

# XV Semana da SeFis Física



**PPGF**

Programa de  
Pós-Graduação  
em Física

Workshop do PPGF  
Programa e Resumos  
6 de Setembro de 2019

Workshop do PPGF na XV SeFis  
6 de Setembro de 2019

Apresentações Orais

- 14h00-14h15 – Diana Navroski  
14h15-14h30 – Felipe Soares Covre  
14h30-14h45 – Daniele Souza  
14h45-15h00 – Caique Serati  
15h00-15h15 – Vanderli Laurindo Jr.  
15h15-15h45 – Apresentação Oral dos Pôsteres  
15h45-16h30 – Pôsteres e Café  
16h30-17h00 – Apresentação institucional Quantum Design  
17h00-17h15 – Ricardo Pereira Bonini  
17h15-17h30 – Taysa Mendonça  
17h30-17h45 – Ricardo Rodrigues Justino da Silva  
17h45-18h15 – Leiden em Todas as Escalas (Matheus Velloso e Francisco Groppo)  
18h15-18h30 – Prêmios de melhores trabalhos e Encerramento do Workshop

## **Resumos das apresentações orais**

01

Título: OTIMIZANDO A EFICIÊNCIA DE CÉLULAS SOLARES BASEADAS EM NANOESTRUTURAS SEMICONDUTORAS QUATERNÁRIAS

Autores: Diana Maria Navroski Thomen, Benito Alén, Marcio Daldin Teodoro

O aumento no consumo da energia elétrica nos últimos anos tem resultado em uma grande busca por fontes de geração de energia renováveis. Uma forma de energia que se encaixa neste perfil é a solar. Materiais que ganharam evidência recentemente para aplicação em células solares são baseados nas ligas quaternárias compostas por GaAsSbN, sensível na região espectral de 1,0 eV ou 1,15 eV, o que os tornam interessantes na confecção de células solares de multijunção – aquelas que apresentam melhor eficiência de conversão energética atualmente. Todavia, este material apresenta algumas desvantagens, sendo elas: possui três átomos do grupo-V competindo pela mesma posição; problemas de separação de fase; degradação das propriedades óticas devido à adição de Nitrogênio. Uma forma de resolver este problema é optar por crescer duas ligas ternárias (GaAsSb/GaAsN) de forma periódica, com camadas nanométricas, criando uma super-rede (SL), diminuindo assim o problema de miscibilidade entre Sb e N. Além disso, é possível reduzir a concentração de N pela metade, diminuindo como consequência, os problemas óticos ligados ao mesmo. Outra característica fundamental relacionada a eficiência de uma célula solar refere-se ao tempo de recombinação dos portadores foto-gerados. A otimização deste parâmetro pode ser feita com o uso uma SL do tipo II, onde os elétrons e buracos estão confinados em distintos potenciais, aumentando assim o tempo de recombinação. Neste trabalho estão sendo estudadas cinco amostras de SL do tipo II com diferentes espessuras de período (na ordem de nanômetros), em que o período é a união de uma camada de GaAsSb e uma camada de GaAsN. Foram realizadas medidas de fotoluminescência (PL) e fotoluminescência resolvida no tempo (TRPL). Primeiramente, foi possível analisar que as amostras com maior período apresentam a largura de linha à meia altura (do inglês FWHM) mais estreita, o que indica melhor qualidade cristalina. Além disso, observou-se que, conforme o tamanho do período aumenta, a energia do pico observado na PL diminui. Esse resultado demonstra que é possível ajustar o gap de energia da amostra simplesmente ajustando o tamanho dos períodos. Em relação às análises de TRPL, observou-se que conforme a intensidade da PL aumenta, a recombinação ocorre de forma mais rápida. Tal comportamento, mostra que longos tempos de vida foram encontrados na região de baixa emissão, compatíveis com os tempos esperados para o bom funcionamento de células solares. Ainda, avaliou-se que para amostras com maior período, o tempo de recombinação foi maior, demonstrando que esse fator também pode ser ajustado em relação ao tamanho do período da super-rede, cuja eficiência de conversão já atinge valores recordes em torno de 50%.

