

## ESTUDO E CARACTERIZAÇÃO DE SUBSTRATOS BASEADOS EM GOLDENE PARA ADSORÇÃO MOLECULAR VIA TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE

WANDERSON S. ARAÚJO<sup>1</sup>; JOSÉ R. BORDIN<sup>2</sup>; CAROLINA F. MATOS<sup>3</sup>;  
MAURÍCIO J. PIOTROWSKI<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Universidade Federal de Pelotas, Departamento de Física —*  
*wandersonsouza392@gmail.com*

<sup>2</sup>*Universidade Federal de Pelotas, Departamento de Física — jrbordin@ufpel.edu.br*

<sup>2</sup>*Universidade Federal de Santa Maria, Departamento de Química —*  
*carolina.matos@uol.com.br*

<sup>3</sup>*Universidade Federal de Pelotas, Departamento de Física — mauriciomjp@gmail.com*

### 1. INTRODUÇÃO

A busca por alternativas sustentáveis e inovadoras tem direcionado esforços científicos para o desenvolvimento de novos materiais que conciliem desempenho tecnológico elevado com baixo consumo de recursos e energia. Nesse contexto, os materiais bidimensionais (2D) surgem como soluções promissoras, pois sua estrutura atomicamente fina permite funcionalidades avançadas utilizando quantidade mínima de matéria-prima. Desde a descoberta do grafeno como material estável de camada única em 2004 (Novoselov et al., 2004), a pesquisa em materiais 2D avançou significativamente, impulsionada por suas propriedades singulares e por seu potencial em aplicações eletrônicas, ópticas e catalíticas. Esse marco inaugurou uma nova era na ciência dos materiais, abrindo caminho para a exploração de estruturas ultrafinas com características físicas e químicas distintas de suas contrapartes cristalinas em volume (*bulks*).

Nesse cenário, destaca-se o goldene, uma estrutura composta por uma única camada atômica de ouro. Embora sua existência tenha sido prevista teoricamente há décadas, apenas em 2024 foi sintetizado experimentalmente (Shun et al., 2024). Essa conquista representa um avanço histórico, uma vez que o goldene estabelece o limite extremo da redução dimensional para o ouro, elemento de importância histórica, tecnológica e econômica.

A configuração bidimensional do goldene impõe aos átomos de ouro uma coordenação significativamente reduzida em relação ao *bulk*, resultando em alta razão superfície-volume e grande quantidade de átomos insaturados expostos. Esses fatores modificam substancialmente suas propriedades eletrônicas, ópticas e catalíticas, favorecendo o desempenho em catálise e potencializando aplicações em dispositivos ultrafinos e catalisadores de alta eficiência. Em adição, a possibilidade de funcionalização desses substratos, com vacâncias, por exemplo, é salutar em evidenciar e ampliar propriedades diretamente associadas à efetivação da adsorção de espécies moleculares. Assim, o estudo do goldene e suas possíveis funcionalizações não apenas aprofunda o entendimento fundamental da química e física do ouro em baixas dimensões, mas também revela possibilidades práticas capazes de impactar setores estratégicos da ciência e da indústria.

## 2. METODOLOGIA

A metodologia empregada neste trabalho baseou-se em cálculos computacionais atomísticos fundamentados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT), conforme estabelecido por Hohenberg e Kohn (1964) e Kohn e Sham (1965). Para a descrição dos efeitos de troca e correlação, utilizou-se o funcional de Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE), incorporando as correções de van der Waals propostas por Grimme (D3) a fim de representar de forma precisa as interações de longo alcance. Os cálculos de DFT foram realizados com o pacote computacional *Vienna Ab-initio Simulation Package* (VASP), desenvolvido por Kresse e colaboradores (1993, 1996), que emprega o método do *Projector Augmented Wave* (PAW) para a representação eficiente dos orbitais de Kohn-Sham.

## 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Foram realizadas otimizações estruturais em supercélulas derivadas da célula unitária do goldene, composta por dois átomos de ouro, considerando repetições de 4x4, 5x5 e 6x4. As simulações empregaram condições periódicas no plano  $xy$  e um vácuo de 14 Å ao longo do eixo  $z$ , a fim de evitar interações artificiais entre as imagens periódicas.

