

Estrutura Eletrônica em Sólidos



LIGAÇÃO METÁLICA

Algumas Propriedades dos Metais:

- ❑ Condutividade Elétrica**
- ❑ Condutividade Térmica**
- ❑ Brilho**
- ❑ Maleabilidade**



**Mobilidade dos elétrons de valência
na estrutura.**

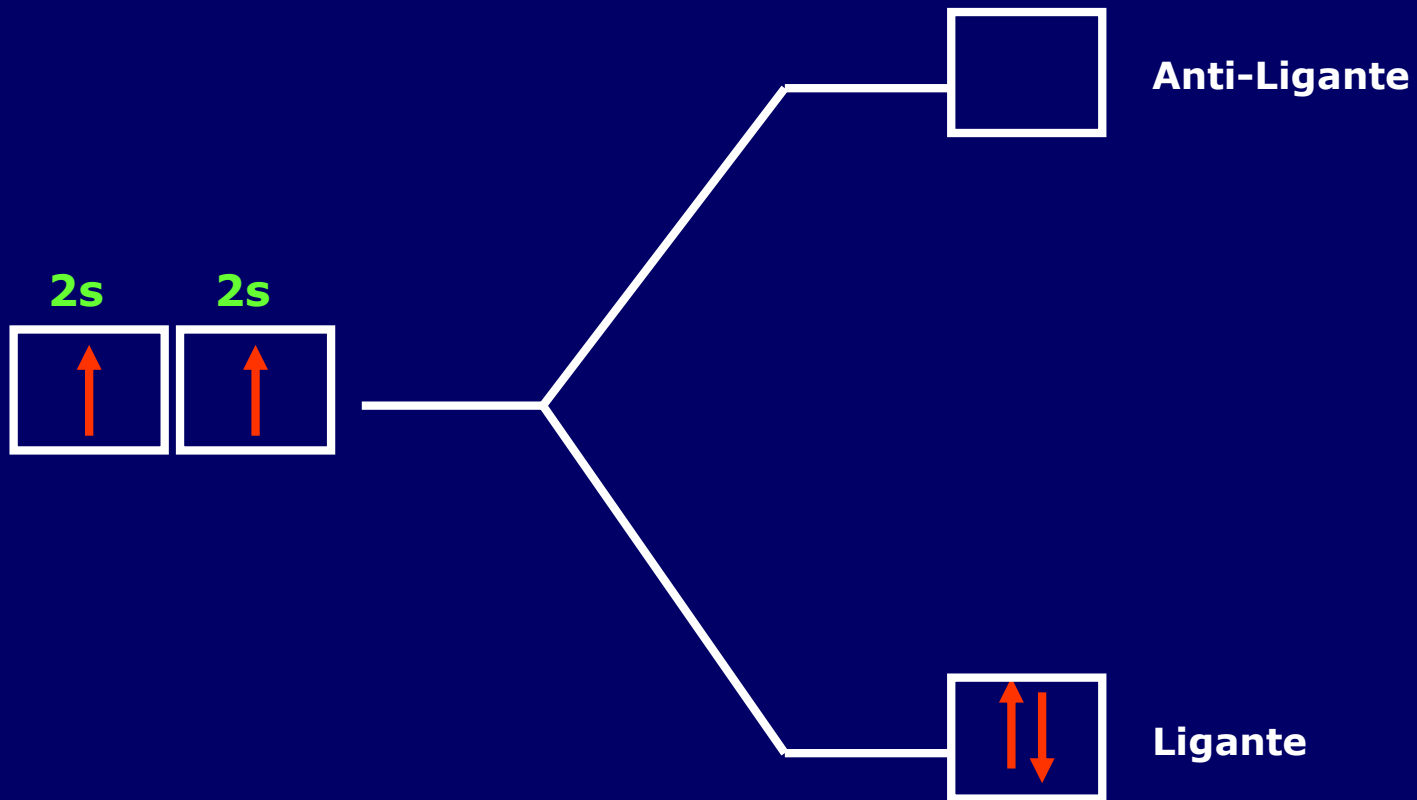
Condutividade no Estado Sólido

Substância	Tipo Ligação	Condutividade (ohm ⁻¹ . m ⁻¹)
Ag	Metálica	6,3x10 ⁷
Na	Metálica	6,0x10 ⁷
NaCl	Iônica	10 ⁻⁹
Quartzo	Covalente	10 ⁻¹⁶
Diamante	Covalente	10 ⁻¹⁶

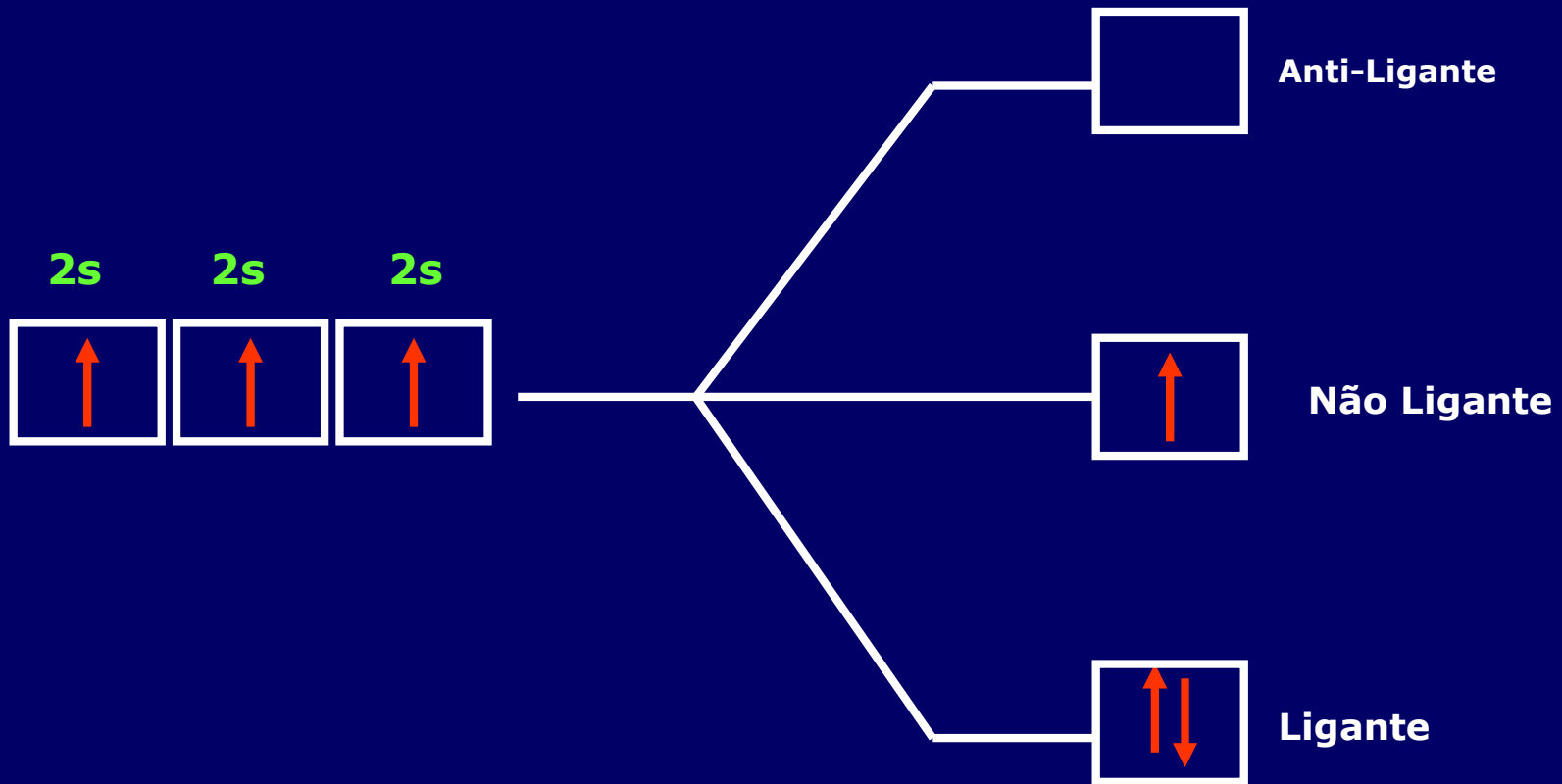
Condutividade: σ
ohm⁻¹.m⁻¹ = S.m⁻¹
S= Siemens

Teoria de Bandas: Formação de Orbitais Moleculares envolvendo todos os orbitais atômicos dos átomos no sólido.

