

Algoritmo para simulação de zonas proibidas em estruturas eletrônicas de bandas

(Algorithm for simulation of forbidden zones in electronic band structure)

Wagner Leite Araujo¹

¹Departamento de Engenharia Nuclear, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, Brasil
Recebido em 2/3/2010; Aceito em 2/8/2011; Publicado em 2/3/2011

Este artigo visa apresentar um algoritmo descritivo de *gaps* energéticos em semicondutores utilizando o modelo de Kronig-Penney. O código desenvolvido proporciona uma ferramenta didática na descrição de zonas proibidas em redes cristalinas, tema comumente tratado em cursos de estrutura da matéria e física de estado sólido. Os cálculos presentes no algoritmo seguem detalhados. O principal objetivo é descrever uma metodologia para se obter curvas da energia *vs.* número de onda, tratando o coeficiente de transmissão do material como constante, caso bem conhecido na literatura, e como função da energia.

Palavras-chave: modelo de Kronig-Penney, funções de bloch, gaps de energia, estruturas eletrônicas em um cristal.

This paper presents a descriptive algorithm of energy gaps in semiconductors applying the Kronig-Penney model. The code provides a teaching tool in the description of forbidden zones in crystalline lattices, which is an issue usually treated in structure of matter and solid state physics courses. All calculations contained in the algorithm is detailed. The main goal is to describe a methodology to obtain curves of energy *vs.* wave number, addressing the transmission coefficient of the material as constant, well known in the literature, and as a function of energy.

Keywords: Kronig-Penney model, bloch functions, energy gaps, electronic structures in a crystal.

1. Introdução

Elétrons de um único átomo ocupam orbitais que definem um ajuste discreto de energia. Quando átomos são colocados juntos em uma molécula, seus orbitais se separam como em uma oscilação acoplada. Isso produz um número de orbitais moleculares proporcional ao número de átomos [1]. Quando milhares de átomos interagem uns com os outros formando um sólido, o número de orbitais se torna excessivamente grande e a diferença de energia entre eles se torna muito pequena; assim, os níveis podem ser considerados, praticamente, bandas contínuas de energia e não níveis discretos como em átomos isolados. Contudo, alguns intervalos de energia não contém orbitais, não importando quantos átomos estejam agregados; isso dá origem aos *gaps* de energia.

O objetivo desse artigo é descrever um algoritmo, baseado no modelo de Kronig-Penney, que conduz a curva da energia em função do número de onda para o coeficiente de transmissão constante, sendo essa, bem conhecida na literatura [2–5] e, também, dependente

da energia, cujo esboço não foi encontrado em textos relacionados. Esse algoritmo pode ser facilmente modificado, possibilitando novos testes e diagnósticos. O modelo de Kronig-Penney será previamente abordado, após considerações sobre o teorema de Bloch [6]. O desígnio final é averiguar a presença das zonas proibidas. Os cálculos serão detalhados no Apêndice A. No Apêndice B, encontra-se um algoritmo projetado para o Scilab [7], que é um programa livre. Esse algoritmo pode ser facilmente modificado possibilitando novos testes e diagnósticos.

2. Considerações iniciais

O comportamento de elétrons transitando no interior de um cristal semicondutor pode ser comparado a partículas em uma caixa tridimensional cujo interior é demasiadamente complicado. Os átomos dessa estrutura vibram em posições específicas na rede. Em cristais reais existem defeitos estruturais que se originam, por exemplo, de átomos perdidos e impuros. Uma maneira de simplificar o modelamento matemático do

¹E-mail: wagnerleite@ufmg.br

problema é assumir que tais defeitos e as vibrações do núcleo do átomo conduzirão a uma perturbação de segunda ordem. De fato, essa hipótese expressa a estrutura da rede como perfeita e os átomos como fixados em posições bem determinadas.

O modelo de Kronig-Penney [8] será empregado para as análises tratadas nesse artigo. Este, admite soluções analíticas, permitindo simplificações algébricas. A estrutura de bandas eletrônicas está diretamente relacionada a várias propriedades macroscópicas de materiais e, por conseguinte, tem desempenhado um interesse vasto na área de semicondutores. Materiais hipotéticos são investigados por cálculos envolvendo tais estruturas [9–12]; quando esses materiais mostram propriedades atrativas, despertam interesse e, quando possível, são preparados em ensaios experimentais.

A teoria de Kronig-Penney é um arquétipo unidimensional da mecânica quântica na análise de redes cristalinas. Apesar das simplificações, a estrutura de bandas eletrônicas oriunda desse modelo proporciona o estudo de várias características referentes a composições de bandas que resultam de modelos mais complexos envolvendo cálculos numéricos extensos.

