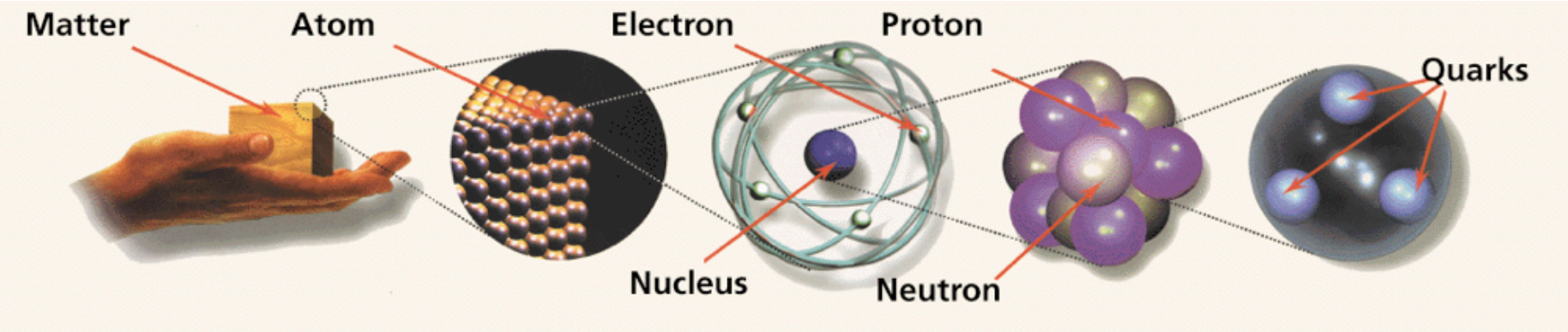
Física Moderna II
Aula 08

Marcelo G Munhoz
Pelletron, sala 245, ramal 6940
munhoz@if.usp.br

Física Moderna II

Particle Physics Education CD-ROM ©1999 CERN



Sólidos

Átomos de 1 e^-

↓

Átomos de 2 e^-

↓

Átomos de muitos e^-

↓

Moléculas

Núcleo Atômico

Partículas Elementares

Física do Estado Sólido

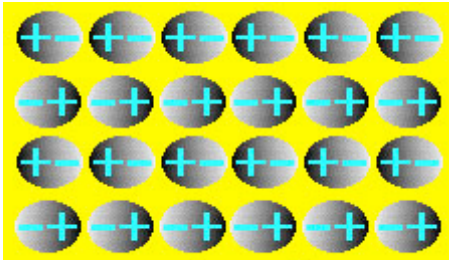
- Objetivo: a partir da nosso conhecimento da física quântica e da descrição do comportamento de átomos e moléculas, compreender qualitativamente as propriedades dos sólidos

Sólidos Cristalinos

- Apresentam um arranjo regular dos átomos ou moléculas em uma configuração periódica, chamada de rede cristalina

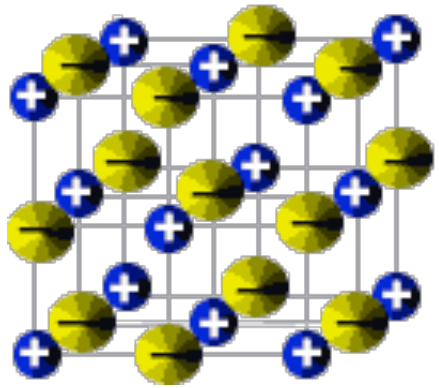
Tipos de Sólidos Cristalinos

- **Sólidos Moleculares**: constituído de moléculas estáveis que mantêm sua individualidade
- São compostos de moléculas que formam dipolos elétricos que são sempre atrativos
- A energia de ligação entre os constituintes desses sólidos é fraca



Tipos de Sólidos Cristalinos

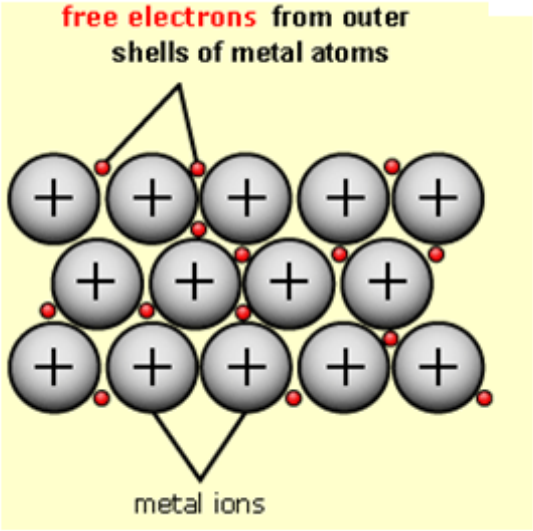
- **Sólidos Iônicos**: formados por íons positivos e negativos, alternadamente
- Apresentam forças eletrostáticas de ligação bastante intensas



Tipos de Sólidos Cristalinos

- **Sólidos Metálicos** são formados por átomos contendo elétrons pouco ligados na camada mais externa

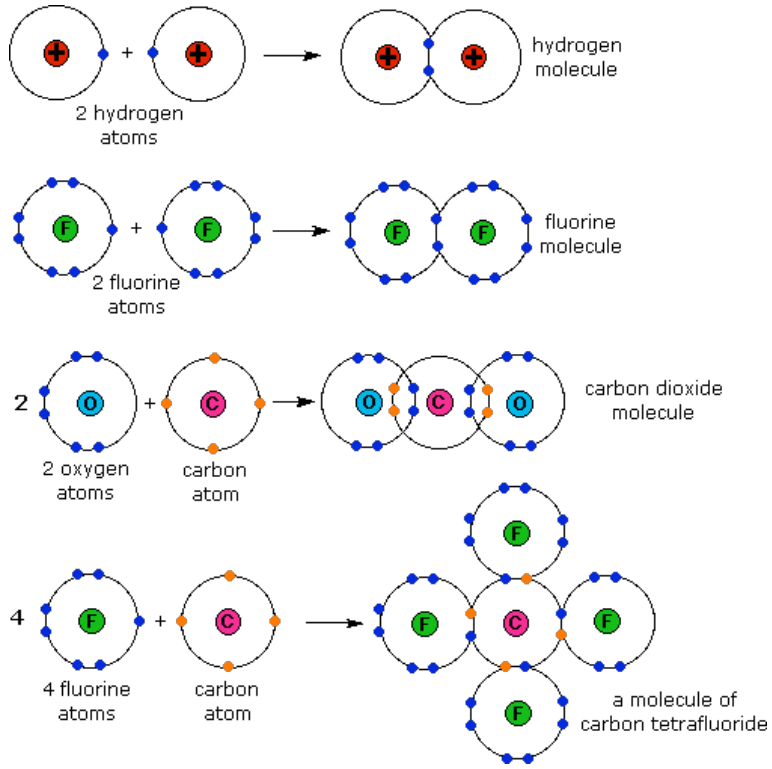
- Forma-se um "gás de elétrons" que atrai os íons positivos, mantendo a estrutura ligada do sólido



Tipos de Sólidos Cristalinos

- **Sólidos Covalentes** contêm átomos ligados por elétrons de valência compartilhados, como no caso de ligações covalentes em moléculas

