

PROPOSTA PARA ABERTURA DE CONCURSO DE PROFESSOR DOUTOR, MS-3, RDIDP

Área: Estrutura Eletrônica de Materiais

Professores do IFUSP que apoiam a proposta: Gustavo Martini Dalpian, Helena Maria Petrilli, Luana Sucupira Pedroza, Lucy Vitoria Credidio Assali, e Marília Junqueira Caldas.

Justificar a adição de um docente na área

A área de pesquisa em estrutura eletrônica de materiais possui um longo histórico no IFUSP que se iniciou no final da década de 1960 e na década de 1970. É muito difícil contar o número de artigos que foram publicados na área desde então, ou mesmo contar o número de estudantes de pós-graduação que foram formados na área. Podemos dizer, com certeza, que esta área ajudou a moldar a estrutura do IFUSP e inclusive a estrutura da ciência em nível nacional. Inúmeros artigos de alto impacto foram publicados, projetos de grande porte foram financiados e eventos foram organizados ao seu entorno. Os egressos formados no IFUSP nesta área estão distribuídos por instituições de ensino e pesquisa por todo o Brasil e também em diversos países. Há também forte atuação no exterior.

Diante de um contexto histórico tão exitoso, e considerando que a área permanece muito ativa (vide descrição da relevância abaixo), entendemos que seja fundamental que o IFUSP mantenha de forma perene um grupo forte atuando na área. Hoje o IFUSP possui um grupo de pesquisadores que atuam diretamente e ativamente na área. Ocorre que estes pesquisadores já estão em um estágio mais avançado na carreira acadêmica. A mais jovem docente que atua na área se doutorou no ano de 2010, ou seja, tem 14 anos de prática em física. A média de tempo de doutorado entre os docentes que atuam na área é de 29 anos. É importante, para a manutenção da dinâmica do grupo, que docentes mais jovens também estejam presentes. A contratação de um novo docente em nível MS-3 garantiria uma saudável distribuição de experiências entre os docentes desta importante área de pesquisa.

Impacto da contratação no âmbito do IFUSP

A contratação de um docente na área de Estrutura Eletrônica de Materiais ajudará na manutenção da atuação e liderança histórica do IFUSP na área. Conforme discorrido acima, hoje o grupo de pesquisadores que atuam na área de estrutura eletrônica de materiais podem ser qualificados como docentes mais experientes, com mais de uma década de experiência após a conclusão do doutorado. Será saudável para a instituição que os novos docentes que serão

contratados estejam distribuídos de forma mais uniforme entre as diferentes áreas, garantindo sua manutenção e atividade durante um tempo mais longo dentro da instituição.

Relevância atual da pesquisa

A área de estrutura eletrônica de materiais possui sua base em disciplinas como a Física Quântica, a Física da Matéria Condensada e a Física Atômica e Molecular. Pode-se dizer que é um tema tradicional da física, visto que inclusive aparece listada nas áreas da física usadas por agências como o CNPq. Apesar deste aspecto muito tradicional, uma análise rápida da literatura mostra que esta área está se mantendo constantemente atualizada, buscando por novos problemas e metodologias.

Um aspecto fundamental desta área é que, nas últimas décadas, ela deixou o âmbito somente da física e se espalhou por outras áreas do conhecimento. Pesquisadores que atuam na área possuem um grande potencial de interagir com pesquisadores de outras áreas do conhecimento e também com cientistas experimentais. Entre as áreas nas quais os pesquisadores podem atuar destacam-se a química, a nanociência, a ciência de materiais, biologia, farmácia, etc. Mais recentemente houve avanços importantes para a área de ciência de dados, onde se optou por incorporar as metodologias big data em cálculos de estrutura eletrônica. Uma referência atual e importante que trata do tema foi publicada na Nature Materials [Marzari, N., Ferretti, A. & Wolverton, C. Electronic-structure methods for materials design. *Nat. Mater.* 20, 736–749 (2021).]