A análise reportada por este trabalho terá como base o estudo de uma partícula presente em uma estrutura unidimensional dentro de uma rede cristalina periódica. Este problema pode ser simplificado tratando uma barreira de potencial em três dimensões (uma partícula em uma caixa [13]) de forma unidimensional. O potencial que define tal barreira é causado pelos íons na estrutura periódica do cristal. Essa estrutura cria um campo eletromagnético de forma que os elétrons ficam sujeitos a um potencial regular. Isso é uma extensão do modelo do elétron livre [14], que assume um potencial nulo dentro da estrutura.

3. Formação de bandas no modelo de elétron livre

3.1. O teorema de Bloch

Se o potencial $U(x)$ é uma função periódica tal que $U(x+a) = U(x)$, o teorema de Bloch pode ser escrito como $\Psi(x+a) = e^{ika}\Psi(x)$, onde $\Psi(x)$ representa a função de onda unidimensional, k o número de onda ($2\pi/\lambda$), a a distância interatômica, x a distância na rede cristalina e $i = \sqrt{-1}$. De forma equivalente, o teorema ainda pode ser escrito como $\Psi(x) = e^{ikx}u(x)$, sendo que a função de onda da célula tem a mesma periodicidade do potencial, isso significa que $u(x+a) = u(x)$. Então, $\Psi(x+a) = e^{ik(x+a)}u(x+a) = e^{ika}e^{ikx}u(x) = e^{ika}\Psi(x)$. A função de onda $\Psi(x)$ claramente não é periódica. Ela tem a forma de uma onda plana (e^{ikx}) modulada por uma função $u(x)$ que reflete a periodicidade da célula cristalina e a periodicidade do potencial.

O uso de condições de contorno periódicas em um

arranjo de N átomos implica que $\Psi(x) = \Psi(x+Na) = e^{ikNa}\Psi(x)$, então $e^{ikNa} = 1 = e^{2n\pi}$; assim $k = 2n\pi/Na$, para $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm N/2$. Para um cristal com dimensões finitas, o número de onda k pode assumir apenas valores inteiros limitados por $\pm\pi/a$. Em um cristal real, a grande quantidade de átomos implica em valores de k muito próximos e, assim, definem praticamente uma continuidade na energia.

Vale ressaltar que razão do número de onda k ser proporcional a $n\pi/a$ é devido a formação de ondas estacionárias para os estados nas extremidades das barreiras. As funções de onda interferem construtivamente, com diferença de fase de 2π com a função de onda do vizinho mais próximo como mostrado na Fig. 1. A onda $\Psi_1(x)$ interfere construtivamente com $\Psi_2(x)$. Então, pode-se dizer que $\lambda = 2a$. Com essa consideração, a interferência será construtiva sempre que $2a = \lambda, 2\lambda, 3\lambda, \dots = n\pi$, o que implica que $\lambda = 2a/n$. Porém $\lambda = 2\pi/k$, logo, $k = n\pi/a$.

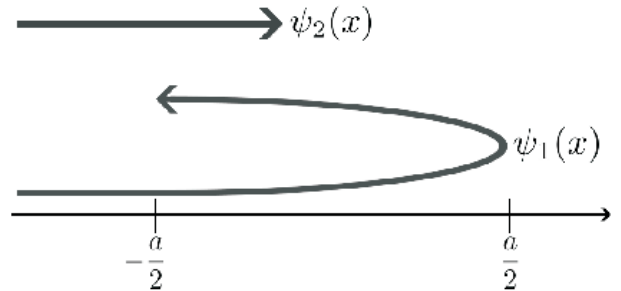


Figura 1 - Esquema representativo da interferência das funções de onda.

3.2. O modelo de Kronig-Penney

O modelo de Kronig-Penney é fundamentado em uma rede cristalina unidimensional e infinita, onde se utiliza uma solução analítica conhecida da equação de Schrödinger para uma barreira de potencial [15]. Esta equação, originada do trabalho de Erwin Schrödinger [16], descreve a evolução espacial e/ou temporal de um sistema quântico e, quando se remove a dependência temporal, é dada pela Eq. (1).

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x). \quad (1)$$

A Fig. 2 representa um potencial unidimensional e periódico $U_p(x)$ que atua em um elétron de massa m e energia E .

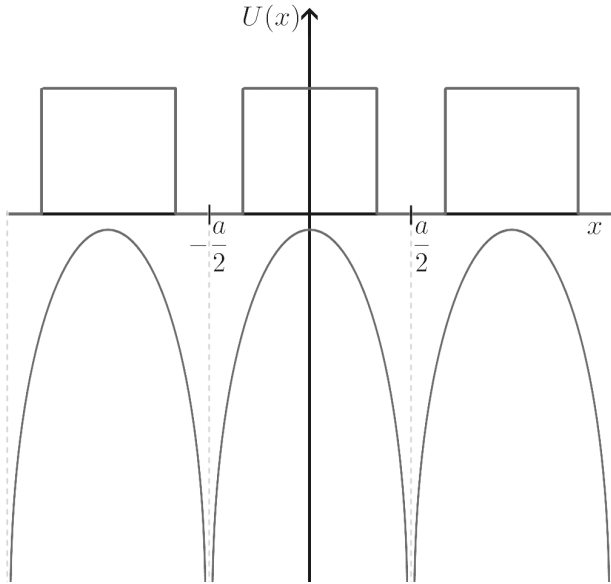


Figura 2 - Potencial unidimensional real e aproximação de Kronig-Penney.

