

Se utilizó la teoría del funcional de la densidad (DFT) implementada por el código VASP para examinar las propiedades fisicoquímicas [3]. Se encontró que los defectos modifican algunas de estas propiedades. Estos disminuyen el gap energético (Eg), siendo más notable en los defectos puntuales. Además, las vacancias de oxígeno aumentan el momento magnético ( $\mu$ ). Por otra parte, se registró un incremento importante en la función trabajo (WF) en CeO<sub>2</sub> (111) con vacancia positiva de oxígeno (VO<sup>2+</sup>) sobre todo para la especie NO; mientras que se observaron comportamientos contrarios para la vacancia neutra (VO<sup>0</sup>) de oxígeno y los defectos tipo “escalón”.

Los defectos favorecen la adsorción de las especies NO, N<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>. Se estableció una jerarquía en las superficies según los valores de energía de adsorción y la especie adsorbida, siendo para el NO: VO<sup>2+</sup>, VO<sup>0</sup>, CeO<sub>2</sub> (331), CeO<sub>2</sub> (111); y para el N<sub>2</sub> y O<sub>2</sub> se obtuvieron resultados similares. Además, se vio que la adsorción de estas especies produce una reducción en Eg y un aumento considerable en los momentos magnéticos. Sin embargo, se determinó que los cambios en WF dependen tanto de la especie adsorbida como de la superficie.

En conclusión, los resultados de este estudio resaltan la capacidad de las superficies de CeO<sub>2</sub> (ceria) para el sensado de las especies NO, N<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>. Las propiedades fisicoquímicas analizadas pueden ser moduladas según la especie adsorbida y el tipo de defecto existente en la superficie..

[1] J. Phys. Chem. C 2012, 116, 2443–2452

[2] Defects at Oxide Surfaces ,Chapter 2, ISBN: 978-3-319-14367-5.

[3] <https://www.vasp.at>

Poster ID: MC-31

## Estudio de la exfoliación de TiSe<sub>2</sub> bidimensional dopado con Cu

Molina G<sup>1</sup>, Rosa I<sup>3</sup>, Otero M<sup>1</sup>, Santo M<sup>1</sup>, Morales G<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidad Nacional de Río Cuarto (UNRC), Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Físico-Químicas y Naturales

<sup>2</sup> Universidad Nacional de Río Cuarto (UNRC), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Físico-Químicas y Naturales

<sup>3</sup> Institute of Advance Materials (INAM), Universitat Jaume I, Castello, España

Los materiales con espesores que van desde unos pocos nanómetros hasta una sola capa atómica presentan oportunidades sin precedentes para investigar propiedades de la materia restringida al plano bidimensional. Uno de los materiales bidimensionales más estudiados son los llamados dicalcogenuros de metales de transición (TMD) los cuales tienen un grosor de tan solo 3 átomos. Entre estos materiales se destaca el diseleniuro de titanio (TiSe<sub>2</sub>) y sus derivados, ya que exhiben una variedad de propiedades físicas interesantes que no pueden comprenderse

en base al conocimiento teórico actual lo cual provoca dificultad o un retraso en su aplicación. Jurelo et al. [1] estudiaron mediante cálculos de DFT el efecto de la intercalación de cobre (Cu) en las propiedades estructurales, vibratorias y electrónicas del  $\text{TiSe}_2$ , observando que el mismo tiene propiedades equivalentes a la de un superconductor de alta temperatura. En general, la síntesis del  $\text{TiSe}_2$  bidimensional se realiza mediante deposición química en fase de vapor (CVD), exfoliación mecánica o exfoliación en fase líquida. Para sortear la complejidad y costo de estos procesos Rosa et al. [2] desarrollaron un método novedoso que consiste en sintetizar y aislar láminas 2D únicas a partir de cristales 3D de  $\text{Cu}_x\text{TiSe}_2$ , mediante un proceso de exfoliación solvotérmico utilizando hidracina ( $\text{N}_2\text{H}_4$ ) como solvente. Se observó que la  $\text{N}_2\text{H}_4$  facilita la exfoliación conservando la estructura del  $\text{Cu}_x\text{TiSe}_2$ .

En busca de comprender cómo la  $\text{N}_2\text{H}_4$  influye en la exfoliación del  $\text{TiSe}_2$ , se realizaron simulaciones DFT sobre sistemas de  $\text{TiSe}_2$ ,  $\text{Cu}_x\text{TiSe}_2$  y su interacción con  $\text{N}_2\text{H}_4$ . Los cálculos fueron realizados con el paquete de programas Quantum Espresso utilizando los funcionales de Perdew–Burke–Ernzerho (PBE) dentro de la aproximación de gradiente conjugado (GGA) y con Pseudopotenciales PAW. Además de analizar las propiedades eléctricas y estructurales a nivel atómico, se realizaron cálculos de NEB (Nudged Elastic Band) para estudiar la energía de activación para la difusión del Cu adsorbido en  $\text{TiSe}_2$ . Nuestros resultados, consistentes con los reportados previamente [1], revelan una interacción favorable entre los átomos de N de  $\text{N}_2\text{H}_4$  y los átomos de Se en  $\text{TiSe}_2$ . Además observamos que la intercalación de  $\text{N}_2\text{H}_4$  aumenta la separación entre las láminas de  $\text{TiSe}_2$ , lo cual disminuye la interacción de Van der Waals entre ellas y facilita el proceso de exfoliación en el material 3D. Estos efectos se ven potenciados por la presencia de cobre en la estructura de  $\text{Cu}_x\text{TiSe}_2$ , dado que la  $\text{N}_2\text{H}_4$  también interactúa favorablemente con los átomos de Cu. Los cálculos de NEB proporcionan información crucial sobre la dinámica y movilidad de los átomos de Cu en el material, lo que contribuye a una comprensión más profunda de los mecanismos de transporte y difusión del dopado.

## REFERENCIAS

- 1 - Jurelo A., Pontes Ribeiro R., de Lazaro S., Monteiro J. Phys.Chem.Chem.Phys., 20, (2018) 27011.
- 2 - Alvaro J Rosa, Caracterización de materiales bidimensionales mediante microscopías por barrido de punta. Trabajo especial de licenciatura en física, UNRC (2021).

Poster ID: MC-32

**Cálculos DFT para el estudio del estado fundamental estructural y magnético de las cromitas  $\text{XCr}_2\text{O}_4$**