

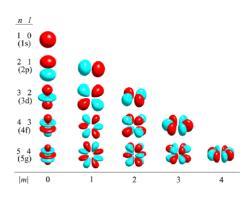
### Interações Atômicas e Moleculares

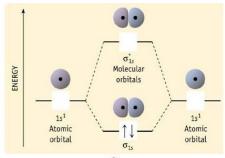
10. Sólidos:Propriedades Elétricas

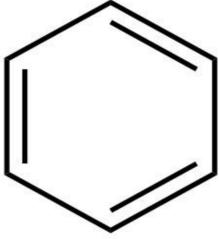
Prof. Pieter Westera pieter.westera@ufabc.edu.br

http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/IAM.html









Tomando como critério a condutividade de corrente elétrica, os sólidos podem ser classificados nos seguintes tipos:

- Um condutor (metálico) é um material, cuja condutividade diminui (ou a resistividade aumenta), quando a temperatura aumenta.
- Num semicondutor a condutividade aumenta, quando a temperatura aumenta.
- Um semicondutor com condutividade muito baixa se chama isolante.
- Um supercondutor é um material com resistividade zero. Acontece apenas em temperaturas bem a baixo de 0 °C. O mesmo material é condutor, semicondutor ou isolante em temperaturas mais altas.

Como entender a condução elétrica?

Elétrons quase livres num potencial periódico devido aos cátions com paredes de potencial "impassáveis".

Os elétrons de valência formam orbitais delocalizados pelo material inteiro.

Modelo simples: cadeia 1D de átomos (=> método de Hückel)

Energia de um e de condução

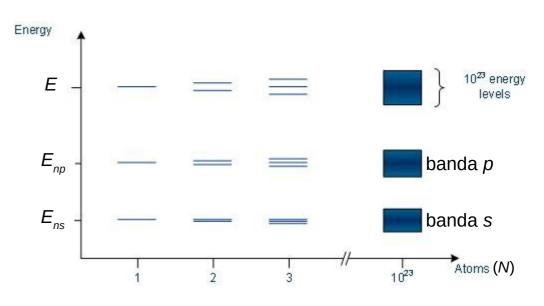
6° aula:  $E_i = \alpha + 2\beta \cos 2i\pi/N$ , i = 1, ..., N,

onde  $\alpha$  é a energia dos orbitais atômicos de valência do material, e  $\beta$ , a integral de ressonância para átomos vizinhos.

$$E_i = \alpha + 2\beta \cos 2i\pi/N,$$
  
 $i = 1, ..., N$ 

=> N soluções entre  $\alpha$  +  $2\beta$  e  $\alpha$  -  $2\beta$ .

No caso de um corpo (fio) macroscópico, *N* é tão grande que temos espaçamento "infinitamento"



espaçamento "infinitamente fino" (zero).

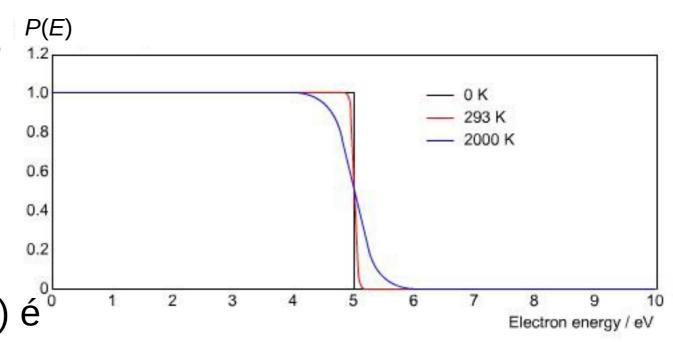
=> bandas de energia

Bandas compostas de orbitais s são chamadas bandas s, aquelas compostas de orbitais p, bandas p, etc.

### Distribuição de Fermi-Dirac

Quais níveis nestas bandas são ocupados por elétrons?

A distribuição de energias de uma população de e (ou outros férmions) é



$$P(E) = 1/(e^{(E-\mu)/kT} + 1),$$

chamada distribuição de Fermi-Dirac, onde  $\mu$  (ou  $E_{\rm F}$ ) é chamado potencial químico, ou, às vezes, nível de Fermi, energia para aquela P(E) é de 50 % e pode ser interpretado como o limite entre níveis desocupados e ocupados.

