

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

Jefer 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

IC9

Implementação e manutenção de cálculo de estrutura eletrônica de semicondutores

PAULI, Ian Giestas; SIPAHI, Guilherme

iangiestas@usp.br

O laboratório de física computacional, o LFC, vem desenvolvendo um software de cálculo de estrutura eletrônica, que permite usar um computador de mesa para realizar cálculos de estrutura de bandas, mesmo em sistemas cuja matriz hamiltoniana não caberia na memória ao usar outros métodos de diagonalização, além disso, o código podia realizar procedimentos auto-consistentes e cálculos feitos em pós-processamento, o que permite caracterizar novos materiais. No entanto, com o passar dos anos e as diversas alterações para a inclusão de novos recursos, o código cresceu sem o planejamento necessário para a sua organização e algumas escolhas tornaram-no pouco prático de usar e realizar melhorias ou implementar novos recursos. Com o intuito de resolver este problema, iniciou-se a escrita de uma nova versão, buscando sanar estas lacunas do projeto. O novo código foi escrito usando fortran moderno e técnicas de orientação a objetos, visando facilitar a introdução de novos hamiltonianos, bem como a configuração por seus usuários, além de tornar possível uma rápida adição de recursos através de uma arquitetura flexível. Além disso, foi integrado um sistema de compilação e gerenciamento de dependências, o *fpm(1)*, que permite integrar códigos de propósito geral, o que faz com que se passe mais tempo resolvendo os problemas de Física, do que problemas de ordem técnica. O código agora conta com um programa principal cuja configuração pode ser realizada através de um arquivo de texto plano estruturado em TOML, graças a facilidade da incorporação de sua biblioteca Fortran e com isso é possível controlar o cálculo, os parâmetros dos materiais, método de solução e configurar a geração de gráficos. Outra funcionalidade adicionada é a introdução da possibilidade de incluir novos Hamiltonianos por um arquivo com uma sintaxe idêntica a do fortran, em tempo de execução, ou seja, não é preciso recompilar o código para trocar o modelo a ser usado, por meio de um *parser* simples que usa o algoritmo de Dijkstra, o *shunting yard (2)*, desenvolvido em uma biblioteca a parte. É possível definir expressões que podem ser reutilizadas posteriormente ao declarar os elementos da matriz do modelo e utilizar os nomes de parâmetros definidos no arquivo apropriado e também adicionar algumas funcionalidades importantes aos usuários não-programadores, em tempo de execução. É possível definir o método de solução, os parâmetros e modificá-los sem a necessidade de recompilação, e sem precisar programar usando a API desenvolvida. No entanto, o *parser* ainda é muito rudimentar dado a complexidade existente em ter que definir estruturas de dados genéricas em Fortran e ainda não possui suporte a operações unárias (apenas funções, que é como "-" unário é definido). Ainda falta realizar o porte dos cálculos auto-consistentes, cujas alterações estão sendo realizadas por outro colaborador do projeto diretamente no código, o que será um bom termômetro das alterações. Por fim, testes de desempenho e comparação com o código legado precisam ser feitos de modo que se possa medir as diferenças entre os tempos de construção e diagonalização dos hamiltonianos.

Palavras-chave: Fortran moderno. Semicondutores. Parsers.

Agência de fomento: CNPq (Não se aplica)

Referências:

1 KEDWARD, L. J. *et al.* The state of Fortran. **Computing in Science & Engineering**, v. 24, n. 2, p. 63-72, 2022, DOI: 10.1109/MCSE.2022.3159862.

2 DIJKSTRA, E.W. **Algol 60 translation:** an Algol 60 translator for the X1 and making a translator for Algol 60. Disponível em: <https://www.cs.utexas.edu/~EWD/MCReps/MR35.PDF>. Acesso em: 26 ago. 2022.