O modelo de Kronig-Penney se baseia em resolver a Eq. (1) na célula ilustrada na Fig. 2, região $-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}$. A periodicidade da rede cristalina e por conseguinte, a periodicidade dos potenciais influenciam nas funções de onda. Tal comportamento é considerado por intermédio do teorema de Bloch, onde os potenciais periódicos reais são aproximados por potenciais periódicos em forma de barreira, como descrito na Fig. 2.

3.2.1. Solução da equação de Schrödinger em uma barreira de potencial

Sejam $\Psi_e(x)$ e $\Psi_d(x)$ as soluções da Eq. (1), para uma onda propagante da esquerda para direita $\Psi_e(x)$ (Fig. 3A) e da direita para esquerda $\Psi_d(x)$ (Fig. 3B). Definem-se os números complexos r e t como o coeficiente de reflexão e de transmissão, respectivamente. Na Fig. 3, i representa a onda incidente, r a porção refletida e t a parte transmitida da onda. Com isso, as soluções da Eq. (1) para os potenciais representados pelas Figs. 3A e 3B serão:

$$\Psi_e(x) = \begin{cases} e^{ikx} + re^{-ikx} & x \leq -\frac{a}{2} \\ te^{ikx} & x \geq \frac{a}{2}, \end{cases} \quad (2)$$

$$\Psi_d(x) = \begin{cases} te^{-ikx} & x \leq -\frac{a}{2} \\ e^{-ikx} + re^{ikx} & x \geq \frac{a}{2}. \end{cases} \quad (3)$$

Através do princípio da superposição, a combinação linear $\Psi(x) = A\Psi_e(x) + B\Psi_d(x)$ é solução da Eq. (1), já que $\Psi_e(x)$ e $\Psi_d(x)$ também são soluções.

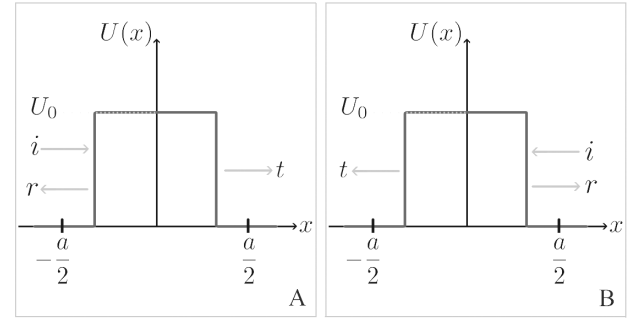


Figura 3 - Ilustração do modelo utilizado para resolver a equação de Schrödinger. Onda incidindo pela (A) esquerda e pela (B) direita.

O teorema de Bloch postula que

$$\Psi(x+a) = e^{i\mathcal{K}a} \Psi(x), \quad (4)$$

e que

$$\frac{d\Psi}{dx'} \Big|_{x'=x+a} = e^{i\mathcal{K}a} \frac{d\Psi}{dx'} \Big|_{x'=a}. \quad (5)$$

Este teorema, em $x = \pm \frac{a}{2}$, conduz a

$$\begin{cases} e^{i\mathcal{K}a} [A\Psi_e(-\frac{a}{2}) + B\Psi_d(-\frac{a}{2})] \\ e^{i\mathcal{K}a} [A\frac{d\Psi_e}{dx}(-\frac{a}{2}) + B\frac{d\Psi_d}{dx}(-\frac{a}{2})] \end{cases}. \quad (6)$$

Substituindo $\Psi_e(x)$ e $\Psi_d(x)$ das Eqs. (2) e (3) nas Eqs. (4) e (5), chega-se em um sistema de duas equações com duas variáveis que será resolvido para as incógnitas A e B (Eq. (6)). A solução deste sistema resulta na Eq. (7).

$$\cos(\mathcal{K}a) = \frac{(t^2 - r^2)}{2t} e^{ika} + \frac{1}{2t} e^{-ika}. \quad (7)$$

Ao considerar o potencial periódico igual a zero em todo o cristal, tem-se $|t|^2 = 1$ e $|r|^2 = 0$. Ou seja, a transmitância será 1 e não haverá nenhuma reflexão. De fato, a Eq. (7) é consistente com essa consideração. No limite onde não há nenhum potencial, $\cos(\mathcal{K}a) = 1/2 e^{ika} + 1/2 e^{-ika}$. Pontua-se que a relação: $\cos(ax) = e^{iax} + e^{-iax}/2$, permite escrever $\cos(\mathcal{K}a) = \cos(ka)$, isto é: $\mathcal{K} = k$. Assim, o perfil da energia será o mesmo do modelo de elétrons livres, $E = \hbar^2 k^2 / 2m$; o que acontece quando se toma $U_p(x + Na) = 0$.

