

Física

Estudo teórico das propriedades estruturais e eletrônicas de nanofitas bidimensionais

Daiane Beatriz Costa - 9º módulo de Física, UFLA, bolsista PIBIC/UFLA.

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

Resumo

A síntese do grafeno, o qual é uma folha plana de átomos de carbono formando uma estrutura hexagonal, impulsionou a pesquisa de cristais bidimensionais (2D), sendo um importante e crescente ramo de pesquisa na área de Física de Materiais que podem encontrar aplicações em diversas áreas. Entre elas, podemos apontar a modificação dos tecidos usados nas roupas de proteção contra fogo que permite uma melhor barreira física prevenindo a penetração de calor e gases, para ser utilizada em Equipamentos de Proteção Individual (EPI), desenvolvimento de um carregador que pode ser utilizado em qualquer celular ou tablet com porta Universal Serial Bus (USB) padrão que recarrega a bateria do celular em 5 minutos, utilizando um supercapacitor de grafeno, outro exemplo é a pesquisa da Universidade de Manchester, na área de compósitos e revestimentos, que combinado com tintas e utilizado em latarias de carro e casco de navio prevenindo oxidações. As aplicações do grafeno são possíveis devido às suas propriedades, por estarem entre os mais fortes, resistentes e flexíveis dos materiais conhecidos, é considerado semimetal, condutor de calor e transparente. Apesar de possuir promissoras propriedades, o grafeno possui algumas limitações para determinadas aplicações. Uma forma de obter diferentes propriedades é utilizando uma nanofita de grafeno, pois as bordas da nanofita podem modificar suas propriedades eletrônicas, e também apresentar outras novas, como propriedades magnéticas. No entanto, há estudos que investigam outros materiais com estruturas similares ao grafeno, entre eles, os da família MX da tabela periódica (onde M = Be, Mg, Zn e Cd; e X = Cl, Br e I) mostrados por Zhang e colaboradores, fazendo que essas buscas seja um importante ramo de pesquisas na atualidade. Dessa forma, o objetivo é investigar as propriedades eletrônicas, estruturais e magnéticas de algumas nanofitas da família MX de materiais 2D, dentre as quais escolhemos as nanofitas 2D formadas por BeCl, MgCl e ZnCl. Os sistemas serão investigados através de Simulações Computacionais, pelo método da Teoria do Funcional da Densidade (DFT). Sendo implementada em diversos pacotes computacionais, neste trabalho é utilizado o pacote de código aberto Quantum Espresso. Ainda não foram iniciadas as simulações, a princípio foi necessário fazer revisões bibliográficas sobre a estrutura e propriedades do grafeno que condicionam em amplas aplicações, antes de prosseguir para as nanofitas propostas.

Palavras-Chave: Grafeno, Cristais bidimensionais, Propriedades.

Instituição de Fomento: Univerdade Federal de Lavras

Link do pitch: <https://youtu.be/m6UzYjOwWOQ>