## Controle elétrico de interações éxciton-electron em heteroestruturas hBN/MoSe<sub>2</sub>/hBN

Y. Galvão Gobato<sup>1,2</sup>, M.E. Severijnen<sup>1</sup>, F. S. Covre<sup>2</sup>, F. Whitters<sup>3</sup>, U. Zeitler<sup>2</sup>, P.C.M. Christianen<sup>2</sup>

<sup>1</sup> High Field Magnetic Laboratory, Radboud University Nijmegen, Holanda

<sup>2</sup> Universidade Federal de São Carlos (UFSCAR), Brasil

<sup>3</sup> University of Exeter, Reino Unido

Nos últimos anos, tem tido um aumento crescente no estudo das propriedades de semicondutores bidimensionais (2D). Particularmente, muitos trabalhos foram realizados em monocamadas de dicalcogenetos de metais de transição (TMD), que possuem um *gap* de energia direto em dois vales não equivalentes ( $\pm K$ ), e também fortes efeitos excitônicos devidos a um forte confinamento quântico, grande massa efetiva de portadores e uma pequena constante dielétrica. Na presença de campos magnéticos perpendiculares, tais sistemas apresentam fenômenos físicos interessantes tais como a separação “*valley-Zeeman*” e polarização de vale induzida pelo campo magnético. Em particular, foi demonstrado que a separação de vale de monocamadas de TMDs varia de maneira linear com o campo magnético perpendicular e um fator  $g$  da ordem de  $\sim 4$  foi obtido tanto para éxcitons como para trions nesses sistemas. Neste trabalho, realizamos um estudo sistemático da fotoluminescência resolvida em polarização em campos magnéticos intensos de até 30T em dispositivos com gate elétrico de monocamadas de MoSe<sub>2</sub> encapsuladas por nitreto de boro hexagonal (hBN). Os resultados obtidos revelam um comportamento diferente quando comparado a resultados previamente reportados na literatura [1-2]. Foi observado uma pequena dependência do fator  $g$  excitônico com o aumento da voltagem aplicada e uma dependência importante do fator  $g$  do trion com tensão aplicada. Observamos também uma forte dependência do grau de polarização excitônica, onde foi observado uma clara inversão de sinal de polarização do vale com aumento da voltagem aplicada na amostra. Além disso, observamos que o pico da PL do éxciton apresenta um “*blue shift*” com o aumento da voltagem aplicada enquanto o pico do trion, apresenta um “*red shift*” com o aumento de voltagem que pode ser explicado por uma teoria éxciton-polaron. Em geral, os resultados obtidos evidenciam efeitos importantes de interação éxciton-eletrons nesses sistemas modificando o fator  $g$  e grau de polarização do vale.

Referências:

1) Zefang Wang, Kin Fai Mak, and Jie Shan, Phys. Rev. Lett. 120, 066402 (2018)

2) Patrick Back et al Phys. Rev. Lett. 118, 237404 (2017).

## Estudo das propriedades ópticas em ligas semicondutoras GaAsBi dopadas crescidas em orientações cristalinas distintas

Daniele de Souza<sup>1</sup>, Sultan Alhassan<sup>3,4</sup>, Mohamed Henini<sup>3</sup>, Igor Kazakov<sup>5</sup>, Helder Vinicius Avanço Galetiz, Yara Galvão Gobato<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>\*Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos (UFSCar) 13560-905, São Carlos, SP, Brasil

<sup>2</sup>\* Departamento de Engenharia Elétrica da Universidade Federal de São Carlos (UFSCar) 13560-905, São Carlos, SP, Brasil

<sup>3</sup>\*School of Physics and Astronomy, University of Nottingham, Nottingham NG7 2RD, UK

