

ADSORÇÃO DE LÍTIUM NO MATERIAL BIDIMENSIONAL Ge₂SSE

Rafaela Zalli Cibella – rafazalli@hotmail.com

Prof. Dr. Leandro Seixas Rocha (Orientador) – leandro.seixas@mackenzie.br

RESUMO

Materiais bidimensionais possuem facilidade na sua síntese, alcance de alta densidade de energia, finura, alta superfície de contato, alta reatividade, alta resistência e flexibilidade, além de permitir fácil modificação e/ou inserção de íons. Devido a essas características esse tipo de material vem sendo muito estudado para a implementação em eletrodos de baterias. Nesse trabalho vamos estudar o material 2D Janus, Ge₂SSe. Esse material pode ser empregado para criação de novos dispositivos eletrônicos em nanoescala. Trata-se de um material em que é feita uma quebra de simetria através de uma substituição de elementos de uma subcamada por elementos do mesmo grupo químico. Será analisado a diferença na adsorção do lítio em três matérias diferentes, sulfeto de germânio (GeS), seleneto de germânio (GeSe) e o material Janus (Ge₂SSe). Este trabalho investiga via simulações feitas no software SIESTA a adsorção de lítio nos materiais, avaliando a perspectiva de sua implementação como eletrodo em baterias de íon de Li.

Palavras-chave: Janus. Adsorção de lítio. Ge₂SSe. Bateria.

ADSORPTION OF LITHIUM IN BIDIMENSIONAL MATERIAL Ge₂SSE

ABSTRACT

Two-dimensional materials are easy to synthesize, reach high energy density, fineness, high contact surface, high reactivity, high strength and flexibility, in addition to allowing easy modification and/or insertion of ions. Due to these characteristics, this type of material has been extensively studied for implementation in battery electrodes. In this work we will study the 2D Janus material, Ge₂SSe. This material that can be used to create new nanoscale electronic devices. It is a material in which symmetry is broken by replacing elements of a sublayer by elements of the same chemical group.

The difference in lithium adsorption on three different materials will be analyzed, germanium sulfide (GeS), germanium selenide (GeSe) and the Janus material (Ge₂SSe). This work investigates, via simulations carried out in the SIESTA software, the adsorption of lithium on materials, evaluating the perspective of its implementation as an electrode in Li-ion batteries.

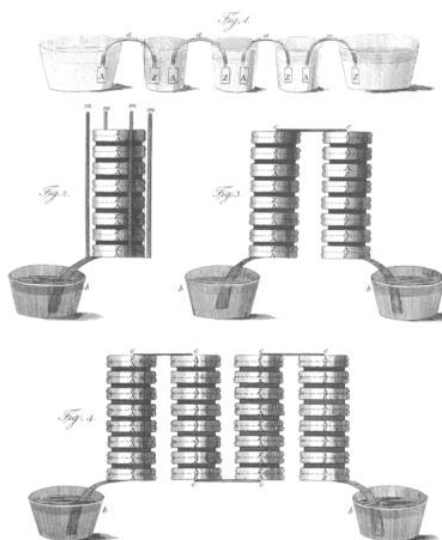
Keywords: Janus. Lithium adsorption. Ge₂SSe. Battery.

1 INTRODUÇÃO

A humanidade vem se tornando cada vez mais dependente de energia elétrica, dentre as diversas fontes de energia que utilizamos no nosso cotidiano, as pilhas e baterias vem tomando cada vez mais espaço nas nossas vidas, pois permitem o uso de energia de forma móvel e algumas vezes portátil, fazendo com que deixemos de lado as tomadas e fios que privam a nossa movimentação. A tecnologia vem evoluindo cada vez mais e com isso as fontes de energia utilizadas também precisam evoluir, se tornando cada vez mais eficiente. A necessidade de um material para a produção de baterias com baixa barreira de difusão do lítio para um carregamento mais rápido, nos levou a pesquisar sobre a adsorção e difusão de lítio em materiais bidimensionais.

A primeira descoberta sobre eletricidade se deu em torno de 1780 por a Luigi Galvani (1737-1798), ao utilizar pernas de rã dessecadas, notou que se tocasse uma das extremidades do músculo com um metal e a outra extremidade com outro metal ocorria uma contração, porém acreditou-se que isso ocorria devido uma “eletricidade animal”. Em 1799, Alessandro Giuseppe Anastasio Volta (1745-1827), sem acreditar que a eletricidade gerada por Galvani era provida de um animal, deu início a sua pesquisa, que acabou sendo responsável pelo desenvolvimento de baterias. Tal experimento tratava-se de uma série de discos de dois metais diferentes que se intercalavam, dando origem ao nome Pilha de Volta. Na intersecção de cada disco havia um pedaço de tecido ou papel embebido com água com sal ou água com carbonato de potássio, dentre os diversos metais que poderiam ser usados, Volta optou inicialmente por utilizar zinco e cobre e notou que ao ligar um fio condutor as duas extremidades da série de metais era gerado uma corrente elétrica, como mostrado na Fig. 1.

Figura 1. Pilha de Volta.



Fonte: (ANDHINI, 2017)

A descoberta de Volta levou diversos pesquisadores a se interessar pela criação de baterias. Com o passar do tempo foram feitas várias análises de eficiência dos materiais que poderiam ser utilizados, e dentre tantas substâncias o lítio começou a ganhar destaque e vem sendo utilizado para esse tipo de estudo até hoje.

