INVESTIGAÇÃO DFT DAS PROPRIEDADES ESTRUTURAIS E ELETRÔNICAS DA LIGA 2D TMD $MOWSe_4$

Aristóteles da Conceição Costa Filho[1]

Ytalo Arthur Diniz Correa[2]

Edvan Moreira[3]

INTRODUÇÃO

A análise teórica e experimental dos materiais bidimensional, no cenário atual, está em crescente desenvolvimento, especialmente os Dicalcogenetos Metais de Transição, TMDs, justificando-se pelas suas propriedades eletrônicas, pela presença de bandgap com valor moderadamente satisfatório para a produção de dispositivos eletrônicos (BRACHT, 2024).

Os TMDs e suas ligas pertencem ao grupo de materiais com estruturas estequiométricas iniciais do tipo XY_2, no qual o X representa um metal de transição dos grupos IV-VI da tabela periódica e Y é o calcogênio, como Selênio e Enxofre (WANG *et al*., 2015).

Ademais, estes materiais nanoestruturados apresentam alta flexibilidade, o que contribui para sua aplicação em materiais eletrônicos. Um TMD que recebe bastante atenção na comunidade científica é o $MoSe_2$ e o WSe_2, o Disseleneto de Molibdênio e o Disseleneto de Tungstênio pelas suas propriedades semicondutoras.

Diante do exposto, o presente trabalho visa realizar a modelagem computacional e analisar as propriedades estruturais e eletrônicas de uma nova liga bidimensional $MoWSe_4$, comparando seus resultados com as monocamadas $MoSe_2$ e WSe_2, via formalismo da Teoria Funcional de Densidade (DFT), considerando a aproximação GGA-PBE.

METODOLOGIA

Os cálculos computacionais foram realizados utilizando o software *Materials Studio* CASTEP, um código baseado em mecânica quântica de primeiros princípios usado para realizar cálculos de estrutura eletrônica em cristais, superfícies e moléculas (CLARK *et al*., 2005).

Para a realização dos cálculos, utilizou-se o funcional GGA-PBE que melhora a aproximação em relação à local por considerar não apenas a densidade eletrônica local, mas também seu gradiente espacial (BRACHT, 2024). O procedimento consistiu inicialmente na otimização de geometria dos materiais, empregando critérios de convergência para levar os compostos ao estado fundamental de menor energia. Em seguida, foram calculadas as propriedades eletrônicas de banda e ópticas, com energia de 720 eV.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Propriedades Estruturais

Inicialmente, foram analisadas as propriedades estruturais do $MoSe_2$ e WSe_2 por meio de cálculos de otimização de geometria. Os parâmetros de rede obtidos pelo funcional GGA-PBE estão apresentados no Quadro 1.

1 Discente em Física Licenciatura, Universidade Estadual do Maranhão – UEMA. E-mail: aristoteles34qp@gmail.com
2 Discente em Física Licenciatura, Universidade Estadual do Maranhão – UEMA. E-mail: ytaloarthur145@gmail.com
3 Doutor em Física, Docente do Departamento de Física – DFIS/CECEN, Universidade Estadual do Maranhão – UEMA. E-mail: edvan.moreira@fisica.uema.br

Quadro 1 – Parâmetros Estruturais do $MoSe_2$ e WSe_2

Parâmetros	$MoSe_2$	WSe_2
a = b [Å] GGA-PBE	3.3011	3.2797
d(Γ−Y) [Å] GGA-PBE	3.304	3.323
d(Γ−X) [Å] GGA-PBE	2.534	2.519
α = β	90°	90°
γ	120°	120°
a = b [Å] Exp.	3.288	3.286
d(Γ−Y) [Å] Exp.	3.335	3.34
a = b [Å] GGA-PBE [ref]	3.319	3.296
d(Γ−X) [Å] PBE [ref]	2.55	2.55

Fonte: MATHIAS et al., 2023 (adaptada pelo autor).

A liga $MoWSe_4$ apresentou uma configuração monoclínica ($\alpha = \gamma = 90^{\circ}$, $\beta \approx 89{,}99^{\circ}$) diferenciando-se das estruturas hexagonais de suas monocamadas individuais. Os parâmetros etruturais obtidos estão apresentados no Quadro 2.

