



INSTITUTO DE FÍSICA
Universidade Federal Fluminense

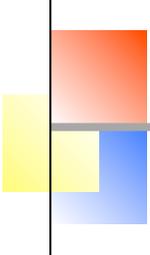
Física IV

Condução Elétrica em Sólidos

(Cap 41; Halliday, Resnik, Walker 8^a ou 9^a ed.)

Prof. Daniel Jonathan

Niterói, Maio 2014



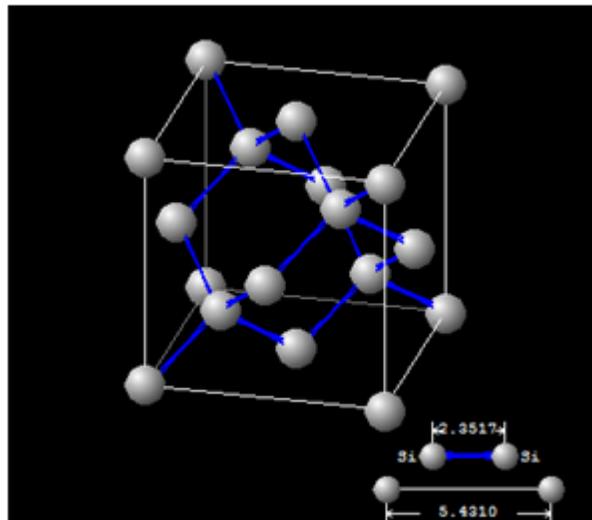
Propriedades Físicas de Materiais

- Problema da Física de Materiais: entender as propriedades elétricas, magnéticas, ópticas, estruturais, etc dos materiais a partir das interações de seus constituintes microscópicos.
- Principal fator: estrutura eletrônica.
- Quais os mecanismos através dos quais um material conduz, ou não, eletricidade?
- Não há resposta exata:
 - Hidrogênio: resolver a equação de Schrödinger para um elétron (exata)
 - Átomos com Z elétrons: resolver a equação de Schrödinger para Z elétrons (aproximação)
 - Sólido: resolver a equação de Schrödinger para $\sim 10^{23}$ elétrons (impraticável!!!)

Sólidos cristalinos

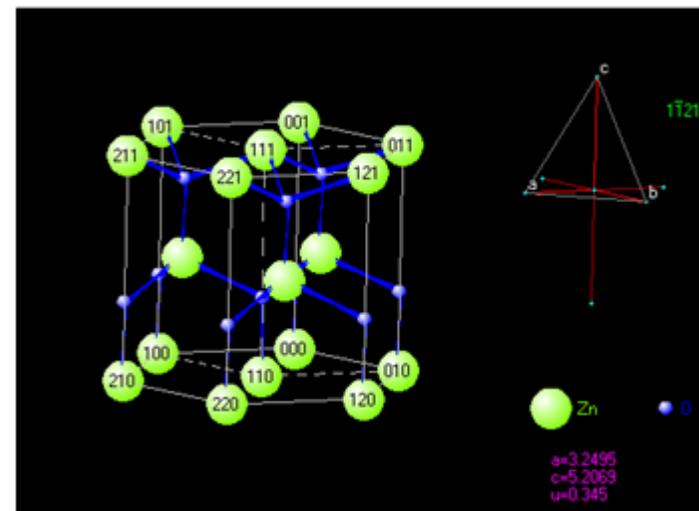
- Sólidos cristalinos: átomos estão dispostos em uma estrutura periódica (rede cristalina)
- Tijolo fundamental: célula unitária

Rede do diamante



Si, Ge, diamante

Rede hexagonal



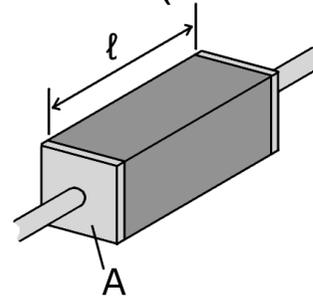
ZnO, GaN, AlN

Propriedades Elétricas de Sólidos

- Propriedades elétricas relevantes de sólidos:

- Resistividade** ρ à temperatura ambiente (unid: $\Omega \cdot m$)

$$\rho = R \frac{A}{l}$$



- Coeficiente de temperatura da resistividade:** α (unid: K^{-1})

$$\alpha = \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dT}$$

- Concentração de portadores de carga:** n

= número de portadores de carga por unidade de volume (unid: m^{-3})

Propriedades Elétricas de Sólidos

Os valores e comportamentos dessas propriedades nos permitem classificar a maioria dos sólidos em 3 categorias:

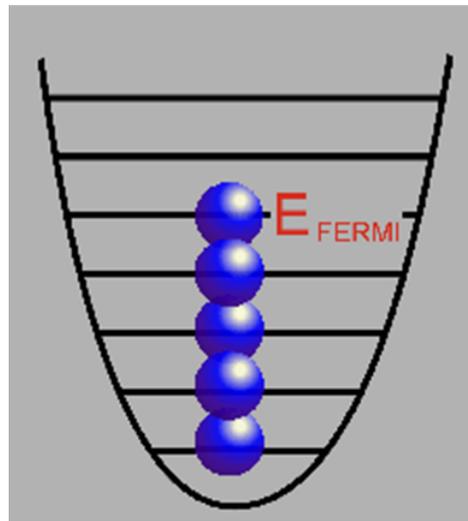
Metal, isolante, ou semicondutor

Propriedade	Unidade	Material		
		Cobre	Silício	Diamante
Tipo de condutor		Metal	Semicondutor	Isolante
Resistividade, ρ	$\Omega \cdot m$	2×10^{-8}	3×10^3	10^{16}
Coefficiente de temperatura da resistividade, α	K^{-1}	$+4 \times 10^{-3}$	-70×10^{-3}	
Concentração de portadores de carga, n	m^{-3}	9×10^{28}	1×10^{16}	

Pergunta chave: O que causa um diamante ser um isolante, o cobre um metal e o silício um semicondutor?

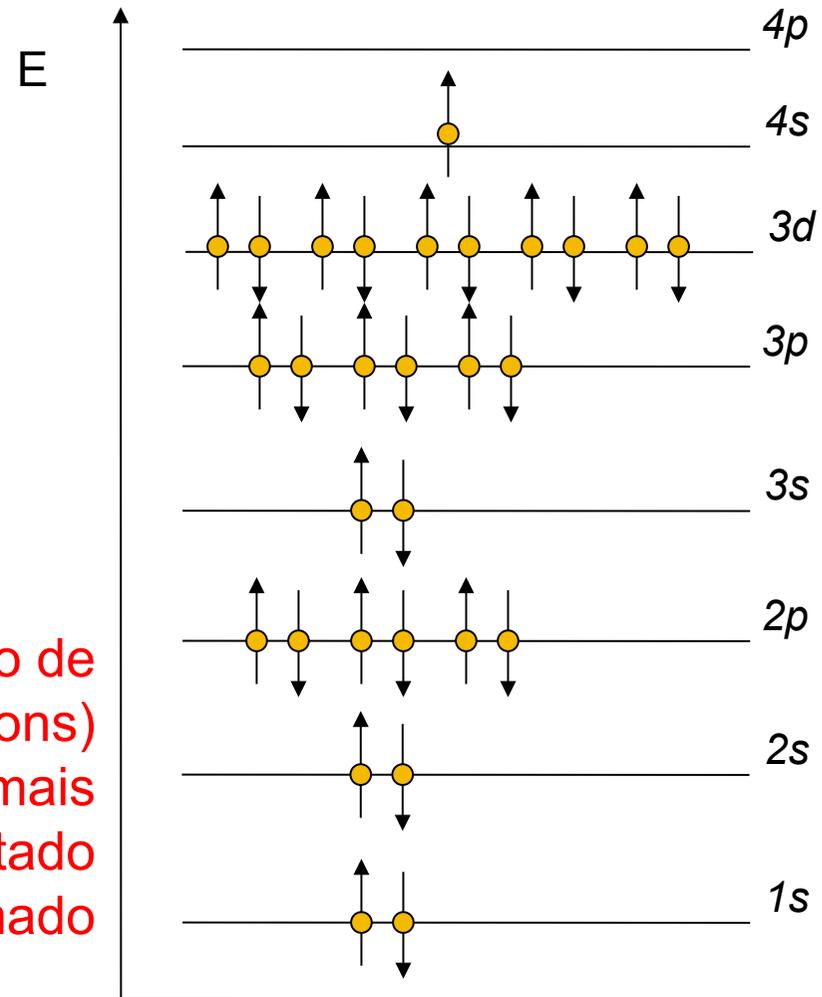
Níveis de energia: um átomo

Átomo isolado (ex: Cobre $Z = 29$)

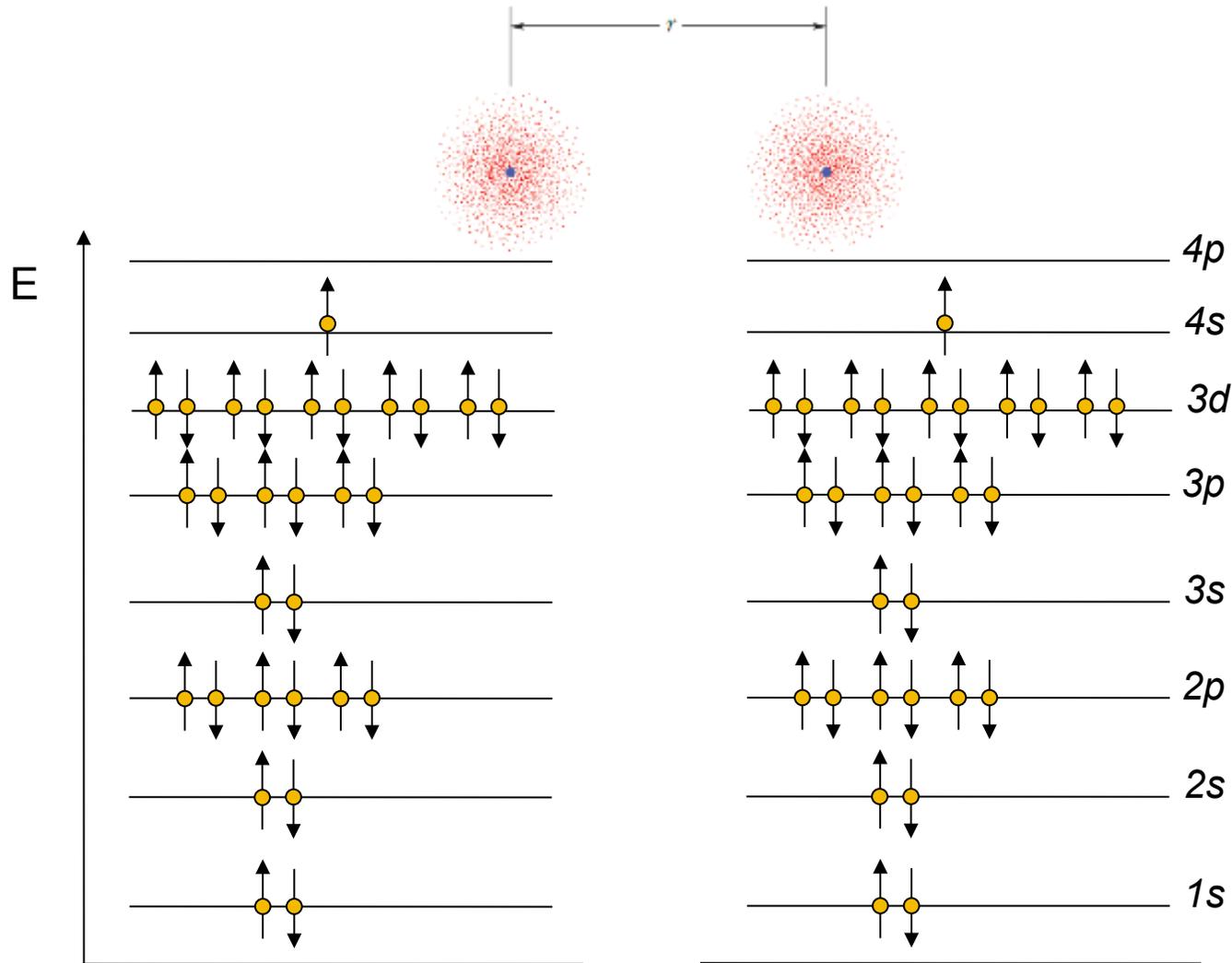


Férmions

Partículas que obedecem o Princípio de Exclusão de Pauli (como os elétrons) são chamadas *férmions*. O nível mais alto de energia ocupado no estado fundamental do sistema é chamado **energia de Fermi, ou E_F**



