

INVESTIGAÇÃO TEÓRICA DAS PROPRIEDADES DO Y-GRAFINO E SEU POTENCIAL EM SENSORES DE GASES: UMA ABORDAGEM COM SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS

BARBOSA, Sara da Costa¹; SOUSA, Regina Lélis de²;

RESUMO

Este trabalho designou-se a investigar propriedades estruturais, energéticas, eletrônicas e cinéticas de um alótropo de carbono, tendo como objeto central o denominado γ -grafino. suas propriedades mecânicas e eletrônicas excepcionais que o qualificam para uma ampla gama de aplicações tecnológicas, incluindo dispositivos eletrônicos, sensores, além de potenciais usos biomédicos. Os valores de energia de corte de 45 Ry para as ondas planas (e 450 Ry para a densidade eletrônica) são suficientes para a descrição dos sistemas investigados, tanto no esquema PBE quanto no LDA. Adotou-se um grid k de $8 \times 8 \times 1$ sendo este duplicado para os cálculos de densidade de estados, foram fixados os grids de pontos k, estabelecidos como $8 \times 8 \times 8$ para ambos os funcionais de troca e correlação. Observou-se que os gaps do Y-grafino confirmam sua semicondutividade e esses resultados confirmam a estabilidade do sistema com custo computacional reduzido.

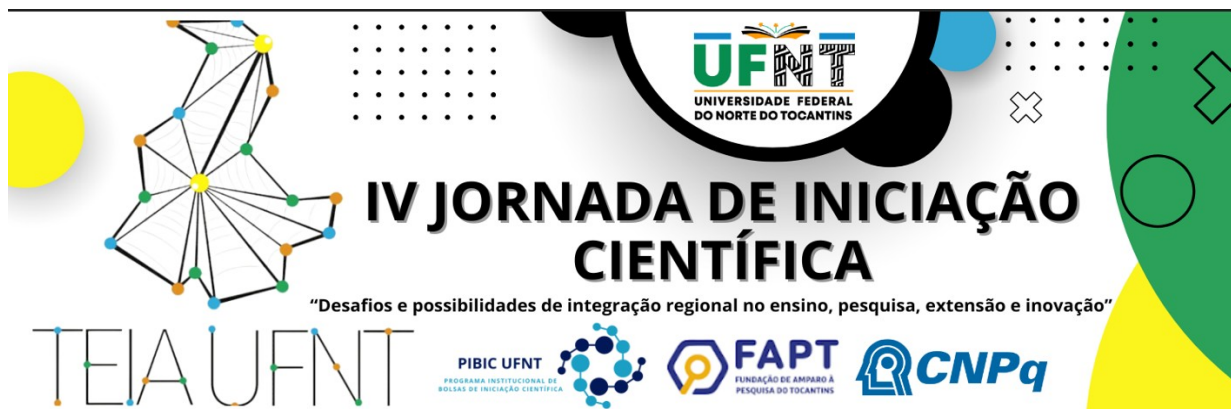
Palavras-chave: Y-grafino. Simulações. Sensores de gases.

I. INTRODUÇÃO/JUSTIFICATIVA

O presente estudo dedica-se a investigações teóricas das propriedades estruturais, energéticas, eletrônicas e cinéticas de materiais bidimensionais (2D) e de seus análogos unidimensionais (1D) e tridimensionais (3D), tendo como objeto central o alótropo de carbono denominado γ -grafino. Alótropos de carbono, como o grafeno e o grafite, consolidaram-se como paradigmas em ciência de materiais em virtude de

¹ Bolsista do Programa de Iniciação Científica (PIBIC/PIBITI). Universidade Federal do Norte do Tocantins (UFNT), Centro de Ciências Integradas. sara.barbosa@ufnt.edu.br.

