

SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
COORDENAÇÃO DO CURSO DE FÍSICA

DEFESA DE TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Autora: Vitória da Silveira Gomes

“NANOSENSOR DE GASES DE BOROFENO β_{12} DOPADO COM CARBONO”

Orientador: Prof. Dr. Rodrigo Garcia Amorim

Banca Examinadora:

*Rodrigo Garcia Amorim, D.C.
Adriano de Souza Martins, D.C.
Marcos Veríssimo Alves, D.C.*

*(Orientador – UFF)
(UFF)
(UFF)*

Resumo:

Neste trabalho, foram investigadas as propriedades eletrônicas e estruturais do borofeno na fase β_{12} dopado com carbono, assim como a interação do sólido com gases relevantes para o ambiente, por meio de cálculos baseados na Teoria do Funcional da Densidade. Usando o programa de simulação computacional SIESTA, os parâmetros numéricos foram otimizados, assim como a amostragem de pontos k e o mesh cutoff. Após a relaxação, a energia de ligação foi avaliada a fim de analisar a interação do material dopado com os gases CO, CO₂, NO e NO₂. Os resultados mostraram que os gases contendo nitrogênio foram detectados com mais facilidade. Com os resultados encontrados, é possível concluir que o material possui características promissoras para o desenvolvimento de sensores baseados em materiais 2D, devido a forte interação com determinadas moléculas.

Dia: 6^a feira, 05/12/2025

Hora: 15:30

Sala: 211C