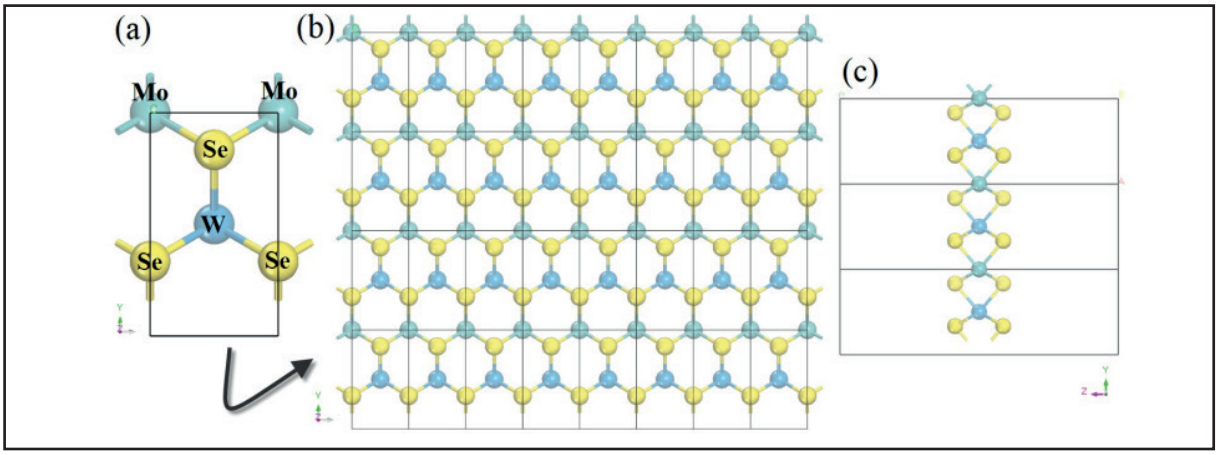
Quadro 2 – Parâmetros Estruturais do $MoWSe_4$

Parâmetros	$MoWSe_4$
a	5.737703 Å
b	3.316656 Å
c	18.961571 Å
α = γ	90°
β	89.99°
Volume	360.83844 ų

Fonte: Autoria própria, 2026.

Ao juntar e replicar as células monoclínicas, forma-se uma monocamada com arranjo hexagonal, similar ao grafeno (DUAN; ZHANG, 2024) como pode ser visto na Figura 1.

Figura 1- (a) célula unitária do $MoWSe_4$; (b) célula unitária replicada ao longo das direções x e y; (c) espessura da liga $MoWSe_4$.



