

Estudo *Ab Initio* de Propriedades Eletrônicas de Materiais Bidimensionais Estáveis de CuS_x ($x = 0,5; 1,0; 1,5$ e $2,0$)

Guilherme K. Inui

Alexandre C. Dias, Rafael Besse

Juarez L. F. Da Silva

Instituto de Química de São Carlos (IQSC – USP)

guiinui@usp.br

Objetivos

Motivação: Os calcogenetos oferecem uma base interessante para a obtenção de semicondutores bidimensionais com uma ampla variedade de propriedades.

Objetivo: Para contribuir com a busca de novos materiais 2D, foi explorado o CuS_x ($x = 0,5; 1,0; 1,5; 2,0$) usando métodos de relaxamento de estrutura, estabilidade por meio de cálculos de fônon e triagem de propriedades eletrônicas para futuras aplicações em dispositivos fotovoltaicos.

Métodos e Procedimentos

Foram analisadas duas bases de dados diferentes (*Inorganic Crystal Structure Database* (ICSD)^[3] e *Computational 2D Materials Database* (C2DB)^[4]) a respeito de estruturas bidimensionais as quais, os cátions são substituídos por Cu e os ânions por S, formando assim as estruturas desejadas. Estequiometrias mais altas, foram submetidos em métodos de retirada de elétrons para gerar uma gama maior de estruturas no grupo. Todos os materiais são submetidos a cálculos de tensor de stress, cálculos de fônon, função trabalho, densidade de estados (DOS) e estruturas de bandas (BS) utilizando-se do *Vienna Ab initio Simulation Package* (VASP), baseado na Teoria do Funcional da Densidade. O funcional Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) dentro da Aproximação de Gradiente Generalizado (GGA) foi empregado, e a correção D3 van der Waals foi incluída.

Resultados

Com a análise estrutural dos compostos obtidos, foi possível comparar com as dependências logarítmicas entre a distância da ligação e o número

de coordenação efetivo descrito na literatura^[5] com $R^2 = 0,939$. Foi possível determinar um conjunto menor entre as 42 estruturas totais por meio da estabilidade nos cálculos dos fônon, nos quais foram separadas 4 estruturas de cada estequiometria ($\text{CuS}_{0,5}$, CuS_1 , $\text{CuS}_{1,5}$, CuS_2) com um método de varredura do menor para o maior energia e separando o primeiro que é estável ou metaestável. O grupo reduzido foi submetido às análises DOS e BS, resultando em 1 estrutura que contém um band gap direto de 0,10 eV. As análises da função de trabalho resultaram em valores entre 4,33 e 5,92 eV.

Conclusões

As 42 estruturas derivadas de protótipos da literatura foram analisadas a partir de suas propriedades estruturais com uma dependência logarítmica entre distância média de ligação e número de coordenação efetivo e foram separados 4 para que possam ser melhor analisados as quais são as estruturas de menor energia e estáveis pela análise de fônon. Dessa estrutura, foi observado através de análises eletrônicas, que a estrutura de $\text{CuS}_{0,5}$ (Ag_2Se) é um semicondutor com *band gap* direto igual a 0,10 eV.

Referências Bibliográficas

- [1] Besse, R. et al. Phys. Ver. B. 2016, 93, 165205.
- [2] Bastos, C. M. O. et al. Phys. Ver. Mater. 2019, 3, 044002.
- [3] Belsky, A. et al. Acta. Crystallogr. Sect. B 2002, 58, 364-369.
- [4] Hastrup, S. et al. 2D Mater. 2018, 5, 042002.
- [5] Batsanov, S. S. J. Struct. Chem, 2010, 51, 281-287.

Agradecimentos: Julian F. R. V. Silveira pela contribuição no projeto.