



## Plan de Gestión de Datos

### INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO

#### 1. – Datos del Proyecto

##### - Título del Proyecto (en castellano)

*Materiales bidimensionales: intercambio electrónico en colisiones con iones de baja energía.*

##### - Título del Proyecto (en inglés)

*2D-materials: electronic exchange in low energy collisions.*

##### - Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen

*Los materiales 2D son materiales cristalinos formados por una sola capa de átomos o moléculas. El grafeno es un ejemplo paradigmático de material 2D. La investigación en el área está incentivada por las inusuales propiedades que presentan estos materiales que podrían aplicarse en campos tan diversos como semiconductores, energía fotovoltaica, catálisis, purificación de agua, etc. Una de las características destacables de estos materiales es la débil interacción entre capas (fuerzas de Van der Waals) comparada con la fuerte interacción covalente entre los átomos de una capa. Esta característica hace que estos materiales sean relativamente fáciles de preparar por exfoliación mecánica o química ("top-down"). Otra propiedad particular que presentan estos materiales es que su estructura electrónica de bandas cambia sustancialmente cuando es comparada con la correspondiente estructura de bandas de los materiales 3D. Por otro lado, es conocido que la estructura electrónica de un dado material juega un papel clave en el fenómeno de transferencia de carga en procesos dinámicos (colisiones) con distintos átomos. En este proyecto nos proponemos explorar, y caracterizar como las distintas características de la estructura electrónica de los materiales 2D afecta los distintos procesos de intercambio de carga en colisiones de iones con materiales 2D, en particular sulfuro de molibdeno y grafeno. Se pretende abordar el problema tanto desde el punto de vista teórico como experimental. Desde el punto de vista teórico, se implementarán métodos DFT para el cálculo de las propiedades electrónicas de estos sistemas y se utilizará este resultado en modelos propios basados en primeros principios para describir la interacción estática y dinámica de átomos y moléculas con estas superficies, dirigiendo el esfuerzo a la comprensión de los mecanismos básicos que regulan tanto la interacción estática superficie-adsorbato como la interacción dinámica superficie-proyectil. Desde el punto de vista experimental se medirán las fracciones de iones (H, Li, He, N) dispersadas por materiales 2D con adsorbato alcalinos o sin ellos, utilizando la técnica de dispersión de iones de baja energía (LEIS) en un rango de energía de 1 a 10keV y para varias configuraciones geométricas de ángulos de entrada/salida. Los resultados teóricos y experimentales se contrastarán para, de ese modo, razonar sobre la relevancia de cada uno de los ingredientes físicos en el problema a analizar.*

##### - Descripción del Proyecto (en inglés) Resumen



Two-dimensional materials (or 2D materials) are crystalline materials formed by a single layer of atoms or molecules. Graphene is a paradigmatic example of a 2D material. Research in the area is encouraged by the unusual properties of these materials that could be applied in fields as diverse as semiconductors, photovoltaic energy, catalysis, water purification, etc. One of the outstanding characteristics of these materials is the weak interaction between layers (Van der Waals forces) compared to the strong covalent interaction between the atoms of a layer. This feature makes these materials relatively easy to prepare by mechanical or chemical exfoliation. Another particular property of these materials is that their electronic band structure substantially changes when compared to the corresponding band structure of 3D materials. On the other hand, it is known that the electronic structure of a given material plays a key role in the phenomenon of charge transfer in dynamic processes (collisions) with different atoms. In this project we propose to explore, and characterize how the different characteristics of the electronic structure of 2D materials affect the different processes of charge exchange in ion collisions with 2D materials, in particular molybdenum sulfide and graphene. We plan to make a theoretical and experimental approach to the problem. From the theoretical point of view, DFT methods will be implemented for the calculation of the electronic properties of these systems and this result will be used in our own models based on first principles to describe the static and dynamic interaction of atoms and molecules with these surfaces, focusing the efforts in understanding the basic mechanisms that regulate both static surface-adsorbate interaction and dynamic surface-projectile interaction. From an experimental point of view, the ion fractions (H, Li, He, N) dispersed by 2D materials with or without alkaline adsorbates will be measured using the low energy ion dispersion technique (LEIS) in a range of energy 1 to 10keV and for various geometric configurations. The theoretical and experimental results will be contrasted in order to reason on the relevance of each of the physical ingredients present in the problem.

**- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en castellano)**

Materiales bidimensionales      Transferencia de carga      Colisiones de baja energía

**- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en inglés)**

2D-Materials      Charge transfer      Low energy collisions.