- Formam materiais duros, maus condutores elétricos e de calor

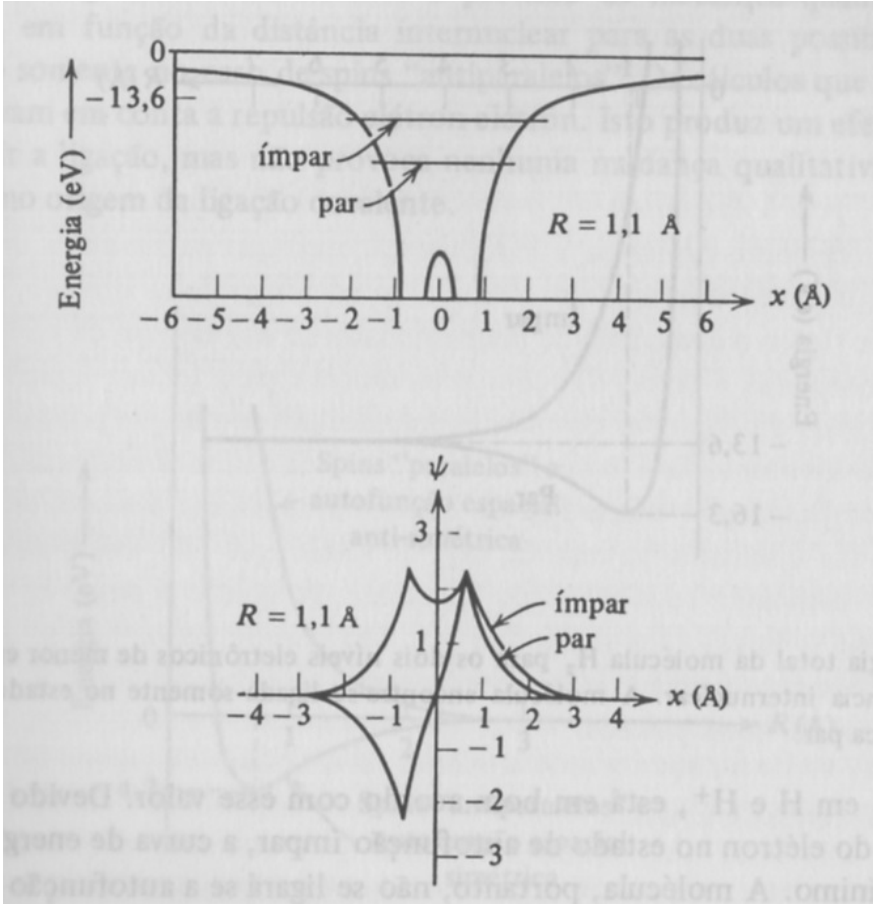


Ligação Covalente

- Se a parte espacial da função de onda dos elétrons mais externos for simétrica (par), os elétrons terão alta probabilidade de se encontrarem entre os núcleos

- Se a parte espacial da função de onda desses elétrons for anti-simétrica (impar), essa probabilidade será nula

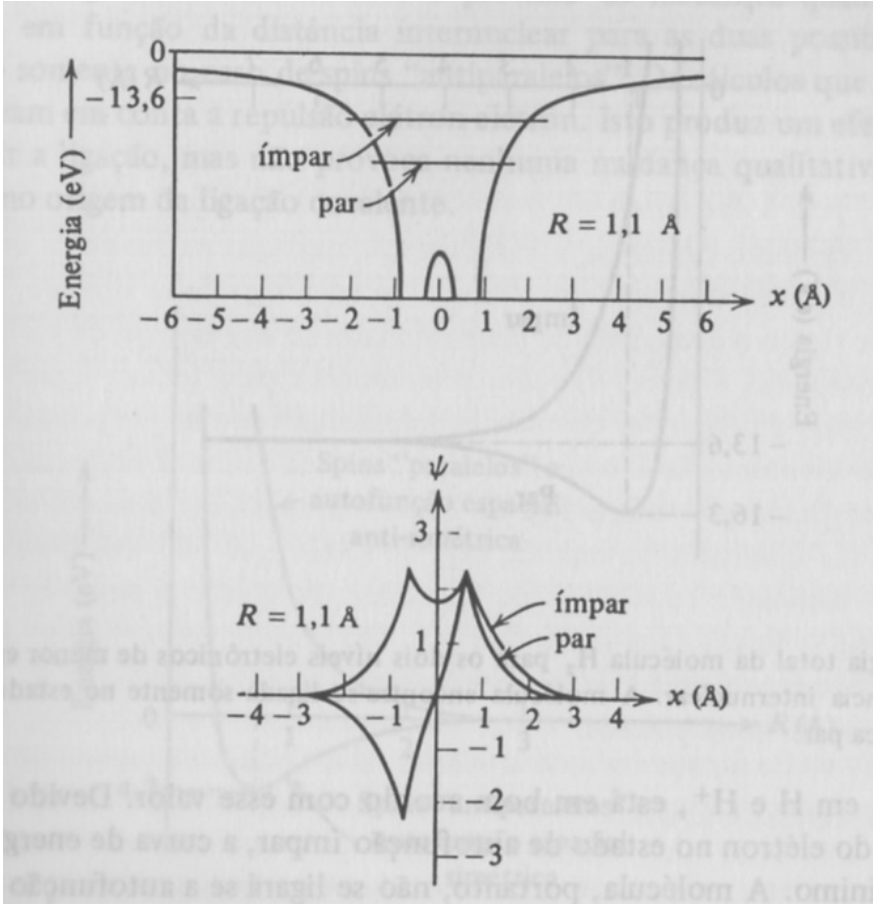
- Se os elétrons estiverem entre os núcleos, a energia potencial do sistema será mínima, portanto poderá formar um estado ligado (molécula)



Ligação Covalente

- A energia potencial do sistema é dada pela energia de atração dos elétrons com o núcleo e a repulsão entre os núcleos

- Se os elétrons estiverem entre os núcleos, a energia potencial do sistema será mínima, portanto poderá formar um estado ligado (molécula)

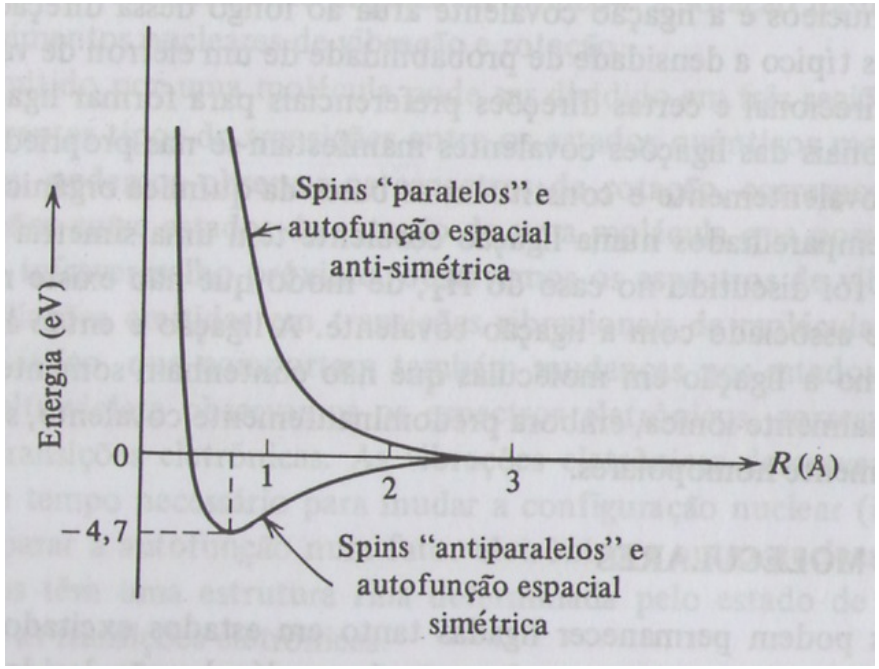


Ligação Covalente

- Portanto, para o elétron estar entre os núcleos, minimizando a energia, a função de onda espacial deve ser simétrica

- Se a função de onda espacial for simétrica, a parte de *spin* deve ser anti-simétrica, ou seja, os *spins* devem estar "antiparelos"

- Neste caso, as propriedades de simetria da função de onda são muito importantes



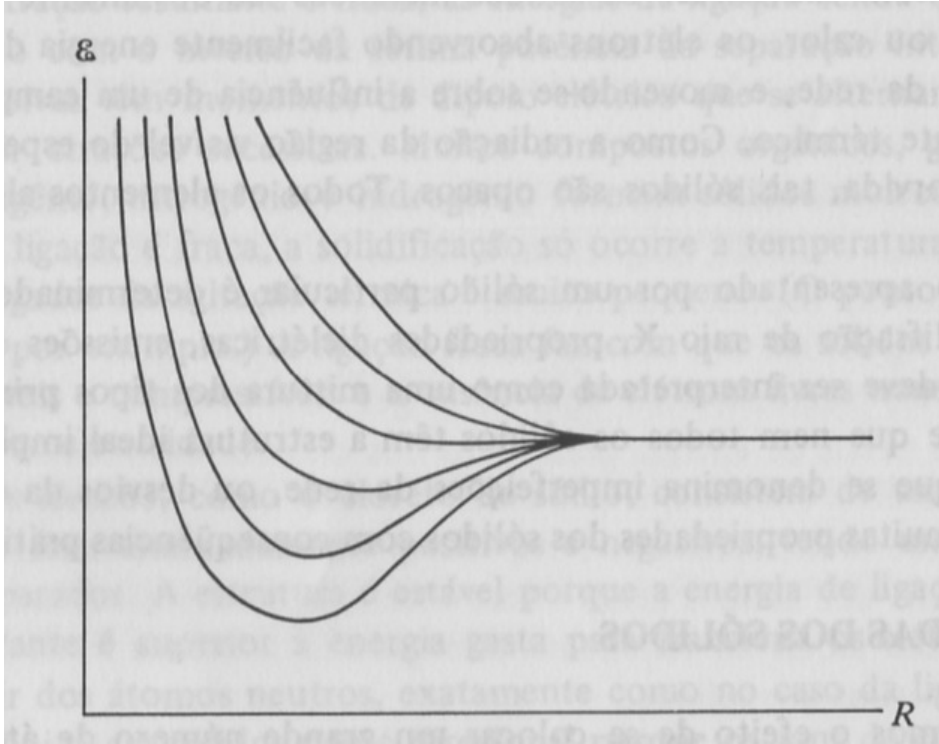
Propriedades Elétricas

- Vamos estudar as propriedades elétricas dos sólidos, ou seja, como descrever o comportamento dos elétrons de um sólido quando ele está sujeito a um campo elétrico
- Inicialmente, vamos analisar o que acontece com os estados e níveis de energia dos elétrons quando aproximamos vários átomos, "montando" um sólido

