REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

DESIGN COMPUTACIONAL DA LIGA TMD $CrMoS_4$ – UM ESTUDO VIA DFT

COMPUTATIONAL DESIGN OF THE TMD $CrMoS_4$ – A STUDY BASED ON THE DFT

DISEÑO COMPUTACIONAL DE LA ALEACIÓN TMD $CrMoS_4$ - UN ESTUDIO MEDIANTE DFT

Pedro Afonso da Silva Batista
Graduado em Física Licenciatura
Universidade Estadual do Maranhão (UEMA), Brasil
E-mail: pedro.20210008190@aluno.uema.br

Emilly Suellen Amorim Silva
Graduada em Física Licenciatura
Universidade Estadual do Maranhão (UEMA), Brasil
E-mail: emillysuellena@gmail.com

Caleb Nathan Navis
Mestre em Química
Universidade Estadual do Maranhão, Brasil
E-mail: kalebnavis@hotmail.com

Ubiraci Silva Nascimento
Doutor em Engenharia Mecânica
Universidade Estadual do Maranhão, Brasil
E-mail: ubiracisn@gmail.com

Leonardo de Souza Barbosa
Doutor em Física
Universidade Estadual do Maranhão, Brasil
E-mail: leofis94@gmail.com

David Lima Azevedo
Doutor em Física
Universidade de Brasília, Brasil
E-mail: david888azv@gmail.com

Edvan Moreira
Doutor em Física
Universidade Estadual do Maranhão, Brasil
E-mail: edvan.moreira@fisica.uema.br

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

Resumo

Os Dicalcogenetos de Metal de Transição - TMDs são materiais bidimensionais com estequiometria, comumente, XY_2, no qual X é o metal de transição e Y o calcogênio. Este grupo possui grande relevância de estudo pelo corpo científico, devido os materiais que o compõe possuírem monocamada análoga a do grafeno. Tal semelhança proporciona o foco da comunidade científica em realizar estudos acerca das propriedades físicas destes materiais, a fim de se encontrar TMDs com propriedades similares ao grafeno. Este grupo, diferente do grafeno que possui *bandgap* nulo, possui *bandgap* intermediário, isto é, os TMDs são semicondutores. Por isso, são perfeitos candidatos a serem integrados em diversos setores, sobretudo na indústria optoeletrônica. Nesse sentido, a presente pesquisa visa explanar algumas propriedades físicas da monocamada da liga TMD $CrMoS_4$, que é um material sem nenhum estudo na literatura seja teórico ou experimental. Os resultados da liga TMD $CrMoS_4$ podem ser comparáveis às monocamadas dos TMDs 2H – CrS_2 e 2H – MoS_2, que são materiais com grande acervo de dados na literatura. A metodologia da pesquisa consistiu no design computacional das células primitivas dos TMDs 2H – CrS_2 e 2H – MoS_2 e da liga TMD $CrMoS_4$. Após a modelagem, a partir do software *Material Studio* módulo CASTEP a partir da Aproximação do Gradiente Generalizado – GGA, via a Teoria do Funcional da Densidade – DFT, realizou-se os cálculos computacionais das propriedades optoeletrônicas a partir das células primitivas em seu estado fundamental. Os resultados explanam que ambas as monocamadas apresentam *bandgap* entre o intervalo de 0,90 eV a 1,20 eV. As conclusões sugerem que ambos os materiais em estudo são estáveis estruturalmente e semicondutores.
Palavras-chave: Propriedades optoeletrônicas; Liga TMD $CrMoS_4$; Teoria do funcional da densidade.

Abstract

Transition Metal Dichalcogenides (TMDs) are two-dimensional materials with a typical stoichiometry of XY_2, where X represents a transition metal and Y a chalcogen. This group is of significant interest to the scientific community because its constituent materials possess a monolayer analogous to graphene. Such similarity has focused research on the physical properties of these materials in search of TMDs with characteristics comparable to graphene. Unlike graphene, which has a zero bandgap, TMDs exhibit an intermediate bandgap, classifying them as semiconductors. Consequently, they are ideal candidates for integrationinto various sectors, particularly in the optoelectronic industry. In this context, the present study aims to elucidate certain physical properties of the monolayer of the TMD alloy $CrMoS_4$, a material that has not been explored in either theoretical or experimental literature. The results for the $CrMoS_4$ alloy can be compared to those of the monolayers of 2H–CrS_2 and 2H–MoS_2, which are well-documented in the literature. The research methodology involved the computational design of the primitive cells of 2H–CrS_2, 2H–MoS_2, and the TMD alloy $CrMoS_4$. Following the design phase, computational calculations of the optoelectronic properties were performed on the primitive cells in their ground state using Material Studio's CASTEP module under the Generalized Gradient Approximation (GGA) within Density Functional Theory (DFT). The results indicate that both monolayers exhibit a bandgap ranging from 0.90 eV to 1.20 eV, and the conclusions suggest that the materials under study are both structurally stable and semiconductors.
Keywords: Optoelectronic Properties; TMD Alloy $CrMoS_4$; Density Functional Theory.

Resumen

Los dicalcogenuros de metales de transición (TMD) son materiales bidimensionales con una estequiometría típica de XY_2, donde X representa un metal de transición y Y un calcógeno. Este grupo es de gran interés para la comunidad científica debido a que sus materiales constituyentes poseen una monocapa análoga al grafeno. Dicha similitud ha enfocado la investigación en las propiedades físicas de estos materiales en la búsqueda de TMD con características comparables al grafeno. A diferencia del grafeno, que tiene una banda prohibida cero, los TMD exhiben una banda prohibida

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

intermedia, clasificándolos como semiconductores. En consecuencia, son candidatos ideales para la integración en diversos sectores, particularmente en la industria optoelectrónica. En este contexto, el presente estudio tiene como objetivo dilucidar ciertas propiedades físicas de la monocapa de la aleación TMD $CrMoS_4$, un material que no ha sido explorado ni en la literatura teórica ni experimental. Los resultados para la aleación $CrMoS_4$ pueden compararse con los de las monocapas de 2H–CrS_2 y 2H–MoS_2, bien documentadas en la literatura. La metodología de investigación implicó el diseño computacional de las celdas primitivas de 2H–CrS_2, 2H–MoS_2 y la aleación TMD $CrMoS_4$. Tras la fase de diseño, se realizaron cálculos computacionales de las propiedades optoelectrónicas en las celdas primitivas en su estado fundamental utilizando el módulo CASTEP de Material Studio bajo la Aproximación de Gradiente Generalizado (GGA) dentro de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). Los resultados indican que ambas monocapas exhiben una banda prohibida que oscila entre 0,90 eV y 1,20 eV, y las conclusiones sugieren que los materiales en estudio son estructuralmente estables y semiconductores.
Palabras clave: Propiedades optoelectrónicas; Aleación TMD $CrMoS_4$; Teoría del funcional de la densidad.