Níveis de energia: dois átomos

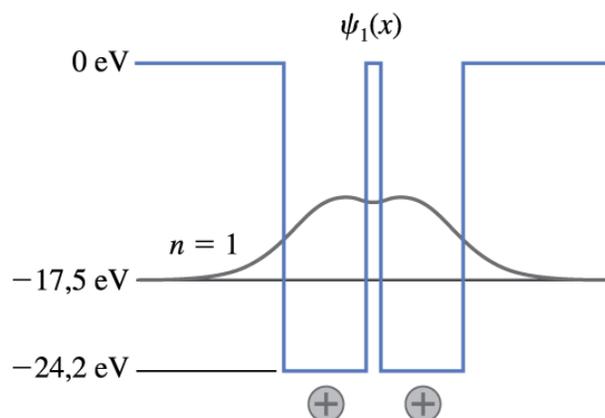


7

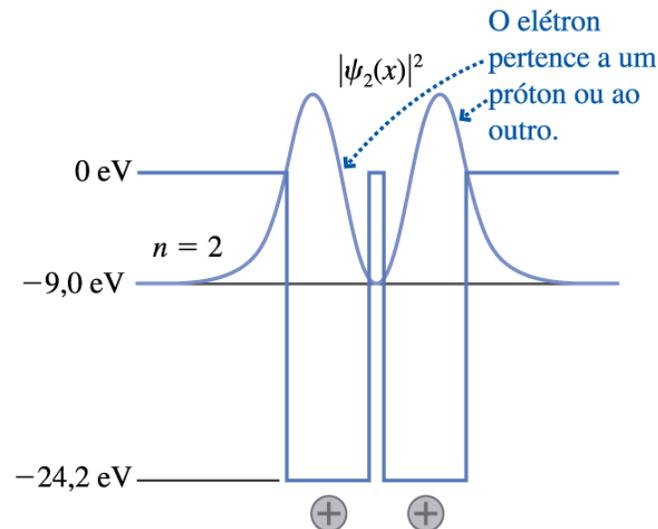
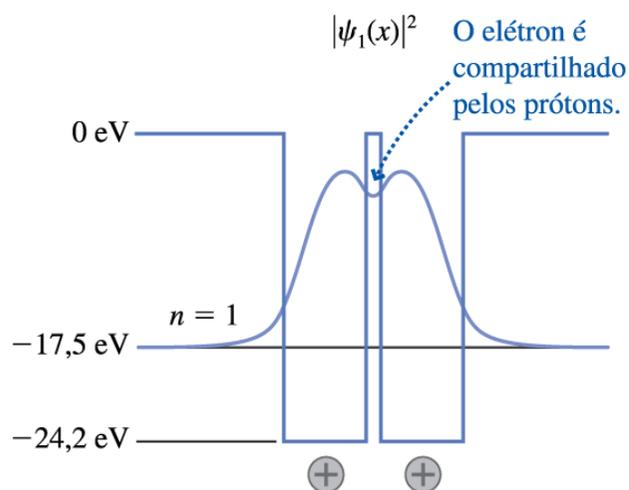
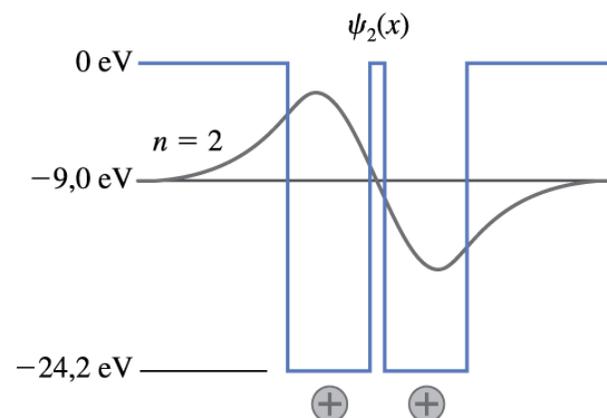
Para 2 átomos distantes (r grande), o nível de Fermi é o mesmo de 1 átomo

Recordando: Ligação química covalente (cap 41)

(a) Orbital ligante



(b) Orbital antiligante

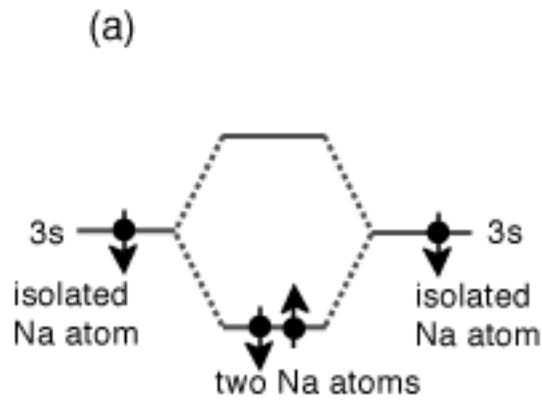


Energia **diminui** qdo os núcleos se aproximam (força atrativa)

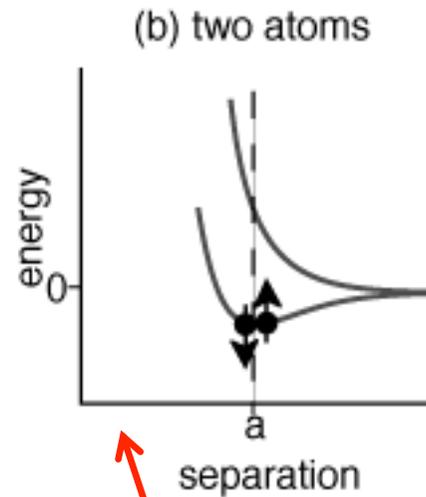
Energia **aumenta** qdo os núcleos se aproximam (força repulsiva)

Níveis de energia: dois átomos

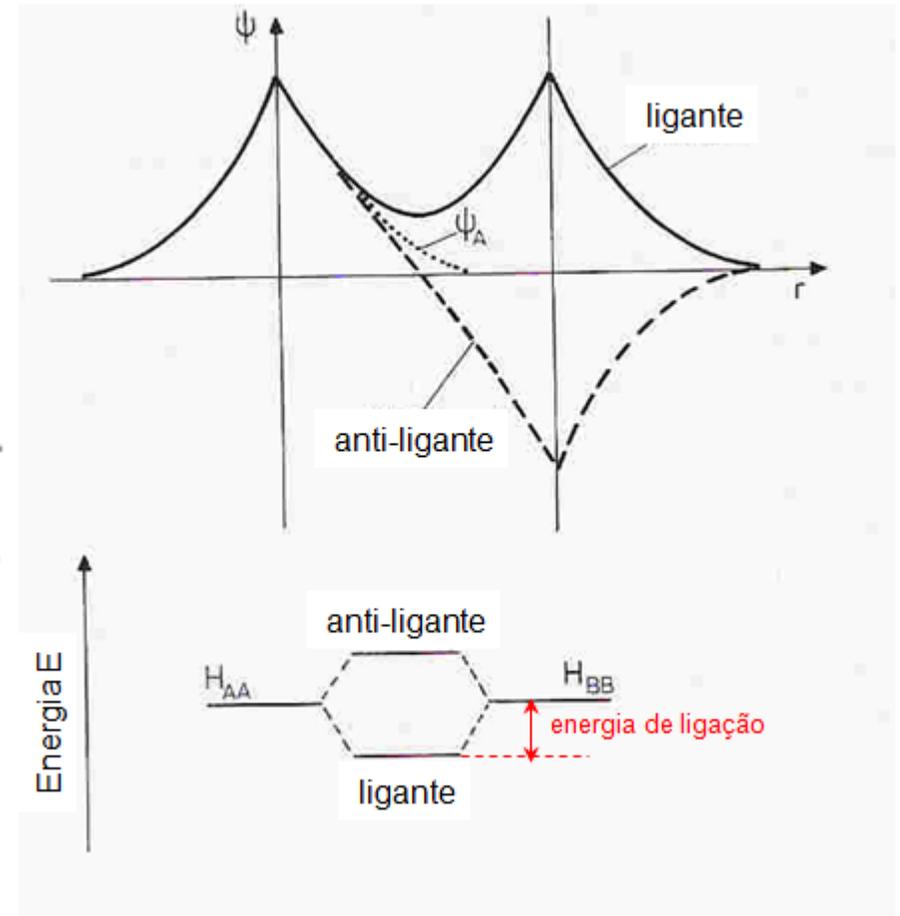
- Aproximando dois átomos:



Cada orbital atômico se separa em dois orbitais moleculares: **LIGANTE** e **ANTILIGANTE**



Energia em função da separação interatômica



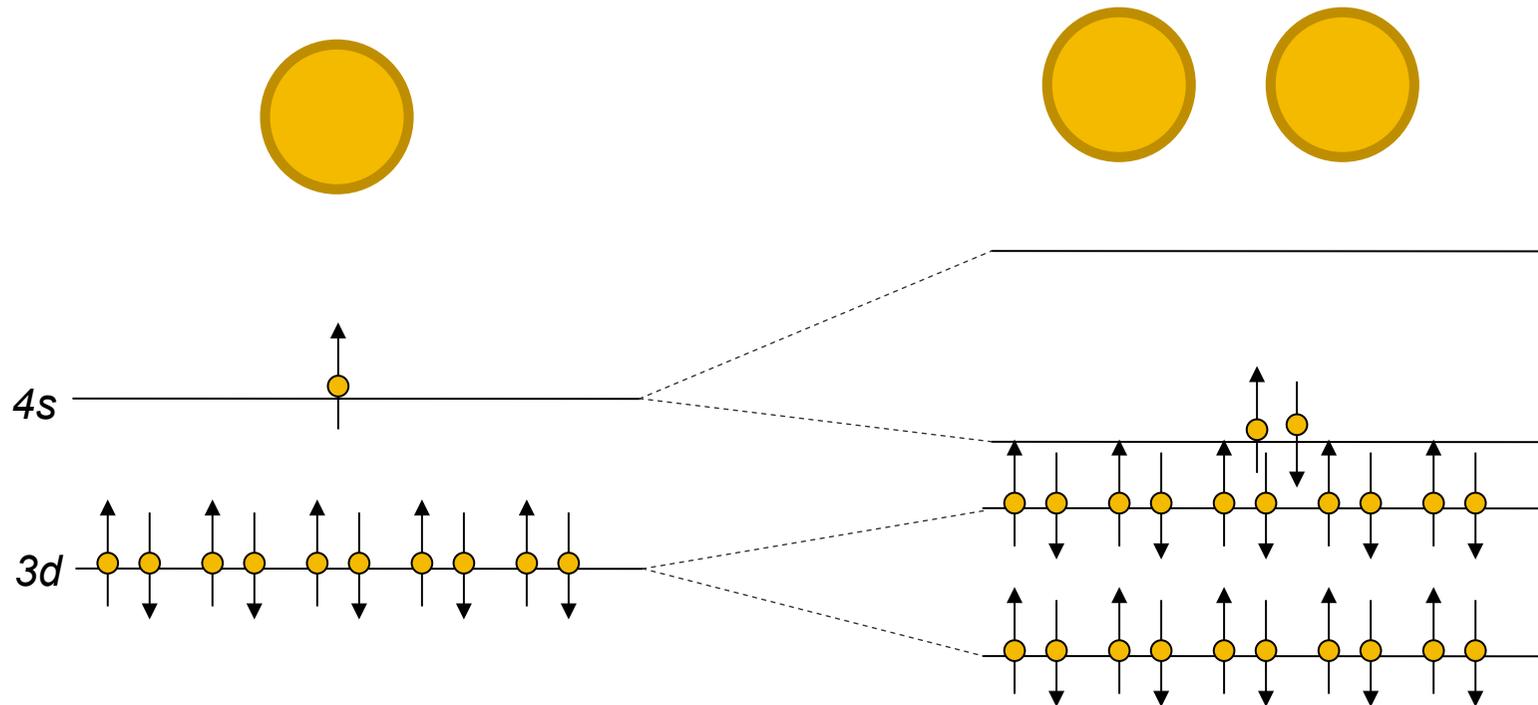
Por que o orbital ligante tem menor energia?

Veja a função de onda!!!

