

## ESTUDO DE WS<sub>2</sub> e MoS<sub>2</sub> POR ESPECTROSCOPIA RAMAN

Maria Ivanilda Lima da Silva <sup>1</sup>  
Francisco Carlos Carneiro Soares Salomão <sup>2</sup>

### INTRODUÇÃO

Dichalcogenetos de metais de transição (TMDCs) que têm a fórmula geral MX<sub>2</sub>, onde M representa um metal de transição, enquanto que X representa o calcogênio. Apesar da existência de mais de quarenta espécies de TMDCs, apenas MoS<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub>, WS<sub>2</sub> e WSe<sub>2</sub>, foram fortemente estudados até os dias atuais [1,2]. É devido ao fato de que a espécie mencionada apresenta um caráter semicondutor, com um gap de banda considerável, o que torna esses TMDCs muito atraentes para aplicações como dispositivos semicondutores. Usando esfoliação mecânica ou método de deposição de vapor, foi possível obter ou até mesmo camadas únicas desses sólidos da Van Der Waals para construir dispositivos como transistores, ou mesmo integrados circuitos Além disso, a transição na natureza de *band gap*, do indireto em poucas camadas para o direto na camada única, tornam estes materiais muito interessantes para fins opto-eletrônicos. Dispositivos baseados em junções p-n, foto-transistores e fotodiodos são exemplos do potencial de TMDCs semicondutores para opto-eletrônicos dispositivos [3 – 6]. Neste trabalho, utilizamos Espectroscopia Raman com o objetivo de investigar as propriedades vibracionais e eletrônicas em amostra do WS<sub>2</sub> e MoS<sub>2</sub>. As medidas foram obtidas em monocamada 1L, bicamada 2L e poucas camadas FL de WS<sub>2</sub> e MoS<sub>2</sub>, em substrato de Si.

---

<sup>1</sup> Graduando do Curso de Física da Universidade Estadual do Ceará - UECE, [maria.ivanilda@aluno.uece.br](mailto:maria.ivanilda@aluno.uece.br) ;

<sup>2</sup> Prof. Doutor do Curso de Física da Universidade Estadual do Ceará - UECE, [carlos.salomao@uece.br](mailto:carlos.salomao@uece.br);

## **METODOLOGIA (OU MATERIAIS E MÉTODOS)**

A amostra de  $WS_2$  e  $MoS_2$  foram obtida por método de crescimento por deposição à vapor (CVD). Um espectrômetro Raman modelo LabRAM Jobin-Yvon da marca Horiba, equipado com dispositivo detector de carga acoplada resfriado com nitrogênio líquido. Neste conjunto de medidas foram utilizados para excitação da amostra um laser de íon de argônio com comprimento de onda de 488 nm (2,54 eV) da marca Melles Griot, um laser de 633 nm (1,96 eV) de Hélio-Neônio também da marca Melles Griot. Para focalização dos feixes na amostra foi utilizada uma lente 100x com abertura numérica de 0,90 da marca Olympus e uma grade com densidade de 600 linhas/mm. O software utilizado para controlar o equipamento e registrar os espectros adquiridos foi o LabSpec 5.

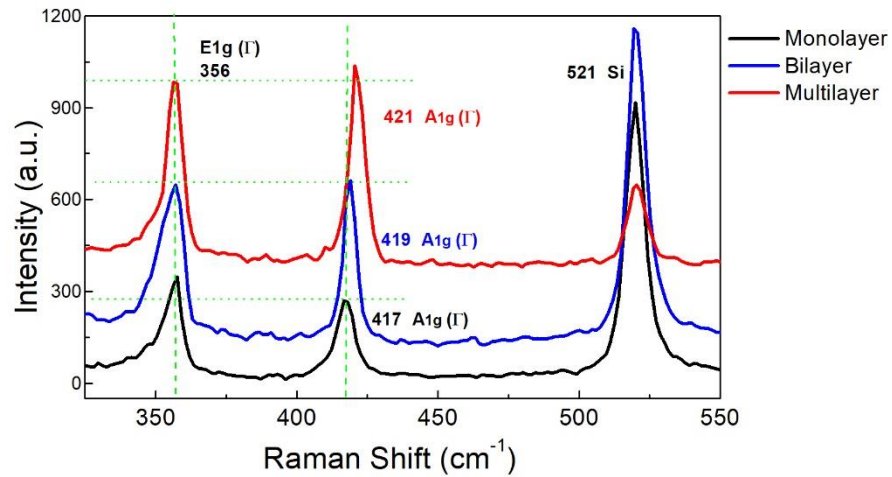
## **DESENVOLVIMENTO**

O desenvolvimento da pesquisa foi se deu pela análise dos deslocamentos de frequência dos modos  $A_{1g}$  em relação ao modo de vibração  $E_{1g}$  nas amostras de uma, duas, três e várias camadas, baseando-se nas revisão bibliográfica citada acima.