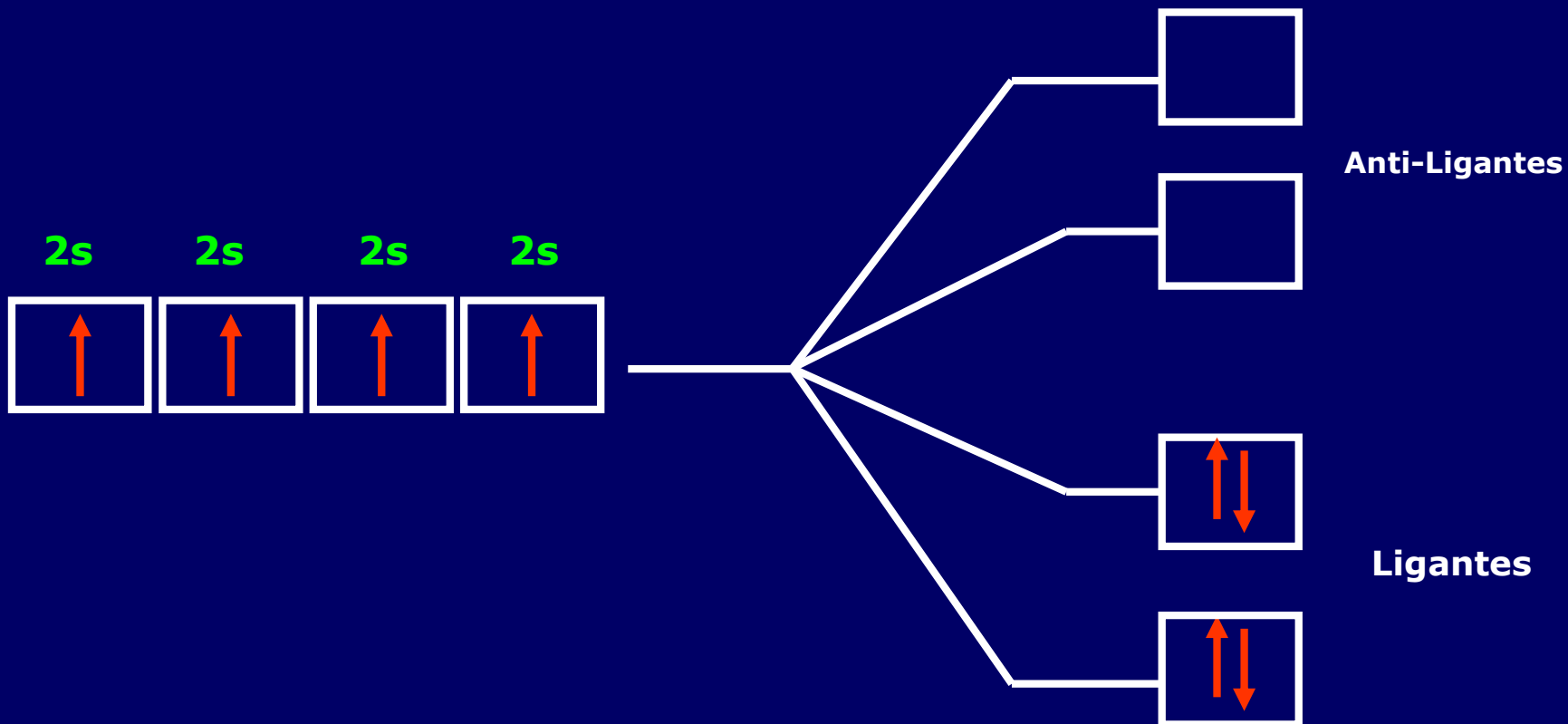
a) Li_2



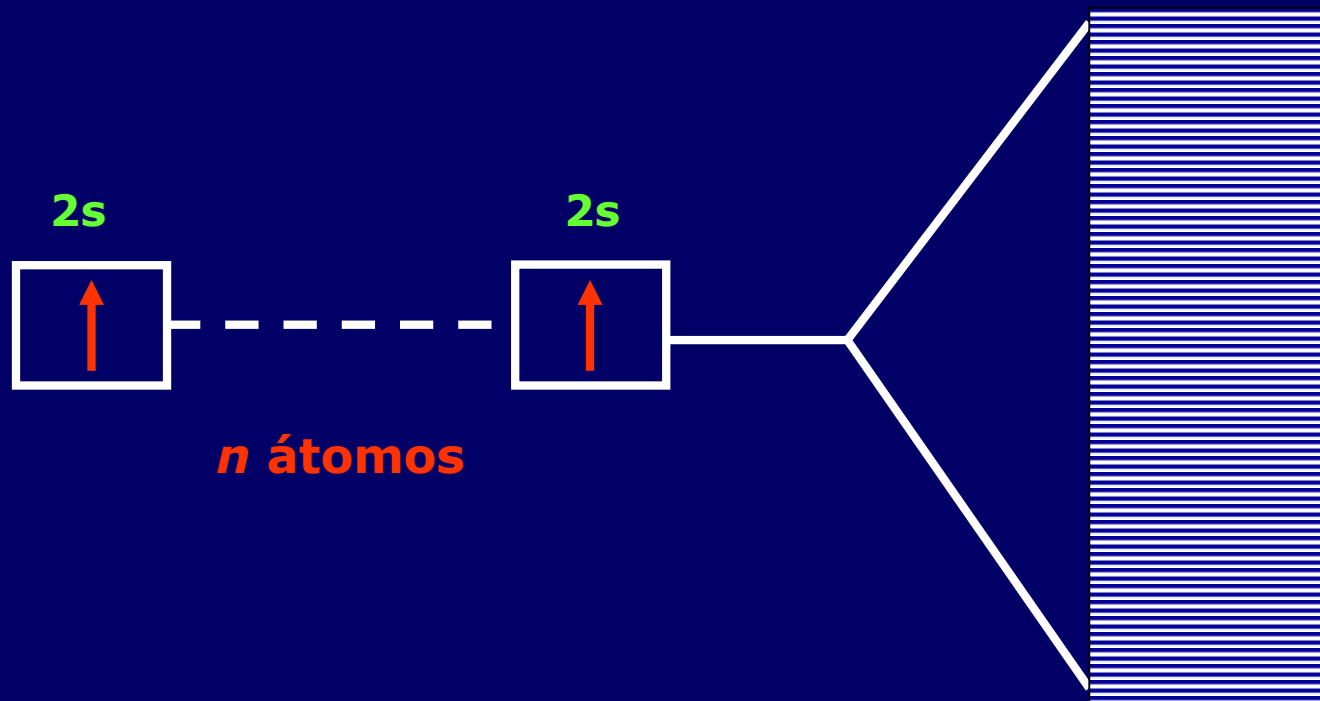
b) Li_3



c) Li_4



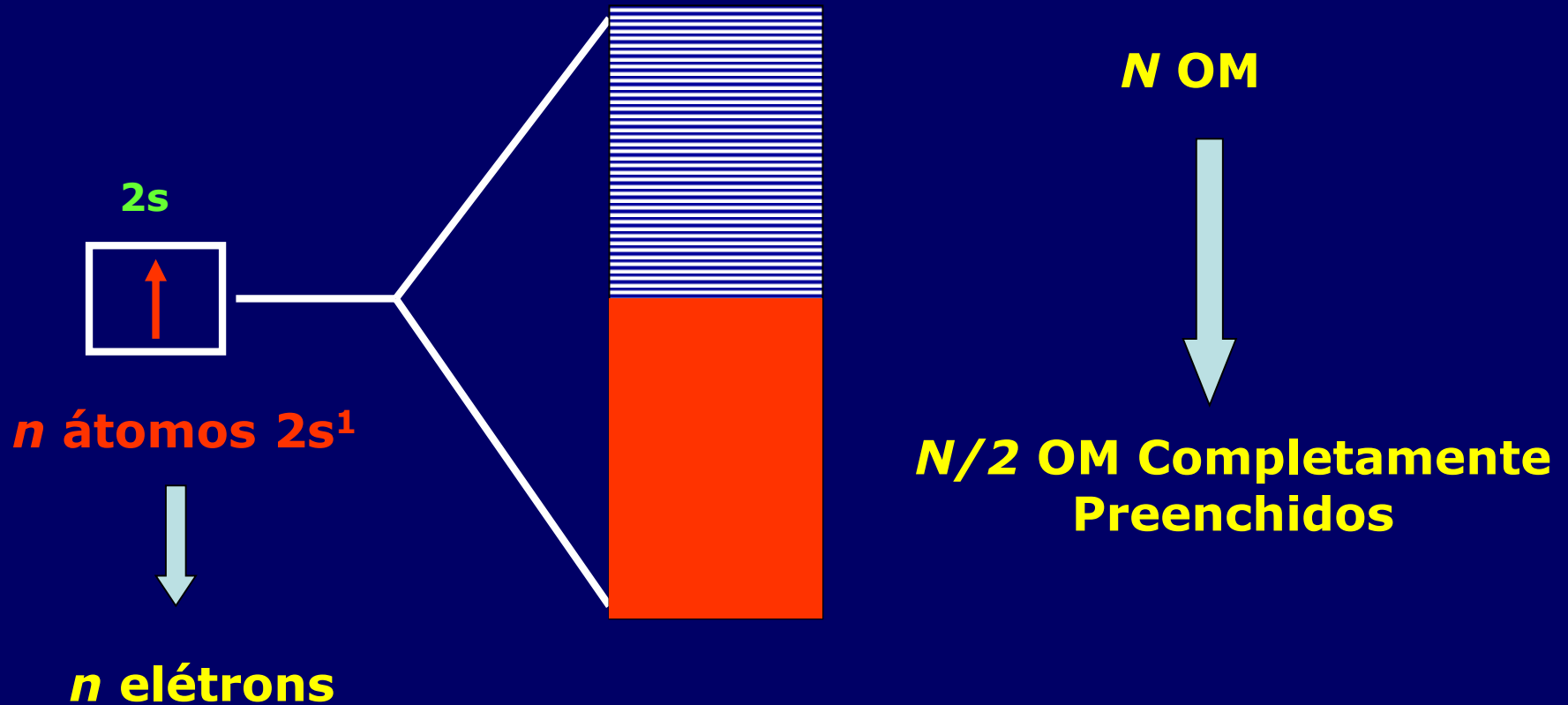
d) Li_n

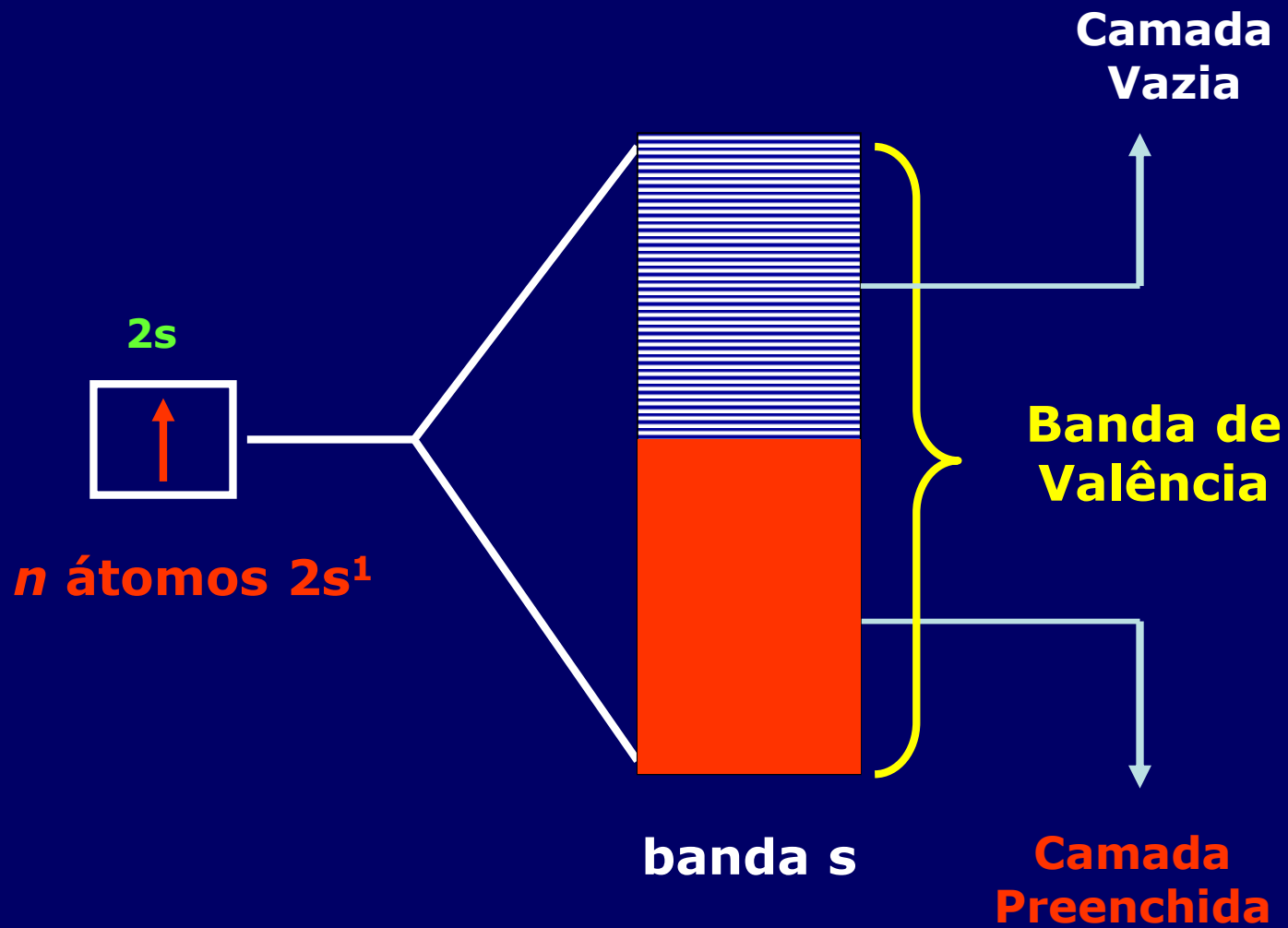


Banda de Energia: Conjunto de OM com pequenas diferenças de energia entre orbitais (níveis) sucessivos.

