

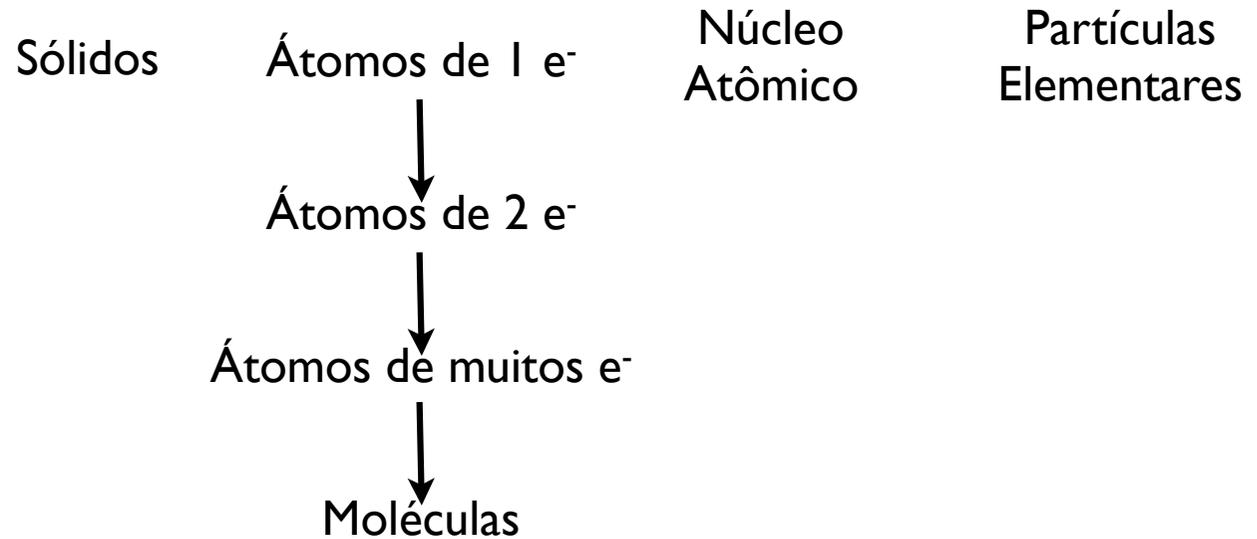
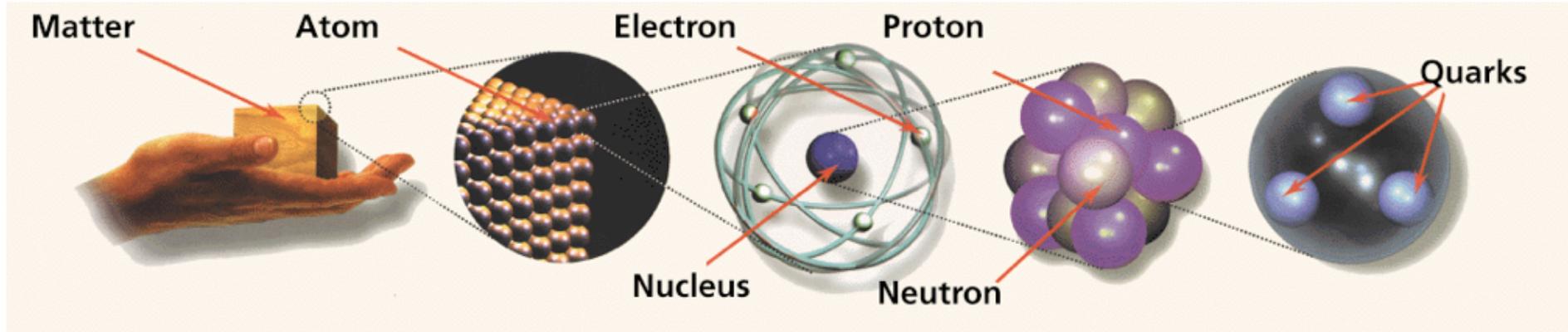
Física Moderna II

