



## Estudos computacionais da estrutura eletrônica de heteroestruturas bimetálicas

Lucas dos Reis Maia\*, Miguel Angel San Miguel Barrera

### Resumo

As heteroestruturas bimetálicas são de grande importância por apresentarem características e propriedades únicas, que não são a combinação direta das propriedades dos metais individuais, e sim um efeito sinérgico dos componentes. As aplicações são diversas incluindo sensores, catálise, fotoluminescência, atividade antibactericida, etc. Provocando na atualidade enorme interesse em pesquisa experimental e teórica. Este projeto tem o objetivo de estudar, usando métodos computacionais baseados na teoria do funcional de densidade (DFT - Density Functional Theory), heteroestruturas bimetálicas formadas por Ouro (Au), Prata (Ag), Bismuto (Bi) e Índio (In). Em três etapas, o projeto abordará: i) o estudo das propriedades de bulk de cada metal; ii) a elaboração de modelos computacionais de slab das principais superfícies e iii) construção de heteroestruturas bimetálicas de Au/ Ag, Ag/Bi, Ag/In. Nos estudos será conveniente usar o pacote computacional VASP (Vienna Ab initio Simulation Package), que permitirá um maior entendimento das propriedades eletrônicas desses sistemas, particularmente no que se refere aos processos de transferência de carga entre os metais.

### Palavras-chave:

*Heteroestruturas bimetálicas, DFT- Density Functional Theory, pacote computacional VASP.*