1. Introdução

No ano de 2004 descobriu-se a forma alotrópica mais recente sintetizada do carbono, que foi denominada de Grafeno. Este material, conforme Segundo e Vilar (2016, p. 55), é um material que consiste em uma monocamada plana, com os átomos de carbono distribuídos em células hexagonais e com os átomos hibridizados com orbital sp^2, resultando em um elétron livre por átomo no orbital *p*. O grafeno é uma monocamada que apresenta *bandgap* nulo, isto é, quando interage com um campo elétrico externo, seus elétrons conseguem fluir com facilidade da banda de valência para a de condução, visto que as bandas estão sobrepostas. Com essas características, o grafeno é um material que apresenta grande potencial de aplicação em diversos itinerários do conhecimento, desde a indústria optoeletrônica, da saúde, meio ambiente e alimentícia e dentre outros setores (HASAN e MARION, 2016).

Entretanto, de acordo com Rebello, Nascimento e Amarante (2018, p. 217), a logística atual para a confecção de dispositivos eletrônicos passaria por mudanças uma vez que é utilizado o silício como principal matéria-prima desses dispositivos. Em outras palavras, a logística do setor opto-eletrônico necessitaria readaptar os seus métodos de produção substituindo o silício, que é um semicondutor com bandgap não nulo, para o grafeno, que possui bandgap nulo e, por isso, é caracterizado como um condutor (HASAN e MARION, 2016; SEGUNDO e VILAR, 2016; REBELLO, NASCIMENTO e AMARANTE, 2018).

Nesse contexto, surge o interesse por parte da comunidade científica em investigar materiais ou grupos de materiais que possuam tanto estrutura quanto

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

propriedades análogas as do grafeno (NAVIS, BITTENCOURT, *et al.*, 2024). Dentre as possibilidades, pode-se destacar o grupo dos Dicalcogenetos de Metal de Transição (*Transition Metal Dichalcogenides* – TMDs), que é um grupo formado pela junção dos metais de transição com os calcogênios. Nesse grupo, as estequiometrias mais comuns são da forma XY_2 (X = Cr, Mo, W; Y = S, Se), como, os TMDs 2H-CrS_2, 2H-MoS_2, 2H-$MoSe_2$, 2H-WSe_2 e dentre outros (WANG, KALANTAR-ZADEH, *et al.*, 2012; MOREIRA, FREITAS e AZEVEDO, 2020). Desse modo, abre o caminho para se estudar TMDs com estequiometria diferente da XY_2, como a liga TMD $CrMoS_4$. Essa liga TMD possui estequiometria da formada por dois átomos de metal de transição diferentes e quatro átomos do mesmo tipo de calcogênio na célula primitiva.

Desse modo, a presente pesquisa visa realizar o estudo acerca das propriedades estruturais e optoeletrônicas da monocamada da liga TMD $CrMoS_4$, comparando os resultados obtidos com os TMDs 2H-CrS_2 e 2H-MoS_2, a fim de validar os resultados do $CrMoS_4$. Para realizar esse estudo, utilizou-se o *software Material Studio* módulo *CASTEP*, que é um módulo baseado na teoria do funcional da densidade – DFT, via aproximação do gradiente generalizado – GGA, para convergir os TMDs CrS_2, MoS_2 e a liga TMD $CrMoS_4$ ao estado fundamental de energia, através do cálculo de optimização de geometria. Após a convergência dos materiais ao estudo fundamental, realizou-se o cálculo das propriedades estruturais e optoeletrônicas. A partir dos resultados obtidos, realizou-se a comparação dos TMDs CrS_2 e MoS_2 com a Liga TMD $CrMoS_4$, além de comparar os resultados dos TMDs CrS_2 e MoS_2 aos resultados teóricos e experimentais da literatura.

2. Revisão da Literatura

Os materiais em análise são caracterizados como sólidos cristalinos, isto é, os átomos que os compõe são ordenados de modo periódico. Por isso, toda propriedade que dependa da posição é invariante. Qualquer operação de translação que ocorra nos materiais, segue a condição $T = \boldsymbol{u}_1 a_1 + \boldsymbol{u}_2 a_2 + \boldsymbol{u}_3 a_3$, *onde* $\boldsymbol{u}_{1,2,3}$ são constantes e $a_{1,2,3}$ são os vetores de translação (KITTEL, 2013).

Nesse sentido, para todo sólido cristalino há um menor padrão de repetição,

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

que surge em decorrência da periodicidade microscópica do material. Este padrão de repetição denomina-se célula primitiva. Os TMDs CrS_2 e MoS_2 suas células primitivas caracterizam-se como rede hexagonal (C2DB, 2018). Para a liga de TMD $CrMoS_4$, sua célula primitiva caracteriza-se como rede ortorrômbica.

No banco de dados cristalográficos C2DB, obteve-se dados teóricos acerca os TMDs CrS_2 e MoS_2, acerca das propriedades estruturais, optoeletrônicas e dentre outras (C2DB, 2018). A liga TMD $CrMoS_4$, por sua vez, é uma nanomaterial sem nenhuma publicação tanto teórica quanto experimental encontrada e, portanto, essa pesquisa é a primeira caracterização teórica acerca deste material.

Em relação às propriedades eletrônicas, de acordo com os dados encontrados no C2DB sobre os TMDs CrS_2 e MoS_2, verificou-se que o *bandgap* destes dois nanomateriais é um valor por volta de 1 eV a 3 eV (C2DB, 2018). Enquanto para as propriedades ópticas, observou-se que ambos os materiais apresentam característica anisotrópicas nos gráficos de absorção e função dielétrica (parte real e imaginária) (C2DB, 2018).

Para a obtenção das propriedades estruturais e optoeletrônicas utilizou-se da Teoria do Funcional da Densidade – DFT para a obtenção delas. Esta teoria é baseada em dois pilares: os teoremas de Hohenberg e Kohn e o método de Kohn – Sham (MOREIRA, FREITAS e AZEVEDO, 2020). O método de Kohn – Sham afirma que a obtenção de qualquer informação do sistema em análise pode ser obtida a partir da densidade eletrônica associada ao estado fundamental do sistema em análise (MATHIAS, MOUCHEREK, *et al.*, 2023). Para obter essas informações via a densidade do estado fundamental, é necessário aplicar o formalismo de Kohn – Sham, que propõe criar um sistema fictício cujo há poucas interações, mas a densidade é a mesma do sistema original. Embora os elétrons do sistema não interajam explicitamente entre si, os efeitos da interação elétron – elétron são incorporados de forma efetiva pelo termo Hartree e pelo funcional de troca-correlação (PEREIRA, BATISTA, *et al.*, 2024).