Aula 08

Marcelo G Munhoz
Edifício HEPIIC, sala 202, ramal 916940
munhoz@if.usp.br

Física Moderna II

Particle Physics Education CD-ROM ©1999 CERN



Física do Estado Sólido

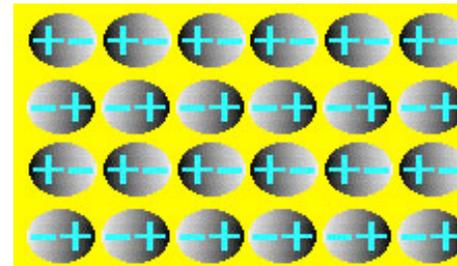
- Objetivo: a partir do nosso conhecimento da física quântica e da descrição do comportamento de átomos e moléculas, compreender qualitativamente as propriedades dos sólidos

Sólidos Cristalinos

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

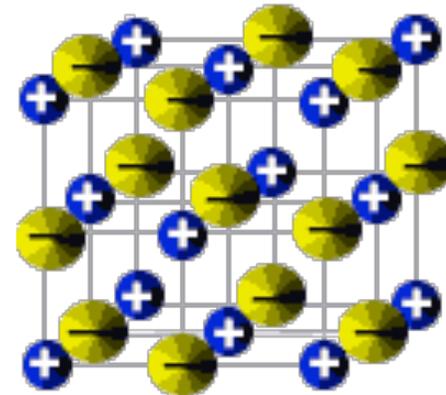
Tipos de Sólidos Cristalinos

- **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



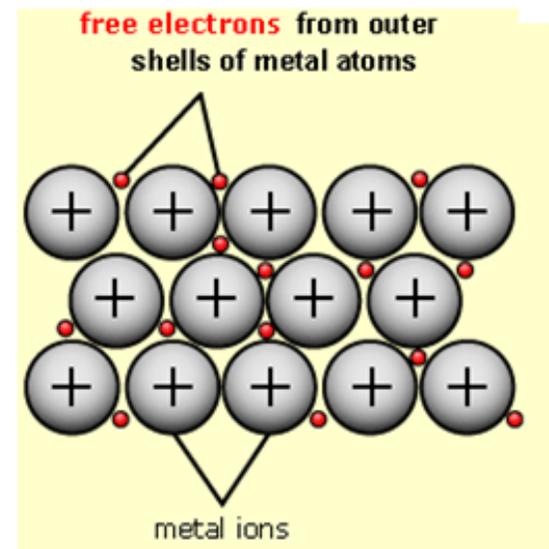
Tipos de Sólidos Cristalinos

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



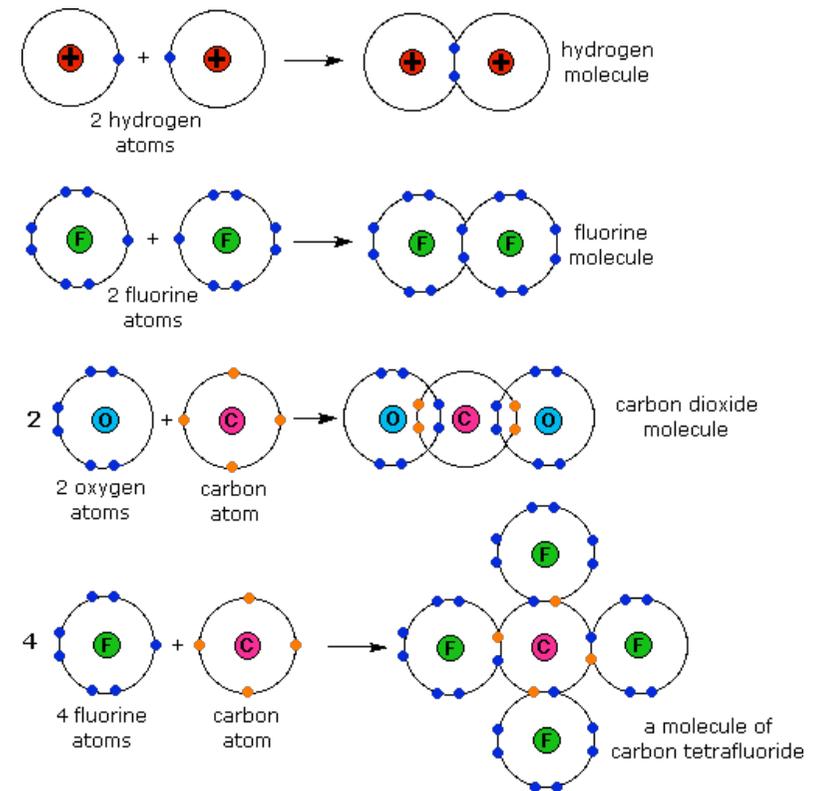
