

Investigação das Propriedades Estruturais e Energéticas de Calcogenetos Bidimensionais de Cobre através de Cálculos da Teoria do Funcional da Densidade

Guilherme K. Inui, Rafael Besse, e Juarez L. F. Da Silva

Instituto de Química de São Carlos (IQSC-USP)

guiinui@usp.br

Objetivos

Calcogenetos (materiais que contém S, Se ou Te como ânions) atraem interesse pela formação de semicondutores bidimensionais (2D)^[1,2] com propriedades promissoras para fornecimento de energia solar o qual merece estudos mais aprofundados. Por exemplo, foi encontrado que Ag_2S é um semicondutor tem ductilidade parecida com metais na temperatura ambiente, devido à sua estrutura cristalina em camadas, e Cu_9S_5 é um semicondutor 2D tipo-p. Portanto, para contribuir com o estudo das propriedades de calcogenetos 2D de cobre, são desenvolvidos investigações da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) para análise das propriedades estruturais e energéticas dos compostos CuS_x ($x = 0,0-2,0$).

Métodos e Procedimentos

Foram analisadas duas bases de dados, *Inorganic Crystal Structure Database* (ICSD)^[3] e *Computational 2D Materials Database* (C2DB)^[4] para estruturas cristalinas de CuQ_x e AgQ_x ($Q = \text{S, Se, Te}$; $x = 0,0 - 2,0$). Os cálculos de DFT foram realizados através do *Vienna Ab initio Simulation Package* (VASP) e empregaram a aproximação do gradiente generalizado (GGA) para o funcional de troca-correlação, como proposto por Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE), com correção D3 de van der Waals. As geometrias de equilíbrio foram obtidas através da minimização do tensor de *stress* e forças nos átomos.

Resultados

As bases de dados analisadas resultaram em 34 estruturas diferentes selecionadas para estudos. Após a otimização estrutural, foram

encontradas 27 estruturas diferentes, das quais 7 têm configurações ferromagnéticas. A estabilidade termodinâmica dos materiais foi classificada baseada na energia de formação ΔH , utilizando um limiar tendo em conta a precisão do funcional PBE para energia de formação ($\Delta H \leq 0,2 \text{ eV/atom}$)^[4], e foram encontradas 13 estruturas que satisfazem esse critério. Foi aplicada uma análise do número de coordenação efetivo (ECN)^[5] para melhor descrição da diversidade estrutural, e correlacionar o ECN com a distância média de ligações.

Conclusões

Compostos CuS_x ($x = 0,0-2,0$), em um conjunto de 34 protótipos estruturais, foram estudados aplicando cálculos de DFT. Baseado no calor de formação, 13 materiais foram considerados termodinamicamente estáveis. A correlação do ECN e distância média de ligação foi feita através de uma função logarítmica que condiz com tendências conhecidas que descrevem uma ampla gama de moléculas e cristais. Estudos mais aprofundados serão feitos para análise da aplicação em células solares, baseado no entendimento das propriedades eletrônicas como densidade de estados, estrutura de bandas, e alinhamento de bandas.

Referências Bibliográficas

- [1]. Besse, R.; Sabino, F. P.; Da Silva, J. L. F. *Phys. Rev. B*. **2016**, 93, 165205.
- [2]. Bastos, C. M. O. *et al. Phys. Rev. Mater.* **2019**, 3, 044002.
- [3]. Belsky, A. *et al. Acta. Crystallogr. Sect. B* **2002**, 58, 364-369.
- [4]. Haastrup, S. *et al. 2D Mater.* **2018**, 5, 042002.