

PROPUESTA DE TESIS DE MAESTRÍA EN CIENCIAS FÍSICAS

DATOS GENERALES DE LA PROPUESTA

Título de la propuesta: **Difracción de átomos rápidos en incidencia rasante (GIFAD): Construcción y análisis de potenciales ab initio (DFT)**

Apellido y Nombres del director: **Bocan, Gisela Anahí**

Teléfono: **5394**

Dirección electrónica del director (ingresar una sola dirección): **gisela.bocan@cab.cnea.gov.ar**

Cargo IB: **No tengo en este momento cargo docente en IB.**

¿Propone codirector? : **NO**

Datos Co-director:

Dirección electrónica del codirector (ingresar una sola dirección):

Título máximo alcanzado del codirector (Doctor, Magister, otros) :

Cargo docente del codirector en el IB (no excluyente):

Justifique brevemente el rol del Codirector:

Lugar de realización: **División de Física de Superficies, Centro Atómico Bariloche**

DETALLE TÉCNICO DE LA PROPUESTA

Orientación:

Interacción Radiación-Materia

Breve descripción: **El auge del diseño de materiales bidimensionales con prometedoras aplicaciones tecnológicas tiene a la física de superficies como clara protagonista, tanto desde la comprensión fundamental de las interacciones que determinan las propiedades de interés como desde la información que pueden aportar las múltiples técnicas de caracterización.**

La teoría de la funcional densidad (DFT) es una herramienta fundamental para el modelado de sistemas en Física de Superficies. Una muestra de esto tenemos en dos artículos recientes [Bocan et al PRL 2020, Bocan et al PRB 2021], donde un refinado análisis de potenciales de interacción, construidos a partir de cálculos DFT, en conjunto con un seguimiento de la dinámica semicuántica del proceso de scattering, permitió, para el sistema He-KCl(001), conectar un llamativo comportamiento de los patrones de GIFAD para incidencia muy rasante, con la presencia de un muy débil (profundidad menor que 10 meV) pozo de fisisorción, interacciones de van der Waals y efectos de potencial suave (a.k.a. efectos dinámicos). Estos resultados motivan la extensión del estudio a otros sistemas de similares características; esto es gases nobles (He, Ne, Ar) que inciden sobre superficies haluro-alcalinas (LiF, NaCl, BrK, etc.) en cortes (001) con el objetivo de estudiar como juegan los mencionados factores en cada caso.

En este marco, el trabajo que se propone se trata de, a partir de cálculos DFT y sofisticadas técnicas de interpolación multidimensional, construir y analizar potenciales de interacción para simulaciones de GIFAD, considerando distintos niveles de aproximación (despreciando o incluyendo interacciones de van der Waals y comparando el desempeño de distintos modelos para este último caso). Las actividades serán de carácter computacional, introductorio a DFT, e implican una activa interacción teoría-experimento. El grupo de investigadores/as involucrados/as en el trabajo incluye a la Dra. G.A. Bocan (Física de Superficies, CAB), el Dr. E.A. Sánchez (Física de Superficies, CAB), la Dra. M. S.

Gravielle (Física de Superficies, IAFE, BsAs) y el grupo del Dr. H. Khemliche (Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay).

Metodología principal: **Computacional**

Metodología secundaria:

Información adicional: **Sobre GIFAD:**

La difracción de átomos rápidos en incidencia rasante (GIFAD) es una novedosa técnica de caracterización superficial, no destructiva y de muy alta sensibilidad a las propiedades estructurales de la primera capa atómica.

Cuando proyectiles atómicos con energías del orden de los keV inciden de manera rasante sobre una superficie cristalina, siguiendo una dirección de alta simetría de la misma, el haz de átomos dispersados produce, en una pantalla sensible, un patrón de difracción. Efectos de naturaleza ondulatoria resultan inesperados en el rango de energías mencionado pero pueden entenderse a partir del desacople de los movimientos rápido ($E_{\parallel} \sim \text{keV}$) en la dirección de “channeling” y lento ($?? \sim$ distancias interatómicas en la superficie) en el plano perpendicular a esa dirección. Mientras el primero responde a una descripción clásica, el segundo requiere de un tratamiento cuántico. En estas condiciones la superficie se comporta de manera análoga a una red de difracción de N rendijas, produciendo un patrón de intensidades donde se combinan (a) la interferencia inter-canal, o de Bragg, debida al arreglo periódico de canales y (b) la interferencia intra-canal, originada por la corrugación del potencial de interacción dentro de un dado canal. Más allá de su interés como técnica de caracterización, el fenómeno de GIFAD es muy interesante a nivel fundamental, con preguntas todavía abiertas como el rol de posibles procesos inelásticos, la decoherencia o las contribuciones de interacciones de van der Waals. Además, su extrema sensibilidad a detalles estructurales la torna un gran desafío a la hora de lograr una descripción teórica de la calidad requerida.

¿Propone que el tema sea considerado para suplemento de beca por tema prioritario?**NO**

Justifique porqué su propuesta debe ser considerada como tema prioritario:

Indique Gerente o Jefe de Departamento que avala su petición: