{slab} (eV)	E_{CO} (eV)	ΔE (eV)
1	-214.915823	-199.79233	-15.108637	-0.014859
2	-213.184273	-199.79233	-15.108637	1,716691
3	-214.912869	-199.79233	-15.108637	-0.0011905

En este caso, vemos que la interacción es muy poco favorable, ya que incluso en modos en los que estamos forzando a que la interacción ocurra, obtenemos energías que nos indican que esta es una reacción realmente débil.

Para fundamentar este resultado, veamos el resultado de los cálculos de termodinámica en GPAW

Adsorbato	U	-T*S	F	Temperatura
H_2	0.358 eV	-0.15 eV	0.343 eV	298.15 k
CO	0.358 eV	-0.015 eV	0.343 eV	298.15 k
CO_2	0.358 eV	-0.015 eV	0.343 eV	298.15 k
H_2	0.377 eV	-0.042 eV	0.355 eV	398.15 k
CO	0.377 eV	-0.042 eV	0.335 eV	398.15 k
CO_2	0.377 eV	-0.042 eV	0.335 eV	398.15 k
H_2	0.403 eV	-0.081 eV	0.322 eV	498.15 K
CO	0.403 eV	-0.081 eV	0.322 eV	498.15 K
CO_2	0.403 eV	-0.081 eV	0.322 eV	498.15 K

Lo primero que podemos notar, es que el aumento en la temperatura genera cambios muy mínimos en la energía libre de Helmholtz. Recordemos que, en este experimento realizado a presión y volumen constantes, este será igual a la energía libre de Gibbs, en los cuales obtuvimos valores positivos. Es decir, las reacciones entre el adsorbato y el pentagrafeno limpio parecen ser inviables.

Ahora con estos resultados, obtengamos ΔG_{diss} , dado que los resultados son bastante similares utilizaremos los resultados obtenidos calculando a temperatura de 298.15 K y 1 atm de Presión

$$\Delta G_{dissH_2} = 0.156eV$$

$$\Delta G_{dissCO_2} = 0.43eV$$

$$\Delta G_{dissCO} = 0.105eV$$

Conclusiones

El estudio realizado generó varias conclusiones interesantes e importantes a tener en cuenta para futuros trabajos:

Al analizar el diagrama de estructura de bandas, se observó que el pentagrafeno presenta una estructura de bandas semimetálica, con bandas de valencia y conducción que se superponen en ciertas regiones. Esto indica que el material puede exhibir propiedades conductoras en ciertas direcciones y se sugiere la posibilidad de una alta movilidad de carga en el material.

En cuanto al diagrama de densidad de estados, se observó una ausencia de densidades de estados en el rango de -3 eV, lo cual indica la presencia de una brecha de energía prohibida en esta región. Entre -2 eV y -1 eV, se encontraron aproximadamente 2.5 densidades de estados, lo que indica la existencia de niveles electrónicos permitidos en esta región energética. Además, se identificó un pico de densidad de estados de aproximadamente 1.2 entre 10 eV y 15 eV, lo cual sugiere la presencia de transiciones electrónicas significativas en esta región.

Estas características pueden tener implicaciones importantes en sus propiedades electrónicas y ópticas, lo que lo convierte en un material prometedor para aplicaciones en dispositivos electrónicos y optoelectrónicos.

La disparidad entre los resultados que obtuvimos utilizando la celda unitaria y una super celda 2x2, muestran la importancia de ser rigurosos a la hora de realizar simulaciones y corroborar por distintos medios los resultados que se lleguen a obtener.

El pentagrafeno pristino no logró adsorber ninguna de las moléculas que planteamos. Termodinámicamente pudimos demostrar la inviabilidad de las reacciones independiente de las condiciones de temperatura en que se dieran.

Perspectivas

El estudio de los materiales puede ser extenso y por momentos insatisfactorio, para el objetivo que nos planteamos no se pudo cumplir el hallar un tipo de interacción favorable que satisficiera nuestras expectativas. De igual manera y basandonos en múltiple bibliografía generada por la comunidad, creemos que es posible que el dopaje del material nos guie por un mejor camino. Con todo esto, hemos conocido un material que, aunque hasta el momento de esta escritura, sigue siendo hipotético, la búsqueda y desarrollo de conocimiento

a través de él, ha demostrado la existencia de propiedades más que promisorias a futuro. La continuación de este proyecto orientada hacia el estudio de los dopajes del material podría significar un nuevo universo de posibilidades, el cuál multiples investigadores ya han empezado a expandir.

Referencias

- Zhang, S., Zhou, J., Wang, Q., Chen, X., Kawazoe, Y., & Jena, P. (2015). Penta-graphene: A new carbon allotrope. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 112(8), 2372-2377.
- Jimenez-Orozco, C., Flórez, E., & Rodriguez, J. A. The α -WC (0001) surface as a hydrogen sponge: A first principle study of H₂ dissociation and formation of low and high coverages. *ChemCatChem*, e202300165.
- Deb, J., Seriani, N., & Sarkar, U. (2021). Ultrahigh carrier mobility of penta-graphene: a first-principle study. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 127, 114507.
- Xiao, B., Li, Y. C., Yu, X. F., & Cheng, J. B. (2016). Penta-graphene: a promising anode material as the Li/Na-ion battery with both extremely high theoretical capacity and fast charge/discharge rate. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 8(51), 35342-35352.
- Sathishkumar, N., Wu, S. Y., & Chen, H. T. (2019). Boron-and nitrogen-doped penta-graphene as a promising material for hydrogen storage: a computational study. *International Journal of Energy Research*, 43(9), 4867-4878.
- Sathishkumar, N., Wu, S. Y., & Chen, H. T. (2020). Charge-modulated/electric-field controlled reversible CO₂/H₂ capture and storage on metal-free N-doped penta-graphene. *Chemical Engineering Journal*, 391, 123577.
- J. J. Mortensen, L. B. Hansen, and K. W. Jacobsen Real-space grid implementation of the projector augmented wave method *Phys. Rev. B* 71, 035109 (2005)
- J. Enkovaara, C. Rostgaard, J. J. Mortensen et al. Electronic structure calculations with GPAW: a real-space implementation of the projector augmented-wave method *J. Phys.: Condens. Matter* 22, 253202 (2010)
- Ask Hjorth Larsen, Jens Jørgen Mortensen, Jakob Blomqvist, Ivano E. Castelli, Rune Christensen, Marcin Dulak, Jesper Friis, Michael N. Groves, Bjørk Hammer, Cory Hargus, Eric D. Hermes, Paul C. Jennings, Peter Bjerre Jensen, James Kermode, John R. Kitchin, Esben Leonhard Kolsbjerg, Joseph Kubal, Kristen Kaasbjerg, Steen Lysgaard, Jón Bergmann Maronsson, Tristan Maxson, Thomas Olsen, Lars Pastewka, Andrew Peterson, Carsten Rostgaard, Jakob Schiøtz, Ole Schütt, Mikkel Strange, Kristian S. Thygesen, Tejs Vegge, Lasse Vilhelmsen, Michael Walter, Zhenhua Zeng, Karsten Wedel Jacobsen The Atomic Simulation Environment—A Python library for working with atoms *J. Phys.: Condens. Matter* Vol. 29 273002, 2017
- S. R. Bahn and K. W. Jacobsen An object-oriented scripting interface to a legacy electronic structure code *Comput. Sci. Eng.*, Vol. 4, 56-66, 2002