

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

48

## Estudo de propriedades quânticas de materiais semicondutores de baixa dimensionalidade

SIPAHI, Guilherme Matos<sup>1</sup>; PAULI, Ian Giestas<sup>1</sup>

iangiestas@usp.br

<sup>1</sup>Instituto de Física de São Carlos - USP

O campo da computação quântica continua evoluindo como uma das principais frentes tecnológicas da atualidade. Embora a teoria quântica já esteja bem estabelecida e existam vários algoritmos quânticos, a implementação prática ainda enfrenta desafios, principalmente na construção de qubits estáveis em larga escala. (1) Entre as várias abordagens, a utilização de materiais semicondutores destaca-se pela possibilidade de fabricação em massa e integração com circuitos eletrônicos. Nosso trabalho se concentra no desenvolvimento de um framework generalista de massa efetiva, capaz de ser aplicado a diferentes sistemas quânticos, incluindo junções de arsenetos do tipo III-V e nanoestruturas de silício. O objetivo principal é oferecer uma ferramenta flexível para a modelagem de diversos sistemas semicondutores, permitindo a inclusão de diversos potenciais e modelos customizados. Recentemente, integramos ao nosso framework o potencial de Coulomb e um procedimento autoconsistente que, apesar de apresentar convergência estável, ainda requer otimização e testes, já que o tempo de convergência atualmente gira em torno de 5 horas por simulação e em torno de 1000 iterações (máximo). Grande parte do tempo é gasto no cálculo de densidade de estados, que dura 10s em cada passo, mas pode ser otimizado com um corte no número de bandas consideradas. Alguns sistemas de referência estão sendo testados para garantir que os cálculos estão sendo feitos corretamente. Atualmente, estamos trabalhando na implementação dos efeitos de troca e correlação no framework. Esses efeitos corrigem as limitações das aproximações de elétrons independentes, levando em conta a repulsão entre elétrons com o mesmo spin (troca) e as interações entre os movimentos dos elétrons (correlação), que influenciam diretamente suas posições devido à repulsão coulombiana. (2) Incorporar essas correções permitirá uma modelagem mais precisa das interações eletrônicas nos sistemas quânticos simulados, especialmente em materiais semicondutores, onde as interações entre múltiplos elétrons têm um papel significativo. Este desenvolvimento visa refinar a precisão das simulações e ampliar o escopo de aplicações do framework a sistemas semicondutores mais complexos.

**Palavras-chave:** Semicondutores; Troca e correlação; Procedimento autoconsistente.

**Agência de fomento:** CAPES (8887.821568/2023-00)

### Referências:

- 1 CHATTERJEE, A. *et al.* Semiconductor qubits in practice. **Nature Reviews Physics**, v. 3, p. 157-177, Feb. 2021. DOI: <https://doi.org/10.1038/s42254-021-00283-9>.
- 2 GUNNARSON, O. *et al.* Descriptions of exchange and correlation effects in inhomogeneous

electron systems. **Physical Review B**, v. 20, n.8, p. 3136, 1979. DOI:  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.20.3136>.