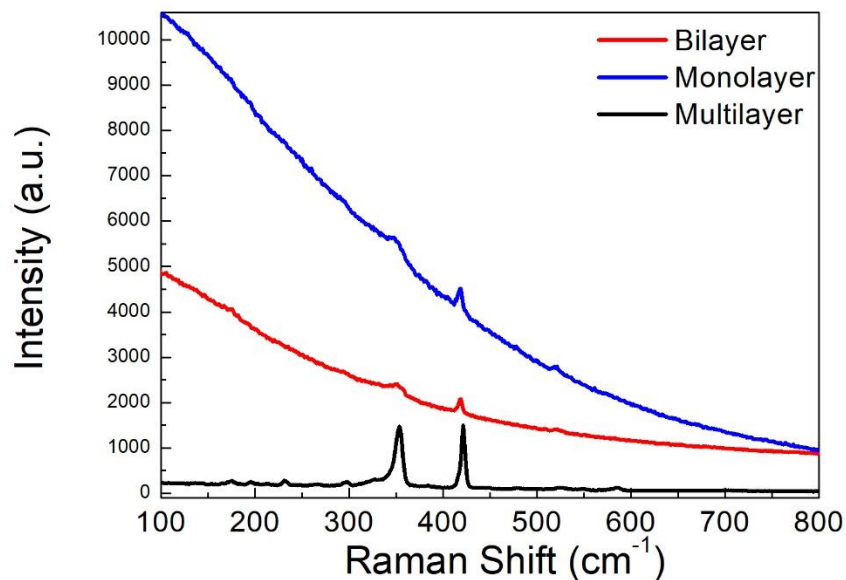
## **RESULTADOS E DISCUSSÃO**

A Figura 1 mostra os espectros Raman, utilizando a linha de laser de 488 nm, do  $WS_2$  monocamada (linha preta), bicamada (linha azul e multicamada (linha vermelha). Percebemos que ocorre um deslocamento (almento) na frequência de vibração do modo  $A_{1g}$ , quando o número de camadas do  $WS_2$  aumenta. Além disso, a intensidade relativa do modo de vibração  $A_{1g}$  em relação ao modo de vibração  $E_{1g}$  aumenta com o aumento do número de camadas. Isto indica que estão ocorrendo mais vibrações do tipo  $A_{1g}$ , visto que estas vibrações são perpendiculares ao plano e o número de planos aumentou com o aumento do número de

camadas. O deslocamento na frequência do modo de vibração A<sub>1g</sub> está associado ao aumento das interações entre os planos, devido ao aumento do número de planos.



**Figura 1: Espectro Raman, na linha de laser de 488 nm, do WS<sub>2</sub> monocamada (preto), bicamada (azul) e multicamada (vermelho).**



**Figura 2: Espectro Raman, na linha de laser de 633 nm, do WS<sub>2</sub> monocamada (preto), bicamada (azul) e multicamada (vermelho).**

A Figura mostra os espectros Raman, na linha de laser de 633 nm, do WS<sub>2</sub> monocamada (linha azul), bicamada (linha vermelha) e multicamada (linha preta). Percebemos um efeito de

luminescência de grande intensidade para WS<sub>2</sub> monocamada. A intensidade da luminescência diminui quando temos WS<sub>2</sub> bicamada e desaparece para multicamadas. Isto pode ser associado à um “gap” direto na estrutura eletrônica do WS<sub>2</sub> de uma e duas camadas.

A Figura 3 mostra os espectros Raman, utilizando a linha de laser de 488 nm, do MoS<sub>2</sub> monocamada (linha preta), bicamada (linha vermelha), tricamada (linha verde) e multicamada (linha azul). Semelhante ao WS<sub>2</sub>, podemos notar que o deslocamento (almento) na frequência de vibração do modo A<sub>1g</sub>, quando o número de camadas do MoS<sub>2</sub> aumenta. Isto indica que estão ocorrendo mais vibrações do tipo A<sub>1g</sub>, visto que estas vibrações são perpendiculares ao plano e o número de planos aumentou com o aumento do número de camadas. O deslocamento na frequência do modo de vibração A<sub>1g</sub> está associado ao aumento das interações entre os planos, devido ao aumento do numero de planos.

