

Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

XIV Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos

Livro de Resumos da Pós-Graduação

São Carlos
2024

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(13: 21-25 ago.: 2023: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XIII Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo / Organizado por Adonai Hilário da Silva [et al.]. São Carlos: IFSC, 2023.
358p.

Texto em português.

1.Física. I. Silva, Adonai Hilário da, org. II. Título.

ISSN: 2965-7679

111

Análise da simetria da supercélula formada pelo pontos de sobreposição no grafeno bicamada torcido

MAZZIERO, Mateus Lopes¹; SIPAHI, Guilherme Matos¹

mateus.mazziero@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O grafeno é um material amplamente estudado devido às suas propriedades, como a estabilidade na forma de uma camada 2D de espessura atômica, e a presença de efeitos exóticos, como o efeito Hall quântico e fases topológicas. (1) Este estudo foca na geometria do grafeno bicamada torcido, utilizando teoria de grupos para analisar a simetria dos padrões de sobreposição para diferentes ângulos. O grafeno bicamada foi modelado como uma árvore k-d (2), permitindo buscas rápidas por nós na rede cristalina, e a análise da simetria foi feita utilizando o pacote spglib. A segunda camada foi rotacionada por vários ângulos contidos entre dois ângulos mágicos obtidos da literatura (3), e analisamos os padrões formados pelas sobreposições dos tipos AA, AB, BA e BB. Observamos o aparecimento de padrões hexagonais para os diferentes tipos de regiões, que apresentaram supercélulas com simetria D_{6h} , as quais podem ser usadas para construir um Hamiltoniano que considera efeitos de interação de longo alcance.

Palavras-chave: Teoria de grupos; Grafeno bicamada; Ângulo mágico.

Agência de fomento: CAPES (88887.901476/2023-00)

Referências:

- 1 ZHANG, Y. *et al.* Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene. **Nature**, v. 438, n. 7065, p. 201-204, 2005. DOI: 10.1038/nature04235.
- 2 BENTLEY, J. L. Multidimensional binary search trees used for associative searching. **Communications of the ACM**, v. 18, n. 9, p. 509-517, 1975. DOI: 10.1145/361002.361007.
- 3 SHALLCROSS, S.; SHARMA, S.; KANDELAKI, E.; PANKRATOV, O. A. Electronic structure of turbostratic graphene. **Physical Review B**, v. 81, n. 1, 2010. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.165105.