Tipos de Sólidos Cristalinos

- **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



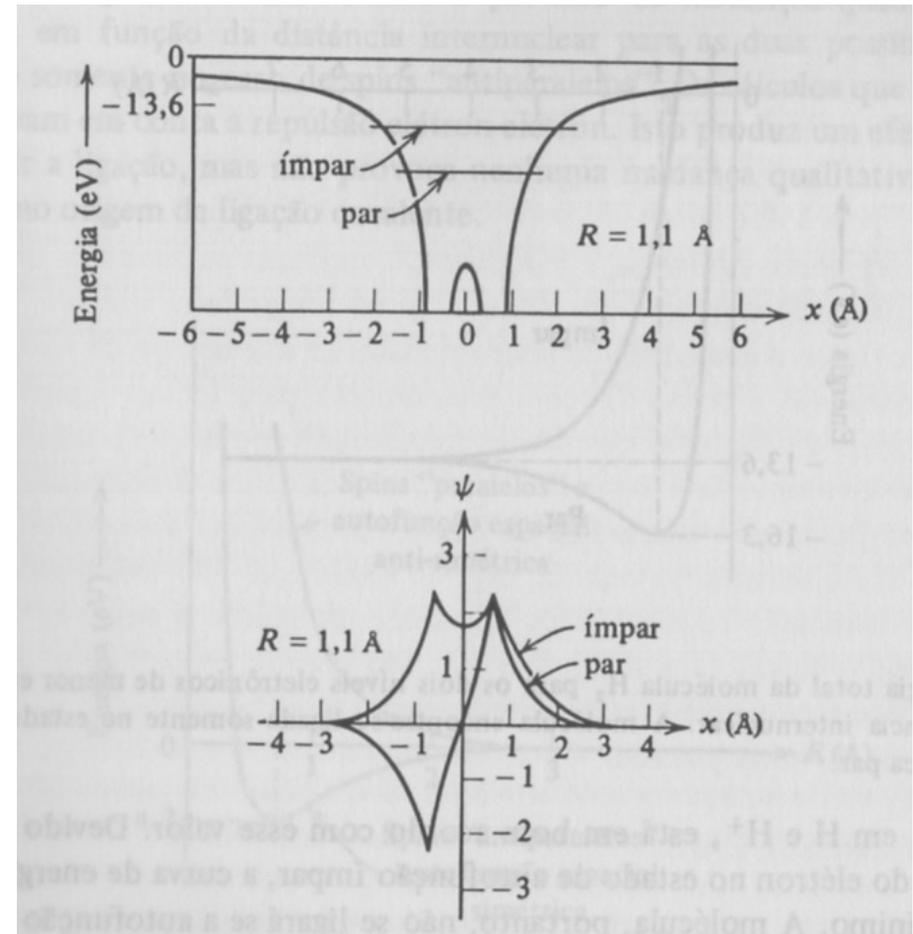
Tipos de Sólidos Cristalinos

- **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



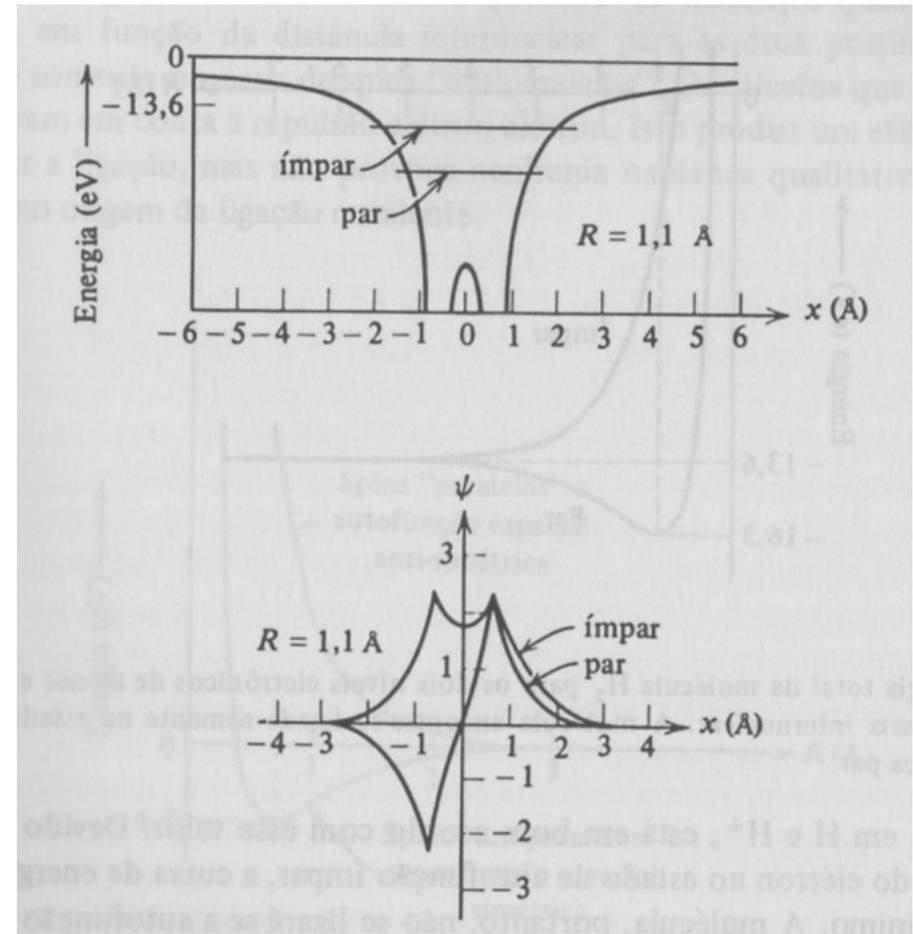
Ligação Covalente

- 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 (ímpar), essa probabilidade será nula



