

Física do Estado Sólido: Sólidos Condutores



André E. Zaidan
Cristiane Calil Kores
Rebeca Bayeh

Trabalho de Física Moderna II

Professor Marcelo Gameiro Munhoz

7 de maio de 2012



Física do Estado Sólido

- Área da Física Quântica que busca compreender as propriedades mecânicas, térmicas, magnéticas e ópticas da matéria sólida.

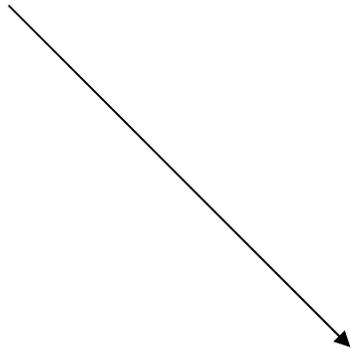
Física do Estado Sólido

- Origem das forças que mantêm os átomos juntos em um sólido

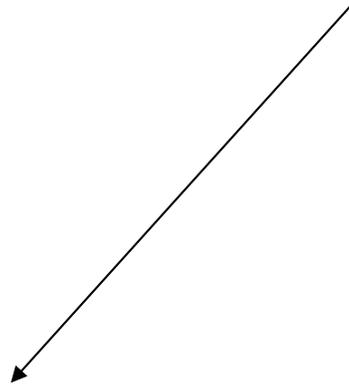
- Níveis de energia dos elétrons num sólido

Física do Estado Sólido

- Origem das forças que mantêm os átomos juntos em um sólido



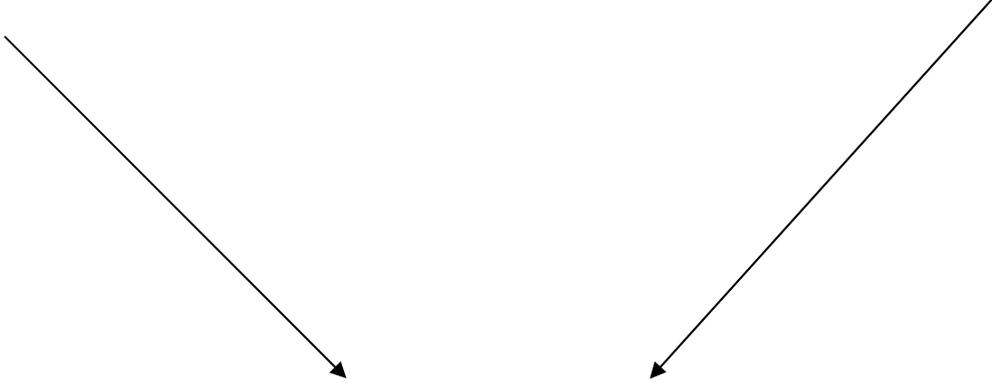
- Níveis de energia dos elétrons num sólido



Física do Estado Sólido

- Origem das forças que mantêm os átomos juntos em um sólido

- Níveis de energia dos elétrons num sólido



Teoria de bandas dos sólidos

TIPOS DE SÓLIDOS

- As moléculas e átomos não podem ser considerados isolados: A força que mantém os átomos ligados formando a molécula é da mesma ordem de grandeza da força que liga as moléculas formando o sólido

TIPOS DE SÓLIDOS

- Sólido cristalino: arranjo regular dos átomos em uma configuração periódica - rede cristalina



TIPOS DE SÓLIDOS

- Sólido cristalino: arranjo regular dos átomos em uma configuração periódica - rede cristalina



- Sólido não cristalino: não há configuração regular em grande escala



TIPOS DE SÓLIDOS

- Sólido cristalino: arranjo regular dos átomos em uma configuração periódica - rede cristalina