Teoria de Banda dos Sólidos

- Como na ligação covalente, ao aproximarmos vários átomos uns dos outros, os níveis de energia vão depender da simetria da função de onda espacial (e consequentemente do *spin*) de cada átomo

- Neste exemplo, o sistema apresenta 6 átomos

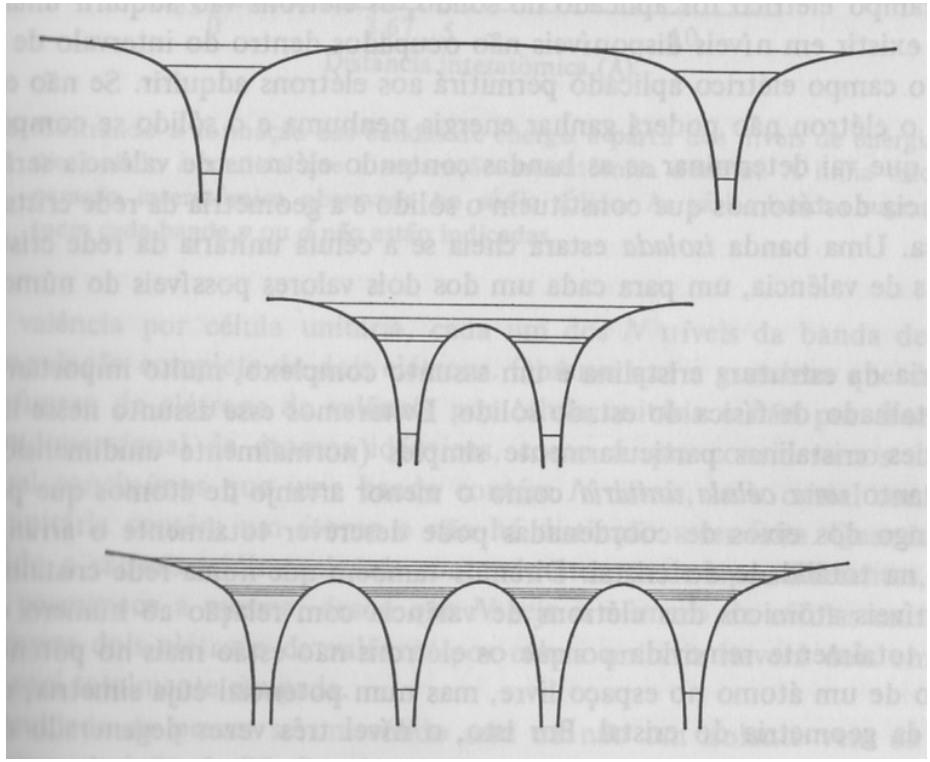


Teoria de Banda dos Sólidos

- Pode-se imaginar isso como uma quebra de degenerescência dos estados dos átomos afastados

- Quando aproximamos os átomos, a degenerescência é quebrada formando "bandas"

- Para cada nível de energia, se formará uma banda diferente a partir da degenerescência dos vários átomos

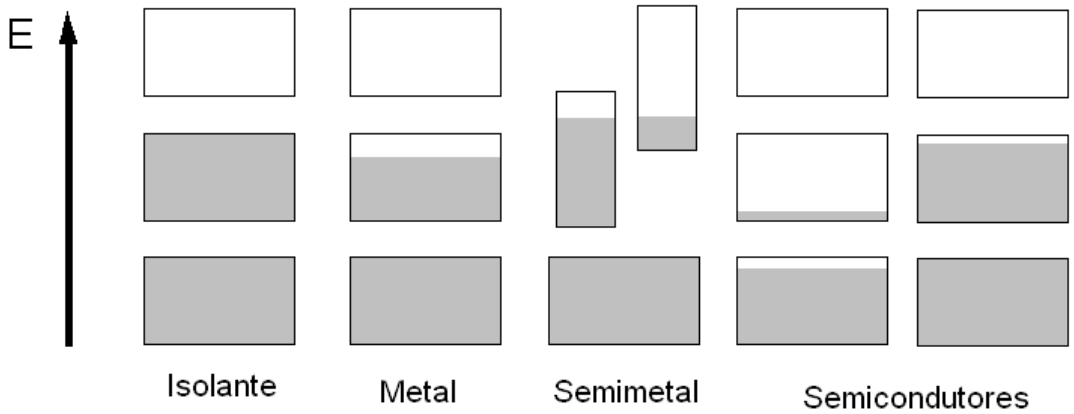


Teoria de Banda dos Sólidos

- A formação e a ocupação dessas bandas define se um sólido será um condutor ou um isolante
- Mas, como compreender as propriedades elétricas de um sólido, isto é, se ele é condutor ou isolante, a partir da configuração de suas bandas e da ocupação das mesmas?

Teoria de Banda dos Sólidos

- Isolante: as bandas estão ou completamente cheias ou completamente vazias
- Condutor: alguma banda está parcialmente cheia
- A ocupação das bandas depende do número de elétrons de valência nas unidades do sólido



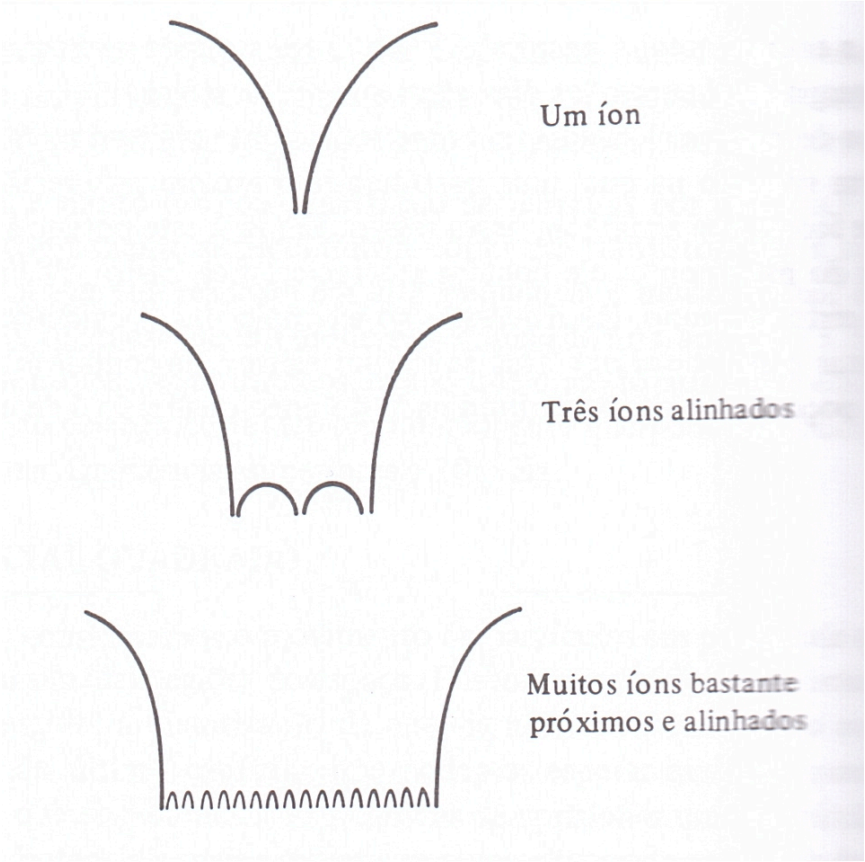
Teoria de Banda dos Sólidos

- Portanto, o tamanho e ocupação das bandas é essencial para determinar o comportamento elétrico de um sólido
- Então, como determinar o tamanho e a ocupação das bandas de um sólido?

