



***Estudo da estrutura eletrônica da bicamada de grafeno deformado na direção axial intercalado.***

**Moisés Emanuel Silveira Medeiros Casado<sup>1</sup>, Luis Alberto Terrazos Javier <sup>2</sup>**

**RESUMO**

Esta pesquisa investiga as propriedades eletrônicas de uma bicamada de grafeno deformada, material amplamente pesquisado por suas características ajustáveis, como supercondutividade em ângulos específicos. Foi criada uma supercélula com deformação senoidal de amplitude  $A=1,07 \text{ \AA}$ , e cálculos baseados na teoria funcional da densidade (DFT) foram realizados usando o Wien2k. A bicamada foi intercalada em três posições: top, hollow e bridge, sendo a posição top energeticamente mais estável.

Os resultados mostraram que a bicamada deformada apresenta caráter metálico, com aproximadamente 15 estados/eV na energia de Fermi. A análise do PDOS revelou que os orbitais p têm maior contribuição na energia de Fermi, especialmente na camada deformada. Já na camada não deformada, o comportamento típico do grafeno foi mantido, com o estado  $p_z$  predominando. A estrutura de bandas exibiu formatos parabólicos, indicando contribuições de estados s, enquanto a densidade eletrônica permaneceu inalterada na camada não deformada. Na estrutura de bandas do top observou-se que os estados s e p contribuem para a energia de Fermi, com uma energia entorno de 16 estados/eV. No átomo intercalado as simetrias  $p_x$ ,  $p_y$  e  $p_z$  apresentaram contribuições, com  $p_x$  sendo a dominante. Distorções na densidade eletrônica foram observadas próximas ao átomo intercalado.

**Palavras-chave:** Bicamada de grafeno, propriedades eletrônicas, Teoria funcional da Densidade, intercalação.

<sup>1</sup>Aluno de Física, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Campus Cuité, PB, e-mail: moises.emanuel@estudante.ufcg.edu.br

<sup>2</sup>Doutor, Professor, UAFM, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: lterrazo@ufcg.edu.br

# ***Study of the electronic structure of axially deformed and intercalated bilayer graphene.***

## **ABSTRACT**

This research investigates the electronic properties of a deformed bilayer graphene, a material widely studied for its tunable characteristics, such as superconductivity at specific angles. A supercell with sinusoidal deformation of amplitude  $A=1.07 \text{ \AA}$  was created, and density functional theory (DFT) calculations were performed using Wien2k. The bilayer was intercalated at three positions: top, hollow, and bridge, with the top position being the most energetically stable.

The results showed that the deformed bilayer exhibits metallic behavior, with approximately 15 states/eV at the Fermi energy. The PDOS analysis revealed that the p orbitals have the highest contribution at the Fermi energy, particularly in the deformed layer. In the non-deformed layer, the typical graphene behavior was maintained, with the pz state dominating. The band structure displayed parabolic shapes, indicating contributions from s states, while the electronic density remained unchanged in the non-deformed layer. In the top band structure, it was observed that s and p states contribute to the Fermi energy, with around 16 states/eV. In the intercalated atom, the px, py, and pz symmetries showed contributions, with px being dominant. Distortions in the electronic density were observed near the intercalated atom.

**Keywords** Bilayer Graphene, electronic Properties, Density Functional Theory (DFT), intercalation.