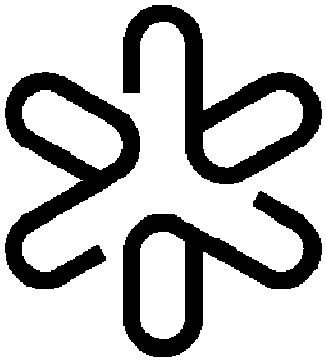


Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Física Moderna II

Profa. Márcia de Almeida Rizzutto

Cap. 10-Tipler
Cap. 13 Eisberg

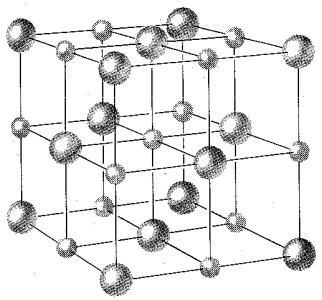
Sólidos

- Iônicos
- Covalentes
- Metálicos
- Moleculares

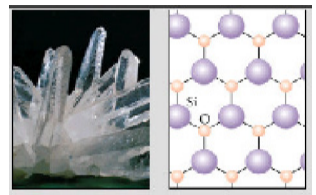
Moleculares: moléculas tão estáveis que mantém individualidades.
Ligação por van der Waals (fraca, ~10^{-2} eV) $\Rightarrow T_{amb} \Rightarrow$ dissociação.
Sólidos apenas a $T << T_{amb}$. Fusão do H_2 a 14 K.
Falta de e^- livres $\Rightarrow$ maus condutores de eletricidade e calor.
Facilmente deformáveis. Ex: gelo, compostos orgânicos

Iônicos: formação regular, alternada, 3D,
Não existem e^- livres. Má condução de eletricidade e calor.
Forças eletrostáticas fortes $\Rightarrow$ alta $T_{fusão}$, duros e pouco deformáveis. Interação dominante é a coulombiana entre os íons.

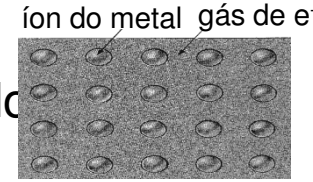
NaCl

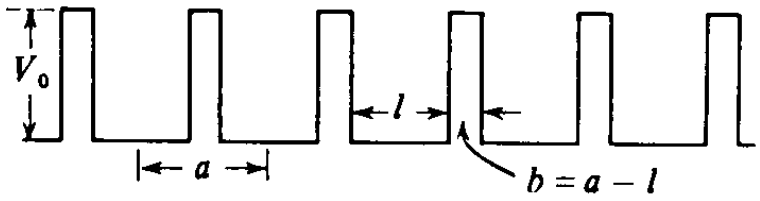


Covalentes: átomos ligados por e^- de valência compartilhados
Estrutura eletrônica rígida $\Rightarrow$ duros, pouco deformáveis e alta $T_{fusão}$.
Não existem e^- livres $\Rightarrow$ má condução de eletricidade e calor.
Alguns (como Si e Ge) são semicondutores.
Diamante, quartzo



Metálicos: os e^- livres podem vagar pelo material, sendo compartilhado por todos os átomos de uma molécula$\Rightarrow e^-$ ligados ao potencial combinado de todos os íons positivos do cristal, formando um gás, que atrai os íons.
$\Rightarrow$ bons condutores de eletricidade e calor.





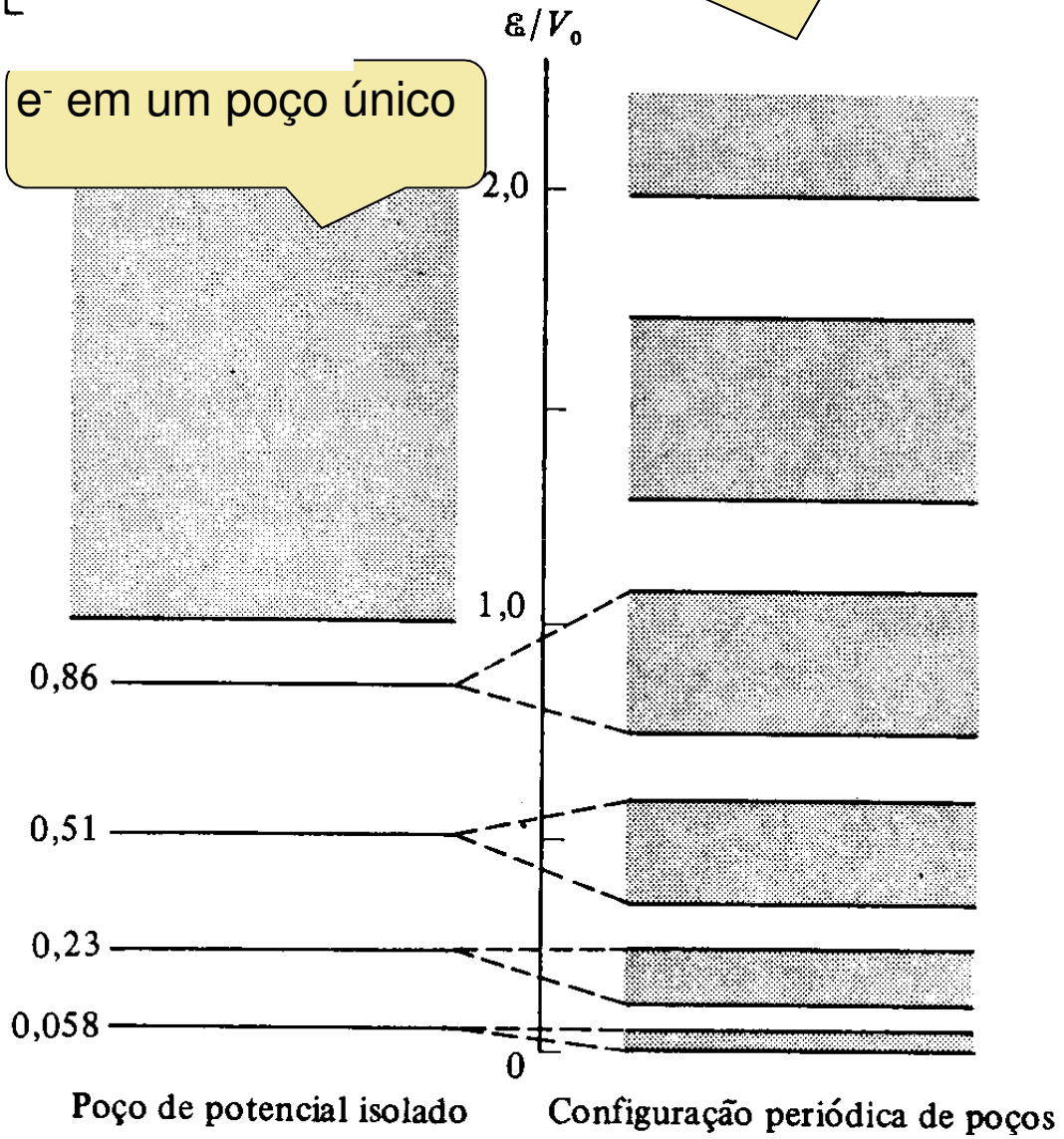
Modelo de Potencial de Kronig-Penney

e⁻ em sistema de poços periódicos, com $b = l/16$

e⁻ em um poço único

A eq. de Schrödinger pode ser resolvida para o potencial de Kronig-Penney, de onde aparecem as bandas permitidas e as proibidas. É interessante notar que intervalos proibidos aparecem para determinados valores de comprimento de onda (k).

$$k = \pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{2\pi}{a}, \pm\frac{3\pi}{a}, \ldots\ldots$$



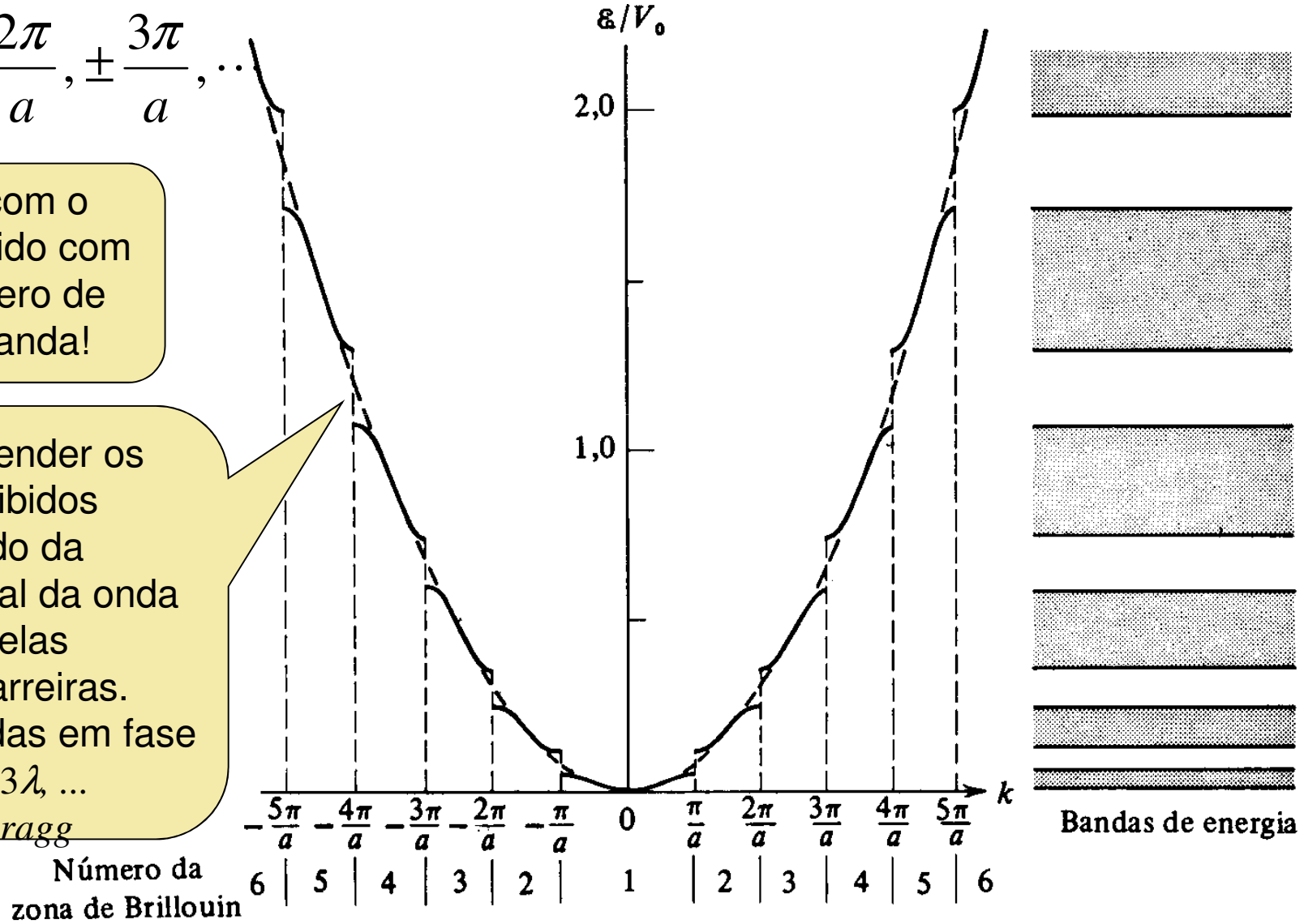
Rede unidimensional de periodicidade a:

Descontinuidades em

$$k = \pm\frac{\pi}{a}, \pm\frac{2\pi}{a}, \pm\frac{3\pi}{a}, \ldots$$

Concordam com o resultado obtido com base no número de estados da banda!

