

INTERAÇÕES DE SUPERFÍCIE EM MATERIAIS DE BAIXA DIMENSIONALIDADE: ANÁLISE E MODELAGEM COMPUTACIONAL DE HETEROESTRUTURAS DE MATERIAIS BIDIMENSIONAIS E NANOPARTÍCULAS

Hyvina Da Silva Lino¹
Maio N'ghaté²
Ana Cecília Soares De Olanda³
Daniel Brito De Araújo⁴

RESUMO

Na área da Nanotecnologia, a busca para compreender e estudar materiais bidimensionais (2D) é impulsionada pela busca constante de criar dispositivos eletrônicos cada vez menores e mais rápidos. Devido à sua baixa dimensionalidade, semicondutores como o MoS₂ são frequentemente escolhidos para realizar pesquisas nesta área. Este projeto tem como objetivo analisar, por meio de modelagem computacional as alterações nas propriedades óticas e eletrônicas do MoS₂, quando ele interage com Supercristais (SC) formados por nanopartículas (NPs) de ouro. A metodologia utilizada neste projeto consistiu na análise computacional de dados experimentais de absorção ótica para diversas conformações de heteroestruturas de MoS₂ em cima de supercristais. Os dados foram analisados utilizando a linguagem de programação Python e suas bibliotecas Pandas, Matplotlib e SciPy, com o desenvolvimento de códigos utilizados para reduzir os ruídos das amostras (filtro gaussiano) e detectar os picos de Excitons (find_peaks). Os resultados nos mostram que, para o MoS₂ na ausência de Nanopartículas, há dois picos de absorção cujas energias permanecem em valores constantes de aproximadamente 1,87 eV e de 2,07 eV independentemente do número de camadas do material, esses picos são associados a éxcitons. Já quando analisamos o MoS₂ juntamente com uma camada do Supercristal, podemos notar um desvio para o azul (blue-shift) nos picos de absorção. Na monocamada (1C) de MoS₂ em 1C de SC, podemos notar que tivemos um aumento de 0,42 eV (chegando a 2,29 eV) comparado com 1C de MoS₂ isolado. No decorrer do aumento de camadas podemos notar que o valor do desvio de energia decai, apresentando variações de 0,31 eV para duas camadas (2C), 0,27 eV para três camadas (3C), 0,23 eV para quatro camadas (4C) e apenas 0,03 eV para amostras com poucas camadas (FL). Por fim, podemos concluir que, esse efeito ocorre devido à Blindagem Dielétrica, que depende da proximidade entre os materiais utilizados, o que explica sua maior intensidade em amostras mais finas. O uso de ferramentas computacionais como Python e suas bibliotecas (Pandas, Matplotlib e SciPy) foi fundamental para a compreensão dos comportamentos analisados. O projeto teve apoio financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e da FUNCAP. Agradeço ao CNPq pelo financiamento da pesquisa, por meio do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica nas Ações Afirmativas (PIBIC-Af) da UNILAB. Grande área do CNPq: Ciências Exatas e da Terra. O projeto contribui para "Diversidade, Inclusão e Transformação Social" ao ser desenvolvido por meio de uma bolsa de Ações Afirmativas, permitindo que discentes de diversos perfis sociais tenham acesso a pesquisas sobre nanotecnologia.

Palavras-chave: MoS₂; modelagem computacional; Supercristais.

UNILAB, ICEN, Discente, hyvinalino@aluno.unilab.edu.br¹

UNILAB, ICEN, Discente, maionghate@aluno.unilab.edu.br²

UNILAB, ICEN, Discente, cecilia.soares@aluno.unilab.edu.br³

UNILAB, ICEN, Docente, daniel.dearaujo@unilab.edu.br⁴