Desenvolvendo a Eq. (7), como detalhado no Apêndice 1, obtém-se:

$$\cos(\mathcal{K}a) = \frac{\cos(ka + \delta)}{|t|}, \quad \text{com } |t| \leq 1. \quad (8)$$

4. Bandas de energia e zonas de Brillouin

Através da Eq. (8), a razão matemática da formação de *gaps* de energia se torna clara. Nota-se que a função $\cos(\mathcal{K}a)$ só pode assumir valores no intervalo $[-1, 1]$,

como $|t| \leq 1$, a função $\cos(ka+\delta)/|t|$ pode ser um número maior que 1. A energia em unidades de $\hbar^2\pi^2/2ma$ é dada pela equação $E = k^2$. As zonas proibidas (os *gaps* de energia) resultam, naturalmente, deste evento, como mostra a Fig. 4.

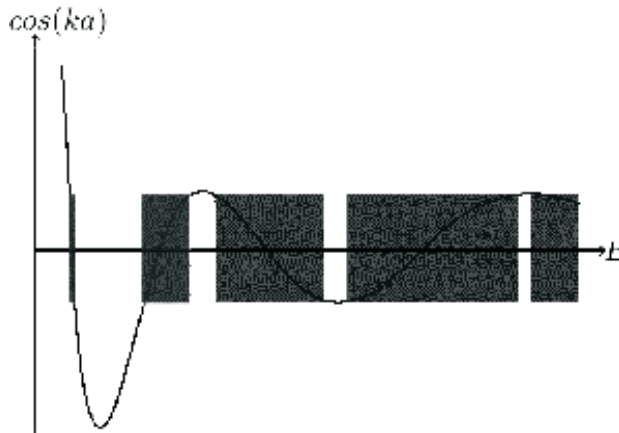


Figura 4 - Gráfico da função implícita 8.

A Fig. 5 mostra uma representação das bandas na zona reduzida. É possível esboçar as curvas de energia em um diagrama estendido como mostrado na Fig. 6. Nesse diagrama a energia E pode crescer indefinidamente ao longo do eixo do número de onda k . O esquema da zona estendida possibilita uma comparação mais prática com a curva característica do modelo do elétron livre que é definida pela parábola $E = \hbar^2 k^2/2m$.

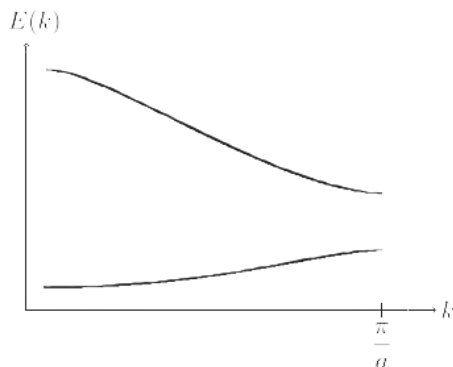


Figura 5 - Gráfico da representação reduzida da primeira e segunda zona de Brillouin.

A Fig. 6 permite definir uma terminologia relevante em física do estado sólido, a zona de Brillouin. Tais zonas são numeradas em função de intervalos de energia ou de número de onda. Um exemplo é mostrado na Fig. 4, onde as zonas de Brillouin são definidas. Na Fig. 6, a primeira zona de Brillouin é a região entre $-\pi/a$ a π/a .

5. O algoritmo

A construção do algoritmo se baseia na Eq. (8). Através desta, o algoritmo fornece a curva da energia *vs.* ka . A edificação da curva se dará em duas conjunturas:

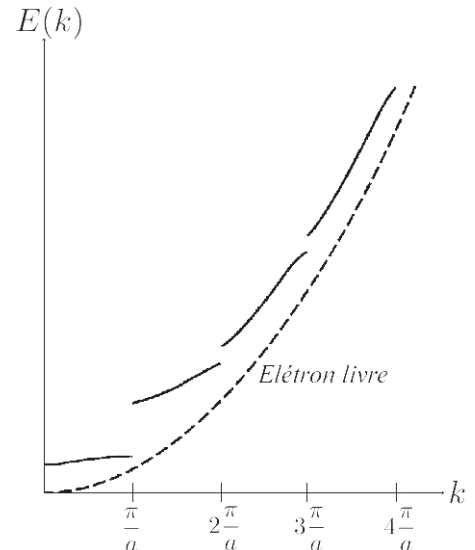


Figura 6 - Gráfico comparativo entre o modelo do elétron livre e as zonas de Brillouin na representação estendida.