Podemos entender os intervalos proibidos como resultado da reflexão parcial da onda progressiva pelas sucessivas barreiras. Ondas refletidas em fase $\Rightarrow 2a = \lambda, 2\lambda, 3\lambda, \ldots$ (*condição de Bragg*

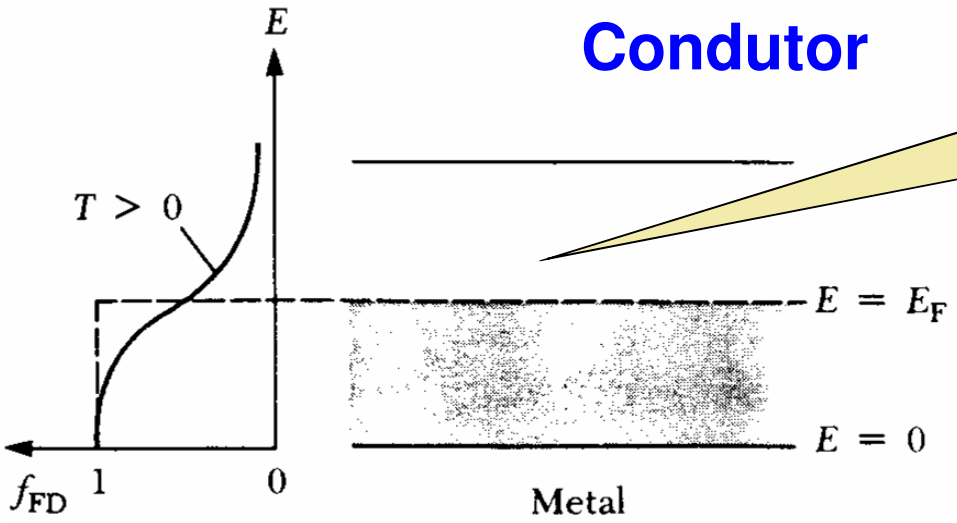


Condução – metais, isolantes e semicondutores

O comportamento de um sólido em relação à condução de eletricidade depende da distribuição e população dos seus níveis de energia. As bandas criadas por níveis que, no átomo isolado, correspondiam a subcamadas fechadas têm todos os seus níveis ocupados.

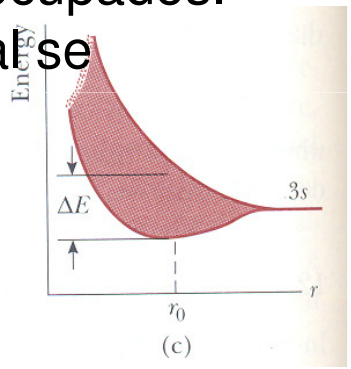
As bandas geradas pelos níveis onde se encontram os e^- de valência podem estar total ou parcialmente ocupadas.

Um campo elétrico aplicado ao material provoca um aumento na energia dos e^-, desde que existam níveis de energia disponíveis para serem ocupados. Caso contrário, os e^- não conseguem adquirir energia e o material se comporta como um isolante.



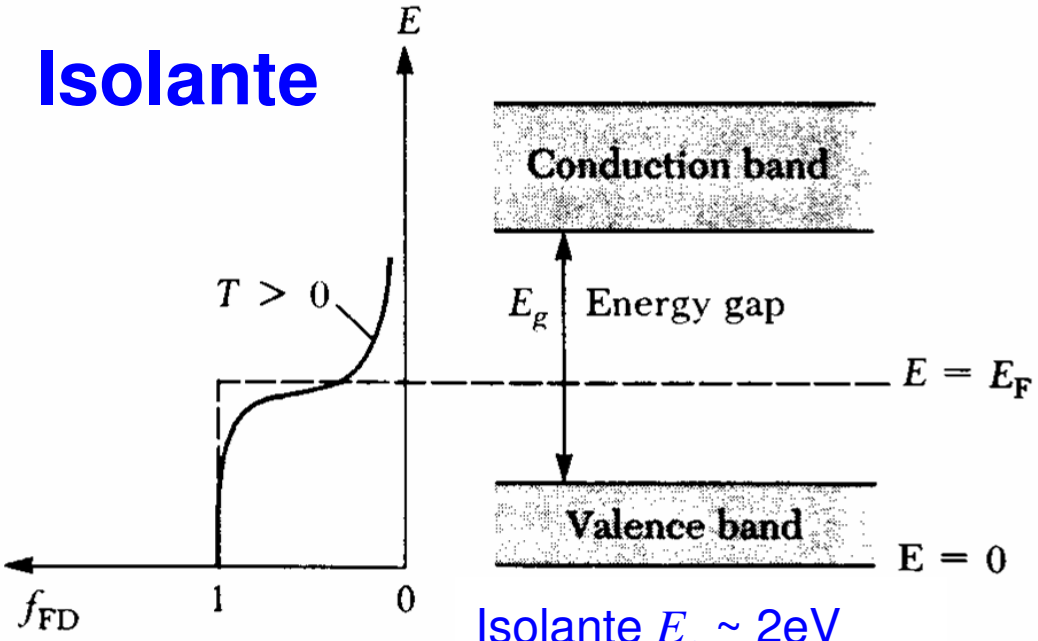
Condutor

A condução elétrica em metais é entendida se considerarmos a banda 3s parcialmente preenchida



Níveis abaixo da energia de Fermi são preenchidos e os acima estão vazios (T=0). Com T>0 alguns e^- são termicamente excitados acima de E_F. Os e^- encontram níveis vazios e estão livres para se mover pois existem muitos estados de energia desocupados.

Isolante



Isolante E_g ~ 2eV

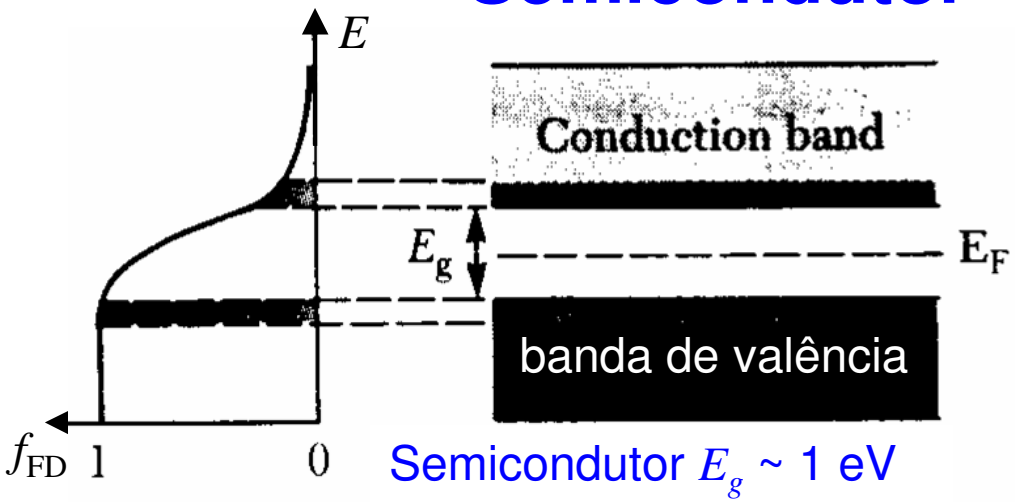
Quando um campo elétrico é suficientemente intenso para promover e^- para a banda de condução, ocorre a ruptura do dielétrico.

Um sólido é considerado um isolante, quando sua banda de valência está completa e há uma separação, superior a ~ 2 eV, até a primeira banda disponível, a banda de condução.

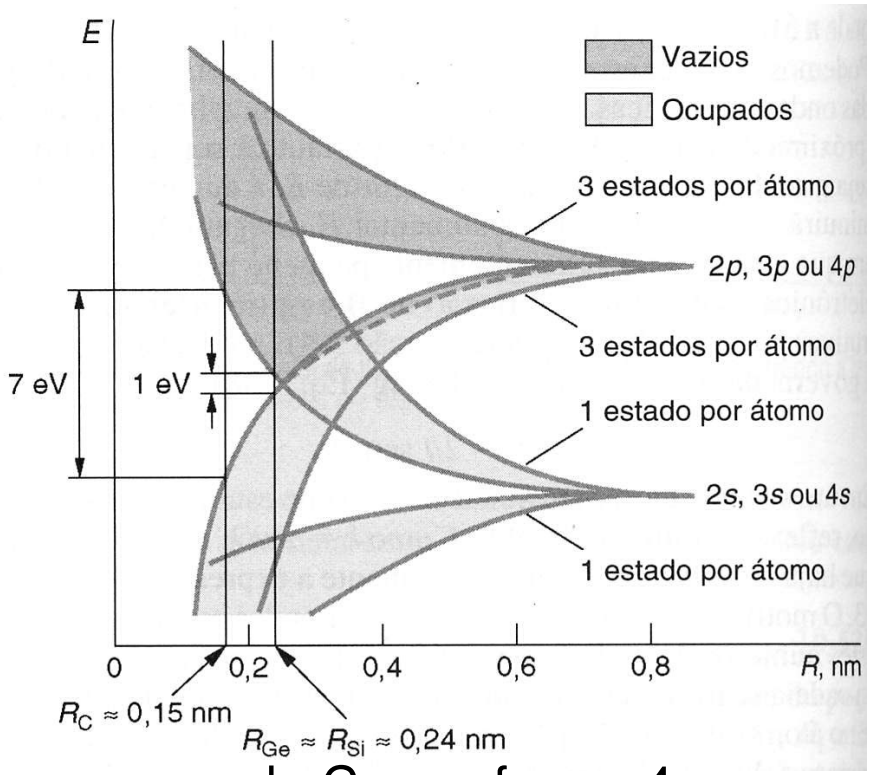
Quase todos os cristais iônicos são isolantes, pois ambos os íons têm suas camadas fechadas, como no caso do NaCl. A banda vazia mais próxima vem dos estados excitados dos íons Na^+ e Cl^-, que apresentam uma diferença de energia muito grande em relação à camada de valência.

A excitação térmica, ou mesmo os campos elétricos usualmente empregados, não são suficientes para conseguir promover um e^- da banda de valência para a de condução.

Semicondutor

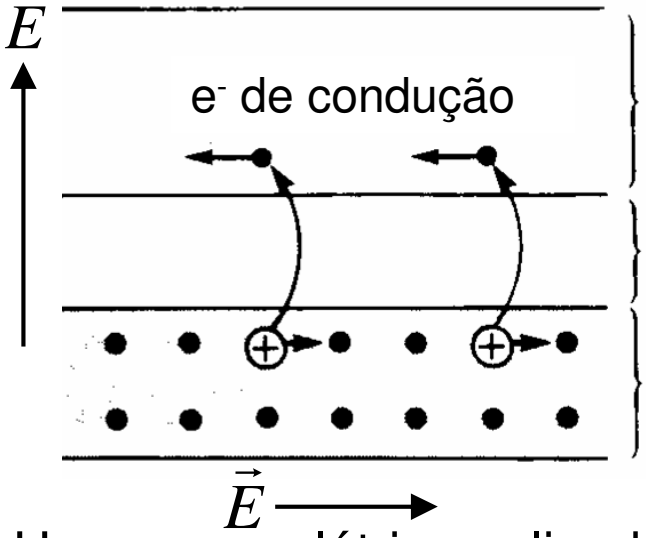


Semicondutor E_g ~ 1 eV



Quando a largura da banda proibida é pequena (menor que 2 eV), o sólido é considerado um semicondutor. Consideremos o caso do C, que forma 4 ligações covalentes com outros C para formar o diamante. Dos 8 estados que o orbital híbrido *sp* tem, apenas 4 formam estados ligantes. Os outros 4 correspondem a autofunções espaciais anti-simétricas, com energias mais altas. Esses estados vão dar origem às bandas de condução.
Dependendo da distância interatômica, a separação entre as bandas de valência e de condução pode fazer do material um isolante (caso do diamante) ou um semicondutor (caso do Si e do Ge).
Semicondutor intrínseco: semicondutor puro, sem impurezas que afetem a distribuição de e^- ou buracos.

Condução elétrica em semicondutores



$\oplus \rightarrow$ buracos

$\bullet \rightarrow$ elétrons

Um campo elétrico aplicado a um semicondutor produz condução elétrica devido ao movimento dos e^- na banda de condução, bem como dos buracos na banda de valência. No caso dos buracos, o movimento também se deve aos e^-, que, devido ao campo, ocupam sucessivamente a vacância deixada pelo e^- promovido à banda de condução, fazendo com que a vacância se desloque no sentido oposto.

Uma característica interessante dos semicondutores é que sua condutividade aumenta (e sua resistividade diminui) com o aumento de T (contrário aos metais)
Com o aumento de T o no. de e^- aumenta já que mais e^- são excitados e enviados a banda de condução (o no. de buracos também aumenta.)

