

## ESTUDO COMPUTACIONAL DO SILICENO 2D UTILIZADO EM BATERIAS DOPADAS COM NÍQUEL

Amanda S. da Silva  
amanda.silva13@sou.ufmt.br

Ericson Hamissés N. S. Thaines  
hthaines@unicamp.br

Renato Garcia Freitas  
renato.sobrinho@ufmt.br

### Introdução.

Os materiais em camadas bidimensionais (2D) despertam um interesse significativo devido às suas propriedades elétricas, ópticas e termodinâmicas excepcionais [1,16,3]. Heteroestruturas fundamentadas nesses materiais 2D [13,18], têm sido objeto de investigação. Recentemente, estruturas que apresentam interações robustas entre suas camadas, como heteroestruturas do tipo doador-aceitador (DA) [2], compostas por eletrodos e siliceno, demonstraram um promissor potencial em aplicações relacionadas ao armazenamento de energia, em especial nas baterias de íons de lítio (LIBs) [4,12]. A dopagem e otimização das propriedades estruturais e eletrônicas destas heteroestruturas, são aspectos fundamentais para a melhoria de seu desempenho [7,9,15].

### Metodologia.

Os cálculos estruturais e eletrônicos dos materiais de ancoragem 2D (siliceno), foram realizados por meio da Teoria do Funcional da Densidade (DFT) [8,10] implementada no pacote computacional Quantum ESPRESSO [6]. Uma parametrização de sistemas por meio de diferentes funcionais de troca e correlação, pseudopotenciais e energia de corte, além de testes de convergência para pontos- $k$  foram realizados. A interação eletrônica foi descrita por pseudopotencial ultra-soft (US-PP). As propriedades eletrônicas foram calculadas utilizando as interações de troca e correlação eletrônica descritas pelo funcional desenvolvido por Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) [14] com energia de corte de 45 Ry. Para a zona de Brillouin, foi utilizada uma malha de  $4 \times 4 \times 2$  de pontos- $k$  para estrutura do silício - 2D simulado em uma caixa hexagonal. A malha de pontos- $k$  baseia-se no método desenvolvido por Monkhorst-Pack [11]. Foi realizado cálculos da densidade de estados projetados (PDOS) e estrutura de bandas para estudar as propriedades eletrônicas.

### Resultados e Discussões.

O siliceno é um semimetal (semicondutor sem gap) porque as bandas de valência e condução se tocam no nível de Fermi. Além disso por ser um portador de carga, o siliceno se comporta como férmion de Dirac “sem massa”, uma vez que as bandas de valência e condução se cruzam ao nível de Fermi, como interseções lineares das bandas no ponto K da zona de Brillouin hexagonal. A estrutura de bandas eletrônicas e a densidade de estados para o siliceno puro. O siliceno é um material anódico promissor



para baterias devido à sua alta capacidade, baixa barreira de energia de difusão e band gap ajustável [5,19,17].

Para revelar o efeito da dopagem de Ni, que é um metal de transição, nas propriedades eletrônicas do siliceno, a densidade de estados parcialmente projetados (PDOS) foi plotada para que os resultados pudessem ser analisados. A análise dos PDOS para o siliceno puro e o siliceno dopado com um átomo de níquel (Ni) demonstra as diferentes contribuições na distribuição dos estados eletrônicos. Na estrutura de siliceno puro, a densidade de estados está distribuída principalmente nos orbitais  $p$  e  $s$  do silício, representados por  $Si-p$  e  $Si-s$ . Na estrutura de siliceno dopado com níquel, a dopagem introduz novos estados na estrutura eletrônica, evidenciados pela contribuição dos orbitais  $d$  do níquel ( $Ni-d$ ), que aparecem próximos ao nível de Fermi e se destacam em relação ao siliceno puro. Esses novos estados indicam uma forte interação entre os átomos de silício e o átomo de níquel dopante, aumentando a densidade de estados total na região próxima ao nível de Fermi.

### **Conclusão.**

A dopagem do siliceno com um átomo de níquel altera significativamente suas propriedades eletrônicas. Enquanto o siliceno puro apresenta características de um semimetal, com bandas de valência e condução que se tocam no nível de Fermi, a introdução de um átomo de níquel adiciona novos estados eletrônicos próximos ao nível de Fermi. Esses novos estados, atribuídos aos orbitais  $d$  do níquel, refletem uma interação intensa entre o níquel e o silício, resultando em uma modificação na densidade de estados total. Essas alterações podem implicar em uma maior condutividade, tornando-o um material promissor para aplicações em dispositivos eletrônicos, como baterias.

### **Palavras-Chave.**

Silicileno; Materiais Bidimensionais; Modelagem de Materiais; DFT.

