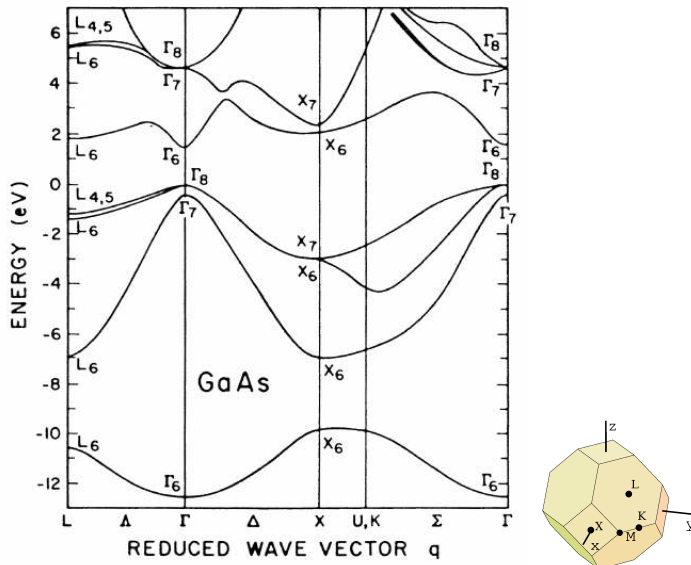


10.1



A figura ao lado mostra uma estrutura de bandas calculada para o GaAs. O cristal tem a estrutura da zinblenda, a rede é fcc com uma constante de rede 5.65 Å, e a base tem dois átomos por célula primitiva, cada um com 4 vizinhos formando um tetraedro.

- a) Qual é o hiato? É directo ou indirecto?
- b) Compare a estrutura de bandas do GaAs com a estrutura de bandas dos electrões livres. Quais são as semelhanças e as diferenças?

10.2 Considere um universo a 1 dimensão com uma cadeia atômica de 2 átomos diferentes separados pela distância $a/2$ e apenas um estado relevante por átomo. Construa um modelo tight binding onde as energias atômicas são ϵ_A e ϵ_B , e o termo de “hopping” é $-t$.

- a) Derive as relações de dispersão dos electrões.
- b) Desenhe a relação de dispersão.
- c) O que acontece no limite $t \rightarrow 0$?
- d) O que acontece no limite $\epsilon_A \rightarrow \epsilon_B$?

10.3 Considere uma camada de grafeno. Vamos fazer um modelo tight-binding muito simples com apenas um estado por átomo e “hopping” apenas entre primeiros vizinhos. A zona de Brillouin é um hexágono.

- a) Escreva a matriz tight-binding do problema.
- b) Desenhe a relação de dispersão ao longo da linha que vai do centro do hexágono a um dos vértices.

Problema numérico para fazer em casa

- 10.4 Considere a camada de grafeno do problema anterior. Vamos adicionar parâmetros ao modelo tight-binding. Primeiro considere o parâmetro de “overlap” entre primeiros vizinhos. Em seguida considere interações entre segundos vizinhos. Verifique que continua a ter a degenerescência no vértice da zona de Brillouin.