

## XII CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DO IFSP ITAPETININGA

Itapetininga, 19, 20 e 21 de maio de 2026

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo

Campus Itapetininga

### ESTUDO TEÓRICO DE CERÂMICAS AVANÇADAS

Beatriz Caroline Peron Lopes – PIBIFSP/IFSP<sup>1</sup>

Prof. Dr. Nélío Henrique Nicoletti – IFSP<sup>2</sup>

#### Introdução

A busca por materiais com propriedades eletrônicas e ópticas tem se intensificado, impulsionada principalmente pela demanda por dispositivos mais eficientes, compactos e sustentáveis, bem como pela necessidade de superar as limitações impostas pelos materiais clássicos. Nesse cenário, as cerâmicas de óxidos com estrutura cristalina do tipo perovskita ( $ABO_3$ ) destacam-se devido à sua notável versatilidade estrutural e à grande variedade de propriedades que apresentam. A relevância das perovskitas na ciência dos materiais está diretamente associada à flexibilidade de sua rede cristalina, que permite a substituição de diferentes cátions nos sítios A e B, além da ocorrência de distorções estruturais que podem modificar suas propriedades eletrônicas. Como consequência, esses materiais são amplamente explorados em diversas aplicações tecnológicas, incluindo dispositivos optoeletrônicos, sensores, células solares, catalisadores e óxidos semicondutores (Afre *et al.*, 2024; Yang *et al.*, 2024). Dentre as diversas perovskitas investigadas, o  $BaSnO_3$ , cristalizado na forma cúbica, grupo espacial  $Pm\bar{3}m$  (número 221), tem se destacado como um material de grande interesse científico. Apresenta características eletrônicas importantes, somadas a uma elevada estabilidade térmica e química. Quando dopado com elementos como o lantânio, exibe alta condutividade elétrica. Do ponto de vista eletrônico, o  $BaSnO_3$  distingue-se pela presença de bandas de condução com forte dispersão, associadas a alta mobilidade dos elétrons e por um *band gap* variando aproximadamente entre 3,1 a 3,4 eV. Essas propriedades o tornam particularmente promissor para aplicações em dispositivos eletrônicos de alto desempenho, como células solares, sensores e óxidos condutores transparentes (Zhang *et al.*, 2021; Zhang *et al.*, 2022). Nesse contexto, o presente estudo teve como objetivo investigar a correlação entre a estrutura cristalina e as propriedades eletrônicas de cerâmicas de óxidos com estrutura do tipo perovskita, com ênfase no composto  $BaSnO_3$ , por meio de simulações computacionais baseadas na Teoria do Funcional da Densidade (DFT).

#### Objetivo

O presente estudo teve como objetivo analisar a correlação entre a estrutura cristalina e as propriedades eletrônicas da perovskita  $BaSnO_3$ , com foco na densidade de estados, estrutura de bandas e no *band gap*.

<sup>1</sup> Estudante do curso de Técnico em Informática Integrado ao Ensino Médio, Instituto Federal de São Paulo, Campus Piracicaba. E-mail: b.peron@aluno.ifsp.edu.br. ORCID: <https://orcid.org/0009-0003-9326-1866>

<sup>2</sup> Doutor em Ciências e Tecnologia dos Materiais, Professor de Ensino básico, técnico e tecnológico do Instituto Federal de São Paulo, campus Piracicaba. Email: nelio.nicoletti@ifsp.edu.br. ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8439-518X>

## XII CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DO IFSP ITAPETININGA

Itapetininga, 19, 20 e 21 de maio de 2026

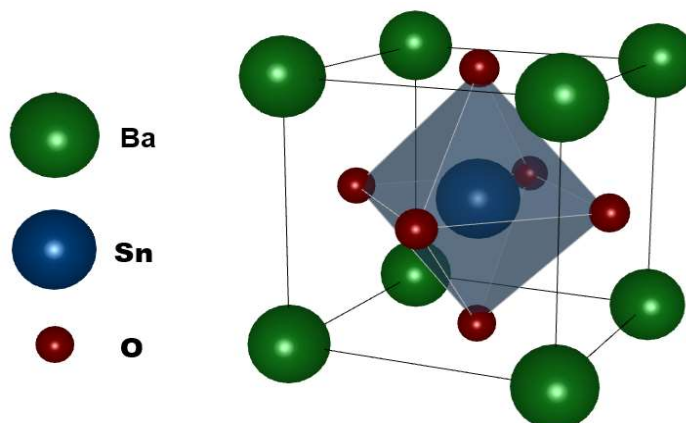
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo

Câmpus Itapetininga

### Metodologia

O estudo foi conduzido por meio de cálculos computacionais *ab initio*, baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT), utilizando o formalismo Kohn-Sham, que trata o sistema de muitos elétrons a partir da densidade eletrônica para a obtenção da energia fundamental do sistema, descrevendo suas propriedades eletrônicas e encontrando a energia fundamental do sistema (Kohn; Sham, 1965). Inicialmente, construiu-se um modelo teórico da célula unitária cúbica da perovskita  $\text{BaSnO}_3$  (Figura 1) com condições periódicas de contorno, simulando uma amostra do material.

Figura 1 – Célula unitária do  $\text{BaSnO}_3$  na fase cúbica, destacando os octaedros  $\text{SnO}_6$  e a posição dos átomos na rede cristalina.



Fonte: Elaborado pelos autores (2026).

As simulações foram realizadas utilizando o software computacional Quantum ESPRESSO, que implementa a DFT com base em funções de onda planas e pseudopotenciais para simular o comportamento de elétrons e átomos, sendo amplamente validado para o estudo de sólidos cristalinos (Giannozzi *et al.*, 2009). Com isso, foram definidos os parâmetros do cálculo, incluindo o funcional de troca e correlação GGA-PBESol, uma abordagem otimizada para a descrição de propriedades estruturais e energéticas de sólidos. Também foram empregados pseudopotenciais do tipo PAW provenientes da PSLibrary (versão 1.0.0), com energias de corte de 160 Ry para as funções de onda e 1280 Ry para a densidade de carga, além de uma malha de pontos  $k$  de  $16 \times 16 \times 16$ . Antes das etapas principais, foram realizados testes de convergência para as energias de corte e para a malha de pontos  $k$ , garantindo que os resultados não dependessem significativamente desses parâmetros numéricos. Esses testes permitiram assegurar a estabilidade dos valores de energia total e propriedades estruturais dentro de uma margem de erro controlada. As simulações foram realizadas por meio de cálculos de otimização estrutural (*vc-relax*), utilizando o método BFGS para a relaxação das posições atômicas e dos parâmetros de rede, com critérios de convergência de  $10^{-12}$  Ry para a energia total e  $10^{-10}$  Ry para as forças. O ciclo autoconsistente foi conduzido até a convergência, garantindo alta precisão numérica na determinação das propriedades estruturais e eletrônicas do  $\text{BaSnO}_3$  (Perdew *et al.*, 2008; Giannozzi *et al.*, 2009). Durante o processo de relaxação, observou-se a evolução das forças que atuam nos átomos e das tensões na célula unitária, buscando que o sistema atingisse um estado de equilíbrio mecânico. A geometria inicial foi, então, ajustada

## XII CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DO IFSP ITAPETININGA

Itapetininga, 19, 20 e 21 de maio de 2026

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo

Campus Itapetininga

iterativamente até a configuração de equilíbrio, caracterizando a estrutura otimizada do sistema. A partir dessa etapa, foram calculadas propriedades eletrônicas relevantes, como a estrutura de bandas e a densidade de estados eletrônicos (DOS) e a largura do *band gap*, possibilitando a análise da distribuição dos níveis de energia, da contribuição dos orbitais atômicos e do comportamento dos elétrons próximos ao nível de Fermi (Martin, 2004). Adicionalmente, foi avaliada a contribuição dos orbitais s, p e d dos átomos constituintes por meio da densidade de estados projetada (PDOS), permitindo identificar quais espécies químicas dominam as regiões de valência e condução. Para o cálculo da estrutura de bandas, foram considerados caminhos de alta simetria no espaço recíproco da rede cúbica, possibilitando a identificação da natureza do *band gap* (direto ou indireto). Por fim, os resultados obtidos foram comparados a dados experimentais disponíveis na literatura, permitindo avaliar a precisão do modelo.