3. Metodologia

Para a execução desta pesquisa realizou-se, primeiramente, revisão de

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

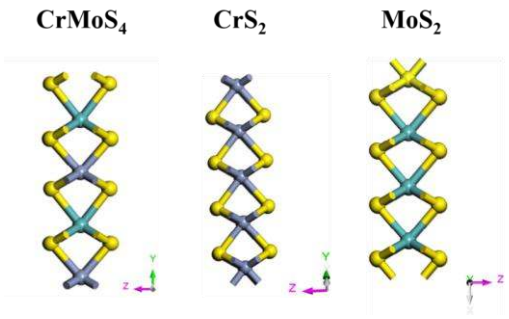
literatura acerca dos nanomateriais em estudo, via *google* acadêmico, bancos de dados cristalográficos (como o C2DB) periódicos contidos na *Web of Science* e *Scorpus.* Posteriormente, realizou-se a execução metodológica no *software Material Studio*, a fim de otimizar as células primitivas em estudo e, a partir delas optimizadas, obter os resultados das propriedades estruturais e optoeletrônicas.

4. Resultados e Discussão

4.1 Optimização de Geometria

As monocamadas em estudo estão contidas no grupo dos dicalcogenetos de metais de transição – TMDs e, assim, são formadas pela junção de metais de transição com calcogênios. Nesse grupo, as estequiometrias mais comuns na natureza são os TMDs da forma XY_2, como o MoS_2. Dado isso, existem outras estequiometrias contidas no grupo dos TMDs além da XY_2, como a das ligas TMD. Essa estequiometria é caracterizada por possuir dois átomos de metais de transição e quatro calcogênios e, portanto, sendo uma liga TMD. Visualmente, conforme a espessuras do TMD 2H-CrS_2 e 2H-MoS_2 e da liga TMD $CrMoS_4$ na figura 1, é possível diferenciar um TMD de uma liga TMD através dos átomos de metais de transição, visto que os TMDs com estequiometria XY_2 possuem forma Y – X – Y enquanto a liga TMD, de estequiometria MXY_4, intercala os átomos de metal de transição e possui a forma Y – M – Y e Y – X – Y intercalada, isto é, os átomos de metal de transição são ensanduichados de modo intercalado.

Figura 1 - Espessura da liga TMD $CrMoS_4$ e dos TMDs CrS_2 e MoS_2.



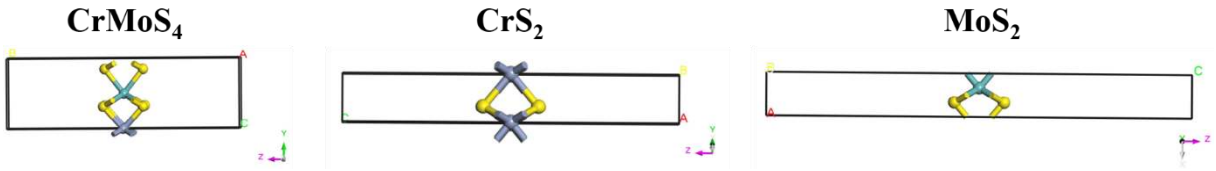
Fonte: Autoria própria (2026).

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

Os TMDs CrS_2 e MoS_2 possuem células primitivas caracterizadas como hexagonal compacta e, portanto, parâmetros $a = b \neq c$ e ângulos $\alpha = \beta = 90^o$ e $\gamma = 120^o$. A liga TMD $CrMoS_4$ possui célula primitiva ortorrômbica e, portanto, parâmetros $a \neq b \neq c$ e $\alpha = \beta = \gamma = 90^o$. Nas células primitivas os parâmetros *a*, *b* e *c* são paralelos ao eixo *x*, *y* e *z*, respectivamente (ver figura 2).

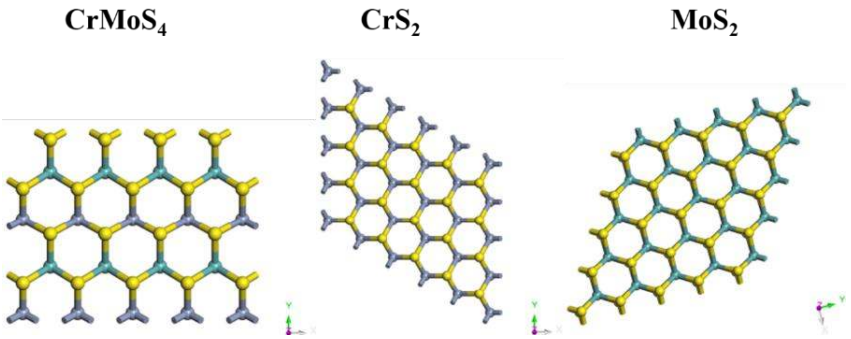
Figura 2 - Célula primitiva da liga TMD $CrMoS_4$ e dos TMDs CrS_2 e MoS_2.



Fonte: Autoria própria (2026).

A monocamada da liga TMD $CrMoS_4$, a do TMD CrS_2 e MoS_2 podem ser estudadas a partir das suas respectivas células primitivas, visto que esta é o menor padrão de repetição da estrutura e que pode ter seus resultados generalizados para a estrutura macroscópica. Como mencionado, as células primitivas em estudo estão dispostas em um sistema 3D pelas coordenadas *x*, *y* e *z*, no qual cada coordenada é paralela a um parâmetro da estrutura (*a*, *b*, *c*). Ao se replicar as células primitivas em estudo em duas direções, geralmente “x” e “y”, há a formação das monocamadas (ver figura 3).

Figura 3 - Monocamada da liga TMD $CrMoS_4$ e dos TMDs CrS_2 e MoS_2.



