



Título: Avaliação do efeito eletrônico da adsorção de halogenetos sobre as interações de van der Waals presentes entre duas camadas de MoS₂

Aluno: Lucas Doria de Carvalho

Orientador: Maximiliano Segala

Departamento de Físico-Química - Instituto de Química - UFRGS

lucas.doria@ufrgs.br

Introdução

O dissulfeto de molibdênio (MoS₂) é um dicacogeneto metálico que vem sendo estudado cada vez mais pela comunidade científica por suas diversas aplicações promissoras, como transistores e sensores [1]. A geometria deste material consiste em duas camadas S – Mo – S, como apresentado na Figura 1, mantidas por interações do tipo van der Waals. Já as ligações covalentes controlam a interação dentro das camadas. Desta forma, as propriedades eletrônicas podem ser sintonizadas tanto pelo número de camadas como pela presença de dopantes.

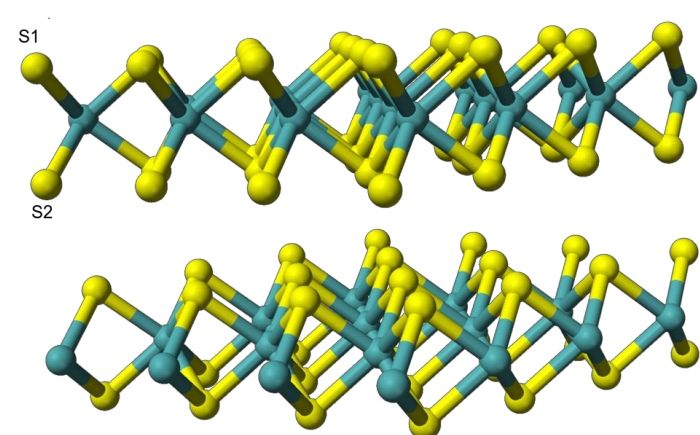


Figura 1: Estrutura espacial do bulk MoS₂.