Gás de Elétrons Livres

- Neste modelo, considera-se que os elétrons que ocupam parcialmente uma banda, chamada de banda de condução, estão livres, formando um gás de férmions

- É possível estimar a ocupação e a largura da banda de condução com este modelo



Partícula presa em uma “caixa”

$$\psi(x) = \sqrt{2/a} \cdot cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

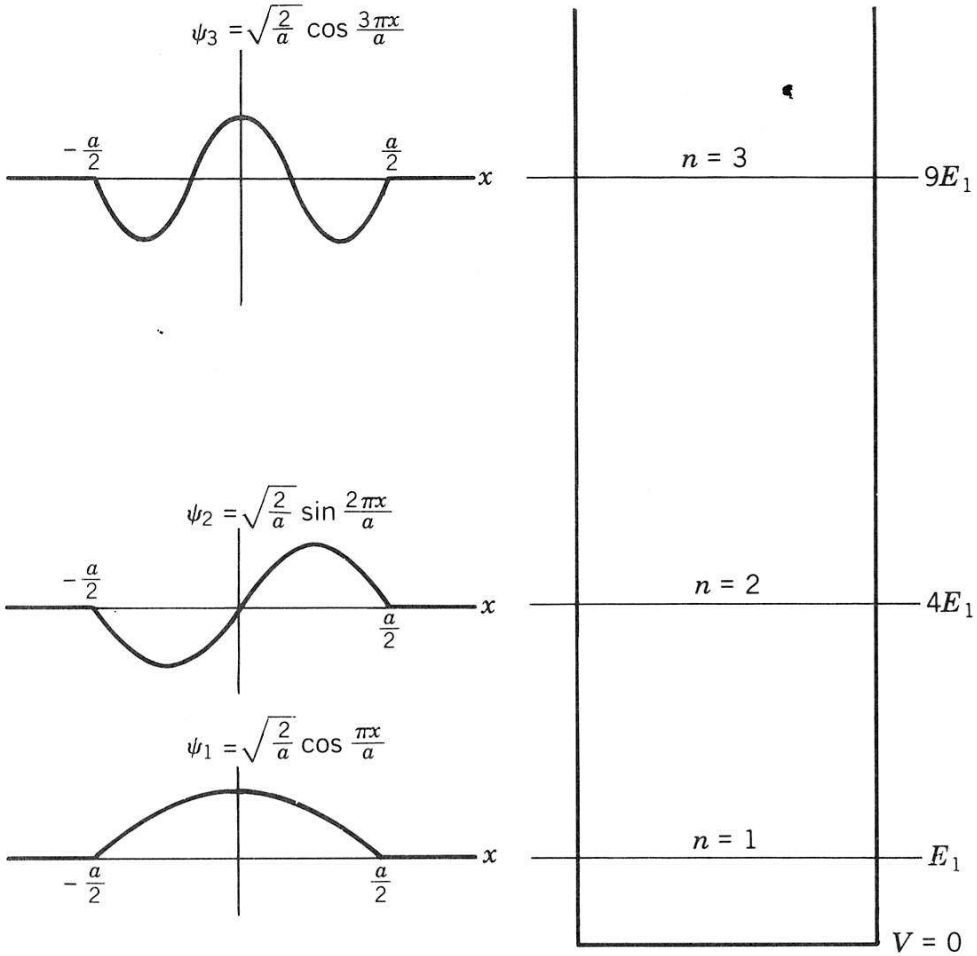
para n=1,3,5,...

$$\psi(x) = \sqrt{2/a} \cdot sen\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

para n=2,4,6,...

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2$$

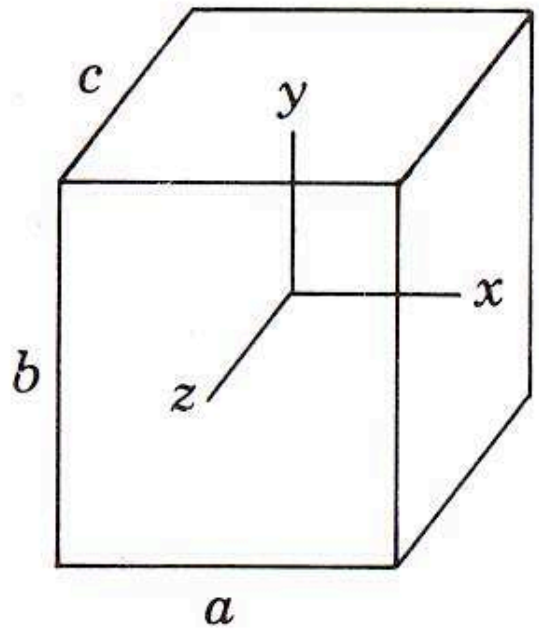
para n=1,2,3,4,...



Partícula na caixa retangular

- Vamos considerar uma partícula livre "presa" em uma caixa retangular

- Este problema é equivalente ao poço infinito, porém em três dimensões



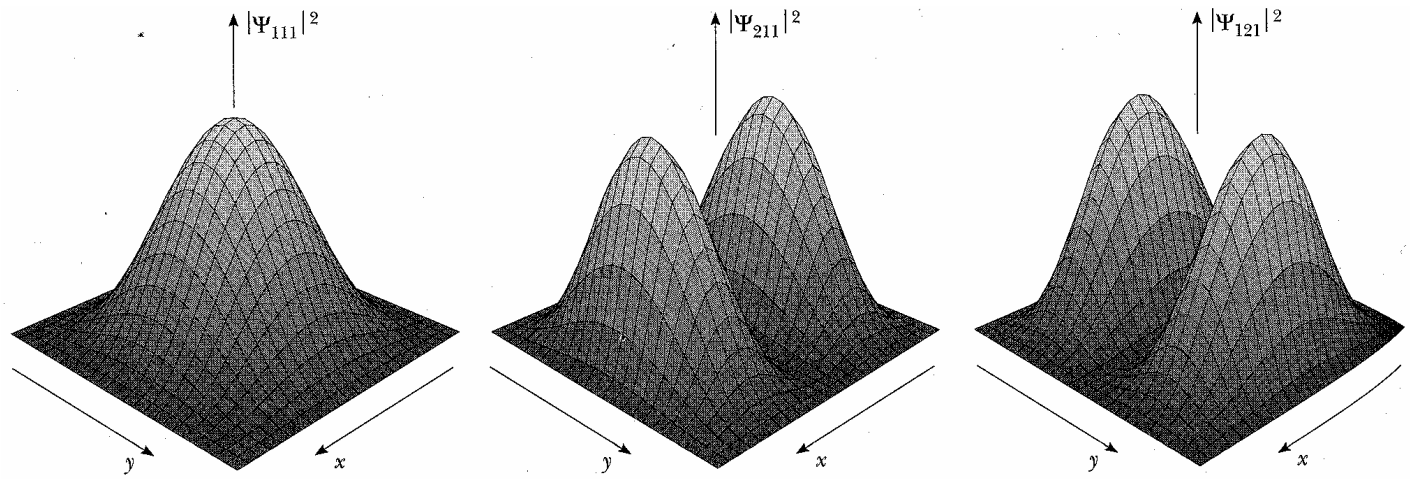
Partícula na caixa retangular

$$\psi(x) = \sqrt{2/a}\sqrt{2/b}\sqrt{2/c} \cdot cos\left(\frac{n_1\pi}{a}x\right) \cdot cos\left(\frac{n_2\pi}{b}y\right) \cdot cos\left(\frac{n_3\pi}{c}z\right)$$

n_1 , n_2 , n_3 = 1,3,5,...

$$\psi(x) = \sqrt{2/a}\sqrt{2/b}\sqrt{2/c} \cdot sen\left(\frac{n_1\pi}{a}x\right) \cdot sen\left(\frac{n_2\pi}{b}y\right) \cdot sen\left(\frac{n_3\pi}{c}z\right)$$

n_1 , n_2 , n_3 = 2,4,6,...