- A primeira com o coeficiente de transmissão $t = 0,8$.
- A segunda com a transmitância variando com o k ; para tal será escolhido um valor para a altura da barreira, U_0 .

O algoritmo empregará um processo iterativo para gerar pares de coordenadas que esboçarão a curva pretendida. O eixo da energia será dado em unidades $\hbar^2\pi^2/2ma$, possibilitando certa arbitrariedade na escolha de unidades de medida. Por exemplo, ao se escolher 2 \AA para a , que é um valor plausível, diretamente se infere nas unidades do eixo da energia; isso significa que esse acoplamento de unidades permite que se escolha $a = 1 \text{ m}$, que apesar de absurdo, não traz prejuízo qualitativo na representação gráfica.

O perfil da curva se dará no esquema da zona reduzida e na região positiva do produto ka . Para generalizarmos toda a primeira zona de Brillouin, bastaria espelhar o resultado para valores negativos de ka .

Primeiramente é necessário definir linhas de comando para determinar os valores para a largura do poço de potencial a , coeficiente de transmissão t , fase δ e a acuidade do *plot* definida como dk (espaçamento entre pares de coordenadas). Na linha seguinte, define-se o k_0 para representar o valor inicial de k . Em seguida é necessário gerar um comando que impõe um processo iterativo. Tal processo faz o i variar entre zero e o número de iterações determinada pelo usuário. Essa operação se inicia pela Eq. (9)

$$k = k_0 + idk. \quad (9)$$

Na Eq. (10), f é definido para representar o lado esquerdo da Eq. (8)

$$f = \frac{\cos(ka + \delta)}{|t|}. \quad (10)$$

\mathcal{K} é dado por uma função arco-cosseno. Logo, torna-se necessário uma linha de comando condicional que limita o resultado de f entre -1 e 1 , antes da Eq. (10)

$$\mathcal{K} = \frac{\arccos(f)}{a}. \quad (11)$$

Na Eq. (11), o k é isolado. A Eq. (12) fornece o valor da energia

$$E = k^2. \quad (12)$$

Em seguida, gera-se um comando para determinar a energia em função de ka e/ou as coordenadas E e k . Temos assim a curva pretendida na primeira conjuntura.

A segunda conjuntura segue a mesma feição da primeira; contudo, deve-se definir a transmitância em relação à energia. Isso é realizado por meio da Eq. (13) para a energia maior que a barreira de potencial e pela Eq. (14) para a barreira maior que a energia. As Eqs. (13) e (14) são descritas por Eisberg e Resnick [15]

$$T = 1 + \frac{[\sin(ka)]^2}{4 \left(\frac{E}{U_0}\right) \left[\left(\frac{E}{U_0}\right) - 1\right]}, \quad (13)$$

$$T = 1 + \frac{[\sinh(ka)]^2}{4 \left(\frac{E}{U_0}\right) \left[1 - \left(\frac{E}{U_0}\right)\right]}, \quad (14)$$

onde T representa o inverso do coeficiente de transmissão.

Como na primeira conjuntura, é necessário gerar uma linha solicitando entradas para os parâmetros a , dk , k_0 , U_0 , δ . O mesmo comando condicional aplicado na primeira conjuntura atua na Eq. (9), depois na Eq. (12) e em seguida um novo comando condicional é requerido. Este comando seleciona as energias que serão aplicadas na Eq. (13) ou na Eq. (14), isto é, se $E > U_0$, a energia será aplicada na Eq. (13); se $E < U_0$, aplica-se E na Eq. (14). Deve ser garantido que os denominadores das Eqs. (13) e (14) não assumam valores nulos. Para resolver esse empecilho, basta coloca uma linha de comando que selecione valores diferentes de zero para o denominador dessas equações. A próxima linha de comando faz com que f receba o valor da transmitância, como na Eq. (10). Em seguida, calcula-se \mathcal{K} por meio da Eq. (11) e se determina o comando para gerar a curva e/ou as coordenadas provedoras da curva.

6. Simulações e resultados

A Fig. 7 mostra a curva obtida no caso da transmitância constante. Os dados de entrada foram $a = 1$,

$dk = 0,01$, $k_0 = 0$, $\delta = 0,2$, $t = 0,8$ e i variando de 0 a 500. A Fig. 8 mostra a simulação com i variando de 0 a 1500. Os *gaps* de energia ficaram bem evidentes.

Na primeira simulação para a transmitância variável, a curva apresentou o perfil ilustrado na Fig. 9. Nesta, observa-se dois *gaps* de energia com um comportamento peculiar.

