



Evento	Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2020
Local	Virtual
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.

Aluno: Lucas Doria

Orientador: Maximiliano Segala

Instituição: Universidade Federal do Rio Grande do Sul

A miniaturização de transistores levou a microeletrônica baseada no Si ao seu limite. Nesse cenário, os materiais 2D entraram em cena, dentre os quais destacam-se os dicalcogenetos de metais de transição (TMDs) como MoS₂, WS₂, MoSe₂ ou WSe₂. As propriedades eletrônicas destes materiais podem ser sintonizadas pelo número de camada, bem como pela adsorção de ligantes à sua superfície, o que é um fator chave no desenvolvimento destes materiais. O dissulfeto de molibdênio (MoS₂) é uma das substâncias que vêm recebendo especial atenção, por este material consistir de camadas S–Mo–S. Entre as camadas há forças de van der Waals, enquanto S–Mo–S são ligações covalentes. Sabe-se que à medida que o número de camadas do material diminui, o *band gap* aumenta de 1,27 eV até 1,8 eV, sendo 1,27 eV o valor característico para o MoS₂ na forma *bulk*, o que o caracteriza como semicondutor. O grupo de experimentalista parceiro estudou o processo de adsorção de halogenetos (F, Cl, Br e I) sobre a superfície de MoS₂ com diferentes camadas. Assim nosso objetivo aqui é avaliar o efeito dos halogenetos sobre as interações de van der Waals (···) existentes entre camadas de MoS₂ e, para tanto, modelamos sistemas bicamadas do tipo MoS₂···MoS₂-X. Calculamos então propriedades eletrônicas tais como *Density of States* (DOS), *projected DOS* (PDOS) e a estrutura de bandas utilizando-se o QuantumEspresso (QE), software livre baseado em cálculos DFT com ondas planas tipo PAW e funcional de troca-correlação PBE. Com relação aos sistemas bicamada MoS₂ e MoS₂-F, obtivemos que o primeiro é semicondutor com banda indireta, enquanto o segundo é condutor com banda indireta. Além disso, o MoS₂-F apresenta DOS característico de dopagem, com adição de estados eletrônicos distribuídos em torno da energia de Fermi. As contribuições dos diferentes orbitais foi analisada com seu PDOS.