



**REENCONTROS
NOVOS ESPAÇOS
OPORTUNIDADES**

XXXIV SIC Salão Iniciação Científica

**26 - 30
SETEMBRO
CAMPUS CENTRO**

Evento	Salão UFRGS 2022: SIC - XXXIV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2022
Local	Campus Centro - UFRGS
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

Materiais 2D entraram em cena após a microeletrônica baseada no Si chegar ao seu limite, dentre os quais destacam-se os dicalcogenetos de metais de transição (TMDs) como MoS₂ e WS₂. As propriedades eletrônicas destes materiais podem ser sintonizadas pelo número de camadas, bem como pela adsorção de ligantes à sua superfície. O grupo experimentalista parceiro estudou o processo de adsorção de halogenetos (F, Cl) sobre a superfície de MoS₂ e de WS₂, com diferentes camadas. Nosso objetivo aqui é avaliar o efeito dos halogenetos sobre as interações de van der Waals (...) existentes entre duas camadas de MS₂ (M = Mo, W) e, para tanto, modelamos sistemas bicamadas do tipo MS₂...MS₂-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. Os parâmetros estruturais obtidos estão em bom acordo com a literatura, com erros relativos para MoS₂ e WS₂ abaixo de 1,10% e 2,55%, respectivamente. Além disso, a adsorção de halogenetos faz com que a distância intercamada aumente, sendo um possível indicativo do enfraquecimento das interações vdW. Com relação aos sistemas MoS₂ bicamada 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 novos estados eletrônicos distribuídos em torno do nível de Fermi. É interessante como MoS₂-Cl não apresenta uma densidade de estados relevante entre -8 eV e -6 eV, o que difere dos resultados obtidos para MoS₂-F. Por fim, os resultados são similares para o DOS e PDOS de WS₂-F e WS₂-Cl, esperando-se assim, por exemplo, que WS₂-F também tenha propriedades eletrônicas de um condutor metálico.