Níveis de energia: dois átomos

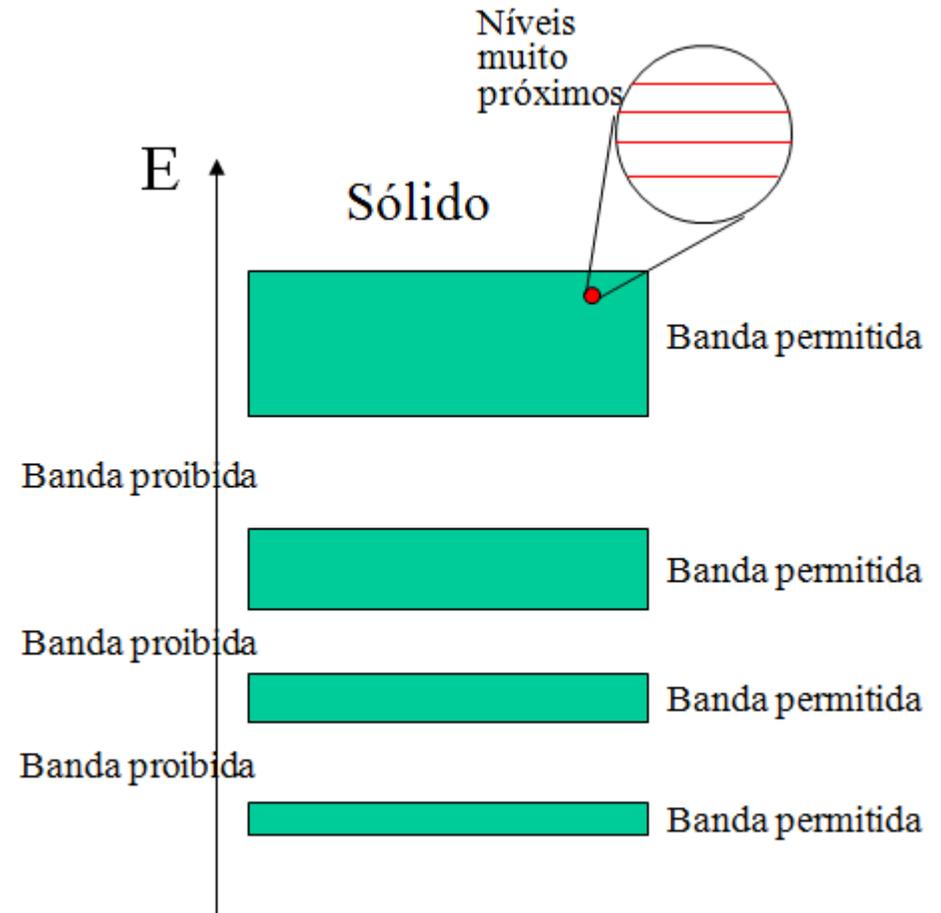
Átomo isolado (Cobre)

“Molécula”



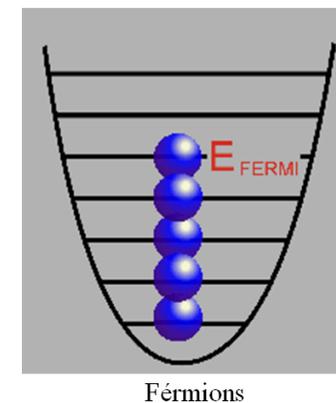
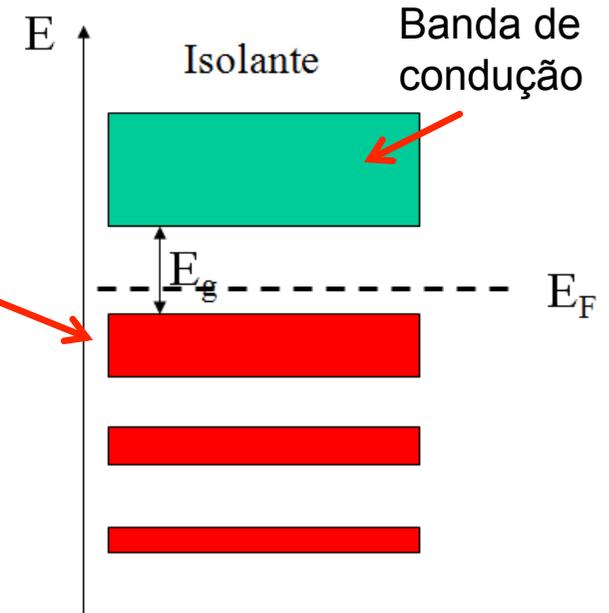
Níveis de energia: muitos átomos

- Sólido: $\sim 10^{23}$ átomos de cobre \rightarrow cada nível atômico se desdobra em 10^{23} níveis
- Níveis de energia muito próximos: **bandas** de energia



Isolantes

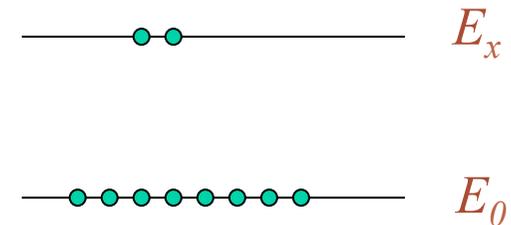
- **Sistema isolante:** ao aplicar uma diferença de potencial, não há corrente elétrica apreciável.
- Explicação: o nível mais alto de energia preenchido (**energia de Fermi E_F**) corresponde ao topo da última banda totalmente ocupada no estado fundamental (**banda de valência**)
- Primeira banda **desocupada** (**banda de condução**) está separada por uma energia E_g (*band gap*) muito maior que kT (energia térmica)
- Dessa forma, não há “espaço” para os elétrons “caminharem” pelo sistema



Efeito de temperatura $T > 0$

N átomos em equilíbrio térmico à temperatura T : o número de átomos excitados em um nível com energia E_x e'

$$N_x = N_0 e^{-(E_x - E_0)/kT}$$



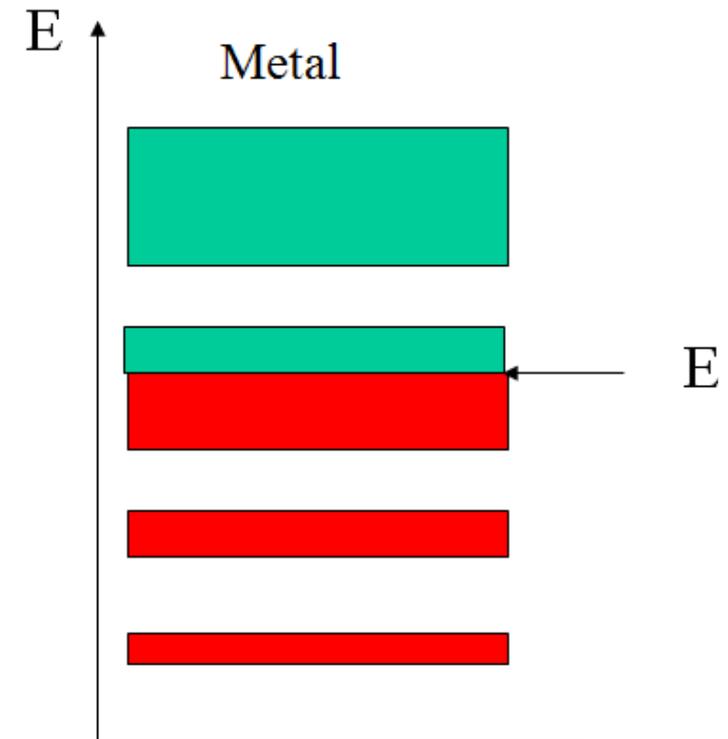
onde $k = 8,617 \times 10^{-5}$ eV / K (constante de Boltzmann)

P/ diamante: $E_x - E_0 = E_g = 5,5$ eV:

$$\frac{N_x}{N_0} = e^{-(E_g/kT)} = e^{-213} \approx 3 \times 10^{-93}$$

Metais (condutores)

- Explicação: neste caso, o nível mais alto de energia preenchido no estado fundamental (**energia de Fermi E_F**) está **no meio** de uma banda **parcialmente** ocupada (**banda de condução**)
- Dessa forma, ao aplicarmos uma diferença de potencial há uma corrente elétrica, já que há níveis de energia ligeiramente acima dos ocupados para que os elétrons “caminhem” pelo sistema.



Metais: cálculo de n

- Quantos elétrons de condução existem na amostra?

$$n_e = n_a \cdot n_v$$

- Concentração de portadores (elétrons de condução) n :

$$\begin{aligned} n &= \frac{n_e}{V} = \frac{n_a n_v}{V} \\ &= \frac{m}{m_a} \frac{n_v}{V} = \frac{\mu n_v}{m_a} \end{aligned}$$

$$n = \frac{\mu n_v N_A}{m_{mol}}$$

n_e = núm. de elétrons de condução na amostra

n_a = núm. de átomos na amostra

n_v = núm. de elétrons de valência por átomo

V = volume da amostra

m = massa da amostra

m_a = massa atômica = m / n_a

μ = densidade da amostra = m / V

N_A = número de Avogadro = $6,02 \times 10^{23}$

m_{mol} = massa de 1 mol = $N_A m_a$

Metais: cálculo de n

- Quantos elétrons de condução existem na amostra?

$$n_e = n_a \cdot n_v$$

- Concentração de portadores (elétrons de condução) n :

$$\begin{aligned} n &= \frac{n_e}{V} = \frac{n_a n_v}{V} \\ &= \frac{m}{m_a} \frac{n_v}{V} = \frac{\mu n_v}{m_a} \end{aligned}$$

$$n = \frac{\mu n_v N_A}{m_{mol}}$$

Ex: Cobre

- $\mu = 8,96 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$
- $m_{mol} = 63,546 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$
- $n_v \sim 1$

$$n \sim 8,5 \times 10^{28}$$

bate bem com valor experimental...



Metais: Exemplo

- Quantos elétrons de condução existem em um cubo de magnésio com um volume de $2.00 \times 10^{-6} \text{ m}^3$? Dados:
 - $\rho_{\text{mag.}} = 1,738 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$
 - $M_{\text{mol. mag.}} = 24,312 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$
 - Os átomos de magnésio são divalentes

R: $1,72 \times 10^{23}$

Metais: contando estados

- Quantos estados quânticos existem?

Modelo: ELÉTRONS LIVRES em um potencial tipo 'caixa 'rigida' 3D

- Quantos estados existem por unidade de volume no intervalo de energias entre E e $E + dE$?

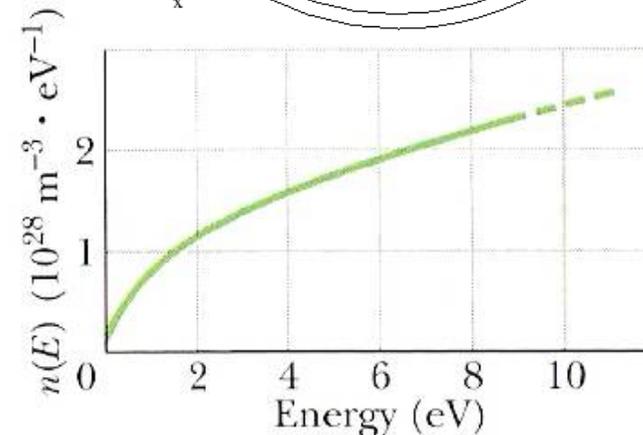
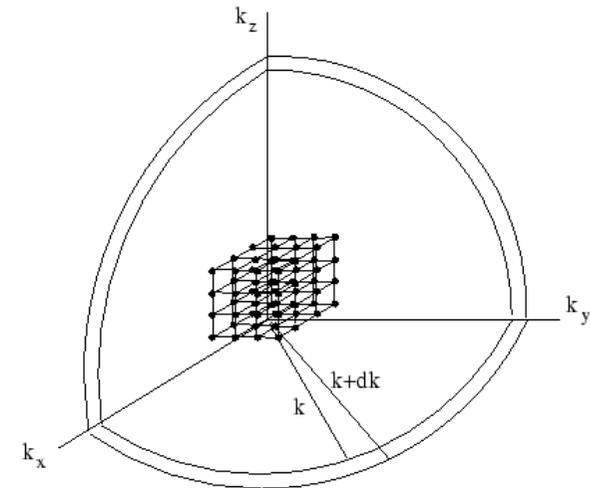
- Elétrons confinados em uma caixa 3D: n_x, n_y, n_z

$$n^2 = n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$$

$$E = n^2 \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right) \quad dE = 2n \, dn \left(\frac{h^2}{8mL^2} \right)$$

$$N(n)dn = 2 \times \frac{1}{8} \times 4\pi n^2 dn$$

$$N(E)dE = \frac{8\sqrt{2}\pi m^{3/2}}{h^3} E^{1/2} dE$$



Metais: Contando Estados

A densidade de estados aumenta com a energia dentro de uma banda.

