

## 042 DINÂMICA DE REDES CRISTALINAS SEMICONDUTORAS

A.Q. de Moraes, P.S. Guimarães (Departamento de Física, Universidade Federal de Santa Maria, 97119 Santa Maria - RS)

Neste trabalho iniciamos o estudo da estrutura de fonons de cristais semicondutores a partir de um formalismo semi-empírico. Para isso partimos de códigos computacionais padrões desenvolvidos para materiais cristalinos com estrutura BCC, os quais foram implantados em ambiente de microcomputadores padrão IBM-PC. Estes códigos, após implantados, foram utilizados em um estudo preliminar da relação entre o tempo consumido na determinação da densidade de estados de fonons e o número de pontos na zona de Brillouin utilizados para determinar essa densidade de estados. Numa etapa posterior, partimos para a modificação desses códigos computacionais para adequá-los ao cálculo da estrutura de fonons de cristais com as estruturas tipo ZnS, por serem estas as estruturas cristalinas dos materiais semicondutores em que estamos interessados.

1. G.W. Keeler, in "Physics Programs", (John Wiley & Sons, Chichester, 1980).