<sup>4</sup>\*School of Physics, College of Science, Jouf University, 74631-7365, Kingdom of Saudi Arabia

<sup>5</sup>\*P. N. Lebedev Physical Institute, Russian Academy of Science, 119991, GSP-1, Moscow, Russia

As ligas III-V contendo bismuto (Bi) no regime diluído tem despertado um crescente interesse no campo da optoeletrônica, principalmente para o desenvolvimento de dispositivos que permitam uma engenharia de gap de banda na região do infravermelho próximo. Esses materiais possuem características interessantes, como GaAsBi que apresenta uma forte redução do “gap” de energia (aproximadamente 90 meV) [1]. O processo de crescimento da liga GaAsBi é complexo, uma vez que o átomo de Bi possui um raio atômico relativamente grande em relação a outros elementos da família VA e apresenta a tendência de segregar na superfície da amostra. Para que haja uma incorporação efetiva de Bi na rede hospedeira (GaAs) é necessário a diminuição da temperatura de crescimento do GaAsBi com relação do GaAs, que deve estar entre 270°C e 340°C [2], resultando defeitos nativos e efeito de desordem estrutural, o que pode diminuir a sua eficiência óptica. Apesar de já se ter avançado na compreensão da estrutura de banda deste material, ainda permanecem pouco elucidados os efeitos da dopagem e direções de crescimento sobre as propriedades ópticas e estruturais do GaAsBi, aspectos essenciais para a fabricação de dispositivos ativos. Neste trabalho, realizamos um estudo sistemático das propriedades ópticas de GaAsBi dopados tipo p e n e crescidos em diferentes planos cristalinos (100) e (311)B de concentração nominal de bismuto de aproximadamente 0.5%. Para isso realizamos medidas de fotoluminescência em função da temperatura e da potência. Observamos que as amostras dopadas do tipo p e n com planos cristalinos (311)B possuem uma menor intensidade de emissão óptica quando comparada com o plano (100). Entretanto, essas amostras apresentam emissões para menores energias, o que evidencia que as amostras (311)B apresentam uma maior incorporação de bismuto que amostras com plano cristalino (100). O efeito da dopagem também é comparado com relação às direções de crescimento de amostras não dopadas, usadas como referência.

### Referência:

1-NAGARAJA, Kodihalli K. et al. GaAs (1-x) Bi x: A Promising Material for Optoelectronics Applications.

**Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences**, v. 42, n. 3, p. 239-265, 2017.

2- LI, Handong; WANG, Zhiming M. (Ed.). Bismuth-containing compounds. New York: Springer, 2013.

## Propriedades ópticas de monocamadas de MoS<sub>2</sub>/Talco

C. Serati de Brito<sup>1</sup>, I. Barcelos<sup>2</sup>, M. B. de Andrade<sup>3</sup>, Y. Galvão Gobato<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Federal University of São Carlos (UFSCAR), São Carlos-SP.

<sup>2</sup>Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), Campinas-SP.

<sup>3</sup>Instituto de Física de São Carlos (USP), São Carlos-SP.