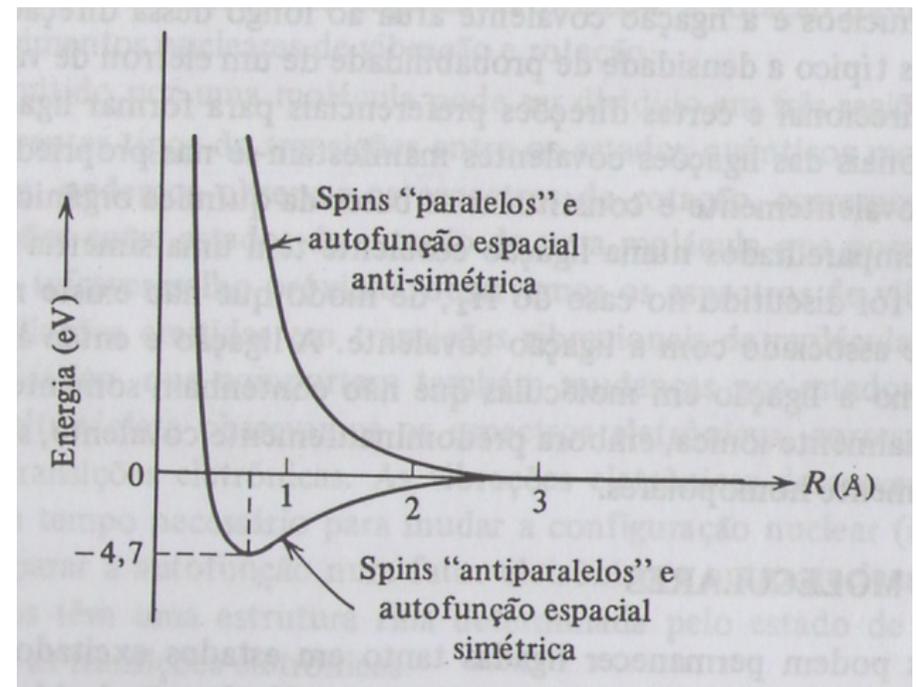
Ligação Covalente

- 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

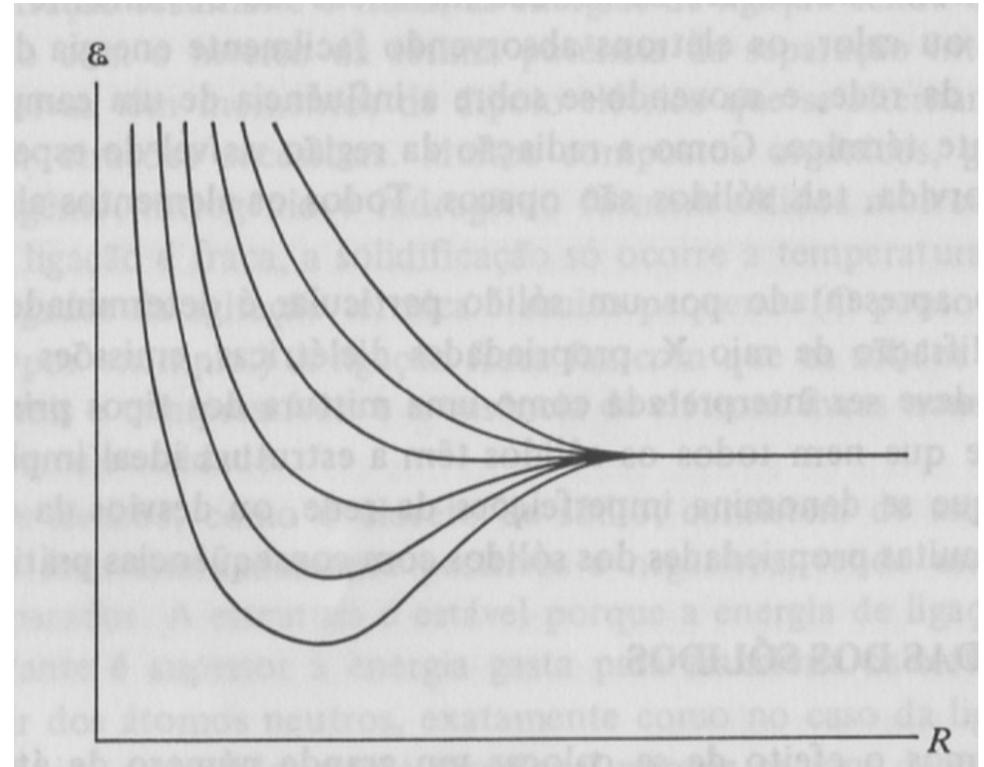


Propriedades Elétricas

- 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

