

**INSTITUTO  
FEDERAL**  
Paraíba

**INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DA  
PARAÍBA  
CURSO SUPERIOR DE LICENCIATURA EM FÍSICA**

TALLYS HENRIQUE DA COSTA PEREIRA

**INTRODUÇÃO À FÍSICA DOS SEMICONDUTORES: Estruturas de Bandas**

Campina Grande

2025

TALLYS HENRIQUE DA COSTA PEREIRA

## **INTRODUÇÃO À FÍSICA DOS SEMICONDUTORES: Estruturas de Bandas**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado no Curso Superior de Licenciatura em Física do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da Paraíba (IFPB), como requisito parcial para obtenção do título de Licenciado em Física.

Orientador (a): Dr. Francisco Geraldo da Costa Filho

Campina Grande

2025

TALLYS HENRIQUE DA COSTA PEREIRA

Catálogo na fonte:  
Ficha catalográfica elaborada por Gustavo César Nogueira da Costa - CRB 15/479

P436i Pereira, Tallys Henrique da Costa.

Introdução à física dos semicondutores: estruturas de bandas / Tallys Henrique da Costa Pereira. - Campina Grande, 2025.

45 f.: il.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Licenciatura em Física) - Instituto Federal da Paraíba, 2025.

Orientadores: Prof. Dr. Francisco Geraldo da Costa Filho.

1. Mecânica quântica. 2. Estrutura de bandas. 3. Semicondutores. 4. Física do estado sólido. I. Costa Filho, Francisco Geraldo da. II. Título.

CDU 537.3

## **INTRODUÇÃO À FÍSICA DOS SEMICONDUTORES: Estruturas de Bandas**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado no Curso Superior de Licenciatura em Física do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da Paraíba (IFPB), como requisito parcial para obtenção do título de Licenciado em Física.

Aprovado(a) em: 12/08/2025

### **BANCA EXAMINADORA**

---

Prof. Dr. Francisco Geraldo da Costa Filho – orientador  
IFPB – Campina Grande

---

Prof. Dr. Maxwell Aragão Marques Nogueira  
IFPB – Campina Grande

---

Prof. Me. Luciano Feitosa do Nascimento  
IFPB – Campina Grande

## AGRADECIMENTOS

A Deus, por ser minha fonte inesgotável de força, fé e sabedoria. Em cada momento de incerteza, encontrei em Sua presença o conforto necessário para seguir em frente. Sem Sua luz e direção, esta conquista não teria sido possível.

À minha família, meu alicerce, agradeço por todo o amor, paciência e apoio incondicional ao longo dessa caminhada. À minha mãe, **Jaqueline da Costa Silva**, por ser minha inspiração de dedicação e coragem; ao meu pai, **José Luiz Filho**, por acreditar em mim e me incentivar a nunca desistir; e aos meus irmãos, **Ruan Mateus** e **Pedro Henrique**, pela companhia, apoio e por tornarem essa jornada mais leve com sua presença.

Aos meus amigos, que estiveram ao meu lado nos momentos de dificuldade e também nas conquistas, meu sincero agradecimento. A presença, o incentivo e a amizade de vocês foram essenciais para que eu pudesse me manter firme até o fim.

Aos professores que fizeram parte da minha formação acadêmica, deixo minha mais profunda gratidão. Em especial, agradeço ao meu eterno orientador **Dr. Francisco Geraldo**, ao **Dr. Valdenes Carvalho** e ao professor **Alex Sander Barros**, por todo o apoio, orientações e ensinamentos que foram fundamentais durante a elaboração deste trabalho. Suas contribuições foram essenciais para que eu conseguisse vencer os desafios enfrentados ao longo deste percurso.

Estendo meus agradecimentos à banca examinadora, composta pelos professores **Luciano Feitosa** e **Maxwell Aragão**, por gentilmente aceitarem o convite de avaliar este trabalho. A presença e a experiência de vocês muito me honram, e certamente engrandecerão esta etapa final do curso.

A elaboração deste Trabalho de Conclusão de Curso exigiu muito esforço, persistência e dedicação. No entanto, mais do que um requisito acadêmico, ele representa o resultado de uma trajetória marcada por aprendizados, superações e crescimento pessoal. A todos que contribuíram direta ou indiretamente para esta realização, deixo aqui o meu mais sincero e profundo agradecimento.

## RESUMO

Este trabalho apresenta uma análise da aplicação da mecânica quântica na compreensão das estruturas eletrônicas de sólidos cristalinos, com ênfase na formação de bandas de energia. Parte-se dos fundamentos históricos e teóricos da mecânica quântica, incluindo a Equação de Schrödinger, o princípio da incerteza, a dualidade onda-partícula e a interpretação probabilística da função de onda. A partir disso, é desenvolvido o formalismo necessário para compreender a estrutura de bandas em materiais sólidos, utilizando modelos como o poço de potencial delta de Dirac e o teorema de Bloch. A estrutura de bandas é analisada sob diferentes modelos — elétron quase livre e ligação forte — permitindo classificar materiais como condutores, semicondutores e isolantes, de acordo com a largura do *band gap*. O trabalho também aborda o método *k·p*, utilizado para calcular as dispersões energéticas em semicondutores, especialmente próximos ao ponto  $\Gamma$  da zona de Brillouin. Por fim, discute-se o papel fundamental da mecânica quântica no desenvolvimento de tecnologias como transistores, LEDs, lasers e dispositivos de computação quântica, destacando sua relevância teórica e prática para a física do estado sólido e a inovação tecnológica. Através da análise dos potenciais periódicos e da aplicação de métodos teóricos, conclui-se que o conhecimento das estruturas de bandas é essencial para compreender e projetar materiais com propriedades eletrônicas específicas.

**Palavras-chave:** mecânica quântica; estrutura de bandas; equação de Schrödinger; materiais semicondutores; teorema de Bloch; método *k·p*.

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	REVISÃO DE MECÂNICA QUÂNTICA	2
2.1	QUANTIZAÇÃO DA ENERGIA	4
2.2	DUALIDADE ONDA-PARTÍCULA	4
2.3	PRINCÍPIO DA INCERTEZA	4
2.4	INTRODUÇÃO À EQUAÇÃO DE SCHRODINGER	4
2.5	EQUAÇÃO DE SCHRODINGER	5
2.6	A INTERPRETAÇÃO ESTATÍSTICA	6
2.7	NORMALIZAÇÃO	8
2.8	EQUAÇÃO DE SCHRODINGER INDEPENDENTE DO TEMPO	10
2.9	INTERPRETAÇÃO FÍSICA	13
2.10	O POÇO DE POTENCIAL DELTA DE DIRAC	14
3	ESTRUTURAS DE BANDAS	16
3.1	O PROBLEMA QUÂNTICO EM UM POTENCIAL PERIÓDICO	17
3.2	REPRESENTAÇÃO DA REDE DE DIRAC	18
3.3	FORMAÇÃO DAS BANDAS DE ENERGIA	18
3.4	MODELO DO ELÉTRON QUASE LIVRE	19
3.5	CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS SEGUNDO A ESTRUTURA DE BANDAS.	19
3.6	ESTRUTURA CRISTALINA	20
3.7	REDE RECÍPROCA	21
3.8	ZONA DE BRILLOUIN	21
4	MÉTODO $k \cdot p$	23
4.1	BANDAS DE ENERGIA PELO MÉTODO $k \cdot p$	24
5	CONCLUSÃO	32
	REFERÊNCIAS	34
	APÊNDICE A – TEXTO TEXTO TEXTO TEXTO	35



## 1. INTRODUÇÃO

Desde os primórdios do século XX, a mecânica quântica consolidou-se como a principal teoria para a descrição do comportamento da matéria em escalas atômicas e subatômicas. A partir das limitações da mecânica clássica em explicar fenômenos como o efeito fotoelétrico, a radiação do corpo negro e a estabilidade atômica, surgiu a necessidade de um novo arcabouço teórico.

Max Planck, ao introduzir a quantização da energia, deu origem a um conjunto de ideias que seriam refinadas por nomes como Einstein, Bohr, Heisenberg e Schrödinger. A formulação da Equação de Schrödinger proporcionou uma estrutura matemática capaz de prever com precisão as propriedades físicas de sistemas quânticos. Essa equação, tanto em sua forma dependente quanto independente do tempo, permite o cálculo da função de onda associada a partículas, revelando informações fundamentais como energia, posição provável e comportamento dinâmico.

A interpretação probabilística, proposta por Max Born, trouxe uma nova perspectiva sobre o determinismo da física, introduzindo a incerteza como aspecto intrínseco à natureza. Ao aplicar esses princípios à matéria condensada, em especial aos sólidos cristalinos, a mecânica quântica revelou-se essencial para a compreensão da estrutura eletrônica dos materiais.

Conceito de estrutura de bandas surgiu como uma consequência direta da aplicação da Equação de Schrödinger a elétrons em potenciais periódicos. A teoria explica como, em materiais sólidos, os estados energéticos se agrupam em bandas e como a existência de lacunas (*band gaps*) entre essas bandas determina a condutividade elétrica de materiais como metais, semicondutores e isolantes.

Neste contexto, o presente trabalho tem como objetivo central investigar o comportamento de partículas quânticas em potenciais periódicos, a partir da Equação de Schrödinger e do método  $k \cdot p$ . A abordagem adotada busca relacionar os fundamentos da mecânica quântica com aplicações práticas na física do estado sólido, com ênfase na análise das bandas de energia em semicondutores. A relevância dessa investigação se justifica pela importância crescente das tecnologias baseadas em materiais

## 2. REVISÃO DE MECÂNICA QUÂNTICA

A Mecânica Quântica foi desenvolvida no início do século XX por diversos físicos notáveis. Entre eles, destacam-se nomes como Max Planck, Niels Bohr, Werner Heisenberg, Erwin Schrödinger e Albert Einstein. O objetivo desse ramo da Física foi explicar fenômenos que a mecânica clássica não tem capacidade de solucionar.