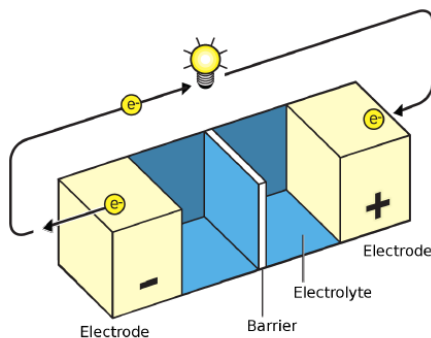
O lítio é um metal que foi descoberto por Johan August Arfwedson e nomeada juntamente com Jöns Jakob Berzelius em 1817. Devido às suas propriedades foi considerado um elemento bom para a aplicação em baterias. Um dos principais motivos do interesse pelo lítio foi devido à sua leveza, baixa densidade e baixo potencial de redução padrão. A principal desvantagem do seu uso é causada pela sua alta reatividade, portanto quando usado se deve ter o cuidado de evitar o contato com água e ar (ROYAL; ACADEMY, 2019).

Uma das baterias que revolucionou a tecnologia de armazenamento de energia foi a bateria de íon-lítio, que são até hoje empregadas em muitos objetos, como celulares e *notebooks*. A descoberta e desenvolvimento dessa bateria foram laureadas com o prêmio Nobel de química de 2019. O funcionamento dessa bateria é relativamente simples e sua configuração é básica, mostrada na Fig. 2. Trata-se de uma célula com dois eletrodos conectados a um circuito elétrico, entre eles tem-se um eletrólito que contém espécies carregadas. Os eletrodos podem ser separados por uma barreira que vai impedir que eles entrem em contato um com o outro causando um curto-circuito na bateria.

As baterias íon-lítio possuem um modo de descarga, e algumas delas podem ser recarregáveis e então terão um modo de recarga. O modo de descarga serve para conduzir a corrente elétrica e ocorre por meio de um processo de oxidação no eletrodo negativo (ânodo) e o processo complementar

de redução, que ocorre no eletrodo positivo (cátodo). A tensão da célula vai depender da diferença de potencial dos eletrodos, e o processo é espontâneo. No modo recarga o processo pode ser revertido, usando eletricidade externa para produzir reações redox complementares nos eletrodos, neste caso o processo dependente de energia e não é espontâneo.

Figura 2. Processo redox espontâneos nos eletrodos.



Fonte: (ROYAL; ACADEMY, 2019)

A descoberta da bateria de íon-lítio acabou gerando diversas pesquisas para o desenvolvimento de novas baterias e criando cada vez mais metas de melhoria no armazenamento de energia. A pesquisa vem se desenvolvendo até hoje e o aparecimento de novos objetos tecnológicos movidos a energia acabaram por elevar cada vez mais o nível dos estudos e almejar por baterias com maior eficiência em diversos pontos, como quantidade de armazenamento de carga, compactação, velocidade de carregamento e durabilidade.

A busca por novos elementos levou ao início da utilização de materiais bidimensionais de diferentes características para a implementação em armazenamento de energia, um dos materiais utilizado é o Janus, que possui em sua superfície dois ou mais elementos diferentes, que fazem com que um único material tenha propriedades eletrônicas e eletroquímicas únicas. Esse material pode ser modificado em busca de propriedades que solucionem a problemática da pesquisa.

2 REVISÃO DA LITERATURA

Nesta seção, será apresentada uma revisão da literatura com uma fundamentação teórica acerca do tema central deste trabalho. Para a realização deste estudo foram levantados referenciais bibliográficos sobre a contextualização da pesquisa que propomos com vistas a evidenciar a evolução e importância da temática. Desta forma, foi possível identificar os aspectos de relevância para esta pesquisa acerca da performance de pilhas e baterias ao longo da história

Após essa contextualização, é apresentado um tópico sobre materiais bidimensionais com ênfase no Ge₂SSe, que é o material tema do estudo.

2.1 EVOLUÇÃO DO MÉTODO DE OBTENÇÃO DE ENERGIA

As descobertas de grandes cientistas ao longo dos anos como Alessandro Volta, Luigi Galvani, Johan Arfwedson, John B. Goodenough, M. Stanley Whittingham e Akira Yoshino geraram grande impacto na época e estão presentes na nossa vida até hoje.

A evolução das fontes de energia e das suas implementações tem tornado as pesquisas para o seu armazenamento cada vez mais importantes. Desde o descobrimento da energia elétrica por Tales Mileto, passamos pela invenção da pilha de Volta, pela criação da bateria de íon-lítio e seguimos evoluindo cada vez mais na área do armazenamento de energia e na revolução tecnológica que as descobertas nesta área geram, um dos benefícios desses avanços foi a mudança que vem sendo implementada de veículos alimentado por combustíveis fósseis para transporte movido a eletricidade.

Tendo em vista que o armazenamento eficiente de energia é um pré-requisito necessário para novas criações, o desenvolvimento progrediu rapidamente nas últimas décadas. Cada invenção com um intuito diferente mas sempre levando a uma descoberta inovadora, como o armazenamento de energia elétrica produzida por fontes renováveis (SANTOS, 2016), célula combustível e bateria integrados a sistema fotovoltaico (CALVALCANTE; CARVALHO; LIMA, 2005), baterias de níquel-hidreto metálico (AMBROSIO; TICIANELLI, 2001), dentre outras inúmeras e podemos esperar que muitas outras descobertas importantes venham a ser feitas na tecnologia de baterias. Essas descobertas futuras, sem dúvida, levarão a novas melhorias em nossa vida.