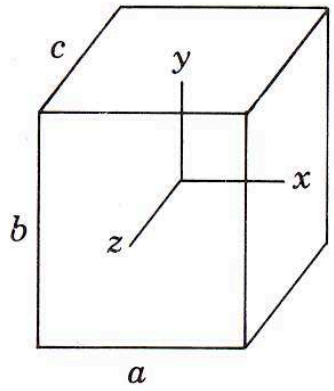


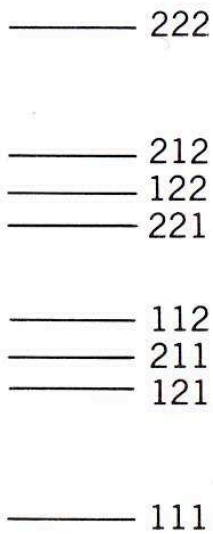
Partícula na caixa retangular

- Além da quantização de energia, uma outra propriedade interessante surge neste problema

- No caso da caixa retangular com os 3 lados diferentes, cada combinação de números quânticos (n_1 , n_2 , n_3), resulta em uma valor diferente de energia

$$E = E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m}\left(\frac{n_1^2}{a^2} + \frac{n_2^2}{b^2} + \frac{n_3^2}{c^2}\right)$$

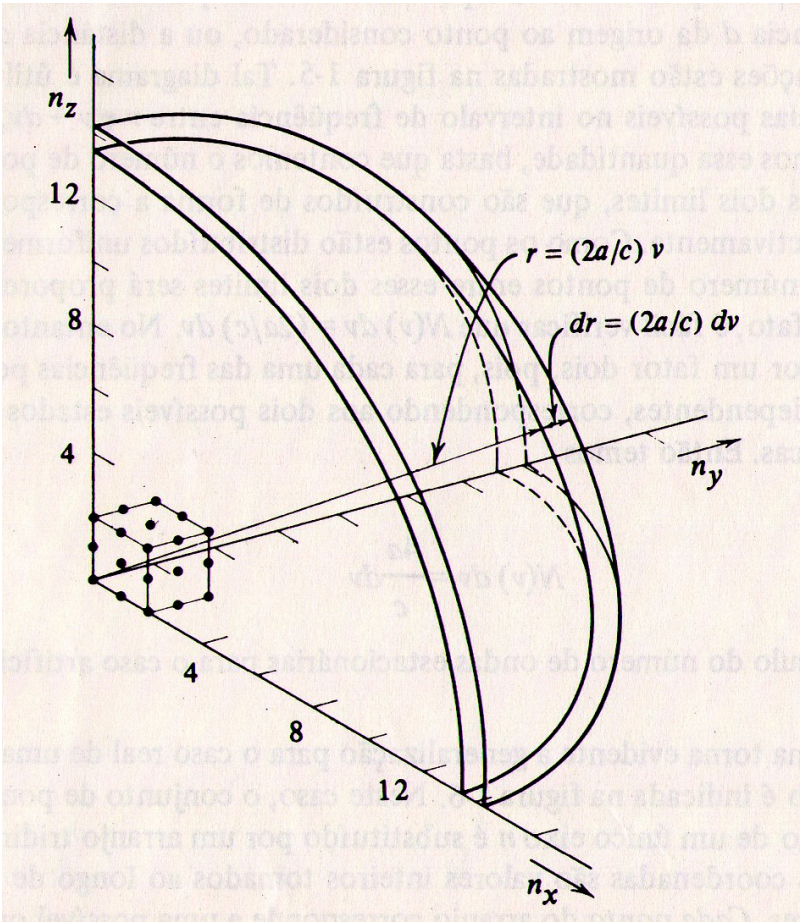




Gás de Elétrons Livres

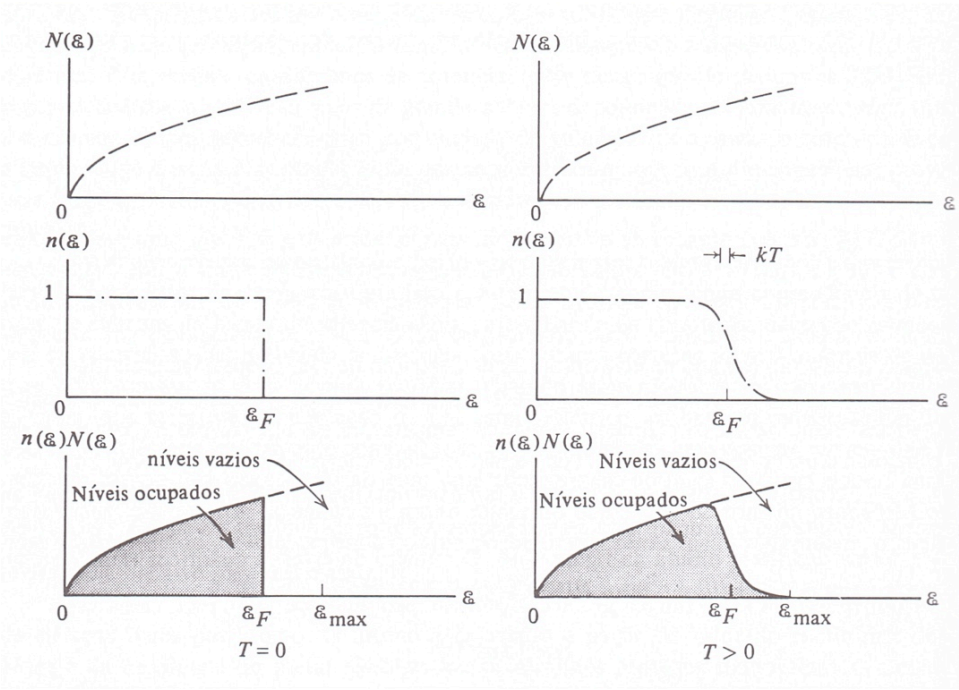
- Neste modelo, a ocupação de uma banda será dada pelo número de estados disponíveis $N(\varepsilon)$ vezes a ocupação esperada para cada estado $n(\varepsilon)$ sendo:

$$N(\epsilon) = \frac{8\pi V}{h^3}(2m^3)^{1/2}\epsilon^{1/2}d\epsilon$$



Gás de Elétrons Livres

- Neste modelo, a ocupação de uma banda será dada pelo número de estados disponíveis $N(\varepsilon)$ vezes a ocupação esperada para cada estado $n(\varepsilon)$ sendo:



$$N(\epsilon) = \frac{8\pi V}{h^3}(2m^3)^{1/2}\epsilon^{1/2}d\epsilon$$

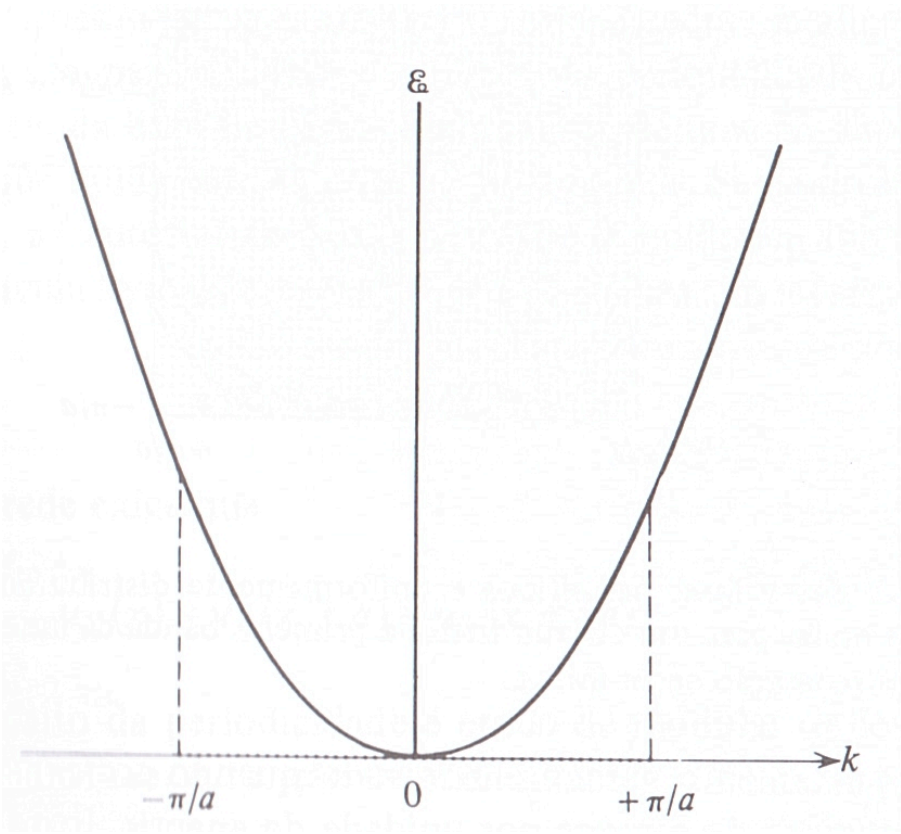
$$n_{Fermi}(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\epsilon_F)/kT}+1}$$

