

ACHEGÁNDONOS AO LÍMITE BIDIMENSIONAL NA FÍSICA DE MATERIAIS: UN ESTUDO COMPUTACIONAL

PHILLIPS STALLER, JAN¹; PARDO CASTRO, VÍCTOR¹;
OTERO FUMEGA, ADOLFO²

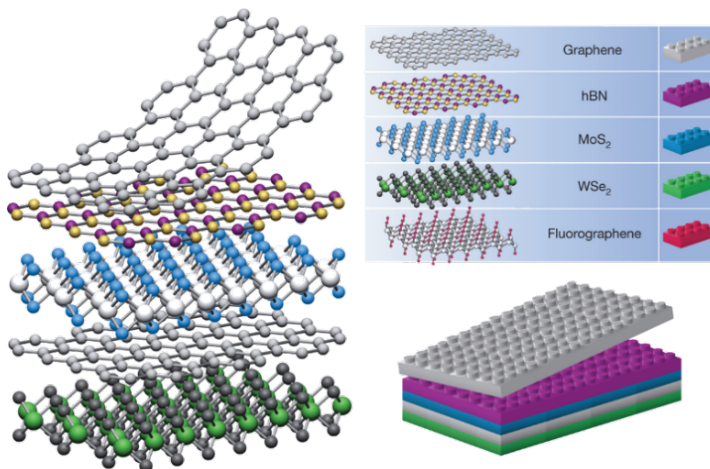
¹Universidade de Santiago de Compostela

²Aalto University, Finland

1. Introducción

A Física de Materiais ocupa un lugar central no mundo tecnolóxico actual, onde a miniaturización dos dispositivos, mantendo tódalas súas funcionalidades, require a nanoestruturación de distintos materiais e a comprensión das súas propiedades cando se aproximan ao límite bidimensional. Esta necesidade abre unha área de investigación moi activa tanto na Física como na Química contemporánea.

O interese por comprender estes materiais bidimensionais radica na súa potencialidade para ser empregados como unidades mínimas, que non só permiten avanzar na nanoestruturación, senón que tamén funcionan como bloques fundamentais para crear novos materiais a partir da combinación destas unidades. Unha boa analogía sería comparar cada un destes materiais bidimensionais cunha peza de lego (Geim, 2013). Ao combinar estas pezas, do mesmo xeito que faríamos con lego, é posible estudar se a estrutura resultante herda propiedades dos materiais orixinais ou, pola contra, dá lugar a novas propiedades completamente inéditas.



nature

AK Geim & IV Grigorieva *Nature* **499**,
419-425 (2013)
doi:10.1038/nature12385

A exploración das propiedades electrónicas, magnéticas e estruturais destes materiais no límite bidimensional é posible grazas ao uso de métodos teóricos. Estes métodos permiten predicir novos materiais ou axudar na caracterización experimental de compostos xa coñecidos. Entre as técnicas fundamentais neste campo destaca a teoría do funcional de densidade (DFT, polas súas siglas en inglés) (Hohenberg, 1964), amplamente utilizada debido á súa fácil implementación

computacional. Deste xeito, a física e a química de materiais combínanse con ferramentas computacionais para describir materiais bidimensionais con propiedades exóticas como o magnetismo, a ferroelectricidade, o illamento eléctrico ou a superconductividade.

Dentro deste ámbito, a familia dos dicalcóxenos de metais de transición (TMDs, polas súas siglas en inglés) resulta especialmente interesante para a investigación en nanoestruturación. Estes materiais preséntanse como excelentes candidatos para estudos en 2D e, seguindo coa analogía das pezas de lego, funcionan como os nosos bloques de construción fundamentais. Neste estudo, centramos a nosa atención nesta familia de materiais, analizando as súas propiedades no límite bidimensional a través de métodos computacionais, co obxectivo de predicir e apoiar a caracterización de novas estruturas.

2. Referencias

- Geim, A. K., & Grigorieva, I. V. (2013). Van der Waals heterostructures. *Nature*, 499(7459), 419-425.
- Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical review*, 136(3B), B864.