

FI - Semicondutores - 1s 2012 - Lista 1

- Aproximação $\vec{k} \cdot \vec{p}$.** (a) Considere o problema 2(c) da Lista 1. Assuma que os parâmetros sejam tais que exista um gap e que a última banda de valência seja do tipo p-ligante e a banda de condução seja do tipo s-ligante.
(a) Considere o ponto $\vec{k} = 0$. Faça uma expansão da banda em torno desse ponto, isto é, reescreva o hamiltoniano para valores pequenos de \vec{k} , guardando termos de segunda ordem em \vec{k} . Aproxime a solução para os estados da banda s-antiligante utilizando teoria de perturbação não degenerada e encontre uma expressão para $\epsilon(\vec{k})$ da forma $= \hbar^2 k^2 / 2m_{ef}$, onde m_{ef} é uma massa efetiva e carregue informação sobre a dispersão do cristal.
(b) Repita o cálculo de (a) mas agora levando em conta a solução da diagonalização da matriz. Encontre a expressão mais simples possível para a energia mas que leve em conta a não-parabolicidade da energia.
(c) Repita o cálculo para a banda p-ligante. Nesse caso, como há degenerescência, é necessário tratar o cálculo em perturbação degenerada. Considere as outras bandas em perturbação não degenerada. Encontre o hamiltoniano 2x2 que descreve as bandas p-ligante em torno de $\vec{k} = 0$. *Sugestão:* considere o método de Löwdin (J. Chem. Phys. **19**, 1396 (1951)).
Sugestão: Reescreva o hamiltoniano 6x6 inicial na base dos estados ligantes e antiligantes, ou seja, na base dos autovetores a $\vec{k} = 0$.
- Repita o problema 1 para $\vec{k} = (\pi/a, 0)$.
- Considere o mesmo “material” (rede quadrada, bidimensional, com orbitais s, p_x, p_y) e desenvolva o hamiltoniano para valores próximos de $\vec{k} = 0$, utilizando a aproximação $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Compare os termos do hamiltoniano obtido com o do problema 1. Discuta a inclusão dos segundos vizinhos no problema 1.