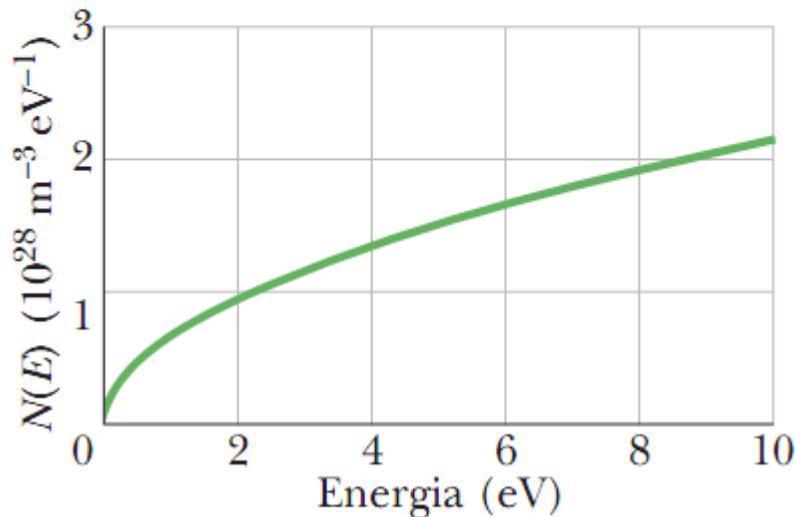
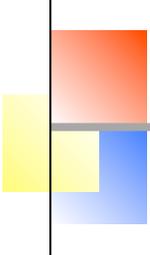


Figura 41-6 A função densidade de estados $N(E)$, definida como o número de níveis de energia disponíveis para os elétrons por unidade de energia e por unidade de volume, plotada em função da energia. A função densidade de estados expressa apenas o número de estados disponíveis; esses estados podem estar ou não ocupados por elétrons.

$$N(E) = \frac{8\sqrt{2}\pi m^{3/2}}{h^3} E^{1/2} \quad (\text{densidade de estados, } \text{m}^{-3} \text{ J}^{-1})$$



Metais: efeito de $T > 0$

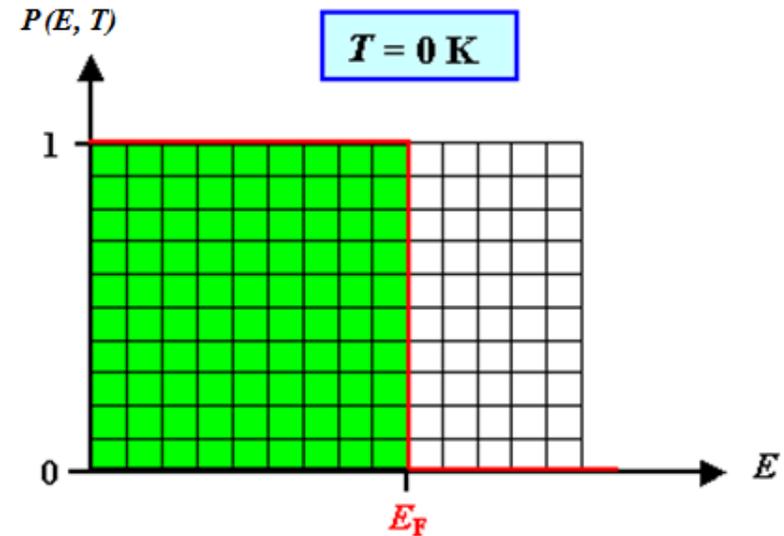
- O que ocorre com a distribuição de elétrons em um metal quando T aumenta?
 - Elétrons próximos ao nível de Fermi irão ganhar uma energia térmica adicional da ordem de $E = k_B T$. Isso irá modificar a distribuição de elétrons próximo ao nível de Fermi.
 - O número de portadores de carga não é afetado substancialmente (os elétrons já estão na banda de condução)
 - Rede de íons vibra mais – aumentam as colisões entre elétrons e íons – **aumenta a resistência -> daí o sinal (+) para α .**

Metais: probabilidade para energias

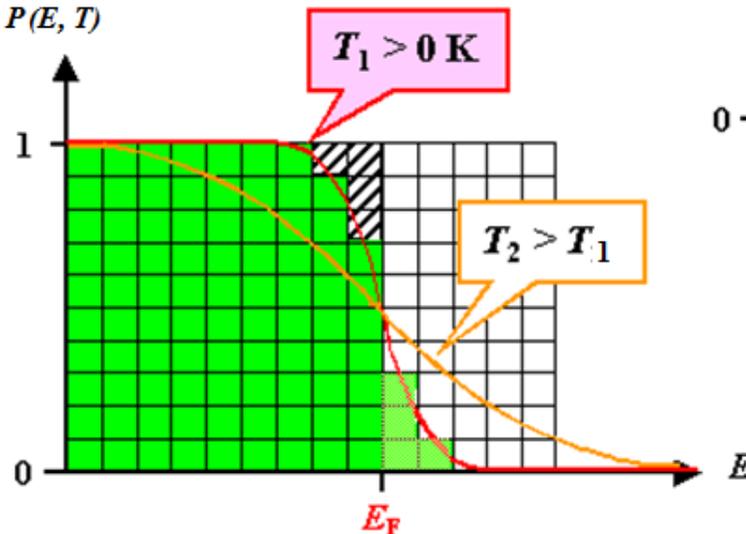
- Probabilidade de Ocupação:
- Estatística quântica: Fermi-Dirac

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

- Para $T = 0$:
 - Se $E < E_F \rightarrow e^{-\infty} = 0 \rightarrow P(E) = 1$
 - Se $E > E_F \rightarrow e^{\infty} \rightarrow P(E) = 0$



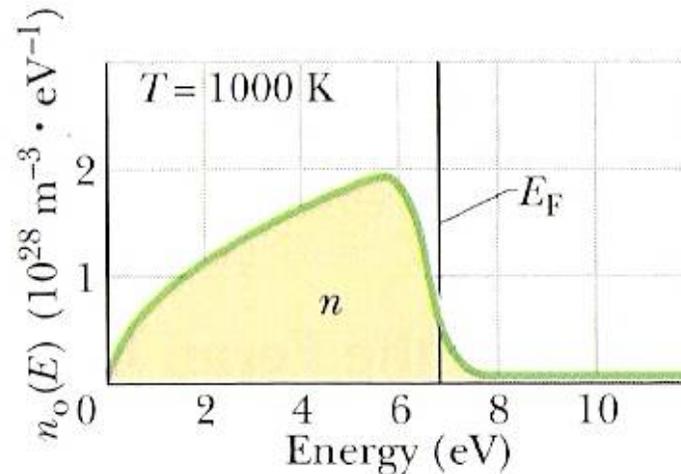
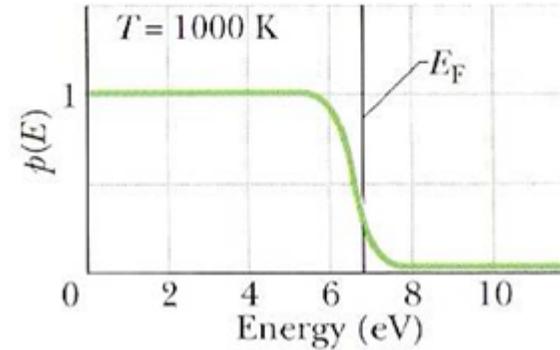
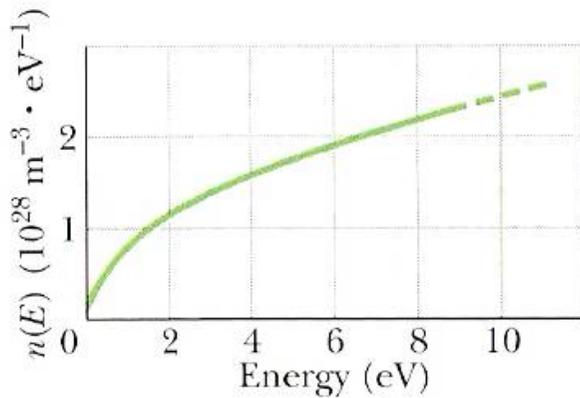
- Para $T > 0$: $P(E, T)$



Metais: no. de estados ocupados

- Quantos estados ocupados existem?

$$N_0(E) = N(E) P(E)$$



(c)

Metais: calculo da energia de Fermi

- A integral de $N_0(E)dE$ dá o número de elétrons de condução por unidade de volume do material.

$$n = \int_0^{E_F} N_0(E) dE$$

(Número de estados ocupados por unidades de volume em $T = 0$ K para todas as energias entre $E = 0$ e $E = E_F$)

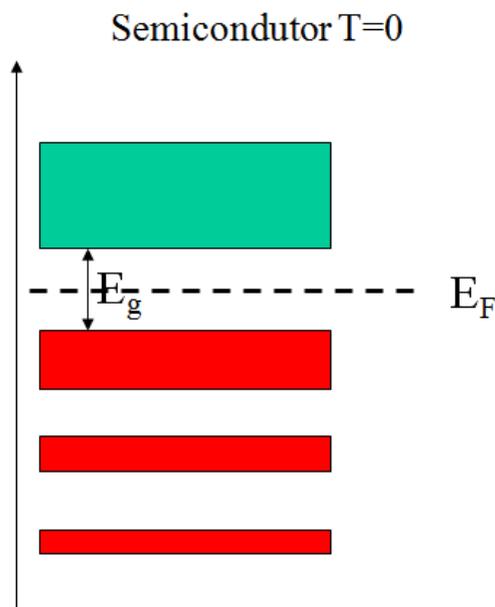
- Para $T = 0$, $P(E) = 1$ para $E < E_F$:

$$n = \frac{8\sqrt{2}\pi m^{3/2}}{h^3} \int_0^{E_F} E^{1/2} dE = \frac{8\sqrt{2}\pi m^{3/2}}{h^3} \frac{2E_F^{3/2}}{3}$$

$$E_F = \left(\frac{3}{16\sqrt{2}\pi} \right)^{2/3} \frac{h^2}{m} n^{2/3} = \frac{0,121h^2}{m} n^{2/3}$$

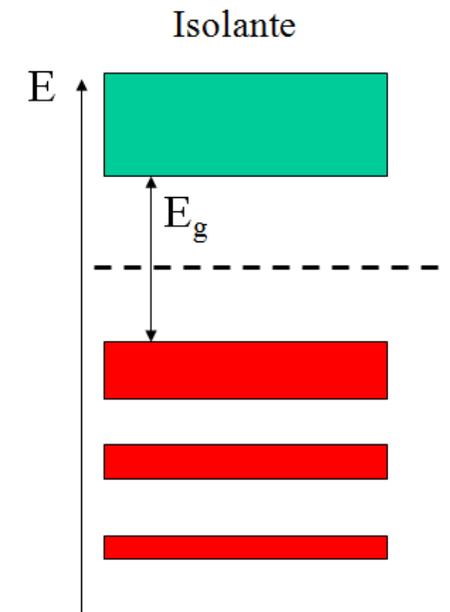
Semicondutores

- Para $T = 0$:
- A energia do último elétron a ser preenchida define a **energia de Fermi E_F**
- Última banda **ocupada** está **totalmente ocupada (banda de valência)**
- Primeira banda **desocupada (banda de condução)** está separada por uma energia E_g (*band gap*).



