

INFLUÊNCIA DE PARÂMETROS ESTRUTURAIS E ELETRÔNICOS PARA O CÁLCULO DA TEMPERATURA CRÍTICA (T_c) DE SUPERCONDUTORES

José William Ferreira da Silva¹; Thamirys Alves Pereira²; Renato César da Silva³

¹ IF Sertão Pernambucano – Campus Ouricuri, williamfsilva0@gmail.com.

² IF Sertão Pernambucano – Campus Ouricuri, thamirysalvespereira@gmail.com.

³ IF Sertão Pernambucano – Campus Ouricuri, renato.cesar@ifsertao-pe.edu.br.

Desde a descoberta de fullerides supercondutores por Robert Haddon e colaboradores em 1991, o fenômeno da supercondutividade nesses materiais continua sendo uma questão em aberto na física da matéria condensada. Materiais supercondutores atípicos apresentam uma fonte de supercondutividade relativamente diferente das interações elétron-íon, característica dos supercondutores convencionais, o que torna complexa a formulação de uma teoria que explique com eficácia as propriedades desses compostos. Assim, considerando a importância que os materiais supercondutores desempenham no meio tecnológico para a produção de equipamentos cada vez mais sofisticados e, por conseguinte, a disponibilidade de algoritmos computacionais implementados em softwares de alto desempenho para estudos teóricos fundamentados na mecânica quântica, este trabalho tem como objetivo estudar *in silico* a influência da intercalação de moléculas orgânicas neutras nos valores de temperatura crítica para fullerides supercondutores. Os dados eletrônicos e geométricos obtidos por intermédio de cálculos semiempíricos e da Teoria do Funcional de Densidade (DFT) serviram como base para a previsão via QSAR da Temperatura Crítica (T_c) das estruturas modeladas, baseada na teoria BCS e em dados experimentais reportados na literatura. Os fullerides selecionadas foram: $\text{Na}_2\text{CsC}_{60}$, $\text{Na}_2\text{RbC}_{60}$, $\text{K}_2\text{CsC}_{60}$, K_3C_{60} , $\text{K}_2\text{RbC}_{60}$, Rb_3C_{60} , $\text{RbCs}_2\text{C}_{60}$ e as moléculas dopantes escolhidas foram: Água (H_2O) Amônia (NH_3), Metilamina (CH_3NH_2) e Metil-hidrazina [$\text{CH}_3(\text{NH})\text{NH}_2$]. Os resultados encontram-se em boa concordância com os dados experimentais, em que mudanças significativas na T_c são evidenciadas de acordo com o aumento do parâmetro de rede e o caráter iônico das ligações químicas das moléculas dopantes.

Palavras-chave: DFT; supercondutores; mecânica quântica; QSAR.

Agradecimentos: IF Sertão-PE; ao Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho – São Paulo (CENAPAD – SP).