Condução Eletrônica e Distribuição Eletrônica :

a) Orbitais Atômicos Semi-Preenchidos

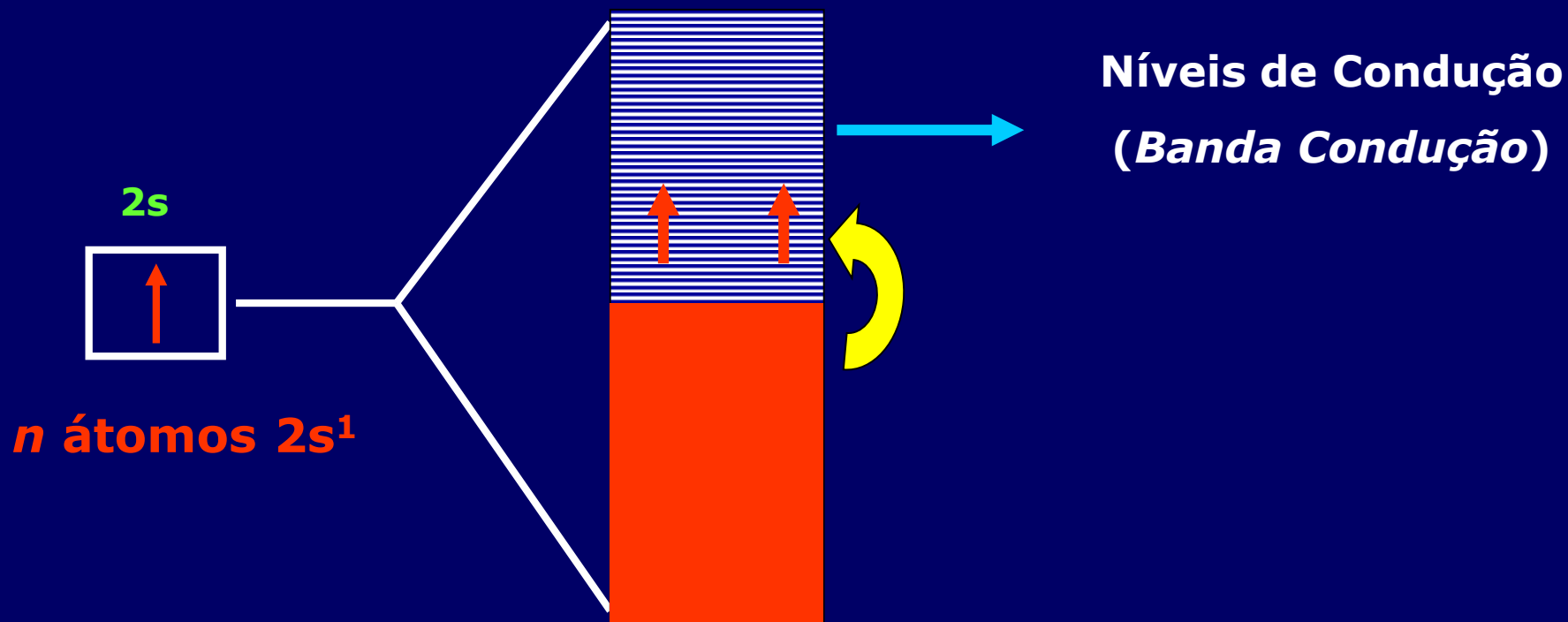




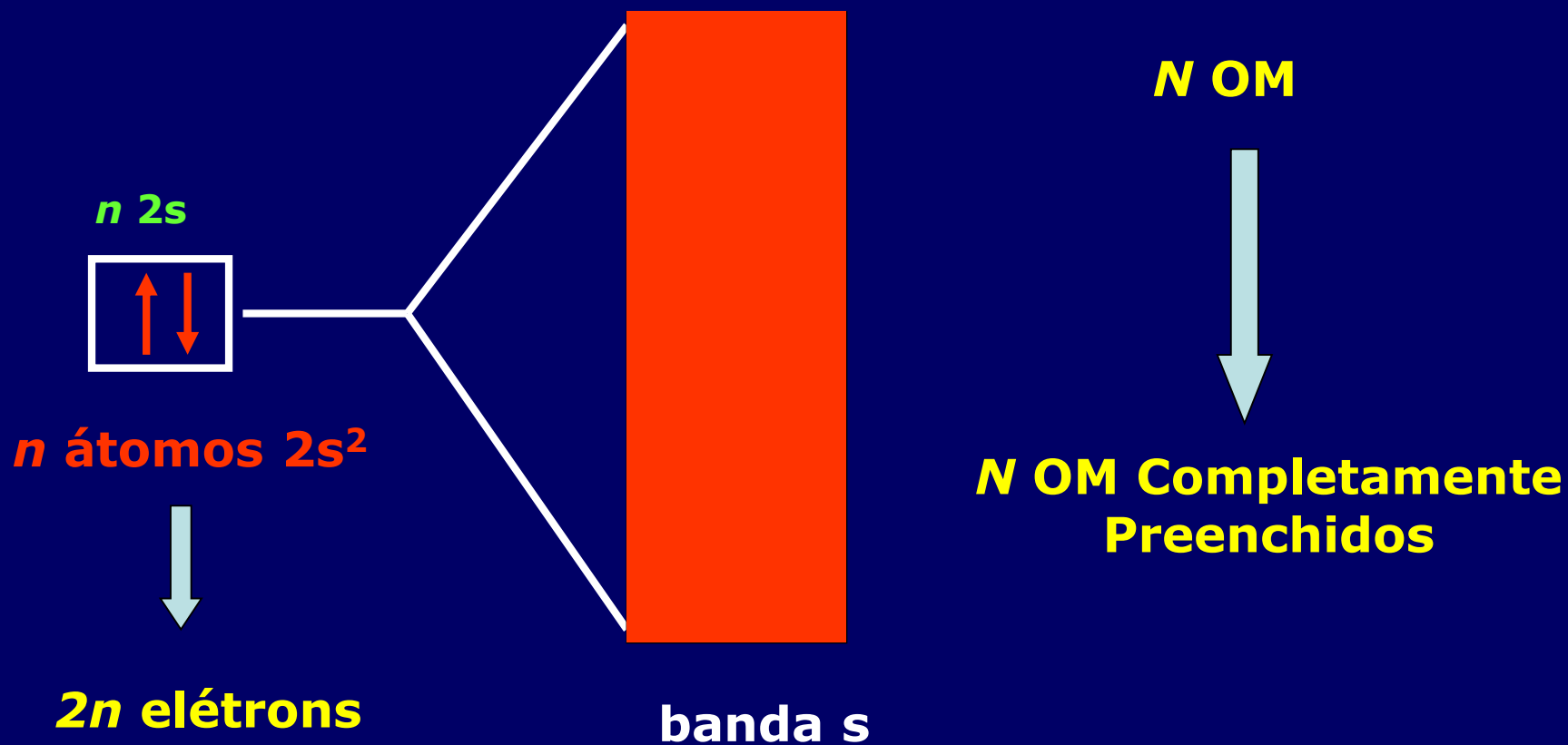
Estímulo Externo



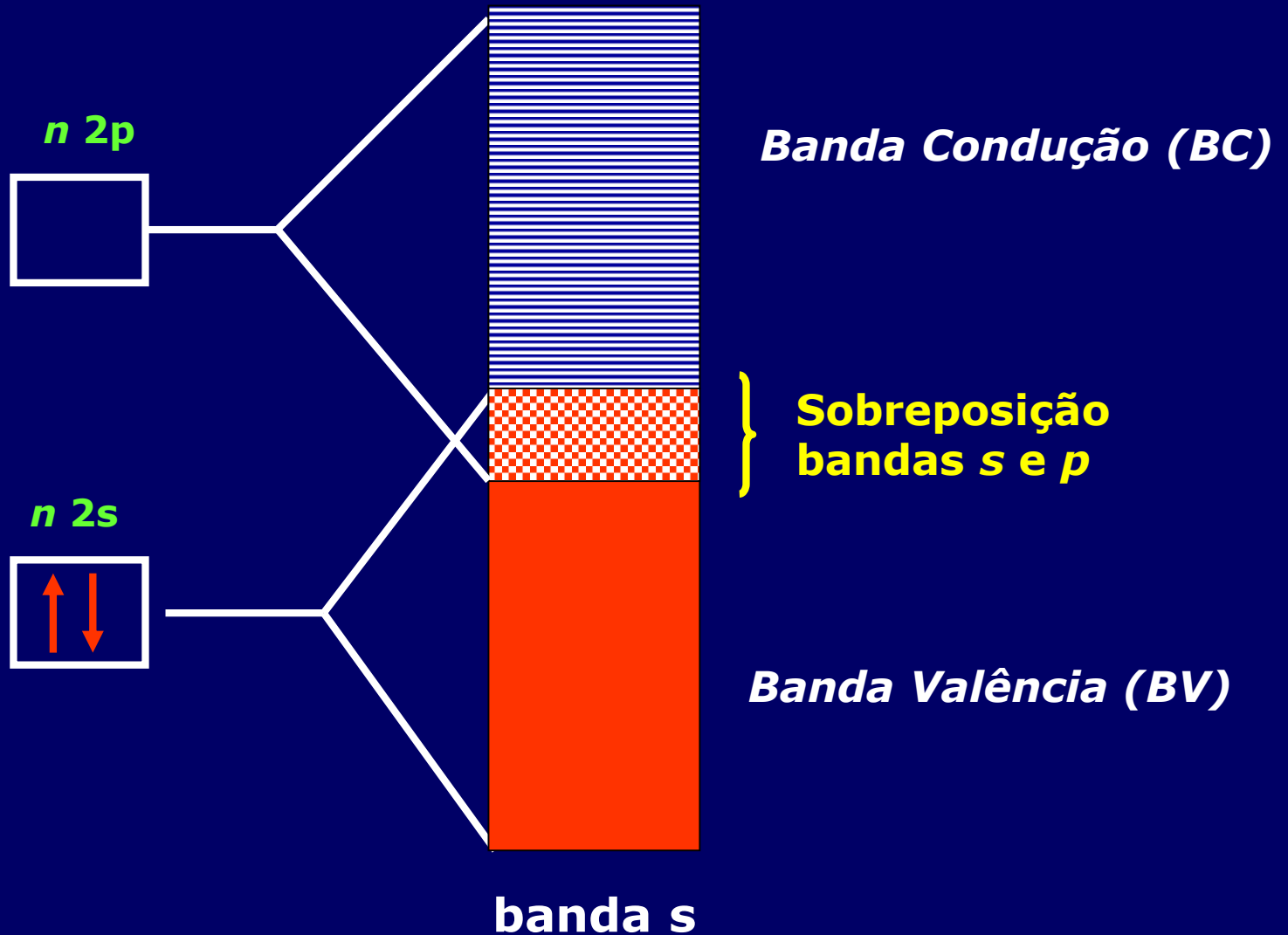
Promoção de elétrons para a camada vazia



b) Orbitais Atômicos Preenchidos, Ex: Be



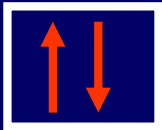
banda p (vazia)



