

PROYECTO EUROPEO TRANS2DTMD

“Los avances con el grafeno han disparado el interés por otros materiales 2D”

El grafeno protagoniza la mayor iniciativa europea de investigación hasta la fecha, la Graphene Flagship, pero dentro de este megaproyecto se promocionan también los estudios de otros materiales bidimensionales, como los llamados TMD. Sus interesantes propiedades se pueden aplicar en electrónica, espintrónica y un tercer campo: la ‘valletrónica’, según explica en esta entrevista el físico Lucian Covaci de la Universidad de Amberes.

Enrique Sacristán

31/10/2017 10:30 CEST



El físico Lucian Covaci trabaja en el Grupo de Teoría de la Materia Condensada en la Universidad de Amberes. / UAntwerp

En el último congreso [Graphene Week](#), celebrado recientemente en Atenas, se reunieron más de 700 expertos internacionales en grafeno, un material laminar de átomos de carbono con un potencial enorme. Al congreso también acudió el investigador Lucian Covaci (Arad-Rumania, 1976) como representante del grupo de Física de la Materia Condensada de la Universidad de Amberes, en Bélgica.

Dentro de la gran iniciativa europea [Graphene Flagship](#), este grupo coordina un proyecto que no se centra en el grafeno, sino en otros materiales 2D de creciente interés con un nombre que cuesta pronunciar: dicalcogenuros de metales de transición ([TMD](#), por sus siglas en inglés). Covaci explica a Sinc las características y aplicaciones de estos novedosos materiales.

¿Qué son exactamente los TMD?

Son una familia de materiales semiconductores bidimensionales con la fórmula MX_2 , donde la M representa un metal de transición –elementos de la parte central de la tabla periódica, como el molibdeno o el wolframio– y la X es un calcógeno –los de la columna del oxígeno, como el azufre, el selenio o el telurio. Insertando una capa de átomos tipo M entre dos del tipo X obtenemos la finísima pero estable monocapa TMD. En su versión 3D se conocen desde hace medio siglo, pero los avances con el grafeno en la última década también han disparado el interés por estos materiales bidimensionales y sus propiedades.

"Los TMD ofrecen ventajas frente al grafeno, especialmente en aplicaciones electrónicas como los transistores de efecto campo"

¿Qué ventajas tienen respecto al grafeno?

Los TMD y otros materiales bidimensionales como el siliceno, el fosforeno o el germaneno ofrecen beneficios en aplicaciones electrónicas como los [transistores de efecto campo](#). Dentro de lo que se llama [brecha energética](#) o de bandas (*bandgap*), el grafeno es *zero-gap*, es decir, un semiconductor, y solo se puede usar como contacto o 'compuerta'. Pero para desarrollar un transistor se necesita un espacio sintonizable, algo que pueden aportar muchos TMD, ya que son semiconductores con *bandgaps* considerables.

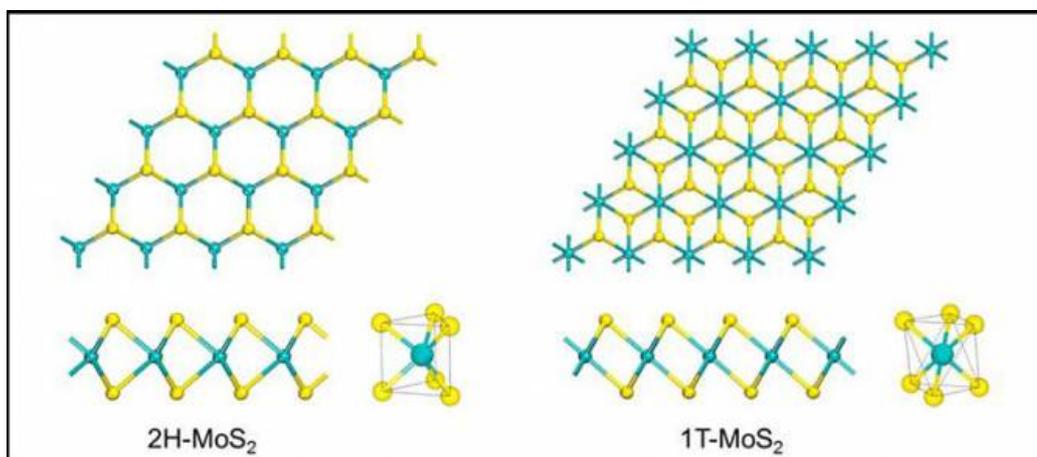
¿Alguna otra diferencia?

Otro inconveniente del grafeno es el hecho de que las interacciones espín-órbita son muy débiles, y por tanto, se pierde gran cantidad de física

interesante relacionada con la espintrónica. Este no es el caso en la mayoría de los otros materiales 2D, donde el acoplamiento espín-órbita es grande, lo que permite manipular los espines de los electrones con medios eléctricos. Actualmente se está dando un fuerte impulso a la combinación de los TMD con el grafeno para inducir propiedades deseadas.

¿Y en qué consiste el proyecto en el que se han embarcado?

