



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2020: SIC - XXXII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2020
<b>Local</b>	Virtual
<b>Título</b>	Avaliação do efeito eletrônico da adsorção de halogenetos sobre as interações de van der Waals presentes entre duas camadas de MoS <sub>2</sub>
<b>Autor</b>	LUCAS DORIA DE CARVALHO
<b>Orientador</b>	MAXIMILIANO SEGALA

**Título: Avaliação do efeito eletrônico da adsorção de halogenetos sobre as interações de van der Waals presentes entre duas camadas de MoS<sub>2</sub>.**

**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 MoS<sub>2</sub>, WS<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub> ou WSe<sub>2</sub>. 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 (MoS<sub>2</sub>) 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 MoS<sub>2</sub> 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 MoS<sub>2</sub> com diferentes camadas. Assim nosso objetivo aqui é avaliar o efeito dos halogenetos sobre as interações de van der Waals (···) existentes entre camadas de MoS<sub>2</sub> e, para tanto, modelamos sistemas bicamadas do tipo MoS<sub>2</sub>···MoS<sub>2</sub>-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 MoS<sub>2</sub> e MoS<sub>2</sub>-F, obtivemos que o primeiro é semicondutor com banda indireta, enquanto o segundo é condutor com banda indireta. Além disso, o MoS<sub>2</sub>-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.