$n 2p$



$n 2s$



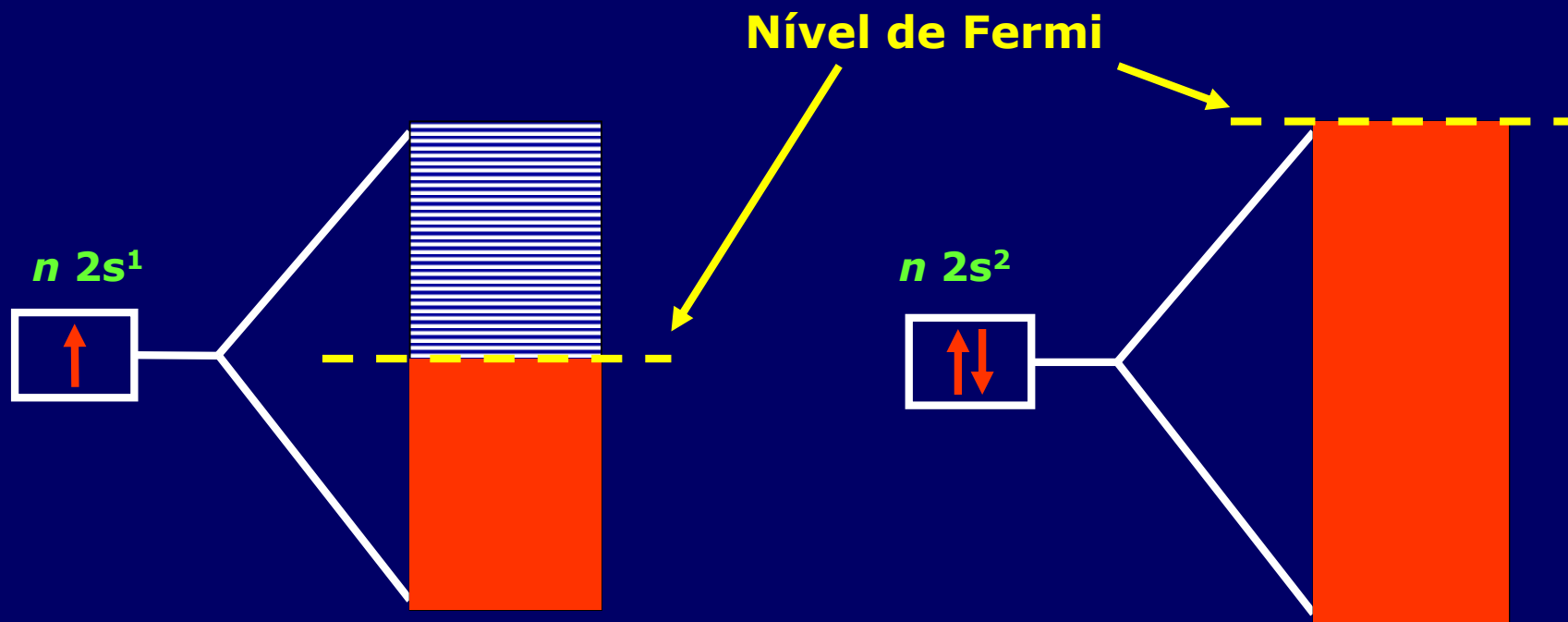
Banda Condução (BC)

**Sobreposição
bandas s e p**

Banda Valência (BV)

banda s

Níveis de Fermi: Níveis eletrônicos de maior energia ocupados em um sólido à $T = 0K$



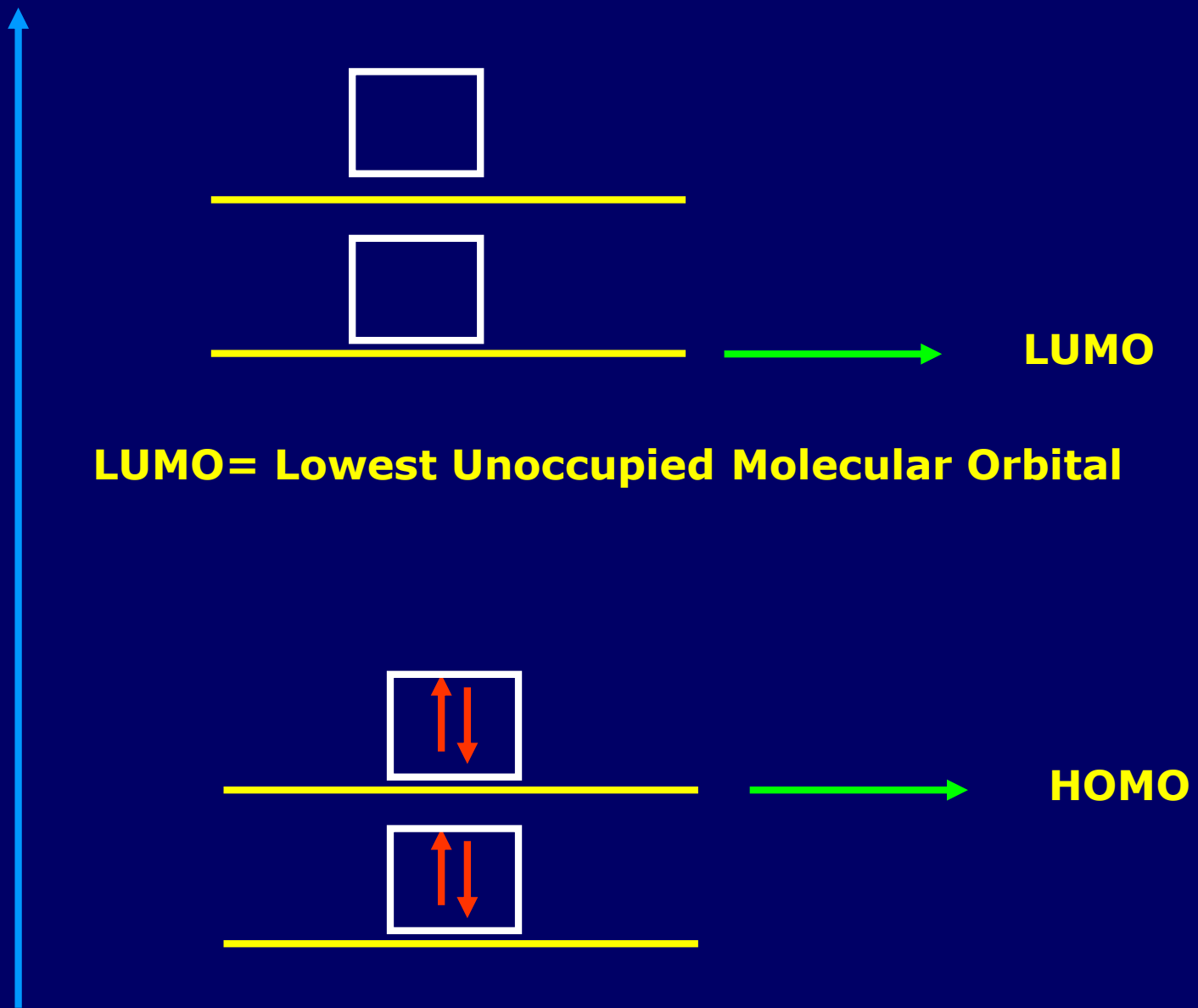
Nível de Fermi



HOMO

HOMO = Highest Occupied Molecular Orbital

Energia



LUMO = Lowest Unoccupied Molecular Orbital

LUMO

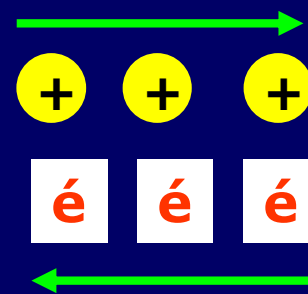
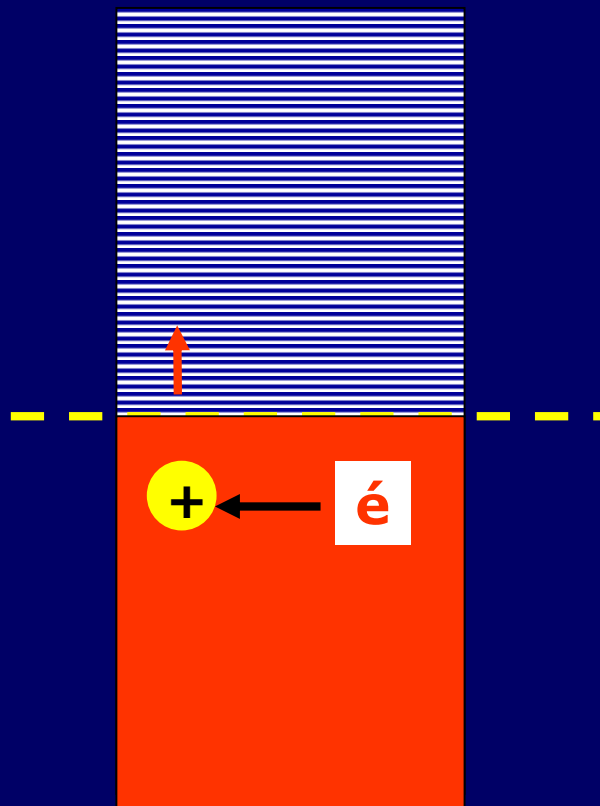
HOMO

Processo de Condução Elétrica em Sólidos Metálicos

Formação de lacunas (*buracos positivos*)

