

Universidade de São Paulo
Instituto de Física de São Carlos

Semana Integrada do Instituto de Física
de São Carlos

13^a edição

Livro de Resumos

São Carlos
2023

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

PG149

Método de fitting de estruturas de bandas a partir de estratégias envolvendo propriedades de simetria para obtenção de parâmetros de Luttinger, Kane e g-factor

WANDERLEY, Adilson Barros¹; SIPAHI, Guilherme Matos¹; OLIVEIRA, Caio Estevão de¹

adilson.wanderley@usp.br

¹Instituto de Física de São Carlos - USP

Semicondutores são fundamentais na construção de células solares, computadores e celulares menores, mais rápidos, com maior capacidade de armazenamento, processamento e melhores baterias. Propriedades dos semicondutores são estudadas além de sua composição química, envolvendo a compreensão dos átomos que constituem seu arranjo cristalino. 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, $H\psi = E\psi$. O método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ vem sendo utilizado há algumas décadas na construção de Hamiltonianos efetivos 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 o particionamento 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* e também quando se deseja estudar regiões mais distantes do ponto Γ na Zona de Brillouin (ZB), é necessário a inclusão de mais bandas, o que ainda mantém o custo computacional elevado. 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 permite uma descrição mais realística, levando a uma melhora no *fitting* para determinar parâmetros como a massa efetiva, fatores-g, e parâmetros de Luttinger e Kane, com menor custo computacional e podendo ser futuramente integrada à abordagem conhecida por *High Throughput in Material Science*. Os *fittings* obtidos foram extremamente bons e se mantiveram bem ajustados em regiões mais distantes do ponto Γ na ZB, além de resultarem em parâmetros que estão em conformidade com os reportados na literatura para o GaAs na forma Zinblende.

Palavras-chave: Hamiltoniano efetivo. Método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$. Parâmetros de Luttinger e Kane.

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

Referências:

- 1 BASTOS, C. M. O. *et al.* Stability and accuracy control of k·p parameters. **Semiconductor Science and Technology**, v. 31, n. 10, p. 105002-1-105002-10, Oct. 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, June 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, Feb. 2018. DOI: 10.1063/1.5018325.