

CEX - CÂMARA DE CIÊNCIAS EXATAS E DOS MATERIAIS ( COMUNICAÇÃO COORDENADA )

NOME: ANTÔNIO LENITO SOARES JÚNIOR

TÍTULO: NOVA CLASSE DE MATERIAIS DE DUAS DIMENSÕES - CALCOGENETOS DE COBRE CUX (X= S, SE, TE).

AUTORES: ANTÔNIO LENITO SOARES JÚNIOR, ANTÔNIO LENITO SOARES JÚNIOR, LETÍCIA GABRIELE FERREIRA, ERICK ALEXSANDER CAETANO

PALAVRA CHAVE: SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL, MATERIAIS BIDIMENSIONAIS (2D), NOVAS ESTRUTURAS 2D

## RESUMO

NOVA CLASSE DE MATERIAIS DE DUAS DIMENSÕES - Calcogenetos de Cobre CuX (X= S, Se, Te).

A dimensionalidade é um dos parâmetros importantes de um material, as propriedades de um composto químico podem mudar, drasticamente, dependendo se está disposto em uma estrutura cristalina de duas (2D) ou três dimensões (3D). Os materiais 2D são uma classe de nanomateriais que tem recebido grande atenção dos pesquisadores, principalmente, após a obtenção experimental do grafeno, por Geim et al. em 2004, através da esfoliação mecânica do grafite. As novas propriedades observadas nos materiais 2D traz a perspectiva da inovação tecnológica. Entre as várias aplicações destacam-se: uso em dispositivos eletrônicos, armazenamento ou separação de gás, catálise, sensores de alto desempenho, membranas de suporte.

Neste cenário, o objetivo da pesquisa é investigar as propriedades eletrônicas, estruturais e mecânicas das estruturas 2D formadas a partir do metal de transição Cu e calcogênios: S, Se e Te. A investigação se dá através da simulação computacional que é norteada pelos fundamentos da mecânica quântica, considerando as células unitárias das estruturas e a periodicidade do estado sólido. Estes cálculos são realizados utilizando-se a Teoria do Funcional de Densidade, que tem como base os conceitos apresentados por Kohn e Hohenberg e o formalismo desenvolvido por Kohn e Sham.

Antes de obter as propriedades das estruturas 2D, faz-se necessário a análise de alguns parâmetros de entrada para os cálculos, dois deles são: malha de pontos  $k$  e energia de corte. Estes parâmetros já foram obtidos e devidamente analisados. Nesta fase do projeto, começa-se a realização dos cálculos computacionais com intuito de obter, de fato, as propriedades das estruturas 2D supracitadas. Existe um grande potencial e relevância no trabalho devido sua possível contribuição científica, tecnológica e de inovação, por se tratar de uma área muito promissora e que ainda há muito a ser descoberto e explorado.