$T > 0 \text{ K}$

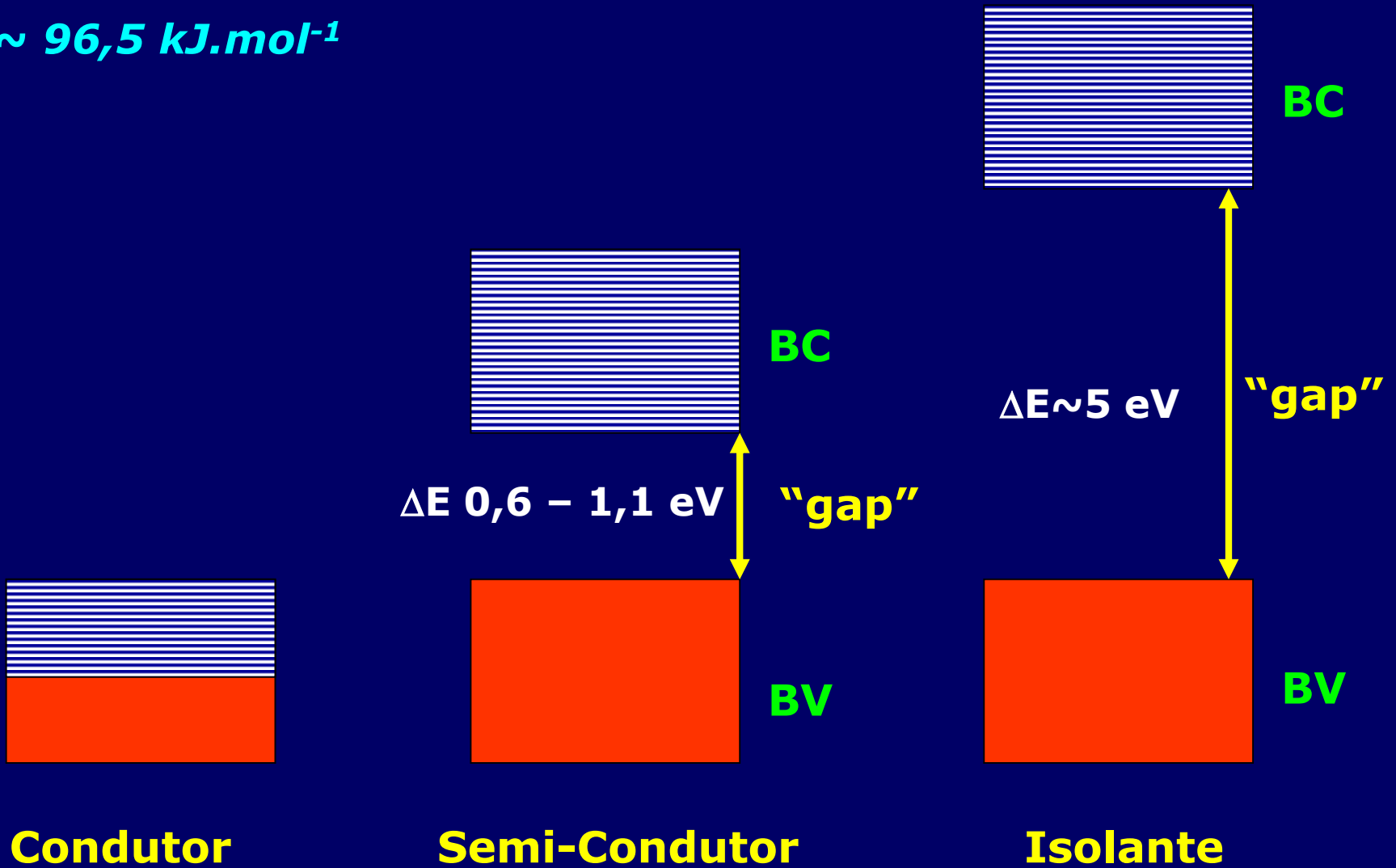
Nível de Fermi



Movimentação de
elétrons e lacunas

Condutores, Semi-Condutores, Isolantes

$1\text{eV} \sim 96,5 \text{ kJ.mol}^{-1}$



TEMPERATURA E CONDUTIVIDADE

A) Condutores:

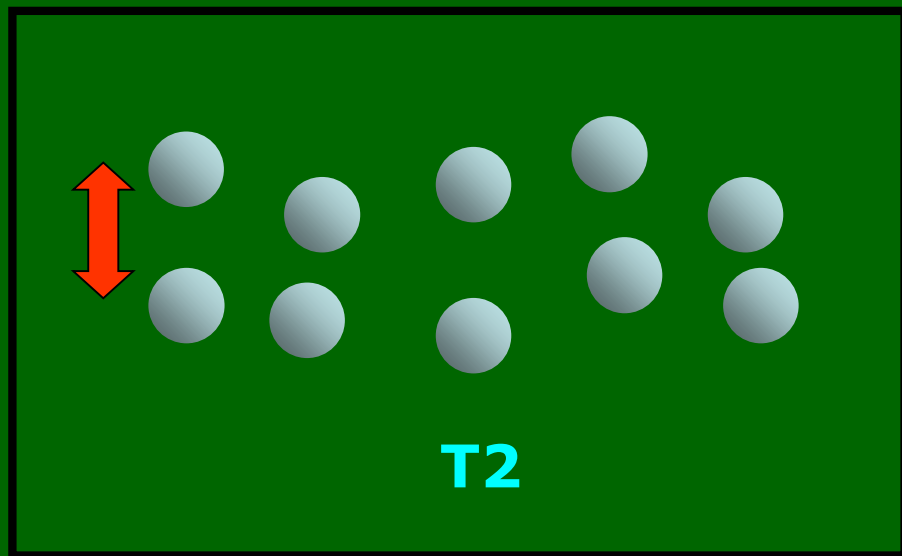
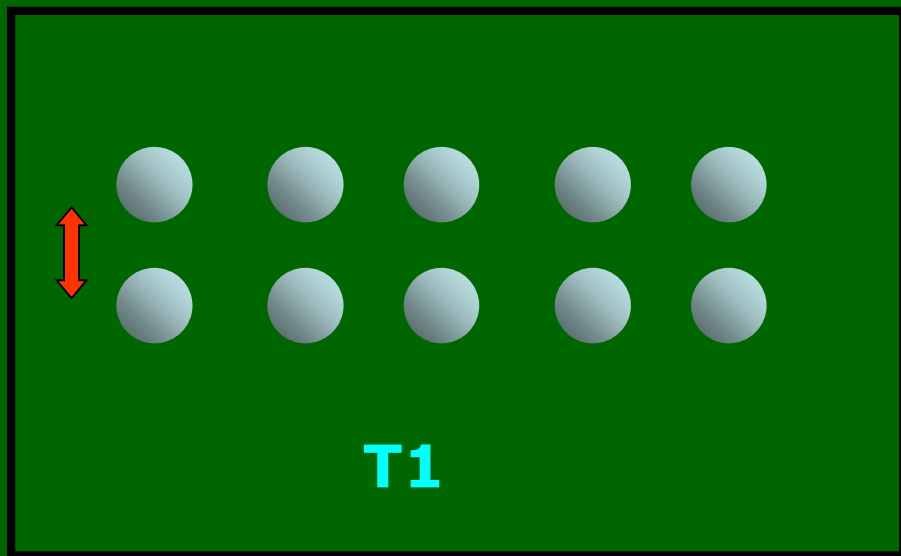


Temperatura

Condutividade



$>T \rightarrow >$ vibrações atômicas



$T2 > T1$

TEMPERATURA E CONDUTIVIDADE

B) Semi-Condutores:



C) Isolantes: Quando condutividade é mensurável



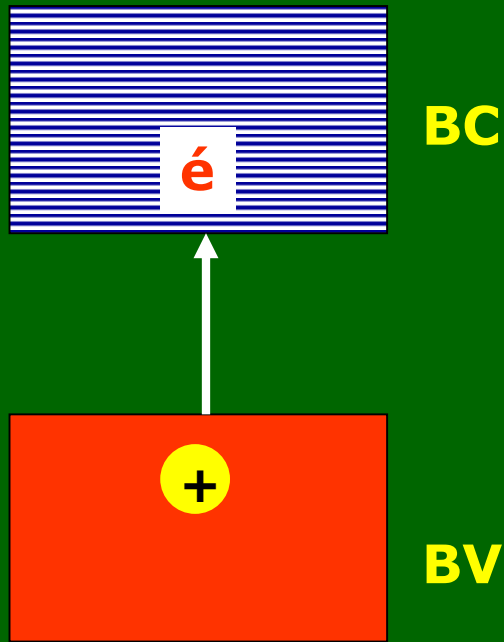
Processo Excitação Térmica:

BV → BC

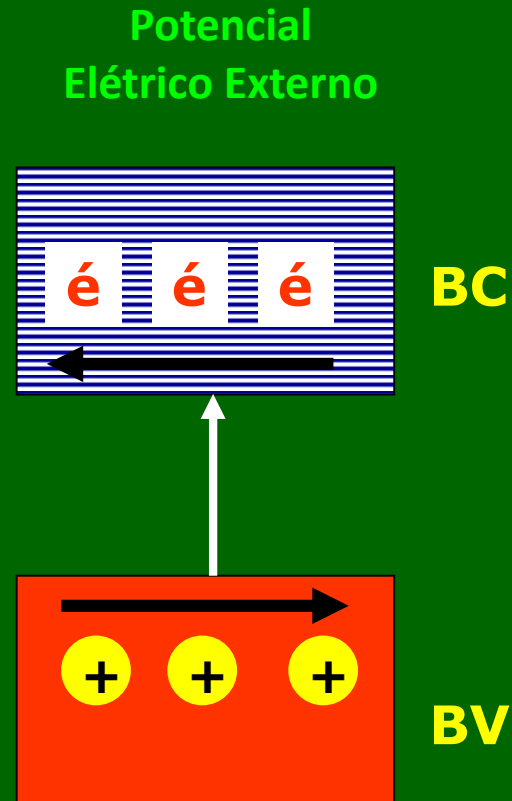
The diagram shows the text 'BV' in yellow, followed by a green arrow pointing to the right, followed by the text 'BC' in red.

