



ESTUDO DA SUPERCONDUTIVIDADE DA BICAMADA DE GRAFENO DEFORMADA NA DIREÇÃO AXIAL.

Moisés Emanuel Silveira Medeiros Casado¹, Luis Alberto Terrazos Javier ²

RESUMO

Devido as excelentes propriedades do grafeno, cada vez mais se tem buscado pesquisar as propriedades eletrônicas tanto do grafeno como também da bicamada de grafeno. Os estudos relacionados a supercondutividade desses materiais se baseia em realizar mudanças em sua estrutura sejam elas rotacionando as bicamadas em ângulos mágicos por exemplo, ou variando os ângulos, todavia, para se fazer isso exige altas pressões sobre o material. Quando se altera as característica da bicamada de grafeno as suas propriedades também são alteradas.

No presente artigo, foi construído uma supercélula da bicamada de grafeno deformada em forma senoidal, com comprimentos de ondas de $A = 0,44 \text{ \AA}$ e $A = 1,07 \text{ \AA}$, no qual realizou os cálculos de primeiros princípios utilizando-se da (DFT) inserido os códigos computacionais através do Wien2k. Com base em nossos resultados a bicamada de grafeno deformada em forma senoidal com $A = 0,44 \text{ \AA}$ ao ser analisada mostrou em sua densidade de estados caráter metálico pois, em sua densidade de estados nota-se a presença de estados na energia de Fermi, em sua estrutura de bandas observou-se que na energia de Fermi ainda existem bandas cruzando-a, evidenciando assim que o material não é um supercondutor.

Em seguida, observando as bicamadas de grafenos deformadas em forma senoidal com $A = 1,07 \text{ \AA}$ nota-se em sua densidades de estados que existem estados na energia de Fermi. Já na sua estrutura de bandas é perceptível a presença de bandas cruzando a energia de Fermi.

Analisando mais detalhadamente ao observar sua estrutura de banda aparece uma banda tridimensional de elétrons livres (NFEB) no nível de Fermi, nos pontos M e Λ . Característica essa principal que difere os materiais supercondutores a base de grafeno, indicando uma propriedade supercondutora no material.

Palavras-chave: Bicamada de grafeno, supercondutividade, grafeno, deformação axial.

¹Aluno de Física, Unidade Acadêmica de Física e matemática, UFCG, Campus Cuité, PB, e-mail: moises.emanuel@estudante.ufcg.edu.br

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



STUDY OF SUPERCONDUCTIVITY IN AXIALLY DEFORMED GRAPHENE BILAYER.

ABSTRACT

Due to the excellent properties of graphene, there is an increasing interest in researching the electronic properties of both graphene and graphene bilayers. Studies related to the superconductivity of these materials are based on making structural changes, such as rotating bilayers at magic angles or varying the angles. However, achieving these changes requires high pressures on the material. When altering the characteristics of graphene bilayers, their properties are also changed.

In this present article, a supercell of sinusoidally deformed graphene bilayer with wavelengths of $A=0.44 \text{ \AA}$ and $A=1.07 \text{ \AA}$ was constructed. First-principles calculations were performed using Density Functional Theory (DFT) with computational codes implemented in Wien2k. Based on our results, the sinusoidally deformed graphene bilayer with $A=0.44 \text{ \AA}$, when analyzed, exhibited metallic character in its density of states because the presence of states at the Fermi energy was observed. In its band structure, it was observed that there are still bands crossing the Fermi energy, indicating that the material is not a superconductor.

Next, when observing the sinusoidally deformed graphene bilayers with $A=1.07 \text{ \AA}$, it is noticeable in their density of states that there are states at the Fermi energy. In their band structure, the presence of bands crossing the Fermi energy is evident.

Analyzing more closely, when examining its band structure, a three-dimensional band of free electrons (NFEB) appears at the Fermi level, at the points M and Λ . This key characteristic distinguishes graphene-based superconducting materials, indicating a superconducting property in the material.

Keywords: Graphene bilayer, Superconductivity, Graphene, axial deformation.