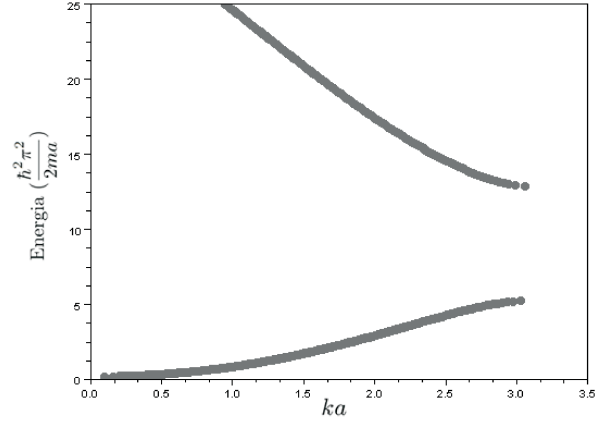


Figura 7 - Energia em função do número de onda após 500 iterações com t constante.

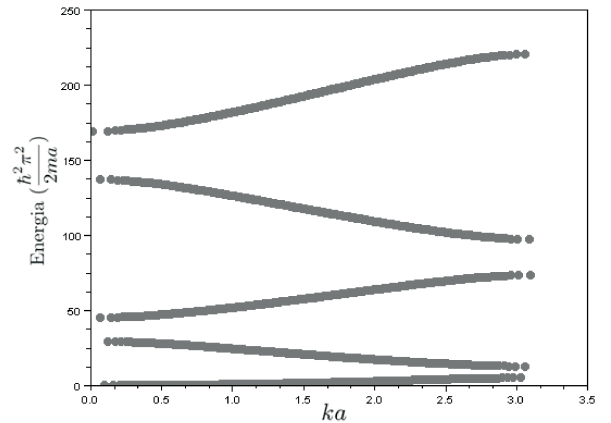


Figura 8 - Energia em função do número de onda após 1500 iterações com t constante.

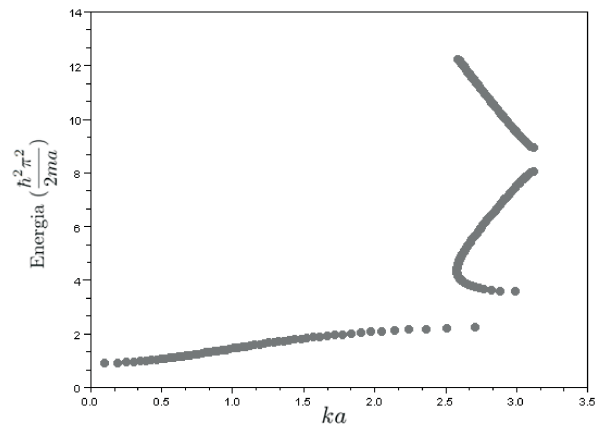


Figura 9 - Energia em função do número de onda após 350 iterações.

A Fig. 10 apresenta um domínio maior na extensão da curva, para isso foi usado o dobro de iterações da simulação apresentada na Fig. 9. Ao aumentar o número de iterações não se observa mais zonas proibidas, isto é, a curva apresentou apenas dois *gaps* visíveis, ficando evidenciado após determinar vários intervalos iniciando de valores distintos de k_0 e averiguando minuciosamente os diagnósticos.

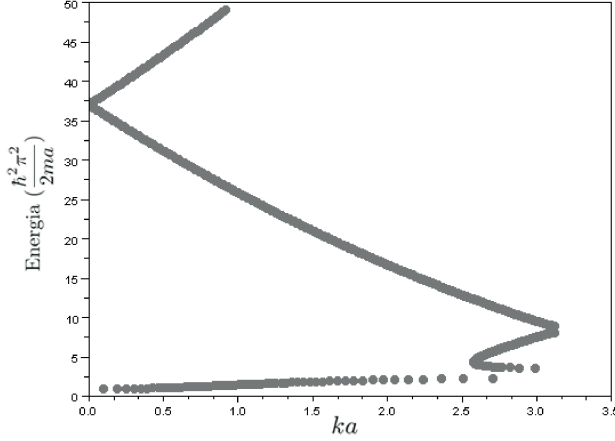


Figura 10 - Energia em função do número de onda após 700 iterações.

7. Conclusão

Nesse trabalho abordamos o teorema de Bloch e o modelo de Kronig-Penney seguido de um algoritmo que fornece curvas da energia *vs.* número de onda para a transmitância constante e variando com a energia, onde o escopo foi esboçar a existência dos *gaps* de energia em semicondutores. As zonas proibidas foram observadas em ambas as análises. A curva para o coeficiente de transmissão constante atingiu os mesmos resultados das obtidas na literatura. Para a conjuntura que utiliza o coeficiente de transmissão variável, não foram encontrados dados na literatura para comparação. É deixado um algoritmo completo que segue a mesma idéia do descrito nesse artigo, onde o leitor pode experimentar novos parâmetros em suas próprias simulações.

