



Evento	Salão UFRGS 2018: SIC - XXX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2018
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 MoS ₂
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 MoS₂.

Autor: Lucas Doria

Orientador: Maximiliano Segala

Instituição: Universidade Federal do Rio Grande do Sul

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. 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 MoS₂ se classifica como material semiconductor.

Partindo-se da cristalografia presente na literatura sobre o MoS₂, foi estudada a melhor forma de analisar os sistemas de interesse, consistindo em várias simulações do material *bulk* com a utilização de diferentes energias cinéticas de corte (E_{cut}) e de densidade eletrônica (E_p) para a otimização destes parâmetros. Uma vez determinado o menor valor de energia cinética de corte e da densidade eletrônica que produzia erros da energia da ordem de 10^{-3} Ry, testou-se os K-points no intervalo entre $5 \times 5 \times 5$ até $12 \times 12 \times 12$. O menor grid que não apresentou oscilações de energia consideráveis foi $8 \times 8 \times 8$. Assim, $E_{cut} = 37$ Ry e $E_p = 313$ Ry com um grid de K-points $8 \times 8 \times 8$ foram utilizados para os cálculos posteriores de relaxação das posições atômicas e da caixa.

A partir de uma célula primitiva de MoS₂, o sistema foi otimizado como *bulk*. Um sistema bicamada de MoS₂ foi criado a partir do *bulk* otimizado inserindo um vácuo de 18 Å, e os halogênios foram inseridos posteriormente no sistema bicamada otimizado para análise. Sistemas com mais camadas de MoS₂ também foram estudados.

Nesta pesquisa, foram analisadas as propriedades eletrônicas do MoS₂ a partir da adsorção de diferentes halogênios (F, Cl, Br, I) à camada superior de MoS₂. Foi simulada tanto a cobertura completa (razão 1:1 de halogênio e enxofre) de halogênios sobre a superfície de MoS₂ quanto o monômero do respectivo halogênio (razão 1:25 de halogênio e enxofre).

Avaliando-se as distâncias entre os átomos para os modelos com cobertura completa, percebemos excelente correlação com os dados da literatura. Experimentalmente foi reportado que a cobertura com fluoretos e cloretos possibilita a posterior remoção da camada superior, o que não ocorre no caso de Br e I. A análise da distância entre as duas camadas de MoS₂ mostra os valores de 3,57; 3,57; 3,64; 3,62; 3,60 e 3,61 Å, respectivamente, para o sistema *bulk*, bicamada, F, Cl, Br e I, demonstrando que F e Cl enfraquecem mais as interações de Van der Waals existentes entre as camadas, o que pode ser uma explicação para o comportamento experimental.

Uma vez que os dados geométricos obtidos para a cobertura completa casam com os experimentais, foi otimizado o sistema com apenas um halogênio sobre a superfície, assim como foi iniciado o estudo sobre as propriedades eletrônicas do material.

Simulações para a obtenção da densidade de estados (DOS) e da representação das bandas de condução estão sendo aplicadas aos sistemas de interesse para reprodução dos resultados encontrados na literatura.

Os cálculos foram realizados com base na teoria do funcional de densidade (DFT), utilizando o Quantum Espresso, software livre baseado em cálculos de ondas planas.