- Sólido não cristalino: não há configuração regular em grande escala



TIPOS DE SÓLIDOS

- Sólido molecular

TIPOS DE SÓLIDOS

- Sólido molecular

- Sólido iônico

TIPOS DE SÓLIDOS

- Sólido molecular

- Sólido iônico

- Sólido covalente

TIPOS DE SÓLIDOS

- Sólido molecular

- Sólido iônico

- Sólido covalente

- Sólido metálico

TIPOS DE SÓLIDOS: SÓLIDOS MOLECULARES

TIPOS DE SÓLIDOS: SÓLIDOS MOLECULARES

- Formados por moléculas estáveis, que podem ser consideradas individualmente

TIPOS DE SÓLIDOS: SÓLIDOS MOLECULARES

- Formados por moléculas estáveis, que podem ser consideradas individualmente

- Elétrons emparelhados: não pode haver ligação covalente

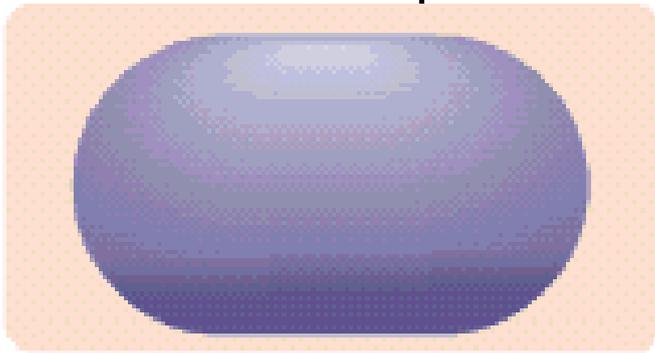
TIPOS DE SÓLIDOS: SÓLIDOS MOLECULARES

- Formados por moléculas estáveis, que podem ser consideradas individualmente

- Elétrons emparelhados: não pode haver ligação covalente
- Ligação pela força de van der Waals, devido ao momento de dipolo elétrico flutuante

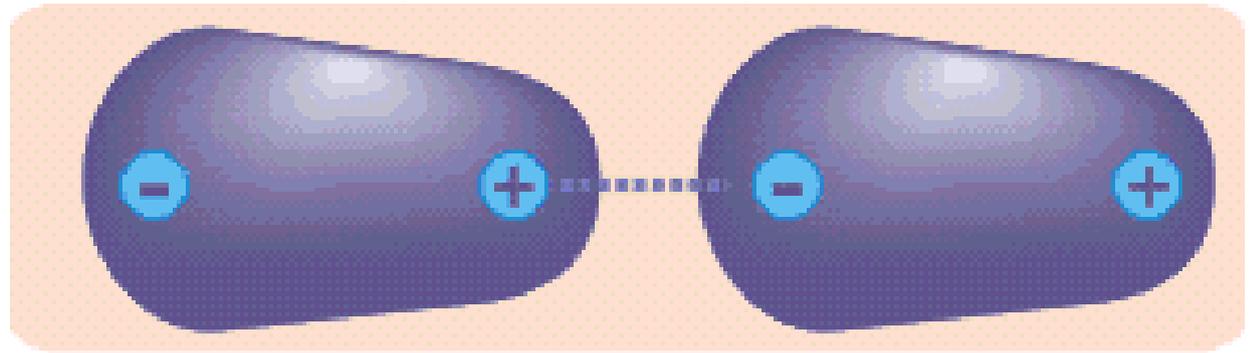
TIPOS DE SÓLIDOS: SÓLIDOS MOLECULARES

Molécula Apolar



Molécula isolada
(estado gasoso)

Moléculas Apolares com dipolos induzidos



Moléculas próximas
(estado sólido ou líquido)

TIPOS DE SÓLIDOS: SÓLIDOS MOLECULARES

- Força de interação da ordem de 10^{-2} eV

TIPOS DE SÓLIDOS: SÓLIDOS MOLECULARES

- Força de interação da ordem de 10^{-2} eV
- A força varia com o inverso da sétima potência da distância intermolecular.