#### Distribuição de Fermi-Dirac

$$P(E) = 1/(e^{(E-\mu)/kT} + 1)^{P(E)}_{1.2}$$

Para  $T \to 0$  K,

 $P(E)$  tende a uma

função retangular,

 $P(E) = 1$  p.  $E < \mu$ 
 $P(E) = 0$  p.  $E > \mu$ 

Ouando a temporatura aumenta, anda  $\mu$  and  $\mu$  respectively.

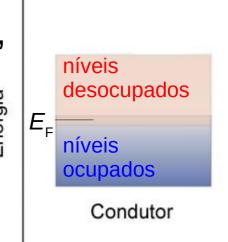
Quando a temperatura aumenta, cada vez mais elétrons são excitados para cima do nível de Fermi.

Para  $E >> \mu$ , P(E) tende à distribuição de Boltzmann,  $P(E) = e^{-(E-\mu)/kT}$ .

Em metais/condutores, a banda de valência é parcialmente ocupada, por ser composta por orbitais atômicos parcialmente ocupados, ou, por ser uma sobreposição de bandas.

=> Os níveis desocupados ficam imediatamente a cima dos ocupados, e é muito fácil excitar um elétron de um nível ocupado para um nível desocupado.

=> elétrons quase livres e condutividade alta



A resistividade se dá por choques com os átomos (cátions) da rede, que vibram mais e apresentam seções de choque maiores em temperaturas altas, o que explica o aumento da resistividade com a temperatura.

Em semicondutores, a banda de valência é cheia e a próxima, a de condução, vazia.

Mas se a lacuna (ingl. gap) entre as duas bandas não é muito grande, i. e. ≤ 2 eV, um número razoável de elétrons é excitado da b. d. v. pra b. d. c. em temperatura ambiente, e o material consegue conduzir eletricidade (embora menos bem que um condutor). Quanto maior é a temperatura, tanto mais elétrons são excitados, tanto major é a condutividade => semicondutor exemplos: silício, germânio

Se a lacuna é grande, poucos elétrons são excitados e temos um isolante.

banda de condução níveis desocupados

E lacuna handa de valência ocupados

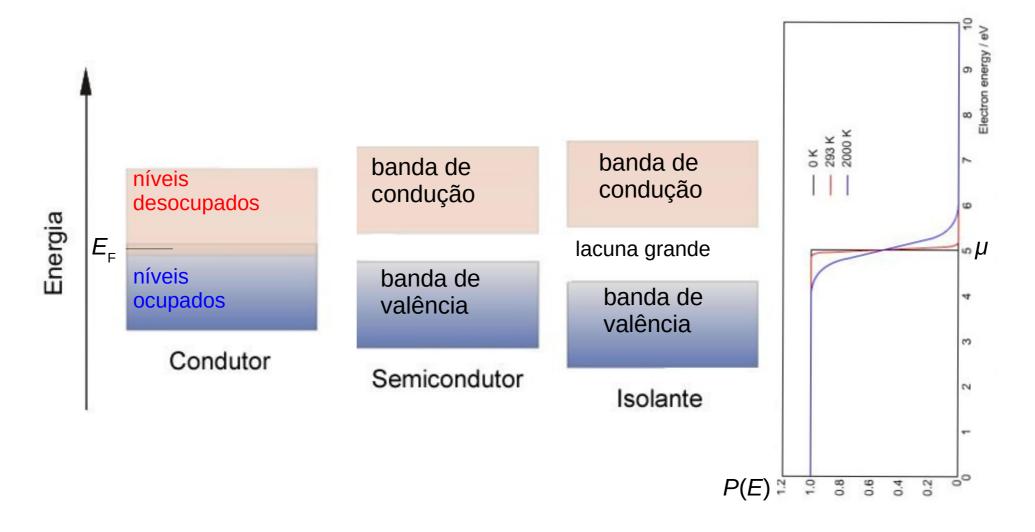
Semicondutor

banda de níveis desocupados lacuna grande banda de níveis

banda de níveis valência ocupados

Isolante

Comparando as posições das bandas com o nível de Fermi



Valores típicos de resistividades são

condutores: 10<sup>-8</sup> Ω·m
 exemplos: cobre, alumínio, prata, ouro, magnésio, níquel, ferro, ...