O ponto de partida foi dado por Max Planck, em 1900, ao propor que a energia não é emitida de forma contínua, mas sim em pequenos pacotes denominados quanta. Essa hipótese foi essencial para solucionar o problema do corpo negro e marcou o início da chamada teoria quântica. Posteriormente, Albert Einstein aprofundou essa ideia ao aplicar o efeito fotoelétrico, fenômeno no qual elétrons são ejetados de superfícies metálicas quando expostas à luz. Einstein percebeu que a luz também possui um caráter corpuscular, sendo compostas por partículas chamadas fótons. Essa contribuição foi um divisor de águas para consolidar o conceito de quantização da energia e lhe rendeu o Prêmio Nobel de Física em 1921.

Outros cientistas, citados anteriormente, também desempenharam papéis fundamentais. Niels Bohr, por exemplo, propôs um modelo atômico em que os elétrons orbitam o núcleo em níveis de energia quantizados. Werner Heisenberg introduziu o Princípio da Incerteza, segundo o qual é impossível conhecer simultaneamente, com precisão absoluta, a posição e a velocidade de uma partícula. Um dos marcos mais importantes da teoria foi a formulação da Equação de Schrödinger, que descreve matematicamente o comportamento de sistemas quânticos ao longo do tempo. Essa equação é amplamente utilizada na física moderna e constitui a base da Mecânica Quântica ondulatória.

A Equação de Schrodinger possibilita compreender como a posição de uma partícula muda no tempo. Essa equação descreve a função de onda de um sistema que contém informações possíveis sobre o estado físico da partícula, como sua região de oscilação, energia e probabilidade de estar em um determinado local.

Dependendo da situação física, a equação pode ser escrita de duas formas principais:

- I. Dependente do tempo – usada quando o estado da partícula muda ao longo do tempo, ou seja, quando há uma evolução dinâmica do sistema. Essa é a forma geral da equação e é usada, por exemplo, quando uma partícula está em movimento ou está sofrendo influência de um campo variável.

- II. Independente do tempo – usada quando o sistema está em um estado estacionário, como no estudo de estados ligados a potenciais estáticos. Ou seja, as propriedades observáveis, como a energia, não mudam com o tempo.

Além disso, a Teoria Quântica foi imprescindível no processo de explicar questões fundamentais sobre o Estado Sólido da Matéria através da análise dos átomos presentes nas propriedades físicas dos materiais semicondutores existentes no nosso meio, dentre esses, destacam-se os sólidos cristalinos, materiais cujas partículas (átomos, íons ou moléculas) se organizam em uma estrutura regular, repetitiva e tridimensional. Alguns exemplos clássicos são os metais como o ouro, prata, ferro e o cobre. Outro exemplo são os cristais de sal (NaCl), em que os íons de sódio e cloro se arranjam em uma rede regular.

Em materiais magnéticos, os átomos interagem entre eles e geram campos magnéticos. De modo geral, quando estamos lidando com escalas da ordem de tamanho de moléculas ou com energias baixas, precisamos trabalhar com as principais equações da Mecânica Quântica para obter resultados que condizem com a nossa realidade.

Os resultados dos níveis de energias são obtidos na Física Quântica através de cálculos probabilísticos, esses são uns dos fatores principais que o difere da Teoria Newtoniana. O caso de uma partícula em um Poço de Potencial Infinito, onde não se tem a capacidade de saber o ponto exato em que a partícula se localiza, mas se pode perceber, através da probabilidade, o local em que a partícula está oscilando.

A mecânica quântica é a teoria fundamental que descreve o comportamento da matéria e da radiação em escalas atômicas e subatômicas. Diferente da mecânica clássica, que se baseia em trajetórias determinísticas, a mecânica quântica introduz conceitos como quantização de energia, dualidade onda-partícula e princípio da incerteza.

Desde sua formulação no início do século XX, a teoria revolucionou a física, permitindo avanços na eletrônica, computação quântica e nanotecnologia. Assim, o desenvolvimento da Mecânica Quântica foi resultado de um esforço coletivo e contínuo, que reformulou profundamente a maneira como os fenômenos físicos são compreendidos em escalas microscópicas.

## **2.1. QUANTIZAÇÃO DA ENERGIA**

A quantização de energia foi inicialmente proposta por Max Planck em 1900 para explicar a radiação do corpo negro. Posteriormente, Albert Einstein utilizou essa ideia

para descrever o efeito fotoelétrico, introduzindo o conceito de fótons. A energia de um fóton é dada por:

$$E = h \cdot f, \quad (1.1)$$

onde  $h$  é a constante de Planck e  $f$  é a frequência da radiação.

## 2.2 DUALIDADE ONDA-PARTÍCULA

Louis de Broglie propôs que partículas, como os elétrons, também apresentam propriedades ondulatórias. Segundo sua hipótese, a cada partícula está associado um comprimento de onda dado pela equação:

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (1.2)$$

onde  $\lambda$  é o comprimento de onda,  $h$  é a constante de Planck e  $p$  é o momento linear da partícula. Essa ideia foi confirmada experimentalmente pelo experimento de difração de elétrons realizado por Davisson e Germer, demonstrando o comportamento ondulatório dos elétrons ao interagirem com uma estrutura cristalina.

## 2.3 PRINCÍPIO DA INCERTEZA DE HEISENBERG

Werner Heisenberg demonstrou que é impossível determinar simultaneamente a posição e o momento de uma partícula com precisão absoluta. Esse princípio é expresso por:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (1.2)$$

onde  $\hbar$  é a constante de Planck reduzida, definida como  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ . Esse princípio tem implicações profundas para a natureza probabilística da mecânica quântica.

## 2.4 INTRODUÇÃO À EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

A evolução temporal de sistemas quânticos é descrita pela equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(r, t) = \hat{H} \Psi(r, t), \quad (1.4)$$

onde  $\Psi(r, t)$  é a função de onda e  $\hat{H}$  é o operador Hamiltoniano do sistema. A solução dessa equação permite determinar as probabilidades associadas aos diferentes estados quânticos – como os estados estacionários, excitados, emaranhados e coerentes –, de acordo com o que será visto no decorrer deste trabalho.

## INTERPRETAÇÃO E APLICAÇÕES

A interpretação de Copenhague, proposta por Niels Bohr e Werner Heisenberg, sugere que a função de onda colapsa ao ser medida, determinando um estado específico. Entre as aplicações tecnológicas da mecânica quântica, destacam-se:

- Computação quântica: utilização de *qubits* para realizar cálculos exponencialmente mais rápidos que computadores clássicos.
- Sensores quânticos: medições de precisão extrema em campos magnéticos e gravitacionais.
- Criptografia quântica: segurança baseada na impossibilidade de clonar estados quânticos arbitrários.

A mecânica quântica transformou a física e possibilitou avanços tecnológicos significativos. Apesar de seu caráter contraintuitivo, suas previsões são confirmadas experimentalmente com altíssima precisão. Com o desenvolvimento de novas tecnologias quânticas, espera-se que sua aplicação se expanda ainda mais no futuro.

### 2.5 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

A Equação de Schrödinger (ES) é utilizada para descrever e prever o comportamento de partículas em escala quântica, como os elétrons, permitindo compreender tanto suas oscilações quanto seus níveis ou bandas de energia. Sua dedução matemática é considerada complexa, uma vez que o elétron não se comporta apenas como partícula, mas também apresenta características ondulatórias, conforme proposto na dualidade onda-partícula. Quando existem funções que satisfazem a equação, é possível determinar a região de maior probabilidade em que o elétron se encontra, bem como identificar sua energia associada.

Na abordagem interpretativa associada à ES, o sistema quântico é representado por uma função de onda, simbolizada por  $\Psi$  (psi), que contém todas as informações acessíveis sobre o estado do sistema. Dessa forma, o  $\Psi$  implica necessariamente resolver

a ES, que permite descrever a dinâmica e as propriedades observáveis da partícula analisada, podendo ser expressa como:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{2m \partial x^2} + V\Psi. \quad (1.5)$$

Desse modo, temos a equação para determinar o comportamento de uma partícula livre, onde  $\hbar$  é uma constante reduzida,  $m$  é a massa e  $V$  é o potencial associado ao sistema quântico. A função de onda determinada pela expressão (1.1) determina a função de onda para qualquer instante de tempo fazendo uma analogia à mecânica clássica de acordo com a Segunda Lei de Newton.

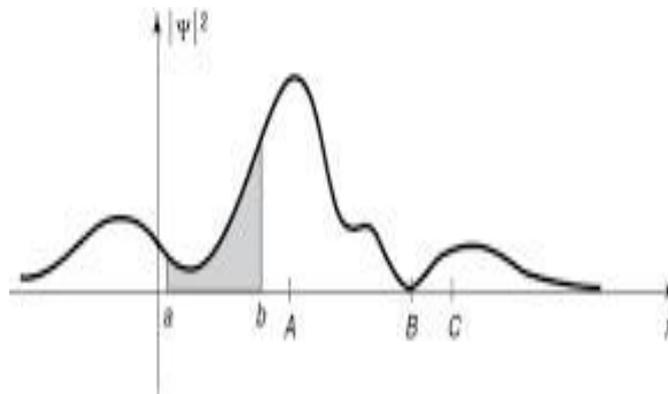
## 2.6 A INTERPRETAÇÃO ESTATÍSTICA

A função de onda existe para identificar a região do espaço em que a partícula está localizada, tendo em vista que não é possível determinar o seu ponto exato. Diante disso, a interpretação probabilística apresenta essa indeterminação, mas é capaz de fornecer cálculos probabilísticos sobre possíveis resultados do espaço em que a partícula oscila. De modo geral, o estado de uma partícula é representado pelo cálculo probabilístico de Born, que é justamente a probabilidade de encontrar a partícula em determinado ponto  $x$ , no instante  $t$ .

$$\int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx. \quad (1.6)$$

Nesse caso, temos a probabilidade de encontrar a partícula entre  $a$  e  $b$  em função do instante de tempo  $t$ . Para entender essa interpretação probabilística, analisaremos um gráfico que representa  $|\Psi|^2$  em relação à posição  $x$ .

