

# INVESTIGAÇÃO DAS PROPRIEDADES ELETRÔNICAS E ESTRUTURAIS DE MATERIAIS BIDIMENSIONAIS

Cézar Augusto Meira Carmo Filho<sup>1</sup>, Edward Ferraz de Almeida Junior<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Discente do Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias (CCET/UFOB, Barreiras-Ba/Brasil),  
cezar.f9736@ufob.edu.br,*

<sup>2</sup>*Docente do Centro das Ciências Exatas e das Tecnologias (CCET/UFOB, Barreiras-Ba/Brasil),  
edward.almeida@ufob.edu.br*

O presente trabalho concentra-se no estudo das propriedades estruturais e eletrônicas do grafeno, MoS<sub>2</sub> e WSe<sub>2</sub>. O nível de teoria adotado para os presentes cálculos foi a teoria do funcional da densidade (DFT) dentro de sua aproximação de gradiente generalizado (GGA) com energia de troca-correlação e polarização de spin, considerando um cálculo colinear, para avaliar a magnetização ao longo do eixo z, por meio do software Quantum Espresso. Foi realizada a análise da estrutura atômica dos materiais, considerando a distância entre camadas e as distâncias interatômicas na estrutura cristalina, também foi feita uma investigação detalhada de suas propriedades eletrônicas. Para isso, foram realizadas simulações que permitiram obter a densidade de estados total (DOS) e projetada (PDOS), além da estrutura de bandas e análise do band gap. Os resultados foram comparados com a literatura atual, com o objetivo de promover o treinamento e a aprendizagem no uso dessas ferramentas e na interpretação dos dados gerados. O band gap indireto do MoS<sub>2</sub> foi calculado e obtivemos o resultado de 1,11 eV, próximo ao valor da literatura de 1,2 eV, enquanto o WSe<sub>2</sub> apresentou um band gap indireto de 1,21 eV, dentro do intervalo reportado na literatura (1,2 - 1,6 eV). Esses resultados são consistentes com os valores experimentais encontrados na literatura, confirmando a validade das simulações realizadas.

**Palavras-Chave:** Estrutura Eletrônica, Sistemas Bidimensionais, Novos Materiais.

**Agência Financiadora:** FAPESB (Cotas).