O dissulfeto de molibdênio (MoS<sub>2</sub>) é um material semicondutor que tem atraído bastante interesse da comunidade científica na última década. Em particular o MoS<sub>2</sub> é um material semicondutor de gap indireto pertencente a classe dos dicalcogenetos de metais de transição (TMDs). Esses sistemas apresentam uma estrutura lamelar, ou seja, são formados por camadas atômicas fracamente interagentes entre si via interações de Van der Waals. Essa fraca interação entre os planos cristalinos possibilita esfoliar materiais TMDs, separando essas camadas até a obtenção de um cristal praticamente bidimensional (2D). Nesta condição, ocorre uma transição de estrutura de banda de gap indireto para gap direto resultando assim em um aumento considerável da eficiência óptica desses materiais. Além disso, os semicondutores TMDs-2D apresentam fortes efeitos excitônicos e regras de seleção específicas nas transições eletrônicas, tornando-os bastante atrativos tanto do ponto de vista de física fundamental, quanto no ponto de vista de aplicações em optoeletrônica. Os semicondutores 2Ds são usualmente preparados sobre SiO<sub>2</sub> resultando em vários problemas devidos a defeitos e impurezas que resultam em dopagem indesejada e efeitos de localização de éxcitons. Para evitar tais problemas foi demonstrado recentemente que o uso de nitreto de boro hexagonal (h-BN) entre o material 2D do SiO<sub>2</sub> pode melhorar de maneira significativa as propriedades elétricas e ópticas de sistemas 2Ds<sup>1</sup>. Apesar dos progressos obtidos, existe também um grande interesse no uso de outros materiais isolantes que podem afetar as propriedades de dispositivos baseados em semicondutores 2Ds. O talco é um silicato de magnésio hidratado de fórmula química Mg<sub>3</sub>Si<sub>4</sub>O<sub>10</sub>(OH)<sub>2</sub>, é um mineral abundante, e que assim como o MoS<sub>2</sub> e o h-BN, também apresenta estrutura lamelar. O talco é também um material isolante com alto *gap* de energia (5.3 eV), que possui alta estabilidade térmica, é quimicamente inerte e apresenta superfície atômica plana<sup>2,3</sup>. Portanto, é um material que apresenta todas as potencialidades para ser utilizado como um material alternativo ao hBN para TMDs-2D. Neste trabalho, realizamos a preparação e investigação de propriedades ópticas de monocamadas de MoS<sub>2</sub> depositadas sobre h-BN e sob talco. As propriedades ópticas desses sistemas foram investigadas realizando medidas de micro-Raman e microfotoluminescência. Os resultados preliminares obtidos indicam uma melhoria significativa na largura de linha da emissão de fotoluminescência do MoS<sub>2</sub> sobre o talco quando comparado com amostras depositadas sobre h-BN. Foi também observado que essa melhoria nas propriedades ópticas depende consideravelmente da espessura do talco. Além disso, observamos uma mudança significativa na posição do pico de fotoluminescência para amostras preparadas sobre talco e h-BN que foi associado a uma diferença na tensão axial do MoS<sub>2</sub> dependendo do substrato utilizado. De forma geral, nossos resultados preliminares demonstram que o talco é um material promissor para explorar a física de sistemas bidimensionais e para o uso em novos dispositivos optoeletrônicos baseados nos TMDs-2D.

Referências:

1 – F. Cadiz et al, Phys Rev X **7**, 021026 (2017).

2 – I. Barcelos et al, ACS Photonics **5**,1912 (2018)

3 – E. Mania et al, 2D Materials **4**, 031008 (2017).

**Controle magnético da transferência de spin em nanoestruturas híbridas QD-QW**

V. Laurindo Jr.1, Yu. I. Mazur 2, E. R. Cardozo de Oliveira 1, B. Alén 3, M. E. Ware 2, E. Marega Jr. 4, Z. Ya. Zhuchenko 5, G. G. Tarasov 5, G. E. Marques 1, G. J. Salamo 2, M. D. Teodoro 1