Figura 1 – Função de onda

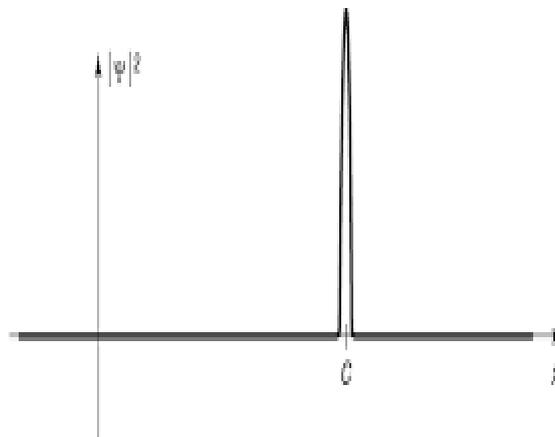


Fonte: GRIFFITHS, David J, 2011. p. 2.

A região delimitada entre os pontos  $a$  e  $b$  representa a probabilidade de encontrar a partícula. Observando o ponto  $A$ , percebe-se que essa probabilidade é significativamente maior, pois a função de onda apresenta maior amplitude. Já no ponto  $B$ , a probabilidade tende a zero, pois, nesse local, não há espaço para a partícula oscilar. Ou seja, quanto maior for a área sob a curva da função de onda, maior será a probabilidade de encontrar a partícula naquela região.

Ao medir a região em que uma partícula oscila e ela for encontrada no ponto máximo da região  $C$ , ocorre um colapso na função de onda. Quando repetida a medição de forma rápida, o resultado deverá ser o mesmo. Então, o gráfico a seguir representa um colapso instantâneo e imediato na  $\Psi$ .

Figura 1.2 – Colapso da função de onda



GRIFFITHS, David J, 2011. p.4

A Figura 1.2 ilustra o fenômeno conhecido como colapso da função de onda, representando graficamente  $|\Psi(x)|^2$ , isto é, o quadrado do módulo da função de onda, imediatamente após a medição da posição de uma partícula, que foi detectada no ponto  $C$ . Antes da medição, o estado da partícula é descrito por uma função de onda estendida no espaço, que fornece a distribuição de probabilidade de sua posição. No entanto, no instante em que é realizada uma medição precisa da posição, a função de onda sofre uma mudança brusca e descontínua, concentrando-se fortemente no ponto onde a partícula foi encontrada. Este fenômeno é interpretado como o colapso da função de onda, conceito fundamental da interpretação de Copenhague. Na figura, observamos que  $|\Psi(x)|^2$  exibe um pico estreito e elevado exatamente na coordenada  $C$ , indicando que a probabilidade de encontrar a partícula em qualquer outro ponto é praticamente nula após a medição. Isso reflete a localização exata da partícula no espaço, embora, segundo o Princípio da Incerteza de Heisenberg, esse conhecimento preciso sobre a posição implique uma grande incerteza em relação ao seu momento linear.

## 2.7 NORMALIZAÇÃO

A normalização é um conceito essencial que surge a partir da necessidade de garantir que as funções de onda  $\Psi(x, t)$  estejam ajustadas de forma correta ao espaço físico. Ou seja, consiste em ajustar a função de onda de modo que exista uma integral de densidade

de probabilidade ao longo de todo o espaço, em que a partícula oscila, que seja igual a 1. Matematicamente, essa integral pode ser expressa como sendo:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (1.7)$$

note que  $|\Psi(x, t)|^2$  é a densidade de probabilidade de encontrar a partícula no espaço  $x$ , no tempo  $t$ . Se uma função de onda não satisfaz essa condição inicial, ela pode ser multiplicada por  $A$  que é a constante de normalização para que a integral acima seja atendida. Essa constante garante a regularidade da função de onda para que esteja ajustada com o objetivo de descrever uma distribuição probabilística fundamentada. De modo geral, a normalização garante que as probabilidades feitas a partir da função de onda sejam condizentes com a realidade física, ou seja, se uma função de onda não estiver normalizada, os resultados obtidos através dos cálculos probabilísticos, dos momentos e das energias seriam incorretos, prejudicando sua interpretação; logo, esse processo (normalização) garante que o comportamento de partículas sejam fisicamente consistentes desempenhando um papel de acordo com as interpretações e previsões da teoria quântica fazendo com que isso garanta que a partícula tenha 100% de chance de estar em algum lugar no espaço.

Se a densidade de probabilidade for igual a zero em determinada região do espaço, não há probabilidade de encontrar a partícula naquele ponto específico. Contudo, isso não prejudica o processo de normalização, desde que  $|\Psi(x, t)|^2 = 1$ . Note que

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 dx. \quad (1.8)$$

Na primeira expressão, a integral é uma função que depende apenas do tempo por isso o uso  $d/dt$ , mas na segunda expressão, o uso da derivada parcial  $\partial/\partial t$  é coerente pois função depende do espaço e, também, do tempo. Aplicando a regra do produto na equação acima, temos:

$$\frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi. \quad (1.9)$$

Aplicando a equação de Schrodinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{-i\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} V\Psi \quad (1.10)$$

e substituindo o complexo conjugado

$$i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = \frac{-i\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar} V\Psi^*, \quad (1.11)$$

então após a substituição  $\Psi^*$ , temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 &= \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} \Psi \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \right]. \end{aligned} \quad (1.12)$$

Fazendo as devidas manipulações matemáticas e colocando os limites de integração que vai de  $-\infty$  a  $+\infty$ , podemos calcular a integral da equação 1.8, assim:

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = \frac{i\hbar}{2m} \left( \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right), \quad (1.13)$$

Substituindo os limites de integração quando  $x$  vai de  $-\infty$  a  $+\infty$ , a função de onda  $\Psi(x, t)$  tende a zero e se fosse zero teríamos uma função não normalizável, portanto,

$$\frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 0. \quad (1.14)$$

## 2.8 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER INDEPENDENTE DO TEMPO

A Equação de Schrödinger independente do tempo constitui uma das expressões fundamentais da mecânica quântica. Além de descrever o comportamento de uma partícula sujeita a um determinado potencial, essa equação permite a determinação do estado quântico de um sistema. Representa a forma estacionária da equação geral de Schrödinger, sendo aplicada na análise de sistemas em estados de energia bem definidos, também denominados estados estacionários (GRIFFITHS, 2018).

Para determinar o potencial  $V(x)$ , que não depende do tempo, é necessário resolver a Equação de Schrödinger por meio do método de separação de variáveis. Esse procedimento possibilita a decomposição da função de onda em componentes espaciais e

temporais, o que facilita a resolução do problema quântico em situações nas quais o potencial é estático (SILVA, 2020).

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi. \quad (1.15)$$

Aplicando o método de separação de variáveis, temos:

$$\Psi(x, t) = \Psi(x)\varphi(t), \quad (1.16)$$

onde  $\Psi$  (minúsculo) é uma função de onda que depende apenas do espaço  $x$  e  $\varphi$  é uma função de onda dependente apenas do tempo  $t$ . Para soluções separáveis fazemos

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \Psi \frac{d\varphi}{dt}, \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{d^2 \Psi}{dx^2} \varphi.$$

Substituindo essa forma na equação de Schrodinger:

$$i\hbar \Psi \frac{d\varphi}{dt} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} \varphi + V\Psi \varphi,$$

e dividindo ambos os lados da equação acima por  $\Psi(x)\varphi(t)$ :

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Psi} \frac{d^2 \Psi}{dx^2} \varphi + V. \quad (1.17)$$

Chegamos a uma equação onde o lado esquerdo é dependente apenas do tempo ( $t$ ) e o lado direito dependente somente do espaço ( $x$ ). Como essas duas expressões são iguais, elas devem ser iguais a uma constante de separação que chamaremos de energia  $E$ . Logo a equação da esquerda ficará

$$i\hbar \frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dt} = E,$$

isolando  $\frac{d\varphi}{dt}$ :

$$\frac{d\varphi}{dt} = \frac{iE}{\hbar} \varphi, \quad (1.18)$$

a equação da direita ficará

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\Psi} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V = E,$$

multiplicando os dois lados da equação por  $\Psi$ , temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + V\Psi = E\Psi. \quad (1.19)$$

Agora temos duas equações diferenciais ordinárias separadas, onde a primeira é a equação temporal

$$i \hbar \frac{d\varphi}{dt}(t) = E\varphi(t)$$

e multiplicando a equação temporal por dt:

$$i \hbar d\varphi(t) = E\varphi(t)dt,$$

logo

$$\frac{d\varphi(t)}{\varphi(t)} = -i \frac{E}{\hbar} dt.$$

Após as manipulações matemáticas feitas anteriormente e integrando ambos os lados da equação anterior, temos:

$$\varphi(t) = e^{\frac{-iEt}{\hbar}}, \quad (1.20)$$

aplicando a Equação de Schrödinger na sua forma dependente do tempo (eq. 1.4), onde  $\Psi(x, t)$  é a função de onda,  $\hbar$  é a constante de Planck reduzida  $\hat{H}$  é o operador Hamiltoniano do sistema. Para um sistema unidimensional com um potencial  $V(x)$ , o Hamiltoniano é:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x). \quad (1.21)$$

Se o potencial  $V(x)$  não depender explicitamente do tempo, a separação de variáveis permite escrever a função de onda como

$$\Psi(x,t) = \Psi(x)e^{\frac{-iEt}{\hbar}}. \quad (1.22)$$

Como visto anteriormente,  $\varphi(x)$  é a solução espacial e  $E$  representa a energia da partícula. Substituindo na equação original, obtemos a Equação de Schrödinger Independente do Tempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x). \quad (1.23)$$

Essa equação diferencial descreve os estados estacionários do sistema, permitindo determinar os estados quânticos acessíveis e seus respectivos níveis de energia.

## 2.9. INTERPRETAÇÃO FÍSICA

A função de onda  $\varphi(x)$  contém toda a informação sobre o estado quântico da partícula. O módulo  $|\varphi(x)|^2$  representa a densidade de probabilidade de encontrar a partícula em uma dada posição  $x$ .