² Orientadora do Programa de Iniciação Científica. Universidade Federal do Norte do Tocantins (UFNT), Centro de Ciências Integradas. E-mail:regina.sousa@ufnt.edu.br



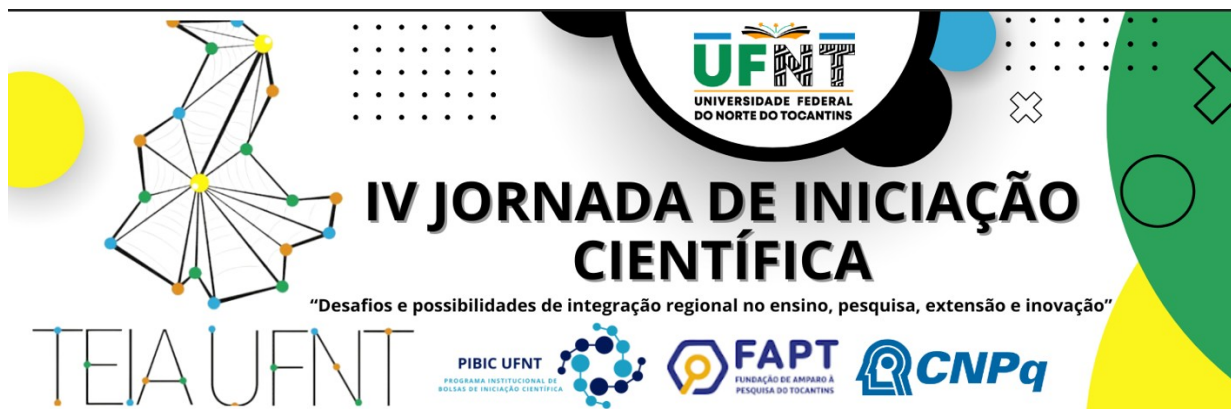
suas propriedades mecânicas e eletrônicas excepcionais que os qualificam para uma ampla gama de aplicações tecnológicas, incluindo dispositivos eletrônicos, sensores, membranas funcionais e sistemas de armazenamento de energia. Trata-se de uma pesquisa de caráter interdisciplinar, situada no campo das Ciências Exatas e da Terra e que dialoga com áreas específicas como Materiais Avançados, Engenharia de Materiais, Síntese, Fabricação e Nanotecnologia. Assim, este projeto busca contribuir para o desenvolvimento de tecnologias inovadoras e sustentáveis, ampliando a compreensão fundamental e aplicada sobre materiais emergentes.

A relevância da investigação reside no fato de que a versatilidade do carbono, decorrente de suas possibilidades de hibridização sp^2 e sp , permite a formação de uma diversidade notável de alótropos com propriedades físico-químicas singulares. Nesse contexto, a descoberta e a síntese do γ -grafino configuram um marco, com impactos expressivos em áreas como eletrônica, armazenamento de energia, catálise, proteção contra radiação ultravioleta, desenvolvimento de transistores de última geração, aplicação em membranas de separação de gases e líquidos, além de potenciais usos biomédicos (ALAGHEMANDI et al., 2014).

Ao oferecer uma análise aprofundada das propriedades e potenciais aplicações do γ -grafino, esta pesquisa pretende impulsionar avanços significativos nos setores de eletrônica, energia e saúde, contribuindo para a consolidação do conhecimento científico sobre materiais bidimensionais e, em particular, sobre o γ -grafino, no contexto de tecnologias flexíveis, inteligentes e sustentáveis.

II. OBJETIVOS

Investigar teoricamente as propriedades de monocamadas de γ -grafino por meio de simulações computacionais avançadas e explorar seu potencial como camada ativa de sensores para detecção seletiva de gases nocivos à saúde humana. Investigar os mecanismos de interação entre o γ -grafino e as moléculas gasosas alvo, por meio de estudos de absorção e alterações nas propriedades eletrônicas do γ -grafino



induzidas pela presença dessas moléculas; Realizar simulações computacionais utilizando técnicas de primeiros princípios, técnicas clássicas para investigar as propriedades estruturais, energéticas, eletrônicas e cinéticas do γ -grafino em suas formas cristalina e 2D, tanto em monocamadas quanto em multicamadas; Avaliar se o γ -grafino pode ser empregado como camada ativa em sensores capazes de detectar seletivamente gases perigosos para os seres humanos.

