

LIVRO DE RESUMOS



DÉCIMA PRIMEIRA SEMANA DA
GRADUAÇÃO E PÓS-GRADUAÇÃO DO
INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS - USP

2021



**Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos**

**XI Semana Integrada do Instituto de
Física de São Carlos**

Livro de Resumos

**São Carlos
2021**

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 11

Coordenadores

Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luiz Vitor de Souza Filho

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luís Gustavo Marcassa

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Arthur Deponte Zutião

Artur Barbedo

Beatriz Kimie de Souza Ito

Beatriz Souza Castro

Carolina Salgado do Nascimento

Edgard Macena Cabral

Fernando Camargo Soares

Gabriel dos Reis Trindade

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Gabriel Henrique Armando Jorge

Giovanna Costa Villefort

Inara Yasmin Donda Acosta

Humberto Ribeiro de Souza

João Hiroyuki de Melo Inagaki

Kelly Naomi Matsui

Leonardo da Cruz Rea

Letícia Cerqueira Vasconcelos

Natália Carvalho Santos

Nickolas Pietro Donato Cerioni

Vinícius Pereira Pinto

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrandiono

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

(11: 06 set. - 10 set. : 2021: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da XI Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por João H. Melo Inagaki [et al.]. São Carlos: IFSC, 2021.

412 p.

Texto em português.

1. Física. I. Inagaki, João H. de Melo, org. II. Título

ISBN 978-65-993449-3-0

CDD 530

IC9

A implementação do AFORS-HET na simulação de diagramas de bandas de heterojunções de semicondutores nanoestruturados aplicados na fotocatálise da água para geração de H₂

ZAMPAULO, L. G. T.¹; GONÇALVES, R. V.²

lg.zam@usp.br

¹Escola de Engenharia de São Carlos - USP

²Instituto de Física de São Carlos - USP

A busca por fontes de energia renováveis nos dias atuais cresceu freneticamente e uma das opções encontradas foi o processo de fotodissociação da molécula da água, o qual utiliza da energia solar para, a partir da água, gerar hidrogênio, que é uma energia limpa, estocável e abundante disponível no mundo. (1) Deste modo, visando realizar o processo de fotocatálise da água de maneira mais eficiente possível, foi estudado uma forma de implementar e simular as estruturas de bandas de materiais semicondutores para facilitar seu estudo e entender melhor os movimentos e fenômenos eletrônicos presentes na estrutura e capazes de serem identificados nos diagramas de bandas, que influenciam a eficiência do processo de fotocatálise. A implementação ocorreu no software AFORS-HET (2) e se deu primeiramente com o estudo das funções do software, por meio da leitura do manual do software e livro (3), verificando suas capacidades e limitações. Posteriormente, a fim de verificar na prática o progresso no entendimento do que o AFORS-HET é capaz de simular, foi realizado reproduções de diagramas de bandas já presentes na literatura, sejam eles relacionados à aplicações na fotocatálise ou não, visto que o objetivo aqui era apenas conhecer a ferramenta. Por fim, foi iniciada a simulação e estudo do diagrama de bandas da estrutura BiVO₄/CuWO₄ a fim de correlacionar os resultados simulados com o da fotocatálise da água, desta mesma estrutura, tornando possível verificar um provável aumento na eficiência do processo.

Palavras-chave: AFORS HET. Diagrama de bandas. Fotossíntese artificial.

Referências:

- 1 TACHIBANA, Y.; VAYSSIERES, L.; DURRANT, J. R. *et al.* Artificial photosynthesis for solar water-splitting. **Nature Photonics**, v. 6, n. 8, p. 511-518, Aug. 2012.
- 2 VARACHE, R., *et al.* Investigation of selective junctions using a newly developed tunnel current model for solar cell applications. **Solar Energy Materials Solar Cells**, v. 141, p. 14-23, Oct. 2015. DOI 10.1016/j.solmat.2015.05.014.
- 3 STANGL, R.; LEENDERTZ, C.; HASCHKE, J. Numerical simulation of solar cells and solar cell characterization methods: the open-source on demand program AFORS-HET. *In:* RUGESCU, R. D. (ed.) **Solar energy**. Rijeca: Intech, 2010. cap. 14, p. 319-352.