Resumo: Condutor, Isolante e Semicondutor

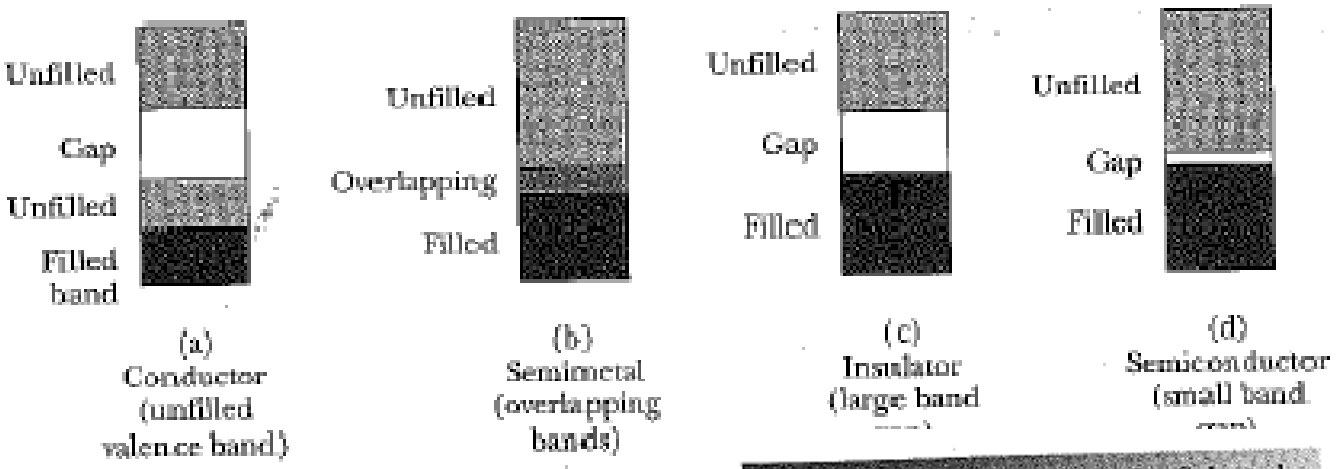


Figure 11.6 Possible band structures: (a) a conductor with an unfilled valence band, (b) a conductor with overlapping valence and conduction bands (a semimetal), (c) an insulator due to its large band gap, and (d) a semiconductor (due to its small band gap).

O aumento do número de elétrons nos estados excitados explica a dependência da temperatura da resistividade dos semicondutores , somente aqueles elétrons que podem pular da banda de valência para a banda de condução estão disponíveis para participar do processo de condução nos semicondutores. Cada vez mais elétrons podem ser encontrados na banda de condução:

se T aumenta, então a resistividade deste semicondutor diminui

Table Energy Gaps for Selected Semiconductor Materials at $T = 0$ K and $T = 300$ K

Material	E_g (eV) $T = 0$ K	$T = 300$ K
Si	1.17	1.11
Ge	0.74	0.66
InSb	0.23	0.17
InAs	0.43	0.36
InP	1.42	1.27
GaP	2.32	2.25
GaAs	1.52	1.43
GaSb	0.81	0.68
CdSe	1.84	1.74
CdTe	1.61	1.44
ZnO	3.44	3.2
ZnS	3.91	3.6

From C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 6th ed., New York: Wiley (1986), p. 185.

Probabilidade de ocupação na banda de condução:

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{(E-E_F)/kT} + 1}$$

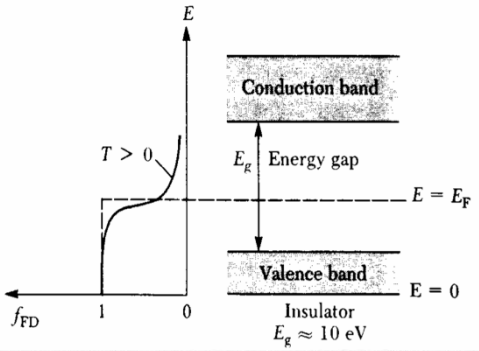
$T = 300K$

$kT \sim 0.025eV$

$kT = 0.10/4 = 0.025$

$E - E_F = 4kT = 0.10$

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{e^{0,10/0,025} + 1} = 0,019$$



$E - E_F$ (eV)	0,05	0,10	0,25	1,0	2,5	7,5
Múltiplo de kT	2	4	10			
$f_{FD}(E)$	0,12	0,019	$5,1 \times 10^{-5}$	$6,5 \times 10^{-18}$		

129

O número relativo de elétrons

Se E_g é 0,5eV, 10^{-5} dos e- que se encontram no alto da banda de valência serão excitados para a banda de condução

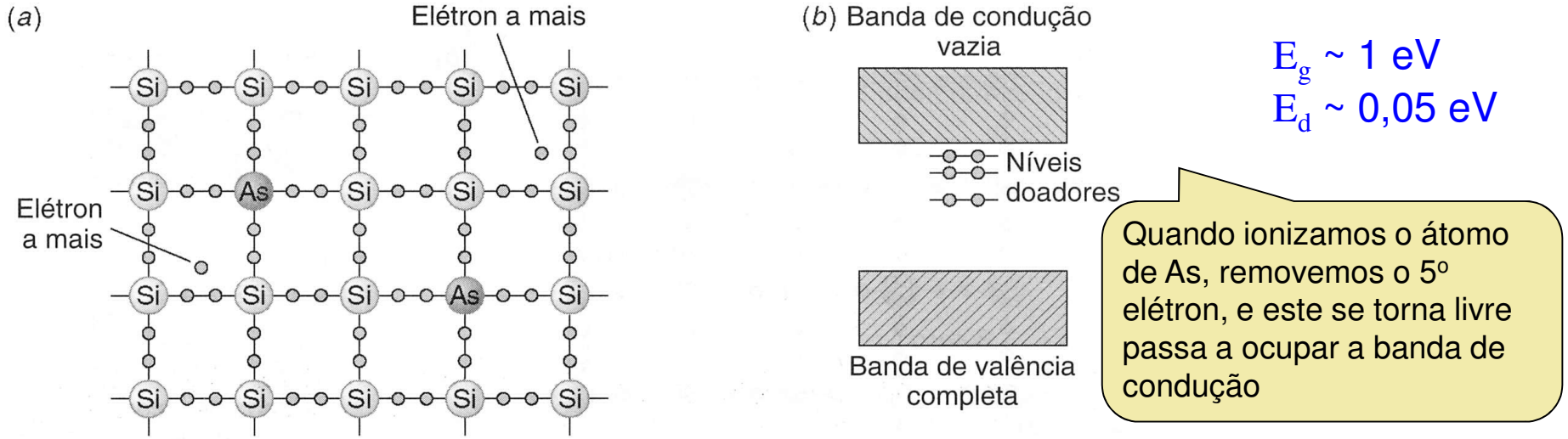
Tabela 10-5 Largura da banda proibida E_g e constante dielétrica κ para alguns semicondutores

Semicondutor	E_g (eV) 0 K	E_g (eV) 293 K	κ	Semicondutor	E_g (eV) 0 K	E_g (eV) 293 K	κ
Si	1,15	1,11	11,8	CdTe	1,56	1,44	10,2
Ge	0,74	0,67	15,9	PbS	0,28	0,37	17,0
Te	—	0,33	—	InP	1,41	1,27	12,4
GaAs	1,53	1,35	13,1	CdSe	1,85	1,74	10,1
InSb	0,23	0,16	17,8	GaP	2,40	2,24	11,1
ZnS	—	3,54	5,2	PbTe	0,19	0,25	30,1

Dopagem de semicondutores

O processo de dopagem de semicondutores refere-se à adição de pequena quantidade de impureza, com propriedades adequadas, de forma a afetar o comportamento elétrico do semicondutor da maneira desejada. Existem dopantes doadores e receptores.

Tipo n – Si dopado com As (que tem valência 5)



Resolvendo a Eq. de Schrödinger para o potencial periódico que o e^- enxerga, obtemos os valores das energias e dos valores médios dos raios das órbitas de Bohr para o quinto elétron do arsênico:

$$E_n = -\frac{1}{2}\left(\frac{ke^2}{\hbar}\right)\frac{m^*}{\kappa^2 n^2}$$

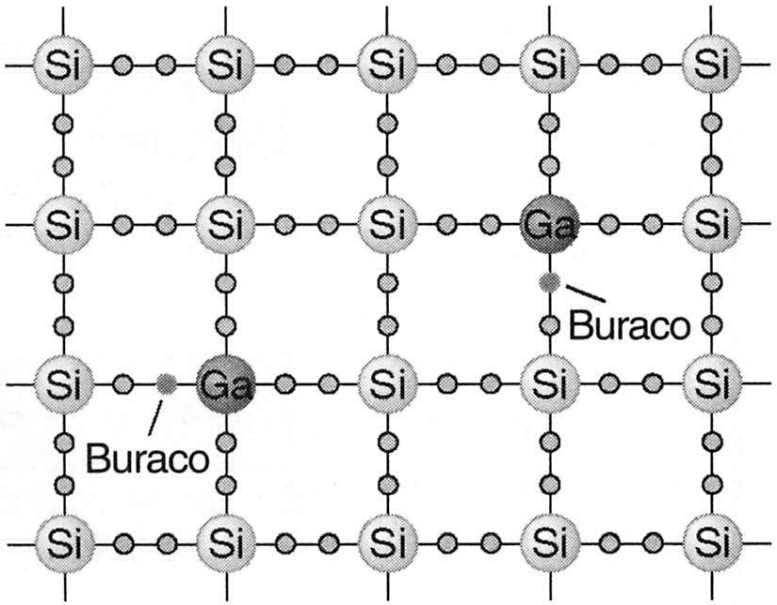
Massa efetiva

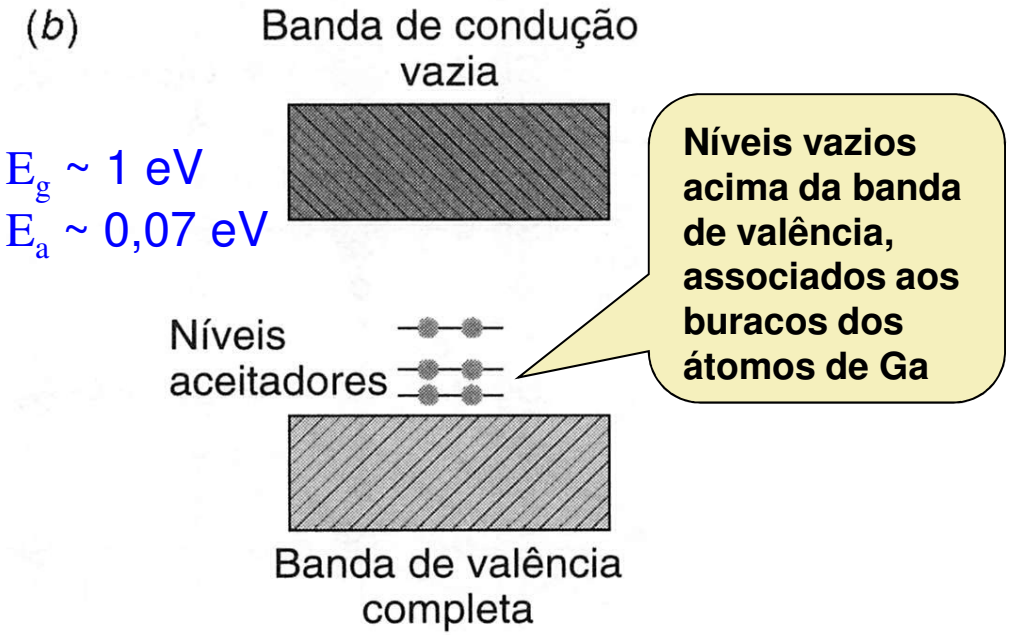
Constante dielétrica do material

$$\langle r_n \rangle = a_0 n^2 \frac{m_e}{m^*}\kappa$$

Raio de Bohr =0.0529nm

Tipo p – Si dopado com Ga (que tem valência 3)

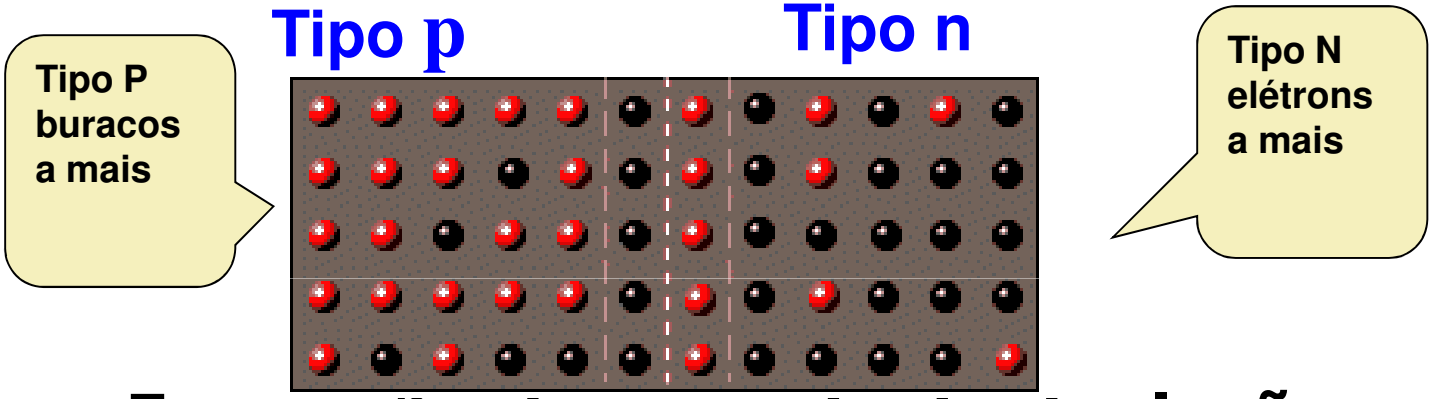




Ionizar o sistema buraco-íon, significa transferir os elétrons da banda de valência para os níveis aceitadores, criando buracos nesta banda que contribuirão para a condução da eletricidade. O fato da condução nos semicondutores tipo p se deve principalmente ao movimento dos buracos.