III. METODOLOGIA

A execução deste projeto baseia-se na modelagem de monocamadas de γ -grafino por meio de simulações computacionais fundamentadas em técnicas de primeiros princípios, utilizando a Teoria do Funcional da Densidade (DFT). Os cálculos foram realizados com o código de domínio público Quantum ESPRESSO (PWSCF), que emprega pseudopotenciais para descrever as interações entre os elétrons de caroço e o núcleo atômico, em conjunto com funções de base do tipo ondas planas para a expansão da função de onda (Giannozzi et al., 2009; Giannozzi et al., 2017). Com o intuito de reduzir o custo computacional sem perda significativa de precisão, foram adotados pseudopotenciais do tipo ultrasuave.

As interações de troca e correlação eletrônica foram tratadas a partir de duas aproximações distintas: LDA-PZ (Local Density Approximation – Perdew- Zunger) e GGA-PBE (Generalized Gradient Approximation – Perdew-Burke- Ernzerhof). A solução das equações de Kohn–Sham foi obtida pela discretização do espaço recíproco, com grades de pontos k geradas segundo o método de Monkhorst–Pack.

IV. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O grafino apresenta três formas estruturais possíveis: α -, β - e γ -grafino. Neste trabalho, o foco recai sobre as monocamadas de γ -grafino (Figura 1), uma vez que esta configuração hexagonal é reconhecida como a mais estável entre as três (Puigdollers et al., 2016). Resultados de otimização dos parâmetros de rede no plano das monocamadas evidenciam desacordo com os dados da literatura são menores que 0,5%.

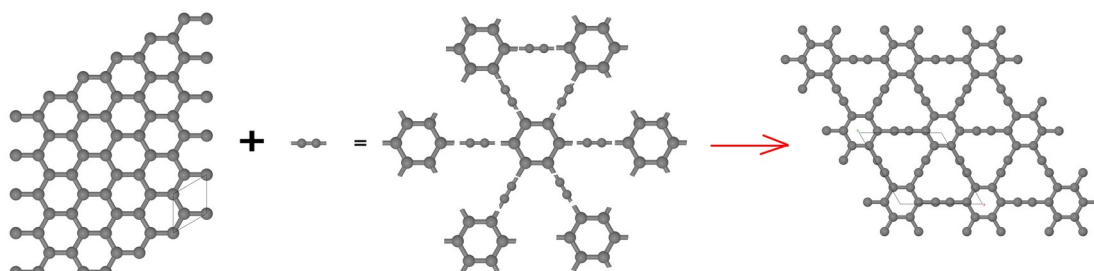
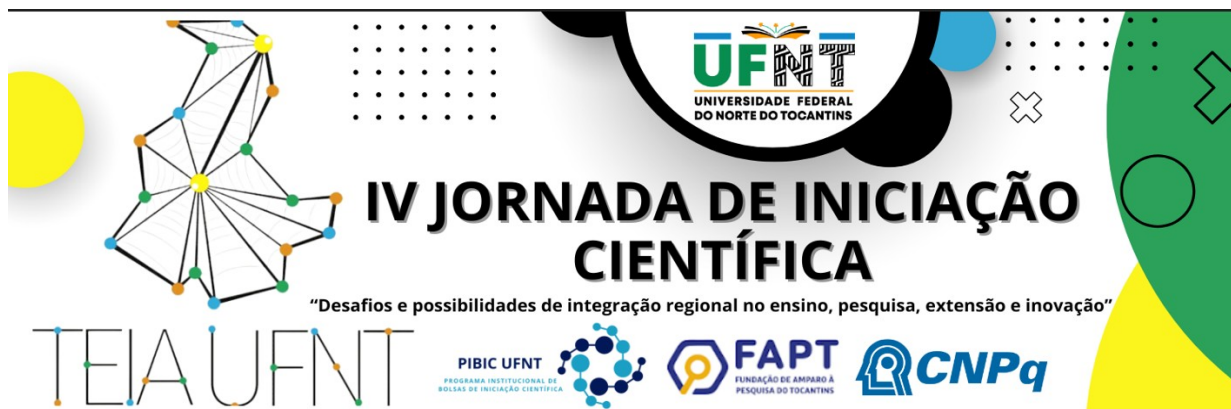


Figura 1: Formação estrutural do grafino sintetizado a partir da soma das ligações dos anéis de grafeno sp^2 com uma ligação tripla de carbono sp , gerando o alótropo grafino.