Gás de Elétrons Livres

- E ele permite calcular a largura da banda a partir da energia máxima permitida, que é dada por:

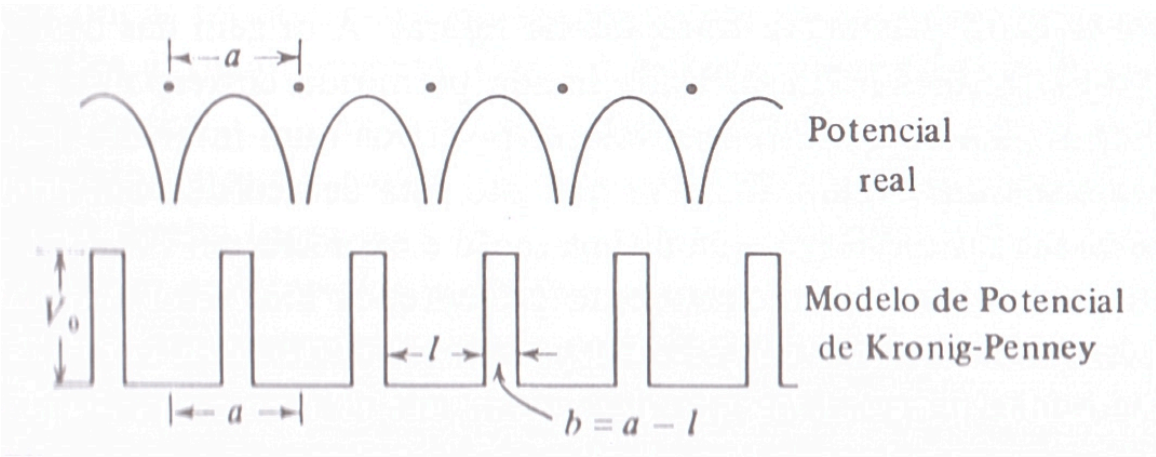
$$\epsilon_{max} = \frac{h^2 N^2}{8mL^2} = \frac{h^2 L^2}{8mL^2 a^2}$$
$$= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2}$$

- que leva a: $-\pi/a \leq k \leq +\pi/a$



Modelo de Kronig-Penney

- Neste modelo, considera-se a presença dos ions que dão origem à uma rede periódica de potenciais quadrados e barreiras de potencial

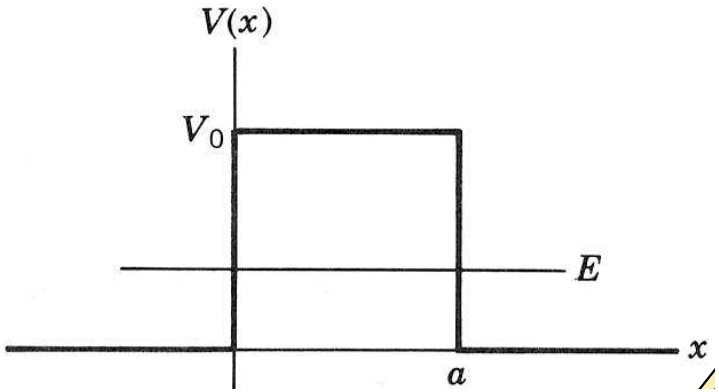


Barreira de Potencial

- Se o potencial apresentar um valor V_0 para apenas um intervalo de x, dizemos se tratar de uma barreira de potencial

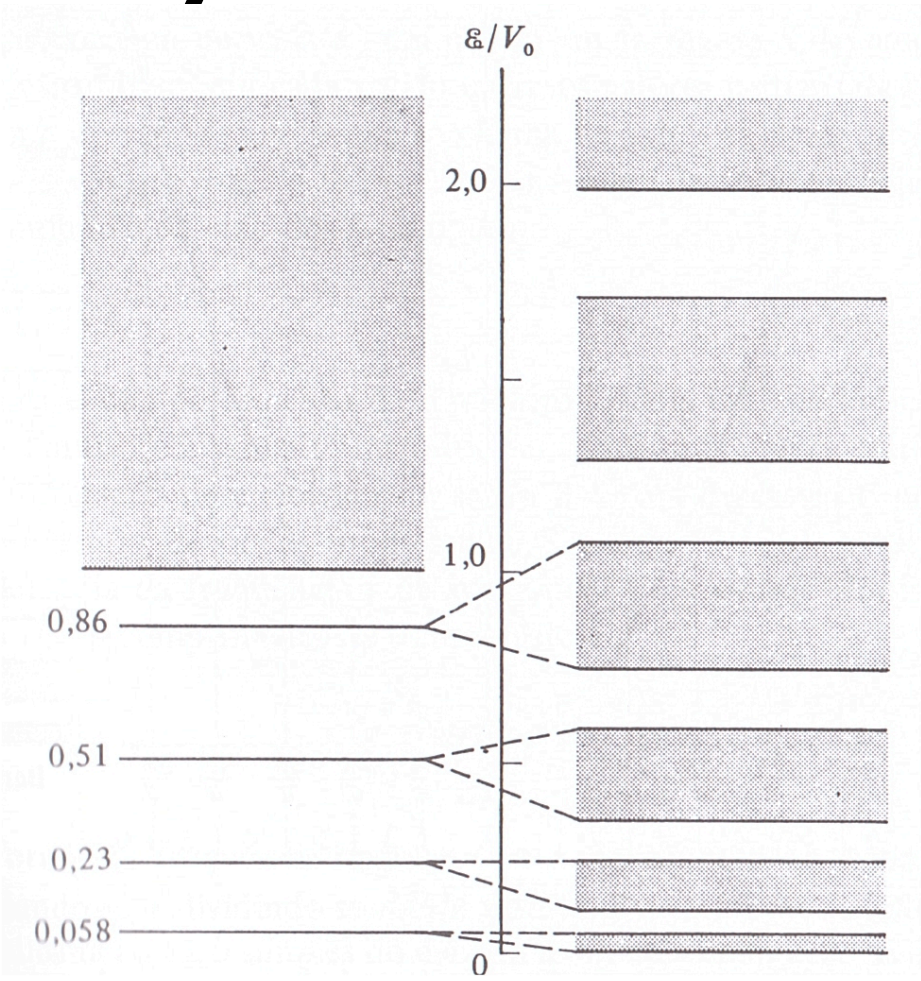
- Existem vários sistemas físicos que podem ser tratados com um potencial como este

- Inicialmente, vamos resolver o problema para o caso em que $E < V_0$



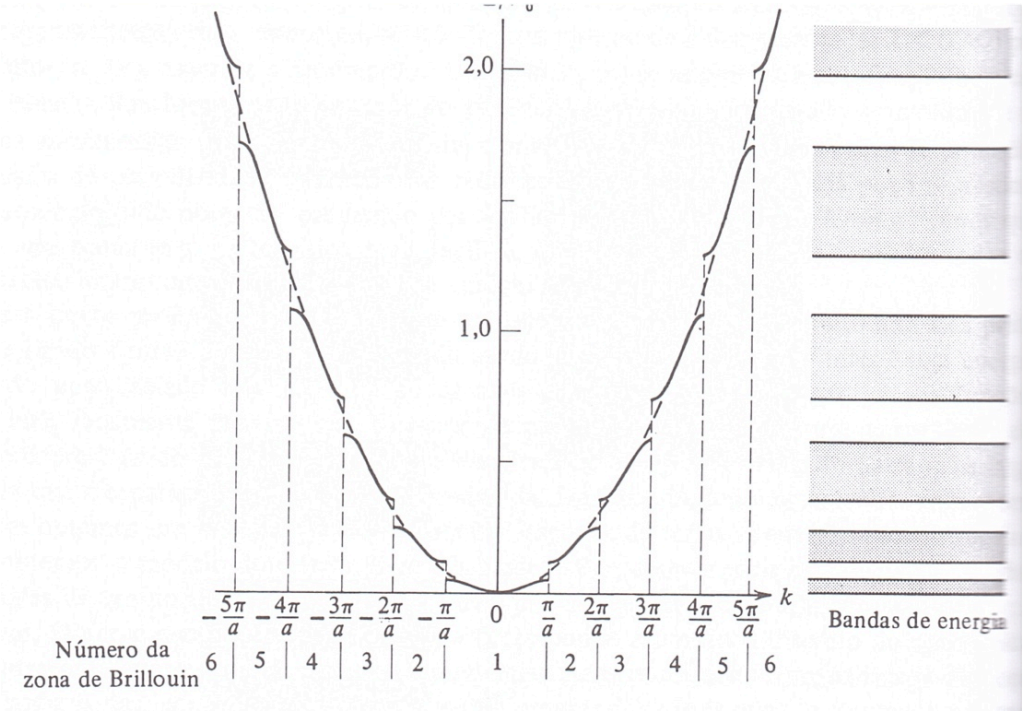
Modelo de Kronig-Penney

- A rede periódica de potenciais quadrados e barreiras de potencial faz surgir as bandas com intervalos entre elas devido à interferência dos elétrons