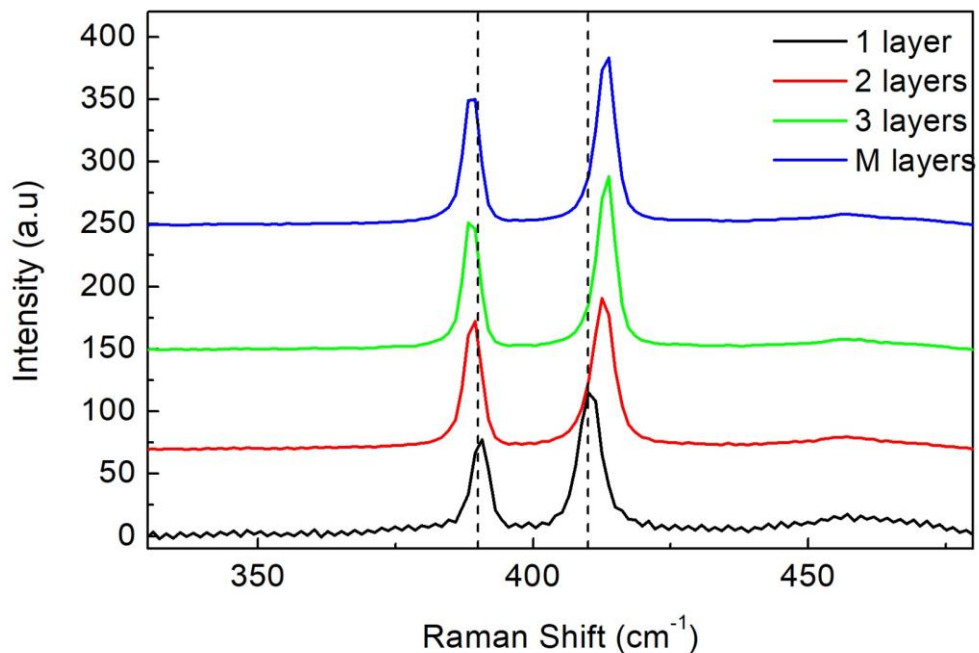


Figura 3: Espectro Raman, na linha de laser de 488 nm do do MoS<sub>2</sub> monocamada (preto), bicamada (vermelho), tricamada (verde) e multicamada (azul).

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

Em conclusão, utilizamos medidas de espectroscopia Raman para investigar as propriedades vibracionais e eletrônicas do dissulfeto de molibdênio e dissulfeto de Tungstênio em monocamada, bicamada tricamada e multicamada. Através da análise da mudança da frequência do modo de vibração e aumento na intensidade relativa do modo A1g, podemos identificar a mudança do número de camadas tanto de WS<sub>2</sub> como de MoS<sub>2</sub> pela utilização desta técnica. Pelos efeitos de luminescência identificados nas medidas utilizando o laser de 633 nm, podemos inferir que o WS<sub>2</sub> monocamada e bicamada apresentam “gap” direto na sua estrutura eletrônica, enquanto o WS<sub>2</sub> multicamadas não apresenta “gap” direto.

**Palavras-chave:** Espectroscopia Raman, Dissulfeto de Molibidênio, Dissulfeto de Tungstênio

## REFERÊNCIAS

- [1] Qing Hua Wang, Kourosh Kalantar-Zadeh, Andras Kis, Jonathan N. Coleman, and Michael S. Strano. **Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides**. Nat Nano, 7(11):699{712, Nov 2012.
- [2] Manish Chhowalla, Hyeon Suk Shin, Goki Eda, Lain-Jong Li, Kian Ping Loh, and Hua Zhang. **The chemistry of two-dimensional layered transition metal dichalcogenide nanosheets**. 5:263 EP, Mar 2013. Review Article.
- [3] Zongyou Yin, Hai Li, Hong Li, Lin Jiang, Yumeng Shi, Yinghui Sun, Gang Lu, Qing Zhang, Xiaodong Chen, and Hua Zhang. **Single-layer mos2 phototransistors**. ACS Nano, 6(1):74{80, 2012. PMID: 22165908.
- [4] Saptarshi Das, Hong-Yan Chen, Ashish Verma Penumatcha, and Joerg Appenzeller. **High performance multilayer mos2 transistors with scandium contacts**. Nano Letters, 13(1):100{105, 2013. PMID: 23240655.
- [5] Jen-Ru Chen, Patrick M. Odenthal, Adrian G. Swartz, George Charles Floyd, Hua Wen, Kelly Yunqiu Luo, and Roland K. Kawakami. **Control of schottky barriers in single layer**

**mos<sub>2</sub> transistors with ferromagnetic contacts.** Nano Letters, 13(7):3106{3110, 2013. PMID: 23746085.

[6] Wei Liu, Jiahao Kang, Deblina Sarkar, Yasin Khatami, Debdeep Jena, and Kaustav Banerjee. **Role of metal contacts in designing high-performance monolayer n-type wse<sub>2</sub> eld e\_ect transistors.** Nano Letters, 13(5):1983{1990, 2013. PMID: 23527483.