

Materiais Supercondutores

Pesquisa revela como a supercondutividade se comporta quando um material bidimensional é submetido à tensão. Para o caso estudado, uma monocamada de Mo_2N , a temperatura de transição crítica para o estado supercondutor (T_c) é máxima se o material estiver relaxado e se reduz caso esteja esticado. Esta propriedade pode ser utilizada para a construção de dispositivos que entrem e saiam do estado supercondutor mediante a aplicação de tensões ao material.

A temperatura de transição na supercondutividade (T_c) corresponde ao valor de temperatura no qual um material torna-se supercondutor. Em temperaturas maiores do que esta, o material se comporta de outras maneiras, por exemplo, como um isolante. Uma das linhas de pesquisa na supercondutividade relaciona-se com a caracterização de (T_c) e a compreensão de como fatores externos podem influenciá-la.

Em trabalho anterior, nosso grupo de pesquisa ilustrou um exemplo no qual a aplicação de grandes pressões hidrostáticas viabiliza o comportamento supercondutor mediante a reorganização do material em estruturas cristalinas que se formam em grandes pressões [Pereira et al., 2021]. Naquele exemplo, a pressão atuou como variável capaz de modificar (T_c) daquele material.

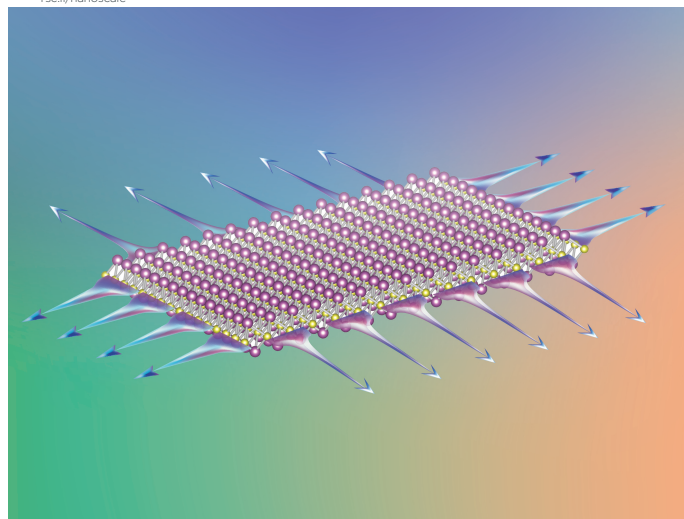
Para o caso de materiais bidimensionais, processo análogo corresponde à aplicação de tensões. Nessa perspectiva, o trabalho desenvolvido pelos professores Zenner S. Pereira (UFERSA), Giovanni M. Faccin (UFGD) e Edison Z. da Silva (UNICAMP) empregou a simulação computacional para estudar o comportamento supercondutor de uma monocamada de Mo_2N . A metodologia adotada consiste na resolução da estrutura eletrônica do material a partir do formalismo da teoria do funcional da densidade (DFT). A partir disto, a análise do acoplamento elétron-fônon viabiliza a detecção da formação de pares de Cooper, situação na qual constata-se o estado supercondutor no modelo. Dezenas de simulações foram realizadas buscando-se mapear o comportamento supercondutor em função de diferentes temperaturas e tensões aplicadas, resultando na caracterização deste processo, tanto para um modelo isotrópico (Allen-Dynes) quanto anisotrópico (Migdal-Eliashberg). A bidimensionalidade do material exige um modelo anisotrópico para uma descrição adequada da supercondutividade, tal modelo implicou resultados significativamente mais precisos. Observou-se que a temperatura de transição supercondutora neste material variou entre 19.3 K a 24.8 K em função da tensão, sendo este comportamento não-linear. Além disso, nosso estudo mostra algumas características marcantes desse material, como o fato de ser um eletreto (ter caráter iônico) e mesmo assim apresentar relativa alta (T_c). Há também de se relatar que suas propriedades eletrônicas são fortemente dependentes da deformação aplicada. É importante destacar que, até onde sabemos, nossa simulação aponta que a monocamada de Mo_2N tem a mais alta temperatura de supercondutividade para esta classe de materiais à pressão ambiente.

O trabalho *Strain-Induced Multigap Superconductivity in Electrene Mo_2N : A First Principles Study* foi publicado na revista *Nanoscale*, periódico da Royal Society of Chemis-



Nanoscale

rsc.li/nanoscale



ISSN 2040-3372



PAPER
Zenner S. Pereira, Giovanni M. Faccin and E. Z. da Silva
Strain-induced multigap superconductivity in electrene Mo_2N : a first principles study



try [Pereira et al., 2022], conforme destaque ilustrado na figura acima.

Referências

- 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>.
- Z. S. Pereira, G. M. Faccin, and E. Z. da Silva. Strain-induced multigap superconductivity in electrene Mo_2N : A first principles study. *Nanoscale*, 14:8594–8600, 2022. doi: 10.1039/D2NR00395C. URL <http://dx.doi.org/10.1039/D2NR00395C>.

Financiamento

Os autores agradecem o apoio financeiro da FAPESP (2013/07296-2, 2016/23891-6 e 2017/26105-4), CNPq. 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).