



Conectando vidas Construindo conhecimento



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	Avaliação do efeito eletrônico da adsorção de halogenetos sobre as interações de van der Waals presentes entre duas camadas de TMDs
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 TMDs.

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_2 , WS_2 , MoSe_2 ou WSe_2 . As propriedades eletrônicas destes materiais podem ser sintonizadas pelo número de camadas, bem como pela adsorção de ligantes à sua superfície, o que é um fator chave no desenvolvimento deles. O dissulfeto de molibdênio (MoS_2) é uma das substâncias que vêm recebendo especial atenção, por este material consistir de camadas S–Mo–S. O grupo experimentalista parceiro estudou o processo de adsorção de halogenetos (F, Cl) sobre a superfície de MoS_2 , bem como sobre WS_2 , com diferentes camadas. Assim, nosso objetivo aqui é avaliar o efeito dos halogenetos sobre as interações de van der Waals (...) existentes entre duas camadas de MS_2 (M = Mo, W) e, para tanto, modelamos sistemas bicamadas do tipo $\text{MS}_2 \cdots \text{MS}_2\text{-X}$. Calculamos então propriedades eletrônicas tais como *Density of States* (DOS), *projected* DOS (PDOS) e a estrutura de bandas utilizando o Quantum Espresso (QE), software livre baseado em cálculos DFT com ondas planas tipo PAW e funcional de troca-correlação PBE. Com relação aos sistemas MoS_2 bicamada e $\text{MoS}_2\text{-F}$, obtivemos que o primeiro é semicondutor com banda indireta, enquanto o segundo é condutor com banda indireta. Além disso, o $\text{MoS}_2\text{-F}$ apresenta DOS característico de dopagem, com adição de novos estados eletrônicos distribuídos em torno do nível de Fermi. É interessante como $\text{MoS}_2\text{-Cl}$ não apresenta uma densidade de estados relevante entre -8 eV e -6 eV, o que difere dos resultados obtidos para $\text{MoS}_2\text{-F}$. Por fim, os resultados são similares para o DOS e PDOS de $\text{WS}_2\text{-F}$ e $\text{WS}_2\text{-Cl}$, esperando-se assim, por exemplo, que $\text{WS}_2\text{-F}$ também tenha propriedades eletrônicas de um condutor metálico.