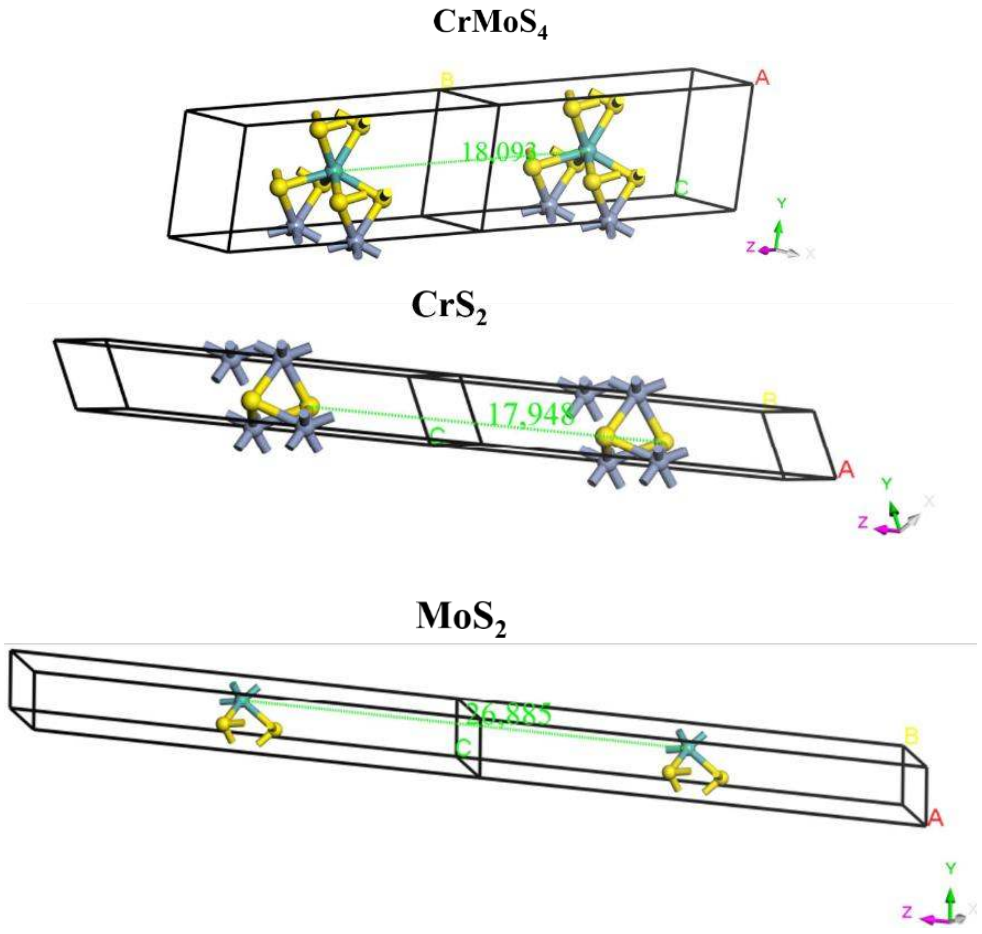
Fonte: Autoria própria (2026).

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

A terceira direção, geralmente o eixo “z”, é a distância de vácuo entre uma monocamada e outra, no qual de acordo com a literatura, esse parâmetro deve ter valor de comprimento mínimo por volta de 12Å (ver figura 4). Na pesquisa realizada por Kuc, Zibouche e Heine (2011), eles utilizam no seu método computacional, via *software CRYSTAL09*, uma distância de vácuo entre as monocamadas por volta de 12Å e afirmam que esta distância é suficiente para evitar interações indesejadas entre as monocamadas. Outros autores, por sua vez, já adotam distâncias de vácuo na faixa de 15Å em diante, como na pesquisa feita por Chen, Zeng, *et al.*, (2020); Mak, Lee, *et al.*, (2010); Moreira, Freitas e Azevedo, (2020); Hamdaoui, Pérez, *et al.*, (2023); Navis, Bittencourt, *et al.*, (2024) e Pereira, Batista, *et al.*, (2024).

Figura 4 - Distância de vácuo da liga TMD $CrMoS_4$ e a do TMD CrS_2 e MoS_2.



Fonte: Autoria própria (2026).

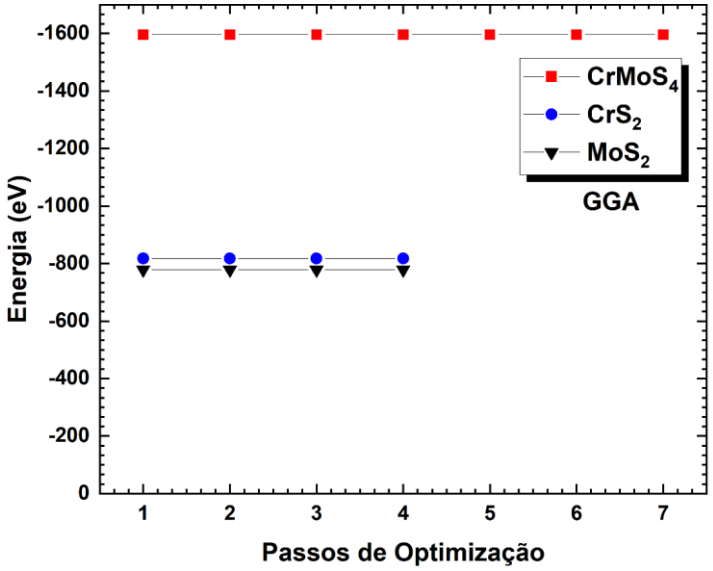
REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

A fim de se obter os cálculos computacionais acerca das propriedades estruturais e optoeletrônicas, realizou-se primeiramente o cálculo de optimização de geometria. Esse cálculo inicial é fundamental para a convergência das células primitivas dos materiais em estudo ao estado fundamental de energia. A partir das estruturas optimizadas, foi possível verificar a estabilidade energética da liga TMD $CrMoS_4$ e dos TMDs CrS_2 e MoS_2, com a finalidade de comprovar que os materiais são estáveis energeticamente, por meio do gráfico de convergência para o estado fundamental, e obter os parâmetros de rede das estruturas.

Por meio da optimização de geometria (figura 5) é possível observar que as nanoestruturas estão em seus estados fundamentais, atingindo valores de energia negativos, via aproximação GGA. A liga TMD $CrMoS_4$ finalizou a convergência com energia por volta de -1.600 eV, enquanto os TMDs CrS_2 e MoS_2 atingiram cerca de -800 eV. Estes resultados demonstram as estruturas estão relaxadas em estados fundamentais de energia, sem variações de energia, permitindo o cálculo das propriedades a partir desse nível de energia.

Figura 5 - Convergência dos materiais para o estado fundamental de energia.



Fonte: Autoria própria (2026).

O cálculo de optimização possibilita a realização da comparação dos valores dos parâmetros de rede das células primitivas obtidos via *software Material Studio* –

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

CASTEP aos valores teóricos e experimentais encontrados na literatura. Os TMDs CrS_2 e MoS_2 são materiais com grande acervo de dados na literatura, enquanto a liga TMD $CrMoS_4$ não há nenhum registro até então e, por isso, está pesquisa é pioneira no estudo das propriedades físicas do TMD $CrMoS_4$. Estes resultados obtidos via *software* foram validados a partir da comparação dos TMDs 2H-CrS_2 e MoS_2, visto que os materiais integrantes do grupo dos TMDs possuem resultados próximos em determinados pontos de análise (MOREIRA, FREITAS e AZEVEDO, 2020; MATHIAS, MOUCHEREK, *et al.*, 2023; SANTOS, MOUCHEREK, *et al.*, 2023; SANTOS, MOUCHEREK, *et al.*, 2023; NAVIS, BITTENCOURT, *et al.*, 2024; PEREIRA, BATISTA, *et al.*, 2024).

Tabela 1 - Valores dos parâmetros de rede dos TMDs CrS_2, MoS_2 e da liga TMD $CrMoS_4$ comparados aos parâmetros da literatura teórica ou experimental.