Modelo de Kronig-Penney

- A rede periódica de potenciais quadrados e barreiras de potencial faz surgir as bandas com intervalos entre elas devido à interferência dos elétrons

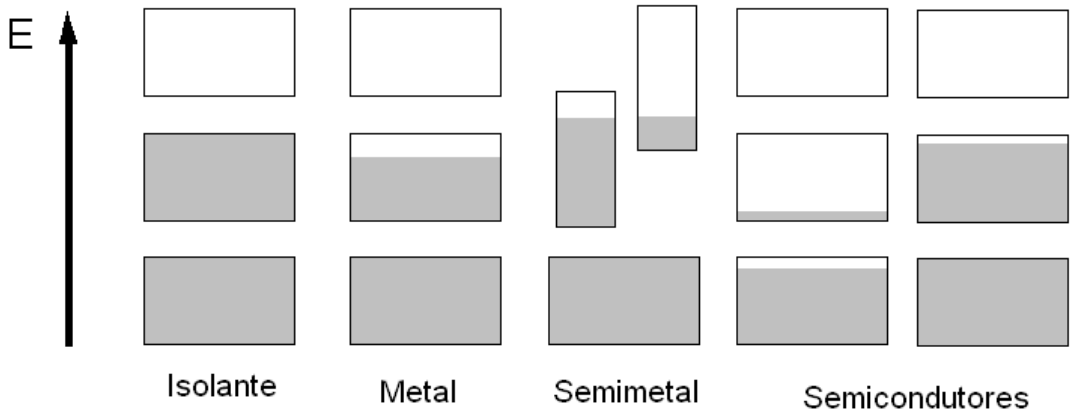


Teoria de Banda dos Sólidos

- Isolante: as bandas estão ou completamente cheias (banda de valência) ou completamente vazias (banda de condução)

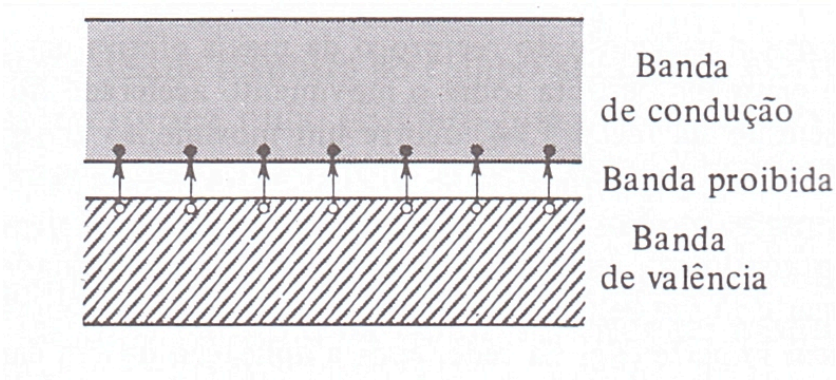
- Condutor: alguma banda está parcialmente cheia (banda de condução)

- Semi-condutor: apresenta uma banda cheia (banda de valência) e uma banda vazia (banda de condução) quando $T=0$. Porém, a diferença de energia entre essas duas bandas é pequena (menos de 2 eV)



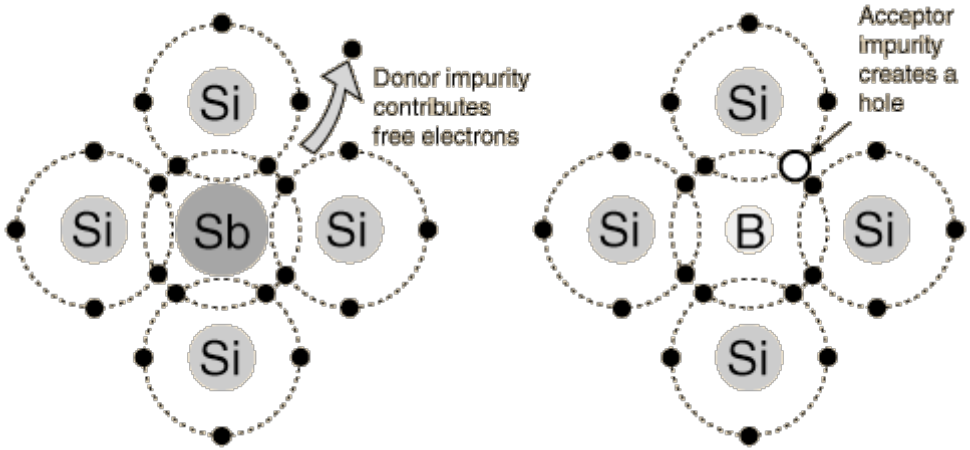
Semicondutores

- Condutividade intrínseca

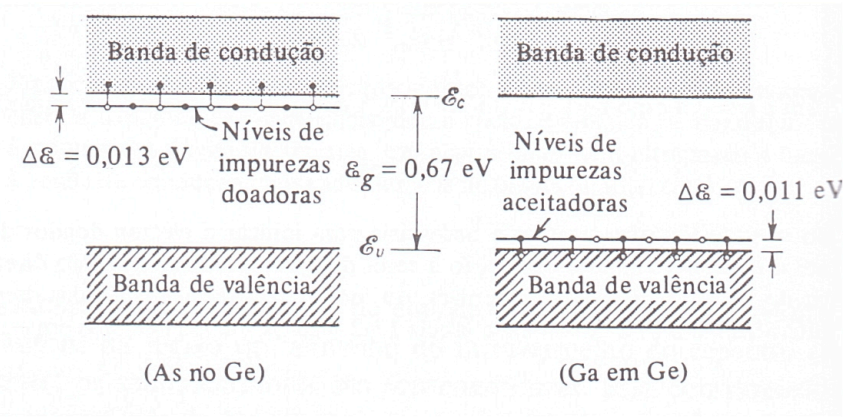


Semicondutores

- Condutividade intrínseca
- Condutividade extrínseca
  - Dopagem
    - Impureza doadora: semicondutor tipo-n
    - Impureza aceitadora: semicondutor tipo-p



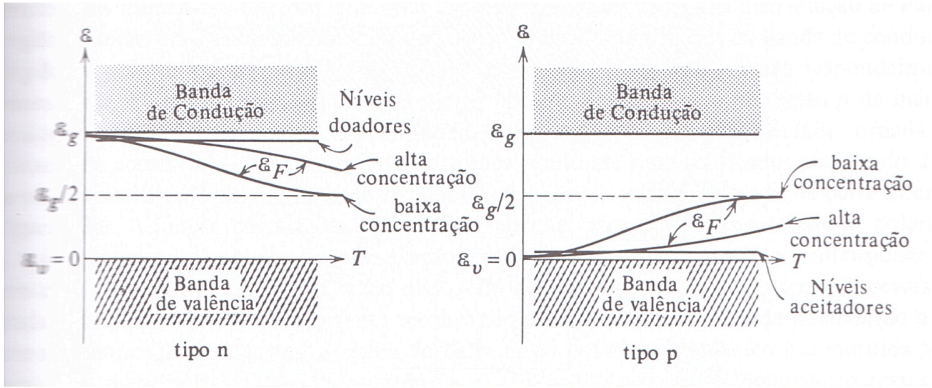
http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/solids/dope.html