### Resultados

Os cálculos de otimização estrutural do BaSnO<sub>3</sub>, baseados na Teoria do Funcional da Densidade, resultaram em um parâmetro de rede cúbico de 4,135 Å, com equivalência entre os parâmetros de rede  $a = b = c$ , bem como ângulos  $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ , confirmando a simetria cúbica esperada para a estrutura perovskita. O resultado obtido evidencia que o BaSnO<sub>3</sub> apresenta alta simetria cristalina e estabilidade estrutural, características diretamente relacionadas às suas propriedades eletrônicas. Em comparação com dados experimentais reportados na literatura, que indicam parâmetros de rede na faixa de 4,116 Å a 4,119 Å, obtidos por difração de raios-X em amostras policristalinas (Kim *et al.*, 2012; Zhang *et al.*, 2018), observa-se uma diferença de 0,019 Å em relação ao valor de 4,116 Å, correspondente a um desvio relativo de aproximadamente 0,46%, conforme apresentado na Tabela 1. Tal desvio está dentro da precisão de cálculos de primeiros princípios para sólidos, indicando que a estrutura otimizada é adequada para o estudo das propriedades do material.

Tabela 1: Parâmetro de rede teórico e valores experimentais.

Método/Referência	Parâmetro de rede (Å)	Desvio (%)
Experimental/KIM <i>et al.</i> , 2012	4,116	-
Experimental/ZHANG <i>et al.</i> , 2018	4,119	-
Teórico/DFT (GGA-PBEsol) <sup>a</sup>	4,135	0,46

<sup>a</sup> Resultados obtidos neste estudo

Fonte: Elaborado pelos autores (2026).

As propriedades eletrônicas do BaSnO<sub>3</sub> foram analisadas por meio do cálculo da densidade de estados (DOS) e da estrutura de bandas. Essas análises permitem caracterizar a distribuição dos estados eletrônicos e a dispersão das bandas de energia, fornecendo subsídios para a compreensão do comportamento eletrônico do material. A seguir, a Figura 2-a) apresenta a estrutura de bandas da perovskita BaSnO<sub>3</sub> calculada via DFT utilizando Quantum ESPRESSO ao longo do caminho de alta simetria na 1ª Zona de Brillouin ( $\Gamma$ -X-M- $\Gamma$ -R-X). Observa-se um gap indireto, configuração consistente com a

## XII CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DO IFSP ITAPETININGA

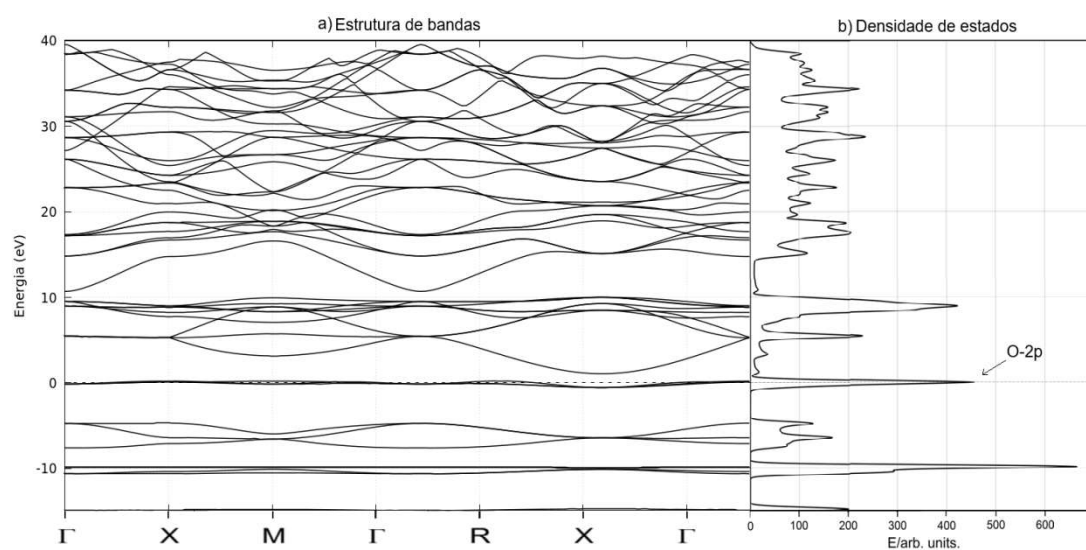
Itapetininga, 19, 20 e 21 de maio de 2026