Parâmetros	**2H – CrS_2**
a=b (Å) Exp.	3,04 (C2DB, 2018)
a=b (Å) Pré-ot.	3,04
a=b (Å) GGA	3,06 (+0,66%)
c (Å) Exp.	≥12 (KUC, ZIBOUCHE e HEINE, 2011)
c (Å) Pré-ot.	17,95
c (Å) GGA	18,03
α=β (º)	90
γ (º)	120
Parâmetros	**2H – MoS_2**
a=b (Å) Exp.	3,16 (YUN, HAN, *et al.*, 2012)
a=b (Å) Pré-ot.	3,16
a=b (Å) GGA	3,21 (+1,58%)
c (Å) Exp.	≥12 (KUC, ZIBOUCHE e HEINE, 2011)
c (Å) Pré-ot.	26,88
c (Å) GGA	27,02
α=β (º)	90
γ (º)	120
Parâmetros	**$CrMoS_4$**
a (Å) Pré-op.	3,12
a (Å) GGA	3,14
b (Å)	≥12 (KUC, ZIBOUCHE e HEINE, 2011)
b (Å) Pré. op.	18,09
b (Å) GGA	18,18
c (Å) Pré-op.	5,40
c (Å) GGA	5,44
α=β=γ (º)	90

Fonte: Autoria própria (2026).

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

A energia de corte adotada para atender aos critérios de convergência foi de 720 eV, suficiente para os cálculos das propriedades estruturais e optoeletrônicas. Para o cálculo da otimização geométrica e minimização de energia das estruturas, utilizou-se os seguintes critérios de convergência: a tolerância de energia total foi de $0{,}1667\times10^{-3}$ eV/atomo, a tolerância de força máxima entre íons foi de $0{,}3\times10^{-1}$ eV/Å, a pressão inferior a $0{,}5\times10^{-1}$ GPa e o deslocamento atômico inferior a $0{,}1\times10^{-2}$ Å.

Na tabela 1, há os valores dos parâmetros de rede das células primitivas antes da optimização de geometria, pós-optimização via aproximação GGA e os valores da literatura. Para os TMDs CrS_2 e MoS_2 é perceptível que ambas as células primitivas possuem um aumento dos parâmetros de rede (*a*, *b*, *c*) após a convergência para o estado fundamental de energia. A liga TMD $CrMoS_4$ possui um aumento dos parâmetros de rede (*a*, *b*, *c*) em relação aos valores pré-otimização (Pré-ot). Para ambas as células primitivas, os valores pós-convergência via aproximação GGA em relação aos valores da literatura não ultrapassam 1,60% e, sendo assim, são resultados com margem de erro aceitável (BATISTA, ABREU e MOREIRA, 2024; NAVIS, BITTENCOURT, *et al.*, 2024).

4.2 Propriedades Eletrônicas

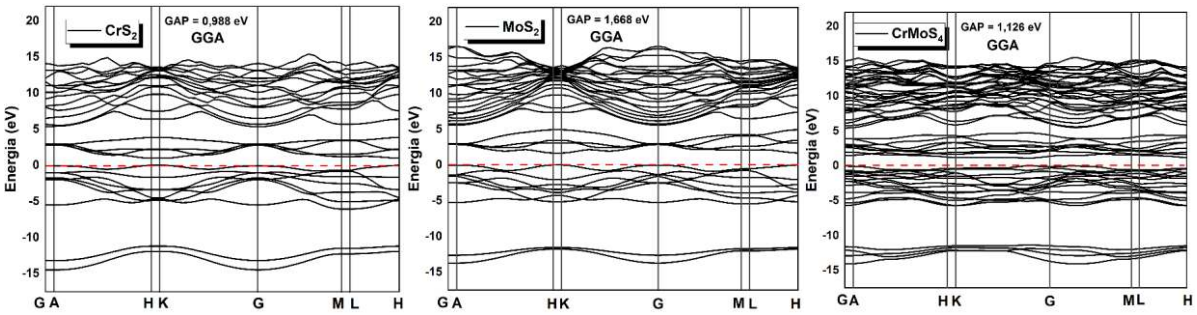
As propriedades eletrônicas foram investigadas a partir do gráfico de estrutura de bandas e densidade de estados – DOS dos materiais em estudo. A análise da estrutura de bandas é justamente o que permite a classificação dos materiais em análise como condutores, isolantes ou semicondutores. A densidade de estados, por sua vez, espelha os estados permitidos dentro das bandas de energia que os elétrons podem ocupar, sendo estes estados coerentes com o princípio da exclusão de Pauli e a estatística de Dirac-Fermi.

Para o estudo das estruturas de bandas e densidade de estados dos materiais investigados, empregou-se energia de corte por volta de 720 eV, os *k-point* com dimensão 5x5x2 e a *energy range* de 20 eV (ver figuras 6 e 7).

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

Figura 6 - Gráfico de estrutura de bandas do CrS_2, MoS_2 e $CrMoS_4$.



Fonte: Autoria própria (2026).

Os gráficos de estrutura de bandas dos materiais em estudo, conforme expostos na figura 6, demonstram a existência de um *bandgap* de energia com valor moderado, o que nos implica a classificar estes materiais como semicondutores. Este resultado já era esperado, visto que os TMDs são um grupo de semicondutores. Além disso, conforme a tabela 2, vê-se que os valores de *bandgap* dos TMDs CrS_2 e MoS_2 são próximos dos valores encontrados na literatura, o que é uma forma de validar os resultados obtidos via software. O *bandgap* da liga previu-se ficar em um valor intermediário entre o CrS_2 e MoS_2. Contudo, deve-se observar que, devido à aproximação natural das funções de troca e correlação do formalismo DFT (GGA, por exemplo), as bandas de energia calculadas teoricamente não serão exatamente precisas e podem superestimar ou subestimar os valores experimentais, mas ainda assim, apresentam bons resultados e podem convergir para os resultados experimentais (SANTOS, *et al.*, 2023; SANTOS, *et al.*, 2023).

Tabela 2 - *Bandgap* de energia dos TMDs CrS_2, MoS_2 e da liga TMD $CrMoS_4$ e seus respectivos valores experimentais ou teóricos encontrados na literatura.

Monocamada	***Bandgap* (eV) GGA**	**Literatura (eV)**
CrS_2	0,988	0,877 (C2DB, 2018)
MoS_2	1,668	1,580 (C2DB, 2018)
$CrMoS_4$	1,126	---

Fonte: Autoria própria (2026).

