

ESTUDIOS DE LA INTERACCIÓN DE ÁTOMOS DE F CON MoS₂ BIDIMENSIONAL.

Farigliano Lucas M.*; Paredes-Olivera Patricia A.**; Patrino Eduardo M.*

e-mail: lfarigliano@unc.edu.ar

Departamento de Físicoquímica* y Departamento de Química Teórica y Computacional**, Instituto de Investigaciones en Físico Química de Córdoba (INFIQC). Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, X5000HUA Córdoba, Argentina.



INFIQC
1983-2013



Introducción

Etching es una técnica para eliminar la parte no deseada de la superficie de un material.¹ Existen muchos métodos, tanto físicos como químicos, para llevar a cabo esta técnica. Uno de ellos es a través de plasmas de átomos de flúor, por ejemplo, el etching de MoS₂ causado por la exposición al plasma de CF₄. En este método, se forma flúor atómico por la disociación de CF₄, que luego reacciona con MoS₂ para formar fluoruros relacionados con Mo y S, como por ejemplo MoF₆, SF₄ y SF₆.²

En este trabajo, se realizaron estudios de dinámica molecular ab-initio, a diferentes temperaturas, para analizar los mecanismos por los cuales la superficie de MoS₂ interactúa con átomos de F y moléculas de F₂. Además, a partir de estructuras con diferentes grados de cubrimiento se estudiaron los procesos de difusión de átomos de F sobre la superficie de MoS₂.

Metodología

CÓDIGO: Quantum Espresso con interacciones de Van der Waals.

- Pseudopotenciales: ultrasoft de Perdew – Wang-Ernzerhof (PBE).
- Zona de Brillouin: punto GAMMA; umbral de 1×10^{-8} Ry.
- Optimización de geometría: (BFGS).
- Cutoff Energía: 40 Ry.
- Cutoff Densidad Electrónica: 240 Ry.
- Celdas: 16,56 Å x 12,73 Å x 17,00 Å
- Paso de tiempo: 1 fs (MD).

Resultados

Proceso Inicial

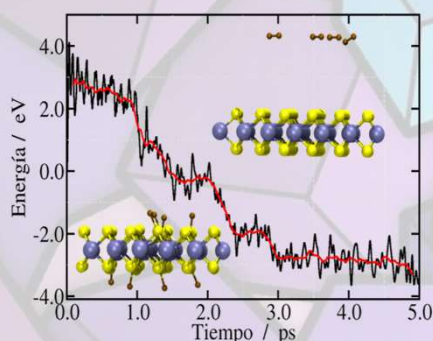


Figura 1: Energía total en función del tiempo de simulación. La curva negra representa la energía de interacción entre moléculas de F₂ y MoS₂. La curva roja es una energía suavizada.

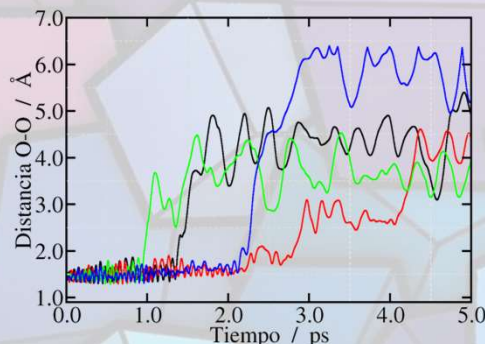


Figura 2: Distancia O-O en función del tiempo de simulación. Las curvas corresponden a las cuatro moléculas de F₂ que reaccionan con la superficie de MoS₂.

MoS₂ + 30 F

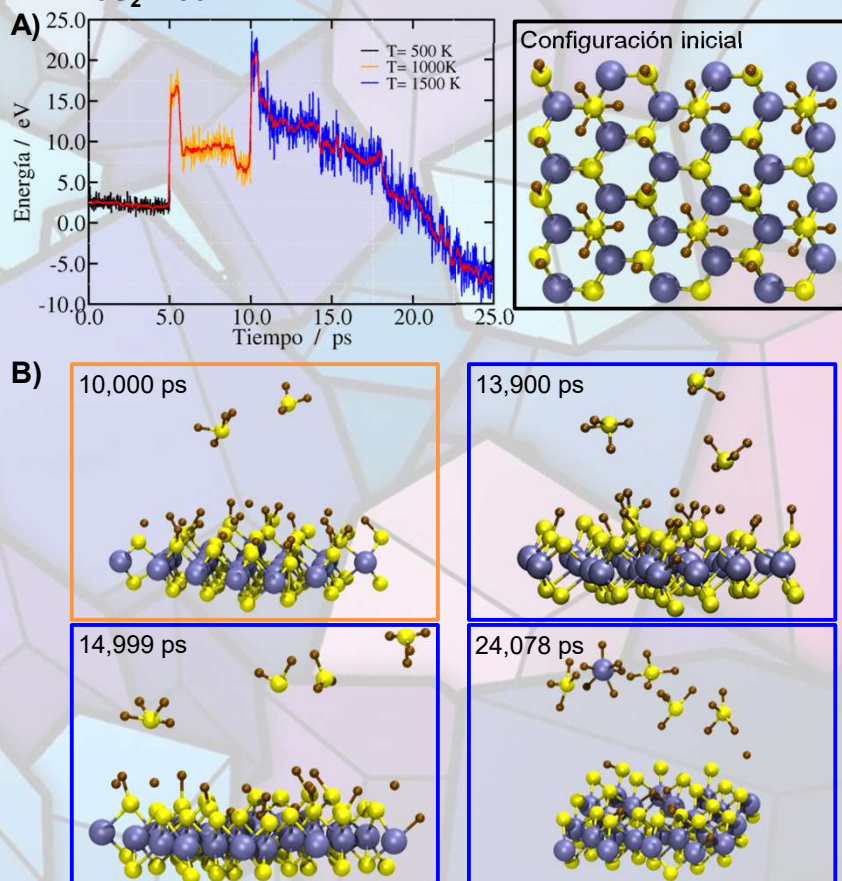


Figura 3: A) Perfil de energía total, a diferentes temperaturas, de simulaciones de AIMD para la superficie de MoS₂ con 30 flúor adsorbidos en la superficie. Además se muestra la configuración inicial B) Las configuraciones ilustran los eventos observados durante la simulación.

Conclusiones

La interacción de átomos de F con MoS₂ se investigó empleando simulaciones AIMD a 100, 300, 500, 1000 y 1500 K. A partir de las simulaciones de AIMD se observaron los productos de etching, SF_x y MoF_x, ya reportados en bibliografía. Las simulaciones de dinámica molecular permitieron plantear diferentes mecanismos de formación, que luego fueron corroborados por cálculos de NEB a 0K. Se observó una fuerte interacción entre los átomos de F en fase gaseosa y la superficie de MoS₂. Por otro lado, al estudiar los productos de reacción, se observó una tendencia favorable, en cuanto a la estabilidad de los productos a medida que el número de flúor aumentaba en los compuestos SF_x gaseosos formados.

Bibliografía

- ¹Min Hwan Jeon, Nanotechnology **2015**, 26, 355706
²He, T. Advanced Materials Technologies, **2019**, 4(8), 1900064

Agradecimientos

Los autores agradecen el financiamiento a CONICET, SECyT y FONCYT. Lucas Farigliano agradece a CONICET por la beca otorgada para el desarrollo de sus estudios de posgrado.