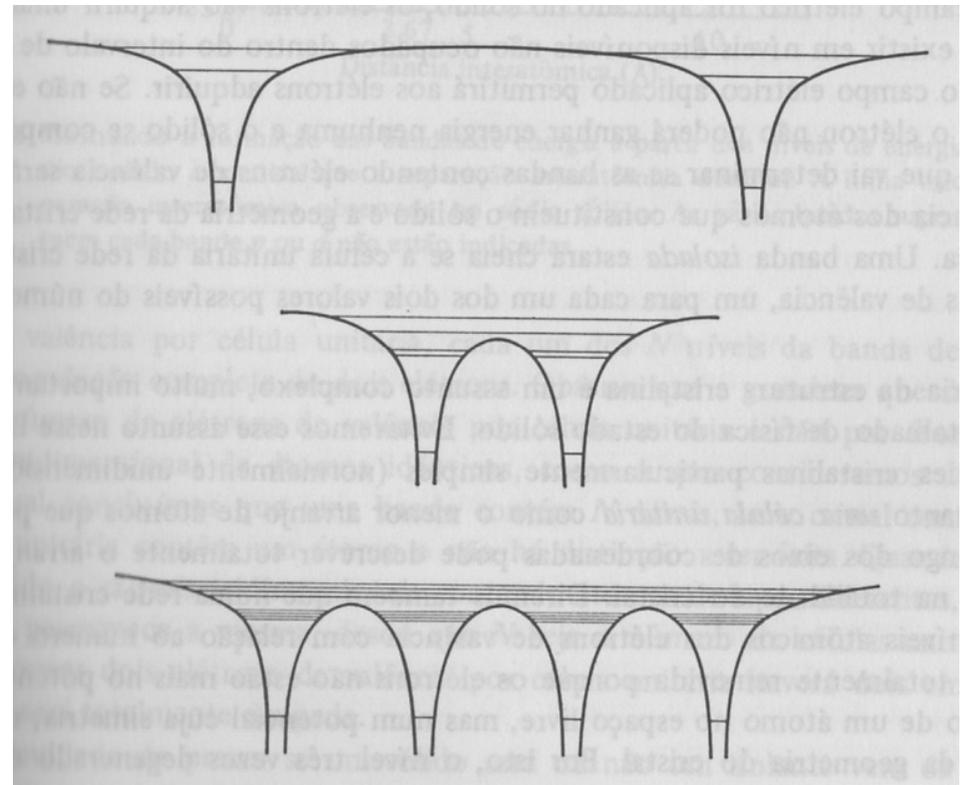
Teoria de Banda dos Sólidos

- 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 conseqüentemente 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