TIPOS DE SÓLIDOS: IÔNICOS

TIPOS DE SÓLIDOS: IÔNICOS

- Formados por íons, em um estrutura regular tridimensional

TIPOS DE SÓLIDOS: IÔNICOS

- Formados por íons, em um estrutura regular tridimensional
- Os íons de dispõem como esferas empilhadas, mas a simetria do cristal dependerá do tipo de arranjo espacial que minimiza a energia

TIPOS DE SÓLIDOS: IÔNICOS

- Formados por íons, em um estrutura regular tridimensional
- Os íons de dispõem como esferas empilhadas, mas a simetria do cristal dependerá do tipo de arranjo espacial que minimiza a energia
- Ligação por força eletrostática

TIPOS DE SÓLIDOS: IÔNICOS

- Vibrações na rede:
energias correspondentes
à radiação no
infravermelho

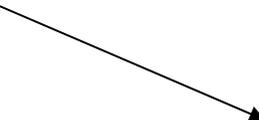
TIPOS DE SÓLIDOS: IÔNICOS

- Vibrações na rede:
energias correspondentes
à radiação no
infravermelho

- Excitação eletrônica:
radiação ultravioleta

TIPOS DE SÓLIDOS: IÔNICOS

- Vibrações na rede:
energias correspondentes
à radiação no
infravermelho



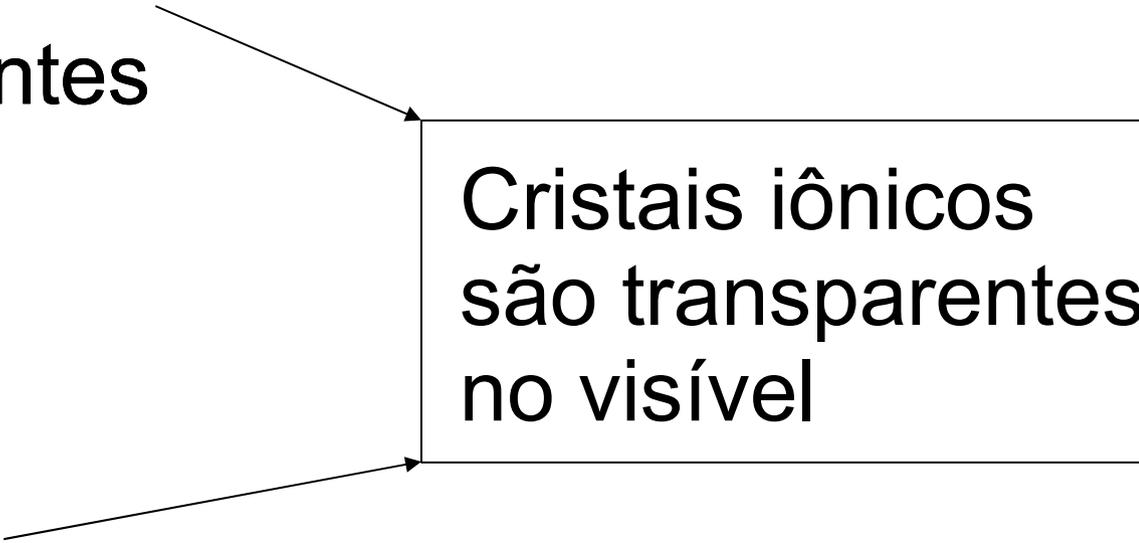
- Excitação eletrônica:
radiação ultravioleta



TIPOS DE SÓLIDOS: IÔNICOS

- Vibrações na rede:
energias correspondentes
à radiação no
infravermelho

- Excitação eletrônica:
radiação ultravioleta



Cristais iônicos
são transparentes
no visível

TIPOS DE SÓLIDOS: COVALENTES

TIPOS DE SÓLIDOS: COVALENTES

- Átomos ligados por elétrons de valência compartilhados, como na ligação covalente que forma moléculas

TIPOS DE SÓLIDOS: METÁLICOS

TIPOS DE SÓLIDOS: METÁLICOS

- A ligação metálica pode ser entendida como um caso limite da ligação covalente, em que os elétrons participam de todos os íons do cristal

