

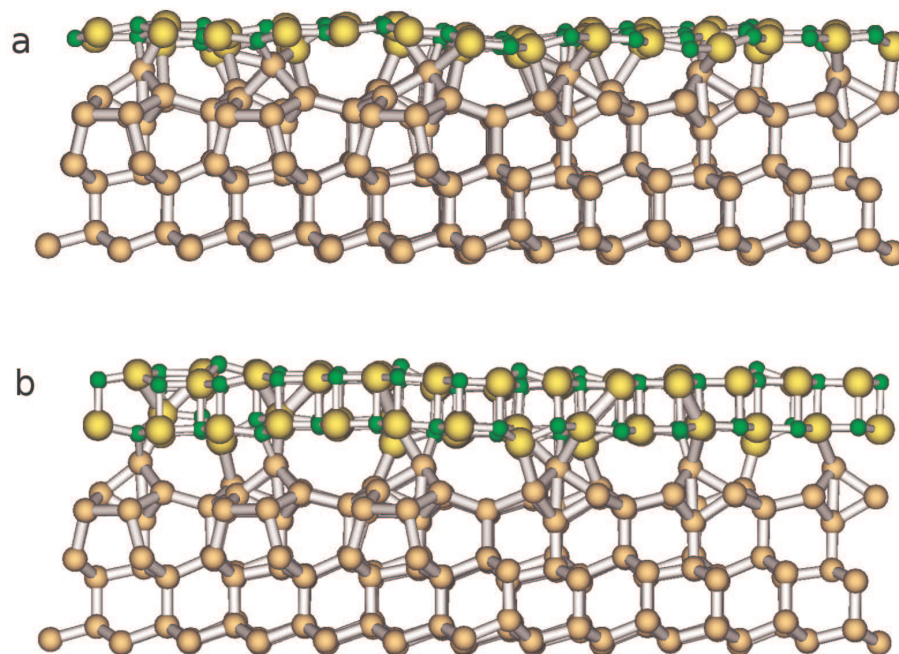


Figura 3.7: Configuração otimizada da monocamada (a) e bicamada (b) de ZnO adsorvidas em superfície de Si(111) reconstrução (7x7)

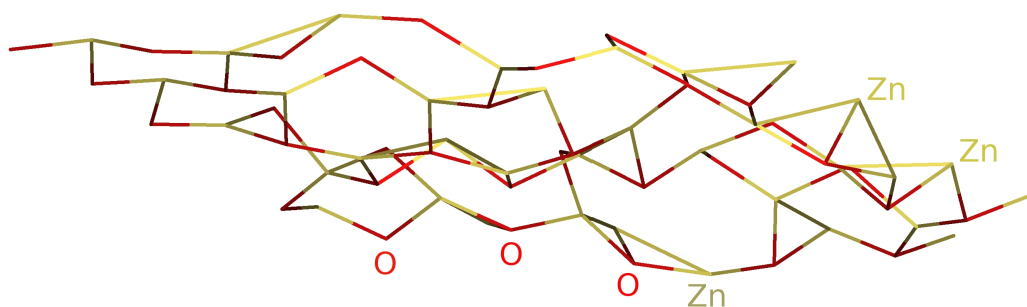


Figura 3.8: monocamada amorfizada de ZnO-2D (6x6) adsorvida em superfície não-reconstruída (5x5) de Si(111). Os átomos de Si da interface foram ocultados.

Os estados 3d do Zn se encontram bem localizados entorno de -8 a -6 eV, abaixo do nível de Fermi. Para a estrutura (7x8)Si/ZnO, a Figura 3.11 apresenta a densidade de estados projetada nos orbitais 3p e 3s do Si, 3d do Zn e 2p do O. Aqui observamos também que logo abaixo do nível de Fermi (-5 a 0 eV) ocorre a interação dos estados 3p do Si com os 2p do O. Os estados Zn-3d estão entorno de -8 e -6 eV abaixo do nível de Fermi e se superpõe também aos estados 2p do O, 3s e 3p do Si.