SEMI-CONDUTORES INTRÍNSECOS

Ex: Si e Ge



Excitação Térmica
ou Luminosa

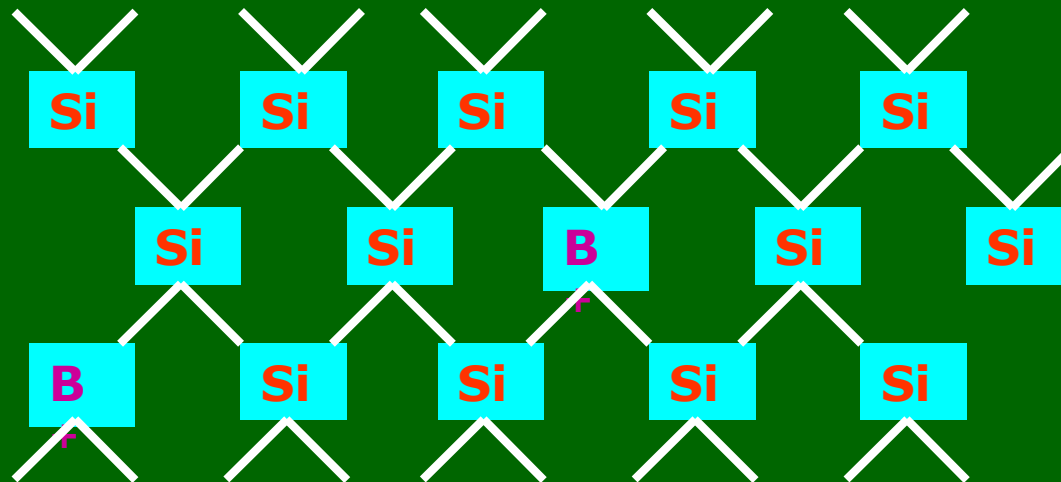


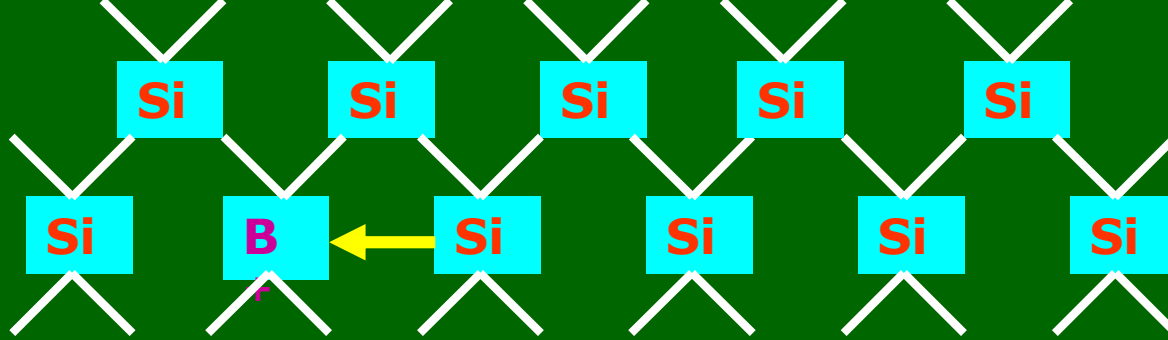
Fluxo de elétrons

SEMI-CONDUTORES EXTRÍNSECOS

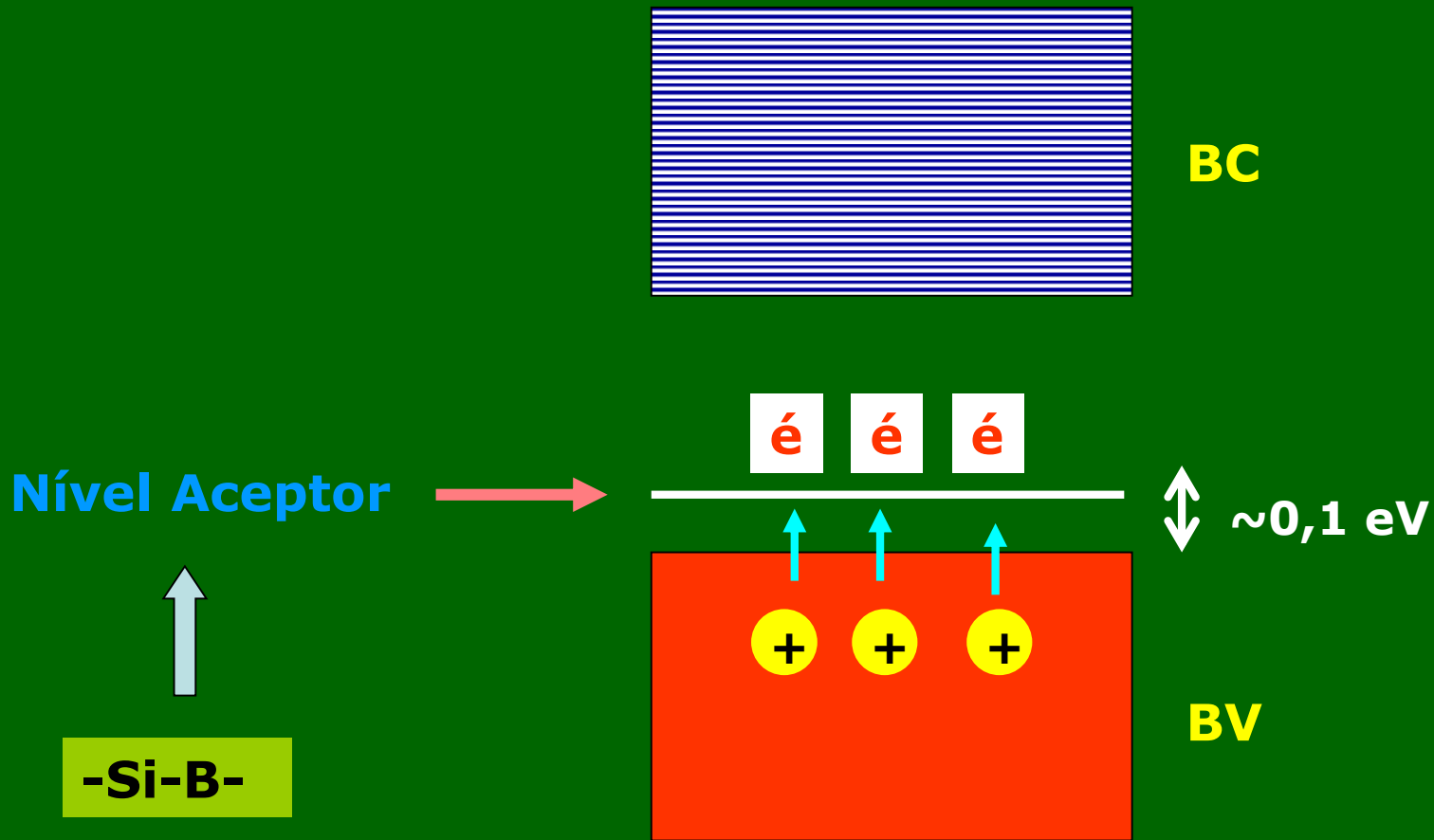
i- Tipo p (positivo)

Dopagem com elementos deficientes de elétrons em relação à matriz





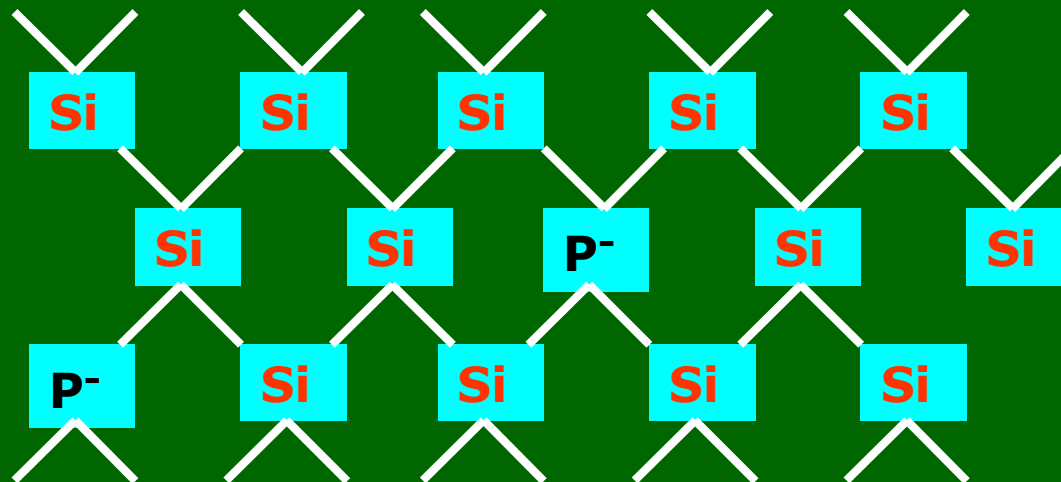
i- Tipo p (positivo)



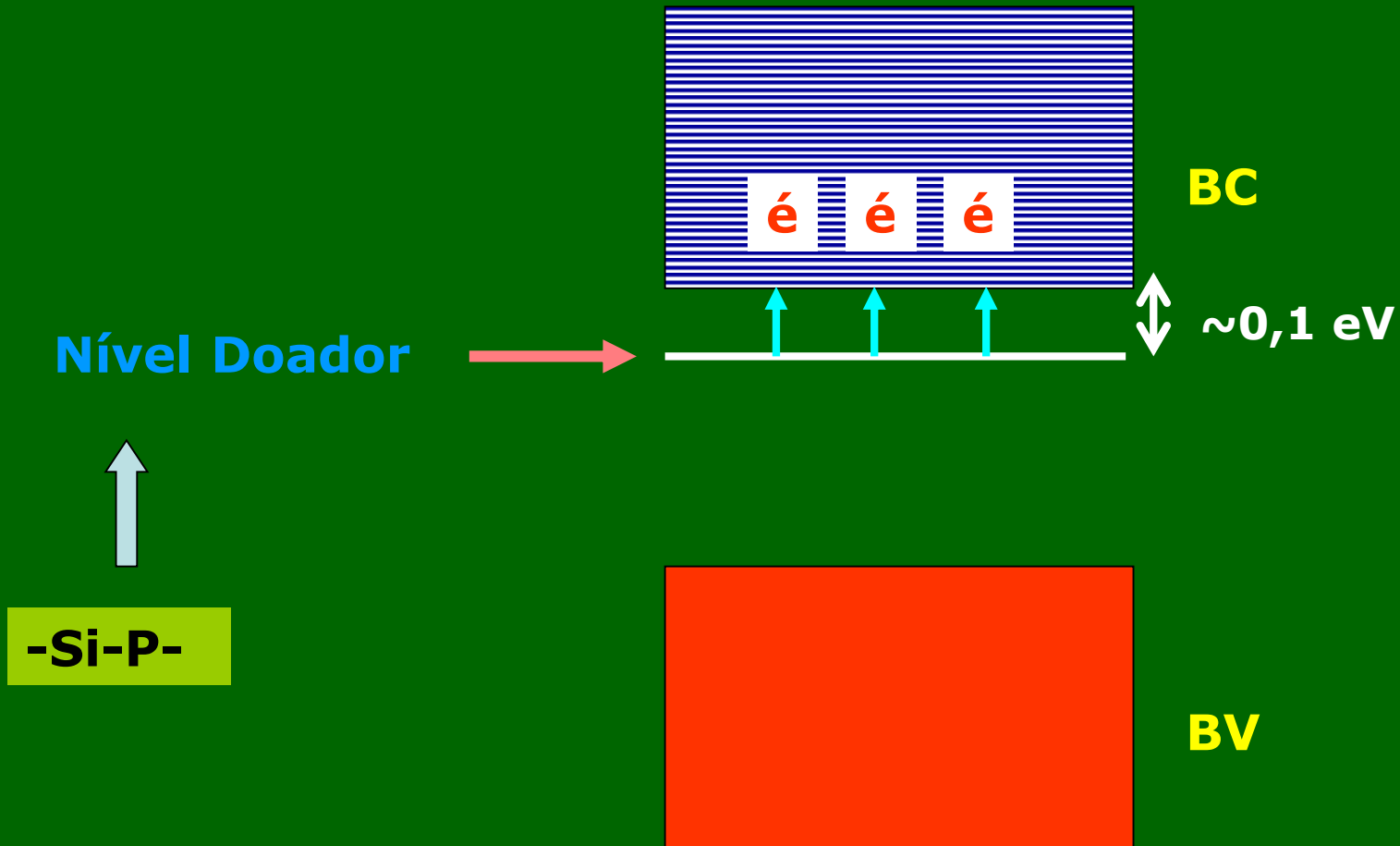
SEMI-CONDUTORES EXTRÍNSECOS

ii- Tipo n (negativo)

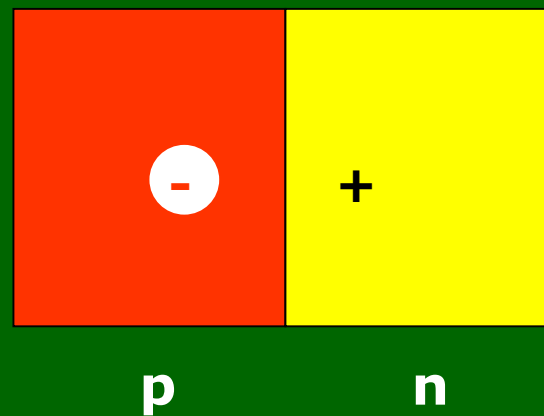
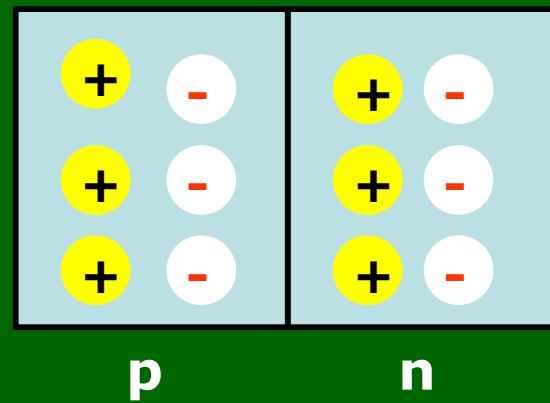
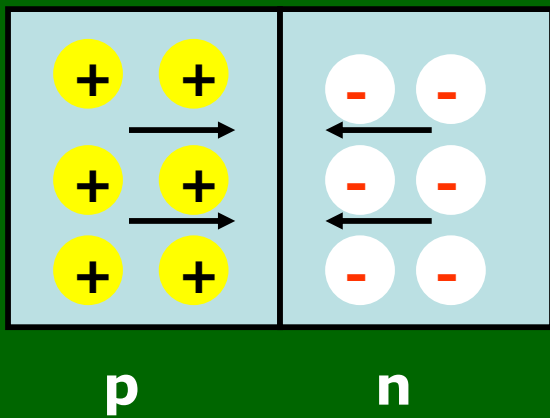
Dopagem com elementos com mais elétrons em relação à matriz