1- Departamento de Física da Universidade Federal de São Carlos, SP, Brazil

2- Instituto de Nanociência e Engenharia, Universidade de Arkansas, AR, USA

3- Instituto de Micro e Nanotecnologia, Três Cantos, Spain

4- Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo, SP, Brazil

5 Instituto de Física de Semicondutores , Kiev, Ukraine

Nanoestruturas semicondutoras híbridas do tipo Ponto Quântico (QD) – Poço Quântico (QW) apresentam o comprimindo de onda da fotoluminescência que depende do tamanho do ponto, largura do poço, e da barreira entre o QD-QW definindo o acoplamento dessas estruturas. Neste trabalho investigamos a transferência de portadores no sistema híbrido InAs/GaAs QD - InGaAs QW por magneto-fotoluminescência, onde uma dependência incomum da fotoluminescência para altos campos magnéticos é observada. Foi observado a existência de duas regiões: uma com forte acoplamento QD-QW abaixo de 6 T e para campos magnéticos mais altos, o acoplamento é reduzido e a luminescência da estrutura híbrida se assemelha a um sistema independente. [1] Observou-se ainda uma dependência na abertura Zeeman com a potência de excitação, onde para a maior energia de excitação um comportamento linear esperado é observado. Enquanto que para potências mais baixas, a linearidade é observada para altos campos magnéticos e para baixos campos o Zeeman se torna não-linear.

[1] V. Laurindo Jr. Yu. I. Mazur, E. R. Cardoso de Oliveira, B. Alén, M. E. Ware, E. Marega Jr., Z. Ya. Zhuchenko, G. G. Tarasov, G. E. Marques, M. D. Teodoro, G. J. Salamo, Phys. Rev. B **100**, 035309 (2019).

# Propriedades Dielétricas, Magnéticas e Magnetodielétricas do sistema PZT/CFO Fabricados via RF-Sputtering

Bonini, R.P(1); Zabotto, F.L.(1);

(1) Universidade Federal de São Carlos – UFSCar

**Palavras chave:** Multiferroicos Magnetoelétrico, Filmes Finos, PZT, CFO

Na última década, sistemas nanoestruturados que apresentem acoplamento magnetoelétrico tem despertados grande interesse de pesquisadores e da indústrias de alta tecnologia devido ao fato desses materiais integrarem duas propriedades de alta aplicabilidade tecnológica, o ferromagnetismo e a ferroeletricidade. Através de uma sistemática abordagem experimental, no recente trabalho, foi possível investigar a fabricação, pelo método de deposição física por rádio frequência (RF-Sputtering), e caracterização de filmes finos compósitos magnetoelétricos do sistema  $\text{Pb}(\text{Zr}_{0,2}\text{Ti}_{0,8})\text{O}_3/\text{CoFe}_2\text{O}_4$  (PZT/CFO) com conectividade 2-2 (laminado). Neste trabalho foi possível verificar a presença do acoplamento magnetodielétrico e magnetoelétrico que foram correlacionados com a interação via “*strain/stress*” entre as fases, nesse caso um “*stress*” tensional surgiu sobre a fase CFO devido a presença da fase PZT, resultando na melhoria das propriedades magnéticas quando aplicado campo magnético perpendicular a superfície do filme. Assim faz-se necessário um estudo mais avançado da influência do “*strain*” sobre as propriedades magnetoelétricas desse sistema através da técnica de dispersão de raios X com luz coerente na presença de campo elétrico externo. Por fim foi visto que o acoplamento magnetodielétrico surge no espectro de frequência de máxima dispersão dielétrica da heteroestrutura e que a presença de uma interface ativa influência nessas propriedades dielétricas do sistema.

## Engenharia de reservatórios com temperaturas efetivas para sistemas de spin qubit

Autores: Taysa M. de Mendonça<sup>1</sup>, Alexandre M. de Souza<sup>3</sup>, Rogério J. de Assis<sup>2</sup>, Norton G. de Almeida<sup>2</sup>, Roberto S. Sarthour<sup>3</sup>, Ivan S. Oliveira<sup>3</sup>, Celso J. Villas-Boas<sup>1</sup>

1- Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, 13565-905, São Carlos, SP, Brasil

2- Instituto de Física, Universidade Federal de Goiás, 74.001-970, Goiânia, GO, Brasil

3- Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, 22290-180, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