- semicondutores: 10<sup>-4</sup> a 10<sup>5</sup> Ω·m exemplos: silício, carbono, germânio, arsenieto de gálio (GaAs), ...



exemplos: vidro, cerâmico, polímeros, ...

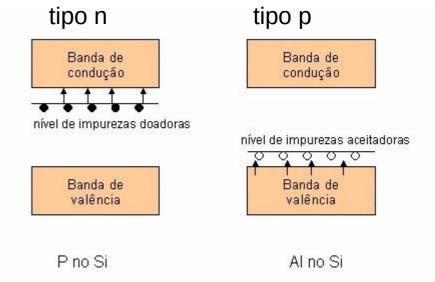




### Semicondutores Dopados

Semicondutores (p. e. Si) com ~1 em cada 10<sup>9</sup> átomos substituídos por um outro elemento que tem

- níveis (parcialmente)
   desocupados pouco a cima
   da banda de valência (tipo p) ou
- níveis (parcialmente) ocupados pouco a baixo da banda de condução (tipo n).



tipo p

Banda de conducão

#### Semicondutores Dopados

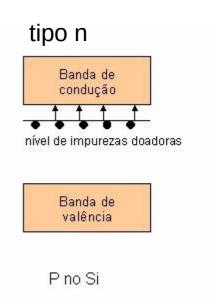
Semicondução tipo p

Os átomos dopantes têm níveis desocupados perto das energias da banda de valência do semicondutor, às vezes chamados banda de aceitação ou receptora, que podem fácilmente tirar elétrons desta banda, assim deixando buracos nela, que se comportam como cargas positivas (p = positivo) livres, aumentando a condutividade.

### Semicondutores Dopados

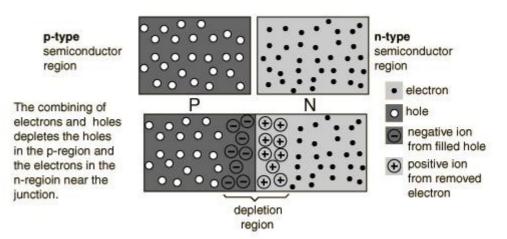
Semicondução tipo n

Os átomos dopantes têm níveis ocupados perto das energias da banda de condução do semicondutor, às vezes chamados banda doadora, e podem fácilmente doar elétrons para esta banda, que assim se tornam cargas negativas (n = negativo) livres, aumentando a condutividade.



### Junção p-n

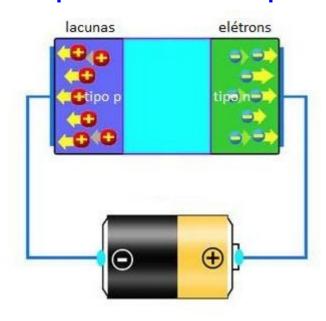
- Junção entre um semicondutor dopado tipo p, e um tipo n.
- No semicondutor tipo n existem elétrons livres e no tipo p, buracos livres.



- Perto da junção, os elétrons do semicondutor tipo n "caem" nos buracos do semicondutor tipo p, resultando numa região sem cargas negativas ou positivas livres, chamada zona de esgotamento ou região de depleção, que impede correntes elétricos através da junção.

### Junção p-n

#### Aplicando um potencial elétrico



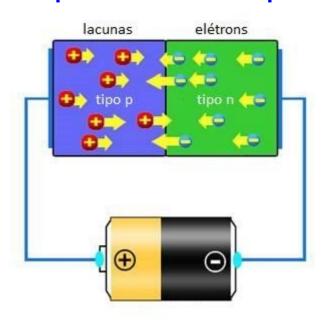
A ligando o potencial positivo do lado do semicondutor dopado tipo n, e o potencial negativo do lado do tipo p, chamado polarização inversa:

- Os elétrons livres no s.c. tipo n são atraídos para longe da junção, e os buracos livres também, aumentando a zona de esgotamento.

=> Corrente não poderá fluir através da junção mesmo.

