

Propiedades electrónicas en sistemas metal-porfirina

Ricardo Faccio

Centro NanoMat, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay
E-mail: rfaccio@fq.edu.uy

La electrónica molecular y la espintrónica requieren un conocimiento profundo de los procesos que ocurren en la interface de moléculas y las superficies donde se depositan. En primera instancia presentaremos un estudio teórico/experimental para tetrafenil porfirinas de cobalto depositadas sobre $Cu_3N-Cu(110)$.¹ Este sistema promueve el desacoplamiento de estados electrónicos de manera selectiva, permitiendo así su visualización y los respectivos estados vibrónicos en experimentos de STM a baja temperatura. Pero así como los niveles moleculares se aíslan, los estados con simetría z presentan una fuerte interacción con el sustrato, a diferencia de lo que ocurre cuando la misma molécula se deposita sobre $Cu(110)$. Cálculos de primeros principios confirman la geometría de adsorción observada y el desacoplamiento electrónico antes mencionado.

En segunda instancia mostraremos como sistemas análogos al anterior pueden ser considerados como diodos moleculares. Se han realizado estudios de tetrafenil porfirinas depositadas en $Cu_3Au(100)$, y dependiente del metal sustituyente de la molécula es posible obtener un efecto rectificador, de tipo diodo con respuesta “ n ” o “ p ”. La remoción parcial de hidrógenos, mediante STM permite modificar el estado de cargas de las moléculas de porfirina y así modificar el comportamiento eléctrico. Los cálculos por primeros principios permiten entender el mecanismo de rectificación en función del alineamiento de los niveles electrónicos y su hibridación, la cual depende de la simetría de los estados involucrados.²

- 1.- V. Zoldan, Ch. Gao, R. Faccio, A.A. Pasa, *Journal Physical Chemistry C* **117** (2013) 15984.
2. V. Zoldan, R. Faccio, AA. Pasa, *Nature Scientific Reports* **5** (2015) 1.