

# ESTUDO DA ANARMONICIDADE EM SULFETO DE GÁLIO DE POUCAS CAMADAS SUSPENSO E SUPORTADO COM VARIAÇÃO DE TEMPERATURA.

III Congresso Online de Engenharia de Materiais. inscrições encerradas, 3<sup>a</sup> edição, de 28/07/2021 a 31/07/2021  
ISBN dos Anais: 0000000000000000

ARAUJO; Francisco Diasis V.<sup>1</sup>, ALENCAR; Rafael S.<sup>2</sup>, VIANA; Bartolomeu C.<sup>3</sup>

## RESUMO

Nos últimos anos, os materiais bidimensionais (2D) despertaram muito interesse quanto ao estudo de suas propriedades fundamentais. Sua estrutura semelhante ao grafeno, porém com band gap diferente de zero, formou um grupo de cristais que podem exibir uma grande variedade de propriedades físicas quando a amostra é reduzida ao nível atômico. Dentre estes destacam-se os monocalcogenedos do grupo III, tais como GaS, GaSe e InSe, etc. Nos quais observa-se uma transição do gap de energia indireto para direto quando diminui o número de camadas. Assim, para o desenvolvimento de novas tecnologias com uso de materiais 2D é fundamental o entendimento de suas propriedades térmicas. Neste trabalho realizamos um estudo de espectroscopia Raman dependente da temperatura do sulfeto de gálio (GaS) de poucas camadas esfoliado mecanicamente suspenso e suportado. As medições Raman das amostras de GaS foram realizadas na faixa de temperatura de 148 - 614 K em três posições distintas da amostra, onde as medições Raman foram realizadas para duas, três e múltiplas camadas utilizando-se um estágio térmico Linkam THMS600 para o controle da temperatura. Nesse estudo focou-se nos modos A11g e A21g que são mais intenso para a energia de excitação usada. A partir destes resultados, buscou-se uma relação entre a mudança do modo Raman e a espessura da camada do GaS, de acordo com estudos realizados na literatura, que utilizaram uma função exponencial analítica para determinar a espessura da camada a partir de medidas Raman além de observar simultaneamente os efeitos anarmônicos no espectro através do parâmetro de Grüneisen no modo isobárico. Este parâmetro termodinâmico descreve as mudanças no volume da célula devido a variações de temperatura e pressão, ou seja, quanto maior o parâmetro maior será a anarmonicidade na amostra. Nesse sentido, ajustamos cada modo Raman com a função exponencial proposta na literatura, determinando-se assim o número de camadas das três regiões estudadas. Observou-se também que os modos mudam para o vermelho com o aumento da temperatura além de apresentarem um comportamento linear, semelhante ao que foi observado em estudos anteriores com outros materiais 2D. Esta tendência linear para ambos os modos A1g indica que o processo de três fônons é dominante na faixa de temperatura medida. No entanto, o aumento do coeficiente de temperatura para amostras suportadas e mais espessas foi atribuído ao aumento da anarmonicidade dos fônons induzida pela rugosidade da superfície do substrato e espalhamento dos fônons Umklapp. Em conclusão, investigamos a espectroscopia Raman dependente da temperatura dos fônons ópticos A11g e A21g de GaS suspenso e suportado de duas, três e multicamadas. Nossos resultados mostram uma freqüência linear decrescente para ambos os modos A1g com o aumento da temperatura e os coeficientes de temperatura de primeira ordem  $\theta$  foram calculados considerando a anarmonicidade do processo de três fônons. Assim, nossos resultados experimentais fornecem uma compreensão da influência do substrato e do número de camadas nas propriedades térmicas de GaS de poucas camadas, e a metodologia usada aqui pode ser estendida a outros materiais semelhantes.

**PALAVRAS-CHAVE:** espectroscopia Raman dependente da temperatura, Monochalcogeneto de metal pós-transição, sulfeto de gálio, transporte térmico em materiais 2D

<sup>1</sup> Pós-graduação em Ciência e Engenharia dos Materiais, Universidade Federal do Piauí, fdiasisva@ifpi.edu.br

<sup>2</sup> Faculdade de Física, Universidade Federal do Pará, rsalencar@ufpa.br

<sup>3</sup> Departamento de Física, Universidade Federal do Piauí, bartolomeu@ufpi.edu.br