Densidades típicas de dopantes (n ou p): 10^{13} a 10^{19} cm^{-3}.

Ao se juntar um elemento p a um elemento n, temos a seguinte situação: o elemento p tem excesso de buracos; o elemento n tem excesso de elétrons. No ponto onde os dois cristais se tocam, tende a haver uma migração de elétrons e buracos, até que se estabeleça um equilíbrio.



Formação da camada de depleção

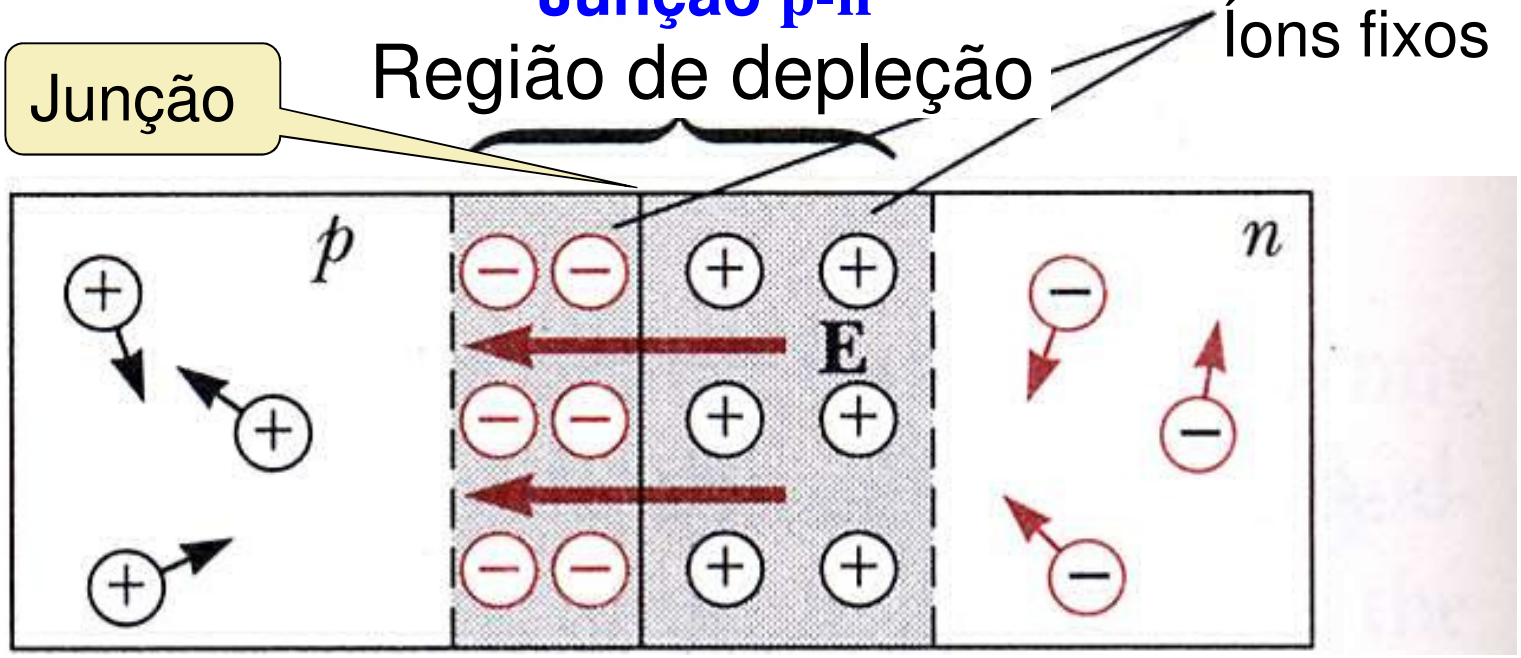
Observe que se forma um equilíbrio na região da junção, deixando de existir portadores majoritários (elétrons livres ou buracos). A camada de depleção é uma espécie de "zona morta" onde não há espaço para movimentação de elétrons e lacunas.

http://www.agostinhorosa.com.br/artigos/transistor-6.html

Componentes eletrônicos são baseados em semicondutores

A possibilidade de controle das características dos semicondutores em relação à condução elétrica, fazem deles materiais muito utilizados na produção de componentes eletrônicos, tais como diodos, transistores, LEDs, lasers, detectores, etc.,

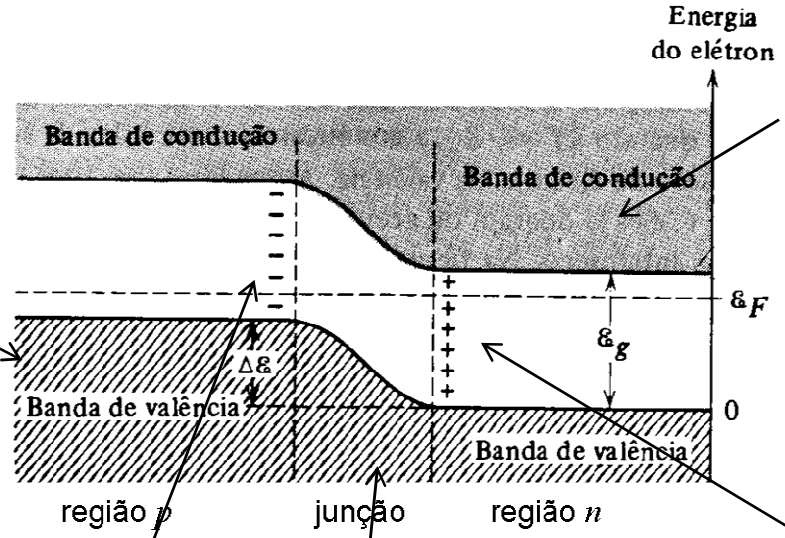
Junção p-n



Quando um semicondutor tipo n entra em contato com um tipo p, há uma concentração desigual de elétrons e buracos e isto promove a difusão de elétrons para o tipo p e de buracos para o lado n, até o equilíbrio. Dá origem uma ddp V entre o lado n e o lado p (potencial de contato).

Junção p-n: não polarizada a temperatura ambiente

DIODO



Níveis doadores

Níveis aceitadores

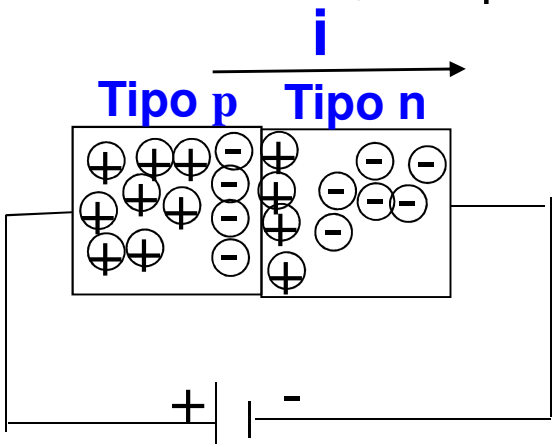
Acumulo de elétrons no tipo p

Falta de elétrons ou acumulo de buracos no lado n

Condensador plano de placas paralelas com uma carga negativa de um lado e carga positiva de outro

fonte de tensão externa

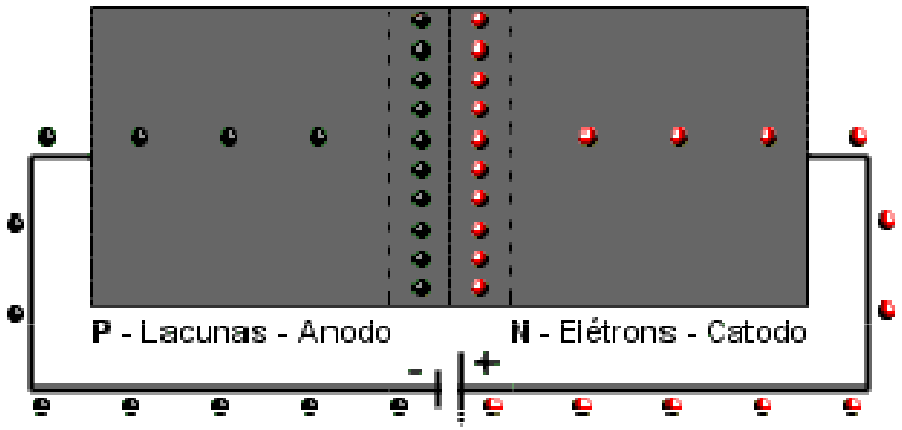
Quando submetemos o diodo a uma tensão, ou seja, colocarmos uma bateria em seus terminais, conectamos o terminal negativo (fluxo de elétrons) da bateria à porção N do diodo e o terminal positivo (fluxo de buracos) à porção P. Desta forma, a região N, com excesso de elétrons, recebe ainda mais elétrons, e a porção P recebe ainda mais buracos:



polarização direta

Com esse movimento, forma-se uma corrente elétrica. O semicondutor passa a se comportar como um condutor normal.

Vamos agora inverter a polaridade da bateria. Vamos conectar o terminal positivo da bateria à porção N do diodo e o terminal negativo à porção P. Desta forma, os elétrons da região N são atraídos pelas lacunas do pólo positivo da bateria e as buracos da região P são completadas pelos elétrons do pólo negativo. Observe o que acontece:



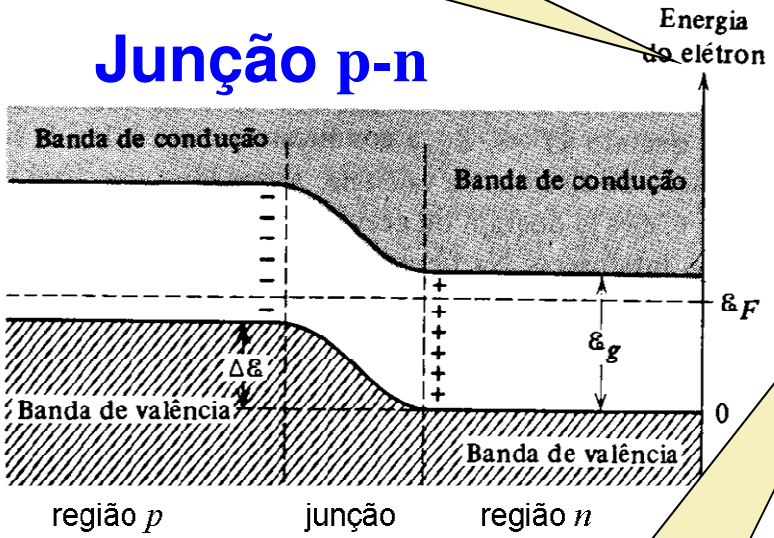
Polarização inversa

A camada de depleção aumenta sensivelmente. Se ela já dificultava a passagem de corrente, agora torna-se virtualmente impossível transpô-la. Os portadores majoritários de cada lado ficam ainda mais isolados. O semicondutor, então, passa a se comportar como um isolante. Não há passagem de corrente elétrica.