2.2 MATERIAIS BIDIMENSIONAIS

Materiais bidimensionais vêm ganhando grande atenção na última década devido a facilidade na sua síntese, alcance de alta densidade de energia, finura, alta superfície de contato, alta reatividade, alta resistência e flexibilidade, além de permitir fácil modificação e/ou inserção de íons (KUMAR *et al.*, 2018).

Alguns exemplos de materiais 2D são grafeno, nitreto de boro, carbetos de metal de transição, óxidos metálicos e hidróxidos (NAGUIB *et al.*, 2013).

A seleção de um material de eletrodo adequado é uma etapa fundamental no desenvolvimento de baterias e os materiais 2D estão tendo bons resultados para essa implementação, um dos materiais que vem se destacando nas pesquisas é o Janus, um material que possui uma quebra de simetria no plano basal do material 2D, o que pode enriquecer suas propriedades eletrônicas e ópticas e o acoplamento destas com outras propriedades físicas. Janus é um material que pode ser empregado para criação de novos dispositivos eletrônicos em nanoescala. Trata-se de um material em que é feita uma quebra de simetria através de uma substituição de elementos de uma subcamada por elementos

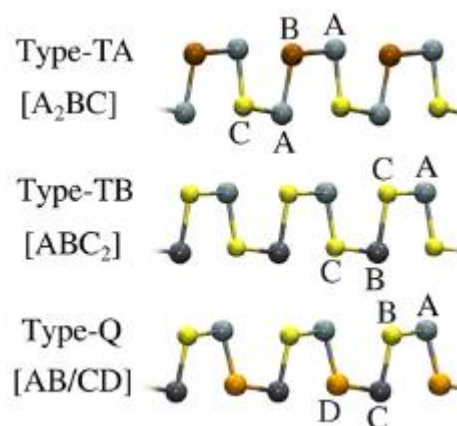
do mesmo grupo químico. O primeiro material Janus 2D que foi estudado é o MoSSe, para produção desse material a subcamada de enxofre foi removido por um plasma H₂. Em uma segunda etapa, houve o processo de selenização. O MoSSe desenvolvido tem uma camada de enxofre de um lado (parte inferior) e selênio do outro lado (topo). Outros materiais Janus 2D também estão sendo estudados devido às suas propriedades eletrônicas únicas, piezoeletricidade e propriedades ópticas não-lineares, como geração de segundo harmônico (SEIXAS, 2020).

2.2.1 Material bidimensional Janus Ge₂SSe

O Ge₂SSe é um material desenvolvido através de substituições de calcogênios (grupo VI) no material Janus. Algumas simulações atomísticas foram feitas via métodos *ab initio* baseados na teoria do funcional da densidade (DFT, acrônimo do termo em inglês *Density Functional Theory*). Para essas simulações foram utilizados o *software* SIESTA.

Na Fig. 3 temos a vista lateral da geometria enrugada dos monocalcogenetos do grupo IV de Janus, com isso é possível definir a parte superior e inferior. Por meio de pesquisas já realizadas é possível concluir que o material Janus Ge₂SSe tem energias de formação mais baixas do que o MoSSe, que é um material Janus já obtido experimentalmente. Essas energias de baixa formação foram a primeira evidência de estabilidade para alguns materiais Janus baseados nos monocalcogenetos do grupo IV. A baixa energia de formação faz com que o material se forme mais facilmente e seja estável, sendo assim um bom material para estudo.

Figura 3. Vista lateral da geometria enrugada dos monocalcogenetos do grupo IV de Janus.



Fonte: (SEIXAS, 2020).

3 METODOLOGIA

Para a realização das análises propostas nesse trabalho iremos utilizar simulações realizadas com o *software* SIESTA, versão 4.1, que implementa a DFT em funções de ondas bases localizadas

e nos permite calcular energias totais para aplicações desejadas do projeto. O SIESTA é uma plataforma gratuita que realiza cálculos de estruturas eletrônicas e executa simulações atomísticas de moléculas e sólidos, facilitando a compreensão dos fenômenos físicos e químicos que podem ocorrer no material. Ao longo das simulações computacionais é possível controlar diversas variáveis para gerar um aprofundamento no estudo realizado, esse controle nos permite caracterizar o material utilizado e descobrir o *design* de novos materiais a partir da modificação de materiais já conhecidos.

Uma das simulações que utilizaremos é a simulação de primeiro princípio, ou simulação *ab initio*, que permite o cálculo das propriedades físicas e químicas a partir da composição química e das posições dos átomos na célula unitária do material (COULAUD *et al.*, 2013; GARCÍA *et al.*, 2020).

A DFT é uma teoria da mecânica quântica, muito popular desde os anos 70, principalmente devido ao seu baixo custo computacional, utilizada para descrever a estrutura eletrônica da matéria, por meio da equação de Schrödinger para sistemas de muitos corpos. Essa teoria só passou a ser considerada precisa para uso nos cálculos de química quântica nos anos 90, permitindo calcular as propriedades de um sistema de muitos elétrons usando funcionais dependentes da densidade eletrônica.

A partir das simulações atomísticas realizadas com a DFT, podemos calcular energias totais de sistemas como materiais 2D isolados, átomos de Li, e sistemas de Li adsorvidos no material 2D. Comparando as energias totais podemos obter as energias de adsorções do Li no material 2D de estudo. Também podemos obter dados estruturais, comprimentos e ângulos de ligações, cargas elétricas parciais nos átomos, e dados de densidade de estados do material. As variações das cargas parciais antes e depois da adsorção do Li permite calcular a carga elétrica acumulada no eletrodo carregado com Li. As energias de adsorções dos íons de Li nos materiais 2D são calculados na forma:

$$E_{ads} = E_{tot}(M) - E_{tot}(Li) - E_{tot}(M + Li),$$

onde $E_{tot}(M)$ é a energia total do material 2D, $E_{tot}(Li)$ é a energia total do átomo de Li, e $E_{tot}(M + Li)$ é a energia do sistema formado pelo material 2D com o íon de Li adsorvido. A energia de adsorção definida dessa forma é positiva para sistemas (material+Li) ligados, e negativa para sistemas não ligados. As energias de adsorções mais fortes (maiores E_{ads}) formam os sistemas mais estáveis.