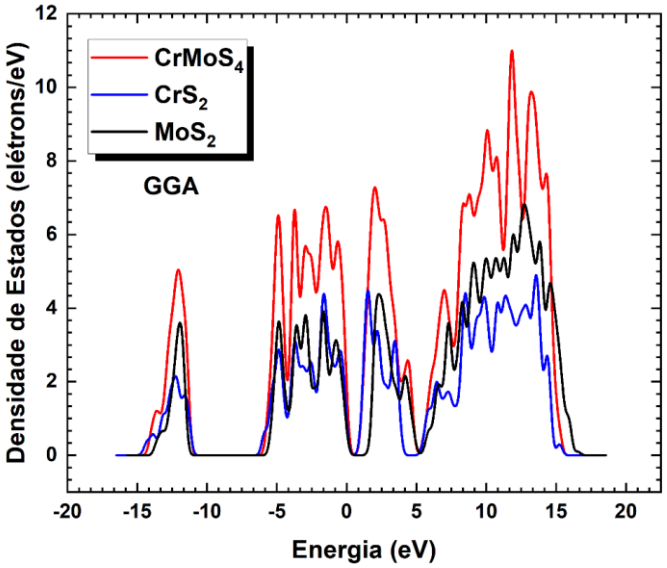
A partir do gráfico de densidade de estados – DOS, é possível perceber a diferença de densidade estados entre os materiais em estudo. Na figura 7, é

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

perceptível que os TMDs CrS_2 e MoS_2 possuem gráfico de densidade de estados menos densos quando comparados com o da liga TMD $CrMoS_4$. De modo simples, a DOS das monocamadas em estudo nos traduzem o modo como os orbitais eletrônicos dos átomos que compõem os TMDs CrS_2, MoS_2 e a liga TMD $CrMoS_4$ contribuem para as propriedades eletrônicas (MOREIRA, FREITAS e AZEVEDO, 2020; NAVIS, BITTENCOURT, *et al.*, 2024; PEREIRA, BATISTA, *et al.*, 2024). Assim, observa-se (linha vermelha) que a liga TMD $CrMoS_4$ possui maior densidade de estados em comparação aos TMDs CrS_2 e MoS_2. Na figura 7 apresenta-se a DOS total nas proximidades do nível de Fermi (0 eV), que demarca as bandas de energia mais altas ocupadas por elétrons (bandas de valência) e as bandas de condução em que os elétrons se movem livremente permitindo a condutividade elétrica, com alguns picos bem evidentes entre -5,0 e 5,0 eV, dominados principalmente pelos orbitais *d* dos metais de transição (Cr e Mo) e *p* do Enxofre (S).

Figura 7 - Densidade de estados do $CrMoS_4$, CrS_2 e MoS_2.



Fonte: Autoria própria (2026).

É possível realizar uma análise mais profunda acerca da densidade de estados – DOS, a partir do cálculo da densidade de estados parciais – PDOS. Nesse cálculo, é possível averiguar, quais os orbitais eletrônicos, de cada átomo que compõem a célula primitiva em análise, que mais contribui para a densidade de

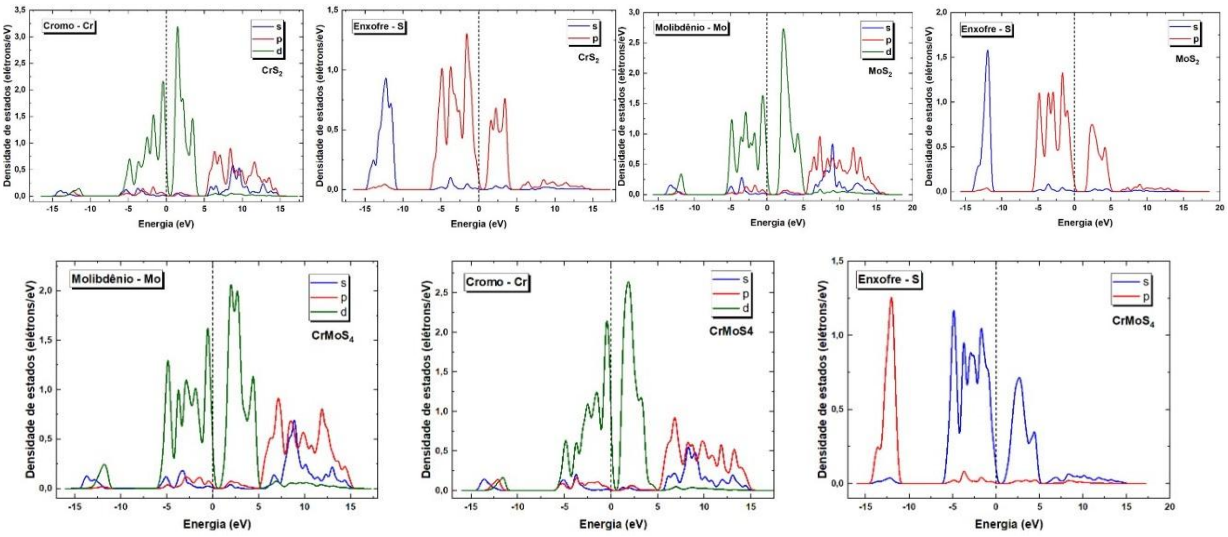
REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

estados na banda de valência e a de condução no gráfico de estrutura de bandas. A figura 8 mostra os gráficos de PDOS das três células primitivas em estudo – CrS_2, MoS_2 e $CrMoS_4$, respectivamente.

Em ambos os gráficos de PDOS, os picos à esquerda do zero no eixo horizontal, energia (eV), mostram as regiões ocupadas por elétrons na banda de valência e, por sua vez, os picos à direita do zero representam as regiões ocupadas por elétrons livres nas bandas de condução (ver figuras 6 e 8). É perceptível que nos TMDs CrS_2 e MoS_2 o subnível eletrônico que mais contribui para a banda de valência e condução é o subnível eletrônico *d* dos átomos de metal de transição e o subnível *p* do átomo de Enxofre (S). Enquanto, na liga de TMD $CrMoS_4$, o subnível *d* dos dois átomos de metal de transição e o subnível *s* do enxofre são os subníveis eletrônicos que mais contribuem para as regiões ocupadas na banda de valência e na de condução.

Figura 8 - PDOS dos TMDs CrS_2, MoS_2 e da liga $CrMoS_4$.



Fonte: Autoria própria (2026).