### Junção p-n

#### Aplicando um potencial elétrico



B ligando o potencial positivo do lado do semicondutor dopado tipo p, e o potencial negativo do lado do tipo n, chamado polarização direta:

- Os elétrons livres no s.c. tipo n são atraídos rumo junção, e os buracos livres também, diminuindo a zona de

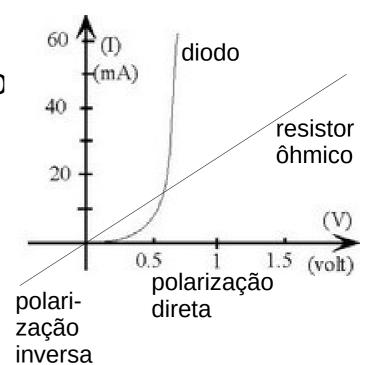
esgotamento. Se o potencial aplicado for alto o suficiente ( $\geq 0.5 \text{ V} = V_0$ ), a zona de esgotamente some.

=> Corrente poderá fluir através da junção no sentido do s.c. tipo p para o tipo n.

### Junção p-n

=> A junção age como um tipo de "válvula" para corrente elétrica, deixando passar corrente no sentido s.c. tipo p → s.c. tipo n, mas não no sentido oposto.

Um elemento destes dentro de um circuito elétrico se chama diodo (→→) e é muito importante, p. e. em computadores (=> transistor).



#### **Diodos**

Um diodo que é usado para este fim, deixar corrente passar apenas em um sentido, é chamado diodo retificador.

A "queda" dos elétrons nos buracos na junção libera muita energia, p. e. em forma térmica => computadores precisam de bons sistemas de resfriamento.

A energia também pode ser liberada como fótons (p. e. em s.c. dopados tipo GaAs)

=> usado como luzes em displays eletrônicos

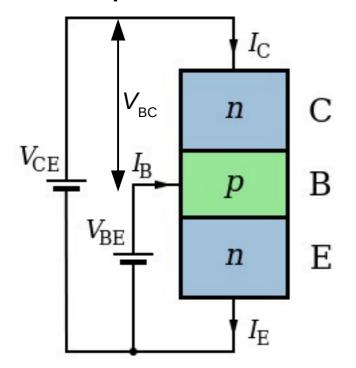
=> LEDs (light emitting diodes)

Uma célula solar é basicamente um LED inverso, absorvendo fótons e produzindo energia elétrica.



Transistores (símbolo (\*)

exemplo: transistor n-p-n



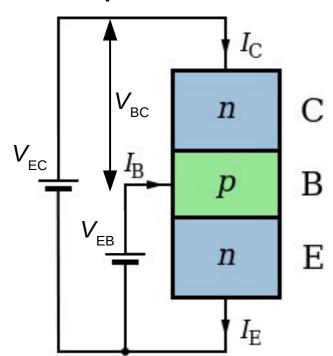
Sequência s.c. tipo n - tipo p - tipo n, chamados emissor, base e coletor, a base não sendo muito maior que duas zonas de esgotamento.

Há dois modos de operação de um transistor, dependendo da função, que ele tem que fazer.

transistor

#### **Transistores**

exemplo: transistor n-p-n



A  $V_{EB}$  perto do  $V_0$  da junção EB,

=> a zona de esgotamento entre o emissor e a base é muito pequena.

=>  $I_{\rm B}$  pode variar muito, assim como " $R_{\rm FB}$ " =  $V_{\rm FB}/I_{\rm B}$ .

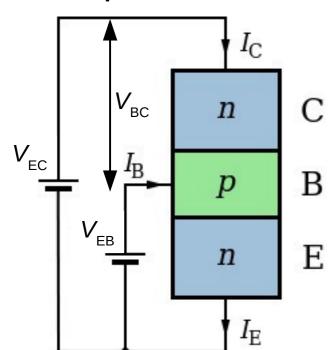
Aplicando uma tensão  $V_{\rm EC} >> V_{\rm EB}$ , grande parte dos elétrons passando

do emissor para a base continua para o coletor.

Eles conseguem passar a zona de esgotamento basecoletor, já que os buracos no s.c. tipo p perto do coletor já estão "tampados" por elétrons do coletor.

