



## Plan de Gestión de Datos

### INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO

#### 1. – Datos del Proyecto

##### - Título del Proyecto (en castellano)

Preparación y caracterización de materiales bidimensionales (2D)  
50620190100016LI

##### - Título del Proyecto (en inglés)

Preparation and characterization of 2D materials

##### - Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen

En este proyecto se propone explorar y caracterizar distintas alternativas novedosas para la preparación y modificación de películas atómicamente controladas de materiales bidimensionales (2D). Por un lado se propone utilizar implantación iónica para la preparación de dicalcogenuros metálicos, los cuales constituyen una nueva familia de materiales 2D, que tal como el grafeno son nanoestructuras con propiedades únicas y con potenciales aplicaciones que se extienden desde sensores de alta performance, dispositivos electrónicos, baterías de alto rendimiento, catálisis, etc. Por otro lado se propone estudiar los procesos de adsorción e interacción de moléculas de halogenuros metálicos de transición, entre ellos el fluoruro de aluminio ( $\text{AlF}_3$ ), con superficies de grafito pirolítico altamente orientado (HOPG), películas delgadas de sulfuro de molibdeno ( $\text{MoS}_2$ ) y superficies naturales de pirita ( $\text{FeS}_2$ ), con la finalidad de comprender los mecanismos de intercalación/dopado en la estructura cristalina del sustrato y los procesos por los cuales la disposición de éstas moléculas altera las propiedades esenciales de estos sistemas.

Las nanoestructuras formadas serán caracterizadas química y morfológicamente utilizando técnicas específicas de análisis de superficies, teniendo en cuenta los diferentes parámetros involucrados en el proceso y evaluando la potencial aplicabilidad de las mismas. Por ejemplo en los últimos años, han ganado gran relevancia las baterías de iones de halogenuros metálicos, debido a la notable mejora en el rendimiento, convirtiéndolas en una opción prometedora para la acumulación de energía. En comparación con las baterías de iones de litio monovalentes, los cationes de aluminio (Al) pueden llevar tres cargas positivas, lo que daría lugar a mayores densidades de energía. Como complemento a la parte de preparación y caracterización de películas bidimensionales, se implementarán métodos *ab-initio*



para el cálculo de las propiedades electrónicas de estos sistemas.

El reto científico fundamental es establecer relaciones entre los sistemas nanoestructurados y su función como dispositivo de almacenamiento de energía de alta densidad. Se pretende así contribuir al conocimiento en profundidad de estos sistemas con el fin de generar hipótesis que permitan un diseño racional, particularmente en cuanto a la estabilidad de los mismos en condiciones de operación realistas de presión y temperatura.

**- Descripción del Proyecto (en inglés) Resumen**

This proposal is to explore and characterize different novel alternatives to prepare and modify 2D materials. Ionic implantation will be used as a tool to develop transition metal dichalcogenides (TMD's), e.g. MoS<sub>2</sub>, which constitute a new family of 2D materials with unique properties, such as graphene, and with countless potential technological applications, like high performance sensors, electronic devices, high performance batteries, catalysis, etc. The proposal will also examine the adsorption and interaction of metallic halide molecules, like AlF<sub>3</sub> with different bilayer materials such as HOPG, MoS<sub>2</sub> and natural pyrite surfaces (FeS<sub>2</sub>). The aim is to understand the intercalation/doping mechanisms and the processes by which the molecules alter the main surfaces properties.

The new nanostructures will be chemically and morphologically characterized using standard surface analysis techniques, and the potential applications will be appraised. For example in the last years metallic halides batteries gained extensive consideration as they constitute a promising alternative for energy accumulation. Unlike the monovalent lithium battery aluminum cations can carry three positive charges and this could lead to larger energy densities. The proposal also includes the implementation of ab initio calculations of the electronic properties of the above mentioned systems.

The proposal main scientific challenge is to explore the relationship between the nanostructured systems and their performance in high density energy storage devices. The gained knowledge will contribute to the rational design of the devices, e.g. taking into account the stability under normal operation conditions.

**- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en castellano)**

Materiales 2D; compuestos intercalados; interacción molécula-superficie

**- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en inglés)**

2D materials; intercalated compounds; surface-molecule



interaction
<b>2 – Datos del Director/ar del Proyecto</b>
<b>- Nombre y Apellido</b>
Ricardo Alberto Vidal
<b>- Unidad Académica</b>
Instituto de Física del Litoral; Facultad de Ingeniería Química
<b>- Teléfono oficial de contacto</b>
+54 342 4559175
<b>-Teléfono móvil de contacto</b>
+54 9 342 4783044
<b>-E-mail del Director/a del Proyecto</b>
Ricardo.vidal@ifis.santafe-conicet.gov.ar

<b>DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO</b>
<b>-Describa la toma de muestras / datos a realizar</b>
<p>1) Datos experimentales provenientes de equipos de medición</p> <p>a) Espectros de energía de electrones provenientes de:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>- espectroscopia Auger (microsonda SAM PHI 590 A ubicado en el LASUI, IFIS Litoral)</li> <li>- espectroscopia de fotoelectrones (excitados por rayos X, XPS o ultravioleta, UPS) (UNI-SPECS ubicado en el CENACA, FIQ, UNL)</li> </ul> <p>b) Espectros de energía de iones provenientes del espectrómetro de LEIS (ubicado en el LASUI, IFIS Litoral)</p> <p>c) Imágenes de microscopia de efecto túnel (STM), fuerzas atómica (AFM) (STM Nanotec ubicado en el LASUI, IFIS Litoral)</p> <p>2) Datos provenientes del cálculo de estructuras electrónicas y propiedades de materiales realizadas por métodos computacionales (Cluster Pirayú instalado en el CIMEC del CCT-Santa Fe, UNL)</p>

<b>– Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad/ser de acceso público? (marque X)</b>	
X	NO
	<b>SI. Elija una de las opciones:</b>
	<p>a) Se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes</p> <p>b) No se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible</p> <p>c) Existe un contrato con un tercero que impide la divulgación</p> <p>d) Otro. Justifique.</p>



<b>- Período de Confidencialidad:</b> Es el período durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El período máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad/serán de acceso público. Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios. Marque su opción con "X".	
<input type="checkbox"/>	1 (UN) año
<input checked="" type="checkbox"/>	2 (DOS) años
<input type="checkbox"/>	3 (TRES) años
<input type="checkbox"/>	4 (CUATRO) año
<input type="checkbox"/>	5 (CINCO) años
<input type="checkbox"/>	Otro.
Motivos:	

Ricardo A. Vidal