Nessas simulações computacionais foram utilizados *meshcutoff* de 400 Ry, *Energy shift* de 0.030 eV, funcional de troca-correlação na aproximação PBEsol, grades de Monkhorst-Pack de 7x7x1 para amostragem de pontos-k na primeira zona de Brillouin e tolerância de forças de 0.01 eV/Ang para otimização de geometrias.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Por meio da análise das simulações realizadas com o software SIESTA, calculamos as energias totais para aplicações desejadas do projeto.

Analisamos três materiais: sulfeto de germânio (GeS), seleneto de germânio (GeSe) e o material Janus (Ge₂SSe). Após fazer a simulações da supercélulas 2x2 de cada material, colocamos o lítio em dois sítios diferentes, sítio A e sítio B, obtivemos as energias totais dos materiais, mostradas na Tab. 1.

Figura 4. Representação esquemática da supercélula 2x2 do GeS: (a) visão lateral, (b) visão superior (b)

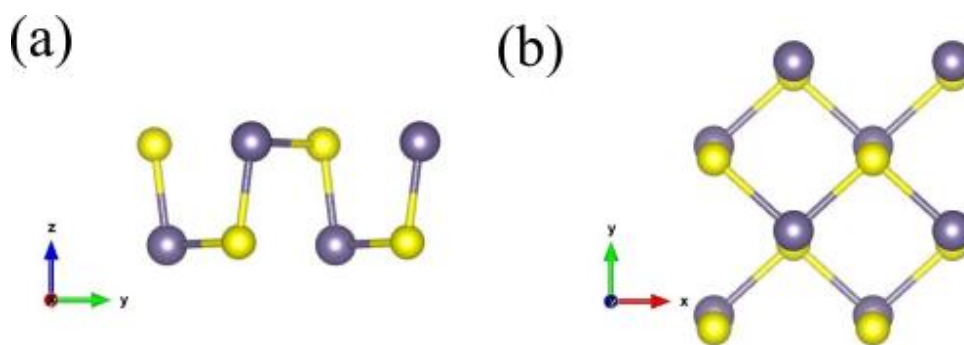


Figura 5. Representação esquemática da supercélula 2x2 do GeS com Li adsorvido no sítio A: (a) visão lateral, (b) visão superior.

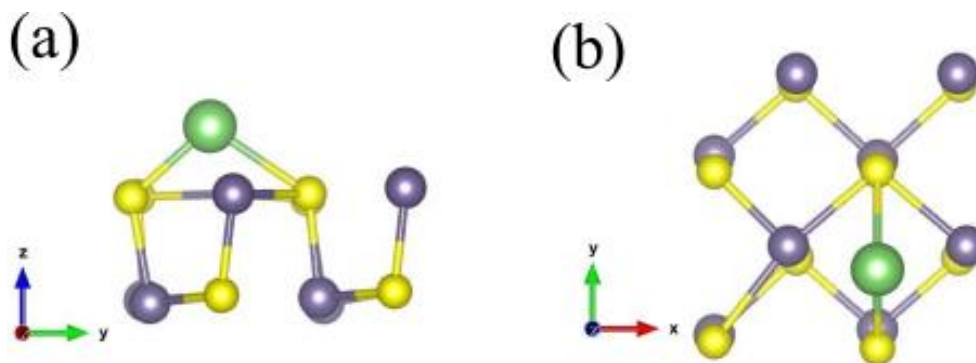


Figura 6. Representação esquemática da supercélula 2x2 do GeS com Li adsorvido no sítio B: (a,b) visão lateral, (c) visão superior.

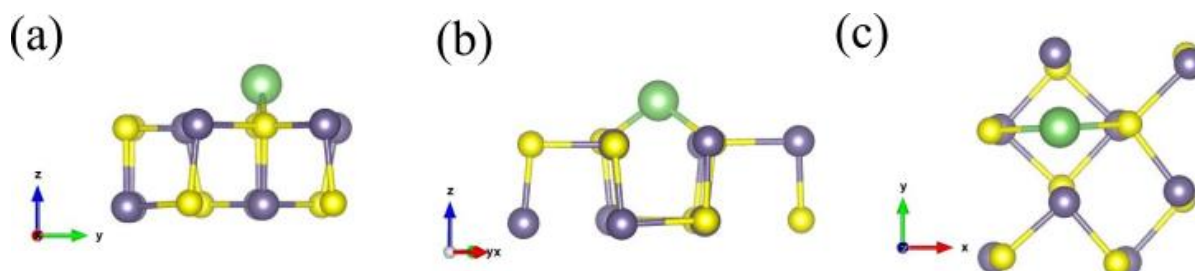


Figura 7. Representação esquemática da supercélula 2x2 do GeSe: (a) visão lateral, (b) visão superior.