#### **Transistores**

exemplo: transistor n-p-n



A resistência que estes elétrons "sentem" é basicamente " $R_{\rm EB}$ "

$$=>I_{\rm C}=V_{\rm EC}/{}^{\shortparallel}R_{\rm EB}{}^{\shortparallel}=V_{\rm EC}/V_{\rm EB}\cdot I_{\rm B}=\beta\cdot I_{\rm B},$$

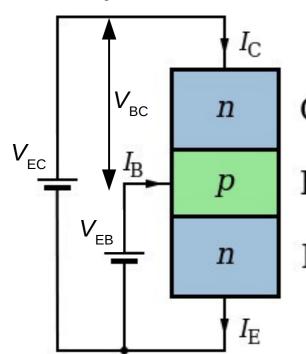
onde  $\beta = V_{EC}/V_{EB} >> 1$  é chamado ganho do transistor.

=> Neste modo, um transistor pode amplificar sinais.

Usado em amplificadores, etc.

#### **Transistores**

exemplo: transistor n-p-n



 $\mathsf{B} \ V_{\mathsf{EB}} \ \mathsf{\acute{e}} \ \mathsf{bem} \ \mathsf{menor} \ \mathsf{que} \ V_{\mathsf{o}} \ (\mathsf{i.} \ \mathsf{e.} \ \mathsf{zero})$ 

 $=>I_{\rm E}=I_{\rm B}=I_{\rm C}=0$ 

ou bem maior que  $V_0$ 

 $^{\rm B} = "R_{\rm FR} = 0"$ 

 $=> I_{c}$  se torna muito grande, até

alcançar um valor de saturação, dado pelo "aparelho" ligado na saída do coletor.

=> Variando  $V_{EB}$ , o transistor pode ser usado como um interruptor.

Usado em circuitos lógicos, chips, computadores, etc.

#### **Transistores**

Existem também transistores tipo p-n-p, naqueles a base é tipo n, e o emissor e o coletor são tipo p.

Estes funcionam da mesma maneira que os n-p-n, invertendo os sinais dos potenciais e correntes involvidos, trocando elétrons por buracos, etc.

Bom exercício: Reflita em detalhes como os transistores p-n-p funcionam.

### Supercondutores

Supercondutores são materiais com resistividade zero.

Eles têm esta propriedade só a baixo de uma certa temperatura, a temperatura crítica  $T_{\rm c}$ , normalmente da ordem de 20 K.

A temperatura crítica mais alta já alcançada é de 203 K (em 2015).

Acima desta temperatura o material não necessariamente é um bom condutor.

Muitos supercondutores "de alta temperatura" ( $T_c > 30 \text{ K}$ ) são materiais cerâmicos, ou seja, isolantes, em temperaturas ambientes.

### Supercondutores

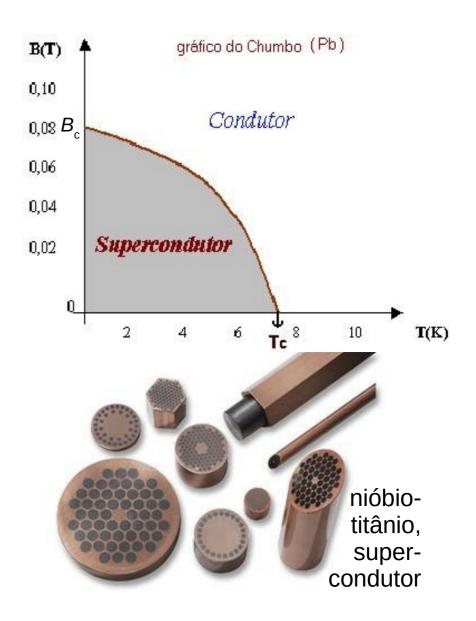
Aplicando um campo magnético, o campo no interior do supercondutor é zero, o campo é "expulso" do supercondutor.

=> Efeito Meissner

#### Supercondutores

Aplicando um campo magnético,  $T_c$  diminui.

A cima de um certo valor do campo, o campo crítico  $B_c$ , a supercondutividade não ocorre mais.





# Interações Atômicas e Moleculares

### FIM PRA HOJE