Dependendo da natureza do potencial  $V(x)$ , podemos obter soluções que descrevem estados ligados (quando  $E < 0$ ) ou estados de espalhamento (quando  $E > 0$ ). Para potenciais bem comportados, as soluções devem satisfazer as seguintes condições de contorno, como visto no anteriormente:

1. Normalização:  $\int |\varphi(x)|^2 dx = 1$ , garantindo que a partícula exista em algum lugar do espaço.
2. Continuidade:  $\varphi(x)$  e  $\frac{d\varphi}{dx}$  devem ser contínuos, a menos que  $V(x)$  tenha singularidades.

Em seguida, aplicamos essa formulação ao caso do poço de potencial delta de Dirac, um exemplo fundamental para sistemas de ligação na mecânica quântica.

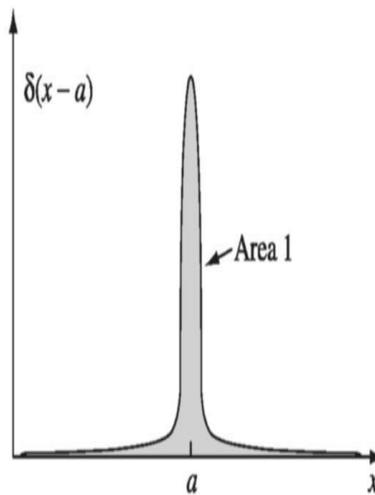
## 2.10. O POÇO DE POTENCIAL DELTA DE DIRAC

O poço de potencial delta é definido como:

$$V(x) = -V_0 \delta(x). \quad (1.24)$$

onde  $V_0 > 0$  determina a força da interação e  $\delta(x)$  é a função delta de Dirac. Esse potencial representa um poço infinitamente fino, mas suficientemente profundo para permitir um estado ligado.

Figura 1.3 – Função delta de Dirac



Fonte: GRIFFITHS, David J, 2005. pg. 54.

Substituindo esse potencial na Equação de Schrödinger Independente do Tempo, temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} - V_0\delta(x)\varphi(x) = E\varphi(x). \quad (1.25)$$

Procuramos uma solução para um estado ligado, ou seja, com  $E < 0$ . Definimos  $E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , com  $k > 0$ , de modo que a equação para  $x \neq 0$  torna-se:

$$\frac{d^2\varphi}{dx^2} = k^2\varphi(x). \quad (1.26)$$

A solução geral para essa equação é da forma:

$$\varphi(x) = Ae^{kx}, \quad x < 0, \quad (1.27)$$

$$\varphi(x) = Ae^{-kx}, \quad x > 0. \quad (1.28)$$

Para garantir a normalização, a função deve decair para  $|x| \rightarrow \infty$ , o que impõe  $A = B$ . Assim, temos:

$$\varphi(x) = Ce^{kx}, \quad x < 0, \quad (1.29)$$

$$\varphi(x) = Ce^{-kx}, \quad x > 0. \quad (1.30)$$

A continuidade em  $x = 0$  exige que  $\varphi(0^-) = \varphi(0^+)$ , o que já é satisfeito. No entanto, a descontinuidade da derivada da função de onda imposta pelo potencial delta leva à condição:

$$\left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{0^+} - \left(\frac{d\varphi}{dx}\right)_{0^-} = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}. \quad (1.31)$$

Calculando as derivadas, obtemos:

$$kC - kC = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}C, \quad (1.32)$$

cancelando  $C$  (pois  $C \neq 0$ ), obtemos a relação:

$$k = -\frac{2mV_0}{\hbar^2}. \quad (1.33)$$

Como  $E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , temos a energia do estado ligado:

$$E = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}. \quad (1.34)$$

Essa solução indica que o potencial delta sempre suporta um estado ligado, independentemente da intensidade  $V_0$ .

A Equação de Schrödinger Independente do Tempo é essencial para entender os estados estacionários de sistemas quânticos. O estudo do potencial delta de Dirac ilustra como mesmo um potencial infinitamente fino pode gerar estados ligados, sendo um modelo relevante em diversas áreas da física, como física de semicondutores e teoria de espalhamento. Esse exemplo reforça a natureza probabilística da mecânica quântica e a importância das condições de contorno na determinação dos estados físicos permitidos.

### 3. ESTRUTURAS DE BANDAS

A estrutura de bandas permite a compreensão do comportamento eletrônico de diferentes materiais, como metais, semicondutores e isolantes, e fundamenta o desenvolvimento de dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos.

A origem da estrutura de bandas está na interação entre os elétrons e o potencial periódico gerado pelos átomos em uma rede cristalina. Diferentemente de átomos isolados, onde os elétrons ocupam níveis discretos de energia, em sólidos, esses níveis se combinam formando bandas contínuas de estados eletrônicos permitidos.

A mecânica quântica fornece a base teórica para descrever esse fenômeno. Por meio do teorema de Bloch e do modelo de elétrons quase livres, é possível derivar matematicamente a existência dessas bandas de energia e prever as propriedades elétricas e ópticas dos materiais.

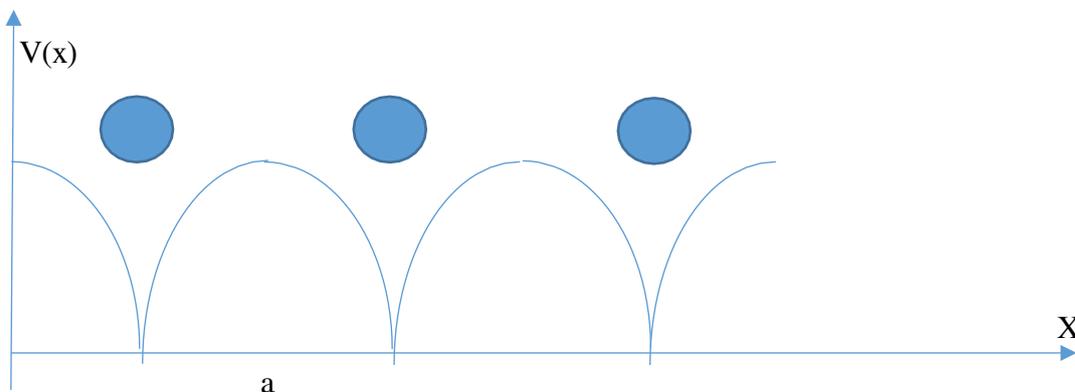
O presente trabalho busca apresentar uma análise sobre a formação da estrutura de bandas, abordando os principais conceitos teóricos e suas aplicações na física dos materiais.

#### 3.1 O PROBLEMA QUÂNTICO EM UM POTENCIAL PERIÓDICO

A compreensão da estrutura de bandas começa com o estudo do comportamento de um elétron sujeito a um potencial periódico, que representa a influência da rede cristalina. Esse potencial é expresso como:

$$V(x + a) = V(x). \quad (1.35)$$

onde “a” é o parâmetro de rede, ou seja, a periodicidade da estrutura cristalina. A figura a seguir representa um esquema que exemplifica um potencial periódico em uma dimensão:



A equação de Schrödinger independente do tempo para esse sistema é dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V\varphi(x) = E\varphi(x), \quad (1.36)$$

diferentemente de sistemas com potenciais confinantes ou livres, aqui a função de onda  $\varphi(x)$  não pode ser assumida como um simples estado estacionário. Para resolver essa equação, considera-se o teorema de Bloch, que estabelece que a solução pode ser expressa como:

$$\varphi_k(x) = e^{ikx}u_k(x), \quad (1.37)$$

onde  $u_k(x)$  é uma função periódica que satisfaz  $u_k(x + a) = u_k(x)$ . Essa formulação indica que os estados eletrônicos em um sólido possuem quase-momentum  $k$ , associado ao espaço recíproco do cristal. O teorema de Bloch permite descrever a relação de dispersão dos elétrons no material, levando à noção de bandas de energia e lacunas (*band gaps*) entre elas.

### 3.2 REPRESENTAÇÃO DA REDE DE DIRAC.

A rede de Dirac surge em sistemas onde os elétrons obedecem a uma relação de dispersão linear, como no grafeno e em alguns materiais topológicos. Diferente de semicondutores convencionais, onde a relação de dispersão tem formato parabólico próximo ao mínimo da banda de condução, os elétrons em materiais de Dirac seguem uma relação linear próximo aos pontos de contato das bandas.

### 3.3 FORMAÇÃO DAS BANDAS DE ENERGIA

A partir do teorema de Bloch, a energia dos elétrons em um cristal não assume qualquer valor contínuo, mas sim um conjunto de valores permitidos organizados em bandas de energia, separadas por gaps energéticos (lacunas de energia). Esse fenômeno resulta diretamente da periodicidade do potencial cristalino e das restrições impostas pelas soluções da equação de Schrödinger em sistemas periódicos. A formação dessas bandas pode ser compreendida por meio de dois modelos teóricos fundamentais:

1. Modelo de elétrons quase livres, e
2. Modelo de ligação forte.

O primeiro assume que os elétrons se movem quase livremente pelo cristal, sendo ligeiramente perturbados pelo potencial periódico da rede. Essa abordagem parte da ideia

de um gás de elétrons livres e aplica a teoria de perturbações para incorporar os efeitos do potencial da rede.

Quando aplicamos o teorema de Bloch nesse contexto, observa-se que a interação com o potencial periódico provoca pequenas aberturas (*gaps*) nos pontos de Brillouin onde ocorre interferência construtiva dos estados eletrônicos. Esse modelo explica bem os metais, nos quais os elétrons apresentam comportamento mais livre.

Por outro lado, o modelo de ligação forte considera os elétrons fortemente ligados aos núcleos atômicos e propõe que os orbitais atômicos se sobrepõem levemente, permitindo o tunelamento (salto quântico) entre sítios vizinhos. A sobreposição leva à formação de bandas discretas de energia. Esse modelo é mais apropriado para descrever materiais isolantes e semicondutores, onde os elétrons estão localizados e o gap energético é significativo.