No que tange metodologias, a abordagem mais frequente nos dias envolve a utilização da Teoria do Funcional da Densidade (DFT), que está implementada em uma série de códigos computacionais e é aplicada a um amplo espectro de problemas. Apesar dessa vantagem clara da DFT, há uma hierarquia relativamente bem definida de metodologias na área, que partem de métodos de função de onda como Hartree-Fock, Møller–Plesset e CI (configuration interaction). Algumas dessas abordagens foram estendidas para tratar sistemas de estado sólido, também em combinação com métodos estocásticos como Monte Carlo quântico (QMC), que possuem uma longa história de fornecer resultados precisos para materiais. Há também uma série de métodos espectrais que utilizam funções de Green. A partir deste ponto começam a aparecer metodologias como Dynamic Mean Field Theory e métodos GW para tratar estados excitados. Outro conjunto de metodologias dependentes do tempo e que incluem domínios fora do equilíbrio como a time-dependent density functional theory (TDDFT) e non-equilibrium Green's functions. Nossa proposta é que o futuro docente do IFUSP trabalhe com qualquer uma dessas metodologias.

Na esfera de aplicações, a quantidade de possíveis sistemas é muito grande, principalmente pela versatilidade destas metodologias em atuar em inúmeros problemas interdisciplinares diferentes. Há aplicações em materiais quânticos, [1] materiais magnéticos, [2] materiais bidimensionais, [3,4] defeitos em materiais, [5] superfícies, [6] líquidos, [7] sistemas fortemente correlacionados, [8] polímeros [9] entre outros.

Apesar de algumas das metodologias estarem bastante bem estabelecidas, uma busca rápida na literatura mostra que ainda há forte avanço de novos desenvolvimentos metodológicos e forte avanço para a utilização dessas metodologias em uma variedade cada vez maior de problemas, com uma intensa busca por viabilizar que esses métodos sejam capazes de interagirem com dados experimentais. [10]

Prognóstico de candidatos:

A área de “Estrutura Eletrônica de Materiais” é bastante fértil, e há candidatos muito fortes tanto no Brasil como no exterior. O grupo responsável se compromete em divulgar amplamente a vaga, de forma a atrair os melhores candidatos. Abaixo alguns exemplos:

Alexsandro Kirch - Doutorado 2018, experiência internacional (Noruega)

Bruno Ipaves – Doutorado 2023

Carlos Mera Acosta – Doutorado 2018, experiência internacional 2 anos (USA e Alemanha);

Gabriel Ravanhani Schleder – Doutorado 2021, experiência internacional 2 anos (Harvard);

Fernando Pereira Sabino – Doutorado 2017, experiência internacional 2 anos (USA);

Ivan de Paula Miranda – Doutorado 2021, experiência internacional 2 anos (Suécia);

Leandro Seixas Rocha – Doutorado 2014, experiência internacional 2 anos (USA e Singapura)

Lidia Carvalho Gomes - Doutorado 2014, experiência internacional 2 anos (USA e Singapura)

Ramon Cardias Alves de Almeida – Doutorado 2018, experiência internacional 2 anos (França e Suécia)

Viabilidade da execução de projetos na área

O desenvolvimento de atividades de pesquisa na área sugerida é plenamente factível e implementável em curto prazo no IFUSP. Nossa instituição possui uma infraestrutura de pesquisa teórico/computacional excelente, com espaço para instalação de clusters de alto desempenho. Também há clusters já instalados, e a intenção de criar uma federação de clusters, equipamentos esses aos quais o novo docente poderia utilizar. Além disso, o futuro docente será capaz de conseguir acesso a centros de computação de alto desempenho espalhados pelo Brasil, como o

LNCC em Petrópolis e o CENAPAD em Campinas. Importante mencionar também que a FAPESP acabou de divulgar o resultado de uma grande chamada para instalação de um novo supercomputador de grande porte na USP. É preciso criar demanda contínua para esses equipamentos.