http://www.agostinhorosa.com.br/artigos/transistor-6.html

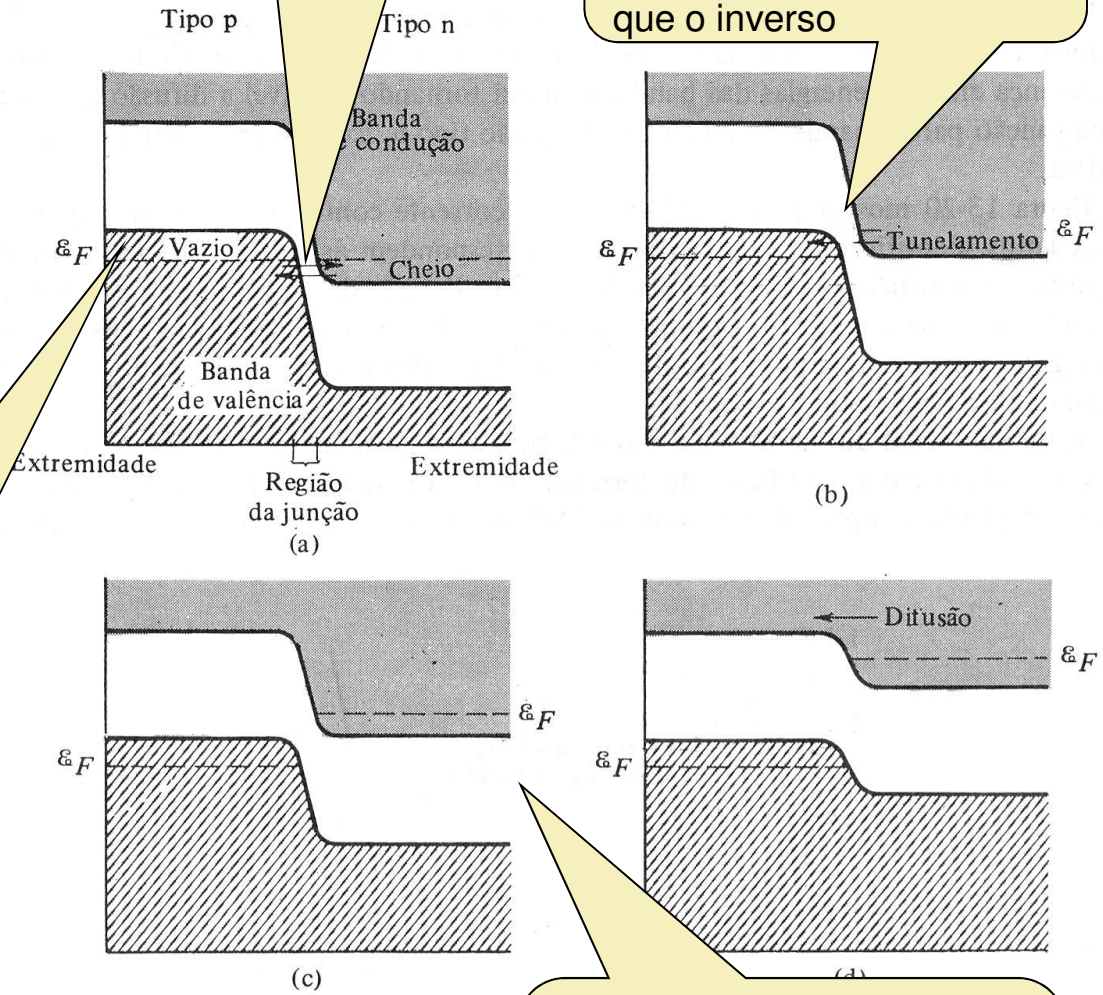
Níveis de energia dos elétrons de uma junção pn (não polarizada)

Junção p-n



No equil. e sem polarização a corrente é igual nos dois sentidos

Com tensão de polarização a corrente do lado n para o p é maior que o inverso

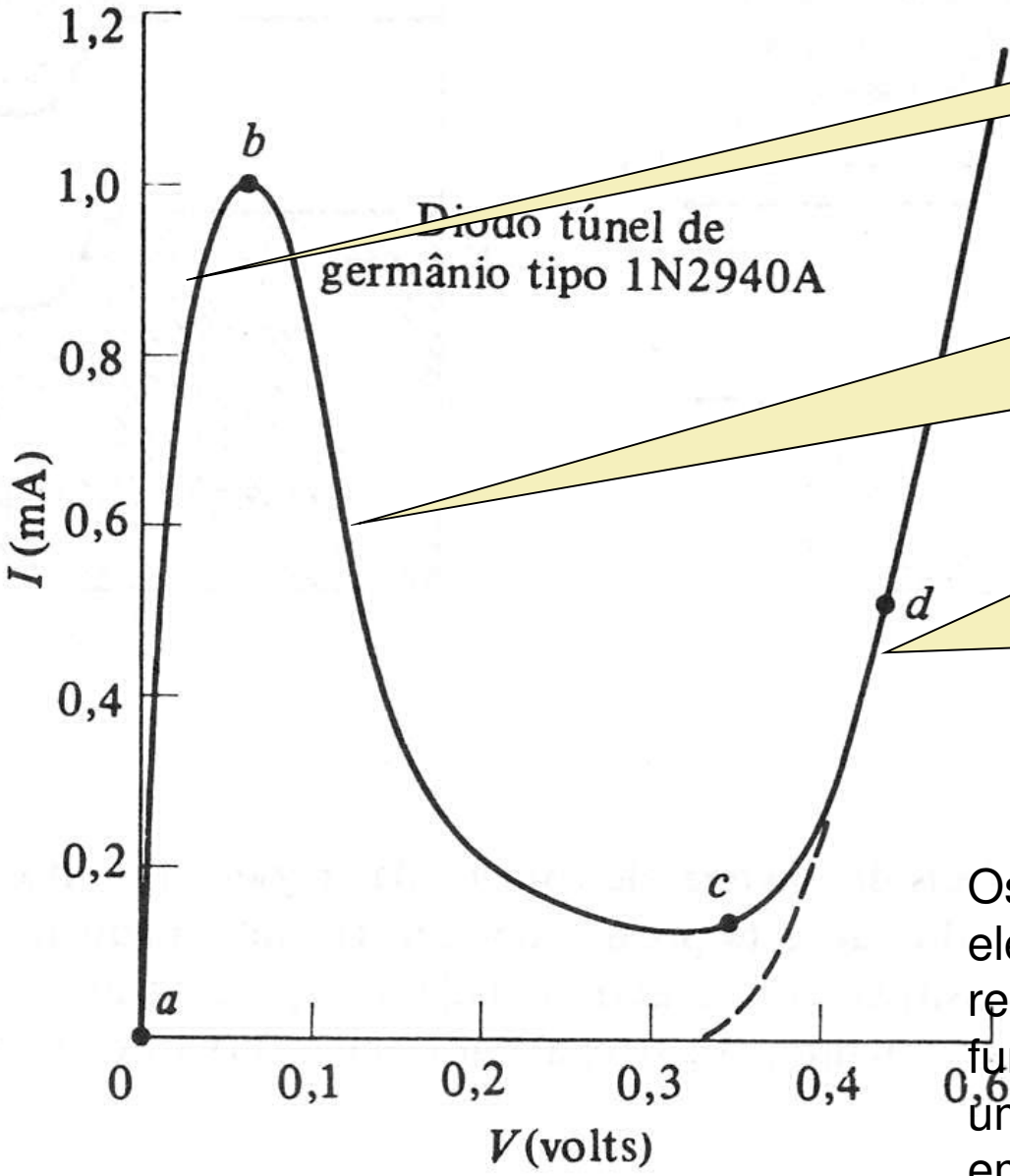


quando o lado n e o lado p (da junção pn) são fortemente dopados, a parte inferior da banda de condução fica abaixo da parte superior da banda de valência – há tunelamento

⇨ **Diodo túnel**

Com o aumento maior da polarização a corrente de tunelamento deixa de existir. Embora a i_normal tenha aumentado i_total diminui

Curva característica



O aumento da tensão produz um aumento da corrente normal e de tunelamento

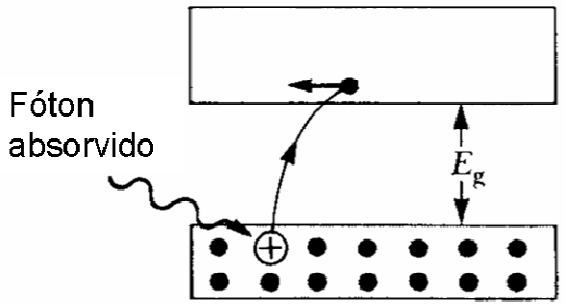
Com o aumento da tensão aplicada há uma diminuição da corrente de tunelamento e o diodo se comporta como se sua resistência fosse negativa

a corrente de tunelamento se torna tão pequena , e o diodo volta se comportar como um diodo comum

Os diodos túnel são usados em circuitos eletrônicos devido a seu tempo de resposta rápido, pois quando está funcionando perto do máximo da curva, uma pequena variação de tensão resulta em uma grande variação de corrente.

Absorção e emissão de luz

Absorção e emissão de luz por semicondutores são processos análogos àqueles que ocorrem em átomos isolados, com a diferença de que níveis atômicos são substituídos por bandas.

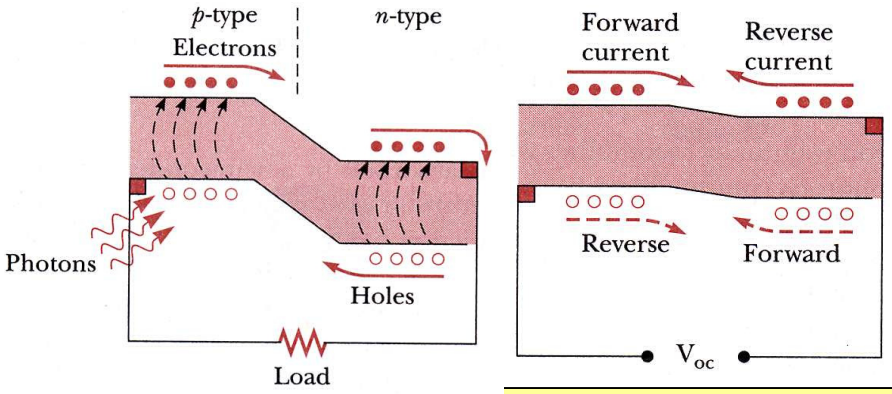


Célula Solar: também apresenta junções pn. Um fóton de E > largura da banda proibida incide sobre a região p, transfere o e^- para a banda de condução deixando buraco na banda de valência, excesso de

+ cargas positivas na região p
- cargas negativas na região n

} ddp entre as duas regiões ~ 0.6V

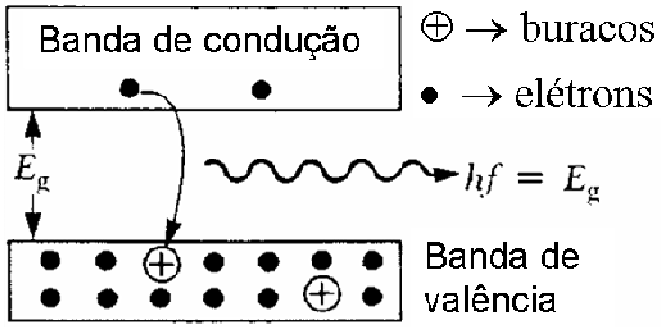
Se uma resistência é ligada e estas regiões, temos corrente elétrica



Parte da energia de luz incidente é transformada em energia elétrica

A corrente no resistor é proporcional ao nº de fótons, que por sua vez é proporcional a intensidade de luz incidente

Processo inverso da célula solar é o



Diodo fotoemissor: uma partícula de alta energia (e-) ao atravessar o semicondutor cria muitos pares e^- - buracos logo tenho um pulso de corrente registra a passagem da partícula. Quando a junção pn é polarizada diretamente há uma corrente elevada e muitos elétrons se recombinam com os buracos para emitir fótons.