4.3 Propriedades Ópticas

As propriedades ópticas dizem respeito à interação da onda eletromagnética com a matéria. No caso da pesquisa em questão, será analisada a interação da onda eletromagnética (luz, por exemplo) com os átomos que constituem os nanomateriais,

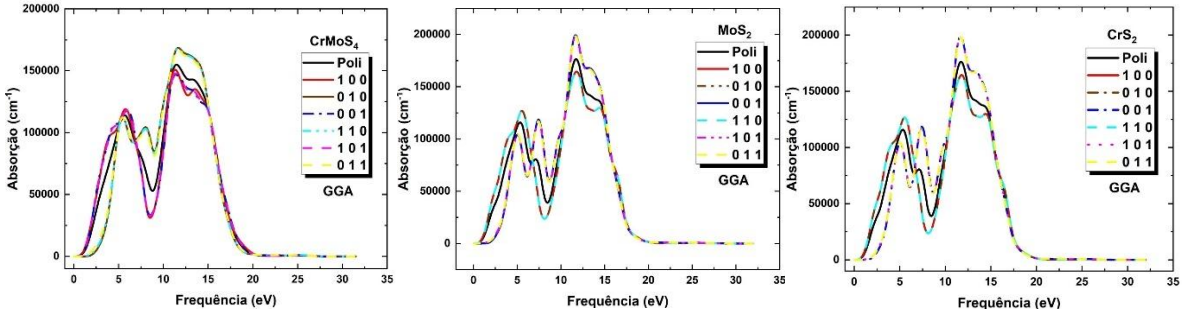
REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

visto que os fenômenos que ocorrem dentro dos sólidos envolvem interações entre radiação eletromagnética e átomos/íons (MOREIRA; AZEVEDO; FREITAS, 2020). Assim, nessa interação, a componente do campo elétrico oscila para baixas frequências e, ao interagir com a nuvem de elétrons, induz uma polarização. Por consequência, essa interação envolve a absorção, emissão e a transição eletrônica dos elétrons.

A começar pelo gráfico de absorção óptica, é perceptível para ambas as células primitivas uma característica anisotrópica, isto é, a absorção depende da direção da medida. Os gráficos de absorção dos TMDs CrS_2 e do MoS_2 são similares, visto que absorvem aproximadamente nos mesmos intervalos – no visível na faixa por voltada de 1,6 a 3,1 eV e no ultravioleta para valores aproximadamente acima de 3,1 eV. A liga de TMD, por sua vez, possui faixas picos de absorção nos mesmos intervalos dos TMDs CrS_2 e MoS_2, porém as direções de absorção mudam a amplitude dos picos. No espectro de absorção dos três materiais, percebe-se que para valores acima de 17 eV a absorção tende a ser isotrópica (ver figura 9).

Figura 9 - Gráficos de absorção dos materiais em estudo.



Fonte: Autoria própria (2026).

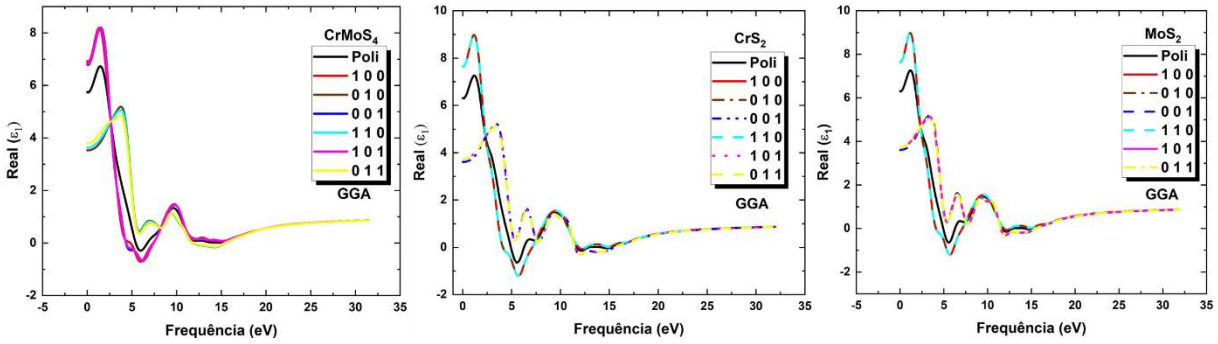
Além do cálculo de absorção óptica, realizou-se também o cálculo da função dielétrica (figura 10), a fim de compreender acerca da capacidade do material de armazenar energia e para a melhor compreensão das transições eletrônicas ocasionadas pela absorção de fótons. Assim, em primeira análise, observa-se que a parte real da função dielétrica, ε_1, explana a capacidade do material de armazenar energia. Quando o material interage com um campo elétrico externo, $\vec{E}$, há a

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

formação de dipolos induzidos e, por consequência, associa-se a esses dipolos induzidos uma energia potencial. É justamente a facilidade do material armazenar energia no formato de energia potencial associada aos dipolos induzidos formados que o gráfico da parte real da função imaginária explana.

Figura 10 - Parte real da função dielétrica.



Fonte: Autoria própria (2026).

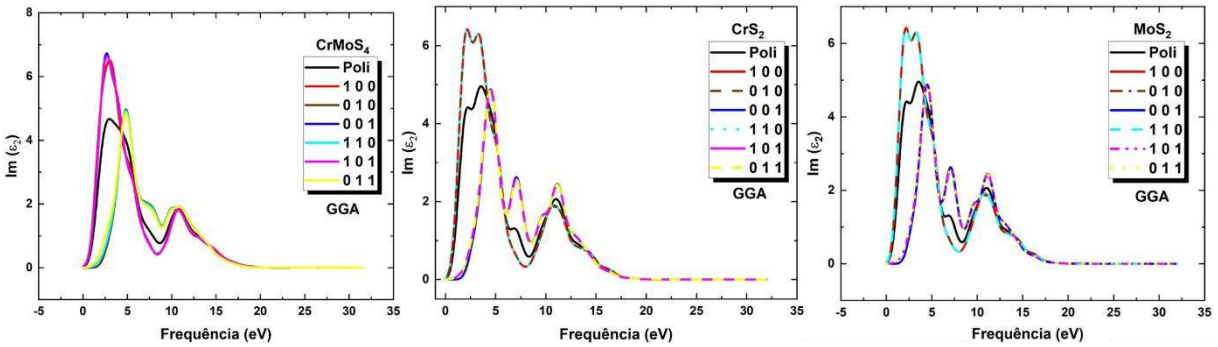
Na parte real da função dielétrica (ver figura 10), é nítido que os TMDs CrS_2 e MoS_2 possuem a capacidade de armazenar energia em direções similares, tendo como principais direções de maior armazenamento: |1 0 0| e |1 1 0|. A liga de TMD, no que lhe remete, já possui principais direções de maior armazenamento de energia: |1 0 0|, |0 0 1| e |1 0 1|. Em todas as estruturas, após 15 eV, a capacidade de armazenar energia se torna isotrópica.

Para a parte imaginária, ε_2, percebe-se, conforme a figura 11, no intervalo de 0 eV a 15 eV que as transições eletrônicas ocorrem sobretudo nas direções |1 0 0|, |0 1 0| e |1 1 0| para os TMDs CrS_2 e MoS_2. Enquanto para a liga de TMD, as transições ocorrem principalmente nas direções |1 0 0|, |0 0 1| e |1 0 1|. As transições eletrônicas são as transições associadas à passagem dos elétrons de valência para a banda de condução, assim esses “saltos” de uma banda para outra ocorrem, principalmente, nessas direções expostas nos gráficos da figura 11.

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

Figura 11 - Parte imaginária da função dielétrica.



