

LIVRO DE RESUMOS

SIFSC

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



2020

Física e
Molecular

Universidade de São Paulo Instituto de Física de São Carlos

X Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

Livro de Resumos

São Carlos
2020

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 10

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

Felipe de Souza Macias

Gabriel dos Reis Trindade

Gabriel Henrique Armando Jorge

Giovanna Costa Villefort

Giulia Kassab

Humberto Ribeiro de Souza

João Hiroyuki de Melo Inagaki

Juliana Naomi Yamauti Costa

Letícia Cerqueira Vasconcelos

Nickolas Pietro Donato Cerioni

Paulina Rossi Ferreira

Roberto Hiroshi Matos Furuta

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 Mastrantonio

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(10: 03-05 nov.: 2020: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da X Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por Joao H. Melo Inagaki [et al.]. São Carlos: IFSC, 2020.

321p.

Texto em português.

1.Física. I. Inagaki, Joao H. de Melo, org. II.Titulo.

ISBN: 978-65-993449-0-9

CDD 530

PG172

Framework para a determinação semiautomática de Hamiltonianos efetivos a partir de estruturas de bandas preexistentes

WANDERLEY, A. B. ; SIPAHI, G. M. ; SILVA, J. L. F. D.

adilson.wanderley@usp.br

Compreender a estrutura eletrônica dos semicondutores é fundamental para o desenvolvimento de novas tecnologias como: computadores mais rápidos, *LEDs*, células solares e materiais eletrônicos. Em modelos teóricos as propriedades eletrônicas em nanoescala são obtidas por Hamiltonianos efetivos, que podem descrever estruturas de bandas de maneira realística com baixo custo computacional. Estes Hamiltonianos descrevem os *spin splitting* e permitem a descrição de fatores-*g* efetivos em semicondutores III-V, onde a precisão dos cálculos depende da inclusão de bandas distantes.(1) Um método bem-sucedido e muito utilizado na construção desses Hamiltonianos é o método **k·p**.(1-2) Os elementos do Hamiltoniano matricial são obtidos com uso da teoria de perturbação de Löwdin e termos de massa efetiva, que vão além da ordem zero. Tais termos dependem de parâmetros que podem ser determinados pela simetria do grupo cristalino do material. A partir desta abordagem, o grupo do Laboratório de Física Computacional do IFSC em parceria com o QTNano do IQSC, desenvolveu um método que permite extrair parâmetros preexistentes das estruturas de bandas envolvendo um *fitting* com estruturas de bandas de Hamiltonianos previamente calculados.(1,3) Contudo, nos casos em que os *spin splitting* são da ordem do *gap*, existem poucos parâmetros para construção desses Hamiltonianos disponíveis na literatura. Neste contexto, propõem-se o uso de ferramentas computacionais, que permitam automatizar processos realizados manualmente, podendo reduzir os erros e gerar um ganho de tempo na inserção desses parâmetros. Propõem-se ainda o uso de *High Throughput in Material Science* com técnicas de inteligência artificial, como *Machine Learning*, na predição dos parâmetros permitindo a construção de Hamiltonianos de ordem zero mais realísticos e com um ganho no tempo de execução.(2) Com isso, será possível gerar um classificador de Hamiltonianos alternativos, que utiliza teoria de grupos e propriedades de simetria, e a construção de uma base de dados que auxiliará na busca por novos materiais.

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 of Applied Physics**, v. 123, n. 6, p. 065702, 2018. 2 MARQUARDT, O. *et al* Multiband **k p** model and fitting scheme for ab initio based electronic structure parameters for wurtzite GaAs. **Physical Review B** , v. 101, n. 23, p. 235147, 2020. 3 BASTOS, C. M. O. *et al* . Stability and accuracy control of **k p** parameters. **Semiconductor Science and Technology** , v. 31, n. 10, p. 105002, 2016.