



ESTUDO DA BICAMADA ROTADA DE GRAFENO INTERCALADA COM CARBONO.

Maycon da Silva Santos¹, Luis Alberto Terrazos Javier²

RESUMO

O grafeno é um alótropo do carbono que consiste de uma folha composta por átomos de carbono em uma rede hexagonal bidimensional, e com espessura de apenas um átomo. A bicamada de grafeno é um material puramente bidimensional e consiste no empilhamento de duas monocamadas de grafeno. Desde sua descoberta esse material vem sendo o foco de investigação de vários pesquisadores, motivados pelas excelentes propriedades físicas do material e seu promissor potencial para aplicações. Dentre estas variadas formas, temos a bicamada de grafeno rotada por um ângulo e intercalada com átomos, que foi objeto de estudo desta pesquisa. Inicialmente foi construída uma supercélula rotada por um ângulo de $21, 8^\circ$. E utilizando a Teoria Funcional da Densidade (DFT) inserida nos códigos computacionais SIESTA. Foram calculadas as propriedades eletrônicas da estrutura com intercalação do átomo de carbono em três diferentes posições, bridge, top e hollow. Os resultados apontaram maior estabilidade no caso Bridge, e na densidade de estados observamos um pico na energia de Fermi, e presença de bandas flat na estrutura de bandas do material no nível de Fermi. Por fim, de acordo com a literatura (CODECIDO et al., 2019) essas características nos indicam uma possibilidade de que esse sistema seja um supercondutor.

Palavras-chave: Grafeno, supercondutividade, SIESTA.

¹Aluno De Física, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Campus Cuité, PB, e-mail: maycon.silva@estudante.ufcg.edu.br

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

STUDY OF THE ROTTED GRAPHENE BASEMENT INTERCALATED WITH CARBON.

ABSTRACT

Graphene is a carbon allotrope consisting of a sheet composed of carbon atoms in a two-dimensional hexagonal network, and with a thickness of only one atom. Two-layer graphene is a purely two-dimensional material and consists of two stacked graphene monolayers. Since its discovery, this material has been the focus of investigation by several researchers, motivated by the material's excellent physical properties and its promising potential for applications. Among these various forms, we have the graphene bilayer rotated by an angle and intercalated with atoms, which was the object of study of this research. Initially, a supercell rotated by an angle of $21, 8^\circ$ was constructed. And using Density Functional Theory (DFT) inserted into the SIESTA computer codes. The electronic properties of the structure with carbon atom intercalation in three different positions, bridge, top and hollow, were calculated. The results pointed out higher stability in the bridge case, and in the density of states we observed a peak at the Fermi energy, and presence of apartment bands in the band structure of the material at the Fermi level. Finally, according to the literature (CODECIDO et al., 2019) these characteristics indicate us a possibility that this system is a superconductor.

Keywords: Graphene, superconductivity, SIESTA.