



## **CÁLCULOS DAS PROPRIEDADES OPTOELETRÔNICAS E VIBRACIONAIS DE NANOESTRUTURAS FORMADAS A PARTIR DE XS<sub>2</sub> (X = Mo, Cr, W).**

Mateus Fernandes Santos<sup>1</sup>, Nilton Ferreira Frazão<sup>2</sup>

### **RESUMO**

Os materiais nanoestruturados do tipo TMDs têm atraído atenção da comunidade científica já há algum tempo. Relatamos os resultados de um estudo teórico sobre o comportamento das estruturas, optoeletrônica, vibracional, incluindo espectros teóricos infravermelhos e Raman, dos materiais XS<sub>2</sub> (X = Mo, Cr, W) usando a teoria do funcional da densidade (DFT), considerando a densidade local e aproximação de gradiente generalizado, LDA e GGA, respectivamente. Parâmetros de rede calculados estão próximos de as medições experimentais. A função dielétrica e a absorção das estruturas cristalinas mostraram-se sensíveis ao plano de polarização da luz incidente. Obtivemos as estruturas de banda e densidade de estados (DOS), bem como picos teóricos de os espectros infravermelho (IR) e Raman na faixa de frequência de 0-800 cm<sup>-1</sup> foram analisados e atribuídos, considerando os pseudopotenciais conservados pelas normas. A comparação entre essas matérias revelou que ambos possuem potencial aplicação tecnológica em dispositivos nanoeletrônicos de transporte de carga.

**Palavras-chave:** TMDs, DFT, GGA.

---

<sup>1</sup> Aluno da Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Física e matemática, UFCEG, Cuité, PB, e-mail: mateus.fernandes@estudante.ufcg.edu.br

<sup>2</sup> Doutor, Professor do Magistério Superior, Unidade Acadêmica de Física e matemática UFCEG Cuité, PB, e-mail: nilton.ferreira@professor.ufcg.edu.br



***CALCULATIONS OF THE OPTOELECTRONIC AND VIBRATIONAL PROPERTIES OF NANOSTRUCTURES FORMED FROM XS<sub>2</sub> (X = Mo, Cr, W)..***

**ABSTRACT**

The nanostructured materials of the thymus TMDs have been attracting attention from the scientific community for some time. We report the results of a theoretical study on the behavior of structures, optoelectronics, vibrational, including theoretical infrared and Raman spectra, of XS<sub>2</sub> materials (X = Mo, Cr, W) using the Density Functional Theory (DFT), considering density location and generalized gradient approximation, LDA and GGA, respectively. Calculated lattice parameters are close to the experimental measurements. The dielectric function and the absorption of the crystalline structures were shown to be sensitive to the plane of polarization of the incident light. We obtained the band structures and state density (DOS), as well as theoretical peaks of the infrared (IR) and Raman spectra in the frequency range of 0-800 cm<sup>-1</sup> were analyzed and assigned, considering the pseudopotentials conserved by the standards. The comparison between these materials revealed that both have potential technological applications in nanoelectronic cargo transport devices.

**Keywords:** TMDs, DFT, GGA.