



Proyecto de investigación en simulación y análisis de estructuras multicapa de materiales 2D.

Plan de trabajo

Familiarización con sistemas bidimensionales, estudio y construcción de sistemas bidimensionales a partir de celdas unitarias. El tipo de redes cristalinas por estudiar serán cuadradas, rectangulares y hexagonales. Familiarización con conceptos de estado sólido, como elementos de cristalografía, tipos de redes de Bravais y bases, además de las operaciones de traslación y rotación.

Construcción de homo- y -heteroestructuras de van der Waals de dos capas identificando en estas la celda de moiré correspondiente. Entre las heteroestructuras que se construirán se encuentran nitruro de boro hexagonal sobre grafeno, de diacalcogenuros de metales de transición con grafeno, de grafeno con fosforeno negro y con la fase beta de GeSe, además de la celda convencional de grafeno en bicapa rotado.

Generación de un código computacional para la construcción de cristales de van der Waals de 3 o más capas. Con el conocimiento previo adquirido, se escribirá un código computacional que genere cristales de van der Waals quirales compuestos de diferentes sistemas laminares, empleando operaciones de simetría como expansión y rotación además de una tensión pequeña $<5\%$ en las redes para generar sistemas con pocos átomos en la supercelda conmensurable. Se calcularán los vectores de su red en el espacio recíproco así como también se denotará la primer Zona de Brillouin (BZ), la zona irreducible y los puntos K y M correspondientes a las redes en cada Capa y a la super-Red generada.