



## Proyectos de la Secretaría de Investigación, Internacionales y Posgrado

<b>Convocatoria: PROYECTO SIIP TIPO 1 BIENAL 2019</b>
<b>Título: Estudio de superficies para la formación de sistemas bidimensionales</b>
<b>Director: SANCHEZ, ESTEBAN ALEJANDRO</b>
<b>Codirector: GRIZZI, OSCAR</b>
<b>Área: FISICA-MATERIA CONDENSADA</b>

### Resumen de Proyecto:

El uso de superficies como mesa de trabajo donde se depositan diferentes especies en forma controlada permite combinar materiales que tienen alguna propiedad volumétrica útil (mecánica, eléctrica, óptica) con la propiedad de superficie adecuada (por ej. resistencia a la corrosión, reactividad, baja fricción, biocompatibilidad, hidrofobicidad). Esta metodología permite también generar sistemas bidimensionales con propiedades específicas. Este proyecto abarca estudios teóricos y experimentales de aspectos fundamentales de la dinámica de adsorción de átomos y moléculas orgánicas en diferentes sustratos, de su autoensamblado para formar capas ultra-delgadas organizadas, de su estabilidad térmica; y de la posibilidad de generar sistemas bidimensionales con propiedades similares a las del grafeno. Desde el punto de vista experimental, las espectroscopías de electrones (AES, UPS, XPS, EELS) tradicionales se combinan con otras espectroscopías de iones (TOF-DRS, -ISS), microscopías de barrido de punta (STM - AFM) y técnicas de difracción de electrones (LEED) y átomos (GIFAD) para estudiar la cinética de adsorción, el orden cristalográfico y el proceso de autoensamblado de átomos de Ge y moléculas orgánicas de benzenodimetanotiol en superficies metálicas (Ag, Al); como así también, los procesos fundamentales de difracción de átomos rápidos rasantes en superficies monocristalinas. En lo que respecta a los estudios teóricos se realizan simulaciones de dichos sistemas aplicando la teoría de funcional densidad (DFT) y del tipo Montecarlo que permiten obtener información sobre la estructura atómica y electrónica de los materiales y de sus superficies puras y con adsorbatos, simular imágenes de STM y curvas I-V de LEED; y estudiar la dinámica de la interacción de átomos e iones con superficies.

**Palabras Claves : 1- MOLECULAS 2- SUPERFICIES 3- BIDIMENSIONALES**



**Título (Inglés): Study of surfaces for the formation of two-dimensional systems**

**Resumen de Proyecto (inglés):**

The use of surfaces as a work table where different species are deposited in a controlled manner allows to combine materials that have some useful volumetric property (mechanical, electrical, optical) with the appropriate surface property (eg. corrosion resistance, reactivity, low friction, biocompatibility, hydrophobicity). This methodology also allows generating two-dimensional systems with specific properties. This project covers theoretical and experimental studies of fundamental aspects of the dynamic of adsorption of atoms and organic molecules on different substrates, their self-assembling to form ultrathin organized layers, their thermal stability; and the possibility of generating two-dimensional systems with properties similar to those of graphene. From the experimental point of view, electron spectroscopies (AES, UPS, XPS, EELS) combined with other traditional ion spectroscopies (TOF-DRS, -ISS), scanning probe microscopies (STM - AFM) and diffraction of electrons (LEED) and atoms (GIFAD) are used to study the adsorption kinetics, the thermal stability, the crystallographic order and the process of self-assembly of Ge atoms and benzenedimethanethiol organic molecules on metal surfaces (Ag, Al); as well as, the fundamental processes of grazing incidence fast atom diffraction on monocrystalline surfaces. In regards to theoretical studies, the simulations of such systems are performed using the density functional theory (DFT) and Monte Carlo type calculations which allows to obtain information on the atomic and electronic structure of materials and their pure surfaces and with adsorbates, to simulate STM images and LEED I-V curves ; and to study the dynamics of the interaction of atoms and ions with surfaces.

**Palabras Claves : 1- MOLECULES 2- SURFACES 3- BIDIMENTIONAL**



## EQUIPO DE TRABAJO

SANCHEZ, ESTEBAN ALEJANDRO

esanchez@cab.cnea.gov.ar	Director
UNIDAD EJECUTORA INSTITUTO DE NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGIA - NODO BARILOCHE	

GRIZZI, OSCAR

grizzi@cab.cnea.gov.ar	Codirector
COMISION NACIONAL DE ENERGIA ATOMICA	

CANTERO, ESTEBAN DANIEL

estebancanero@gmail.com	Investigador
GERENCIA DE FISICA (CAB)	

BOCAN, GISELA ANAHI

gisela.bocan@cab.cnea.gov.ar	Investigador
UNIDAD EJECUTORA INSTITUTO DE NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGIA - NODO BARILOCHE	

Este objeto está alojado en la Biblioteca Digital en la URL: [sijp2019-2021.bdigital.uncu.edu.ar](http://sijp2019-2021.bdigital.uncu.edu.ar) .

Se ha aportado el día 18/06/2020 a partir de la exportación de la plataforma SIGEVA de los proyectos bianuales de la SIIP 2019-2021