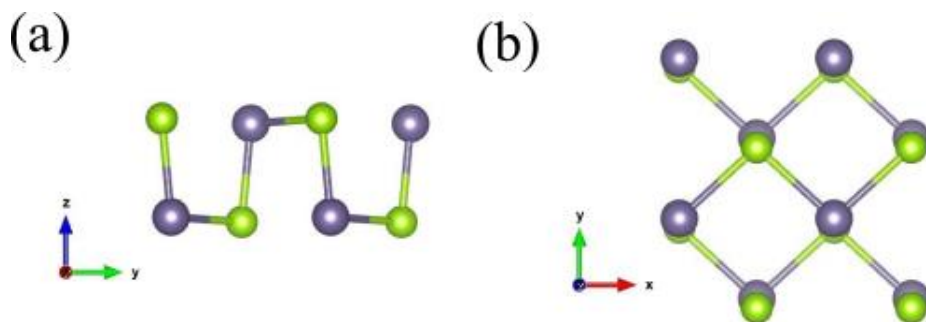


Figura 8. Representação esquemática da supercélula 2x2 do GeSe com Li adsorvido no sítio A: (a,b) visão lateral, (c) visão superior.

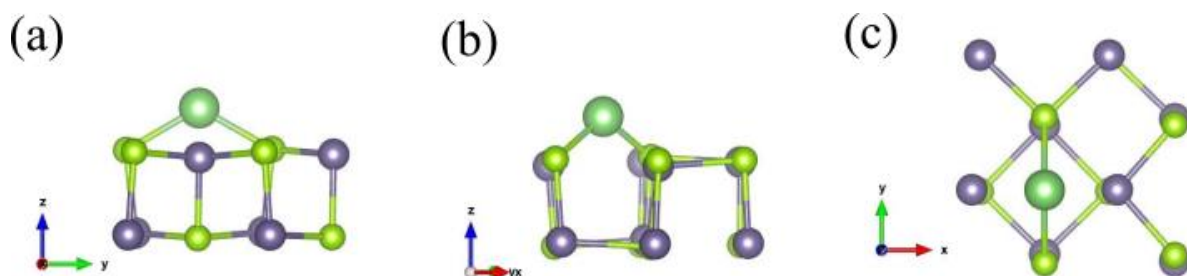


Figura 9. Representação esquemática da supercélula 2x2 do GeSe com Li adsorvido no sítio B: (a,b) visão lateral, (c) visão superior.

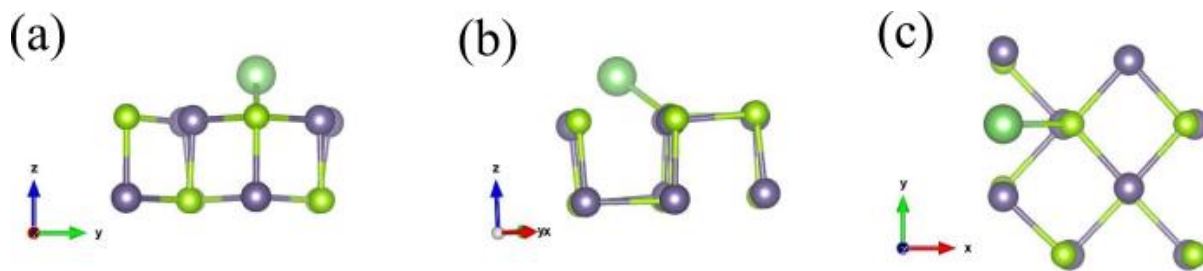


Figura 10. Representação esquemática da supercélula 2x2 do material Janus Ge_2SSe : (a) visão lateral, (b) visão superior.

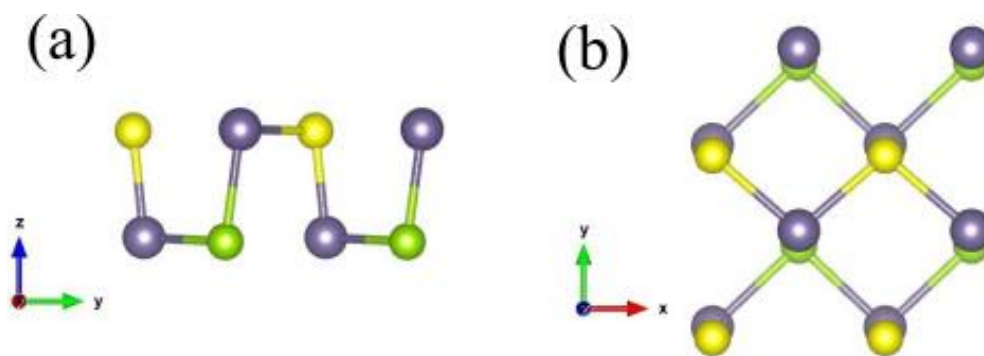


Figura 11. Representação esquemática da supercélula 2x2 do material Janus Ge_2SSe com Li adsorvido no sítio A (parte inferior): (a) visão lateral, (b) visão superior.

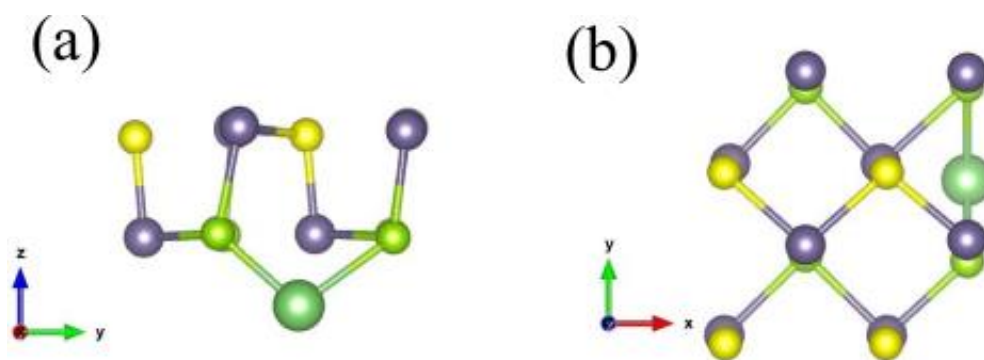


Figura 12. Representação esquemática da supercélula 2x2 do material Janus Ge_2SSe com Li adsorvido no sítio A (parte superior): (a) visão lateral, (b) visão superior.