Agradecimentos

Agradeço a André Tanus Cesário pelo auxílio a esse trabalho, principalmente pelos cálculos apresentados no Apêndice 8.1, e aos pesquisadores Mario Sergio de Carvalho Mazzoni e Luiz Alberto Cury devido ao conhecimento e às idéias compartilhadas.

8. Apêndices

8.1. Apêndice: desenvolvimento analítico da Eq. (7)

Solução do sistema descrito pela Eq. (6) fornece

$$\begin{cases} e^{i\mathcal{K}a} [A\Psi_e(\frac{-a}{2}) + B\Psi_d(\frac{-a}{2})] \\ e^{i\mathcal{K}a} [A\frac{d\Psi_e}{dx}(\frac{-a}{2}) + B\frac{d\Psi_d}{dx}(\frac{-a}{2})] \end{cases} \quad (15)$$

Substituindo as equações para $\Psi_e(x)$ e $\Psi_d(x)$ (Eqs. (2) e (3)) na Eq. (15), chega-se ao sistema de duas equações com duas variáveis descrito abaixo

$$\begin{cases} e^{i\mathcal{K}a} [A(e^{-\frac{ika}{2}} + re^{\frac{ika}{2}}) + Bte^{\frac{ika}{2}}] \\ ik \{ e^{i\mathcal{K}a} [A(e^{-\frac{ika}{2}} - re^{\frac{ika}{2}}) - Bte^{\frac{ika}{2}}] \} \end{cases} \quad (16)$$

Somando e subtraindo as equações acima, tem-se

$$\begin{cases} 2Ate^{\frac{ika}{2}} + 2Bre^{\frac{ika}{2}} = e^{i\mathcal{K}a} 2Ae^{-\frac{ika}{2}} \\ 2Be^{-\frac{ika}{2}} = e^{i\mathcal{K}a} (2Ae^{\frac{ika}{2}} + 2Bte^{\frac{ika}{2}}) \end{cases} \quad (17)$$

Multiplicando a primeira equação do sistema (17) por $e^{\frac{ika}{2}}$ e a segunda equação por $e^{-\frac{ika}{2}}$, tem-se

$$\begin{cases} Ate^{ika} + Bre^{ika} = Ae^{i\mathcal{K}a} \\ Be^{-ika} = e^{i\mathcal{K}a} (Ar + Bt) \end{cases} \quad (18)$$

Pode-se escrever a Eq. (18) da seguinte forma

$$\begin{cases} A(te^{ika} - e^{i\mathcal{K}a}) + Bre^{ika} = 0 \\ Are^{i\mathcal{K}a} + B(te^{i\mathcal{K}a} - e^{-ika}) = 0 \end{cases} \quad (19)$$

Definindo o sistema acima na forma matricial como $A\vec{X} = \vec{0}$

$$A = \begin{bmatrix} (te^{ika} - e^{i\mathcal{K}a}) & re^{ika} \\ re^{i\mathcal{K}a} & te^{i\mathcal{K}a} - e^{-ika} \end{bmatrix}, \quad (20)$$

$$\vec{X} = \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix}. \quad (21)$$

Assim, o sistema linear homogêneo $A\vec{X} = \vec{0}$ pode ser escrito como

$$\begin{bmatrix} (te^{ika} - e^{i\mathcal{K}a}) & re^{ika} \\ re^{i\mathcal{K}a} & te^{i\mathcal{K}a} - e^{-ika} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (22)$$

Para que um sistema de equações lineares homogêneo tenha solução não-trivial, deve-se ter $\det(A) = 0$

$$\begin{aligned} -r^2 e^{iak} e^{ia\mathcal{K}} + t^2 e^{iak} e^{ia\mathcal{K}} - \\ te^{2ia\mathcal{K}} - t + e^{-iak} e^{ia\mathcal{K}} = 0. \end{aligned} \quad (23)$$

Rearranjando os termos da Eq. (23), obtém-se

$$(t^2 - r^2) e^{iak} e^{ia\mathcal{K}} - t(1 + e^{2ia\mathcal{K}}) + e^{-iak} e^{ia\mathcal{K}} = 0 \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} \frac{(t^2-r^2)}{2t} e^{iak} - \frac{(1+e^{2ia\mathcal{K}})}{2e^{ia\mathcal{K}}} + \frac{e^{-iak}}{2t} &= 0 \Rightarrow \\ \frac{(1+e^{2ia\mathcal{K}})}{2e^{ia\mathcal{K}}} &= \frac{(t^2-r^2)}{2t} e^{iak} + \frac{e^{-iak}}{2t} \Rightarrow \\ \frac{1}{2} (e^{-i\mathcal{K}a} + e^{i\mathcal{K}a}) &= \frac{(t^2-r^2)}{2t} e^{iak} + \frac{e^{-iak}}{2t} \Rightarrow \\ \cos(\mathcal{K}a) &= \frac{(t^2-r^2)}{2t} e^{iak} + \frac{e^{-iak}}{2t}. \end{aligned} \quad (24)$$