⇩

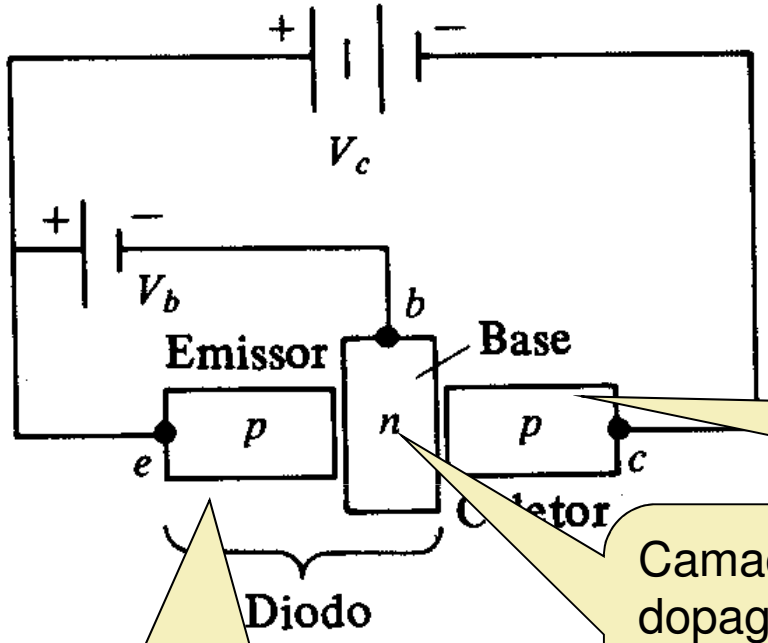
LED (**Light-Emitting Diode**)

Os LED são usados em lâmpadas piloto, mostradores digitais, etc...

O principio de funcionamento do laser semicondutor é o mesmo do LED

Transistor

O transistor funciona como um amplificador de sinal!



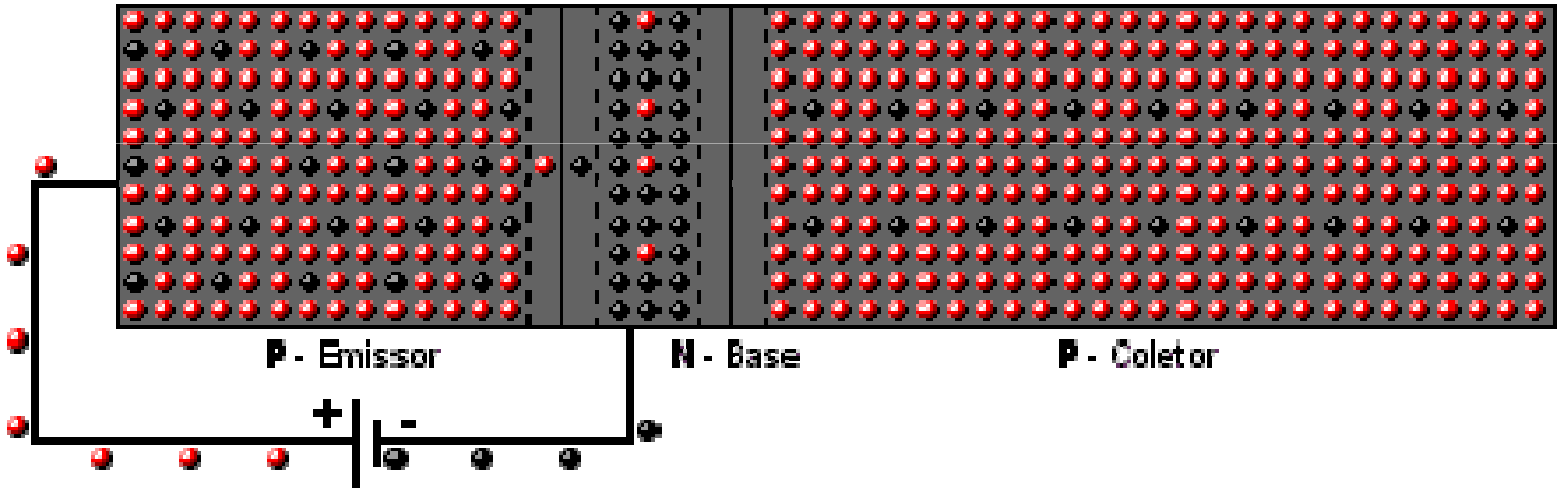
Quando polarizamos diretamente um diodo vimos que este conduz eletricidade. No transistor temos a capacidade de controlar quanto de eletricidade é conduzida.

Camada com espessura grande com pequena dopagem e é a responsável para receber os elétrons que vem do emissor e passam pela base

Camada com espessura fina com dopagem média, não impede que as cargas que vem do emissor cheguem ao coletor (base)

Camada com espessura média e muitos buracos, fornecedora de cargas positivas

•bateria entre o emissor e a base.
•polarização direta, terminal negativo (fluxo de elétrons) da bateria ao emissor (porção N - excesso de elétrons) e o terminal positivo (fluxo de buracos) à base (porção P - excesso de buracos). Desta forma, a região N, com excesso de elétrons, recebe ainda mais elétrons, e a porção P recebe ainda mais lacunas.



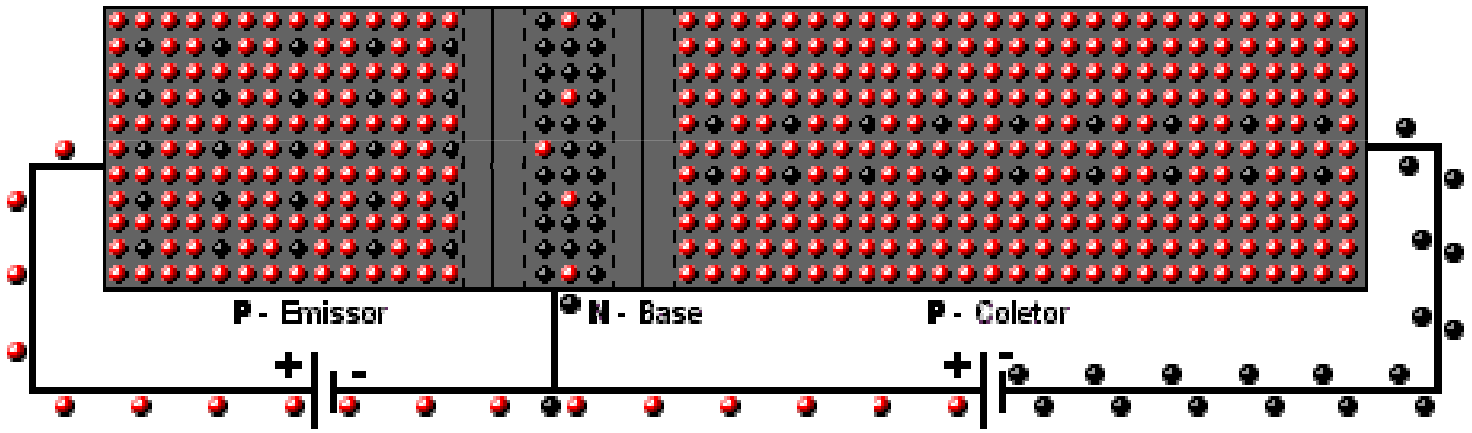
http://www.agostinhorosa.com.br/artigos/transistor-6.html

Polarização direta emissor-base

•Como no caso do diodo, a polarização direta faz com que a porção emissor-base se comporte exatamente como um condutor.

Ao mesmo tempo: polarizar inversamente o conjunto base-coletor, conectando o terminal positivo (fluxo de buracos) da bateria ao coletor (porção N - excesso de elétrons) e o terminal negativo (fluxo de elétrons) à base (porção P - excesso de buracos).
Os elétrons do coletor serão atraídos pelas lacunas do pólo positivo da bateria e as lacunas da base serão completadas pelos elétrons do pólo negativo. Como no caso do diodo, essa polarização inversa faz com que a porção base-coletor não conduza corrente.

Polarização simultânea



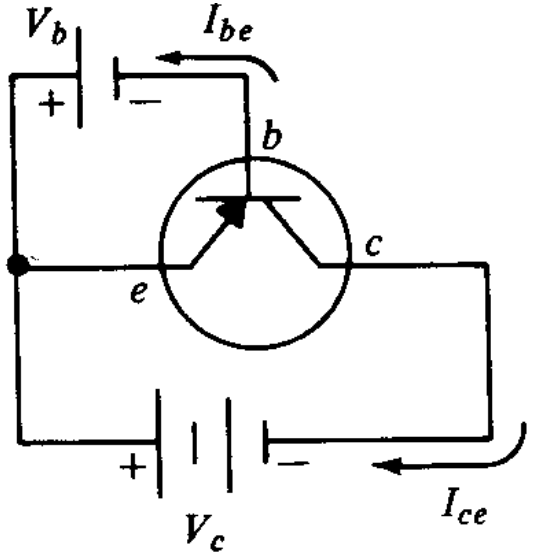
http://www.agostinhorosa.com.br/artigos/transistor-6.html

Na polarização emissor-base os elétrons se dirigiam para a base, atraídos pelo pólo positivo da bateria. Mas agora o coletor, que é bem maior e está com energia extra vinda do pólo negativo da bateria, exerce uma atração muito maior sobre esses elétrons. Como a base é muito fina, os elétrons tendem muito mais a atravessar a base e ir para o coletor do que fluir pela base para o pólo positivo da bateria. Desta forma, uma pequena parte da corrente fluirá pela base; a maior parte da corrente fluirá para o coletor. **A mágica da amplificação está acontecendo**

Transistor

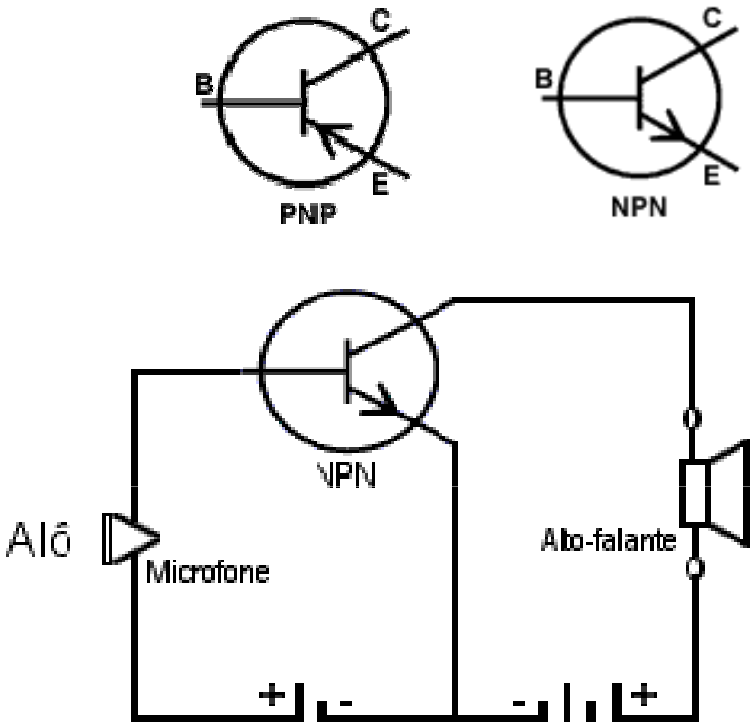
se aumentarmos a corrente que flui pela base (emissor-base), haverá um aumento na corrente que flui pelo coletor. Ou seja, podemos controlar a corrente vinda do emissor para o coletor agindo sobre a corrente da base. Isto é a corrente da base controla a corrente entre o emissor e o coletor.

como a corrente da base é muito pequena, basta aplicarmos uma pequena variação na corrente da base para obtermos uma grande variação na corrente do coletor. Pronto: entramos com uma pequena corrente (via base) e saímos com uma grande corrente (via coletor)



Analisamos um transístor do tipo PNP. Caso invertamos nosso sanduíche, criaremos um transístor NPN. O funcionamento é exatamente o mesmo, apenas invertendo-se o fluxo da corrente.

