

MESTRADO EM FÍSICA
(Perfis: Física Fundamental e Física Aplicada)

Edição - 2014/2015

Proposta de tese

Título/Tema:

Propriedades electrónicas de materiais bidimensionais

Orientador:

Ricardo Mendes Ribeiro

Tel./e-mail:

253604335 / ricardo@fisica.uminho.pt

Objetivos:

Cálculo da estabilidade energética, das propriedades electrónicas e ópticas de materiais bidimensionais da forma $MX_{1+z}Y_{1-z}$ ($M=W, Mo$; $X=S$; $Y=Se$; $0 < z < 1$).

Resumo:

Os materiais bidimensionais, como o grafeno, o nitrato de boro (BN), os dicalcogenetos (MX_2 $M=W, Mo$; $X=S, Se$) inauguraram um novo espaço de desenvolvimento tecnológico e científico. As suas propriedades extraordinárias já permitiram desenvolver protótipos de muitos dispositivos inovadores, que prometem uma verdadeira revolução tecnológica. O conhecimento aprofundado destes materiais constitui uma mais valia para quem trabalha em ciências de materiais ou Física do estado sólido.

Este trabalho consiste em estudar materiais bidimensionais usando os métodos numéricos da Teoria do Funcional da Densidade (DFT). (usando software já desenvolvido) para calcular a estabilidade energética, as propriedades electrónicas e ópticas de materiais bidimensionais da forma $MX_{1+z}Y_{1-z}$ ($M=W, Mo$; $X=S$; $Y=Se$; $0 < z < 1$).

O software a utilizar é o Quantum Espresso.

Este trabalho permitirá ao estudante o domínio da técnica mais utilizada para determinar as propriedades microscópicas de materiais, tanto por teóricos como por experimentalistas.

Assinatura

Data

31-3-2014