



## **AB INITIO ESTUDO DAS PROPRIEDADES OPTOELETRÔNICAS E VIBRACIONAIS DE NANOESTRUTURAS DO TIPO TMDs..**

Ronayde Emanuel de Lima<sup>1</sup>, Nilton Ferreira Frazão<sup>2</sup>

### **RESUMO**

Nos últimos anos a comunidade científica tem voltado a atenção para os materiais nanoestruturado, o que tem resultado em uma gama de pesquisas a respeito de suas propriedades físico-químicas. Os dicalcogênios de metal de transição (TMDs) são destaque entre esses materiais. Diante disto, este trabalho tem por objetivo contribuir com as pesquisas sobre TMDs do tipo XS<sub>2</sub> (X=Cr, Mo, W), a partir de estudos AB INITIO por meio da Teoria do Funcional da Densidade (DFT). Foi utilizado o módulo CASTEP alocado na workstation gráfica Materials Studio. Calculou-se para as fases 1T e 2H dos TMDs em estudo, as propriedades: estrutura de bandas, densidade de estado, absorção, condutividade, função dielétrica e cálculo de Phonon. A comparação dos resultados obtidos com o que está disposto na literatura revelou que esses materiais possuem grande potencial de aplicação tecnológica em dispositivos nanoeletrônicos de transporte de carga.

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

---

<sup>1</sup>Aluno do curso de licenciatura em física, Unidade acadêmica de física e matemática, UFCG, Cuité, PB, e-mail: ronayde.emanuel@estudante.ufcg.edu.br

<sup>2</sup>Doutor, professor do Magistério Superior, Unidade acadêmica de física e matemática, UFCG, Cuité, PB, e-mail: nilton.fraza@ufcg.edu.br



***AB INITIO STUDY OF OPTOELECTRONIC AND VIBRATIONAL PROPERTIES OF TMD NANOSTRUCTURES.***

**ABSTRACT**

In recent years, the scientific community has turned attention to nanostructured materials, which has resulted in a range of researches regarding their physical-painted properties. Transition metal dichalcogens (TMDs) are prominent among these materials. Therefore, this work aims to contribute to research on TMDs of type  $XS_2$  ( $X = Cr, Mo, W$ ), from AB INITIO studies through the Density Functional Theory (DFT). The CASTEP module allocated in the Materials Studio graphic workstation was used. For the 1T and 2H phases of the TMDs under study, the following properties were calculated: band structure, state density, absorption, conductivity, dielectric function and Phonon calculation. The comparison of the results obtained with what is provided in the literature revealed that these materials have great potential for technological application in nanoelectronic charge transport devices.

**Keywords:** TMDs, Nanomaterials, DFT.