Após a definição dos grids de pontos k , procedeu-se ao cálculo da energia de coesão do sistema. Essa grandeza representa a quantidade de energia necessária para dissociar todos os átomos constituintes de um sólido até o estado de átomos neutros e isolados, sem qualquer interação residual. Em termos físicos, valores mais negativos de energia de coesão indicam estruturas mais estáveis, refletindo ligações atômicas mais fortes e maior resistência do material à separação. Para fins de validação, os resultados foram comparados com dados de referência disponíveis na literatura. Segundo Kenarsari et al. (2023), a energia de coesão do γ -grafino é de aproximadamente $-8,564$ eV. Os valores obtidos neste estudo mostram excelente concordância com esse resultado, confirmando a consistência da metodologia empregada. Os dados numéricos correspondentes estão sumarizados na Tabela 1. O γ -grafino é um material semiconductor de gap direto em M, conforme pode ser comprovado pela inspeção da estrutura de bandas apresentada na figura 2. Com o objetivo de caracterizar em maior detalhe o comportamento eletrônico do material, realizou-se a análise da Projeção da Densidade de Estados (PDOS).

Tabela 1: Dados de energia de coesão em comparação com os dados teóricos da literatura e a diferença relativa entre eles.

Monocamada	E_coesão (eV)	Teor.-PBE/PAW [Kenarsari et al, 2023]	Dif.Relativa (%)	Teor.PBE+D2 (PUIGDOLLER S, et al, 2016)	Dif. Relativa(%)
LDA-PZ – C	-9.36	-8.56	-9.3	-7.21	-29.8
GGA-PBE -C	-8.58	-8.56	-0.2	-7.21	-19.0
GGA-PBE-vdW – C	-8.62	-8.56	-0.7	-7.21	-19.6
LDA-PZ – D	-9.36	-8.56	-9.3	-7.21	-29.8
GGA-PBE – D	-8.58	-8.56	-0.2	-7.21	-19.0
GGA-PBE-vdW – D	-8.62	-8.56	-0.7	-7.21	-19.6



A representação gráfica correspondente encontra-se na Figura 3, permitindo comparar o gap de energia do grafino com os de outros alótropos de carbono, como grafeno e grafite. Ressalta-se que, especialmente no caso do grafeno, já foram reportadas evidências de que a semicondutividade em multicamadas pode depender fortemente do tipo de empilhamento das folhas atômicas (Lelis-Sousa, 2020). A análise da PDOS revela uma tendência clara para os gaps eletrônicos dos três materiais considerados, seguindo a ordem: $E_g(\text{grafite}) < E_g(\text{grafeno}) < E_g(\text{grafino})$. Essa hierarquia fornece evidências diretas da maior estabilidade eletrônica do γ -grafino no que tange ao confinamento eletrônico.

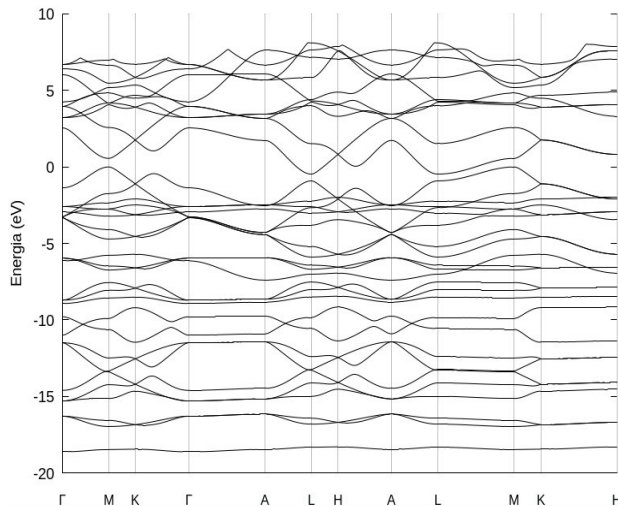
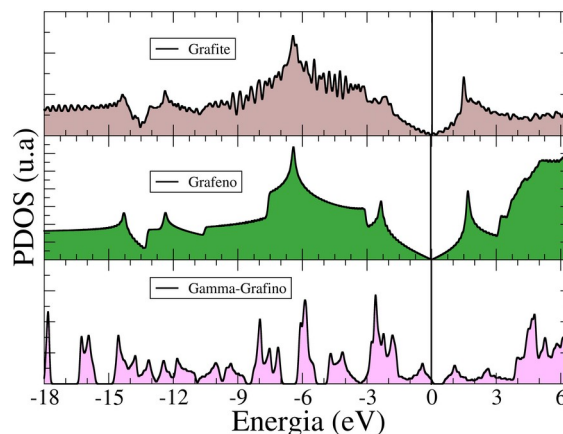


