

PROPRIEDADES ELETRÔNICAS, ESTRUTURAIS E CONSTANTES ELÁSTICAS DO ZnO

Naiara Letícia Marana e Julio Ricardo Sambrano*

Departamento de Matemática, Universidade Estadual Paulista, 17033-360 Bauru – SP, Brasil

Aguinaldo Robinson de Souza

Departamento de Química, Universidade Estadual Paulista, 17033-360 Bauru – SP, Brasil

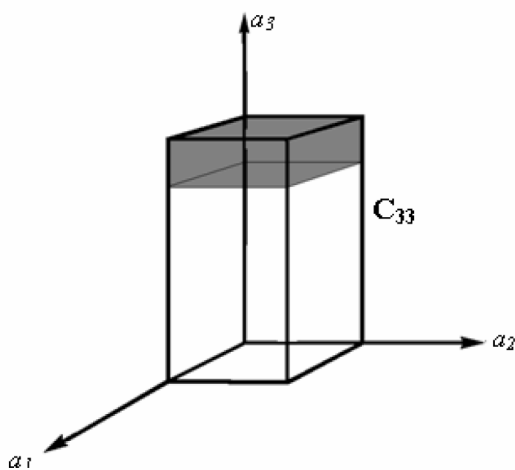


Figura 1Sa. Representação da tensão aplicada sobre a célula unitária referente à constante elástica C_{33}

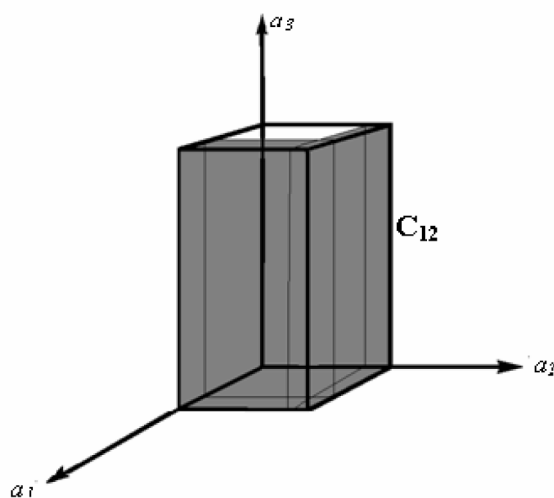


Figura 1Sb. Representação da tensão aplicada sobre a célula unitária referente à constante elástica C_{12}

*e-mail: sambrano@fc.unesp.br

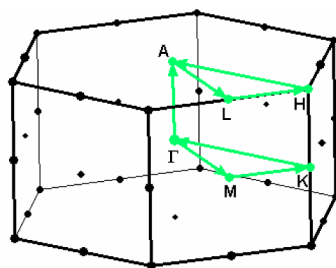


Figura 2Sa. Zona de Brillouin

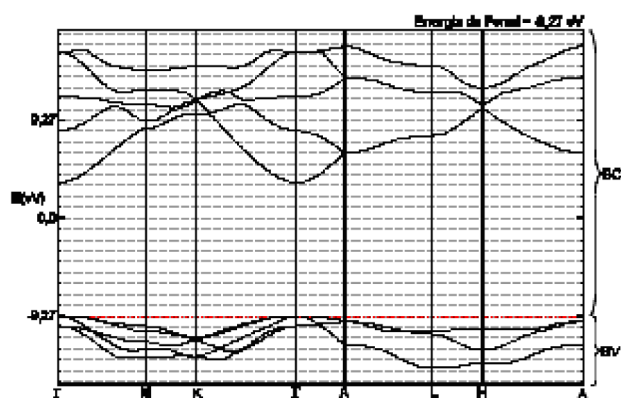


Figura 2Sb. Estrutura de bandas HF

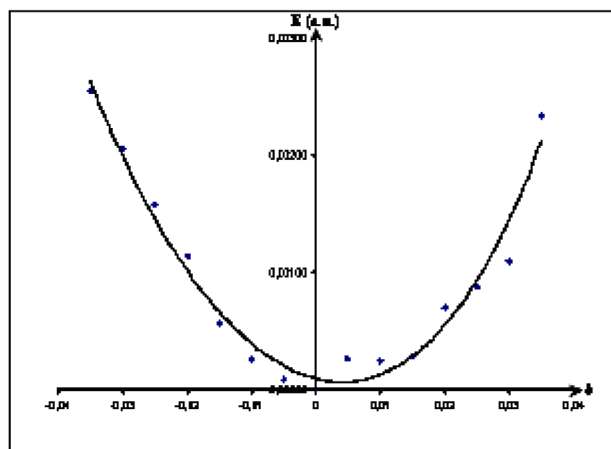


Figura 3Sa. Variação de energia (ΔE) em função de δ para a constante C_{33} com um ajuste polinomial de ordem 4 para HF