



XXXIII SIC SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

Evento	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2021
Local	Virtual
Título	Simulação computacional de propriedades eletrônicas do Bi ₃ Ni
Autor	MURILO KESSLER DE AZAMBUJA
Orientador	MILTON ANDRE TUMELERO

Simulações computacionais de propriedades eletrônicas do Bi_3Ni

Autor: Murilo Kessler de Azambuja

Orientador: Milton André Tumelero

IF-UFRGS

O Bi_3Ni é um material supercondutor que já apresentou empiricamente indícios de supercondutividade não-convencional, topológica e até mesmo de fases magnéticas coexistindo com a supercondutividade. Neste trabalho temos como objetivo inicial o domínio de técnicas computacionais para a simulação das propriedades eletrônicas do Bi_3Ni , a fim de tentar verificar as propriedades citadas anteriormente.

Futuramente, planeja-se realizar simulações onde serão introduzidas impurezas de Cr , Mn , Fe e Co no material, i.e., alguns átomos de níquel da rede cristalina serão substituídos por átomos dos elementos citados acima, que possuem propriedades muito semelhantes às do níquel, porém com número atômico menor e, conseqüentemente, menos elétrons e diferentes valências. Desta forma, busca-se observar como as propriedades eletrônicas do material se modificam ao variar a quantidade de portadores de carga. Para descrever o sistema, utilizou-se a teoria do funcional de densidade (DFT), que são cálculos de primeiros princípios (não utilizam parâmetros experimentais) baseados na expansão das funções de densidade eletrônica em uma base de ondas planas. Estes cálculos normalmente fazem uso de pseudopotenciais do tipo PAW (projected augmented waves), que separam os elétrons em elétrons de valência (que são responsáveis pelas ligações químicas e pelas propriedades eletrônicas do material) e elétrons do caroço (mais próximos do núcleo). Os elétrons do caroço podem ser considerados aproximadamente independentes do sistema, logo pode-se considerá-los como um potencial efetivo, incluído no pseudopotencial, que irá contribuir para a dinâmica dos elétrons de valência. Com os resultados computacionais, analisou-se a densidade de estados eletrônicos do material e constatou-se a ausência de magnetismo, além de evidenciar o comportamento metálico do material e uma possível indicação de uma fase supercondutora.