

Engenharia Física

Estudo computacional da deposição de moléculas magnéticas no bifenileno

Pedro Henrique Ázara de Almeida - 8º módulo de Engenharia Física, UFLA, bolsista PIBIC/CNPq

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

Resumo

Materiais bidimensionais (2D) vêm se destacando pela possibilidade de manipulação de suas propriedades eletrônicas e magnéticas. Dentre eles, o bifenileno, um material 2D promissor com rede não-hexagonal estável, demonstra versatilidade para aplicações em spintrônica. Neste trabalho, investigamos a adsorção de metalocenos — com foco particular no cobaltoceno — sobre diferentes sítios do bifenileno, por meio de cálculos baseados na Teoria do Funcional da Densidade. Para isso, foram consideradas 24 configurações de deposição, abrangendo múltiplos sítios e orientações moleculares, cujos relaxamentos estruturais e energias de adsorção permitiram identificar as geometrias mais estáveis e compreender a natureza da interação molécula-substrato. A análise de transferência de carga evidenciou que o cobaltoceno atua como doador de elétrons, promovendo a transferência de carga para o bifenileno. Adicionalmente, a investigação da estrutura de bandas e da densidade de estados projetada revelou a formação de estados híbridos na interface, bem como modificações relevantes no entorno do nível de Fermi. A aplicação de campo elétrico externo, por sua vez, demonstrou efeitos significativos tanto nas propriedades eletrônicas, com alterações na transferência de cargas, quanto nas magnéticas, possibilitando ajustes controlados no momento magnético e na anisotropia do sistema. Esses resultados fornecem uma compreensão abrangente da interação entre moléculas magnéticas e bifenileno, destacando não apenas a estabilidade da adsorção, mas também os mecanismos pelos quais carga, estrutura eletrônica e campos externos podem ser explorados para modular as propriedades do sistema. Tais achados reforçam o potencial desse híbrido molecular-2D para aplicações futuras em dispositivos de memória e processamento de informação baseados em spintrônica.

Palavras-Chave: bifenileno, metaloceno, teoria do funcional da densidade.

Instituição de Fomento: CNPq

Link do pitch: <https://www.youtube.com/watch?v=ZesWVijrPgo>