

Previsão de Um Novo Supercondutor

Simulações computacionais preveem a existência de um novo material do tipo eletreto com a maior temperatura crítica de transição supercondutora em sua classe.

Neste ano de 2021 a descoberta da supercondutividade por Kamelningh Onnes em 1911 completa 110 anos. Um material supercondutor tem a característica de poder transportar corrente elétrica sem qualquer resistência. Materiais com tais propriedades são desejados em diversas áreas da tecnologia e podem ter inúmeras aplicações. Portanto, a busca por novos supercondutores tornou-se tema central de várias pesquisas.

A pesquisa em supercondutividade teve seu apogeu nas décadas de 50 até 70. A teoria BCS proposta por Bardeen Cooper e Schrieffer [Bardeen et al., 1957] decifrou o fenômeno mostrando que a interação elétron-fônon (IEF) é a mediadora de uma interação atrativa para os elétrons que formam os pares de Cooper causando a supercondutividade. Esta teoria feita para acoplamentos fracos da IEF foi generalizada pelas teorias de Migdal e Eliashberg e resolveu as maiores dificuldades dos mecanismos da interação elétron-fônon que causam supercondutividade.

A estrutura eletrônica moderna teve seu início nos anos 80 e, junto com a evolução dos computadores, implementou o sonho de Walter Kohn, viabilizando a capacidade preditiva e previsão computacional de novos materiais. O casamento da moderna estrutura eletrônica a partir de cálculos de primeiros princípios baseados no funcional de densidade e a teoria da supercondutividade permite hoje prever novos materiais supercondutores.

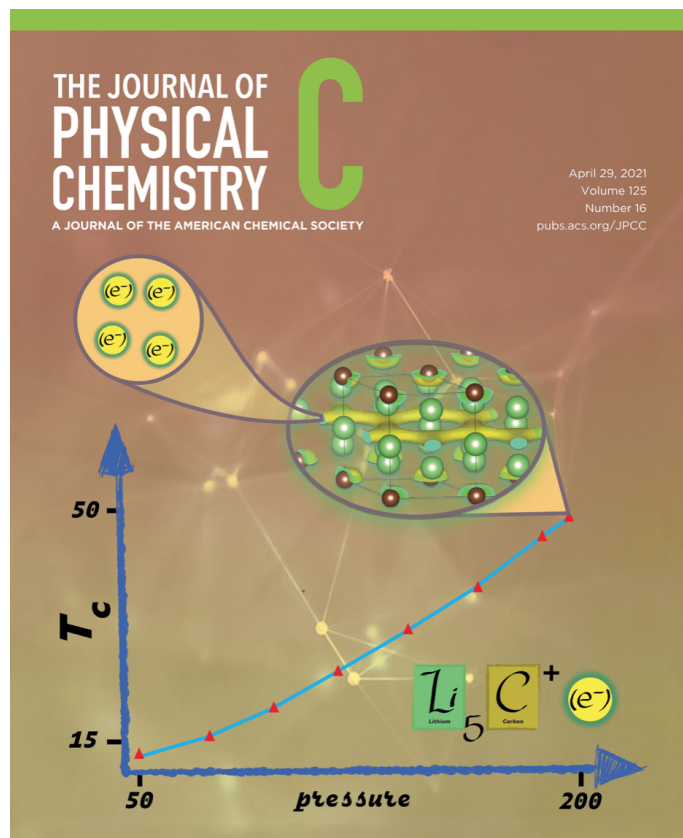
Eletretos são materiais iônicos onde o ânion (a carga negativa) habita os interstícios da estrutura. Isto oferece uma oportunidade interessante de explorar estes estados eletrônicos que em certas situações podem se transformar em canais de transporte eletrônico em uma, duas ou três dimensões, com muitas aplicações possíveis.

Neste trabalho os professores Zenner S. Pereira (UFERSA), Giovanni M. Faccin (UFGD) e Edison Z. da Silva (UNICAMP), usando uma paleta diversificada de métodos, identificaram o Li_5C como um potencial material supercondutor sob alta pressão. O modelo físico utilizado foi resolvido usando supercomputadores e apontou que este material é um eletreto que apresenta supercondutividade com temperatura crítica $T_c = 48,3$ K.

O trabalho usou o método CALYPSO (Crystal structure AnaLYsis by Particle Swarm Optimization) que implementa um algoritmo de otimização de "enxame de partículas", inspirado na coreografia do voo de certos pássaros. Este método usado em conjunção com o método VASP de estrutura eletrônica permite encontrar novas estruturas levando a previsão e descoberta de materiais estáveis ou metaestáveis. Dessa forma, foi identificado o composto Li_5C no intervalo de pressão entre 50 a 210 GPa.

A previsão teórica do novo material, Li_5C , mostra que é um eletreto formado por um cátion $[\text{Li}_5\text{C}]^+$ e um elétron (e^-) intersticial que, sob pressão, forma uma rede eletrônica bidimensional nos interstícios do cristal. A interação elétron-fônon, a função espectral de Eliashberg e o parâmetro de acoplamento da interação elétron fônon foram estudados, prevendo que este material é um supercondutor sob alta pressão.

O Li_5C apresentou supercondutividade com temperatura crítica



ACS Publications
Most Trusted. Most Cited. Most Read.

www.acs.org

temperatura crítica $T_c = 48,3$ K colocando-o como o eletreto com maior temperatura crítica prevista na literatura até então.

O trabalho *Predicted Superconductivity in Electride Li_5C* encontra-se em destaque (imagem acima) na edição de 29 de abril de 2021 do The Journal of Physical Chemistry C da Sociedade Americana de Química [Pereira et al., 2021].

Referências

J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.*, 108:1175–1204, Aug 1957.

Z. S. Pereira, G. M. Faccin, and E. Z. da Silva. Predicted superconductivity in the electride Li_5C . *The Journal of Physical Chemistry C*, 125(16):8899–8906, 2021. doi: 10.1021/acs.jpcc.1c02329. URL <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c02329>.

Financiamento

Os autores agradecem o apoio financeiro da FAPESP (2013/07296-2, 2016/23891-6 e 2017/26105-4), CNPq e UFERSA-CARAÚBAS (23091.004584/2021-94). Este trabalho utilizou recursos computacionais do Centro Nacional de Processamento de Alto Desempenho em São Paulo (Cenapad-SP), Centro de Computação John David Rogers (CCJDR-Unicamp) e SDumont (LNCC).