



## **MODELAGEM COMPUTACIONAL E CÁLCULO AB INITIO DE PROPRIEDADES DE NANOESTRUTURAS TMDs: UTILIZANDO DFT.**

**Genezio Pereira dos Santos Filho<sup>1</sup>, Nilton Ferreira Frazão<sup>2</sup>**

### **RESUMO**

Analisando dichalcogenetos de metais de transição (TMDs) nas fases 1H, 1T e 1T', pode-se observar que estes TMDs, nomeadamente MoS<sub>2</sub>, CrS<sub>2</sub> e WS<sub>2</sub>, fornecem dados estruturais diferentes em cada uma destas fases. Esta análise revelou que a fase 1H apresentou maior estabilidade durante a irradiação da fase, seguida pela 1T e finalmente 1T', que apresentou menor estabilidade e maior cristalinidade em comparação às demais fases. Os dichalcogenetos de metais de transição (TMDs) são materiais sólidos cujas propriedades elétricas e ópticas são fortemente influenciadas por bandas de energia específicas. As estruturas multicamadas fornecem flexibilidade para ajustar essas propriedades por meio de dopagem, modificação e empilhamento, tornando-as adequadas para uma variedade de aplicações. A existência de "lacunas" na banda determina se ela se comporta como semicondutor ou condutor, sendo a fase T geralmente condutora, enquanto as fases H e T' são semicondutoras. Estudos de espectroscopia Raman mostraram que as vibrações acústicas nestes materiais têm um efeito significativo na sua condutividade elétrica, levando à formação de polarons acústicos. As estruturas de espalhamento de fônons também desempenham um papel importante na estabilidade de fase. Além disso, o espectro de absorção óptica fornece informações sobre a frequência máxima de absorção, que pode ser utilizada em dispositivos fotovoltaicos e ópticos. Esta revisão abrangente fornece uma compreensão abrangente das propriedades e aplicações dos TMDs, tornando-os adequados para uma variedade de aplicações em eletrônica, óptica e fotovoltaica.

**Palavras-chave:** Dichalcogenetos de Metais de Transição, Análise Estrutural, Propriedades Eletrônicas e Ópticas.

---

<sup>1</sup> Genezio Pereira dos Santos Filho, Licenciatura em Física, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, Centro de educação e Saúde, UFCG, Cuité, PB, e-mail: genezio.pereira@estudante.ufcg.edu.br

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



***COMPUTATIONAL MODELING AND AB INITIO CALCULATION OF TMDs  
NANOSTRUCTURE PROPERTIES: EMPLOYING DFT.***

**ABSTRACT**

Analyzing Transition Metal Dichalcogenides (TMDs) in the 1H, 1T, and 1T' phases reveals distinct structural characteristics in each of these phases. Notably, TMDs such as MoS<sub>2</sub>, CrS<sub>2</sub>, and WS<sub>2</sub> exhibit varying structural data across these phases. This analysis has unveiled that the 1H phase demonstrates higher stability during phase irradiation, followed by 1T, and finally 1T', which exhibits lower stability and greater crystallinity in comparison to the other phases. Transition Metal Dichalcogenides (TMDs) are solid materials whose electrical and optical properties are strongly influenced by specific energy bands. Multilayered structures provide flexibility to tailor these properties through doping, modification, and stacking, rendering them suitable for a range of applications. The presence of "band gaps" determines whether they behave as semiconductors or conductors, with the T phase typically being conductive, while the H and T' phases are semiconducting. Raman spectroscopy studies have shown that acoustic vibrations in these materials significantly affect their electrical conductivity, leading to the formation of acoustic polarons. Phonon scattering structures also play a crucial role in phase stability. Furthermore, the optical absorption spectrum provides insights into the maximum absorption frequency, which can be harnessed in photovoltaic and optical devices. This comprehensive review offers a comprehensive understanding of the properties and applications of TMDs, making them suitable for a variety of applications in electronics, optics, and photovoltaics.

**Keywords:** Transition Metal Dichalcogenides, Structural Analysis, Electronic and Optical Properties.