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo

Câmpus Itapetininga

natureza semicondutora do material. Na Figura 2-b) é apresentado a densidade total de estados (DOS), com picos pronunciados entre 0 a -5 eV, associados às principalmente as contribuições de orbitais 2p dos oxigênios na banda de valência e hibridização com orbitais 5s dos estanhos.

Figura 2 – a) Estrutura de bandas b) Densidade de estados.



Fonte: Elaborado pelos autores (2026).

### Conclusão

Os resultados obtidos demonstram que a metodologia DFT(GGA-PBEsol), implementada no Quantum ESPRESSO, reproduz com elevada precisão os parâmetros estruturais do BaSnO<sub>3</sub>, confirmando sua estrutura perovskita cúbica (Pm3m) em excelente concordância com valores experimentais da literatura. O funcional PBEsol se destaca pela descrição dos raios iônicos em óxidos, proporcionando volumes celulares mais precisos, obtendo neste estudo uma discrepância de ~1,1% em relação a dados experimentais. A leve discrepância estrutural observada neste estudo é consistente com as limitações da metodologia DFT quando aplicada com a aproximação GGA e não compromete a confiabilidade qualitativa. Em relação ao estudo das características eletrônicas do material, a análise qualitativa da estrutura de bandas revela gap indireto e dispersão dos estados sp, enquanto a densidade de estados total revela a contribuição dos orbitais 2p do oxigênio, hibridizados com os orbitais 5s do estanho na banda de valência. Como perspectivas futuras, propõe-se a ampliação do estudo por meio da análise detalhada da estrutura de bandas, da densidade de estados eletrônicos, comparando-os com dados experimentais disponíveis, para uma caracterização mais abrangente do BaSnO<sub>3</sub> por meio de funcionais híbridos, para potencializar o estudo das propriedades eletrônica.

### Referências

AFRE, R. A. *et al.* **Perovskite solar cells: recent progress and device-level advances.** *Micromachines*, v. 15, n. 4, p. 820–835, 2024.

## **XII CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DO IFSP ITAPETININGA**

Itapetininga, 19, 20 e 21 de maio de 2026

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de São Paulo

*Campus Itapetininga*

- YANG, C. *et al.* **Achievements, challenges, and future prospects for metal-halide perovskite photovoltaics**. *Light: Science & Applications*, v. 13, n. 1, p. 1–19, 2024.
- ZHANG, R. *et al.* **One-step epitaxy of high-mobility La-doped BaSnO<sub>3</sub> films by high-pressure magnetron sputtering**. *APL Materials*, v. 9, n. 6, p. 061103, 2021.
- ZHANG, Y. *et al.* **Electron transport in BaSnO<sub>3</sub> and related perovskite oxides**. *Communications Materials*, v. 3, n. 1, art. 45, 2022.
- KOHN, W.; SHAM, L. J. **Self-consistent equations including exchange and correlation effects**. *Physical Review*, v. 140, n. 4A, p. A1133–A1138, 1965.
- GIANNOZZI, P. *et al.* **Quantum ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials**. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 21, n. 39, p. 395502, 2009.
- PERDEW, J. P. *et al.* **Restoring the density-gradient expansion for exchange in solids and surfaces**. *Physical Review Letters*, v. 100, n. 13, p. 136406, 2008.
- MARTIN, R. M. **Electronic structure: basic theory and practical methods**. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
- KIM, H. J. *et al.* **High mobility in a stable transparent perovskite oxide**. *Applied Physics Express*, v. 5, n. 6, p. 061102, 2012.
- ZHANG, L. *et al.* **Structural and optical properties of BaSnO<sub>3</sub> perovskite oxide**. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, v. 29, p. 12345–12352, 2018.