O estudo da termodinâmica quântica nos permite uma compreensão mais profunda das leis fundamentais da termodinâmica e suas limitações que aparecem quando os efeitos quânticos são levados em consideração [1]. Neste contexto, as máquinas térmicas quânticas, que empregam sistemas quânticos como meio de trabalho tem atraído grande interesse dos físicos pois permitem investigar os limites fundamentais da eficiência das máquinas térmicas [2,3]. Em um trabalho recente, mostramos, tanto teoricamente como experimentalmente, que máquinas térmicas quânticas trabalhando com um dos reservatórios a uma temperatura efetiva negativa apresentam comportamentos contra-intuitivos como uma maior eficiência ao realizar ciclos não-adiabáticos [4], ao contrário do comportamento usual de máquinas térmicas clássicas que fornecem sua máxima eficiência somente em processos estritamente adiabáticos. No presente trabalho mostramos como projetar um reservatório efetivo com temperatura negativa, ou qualquer um arbitrário, para um único qubit sistema. Para este fim, primeiro precisamos projetar uma interação apropriada entre um único spin sistema, spin nuclear de  $^{13}\text{C}$  ( $I = 1/2$ ), para um reservatório fermiônico, no nosso caso um grande número de spins nucleares de  $^1\text{H}$  ( $I = 1/2$ ) que age como o banho de spins. Esta estrutura de carbonohidrogênio está presente na amostra policristalina de adamantano ( $\text{C}_{10}\text{H}_{16}$ ), que foi usada em nossa configuração experimental. A engenharia de interação necessária é alcançada pela aplicação de uma sequência específica de pulsos de radiofrequência simultaneamente em ambos os spins de carbono e hidrogênio e as temperaturas, tanto do qubit sistema quanto do banho, podem ser controladas pela preparação inicial apropriada do estado dos spins nucleares. Também derivamos o hamiltoniano efetivo para o nosso sistema e seus resultados previstos estão em muito boa concordância com os dados experimentais.

[1] Gemmer, J. *et al.* *Quantum Thermodynamics*, LNP 657, Springer Verlag, Heidelberg, Berlin (2004).

[2] Alicki, R. The quantum open system as a model of the heat engine. *J. Phys. A: Math. Gen.* 12, L103 (1979).

[3] Quan, H. T. *et al.* Quantum thermodynamic cycles and quantum heat engines, *Phys. Rev. E.* 76, 031105 (2007).

[4] De Assis, R. J. *et al.* Quantum heating engine beating the Otto limit. *Phys. Rev. Lett.* 122, 240602 (2019).

**Análise de Fenômenos Críticos no Modelo *Rock-Paper-Scissors*****Autor:** Ricardo Rodrigues Justino da Silva (UFSCar)**Orientador:** Prof. Dr. Francisco Ednilson Alves dos Santos (UFSCar)**Colaborador:** Prof. Dr. Dionisio Bazeia (UFPB)

Meu trabalho de mestrado foi desenvolvido com o propósito de analisar fenômenos críticos no modelo *Rock-Paper-Scissors* (RPS), constituído por três espécies e o espaço vazio, distribuídos inicialmente de maneira aleatória numa rede quadrada, em que uma célula ativa pode interagir com apenas um de seus quatro vizinhos próximos (células passivas), onde as possíveis interações são: movimentação (célula ativa e passiva trocam de lugar), reprodução (célula ativa preenche um espaço vazio) e predação (célula ativa elimina a célula passiva, criando um espaço vazio). Em suma, trata-se de um modelo com interação cíclica sem direção privilegiada, mas que apresenta assinaturas de uma transição de fase contínua do estado de diversidade (fase simétrica) para o de uniformidade (fase assimétrica). Com isso, fomos motivados a estudar esse tipo de sistema e analisar como a variação de um de seus parâmetros de controle, a reprodução, influencia o sistema quando nos aproximamos da reprodução crítica. A partir da realização de experimentos numéricos foi possível calcular os expoentes críticos desse tipo de sistema e amparados na teoria de fenômenos críticos, identificar qual a classe de universalidade que o modelo *Rock-Paper-Scissors* com três espécies e o espaço vazio pertence.