Se llama Trans2DTMD, un proyecto de tres años que comenzó en 2016. Se trata de una investigación teórica sobre el transporte electrónico en los TMD bidimensionales y 'funcionalizados', un término que hace referencia a que no son puros, sino que tienen algún elemento que cambia sus propiedades. Lo más interesante es que puedes 'dopar' estos materiales añadiendo impurezas (como introducir o variar algunos tipos de átomos) o cambiando su topología para inducir, por ejemplo, una fase metálica o dotarlos de magnetismo.



Un ejemplo de TMD: el disulfuro de molibdeno (MoS₂), que puede ser semiconductor (a la izquierda) o metálico (derecha) según la disposición de sus átomos. / Trans2DTMD

¿Cuáles son los principales objetivos de Trans2DTMD?

Por un lado, desarrollar métodos numéricos novedosos para realizar cálculos de transporte electrónico en materiales 2D. Utilizamos tanto códigos numéricos comerciales como herramientas propias creadas por nosotros para investigar sus características estructurales, ópticas y electrónicas. Por otra parte, estudiamos los efectos que producen los defectos y deformaciones sobre las propiedades de los TMD metálicos, así

como predecir nuevos materiales 2D interesantes.

¿Qué propiedades y aplicaciones tienen estos TMD?

Sus propiedades topológicas son de gran importancia en aplicaciones electrónicas, por ejemplo en el campo de los transistores de efecto campo, los dispositivos fotovoltaicos y el ámbito de los biosensores. Los TMD también son relevantes en espintrónica, una tecnología emergente que explota tanto la carga del electrón como su espín, así como en otra todavía más novedosa: la valletrónica, donde valles energéticos en la banda de conducción pueden atrapar y canalizar el flujo de electrones.

"Lo más interesante es que puedes 'dopar' estos materiales añadiendo impurezas o cambiando su topología para dotarlos de nuevas propiedades"

¿Qué avances han realizado hasta el momento?

Para estudiar estos materiales estamos desarrollando un *software* basado en el código Pybinding ideado en la Universidad de Amberes, que además será de código abierto disponible para toda la comunidad científica. Hasta ahora hemos implementado códigos numéricos que pueden aprovechar los recursos computacionales más modernos, como los *clusters* de ordenadores y tarjetas gráficas. Esto permitirá analizar los efectos del desorden en la conductividad eléctrica y óptica de los materiales.

¿Para qué servirá este software?

Permitirá la simulación de sistemas muy grandes (con miles de millones de átomos) para previsualizar efectos que luego se puedan observar en muestras experimentales. Esto es importante ya que muchas de las herramientas teóricas fallan a la hora de estudiar de forma precisa los [adátomos](#) (átomos individuales adheridos en un cristal) y los defectos que dispersan la electricidad. Con este *software* se podrán realizar simulaciones precisas en espintrónica y valletrónica.

"Desarrollamos métodos numéricos novedosos para realizar cálculos de transporte electrónico en materiales 2D"

¿Cuántos grupos colaboran en el proyecto?

Trans2DTMD está coordinado por el Grupo de Teoría de la Materia Condensada, dirigido por el profesor François Peeters en la Universidad de Amberes, con amplia experiencia en herramientas computacionales y teóricas para el estudio de TMD. El segundo miembro del consorcio es el equipo de Química Teórica dirigido por el profesor Thomas Heine en la Universidad de Leipzig (Alemania). La coordinación con Graphene Flagship y los aspectos relacionados con el grafeno se realizan a través de la Universidad Técnica de Dresde (Alemania). Además, están asociadas la Universidad de Twente (Países Bajos), especializada en espintrónica; y la Universidad del País Vasco, que proporciona cálculos para analizar las interacciones electrón-electrón, un aspecto importante en los materiales 2D.

¿Los miembros de Trans2DTMD ya han publicado algún *paper*?

Junto a otros socios de la iniciativa Graphene Flagship, el equipo de la Universidad de Leipzig ha publicado en [Nano Letters](#) un trabajo sobre mejoras en la calidad óptica del diseleniuro de molibdeno (MoSe_2). También han presentado en la revista [2D Materials](#) cálculos sobre propiedades potenciales y exóticas del seleniuro de tántalo (Ta_2Se_3). En la misma publicación, nuestro grupo de la Universidad de Amberes también ha presentado un estudio sobre la conductividad del grafeno bicapa retorcido para una amplia gama de ángulos de torsión y campos eléctricos.

La agencia Sinc participa en el proyecto europeo [SCOPE](#), coordinado por FECYT y financiado por la Unión Europea a través de [Horizon 2020](#). Los objetivos de SCOPE son comunicar resultados visionarios de la investigación de proyectos asociados al [Graphene Flagship](#) y el [Human Brain Project](#), así como promover y reforzar las relaciones en la comunidad científica de las Iniciativas de Investigación

Emblemáticas de las Tecnologías Futuras y Emergentes ([FET Flagships](#)) en la UE.

Derechos: **Creative Commons**

TAGS

MATERIALES 2D | ESPINTRÓNICA | GRAFENO | ELECTRÓNICA | SCOPE |
GRAPHENE FLAGSHIP |

Creative Commons 4.0

Puedes copiar, difundir y transformar los contenidos de SINC. [Lee las condiciones de nuestra licencia](#)