### 3.4 MODELO DO ELÉTRON QUASE LIVRE.

No modelo do elétron quase livre, considera-se que os elétrons no sólido se movem de maneira semelhante a partículas livres, mas com pequenas perturbações causadas pelo potencial periódico. A equação de dispersão para um elétron livre é dada por:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (1.38)$$

porém, a presença do potencial periódico gera interações nos pontos de Brillouin ou zona de Brillouin que é definida como a região do espaço recíproco mais próxima da origem do que de qualquer outro ponto da rede recíproca que será definido no decorrer deste trabalho. Geometricamente, corresponde à célula de Wigner-Seitz construída no espaço recíproco.

Essa zona desempenha um papel crucial na descrição das propriedades eletrônicas dos sólidos, pois representa os limites naturais para os valores do vetor de onda.

Nos contornos da zona de Brillouin, ocorrem condições de ressonância, conhecidas como reflexões de Bragg, que resultam no acoplamento de estados eletrônicos com vetores de onda opostos. Como consequência, surgem lacunas de energia (*band gaps*), o que rompe a continuidade da equação de dispersão do elétron livre. Esse

fenômeno explica a origem da estrutura de bandas nos sólidos, diferenciando condutores, semicondutores e isolantes com base na presença e no tamanho dessas lacunas.

Esse modelo intermediário entre elétrons livres e elétrons fortemente ligados é fundamental para a compreensão das propriedades eletrônicas dos materiais cristalinos. “A construção da zona de Brillouin e a análise das soluções da equação de Schrödinger dentro dela são essenciais para prever o comportamento eletrônico nos sólidos periódicos” (KITTEL, 2005, p. 177). Isso resulta na separação dos estados eletrônicos em bandas permitidas e proibidas. Nos pontos de Brillouin  $k = \pm \frac{\pi}{a}$ , o espalhamento dos elétrons pelo potencial periódico causa a formação de um gap de energia. Isso explica a existência de materiais condutores, semicondutores e isolantes, dependendo do tamanho desse *band gap*.

### 3.5 CLASSIFICAÇÃO DOS MATERIAIS SEGUNDO A ESTRUTURA DE BANDAS

A estrutura de bandas permite classificar os materiais sólidos de acordo com sua capacidade de condução elétrica. Essa classificação se baseia na largura do band gap, que separa a banda de valência (ocupada por elétrons) da banda de condução (onde os elétrons podem se mover livremente).

Os principais grupos de materiais são:

- Metais: não possuem gap de energia significativo, permitindo a condução elétrica mesmo em temperatura ambiente. Os elétrons ocupam parcialmente a banda de condução, possibilitando a movimentação de cargas sob a ação de um campo elétrico.
- Semicondutores: possuem um gap de energia moderado (tipicamente entre 0,1 e 3eV), permitindo controle da condução por dopagem ou temperatura. Exemplos incluem o silício (Si) e o germânio (Ge).
- Isolantes: possuem um band gap grande (superior a 5 eV), impedindo a excitação térmica dos elétrons para a banda de condução. Materiais como o diamante e a sílica são exemplos de isolantes típicos.

A Mecânica Quântica, ao prever a existência dessas bandas de energia, permite compreender fenômenos fundamentais na eletrônica moderna, incluindo o funcionamento de transistores, LEDs e células solares. A estrutura de bandas de energia é um dos resultados mais significativos da aplicação da mecânica quântica a sistemas de muitos elétrons. O conceito de funções de Bloch e a introdução de gaps energéticos explicam o comportamento elétrico dos materiais e fundamentam diversas tecnologias. A abordagem

de GRIFFITHS, David J. 3 ed. 2018, enfatiza a elegância da mecânica quântica ao explicar fenômenos macroscópicos a partir de princípios fundamentais. O estudo da estrutura de bandas não apenas permite entender a natureza dos sólidos, mas também possibilita o desenvolvimento de novos materiais com aplicações tecnológicas inovadoras.

Figura 1.4 – Representação esquemática da teoria de bandas em metais, semicondutores e isolantes

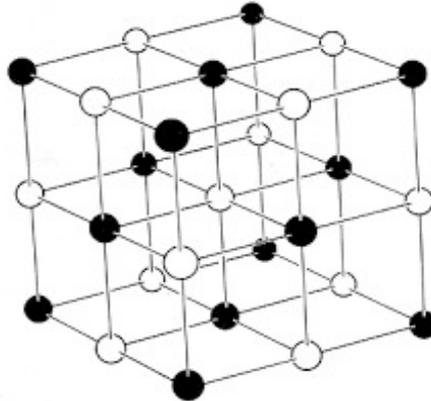


Fonte: “Ciência e Engenharia de Materiais: Uma Introdução”, John Wiley & Sons, 2002.

### 3.6 ESTRUTURA CRISTALINA

A estrutura cristalina refere-se à organização periódica e tridimensional dos átomos, íons ou moléculas em um sólido. Essa organização é representada pela célula unitária, que se repete infinitamente no espaço, formando a rede cristalina. A figura abaixo representa o cloreto de sódio, NaCl, ou sal de cozinha.

Figura 1.4 – Estrutura Cristalina NaCl.



Fonte: Kittel, Cap. 1 (cristais), Cap. 19 (amorfos) e Cap. 22 (ligas).

Disponível em: <https://www.if.ufrj.br/~capaz/fmc/cap3-estrutura.pdf>

Existem sete sistemas cristalinos fundamentais — cúbico, tetragonal, ortorrômbico, monoclinico, triclínico, hexagonal e romboédrico — que definem a geometria do arranjo atômico. Em materiais semicondutores como o silício (Si) e o germânio (Ge), a estrutura cristalina do tipo diamante é responsável por suas propriedades eletrônicas peculiares.

Essa organização periódica influencia diretamente propriedades como condutividade elétrica, comportamento óptico e resistência mecânica, aspectos fundamentais para o estudo da física do estado sólido (KITTEL, 2005; ASHCROFT; MERMIN, 1976).

### 3.7 REDE RECÍPROCA

A rede recíproca é uma construção matemática derivada da rede direta, sendo utilizada para descrever a periodicidade de sólidos no espaço dos momentos. Enquanto a rede direta descreve a posição dos átomos no espaço real, a rede recíproca está associada aos vetores de onda permitidos em um cristal. Essa formulação é essencial para o entendimento da difração de raios X, já que a condição de Bragg pode ser expressa naturalmente nesse espaço. O conceito é igualmente fundamental para a formulação do teorema de Bloch, que descreve as funções de onda de elétrons em potenciais periódicos (GRIFFITHS, 2018; KITTEL, 2005).

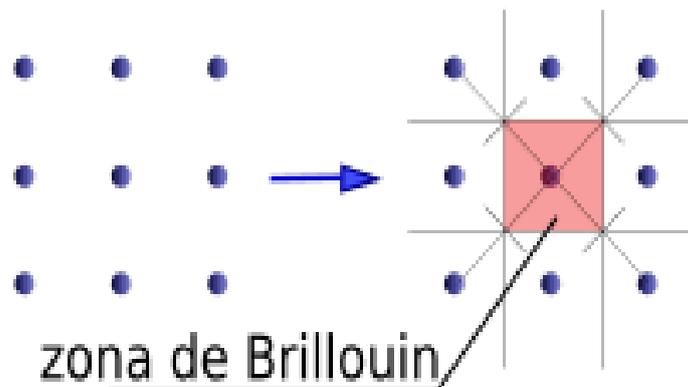
### 3.8 ZONA DE BRILLOUIN

A zona de Brillouin é definida a partir da rede recíproca e corresponde à região do espaço delimitada por planos perpendiculares aos vetores que ligam a origem aos pontos mais

próximos da rede recíproca. A primeira zona de Brillouin é, portanto, equivalente à célula de Wigner-Seitz no espaço recíproco. Nos limites dessa zona ocorrem reflexões de Bragg, que geram aberturas de gaps de energia (band gaps). Esse conceito é central para compreender a formação das bandas eletrônicas e a classificação dos materiais em condutores, semicondutores e isolantes (ASHCROFT; MERMIN, 1976).

A compreensão da estrutura cristalina, da rede recíproca e da zona de Brillouin é indispensável para a física dos semicondutores. A estrutura cristalina determina a periodicidade que dá origem às bandas de energia; a rede recíproca fornece o formalismo matemático para descrever ondas eletrônicas em sólidos; e a zona de Brillouin delimita as regiões críticas para a formação de gaps energéticos. A interação desses conceitos permite entender o funcionamento de dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos, como transistores, LEDs e células solares, mostrando a relevância da mecânica quântica para a inovação tecnológica (GRIFFITHS, 2018; KITTEL, 2005).

Figura 1.5 - Primeira Zona de Brillouin para rede recíproca quadrada.



Fonte: Adaptado de WIKIPEDIA: Zona de Brillouin. Disponível em:  
[https://pt.wikipedia.org/wiki/Zona\\_de\\_Brillouin#/media/Ficheiro:Zona\\_de\\_Brillouin.svg](https://pt.wikipedia.org/wiki/Zona_de_Brillouin#/media/Ficheiro:Zona_de_Brillouin.svg)

#### 4. MÉTODO K.P

O estudo das propriedades eletrônicas dos sólidos cristalinos é uma área fundamental da física do estado sólido. Dentre os diversos métodos utilizados para descrever o comportamento de elétrons, por exemplo, em potenciais periódicos  $V(x)$ , destaca-se o método de  $k \cdot p$ , que tem sua fundamentação no Teorema de Bloch. Tal método é amplamente empregado para o cálculo de estruturas de bandas em semicondutores, permitindo o tratamento de elétrons próximos a pontos específicos da zona de Brillouin. Então, a partir da equação de Schrodinger, podemos deduzir matematicamente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} = E\varphi(x) - V(x)\varphi(x) \quad (1.39)$$

logo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi(x) + V(x)\varphi(x) = E\varphi(x). \quad (1.10)$$

A partir daí, podemos reescrever as funções de onda na forma:

$$\Psi_{n,k}(x) = e^{ik \cdot x} u_{n,k}(x), \quad (1.41)$$

onde  $u_{n,k}(x)$  é periódica com o mesmo período de  $V(x)$ . Então, podemos aplicar o resultado anterior na ES para um potencial periódico e bandas de energias; logo,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_{n,k}(x) + V(x)\Psi_{n,k}(x) = E_{n,k}\Psi_{n,k}(x). \quad (1.42)$$

Substituindo (1.41) em (1.42) obtemos (vide apêndice).

$$\left[ \frac{p^2}{2m} + V(x) + \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] u_{n,k}(x) = E_{n,k} u_{n,k}(x) \quad (1.44)$$

Desse modo, podemos escrever a Hamiltoniana em duas partes e de modo geral, temos

$$(H_0 + H_k)u_{n,k} = E_{n,k}u_{n,k}. \quad (1.45)$$

Associando as duas equações anteriores, percebemos que

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(x),$$

e que

$$H_k = \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

A abordagem por teoria de perturbação representa o método mais acessível para determinar as bandas de dispersão em um material, utilizando o formalismo  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ . Em um sistema semiconductor que apresenta duas bandas principais (banda de condução e banda de valência), é possível estimar o valor da lacuna de energia por meio de medições ópticas, como as realizadas via espectroscopia. Com base nesse conhecimento previamente obtido, a teoria  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  torna-se uma ferramenta eficaz para o cálculo da dispersão das bandas nas proximidades das extremidades das bandas de energia.