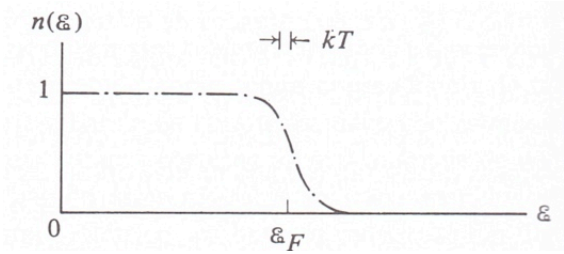


Semicondutores

- A ocupação da banda de condução pode ser estimada a partir da energia de Fermi do semicondutor

$$n_{Fermi}(\epsilon) = \frac{1}{e^{(\epsilon-\epsilon_F)/kT}+1}$$

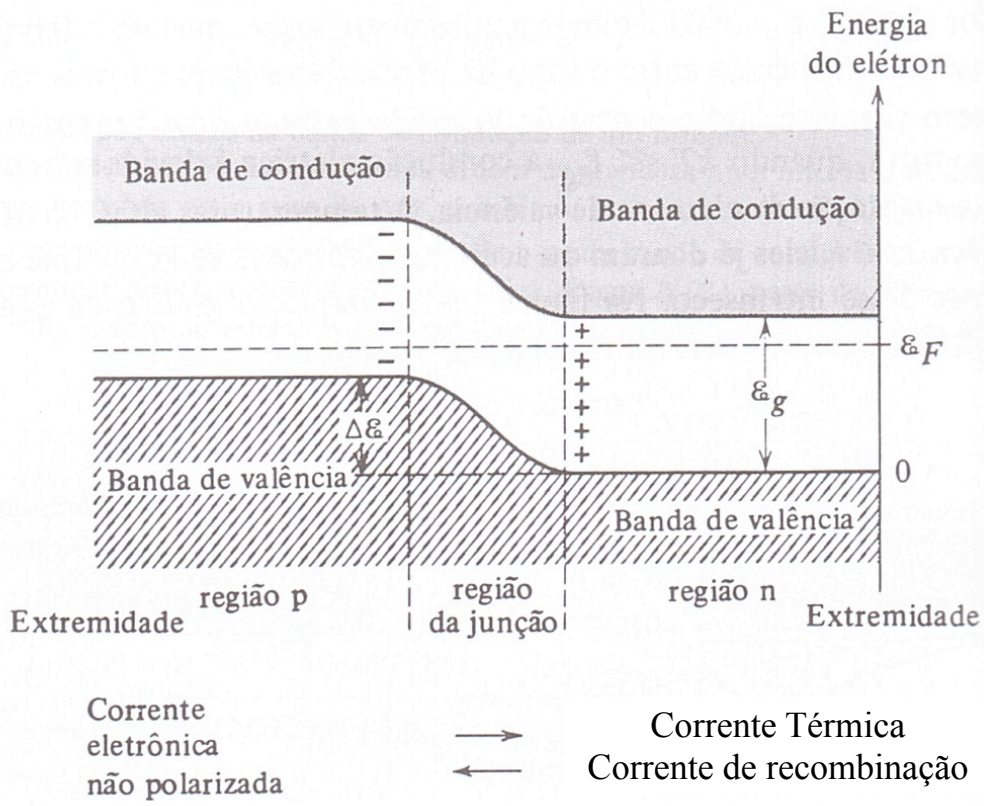




Junção p-n

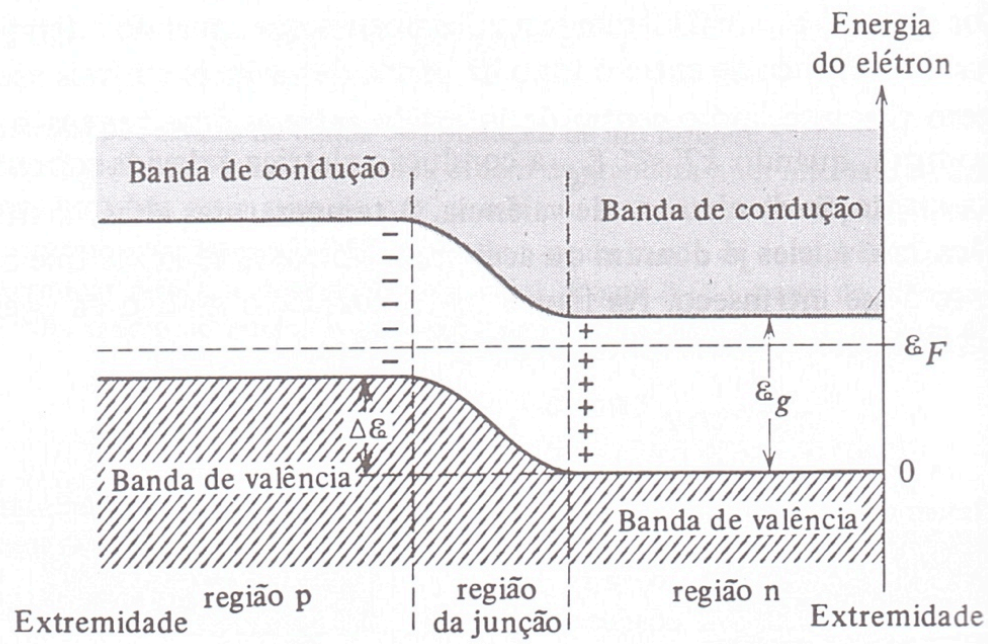
- Ao se unir um semicondutor do tipo-n com um do tipo-p, surge uma junção p-n

- Nessa junção, muda-se os limites das bandas de condução e valência a fim de se manter a energia do sistema mínima (energia de Fermi constante)

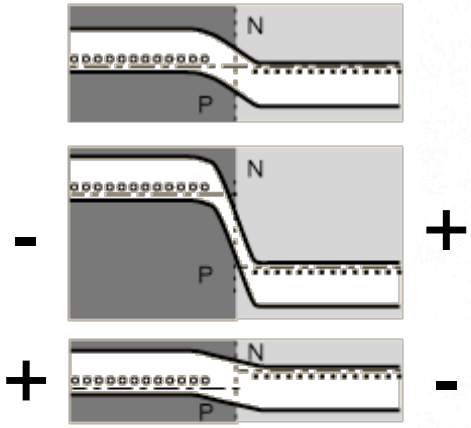


Junção p-n

- Ao aplicarmos uma tensão na junção p-n modifica-se o equilíbrio



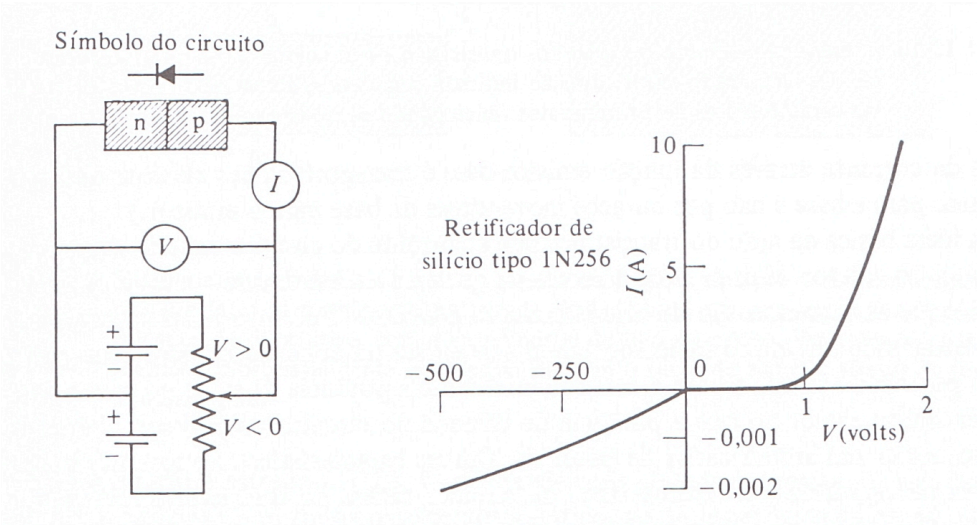
http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/solids/pnjun.html#c1



Corrente eletrônica não polarizada	→ ←	Corrente Térmica Corrente de recombinação
Corrente reversa polarizada	→ ←	Corrente Térmica Corrente de recombinação
Corrente direta polarizada	→ ←	Corrente Térmica Corrente de recombinação

Dispositivos Semicondutores

- Diodo (retificador) semicondutor

- Ao se aplicar um diferença de potencial em uma junção p-n cria-se uma polarização reversa ou direta, conforme o sentido da d.d.p.

- A corrente reversa será muito menor do que a direta, possibilitando o uso desse dispositivo em várias aplicações