Figura 2: Estrutura de bandas do gamma-grafino com LDA mostrando que os elétrons tem alta condutividade devido ao comportamento das bandas de condução.

Em termos práticos, a magnitude do gap de energia é um parâmetro determinante para avaliar a condutividade eletrônica, possibilitando classificar os materiais como condutores, semicondutores ou isolantes.



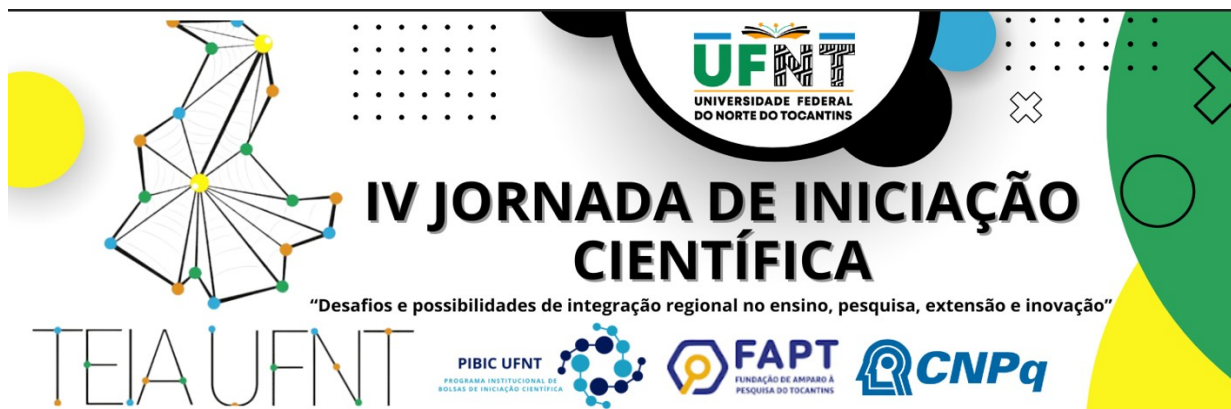


Figura 3: Projeção de densidade de estados (PDOS) demonstrando os gaps de energia do grafino em comparação com o grafite e o grafeno. Evidencia-se que o γ -grafino possui o gap mais aberto demonstrando sua semicondutividade.

Para uma análise mais aprofundada do γ -grafino, foram geradas duas PDOS utilizando o funcional GGA-PBE (Figura 4), com o objetivo de examinar a distribuição eletrônica nos orbitais s e p dos átomos de carbono em estados de hibridização sp e sp². Os resultados indicam que os orbitais s não contribuem significativamente até o topo da banda de valência, independentemente da hibridização considerada.