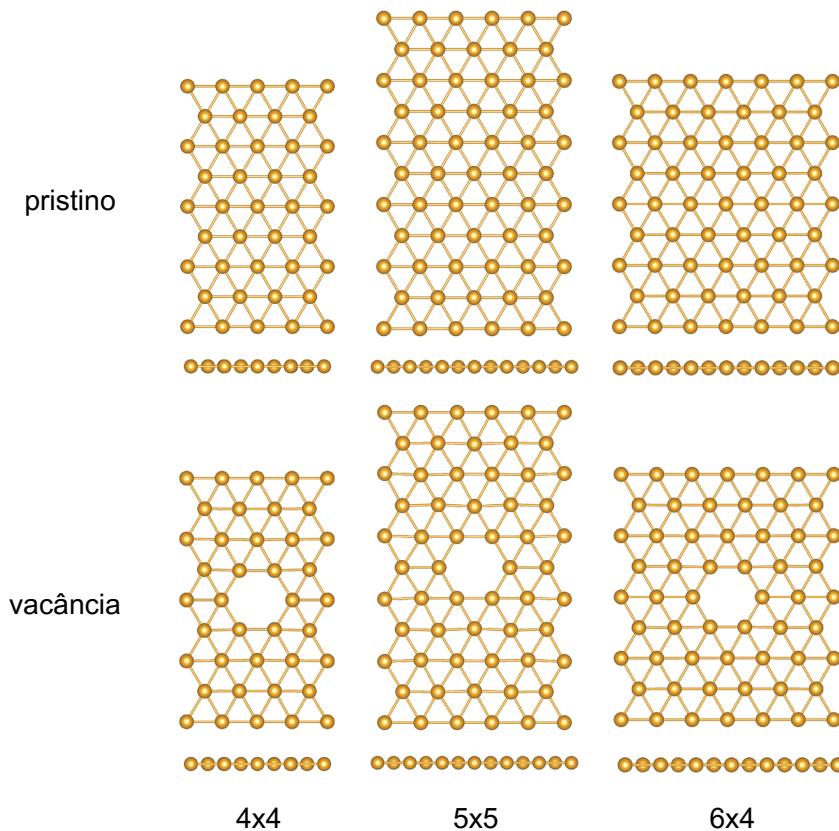


Figura 1: Sistema de supercélulas de goldene 4x4, 5x5 e 6x4 com e sem vacância.

Além das folhas pristinas, foram analisadas estruturas contendo uma vacância simples, simulando possíveis defeitos originados durante a síntese e permitindo

avaliar como essas imperfeições afetam a estabilidade estrutural e a reatividade química do material. A Figura 1 apresenta os modelos estruturais investigados, evidenciando que, mesmo após a criação da vacância, o goldene preserva sua configuração essencialmente planar. Isso indica que a remoção de um átomo de ouro não induz distorções significativas na geometria da folha bidimensional, sugerindo que defeitos pontuais não comprometem a integridade da rede cristalina.