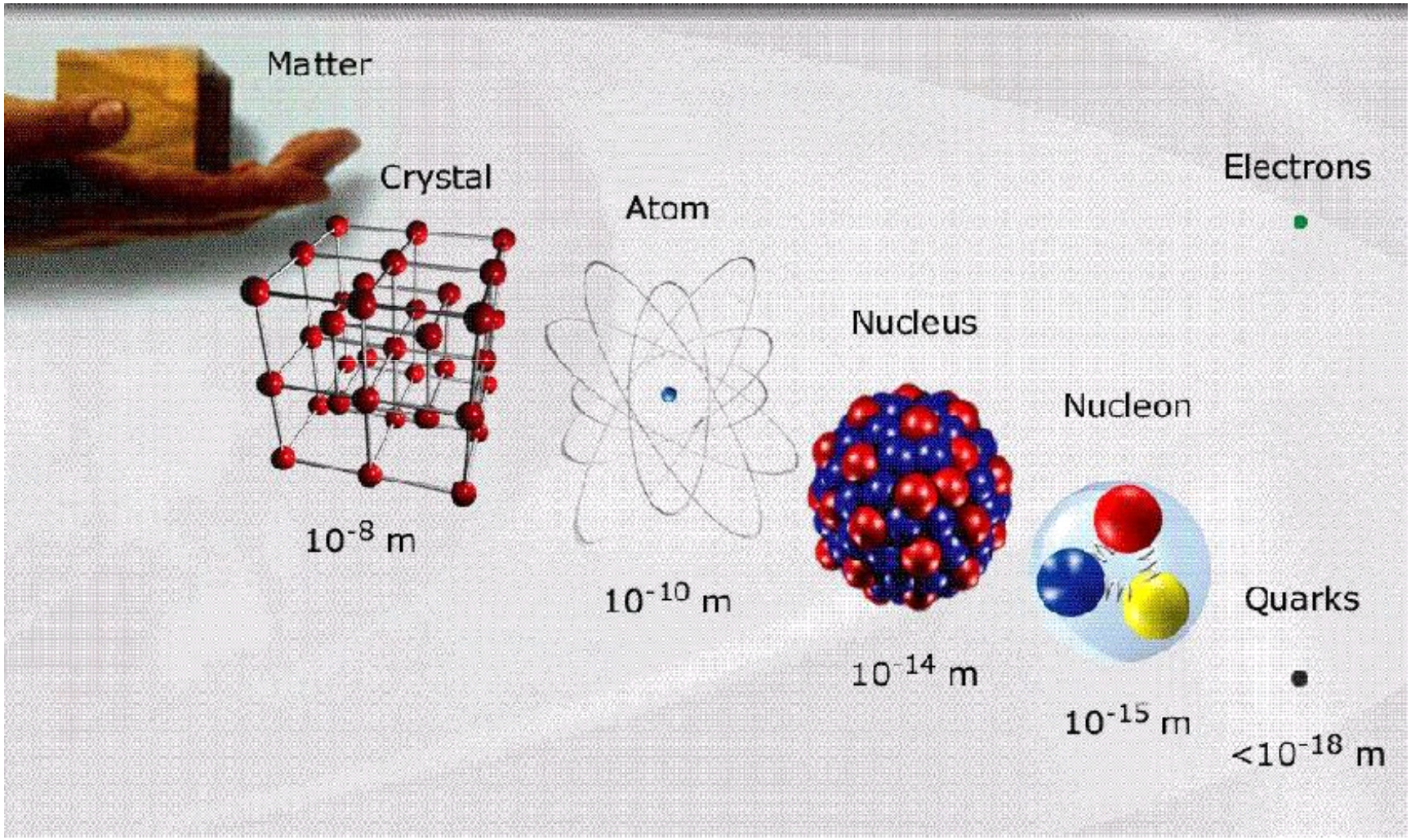
Nos esquemas eletrônicos os transístores são representados pelos seguintes símbolos:



Amplificação. (Inspirado em desenho da Lucent)

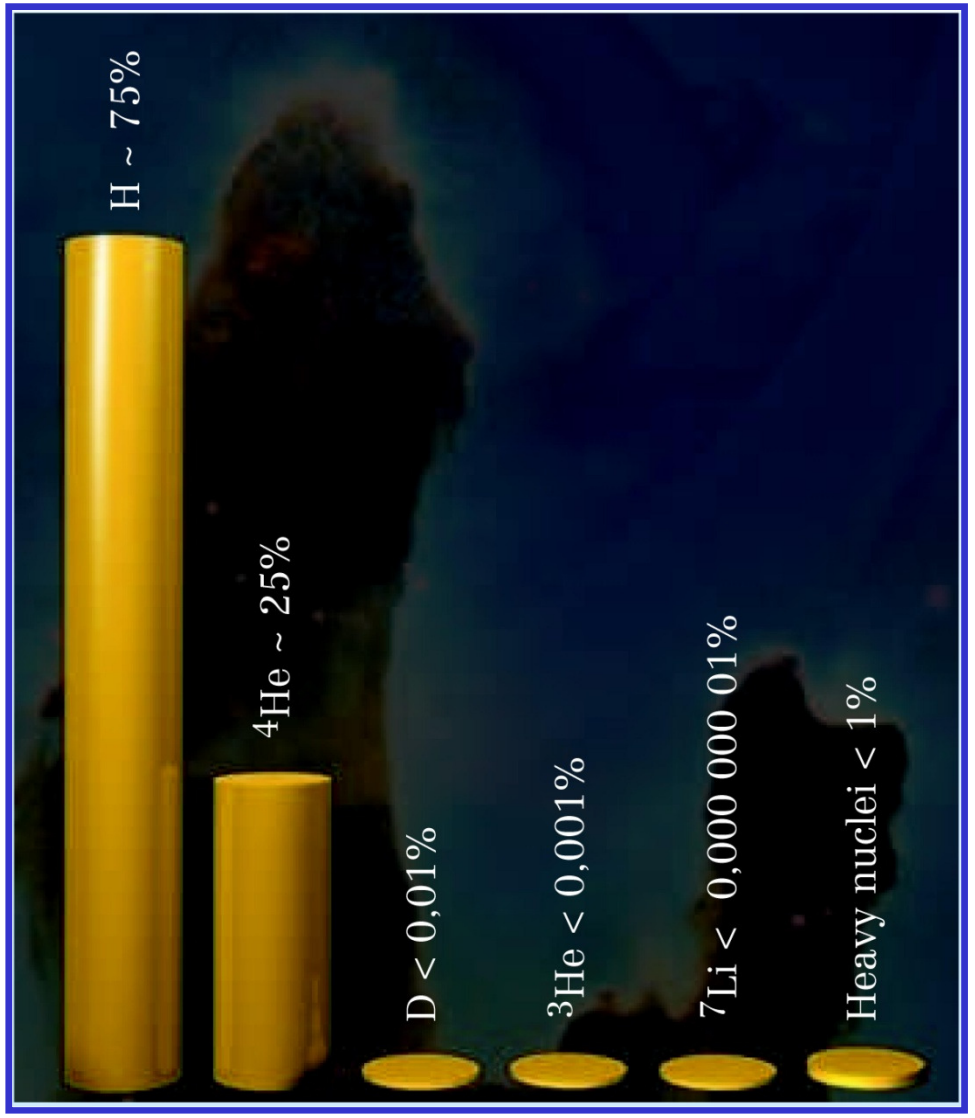
http://www.agostinhorosa.com.br/artigos/transistor-6.html

Do que as coisas são feitas?



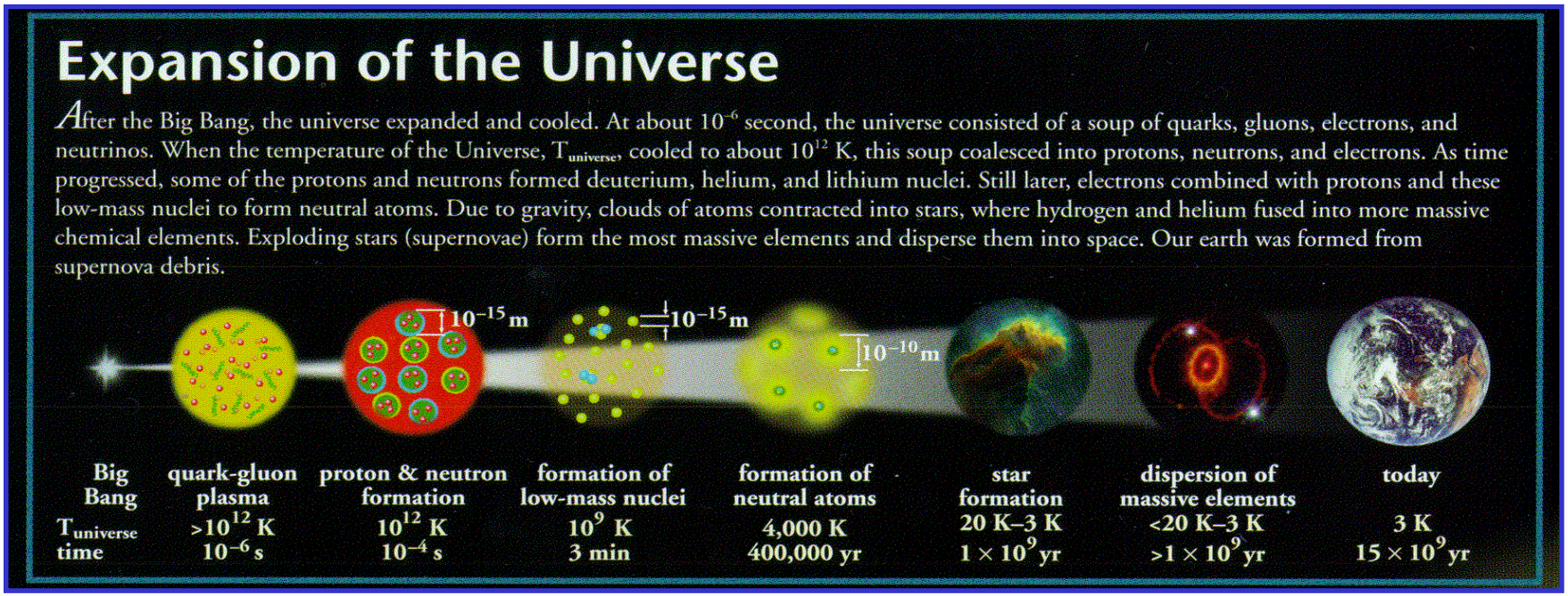
Alguns dados

- Mais de 99% da massa conhecida do Universo está sob a forma de núcleos atômicos.
- 3/4 dessa massa são prótons e quase todo o resto é composto por núcleos de hélio, com pequenas quantidades de deutério, carbono, ...



História dos núcleos

- Os núcleos atômicos não existiram desde sempre:
  - Os mais leves (deuteron, hélio, ...) foram formados poucos minutos após o Big Bang.
  - Os demais, muito mais tarde, durante a vida e a morte das estrêlas.

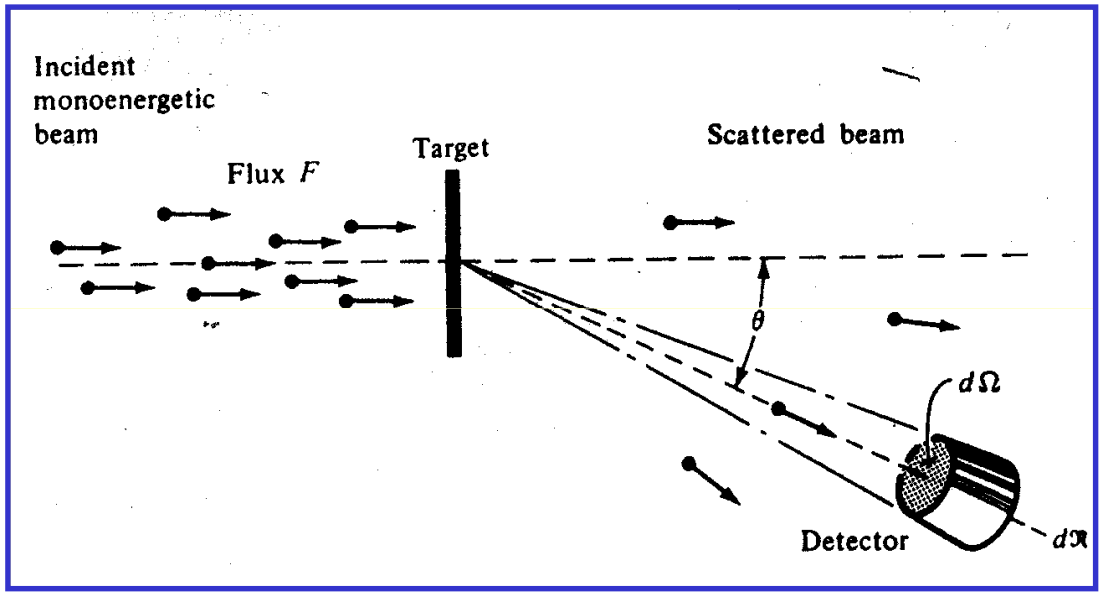


Física Nuclear: cronologia do início

Descoberta do RX (Röeting)	1895
Descoberta da Radioatividade (Becquerel)	1896
Separação química do Ra (Marie e Pierre Curie)	1898
Modelo atômico de Rutherford	1911
Descoberta de isótopos (J.J. Thomson)	1912
Transmutação nuclear induzida (Rutherford)	1919
Aplicação da MQ à radioatividade:	
– Decaimento α (Gamow, Gurney e Condon)	1928
– Decaimento β (Fermi)	1934
Descoberta do nêutron (Chadwick)	1932
Hipótese n-p (Heisenberg)	1932
Descoberta do pósitron (Anderson)	1932
Mésons e a força nuclear (Yukawa)	1935
Descoberta do méson μ (Anderson e Neddermeyer)	1936
Descoberta do méson π (Powell)	1946
Quebra da paridade no decaimento β (Lee e Yang)	1956

Primeiros modelos nucleares

- Em 1911, E. Rutherford coloca em cena o núcleo: seu modelo atômico demandava a existência de um objeto extremamente denso e massivo localizado no centro do átomo.
- Logo ficou claro também que o núcleo era a origem das emanações radioativas e fonte dessa energia.



