|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | Construcción de estructuras multicapa de materiales bidimensionales de van der Waals mediante el uso de métodos geométricos. | | |
|  | | **Plan de trabajo** |  |

En Física de estado Sólido, como primer acercamiento, los materiales que se estudian son caracterizados como cristales en el espacio real (en una, dos o tres dimensiones) conformados por una red y una base. Entre los materiales estudiados se encuentran los sistemas estructurados por 2 o más capas de materiales bidimensionales (2D), los cuales pueden tener distintas propiedades que los materiales que lo conforman, para el estudio de estos sistemas se requiere conocer el cristal que lo caracteriza. Nuestro propósito es generar un código computacional intuitivo, flexible y robusto haciendo uso de métodos geométricos que, tomando en cuenta los requerimientos del problema en cuestión, pueda calcular la red y base que describen al cristal que caracteriza al sistema dado y lo presente en un formato conocido para su posterior estudio.

Comenzaremos con un acercamiento a conceptos básicos de estado sólido como lo son los elementos de cristalografía, tipos de redes de Bravais y bases, así como con las operaciones de simetría sobre estos (rotación y traslación). Se estudiarán y construirán sistemas 2D a partir de celdas unitarias, estos sistemas serán redes cristalinas de 3 tipos, cuadradas como lo es la fase alfa del GeSe, rectangulares como el Fosforeno Negro y hexagonales cómo el Grafeno. Seguiremos con la construcción de homo- y -heteroestructuras de van der Waals de varias capas, identificando en estas la celda de moiré correspondiente. Estas estructuras se construirán con las diversas combinaciones de los 3 tipos de redes cristalinas antes mencionadas, así como con estas bajo operaciones de simetría. Finalizaremos con la generación de un código computacional para la construcción de cristales de van der Waals quirales compuestos de 2 o más sistemas laminares (pertenecientes a cualquier tipo de red y composición química) expuestos a operaciones de simetría y a tensiones menores al 5% en las redes, generando así sistemas con pocos átomos en la supercelda conmensurable y con fidelidades altas al sistema real.