



XXIX CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA (CIC)
2019
UACSA, UAST, UFAPE, CODAI e UEADTEC
Universidade Federal Rural de Pernambuco
Pró-Reitoria de Pesquisa e Pós-Graduação
Coordenação de Programas Especiais



UTILIZAÇÃO DA TEORIA BCS NO CÁLCULO DA TEMPERATURA CRÍTICA DE SUPERCONDUTORES FULERETOS DE METAIS

Eduardo Victor Santana dos Anjos¹, Renato César da Silva³, Antonio Carlos Pavão³ Cristiano Costa Bastos ⁴
E-mail: duduvictor.ea@gmail.com

1 Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife/PE

2 Instituto Federal Sertão Pernambucano, Ouricuri/PE

3 Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife/PE

4 Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife/PE

São desenvolvidos modelos alternativos usando a teoria BCS para o cálculo da temperatura crítica (T_c) de supercondutores fuleretos (A_3C_{60} e A_2BC_{60} , com $A, B = Na, K, Rb$ e Cs). A partir de modelos matemáticos obtidos seguindo a metodologia da Relação Quantitativa Estrutura-Atividade (QSAR), usando 12 sistemas como conjunto treino, 3 sistemas como conjunto teste (erros inferiores a 3K) e 14 propostas teóricas que não fazem parte da sistemática de obtenção da fórmula. Selecionamos, dentre várias propriedades físico-químicas, o volume molecular (V) do C_{60} , a energia de ionização (I), a afinidade eletrônica (A), volume atômico (V) e raio iônico (R). A T_c mostrou-se sensível as propriedades do C_{60} , o que, comparativamente com modelos da literatura, traz novos aspectos na compreensão da supercondutividade em fuleretos, como a relação do fenômeno com essas propriedades. Na BCS, temos $T_c = 120e^{-1\rho}$. Em nosso modelo ρ é dado pela expressão, $\rho = -1,37653 + 0,17764 \Sigma I - 8,15934 \Sigma V \Sigma A \cdot IR$, com testes estatísticos de confiabilidade $R = 0,995$; $R^2 = 0,990$; $F(2,9) = 477,88$; $s = 0,02$. Com isso, foi possível obter um modelo para o cálculo da T_c de fuleretos com o uso da teoria BCS, mostrando que é possível usar tal equação para uma classe de supercondutores não convencionais.

Palavras-chave: fuleretos, bcs, qsar, supercondutores

Área do Conhecimento: Ciências Exatas e da Terra

Realização:



Apoio:



FUNDAÇÃO APOLÔNIO SALLES
F A D U R P E