Evento	Salão UFRGS 2019: SIC - XXXI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2019
Local	Campus do Vale - UFRGS
Título	Avaliação do efeito eletrônico da adsorção de halogenetos sobre as interações de van der Waals presentes entre duas camadas de MoS2
Autor	LUCAS DORIA DE CARVALHO
Orientador	MAXIMILIANO SEGALA

Título: Avaliação do efeito eletrônico da adsorção de halogenetos sobre as interações de van der Waals presentes entre duas camadas de MoS_2.

Autor: Lucas Doria
Orientador: Maximiliano Segala
Instituição: Universidade Federal do Rio Grande do Sul

O dissulfeto de molibdênio (MoS_2) é um dicacogeneto metálico que vem sendo estudado cada vez mais pela comunidade científica por suas diversas aplicações promissoras, como transistores e sensores. A geometria deste material consiste em duas camadas S – Mo – S. A força de van der Waals é dominante entre as camadas, enquanto ligações covalentes controlam a interação dentro das camadas.
As propriedades eletrônicas deste material podem ser sintonizadas pela variação de sua espessura, bem como pela adsorção de ligantes à sua superfície. Foi registrado que à medida que as camadas do material diminuem, o *band gap* aumenta entre 1,27 eV e 1,8 eV, sendo o *band gap* característico do material de aproximadamente 1,7 eV, mostrando que o MoS_2 se classifica como material semicondutor.
No primeiro ano de pesquisa do nosso grupo foi estudado o processo de adsorção de halogênios por superfícies de dissulfeto de molibdênio (MoS_2) tais como Flúor, Cloro, Iodo e Bromo (F, Cl, I e Br, respectivamente). O sucesso do primeiro ano de pesquisa do nosso grupo, refletido no resultado de que os dados geométricos obtidos para estruturas de MoS_2 halogenado (MoS_2-X; X = F, Cl, I, Br) casam com os experimentais, levou à nova etapa de pequisa.
Foi então 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. Mais especificamente, várias sub-rotinas integradas aos códigos do QE foram estudadas para melhor aproveitamento de suas funções.
A partir dos dados estimados de propriedades geométricas das estruturas MoS_2 halogenado foram analisadas as propriedades eletrônicas de tais sistemas, como densidade de estados (DOS), *band structure* e densidade de estados projetada (PDOS).
A DOS obtida para o MoS_2-F, por exemplo, apresenta uma característica de simetria, indicando que a estrutura é não-magnética. Comparando a DOS dos sistemas MoS_2 e MoS_2-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.
Para os sistemas halogenados descritos anteriormente foram calculados seu *band structure* com sucesso. Com relação à propriedade PDOS dos sistemas, o cálculo foi realizado apenas para o sistema MoS_2-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 o sistema molibdênio com Flúor inserido em sua estrutura, e não mais como cobertura. Conseguir estudar os efeitos de defeitos na estrutura do MoS_2 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.