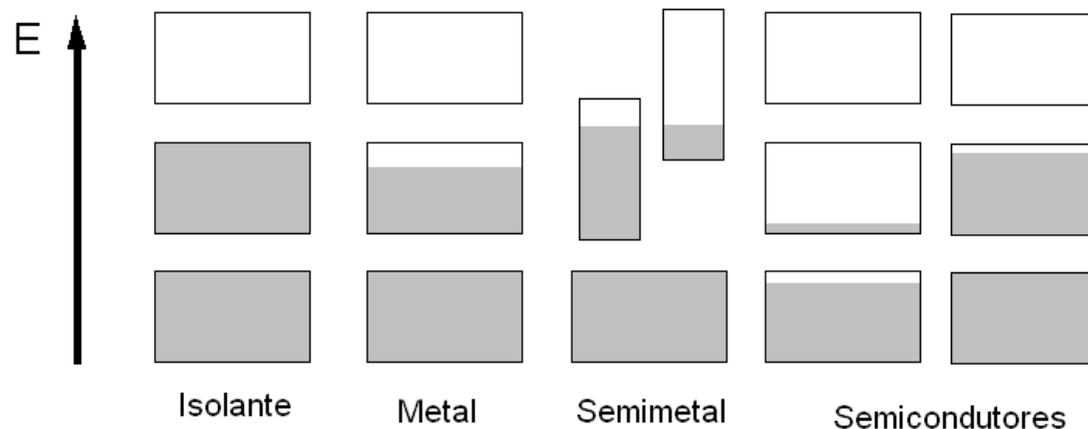


Teoria de Banda dos Sólidos

- 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

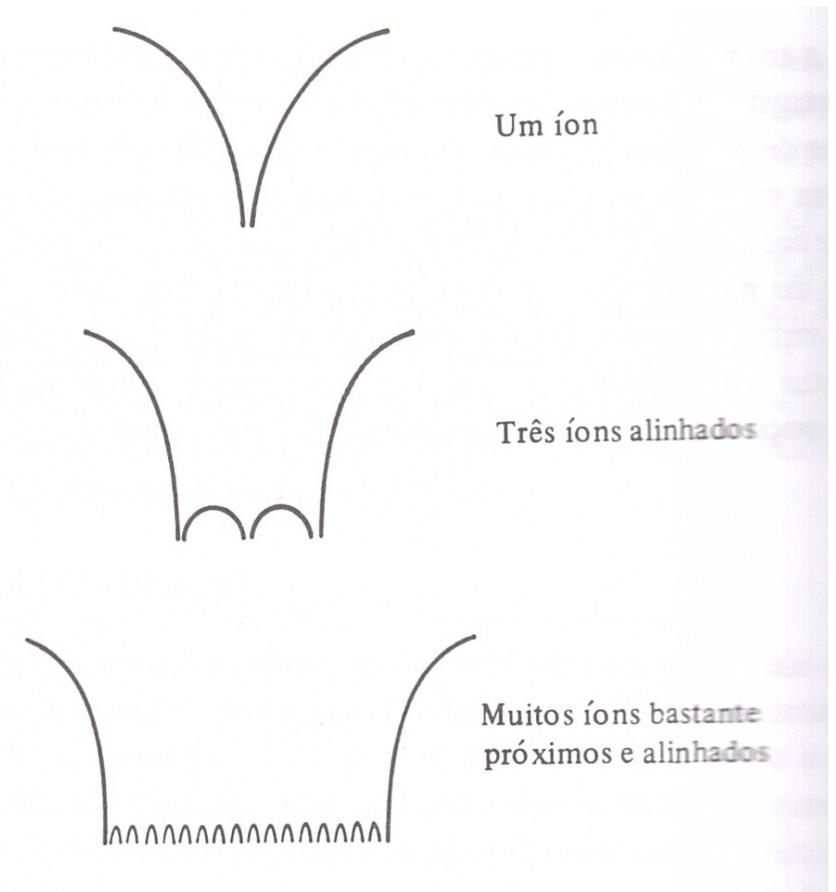


Teoria de Banda dos Sólidos

- 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?

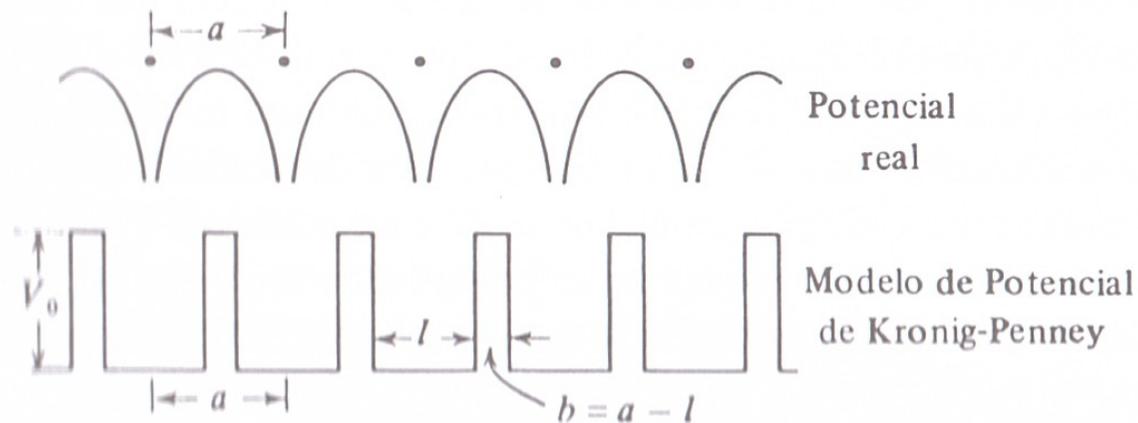
Gás de Elétrons Livres

- 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



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



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)