TIPOS DE SÓLIDOS: METÁLICOS

- A ligação metálica pode ser entendida como um caso limite da ligação covalente, em que os elétrons participam de todos os íons do cristal
- Se o cristal possui átomos com elétrons fracamente ligados, esses elétrons se tornam livres pela energia disponível com a ligação

TIPOS DE SÓLIDOS: METÁLICOS

- A ligação metálica pode ser entendida como um caso limite da ligação covalente, em que os elétrons participam de todos os íons do cristal
- Se o cristal possui átomos com elétrons fracamente ligados, esses elétrons se tornam livres pela energia disponível com a ligação
- Gás de elétrons: os íons positivos estão imersos, e o gás exerce forças atrativas sobre cada íon, mantendo a ligação

TIPOS DE SÓLIDOS: METÁLICOS

- Há muitos estados eletrônicos desocupados, pois não há elétrons suficientes para preencher a camada de valência de todos os átomos.

TIPOS DE SÓLIDOS: METÁLICOS

- Há muitos estados eletrônicos desocupados, pois não há elétrons suficientes para preencher a camada de valência de todos os átomos.
- O sólido metálico apresenta uma rede regular de íons positivos esfericamente simétricos

TIPOS DE SÓLIDOS: METÁLICOS

- Há muitos estados eletrônicos desocupados, pois não há elétrons suficientes para preencher a camada de valência de todos os átomos.
- O sólido metálico apresenta uma rede regular de íons positivos esfericamente simétricos
- Absorvem facilmente a energia da radiação incidente → são opacos

O tipo de ligação presente em um sólido particular é determinado experimentalmente:

- Difração de raios X
- Propriedades dielétricas
- Emissões ópticas, etc.

TEORIA DE BANDAS DOS SÓLIDOS

TEORIA DE BANDAS DOS SÓLIDOS

Podemos olhar a ligação metálica como sendo uma ligação covalente, só que em vez de ser uma ligação entre dois átomos apenas, temos a ligação entre todos o átomo do sólido.

TEORIA DE BANDAS DOS SÓLIDOS

Podemos olhar a ligação metálica como sendo uma ligação covalente, só que em vez de ser uma ligação entre dois átomos apenas, temos a ligação entre todos o átomo do sólido.



TEORIA DE BANDAS DOS SÓLIDOS

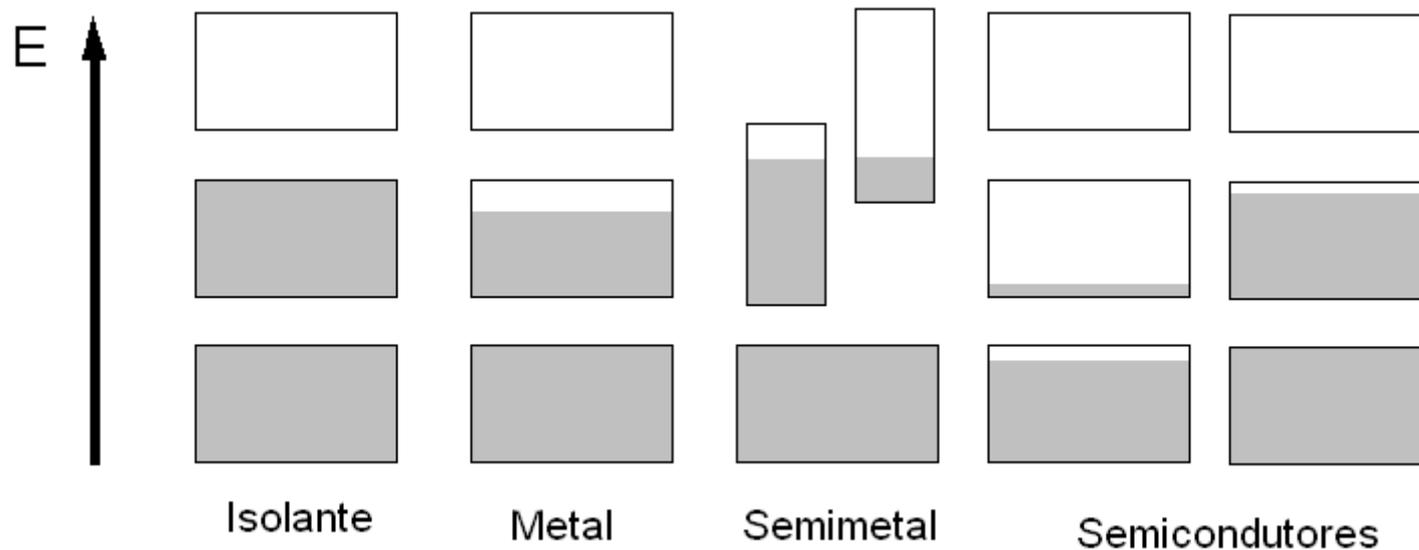
Podemos olhar a ligação metálica como sendo uma ligação covalente, só que em vez de ser uma ligação entre dois átomos apenas, temos a ligação entre todos o átomo do sólido.