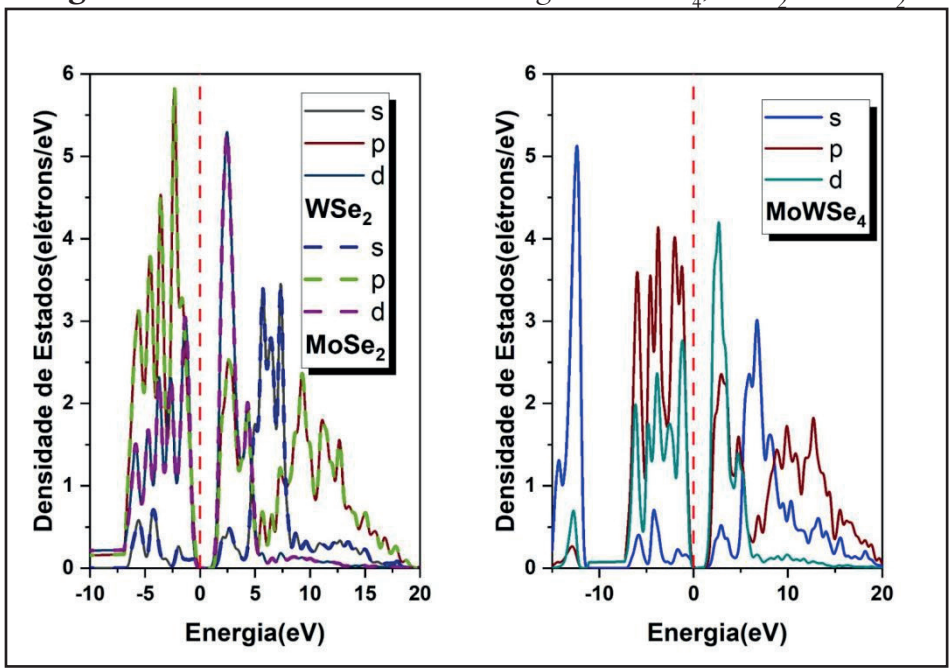
Fonte: Autoria própria, 2026

Propriedades Eletrônicas

A análise do gráfico da densidade de estados (DOS) revelou que a liga $MoWSe_4$ apresenta uma predominância de orbitais similar às monocamadas $MoSe_2$ e WSe_2. Os orbitais

d das monocamadas dominam as regiões próximas ao nível de Fermi na banda de condução, responsável pelo bandgap e caráter semicondutor da liga, como pode ser visto na Figura 2.

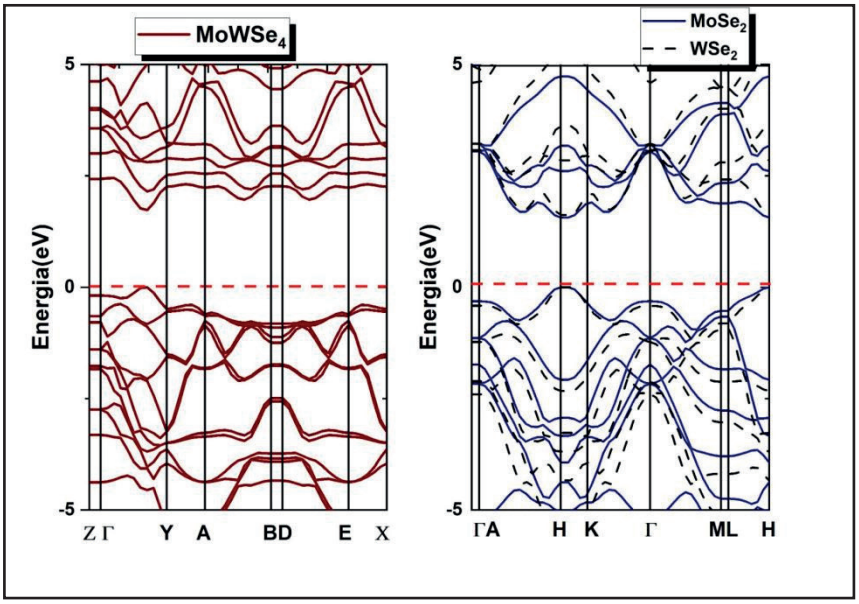
Figura 2- Densidade de estados das ligas $MoWSe_4$, WSe_2 e $MoSe_2$.



Fonte: Autoria própria, 2026

A fim de estudar o bandgap das ligas, obtém-se o gráfico da estrutura de bandas, no qual o valor do gap é estimado pela diferença de energia entre o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução. Quando ocorrem no mesmo ponto da zona de Brillouin, o gap é classificado como direto. A estrutura das bandas da liga $MoWSe_4$, $MoSe_2$ e WSe_2 pode ser vista na Figura 3.

Figura 3 - Estrutura de bandas eletrônicas das ligas $MoWSe_4$, WSe_2 e $MoSe_2$.



Fonte: Autoria própria, 2026.

O bandgap das monocamadas $MoSe_2$ e WSe_2 é do tipo direto, ou seja, a transição eletrônica entre a banda de valência e a banda de condução ocorrem no mesmo ponto, com o elétron absorvendo ou emitindo um fóton. Os valores obtidos foram, respectivamente, 1,566 eV e 1,536 eV. A liga $MoWSe_4$ também apresenta um bandgap direto, com o valor de 1,736 eV.

CONCLUSÃO

Os resultados obtidos revelaram propriedades estruturais e eletrônicas promissoras do $MoWSe_4$, se diferenciando das respectivas monocamadas $MoSe_2$ e WSe_2. A configuração monoclínica da liga, em contraste com as demais, sugere uma reorganização no arranjo atômico, sendo provável pela combinação do Mo e W. Porém, ao replicar nas direções x e y, apresenta uma forma similar a grafeno, hexagonal, como evidenciado na Figura 1.

