

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

88

Efeitos de *strain* em nanoestruturas de perovskita

SIPAHI, Guilherme Matos¹; SIQUEIRA, Anderson¹

anderson.siqueira@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos – USP

Os haletos de perovskitas são semicondutores de baixa dimensionalidade que possuem grande importância em fotovoltaica, fotônica e optoeletrônica devido as suas propriedades ópticas e eletrônicas. Suas aplicações incluem a fabricação de células solares, fotodetectores e lasers. (1) Os haletos de perovskitas possuem fórmula química geral ABX_3 , onde A é um cátion orgânico ou inorgânico, como Cs, B é um íon metálico, como Pb e X é um haleto, como I e Br. (2) Dependendo da temperatura os cristais de perovskitas podem assumir três fases distintas. Em baixas temperaturas os cristais de perovskita assumem a fase ortorrômbica, com simetria do grupo pontual D_{2h} , em temperaturas médias os cristais de perovskita assumem a fase tetragonal, com simetria do grupo pontual D_{4h} e em temperaturas mais elevadas, assumem a fase cúbica, com simetria do grupo pontual O_h . (3) A maioria dos haletos de perovskitas são semicondutores de gap de direto, que são ajustáveis através de emissão de luz com o espectro variando do ultra violeta ao infravermelho e também através de estímulos externos, como o *strain*. Dessa forma, através de engenharia de estrutura de bandas é possível ajustar as propriedades ópticas e eletrônicas resultando em dispositivos eletrônicos mais eficientes. O propósito deste trabalho é construir os Hamiltonianos $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ e de *strain* usando, para este fim, a simetria do grupo duplo das fases cristalinas da perovskita com o objetivo de estudar os efeitos do *strain* sobre as estruturas de bandas desses semicondutores, e consequentemente, como a propriedades ópticas e eletrônicas são afetadas.

Palavras-chave: Perovskita; Estrutura de bandas; Strain.

Agência de fomento: CAPES (88887.803624/2023-00)

Referências:

- 1 ZHAO, Y.; ZHU, K. Organic-inorganic hybrid lead halide perovskites for optoelectronic and electronic applications. **Chemical Society Reviews**, v. 45, n. 3, p. 655-689, Feb. 2016. DOI: 10.1039/C4CS00458B.
- 2 SUTHERLAND, B.R.; SARGENT, E. H. Perovskite photonic sources, **Nature Photonics**, v. 10, p. 295-302, Apr. 2016. DOI: 10.1038/nphoton.2016.62.
- 3 EVEN, J. Pedestrian guide to symmetry properties of the reference cubic Structure of 3D All-Inorganic and hybrid perovskites. **Journal of Physical Chemistry Letters**, v. 6, n. 12, p. 2238-2242, June 2015. DOI: 10.1021/acs.jpcllett.5b00905.