



## **CARACTERIZAÇÃO AB INITIO DE NANOESTRUTURAS DO TIPO TMDs FORMADAS A PARTIR DE XS<sub>2</sub> (X = Mo, Cr, W)**

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

### **RESUMO**

Nas últimas décadas a comunidade científica tem demonstrado grande interesse em relação aos materiais nanoestruturados, o que tem resultado em um aumento 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). Utilizou-se o módulo CASTEP alocado na workstation gráfica Materials Studio. Calculou-se para a fase 1T dos TMDs em estudo, as propriedades: estrutura de bandas, absorção, condutividade, propriedades térmicas e função dielétrica. 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:** Ab Initio, TMD, 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.ferreira@professor.ufcg.edu.br



***AB INITIO CHARACTERIZATION OF TMDs TYPE NANOSTRUCTURES FORMED FROM XS<sub>2</sub> (X = Mo, Cr, W)***

**ABSTRACT**

In recent decades, the scientific community has shown great interest in nanostructured materials, which has increased research on their physicochemical properties. Transition metal dichalcogenes (TMDs) are prominent among these materials. Therefore, this work aims to contribute to research on TMDs of the XS<sub>2</sub> type (X=Cr, Mo, W), from AB INITIO studies through the Density Functional Theory (DFT). The CASTEP module allocated in the Materials Studio graphics workstation was used. For the 1T phase of the TMDs under study, the following properties were calculated: band structure, absorption, conductivity, thermal properties and dielectric function. The comparison of the results obtained with what is available in the literature revealed that these materials have great potential for technological application in nanoelectronic charge transport devices.

**Keywords:** Ab Initio, TMD, DFT.