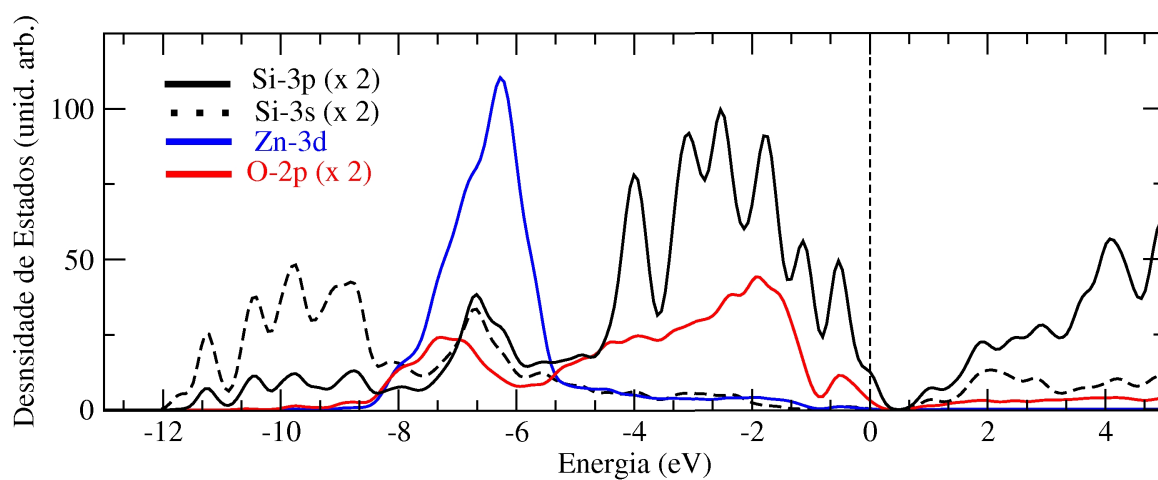


Figura 3.9: Densidade de estados projetada (Si, Zn e O) indicados no corte da célula de 247 átomos da **Monocamada** de ZnO-2D adsorvida em Si(111)(5x5). O nível de Fermi é o zero eV na energia.

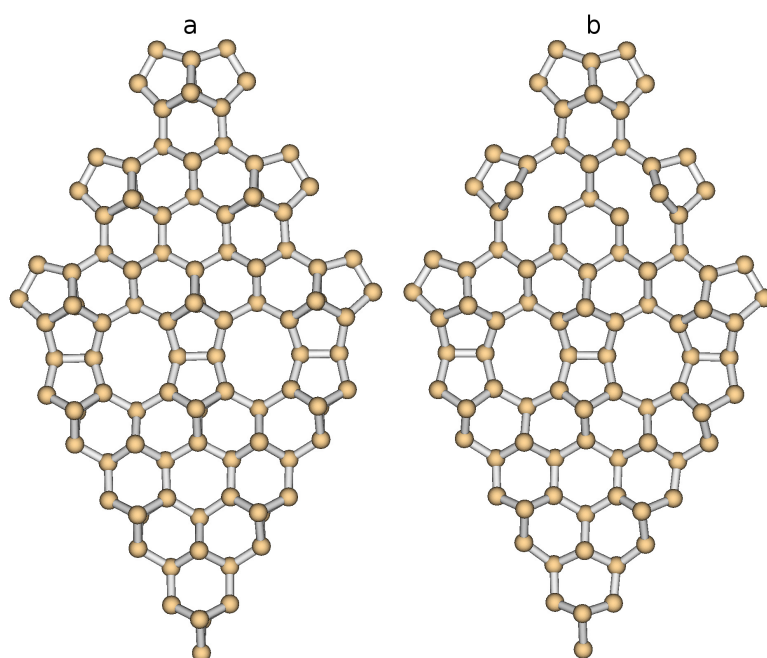


Figura 3.10: Vista superior da superfície reconstruída de Si(111)(7x7) (a), e a mesma vista após a adsorção da monocamada de ZnO. (Os átomos de Zn e O foram omitidos em b).

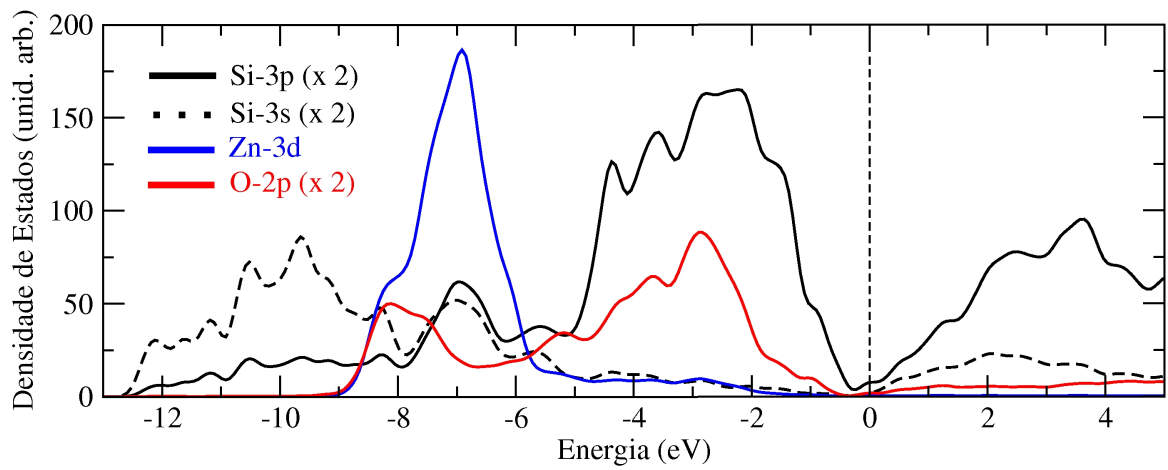


Figura 3.11: Densidade de estados projetada (Si, Zn e O) indicados no corte da célula de 475 átomos da **Monocamada** de ZnO-2D adsorvida em Si(111)(7x7). O nível de Fermi é o zero eV na energia.