

Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

XI Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos

Livro de Resumos

São Carlos
2021

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 11

Coordenadores

Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luiz Vitor de Souza Filho

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luís Gustavo Marcassa

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Arthur Deponte Zutião

Artur Barbedo

Beatriz Kimie de Souza Ito

Beatriz Souza Castro

Carolina Salgado do Nascimento

Edgard Macena Cabral

Fernando Camargo Soares

Gabriel dos Reis Trindade

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Gabriel Henrique Armando Jorge

Giovanna Costa Villefort

Inara Yasmin Donda Acosta

Humberto Ribeiro de Souza

João Hiroyuki de Melo Inagaki

Kelly Naomi Matsui

Leonardo da Cruz Rea

Letícia Cerqueira Vasconcelos

Natália Carvalho Santos

Nickolas Pietro Donato Cerioni

Vinícius Pereira Pinto

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrantonio

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(11: 06 set. - 10 set. : 2021: São Carlos, SP.)
Livro de resumos da XI Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos/ Organizado por João H. Melo Inagaki [et al.].
São Carlos: IFSC, 2021.

412 p.

Texto em português.

1. Física. I. Inagaki, João H. de Melo, org. II. Título

ISBN 978-65-993449-3-0

CDD 530

IC15

Modelagem tight-binding do twisted bilayer graphene

PIETRO, N.; SIPAHI, G.¹

nickolas_pietro@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Por décadas, acreditava-se que materiais bidimensionais eram instáveis demais para existir, até a descoberta de materiais 2D livres em 2004. (1) Um destes materiais é o grafeno, uma folha de átomos de carbono dispostos no formato de favos de mel, que serve de base para outros materiais como o grafite, os nanotubos de carbono e os fulerenos. Além do interesse em suas propriedades eletrônicas, o grafeno demonstrou possuir mais um aspecto especial: em 2018 descobriu-se a ocorrência de supercondutividade não convencional em uma configuração específica de grafeno (2), que consiste em duas placas de grafeno sobrepostas com um ângulo de rotação entre, o chamado grafeno de bicamadas torcidas (tBG, do inglês *twisted bilayer graphene*). O motivo pelo qual este fenômeno ocorre ainda não está claro. Buscamos compreender melhor as propriedades do tBG no intuito de procurar entender melhor a supercondutividade do grafeno, e assim utilizamos o método de *Tight-Binding* (TB) para modelar um sistema de tBG. O método *Tight-Binding* utiliza uma versão discretizada da equação de Schrödinger para um elétron exposto a um potencial periódico, isto é, o potencial no interior de um cristal. Praticamente, estas aproximações são vistas como se o elétron estivesse fortemente ligado a um dos átomos do cristal, e assim só podendo ocupar posições definidas de forma discreta do sistema, por isso o método recebe este nome. No entanto, a modelagem do tBG não é simples. Apesar do TB funcionar muito bem para uma folha única de grafeno, para o tBG é necessário mais cuidado, uma vez que a interação entre as camadas de grafeno não é trivial, e efeitos de muitos corpos influenciam o sistema. (3) Além disso, o tBG possui uma segunda periodicidade: quando as camadas são vistas sobrepostas, o tBG forma figuras de Moiré, que são padrões periódicos de disposição dos átomos com um espaçamento muito maior do que aquele da periodicidade das redes de grafeno. Essas figuras formam regiões de alinhamento dos átomos das duas redes que podem ser classificadas como "AA" ou "AB", e que possuem importância para a modelagem da interação entre as camadas de grafeno. Obtendo-se as funções de onda discretas através do TB, buscamos analisar as simetrias contidas nestas funções de onda, a fim de procurar por efeitos de interações a longa distância devido às figuras de Moiré e por efeitos locais das propriedades físicas do grafeno.

Palavras-chave: Tight-binding. Física do Estado Sólido. Física da Matéria Condensada

Referências:

1 NOVOSELOV, K. S.; GEIM, A. K. The rise of graphene. **Nature Materials**, v. 6, n. 3, p. 183-191, 2007. 2 CAO, Y *et al.* Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices. **Nature**, v. 556, n. 7699, p. 43-50, 2018. 3 GUINEA, F.; WALET, N. R. Continuum models for twisted bilayer graphene: effect of lattice deformation and hopping parameters. **Physical Review B**, v. 99, n. 20, p. 205134, 2019.