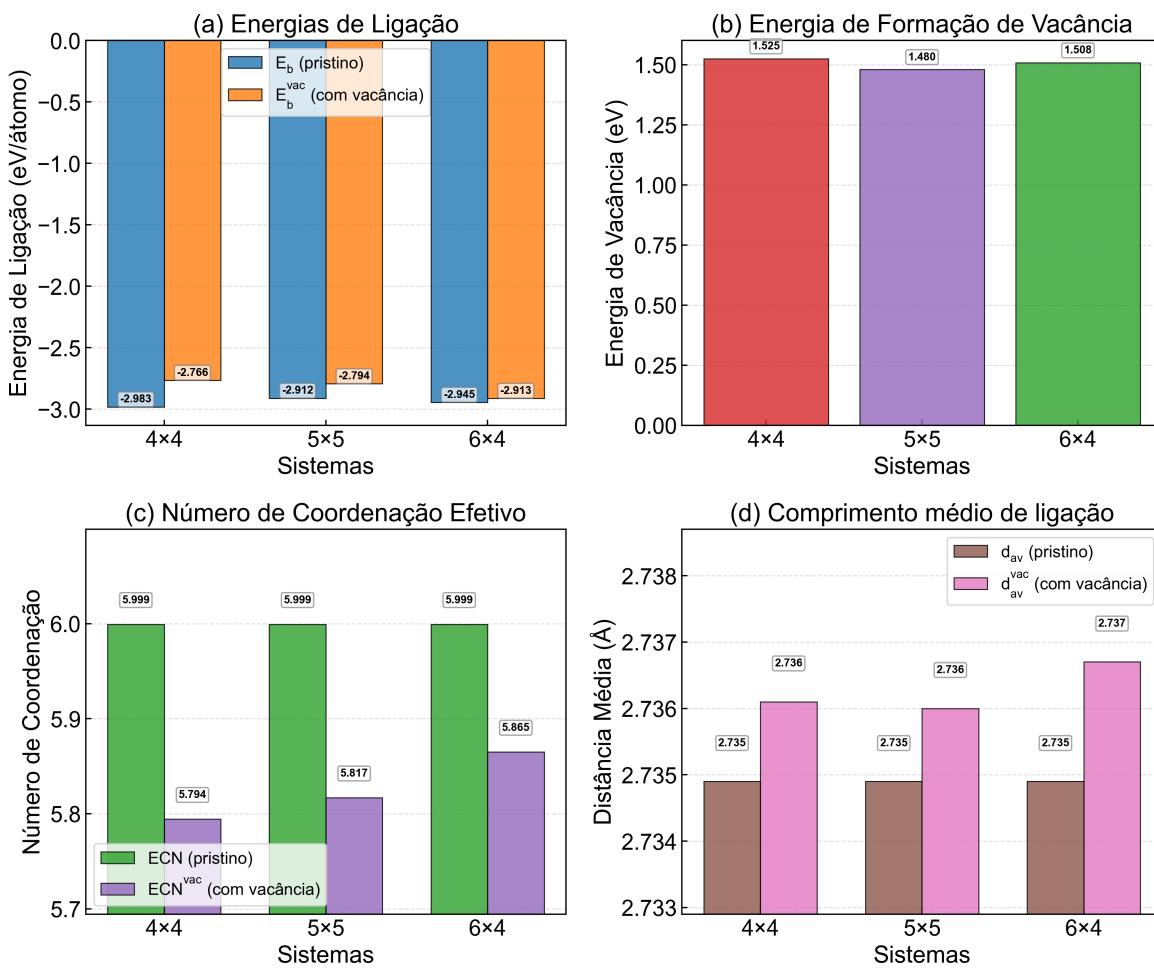


Figura 2: (a) Energia de ligação dos sistemas de goldene com e sem vacância, (b) energia necessária para a formação da vacância, (c) número de coordenação efetivo (ECN) e (d) comprimento médio de ligação dos sistemas estudados.

Na Figura 2 são mostradas as propriedades energéticas e estruturais obtidas. A energia de ligação dos sistemas prístinos apresenta valores próximos de 2,9 eV/átomo, enquanto a introdução de vacâncias causa apenas uma pequena redução nessa magnitude, confirmando a boa estabilidade do material. A energia de formação da vacância é da ordem de 1,5 eV, significativamente menor do que a observada em outros sistemas 2D, como o grafeno ( $\approx 7,7$  eV), indicando que defeitos desse tipo são energeticamente mais acessíveis no goldene. A análise do ECN mostra valores próximos de seis nos sistemas prístinos, como esperado para uma rede hexagonal planar, e ligeira redução na presença de vacância, sem comprometer a planaridade. Já o comprimento médio das ligações apresenta leve aumento na presença do defeito, reflexo da redistribuição das ligações ao redor da vacância.

Esses resultados evidenciam que o goldene mantém estabilidade estrutural significativa mesmo na presença de defeitos, reforçando seu potencial para aplicações em adsorção molecular, dopagem controlada e modificação estrutural voltada ao ajuste de suas propriedades eletrônicas e catalíticas.

#### 4. CONCLUSÕES

As análises realizadas evidenciam que o goldene apresenta elevada estabilidade estrutural, tanto em sua forma pristina quanto na presença de vacâncias simples. Embora a remoção de um átomo de ouro resulte em uma ligeira redução na energia de ligação e em pequenas alterações no número de coordenação, a estrutura mantém-se essencialmente planar, preservando a integridade da rede 2D. Ademais, a baixa energia de formação de vacâncias, significativamente inferior à observada em outros materiais 2D, como o grafeno, indica que tais defeitos são energeticamente viáveis e podem, inclusive, ser introduzidos de forma controlada. Esses resultados posicionam o goldene como um material promissor para aplicações em adsorção molecular, dopagem e outras modificações estruturais destinadas ao ajuste de suas propriedades físico-químicas, reforçando seu potencial para uso em catálise, sensores e dispositivos funcionais avançados.

#### REFERÊNCIAS

- NOVOSELOV, Kostya S. et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, v. 306, n. 5696, p. 666-669, 2004.
- KASHIWAYA, Shun et al. Synthesis of goldene comprising single-atom layer gold. *Nature Synthesis*, v. 3, n. 6, p. 744-751, 2024.
- KOHN, Walter; SHAM, Lu Jeu. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, v. 140, n. 4A, p. A1133, 1965.