



MODELAGEM COMPUTACIONAL E CARACTERIZAÇÃO AB INITIO DE PROPRIEDADES ÓPTICAS E VIBRACIONAIS DE NANOESTRUTURAS TMDs

Genezio Pereira dos Santos Filho¹, Nilton Ferreira Frazão²

RESUMO

Após dichalcogenetos de metais de transição (TMDs) terem ganhado destaque devido às suas propriedades eletrônicas e mecânicas. Esses TMDs, com a fórmula química XY_2 , onde X é um metal de transição e Y é um calcogênio, possuem potencial nanotecnológico significativo, variando entre isolantes, semimetais, metais e semicondutores, e são especialmente promissores na optoeletrônica. Desta forma emergiu os tricalcogenetos de metais de transição (3D) que também se mostraram promissores, principalmente para dispositivos eletrônicos, optoeletrônicos e fotônicos, e possuem potencial em aplicações fotovoltaicas. Nos tempos atuais a preocupação com a eficiência e o escasseamento de fontes de energéticas esses materiais são atraentes pelas suas propriedades optoeletrônicas, desta forma interessando a comunidade científica para possíveis descobertas e análise através dessa classe de material já que apresentam características novas que podem ser descobertas e assim aprimoradas. Com fórmula química XY_3 , esses materiais, incluindo MoS_3 , CrS_3 , WS_3 , $MoSe_3$, $CrSe_3$ e WSe_3 , são estudados nas fases ortorrômbicas (3R), trigonal (1T) e monoclinica (1T'), apresentando ter características de condutor nas fases 3R e 1T e apresenta comportamento de semimetais na fase 1T', estudos vibracionais indicam materiais virtuais, As direções cristalográficas são essenciais para entender a anisotropia óptica o espectro Raman ajuda a identificar e comparar as assinaturas vibracionais únicas de cada material

Palavras-chave: Dichalcogenetos de Metais de Transição, fotovoltaicos, tricalcogenetos de metais de transição.

¹Genezio Pereira dos Santos Filho Física, Unidade de Acadêmica de Física e Matemática UAFM, UFPG, Campina Grande, PB, e-mail: genezio.pereira@estudante.ufcg.edu.br

²<Titulação>, <Função>, <Departamento>, UFPG, Campina Grande, PB, e-mail: emaildoorientador@seuprovedor.com

COMPUTATIONAL MODELING AND AB INITIO CHARACTERIZATION OF OPTICAL AND VIBRATIONAL PROPERTIES OF TMDS NANOSTRUCTURES.

ABSTRACT

After transition metal dichalcogenides (TMDs) gained prominence due to their electronic and mechanical properties. These TMDs, with the chemical formula XY_2 , where X is a transition metal and Y is a chalcogen. In this way, transition metal trichalcogenides (3D) emerged, which also showed promise, mainly for electronic, optoelectronic and photonic devices, and have potential in photovoltaic applications. Nowadays, there is concern about efficiency and the scarcity of energy sources, these materials are attractive due to their optoelectronic properties, thus making the scientific community interested in possible discoveries and analyzes through this class of material as they present new characteristics that can be discovered and thus improved. With chemical formula $1T'$ and presents the behavior of semimetals in the $1T'$ phase, vibrational studies identify virtual materials, Crystallographic directions are essential to understand optical anisotropy, the Raman spectrum helps to identify and compare the unique vibrational signatures of each material

Keywords: Transition metal dichalcogenides, photovoltaics, transition metal trichalcogenides.