Considerando t e r números complexos tais que $t = |t| e^{i\delta}$ com $|t| \leq 1$ e $r = \pm i|r| e^{i\delta}$ sendo $|r| \leq 1$ e $|t|^2 + |r|^2 = 1$, então $t^2 = |t|^2 e^{2i\delta}$ e $r^2 = -|r|^2 e^{2i\delta}$. Assim, $t^2 - r^2 = (|t|^2 + |r|^2) e^{2i\delta}$, como $|t|^2 + |r|^2 = 1$, logo $t^2 - r^2 = e^{2i\delta}$. Finalmente, aplicando esse resultado na Eq. (24), tem-se

$$\begin{aligned} \cos(\mathcal{K}a) &= \frac{e^{2i\delta}}{2|t| e^{i\delta}} e^{iak} + \frac{e^{-iak}}{2|t| e^{i\delta}} \Rightarrow \\ \cos(\mathcal{K}a) &= \left(\frac{e^{i(ka+\delta)} + e^{-i(ka+\delta)}}{2|t|} \right). \end{aligned} \quad (25)$$

A Eq. (25) equivale à Eq. (8).

8.2. Apêndice: algoritmo no Scilab

8.2.1. Coeficiente de transmissão constante

- Notação para o algoritmo: $k=k$ e $\text{Kappa}=\mathcal{K}$.

```
a=1;
dk=0.01;
k0=0;
delta=0.2;
for i=0:1000 do
    k=k0+i*dk;
    t=0.8;
    f=T*cos(k*a+delta);
    if (abs(f)<=1) then
        Kappa=acos(f)/a;
        E=(k^2);
        printf("%f %f \n",Kappa*a,E);
        plot(Kappa*a,E,'.');
    end
end
```

8.2.2. Coeficiente de transmissão variável

- Notação para o algoritmo: $k=k$ e $\text{Kappa}=\mathcal{K}$

```
a=1;
dk=0.01;
k0=0;
U0=3;
delta=0.2;

for i=0:350 do
```

```
k=k0+i*dk;
E=(k^2);
if E>U0 then
    w=(sin(k*a))^2;
    x=(4*(E/U0)*((E/U0)-1));
elseif E<U0 then
    w=(sinh(k*a))^2;
    x=4*(E/U0)*(1-(E/U0));
end,
if x<>0 then
    T=abs(1+(w/x));
    f=T*cos(k*a+delta);
if (abs(f)<= 1) then
    Kappa=(acos(f))/a;
    printf("%f %f \n",Kappa*a,E)
    plot(Kappa*a,E,'.')
end,
end,
end
```

Referências

- [1] J.M. Bass and C.C. Matthai, Phys. Rev. B **52**, 4712 (1995).
- [2] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics* (Wiley, New York, 1996).
- [3] R.F. Pierret, *Advanced Semiconductor Fundamentals* (Prentice Hall, Upper Saddle River, 2002).
- [4] M.N. Rudden and J. Wilson, *Elements of Solid State Physics* (Wiley, New York, 1993).
- [5] J. Singleton, *Band Theory and Electronic Properties of Solids* (Oxford University Press, New York, 2001).
- [6] F. Bloch, Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, **52**, 555 (1929).
- [7] Scilab, The Free Software for Numerical Computation, <http://www.scilab.org>, acessado em 23/8/2011.
- [8] R. Kronig and W.G. Penney, Proceedings of the Royal Society of London. Series A **130**, 499 (1931).
- [9] A. Benzair and H. Aourag, Physica Status Solidi (B) **231**, 411 (2002).
- [10] S.H. Liu, Surface Science **231**, 633 (1982).
- [11] S.B. Fagan, R. Mota, R.J. Baierle, G. Paiva, A.J.R. da Silva and A. Fazzio, Journal of Molecular Structure: THEOCHEM **539**, 101 (2001).
- [12] M.J. Bucknum and R. Hoffmann, Journal of the American Chemical Society **116**, 11456 (1994).
- [13] L. Pauling and E.B. Wilson, *Introduction to Quantum Mechanics with Applications to Chemistry* (Dover Publications, New York, 1985).
- [14] S. Fujita and K. Ito, *Quantum Theory of Conducting Matter: Newtonian Equations of Motion for a Bloch Electron* (Springer, New York, 2007).
- [15] R. Eisberg and R. Resnick, *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles* (Wiley, New York, 1985).
- [16] E. Schrödinger, Journal of the American Chemical Society **116**, 11456 (1926).