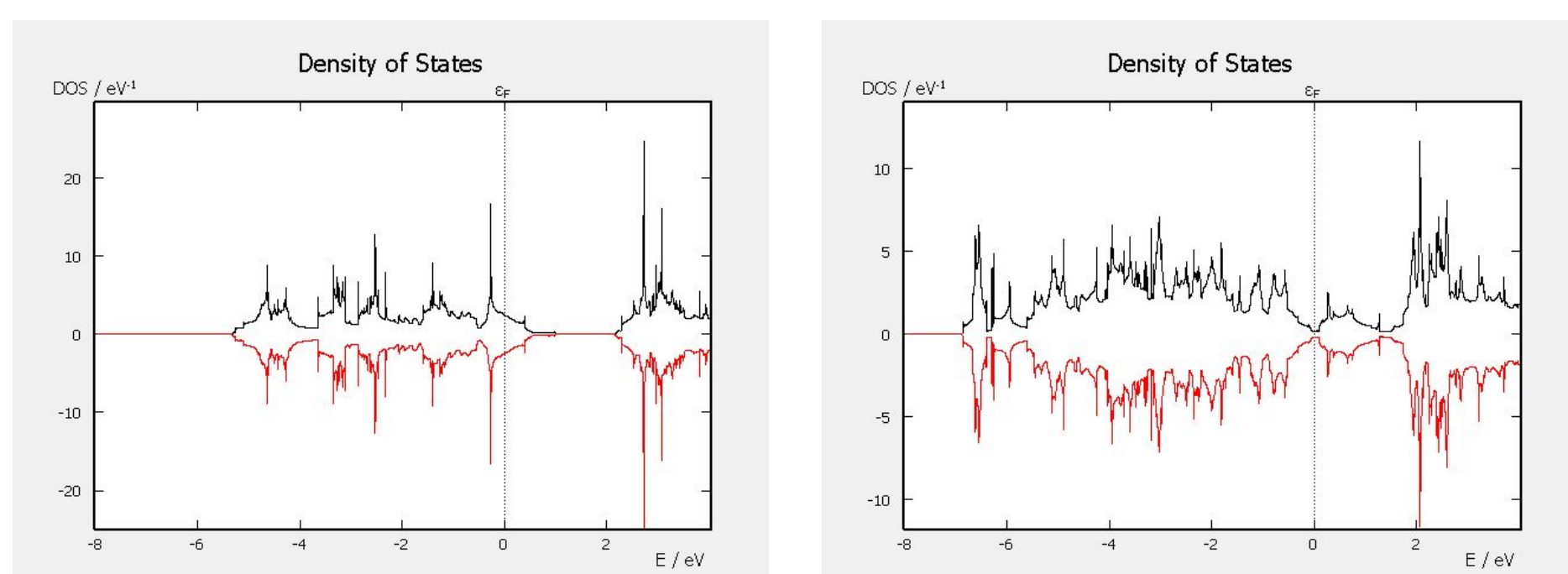
Metodologia

No primeiro ano de pesquisa do nosso grupo, foi estudado o processo de adsorção de halogênios por superfícies de dissulfeto de molibdênio (MoS₂). O sucesso do primeiro ano de pesquisa do nosso grupo, refletido pelo resultado de que os dados geométricos obtidos para estruturas de MoS₂ halogenado (MoS₂-X; X = F, Cl, I, Br) casam com os experimentais, levou à nova etapa da pesquisa [2][3]. Nesta, foi realizada uma especialização no uso do programa *QuantumEspresso* (QE), software livre baseado em cálculos de ondas planas, utilizado por nosso grupo para analisar os sistemas de interesse [4].

A partir dos dados produzidos para as propriedades geométricas das estruturas MoS₂ halogenado, foram analisadas as propriedades eletrônicas de tais sistemas, como densidade de estados (DOS), *band structure* e densidade de estados projetada (PDOS) [5].

Resultados

A DOS obtida para o MoS₂-F, por exemplo, apresenta uma característica de simetria, indicando que a estrutura é não-magnética. Comparando a DOS dos sistemas MoS₂ e MoS₂-F, vemos que o sistema apresenta uma mudança de comportamento de semicondutor para condutor via processo de cobertura. Tais resultados estão de acordo com o encontrado na literatura [6].



(a) Sistema MoS₂ bicamada.

(b) Sistema MoS₂-F.

Figura 2: Comparação de DOS entre os sistemas bicamada e bicamada com cobertura completa de flúor.

Com relação à propriedade PDOS dos sistemas, o cálculo foi realizado apenas para o sistema MoS₂-F. Portanto, foi obtido um considerável progresso nesta etapa da pesquisa, visto que os resultados para a DOS das estruturas de interesse estão de acordo com o encontrado na literatura. Além dos sistemas halogenados, de interesse inicial de nossa pesquisa, foram realizados cálculos de densidade de estados para todas as outras estruturas que vieram a ser relevantes, como, por exemplo, o sistema molibdênio com cloro inserido em sua estrutura, e não mais como cobertura.

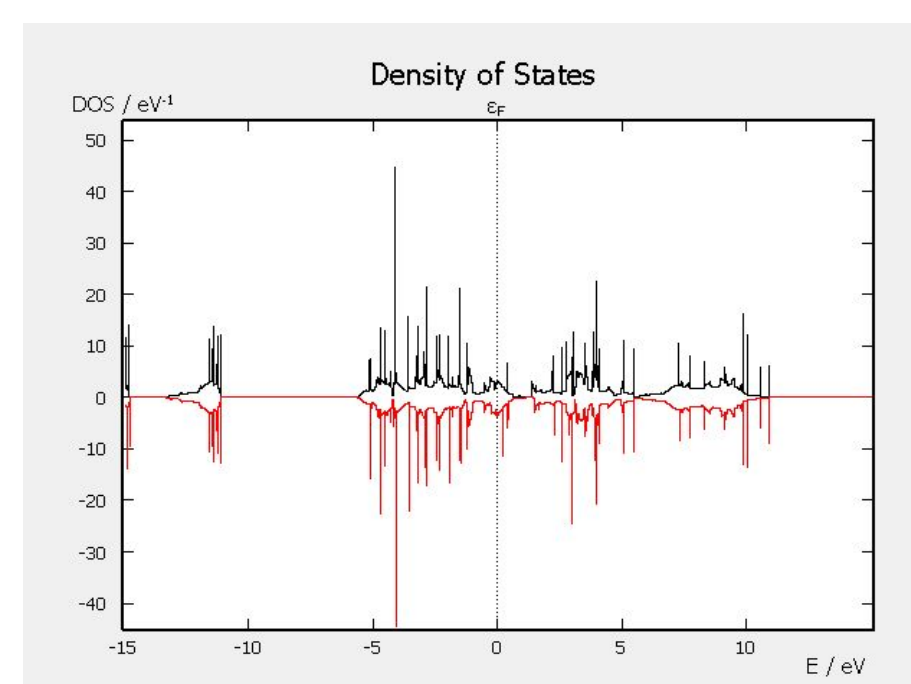


Figura 3: Sistema molibdênio com átomo de cloro inserido na posição do enxofre S1.