#### 4.1 BANDAS DE ENERGIA PELO MÉTODO $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

O estudo da estrutura de bandas em semicondutores é essencial para a compreensão das propriedades eletrônicas dos materiais. Dentre os diversos métodos utilizados para esse fim, destaca-se a aproximação  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ , que permite uma análise efetiva das bandas próximas ao ponto  $\Gamma$  da zona de Brillouin, especialmente em semicondutores do tipo III-V<sup>1</sup>, como os compostos com estrutura cristalina Zinc-Blende.

Inicialmente, pode-se considerar um modelo simplificado que desconsidere os efeitos de acoplamento entre o momento angular do elétron e seu spin, ou seja, o acoplamento spin-órbita. Nesse cenário, o Hamiltoniano do sistema é representado pela seguinte equação:

$$\left[ \frac{p^2}{2m} + V(x) + \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \right] u_{n,k} = \varepsilon_{n,k} u_{n,k}, \quad (1.46)$$

onde

$$\frac{p^2}{2m} + V(x).$$

corresponde ao Hamiltoniano do elétron no potencial periódico do cristal,  $\frac{\hbar^2}{2m} k^2$  representa a energia cinética associada ao vetor de onda  $\mathbf{k}$ , e o termo  $\frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  refere-se ao acoplamento  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ , responsável por descrever interações de perturbação próximas ao ponto  $\mathbf{k} = 0$ . As funções  $u_{n,k}$  são as funções periódicas de Bloch, e  $\varepsilon_{n,k}$  representa a energia dos estados eletrônicos para cada vetor de onda.

No contexto da aproximação  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ , a descrição da estrutura de bandas em semicondutores III-V, como o GaAs, envolve a consideração detalhada das interações

entre os estados próximos à banda de condução e aqueles da banda de valência. Em particular, no ponto  $\Gamma$ , a banda de condução  $\Gamma_{1c}$  é representada por estados de simetria  $|S\rangle$ , enquanto a banda de valência  $\Gamma_4$  é composta por três estados degenerados associados a orbitais do tipo  $p$ :  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$  e  $|Z\rangle$ .

Esses três estados formam uma base vetorial para descrever a banda de valência superior em ausência de acoplamento spin-órbita. No entanto, mesmo sem considerar o spin, a degenerescência desses estados pode ser quebrada por interações perturbativas, como a interação  $k \cdot p$ , responsável por acoplar os estados da banda de condução com os estados da banda de valência. Essa interação é essencial para descrever a dispersão energética com precisão nas vizinhanças do ponto  $k = 0$ .

De forma geral, o acoplamento entre o estado de condução  $|S\rangle$  e os estados  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$  e  $|Z\rangle$  ocorre por meio de elementos de matriz do tipo  $\langle S|p|X\rangle$ ,  $\langle S|p|Y\rangle$  e  $\langle S|p|Z\rangle$ , os quais são diretamente proporcionais ao vetor de onda  $k$ . Essa estrutura leva à formação de uma matriz Hamiltoniana efetiva que pode ser tratada por técnicas de diagonalização, resultando em bandas com diferentes dispersões energéticas. Entretanto, com o objetivo de tornar a análise mais manejável, adota-se, nesta etapa, uma simplificação do modelo: apenas duas das três bandas associadas à representação  $\Gamma_4$  serão consideradas.

Tal abordagem reduz a dimensionalidade da matriz Hamiltoniana, facilitando a obtenção de soluções analíticas ou semianalíticas, sem perder a essência física do acoplamento entre bandas. Portanto, neste modelo simplificado, os estados  $\Phi_1 = |X\rangle$  e  $\Phi_2 = |Y\rangle$  serão utilizados como base para a construção do Hamiltoniano efetivo. A exclusão de  $|Z\rangle$  é apenas para uma simplificação para construção da banda de energia de valência.

A seguir, será apresentada a obtenção de uma expressão aproximada para a banda de valência em semicondutores, utilizando o método  $k \cdot p$ . Essa abordagem permite descrever de forma eficiente a dispersão energética das bandas próximas ao ponto  $\Gamma$  da zona de Brillouin, destacando os principais efeitos do acoplamento entre os estados eletrônicos. Por meio dessa aproximação, é possível analisar as propriedades eletrônicas essenciais da banda de valência, como a curvatura da banda e a massa efetiva dos buracos, elementos fundamentais para a compreensão do comportamento dos portadores de carga no material.

Desse modo, o acoplamento entre as bandas de valência e as bandas de condução será aplicado no ponto de vista de uma perturbação. Então, o elemento de uma matriz exata uma das duas funções de ondas de banda de valência será tratada como sendo

$$H'_{ij} = H_{ij} + \sum_k \frac{H_{ik} - H_{kj}}{E_i - E_K} \quad (1147)$$

sendo i, j números inteiros,  $K = 1_c$ , a parte exata é  $H_{ij}$  e

$$H'_{ij} = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H'_{21} & H'_{22} \end{pmatrix}. \quad (1.48)$$

Analisando a parte exata, temos:

$$H_{11} = \langle X|H|X \rangle, \quad (1.49)$$

em que

$$H = \left[ \frac{p^2}{2m} + V(x) + \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \frac{\hbar}{m} k \cdot p \right] \quad (1.50)$$

e aplicando o método de  $k \cdot p$  na equação anterior para as bandas de energia X e Y

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) + \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \frac{\hbar}{m} (k_x p_x + k_y p_y), \quad (1.51)$$

agora podemos aplicar o produto escalar em cada termo:

$$\langle X|H|X \rangle = \langle X| \left( \frac{p^2}{2m} + V(x) \right) |X \rangle + \langle X| \frac{\hbar^2}{2m} k^2 |X \rangle + \langle X| \frac{\hbar}{m} (k_x p_x + k_y p_y) |X \rangle. \quad (1.52)$$

Assim, encontramos o Hamiltoniano  $H_0$

$$\langle X|H|X \rangle = \langle X|H_0|X \rangle + \langle X| \frac{\hbar^2}{2m} k^2 |X \rangle + \langle X| \frac{\hbar}{m} (k_x p_x + k_y p_y) |X \rangle, \quad (1.53)$$

logo, o primeiro termo é a energia no orbital P

$$\langle X|H|X \rangle = E_p + \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \langle X| \frac{\hbar}{m} (k_x p_x + k_y p_y) |X \rangle. \quad (1.54)$$

Sendo que,

$$\langle X|p|X \rangle = \langle Y|p|Y \rangle = 0. \quad (1.55)$$

$$H_{11} = E_p + \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \quad (1.56)$$

$$H_{22} = E_p + \frac{\hbar^2}{2m} k^2. \quad (1.57)$$

Agora, trabalharemos a parte perturbativa da eq. 1.47

$$\sum_k \frac{H_{1k}H_{k1}}{E_1 - E_K} = \frac{H_{1k}H_{k1}}{E_0} = \frac{H_{11c}H_{1c1}}{E_0} = \frac{|H_{11c}|^2}{E_0}, \quad (1.58)$$

$$H_{11c} = \langle x | \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} (k_x p_x + k_y p_y) | \Gamma_{1c} \rangle = \quad (1.59)$$

$$\frac{\hbar^2 p^2}{2m} \langle y | s \rangle + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \langle y | s \rangle + \frac{\hbar}{m} k_x \langle x | p_x | \Gamma_{1c} \rangle + \frac{\hbar}{m} k_y \langle x | p_y | \Gamma_{1c} \rangle. \quad (1.60)$$

Como  $\langle X | p_x | \Gamma_{1c} \rangle = iP$ ;  $\langle Y | p_y | \Gamma_{1c} \rangle = iP$ ;  $\langle X | p_y | \Gamma_{1c} \rangle = 0$ ;  $\langle Y | p_x | \Gamma_{1c} \rangle = 0$ ; então

$$H_{11c} = \langle x | \frac{\hbar^2 p^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} (k_x p_x + k_y p_y) | \Gamma_{1c} \rangle = i \frac{\hbar}{m} P k_x, \quad (1.61)$$

logo

$$H_{11c} = i \frac{\hbar}{m} P k_x. \quad (1.62)$$

Substituindo na equação (1.58), temos:

$$\sum_k \frac{H_{1k}H_{k1}}{E_1 - E_K} = \frac{\hbar^2 P^2}{m^2 E_0} k_x^2, \quad (1.63)$$

$$\frac{H_{11}H_{1c1}}{E_1 - E_1} = \frac{\hbar^2 P^2}{m^2 E_0} k_x^2. \quad (1.64)$$

Assim

$$H'_{11} = E_p + \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \frac{\hbar^2 P^2}{m^2 E_0} k_x^2 \quad (1.65)$$

e

$$H'_{22} = E_p + \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \frac{\hbar^2 P^2}{m^2 E_0} k_y^2. \quad (1.66)$$

Analisando a matriz 1.48, resta encontrarmos  $H'_{12}$  e  $H'_{21}$ .