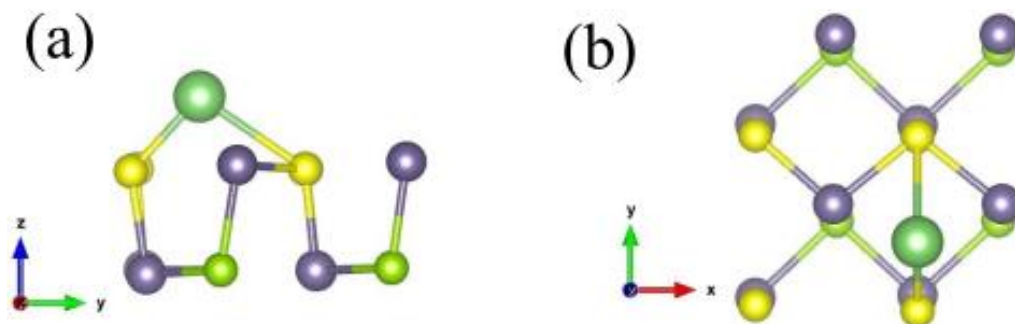


Figura 13. Representação esquemática da supercélula 2x2 do material Janus Ge_2SSe com Li adsorvido no sítio B (parte inferior): (a,b) visão lateral, (c) visão superior.

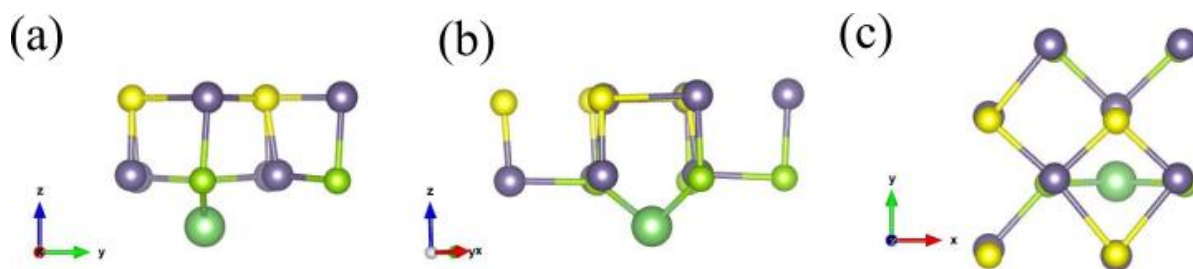
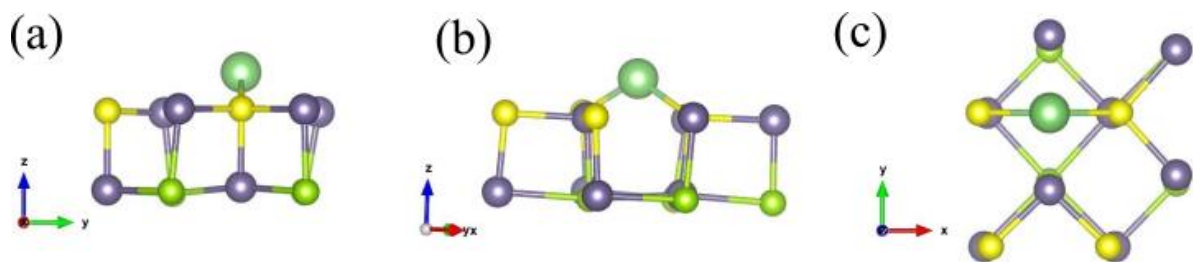
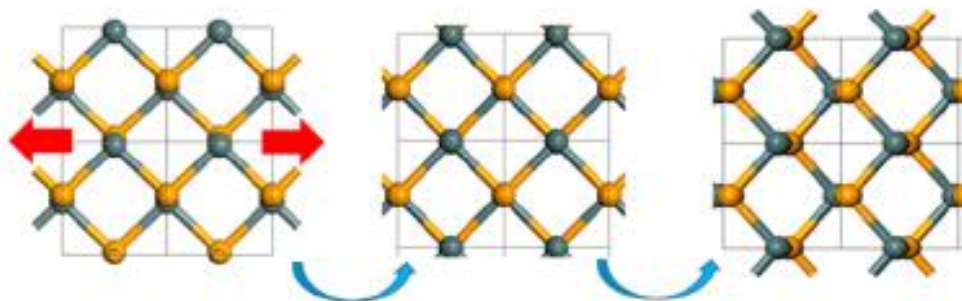


Figura 14. Representação esquemática da supercélula 2x2 do material Janus Ge_2SSe com Li adsorvido no sítio B (parte superior): (a,b) visão lateral (c) visão superior.



Notamos que para alguns materiais o Li adsorvido fez com que houvesse uma mudança estrutural da molécula relaxada, mostradas nas Figs. 6, 8, 9, 13 e 14 até agora não foi visto resultados como esse na literatura. Podemos ver transições semelhantes no artigo “*Intrinsic Ferroelasticity and/or Multiferroicity in Two-Dimensional Phosphorene and Phosphorene Analogues*”, acreditamos que ao colocar o lítio no material ocasionamos o mesmo tipo de transição de fase dos materiais ferroelétricos/ferroelásticos (WU; ZENG, 2016).

