

Materiales bidimensionales, cumpliendo el sueño de Feynman...

Dr. Marcelo M Mariscal

INFIQC, CONICET, Departamento de Química Teórica y Computacional, Facultad de Cs. Químicas, Universidad Nacional de Córdoba.

Lunes 5 de noviembre, 13:00 hs, aula de seminarios RFP, INQUIMAE, tercer piso

Resumen

Durante mucho tiempo, materiales con estructura cristalina compuesta por multicapas han sido ampliamente utilizados en una gran diversidad de aplicaciones tecnológicas. Por ejemplo, desde hace mucho tiempo el grafito y el sulfuro de molibdeno (MoS₂) se vienen utilizando como lubricantes secos debido a su naturaleza en capas. En estos materiales, los átomos están fuertemente unidos dentro del mismo plano pero se encuentran débilmente unidos por fuerzas de van der Waals entre capas. Esta débil interacción entre capas, nos permite poder separarlas con relativa facilidad hasta el límite de obtener una sola lámina o “monocapa” de estos materiales.

El aislamiento de una sola monocapa de grafito, conocida como “grafeno” o de MoS₂ han abierto en los últimos 10 años un campo de investigación muy novedoso y vertiginoso debido a la gran variedad de propiedades de estos nuevos materiales llamados hoy: “materiales bidimensionales (2D)”. Se ha encontrado que las propiedades electrónicas y ópticas son radicalmente diferentes a las de sus homólogos tridimensionales.

Muchos de éstos estudios se llevan a cabo a través de una sinergia entre simulaciones por computadora y experimentos de alta precisión ya que uno de los retos más importantes en el desarrollo y consolidación de tecnologías utilizando estos materiales 2D, es la de producirlos con altísima calidad.

En este seminario tomaremos dos materiales 2D como ejemplo, en el cual mostraremos cómo utilizando la sinergia teórico-experimental encontramos en un primer caso el mecanismo de crecimiento de grafeno de alta calidad. En particular hemos descubierto cual es el rol de átomos libres en el proceso catalítico de crecimiento de grafeno sobre níquel. En un segundo ejemplo, analizaremos el MoS₂, uno de los catalizadores de mayor relevancia para la industria petrolera, el cual es utilizado para eliminar azufre del combustible (hidrodesulfuración). En particular veremos los efectos producidos por modificaciones estructurales y geométricas en la estructura electrónica del material 2D.

