

Resumo do Trabalho em português:



INVESTIGAÇÃO QUÍMICO-QUÂNTICO DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ELETRONICAS DE MATERIAIS EM CAMADA: O EXEMPLO DO MoS_2

Ahmad Forhat, Juarez L.F da Silva, Rafael C. Amaral

Universidade de São Paulo

ahmad.forhat@gmail.com

Objetivos

Os Metais de Transição Dicalcogenados (TMC) são uma classe de semicondutores em duas dimensões, cuja fórmula é MX_2 . Entre estes, o dissulfeto de molibdênio, MoS_2 , é o mais iônico e a sua fase monocamada pode ser utilizada como transistores e fotodetectores. Portanto, neste trabalho, foi estudado as propriedades energéticas, estruturais e eletrônicas das fases mais conhecidas em bulk do MoS_2 (trigonal prismática, 1T, trigonal prismática distorcida, 1T', hexagonal, 2H, romboédrica, 3R) e a monocamada da conformação mais estável.

Materiais e Métodos

Todos os cálculos foram realizados utilizando DFT, com correção do funcional proposto por Perdew Burke, Ernzerhif (PBE), aplicando a correção de van der Walls de acordo com a metodologia D3 proposta por Grimme [1] empregando o critério de convergência eletrônica de 10^{-3} eV. A equação de Khon Shan foi resolvida utilizando o código VASP.

Resultados

Encontrou-se que 2H é a fase mais estável em forma bulk do MoS_2 , os parâmetros de rede calculados foram $a_0 = 3.16 \text{ \AA}$ e $c_0 = 12.33 \text{ \AA}$. Para a análise de Bader, na fase 2H, Mo, e S tem carga efetiva de 1.07 e -0.54 respectivamente, que é explicado pela diferença de eletronegatividade dos dois elementos. Para a monocamada 2H, calculamos a função trabalho de 6.56 eV enquanto que a energia de superfície que foi observada foi de 3.57 eV. Devido as fracas

interações entre as camadas da estrutura 2H do MoS_2 , o valor encontrado para a relaxação intercamadas foi pequena, 0.13%.

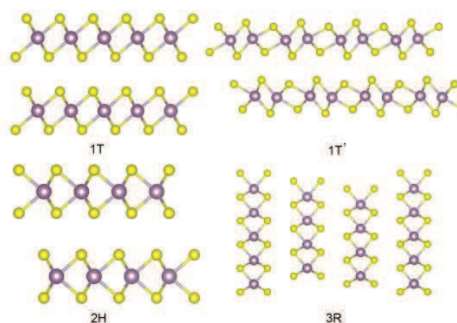


Figura 1: Fases 1T, 1T', 2H e 3R do MoS_2 , as esferas roxas são o Mo e as amarelas o S.

Conclusão.

Esses resultados nos fazem entender melhor as propriedades do MoS_2 tanto em sua fase bulk como monocamada e, assim sendo, auxiliando em sistemas TMD mais complexos, a fim de melhorar o desenvolvimento de mais materiais TMD.

Referências Bibliográficas

[1] S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, and H. Krieg. A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (dft-d) for the 94 elements h-pu. The Journal of chemical physics, 132(15):154104, 2010.