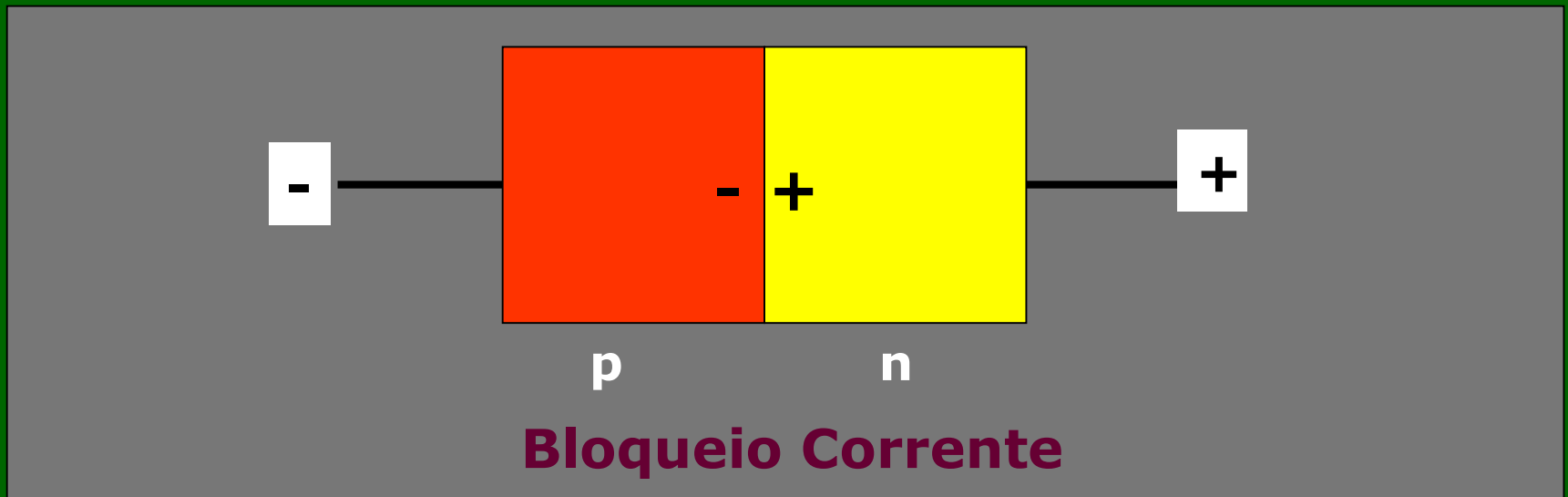
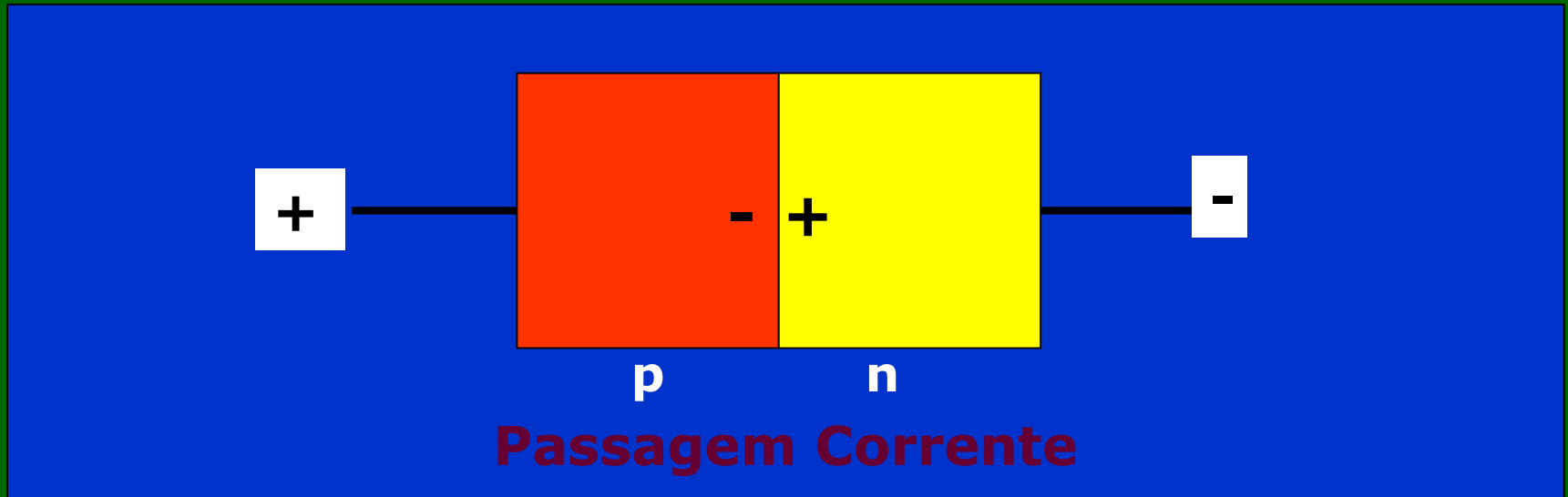
ii- Tipo n (negativo)



JUNÇÕES p-n



Conexão com um Gerador Externo de Corrente



Outros sistemas que apresentam propriedades semi-condutoras

Sistemas AB

□ Média dos elétrons de valência = 4

□ Sem grande diferença de eletronegatividade entre A e B

Ex:

□ GaAs

□ InP

□ InSb

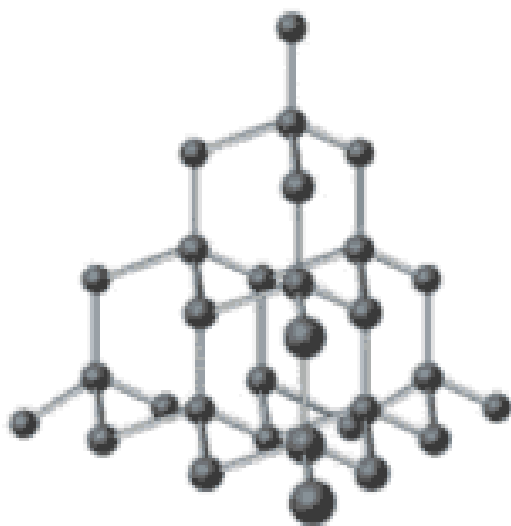
Alótropos de Carbono



Grafite x Diamante

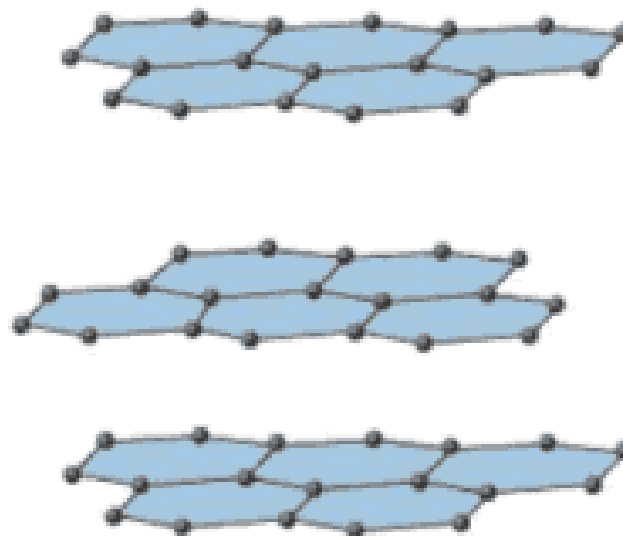
Diamante: Isolante

Grafite: Semi-Conductor/Conductor



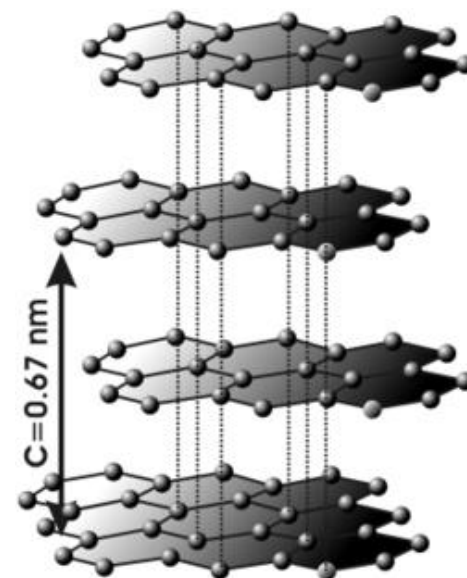
(a)

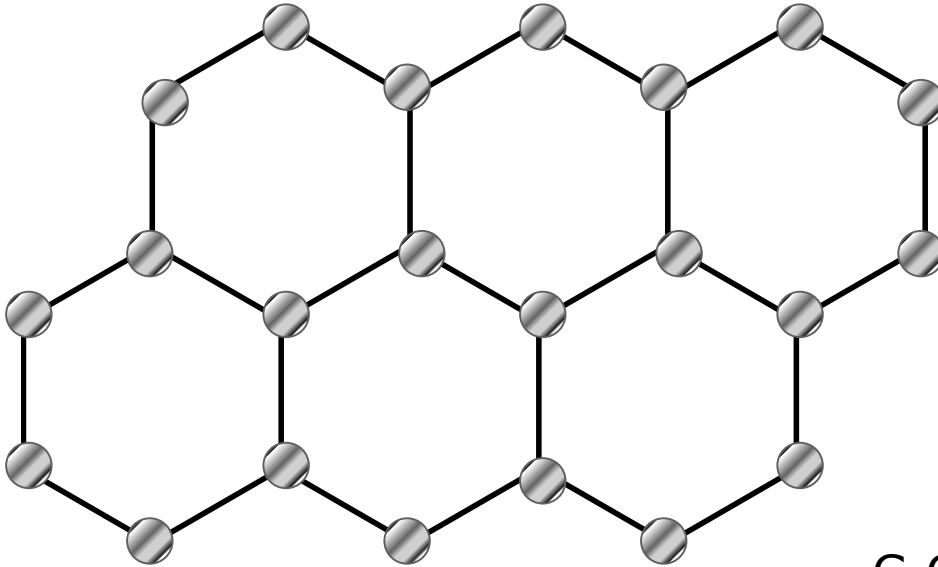
Diamante



(b)