Além disso, as análises das propriedades eletrônicas, por meio do gráfico de densidade de estados e estruturas de bandas, confirmaram que o $MoWSe_4$ exibe um bandgap direto. Portanto, os resultados sugerem que esta nova liga tem potencial industrial para a aplicação de dispositivos eletrônicos diversos, devido a sua estabilidade estrutural e propriedades eletrônicas ajustáveis.

REFERÊNCIAS

BORN, M.; OPPENHEIMER, J. R. **Zur Quantentheorie der Molekeln**. *Annalen der Physik*, v. 84, p. 457-484, 1927.

BRACHT, J. M. **Dicalcogenetos de metais de transição em poucas camadas: o papel das espécies de calcogênio e suas propriedades não convencionais**. 2024. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2024.

CALLISTER, W. D. **Ciência e engenharia de materiais: uma introdução**. Rio de Janeiro: LTC, 2020.

CAMARGOS, J. S. F.; SEMMER, A. de O.; SILVA, S. N. da. **Características e aplicações do grafeno e do óxido de grafeno e as principais rotas para síntese**. *The Journal of Engineering and Exact Sciences*, v. 3, n. 8, p. 1118-1130, 2017.

CAPELLE, K. **A bird's-eye view of density-functional theory**. *Brazilian Journal of Physics*, v. 36, p. 1318-1343, 2006.

CLARK, S. J. et al. **First principles methods using CASTEP**. *Zeitschrift für Kristallographie – Crystalline Materials*, v. 220, n. 5-6, p. 567-570, 2005.

DING, Y. et al. **First principles study of structural, vibrational and electronic properties of graphene-like MX_2 (M = Mo, Nb, W, Ta; X = S, Se, Te) monolayers**. *Physica B: Condensed Matter*, v. 406, n. 11, p. 2254-2260, 2011.

DUAN, X.; ZHANG, H. **Introduction: two-dimensional layered transition metal dichalcogenides**. *Chemical Reviews*, v. 124, n. 19, p. 10619-10622, 2024. Disponível em: https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.4c00586.

KITTEL, C. **Introdução à física do estado sólido**. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2000.

KORMÁNYOS, A. et al. **k·p theory for two-dimensional transition metal dichalcogenide semiconductors**. *2D Materials*, v. 2, n. 2, p. 022001, 2015.

MATHIAS, A. et al. **Two-dimensional dichalcogenides of type XY_2 (X = Mo, W; Y = S, Se): a DFT study of the structural, optoelectronic, thermodynamic properties, infrared, and Raman spectra**. *Journal of Materials Research*, v. 38, n. 8, p. 2072-2083, 2023.

NUSSENZVEIG, H. M. **Curso de física básica: ótica, relatividade, física quântica**. São Paulo: Blucher, 2014. v. 4.

PEDROZA, A. C. **Teoria do funcional da densidade: uma possível solução para o problema de muitos elétrons da mecânica quântica**. *Physicae Organum – Revista dos Estudantes de Física da UnB*, v. 2, n. 1, 2016.

PEREIRA, M. V. D. et al. **Efeitos termo-elétricos e magnéticos das monocamadas TMD 1T'-WTe_2 e 1T'-$RuWTe_2$ via simulação computacional**. *Revista JRG de Estudos Acadêmicos*, v. 7, n. 15, p. e151362, 2024.

SEGUNDO, J.; VILAR, E. O. **Grafeno: uma revisão sobre propriedades, mecanismos de produção e potenciais aplicações em sistemas energéticos**. *Revista Eletrônica de Materiais e Processos*, v. 11, n. 2, p. 54-57, 2016.

WANG, H. et al. **Physical and chemical tuning of two-dimensional transition metal dichalcogenides**. *Chemical Society Reviews*, v. 44, n. 9, p. 2664-2680, 2015.

YU, H. S.; LI, S. L.; TRUHLAR, D. G. **Perspective: Kohn-Sham density functional theory descending a staircase**. *The Journal of Chemical Physics*, v. 145, n. 13, 2016.