

Parâmetros Estruturais e Eletrônicos para o Cálculo da Temperatura Crítica de Supercondutores do tipo A_2BC_{60} (A e B: Na, K, Rb e Cs)

Renato C. da Silva¹, Cristiano C. Bastos², e Antonio C. Pavão¹

¹Universidade Federal de Pernambuco, Departamento de Química Fundamental

²Universidade Federal Rural de Pernambuco, Departamento de Química

Resumo: Variados parâmetros estruturais e eletrônicos ajudam na compreensão da supercondutividade [1-5]. Em particular, sistemas do tipo A_2BC_{60} (A e B: Na, K, Rb, Cs) demonstram relações quantitativas entre a energia de ionização e afinidade eletrônica com a temperatura crítica (T_c) [1,2]. É possível encontrar na literatura diferentes ligantes A e B, como $Na(NH_3)_4$ no lugar do sódio no Na_2CsC_{60} , elevando a T_c de 12K para 29K [3]. Considerando a possibilidade de extensões da teoria BCS [4,5], a fórmula $T_c = 120e^{-1/\rho}$ e a análise estatística de QSAR, foi possível obter uma expressão ρ para os sistemas A_2BC_{60} em função de propriedades dos metais, a diferença de energia dos orbitais de fronteira, eletronegatividade, potencial de ionização, raio iônico, e relativo aos cristais, o parâmetro de rede. Para isso, foi utilizado um conjunto treino: Na_2KC_{60} , Na_2RbC_{60} , $Na_2Rb_{0.5}Cs_{0.5}C_{60}$, Na_2CsC_{60} , K_3C_{60} , K_2RbC_{60} , $K_{1.5}Rb_{1.5}C_{60}$, Rb_2KC_{60} , K_2CsC_{60} , Rb_3C_{60} , Rb_2CsC_{60} , Cs_2RbC_{60} e Cs_3C_{60} .

$$\rho = 2.3001 - 0.2168 \sum I - \frac{1.2136}{a} \left(\frac{\sum \Delta HL}{\sum r} \right)^2 + 0.0191 (\sum \chi)^2$$

Com esta expressão, prevemos corretamente 26.3K para o $(NH_3)_4NaC_{60}$ (T_c experimental = 29.6K), segundo a Tabela 1. Uma fórmula da literatura prevê $T_c = 61.8K$ para $(NH_3)_4Na_2CsC_{60}$, praticamente o dobro do valor correto [2]. Considerando esta análise robusta o suficiente, propomos novos ligantes que podem elevar a T_c .

Tabela 1. T_c experimental e calculada para alguns dos supercondutores utilizados

Supercondutor	T_c experimental (K)	T_c teórica (K)	T_c Hetfleisch et al [3]
K_3C_{60}	19.0	17.6	21.3
Rb_3C_{60}	29.0	28.4	26.9
Rb_2CsC_{60}	31.0	30.9	30.1
Cs_3C_{60}	35.0	35.3	36.5
$(NH_3)_4Na_2CsC_{60}$	29.6	26.3	61.8
$(N_2H_4)_4Cs_2NaC_{60}$	---	55.7	108.5
$(CH_3OH)_4Na_2CsC_{60}$	---	62.1	122.2
$(N_2H_4)_4Na_3C_{60}$	---	77.5	165.6



XIX SBOQT

Simpósio Brasileiro de Química Teórica 2017

12 a 17/Nov, 2017, Águas de Lindóia/SP, Brasil

Estes ligantes seguem o critério de analogia isoglobal [6], mantendo ligantes tetraédricos e uma base de Lewis: $\text{Na}[(\text{CH}_3)_2\text{N}]_4$, $\text{Na}(\text{CH}_3\text{OH})_4$, $\text{Na}[(\text{CH}_3)_2\text{O}]_4$, $\text{Na}[\text{CH}_3\text{NH}_2]_4$, $\text{Na}[\text{N}_2\text{H}_4]_4$ e $\text{Cs}[\text{N}_2\text{H}_4]_4$. Segundo nossa análise, a temperatura crítica pode ser elevada acima de 70K.

Palavras-chave: supercondutividade, BCS e QSAR, temperatura crítica, propriedades estruturais e eletrônicas

Apoio: Este trabalho tem apoio da CAPES e CENAPAD-SP

Referências:

- [1] S. Larsson, J Supercond Nov Magn 28, 315 (2015).
- [2] F. Hetfleisch, Marco Stepper, H.-P. Roeser, A. Bohr, J. S. Lopez, M. Mashmool, S. Roth, Physica C 513, 1 (2015).
- [3] Y. Iwasa, H. Shimoda, Y. Miyamoto, T. Mitani, Y. Maniwa, O. Zhou, T.T.T Palstra, J. Phys. Chem Solids 58, 1697 (1997).
- [4] W. L. Mc Millan, Physical Review 167, 331 (1968).
- [5] G.W. Webb, F. Marsiglio, J.E. Hirsch, Physica C 514, 17 (2015). Chuck-Hou Yee, Turan Birol and Gabriel Kotliar, Europhysics Letters 111, 17002(2015).
- [6] R. Hoffmann, Angew. Chem. Ont. Ed. Eng. 21, 711(1982).