1°) Parte exata

$$H_{12} = \langle X|H|Y\rangle, \quad (1.67)$$

chegaremos na forma:

$$\begin{aligned} H_{12} = \langle X| \left( \frac{p^2}{2m} + V(x) \right) |Y\rangle + \langle X| \left( \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \right) |Y\rangle \\ + \langle X| \frac{\hbar}{m} \left( (k_x P_x + k_y P_y + k_z P_z) \right) |Y\rangle. \end{aligned} \quad (1.68)$$

Como

$$\langle X_i|H|X_j\rangle = 0, \quad (1.69)$$

então,

$$H_{12} = 0 \quad e \quad H_{21} = 0. \quad (1.70)$$

2°) Parte perturbativa

$$\sum_k \frac{H_{1k}H_{k2}}{E_1 - E_k} = \frac{H_{11c}H_{1c2}}{E_1 - E_{1c}} = \frac{H_{11c}H_{1c2}}{E_0}. \quad (1.71)$$

Lembrando que  $\langle X|P_x|\Gamma_{1c}\rangle = iP$ ;  $\langle Y|P_y|\Gamma_{1c}\rangle = iP$ ;  $\langle X|p_y|\Gamma_{1c}\rangle = 0$ ;  $\langle Y|P_y|\Gamma_{1c}\rangle = 0$ ; então

$$H_{21c} = \langle Y| \frac{\hbar^2 P^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} (k_x P_x + k_y P_y) |\Gamma_{1c}\rangle = \quad (1.72)$$

$$\frac{\hbar^2 P^2}{2m} \langle Y|s\rangle + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \langle Y|s\rangle + \frac{\hbar}{m} k_x \langle Y|P_x|\Gamma_{1c}\rangle + \frac{\hbar}{m} k_y \langle Y|P_y|\Gamma_{1c}\rangle. \quad (1.73)$$

$$H_{21c} = \langle Y| \frac{\hbar^2 P^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} (k_x P_x + k_y P_y) |\Gamma_{1c}\rangle = i \frac{\hbar}{m} P k_y. \quad (1.74)$$

$$H_{21c} = i \frac{\hbar}{m} P k_y. \quad (1.75)$$

Aplicando os resultados  $H_{12}$  e  $H_{21c}$  na expressão:

$$\frac{H_{11c} H_{1c2}}{E_0} = \frac{(i \frac{\hbar}{m} P k_x) (i \frac{\hbar}{m} P k_y)}{E_0} = -\frac{\hbar^2 P^2}{m^2 E_0} k_x k_y, \quad (1.76)$$

logo

$$H'_{12} = -\frac{\hbar^2 P^2}{m^2 E_0} k_x k_y. \quad (1.77)$$

Agora podemos agrupar todos os termos de matriz na forma

$$H = \begin{pmatrix} E_p + \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \frac{\hbar^2 P^2}{2m^2 E_0} k_x^2 & 0 + \left(-\frac{\hbar^2 P^2}{m^2 E_0} k_x k_y\right) \\ 0 + \left(-\frac{\hbar^2 P^2}{m^2 E_0} k_x k_y\right) & E_p + \frac{\hbar^2}{2m} k^2 + \frac{\hbar^2 P^2}{2m^2 E_0} k_y^2 \end{pmatrix}. \quad (1.78)$$

1°) Partes exatas:  $E_p + \frac{\hbar^2}{2m} k^2$  e 0.

2°) Perturbações:  $+\frac{\hbar^2 P^2}{2m^2 E_0} k_x^2$  e  $\left(-\frac{\hbar^2 P^2}{m^2 E_0} k_x k_y\right)$ .

Restringindo nossa análise para  $k_y = 0$ , podemos encontrar a relação de dispersão diagonalizando a matriz  $H$ . Ou seja

$$\begin{vmatrix} E_p + \frac{\hbar^2}{2m} \left(1 + \frac{P^2}{E_0}\right) k_x^2 - \lambda & 0 \\ 0 & E_p + \frac{\hbar^2}{2m} k_x^2 - \lambda \end{vmatrix} = 0, \quad (1.79)$$

com isso,

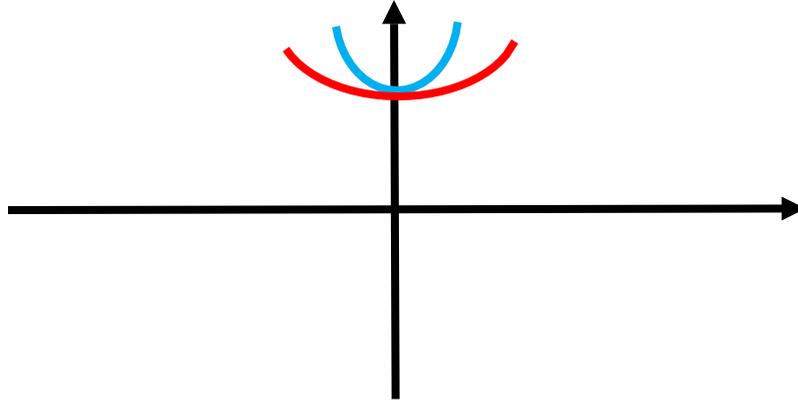
$$\left[E_p + \frac{\hbar^2}{2m} \left(1 + \frac{P^2}{E_0}\right) k_x^2 - \lambda\right] \left[E_p + \frac{\hbar^2}{2m} k_x^2 - \lambda\right] = 0. \quad (1.80)$$

Desta forma temos dois autovalores,  $\lambda_1 = E_1^{\text{Valência}}$  e  $\lambda_2 = E_2^{\text{Valência}}$ . Estes autovalores são, respectivamente

$$\lambda_1 = E_1^{\text{Valência}} = E_p + \frac{\hbar^2}{2m} \left(1 + \frac{P^2}{E_0}\right) k_x^2. \quad (1.81)$$

$$\lambda_2 = E_2^{\text{Valência}} = E_p + \frac{\hbar^2}{2m} k_x^2. \quad (12)$$

Figura 1.6 – Relações de dispersão para cada um dos autovalores de  $H$ . A curva vermelha representa  $E_1^{Valência}$  e a azul representa  $\lambda_2 = E_2^{Valência}$ .



Fonte: próprio autor

A figura 1.6 representa duas possíveis relações de dispersão. Note que por causa das simplificações adotadas, estas bandas são aproximadas por parábolas, típicas de relações de dispersões para elétrons livres, onde a curva vermelha representa  $E_1^{Valência}$  e a azul representa  $E_2^{Valência}$ .

## 5. CONCLUSÃO

A realização deste trabalho possibilitou um aprofundamento teórico acerca da Mecânica Quântica aplicada à física do estado sólido, com especial ênfase na estrutura de bandas eletrônicas e sua relevância para a compreensão dos semicondutores. O ponto de partida foi a análise da equação de Schrödinger independente do tempo, a qual fornece a base matemática para a descrição do comportamento das partículas em potencial quântico. Esse arcabouço teórico permitiu compreender que os elétrons em sólidos não se comportam como partículas isoladas, mas sim como entendidas sujeitas às condições impostas pela periodicidade da rede cristalina.

Nesse sentido, o Teorema de Bloch desempenhou papel central ao demonstrar que as funções de onda em um cristal podem ser expressas como o produto de uma onda plana por uma função periódica. Tal resultado foi decisivo para explicar a formação de bandas de energia, uma vez que a interação dos elétrons com o potencial periódico do cristal gera zonas de energia permitida e proibida. Essa abordagem, além de fundamentar a distinção entre condutores, isolantes e semicondutores, fornece elementos essenciais para o desenvolvimento de novos materiais e tecnologias.

Outro aspecto de destaque foi a discussão do método  $k$ - $p$ , ferramenta aproximada e poderosa para o cálculo de dispersões eletrônicas em diferentes pontos da zona de Brillouin. Ao simplificar o problema da determinação dos autovalores da equação de Schrödinger em sólidos, o método  $k$ - $p$  permitiu relacionar diretamente as propriedades quânticas do material às suas aplicações práticas, sobretudo no campo da microeletrônica e da optoeletrônica. Dessa forma, estabeleceu-se um elo entre a teoria quântica fundamental e o projeto de dispositivos semicondutores, tais como LEDs, células solares, computadores quânticos e transistores de alta eficiência.

No decorrer da pesquisa, verificou-se ainda a importância dos semicondutores compostos III-V e de estruturas cristalinas específicas, como a zinc-blende, para a engenharia de materiais. Tais compostos apresentam propriedades eletrônicas e ópticas ajustáveis, tornando-se estratégicos no desenvolvimento de dispositivos de comunicação, lasers semicondutores e tecnologias de energia renovável. Essa conexão entre teoria quântica e aplicações práticas ressalta a relevância do estudo da estrutura de bandas, não apenas em termos acadêmicos, mas também em seu impacto socioeconômico.

Outro ponto importante foi a ênfase na zona de Brillouin como ferramenta para a análise da dispersão eletrônica nos sólidos. A compreensão desse conceito forneceu subsídios para a análise gráfica da relação energia-momento, elucidando a origem de

lacunas de energia e suas implicações na condução elétrica. A clareza dessa abordagem permitiu evidenciar que o comportamento macroscópico dos semicondutores é uma consequência direta das propriedades quânticas microscópicas.

Apesar das contribuições apresentadas, reconhece-se que o presente trabalho tem suas limitações. A abordagem esteve concentrada em aspectos teóricos e conceituais, sem avançar em simulações computacionais detalhadas ou em análises experimentais. Nesse sentido, futuras pesquisas podem incluir a aplicação de métodos numéricos, como a teoria do funcional da densidade (DFT), ou experimentos de caracterização óptica e eletrônica, de modo a complementar e validar os resultados aqui discutidos.

