

Universidade de São Paulo  
Instituto de Física de São Carlos

XII Semana Integrada do Instituto de  
Física de São Carlos

Livro de Resumos

São Carlos  
2022

# Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 12

## Coordenadores

Prof. Dr. Osvaldo Novais de Oliveira Junior

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

Prof. Dr. Javier Alcides Ellena

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

Profa. Dra. Tereza Cristina da Rocha Mendes

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

## Comissão Organizadora

Adonai Hilario

Arthur Deponte Zutião

Elisa Goettens

Gabriel dos Santos Araujo Pinto

Henrique Castro Rodrigues

Jefter Santiago Mares

João Victor Pimenta

Julia Martins Simão

Letícia Martinelli

Lorany Vitoria dos Santos Barbosa

Lucas Rafael Oliveira Santos Eugênio

Natasha Mezzacappo

Paulina Ferreira

Vinícius Pereira Pinto

Willian dos Santos Ribela

## 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  
(12: 10 out. - 14 out. : 2022: São Carlos, SP.)  
Livro de resumos da XII Semana Integrada do Instituto de  
Física de São Carlos/ Organizado por Adonai Hilario [et al.]. São  
Carlos: IFSC, 2022.  
446 p.  
Texto em português.  
1. Física. I. Hilario, Adonai, org. II. Título

ISBN: 978-65-993449-5-4                      CDD: 530

## PG195

# Método de fitting de estruturas de bandas a partir de estratégias envolvendo propriedades de simetria

WANDERLEY, Adilson Barros; SIPAHI, Guilherme Matos

adilson.wanderley@usp.br

Fundamentais nas sociedades contemporâneas, os semicondutores são peças-chave, por exemplo, na construção de células solares e nos computadores e celulares modernos: menores, portáteis, mais rápidos, com maior capacidade de armazenamento e processamento, com autonomia de bateria e permitindo chamadas de vídeos. O estudo das propriedades dos semicondutores vai além de sua composição química, e envolve a compreensão e manipulação dos átomos que constituem seu arranjo cristalino, em relação à sua disposição espacial e sua simetria. As propriedades físicas desses materiais são estudadas por meio de suas estruturas de bandas, que do ponto de vista teórico são descritas pelo Hamiltoniano da equação de Schrödinger,  $H\psi = E\psi$ . Hamiltonianos efetivos, construídos por meio do método  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ , vêm sendo utilizados há algumas décadas e fornecem uma descrição realística das estruturas de bandas, com baixo custo computacional em relação aos métodos de primeiros princípios.(1-2) Esta abordagem permite ajuste de curvas sob dados experimentais para descrição dos *spin-splitting* e fatores-g efetivos. (1-3) A construção desses Hamiltonianos utiliza propriedades de simetria do grupo cristalino que se pretende estudar a partir da teoria de grupos, no entanto, esse processo resulta na dependência de alguns parâmetros. (1,3) O Laboratório de Física Computacional do IFSC desenvolveu e utiliza, em parceria com o QTNano do IQSC, um método que extrai parâmetros por meio de *fitting* das estruturas de bandas previamente calculadas, utilizando teoria de perturbação de Löwdin e termos de massa efetiva que vão além da ordem zero. (1,3) Para uma descrição envolvendo modelos com *gap* indireto (topo da banda de valência e fundo da banda condução não alinhados), ou mesmo quando o *gap* é da ordem do *spin-splitting*, é necessário a inclusão de mais bandas. Uma maneira de abordar esse tipo de problema com soluções realísticas é, a partir das simetrias do sistema, utilizar os termos ímpares responsáveis por uma abertura mais significativa das energias, com a inclusão de vínculos que possibilitem descrever a simetria de inversão espacial no Hamiltoniano. Essa estratégia permitirá uma descrição mais realística levando a uma melhora no *fitting* para determinar parâmetros como a massa efetiva e fatores-g, podendo futuramente ser integrada à abordagem conhecida por *High Throughput in Material Science*. Até o momento, nossos esforços estão voltados para construção de uma *framework* que auxilie no processo de tomada de decisão sobre qual tamanho, quais bandas são mais influentes em cada região e direção da zona de Brillouin, e qual o número de parâmetros do Hamiltoniano é suficiente para uma descrição realística do sistema.

**Palavras-chave:** Método k.p. Hamiltoniano efetivo. Semicondutores.

**Agência de fomento:** CNPq (140279/2020-2)

### Referências:

1 BASTOS, C. M. O. *et al.* Stability and accuracy control of k-p parameters. **Semiconductors Science**

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

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, p. 235147-1-235147-12, 2020. DOI. 10.1103/PhysRevB.101.235147.

3 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. 065702-1-065702-13, 2018, DOI. 10.1063/1.5018325.