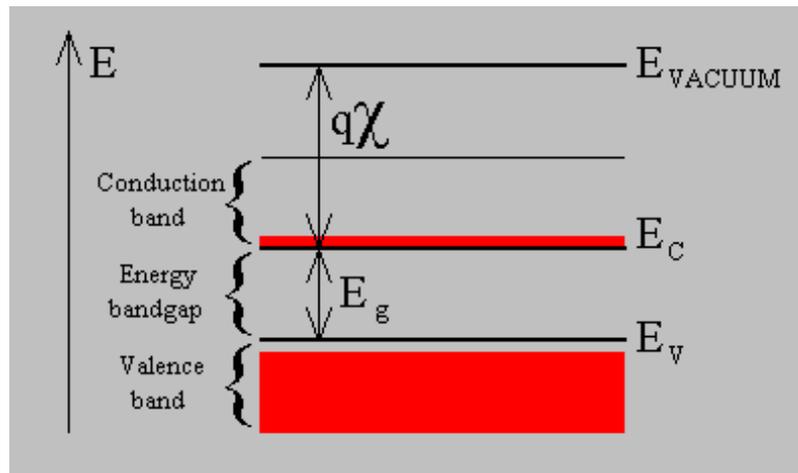
Semicondutor :

**E_g é muito menor
que num isolante!!**

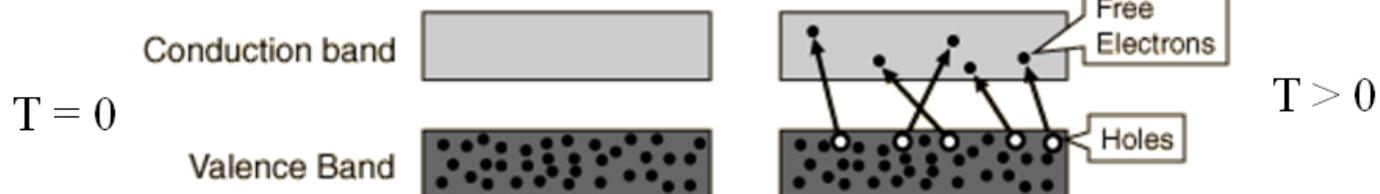


Semicondutores

- Para $T > 0$:
- A probabilidade que um elétron, por agitação térmica passe para um estado da banda de condução não é desprezível no caso do semicondutor.
- Condução por **elétrons e buracos!**



	$E_g [eV]$	$n_i [cm^{-3}]$
<i>Ge</i>	0,67	$2,4 \times 10^{13}$
<i>Si</i>	1,12	$1,5 \times 10^{10}$
<i>GaAs</i>	1,43	5×10^7



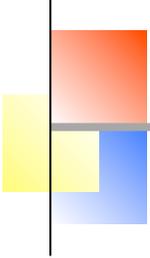
Propriedades Elétricas de Sólidos

Os valores e comportamentos dessas propriedades nos permitem classificar a maioria dos sólidos em 3 categorias:

Metal, isolante, ou semicondutor

	Metal	Semicondutor	Isolante
Exemplo	Cobre	Silício	Diamante
Resistividade ρ	$\sim 10^{-8} \Omega.m$	$\sim 10^3 \Omega.m$	$\sim 10^{16} \Omega.m$
<i>Band gap</i> E_g	n/a	pequeno ($E_g \sim 0 - 3 \text{ eV}$)	grande ($E_g > 3 \text{ eV}$)
Coefficiente de temperatura da resistividade α	positivo	negativo	negativo
Concentração de portadores n	$\sim 10^{26} \text{ m}^{-3}$	$\sim 10^{15} \text{ m}^{-3}$	desprezível

Pergunta chave: O que causa um diamante ser um isolante, o cobre um metal e o silício um semicondutor?



Exercício

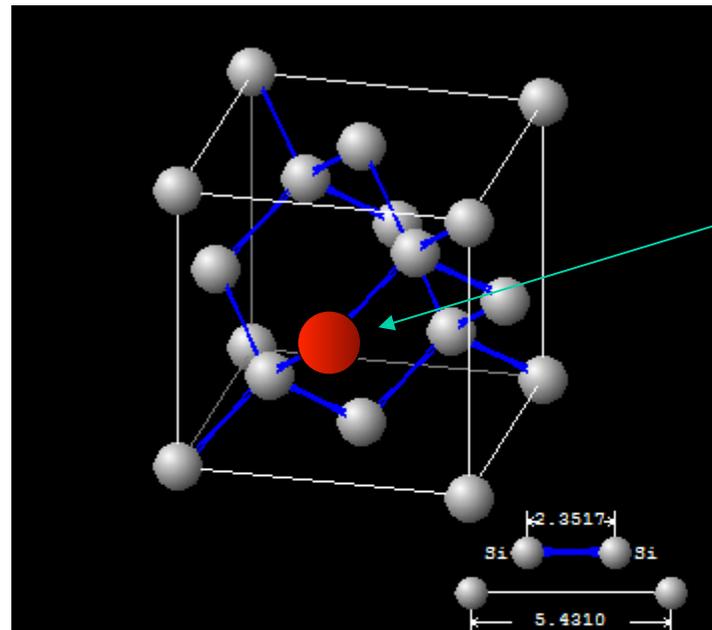
Os valores de E_g para os semicondutores silício e germânio são, respectivamente, 1,12 e 0,67 eV. Quais das seguintes afirmações são verdadeiras?

- (a) As duas substâncias têm a mesma concentração de portadores à temperatura ambiente.
- (b) À temperatura ambiente, a concentração de portadores no germânio é maior que no silício.
- (c) As duas substâncias têm uma concentração maior de elétrons que de buracos.
- (d) Nas duas substâncias, a concentração de elétrons é igual a de buracos.

Semicondutores dopados

As propriedades (e portanto aplicações) dos semicondutores podem ser radicalmente alteradas **dopando-os** com impurezas (i.e., misturando ao sólido semicondutor alguns átomos diferentes)

Exemplo: silício dopado (apenas 1 impureza para cada $\sim 10^7$ átomos de silício já faz enorme diferença!)

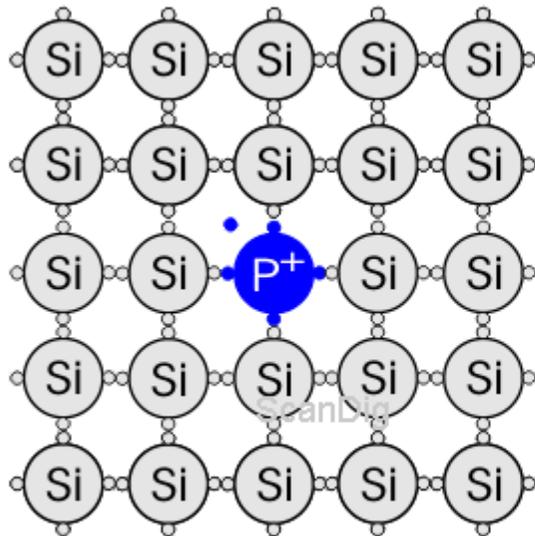


Si

Dopagens tipo *n* e tipo *p*

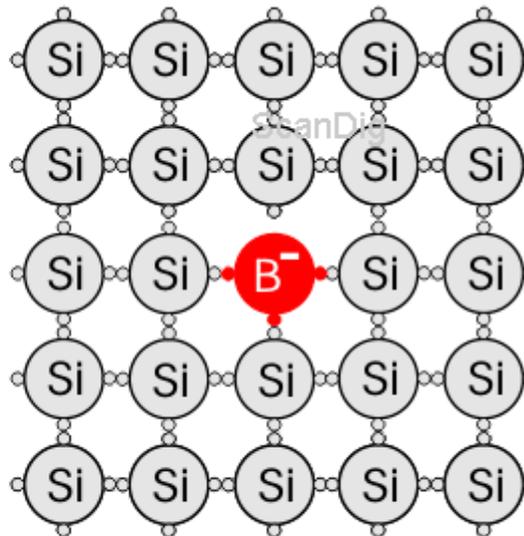
2 tipos de dopagem

Tipo *n*: impureza tem um elétron de valência **a mais** que a matriz de Si



impureza 'doadora' de elétrons

Tipo *p*: impureza tem um elétron de valência **a menos** que a matriz de Si



impureza 'aceitadora' de elétrons

elétrons de valência

Exemplo:

Silício: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$

Fósforo: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$

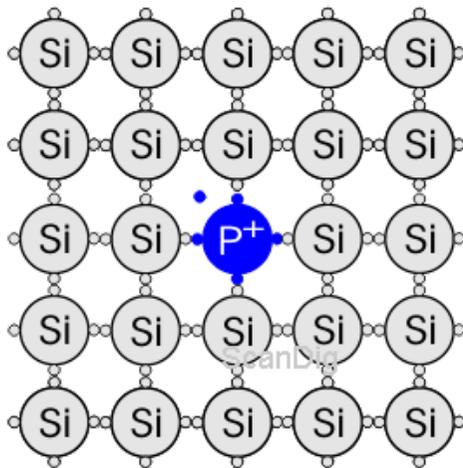
Boro: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$

obs: todos são materiais eletricamente neutros!

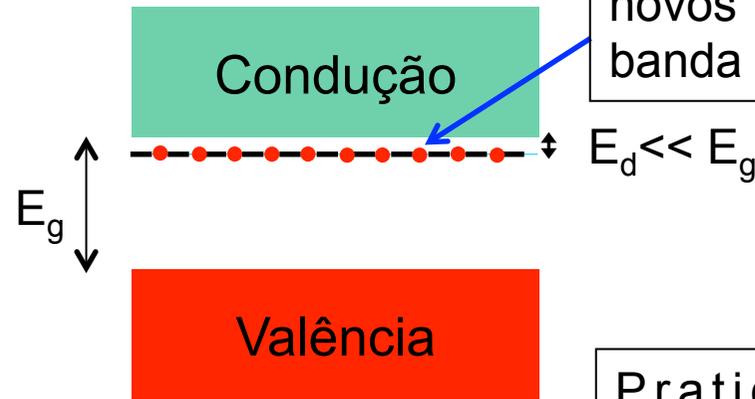
Semicondutores tipo *n*

doadores para Si

					0
	III A	IV A	V A	VII A	He
5	B	C	N	O	F
13	Al	Si	P	S	Cl
31	Ga	Ge	As	Se	Br
49	In	Sn	Sb	Te	I
81	Tl	Pb	Bi	Po	At
113					Rn

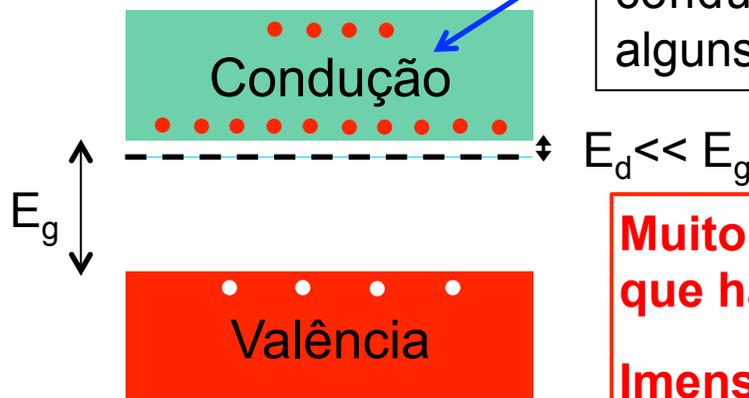


$T = 0$



Elétrons 'extras' são fracamente ligados, e ocupam novos níveis logo abaixo da banda de condução

$T > 0$



Praticamente todos os elétrons 'extras' são facilmente excitados para a banda de condução, juntamente com alguns da banda de valência

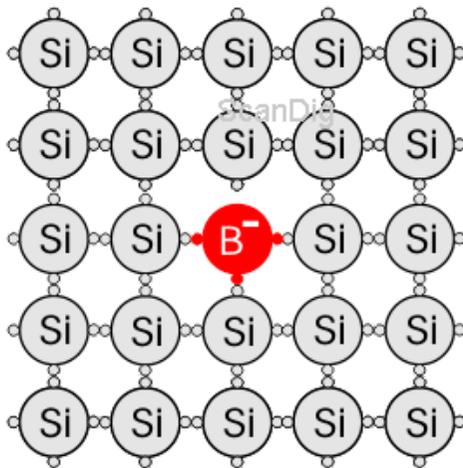
Muito mais portadores do que haveria sem a dopagem

Imensa maioria dos portadores são elétrons !