### **Fonte Financiadora.**

Gostaria de expressar minha sincera gratidão ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela concessão da bolsa de iniciação científica, a qual tem desempenhado um papel crucial no progresso deste projeto. Agradeço à Universidade Federal de Mato Grosso (UFMT) por oferecer um ambiente de aprendizado enriquecedor e por estimular a pesquisa. Meus agradecimentos especiais são dirigidos ao laboratório onde estou realizando minha iniciação científica, a orientação e os ensinamentos proporcionados pelos professores e colegas têm se mostrado inestimáveis. Os autores agradecem pelo apoio da FAPESP (processo n.º 2017/11986-5) e da Shell e a importância estratégica do apoio fornecido pela ANP (Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis), FAPEAM, FAPEMAT e CNPq por recursos financeiros. Agradecemos também ao CENAPAD/SP, UFMT-STI/Server pelo fornecimento de tempo computacional.

### **Referências.**



- [1] CASTRO NETO A. H., GUINEA F., PERES N. M. R., NOVOSELOV K. S., GEIM A. K. **The electronic properties of graphene.** Rev. Mod. Phys. 81 (2009) 109–162.
- [2] WOOMER A. H., DRUFFEL D. L., SUNDBERG J. D., PAULIK J. T., WARREN S. C. **Bonding in 2D donor-acceptor heterostructures.** J. Am. Chem. Soc. 141 (2019) 10300–10308.
- [3] GEIM A. K., NOVOSELOV K. S. **The rise of graphene.** Nat. Mater. 6 (2007) 183–191.
- [4] SLASSI A., CORNIL J. **Theoretical characterization of strain and interfacial electronic effects in donor-acceptor bilayers of 2D transition metal dichalcogenides.** 2D Mater. 6 (2018) 015025.
- [5] TRITSARIS G. A., KAXIRAS E., MENG S., WANG E. **Adsorption and diffusion of lithium on layered silicon for Li-ion storage.** Nano Lett. 13 (2013) 2258–2263.
- [6] GIANNOZZI P., et al. **Quantum espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials.** Journal of physics: Condensed matter, IOP Publishing, v. 21, n. 39, p. 395502, 2009.
- [7] ZHANG G., LI X., WANG M., HUANG S., CHEN D., et al. **2D/2D hierarchical Co3O4/ZnIn2S4 heterojunction with robust built-in electric field for efficient photocatalytic hydrogen evolution.** Nano Res. 16 (2022) 6134–6141.
- [8] HOHENBERG, P., KOHN, W. **Inhomogeneous electron gas.** Physical review, APS, v. 136, n. 3B, p. B864, 1964.
- [9] XU H., LI J., CHU X. **Interfacial built-in electric-field for boosting energy conversion electrocatalysis.** Nanoscale Horiz. 8 (2023) 441–452.
- [10] KOHN, W., SHAM, L. J. **Self-consistent equations including exchange and correlation effects.** Physical review, APS, v. 140, n. 4A, p. A1133, 1965.
- [11] MONKHORST, H. J., PACK, J. D. **Special points for brillouin-zone integrations.** Phys. Rev. B, v. 13, p. 5188–5192, 1976.
- [12] YOU M., GUO G., LUO S., ZHONG J. **Rational design of a C3N/C3B p–n heterostructure as a promising anode material in Li-ion batteries.** Dalton Trans. 52 (2023) 2062–2072.
- [13] AJAYAN P., KIM P., BANERJEE K. **Two-dimensional van der waals materials.** Phys Today 69 (2016) 38–44.



- [14] PERDEW J. P., BURKE K., ERNZERHOF M. **Generalized gradient approximation made simple**. Phys. Rev. Lett., v. 77, p. 3865–3868, 1996.
- [15] CHI Q., ZHU G., JIA D., YE W., WANG Y., WANG J., et al. **Built-in electric field for photocatalytic overall water splitting through a TiO<sub>2</sub>/BiOBr p-n heterojunction**, Nanoscale 13 (2021) 4496–4504.
- [16] WANG Q. H., ZADEH K., KIS A., COLEMAN J. N., STRANO M. S. **Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides**. Nat. Nanotechnol. 7 (2012) 699–712.
- [17] LIN X. Q., NI J. **Much stronger binding of metal adatoms to silicene than to graphene: a first-principles study**. Phys. Rev. B 86 (2012) 075440.
- [18] LIU Y., HUANG Y., DUAN X. **Van der waals integration before and beyond two-dimensional materials**, Nature 567 (2019) 323–333.
- [19] NI Z., LIU Q., TANG K., ZHENG J., ZHOU J., QIN R., GAO Z., YU D., LU J. **Tunable bandgap in silicene and germanene**, Nano Lett. 12 (2012) 113–118.