**2 – Datos del Director/ar del Proyecto**

**- Nombre y Apellido**

Fernando José Bonetto

**- Unidad Académica**

Instituto de Física del Litoral (IFIS), Facultad de Ingeniería Química (FIQ)

**- Teléfono oficial de contacto**

+54-342-4559174 Int: 2155

**-Teléfono móvil de contacto**

+54-342-5264404

**-E-mail del Director/a del Proyecto**

bonetto@santafe-conicet.gov.ar

**DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO**



**-Describe la toma de muestras / datos a realizar**

*El proyecto tiene un componente teórico y otro experimental. Los resultados teóricos son obtenidos a partir de cálculos computacionales que se ejecutan en distintos ordenadores presentes en el grupo como así también en clusters de computadoras a las que el grupo tiene acceso (PIRAYU, FIQ, cluster del IFIS Litoral).*

*Experimentalmente los datos se tomarán utilizando distintas técnicas de superficie entre las cuales la mas utilizada será la técnica de LEIS (Low Energy ion Scattering o Dispersión de Iones de Baja Energía)., disponible en el Laboratorio de Superficies e Interfaces del IFIS Esta técnica esencialmente consiste en hacer colisionar iones de baja energía en las superficies a investigar. A partir de la energía y el estado de carga de los iones dispersados se puede determinar el estado final de carga del proyectil y el tipo de átomo de la superficie que disperso al ion. Tanto la preparación de muestras como los experimentos de dispersión se llevan a cabo dentro de una cámara de ultra alto vacío.*

**- Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad/ser de acceso público? (marque X)**

	<b>NO X</b>
	<b>SI. Elija una de las opciones:</b>
	a) Se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes
	b) No se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible
	c) Existe un contrato con un tercero que impide la divulgación
	d) Otro. Justifique.
<p><b>- Período de Confidencialidad: Es el período durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El período máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad/serán de acceso público.</b></p> <p><b>Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios. Marque su opción con "X".</b></p>	
	<b>1 (UN) año</b>
	<b>2 (DOS) años</b>
	<b>3 (TRES) años</b>
	<b>4 (CUATRO) año</b>
	<b>5 (CINCO) años</b>
	<b>Otro.</b>
	<b>Motivos:</b>



## **INSTRUCTIVO PARA COMPLETAR EL PLAN DE GESTIÓN (PGD)**

El PGD no es un documento definitivo, sino que se desarrollará a lo largo del ciclo de vida del proyecto.

### **INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO**

#### **1 – Datos del Proyecto**

**Título del Proyecto (en castellano):** Deberá ingresar el título completo del proyecto (en castellano), indicando además el código asignado por la SCAyT.

**Título del Proyecto (en inglés):** Deberá ingresar el título completo del proyecto en inglés.

**Descripción del Proyecto (en castellano):** Deberá ingresar la descripción del Proyecto en castellano.

**Descripción del Proyecto (en inglés):** Deberá ingresar la descripción del Proyecto en inglés.

**Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en castellano):** Deberá ingresar tres palabras claves descriptivas del Proyecto, en castellano.

**Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en inglés):** Deberá ingresar tres palabras claves descriptivas del Proyecto, en inglés.

#### **2- Datos del Director/a del Proyecto**

**Nombre y Apellido del Titular del Proyecto:** Nombre completo y apellido del Titular del Proyecto.

**Unidad Académica:** Nombre de la Unidad Académica a la que pertenece el/la directora/a del Proyecto.

**Teléfono oficial de contacto:** Número de teléfono de la oficina/laboratorio/Institución del Director/a del Proyecto, donde pueda ser contactado, incluyendo número de área/país (ej: Para Santa Fe: + 54 9 342 4999-9999).

**Teléfono móvil de contacto:** Número de teléfono móvil del director/ar del Proyecto, donde pueda ser contactado, incluyendo número de área/país.

**E-mail del Director/a del Proyecto:** Correo electrónico de contacto del Director/a del Proyecto.

### **DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO**

**Describe la toma de muestras/datos a realizar:** Información descriptiva sobre la toma de muestras que resultarán en datos/conjuntos de datos. La descripción deberá incluir



información de contexto (lugar de toma de los datos; instrumentos, etc.)

**Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad/ser de acceso público? Deberá marcar con una “X” la opción correcta.** En caso de responder afirmativamente, deberá justificar debidamente, comprendiendo que sólo en casos de extrema excepcionalidad esta restricción de acceso a los datos resulta practicable/aceptable.

**Período de Confidencialidad: Es el periodo durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El periodo máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad/serán de acceso público.**

**Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios.**

Deberá indicar los años que considera necesario prorrogar el período de confidencialidad y explicar los motivos.