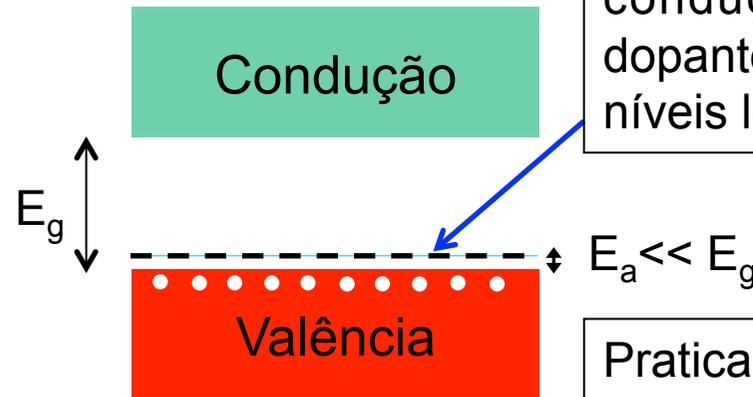
Semicondutores tipo *p*

aceitadores para Si

						0
						2
						10
						18
						36
						54
						86
						118

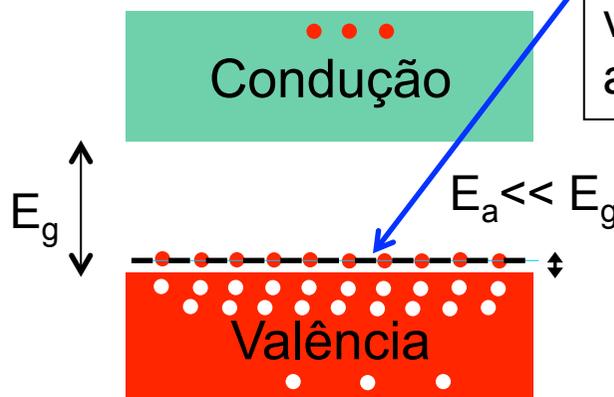


$T = 0$



Além de buracos na banda de condução, a presença do dopante leva a surgirem novos níveis logo acima dessa banda

$T > 0$



Praticamente todos os níveis 'extras' são facilmente preenchidos por elétrons excitados da banda de valência, criando um excesso ainda maior de buracos

Muito mais portadores do que haveria sem a dopagem
Imensa maioria dos portadores são buracos !

Exemplo: Silício dopado com P ou Al

Propriedade	Tipo de Semicondutor	
	<i>n</i>	<i>p</i>
Material da matriz	Silício	Silício
Carga nuclear da matriz	+14 e	+14 e
E_g da matriz	1,2 eV	1,2 eV
Dopante	Fósforo	Alumínio
Tipo de dopante	Doador	Aceitador
Portadores em maioria	Elétrons	Buracos
Portadores em minoria	Buracos	Elétrons
ΔE do dopante	$E_d = 0,045$ eV	$E_a = 0,067$ eV
Valência do dopante	5	3
Carga nuclear do dopante	+15 e	+13 e
Carga total do íon do dopante	+ e	- e

Exercício: Silício dopado com P

No Si puro, a concentração de elétrons de condução a T ambiente é aproximadamente $n_0 = 10^{16} \text{ m}^{-3}$.

a) Quantos elétrons de condução existem para cada átomo de Si no material? Dados:

- $\mu_{\text{Si}} = 2330 \text{ kg/m}^3$
- $M_{\text{mol Si}} = 28,1 \times 10^{-3} \text{ kg/mol}$

$$n = \frac{\mu n_v N_A}{m_{\text{mol}}}$$

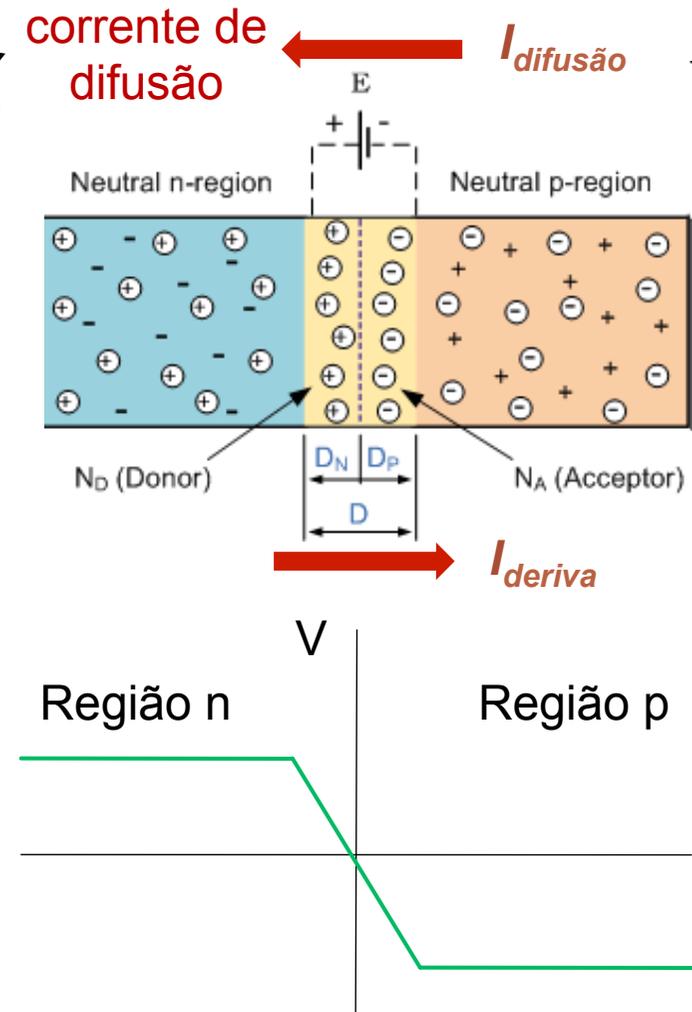
R: 2×10^{-13} !

b) Queremos multiplicar n_0 por 10^6 dopando o Si com P. Que fração de átomos de Si devemos substituir por átomos de P? (Considere que a agitação térmica é capaz de transferir todos os elétrons do nível de doação para a banda de condução).

- R: 1 átomo de P para cada 5×10^6 átomos de Si

A junção p – n

- Cristal semiconductor que foi dopado em uma região com impureza aceitadora (tipo-p) e em outra região com impureza doadora (tipo-n).
- Os elétrons em excesso da região n (esquerda) tendem a se difundir para a região da direita.
- Ao mesmo tempo, os buracos em excesso da região p (direita) tendem a se difundir para a região da esquerda.
- O movimento de elétrons para a direita (buracos para a esquerda) cria uma região com excesso de carga próxima ao plano da junção, de largura D . Ela é chamada **zona de depleção** (pois as cargas recém-chegadas se recombinam com os buracos e elétrons inicialmente excedentes em cada lado)
- Essa carga espacial gera uma **diferença de potencial de contato** que se contrapõe à difusão (i.e., tende a empurrar elétrons de volta para o lado n e buracos de volta para o lado p). Esse movimento é chamado **corrente de deriva**. Um **V de equilíbrio** é atingido qdo $I_{dif} = I_{der}$.

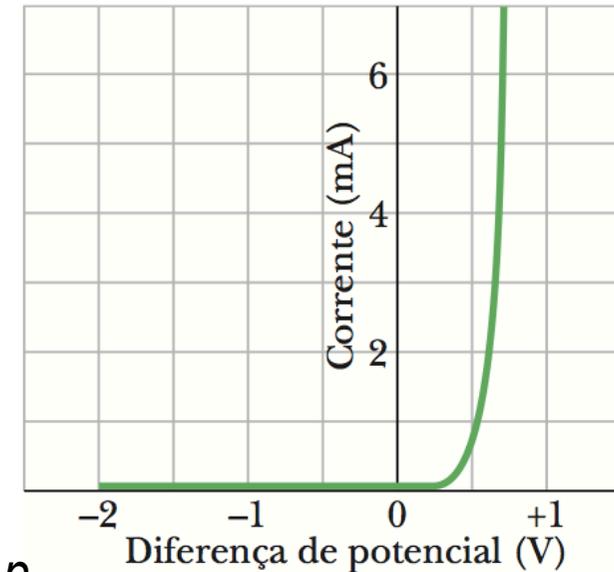
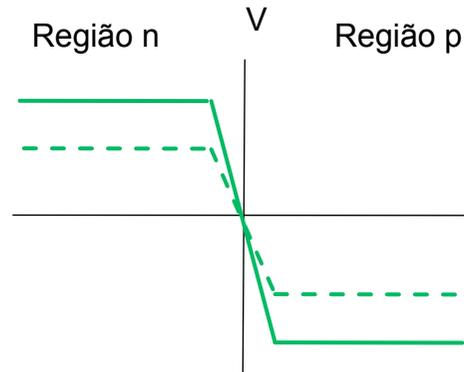


Lembre-se: carga positiva → potencial positivo

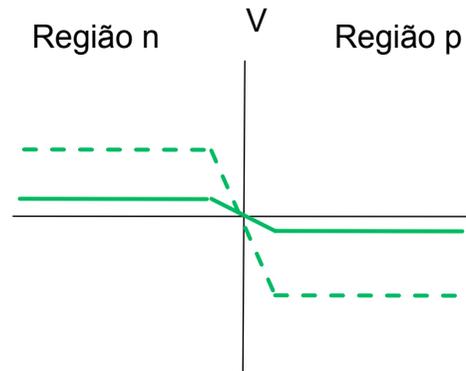
O diodo retificador

Aplique uma tensão adicional em uma junção p-n:

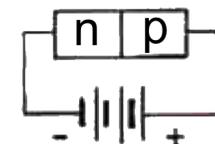
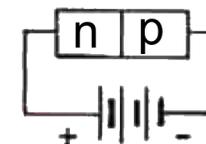
- 'Polarização inversa': tensão positiva aplicada do lado *n*
 - Reforça a diferença de potencial já existente
→ cria (mais) resistência ao movimento das cargas difusivas
→ não há corrente



- 'Polarização direta': tensão positiva aplicada do lado *p*
 - Reduz a diferença de potencial → facilita o movimento de cargas
 - → há corrente



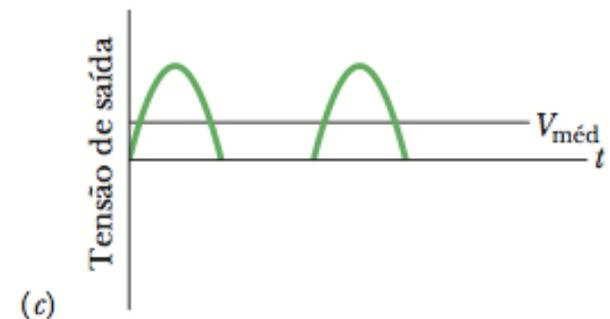
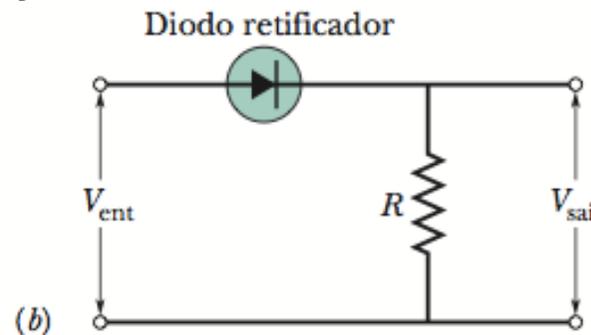
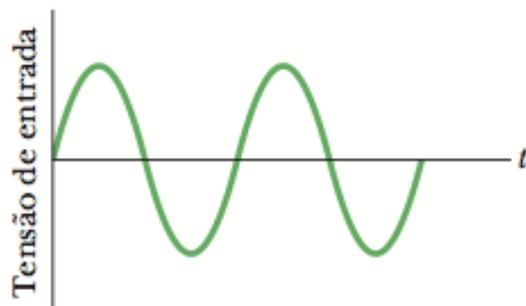
← Polarização inversa | Polarização direta →