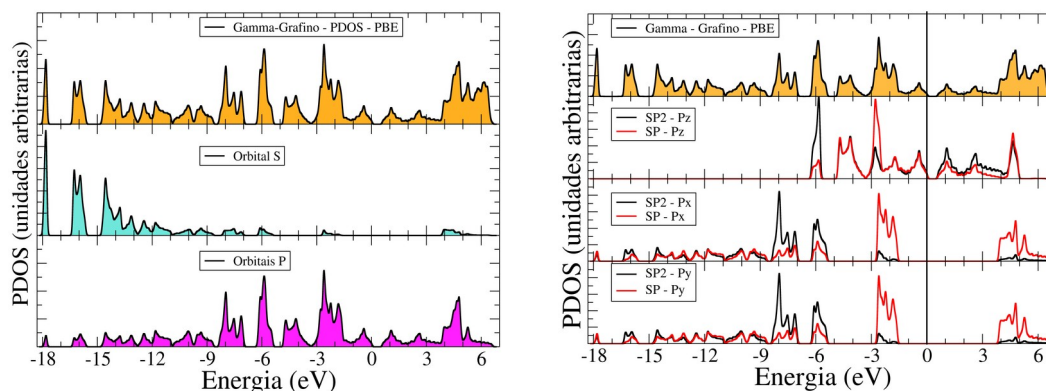


Figura 4: PDOS para gamma-grafino com as contribuições eletrônicas dos orbitais S e P dos carbonos. À direita apresentam-se as contribuições dos orbitais p (componentes px, py, pz) pertencentes aos átomos de C com hibridização sp e sp².

V. CONCLUSÃO/CONSIDERAÇÕES FINAIS

Extensos testes de convergência demonstraram que valores de energia de corte de 45 Ry para as ondas planas (e 450 Ry para a densidade eletrônica) são suficientes para a descrição dos sistemas investigados, tanto no esquema PBE quanto no LDA. Para os cálculos estruturais, adotou-se um grid k de 8×8×1 sendo este duplicado para os cálculos de densidade de estados, de modo a assegurar maior precisão na descrição eletrônica. Adicionalmente, verificou-se que o aumento da energia de corte para 50 Ry não conduz a diferenças significativas, resultando em variações de apenas – 0,001 Ry para o LDA-PZ e –0,0007 Ry para o GGA-PBE. A definição da célula unitária e da energia de corte das ondas planas, foram fixados os grids de pontos k, estabelecidos como 8×8×8 para ambos os funcionais de troca e correlação. Observou-se que os gaps do γ -grafino confirmam sua



semicondutividade e esses resultados confirmam a estabilidade do sistema com custo computacional reduzido.

VI. REFERÊNCIAS

- laghemandi, M., Chem. Phys. Lett. 629 65-69, 2015.;
- Asadpour, M. et al. Solid State Communications, <http://dx.doi.org/10.1016/j.ssc.2015.02.005>, 2015;
- Bhattacharya, B., Singh, N.B., Sarkar, U., Int. J. Quant. Chem. 115, 820-829, 2015.;
- GIANNOZZI, P. et al JOURNAL OF PHYSICS: CONDENSED MATTER, 21, 395502, 2009.
- GIANNOZZI, P. et al. JOURNAL OF PHYSICS: CONDENSED MATTER, 29, 465901, 2017.
- Hu, Y., Wu, C., Pan, Q. et al. Nat.Synth 1, 449–454, (<https://doi.org/10.1038/s44160-022-00068-7>), 2022.
- Kang, B. e Lee, J. Y., Synthesis of g-graphyne by mechanochemistry and its electronic structure, Carbon, 136, 248-254, 2018.;
- Kou, J. et al, Phys. Chem. Chem. Phys. 15, 16120-16126, 2013.;
- Li, X. et al, Applied Physics Reviews 4, 021306 (doi: 10.1063/1.4983646); 2017.). Li, Q. et al, 2016;
- Puigdollers, A. R.; Alonso, G. and Gamallo, P., Nano 9 (3), 1450032/1-8, 2014).
- Wu, P., Du, P., Zhang, H., Cai, C., , Phys. Chem. Chem. Phys. 17 (2), 1441-1449, 2015.

TRABALHO ACADÊMICO

BARBOSA, Sara da Costa; SOUSA, Regina Lélis. *Ivestigação Teórica das Propriedades do Y-grafino e seu Potencial em Sensores de Gases: uma Abordagem Computacional*. 2025. *Graduação em Licenciatura em Física- Pesquisa de Iniciação Científica* (Universidade Federal do Norte do Tocantins, Araguaína, 28/11/2025.

VII. AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao CNPQ por financiar a bolsa de pesquisa, o aporte de recursos financeiros do projeto INEO-MCTI e o uso das facilidades computacionais do CENAPAD-SP.