



## ***ESTUDO DAS PROPRIEDADES ELETRÔNICAS DA BICAMADA DE GRAFENO INTERCALADO COM ÁTOMOS DE CÁLCIO E LÍTIO.***

Nallyson William Santos Oliveira<sup>1</sup>, Luis Alberto Terrazos Javier <sup>2</sup>

### **RESUMO**

Neste trabalho estudamos as propriedades eletrônicas da bicamada de grafeno intercalado com os átomos de Li e Ca. Para fazer esse estudo, nós utilizamos cálculos de primeiros princípios, baseado na teoria funcional da densidade (DFT) usando o método Full-Potencial Linear Augmented Plane Wave (FP-LAPW), que está contido nos códigos computacionais WIEN2k. Para simular esses sistemas utilizamos o esquema de supercelulas. Os cálculos foram realizados para os átomos intercalados no intermédio da bicamada de grafeno, ocupando a posição Hollow. Os resultados mostram uma densidade de estados no nível de Fermi em torno de 3 estados/eV, para a bicamada intercalada com cálcio, enquanto que na bicamada intercalada com lítio não chega 1 estados/eV. Na estrutura de bandas, observamos que nos dois sistemas a banda de elétrons quase livres cruza o nível de Fermi. Porém, na bicamada intercalada com lítio, poucas bandas cruza o nível de Fermi. No geral os resultados dos cálculos mostram que a bicamada de grafeno intercalado com cálcio é supercondutor, enquanto que a bicamada intercalada com lítio não apresenta potencial para ser classificado como supercondutor.

**Palavras-chave:** Supercondutividade, grafeno, estrutura eletrônica.

---

<sup>1</sup>Aluno de Física, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: nallyson01@outlook.com

<sup>2</sup>Doutor, Professor, Unidade Acadêmica de Física e Matemática, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: lterrazo@ufcg.edu.br



***STUDY OF THE ELECTRONIC PROPERTIES OF THE GRAPHENE BYLAYER  
INTERCALATED WITH Ca AND Li ATOMS***

**ABSTRACT**

In this work we study the electronic properties of the graphene bilayer intercalated with the Li and Ca atoms. To do this study, we used First principles calculations based on the Density Funcionational Theory (DFT) using the Full-Pontencial Linear Augmented Plane Wave (FP-LAPW) method, which is contained in the WIEN2k computational codes. To simulate these systems we use the supercells scheme. The calculations were performed for the intercalated atoms in the middle of the graphene bilayer, occupying the Hollow position. The results show a density of states at the Fermi level around 3 states/eV, for the calcium intercalated bilayer, while in the lithium intercalated bilayer there are only 1 states/eV. In the band structure, we observed that in both systems the free electron band crosses the Fermi level. However, in the lithium intercalated bilayer, few bands cross the Fermi level. In general the results of the calculations show that the calcium-intercalated graphene bilayer is superconducting, while the lithium intercalated bilayer has no potential to be classified as superconducting.

**Keywords:** Superconductivity, graphene, electronic structure.