

PESQUISA - FACET

**ESTUDO DE INTERAÇÕES RADIAÇÃO-MATÉRIA POR MEIO DE  
SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS**

*Jeferson De Oliveira Felippsen (jeferson.o.felippsen02@gmail.com)*

*Eduardo André Flach Basso (EduardoBasso@ufgd.edu.br)*

*Eriton Rodrigo Botero (eritonbotero@ufgd.edu.br)*

O presente projeto teve como objetivo investigar as influências nas propriedades de materiais ferroelétricos livres de chumbo a partir das alterações estruturais induzidas pela inserção de dopantes em matrizes de niobato de sódio de potássio (KNN). Esses materiais são de grande interesse devido ao seu potencial uso em dispositivos eletrônicos como uma alternativa mais ambientalmente correta. Os estudos realizados focaram na física do estado sólido e sua aplicação na descrição de problemas relacionados à Física dos Materiais, abrangendo tanto aspectos teóricos quanto experimentais, com o intuito de compreender como as mudanças estruturais afetam as propriedades eletromecânicas dos materiais estudados. Além disso, foi desenvolvida a capacidade de leitura científica crítica, essencial para acompanhar o estado da arte na área de estudo e analisar publicações recentes. A metodologia do projeto consistiu em uma revisão bibliográfica detalhada, que proporcionou uma compreensão aprofundada das estruturas cristalinas e suas propriedades, destacando a importância de compreender a relação entre estrutura e funcionalidade dos materiais. Foram explorados conceitos fundamentais como a formação cristalina, a distribuição eletrônica, os arranjos periódicos dos átomos e as operações de simetria que definem as

redes cristalinas. A partir do estudo das redes de Bravais e das células unitárias, foram analisadas as diferentes estruturas cristalinas, como as cúbicas de faces centradas, cúbicas de corpo centrado e hexagonais compactas, correlacionando essas estruturas com suas propriedades mecânicas e elétricas, incluindo densidade, dureza e condutividade elétrica. O estudo também investigou o impacto das estruturas cristalinas nas propriedades físicas dos materiais, como a transformação do ferro em martensita e a anisotropia observada em monocristais, que afetam diretamente o comportamento dos materiais em aplicações tecnológicas. Embora a revisão bibliográfica tenha sido concluída com sucesso e tenha proporcionado uma base teórica sólida para a compreensão das estruturas cristalinas, os objetivos relacionados à realização de medidas experimentais específicas e à aplicação de simulações computacionais não foram completamente atingidos. Concluiu-se que o projeto avançou significativamente no aspecto teórico, mas ainda requer continuidade para a realização dos experimentos e simulações previstos, a fim de validar as hipóteses formuladas e complementar os dados obtidos teoricamente.

**AGRADECIMENTOS:** Este trabalho foi realizado com o apoio da FUNDECT - Fundação de Apoio ao Desenvolvimento do Ensino, Ciência e Tecnologia do Estado de Mato Grosso do Sul.

**Palavras-chave:** física de materiais; materiais ferroelétricos; estruturas cristalinas.