Quando tratamos de sólidos estamos considerando uma quantidade de átomos de ordem de grandeza superior a 10^{20} . Os elétrons em um mesmo estado quântico não ficam mais restritos a apenas alguns níveis discretos de energia, mas a uma quantidade tão grande de níveis de energia que estes são praticamente contínuos.

TEORIA DE BANDAS DOS SÓLIDOS

A representação das bandas pelos níveis de energia



Agora podemos explicar a diferença entre metais, isolantes, semimetais e semicondutores. A existência de valores positivos para o coeficiente de Hall. Fenômenos de transporte, em especial magnetotransporte. Entre outras.

TEORIA DE BANDAS DOS SÓLIDOS

Mas qual a origem das bandas proibidas?

TEORIA DE BANDAS DOS SÓLIDOS

Mas qual a origem das bandas proibidas?

Sabemos que cristais são invariantes em relação a translações que são combinações lineares inteiras dos eixos do cristal (ver [4]). Vamos chamar de \mathbf{T} translações deste tipo e seja $n = n(\mathbf{r})$ o número concentração de elétrons em \mathbf{r} . Temos então que para todo \mathbf{r} e qualquer \mathbf{T} devemos ter $n(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = n(\mathbf{r})$

Isso sugere uma expansão de $n(r)$ em série de Fourier, para o caso unidimensional temos

$$n(x) = \sum_p n_p \exp(i2\pi px / a)$$

Para a versão tridimensional $n(\mathbf{r})$ podemos fazer a seguinte expansão

$$n(\mathbf{r}) = \sum_G n_G \exp(i\mathbf{G} \cdot \mathbf{r})$$

Onde G é uma coleção de vetores \mathbf{G} tais que a condição $n(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = n(\mathbf{r})$ seja respeitada

TEORIA DE BANDAS DOS SÓLIDOS

A solução foi dada pelo francês Léon Brillouin, ele definiu uma célula primitiva de Vigner-Seitz na rede recíproca (ver [4] pg 27) como sendo zonas de Brillouin. A partir dessas zonas podemos chegar a condições de difração:

$$\vec{k} \cdot \left(\frac{1}{2} \vec{G} \right) = \left(\frac{1}{2} G \right)^2$$

No caso unidimensional temos $|k| = G/2$ e $G = 2\pi n/a$, onde n é um número inteiro e a é a constante da rede.