Fonte: Autoria própria (2026).

5. Conclusão

A partir dos resultados obtidos e dos objetivos propostos, pode-se constatar que a monocamada da liga TMD $CrMoS_4$ é estável energeticamente, fato comprovado pela convergência da célula primitiva para o estado fundamental de energia, via aproximação GGA, em um valor por volta de -1.600eV. Além disso, as propriedades eletrônicas do material corroboram com o esperado para um semicondutor, na qual apresenta uma banda proibida (*gap*) no valor de 1,126 eV. Este valor de *gap* está próximo aos TMDs CrS_2 e MoS_2, que são os materiais comparativos da pesquisa.

No que se refere às propriedades ópticas, conclui-se que ambos os materiais em estudo absorvem na região do visível, mas possuem maior absorção na região do ultravioleta, além de terem capacidade de armazenar energia (ao se analisar o gráfico da função dielétrica real). A parte imaginária faz referência à passagem dos níveis ocupados para os desocupados, que foi melhor compreendido através da análise da densidade parcial de estados eletrônicos - PDOS.

Referências

BATISTA, P. A. D. S.; ABREU, C. V. L.; MOREIRA, E. CARACTERÍSTICAS TERMODINÂMICAS E VIBRACIONAIS DO DISSULFETO E DISSELENETO DE

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

MOLIBDÊNIO 2D VIA MODELAGEM COMPUTACIONAL. In: UEMA **UEMA PRODUZINDO CONHECIMENTO 2022 - 2023**. São Luís: UEMA, 2024. p. 303-315. ISBN 978-85-8227-547-4. Disponivel em: <https://www.ppg.uema.br/2025/01/coletanea-pibic-uema-produzindo-conhecimento-ciclo-2022-2023/>. Acesso em: 10 Dezembro 2024.

C2DB. Computational 2D Materials Database, 2018. Disponivel em: <https://c2db.fysik.dtu.dk/material/1CrS2-1>. Acesso em: 27 Novembro 2024.

CHEN, S.-B. et al. Strain-induced electronic structures, mechanical anisotropy, and piezoelectricity of transition-metal dichalcogenide monolayer CrS2. **Journal of Applied Physics**, 2020. 125111.01 - 125111.011. Disponivel em: <https://pubs.aip.org/aip/jap/article-abstract/128/12/125111/286977/Strain-induced-electronic-structures-mechanical?redirectedFrom=fulltext>. Acesso em: 26 Janeiro 2025.

HAMDAOUI, J. E. et al. First Principle Study on the Effect of Strain on the Electronic Structure and Carrier Mobility of the Janus MoSTe and WSTe Monolayers. **Nanomaterials**, 13, n. 18, 2023. Disponivel em: <https://www.mdpi.com/2079-4991/13/18/2535>. Acesso em: 28 Fevereiro 2025.

HASAN, N. M.; MARION, B. D. G. Grafeno: Inovações, Aplicações e sua Comercialização. **Interfaces Científicas - Exatas e Tecnológicas**, 2, 22 Fevereiro 2016. Acesso em: 1 Dezembro 2024.

KITTEL, C. **Introdução à física do estado sólido**. Tradução de Ronaldo Sérgio de Biasi. 8. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2013. ISBN 85-216-1505-1.

KUC, A.; ZIBOUCHE, N.; HEINE, T. Influence of quantum confinement on the electronic structure of the transition metal sulfide TS2. **Physical Review B**, 83, 2011. 245213.1-245213.4. Disponivel em: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.83.245213#references>. Acesso em: 17 Janeiro 2025.

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

MAK, K. F. et al. Atomically Thin MoS2: A New Direct-Gap Semiconductor. **Physical Review Letters**, 105, 2010. 136805-1 - 136805-4. Disponivel em: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.105.136805>. Acesso em: 28 Fevereiro 2025.

MATHIAS, A. et al. Two-dimensional dichalcogenides of type xy2 (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, p. 2072-2083, 2023.

MATHIAS, A. et al. Two-dimensional dichalcogenides of type XY2 (X=Mo,W;Y=S,Se): A DFT study of the structural, optoelectronic,thermodynamic properties, infrared, and Raman spectra. **Journal of materials research-jmr**, 2023.

MOREIRA, E.; FREITAS, D.; AZEVEDO, D. **Nanoestrutura 2-D do Dissulfeto de Molibdênio - um estudo via teoria do funcional da densidade**. Brasil: Novas edições acadêmicas, 2020. ISBN 978-620-2-55927-0.

NAVIS, C. N. et al. MODELAGEM COMPUTACIONAL DA MONOCAMADA TMD 1T'-RuOsSe2 E SUAS APLICAÇÕES: UM ESTUDO DFT. In: _____ **Engenharia 4.0 a era da produção inteligente**. São Luís: Pascal, v. 13, 2024. Cap. 1, p. 9-23. ISBN 978-65-6068-070-8. Disponivel em: <https://editorapascal.com.br/wp-content/uploads/2024/06/ENGENHARIA-4.0-VOL.-13.pdf>. Acesso em: 2 Dezembro 2024.

PEREIRA, M. V. D. et al. Efeitos Termo-Elétricos e Magnéticos das Monocamadas TMD 1T'-WTe2 e 1T'-RuWTe2 via Simulação Computacional. **Revista JRG de Estudos Acadêmicos**, VII, 2024.

REBELLO, E. V.; NASCIMENTO, G. A.; AMARANTE, M. Grafeno. **Revista Pesquisa e Ação**, 2018. Disponivel em: <https://revistas.brazcubas.br/index.php/pesquisa/article/view/402>. Acesso em: 1 Dezembro 2024.

REMUNOM
ISSN 2178-6925

Received: 02/02/2026 - **Accepted:** 01/03/2026
Vol: 13.01
DOI: 10.66104/bjqwd827
Pages: 1-20

SANTOS, W. O. et al. 1T'-RuO2 monolayer: First-principles study of excitonic, optoelectronic, vibrational, and thermodynamic properties. **Journal of Materials Research**, v. 38, p. 3677-3689, 2023.

SANTOS, W. O. et al. Structural, optoelectronic, excitonic, vibrational, and thermodynamic properties of 1T'-OsO2 monolayer via ab initio calculations. **Journal of Applied Physics**, v. 134, 2023.

SEGUNDO, J.; VILAR, E. Grafeno: Uma revisão sobre propriedades, mecanismos de produção e potenciais aplicações em sistemas energéticos. **Revista eletrônica de materiais e processos**, 11, n. 2, 2016. 54-57.

WANG, Q. H. et al. Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides. **Nature Nanotech**, 2012.

YUN, W. S. et al. Thickness and strain effects on electronic structures of transition metal dichalcogenides: 2H-$MX2$ semiconductors (M = Mo, W; X = S, Se, Te). **Physical Review B**, 85, 2012. 033305.