Figura 15. Transição de fase dos materiais ferroelétricos/ferroelásticos 2D baseados nos monocalcogenetos do grupo IV.



Fonte: (WU; ZENG, 2016).

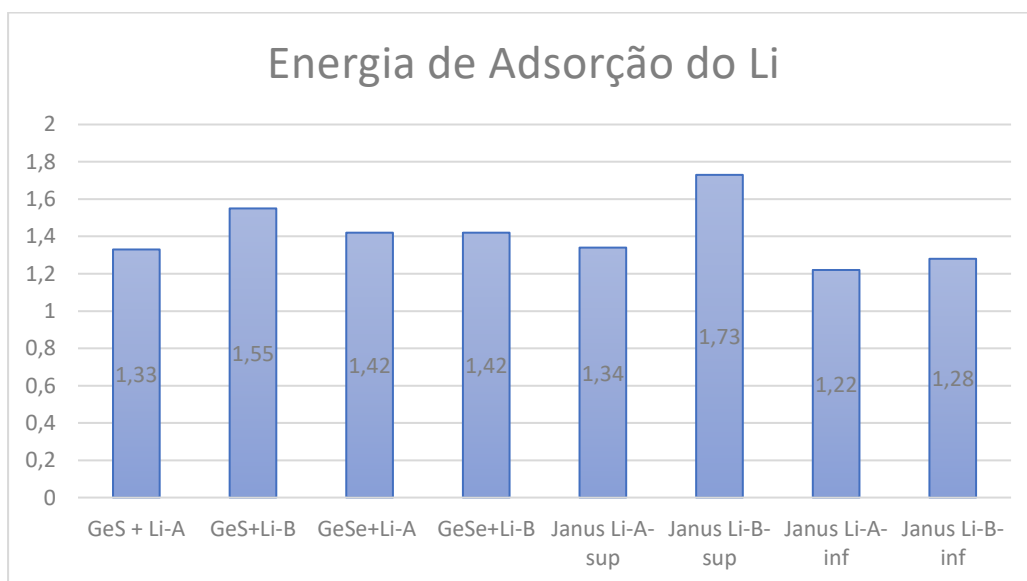
A partir das simulações atomísticas realizadas com a DFT, calculamos as energias totais dos sistemas de materiais 2D isolados, átomos de Li, e sistemas de Li adsorvidos no material 2D.

Tabela 1. Energias totais (em eV) calculadas via DFT com o software SIESTA.

Sistema	Energia total (eV)
Li	-12,814399
GeS	-3.451,635768
GeS + Li	-3.465,784011
GeS+Li-B	-3.466,000414
GeSe	-3.148,824852
GeSe+Li	-3.163,055751
GeSe+Li-B	-3.163,057206
Janus	-3.300,098682
Janus Li-A-sup	-3.314,251260
Janus Li-B-sup	-3.314,640072
Janus Li-A-inf	-3.314,137001
Janus Li-B-inf	-3.314,197670

Comparando as energias totais obtivemos as energias de adsorções do Li no material 2D de estudo. As energias de adsorções são mostradas na Fig. 16.

Figura 16. Energia de adsorção do lítio nos materiais 2D monocalcogenetos GeS, GeSe e Janus Ge₂SSe.



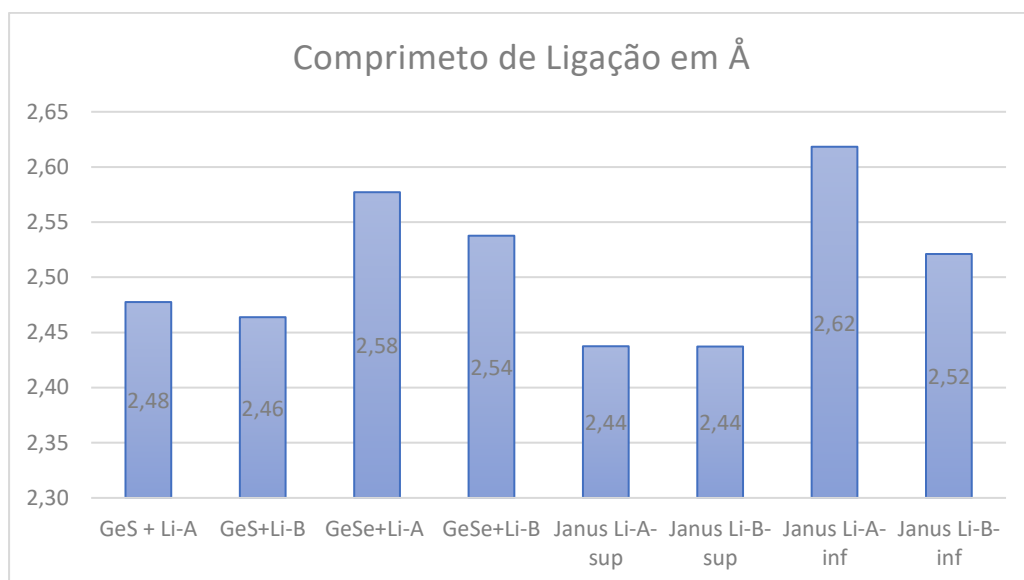
Portanto, notamos que o Li é mais bem adsorvido no material Janus, sítio B, camada superior e menos adsorvido no material Janus, sítio A, camada inferior. Os valores obtidos nas simulações para a adsorção de lítio no GeS e do GeSe diferiram dos encontrados em outras literaturas. Um exemplo é, para o GeS, entre 1,04 e 1,09 eV; e para o GeSe entre 1,02 e 1,05 eV (KARMAKAR; CHOWDHURY; DATTA, 2016). Essas diferenças são causadas principalmente pela diferença de

concentração de Li adsorvido no material 2D. Nos nossos estudos, como a supercélula é menor, há uma simulação de Li adsorvido maior do que os mostrados nas publicações recentes.