O diodo retificador

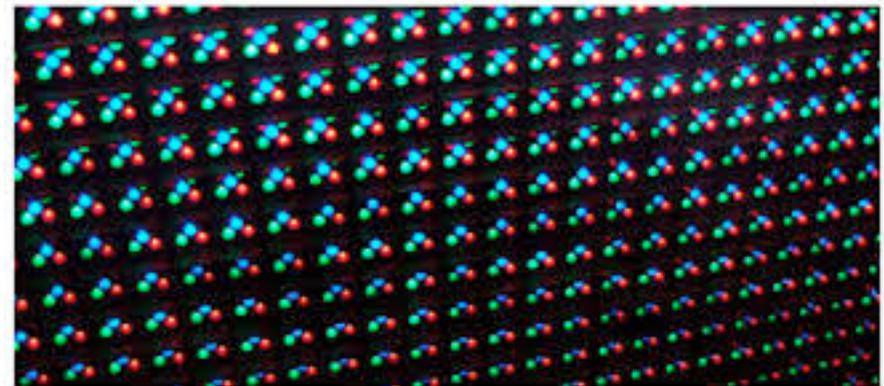
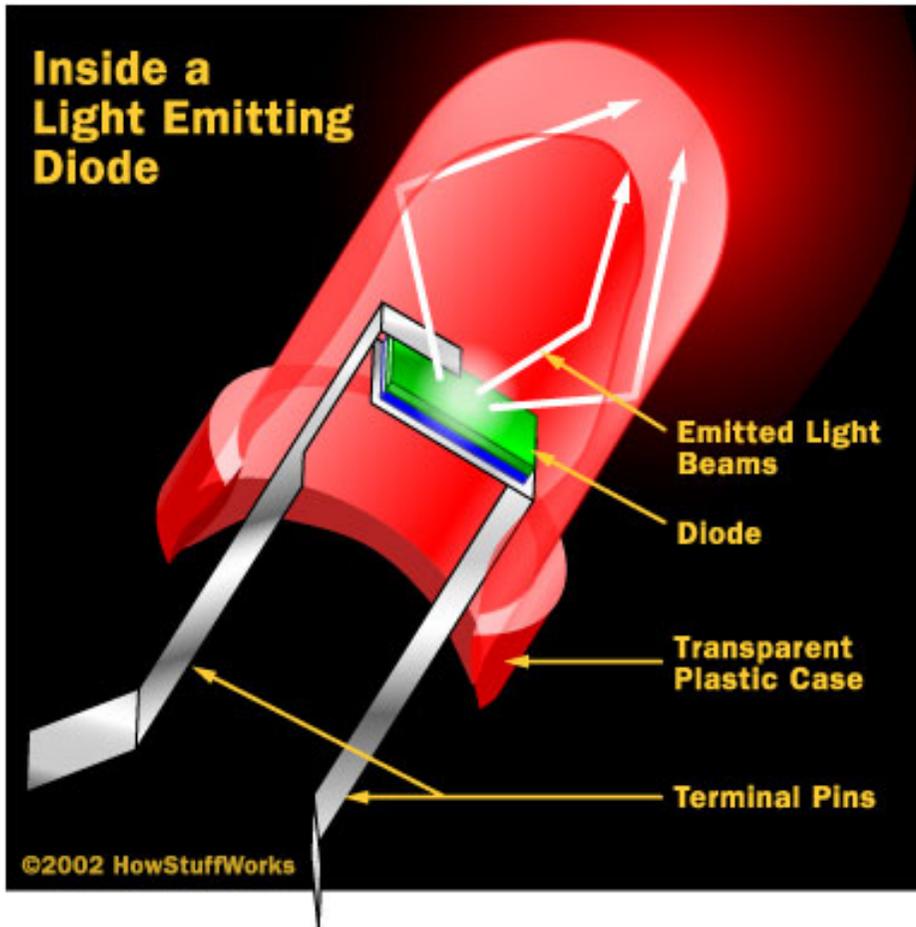
Aplicação simples em eletrônica: 'retificação'

- Tensão de entrada senoidal
 - Valor médio temporal = 0
 - Diodo só permite a passagem de corrente quando a tensão for no sentido de polarização direta.



- Tensão de saída
 - Valor médio temporal $\neq 0$
- Conversor de tensão alternada para tensão contínua

O Diodo Emissor de Luz (LED)

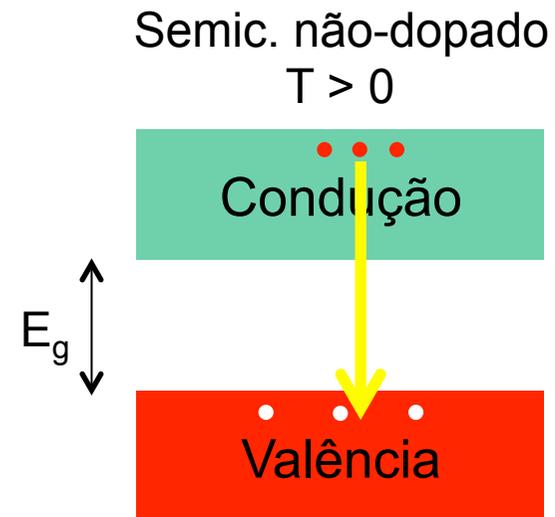


Diodo Emissor de Luz (LED)

Recombinação: num semiconductor (dopado ou não) a $T > 0$, um elétron excitado para a banda de condução pode decair de volta para a banda de valência, eliminando um buraco

Dependendo do material, a energia E_g que é liberada pode ser emitida na forma de um fóton. Ex: AsGa. (Em outros casos, pode ser perdida para vibrações da rede de íons, i.e, 'esquentar' o material).

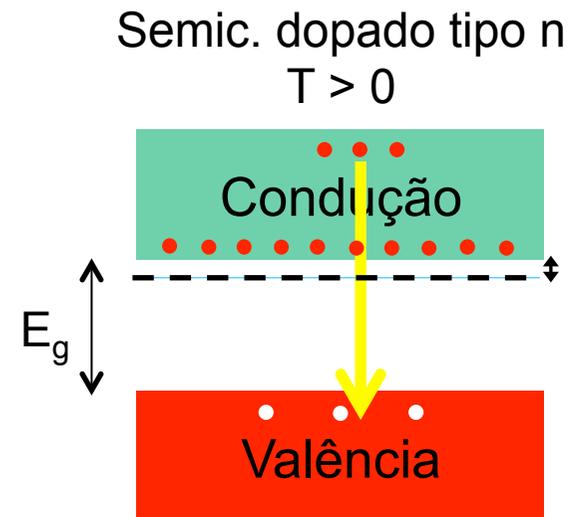
Problema: muito poucos pares elétron-buraco
-> muito poucos fótons emitidos!



Diodo Emissor de Luz (LED)

Recombinação: num semiconductor (dopado ou não) a $T > 0$, um elétron excitado para a banda de condução pode decair de volta para a banda de valência, eliminando um buraco

Dependendo do material, a energia E_g que é liberada pode ser emitida na forma de um fóton. Ex: AsGa. (Em outros casos, pode ser perdida para vibrações da rede de íons, i.e, 'esquentar' o material).



Problema: muito poucos pares elétron-buraco
-> muito poucos fótons emitidos!

Dopagem apenas não resolve!

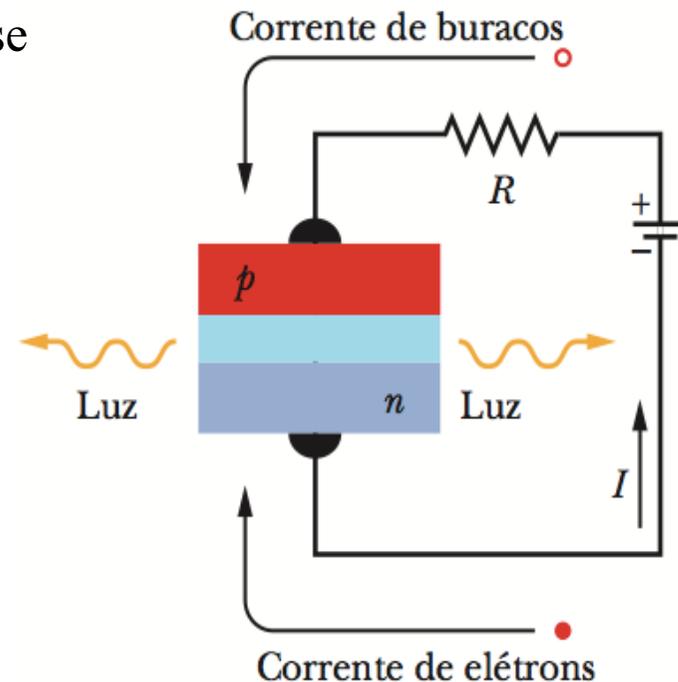
(Muitos elétrons mas poucos buracos, ou vice-versa...)

Diodo Emissor de Luz (LED)

Solução: Junção $p - n$!!

Num diodo diretamente polarizado e muito dopado há muitos buracos e elétrons se recombinando na zona de depleção!!

Figura 41-16 Junção $p-n$ polarizada diretamente, mostrando elétrons sendo injetados no lado n e buracos sendo injetados no lado p . (Os buracos se movem no sentido convencional da corrente I ; os elétrons se movem no sentido oposto.) A luz é emitida. Perto da zona de depleção, tanto do lado n como do lado p , elétrons e buracos se recombinam, emitindo luz no processo.



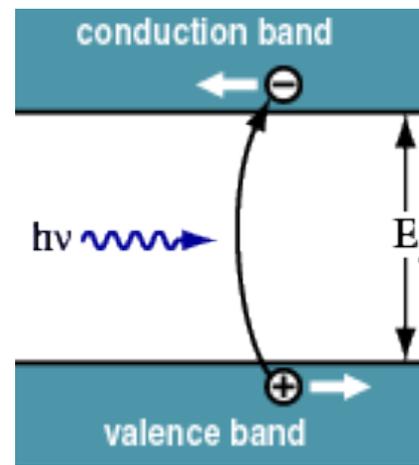
Exemplo: junção GaAs com GaAsP tem $E_g = 1,8\text{eV}$ (luz vermelha). Só nos anos 1990 se descobriu materiais capazes de fazer um LED azul!



Fotodiodo

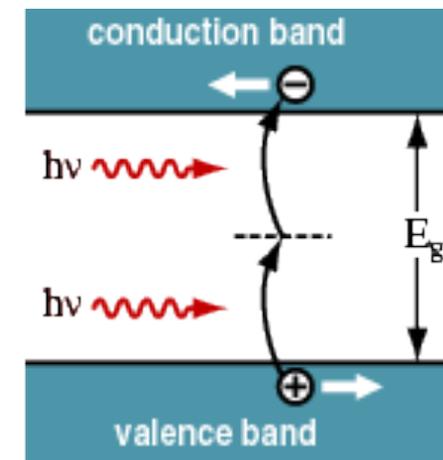
Fotodiodo: processo inverso do LED

- Diodo: corrente elétrica produz recombinação de elétrons e buracos gerando fótons
- Fotodiodo: fótons produzem elétrons e buracos gerando uma corrente elétrica
- Usado em sensores de movimento, detectores de controle remoto, etc.