Justificativa para atividades de Ensino, Cultura e Extensão

Do ponto de vista individual, o docente que será contratado oferecerá as mesmas oportunidades de atuação que os outros docentes contratados no IFUSP. Com relação a disciplinas específicas, o docente terá facilidade de atuar em disciplinas relacionadas à área de Física da Matéria Condensada, além das disciplinas de física fundamental. Dado o perfil computacional esperado para este novo docente, o mesmo também deverá atuar ativamente na reforma do projeto pedagógico do Bacharelado e Física, dentro da linha computacional.

No que tange cultura e extensão, pesquisadores desta área tem tido alguma facilidade de atuação, visto que seus temas de pesquisa tem despertado interesse em setores fora da área de física, principalmente pelas articulações que possui com outras disciplinas como Química, Ciência de Dados e Engenharia.

Referências

- [1] J. E. Padilha, A. Fazzio, and A. J. R. da Silva, *Van Der Waals Heterostructure of Phosphorene and Graphene: Tuning the Schottky Barrier and Doping by Electrostatic Gating*, Phys. Rev. Lett. **114**, 066803 (2015).
- [2] P. C. Carvalho, I. P. Miranda, J. Brandão, A. Bergman, J. C. Cezar, A. B. Klautau, and H. M. Petrilli, *Correlation of Interface Interdiffusion and Skyrmionic Phases*, Nano Lett. **23**, 4854 (2023).
- [3] G. M. Nascimento, E. Ogoshi, A. Fazzio, C. M. Acosta, and G. M. Dalpian, *High-Throughput Inverse Design and Bayesian Optimization of Functionalities: Spin Splitting in Two-Dimensional Compounds*, Sci Data **9**, 1 (2022).
- [4] B. Ipaves, J. F. Justo, B. Sanyal, and L. V. C. Assali, *Tuning the Electronic and Mechanical Properties of Two-Dimensional Diamond through N and B Doping*, ACS Appl. Electron. Mater. **6**, 386 (2024).
- [5] F. P. Sabino, G. M. Dalpian, and A. Zunger, *Light-Induced Frenkel Defect Pair Formation Can Lead to Phase-Segregation of Otherwise Miscible Halide Perovskite Alloys*, Advanced Energy Materials **13**, 2301539 (2023).
- [6] J. C. C. Santos, F. R. Negreiros, L. S. Pedroza, G. M. Dalpian, and P. B. Miranda, *Interaction of Water with the Gypsum (010) Surface: Structure and Dynamics from Nonlinear Vibrational Spectroscopy and Ab Initio Molecular Dynamics*, J. Am. Chem. Soc. **140**, 17141 (2018).

- [7] M. S. Gomes-Filho, A. Torres, A. Reily Rocha, and L. S. Pedroza, *Size and Quality of Quantum Mechanical Data Set for Training Neural Network Force Fields for Liquid Water*, J. Phys. Chem. B **127**, 1422 (2023).
- [8] O. I. Malyi, G. M. Dalpian, X.-G. Zhao, Z. Wang, and A. Zunger, *Realization of Predicted Exotic Materials: The Burden of Proof*, Materials Today **32**, 35 (2020).
- [9] P. Pander, R. Motyka, P. Zassowski, M. K. Etherington, D. Varsano, T. J. da Silva, M. J. Caldas, P. Data, and A. P. Monkman, *Thermally Activated Delayed Fluorescence Mediated through the Upper Triplet State Manifold in Non-Charge-Transfer Star-Shaped Triphenylamine–Carbazole Molecules*, J. Phys. Chem. C **122**, 23934 (2018).
- [10] N. Marzari, A. Ferretti, and C. Wolverton, *Electronic-Structure Methods for Materials Design*, Nat. Mater. **20**, 6 (2021).

São Paulo, 22 de Fevereiro de 2024.