

ANEXO I

Programa de Capacitação Institucional – PCI

**PESQUISA E DESENVOLVIMENTO EM LUZ SÍNCROTRON, BIOCÊNCIAS,
NANOTECNOLOGIA E BIOETANOL**

CENTRO NACIONAL DE PESQUISA EM ENERGIA E MATERIAIS - CNPEM

Projeto 1: Simulação de Materiais Bidimensionais via Teoria do Funcional da Densidade

Introdução

A nanotecnologia é uma das áreas de maior evolução nas últimas décadas. À medida que adentramos na escala nano, a complexidade dos materiais e sistemas que encontramos cresce enormemente, revelando novos fenômenos e novas possíveis aplicações [A]. Nesse contexto, o papel das simulações de teoria funcional da densidade (DFT) na caracterização de materiais bidimensionais torna-se cada vez mais fundamental, particularmente no contexto do Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano). As simulações de DFT fornecem detalhes em nível atômico da estrutura eletrônica, arranjo geométrico e energético dos materiais 2D. Assim, essas simulações podem prever várias propriedades de nanomateriais 2D, como estruturas de bandas, propriedades de transporte eletrônico, ópticas e mecânicas. Essa capacidade preditiva permite que os pesquisadores explorem eficientemente uma ampla gama de composições e estruturas de materiais. Além disso, as simulações de DFT podem revelar fenômenos e comportamentos novos que podem não ser facilmente observáveis experimentalmente, fornecendo uma importante ferramenta para a interpretação de resultados experimentais. Por exemplo, elas podem oferecer insights sobre efeitos de confinamento quântico, estados de borda e outras propriedades únicas que surgem em materiais 2D devido à sua dimensionalidade reduzida. No geral, a DFT pode fornecer insights teóricos que ajudam a interpretar resultados experimentais e orientar investigações experimentais adicionais.

De fato, nos últimos anos, tem havido um crescente sucesso com a integração de simulações de DFT com as diferentes áreas de atuação do LNNano. Exemplos incluem o estudo das propriedades eletrônicas, topológicas e de transporte de monocamadas de dicalcogenetos de metais de transição da família Pt, Hg, e Se [TMD], o estudo do processo de oxidação de monocamadas elementares de As, Sb e Bi suportadas por substrato de SiC [PIC], a investigação das propriedades eletrônicas e de transporte tanto na interface Bi₂Se₃/CrI₃ [INTERF], quanto em monocamadas de boro suportadas por superfícies metálicas [BORO], e o estudo das propriedades estruturais e eletrônicas em nanoescala de interfaces entre celulose e óxido de grafeno [NCLGO].

Para avançar em direção à missão do laboratório de ser um centro de excelência no uso de técnicas e ferramentas de fronteira, a integração das simulações de DFT em suas diversas áreas de atuação é fundamental.

Objetivo Geral

Fazer uso de ferramentas de simulações computacionais de primeiros princípios via teoria do funcional da densidade (DFT) para investigar sistemas bidimensionais de interesse do LNNano, em suas diferentes linhas de pesquisa. As aplicações específicas incluem, mas não estão limitadas, aos tópicos abaixo.

Objetivo Específico 1: Investigação das propriedades estruturais e eletrônicas de materiais de carbono, buscando entender os efeitos de diferentes mudanças estruturais, defeitos, grau de oxidação e alterações de composição.

Objetivo Específico 2: Investigação das propriedades estruturais, eletrônicas, ópticas e topológicas de ligas de dicalcogenetos de metais de transição (TMDs) da família Mo, W e Se, buscando entender o papel dos componentes das ligas e defeito em suas propriedades.

Objetivo Específico 3: Implementação de ferramentas computacionais para criação de base de dados de resultados de DFT, visando a execução automática de cálculos, catalogação, armazenamento e disponibilização dos resultados de modo a aumentar a integração entre as diferentes divisões do laboratório.

Referências

[A] From DFT to machine learning: recent approaches to materials science—a review. GR Schleder, ACM Padilha, CM Acosta, M Costa, A Fazzio. *Journal of Physics: Materials* 2 (3), 032001, 2019.

[TMD] Costa, et al Bruno Focassio, Luis M. Canonico, Tarik P. Cysne, Gabriel R. Schleder, R. B. Muniz, Adalberto Fazzio, and Tatiana G. Rappoport, *Phys. Rev. Lett.* 130, 116204 (2023).

[PIC] Rafael L. H. Freire, F. Crasto de Lima and A. Fazzio, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 26, 9149 (2024)

[INTERF] A. L. Araújo, F. Crasto de Lima, C. H. Lewenkopf, and A. Fazzio, *Phys. Rev. B* 109, 085142 (2024)

[BORO] Wanderlã L. Scopel, F. Crasto de Lima, Pedro H. Souza, José E. Padilha, and Roberto H. Miwa, *J. Phys. Chem. C*, 127, 17556 (2023)

[NCLGO] Romana Petry, Gustavo H. Silvestre, Bruno Focassio, Felipe Crasto de Lima, Roberto H. Miwa, and Adalberto Fazzio, *Langmuir* 38, 1124 (2022)