Primeiros modelos nucleares

- MAS, qual a estrutura desses núcleos?
- A construção de modelos para o núcleo esbarrou numa dificuldade:
  - Prótons e elétrons eram as únicas partículas fundamentais conhecidas.
  - Gravitação e eletromagnetismo eram as únicas interações conhecidas.
- Os primeiros modelos nucleares foram construídos a partir desses ingredientes.

Primeiros modelos nucleares

- Pensemos como um físico da época:
  - Os núcleos têm carga positiva igual ao número atômico (i.e., o número de elétrons), ou seja: +Ze.
  - A massa nuclear é aproximadamente um número inteiro, A, vezes a massa de um próton.
  - A~2Z
  - As partículas fundamentais são o próton e o elétron.
  - No decaimento β, elétrons são emitidos pelo núcleo.
  - A massa do elétron é muito (~2000 vezes) menor que a massa do próton.

Primeiros modelos nucleares

- Assim, nada mais natural do que:
  - O núcleo atômico ser constituído por 2Z prótons e Z elétrons.
  - A massa nuclear ser $M=Am_{próton}+(A-Z)m_e$
- MAS, as energias típicas do decaimento β nuclear estão na faixa de poucos MeV. (1 MeV ~ 0,16 pJ = $0,16x10^{-12}$ J).

Núcleos não podem conter elétrons

- O Princípio da Incerteza nos diz que:

  $\Delta p \Delta x \sim (h/2\pi)$

  Δx é da ordem de grandeza do raio nuclear: 10 fm (10×10^{-15} m)

  $\Delta p \sim (h/2\pi)/\Delta x \sim 20$ MeV/c

  – $E \sim [(pc)^2+(m_e c^2)^2]^{1/2} \sim 20$ MeV (~ 3,2 pJ)
- Considerando que no decaimento β, elétrons com cerca de 1 MeV (~ 0,16 pJ) são emitidos pelo núcleo, podemos concluir que:
  – Os elétrons não "cabem" dentro do núcleo.

Os núcleos não contêm elétrons

- O Princípio da Incerteza nos diz que:

  $\Delta p \Delta x \sim (h/2\pi)$

  – $c\Delta p \sim (E^2-(m_e c^2)^2]^{1/2}$

    - $c\Delta p \sim [(1,0)^2-(0,5)^2]^{1/2}$

      $\Delta p \sim 0,9$ MeV/c

  $\Delta x \sim (hc/2\pi)/c\Delta p \sim 197/0,9 \sim 227$ fm

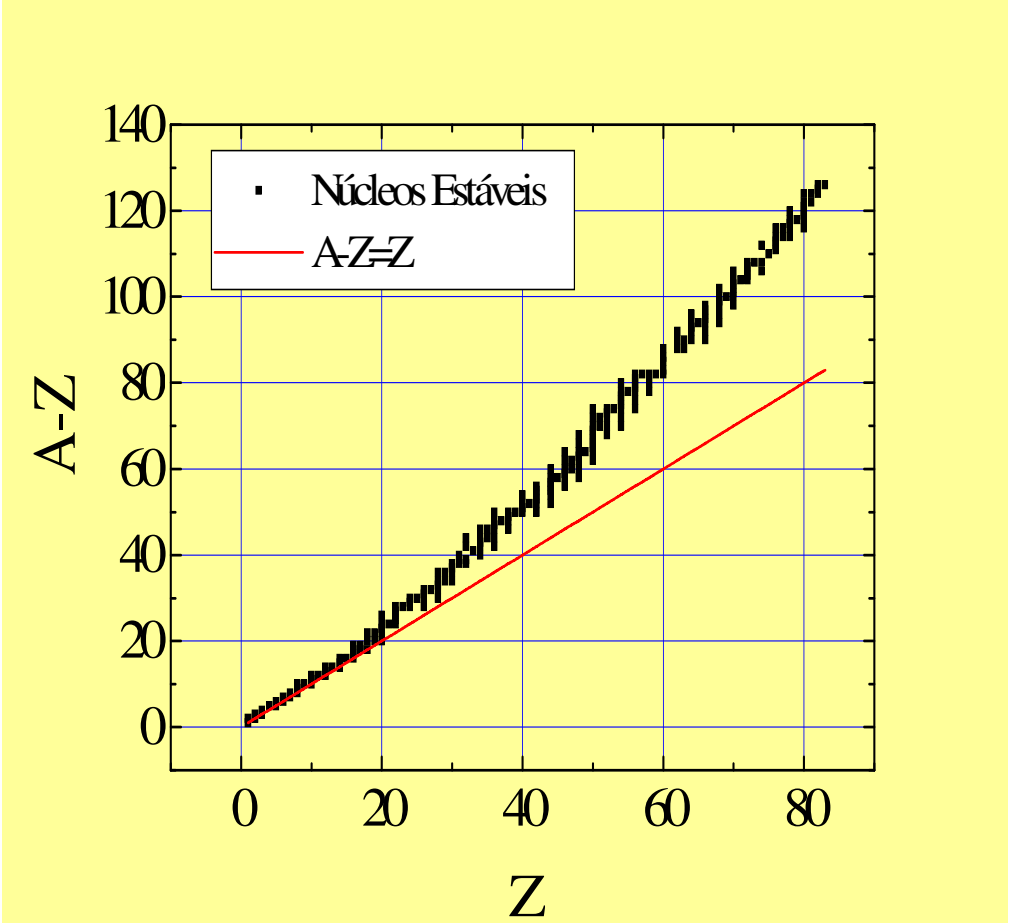
- Os núcleos têm raios de cerca de 10 fm (10×10^{-15} m)
- Conseqüência: os elétrons não "cabem" dentro do núcleo

Década de 30

- A década de 1930 foi importante para a Física Nuclear:
  - A primeira antipartícula, o pósitron, é descoberta por Anderson & Neddermayer.
  - Lawrence (Ciclotron) e Cockroft & Walton constroem máquinas para estudar o núcleo atômico acelerando partículas e lançando-as sobre esses núcleos.
  - O neutrino é postulado.
  - O NÊUTRON É DESCOBERTO.
  - Irene & Joliot Curie produzem o ^{30}P, um núcleo radioativo artificial.
  - Fissão Nuclear (Hahn & Strassman + Meitner & Frisch).

O nêutron

- O nêutron era uma necessidade!
- Vemos claramente que:
  - Até Z~20, A~2Z.
  - Para Z>20, A>2Z.
- Deveria existir algo para compensar a repulsão coulombiana dos prótons e ajudar a "grudar" os constituintes nucleares



Nomenclatura

- Número de massa: A=Z+N
- Os núcleos são representados por:

Número de massa
Número de prótons $Elemento \rightarrow {}^{A}_{Z}X$

Nuclídeos com mesmo Z mas N ≠ ⇒ isótopos.

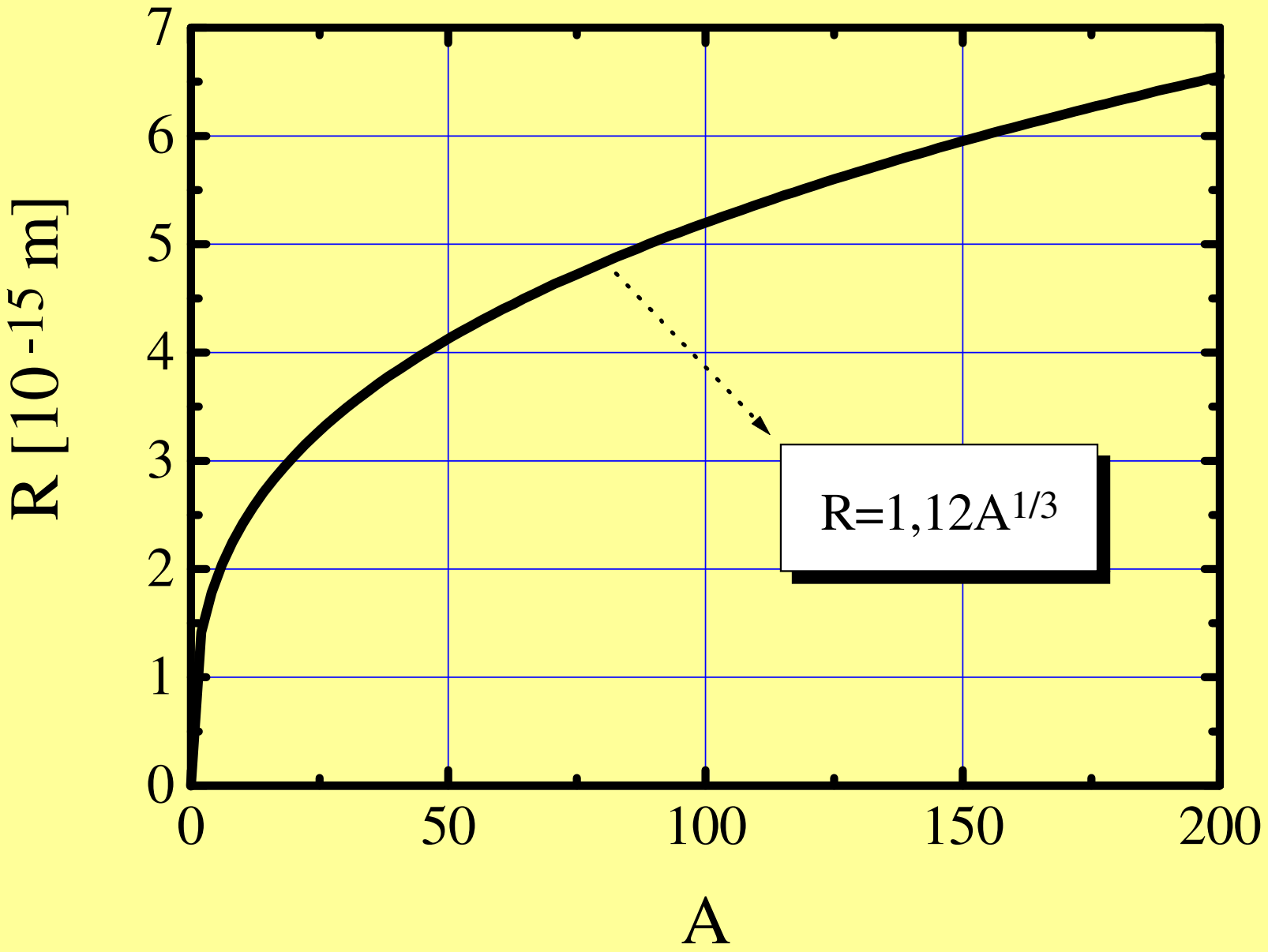
mesmo A mas Z ≠ ⇒ isóbaros.

mesmo N mas Z ≠ ⇒ isótonos.

- Alguns exemplos: ${}^{2}_{1}H$, ${}^{16}_{8}O$, ${}^{7}_{3}Li$, ${}^{14}_{7}Ni$
- Núcleon: constituinte do núcleo; designação genérica dos prótons e nêutrons

Raio Nuclear

- Experiências à la Rutherford mostraram que o raio nuclear tinha um comportamento peculiar:
  - $R=r_0A^{1/3}$
- Em outras palavras:
  - A densidade nuclear é constante
- Conhecemos um sistema com essas características: LÍQUIDOS!


R [10-15 m]
7
6
5
4
3
2
1
0
0
50
100
150
200
A
R=1,12A1/3