Quando a condição de reflexão de Bragg é satisfeita temos ondas estacionárias para $n = 1$ temos as seguintes ondas estacionárias

$$\psi (+) = \exp(i\pi x / a) + \exp(-i\pi x / a) = 2 \cos(\pi x / a)$$

$$\psi (-) = \exp(i\pi x / a) - \exp(-i\pi x / a) = 2i \sin(\pi x / a)$$

TEORIA DE BANDAS DOS SÓLIDOS

Temos assim duas distribuições de probabilidade $\rho (+)$ e $\rho (-)$, se calcularmos os valores médios de energia potencial desse estados conseguimos mostrar que a energia potencial média de $\rho (+)$ é menor que a energia potencial média de $\rho (-)$, a diferença da energia entre esses dois estados é uma região de energia proibida formando assim a banda proibida.

Podemos fazer uma estimativa sobre a largura da banda. Vamos supor que um elétron tenha energia $U(x)=U\cos(2\pi x/a)$ as funções de onda normalizadas para a primeira zona de Brilluoin são $\psi(+)=2^{1/2}\cos(\pi x/a)$ e $\psi(-)=2^{1/2}\sin(\pi x/a)$.

$$\begin{aligned} E &= \int_0^1 U(x) \left(|\psi(+)|^2 - |\psi(-)|^2 \right) dx = \\ &= 2 \int_0^1 U \cos(2\pi x/a) \left(\cos^2(\pi x/a) - \sin^2(\pi x/a) \right) dx = U \end{aligned}$$

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

A abordagem clássica para elétrons de condução traz resultados úteis.

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

- Agitação térmica de íons em torno de sua posição de equilíbrio na rede cristalina
- Íons de impurezas na rede

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

- Agitação térmica de íons em torno de sua posição de equilíbrio na rede cristalina
- Íons de impurezas na rede



CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

- Agitação térmica de íons em torno de sua posição de equilíbrio na rede cristalina
- Íons de impurezas na rede



Elétrons colidem com essas imperfeições

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

Colisões dos elétrons com imperfeições

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

Colisões dos elétrons com imperfeições



CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

Colisões dos elétrons com imperfeições



mudança de direção e velocidade

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

Colisões dos elétrons com imperfeições



mudança de direção e velocidade



CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

Colisões dos elétrons com imperfeições



mudança de direção e velocidade



movimento aleatório

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

Abordagem clássica: tratar esses elétrons em movimento como um gás

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

Ausência de campo elétrico: direções ditadas
"ao acaso"

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

Ausência de campo elétrico: direções ditadas "ao acaso"

Campo elétrico aplicado ao metal: em média, elétrons movem-se lentamente em direção oposta ao campo

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

Ausência de campo elétrico: direções ditadas "ao acaso"

Campo elétrico aplicado ao metal: em média, elétrons movem-se lentamente em direção oposta ao campo



CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

Ausência de campo elétrico: direções ditadas
"ao acaso"

Campo elétrico aplicado ao metal: em média, elétrons
movem-se lentamente em direção oposta ao campo



"velocidade de arrastamento"

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

A velocidade de arrastamento é muito inferior à "velocidade instantânea real" do movimento aleatório.

Ex: Cobre

velocidade de deslocamento ~ 0.0001 m/s

velocidade real ~ 10000 m/s

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

- Descrevemos a frequência de colisão elétrons-imperfeições da rede através do "livre caminho médio" (distância média que um elétron percorre entre uma colisão e outra)

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

- A presença de um campo elétrico implicará da existência de uma força associada a ele. Essa força produzirá uma aceleração nos elétrons

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

- Utilizando as equações de mecânica clássica para cada elétron individualmente, e utilizando as equações de resistividade e condutividade, teremos um modelo para condução de elétrons em um metal.

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

Medidas experimentais

CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

Medidas experimentais



CONDUÇÃO ELÉTRICA EM METAIS

Medidas experimentais



Efeito Hall

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Eisberg, R. & Resnick, R. – “Física Quântica – Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas”; Elsevier, 29ª tiragem.
- [2] Wannier, G. H. – “Elements of Solid State Theory”; Cambridge University Press.
- [3] Ziman, J. M. – “Principles of the Theory of Solids”; Cambridge University Press, 2nd edition.
- [4] Kittel, C. – “Introdução à Física do Estado Sólido”; LTC 8ª ed.