

**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

94

Análise da Usabilidade do Método DFT-1/2 no VASP: Avaliação de Desempenho

SANTOS, Eduardo Afonso Moreira¹; SIPAHI, Guilherme Matos¹

duardo1510@ifsc.usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

O método DFT-1/2 (Density Functional Theory Half-Occupation) tem sido utilizado em cálculos de estrutura eletrônica para melhorar a precisão dos gaps de energia em semicondutores (1), corrigindo erros sistemáticos típicos da aproximação da densidade local (LDA) e do funcional de gradiente generalizado (GGA), correções que podem ser comparadas até com os métodos computacionais mais sofisticados como o HSE3 e HSE06. (2) Este trabalho tem como objetivo analisar a usabilidade do método DFT-1/2 implementado no software VASP (Vienna Ab initio Simulation Package), investigando seu desempenho em termos de precisão e tempo computacional em comparação a outros métodos. A análise foi realizada a partir de cálculos em um material semicondutor o GaAs, avaliando a convergência dos resultados e as correções aplicadas ao gap de energia. Os resultados mostraram que o método DFT-1/2, quando implementado no VASP, oferece uma melhoria significativa na correção de gaps, especialmente em materiais onde métodos convencionais falham em fornecer valores precisos. A interface de uso do método no VASP foi considerada adequada, mas há espaço para otimizações no fluxo de trabalho e na documentação disponível. Conclui-se que o DFT-1/2, é uma alternativa promissora para a correção de gaps de energia, sendo uma ferramenta útil para pesquisadores que buscam maior precisão em seus cálculos de estrutura eletrônica.

Palavras-chave: DFT-1/2; Teoria do funcional da densidade (DFT); Semicondutores.

Agência de fomento: CAPES (88887.965571/2024-00)

Referências:

- 1 FERREIRA, L. G.; MARQUES, M.; TELES, L. K. Approximation to density functional theory for the calculation of band gaps of semiconductors. **Physical Review B: condensed matter and materials physics**, v. 78, n. 12, p. 125116, 2008.
- 2 PELA, R.; MARQUES, M.; TELES, L. Comparing lda-1/2, hse03, hse06 and g0w0 approaches for band gap calculations of alloys. **Journal of Physics: condensed matter**, v. 27, n. 50, p. 505502, 2015.