Engenharia Física

# Estudo computacional da deposição de moléculas magnéticas no bifenileno

Pedro Henrique Ázara de Almeida - 6° módulo de Engenharia Física, UFLA, bolsista PIBIC/CNPq.

Igor Saulo Santos de Oliveira - Orientador DFI, UFLA. - Orientador(a)

## Resumo

A nanotecnologia tem avançado significativamente com o surgimento de materiais bidimensionais, como o grafeno, descoberto em 2004, e, mais recentemente, o bifenileno, que exibe propriedades metálicas distintas do grafeno. A interação do bifenileno com moléculas magnéticas abre novas possibilidades tecnológicas, como o controle de spin para o desenvolvimento de memórias magnéticas e processadores quânticos, impulsionando inovações em diversas áreas da ciência e tecnologia. Este estudo tem como objetivo investigar a deposição de metalocenos sobre substratos de bifenileno, com uma análise detalhada de suas propriedades estruturais, eletrônicas e magnéticas. Serão examinados o momento magnético induzido, a densidade e transferência de cargas, a energia de adsorção e a anisotropia magnética. Para isso, será utilizada a Teoria do Funcional da Densidade (DFT), um método computacional preciso baseado na densidade eletrônica, com a aplicação dos pacotes Quantum Espresso e VASP, sendo os cálculos realizados pelo Cluster Curie, da UFLA. Este estudo conduzirá uma investigação detalhada das interações entre os metalocenos e o bifenileno, tanto em conjunto quanto individualmente, com ênfase na relaxação estrutural e nas características das interações. Diversas posições da molécula sobre o substrato foram testadas, permitindo a identificação da posição mais estável. Os cálculos de estruturas de banda para a estrutura do bifenileno e a análise da densidade de estados permitiram comparações com a estrutura modificada pela presença das moléculas. Com base nos resultados, foi confirmado o caráter metálico e condutor do bifenileno, bem como as interações de van der Waals entre os metalocenos e o substrato. A energia de adsorção apresentou um comportamento exotérmico na interação entre os materiais. Além disso, cálculos de transferência de carga identificaram áreas específicas na estrutura do bifenileno com variação de carga, cuja soma e normalização permitiram quantificar a variação líquida de carga no substrato, oferecendo uma compreensão mais aprofundada das interações envolvidas.

Palavras-Chave: bifenileno, metaloceno, teoria do funcional da densidade.
Instituição de Fomento: CNPq

Link do pitch: https://youtu.be/9DD8ma0HPLk