Grafite





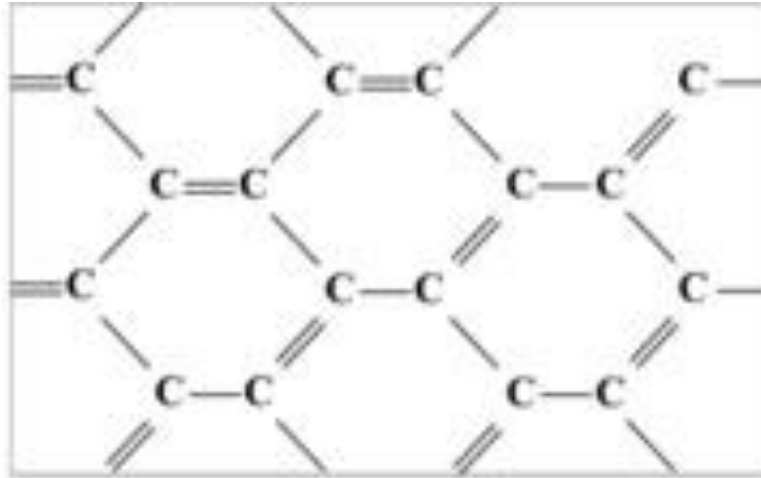
(142 pm)

C-C (etano)= 0,152 nm (152 pm)

C-C (diamante)= 0,154 nm (154 pm)

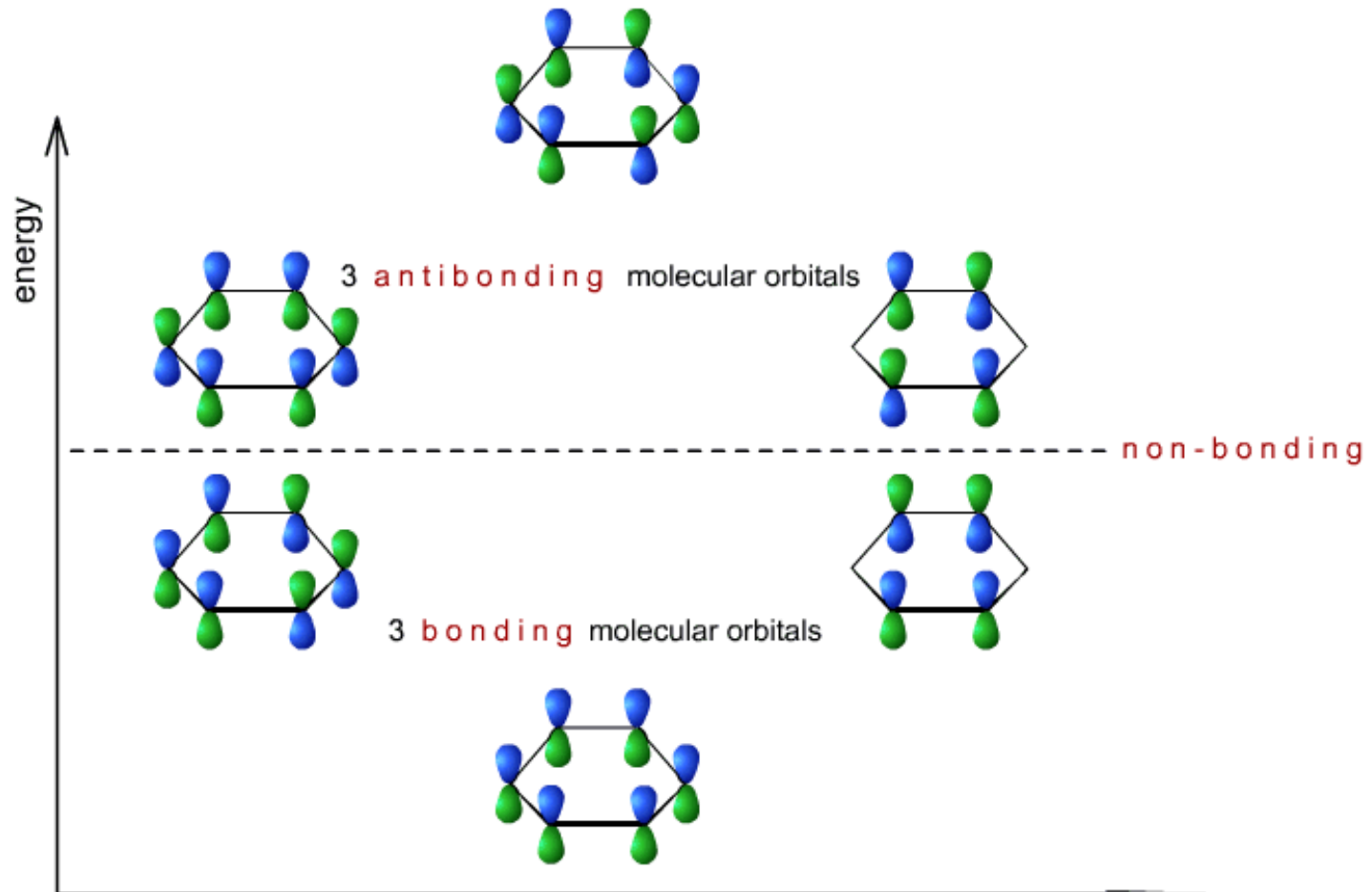
C-C (plano)= 0,142 nm (142 pm)

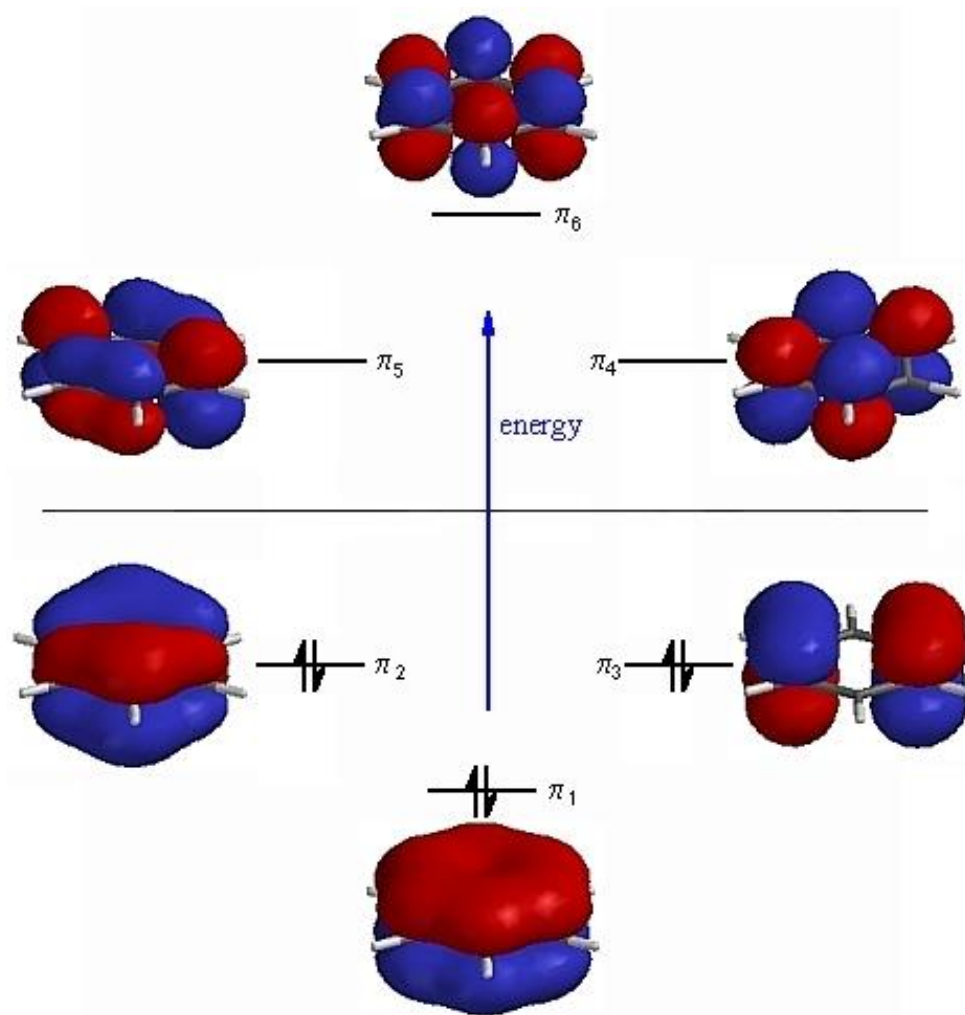
C-C (benzeno)= 0,139 nm (139 pm)



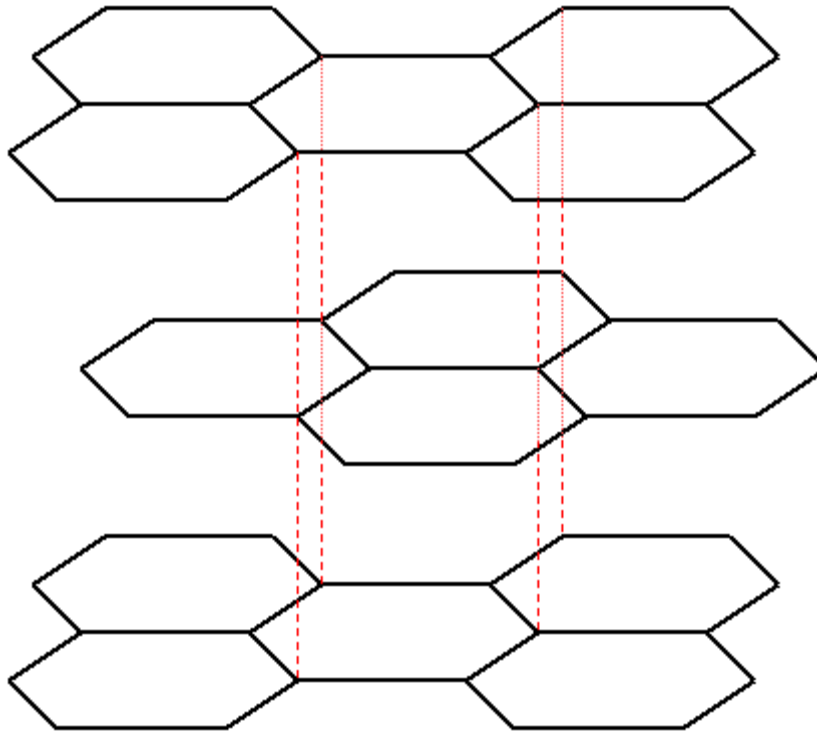
Anatomia Ligações ?

Orbitais Moleculares Sistemas π do Benzeno





Grafite: Condutividade anisotrópica



Condutividade: 1 S.m^{-1}

Resistividade: $1 \Omega .\text{m}$

Condutividade: $7,7 \times 10^4 \text{ S.m}^{-1}$

Resistividade: $1,3 \times 10^{-5} \Omega .\text{m}$

Gap de energia a 298K	
Material	E/eV
Carbono (diamante)	5,47
Carbeto de Silício	3,00
Germânio	0,66
Silício	1,11
Arseneto de Gálio	1,35
Arseneto de Índio	0,36