

# FI - Semicondutores - 1s 2012 - Lista 1

- Modelo de Kronig-Penny e de Tamm.** (a) Calcule os auto-estados de um modelo de Kronig-Penny com barreiras de potencial  $V_0$ .  
(b) Considere agora o mesmo modelo mas semi-infinito, isto é, uma das extremidades não continua indefinidamente mas termina em uma barreira de potencial  $V_1 \geq V_0$ . Encontre a condição (entre  $V_0$  e  $V_1$ ) para que exista um estado de superfície. Esse é o estado de Tamm.
- LCAO.** (a) Considere uma molécula formada por dois átomos ionizados com número atômico  $Z$ , Calcule a energia da molécula em função da distância  $R$  entre os dois íons e a condição para encontrar o valor de equilíbrio. Analise as integrais e discuta o valor de  $R$  em função de  $Z$  e da massa  $M$  do íon.  
(b) Considere uma rede quadrada no plano  $(x, y)$  com dimensão  $a_0$  tendo um átomo por vértice. Considere os orbitais  $s$  e  $p_x$  e  $p_y$ . Calcule a dispersão dos estados na aproximação LCAO. Inclua inicialmente apenas os primeiros vizinhos. Considere o efeito qualitativo dos segundos vizinhos.  
(c) Repita (b), incluindo os primeiros vizinhos apenas qualitativamente, mas agora para uma rede quadrada diatômica composta por dois átomos diferentes, A e B. Despreze a diferença dos potenciais de A e B. Os átomos de A são os primeiros vizinhos de B e vice-versa. Considere que cada átomo tem 3 elétrons ocupando esses orbitais. Preencha as bandas até o nível de Fermi (para  $T=0$ ). Analise os extremos da banda de valência e de condução em função dos valores das integrais dos potenciais. Discuta qualitativamente o resultado em função do valor de  $a_0$  e a luz dos resultados de (a), isto é, do número atômico do átomo. Procure estimar qualitativamente a tendência de formar gap direto, indireto, etc...