

Modelo de osciladores aplicado a materiales 2D para el estudio de la interacción con partículas cargadas

Silvina I. Segui	CONICET. 22774092
Juana L. Gervasoni	Universidad Nacional de Cuyo.CNEA. CONICET. 12234486
Zoran L. Miskovic	Department of Applied Mathematics, University of Waterloo, Ontario. Canada. N2L3G1
Néstor R. Arista	Universidad Nacional de Cuyo. CNEA. 07371542
Raúl O. Barrachina	Universidad Nacional de Cuyo. CNEA. CONICET 13078196

En los últimos años, y debido al constante requerimiento de materiales con nuevas propiedades para distintas aplicaciones, la investigación y el desarrollo de los mismos está recibiendo considerable atención de la comunidad científico-tecnológica, tanto desde las ciencias teóricas como aplicadas.

Los llamados materiales 2D presentan propiedades físicas, químicas y estructurales que difieren de los sólidos tradicionales (tridimensionales).

En este trabajo presentamos una formulación relativista para la pérdida de energía de una carga externa interactuando con un material 2D. Modelamos este material como una monocapa de átomos cuyos electrones de valencia son representados por osciladores armónicos, con frecuencias de oscilación características. Adaptamos el modelo de la electrodinámica clásica para materiales bidimensionales con estructura electrónica isotrópica (3D), y anisotrópica (2D), como el caso particular del grafeno en que sus electrones están restringidos a moverse en el plano del material.

Estudiamos el *stopping power* de electrones y protones, obteniendo expresiones analíticas para dos tipos de trayectorias de la partícula incidente (paralela y perpendicular al plano de osciladores) en función de los parámetros físicos relevantes involucrados en el proceso. La elección de factores de normalización adecuados (que eliminan la dependencia explícita con propiedades específicas como la densidad y la frecuencia de los osciladores) nos permite generalizar los resultados para distintos materiales.

Los principales resultados de nuestro análisis son:

- En un sistema de osciladores 2D anisotrópicos, la pérdida de energía (y por lo tanto, las cantidades integradas como potencia de frenado y pérdida total de energía) debida a un solo oscilador presenta una reducción con respecto al caso isotrópico, especialmente en la trayectoria paralela. Atribuimos este efecto a la menor disponibilidad de modos de oscilación, y por tanto a una reducción de los canales de interacción.
- En el caso de trayectoria perpendicular, la pérdida de energía total depende del valor de la frecuencia ω debido al comportamiento adiabático a grandes distancias.
- Como aplicación de interés en distintas áreas, desarrollamos los cálculos para el caso del grafeno, uno de los principales materiales 2D, que destaca por su estructura atómica simple y propiedades notables (alta temperatura y conductividad eléctrica, elasticidad, dureza, resistencia, etc.). Utilizamos el modelo anisotrópico y consideramos dos regímenes de energía que abarcan la excitación de plasmones en los rangos óptico y sub-terahertz. Los resultados obtenidos con el presente modelo son comparables con los modelos de formalismo dieléctrico en ambos regímenes.
- El presente modelo destaca por su generalidad y analiticidad, y proporciona una evaluación directa de los procesos de pérdida de energía en un material 2D genérico.

Otros materiales 2D que actualmente tenemos bajo estudio incluyen el silicene (cuyo entramado estructural se asemeja a la del grafeno) y fosforeno o fósforo negro (un semiconductor intrínseco de tipo p que posee una bandgap dependiente del espesor finito y directo).