Outro material Janus que vem sendo muito estudado para implementação em eletrodos de bateria é o MoSSe. Nos estudos já feito com esse material foi obtve-se uma variação de energia de adsorção de lítio de 1,05 à 2,41 eV, dependendo do sítio em que o lítio foi inserido. (SHANG *et al.*, 2018). Nas simulações do Ge₂SSe obtivemos valores entre 1,22 e 1,73 eV, portanto ao compararmos notamos que o material Janus MoSSe possui uma maior energia de adsorção de lítio.

Também obtivemos o comprimento das ligações entre o lítio e o átomo mais próximo, mostrados na Fig. 17. A ligação mais curta com o lítio também se apresenta no material Janus, sítio B, camada superior.

Figura 17. Comprimento de ligação entre lítio de o átomo mais próximo.



5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho estudamos a adsorção de íons de Li nos novos materiais bidimensionais Janus Ge₂SSe a partir de simulações atômicas baseadas na teoria do funcional da densidade. Encontramos resultados inéditos de energias de adsorções nesses materiais, com valores que podem ser maiores ou menores do que os encontrados nos materiais GeS e GeSe, dependendo da subcamada de adsorção do íon de Li no material Janus. Também notamos que a adsorção de íons de Li no sítio B nos materiais 2D GeS, GeSe e Ge₂SSe são maiores do que no sítio A, e que essas adsorções induzem transições na geometria do material que são semelhantes as transições ferroelásticas do monocalcogenetos do grupo IV. Entretanto, enquanto as transições ferroelásticas são induzidas por deformações mecânicas, observamos que essas transições foram obtidas apenas pela adsorção de Li em concentrações

relevantes, de um Li^+ para cada oito átomos de Ge do material 2D. Como as propriedades dos materiais 2D estudados nesse trabalho são bastantes anisotrópicas, é esperado que essas transições obtidas pelas adsorções de Li^+ possam ser observadas nessas propriedades anisotrópicas.

REFERÊNCIAS

- AMBROSIO, Renato Canha; TICIANELLI, Edson Antonio. Nickel-metal hydride batteries, an alternative for the nickel-cadmium batteries. **Química Nova**, [s. l.], v. 24, n. 2, p. 243–246, 2001. Disponível em: <https://doi.org/10.1590/s0100-40422001000200015>
- ANDHINI, Nisa Fitri. THE 200 YEARS OF THE ELECTRIC PILE. In celebration of the 200th anniversary of the electric pile, invented by Alessandro Volta, a synopsis of his letter to The Royal Society (London) and of his biography is presented. **Journal of Chemical Information and Modeling**, [s. l.], v. 53, n. 9, p. 1689–1699, 2017.
- CALVALCANTE, Antonio W. A.; CARVALHO, Paulo C.; LIMA, Lutero C. de. Célula Combustível e Bateria Integrados a Sistema Fotovoltaico. **Revista Tecnológica**, [s. l.], p. 196–206, 2005.
- COULAUD, Olivier *et al.* Extensions of the siesta dft code for simulation of molecules. [s. l.], n. February, 2013. Disponível em: <http://arxiv.org/abs/1302.4617>
- GARCÍA, Alberto *et al.* Siesta: Recent developments and applications. **The Journal of chemical physics**, [s. l.], v. 152, n. 20, p. 204108, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/5.0005077>
- KARMAKAR, Sharmistha; CHOWDHURY, Chandra; DATTA, Ayan. Two-dimensional group IV monochalcogenides: Anode materials for Li-ion batteries. **Journal of Physical Chemistry C**, [s. l.], v. 120, n. 27, p. 14522–14530, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b04152>
- KUMAR, Kowsik Sambath *et al.* Recent Advances in Two-Dimensional Nanomaterials for Supercapacitor Electrode Applications. **ACS Energy Letters**, [s. l.], v. 3, n. 2, p. 482–495, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acsenerylett.7b01169>
- NAGUIB, Michael *et al.* New two-dimensional niobium and vanadium carbides as promising materials for li-ion batteries. **Journal of the American Chemical Society**, [s. l.], v. 135, n. 43, p. 15966–15969, 2013. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/ja405735d>
- ROYAL, The; ACADEMY, Swedish. Lithium-Ion Batteries. [s. l.], v. 50005, p. 0–13, 2019.
- SANTOS, Fernando Miguel Soares Mamede dos. Armazenamento de energia associado à produção com origem em fontes renováveis. [s. l.], p. 148, 2016.
- SEIXAS, Leandro. Janus two-dimensional materials based on group IV monochalcogenides. **Journal of Applied Physics**, [s. l.], v. 128, n. 4, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1063/5.0012427>
- SHANG, Chanjuan *et al.* Theoretical Prediction of Janus MoSSe as a Potential Anode Material for Lithium-Ion Batteries. **Journal of Physical Chemistry C**, [s. l.], v. 122, n. 42, p. 23899–23909, 2018.

Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b07478>

WU, Menghao; ZENG, Xiao Cheng. Intrinsic Ferroelasticity and/or Multiferroicity in Two-Dimensional Phosphorene and Phosphorene Analogues. **Nano Letters**, [s. l.], v. 16, n. 5, p. 3236–3241, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b00726>