$$i = RP$$

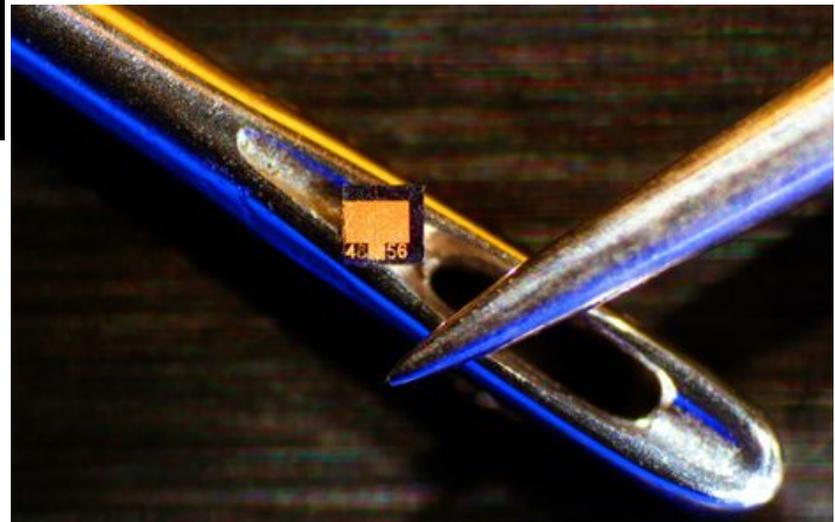
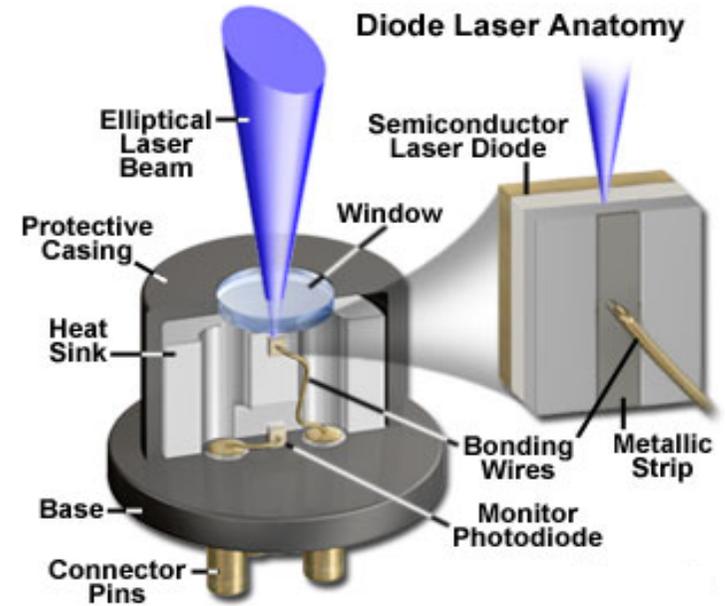
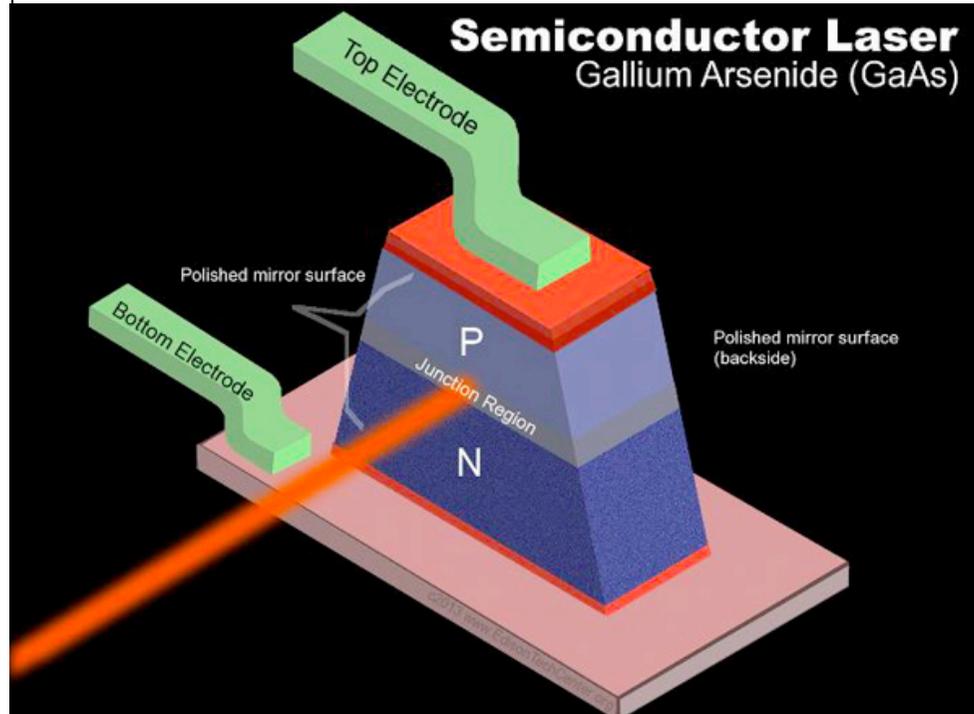
(a)



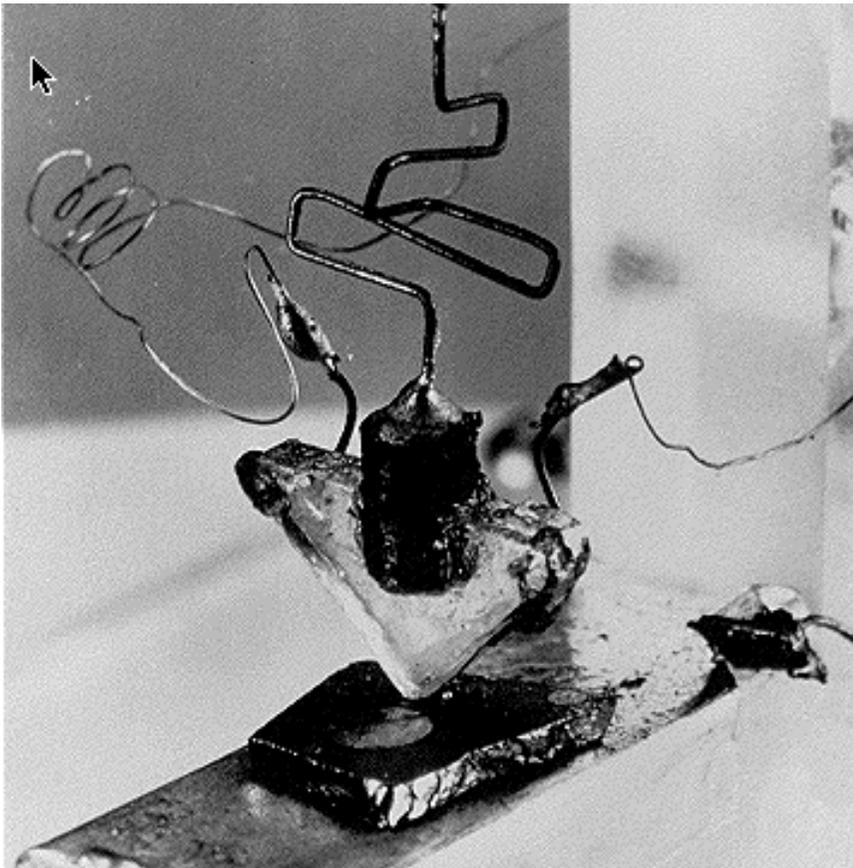
$$i = R_2 P^2$$

(b)

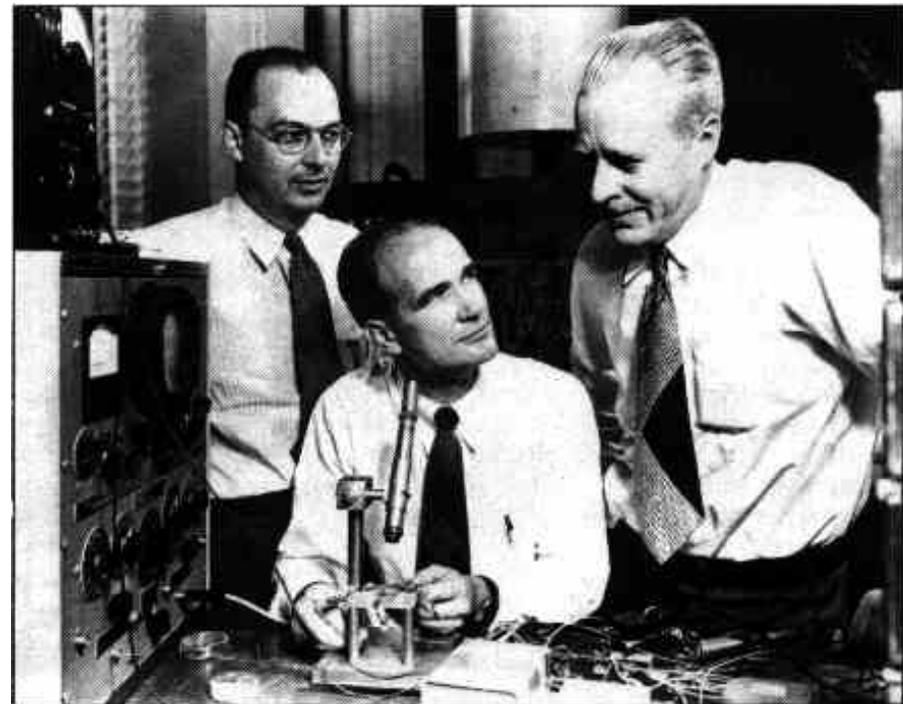
0 laser semiconductor



O transistor

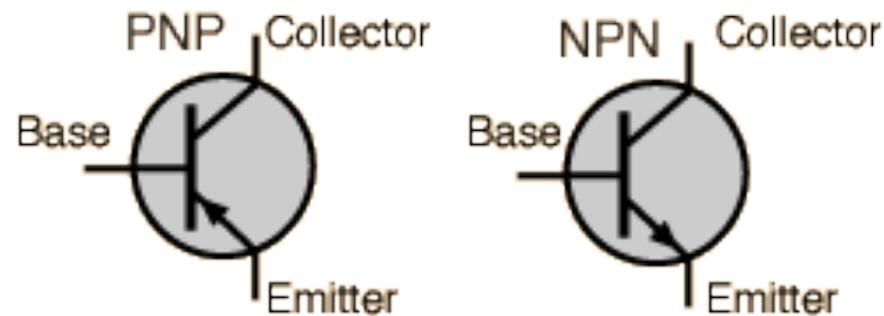
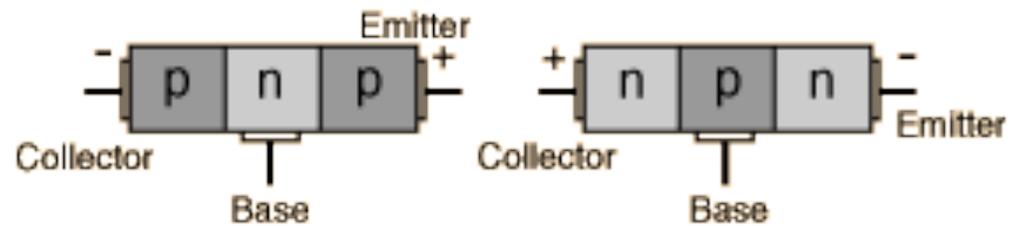


1o transistor (Bell Labs, EUA, 1947)



John Bardeen, William Shockley e
Walter Brattain

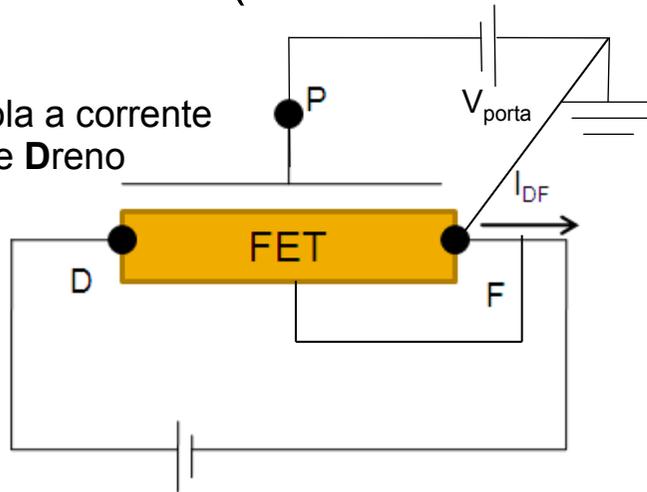
Transistor bipolar NPN ou PNP



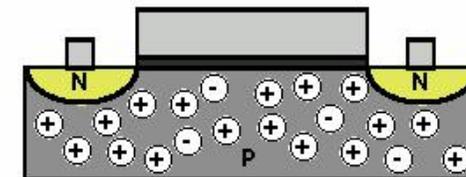
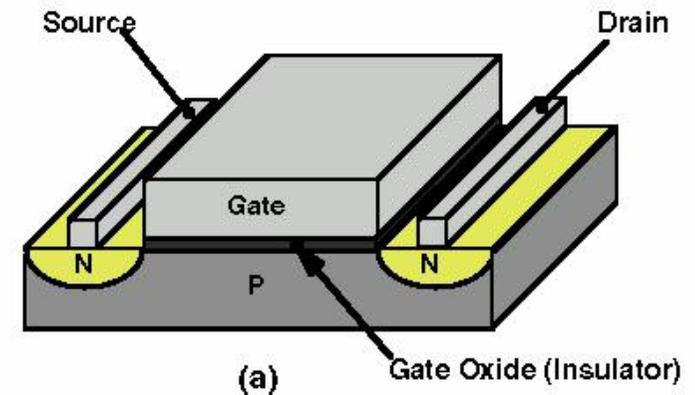
Transistor MOSFET

MOSFET: (Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor)

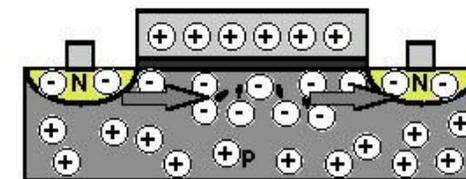
Porta: controla a corrente entre Fonte e Dreno



- Se $V_{porta} > 0$ elétrons se movem ao longo do canal n (fonte - dreno)
- Se $V_{porta} < 0$ há um campo elétrico no interior do dispositivo que repele os elétrons do canal n para o substrato.
 - Aumento da zona de depleção
 - Diminuição da corrente (que pode ser zero!!)
- MOSFET pode trabalhar nos regimes ON – OFF
 - ON = 1, OFF = 0 (sistema binário)
 - Circuitos lógicos



(b)



(c)