

Estudio de la exfoliación de TiSe<sub>2</sub> dopado con Cu mediante cálculos de DFTMolina, Gonzalo <sup>(1)\*</sup>; Rosa, Álvaro <sup>(2)</sup>; Otero, Manuel <sup>(1)</sup>; Morales, Gustavo <sup>(3)</sup><sup>(1)</sup> Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas Físico-Químicas y Naturales, Universidad Nacional de Río Cuarto.<sup>(2)</sup> Institute of Advanced Materials (INAM), Universitat Jaume I, Castelló, España.<sup>(3)</sup> Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas Físico-Químicas y Naturales, Universidad Nacional de Río Cuarto.\*correo electrónico: [gmolina@exa.unrc.edu.ar](mailto:gmolina@exa.unrc.edu.ar)

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 TiSe<sub>2</sub>, observando que el mismo tiene propiedades equivalentes a la de un superconductor de alta temperatura. En general, la síntesis del TiSe<sub>2</sub> 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 Cu<sub>x</sub>TiSe<sub>2</sub>, mediante un proceso de exfoliación solvotérmico utilizando hidracina (N<sub>2</sub>H<sub>4</sub>) como solvente. Se observó que la N<sub>2</sub>H<sub>4</sub> facilita la exfoliación conservando la estructura del Cu<sub>x</sub>TiSe<sub>2</sub>.

En busca de comprender cómo la N<sub>2</sub>H<sub>4</sub> influye en la exfoliación del TiSe<sub>2</sub>, se realizaron simulaciones DFT sobre sistemas de TiSe<sub>2</sub>, Cu<sub>x</sub>TiSe<sub>2</sub> y su interacción con N<sub>2</sub>H<sub>4</sub>. 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. Se analizaron las propiedades eléctricas y estructurales a nivel atómico para correlacionar las mismas con las presentadas a nivel macroscópico. Los resultados estructurales y de DOS están en acuerdo con los reportados previamente [1]. En particular, se observó que los átomos de N de N<sub>2</sub>H<sub>4</sub> interactúan favorablemente con los átomos de Se del TiSe<sub>2</sub>. A su vez, los resultados demuestran que la intercalación de N<sub>2</sub>H<sub>4</sub> aumenta la separación entre las láminas de TiSe<sub>2</sub> disminuyendo la interacción de van der Waals entre láminas en el material 3D facilitando así el proceso de exfoliación. Ambos efectos se ven potenciados por la presencia de cobre en la estructura de Cu<sub>x</sub>TiSe<sub>2</sub>, dado que la N<sub>2</sub>H<sub>4</sub> interacciona favorablemente con los átomos de Cu.

## 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).