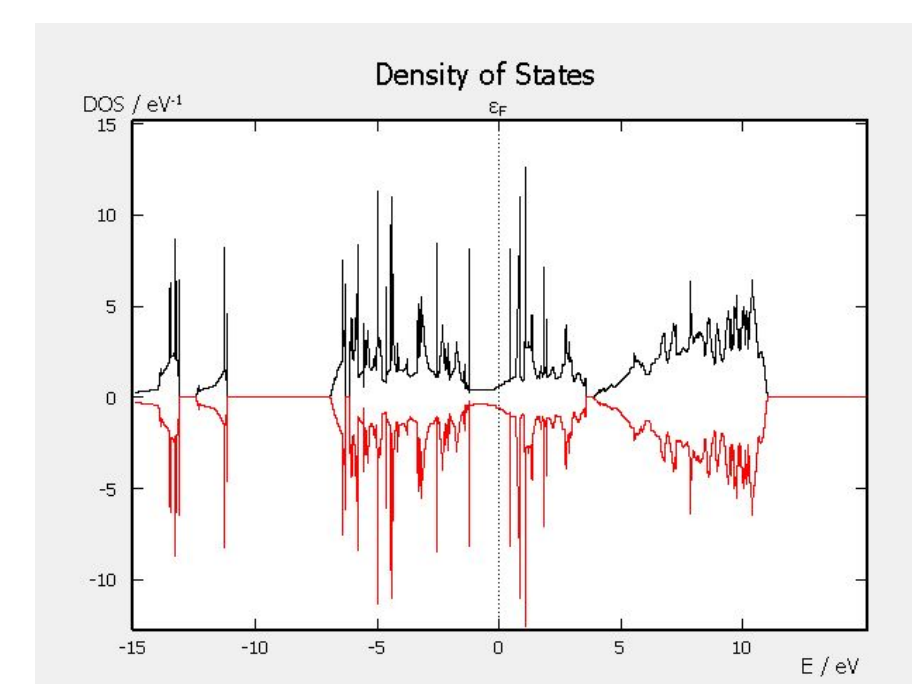


Figura 4: Sistema com átomo de cloro inserido na posição do átomo de molibdênio, caracterizando um sistema enxofre-cloro na primeira camada.

Conclusão

Conseguir estudar os efeitos da presença de defeitos na estrutura do MoS₂ via densidade de estados é um indicativo do sucesso nesta parte da pesquisa. A pesquisa agora segue para as etapas onde as simulações de DOS devem ser aplicadas à sistemas com diversos efeitos, a fim de conseguir representar sistemas analisados pelo laboratório experimental do nosso grupo. Além disso, os cálculos de *band structure* e PDOS ainda devem ser aprimorados ao nível dos sucessos obtidos para os cálculos de DOS.

Referências

1. TaiZhe Lin, BaoTao Kang, MinHwan Jeon, Craig Huffman, JeaHoo Jeon, SungJoo Lee, Wei Han, JinYong Lee, SeHan Lee, GeunYoung Yeom, KyongNam Kim. *Controlled Layer-by-Layer Etching of MoS₂*. ACS Appl. Mater. Interfaces 2015, 7, 15892 – 15897.
2. S. Smidstrup, D. Stradi, J. Wellendorff, P. A. Khomyakov, U. G. Vej-Hansen, M-E. Lee, T. Ghosh, E. Jónsson, H. Jónsson, and K. Stokbro. *First-principles Green's-function method for surface calculations: A pseudopotential localized basis set approach*. Phys. Rev. B 96, 195309 (2017).
3. A. Molina-Sánchez, K. Hummer, L. Wirtz. *Vibrational and optical properties of MoS₂: From monolayer to bulk*. Surf. Sci. Rep. 70 (2015) 554–586.
4. P. Giannozzi et al. <http://www.quantum-espresso.org> J. Phys.:Condens. Matter 21 395502 (2009).
5. David S. Sholl, Janice A. Steckel. *Density Functional Theory: A Practical Introduction*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2009.
6. Hongxing Lia, Min Huang, Gengyu Cao. *Stability, bonding and electronic structures of halogenated MoS₂ monolayer: A first-principles study*. Physica E 91 (2017) 8–14.