Por fim, conclui-se que o estudo da estrutura de bandas e da mecânica quântica em semicondutores constitui um eixo fundamental para o avanço científico e tecnológico. A consolidação dos conceitos explorados neste trabalho demonstra que a física quântica é não apenas uma teoria abstrata, mas um instrumento essencial para a inovação. O contínuo desenvolvimento nessa área tende a impulsionar novas descobertas, desde dispositivos mais eficientes e sustentáveis até tecnologias disruptivas que moldarão a sociedade do futuro.

Assim, este trabalho cumpre seu objetivo de integrar os fundamentos teóricos da mecânica quântica com a aplicabilidade prática nos semicondutores, reforçando a necessidade de aprofundamento constante nesse campo de pesquisa para acompanhar os avanços tecnológicos e responder às demandas contemporâneas da ciência e da indústria.

## REFERÊNCIAS

GRIFFITHS, David J. *Introdução à mecânica quântica*. 2. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2011.

GRIFFITHS, David J. *Introduction to quantum mechanics*. 3rd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 2018.

HEISENBERG, Werner. *The physical principles of the quantum theory*. New York: Dover Publications, 1949.

YU, Peter Y.; CARDONA, Manuel. *Fundamentals of semiconductors: physics and materials properties*. 4. ed. Berlin: Springer, 2010.

FÍSICA TOTAL. *Cristal semicondutor: estrutura de bandas – parte 2*. Youtube, 28 fev. 2022. Disponível em: <https://youtu.be/pmDD2x5mGhg>. Acesso em: 5 ago. 2025.

## APÊNDICE A

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x)\right]\Psi_{n,k}(x) = E_{n,k}\Psi_{n,k}(x),$$

substituindo o Teorema de Bloch na expressão  $\Psi_{n,k}(x)$ , temos:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(x)\right]e^{ik\cdot x}u_{n,k}(x) = E_{n,k}e^{ik\cdot x}u_{n,k}(x)$$

A periodicidade estar aplicada nas funções de ondas  $u_{n,k}(x)$ , que são também chamadas de funções de Bloch.

Sabendo que (eq. 1.41)

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(x),$$

E aplicando na expressão anterior:

$$\left[-\frac{p^2}{2m} + V(x)\right]e^{ik\cdot x}u_{n,k}(x) = E_{n,k}e^{ik\cdot x}u_{n,k}(x)$$

onde  $p = i\hbar\nabla$  e sabendo que  $u_{n,k}(x)$  possui a mesma periodicidade que  $V(x)$ , deixamos a expressão anterior da seguinte forma:

$$\left[-\frac{p^2}{2m} + V(x)\right]\Psi_{n,k}(x) = E_{n,k}\Psi_{n,k}(x)$$

Como visto anteriormente, um potencial é dito periódico quando se repete por algumas posições fixas  $a$ :

$$V(x + a) = V(x),$$

Como existe proporcionalidades em todos os pontos da rede, a densidade de probabilidade será a mesma em todos esses pontos

$$|\Psi_k(x + a)| = |\Psi_k(x)|^2$$

Sendo assim, existem diferenças entre estas funções. Essas distinções é causada por uma fase que tem a capacidade de descrever o estado de uma partícula. Então,

$$|\Psi_k(x + a)| = e^{ik \cdot a} \Psi_k(x)$$

fazendo o  $\Psi^* \Psi$  na função

$$|\Psi_k(x + a)| = e^{ik \cdot a} \Psi_k(x) e^{-ik \cdot a} \Psi_k^*(x)$$

Podemos expressar (eq. 1.42)

$$\Psi_{n,k}(x) = e^{ik \cdot x} u_{n,k}(x)$$

Onde as funções de Bloch

$$u_{n,k}(x)$$

Possui a periodicidade da rede

$$u_k(x + a) = u_k(x).$$

Aplicando as funções de Bloch e resolvendo a equação de Schrodinger inserida dentro de uma célula unitária com condições de contorno periódicos e substituindo

$$\Psi_{n,k}(x) = e^{ik \cdot x} u_{n,k}(x),$$

Temos:

$$\left[-\frac{p^2}{2m} + V(x)\right] \Psi_{n,k}(x) = E_{n,k} \Psi_{n,k}(x).$$

Sabendo que

$$p = -i\hbar\nabla$$

e substituindo em p,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x)\right] \Psi_{n,k}(x) = E_{n,k} \Psi_{n,k}(x).$$

Agora, podemos substituir o valor de

$$\Psi_{n,k}(x)$$

Na equação anterior, logo:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x)\right] e^{ik \cdot x} u_{n,k}(x) = E_{n,k} \Psi_{n,k}(x)$$

Sendo

$$\nabla \Psi_{n,k} = \nabla(e^{ik \cdot x} u_{n,k})$$

Agora, aplicamos uma simples derivada usando a regra do produto:

$$\nabla \Psi_{n,k} = e^{ik \cdot x} \nabla u_{n,k} + ik e^{ik \cdot x} u_{n,k}$$

$$\nabla^2 \Psi_{n,k} = \nabla(e^{ik \cdot x} \nabla u_{n,k} + ik e^{ik \cdot x} u_{n,k})$$

$$\nabla^2 \Psi_{n,k} = \nabla(e^{ik \cdot x} \nabla u_{n,k}) + \nabla(ik e^{ik \cdot x} u_{n,k})$$

$$\nabla^2 \Psi_{n,k} = \nabla(e^{ik \cdot x} \nabla u_{n,k}) + ik \nabla(e^{ik \cdot x} u_{n,k})$$

Aplicando novamente a derivada através do operador e expandindo a expressão de modo que

$$\nabla^2 \Psi_{n,k} = e^{ik \cdot x} \nabla^2 u_{n,k} + ike^{ik \cdot x} \nabla u_{n,k} + ik[e^{ik \cdot x} \nabla u_{n,k} + ike^{ik \cdot x} u_{n,k}]$$

Organizando a expressão:

$$\nabla^2 \Psi_{n,k} = e^{ik \cdot x} \nabla^2 u_{n,k} + ik(\nabla u_{n,k})e^{ik \cdot x} + ike^{ik \cdot x} \nabla u_{n,k} + i^2 k^2 e^{ik \cdot x} u_{n,k}$$

Sabendo que  $i^2 = -1$ , então

$$\nabla^2 \Psi_{n,k} = e^{ik \cdot x} \nabla^2 u_{n,k} + ik(\nabla u_{n,k})e^{ik \cdot x} + ike^{ik \cdot x} \nabla u_{n,k} - k^2 e^{ik \cdot x} u_{n,k}$$

$$\nabla^2 \Psi_{n,k} = \nabla^2 u_{n,k} e^{ik \cdot x} + 2ik \nabla u_{n,k} e^{ik \cdot x} - k^2 u_{n,k} e^{ik \cdot x}$$

Colocando os termos comuns em evidência, temos:

$$\nabla^2 \Psi_{n,k} = u_{n,k} e^{ik \cdot x} (\nabla^2 + 2ik \nabla - k^2)$$

Agora, podemos substituir

$$\nabla^2 \Psi_{n,k},$$

na equação de Schrodinger

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right] e^{ik \cdot x} u_{n,k}(x) = E_{n,k} \Psi_{n,k}(x)$$

Substituindo a equação ficará na forma:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} (\nabla^2 + 2ik \nabla - k^2) + V(x) \right] e^{ik \cdot x} u_{n,k}(x) = E_{n,k} e^{ik \cdot x} u_{n,k}(x)$$

Aplicando a propriedade distributiva e dividindo os dois lados da equação por  $e^{ik \cdot x}$ :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{2ik\hbar^2}{2m} \nabla - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x) \right] u_{n,k}(x) = E_{n,k} u_{n,k}(x)$$

Sabendo que

$$p = -i\hbar\nabla$$

Logo

$$\nabla = -\frac{p}{i\hbar}$$

e que

$$\nabla^2 = -\frac{p^2}{(i\hbar)^2} = -\frac{p^2}{2m}$$

Agora podemos substituir na expressão principal,

$$\left[-\left(\frac{p^2}{2m}\right) + \frac{\hbar^2}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(x)\right] u_{n,k}(x) = E_{n,k} u_{n,k}(x)$$



Catálogo na fonte:

Ficha catalográfica elaborada por Gustavo César Nogueira da Costa - CRB 15/479

P436i Pereira, Tallys Henrique da Costa.

Introdução à física dos semicondutores: estruturas de bandas / Tallys Henrique da Costa Pereira. - Campina Grande, 2025.

45 f.: il.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Licenciatura em Física) - Instituto Federal da Paraíba, 2025.

Orientadores: Prof. Dr. Francisco Geraldo da Costa Filho.

1. Mecânica quântica. 2. Estrutura de bandas. 3. Semicondutores. 4. Física do estado sólido. I. Costa Filho, Francisco Geraldo da. II. Título.

CDU 537.3

	<b>INSTITUTO FEDERAL DE EDUCAÇÃO, CIÊNCIA E TECNOLOGIA DA PARAÍBA</b>
	Campus Campina Grande - Código INEP: 25137409
	R. Tranquílino Coelho Lemos, 671, Dinamérica, CEP 58432-300, Campina Grande (PB)
	CNPJ: 10.783.898/0003-37 - Telefone: (83) 2102.6200

## Documento Digitalizado Ostensivo (Público)

### TCC

<b>Assunto:</b>	TCC
<b>Assinado por:</b>	Tallys Pereira
<b>Tipo do Documento:</b>	Termo de Apresentação
<b>Situação:</b>	Finalizado
<b>Nível de Acesso:</b>	Ostensivo (Público)
<b>Tipo do Conferência:</b>	Cópia Simples

Documento assinado eletronicamente por:

- **Tallys Henrique da Costa Pereira, ALUNO (201721240039) DE LICENCIATURA EM FÍSICA - CAMPINA GRANDE**, em 25/08/2025 21:38:24.

Este documento foi armazenado no SUAP em 25/08/2025. Para comprovar sua integridade, faça a leitura do QRCode ao lado ou acesse <https://suap.ifpb.edu.br/verificar-documento-externo/> e forneça os dados abaixo:

Código Verificador: 1585490

Código de Autenticação: 82b75f3772

