

**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

## PG180

### Fitting das estruturas de bandas a partir de estratégias que envolvem propriedades de simetrias dos materiais baseadas na teoria de grupos

WANDERLEY, A. B.<sup>1</sup>; SILVA, J. L. F.<sup>2</sup>; SIPAHI, G.<sup>1</sup>

adilson.wanderley@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

<sup>2</sup>Instituto de Química de São Carlos - USP

Novos dispositivos eletrônicos e fontes de luz laser, por exemplo, tem seu desenvolvimento relacionado ao conhecimento da estrutura de bandas eletrônicas dos materiais semicondutores. Modelos teóricos utilizados na descrição destas estruturas de bandas, como Hamiltonianos efetivos, fornecem uma descrição realística com baixo custo computacional, em comparação com cálculos de primeiros princípios.(1) Abordagens como o método  $k \cdot p$  são usadas extensivamente por algumas décadas na construção desses Hamiltonianos e permitem ajustes de curvas sob dados experimentais para descrição dos *spin splitting* e fatores-g efetivos. (1-2) A construção desses Hamiltonianos matriciais depende de parâmetros que podem ser obtidos da simetria do grupo cristalino do material que se pretende estudar. Neste sentido, o Laboratório de Física Computacional do IFSC desenvolveu e utiliza, em parceria com o QTNano do IQSC, um método que extrai parâmetros preexistentes das estruturas de bandas, utilizando teoria de perturbação de Löwdin e termos de massa efetiva que vão além da ordem zero, e um *fitting* com estruturas de bandas de Hamiltonianos previamente calculados.(1-3) No entanto, em muitos casos é necessário incluir um número maior de bandas para descrever os parâmetros que compõem os elementos de matriz desses Hamiltonianos, como o caso de materiais com *gap* indireto (fundo da banda de condução não alinhado ao topo da banda de valência) ou quando os *spin splitting* são da ordem do *gap*. A abordagem utilizada para resolver estes problemas, que resultam em valores espúrios, consiste em, a partir das simetrias do sistema aplicar diferentes vínculos à busca de parâmetros, como por exemplo, o uso da simetria de inversão espacial do Hamiltoniano. Esta estratégia permitirá obter uma descrição mais realística, melhorando o *fitting* para determinar parâmetros como a massa efetiva e fatores-g. Todo esse procedimento está sendo realizado na construção de uma *framework* para auxiliar no processo de tomada de decisão sobre qual tamanho, e números de parâmetros, do Hamiltoniano são suficientes para uma descrição realística do sistema.

**Palavras-chave:** Estruturas de bandas. Hamiltonianos efetivos. Método  $k \cdot p$ . Spin splitting. Fator-g efetivo. Massa efetiva. Perturbação de Löwdin

#### Referências:

- 1 BASTOS, C. M. O. *et al.* A comprehensive study of g-factors, elastic, structural and electronic properties of III-V semiconductors using hybrid-density functional theory. **Journal Applied Physics**, v. 123, n. 065702, p. 065702-1-065702-13, 2018, DOI. 10.1063/1.5018325.
- 2 MARQUARDT, O. *et al.* Multiband  $k \cdot p$  model and fitting scheme for ab initio based electronic structure parameters for wurtzite GaAs. **Physical Review B**, v. 101, p. 235147-1-235147-12, 2020, DOI. 10.1103/PhysRevB.101.235147.
- 3 BASTOS, C. M. O. *et al.* Stability and accuracy control of  $k \cdot p$  parameters. **Semiconductor Science**

**and Technology**, v. 31, p. 105002-1-105002-10, 2016, DOI. 10.1088/0268-1242/31/10/105002.